

УДК 539.3

МОДЕЛИ ДЕФОРМИРОВАНИЯ ПРИ ИНТЕНСИВНЫХ ДИНАМИЧЕСКИХ НАГРУЗКАХ (ОБЗОР)

Л. А. Мержиевский

Институт гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН, 630090 Новосибирск, merzh@hydro.nsc.ru

Рассматриваются современные модели необратимых процессов деформирования материалов при их динамическом, в том числе ударно-волновом, нагружении. Модели можно разделить на три группы: 1) макроскопические (континуальные) — традиционные модели механики сплошных сред, в первую очередь классические модели упругопластического деформирования, их разнообразные обобщения на случай описания динамических процессов и модели вязкоупругих релаксирующих сред; 2) микроструктурные модели, основанные на описании микроструктурных механизмов необратимого деформирования (чаще всего — на представлениях о кинетике дислокационного ансамбля); 3) атомистические — молекулярно-динамические модели и расчеты. Особую категорию составляют наиболее перспективные, с точки зрения автора, многоуровневые модели, объединяющие преимущества каждого из перечисленных подходов и рассматривающие механизмы деформирования разных уровней. Приведены примеры расчетов по таким моделям.

Ключевые слова: модели деформирования, динамическое деформирование, ударно-волновые процессы.

ВВЕДЕНИЕ

Применение ударных волн в физике высоких давлений позволило проводить исследование свойств и поведения различных материалов при высочайших давлениях и температурах [1]. Полученные при этом новые экспериментальные данные потребовали для своего описания разработки все более содержательных моделей, способных описывать процессы деформирования в широком диапазоне изменения давления (напряжения) и температуры. При этом используются как чисто феноменологические, так и физически содержательные модели. Анализ всего многообразия построенных и развивающихся в настоящее время конкретных моделей невозможно провести в обзоре, предназначенном для опубликования в периодическом издании, поэтому здесь сделана попытка характеризовать общие принципы построения моделей различных типов. В дополнение к данному обзору следует указать на обзоры и монографии, в которых освещаются как конкретные модели, так и классы моделей для описания динамических и ударно-волновых процессов [1–7]. Разрабатываемые и используемые в настоящее время модели тесно связаны с критериями и моделями разрушения, зачастую сопровож-

дающего ударно-волновые процессы. Вопросы, связанные с разрушением, в данном обзоре не рассматриваются, так как это потребовало бы значительного увеличения объема публикации. Также, за исключением случаев, когда этого избежать не удастся, не рассматриваются методы и алгоритмы численного решения задач динамического и ударно-волнового деформирования, для анализа которых требуется отдельный обзор или монография. Интересующихся этими вопросами можно отослать к широко известным монографиям, подробно описывающим такие методы и алгоритмы.

Используемые в настоящее время для таких расчетов модели условно можно разделить на три большие группы: макроскопические (континуальные), микроструктурные, атомистические. К первым относятся традиционные модели механики сплошных сред, в первую очередь классические модели упругопластического деформирования, их разнообразные обобщения на случай описания динамических процессов и модели вязкоупругих релаксирующих сред. Во вторую группу входят модели, основанные на описании микроструктурных механизмов необратимого деформирования (чаще всего — на представлениях о кинетике дислокационного ансамбля). К третьей группе следует отнести молекулярно-динамические модели

и расчеты. Особую категорию составляют наиболее перспективные, с точки зрения автора, многоуровневые модели, позволяющие объединить преимущества каждого из перечисленных подходов и включать в рассмотрение механизмы деформирования разных уровней.

КОНТИНУАЛЬНЫЕ МОДЕЛИ

Основой моделей первой группы являются законы сохранения массы, импульса и энергии, справедливые для механики сплошных сред. Эти законы обычно записываются в дифференциальной форме, хотя могут использоваться и более сложные формы их записи. По-видимому, одной из первых успешных попыток решения динамических задач физики взрыва и удара было предложенное М. А. Лаврентьевым использование модели идеальной несжимаемой жидкости для описания физических особенностей процесса кумуляции при обжати конической оболочки продуктами детонации [8]. Математические модели, позволяющие описать целый ряд динамических и ударно-волновых задач, рассматривались в [9]. В качестве физического обоснования применимости гидродинамического приближения обычно указывают на то, что давление при исследуемых нагрузках на порядки превышает прочностные характеристики материалов, или, что является более строгим, указывают на существенное превышение нормальных компонент тензора напряжений над касательными. При этом не принимается во внимание, что нагружение материала производится ударной волной, касательные напряжения во фронте которой могут достигать значений, существенно превышающих теоретическую прочность — нагрузку, достаточную для разрыва связей между атомами [10]. Только после их релаксации уровень касательных напряжений понижается до значения, характерного для реализовавшегося спектра скоростей деформации и температурного режима.

Дальнейшее использование гидродинамических моделей связано с разработкой и развитием численного метода частиц в ячейках [11–15], позволившего проводить решение задач при больших деформациях расчетных областей. С его помощью в рамках гидродинамических моделей были установлены основные закономерности формирования кратеров при взрыве и высокоскоростном ударе [16–18]. Вместе с тем, уже давно предпринимались попыт-

ки оценить границы применимости гидродинамических моделей для решения динамических задач [19].

В рамках гидродинамического приближения нельзя провести расчет процесса до заключительных стадий (например, рассчитать параметры кратера при высокоскоростном ударе компактной частицы по массивной преграде). Естественным развитием в создании моделей для описания ударно-волновых процессов стало привлечение представлений об упругопластическом поведении материалов. Здесь существенную роль сыграли работы М. Уилкинса [20], позволившие решить проблему обобщения созданных на основе квазистатических представлений моделей упругопластического деформирования на динамические процессы. В [20] использован вариант модели Прандтля — Рейса, удачно сочетавшийся с эффективным численным методом. В моделях упругопластического тела упругое деформирование описывается законом Гука, а для описания необратимых деформаций уравнения механики сплошных сред дополняются условием (критерием) пластичности. В качестве критерия пластического течения чаще всего используется критерий Мизеса или его обобщения. В главных осях он имеет вид

$$(\sigma_1 - \sigma_2)^2 + (\sigma_2 - \sigma_3)^2 + (\sigma_3 - \sigma_1)^2 = 2Y^2.$$

Здесь $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ — главные напряжения, Y — предел текучести. Как и другие модели упругопластического тела, эта модель возникла как феноменологическая для описания необратимых деформаций металлов, базирующаяся на данных квазистатических экспериментов по однородному одноосному деформированию тонких стержней.

С использованием различных вариантов модели упругопластического тела решено большое количество самых разнообразных одномерных и многомерных задач ударно-волнового деформирования и разрушения. Список публикаций по данной тематике мог бы содержать не одну тысячу наименований. Можно констатировать, что в таких расчетах хорошо передаются основные качественные особенности динамических и ударно-волновых процессов в твердых телах, связанные с прочностными свойствами реальных тел. Для количественного согласования зачастую необходимо прибегать к дополнительной коррекции моделей, опирающихся на описываемые экспери-

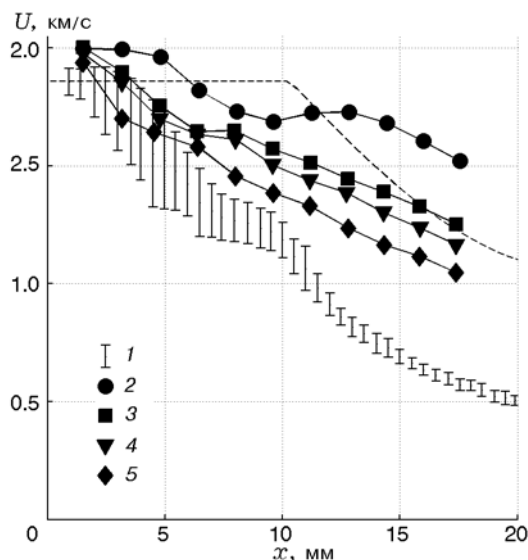


Рис. 1. Затухание ударной волны при взаимодействии с догоняющей волной разрежения:

1 — эксперименты [27], 2, 3 — ANSYS Autodyn, уравнения состояния «Shock» и von Mises, 4 — модель [25], 5 — модель [26], штриховая линия — гидродинамическая модель

ментальные данные. Как показало сравнение результатов расчетов и экспериментов, эти модели чаще всего не описывают элементарного акта ударно-волновых процессов — затухания амплитуды упругопластической ударной волны при ее взаимодействии с догоняющей волной разрежения [21, 22]. Впервые на это обстоятельство указывалось в [23, 24], где была обоснована необходимость более точного учета механизмов необратимых диссипативных потерь, характерных для твердых тел при динамическом деформировании. На рис. 1 представлены результаты решения данной задачи в рамках ряда моделей [25, 26], в том числе и содержащихся в широко используемых коммерческих пакетах программ.

Дальнейший анализ показал, что в большинстве моделей упругопластического деформирования заложен учет только «гидродинамического затухания», чего оказалось недостаточно для адекватного описания ударно-волновых взаимодействий в твердых телах [28–30]. Кроме того, следует также указать на математическую проблему, возникающую при использовании подхода М. Уилкинса [31, 32]. При определенном выборе начальных данных задачи не выполняются условия корректности постановки задачи. Некорректность связана с

тем, что при расчете динамических процессов по законам сохранения состояние среды, характеризующееся точкой в пространстве главных напряжений, может оказаться вне поверхности текучести и необходимо, в соответствии с принятым условием пластичности, вернуть ее на данную поверхность. В [20] предложена процедура возвращения состояния на поверхность текучести, которая и может вызвать потерю корректности задачи. При такой корректировке в расчете происходит потеря части энергии, диссипирующей при необратимой деформации среды, что приводит к неверному описанию динамических процессов. Некорректность полной системы уравнений модели подтверждена в расчетах [31].

