МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РФ

Национальный исследовательский Томский государственный университет
Томский государственный университет систем управления и радиоэлектроники
Болгарская Академия наук
Академия инженерных наук им. А.М. Прохорова
Международная научно-техническая организация «Лазерная ассоциация»

ИННОВАТИКА-2020

СБОРНИК МАТЕРИАЛОВ

XVI Международной школы-конференции студентов, аспирантов и молодых ученых
23–25 апреля 2020 г.
г. Томск, Россия

Под редакцией А.Н. Солдатова, С.Л. Минькова

Scientific & Technical Translations
STT
ИЗДАТЕЛЬСТВО
Томск – 2020

ИССЛЕДОВАНИЕ НА ЖЁСТКОСТЬ СИСТЕМЫ ОБЫКНОВЕННЫХ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ, СООТВЕТСТВУЮЩЕЙ МАТЕМАТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ ДЕФОРМАЦИОННОГО УПРОЧНЕНИЯ СПЛАВОВ СО СВЕРХСТРУКТУРОЙ $L1_2$

В.В. Леонов, С.И. Самохина
Национальный исследовательский Томский государственный университет
nargument@yandex.ru

INVESTIGATION OF THE RIGIDITY FOR THE SYSTEM OF ORDINARY DIFFERENTIAL EQUATIONS CORRESPONDING TO THE MATHEMATICAL MODEL OF STRAIN HARDENING OF ALLOYS WITH THE $L1_2$ SUPERSTRUCTURE

V.V. Leonov, S.I. Samokhina
National Research Tomsk State University

The article presents a study of the ODE system corresponding to the mathematical model of strain hardening of alloys with superstructure $L1_2$ for rigidity. According to the results of the study, this system is extremely rigid.

Keywords: rigidity of differential equations, mathematical model, deformation, alloys, superstructure, system of ordinary differential equations.

Исторически интерес к жестким системам возник в середине XX в. при изучении уравнений химической кинетики с одновременным присутствием очень медленно и очень быстро протекающих химических реакций [1].

Строгого общепринятого математического определения жестких ОДУ нет. Понятие жесткости чаще связывалось именно со свойствами системы ОДУ, но сейчас оно чаще связывается с задачей интегрирования, ведь одна и та же система ОДУ может проявлять различную жесткость. Такое поведение зависит от интервала интегрирования и значений коэффициентов системы ОДУ [1].

Для определения степени жесткости системы был выбран метод исследования ОДУ, в котором значение коэффициента жесткости находится, опираясь на собственные значения Якобиана [2].

Математическая модель деформационного и термического упрочнения сплавов со сверхструктурой $L1_2$ представляет собой систему ОДУ первого порядка, в которой в качестве независимой переменной используется деформация ε. Зависимыми переменными являются ρ

(плотность дислокации), C (C_i – количество межузельных атомов, C_v – количество вакансий), η (параметр дальнего порядка – упорядоченность во взаимном расположении атомов или молекул в веществе).

Индексами «II» и «I» обозначены вклады от механизмов, связанных с движением сверхструктурных (упорядоченное состояние) и одиночных (разупорядоченное состояние) дислокаций соответственно [3].

Параметры модели имеют физический или геометрический смысл [3]: α – угол наклона скользящей дислокации к линии соединения; G – модуль сдвига атомов; b – модуль вектора Бюргерса; τ – внешнее (касательное) напряжение; r_a – радиус вектора; θ – обратная безразмерная температура; a – коэффициент междислокационных взаимодействий; D_0 – длина дислокационных соединений; χ – прочность дислокационного соединения; k – постоянная Больцмана; T – температура; E – собственные энергии соответствующих сегментов дислокаций на единицу длины; κ – постоянная порядка единицы; ι – среднее расстояние между препятствиями в плоскости кристаллографического скольжения; ζ – эффективная энергия антифазных границ; ξ – фактор Смоллмена; μ_r – линейное натяжение сегмента скользящей дислокации; Г – интеграл Эйлера второго порядка; τ_f^0 – напряжение решеточного и примесного трения; d – первичная плоскость скольжения; B – вектор Бюргерса; U1 – энергия активации; U2 – энергия активации сощепления дислокации.

