引文格式：陈志凌，李睿智，孙汝剑，等.基于神经网络及原子模拟的α钛单晶激光冲击强化位错密度预测研究[J].航空制造技术，2026，69(20)：26010003.

CHEN Zhiling，LI Ruizhi，SUN Rujian，et al. Prediction of dislocation density in laser shock peening of α-Ti single crystal based on neural networks and atomic simulations[J]. Aeronautical Manufacturing Technology，2026，69(20)：26010003.

基于神经网络及原子模拟的α钛单晶激光冲击强化位错密度预测研究

陈志凌[1,2]，李睿智[1]，孙汝剑[2,3]，舒　送[3]，王子睿[2]

（1. 北京航空航天大学宇航学院，北京 102206；
2. 中国航空制造技术研究院高能束流制造全国重点实验室，北京 100024；
3. 国营芜湖机械厂，芜湖 241007）

[摘要] 针对钛合金激光冲击强化（Laser shock peening，LSP）过程中位错密度演化规律难以原位分析与预测的难题，采用分子动力学（Molecular dynamics，MD）仿真从原子尺度模拟了α钛LSP过程中全位错、肖克利部分位错的演化过程，定量分析了位错密度的变化规律；基于前馈神经网络模型，实现了对不同LSP激光功率密度（与MD活塞速度对应）、不同时刻位错密度的预测，神经网络模型能准确预测给定活塞速度下总位错密度、全位错占比、肖克利部分位错占比的变化规律。结果表明，通过神经网络预测，0.3～1.9 km/s活塞速度范围内，LSP诱导α钛所产生的最大位错密度是0.73 nm^{-2}，对应活塞速度为1.52 km/s，参考激光冲击功率密度约为0.21 TW/cm^2。

关键词：神经网络；分子动力学仿真；钛合金；激光冲击强化（LSP）；位错密度

中图分类号：V261；TG665；TG146.2+3　　**文献标志码：**A　　**DOI：**10.16080/j.issn1671-833x.26010003



陈志凌

博士研究生，研究方向为激光加工及表面工程技术、多尺度计算力学与人工智能算法。

钛合金由于自身高比强度、优异的耐腐蚀性和良好的高温力学性能，被广泛应用于航空发动机风扇/压气机叶片、飞机机身主承力框等关键航空装备。这些钛合金装备在服役过程中承受着高频次的交变载荷与复杂应力，极易发生疲劳失效，严重影响航空装备的使用安全性与服役可靠性[1–2]。激光冲击强化（Laser shock peening，LSP）是一种先进的表面强化技术，是改善航空钛合金结构件疲劳性能的有力手段，其原理是利用高功率（GW/cm^2量级）短脉冲（飞秒至纳秒量级）激光诱导产生的高压等离子体冲击波作用于材料表面，使表层发生超高应变率（$>10^6\ s^{-1}$）的塑性变形，从而在构件中引入高幅值的残余压应力层，有效改善其疲劳性能。该技术强化的微观本质在于冲击波载荷驱动材料内部发生剧烈的微观组织相互作用和演变，进而形成高密度位错、纳米孪晶等结构，这些微观结构的演化是实现表层晶粒细化和性能优化的核心机制[3–4]。

大量试验研究通过显微组织观察证实了激光冲击强化可在钛合金表层诱生高密度位错结构。例如，Huang等[5]通过电子背散射衍射

收稿日期：2026-01-05；**退修日期：**2026-02-07；**录用日期：**2026-04-09

基金项目：国家自然科学基金（52575550）

通信作者：孙汝剑，高级工程师，博士，研究方向为激光加工及表面工程技术。

(Electron backscatter diffraction, EBSD)观察到了激光冲击强化纯钛的表层形成的大量位错,并通过正态分布拟合了观察区域的位错密度;眷垚旭等[6]通过透射电子显微镜(Transmission electron microscope, TEM)表征了Ti834合金经激光冲击强化后表层的显微组织,发现塑性变形层内产生了大量位错,且随着冲击次数的增加,位错密度也进一步增加。然而,以透射电镜等为代表的试验表征手段存在固有的局限性,其观测视场通常仅为微米甚至纳米尺度,所得结果是材料微观结构的局部切片,难以对强化区域内位错密度的三维空间分布进行全局、定量化的统计描述。此外,激光冲击的塑性变形过程发生在飞秒至纳秒的超快时间尺度,离线的试验表征技术无法原位捕捉到位错形核、增殖、相互作用乃至湮灭的瞬态演化序列。

以分子动力学(Molecular dynamics, MD)为代表的原子尺度模拟技术为揭示上述超短时间尺度的微观机理提供了强大工具。使用MD仿真LSP的通常做法是使用恒定速度的刚性活塞挤压原子尺度的材料来模拟高应变率过程,从而原位捕捉位错的演化。例如,Gu等[7]基于MD模型研究了活塞速度U_p在0.5~1.5 km/s范围时α钛模型的位错演化,发现在该范围内总位错线长度随U_p增大而增大,这意味着在一定范围内,激光功率密度越高,钛材塑性变形区内产生的位错密度越大。进一步地,Li等[8]基于MD模型观察到了激光冲击过程中α钛晶体内不同位错滑移系的产生,这对分析位错的演化有重要意义。然而,原子模拟为了平衡计算精度与成本,通常仅针对固定的冲击速度或有限的激光功率密度开展少数几次模拟。其根本瓶颈在于,进行高保真度的原子模拟计算的成本极其高昂,这使得系统扫描工艺参数空间(如激光冲击功率密度)以探索位错密度演化规律变得几乎不可行。