При дальнейшем развитии моделей упругопластического деформирования, не устранившем, вообще говоря, названных проблем, в модели вводились поправки, сводящиеся к замене постоянного предела текучести некоторой функцией, зависящей от скорости деформации, гидростатического давления и температуры. Наиболее часто в исследовательских работах и коммерческих пакетах применяются пять основных моделей [25, 26, 33–39]. Например, в модели Джонсона — Кука [25], часто используемой в расчетах и включенной в код LS-DYNA, в качестве предела текучести введена зависимость

$$Y(\varepsilon_p, \xi_p, T) = [C_1 + C_2(\varepsilon_p)^n] \left[1 + C_3 \ln \left(\frac{\xi_p}{\xi_{p0}} \right) \right] \left[1 - \frac{T}{T_0} \right]^m,$$

где ε_p — пластическая деформация, ξ_p — скорость пластической деформации, T — температура, $C_1, C_2, C_3, n, m, \xi_{p0}, T_0$ — эмпирические постоянные. В [34–36] с привлечением дислокационных представлений о механизмах необратимого деформирования предел текучести определяется по формуле

$$Y(\varepsilon_p, \xi_p, T) = C_0 + C_1 \exp[-C_2 T + C_3 T \ln(\xi_p)] + C_4(\varepsilon_p)^n,$$

где $C_0, C_1, C_2, C_3, C_4, n$ — постоянные, однако это не привело к принципиальному изменению физического содержания модели. Далее, в [26, 33] зависимость для предела текучести имеет вид

$$Y(\varepsilon_p, \xi_p, T) =$$

$$= Y_s \left(1 - \frac{T - T_0}{T_m - T_0} \right)^a (1 + A\varepsilon_p)^{1/n} (1 + B\xi_p)^{1/m},$$

где присутствует (с учетом модификации в [33]) 8–10 постоянных.

Как показывают данные рис. 1, при использовании подобных моделей для решения задач ударно-волнового деформирования также не удается адекватно учесть диссипацию энергии в процессе взаимодействия ударных волн с волнами разрежения. Этот недостаток пытаются исправить, вводя в зависимость предела текучести еще одну эмпирическую функцию, называемую коэффициентом вязкости. В модели [37, 38]

$$Y(\varepsilon_p, \xi_p, T) = Y_s + (S_i \sigma_i + S_c \sigma_c) \frac{\mu(p, T)}{\mu_0},$$

$$S_i = \left[1 - \left(\frac{kT}{gb^3 \mu(p, T)} \ln \frac{\xi_{pi}}{\xi_p} \right)^{g1} \right]^{q1},$$

$$S_c = \left[1 - \left(\frac{kT}{g_0 b^3 \mu(p, T)} \ln \frac{\xi_{pc}}{\xi_p} \right)^{g2} \right]^{q2},$$

где с учетом введенной функции вязкости $\mu(p, T)$ содержится уже 18 постоянных, а в [39] — до 15 констант. Таким образом, выбрав соответствующие значения эмпирических величин, входящих в зависимости для предела текучести, можно получать расчетные результаты, близкие к экспериментальным. Найденный таким образом набор эмпирических параметров позволяет описывать определенный класс экспериментов, близких к тем, по которым эти параметры определялись, при этом вопрос о применимости данных вариантов моделей для решения более широкого класса задач остается открытым. Попытки оценить диапазон применимости основных моделей, используемых для решения динамических задач, приняты в [40, 41]. Приведенные там данные позволяют дать предварительную оценку применимости моделей в решении конкретных задач.

Усовершенствования указанных моделей призваны, в том числе, снизить роль еще одной особенности моделей упругопластического деформирования, ограничивающей их возможности в описании динамических процессов. Эта особенность заключается в том, что в

моделях упругопластического тела отсутствует время и деформации мгновенно принимают значения, соответствующие напряжениям (однозначная связь напряжений с деформациями через диаграмму деформирования). Это вполне допустимо для решения квазистатических задач, в которых характерное время релаксационных процессов значительно меньше характерного времени исследуемых процессов, но становится неприемлемым при описании динамических процессов, происходящих за время того же порядка, что и время релаксации. В механике деформируемого тела для описания таких динамических процессов привлекаются реологические модели, учитывающие в первую очередь эффекты, связанные с релаксацией касательных напряжений. Чаще всего это модели Максвелла и Фойгта [42]. В [43] представление о релаксирующей среде привлечено для описания распространения ударных волн. Полученное там одномерное уравнение фактически является релаксационным уравнением Максвелла. При этом оказалось, что оно практически совпадает с феноменологическими уравнениями Соколовского и Малверна, сформулированными для описания распространения волн в стержнях [44, 45]. Модели релаксационного типа для описания ударно-волновых процессов сформулированы, например, в [46–49].

Необходимо отметить, что различные варианты и обобщения модели Максвелла получили достаточно широкое распространение при решении динамических задач, в особенности при описании поведения полимеров при ударных нагрузках [50–53] (здесь указаны только некоторые характерные работы). Распространение максвелловского подхода на пространственный случай произвольных материалов и конечных деформаций осуществлено С. К. Годуновым [54]. Феноменологические замыкающие соотношения модели построены в [55–58]. В [59] приведен ее уточненный вариант, а в [60] — новый, термодинамически более обоснованный вариант. На основе этой модели автору данной работы с сотрудниками удалось сформулировать рассматриваемую далее двухуровневую модель, сочетающую преимущества континуального и микроструктурного подходов.

В целом, необходимо отметить, что именно с помощью континуальных моделей, в первую очередь — обобщающих модели упругопластического тела, в настоящее время в ос-

новном проводится моделирование задач деформирования и разрушения материалов при динамических и ударно-волновых нагрузках. Они же преобладают в получивших широкое распространение коммерческих пакетах. В особо важных случаях приходится сочетать разные модели в разных областях и диапазонах [61], что является сложной задачей ввиду неоднозначности определения границ реализации каждой из моделей.

МОДЕЛИ, БАЗИРУЮЩИЕСЯ НА ОПИСАНИИ ЭВОЛЮЦИИ АНСАМБЛЯ ДЕФЕКТОВ

На определенном этапе развития физических представлений о микроструктурных механизмах необратимой (пластической) деформации сложилось представление о том, что доминирующим механизмом деформации в достаточно широком диапазоне изменения ее величины, скорости и температуры для кристаллических (поликристаллических) сред является эволюция дислокационного ансамбля [62, 63]. В дальнейшем пришло понимание того, что пластическая деформация реализуется путем эволюции ансамбля дефектов на различных структурных уровнях [64, 65]. К настоящему времени для динамических и ударно-волновых процессов сформулирован и используется ряд моделей, базирующихся на описании эволюции дислокационного ансамбля. Следует отличать эти модели от моделей упругопластического деформирования, в которых дислокационные представления привлекаются для построения зависимости динамического предела текучести, замыкающего критерий пластичности, от параметров состояния среды. Основу для разработки соответствующих моделей динамического деформирования дали экспериментальные данные о подвижности и плотности дислокаций в монокристаллах фтористого лития [66]. Достаточно полная сводка экспериментальных данных о подвижности дислокаций в различных материалах приведена в [67]. Принципы построения дислокационной теории пластичности и прочности изложены в [62], а различные аспекты конструирования простейшего варианта, пригодного для описания основных эффектов пластического деформирования в динамических условиях, можно найти в [68–72]. В работе [73] показаны широкие возможности дислокационной модели в моделировании одномерных ударно-волновых процессов. Эта работа инициировала целую серию аналогичных

исследований [22, 74–79], использовавших и модифицировавших предложенную в [73] кинетику. Определяющее соотношение, связывающее микроскопические и макроскопические характеристики напряженно-деформированного состояния материала, в простейшем случае можно записать в виде [80]

$$\varepsilon_p = bN(\varepsilon_p, Y)L(\varepsilon_p, Y),$$

где L — среднее расстояние, проходимое дислокациями в процессе деформирования, N — плотность дислокаций, определяемая как общая длина всех отрезков дислокационных линий в единице объема, b — модуль вектора Бюргера, ε_p — максимальная пластическая деформация. Дифференцирование этого уравнения дает выражение

$$\xi = bN(\varepsilon_p, Y)v(\varepsilon_p, Y) + b\dot{N}(\varepsilon_p, Y)L(\varepsilon_p, Y),$$

связывающее скорость пластической деформации со скоростью размножения дислокаций $\dot{N} = dN/dt$ и средней скоростью их движения v . Реальный вклад во второе слагаемое вносят только подвижные дислокации, т. е.

$$\xi = bN_m(\varepsilon_p, Y)v(\varepsilon_p, Y) + b\dot{N}(\varepsilon_p, Y)L(\varepsilon_p, Y),$$

где N_m , v — плотность и средняя скорость подвижных дислокаций. За редким исключением (например, [79]), эта формула используется в форме соотношения Орована, когда пренебрегается вторым слагаемым в правой части, т. е. скорость размножения дислокаций считается относительно малой. При этом не учитывается, что при ударно-волновом нагружении включается механизм гомогенного зарождения дислокаций, приводящий к резкому возрастанию плотности N [81, 82]. В результате при решении конкретных задач на основе соотношения Орована приходится либо вводить завышенную на 2–3 порядка по сравнению с наблюдаемой начальную плотность подвижных дислокаций, либо использовать неоправданно большие значения коэффициента размножения дислокаций, тогда вторым слагаемым уже нельзя пренебрегать.

