

# Применение метода Нелдера — Мида для оптимизации выбора констант модели Лихачёва — Волкова\*

*А. М. Иванов, Ф. С. Беляев, А. Е. Волков, С. П. Беляев, Н. Н. Реснина*

Санкт-Петербургский государственный университет,  
Российская Федерация, 199034, Санкт-Петербург, Университетская наб., 7–9

**Для цитирования:** *Иванов А. М., Беляев Ф. С., Волков А. Е., Беляев С. П., Реснина Н. Н.* Применение метода Нелдера — Мида для оптимизации выбора констант модели Лихачёва — Волкова // Вестник Санкт-Петербургского университета. Математика. Механика. Астрономия. 2022. Т. 9 (67). Вып. 4. С. 693–704. <https://doi.org/10.21638/spbu01.2022.411>

Предложен новый метод подбора констант модифицированной микроструктурной модели Лихачёва — Волкова, предназначенной для описания изменения обратимой деформации в процессе изотермического мартенситного превращения в сплаве  $Ti_{49}Ni_{51}$ . С помощью решения оптимизационной задачи методом Нелдера — Мида были найдены значения параметров модели, обеспечивающие наилучшее приближение экспериментальных данных. Подобранный набор констант позволил качественно и количественно описать изменение деформации в процессах охлаждения и нагревания модельного образца, а также в процессе изотермической выдержки под постоянной нагрузкой. Предложенный способ подбора констант позволяет провести наименьшее количество численных экспериментов, не требуя выполнения дополнительных реальных экспериментов.

*Ключевые слова:* сплавы с памятью формы, мартенситные превращения, изотермическое мартенситное превращение, микроструктурная модель, метод Нелдера — Мида.

**1. Введение.** Сплавы с памятью формы нашли широкое применение в медицине, в космонавтике и в различных отраслях промышленности благодаря своим уникальным свойствам — восстановлению большой неупругой деформации [1–3]. Такое поведение связано с термоупругими мартенситными превращениями, которые долгое время считали атермическими. Однако в последние годы было показано, что некоторые сплавы на основе никелида титана могут испытывать мартенситные превращения в изотермических условиях [4–11]. Установлено, что изотермическое превращение сопровождается изменением обратимой деформации при выдержке под нагрузкой [10–11], что может быть использовано для различных устройств, работающих в узком рабочем интервале температур.

Существует большое количество моделей, описывающих изменение деформации при атермических мартенситных переходах в сплавах на основе Ti-Ni [12–14]. Вместе с тем изменение деформации при изотермической выдержке под постоянным напряжением описывали только в моделях А. А. Мовчана [15] и структурно-аналитической теории Лихачёва — Волкова [16–18]. В работах А. А. Мовчана [15] для теоретического описания реономных свойств сплава  $Ti_{50}Ni_{50}$  и изменения изотермиче-

---

\*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 18-19-00226-П).

© Санкт-Петербургский государственный университет, 2022

ской деформации под постоянной нагрузкой была предложена феноменологическая модель, основанная на предположении о наличии классов предельно медленных и предельно быстрых процессов. Во время выдержки происходит переход из промежуточного состояния в состояние, соответствующее предельно медленному процессу. Однако в данной модели не уделяется внимание природе реономного поведения сплава, а также реономные свойства не связаны с изотермическими мартенситными превращениями.

Второй подход является модификацией структурно-аналитической модели Лихачёва — Волкова [16–18], с помощью которой был проведен расчет изменения деформации при изотермической выдержке сплава  $Ti_{40.7}Hf_{9.5}Ni_{44.8}Cu_5$  под нагрузкой [18]. Для учета реализации изотермического мартенситного превращения в модели было предусмотрено изменение плотности ориентированных дефектов со временем согласно кинетике термоактивируемых процессов. Данная модель позволила качественно описать экспериментальные результаты, однако количественное соответствие удалось получить не для всех термомеханических режимов изотермической выдержки.

Успех теоретического описания экспериментальных данных зависит от метода подбора констант, используемых в модели. Для структурно-аналитической модели существует определенный алгоритм подбора оптимального набора констант [19]. Однако данный алгоритм требует дополнительных экспериментов, по которым будет проводиться подбор параметров. Более того, для подбора констант модели необходимо провести большое количество расчетов и численных экспериментов, что занимает много времени. Все это затрудняет применение предлагаемого алгоритма при расчетах свойств материалов с памятью формы.

Поиск оптимального набора констант модели можно свести к решению оптимизационной задачи приближения теоретических данных к экспериментальным. Если рассматривать набор констант как переменные, а разницу теоретических и экспериментальных данных как некую неотрицательную числовую функцию, которая возвращает нулевое значение при их равенстве, то задача поиска констант сводится к минимизации этой функции. Существует большое количество методов решения поставленной задачи. Однако функция в оптимизационной задаче задается неаналитической и неявной, поскольку требуется провести численный расчет. Поэтому необходимо использовать методы оптимизации, не требующие вычисления градиента функции или задания градиента явной функцией. Такими методами могут быть выбраны метод Нелдера — Мида [20] и генетический алгоритм [21]. Однако использование генетического алгоритма нецелесообразно из-за большого числа пересчета значений функций, что увеличивает время подбора констант. Таким образом, целью данной работы стало исследование возможностей метода Нелдера — Мида для подбора параметров структурно-аналитической модели Лихачёва — Волкова и описания изменения деформации в процессе изотермического мартенситного превращения. Объектом исследования был выбран закаленный сплав  $Ti_{49}Ni_{51}$ , в котором ранее было экспериментально изучено изменение изотермической деформации в процессе выдержки после охлаждения под постоянной нагрузкой [11].