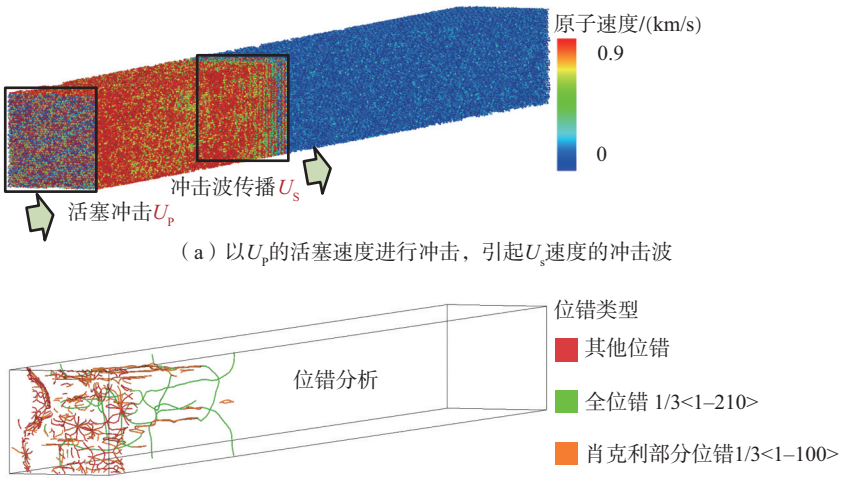
为了在保持原子尺度模拟物理精度的前提下,大幅降低探索工艺参数空间的成本,基于神经网络的代理模型展现出巨大潜力。其核心思路是,首先通过有限次数分子动力学模拟,生成一个“工艺参数–微观结构演化”数据集;然后,利用该数据集训练一个神经网络,使其学习从输入工艺参数到输出响应之间的复杂非线性映射关系,从而实现位错演化规律的快速、低成本预测。这一技术路线的有效性已在相关领域得到验证。如Latypov等[9]以MD仿真结果作为数据集训练人工神经网络,预测了铝在高应变率压缩过程中的位错密度变化。随后,Latypov等[10]使用相同的方法,用人工神经网络预测了多孔镁在高应变率压缩过程中的位错密度变化。然而,目前还未有基于神经网络对钛合金激光冲击强化的位错密度进行预测的研究。

综上所述,本文旨在融合分子动力学模拟与神经网络模型,构建一个针对钛合金激光冲击强化的位错密度智能预测的框架,实现对给定激光功率密度下位错演化行为的快速预测,并逆向确定使位错密度达到峰值的最优激光冲击加工参数,从而指导激光冲击强化加工实践。

1 试验及方法

1.1 分子动力学模型

分子动力学(MD)仿真的理论核心是利用牛顿经典力学计算材料中原子的运动状态,从而根据原子晶格的变化分析位错等微结构的演化[11]。本研究的分子动力学仿真基于大规模原子/分子并行模拟器(Large–scale atomic/molecular massively parallel simulator, LAMMPS)平台[12],后处理使用OVITO程序[13]。由于α钛的位错滑移是钛合金中较为典型的位错滑移形式,因此本研究中钛合金材料简化为具有密排六方晶体(Hexagonal close–packed, HCP)结构的α钛,并假设模型不存在初始缺陷(无点缺陷、位错和面缺陷等),也不存在杂质原子。同时,模型忽略了激光冲击强化中的热效应,只考虑激光诱导冲击波与材料的相互作用。MD仿真模型如图1所示,建立HCP结构的α钛单晶模型,其晶格常数为a = 0.295 nm和c = 0.468 nm。模型尺寸为10 nm × 10 nm × 140 nm,x、y、z轴分别沿[0001]、[1–210]和[10–10]这3个晶向。由于模型为纳米级别,计算结



(a)以U_p的活塞速度进行冲击,引起U_s速度的冲击波

(b)通过位错分析,可以确定冲击引起的位错类型

图1 MD仿真模型示意图

Fig.1 Schematic diagram of MD simulation model

果只能反映材料表层的微观结构演化情况。激光诱导的冲击波通过活塞压缩的方式产生。以U_P的恒定速度使刚性活塞沿z轴方向压缩α钛单晶，x、y轴均为周期性边界条件。通过活塞压缩的方式，能在钛单晶中产生传播速度为U_s的冲击波，在冲击波阵面的前后会出现明显的原子物理参数（包括原子速度等）的突变。使用DXA算法进行位错分析，绿色表示伯格斯矢量为1/3<1–210>的全位错，橙色表示伯格斯矢量为1/3<1–100>的肖克利部分位错，上述两个位错滑移系是冲击过程中最主要的类型[14]。