Математическая модель деформационного и термического упрочнения сплавов со сверхструктурой $L1_2$ с учетом разрушения дальнего атомного порядка в случае работы сверхдислокационных источников [3] выглядит следующим образом (1):

$$\begin{gathered}
\frac{d\rho_{II}}{d\varepsilon} = C_1\frac{(\alpha_2 Gb)^2\rho}{\tau_{II}} + \frac{C_2 e^{\frac{-U_1}{kT}} + C_3 e^{\frac{-U_2}{kT}}}{GB\rho^{\frac{1}{2}}} - \frac{1}{\varepsilon}\min\left(r_a, [\theta\rho]^{-\frac{1}{2}}\right)\frac{a_1^3 D_0}{\chi kTb}\times \\
\times\left(\exp\left[\frac{-E_i}{kT}\right] * C_i + \exp\left[\frac{-E_v}{kT}\right] * C_v\right)\tau_{II}\rho^2\theta^2, \\
\frac{dC_{iII}}{d\varepsilon} = \frac{\iota}{\kappa(\zeta)}\rho_j\xi B\frac{\tau_{II}}{G} - \frac{1}{\varepsilon}\frac{a_1^3 D_0}{\chi kT}\exp\left[\frac{-E_i}{kT}\right]C_i\tau_{II}\rho\theta - \frac{1}{\varepsilon}\mu_r D_0\exp\left[\frac{-E_i}{kT}\right]C_iC_v, \\
\frac{dC_{vII}}{d\varepsilon} = \frac{\iota}{\kappa(\zeta)}\rho_j\xi B\frac{\tau_{II}}{G} - \frac{1}{\varepsilon}\frac{a_1^3 D_0}{\chi kT}\exp\left[\frac{-E_v}{kT}\right]C_v\tau_{II}\rho\theta - \frac{1}{\varepsilon}\mu_r D_0\exp\left[\frac{-E_i}{kT}\right]C_iC_v, \\
\frac{d\eta_*}{d\varepsilon} = -\eta_*\frac{1}{\varepsilon}\mu_r D_0\exp\left(\frac{-E_i}{kT}\right)C_iC_v,
\end{gathered} \tag{1}$$

$$\frac{d\eta_{II}}{d\varepsilon}=\frac{-\frac{1}{2\eta}\eta_*^2(1-k_0^2)\delta}{1-\eta_*^2(1-k_0^2)\delta\rho\frac{Gb^2}{2\pi\zeta_0\eta^4}}\left\{\frac{\iota}{d_0}\exp\left(\iota\frac{\varepsilon}{\omega}\right)+\frac{\delta'\iota}{2\Gamma b}\left[4b+\frac{Gb^2}{\pi\zeta_0\eta^2}\right]\rho^{\frac{1}{2}}\right.$$
$$\left.+\frac{1}{\varepsilon}\frac{a_1^3D_0\theta}{\chi kTb}\left(\exp\left[\frac{-E_i}{kT}\right]C_i+\exp\left[\frac{-E_v}{kT}\right]C_v\right)\tau_{II}\rho+\frac{Gb^2}{2\pi\zeta_0\eta^2}\frac{d\rho_{II}}{d\varepsilon}\right\},$$
$$\tau_{II}=\tau_f^0+\gamma_1\tau_0^{(1)}\exp\left[\frac{-U_1}{kT}\right]+\gamma_2\tau_0^{(2)}\exp\left[\frac{-U_2}{kT}\right]+\alpha_2Gb\rho^{1/2}$$

Математическая модель деформационного и термического упрочнения сплавов со сверхструктурой $L1_2$ с учетом разрушения дальнего атомного порядка в случае работы источников, испускающих одиночные дислокации [3] выглядит следующим образом (2):

$$\frac{d\rho_I}{d\varepsilon}=C_1\frac{(\alpha_1Gb)^2\rho}{\tau_I}-\frac{1}{\varepsilon}\min\left(r_a^*,[\theta\rho]^{-\frac{1}{2}}\right)\frac{a_1^3D_0}{\chi kTb}\times\left(\exp\left[\frac{-E_i}{kT}\right]C_i+\exp\left[\frac{-E_v}{kT}\right]C_v\right)\tau_I\rho^2\theta^2,$$
$$\frac{dC_{iI}}{d\varepsilon}=\frac{\iota}{\kappa(\zeta)}p\xi B\frac{\tau_I}{G}-\frac{1}{\varepsilon}\frac{a_1^3D_0}{\chi kT}\exp\left[\frac{-E_i}{kT}\right]C_i\tau_I\rho\theta-\frac{1}{\varepsilon}\mu_rD_0\exp\left[\frac{-E_i}{kT}\right]C_iC_v,$$
$$\frac{dC_{vI}}{d\varepsilon}=\frac{\iota}{\kappa(\zeta)}p_j\xi B\frac{\tau_I}{G}-\frac{1}{\varepsilon}\frac{a_1^3D_0}{\chi kT}\exp\left[\frac{-E_v}{kT}\right]C_v\tau_I\rho\theta-\frac{1}{\varepsilon}\mu_rD_0\exp\left[\frac{-E_i}{kT}\right]C_iC_v,\qquad(2)$$
$$\frac{d\eta_*}{d\varepsilon}=-\eta\frac{1}{\varepsilon}\mu_rD_0\exp\left(-\frac{E_i}{kT}\right)C_iC_v,$$
$$\frac{d\eta_I}{d\varepsilon}=-\frac{1}{2\eta}\eta_*^2(1-k_0^2)\delta\left\{\iota\frac{1}{d_0}\exp\left(\iota\frac{\varepsilon}{\omega}\right)+\frac{1}{\dot\varepsilon}\frac{a_1^3D_0\theta}{\chi kTb}\times\left(\exp\left[\frac{-E_i}{kT}\right]C_i+\exp\left[\frac{-E_v}{kT}\right]C_v\right)\tau_I\rho+\iota\frac{1}{b}\right\},$$
$$\tau_I=\tau_f^0+\frac{\zeta_0\eta^2}{b}+\alpha_1Gb\rho^{1/2}$$

