

Міністерство освіти і науки України
Сумський державний університет

Хоменко О. В., Гончаров О. А.

**МОДЕЛЮВАННЯ
НЕЛІНІЙНИХ ПРОЦЕСІВ ТА СИСТЕМ**

Навчальний посібник

Рекомендовано вченою радою Сумського державного університету



Суми
Сумський державний університет
2023

УДК 519.87(075.8)

X 76

Рецензенти:

Г. В. Корніч – доктор фізико-математичних наук, професор, завідувач кафедри системного аналізу та обчислювальної математики НУ «Запорізька політехніка»;

І. О. Шуда – доктор фізико-математичних наук, професор, завідувач кафедри математичного аналізу та методів оптимізації Сумського державного університету

*Рекомендовано до видання
вченою радою Сумського державного університету
як навчальний посібник
(протокол № 12 від 13 квітня 2023 року)*

Хоменко О. В.

X 76

Моделювання нелінійних процесів та систем : навчальний посібник / О. В. Хоменко, О. А. Гончаров. – Суми : Сумський державний університет, 2023. – 198 с.

ISBN 978-966-657-934-1

Навчальний посібник присвячений теорії та методології нелінійних процесів і моделей. Він охоплює такі методи аналізування: метод фазової площини, розв'язування нелінійних диференціальних рівнянь та їх систем, зокрема стохастичних, числові методи тощо.

Рекомендований для студентів, аспірантів, наукових співробітників, математиків, фізиків та інженерів.

УДК 519.87(075.8)

© Сумський державний університет, 2023

ISBN 978-966-657-934-1

© Хоменко О. В., Гончаров О. А., 2023

ЗМІСТ

	С.
ПЕРЕДМОВА	7
РОЗДІЛ 1 ІНДУКОВАНІ ШУМОМ ПЕРЕХОДИ	10
1.1 Синергетична теорія фазового переходу	10
1.1.1 Основні положення термодинамічної теорії фазових переходів	10
1.1.2 Основні положення синергетичної теорії фазових переходів	13
1.1.3 Перехід другого роду	15
1.1.3.1 Випадок $\tau_h \ll \tau_\eta, \tau_S$	18
1.1.4 Перехід першого роду	22
1.1.4.1 Випадок $\tau_h \ll \tau_0, \tau_S$	25
1.2 Нерівноважні переходи	27
1.2.1 Основні визначення	27
1.2.1.1 Випадок малого білого шуму	29
1.2.1.2 Визначення границь дифузійного процесу	30
1.2.2 Модель популяційної динаміки Мальтуса – Ферхюльста	32
1.2.3 Модель генного відбору Арнольда, Хорстхемке, Лефевра	36
1.2.3.1 Особливості критичної поведінки	38
1.2.4 Модель із шумом довільної інтенсивності	39
1.2.5 Багатопараметрична модель Лоренца – Хакена	42
1.2.5.1 Синергетичний перехід при адитивних флуктуаціях	46
1.2.5.2 Синергетичний перехід при мультиплікативному шумі	47
1.2.5.3 Вплив стохастичності спряженого поля	47
1.2.5.4 Вплив стохастичності керувального параметра	48
1.2.5.5 Сумісна дія шумів спряженого поля й керувального параметра	51

РОЗДІЛ 2	ЕВОЛЮЦІЯ ІЄРАРХІЧНОЇ СИСТЕМИ	55
2.1	Теорія ієрархічного зв'язку	55
2.2	Мікроскопічна теорія структурної релаксації. Ієрархічно підпорядковані статистичні ансамблі	60
2.3	Часова залежність структурного фактора скла	62
РОЗДІЛ 3	НЕЛІНІЙНА МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ МЕЖОВОГО ТЕРТЯ	67
3.1	Фазова динаміка тертя ультратонких плівок мастила	67
3.1.1	Межовий режим тертя	67
3.1.2	Модель фазових переходів переривчастого режиму тертя	70
3.1.3	Нова карта й теоретичні підходи для опису межового режиму тертя	72
3.2	Основні рівняння для опису плавлення ультратонкої плівки мастила	75
3.3	Умови переходу	80
3.4	Гістерезисні явища при залежності модуля зсуву від напружень	84
3.5	Вплив адитивного некорельованого шуму	88
3.6	Часові ряди напружень	94
3.7	Вплив корельованих флуктуацій температури на плавлення плівки мастила	96
3.7.1	Представлення кольорового шуму та основні рівняння	96
3.7.2	Метод ефективного потенціалу	104
3.7.3	Безперервне перетворення	108
3.7.3.1	Динамічна фазова діаграма	108
3.7.3.2	Фазова кінетика	111
3.7.4	Урахування деформаційного дефекту модуля зсуву .	116
3.7.4.1	Динамічна фазова діаграма	117
3.7.4.2	Фазова кінетика	119

3.8	Гістерезисні явища при залежності модуля зсуву від деформації	122
3.8.1	Гістерезисні явища при фазовому переході другого роду	122
3.8.1.1	Стрибкоподібне плавлення	122
3.8.1.2	Безперервне перетворення	127
3.8.1.3	Фазова кінетика	129
3.8.2	Гістерезисні явища при фазовому переході першого роду	134
3.8.2.1	Стрибкоподібне плавлення	134
3.8.2.2	Фазова кінетика	136
3.9	Багатовимірний термодинамічний потенціал для опису плавлення ультратонкої плівки мастила	139
3.9.1	Основні рівняння	139
3.9.2	Сила тертя	143
3.9.3	Трибологічна система	147

РОЗДІЛ 4 АТОМІСТИЧНЕ ПРЕДСТАВЛЕННЯ МЕЖОВОГО ТЕРТЯ

4.1	Властивості тонких плівок рідин, обмежених твердими поверхнями	154
4.2	Модель молекулярної динаміки ультратонкого шару води, стиснутого між жорсткими алмазними поверхнями	156
4.2.1	Загальна схема комп'ютерного експерименту	156
4.2.2	Модель води	158
4.2.3	Рівняння руху	161
4.2.4	Контроль температури	163
4.2.5	Особливості вимірювань	165
4.3	Результати та обговорення	166
4.3.1	Плівка води між гладенькими поверхнями	166
4.3.2	Плівка води між поверхнями з періодичним атомарним рельєфом	173