**2. Модель.** В структурно-аналитической модели Лихачёва — Волкова [16–18] рассматриваются три структурных уровня: совокупность зерен, отдельное зерно, отдельная фаза в зерне (аустенитная фаза или один из вариантов мартенсита). Деформация представительного объема рассматриваемого уровня рассчитывается как

усреднение деформаций, полученных на предыдущем структурном уровне. То есть макроскопическая деформация всего материала равна усреднению деформации по зернам, а деформация зерна — усреднению деформации по аустенитной фазе и вариантам мартенсита. Деформация зерна выражается в виде суммы упругой, температурной, фазовой и микропластической деформации:

$$\varepsilon^{gr} = \varepsilon^{gr e} + \varepsilon^{gr T} + \varepsilon^{gr Ph} + \varepsilon^{gr mp}, \quad (1)$$

где каждое слагаемое рассматривается как среднее значение по объемам, занятым вариантами мартенсита и аустенитом. Упругая и термическая деформации определяются по закону Дюгамеля — Неймана. Фазовая и микропластическая деформации вычисляются по формулам:

$$\varepsilon^{ph} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \Phi_n D^{(n)}, \quad (2)$$

где  $N$  — количество вариантов мартенсита;  $\Phi_n$  и  $D^{(n)}$  — объемная доля и тензор бейновской деформации (относительно аустенита)  $n$ -го варианта мартенсита:

$$\varepsilon^{mp} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N k \varepsilon_n^{mp} dev D^{(n)}, \quad (3)$$

где  $\varepsilon_n^{mp}$  — мера микропластической деформации  $n$ -го варианта мартенсита;  $k$  — масштабирующий коэффициент.

В процессе роста мартенситных пластин, в связи с несовместностью деформаций  $n$ -го варианта мартенсита и окружающей матрицы аустенита, в материале могут возникнуть ориентированные и рассеянные деформационные дефекты. Ориентированные дефекты создают поля дальнедействующих ориентированных напряжений, порождая кинематическое (трансляционное) упрочнение, а рассеянные дефекты приводят к изотропному упрочнению материала. Примерами ориентированных дефектов являются скопления дислокационных петель в зонах сдвига, а рассеянных дефектов — перегибы на дислокациях и неспособные к движению малые петли дислокаций. Для количественного описания дефектов введены плотности ориентированных и рассеянных дефектов  $b_n$  и  $f_n$  соответственно, которые меняются вследствие развития микропластической деформации при росте  $n$ -го варианта мартенсита. В работе [18], посвященной расчету деформации, вызванной изотермическим мартенситным переходом, использовали следующие эволюционные зависимости:

$$\begin{cases} \dot{b}_n = k_b \dot{\varepsilon}_n^{mp} - k_b \frac{1}{\beta^*} |b_n| \dot{\varepsilon}_n^{mp} H(b_n \dot{\varepsilon}_n^{mp}), \\ \dot{f}_n = |\dot{\varepsilon}_n^{mp}|, \end{cases} \quad (4)$$

где  $k_b$  — коэффициент связи микропластической деформации и ориентированных дефектов;  $\beta^*$  — максимальная плотность ориентированных дефектов;  $H$  — функция Хэвисайда.

Первые слагаемые для выражений скорости изменения плотности ориентированных и рассеянных дефектов ( $\dot{b}_n$  и  $\dot{f}_n$ ) определяют их изменение вследствие микропластической деформации. Второе слагаемое в выражении для  $\dot{b}_n$  описывает изменение плотности дефектов за счет их выхода на поверхность тела со скоростью, пропорциональной их плотности и скорости деформации.

Условие прямого и обратного мартенситных превращений записывается в виде

$$F_n = \pm F^{fr}, \quad (5)$$

где  $F_n$  — термодинамическая сила, вызывающая рост  $n$ -го варианта мартенсита;  $F^{fr}$  — обобщенная термодинамическая сила, препятствующая росту мартенситной фазы. Знак «+» соответствует прямому превращению, а знак «-» — обратному превращению. Эти силы рассчитывались по следующим формулам:

$$F_n = \frac{q_0}{T_0}(T - T_0) + \sigma_{ij} D_{ij}^{(n)} - \mu \sum_{m=1}^N A_{mn}(\Phi_m - b_m), \mu = \frac{q_0(M_H - M_K)}{T_0(1 - 2\alpha)}, \quad (6)$$

$$F^{fr} = \pm q_0 \frac{M_K - T_0}{T_0}, T_0 = \frac{M_H + A_K}{2}, \quad (7)$$

где  $q_0$  — скрытая теплота превращения;  $T$  — температура;  $\sigma_{ij}$  — тензор напряжений;  $\alpha$  — материальная постоянная, отвечающая за силу взаимодействия вариантов мартенсита;  $M_H, M_K$  — температура начала и окончания прямого перехода;  $A_H, A_K$  — температура начала и окончания обратного перехода;  $T_0$  — температура термодинамического равновесия.

В выражении (6) последнее слагаемое определяет обобщенную термодинамическую силу

$$F_n^p = \mu \sum_{m=1}^N A_{mn}(\Phi_m - b_m). \quad (8)$$

Из (8) видно, что сила  $F_n^p$  определяется количеством мартенсита и ориентированными деформационными дефектами  $b_n$ . Эта сила является причиной микропластического течения, которое, согласно принятой в данной модели гипотезе, происходит тогда и только тогда, когда выполняется условие:

$$|F_n^p| = F_n^y. \quad (9)$$

Величина  $F_n^y$  связана с рассеянными дефектами соотношением

$$F_n^y = a_y f_n, \quad (10)$$

где  $a_y$  — материальная постоянная. Рост силы  $F_n^y$  в процессе микропластического течения описывает изотропное упрочнение.