Зависимости для N и v , необходимые для замыкания данного типа моделей, чаще всего строятся на основе интерполяции соответствующих экспериментальных данных и простейших физических предположений, что оставляет значительный произвол в выборе функционального вида этих зависимостей. В результате построенные модели имеют ограниченную

применимость по диапазону изменения определяющих параметров и классу решаемых задач. Анализ применимости некоторых наиболее распространенных зависимостей для N и v при описании набора экспериментальных результатов, полученных в процессах, отличающихся уровнем напряжений и особенностями физических механизмов, проведен в [83]. Были рассмотрены экспериментальные данные по прямому измерению скорости индивидуальных дислокаций, данные по расширению полос Людерса, затуханию упругого предвестника, возникающего при расщеплении ударных волн в металлах, данные по измерению зависимости верхнего предела текучести от скорости деформирования. Оказалось, что в рамках проведенного анализа с помощью единых зависимостей для скорости и плотности дислокаций при фиксированных параметрах зависимостей не удастся описать указанные экспериментальные данные, полученные при различных механизмах движения и размножения дислокаций, связанных, в первую очередь, с уровнем приложенных напряжений. Положение может улучшить применение методов молекулярной динамики для конструирования моделей дислокационных кинетик. Такой подход, приводящий к построению многоуровневых моделей, обсуждается ниже.

Перечисленные модели ориентированы на детальное описание особенностей структуры плоских ударных волн и волн разрежения. Их обобщение на пространственный случай затруднительно ввиду необходимости формулировки кинетических соотношений на различных плоскостях скольжения, количество которых связано с типом кристаллической решетки. Это требует введения в рассмотрение тензорной характеристики плотности дислокаций, применения существенно более сложного математического аппарата. Попытка обобщения модели Гилмана на трехмерный случай, описанная в [84], носит иллюстративный характер, так как для практической реализации недостаточно экспериментальной информации, необходимой для замыкания модели, а диапазон применимости ограничен сделанными при построении серьезными допущениями. Более полной представляется модель [85], хотя для ее замыкания также используются простейшие соотношения дислокационной кинетики. Дальнейшее развитие дислокационного подхода осуществлено в работах [86, 87].

Так как эволюция дислокационного ансамбля — не единственный механизм необратимых процессов при деформировании, ряд моделей опирается на описание эволюции других типов дефектов. Здесь отметим учитывающую двойникование модель [88, 89], возможность применения которой к решению задач динамического деформирования не анализировалась. В более общем подходе предполагается, что механизмы пластической деформации обусловлены коллективным поведением ансамблей дефектов, характеризующихся тензором плотности дефектов и параметром структурного скейлинга [90–92]. С использованием данной модели объяснены особенности структуры ударных волн в упруго-пластических материалах, эффекты неустойчивости на фронте пластической волны, расчитан откол в металлах.

АТОМИСТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ

В данном обзоре не обсуждаются принципы реализации молекулярно-динамических расчетов, на этот счет существует обширная литература [93–96]. В интернете представлен ряд пакетов прикладных программ (часть из них находится в свободном доступе), направленных на моделирование методами молекулярной динамики, таких как LAMMPS [97], DL POLY [98], NAMD [99], GROMACS [100], ESPResSo [101]. В настоящее время основными подходами являются классическая молекулярная динамика [93] и молекулярная динамика, основанная на квантовых представлениях (первопринципная, *ab initio*) [94]. В первом случае вводится потенциал, описывающий взаимодействие связей и всевозможных внутри- и межмолекулярных степеней свободы. В основе второго — численное интегрирование уравнения Шредингера. Построение потенциалов, учитывающих многообразие механизмов взаимодействий, является одной из главных задач и проблемой метода.

Начало работ по моделированию ударно-волновых процессов на атомарном уровне связывают с публикацией [102], в которой описан расчет фазовых диаграмм, а среда рассматривалась как система твердых сфер, взаимодействующих посредством упругих соударений. В дальнейшем метод совершенствовался введением в модель более сложных законов взаимодействия атомов. Происходило усложнение потенциалов межатомного взаимодействия от хорошо известных парных Леннарда — Джон-

са и Морзе до сложных многочастичных типа Доу — Баскеса и Воутера [103–105]. Чаще всего в последнее время сложные расчеты проводятся с использованием скоростной модификации Верле [106].

Специфика моделей молекулярной динамики позволяет на атомарном уровне выполнять анализ структуры ударно-волновых переходов, в том числе фазовых, микроструктурных механизмов динамического деформирования и разрушения, кинетики формирования ансамбля дефектов. Особенно резкий скачок возможностей молекулярно-динамического моделирования произошел с созданием суперкомпьютеров и развитием технологии параллельных вычислений [107, 108]. Несмотря на это, методы молекулярной динамики до настоящего времени имеют принципиальное ограничение — это относительно малые времена и размеры рассматриваемых процессов.

Конкретные решенные задачи вначале сводились к расчету распространения ударных волн в линейной цепочке атомов [109–113]. Одномерные расчеты, естественно, не позволяли анализировать особенности поведения реальных ударных волн, в том числе связанных с релаксацией касательных напряжений. Последующие расчеты проводились для двумерных и трехмерных решеток [82, 114–117]. В этих расчетах наблюдалась перестройка кристаллической решетки при сильном одномерном сжатии с образованием новых плоскостей, исследовалось влияние точечных дефектов на механизмы перестройки. Дальнейшее развитие эти исследования получили в [118–124]. В частности, в [122–124] прослеживается перестройка кристаллической структуры при прохождении ударной волны и обнаружено появление ротационной составляющей деформации (рис. 2). Механизмы гомогенного размножения дислокаций в ГЦК-кристалле на примере алюминия и стохастические свойства процесса исследованы в [125]. Детальное исследование эволюции дислокационного ансамбля с использованием суперкомпьютеров и распараллеливания вычислений в кристаллах различного типа выполнено в [126–128]. Рассмотрение проводилось для выделенных плоскостей скольжения, проанализированы особенности процесса размножения, рассчитаны соответствующие адиабаты Гюгонио. Много внимания уделяется молекулярно-динамическим расчетам зарождения и развития откола в нанокристаллах [129–132]. Один

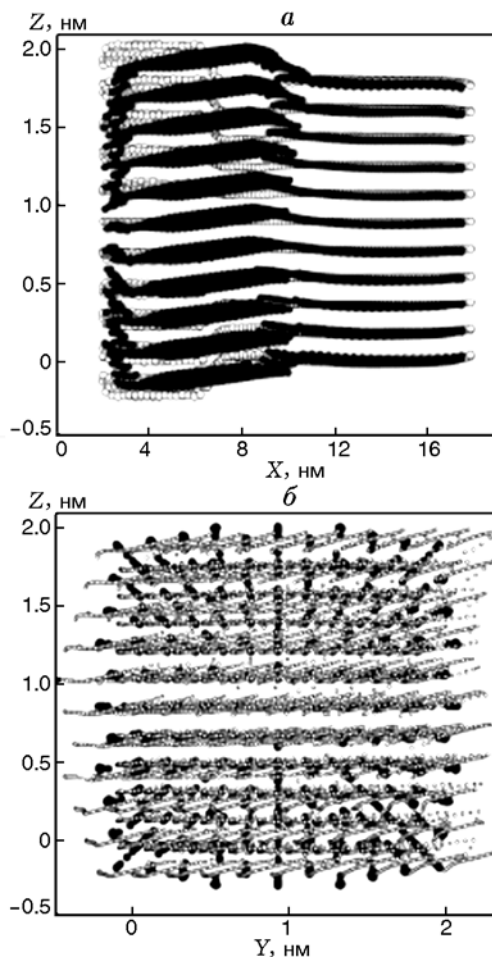


Рис. 2. Расположение атомов в плоскостях XY (a) и YZ (b) при прохождении волны по нанокристаллу меди:

светлые кружки — в момент прихода волны, темные — в охлажденной системе

из интересных типов задач, привлечших внимание исследователей, — моделирование высокоскоростного удара [133–136]. Приведенные примеры не исчерпывают всего многообразия использования метода молекулярной динамики для решения конкретных физических задач.

Необходимо остановиться на одном из направлений развития молекулярно-динамических расчетов, сформировавшемся ввиду ограниченных, несмотря на всё большее распространение суперкомпьютеров и технологий параллельных вычислений, пространственно-временных возможностей методов молекулярной динамики. В этом случае частицы интерпретируются как элементы более высокого масштабного уровня (мезоуровня) [137–139]. С его помощью решен ряд задач макроскопического

характера, в том числе задача об отколе.

Отметим, что для решения больших задач, в которых рассчитываются фазовые траектории $10^9 \div 10^{10}$ атомов даже на интервалах времени $\approx 10^{-6}$ с, требуются суперкомпьютеры типа Blue Gene [108] и эффективное распараллеливание вычислений. При этом возникают дополнительные технические проблемы, связанные с неустойчивостью работы систем многих процессоров. Представляется, что метод молекулярной динамики наиболее эффективен в качестве первого уровня в многоуровневых моделях.

МНОГОУРОВНЕВЫЕ МОДЕЛИ

По современным представлениям конечные пластические деформации происходят в результате эволюции структуры материалов на разных масштабных уровнях [140–142]. Это обстоятельство находит отражение в соответствующих моделях динамического деформирования и разрушения. Многоуровневый подход позволяет объединить преимущества каждого из рассмотренных выше подходов. В настоящее время построение многоуровневых моделей выделилось в самостоятельное научное направление, результаты построения моделей излагаются и обобщаются в многочисленных публикациях в периодических изданиях и монографиях [143–145]. Данной тематике посвящен специальный журнал [146]. При этом остается много нерешенных проблем, связанных с методами и принципами сочетания разных подходов в единой модели. Типичные приемы построения покажем на примере конкретных моделей.