РОЗДІЛ 5	ТЕРМОДИНАМІЧНЕ ПРЕДСТАВЛЕННЯ ФРАГМЕНТАЦІЇ МЕТАЛІВ	178
5.1	Основні поняття та співвідношення	178
5.2	Фазова діаграма	184
5.3	Кінетика встановлення стаціонарного значення густини енергії дефектів	189
5.3.1	Часові залежності	189
5.3.2	Координати $\varphi - \dot{\varphi}$	192
	СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ	195

ПЕРЕДМОВА

Останніми десятиріччями нові концепції та парадигми надали математиці й теоретичній фізиці ледве впізнаваного вигляду, завдяки переключенню інтересу від лінійних до нелінійних моделей і явищ. У тих ситуаціях, коли аналітичні засоби, хоча доповнені топологічними та алгебраїко-геометричними методами, ставали безсильними, на допомогу стали приходити прямі числові методи, що реалізуються на комп'ютерах, доступних зараз практично кожному. Усе це вдихнуло життя в багато, як здається, формальних побудов попередників і відкрило нові горизонти. Ця ера не обійшла різноманітністю результатів математику та фізику фазових переходів. І якщо раніше переважало вивчення статичної та термодинамічної сторін проблеми, то зараз усе глибшим стає опис кінетики фазових перетворень і не лише на феноменологічному, а й на мікроскопічному рівні. До цього фундаментального напрямку в математиці та фізиці належить наш навчальний посібник.

Актуальності навчальному посібнику надає також свідоме підкреслення в ньому синергетичної парадигми, сформульованої на початку 70-х років ХХ ст. Хакеном [1]. За крайньою межею можливості синергетики як загальної теорії самоорганізації в кінетичних системах до кінця ще не зрозумілі, та ця обставина також підкреслює живі й небанальні моменти викладені в посібнику. Прагнення зрозуміти самоорганізацію як наслідок синергетичного ефекту взаємодії різних ступенів вільності дозволило вивчити різноманітні фізичні системи (моделі популяційної динаміки та генного відбору, ультратонку плівку мастила на макро- та молекулярному рівні, інтенсивну пластичну деформацію (ІПД) тощо).

Перший розділ присвячений аналізу з єдиних позицій феноменологічної кінетики фазових переходів як першого, так і другого роду в детерміністичному та стохастичному випадках. В основу покладений аналог моделі Лоренца, що дав свого часу (1975 р.) один із яскравих прикладів дивних атракторів. Дано детальне як аналітичне, так і числове вивчення відповідної нелінійної задачі, причому активними зберігаються одразу дві, а не одна, як робилось раніше, гідродинамічні ступені вільності. Тим самим відкриті більш змістовні математична та фізична картини. Вони дозволили узагальнити недавні часткові результати ін-

ших колег та виявити умови, за яких виникають чи коливальні рухи, чи незалежно від початкових умов фазові траєкторії виходять на універсальну ділянку. Проведений аналіз відрізняє те, що врахування шумів дає можливість побудувати функції розподілення параметрів порядку та фазові діаграми різних моделей.

У розділі 2 досліджено макроскопічні особливості структурних перетворень у межах подання про ієрархічно підпорядковані структури. Це уявлення ґрунтується на концепції ультраметричного простору, у якому неможливо побудувати трикутник з усіма різними сторонами. Відповідний формалізм, що становить основу подальшого викладу, пропонує рівняння, що дозволяє знайти різні види розподілення ймовірності за ієрархічними рівнями. Ієрархічний процес структурної релаксації, розглянутий у розділі, передбачає, що нижній рівень відповідає однорідним об'ємам; перехід на наступний рівень означає зміщення в ультраметричному просторі та відповідає об'єднанню цих об'ємів у кластери; останні зі свого боку об'єднуються в суперкластери наступного рівня ієрархії тощо — до повного об'єму зразка. У результаті розподілення атомів ієрархічної структури представляється у виді розвинення за ультраметричним простором.

У розділі 3 розвинено загальну теорію плавлення ультратонкої плівки мастила. Описано вплив деформаційного дефекту модуля зсуву на плавлення мастила. Досліджено вплив адитивних шумів на процес плавлення мастила. Побудовано фазові діаграми з областями сухого, рідинного та переривчастого тертя. Проведено якісний аналіз часових рядів для всіх областей діаграми та описано самоподібний режим. Проаналізовано вплив на динамічну фазову діаграму корельованих флуктуацій температури. Досліджено фазову кінетику та часові ряди. Проведено дослідження гістерезису, що виникає під час плавлення. Установлено умови реалізації стрибкоподібного та безперервного плавлення під час переходів першого та другого родів. Побудовано фазові портрети в різних кінетичних режимах. Паралельно проблему розглянуто з позицій теорії фазових переходів Ландау. Знайдено параметри мастила, за яких тертя зменшується, та проаналізовано різні експериментальні системи.

Розділ 4 присвячено вивченню властивостей ультратонкої плівки води, що складається з одного або двох шарів молекул та обмеже-

на двома алмазними кристалічними гладенькими або структурованими поверхнями. За мету досліджень стала перевірка коректності використання абсолютно жорстких поверхонь та однієї з наявних моделей молекули води для симуляції трибологічних явищ. Уперше проведено комп'ютерні експерименти для моделі TIP4P молекул води із застосуванням методу молекулярної динаміки (МД). Вивчено поведінку рівноважних і динамічних характеристик системи. Показано, що під час збільшення зовнішнього навантаження відбувається перехід плівки до твердоподібного стану, на що вказує зменшення величини коефіцієнта дифузії та збільшення зсувної в'язкості. Виявлена організація молекул у шари та відсутність їх площинного впорядкування внаслідок використання неструктурованих поверхонь. Також одержані залежності кінетичної сили тертя від навантаження та обчислені значення коефіцієнта тертя. Зроблено висновки про реалістичність досліджуваної моделі.

Наведений у розділі 5 розгляд, що ґрунтується на принципах теорії фазових переходів Ландау, дає цілісну картину фрагментації твердих тіл у процесі ІПД. Побудовано фазові діаграми з областями реалізації різних типів стаціонарних структур. Мінімуми потенціалу відповідають формуванню стаціонарних структур із різним розміром зерна. На фазовій діаграмі виділено чотири області — дві з існуванням однієї стаціонарної структури та дві з існуванням двох. Установлено, що зі збільшенням пружних деформацій розмір зерен у стаціонарних структурах зменшується. Досліджено кінетику встановлення стаціонарних значень густини енергії дефектів. Для всіх областей фазової діаграми в межах адіабатичного наближення за допомогою аналізу кінетичного рівняння типу Ландау — Халатнікова одержано часові залежності густини енергії меж зерен. Згідно з останніми, тип стаціонарної структури залежить від початкових значень густини енергії меж зерен.