Скорость изменения меры микропластической деформации задана следующей формулой:

$$\dot{\epsilon}_n^{mp} = r_{mp}(T) \left( \frac{|F_n^p| - F_n^y}{\mu} \right)^m \text{sign}(F_n^p) H(|F_n^p| - F_n^y), \quad (11)$$

где  $r_{mp}(T) = r_{mp0} e^{\frac{U_{mp}}{RT}}$ ,

$U_{mp}$  — энергия активации термоактивируемого процесса;  $R$  — универсальная газовая постоянная;  $r_{mp0}$  — предэкспоненциальный множитель;  $m$  — константа материала.

Если в процессе прямого перехода (т. е. при выполнении условия (5)) имеет место микропластическое течение (выполнено условие (9)), то при выдержке во времени, согласно формуле (11), будет происходить микропластическая деформация,

скорость изменения которой пропорциональна аррениусовскому множителю, определяющему термоактивируемый процесс. Тогда в соответствии с (4) будет возрастать плотность дефектов  $b_n$ , а следовательно, ввиду выполнения условия превращения (5), будет происходить рост величины  $\Phi_n$  (6), т. е. в процессе изотермической выдержки возможно изменение фазового состояния материала и фазовой деформации.

**3. Подбор параметров.** Для описания экспериментальных результатов с помощью структурно-аналитической модели необходимо провести подбор констант, которые представлены в табл. 1. Значения констант, приведенные в табл. 1, в работе [18] были использованы для расчета изменения обратимой деформации в процессе изотермической выдержки сплава  $\text{Ti}_{40.7}\text{Hf}_{9.5}\text{Ni}_{44.8}\text{Cu}_5$ .

Таблица 1. Материальные константы микроструктурной модели для сплава  $\text{Ti}_{40.7}\text{Hf}_{9.5}\text{Ni}_{44.8}\text{Cu}_5$

| Параметр  | Описание   | Значение (для $\text{Ti-Hf-Ni-Cu}$ [15]) |
|-----------|--|--|
| $M_K$     | Характеристические температуры мартенситных превращений  | 279 К                                    |
| $M_H$     |  | 284 К                                    |
| $A_H$     |  | 302 К                                    |
| $A_K$     |  | 307 К                                    |
| $q_0$     | Скрытая теплота превращения  | -150 МДж/м <sup>3</sup>                  |
| $\alpha$  | Коэффициент согласованности мартенситных вариантов   | 0.4                                      |
| $r_{mp0}$ | Множитель в уравнении (9)  | 5000 с <sup>-1</sup>                     |
| $U_{mp}$  | Энергия активации аррениусовской зависимости в уравнении для приращения микропластической деформации (9) | 42 кДж/моль                              |
| $m$       | Показатель степени в формуле (9)   | 3  |
| $a_y$     | Коэффициент изотропного упрочнения   | 10 <sup>5</sup> Па                       |
| $\beta^*$ | Максимальное количество ориентированных дефектов   | 5.5                                      |
| $k_b$     | Коэффициент связи микропластической деформации и ориентированных дефектов                                | 70                                       |

В настоящей работе подбор значений этих констант для исследуемого сплава  $\text{Ti}_{49}\text{Ni}_{51}$  выполнен на основе метода решения задачи минимизации целевой функции *fitness*, которая количественно описывает разницу между экспериментальными и расчетными данными. Для этого проводили моделирование реального эксперимента и по полученным теоретическим и экспериментальным данным определяли характеристические величины  $\chi_i^{\text{теор}}$  и  $\chi_i^{\text{эксп}}$ . Далее определяли целевую функцию *fitness* как взвешенную сумму квадратов разности этих величин:

$$fitness(\text{параметры}) = \sum_{i=1}^N w_i (\chi_i^{\text{теор}} - \chi_i^{\text{эксп}})^2, \quad (12)$$

где  $w_i$  — весовые коэффициенты;  $\chi_i^{\text{теор}}$ ,  $\chi_i^{\text{эксп}}$  — характеристические параметры, определенные из теоретических и экспериментальных данных (например, температура превращений, величина эффекта памяти формы и т. п.). Чем ближе значение целевой функции к нулю, тем ближе по значению расчетные характеристические величины к экспериментальным. Весовые коэффициенты  $w_i$  выбирали так, чтобы слагаемые в выражении целевой функции (12) были одного порядка.

Подбор параметров проводили в два этапа. На первом этапе были проведены эксперименты и расчеты деформации при охлаждении и нагревании материала че-

рез температурные интервалы мартенситных превращений под напряжениями 50, 200 и 300 МПа. В качестве характеристических параметров  $\chi_i^{\text{теор}}$ ,  $\chi_i^{\text{эксп}}$  выбрали температуры  $M_K^\sigma$ ,  $M_H^\sigma$ ,  $A_H^\sigma$ ,  $A_K^\sigma$  — начала и окончания прямого и обратного превращений при действии постоянного напряжения  $\sigma$ , а также величину деформации, накопленной образцом в процессе прямого превращения. В результате получали начальные приближения констант материала, перечисленных в табл. 1. На втором этапе проводили дальнейший подбор этих констант на основании реальных и численных экспериментов для следующего режима термомеханического нагружения: охлаждение под постоянным напряжением  $\sigma$  до температуры выдержки  $T^*$ , выдержка в течение 60 мин и последующий нагрев. Величины, которые были выбраны в качестве характеристических параметров  $\chi_i$ :  $\dot{\epsilon}$  — скорость изменения деформации в начальный момент выдержки;  $\epsilon_{\text{изо}}^{60}$  — прирост изотермической деформации за 60 мин выдержки;  $M_H^\sigma$  — температура.