Один из первых подходов к построению многоуровневых моделей предложен в [147–149], где формулируется двухуровневая модель, сочетающая преимущества континуального описания в модели вязкоупругого тела максвелловского типа [54, 59, 60] с учетом дислокационных механизмов необратимого деформирования. Полная замкнутая система уравнений модели включает законы сохранения, уравнения, описывающие эволюцию компонентов тензора конечных деформаций и определяющие уравнения в форме зависимостей удельной внутренней энергии и времени релаксации касательных напряжений от параметров, характеризующих состояние среды [54, 59, 60, 147, 149]. В отличие от традиционных моделей, в которых принимается, что удельная внутренняя энергия зависит только от шаровой части

тензора деформаций (удельного объема, плотности), в данном случае учитывается и вклад девиаторной составляющей (вводится зависимость от второго инварианта тензора деформаций):

$$E(\delta, D, S) = E_c(\delta) + E_D(\delta, D) + E_t(\delta, S).$$

Здесь E , E_c , E_D , E_t — полная удельная внутренняя энергия и ее упругая, девиаторная и тепловая составляющие соответственно, $\delta = V_0/V$ — отношение начального удельного объема к текущему, D , S — второй инвариант девиатора тензора деформаций и энтропия. Методика построения такого уравнения состояния описана, например, в [55, 150, 151]. Учет дислокационного механизма необратимого деформирования осуществляется через зависимость для времени релаксации касательных напряжений $\tau = \tau(\delta, D, S)$. Для этого используется связь τ со скоростью пластической деформации:

$$\tau \sim \tau \left(\frac{d\varepsilon_p}{dt} \right)^{-1} = \xi_p^{-1}.$$

Скорость пластической деформации связана с параметрами дислокационного ансамбля формулой Орована:

$$\frac{d\varepsilon_p}{dt} = \xi_p, \quad \tau \sim \tau_0 (N_m v)^{-1},$$

в которой τ_0 — параметр, который зависит от температуры. Как показывает практика расчетов, несмотря на обсуждавшуюся выше неполноту данного соотношения, такой связи оказывается достаточно для приемлемого замыкания модели. Методика построения зависимостей для времени релаксации касательных напряжений описана в [148, 152]. В зависимости от степени детализации процесса изменения полной плотности дислокаций и плотности подвижных дислокаций N_m получены зависимости, с помощью которых рассчитываются диаграммы деформирования, характерные для идеального упругопластического деформирования (рис. 3), упрочняющегося упругопластического тела (рис. 4) и упрочняющегося тела с последующим разупрочнением (рис. 5). Соответствующие зависимости для времени релаксации приведены на рисунках. Кривые на рисунках соответствуют различным скоростям деформации алюминиевого сплава — от 10 до 10^5 с $^{-1}$. Экспериментальные данные заимствованы из [153].

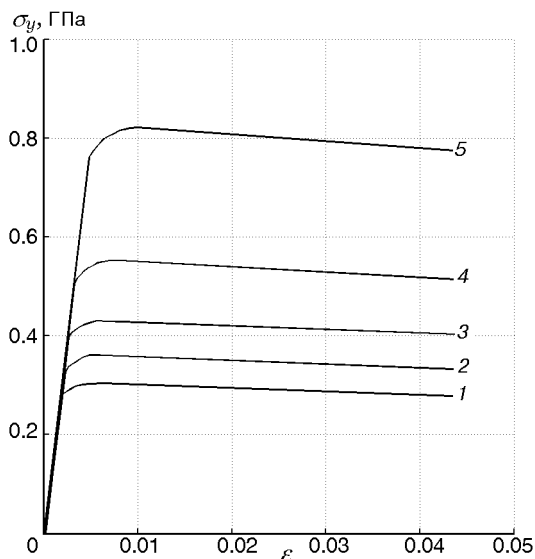


Рис. 3. Диаграмма деформирования, характерная для упрочняющегося упругопластического тела:

кривые 1–5 соответствуют скоростям деформирования $10, 10^2, 10^3, 10^4, 10^5 \text{ с}^{-1}$

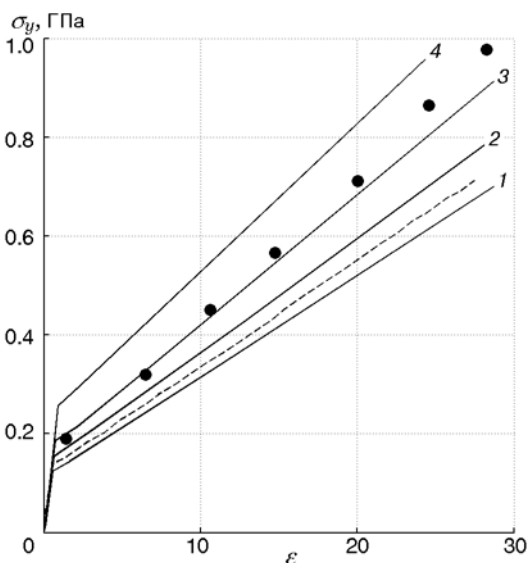


Рис. 4. Диаграмма деформирования, характерная для идеально упругопластического тела:

кривые 1–4 соответствуют скоростям деформирования $10, 10^2, 10^3, 10^4 \text{ с}^{-1}$, точки и штриховая линия — экспериментальные данные [153]

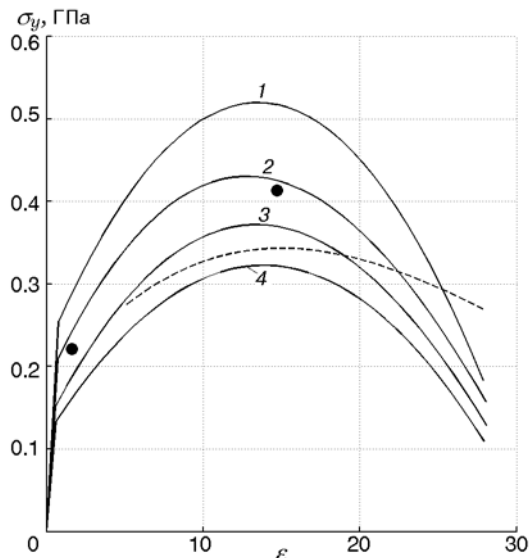


Рис. 5. Диаграмма деформирования, характерная для упрочняющегося упругопластического тела с последующим разупрочнением:

кривые 1–4 получены при скоростях деформирования $10, 10^2, 10^3, 10^4 \text{ с}^{-1}$ соответственно, штриховая линия и точки — экспериментальные данные [153]

Построенные модели использовались для решения ряда задач динамического и ударно-волнового деформирования [147, 149, 154, 155]. Во всех случаях расчеты хорошо описывают результаты соответствующих экспериментов.

Данный подход был распространен и на построение моделей полимерных материалов [156, 157]. В этом случае для построения зависимости деформирования от времени релаксации касательных напряжений используются соотношения, характеризующие термоактивационный характер микро- и мезоструктурных механизмов необратимых деформаций. Рассчитанные диаграммы деформирования полиметилметакрилата приведены на рис. 6.

Другой подход к построению двухуровневой модели продемонстрирован в [158–160]. Здесь элемент материала представлен в виде набора хаотически ориентированных зерен, расчет напряженно-деформированного состояния внутри них проведен по дислокационной модели [158], модели релаксирующего тела максвелловского типа [159] или модели упругопластического тела [160], а параметры состояния мезообъема, включающего достаточно большое количество зерен, осреднены. На рис. 7 показаны результаты расчетов, получен-

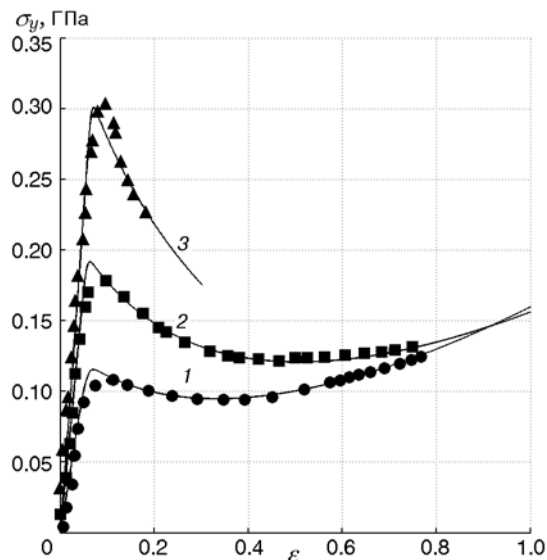


Рис. 6. Диаграмма деформирования полиметилметакрилата:

скорости деформирования: 1 — 10^{-3} с^{-1} , 2 — 0.3 с^{-1} , 3 — 800 с^{-1}

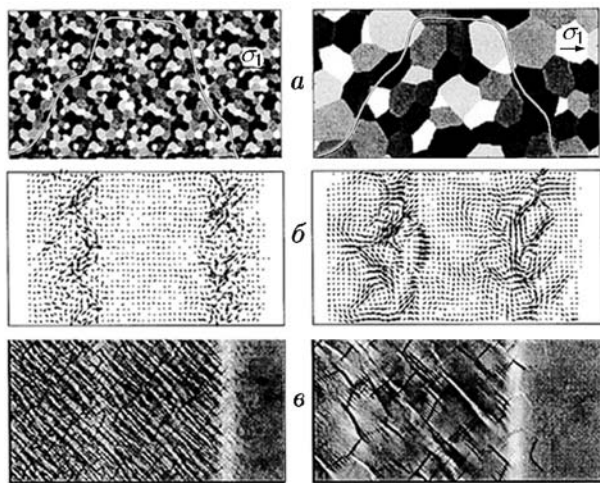


Рис. 7. Деформация поликристалла под действием ударного импульса в материале с размером зерна 50 мкм (левая колонка) и 500 мкм (правая колонка):

a — вид поликристалла, сплошной линией показана форма импульса, *б* — поле скоростей, *в* — картина пластической деформации

ные с использованием модели с максвелловской релаксацией внутри зерен, в которых сравниваются характер деформирования под действием ударного импульса (показан сплошной линией на рис. 7, *a*) одного и того же материала с мелким (50 мкм) и крупным (500 мкм) размером зерна. Расчет показывает принципиальное ка-

чественное различие полей скорости (*б*) и характера пластической деформации (*в*).