РОЗДІЛ 1

ІНДУКОВАНІ ШУМОМ ПЕРЕХОДИ

1.1 Синергетична теорія фазового переходу

1.1.1 Основні положення термодинамічної теорії фазових переходів

Основна концепція фазових переходів полягає в тому, що відмінність між фазами характеризується параметром порядку, який описує їх внутрішні властивості [2–7]. Зокрема під час утворенні просторово-періодичних структур твердих розчинів ступінь впорядкування визначається параметрами дальнього порядку, у разі переходу магнетик — немагнітний матеріал і рідина — газ роль параметрів порядку відіграють відношення спонтанної намагніченості до її максимального значення й густина середовища відповідно (в останніх двох прикладах упорядкованими фазами є (анти) феромагнетик і рідина).

Феноменологічна теорія Ландау дозволяє розглянути основні особливості термодинаміки перетворення на основі розвинення вільної енергії одиничного об'єму в ряд за степенями параметра порядку

$$F = F_0 + \frac{A}{2}\eta^2 + \frac{B}{4}\eta^4 + \frac{D}{6}\eta^6 - h\eta, \quad (1.1)$$

де вільна енергія неупорядкованої фази F_0 і параметри A , B , D є функціями температури T , що плавно змінюються з нею. Останній доданок у правій частині (1.1) враховує наявність поля h , спряженого параметра порядку η . Для твердих розчинів, що впорядковуються, де параметр порядку визначає дальній порядок у чергуванні атомів різного сорту, спряжене поле дорівнює різниці хімпотенціалів компонент. Якщо параметр порядку відповідає спонтанній намагніченості, то спряжене поле зводиться до магнітної індукції.

Розглянемо приклад, коли параметр фазового перетворення η є однокомпонентним і дійсним. За великих температур залежність зміни вільної енергії $\Delta F = F - F_0$ від параметра порядку η має монотонно

зростаючий характер із мінімумом у точці $\eta = 0$, що відповідає не-впорядкованому стану (крива 1 на рис. 1.1а). Пониження температури приводить до появи на залежності $\Delta F(\eta)$ мінімуму, який відповідає значенню $\eta = \eta_e$, відповідному рівноважній впорядкованій фазі. Умова її існування $\Delta F(\eta_e) < 0$ задовольняється як для залежності $\Delta F(\eta)$ типу показаної кривою 6, так і для залежності типу кривої 5. Перша характеризується відсутністю енергетичного бар'єру, що розділяє рівноважні неупорядкований ($\eta = 0$) і впорядкований ($\eta = \eta_e$) стани. Вона властива фазовим переходам другого роду. Характерною ознакою фазових перетворень першого роду є наявність бар'єру $\Delta F(\eta_{cr}) > 0$ між станами $\eta = 0$ і $\eta = \eta_e$.

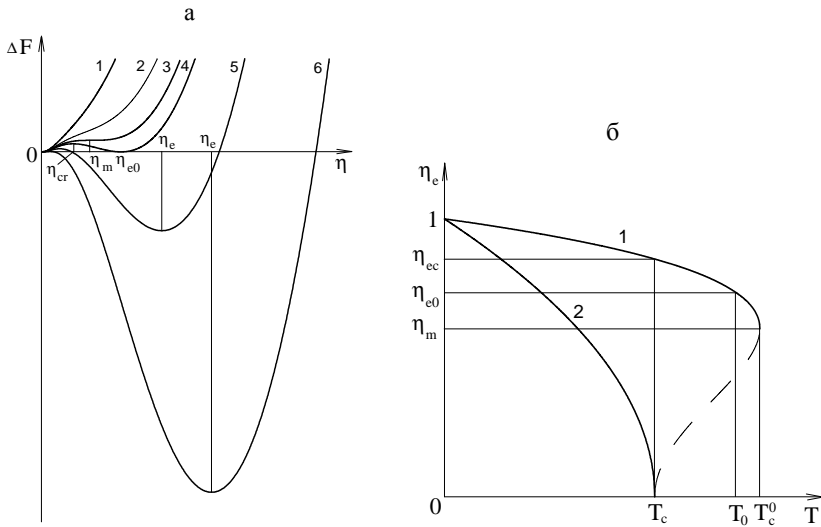


Рисунок 1.1: а – вид залежності зміни вільної енергії під час упорядкування від параметра порядку за різних температур: 1 – $T > T_c^0$; 3 – $T = T_c^0$; 4 – $T = T_0$; 5 – $T_c < T < T_0$; 6 – $T \leq T_c$; б – температурна залежність рівноважного параметра порядку під час фазових переходів першого (1) та другого (2) родів (суцільна крива відповідає стійкому стану η_e , штрихова – нестійкому η_{cr})

Вважаючи, що спряжене поле відсутнє ($h = 0$), і приймаючи па-

раметри розвинення у вигляді

$$A = \alpha (T - T_c), \quad \alpha = \left. \frac{dA}{dT} \right|_{T=T_c} > 0; \quad B, D = \text{const}, \quad (1.2)$$

зазначимо основні особливості температурної залежності величин під час фазових переходів. Для переходів першого роду характерна температура T_c^0 , після досягнення якої на залежності $\Delta F(\eta)$ з'являється плато (див. криву 3), що переходить із подальшим зменшенням T у мінімум, відокремлений від точки $\eta = 0$ бар'єром кінцевої висоти. Для кривої 3 зміна вільної енергії, яка відповідає мінімуму, що з'являється, перевищує відповідне точці $\eta = 0$, тобто впорядкована фаза термодинамічно не вигідна. Проте вона може існувати метастабільно. Якщо температура досягає величини T_0 меншої T_c^0 , коли виконується умова $\Delta F(0) = \Delta F(\eta_e)$ рівності зміни вільної енергії за відсутності порядку ($\eta = 0$) і за умови значення $\eta = \eta_e$, відповідного точці мінімуму (див. криву 4), упорядкована фаза стає стабільною. Залежність, зображена кривою 6 на рисунку 1.1а, здійснюється за температур, що не перевищують величину T_c , а отже, що визначає точку втрати стійкості неупорядкованої фази. Для фазових переходів другого роду вона дорівнює температурі впорядкування T_0 .