Таблица 2. Значения подобранных констант модели\*

| Параметр  | Значение                         |
|-----------|----------------------------------|
| $M_K$     | 209 К*                           |
| $M_H$     | 228 К*                           |
| $A_H$     | 245 К*                           |
| $A_K$     | 262 К*                           |
| $q_0$     | -65 МДж/м <sup>3</sup> *         |
| $\alpha$  | 0                                |
| $r_{mp0}$ | $1.34 \cdot 10^4 \text{ с}^{-1}$ |
| $U_{mp}$  | 56 кДж/моль                      |
| $m$       | 2.7                              |
| $a_y$     | $1.27 \cdot 10^5 \text{ Па}$     |
| $\beta^*$ | 7.2                              |
| $k_b$     | 96                               |

\* Значения близки к экспериментальным данным.

Поставленную оптимизационную задачу решали с помощью метода Нелдера — Мида, который заключается в следующем. Направленно или случайным образом создается множество из  $M + 1$  наборов значений параметров (в данной работе  $M = 12$  — число параметров в наборе). Такое множество называется симплексом. По каждому набору параметров из симплекса вычисляется целевая функция, после чего выбирается набор с наибольшим значением этой функции. Такой набор будем называть «плохим». Путем специальных операций растяжения, сжатия, расширения и сокращения [20] «плохой» набор заменяется на более хороший — значение целевой функции которого меньше, чем у «плохого». Затем снова из обновленного симплекса выбирается новый «плохой» набор и операции повторяются. Данные итерации продолжаются до тех пор, пока определенный специальным методом «размер» симплекса не станет меньше заданного значения или когда значение целевой функции от наилучшего набора параметров не будет меньше заранее определенной величины (погрешности). Таким образом, в момент инициализации начального симплекса необходимо провести  $M + 1$  расчетов, а также в процессе каждой итерации — от 1 до 3 расчетов. Сходимость решения методом Нелдера — Мида достигается быстрее, чем методом генетического алгоритма, — что и определило выбор данного алгоритма. Более того, подбор констант методом Нелдера — Мида производится, по нашим

оценкам, почти в 40 раз быстрее, чем подбор констант согласно алгоритму, описанному в работе [19].

В качестве начального симплекса для первого этапа были выбраны наборы значений констант, близкие к значениям, которые были использованы для описания изменения изотермической деформации сплава на основе Ti-Hf-Ni-Cu [18] (см. табл. 1). Полученный на первом этапе оптимальный набор параметров использовали в качестве начального симплекса для второго этапа, что существенно ускорило сходимость решения. Результаты подбора параметров модели представлены в табл. 2.

**4. Результаты моделирования.** С использованием набора констант (табл. 2), определенных по алгоритму, описанному выше, был проведен расчет изменения деформации при охлаждении и нагревании под постоянным напряжением и при изотермической выдержке под различными напряжениями. На рис. 1 представлены зависимости деформации от температуры, полученные в реальных и численных экспериментах при охлаждении и нагревании образца под постоянными напряжениями 50, 200 и 300 МПа. Сплошными кривыми представлены экспериментальные данные, пунктирными — расчетные. Полученные теоретические зависимости деформации от температуры хорошо аппроксимируют экспериментальные данные на этапе охлаждения. В данной работе коэффициент масштаба микропластической деформации  $k_b$  в выражении (4) принят равным нулю, т. е. не учитывается вклад микропластической деформации на макроуровне (это будет учтено в следующих работах). Поэтому расчетные кривые  $\varepsilon(T)$  являются замкнутыми, тогда как при рассматриваемых напряжениях в эксперименте наблюдается недовозврат деформации после нагревания.

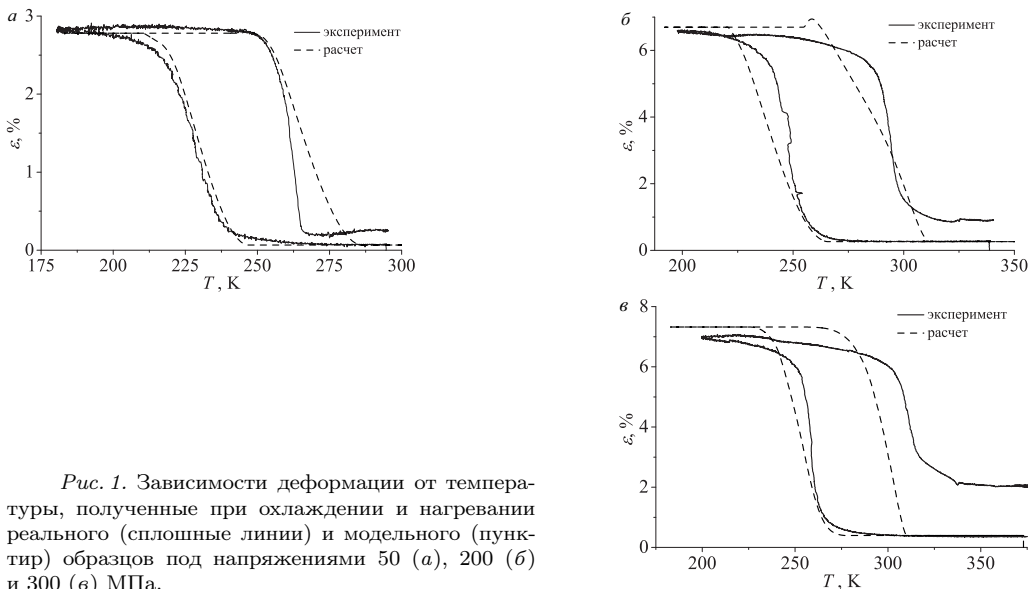


Рис. 1. Зависимости деформации от температуры, полученные при охлаждении и нагревании реального (сплошные линии) и модельного (пунктир) образцов под напряжениями 50 (а), 200 (б) и 300 (в) МПа.