Более последовательно реализуется принцип учета механизмов деформирования на разных структурных уровнях в [161, 162]. Здесь сформулирована трехуровневая модель. На первом этапе расчета методом молекулярной динамики моделируется процесс зарождения и эволюции дислокационного ансамбля. На следующем этапе по полученным данным строятся соотношения кинетики дислокационного ансамбля (второй уровень). На завершающем этапе (третий уровень) построенная кинетика вводится в континуальную модель, с помощью которой уже возможно решение физической задачи. Выполненное построение пока апробировано на решении простейших одномерных задач, однако показывает перспективность такого подхода.

Следует подчеркнуть, что приведенные примеры далеко не исчерпывают всего обширного списка работ, посвященных построению многоуровневых моделей деформирования и разрушения. Примером многообразия используемых подходов могут служить, например, работы [163–169], в которых построены конкретные модели, сочетающие рассмотрение процессов на атомарном или дислокационном уровне и включение их описания в соотношения механики сплошных сред. Полный анализ таких многоуровневых (в основном — двухуровневых) моделей потребовал бы написания специального обзора.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящее время в практических расчетах, в том числе в коммерческих пакетах, преобладают модели упругопластического деформирования, приспособленные к решению динамических задач. Их применимость обусловлена наличием достаточного количества параметров, выбираемых на основе экспериментов, чем обеспечивается приемлемая точность расчетов. К сожалению, появляется заметное количество работ, в которых расчеты проводятся без анализа адекватности используемых параметров модели данному классу задач и материалов. Вместе с тем, имеется понимание необходимости построения моделей, основанных на описании микроструктурных механизмов необратимых процессов, обуславливающих динамическое деформирование и разрушение. Идет развитие таких микроструктурных моделей, в

первую очередь дислокационных. Они хорошо описывают простейшие ударно-волновые процессы — затухание упругого предвестника и плоских ударных волн, плоский откол. Модели, позволившие бы описать динамическое и ударно-волновое деформирование в произвольном пространственном случае, пока не построены.

Интенсивно развивается атомистическое моделирование, ускоренное развитие которого связано, в первую очередь, с появлением суперкомпьютеров и технологии параллельных вычислений. Несмотря на это, пространственно-временное разрешение таких расчетов остается практически ограниченным областью нанокристаллов и долями секунд. По-видимому, эти модели прочно заняли свою нишу — моделирование процессов на микроуровне с целью исследования особенностей микроструктурных механизмов деформирования и разрушения.

Наиболее перспективными представляются многоуровневые модели, учитывающие механизмы на различных структурных уровнях — от квантового и атомарного до макроскопического, подчиняющегося законам механики сплошных сред. В дальнейшем развитии моделей может потребоваться учет фрактальности строения реальных сред на мезоуровне, что потребует привлечения дробного интегро-дифференциального исчисления для формулирования математического аппарата.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Альтшулер Л. В.** Применение ударных волн в физике высоких давлений // *Успехи физ. наук.* — 1965. — Т. 85, вып. 2. — С. 199–258.
2. **Физика взрыва: в 2 т.** / под ред. Л. П. Орленко. — Изд. 3-е, испр. — М.: Физматлит, 2004.
3. **Высокоскоростные ударные явления** / под ред. В. Н. Николаевского. — М.: Мир, 1973.
4. **Вычислительные методы в гидродинамике** / под ред. Б. Олдера, С. Фернбаха, М. Ротенберга. — М.: Мир, 1967.
5. **Канель Г. И., Разоренов С. В., Уткин А. В., Фортон В. Е.** Ударно-волновые явления в конденсированных средах. — М.: Янус, 1996.
6. **Фомин В. М., Гулидов А. И., Сапожников Г. А. и др.** Высокоскоростное взаимодействие тел. — Новосибирск: Изд-во СО РАН, 1999.
7. **Merzhievsky L. A.** Current models of dynamic deformation and fracture of condensed matter // *Mater. Sci. Forum.* — 2014. — V. 767. — P. 101–108.
8. **Лаврентьев М. А.** Кумулятивный снаряд и принципы его работы // *Успехи мат. наук.* — 1957. — Т. 12, № 4 (76). — С. 41–52.
9. **Лаврентьев М. А., Шабат Б. В.** Проблемы гидродинамики и их математические модели. — М.: Наука, 1973.
10. **Cowan G. E.** Shock deformation and limiting shear strength of metals // *Trans. Met. Soc. AIME.* — 1965. — V. 233, N 6. — P. 1120–1130.
11. **Harlow F. H.** Numerical fluid dynamics // *The Amer. Math. Monthly. Computers and Computing.* — 1965. — V. 72, N 2. — P. 84–91.
12. **Харлоу Ф. Х.** Численный метод частиц в ячейках для задач гидродинамики // *Вычислительные методы в гидродинамике.* — М.: Мир, 1967. — С. 316–342.
13. **Яненко Н. Н., Анучина Н. Н., Петренко В. Е., Шокин Ю. И.** О методах расчета задач газовой динамики с большими деформациями // *Численные методы механики сплошной среды.* — 1970. — Т. 1, № 1. — С. 40–63.
14. **Анучина Н. Н.** О методах расчета течений сжимаемой жидкости с большими деформациями // *Численные методы механики сплошной среды.* — 1970. — Т. 1, № 4. — С. 3–84.
15. **Анучина Н. Н.** О решении нестационарных задач газовой динамики методом «частиц в ячейке» // *Теоретические основы и конструирование численных алгоритмов задач математической физики* / под ред. К. И. Бабенко. — М.: Наука, 1979. — С. 235–253.
16. **Динс Д., Уолш Д.** Теория удара: некоторые общие принципы и метод расчета в эйлеровых координатах // *Высокоскоростные ударные явления* / под ред. Р. Кинслоу. — М.: Мир, 1973. — С. 49–111.
17. **Рини Т.** Численное моделирование явлений при высокоскоростном ударе // *Там же.* — С. 164–219.
18. **Робул Г. И.** Применение метода частиц в ячейках к решению задач о высокоскоростном ударе // *Численные методы в аэродинамике.* — М.: МГУ, 1980. — С. 76–84.
19. **Златин Н. А., Кожушко А. А.** Гидродинамические модельные представления в теории высокоскоростного взаимодействия твердых тел и границы их применимости // *Журн. техн. физики.* — 1962. — Т. 52, вып. 2. — С. 330–334.
20. **Уилкинс М. Л.** Расчет упругопластических течений // *Вычислительные методы в гидродинамике.* — М.: Мир, 1967. — С. 212–263.
21. **Бахрах С. М., Иванов А. Г., Ковалев Н. П. и др.** Прочность алюминия при упругопластическом сжатии в ударной волне // *Детонация. Критические явления. Физико-химические превращения в ударных волнах.* — Черногловка, 1978. — С. 94–101.
22. **Фомин В. М., Хакимов Э. М.** Численное моделирование волн сжатия и разрежения в