Для определения степени жёсткости необходимо найти значение коэффициента жёсткости *S*. Для этого необходимо построить матрицу Якоби (*J*) и вычислить её собственные значения. Если собственные числа $\lambda_k, k=1,\dots,N$ матрицы *J* удовлетворяют следующим условиям:

– $Re(\lambda_i)<0, i=1,\dots,N$;
– число жесткости $S=\max_{1\le i\le N}\{|Re(\lambda_i)|\}/\min\limits_{1\le i\le N}\{|Re(\lambda_i)|\}$ велико.

Задача является жесткой, если коэффициент жесткости больше 10, но часто встречаются задачи с коэффициентом жесткости 10^6 и более [4].

Для исследования использован набор, соответствующий деформационному сплаву Ni_3Ge при комнатной температуре. Все необходимые расчеты были проведены в системе Mathcad.

Для заданного набора параметров найдены следующие собственные значения: λ_1 = -7.567×10^{16}, λ_2 = 0, λ_3 = -1.526×10^{17}, λ_4 = -1.528*10^{17}, λ_5 = -2.807×10^5 для математической модели (1) и λ_1 = 2.342×10^{-4}, λ_2 = 1.685×10^{13}, λ_3 = -1.684×10^{13}, λ_4 = -1.526×10^{17}, λ_5 = 0 для математической модели (2).

Если значения λ подставить в формулу

$$S = \max_{1 \le i \le N}\{|Re(\lambda_i)|\} / \min_{1 \le i \le N}\{|Re(\lambda_i)|\}, \qquad (3)$$

то получается, что число жёсткости $S = \infty$, т.к. минимальное значение λ в обоих частях модели равно нулю, из чего можно сделать вывод по классификации коэффициентов в таблице 1, что математическая модель – патологически жёсткая при любых параметрах [5].

Таблица 1

Классификация коэффициентов жесткости

Классификация	**Число жесткости**
Умеренно жесткая	$S = O(10)$
Средне жесткая	$S = O(10^2)$
Сильно жесткая	$O(10^2) \le S \le O(10^5)$
Экстремально жесткая	$O(10^6) \le S \le O(10^8)$
Патологически жесткая	$S \ge O(10^9)$

Таким образом, исследуемая математическая модель оказалась патологически жёсткой, то есть к её решению могут быть применены только специальные численные методы для решения жёстких систем ОДУ, например, метод Розенброка [6].

Литература

1. Хайрер Э., Ваннер Г. Решение обыкновенных дифференциальных уравнений. Жесткие и дифференциально-алгебраические задачи / пер. с англ. – М. : Мир, 1999. – 685 с.
2. Некрасова К.О., Самохина С.И. Исследование фазового пространства модели динамики призматического скольжения в ГЦК-металлах : сб. материалов. V-й международной молодежной научной конференции «Математическое и программное обеспечение информационных, технических и экономических систем», Томск, 2017.
3. Старенченко В.А., Соловьева Ю.В., Старенченко С.В., Ковалевская Т.А. Термическое и деформационное упрочнение монокристаллов сплавов со сверхструктурой L12. – Томск : Изд-во НТЛ, 2006. – 292 с.
4. Холл Дж., Уатт Дж. Современные численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений / пер. с англ. – М. : Мир. – 1979. – 312 с.
5. Холодов А.С., Лобанов А.И., Евдокимов А.В. Разностные схемы для решения жестких обыкновенных дифференциальных уравнений в пространстве неопределенных коэффициентов: методические указания к лабораторным работам по курсу: Нелинейные вычислительные процессы. – М. : МФТИ. – 2001. – 48 с.
6. Shampine L.F., Gear C.W. A User's View of Solving Stiff Ordinary Differential Equations // SIAM Review. – 1979. – Vol. 21, No 1. – P. 1–17.