На рис. 2 представлены кривые изменения деформации со временем в процессе изотермической выдержки, полученные в экспериментах «нагрузка — охлаждение — выдержка — нагрев», при которых действовало напряжение 50, 200 и 300 МПа. Сплошными кривыми представлены экспериментальные зависимости, пунктирны-

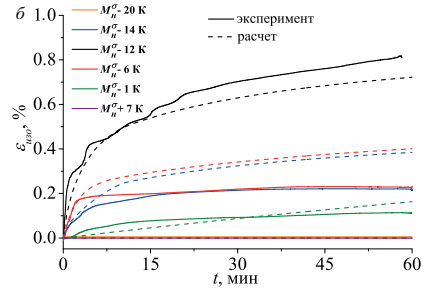
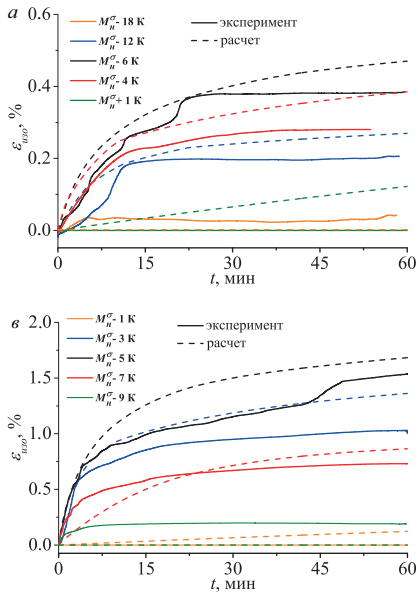


Рис. 2. Изменение изотермической деформации в процессе выдержки реального (сплошные линии) и модельного (пунктирные линии) образца под напряжением 50 (а), 200 (б) и 300 (в) МПа в течение 60 мин. Разными цветами показаны зависимости для разных температур выдержки относительно  $M_n^\sigma$ . Кривые, соответствующие одинаковым температурам выдержки, покрашены в один цвет.

ми — теоретические. Кривые одинакового цвета соответствуют одинаковой температуре выдержки относительно  $M_n^\sigma$ . Поскольку температура начала прямого перехода  $M_n^\sigma$  тоже подвергается приближению, то с точностью до 1 град. теоретические и экспериментальные величины  $M_n^\sigma$  совпадают. Сравнение расчетных и экспериментальных данных показывает, что модель хорошо описывает процесс прироста изотермической деформации. Как и в реальных экспериментах, расчетная деформация в первые минуты растет быстро и со временем скорость роста деформации уменьшается. Однако во всех расчетах деформация непрерывно растет за 60 мин выдержки и не выходит на плато. В реальных же экспериментах изотермическая деформация в большинстве исследованных случаев достигает насыщения за 60 мин. В данной работе целевая функция была выбрана таким образом, чтобы она приближала значения скорости изменения деформации  $\dot{\epsilon}$  в начальный момент выдержки и прирост деформации за 60 мин выдержки ( $\epsilon_{\text{изо}}^{60}$ ). Точное приближение одного из этих параметров могло привести к некоторой погрешности приближения второго. В целом модель позволяет получить хорошее качественное приближение зависимостей изменения деформации со временем в процессе изотермической выдержки под нагрузкой.

Зависимости изменения деформации за 60 мин выдержки ( $\epsilon_{\text{изо}}^{60}$ ) от разности  $\Delta T$  температуры выдержки  $T^*$  и температуры начала прямого перехода  $M_n^\sigma$  ( $\Delta T = T^* - M_n^\sigma$ ), полученные в реальных (квадраты) и в расчетных (окружности) экспериментах, представлены на рис. 3. Видно, что расчетные точки хорошо соответствуют экспериментальным. Более того, температурные интервалы, в которых наблюдается изотермическая деформация, в реальном и модельном образцах совпадают, что не было достигнуто в работе [18].

Таким образом, подбор констант с помощью оптимизации целевой функции методом Нелдера — Мида является удобным способом выбора параметров модели Лихачёва — Волкова. Удобство данного метода заключается в том, что не нужно проводить дополнительные эксперименты для определения констант. Преимуществом



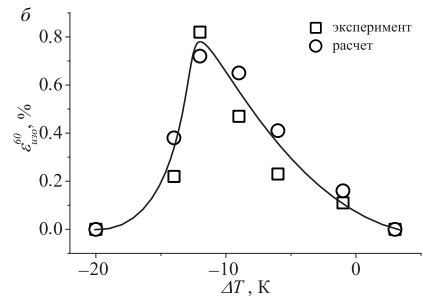
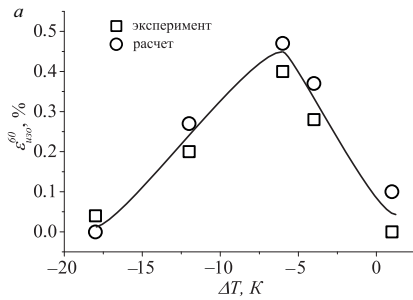
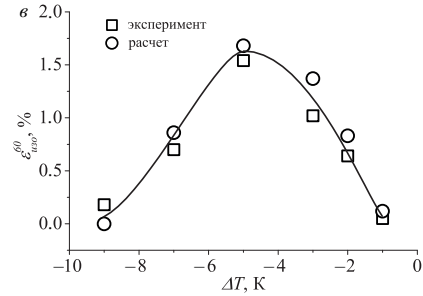


Рис. 3. Зависимости изотермически накопленной деформации за 60 мин выдержки реального (квадраты) и модельного (окружности) образцов от разности температуры выдержки и температуры начала прямого мартенситного превращения под напряжением 50 (а), 200 (б) и 300 (в) МПа.