З умови $\partial F / \partial \eta = 0$ з урахуванням (1.1), (1.2), опустивши тривіальний розв'язок $\eta = 0$, легко визначити рівноважний параметр порядку для переходу другого роду ($\alpha, B > 0, D = 0$)

$$\eta_e^2 = 3\epsilon\eta_M^2, \quad \epsilon \equiv \frac{T_c - T}{T_c}, \quad (1.3)$$

де $\eta_M = \sqrt{\alpha T_c / 3B}$ – максимальне значення параметра порядку. У разі переходу першого роду ($\alpha, D > 0, B < 0$)

$$\left. \begin{array}{l} \eta_e^2 \\ \eta_{cr}^2 \end{array} \right\} = \eta_m^2 (1 \pm \sqrt{\epsilon}), \quad \epsilon \equiv \frac{T_c^0 - T}{T_c^0 - T_c}, \quad (1.4)$$

де $\eta_m^2 \equiv -B/2D$ задає мінімальне значення (див. криву 3 на рис. 1.1а). Температурні залежності (1.3), (1.4) мають вигляд, представлений на рисунку 1.1б. Якщо для фазових переходів другого роду зростання

температури в інтервалі $0 - T_c$ приводить до монотонного спадання величини η_e від 1 до 0, то в разі переходів першого роду до температури T_c^0 відбувається плавне зменшення, а потім різкий стрибок від значення η_m до нуля. На залежності $\Delta F(\eta)$ така поведінка відбивається зникненням мінімуму при $T > T_c^0$. У разі переходу першого роду впорядкування з пониженням температури відбувається при $T = T_c$ із стрибком параметра порядку $\eta_{ec} = \sqrt{2}\eta_m$, а розупорядкування під час нагрівання – у точці T_0 (відповідний стрибок параметра порядку $\eta_{e0} = \sqrt{3/2}\eta_m$). Проте, як зазначено вище, метастабільна впорядкована фаза може існувати до температури T_c^{01}). Отже, за умови переходу першого роду температурна залежність параметра фазового перетворення незворотна, іншими словами, спостерігається гістерезис.

1.1.2 Основні положення синергетичної теорії фазових переходів

Розглянемо тепер особливості опису фазових переходів систем виведених із рівноваги в результаті накачування в них надмірної енергії [3, 4]. У таких системах можливі якісні зміни поведінки мікрорівня, що мають колективний характер (наприклад, когерентне випускання електромагнітних хвиль заздалегідь збудженою системою електронів у лазері). У межах синергетичної теорії кількісний опис указаного переходу був здійснений у роботах Хакена. Лазерна модель з'явилася першим прикладом дослідження кооперативного перетворення під час переходу в сильнозбуджений стан. Подібно до теорії фазових переходів Ландау вона дозволяє описати кінетичні перетворення далеких від рівноваги систем. Якщо раніше для адекватного дослідження було досить увести одну змінну – параметр порядку, *що задає густину бозеконденсату хиггсового поля* – то для опису сильно нерівноважних систем необхідно використовувати три змінні: заселеність одночастковими збудженнями збудженого й незбудженого станів, *хиггсове поле*, що визначає колективну моду, і спряжене йому поле. У лазері роль

¹⁾Така поведінка реалізується при дуже швидкій зміні температури.

указаних змінних належить відповідно різниці заселеностей електронних рівнів, напруженості електричного поля, що визначається густиною бозе-конденсату фотонів, і поляризації системи електронів щодо розділення за рівнями. Основна ідея лазерної схеми полягає в тому, що якісна зміна системи або іншими словами, випадання бозе-конденсату фотонів обумовлена когерентним перерозподіленням електронів між молекулярними рівнями.

Останніми роками намітилася тенденція до опису термодинамічних фазових перетворень за аналогією зі схемою, що описує роботу лазера. Як було показано на прикладах впорядкування металевого твердого розчину й мартенситного переходу, у межах мікроскопічного підходу будь-яке фазове перетворення може бути представлене аналогічно лазерній моделі. Переваги такого представлення пов'язані з можливістю розгляду як фазових, так і кінетичних перетворень, а також із можливістю сумісного опису збуджень одиночного й колективного типу. Крім того, підхід Ландау може бути представлений як спрощення лазерної схеми в результаті виключення всіх змінних, крім параметра порядку. Отже, в його основі лежить розгляд лише колективної гілки збуджень.

Початковою посилкою нашого підходу є синергетична концепція, у межах якої фазовий перехід реалізується в результаті взаємно узгодженої поведінки трьох ступенів свободи: параметра порядку $\eta(t)$, спряженого поля $h(t)$ і керувального параметра $S(t)$ [1,3,4]. Перша пара вказаних змінних зв'язана від'ємним зворотним зв'язком із третім. Основою синергетичного підходу є та обставина, що додатний зворотний зв'язок іншої пари $\eta(t)$, $S(t)$ з $h(t)$ приводить до самоорганізації системи, яка й представляє фазовий перехід.

Із математичного погляду найбільш проста схема опису системи, що самоорганізується, представляється відомою схемою Лоренца [3, 4]. Вона репрезентує три диференціальні рівняння, що виражають швидкості $\dot{\eta}$, \dot{h} , \dot{S} зміни величин η , h , S через їх значення. Характерна особливість цих виразів полягає в тому, що всі вони містять дисипативні доданки, величини яких обернено пропорційні відповідним часам релаксації τ_η , τ_h , τ_S . Зазвичай під час дослідження термодинаміки фазового переходу приймають адіабатичне наближення $\tau_h, \tau_S \ll \tau_\eta$, яке означає, що в ході своєї еволюції спряжене поле $h(t)$ і керувальний

параметр $S(t)$ змінюються настільки швидко, що встигають слідувати за повільною зміною параметра порядку $\eta(t)$ [1]. Водночас еволюція системи описується рівнянням Ландау – Халатнікова, у якому роль вільної енергії відіграє синергетичний потенціал. У результаті синергетичний підхід зводиться до феноменологічної схеми фазового переходу. Відмінність полягає в тому, що в синергетичних системах процес самоорганізації відбувається в області великих значень керувального параметра S , а в термодинамічних – у низькотемпературній. Отже, величина S не зводиться до температури. Крім того, якщо для термодинамічних систем температура середовища збігається з її значенням для термостата, то для синергетичних від’ємний зворотний зв’язок між параметром порядку та спряженим полем, що відображає принцип Ле-Шательє, знижує стаціонарне значення керувального параметра порівняно з його величиною, що фіксується зовнішньою дією. На відміну від термодинаміки в синергетиці реалізується не рівноважний, а стаціонарний стан.