- металлах // ПМТФ. — 1989. — № 5. — С. 114–122.
23. **Христианович С. А., Шемякин Е. И.** О динамической сжимаемости прочных горных пород и металлов // ПМТФ. — 1964. — № 3. — С. 9–15.
 24. **Герман В., Лоуренс Р. Дж.** Влияние выбора модели материала на результаты расчета распространения волн напряжения // Теорет. основы инж. расчетов. — 1978. — Т. 100, № 1. — С. 95–107.
 25. **Johnson G. R., Cook W. H.** A constitutive model and data for metals subjected to large strains, high strain rates and high temperatures // Proc. of 7th Symp. on Ballistics, Hague, Netherlands, 1983. — P. 541–547.
 26. **Steinberg D. J., Cochran S. G., Guinan M. W.** A constitutive model for metals applicable at high-strain rate // J. Appl. Phys. — 1980. — V. 51, N 3. — P. 1498–1504.
 27. **Curran D. R.** Nonhydrodynamic attenuation of shock waves in aluminum // J. Appl. Phys. — 1963. — V. 34, № 9. — P. 2677–2685.
 28. **Duvall G. E.** Maxwell-like relations in condensed materials. Decay of shock waves // Iran. J. Sci. Technol. — 1978. — V. 7. — P. 57–69.
 29. **Мерзиевский Л. А., Реснянский А. Д.** О выборе модели для описания затухания ударных волн в металлах // Физика горения и взрыва. — 1983. — Т. 19, № 1. — С. 99–105.
 30. **Альтшулер Л. В., Кругликов Б. С.** Затухание сильных ударных волн в двухфазных и гетерогенных средах // ПМТФ. — 1984, № 5. — С. 24–29.
 31. **Быченков В. А., Свидинский В. А.** Некорректность модели упругопластического течения в методе Уилкинса // Физика горения и взрыва. — 1990. — Т. 26, № 1. — С. 118–122.
 32. **Садовский В. М., Свободина К. С.** О численной реализации термомеханической модели динамики упругопластической среды // Изв. Алт. гос. ун-та. Сер. Математика и механика, управление, вычислительная техника и информатика, физика. — 2014. — № 1(81). — С. 179–181.
 33. **Steinberg D. J., Lund C. M.** A constitutive model for strain rates from 10^{-4} to 10^6 s^{-1} // J. Appl. Phys. — 1989. — V. 65, N 4. — P. 1528–1533.
 34. **Zerilli F. J., Armstrong R. W.** Dislocation-mechanics based constitutive relations for material dynamics calculations // J. Appl. Phys. — 1987. — V. 61, N 5. — P. 1816–1825.
 35. **Armstrong R., Zerilli F.** Dislocation mechanics based analysis of material dynamics behavior // J. de Phys. Colloque C3. — 1988. — Т. 49. — P. C3-529–C3-534.
 36. **Zerilli F. J., Armstrong R. W.** Constitutive relations for the plastic deformation of metals // High-Pressure Science and Technology — 1993 / S. C. Schmidt, J. W. Shaner, G. A. Samara, M. Ross (Eds). — N. Y.: AIP Press, 1994. — P. 989–992.
 37. **Follansbee P. S., Kocks U. F.** A constitutive description of the deformation of copper based on the use of the mechanical threshold stress as an internal state variable // Acta Metall. — 1988. — V. 36. — P. 82–93.
 38. **Banerjee B., Bhawalkar A. S.** An extended-mechanical threshold stress plasticity model: modeling 6061-T6 aluminum alloy // J. Mech. Mater. Struct. — 2008. — V. 3, N 3. — P. 391–424.
 39. **Preston D. L., Tonks D. L., Wallace D. C.** Model of plastic deformation for extreme loading conditions // J. Appl. Phys. — 2003. — V. 93, N 1. — P. 211–220.
 40. **Liang R., Khan A. S.** A critical review of experimental results and constitutive models for BCC and FCC metals over a wide range of strain rates and temperatures // Intern. J. Plasticity. — 1999. — V. 15. — P. 963–980.
 41. **Banerjee B.** An evaluation of plastic flow stress models for the simulation of high-temperature and high-strain-rate deformation of metals. — 2005. — (Preprint / Univ. of Utah, USA).
 42. **Рейнер М.** Реология. — М.: Наука, 1965.
 43. **Duvall G. E.** Propagation of plane shock waves in a stress-relaxing medium // Stress Waves in Anelastic Solids. — Intern. Union of Theor. Appl. Mech., 1964. — P. 20–32.
 44. **Соколовский В. В.** Распространение упруговязкопластических волн в стержнях // Прикл. математика и механика. — 1948. — Т. 12, № 3. — С. 22–29.
 45. **Малверн Л. А.** Распространение волн в стержне, материал которого чувствителен к скорости деформации // Механика: сб. пер. — 1952. — № 1. — С. 153–161.
 46. **Альтшулер Л. В., Чекин Б. С.** Релаксационные параметры металлов за фронтом ударных волн // Детонация. Критические явления. Физико-химические превращения в ударных волнах. — Черноголовка: ОИХФ, 1978. — С. 87–90.
 47. **Альтшулер Л. В., Чекин Б. С.** Реология волновой деформации металлов // Физика горения и взрыва. — 1983. — Т. 19, № 5. — С. 140–143.
 48. **Быченков В. А., Куропатенко В. Ф., Хардина Л. В.** Кинетическая модель релаксации напряжений в сплошных и пористых твердых телах // Вестн. Челяб. ун-та. Сер. 6. Физика. — 1997. — № 1. — С. 14–27.
 49. **Глушак Б. Л., Игнатова О. Н., Надежин С. С., Раевский В. А.** Релаксационная модель сдвиговой прочности пяти металлов (алюминий, бкриллий, медь, тантал, уран) // ВАНТ. Сер. Мат. моделирование физ. процессов. — 2012. — Вып. 2. — С. 25–35.

50. Corrl D. T., Starr M. J., Vanderby R., Jr, Best T. M. A nonlinear generalized maxwell fluid model for viscoelastic materials // J. Appl. Mech. — 2001. — V. 68, september. — P. 787–790.
51. Bardenhagen S. G., Stoutb M. G., Gray G. T. Three-dimensional, finite deformation, viscoplastic constitutive models for polymeric materials // Mech. Mater. — 1997. — V. 25. — P. 235–253.
52. Khan A. S., Lopez-Pamies O., Kazmi R. Thermo-mechanical large deformation response and constitutive modeling of viscoelastic polymers over a wide range of strain rates and temperatures // Intern. J. Plasticity. — 2006. — V. 22. — P. 581–601.
53. Plaseied A., Fatemi A. Deformation response and constitutive modeling of vinyl ester polymer including strain rate and temperature effects // J. Mater. Sci. — 2008. — V. 43. — P. 1191–1199.
54. Годунов С. К. Элементы механики сплошных сред. — М.: Наука, 1978.
55. Годунов С. К., Козин Н. С., Роменский Е. И. Уравнение состояния упругой энергии металлов при нешаровом тензоре деформации // ПМТФ. — 1974. — № 2. — С. 123–128.
56. Годунов С. К., Козин Н. С. Структура ударных волн в упруго-вязкой среде с нелинейной зависимостью максвелловской вязкости от параметров вещества // ПМТФ. — 1974. — № 5. — С. 101–108.
57. Годунов С. К., Демчук А. Ф., Козин Н. С., Мали В. И. Интерполяционные формулы зависимости максвелловской вязкости некоторых металлов от интенсивности касательных напряжений и температуры // ПМТФ. — 1974. — № 4. — С. 114–118.
58. Годунов С. К., Денисенко В. В., Козин Н. С., Кузьмина Н. К. Применение релаксационной модели вязкоупругости при расчете однородных деформаций и уточнении интерполяционных формул максвелловской вязкости // ПМТФ. — 1975. — № 5. — С. 162–167.
59. Годунов С. К., Роменский Е. И. Элементы механики сплошных сред и законы сохранения. — Новосибирск: Науч. кн., 1998.
60. Годунов С. К. Новый вариант термодинамически согласованной модели максвелловской вязкости // ПМТФ. — 2004. — Т. 45, № 6. — С. 3–13.
61. Аврорин Е. Н., Анучина Н. Н., Гаджиева В. В., Елсуков В. П., Мордвинов Б. П. Численное моделирование взаимодействия пылевидных частиц кометы с космическим аппаратом // Физика горения и взрыва. — 1996. — Т. 32, № 2. — С. 117–123.
62. Инденбом В. Л., Орлов А. Н. Физическая теория пластичности и прочности // Успехи физ. наук. — 1962. — Т. 76, вып. 3. — С. 557–591.
63. Косевич А. М. Динамическая теория дислокаций // Успехи физ. наук. — 1964. — Т. 84, вып. 4. — С. 579–609.
64. Панин В. Е., Лихачев В. А., Гриняев Ю. В. Структурные уровни деформации твердых тел. — Новосибирск: Наука, 1985.
65. Олемской А. И., Скляр И. А. Эволюция дефектной структуры твердого тела в процессе пластической деформации // Успехи физ. наук. — 1992. — Т. 162, № 6. — С. 29–79.
66. Джонстон В., Гилман Дж. Скорость передвижения, плотность дислокаций и пластическая деформация кристаллов фтористого лития // Успехи физ. наук. — 1960. — Т. 70, вып. 3. — С. 489–514.
67. Альшиц В. И., Инденбом В. Л. Динамическое торможение дислокаций // Успехи физ. наук. — 1975. — Т. 115, вып. 1. — С. 3–39.
68. Gilman J. J. Microdynamics of plastic flow at constant stress // J. Appl. Phys. — 1965. — V. 36, N 9. — P. 2772–2777.
69. Gilman J. J. Dislocation mobility in crystals // J. Appl. Phys. — 1965. — V. 36, N 10. — P. 3195.
70. Gillis P. P., Gilman J. J. Dynamical dislocation theory of crystal plasticity. I. The yield stress // J. Appl. Phys. — 1965. — V. 36, N 11. — P. 3370–3380.
71. Gillis P. P., Gilman J. J. Dynamical dislocation theory of crystal plasticity. II. Easy glide and strain hardening // J. Appl. Phys. — 1965. — V. 36, N 11. — P. 3380–3386.
72. Taylor J. W. Dislocation dynamics and dynamic yielding // J. Appl. Phys. — 1965. — V. 36, N 10. — P. 3165–3170.
73. Gilliman J. J. Dislocation dynamics and the response of material to impact // Appl. Mech. Rev. — 1968. — V. 21, N 8. — P. 767–783.
74. Kuriyama S., Kawata K. Propagation of stress wave with plastic deformation in metal obeying the constitutive equation of the Johnston — Gilman type // J. Appl. Phys. — 1973. — V. 44, N 8. — P. 3445–3454.
75. Kelly J. M., Gillis P. P. Continuum descriptions of dislocations under stress reversals // J. Appl. Phys. — 1974. — V. 45, N 3. — P. 1091–1096.
76. Нигматулин Р. М., Холин Н. Н. К модели упругопластической среды с дислокационной кинетикой пластического деформирования // Изв. АН СССР. Механика твердых тел. — 1974. — Т. 4. — С. 131–136.
77. Gupta Y. M., Duvall G. E., Fowles G. R. Dislocation mechanisms for stress relaxation in shocked LiF // J. Appl. Phys. — 1975. — V. 46, N 2. — P. 532–546.
78. Бахрах С. М., Иванов А. Г., Ковалев Н. П. и др. Прочность алюминия при сжатии в ударной волне // ПМТФ. — 1980. — № 2. — С. 137–143.