метода является наименьшее количество численных экспериментов. Показано, что подобранный набор констант модели Лихачёва — Волкова позволяет получить хорошее количественное и качественное описание изменения изотермической деформации при выдержке сплава  $\text{Ti}_{49}\text{Ni}_{51}$  под различными нагрузками.

**5. Заключение.** В результате проделанной работы можно сделать следующие выводы.

1. Разработан способ подбора параметров структурно-аналитической модели Лихачёва — Волкова с помощью решения оптимизационной задачи методом Нелдера — Мида, который позволяет провести наименьшее количество численных экспериментов, не требуя выполнения дополнительных реальных экспериментов.

2. Константы, подобранные по предложенному алгоритму, позволили описать изменение обратимой деформации в процессе изотермической выдержки закаленного сплава  $\text{Ti}_{49}\text{Ni}_{51}$ , используя структурно-аналитическую модель Лихачёва — Волкова.

## Литература

1. Mohd Jani J., Leary M., Subic A., Gibson M. A. A review of shape memory alloy research, applications and opportunities. *Mater. Des.* **56**, 1078–1113 (2014). <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2013.11.084>
2. Razov A., Cherniavsky A. Application of SMAs in modern spacecraft and devices. *Journal of Physics IV France* **112**, 1173–1176 (2003). <https://doi.org/10.1051/jp4:20031091>
3. Otsuka K., Ren X. Physical metallurgy of Ti-Ni-based shape memory alloys. *Progress in Materials Science* **50**, 511–678 (2005). <https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2004.10.001>
4. Kustov S., Salas D., Cesari E., Santamarta R., Van Humbeeck J. Isothermal and athermal martensitic transformations in Ni-Ti shape memory alloys. *Acta Materialia* **60**, 2578–2592 (2012). <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2012.01.025>
5. Fukuda T., Yoshida S., Kakeshita T. Isothermal nature of the B2-B19' martensitic transformation in a Ti-51.2Ni (at. %) alloy. *Scripta Materialia* **68**, 984–987 (2013). <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2013.02.057>

6. Ji Y., Wang D., Ding X., Otsuka K., Ren X. Origin of an Isothermal R-Martensite Formation in Ni-rich Ti-Ni Solid Solution: Crystallization of Strain Glass. *Physical Review Letters* **114**, 055701 (2015). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.114.055701>
7. Resnina N., Belyaev S., Demidova E., Ivanov A., Andreev V. Kinetics of isothermal B2→B19' martensitic transformation in Ti<sub>49</sub>Ni<sub>51</sub> shape memory alloy. *Materials Letters* **228**, 348–350 (2018). <https://doi.org/10.1016/j.matlet.2018.06.055>
8. Resnina N., Belyaev S., Shelyakov A. Isothermal B2→B19' martensitic transformation in Ti<sub>40.7</sub>Hf<sub>9.5</sub>Ni<sub>44.8</sub>Cu<sub>5</sub> shape memory alloy. *Scripta Materialia* **112**, 106–108 (2016). <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2015.09.024>
9. Demidova E., Belyaev S., Resnina N., Shelyakov A. Influence of the holding temperature on the kinetics of the isothermal B2→B19' transformation in TiNi-based shape memory alloy. *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry* **139**, 2965–2970 (2020). <https://doi.org/10.1016/10.1007/s10973-019-08717-4>
10. Demidova E., Belyaev S., Resnina N., Shelyakov A. Strain variation during the isothermal martensitic transformation in Ti<sub>40.7</sub>Hf<sub>9.5</sub>Ni<sub>44.8</sub>Cu<sub>5</sub> alloy. *Materials Letters* **254**, 266–268 (2019). <https://doi.org/10.1016/j.matlet.2019.07.077>
11. Ivanov A., Belyaev S., Resnina N., Andreev V. Strain variation during the isothermal martensitic transformation in the Ni<sub>51</sub>Ti<sub>49</sub> shape memory alloy. *Sensors and Actuators A* **297**, 111543 (2019). <https://doi.org/10.1016/j.sna.2019.111543>
12. Tanaka K., Nagaki S. A. Thermomechanical description of materials with internal variables in the process of phase transitions *Ingenieur-Archiv* **51**, 287–299 (1982). [https://doi.org/10.1016/0029-5493\(83\)90054-7](https://doi.org/10.1016/0029-5493(83)90054-7)
13. Lagoudas D. C., Bo Z., Qidwai M. A. A unified thermodynamic constitutive model for SMA and finite element analysis of active metal matrix composites. *Mech. Composite Material Structure* **3** (2), 153–179 (1996). <https://doi.org/10.1080/10759419608945861>
14. Patoor E., Eberhardt A., Berveiller M. Micromechanical Modelling of Superelasticity in Shape Memory Alloys. *Journal de Physique IV France* **6**, 277–292 (1996). <https://doi.org/10.1051/jp4:1996127>
15. Movchan A. A., Klimov K. Yu. Simulation of rheonomic properties of shape memory alloys. *Composites: Mechanics, Computations, Applications* **2** (3), 171–185 (2011). <https://doi.org/10.1615/CompMechComputApplIntJ.v2.i3.10>
16. Volkov A. E., Belyaev F. S., Evard M. E., Volkova N. A. Model of the evolution of deformation defects and irreversible strain at thermal cycling of stressed TiNi alloy specimen. *MATEC Web of Conferences* **33**, 1–5 (2015). <https://doi.org/10.1051/mateconf/20153303013>
17. Beliaev F. S., Evard M. E., Ostropiko E. S., Razov A. I., Volkov A. E. Aging effect on the One-way and Two-way Shape Memory in TiNi Based Alloys. *Shape Memory Superelasticity* **5**, 218–229 (2019). <https://doi.org/10.1007/s40830-019-00226-5>
18. Demidova E. S., Belyaev F. S., Belyaev S. P., Resnina N. N., Volkov A. E. Simulation of isothermal reversible strain in the Ti<sub>40.7</sub>Hf<sub>9.5</sub>Ni<sub>44.8</sub>Cu<sub>5</sub> alloy using a microstructural model. *Letters on Materials* **11** (3), 327–331 (2021). <https://doi.org/10.22226/2410-3535-2021-3-327-331>
19. Беляев Ф. С. *Микроструктурная модель необратимой деформации и дефектов в сплавах с памятью формы*: автореф. ... дис. канд. физ.-мат. наук, Санкт-Петербург (2016)
20. Nelder J. A., Mead R. A simplex method for function minimization. *The Computer Journal* **7**, 308–313 (1965). <https://doi.org/10.1093/comjnl/7.4.308>
21. Chambers L. D. *The practical handbook of genetic algorithms: applications*. Boca Raton, Chapman and Hall/CRC (2001)