1.1.3 Перехід другого роду

Розглянемо випадок параметра порядку, що не зберігається, для якого можна нехтувати координатною залежністю й система Лоренца надуває вигляду [1]

$$\tau_\eta \dot{\eta} = -\eta + A_\eta h, \quad (1.5)$$

$$\tau_h \dot{h} = -h + A_h \eta S, \quad (1.6)$$

$$\tau_S \dot{S} = (S_e - S) - A_S \eta h. \quad (1.7)$$

Тут точка означає диференціювання за часом t ; τ_η , τ_h , τ_S – часи релаксації параметра порядку η , спряженого поля h і керувального параметра S ; A_η , A_h , A_S – додатні константи зв’язку; S_e – параметр зовнішньої дії. Характерна особливість системи (1.5) – (1.7) полягає в лінійності рівняння (1.5) і нелінійності (1.6), (1.7). Перші доданки описують релаксацію до стаціонарних значень $\eta = 0$, $h = 0$, $S = S_e$, другі – зв’язок між різними гідродинамічними модами. Від’ємний знак перед нелінійним доданком (1.7) відображає дію принципу Ле-Шательє, плюс

перед ηS в (1.6) – додатний зворотний зв'язок параметра порядку і керувального параметра зі спряженим полем, який є причиною самоорганізації.

Під час виконання співвідношень $\tau_h, \tau_S \ll \tau_\eta$ можна нехтувати флуктуаціями величин $h(t) \approx h(\eta(t))$, $S(t) \approx S(\eta(t))$, вважаючи в (1.6), (1.7) $\dot{h} = 0$, $\dot{S} = 0$. У результаті одержуємо рівності

$$h = A_h S_e \eta (1 + \eta^2 / \eta_m^2)^{-1}, \quad (1.8)$$

$$S = S_e (1 + \eta^2 / \eta_m^2)^{-1}; \quad (1.9)$$

$$\eta_m^{-2} \equiv A_S A_h, \quad (1.10)$$

що виражають спряжене поле й керувальний параметр через параметр порядку. При $\eta \ll \eta_m$ співвідношення (1.8) має лінійний вигляд, що характеризується сприйнятливістю $\chi = (A_h S_e)^{-1}$. З зростанням параметра порядку до значення $\eta = \eta_m$ залежність $h(\eta)$ виходить на насичення, а при $\eta > \eta_m$ проявляє спадаючий характер, що відповідає від'ємній сприйнятливості $\chi \equiv d\eta/dh$ і не має фізичного сенсу. Звідси випливає, що стала η_m , визначена рівністю (1.10), має сенс максимального значення параметра порядку. Що стосується рівності (1.9), то вона описує спадання керувального параметра від максимального значення S_e при $\eta = 0$ до мінімальної величини $S_e/2$ при $\eta = \eta_m$. Очевидно, що спадний характер залежності $S(\eta)$ є проявом принципу Ле-Шательє.

Підставляючи (1.8) в (1.5), приходимо до рівняння типу Ландау-Халатнікова

$$\tau_\eta \dot{\eta} = -\partial V / \partial \eta, \quad (1.11)$$

де синергетичний потенціал має вигляд

$$V = \frac{\eta^2}{2} \left\{ 1 - \frac{S_e}{S_c} \left(\frac{\eta}{\eta_m} \right)^{-2} \ln \left[1 + \left(\frac{\eta}{\eta_m} \right)^2 \right] \right\}, \quad (1.12)$$

$$S_c \equiv (A_\eta A_h)^{-1}. \quad (1.13)$$

Якщо параметр зовнішньої дії S_e менший від критичного значення S_c , визначеного рівністю (1.13), то залежність $V(\eta)$ має монотонно зростаючий вигляд із мінімумом у точці $\eta_0 = 0$ (див. рис. 1.2а). Водночас

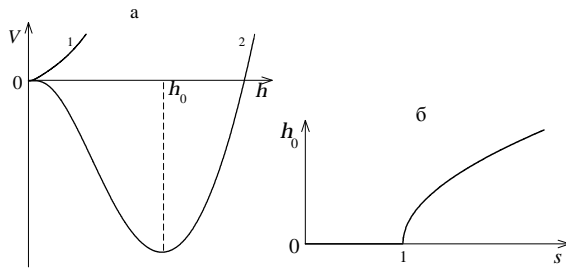


Рисунок 1.2: а – залежність синергетичного потенціалу від параметра порядку для фазового переходу другого роду за різних значень параметра накачування S_e (крива 1 відповідає $S_e < S_c$, крива 2 – $S_e > S_c$); б – залежність стаціонарного значення параметра порядку від $s \equiv S_e/S_c$

система не впорядковується. У закритичній області $S_e > S_c$ синергетичний потенціал набуває мінімум за ненульового значення параметра порядку ²⁾

$$\eta_0 = \eta_m (s - 1)^{1/2}, \quad s \equiv S_e/S_c. \quad (1.14)$$

Як видно з рисунка 1.2б, стаціонарне значення параметра порядку η_0 зростає кореневим чином при закритичному значенні параметра зовнішньої дії $s > 1$. У разі різкого переходу системи в область $s > 1$ вона за час

$$\tau = \tau_\eta (s - 1)^{-1} \quad (1.15)$$

набуває стаціонарного значення параметра порядку (1.14). Водночас залежність $\eta(t)$ має звичайний дебаєвський вигляд

$$\eta = \eta_0 \left(1 - e^{-t/\tau}\right). \quad (1.16)$$

²⁾Оскільки величина η_0 обмежена умовою $\eta_0 \leq \eta_m$, то параметр зовнішньої дії s обмежений зверху значенням $s_m = 2$.