仿真加载包括弛豫和冲击两个过程。弛豫过程中，各轴均设置周期性边界条件，控制模型的压力、温度，使模型沿各轴的应力均减小为0，以消除初始应力的干扰[15]。随后，由于LSP加载的时间极短，可近似为绝热过程，因此采用微正则系综模拟冲击过程，时间步长为1 fs。Sun等[16]的研究表明，当活塞速度取不同值时，激光诱导单晶α钛的变形机制包括弹性变形、塑性变形和晶格无序化。为了确保反映不同变形机制下的位错密度特征，取活塞速度U_P为0.3 ~ 1.9 km/s。同时，为了避免激光诱导冲击波抵达边界引起反射，取冲击时间为20 ps。活塞速度与LSP激光功率密度的关系可按以下方法确定。

激光诱导冲击波的峰值压力P（单位GPa）为[17]

$$P=0.01\sqrt{Z\cdot\frac{\alpha}{2\alpha+3}I_0} \tag{1}$$

式中，Z为材料的等效阻抗；α为激光诱导等离子体热能占内能的比例系数；I_0为LSP激光功率密度。

由于MD模型为纳米级别的尺寸，可认为作用于模型上的冲击波压力即为峰值压力，因此模型实际反映的是平顶光作用的结果，忽略了光斑的高斯分布。根据动量守恒，LSP激光诱导冲击波峰值压力与MD活塞速度及冲击波速度的关系为[18]

$$P=\rho_0 U_P U_S \tag{2}$$

式中，ρ_0为α钛的密度；U_P为活塞速度；U_S为冲击波速度。

活塞速度关系和冲击波速度的关系近似为

$$U_S=C_0+S_1U_P \tag{3}$$

式中，C_0和S_1为常数，与材料属性有关。

结合式(1)~(3)，U_P为0.3 ~ 1.9 km/s时对应的LSP激光功率密度范围是5.69 ~ 368.99 GW/cm^2，该范围包含纳秒到飞秒激光冲击强化的功率密度。

钛原子之间的相互作用采用嵌入原子法（Embedded atom method，EAM）势函数[19]，则可建立原子运动的动力学方程。

$$F=-\nabla U \tag{4}$$

$$a=\frac{F}{m} \tag{5}$$

式中，F为原子受力；U为原子的势能；a为原子的加速度；m为原子的质量。

使用Velocity–Verlet算法进行数值积分[20]。

$$r(t+\Delta t)=r(t)+v(t)\Delta t+\frac{1}{2}a(t)\Delta t^2 \tag{4}$$

$$v(t+\Delta t)=v(t)+\frac{1}{2}\left[a(t)+a(t+\Delta t)\right]\Delta t \tag{5}$$

式中，r为原子坐标；v为原子速度；a为原子加速度；t为时间。

通过DXA算法，可以统计任意时刻模型内不同类型位错的长度及模型体积，由此可计算位错密度。

$$\rho_d=\frac{L_d}{V} \tag{6}$$

式中，ρ_d为位错密度；L_d为位错线长度；V为当前模型体积。

统计U_P为0.3, 0.5, 0.7, 0.9, 1.1, 1.3, 1.5, 1.7, 1.9 km/s；时间t为1 ~ 20 ps各时刻总位错密度、1/3<1–210>型全位错所占比例、1/3<1–100>型肖克利部分位错所占比例，作为神经网络学习的数据集。

1.2 神经网络模型

使用前馈神经网络对位错密度进行预测。如图2所示，前馈神经网络有3层结构，包括输入层、隐藏层、输出层[21]。输入为活塞速度U_P、加载时间t，输出为位错密度、全位错占比、肖克利部分位错占比。输入层和输出层之间是隐藏层，隐藏层由若干神经元组成，具有不同的权重和偏置，以实现输入输出函数关系的拟合。

隐藏层神经元的个数可参考式(7)确定[22]。

$$N_i=\sqrt{m+n}+a_1 \tag{7}$$

式中，N_i为隐藏层神经元个数；m为输出层神经元个数；n为输入层神经元个数；a_1为1~10之间的整数。本文所构建的前馈神经网络输入层有2个神经元，输出层有3个神经元。因此，隐藏层神经元个数的范围是

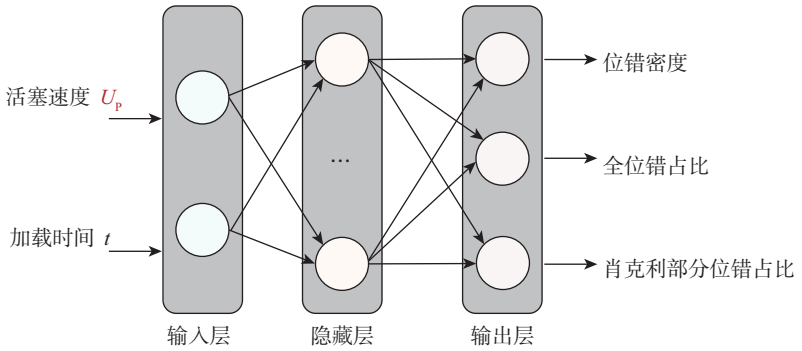


图2 前馈神经网络结构示意图

Fig.2 Schematic diagram of the feed-forward neural network structure

4~12。

为了确定最优的隐藏层神经单元个数，采用均方误差（Mean squared error，MSE）作为性能指标评估模型的优劣。它通过对误差取平方放大了大误差的影响，值越小代表模型精度越高。计算公式为

$$\mathrm{MSE}=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\left(y_i-Y_i\right)^2 \tag{8}$$