Статья поступила в редакцию 5 января 2022 г.;  
доработана 1 апреля 2022 г.;  
рекомендована к печати 9 июня 2022 г.

#### Контактная информация:

Иванов Алексей Максимович — аспирант; ileavenovasky@gmail.com  
 Беляев Федор Степанович — канд. физ.-мат. наук, доц.; belyaev-fs@mail.ru  
 Волков Александр Евгеньевич — д-р физ.-мат. наук, проф.; volkov@math.spbu.ru  
 Беляев Сергей Павлович — д-р физ.-мат. наук, вед. науч. сотр.; s.belyaev@spbu.ru  
 Реснина Наталья Николаевна — д-р физ.-мат. наук, проф.; n.resnina@spbu.ru

# Application of the Nelder — Mead method to optimize the selecting of the Likhachev — Volkov model constants\*

A. M. Ivanov, F. S. Belyaev, A. E. Volkov, S. P. Belyaev, N. N. Resnina

St Petersburg State University, 7–9, Universitetskaya nab., St Petersburg, 199034, Russian Federation

**For citation:** Ivanov A. M., Belyaev F. S., Volkov A. E., Belyaev S. P., Resnina N. N. Application of the Nelder — Mead method to optimize the selecting of the Likhachev — Volkov model constants. *Vestnik of Saint Petersburg University. Mathematics. Mechanics. Astronomy*, 2022, vol. 9 (67), issue 4, pp. 693–704. <https://doi.org/10.21638/spbu01.2022.411> (In Russian)

A new method was proposed for selecting constants of the modified Likhachev — Volkov microstructural model to describe the reversible strain variation during isothermal martensitic transformation in  $Ti_{49}Ni_{51}$  alloy. The experimental data were approximated by solving the optimization problem using the Nelder — Mead method. A set of model parameters was found that provided the best approximation. Using the selected constants set, model qualitatively and quantitatively describe the strain variation during cooling and heating of the model sample, as well as during isothermal holding under constant stress. The proposed method of selecting constants allowed performing the smallest number of numerical experiments without requiring additional real experiments.

*Keywords:* shape memory alloys, martensitic transformation, isothermal martensitic transformation, microstructural model, Nelder — Mead method.

## References

1. Mohd Jani J., Leary M., Subic A., Gibson M. A. A review of shape memory alloy research, applications and opportunities. *Mater. Des.* **56**, 1078–1113 (2014). <https://doi.org/10.1016/j.matdes.2013.11.084>
2. Razov A., Cherniavsky A. Application of SMAs in modern spacecraft and devices. *Journal of Physics IV France* **112**, 1173–1176 (2003). <https://doi.org/10.1051/jp4:20031091>
3. Otsuka K., Ren X. Physical metallurgy of Ti-Ni-based shape memory alloys. *Progress in Materials Science* **50**, 511–678 (2005). <https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2004.10.001>
4. Kustov S., Salas D., Cesari E., Santamarta R., Van Humbeeck J. Isothermal and athermal martensitic transformations in Ni-Ti shape memory alloys. *Acta Materialia* **60**, 2578–2592 (2012). <https://doi.org/10.1016/j.actamat.2012.01.025>
5. Fukuda T., Yoshida S., Kakeshita T. Isothermal nature of the B2-B19' martensitic transformation in a Ti-51.2Ni (at. %) alloy. *Scripta Materialia* **68**, 984–987 (2013). <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2013.02.057>
6. Ji Y., Wang D., Ding X., Otsuka K., Ren X. Origin of an Isothermal R-Martensite Formation in Ni-rich Ti-Ni Solid Solution: Crystallization of Strain Glass. *Physical Review Letters* **114**, 055701 (2015). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.114.055701>
7. Resnina N., Belyaev S., Demidova E., Ivanov A., Andreev V. Kinetics of isothermal B2→B19' martensitic transformation in  $Ti_{49}Ni_{51}$  shape memory alloy. *Materials Letters* **228**, 348–350 (2018). <https://doi.org/10.1016/j.matlet.2018.06.055>
8. Resnina N., Belyaev S., Shelyakov A. Isothermal B2→B19' martensitic transformation in  $Ti_{40.7}Hf_{9.5}Ni_{44.8}Cu_5$  shape memory alloy. *Scripta Materialia* **112**, 106–108 (2016). <https://doi.org/10.1016/j.scriptamat.2015.09.024>
9. Demidova E., Belyaev S., Resnina N., Shelyakov A. Influence of the holding temperature on the kinetics of the isothermal B2→B19' transformation in TiNi-based shape memory alloy. *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry* **139**, 2965–2970 (2020). <https://doi.org/10.1016/10.1007/s10973-019-08717-4>
10. Demidova E., Belyaev S., Resnina N., Shelyakov A. Strain variation during the isothermal martensitic transformation in  $Ti_{40.7}Hf_{9.5}Ni_{44.8}Cu_5$  alloy. *Materials Letters* **254**, 266–268 (2019). <https://doi.org/10.1016/j.matlet.2019.07.077>
11. Ivanov A., Belyaev S., Resnina N., Andreev V. Strain variation during the isothermal martensitic transformation in the  $Ni_{51}Ti_{49}$  shape memory alloy. *Sensors and Actuators A* **297**, 111543 (2019). <https://doi.org/10.1016/j.sna.2019.111543>