79. **Канель Г. И.** Модель кинетики пластической деформации металлов в условиях ударно-волнового нагружения // ПМТФ. — 1982. — № 2. — С. 105–110.
80. **Кульман-Вильсдорф Д.** Дислокации // Физическое металловедение. — М.: Мир, 1968. — Т. 3. — С. 9–86.
81. **Gupta Y. M., Duvall G. E., Fowles G. R.** Dislocation mechanisms for stress relaxation in shocked LiF // J. Appl. Phys. — 1975. — V. 46. — P. 532–546.
82. **Могилевский М. А., Мынкин О. И.** Влияние точечных дефектов на одномерное сжатие решетки // Физика горения и взрыва. — 1978. — Т. 14, № 5. — С. 159–163.
83. **Букаемский А. А., Мержиевский Л. А.** Анализ применимости дислокационных кинетик в задачах динамической пластичности // Динамика сплошной среды. — 1987. — Вып. 80. — С. 31–40.
84. **Мержиевский Л. А.** Трехмерное обобщение упругопластической модели Гилмана // Динамика сплошной среды. — 1983. — Вып. 59. — С. 158–163.
85. **Werne R. W., Kelly J. M.** A dislocation theory of isotropic polycrystalline plasticity // Intern. J. Eng. Sci. — 1978. — V. 16, N 12. — P. 951–965.
86. **Estrin Y.** Dislocation-density-related constitutive modeling // Unified Constitutive Laws of Plastic Deformation / A. S. Krausz, K. Krausz (Eds). — San Diego, CA: Acad. Press, 1996. — P. 69–106.
87. **Austin R. A., McDowell D. L.** A dislocation-based constitutive model for viscoplastic deformation of FCC metals at very high strain rates // Intern. J. Plasticity. — 2011. — V. 27. — P. 1–24.
88. **Rajagopal K. R., Srinivasa A. R.** On the inelastic behavior of solids — Part I: Twinning // Intern. J. Plasticity. — 1995. — V. 11, N 6. — P. 653–678.
89. **Rajagopal K. R., Srinivasa A. R.** On the inelastic behavior of solids — Part II: Energetics associated with discontinuous deformation twinning // Intern. J. Plasticity. — 1997. — V. 13, N 1/2. — P. 1–35.
90. **Савельева Н. В., Баяндин Ю. В., Наймарк О. Б.** Численное моделирование деформирования и разрушения металлов в условиях плоского удара // Вычислительная механика сплошных сред. — 2012. — Т. 5, № 3. — С. 300–307.
91. **Баяндин Ю. В., Мержиевский Л. А., Наймарк О. Б.** Многомасштабные механизмы структурной релаксации и некоторые закономерности формирования пластических волновых фронтов в металлах // Экстремальные состояния вещества. Детонация. Ударные волны: сб. тез. докл. междунар. конф. «XV Харитоновские научные чтения», 18–22 марта 2013 г. — Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2013. — С. 187–188.
92. **Баяндин Ю. В., Мержиевский Л. А., Наймарк О. Б., Савельева Н. В.** Широкодиапазонные определяющие уравнения поведения твердых тел с дефектами при динамическом воздействии и высокоскоростном ударе // Взрыв в физическом эксперименте: Всероссий. конф., приуроченная к 80-летию со дня рождения акад. В. М. Титова, Новосибирск, Россия, 16–20 сент. 2013 г.: тез. докл. — Новосибирск: Ин-т гидродинамики им. М. А. Лаврентьева СО РАН, 2013. — С. 116–118.
93. **Frenkel D., Smit B.** Understanding Molecular Simulation. From Algorithms to Applications. — San Diego etc.: Acad. Press, 1996.
94. **Hutter J., Marx D.** Ab initio molecular dynamics: Theory and implementation // Modern Methods and Algorithms of Quantum Chemistry / J. Grotendorst (Ed.). — Juelich: John von Neumann Institute for Computing, 2000. — P. 301–449. — (NIC Ser.; V. 1).
95. **Хельтье Х.-Д., Зиппль В., Роньян Д., Фолькерс Г.** Молекулярное моделирование. Теория и практика. — М.: Бином, 2010.
96. **Рапапорт Д. К.** Искусство молекулярной динамики. — Ижевск: ИКИ, 2012.
97. **Plimpton S.** Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics // J. Comput. Phys. — 1995. — V. 117, N 1. — P. 1–19.
98. **Todorov I. T., Smith W.** The DL POLY 4 user manual. Version 4.02.0. — Daresbury, England: STFC Daresbury Laboratory, 2011.
99. **Phillips J. C., Braun R., Wang W., Gumbart J., Tajkhorshid E., Villa E., Chipot Ch., Skeel R. D., Kale L., Schulten K.** Scalable molecular dynamics with NAMD // J. Comput. Chem. — 2005. — V. 26, N 16. — P. 1781–1802.
100. **Berendsen H. J. C., van der Spoel D., van Duren R.** GROMACS: A message-passing parallel molecular dynamics implementation // Comp. Phys. Comm. — 1995. — V. 91. — P. 43–56.
101. **Limbach H. J., Arnold A., Mann D. A., Holm C.** ESPResSo — an extensible simulation package for research on soft matter systems // Comp. Phys. Comm. — 2006. — V. 174, N 9. — P. 704–727.
102. **Alder B. J., Wainwright T. E.** Phase transition for a hard sphere system // J. Chem. Phys. — 1957. — V. 27. — P. 1208–1209.
103. **Foiles S. M.** Calculation of the surface segregation of Ni—Cu alloys with the use of the embedded-atom method // Phys. Rev. B. — 1985. — V. 32. — P. 7685–7693.
104. **Foiles S. M., Baskes M. I., Daw M. S.** Embedded-atom method functions for the FCC metals Cu, Ag, Au, Ni, Pd, Pt, and their alloys // Phys. Rev. B. — 1986. — V. 33. — P. 7983–7991.

105. **Voter A. F.** Embedded atom method potentials for seven FCC metals: Ni, Pd, Pt, Cu, Ag, and Al // Los Alamos Unclassified Technical Report LA-UR-93-3901. — 1993.
106. **Allen M. P., Tildesley D. J.** Computer Simulation of Liquids. — Oxford; N. Y.: Clarendon Press, 1987.
107. **Kadav K., Germann T. C., Lomdahl P. S.** Large-scale molecular-dynamics simulation of 19 billion particles // Intern. J. Modern Phys. C. — 2004. — V. 15, N 1. — P. 193–201.
108. **Kadav K., Germann T. C., Lomdahl P. S.** Molecular dynamics comes of age: 320 billion atom simulation on BlueGene/L // Intern. J. Modern Phys. C. — 2006. — V. 17, N 12. — P. 1755–1761.
109. **Tsai D. H., Beckett C. W.** Shock wave propagation in cubic lattices // J. Geophys. Res. — 1966. — V. 71, N 10. — P. 2601–2608.
110. **Duvall G. E., Manvi R., Lowell S. C.** Steady shock profile in a one-dimensional lattice // J. Appl. Phys. — 1969. — V. 40, N 9. — P. 3771–3775.
111. **Manvi R., Duvall G. E.** Shock waves in a lattice one-dimensional non-dissipating lattice // Brit. J. Appl. Phys. (J. Phys. D). Ser. 2. — 1969. — V. 2. — P. 1389–1396.
112. **Клименко В. Ю., Дремин А. Н.** Структура фронта ударной волны в жидкости // Докл. АН СССР. — 1979. — Т. 249, № 4. — С. 840–843.
113. **Клименко В. Ю., Дремин А. Н.** Структура фронта ударной волны в твердом теле // Докл. АН СССР. — 1980. — Т. 251, № 6. — С. 1379–1381.
114. **Tsai D. H., MacDonald R. A.** Shock wave profile in a crystalline solid // J. Phys. C: Solid State Phys. — 1978. — V. 11. — P. L365–L371.
115. **Paskin A., Gohar A., Dienes G. J.** Simulations of shock waves in solids // J. Phys. Chem. Solids. — 1978. — V. 39. — P. 1307–1311.
116. **Holian B. L.** Atomistic computer simulations of shock waves // Shock Waves. — 1995. — N 5. — P. 149–157.
117. **Могилевский М. А., Ефремов В. В., Мынкин И. О.** Поведение кристаллической решетки при сильном одномерном сжатии // Физика горения и взрыва. — 1977. — Т. 13, № 5. — С. 750–754.
118. **Holian B. L.** Modeling shock-wave deformation via molecular dynamics // Phys. Rev. A. — 1988. — V. 37. — P. 2562–2568.
119. **Holian B. L., Lomdahl P. S.** Plasticity induced by shock waves in nonequilibrium molecular-dynamics simulations // Science. — 1998. — V. 280. — P. 2085–2088.
120. **Kadav K., Germann T. C., Lomdahl P. S., Holian B. L.** Microscopic view of structural phase transitions induced by shock waves // Science. — 2002. — V. 296. — P. 1681–1684.
121. **Holian B. L.** Molecular dynamics comes of age for shockwave research // Shock Waves. — 2004. — V. 13, N 6. — P. 489–495.
122. **Головнев И. Ф., Головнева Е. И., Мержиевский Л. А., Фомин В. М.** Генерация дефектов как явление самоорганизации структуры под влиянием внешних нагрузок // Физ. мезомеханика. — 2013. — Т. 16, № 3. — С. 35–43.
123. **Головнев И. Ф., Головнева Е. И., Мержиевский Л. А.** Моделирование трансформации структуры нанокристалла при ударном нагружении // Изв. Алт. гос. ун-та. Сер. Математика и механика, управление, вычислительная техника и информатика, физика. — 2014. — № 1(81). — С. 40–42.
124. **Головнев И. Ф., Головнева Е. И., Мержиевский Л. А., Фомин В. М., Панин В. Е.** Молекулярно-динамическое исследование кластерной структуры и свойств ротационной волны в твердотельных наноструктурах // Физ. мезомеханика. — 2014. — Т. 17, № 4. — С. 41–48.
125. **Норман Г. Э., Янилкин А. В.** Гомогенное зарождение дислокаций // Физика твердого тела. — 2011. — Т. 53, вып. 8. — С. 1536–1541.
126. **Qi Y., Strachan A., Cagin T., Goddard W. A., III.** Large scale atomistic simulations of screw dislocation structure, annihilation and cross-slip in FCC Ni // Mater. Sci. Eng. A. — 2001. — V. 309-310. — P. 156–159.
127. **Germann T. C., Tanguy D., Holian B. L., Lomdahl P. S., Mareschal M., Ravelo R.** Dislocation structure behind a shock front in fcc perfect crystals: Atomistic simulation results // Metallurg. Mater. Trans. A. — 2004. — V. 35, september. — P. 2609–2615.
128. **Cao B., Bringa E. M., Meyers M. A.** Shock compression of monocrystalline copper: Atomistic simulations // Metallurg. Mater. Trans. A. — 2007. — V. 38, N 11. — P. 2681–2688.
129. **Dremov V., Petrovsev A., Sapozhnikov P., Smirnova M.** Molecular dynamics simulations of the initial stages of spall in nanocrystalline copper // Phys. Rev. B. — 2006. — V. 74, N 5. — P. 144110-1–144110-5.
130. **Soulard L.** Molecular dynamics study of the micro-spallation // Eur. Phys. J. D. — 2008. — V. 50. — P. 241–251.
131. **Dongare A. M., Rajendran A. M., LaMattina B., Zikry M. A., Brenner D. W.** Atomic scale studies of spall behavior in nanocrystalline Cu // J. Appl. Phys. — 2010. — V. 108, N 11. — P. 113518-1–113518-10.
132. **Dongare A. M., LaMattina B., Rajendran A. M.** Atomic scale studies of spall behavior in single crystal Cu // Procedia Eng. — 2011. — N 10. — P. 3636–3641.