式中，n 为样本数量；y_i 和 Y_i 分别为真实值和神经网络预测值。

设置神经网络的最大迭代次数为 1000 次、学习速率为 0.01、训练目标最小误差 1×10^{-6}。以交错选择的方式进行数据划分，其中 90% 的数据作为训练集，10% 的数据作为验证集。为了防止过拟合，使用贝叶斯正则化的方法作为训练算法。

使用 S 型正切函数（Tansig）作为连接神经网络输入层到隐含层的激活函数，以增强非线性映射能力，其表达式为[23]

$$\tan\mathrm{sig}(x)=\frac{2}{1+\mathrm{e}^{-2x}}-1 \tag{9}$$

隐藏层到输出层的激活函数则使用线性函数（Purelin），确保结果的准确和连续，其表达式为

$$f(x)=y \tag{10}$$

式中，y 为神经网络预测值。

神经网络模型的运行平台为 MATLAB R2024b，所用硬件为笔记本电脑，其处理器为 AMD Ryzen 7 7840H w/ Radeon 780M Graphics (3.80 GHz)。

2 结果与讨论

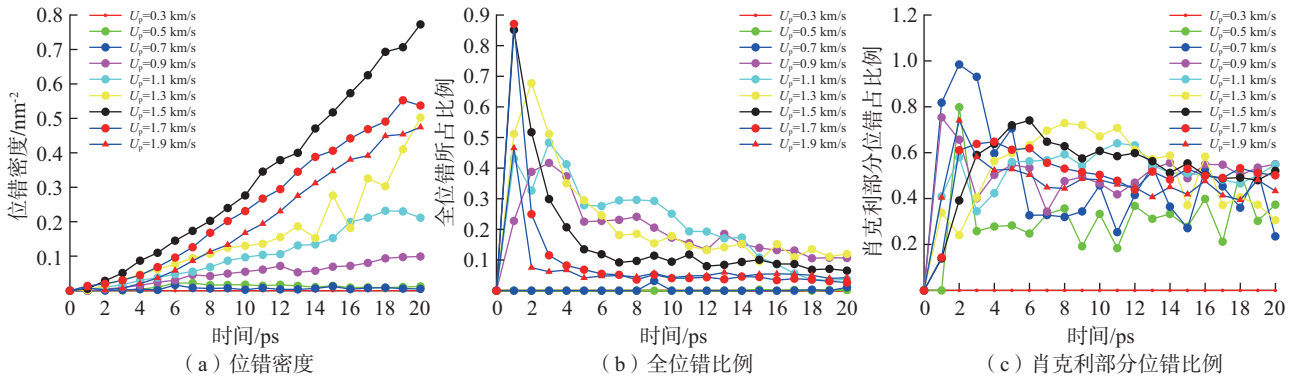
2.1 分子动力学仿真结果

不同冲击速度下，总位错密度、全位错所占比例、肖克利部分位错所占比例随时间变化的曲线分别如图 3 所示。

图 3（a）为不同活塞速度下位错密度，当 U_p = 0.3 km/s 时，冲击加载过程中位错密度始终为 0，表明此时冲击载荷没能使钛晶体内部产生塑性变形；当 0.3 km/s < U_p < 1.5 km/s 时，随着活塞速度增大，位错密度整体增大，表明在此范围内，激光冲击功率密度越大，以位错为主导的塑性变形越剧烈；当 U_p > 1.5 km/s 时，随着活塞速度增大，位错密度整体却减小，表明位错滑移已经不是主要的塑性变形模式，这是因为过高的活塞速度会引入过高的能量，使晶体进入非晶化状态[16]。在 1 ~ 20 ps 的加载范围内，位错密度随时间增大而增大，表明在皮秒尺度下，钛晶体在激光冲击过程中位错会向更密集的方向演化。可以注意到，0.5 km/s 时的位错密度计算结果在局部区域比 0.7 km/s 时的大。根据 Sun 等[16]的研究，活塞速度为 0.5 km/s 时，激光冲击强化过程中 α 钛的塑性变形机制为类孪晶的晶粒旋转；0.7 km/s 时，激光冲击强化过程中 α 钛的塑性变形机制为晶粒旋转和位错滑移。对于 0.7 km/s 的情况，竞争初期，晶粒旋转产生的界面位错与其他位错滑移系的位错发生湮灭，减缓了位错密度的增加，所以位错密度甚至有低于 0.5 km/s 的情况。当晶粒旋转完成时，其不再与其他位错滑移系竞争湮灭，而是成为位错发射源，因此位错密度又重新增加，并出现超过 0.5 km/s 的情况。此外，1.3 km/s 时位错密度的波动则可能来自位错增殖与局部缺陷塌缩的竞争。

如图 3（b）所示，当 U_p ≤0.7 km/s 时，全位错所占比例几乎为 0，此时全位错滑移几乎不参与钛晶体的塑性变形；当 U_p > 0.7 km/s 时，全位错所占比例均经历短暂升高随后逐渐下降的过程，表明在此冲击能量范围内，全位错滑移在塑性变形初期快速占据主导，但又逐渐被其他塑性变形模式取代，并且随着冲击速度增大，全位错比例的峰值出现得更快且数值更大，这表明全位错增殖的速度随冲击能量的增加急剧增大。