\*This work was supported by the Russian Science Foundation (grant no. 18-19-00226-P).

12. Tanaka K., Nagaki S. A. A thermomechanical description of materials with internal variables in the process of phase transitions *Ingenieur-Archiv* **51**, 287–299 (1982). [https://doi.org/10.1016/0029-5493\(83\)90054-7](https://doi.org/10.1016/0029-5493(83)90054-7)
13. Lagoudas D. C., Bo Z., Qidwai M. A. A unified thermodynamic constitutive model for SMA and finite element analysis of active metal matrix composites. *Mech. Composite Material Structure* **3** (2), 153–179 (1996). <https://doi.org/10.1080/10759419608945861>
14. Patoor E., Eberhardt A., Berveiller M. Micromechanical Modelling of Superelasticity in Shape Memory Alloys. *Journal de Physique IV France* **6**, 277–292 (1996). <https://doi.org/10.1051/jp4:1996127>
15. Movchan A. A., Klimov K. Yu. Simulation of rheonomic properties of shape memory alloys. *Composites: Mechanics, Computations, Applications* **2** (3), 171–185 (2011). <https://doi.org/10.1615/CompMechComputAppIntJ.v2.i3.10>
16. Volkov A. E., Belyaev F. S., Evard M. E., Volkova N. A. Model of the evolution of deformation defects and irreversible strain at thermal cycling of stressed TiNi alloy specimen. *MATEC Web of Conferences* **33**, 1–5 (2015). <https://doi.org/10.1051/mateconf/20153303013>
17. Belyaev F. S., Evard M. E., Ostropiko E. S., Razov A. I., Volkov A. E. Aging effect on the One-way and Two-way Shape Memory in TiNi Based Alloys. *Shape Memory Superelasticity* **5**, 218–229 (2019). <https://doi.org/10.1007/s40830-019-00226-5>
18. Demidova E. S., Belyaev F. S., Belyaev S. P., Resnina N. N., Volkov A. E. Simulation of isothermal reversible strain in the  $\text{Ti}_{40.7}\text{Hf}_{9.5}\text{Ni}_{44.8}\text{Cu}_5$  alloy using a microstructural model. *Letters on Materials* **11** (3), 327–331 (2021). <https://doi.org/10.22226/2410-3535-2021-3-327-331>
19. Belyaev F. S. *Microstructural model of irreversible deformation and defects in shape memory alloys*. Candidate dissertation (2016). (In Russian)
20. Nelder J. A., Mead R. A simplex method for function minimization. *The Computer Journal* **7**, 308–313 (1965). <https://doi.org/10.1093/comjnl/7.4.308>
21. Chambers L. D. *The practical handbook of genetic algorithms: applications*. Boca Raton, Chapman and Hall/CRC (2001).

Received: January 5, 2022

Revised: April 1, 2022

Accepted: June 9, 2022

#### Authors' information:

Aleksei M. Ivanov — [ileavenovasky@gmail.com](mailto:ileavenovasky@gmail.com)

Fedor S. Belyaev — [belyaev-fs@mail.ru](mailto:belyaev-fs@mail.ru)

Aleksandr E. Volkov — [volkov@math.spbu.ru](mailto:volkov@math.spbu.ru)

Sergey P. Belyaev — [s.belyaev@spbu.ru](mailto:s.belyaev@spbu.ru)

Natalia N. Resnina — [n.resnina@spbu.ru](mailto:n.resnina@spbu.ru)

## ХРОНИКА

11 мая 2022 г. на заседании секции теоретической механики им. проф. Н. Н. Поляхова в санкт-петербургском Доме ученых им. М. Горького выступили канд. физ.-мат. наук, доц. А. С. Кулешов и аспирант М. М. Гаджиев (механико-математический факультет МГУ имени М. В. Ломоносова, Москва) с докладом на тему «Задача о движении твердого тела с неподвижной точкой в потоке частиц».

Краткое содержание доклада:

Рассматривается задача о движении твердого тела с неподвижной точкой в свободном молекулярном потоке частиц. Показано, что уравнения движения тела обобщают классические уравнения Эйлера—Пуассона движения тяжелого твердого тела с неподвижной точкой и представляются в форме классических уравнений Эйлера—Пуассона в случае, когда поверхность тела, обтекаемого потоком частиц, представляет собой сферу. Обсуждаются вопросы существования первых интегралов в рассматриваемой задаче.