1.1.3.1 Випадок $\tau_h \ll \tau_\eta, \tau_S$

Як і вище, в (1.6) можна покласти $\dot{h} = 0$, що дає зв'язок

$$h = A_h S \eta. \quad (1.17)$$

Ураховуючи його в рівняннях (1.5) і (1.7), що залишилися, і використовуючи масштаби η_m, S_e, τ_η для вимірювання параметра порядку, керувального параметра й часу, приходимо до системи

$$\dot{\eta} = -\eta(1 - sS), \quad (1.18)$$

$$\dot{S} = \tau^{-1} [1 - S(1 + \eta^2)]. \quad (1.19)$$

Її поведінка задається параметрами:

$$s \equiv S_e/S_c, \quad \tau \equiv \tau_S/\tau_\eta, \quad (1.20)$$

перший із яких визначає ступінь збудження системи, а другий – співвідношення характерних часів релаксації керувального параметра й параметра порядку. У границі $\tau \ll 1$ права частина в (1.19) набуває настільки великих значень, що зліва можна покласти $\dot{S} = 0$, і після підстановки одержаної залежності (1.9) в (1.18) ми приходимо до розглянутого вище адіабатичного наближення, поданого рівностями (1.11)–(1.13).

Оскільки аналітично одержати точні залежності $\eta(t), S(t)$ із системи нелінійних диференціальних рівнянь (1.18), (1.19) не представляється можливим, проведемо її якісне дослідження методом фазової площини. Такий аналіз дає можливість визначити характер залежностей $\eta(S)$ (фазових траєкторій), сукупність яких із різними початковими координатами визначає фазовий портрет системи. Точний його вигляд знайдемо методом числового інтегрування системи рівнянь (1.18), (1.19) методом Рунге – Кутта 4-го порядку точності.

Розділивши почленно рівняння (1.18) на (1.19), одержуємо диференціальне рівняння першої степені

$$\frac{d\eta}{dS} = \frac{-\tau\eta(1 - sS)}{1 - S(1 + \eta^2)}. \quad (1.21)$$

Використовуючи (1.21), знайдемо особливі точки фазової площини, тобто точки, у яких напрям дотичної до фазової траєкторії $\eta = \eta(S)$ не визначено. Для цього запишемо систему рівнянь $d\eta/dS=0, d\eta/dS=\infty$

$$-\tau\eta(1 - sS) = 0, \quad (1.22)$$

$$1 - S(1 + \eta^2) = 0. \quad (1.23)$$

Як показує її розв'язок фазовий портрет характеризується наявністю двох особливих точок $D(S_e, 0), O(S_e, \eta_0)$ з координатами $S=S_e, \eta = 0$ і $S=S_e, \eta = \eta_0$ відповідно, де η_0 визначено рівністю (1.14). У безрозмірних величинах вони набувають вигляд $S = 1, \eta = 0$ і $S=s^{-1}, \eta=\sqrt{s-1}$. Зазначимо, що точки, в яких фазові траєкторії мають вертикальну дотичну, задовольняють рівнянню (1.23), а горизонтальну – (1.22).

Визначимо тепер характер стійкості особливої точки $D(1, 0)$. Для цього, вважаючи в рівняннях (1.18), (1.19) $S=1+ae^{\lambda_D t}, \eta = be^{\lambda_D t}$, де амплітуди $a, b \ll 1$, проводимо лінеаризацію їх правих частин. Це означає, що ми опускаємо всі нелінійні доданки за малими зсувами $ae^{\lambda_D t}, be^{\lambda_D t}$ з особливої точки $D(1, 0)$. У результаті одержуємо однорідну систему лінійних алгебраїчних рівнянь відносно a, b :

$$(1 + \lambda_D - s)b = 0; \quad (1.24)$$

$$(1 + \tau\lambda_D)a = 0. \quad (1.25)$$

Умова їх розв'язку приводить до квадратного рівняння для показників Ляпунова λ_D

$$\tau\lambda_D^2 + (1 + \tau - \tau s)\lambda_D + 1 - s = 0, \quad (1.26)$$

розв'язки якого мають вигляд

$$\lambda_D = \frac{1}{2} [(s-1) - \tau^{-1}] \times \\ \times \left\{ 1 \pm \sqrt{1 + 4\tau^{-1}(s-1) [(s-1) - \tau^{-1}]^{-2}} \right\}. \quad (1.27)$$

Аналіз виразу (1.27) показує, що в передкритичній області ($s < 1$) значення λ_D дійсні та від'ємні, а отже, точка D являє собою стійкий вузол.

Вузол – особлива точка, через яку проходять інтегральні криві, подібно до того, як сімейство парабол $y = cx^m$ ($m > 0$) проходить через початок координат. Беручи до уваги, що за таких значеннях s особлива точка O не реалізується, приходимо до висновку – із часом система еволюціонує в стаціонарний неупорядкований стан, що відповідає точці D , згідно з фазовим портретом, наведеним на рисунку 1.3а. Зростання параметра $\tau = \tau_S/\tau_\eta$ приводить до закручування траєкторій навколо точки D , тобто зі зростанням інерційності зміни керувального параметра порівняно з параметром порядку виявляється тенденція до виникнення коливального режиму. Оскільки в закритичній області $s > 1$ показники Ляпунова (1.27) дійсні та мають різні знаки, точка D є сідлом (рис. 1.4). Так називають особливу точку, через яку проходять лише дві інтегральні криві, що є асимптотами (решта всіх кривих, що мають вид гіпербол, через неї не проходять).

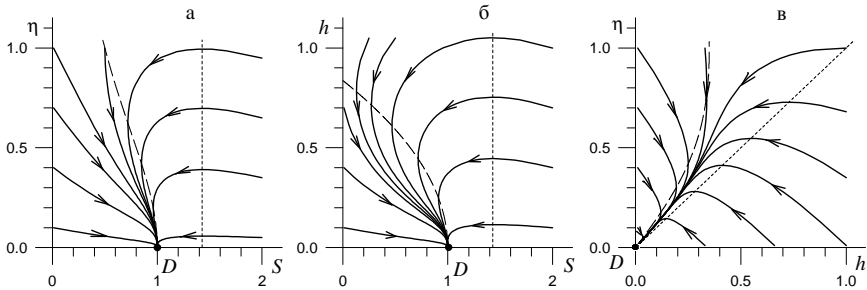


Рисунок 1.3 — Фазові портрети неупорядкованої фази ($S_e = 0.7S_c$) для фазового переходу другого роду: а – $\tau_h \ll \tau_\eta = \tau_S$; б – $\tau_\eta \ll \tau_h = \tau_S$; в – $\tau_S \ll \tau_h = \tau_\eta$. Примітка – тут і на всіх подальших малюнках штрихова лінія вказує точки, у яких фазові траєкторії мають вертикальну дотичну, пунктирна – горизонтальну