如图 3（c）所示，肖克利部分位错的演化规律则更加复杂。当 U_p = 0.3 km/s 时，肖克利部分位错比例为 0，钛晶体内不存在肖克利部分位错，符合总位错为 0 的情况；当 0.3 km/s < U_p ≤ 0.7 km/s 时，肖克利部分位错比例急剧升高又迅速回落，这表明在塑性变形初期，肖克利部分位错是主要的位错形式，但很快被其他形式的



（a）位错密度　（b）全位错比例　（c）肖克利部分位错比例

图 3　MD 仿真结果

Fig.3　Results of MD simulation

位错滑移系取代；当 U_p > 0.7 km/s 时，肖克利部分位错比例升高及回落的速度均放缓，结合全位错的变化规律，可以推断出一方面初始时以全位错增殖为代表的塑性变形机制与肖克利部分位错增殖为代表的塑性变形机制产生了竞争，从而降低了肖克利部分位错比例增大的幅值；另一方面全位错向肖克利部分位错的转化，延缓了肖克利部分位错衰减的过程。

以 U_p = 0.9 km/s 为例分析冲击过程中α钛晶体的位错演化过程，如图4所示。U_p = 0.9 km/s，α钛晶体内塑性变形机制由位错滑移主导，这与Sun等[16]的试验观察吻合。t = 5 ps 时，全位错在塑性变形区增殖，这是全位错比例急剧增加的原因；t = 10 ps时，肖克利部分位错在晶体塑性变形区的边界位置滑移，同时全位错向肖克利部分位错分解，两种因素同时作用导致肖克利部分位错比例升高。全位错向肖克利部分位错分解的位错反应为[24]

$$\frac{1}{3}[11\bar{2}0] \rightarrow \frac{1}{3}[10\bar{1}0] + \frac{1}{3}[01\bar{1}0] \tag{11}$$

t = 15 ps时，由于冲击波的强烈作用，有大量局部缺陷形核，这是其他位错增加而使得全位错和肖克利部分位错比例减小的原因；t = 20 ps 时，在原先肖克利部分位错滑移的地方发生了位错纠缠，形成了晶界，实际上，这是因为此处区域发生了孪晶变形导致的晶粒旋转。Yuan等[25]也报道了在这个过程中肖克利部分位错的滑移。

2.2 神经网络预测结果

由于神经网络权重的初始化是随机的，其训练的结果也有一定的随机性。为了评判最优性能参数对应的隐藏层神经元数量，对神经元数量为4~12的每个模型均训练5次，比较MSE误差，结果如表1所示。根据训练结果，隐藏层神经元数为11的模型，平均误差最小，所以选取隐藏层神经元数量为11。以测试中性能最好（MSE = 0.002559）的模型作为预测位错密度的神经网络模型。

神经网络训练时的误差曲线如图5所示，训练集误差和测试集误差在第914次迭代后收敛。训练集均分误差MSE = 0.002559极小，证明模型有很高的拟合精度。

以 U_p = 1.7km/s的加载过程作为

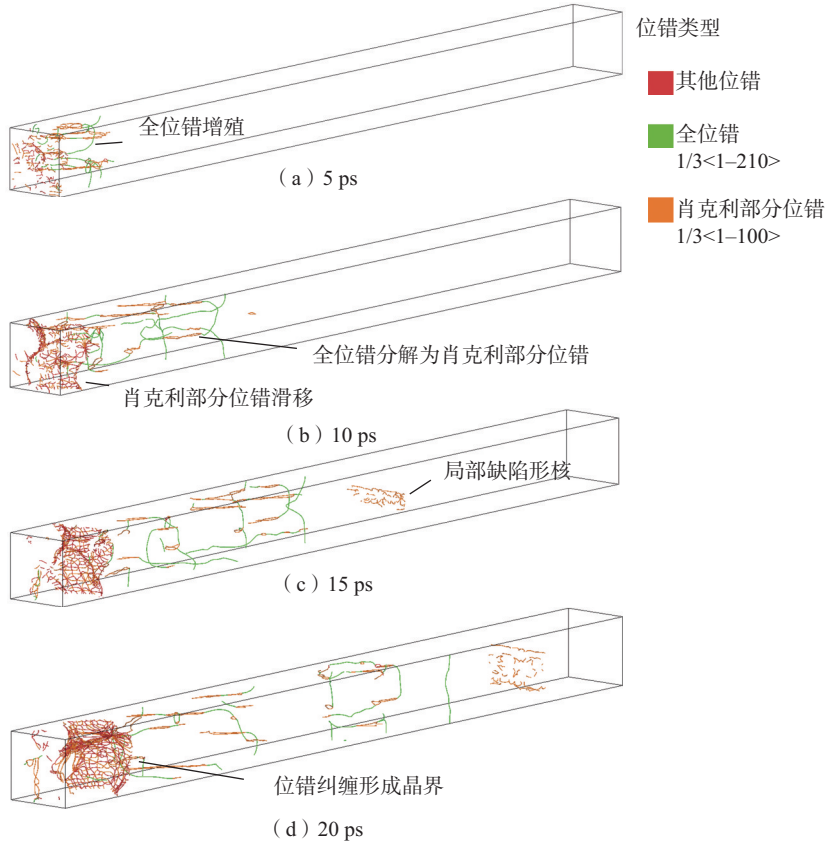


图4 U_p = 0.9 km/s时位错演化过程

Fig.4 Dislocation evolution process at U_p = 0.9 km/s

表1 具有不同神经元数量隐藏层的神经网络的MSE误差比较

Table 1 A comparison of MSE errors of neural networks with hidden layers of different neuron quantities