133. Zhang C., Kalia R. K., Nakano A., Vashishta P. Fracture initiation mechanisms in α -alumina under hypervelocity impact // Appl. Phys. Lett. — 2007. — V. 91, N 12. — P. 121911-1–121911-3.
134. Brancioa P. S., Kalia R. K., Nakano A., Vashishta P., Shimojoc F., Rino J. P. Atomistic damage mechanisms during hypervelocity projectile impact on AlN: A large-scale parallel molecular dynamics simulation study // J. Mech. Phys. Solids. — 2008. — V. 56. — P. 1955–1988.
135. Samela J., Nordlund K. Classical molecular dynamics simulations of hypervelocity nanoparticle impacts on amorphous silica // Phys. Rev. B. — 2010. — V. 81, N 5. — P. 054108-1–054108-5.
136. Holmstrom E., Samela J., Nordlund K. Atomistic simulations of fracture in silica glass through hypervelocity impact // Lett. J. Exploring Frontiers Phys. (EPL). — 2011. — V. 96. — P. 16005-p1–16005-p5.
137. Кривцов А. М., Морозов Н. Ф. Аномалии механических свойств наноразмерных объектов // Докл. АН. — 2001. — Т. 381, № 3. — С. 345–347.
138. Кривцов А. М., Кривцова Н. В. Метод частиц и его использование в механике деформируемого твердого тела // Дальневосточный мат. журн. — 2002. — Т. 3, № 2. — С. 254–276.
139. Кривцов А. М. Деформирование и разрушение твердых тел с микроструктурой. — М.: Физматлит, 2006.
140. Панин В. Е., Лихачев В. А., Гриняев Ю. В. Структурные уровни деформации твердых тел. — Новосибирск: Наука, 1985.
141. Meyers M. A. Dynamic Behavior of Materials. — N. Y.: John Wiley & Sons, Inc., 1994.
142. Малинин В. Г., Малинина Н. А. Структурно-аналитическая мезомеханика деформируемого твердого тела // Физ. мезомеханика. — 2005. — Т. 8, № 5. — С. 31–45.
143. Steinhauser M. O. Computational Multiscale Modeling of Fluids and Solids Theory And Applications. — Berlin; Heidelberg: Springer-Verlag, 2008.
144. Multiscale modelling of plasticity and fracture by means of dislocation mechanics / R. Pippan, P. Gumbsch (Eds). — Wien; N. Y.: Springer, 2010.
145. Multiscale modelling of polymer properties / M. Laso, E. A. Perpete (Eds). — Brussels, 2006.
146. Multiscale modeling and simulation: A SIAM Interdisciplinary J. — <http://www.siam.org/journals/mms.php>.
147. Мержиевский Л. А., Реснянский А. Д. Численное моделирование ударно-волновых процессов в металлах // Физика горения и взрыва. — 1984. — Т. 20, № 5. — С. 114–122.
148. Мержиевский Л. А., Шамонин С. А. Построение зависимости времени релаксации касательных напряжений от параметров состояния среды // ПМТФ. — 1980. — № 5. — С. 170–179.
149. Merzhievsky L. A., Resnyansky A. D. The role of numerical simulation in the study of high-velocity impact // Intern. J. Impact Eng. — 1995. — V. 17, N 1-6. — P. 559–570.
150. Мержиевский Л. А. Моделирование динамического сжатия поликристаллического Al_2O_3 // Физика горения и взрыва. — 1998. — Т. 34, № 6. — С. 85–94.
151. Воронин М. С., Краус Е. И., Мержиевский Л. А. Моделирование ударно-волновых процессов в алюминии с использованием малопараметрического уравнения состояния при нешаровом тензоре деформации // Изв. Алт. гос. ун-та. — 2014. — № 1/1. — С. 32–35.
152. Merzhiyevsky L. A., Tyagel'sky A. V. Dislocation kinetics of shock wave metal deformation // J. de Phys., Colloque C3. — 1991. — P. C3-525–C3-531.
153. Попов Н. Н., Иванов А. Г., Стрекин В. П., Баринов В. М. Получение полных диаграмм растяжения сплавов АМг6 и МА18 при скоростях деформации $10^{-3} \dots 10^3 \text{ c}^{-1}$ // Проблемы прочности. — 1981. — № 12. — С. 50–54.
154. Мержиевский Л. А., Реснянский А. Д. Численное моделирование деформирования и разрушения пологой конической облицовки // Физика горения и взрыва. — 1987. — Т. 23, № 2. — С. 102–110.
155. Мержиевский Л. А., Реснянский А. Д. Численный анализ аномалии защитных свойств тонкого экрана при ударе под углом // Физика горения и взрыва. — 1993. — Т. 29, № 6. — С. 81–87.
156. Мержиевский Л. А., Воронин М. С. Моделирование ударно-волнового деформирования полиметилметакрилата // Физика горения и взрыва. — 2012. — Т. 48, № 2. — С. 113–123.
157. Бордзиловский С. А., Воронин М. С., Караханов С. М., Мержиевский Л. А. Температура ударного сжатия полимерных материалов // Докл. АН. — 2014. — Т. 455, № 6. — С. 646–650.
158. Романова В. А., Балохонов Р. Р. Сравнительный анализ напряженно-деформированного состояния на мезоуровне в двумерных и трехмерных поликристаллических образцах // Физ. мезомеханика. — 2009. — Т. 12, № 6. — С. 33–39.
159. Макаров П. В., Романова В. А., Балохонов Р. Р. Динамика потери сдвиговой устойчивости материалов в условиях ударно-волнового нагружения // Хим. физика. — 2001. — Т. 20, № 8. — С. 94–99.

160. Романова В. А., Балохонов Р. Р., Макаров П. В., Смолин И. Ю. Численное моделирование поведения структурно-неоднородной релаксирующей среды в условиях динамического нагружения // Хим. физика. — 1999. — Т. 18, № 11. — С. 114–119.
161. Красников В. С., Куксин А. Ю., Майер А. Е., Янилкин А. В. Пластическая деформация при высокоскоростном нагружении алюминия: многомасштабный подход // Физика твердого тела. — 2010. — Т. 52, вып. 7. — С. 1295–1304.
162. Mayer A. E., Khishchenko K. V., Levashov P. R., Mayer P. N. Modeling of plasticity and fracture of metals at shock loading // J. Appl. Phys. — 2013. — V. 113, N 5. — P. 193508-1–193508-7.
163. Rajendran A. M., Mohan R., Dongare A. M. Multiscale modeling of cementitious materials under shock loading conditions: challenges and issues // Proc. of the Intern. Conf. Shock Waves in Condensed Matter (SWCM 2012), Kiev, Ukraine, 5–10 September 2012. — P. 324–328.
164. Valisetty R., Rajendran A. Multi-scale modeling capable global codes // Proc. of ICCES'10, Las Vegas, April 29, 2010.
165. Ivanov D. S., Zhigilei L. V. Combined atomistic-continuum modeling of short-pulse laser melting and disintegration of metal films // Phys. Rev. B. — 2003. — V. 68. — P. 064114-1–064114-22.
166. Zbib H. M., de la Rubia T. D. A multiscale model of plasticity // Intern. J. Plasticity. — 2002. — V. 18, N 9. — P. 1133–1163.
167. Gazonas G. A., McCauley J. W., Batyrev I. G., et al. Multiscale modeling of armor ceramics: focus on AlON // Proc. of the 27th Army Science Conf., Orlando, FL, 29 November 2010. — P. 1–8.
168. Antoun T., Vorobiev E. B., Johnson S. Mesoscale modeling of the dynamic response of armor ceramics // Adv. in Ceramic Armor VIII: Ceram. Eng. and Sci. Proc. — 2012. — P. 3–18.
169. Shehadeha M. A., Bringa E. M., Zbib H. M., McNaney J. M., Remington B. A. Simulation of shock-induced plasticity including homogeneous and heterogeneous dislocation nucleation // Appl. Phys. Lett. — 2006. — V. 89, N 11. — P. 171918-1–171918-3.

Поступила в редакцию 11/IV 2014 г.