Розглянемо особливу точку $O(s^{-1}, \sqrt{s-1})$. За умови малого відхилення від неї розв'язок системи (1.18) (1.19) має вигляд

$$S = s^{-1} (1 + ae^{\lambda_1 t}), \quad \eta = \sqrt{s-1} (1 + be^{\lambda_2 t}), \quad (1.28)$$

де $a, b \ll 1$. Підставляючи (1.28) в (1.18), (1.19), у лінійному набли-

женні за a, b одержуємо систему з двох однорідних рівнянь

$$a - \lambda_O b = 0, \quad (1.29)$$

$$(s + \tau \lambda_O) a + 2(s - 1)b = 0. \quad (1.30)$$

Умова існування нетривіального розв'язку цієї системи ($a \neq 0, b \neq 0$) приводить до виразу для показників Ляпунова

$$\lambda_O = -\frac{s}{2\tau} \left(1 \pm \sqrt{1 - 8\tau \frac{s-1}{s^2}} \right). \quad (1.31)$$

Звідси видно, що за значень параметра τ , обмежених зверху величиною

$$\tau_c = \frac{s^2}{8(s-1)}, \quad (1.32)$$

λ_O дійсні та від'ємні, а з його зростанням до значень $\tau > \tau_c$ вони стають комплексними з від'ємною дійсною частиною. Отже, у цих межах точка O представляє стійкий вузол і фокус відповідно (фокус – асимптотична точка всіх інтегральних кривих, що мають вид спіралей, укладених одна в одну).

Отже, у закритичній області $1 < s \leq 2$ при $\tau_\eta \ll \tau_S$ виникає коливальний режим (див. рис. 1.4в), що характеризується частотою

$$\omega = [8\tau s^{-2}(s-1) - 1]^{1/2} s/2\tau_S \quad (1.33)$$

і коефіцієнтом загасання

$$\alpha = s/2\tau_S. \quad (1.34)$$

Зі зростанням температури в інтервалі $1 < s < 2$ величини ω, α зростають, а критичне відношення часів релаксації (1.32) спадає. Іншими словами, збудження системи сприяє появі затухаючих коливань. Проте, як видно з рисунків 1.4а–в, у найбільшому ступеню прояву коливального режиму сприяє зростання параметра $\tau = \tau_S/\tau_\eta \gg 1$.

Зворотна границя $\tau_S \ll \tau_\eta$ відповідає адиабатичному наближенню, що представляє стандартну картину фазового переходу. Згідно з рисунком 1.4 зменшення параметра $\tau \rightarrow 0$ приводить до виділення на фазовому портреті системи ділянки MOD , до якої збігаються з часом

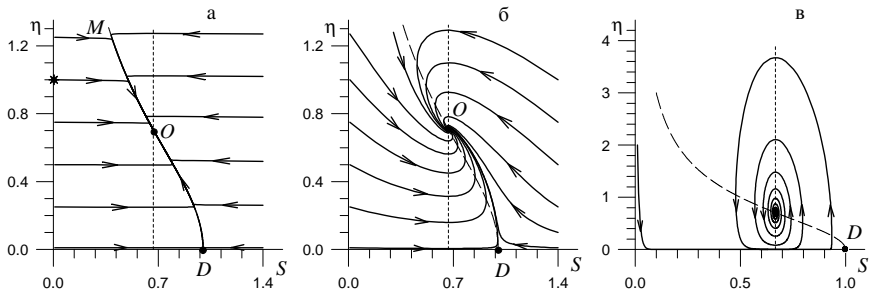


Рисунок 1.4 — Фазові портрети впорядкованої фази ($S_e = 1, 5S_c$) для фазового переходу другого роду: а - $\tau_h \ll \tau_\eta = 10^2 \tau_S$; б - $\tau_h \ll \tau_\eta = \tau_S$; в - $\tau_h \ll \tau_S = 10^2 \tau_\eta$

усі траєкторії. Як видно з часових залежностей, наведених на рисунку 1.5а, конфігуративна точка швидко рухається по траєкторії, розташованій за межами ділянки MOD , а з попаданням на неї істотно сповільнюється, причому ефект уповільнення позначається тим сильніше, чим менше параметр неадіабатичності τ . Очевидно, указана ділянка MOD відповідає притягаючій множині відомій як «русло великої річки». Універсальність кінетичної картини фазового переходу виявляється в тому, що незалежно від початкових умов за $\tau \rightarrow 0$ параметри системи швидко досягають ділянки MOD , положення якої не залежить від мікроскопічних деталей її будови, і потім поволі еволюціонують по цій універсальній траєкторії.

1.1.4 Перехід першого роду

Викладена картина вважає, що час релаксації τ_η є постійним у ході перетворення, хоча насправді його величина може зростати з параметром порядку η . Покажемо, що така дисперсія приводить до трансформації фазового перетворення з другого в перший рід. Для цього використовуємо просту залежність

$$\frac{1}{\tau_\eta} = \frac{1}{\tau_0} \left(1 + \frac{\kappa}{1 + (\eta/\eta_\tau)^2} \right), \quad (1.35)$$

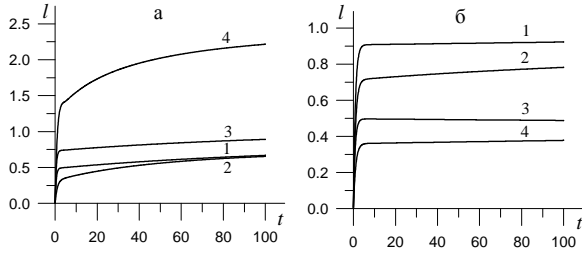


Рисунок 1.5 — Часова залежність шляху l , пройденого конфігуративною точкою по фазовій траєкторії: а – фазовий перехід другого роду (крива 1 відповідає фазовому портрету на рисунку 1.4а); б – фазовий перехід першого роду (крива 1 відповідає фазовому портрету на рисунку 1.8а). Початок відліку l відмічено хрестиком на відповідних рисунках