隐藏层神经元数	训练误差MSE					
	测试1	测试2	测试3	测试4	测试5	平均值
4	0.007745	0.009222	0.006778	0.006965	0.006988	0.007540
5	0.004453	0.006133	0.008377	0.005317	0.005457	0.005947
6	0.005710	0.004297	0.004978	0.004646	0.004278	0.004782
7	0.005429	0.004791	0.004778	0.005005	0.005075	0.005016
8	0.003289	0.002773	0.002283	0.003553	0.003007	0.002981
9	0.004151	0.004006	0.002952	0.004003	0.002828	0.003588
10	0.004694	0.004083	0.003432	0.003648	0.003642	0.003900
11	0.002753	0.002733	0.002559	0.003029	0.002644	0.002744
12	0.003088	0.002718	0.002594	0.002954	0.002946	0.002860

输入，比较神经网络预测和分子动力学仿真的结果，总位错密度、全位错所占比例、肖克利部分位错所占比例的对比结果分别如图6所示。由图6可知，神经网络对3个变量变化趋势的预测基本符合MD仿真结果。神经网络模型准确反映出了总位错密度总体单调增长、全位错比例快速到达极大值点后衰落、肖克利部分位错先增后减的趋势。对于肖克利部分位错衰减过程中的振荡，神经网络模型尚不能模拟，这是因为不同冲击速度的塑性变化机制不同，所引起的数据震荡极为复杂，神经网络还不能准确识别每一种模式的震荡，但对于位错演化趋势的准确预判已经具有一定的指导意义。

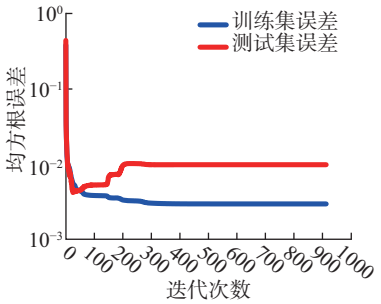


图5 神经网络训练误差曲线

Fig.5 Neural network training error curve

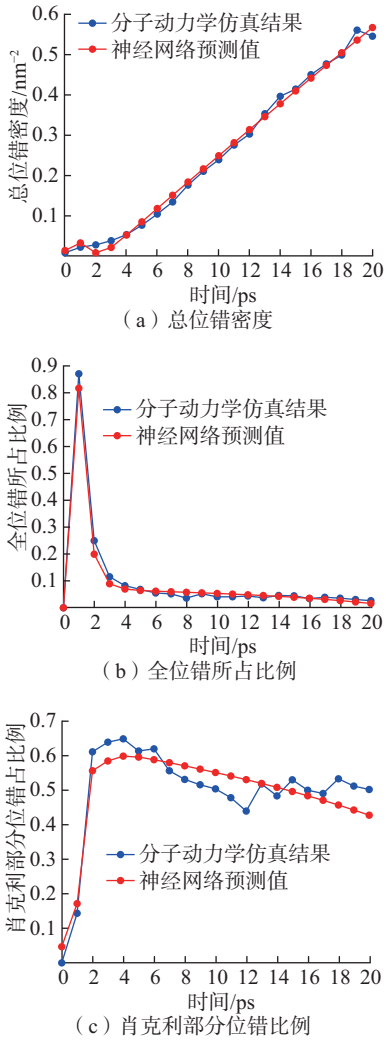


图6 神经网络预测结果与MD仿真的对比

Fig.6 Comparison of neural network prediction results and MD simulation

为了评估模型的精度，计算1～20 ps内神经网络预测数据和MD仿真的相对误差（式12）。

$$\text{error}=\left|\frac{Y-y}{y}\right|\times 100\% \qquad (12)$$

式中，Y为神经网络预测值；y为MD仿真值。

神经网络预测结果的平均相对误差及决定系数R^2如表2所示。平均相对误差均在20%以内，考虑到误差贡献主要来自个别极端数据（如极值点），模型整体趋势预测准确，可以在一定程度上说明模型精度较高。总位错密度、全位错占比、肖克利部分位错占比的R^2均接近1，证明拟合效果好。后续可以考虑通过加密数据集等方式加强模型对极端数据的学习。

近似以t = 20 ps作为位错密度最大时刻，令活塞速度U_p在0.3～1.9 km/s范围内变化，用神经网络模型预测每一个活塞速度下的位错密度，确定位错密度最大时对应的活塞速度。预测的最大位错密度为0.73 nm^{-2}，相应的冲击速度为1.52 km/s，对应的激光冲击功率密度约为0.21 TW/cm^2。北京航空航天大学孙浩等[26]以1.4～9.9 GW/cm^{2}的功率密度开展激光冲击试验，发现激光冲击后TC17钛合金的位错密度随功率密度增大而增大，而本研究进一步将位错密度随功率密度增大的范围扩展到了0.21 TW/cm^2。

