

Комплекс программ для исследования дислокационной динамики кристаллографического скольжения в ГЦК-металлах

ПЕТЕЛИН АЛЕКСАНДР ЕВГЕНЬЕВИЧ

Томский государственный архитектурно-строительный университет (Томск), Россия

e-mail: aepetelin@gmail.com

КОЛУПАЕВА СВЕТЛАНА НИКОЛАЕВНА

Томский государственный архитектурно-строительный университет (Томск), Россия

e-mail: ksn58@yandex.ru

Аннотация

Кристаллографическое скольжение сопутствует большинству явлений, обеспечивающих макроскопическое формоизменение кристаллических тел, и, как правило, является доминирующим процессом пластичности кристаллов.

Для автоматизации исследования динамики кристаллографического скольжения в ГЦК-металлах создан комплекс программ Dislocation Dynamics of Crystallographic Slip (DDCS), в котором реализована математическая модель, позволяющая исследовать динамику формирования дислокационной петли и процессы формирования зоны кристаллографического сдвига в целом. Структура комплекса программ DDCS представляет собой совокупность динамически подключаемых программных модулей, которые подразделяются на функциональные модули, системные модули, модули доступа к базе данных и модули пользовательского интерфейса.

Интерфейс комплекса программ DDCS является интуитивно понятным, предназначенным для работы специалистов без знания программирования, информационных технологий, и специальной подготовки в области решения систем обыкновенных дифференциальных уравнений.

В составе комплекса программ DDCS реализована база данных для хранения характеристик исследуемых материалов по результатам независимых исследований (в настоящее время алюминий, медь, свинец и никель) и результатов вычислительных экспериментов. Поддерживается сохранение пользовательских настроек комплекса программ, импорт и экспорт результатов. В вычислительном модуле комплекса программ DDCS реализованы метод Гира и метод Розенброка, позволяющие решать системы обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ), в том числе жесткие системы ОДУ.

Реализована возможность графического представления результатов вычислительного эксперимента и анимация при исследовании формоизменения дислокационной петли в процессе движения. На графике любая из характеристик может быть отображена на одной из двух осей, а сам график может быть подвергнут масштабированию.

В текущей версии комплекса программ DDCS возможно проведение расчетов масштабных, временных и энергетических характеристик зоны кристаллографического сдвига в алюминии, меди, свинце и никеле с выбором значений параметров из встроенной базы данных.