在计算效率方面，神经网络模型也有明显优势。本文的神经网络模型在MATLAB R2024b平台运行时总时长为10 s量级（硬件为笔记本电脑，处理器为AMD Ryzen 7 7840H w/ Radeon 780M Graphics (3.80 GHz)）；本文的MD模型需要在超级计算云服务器上才能进行，且使用128核进行并行计算，每个模型的用时都在20 min以上的量级，时间成本远高于神经网络模型。

3 结 论

本文基于神经网络及原子模拟（分子动力学仿真）预测了以α钛为代表的钛合金在激光冲击强化超高应变率变形过程中的位错密度演化规律，通过将LSP激光功率密度转化为等效的MD活塞速度，基于0.3~1.9 km/s活塞速度范围内的位错密度演化仿真结果构建数据集，训练前馈神经网络，实现对给定活塞速度位错密度的预测，得到以下主要结论。

（1）MD仿真结果表明，活塞速度在0.3～1.9 km/s范围、加载时间为20 ps时，LSP诱导钛晶体内产生的总位错密度随时间逐渐增大；1/3<1–210>全位错在活塞速度>0.7 km/s时密度明显增大，呈现先增大后减小的趋势；1/3<1–100>肖克利部分位错呈现先增大后减小的趋势，在

表2 神经网络预测结果的平均相对误差及决定系数R^2

Table 2 Average relative error and coefficient of determination R^2 of the neural network prediction results

变量	总位错密度	全位错占比	肖克利部分位错占比
平均相对误差/%	15.7	19.4	8.89
决定系数R^2	0.995	0.989	0.894

活塞速度>0.7 km/s时位错密度减小的趋势因全位错的分解转化而延缓。

（2）神经网络模型能准确预测总位错密度、全位错占比、肖克利位错占比随时间变化的趋势，平均相对误差为15.7%、19.4%、8.89%，极值点等个别极端数据是误差的主要来源，一定程度上证明了神经网络模型的预测能力。

（3）通过神经网络预测，活塞速度在0.3～1.9 km/s范围时，可引入的最大位错密度为0.73 nm^{-2}，对应冲击速度为1.52 km/s，参考的激光冲击功率密度约为0.21 TW/cm^2。

参 考 文 献

[1] 王欣, 罗学昆, 宇波, 等. 航空航天用钛合金表面工程技术研究进展[J]. 航空制造技术, 2022, 65(4): 14–24.

Wang Xin, Luo Xuekun, Yu Bo, et al. Research progress on surface engineering technology of aerospace titanium alloys[J]. Aeronautical Manufacturing Technology, 2022, 65 (4): 14–24.

[2] 田壮, 赵志浩. TA18钛合金管材研究现状及发展趋势[J]. 有色金属加工, 2023, 52(2): 1–11.

Tian Zhuang, Zhao Zhihao. Research status and development trend of TA18 titanium alloy pipe[J]. Nonferrous Metals Processing, 2023, 52(2): 1–11.

[3] 刘仁志, 孙汝剑, 张永鑫, 等. TC21钛合金回转体部件激光冲击强化残余应力数值模拟研究[J]. 航空制造技术, 2024, 67(18): 73–81.

Liu Renzhi, Sun Rujian, Zhang Yongxin, et al. Numerical simulation of laser shock peening induced residual stress on TC21 titanium alloy manufactured cylinder component[J]. Aeronautical Manufacturing Technology, 2024, 67(18): 73–81.

[4] Sun R J, Che Z G, Cao Z W, et al. Fatigue behavior of Ti–17 titanium alloy subjected to different laser shock peened regions and its microstructural response[J]. Surface and Coatings Technology, 2020, 383: 125284.

[5] Huang X, Zhu W X, Chen K, et al. Twin and dislocation induced grain subdivision and strengthening in laser shock peened Ti[J]. International Journal of Plasticity, 2022, 159: 103476.

[6] 咎垚旭, 贾蔚菊, 赵恒章, 等. 激光冲击Ti834合金强化层显微组织演变[J]. 稀有金属材料与工程, 2020, 49(1): 343–348.

Zan Yaoxu, Jia Weiju, Zhao Hengzhang, et al. Microstructure evolution of Ti834 alloy subjected to laser shock processing in strengthening layer[J]. Rare Metal Materials and Engineering, 2020, 49(1): 343–348.

[7] Gu C, Su M H, Tian Z H, et al. Multi-scale simulation study on the evolution of stress waves and dislocations in Ti alloy during laser shock peening processing[J]. Optics & Laser Technology, 2023, 165: 109629.

[8] Li J, Lu W N, Liu L, et al. Molecular dynamics simulation of microstructural evolution and mechanical behavior of titanium alloy subjected to laser shock peening[J]. Optics & Laser Technology, 2024, 175: 110748.

[9] Latypov F T, Fomin E V, Krasnikov V S, et al. Dynamic compaction of aluminum with nanopores of varied shape: MD simulations and machine-learning-based approximation of deformation behavior[J]. International Journal of Plasticity, 2022, 156: 103363.

[10] Latypov F T, Fomin E V, Krasnikov V S, et al. Modeling of shock wave propagation in porous magnesium based on artificial neural network[J]. Mechanics of Materials, 2024, 191: 104953.

[11] Wen P, Tao G, Spearot D E, et al. Molecular dynamics simulation of the shock response of materials: A tutorial[J]. Journal of Applied Physics, 2022, 131(5): 051101.

[12] Plimpton S. Fast parallel algorithms for short-range molecular dynamics[J]. Journal of Computational Physics, 1995, 117(1): 1–19.

[13] Stukowski A. Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO–the Open visualization tool[J]. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 2010, 18(1): 015012.

[14] Stukowski A, Bulatov V V, Arsenlis A. Automated identification and indexing of dislocations in crystal interfaces[J]. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 2012, 20(8): 085007.

[15] Li R Z, Xie B, Yang X G, et al. Multi-scale modelling of rafting behaviour under complex stress states for Ni3Al superalloys[J]. International Journal of Plasticity, 2022, 152: 103255.

[16] Sun R J, Chen Z L, Li Q L, et al. Atomistic insight into laser shock peening response of α – titanium: An experimentally verified simulation study[J]. Acta Materialia, 2024, 281: 120359.

[17] Deng W W, Wang C Y, Lu H F, et al. Progressive developments, challenges and future trends in laser shock peening of metallic materials and alloys: A comprehensive review[J]. International Journal of Machine Tools and Manufacture, 2023, 191: 104061.

[18] Kalita P, Cochrane K R, Knudson M D, et al. Ti–6Al–4V to over 1.2 TPa: Shock Hugoniot experiments, abinitio calculations, and a broad-range multiphase equation of state[J]. Physical Review B, 2023, 107(9): 094101.

[19] Farkas D, Jones C. Interatomic potentials for ternary Nb – Ti – Al alloys[J]. Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering, 1996, 4(1): 23–32.

[20] Jia L B, Xia S M, Li J, et al. Efficient perovskite/silicon tandem with asymmetric self-assembly molecule[J]. Nature, 2025, 644 (8078): 912–919.

[21] 王宇豪, 孙有平, 李旺珍, 等. 基于神经网络的6061铝合金激光焊接拉伸性能预测及工艺优化[J]. 兵器材料科学与工程, 2026, 49(3): 77–88.

Wang Yuhao, Sun Youping, Li Wangzhen, et al. Prediction of tensile properties and optimization of process parameters for laser-welded 6061 aluminum alloy joints based on neural networks[J]. Ordnance Material Science and Engineering, 2026, 49(3): 77–88.

[22] 廖瑞安, 王学松, 祁琳, 等. TOPAZ–Ⅱ反应堆堆芯的稳态热工代理模型[J]. 核动力工程, 2025, 46(3): 24–33.

Liao Ruian, Wang Xuesong, Qi Lin, et al. Steady state thermal surrogate model of TOPAZ–Ⅱ Reactor core[J]. Nuclear Power Engineering, 2025, 46(3): 24–33.

[23] Laabid Z, Moumen A, Mansouri K, et al. Numerical study of the speed's response of the various intelligent models using the tansig, logsig and purelin activation functions in different layers of artificial neural network[J]. IAES International Journal of Artificial Intelligence (IJ–AI), 2023, 12 (1): 155.

[24] Hull D, Bacon D J. Introduction to Dislocations[M]. 4th ed. Oxford: Butterworth–

Heinemann, 2001.

[25] Yuan F S, Li G P, Han F Z, et al. A new type face-centered cubic zirconium phase in pure zirconium[J]. Journal of Materials Science & Technology, 2021, 81: 236–239.

[26] 孙浩, 朱颖, 郭伟, 等. 激光冲击强化对TC17钛合金残余应力及显微组织的影响[J]. 激光与光电子学进展, 2017, 54(4): 041405.

Sun Hao, Zhu Ying, Guo Wei, et al. Effect of laser shock peening on residual stress and microstructure of TC17 titanium alloy[J]. Laser & Optoelectronics Progress, 2017, 54(4): 041405.

Prediction of Dislocation Density in Laser Shock Peening of α-Ti Single Crystal Based on Neural Networks and Atomic Simulations

CHEN Zhiling[1,2], LI Ruizhi[1], SUN Rujian[2,3], SHU Song[3], WANG Zirui[2]

(1. School of Astronautics, Beihang University, Beijing 102206, China;
2. State Key Laboratory of Power Beam Manufacturing Technology, AVIC Manufacturing Technology Institute, Beijing 100024, China;
3. State-Owned Machinery Factory in Wuhu, Wuhu 241007, China)

[ABSTRACT] Addressing the challenge of in-situ analysis and prediction of dislocation density and its evolution during laser shock peening (LSP) of titanium alloys, molecular dynamics (MD) simulations were employed to investigate the evolution of perfect dislocations and Shockley partial dislocations in α-titanium during LSP at the atomic scale, enabling quantitative analysis of dislocation density variation patterns. Based on a feed-forward neural network model, predictions of dislocation density at different MD piston velocities (corresponding to LSP laser power densities) and time points were achieved. The neural network model accurately predicted the evolution of total dislocation density, the proportion of perfect dislocations, and the proportion of Shockley partial dislocations under given piston velocities. Through neural network predictions, within the piston velocity range of 0.3–1.9 km/s, the maximum dislocation density induced by LSP in α-titanium reached 0.73 nm^{-2}, corresponding to a piston velocity of 1.52 km/s and an estimated laser shock power density of approximately 0.21 TW/cm^2.

Keywords: Neural network; Molecular dynamics simulation; Titaniuam alloy; Laser shock peening (LSP); Dislocation density

（责编　晓月）