що характеризується додатними константами $\tau_0, \kappa, \eta_\tau$. Тоді в межах адиабатичного наближення $\tau_h, \tau_S \ll \tau_0$ система Лоренца (1.5) – (1.7) зводиться до рівняння (1.11), у якому проведено перепозначення τ_η на τ_0 , а синергетичний потенціал (1.12) набуває вигляду

$$V = \frac{\eta^2}{2} \left\{ 1 - \frac{S_e}{S_{c0}} \left(\frac{\eta}{\eta_m} \right)^{-2} \ln \left[1 + \left(\frac{\eta}{\eta_m} \right)^2 \right] \right\} + \frac{\kappa \eta_\tau^2}{2} \ln \left[1 + \left(\frac{\eta}{\eta_\tau} \right)^2 \right], \quad (1.36)$$

де $S_{c0} \equiv (A_\eta A_h)^{-1}$. Згідно з рисунком 1.6а за малих значень S_e залежність $V(\eta)$ має монотонно зростаючий вигляд, показаний кривою 1 із мінімумом у точці $\eta = 0$. За умови значення

$$S_c^0 = S_{c0} \left[1 + \frac{\eta_\tau^2}{\eta_m^2} (\kappa - 1) + 2 \frac{\eta_\tau}{\eta_m} \sqrt{\kappa \left(1 - \frac{\eta_\tau^2}{\eta_m^2} \right)} \right] \quad (1.37)$$

з'являється плато (крива 2), яке в разі $S_e > S_c^0$ трансформується в мінімум, що відповідає значенню параметра порядку $\eta_0 \neq 0$, і максимум, що розділяє мінімуми впорядкованої та неупорядкованої фаз (крива 3). Із подальшим зростанням параметра нерівноважності S_e мінімум упорядкованої фази заглиблюється, а висота міжфазного бар'єру спадає,

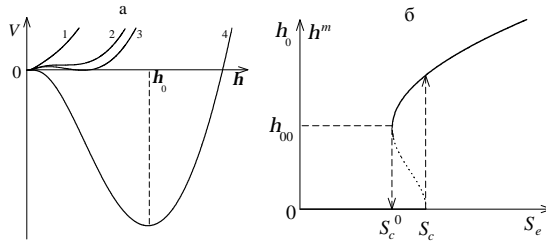


Рисунок 1.6 — а — вид залежності синергетичного потенціалу від параметра порядку в разі різних значень S_e : 1 — $S_e < S_c^0$; 2 — $S_e = S_c^0$; 3 — $S_c^0 < S_e < S_c$; 4 — $S_e \geq S_c$; б — залежність стаціонарних значень параметра порядку від параметра накачування S_e (суцільна крива відповідає стійкому стану η_0 , пунктирна — нестійкому η^m)

набуваючи нульового значення при критичному

$$S_c = S_{c0}(1 + \kappa). \quad (1.38)$$

У разі, якщо $S_e \geq S_c$ залежність $V(\eta)$ має той самий вигляд, що й для фазового переходу другого роду (крива 4 на рис. 1.6а). Стаціонарні значення параметра порядку мають вигляд (рис. 1.6б)

$$\eta_0^m = \eta_{00} \left\{ 1 \mp \left[1 + \left(\frac{\eta_m \eta_\tau}{\eta_{00}^2} \right)^2 \frac{S_e - S_c}{S_{c0}} \right]^{1/2} \right\}^{1/2}, \quad (1.39)$$

$$\eta_{00}^2 \equiv \frac{1}{2} \left[\left(\frac{S_e}{S_{c0}} - 1 \right) \eta_m^2 - (1 + \kappa) \eta_\tau^2 \right]. \quad (1.40)$$

Верхній знак відповідає нестійкому стану η^m , за якого синергетичний потенціал має максимум, нижній — стійкому η_0 . Як видно з рисунка 1.6б, у разі повільного збільшення параметра нерівноважності в точці $S_e = S_c$ відбувається стрибок параметра η_0 від нуля до $\sqrt{2}\eta_{00}$, а потім його значення зростає плавно. У разі зворотного спадання S_e від великих значень параметр порядку η_0 плавно зменшується до точки $S_e = S_c^0$, $\eta_0 = \eta_{00}$, а потім стрибком набуває нульового значення. Даний гістерезис обумовлений енергетичним бар'єром властивим переходу першого роду та виявляється при величинах параметра $\alpha \equiv \eta_\tau / \eta_m$

менше значення 1. Зі збільшенням швидкості зміни параметра нерівноважності петля гістерезису звужується.

Вимірюючи величини η, S, h в одиницях η_m, S_c (див. (1.10), (1.13)) та

$$h_m \equiv \eta_m / A_\eta = A_\eta^{-1} (A_h A_S)^{-1/2}, \quad (1.41)$$

розглянемо різні граничні співвідношення часів релаксації τ_0, τ_h, τ_S . Водночас у початковому рівнянні (1.5) ефективний час релаксації τ_η задається рівністю (1.35).

1.1.4.1 Випадок $\tau_h \ll \tau_0, \tau_S$

Вважаючи в (1.6) $\dot{h} = 0$, знаходимо зв'язок (1.17) у вигляді $h = S\eta$. Його підстановка в рівняння (1.5) приводить до виразу (час вимірюваний в одиницях τ_0)

$$\dot{\eta} = -\eta \left[(1 - S) + \kappa (1 + \eta^2 / \alpha^2)^{-1} \right], \quad (1.42)$$

що відрізняється від (1.18) наявністю останнього доданка. Друге рівняння, яке впливає з (1.7), має той самий вигляд (1.19), що й вище.

Фазовий портрет системи (1.42), (1.19) має три особливі точки $D(s, 0), O(S_-, \eta_-), S(S_+, \eta_+)$ [3]. При $s = S_e / S_{c0} < s_c$ точка D представляє стійкий вузол, а при $s > s_c$ — сідло. В інтервалі $S_c^0 < S < S_c$ реалізації фазового переходу першого роду точка S є сідлом, а O — притягаючим вузлом або фокусом.

Наведені дані показують, що зі зростанням параметра нерівноважності S_e фазовий портрет системи змінюється (див. рис. 1.7). При $S_e < S_c^0$, коли залежність (1.36) має монотонно зростаючий вигляд, точки S, O не реалізуються, а D являє собою стійкий вузол, що відповідає неупорядкованій фазі. До того ж, фазовий портрет має вигляд, властивий фазовому переходу другого роду (див. рис. 1.3а). Під час перевищення характерного значення (1.37) у системі відбувається біфуркація, що полягає в появі сідла S і стійкого вузла/фокуса O . У разі збільшення параметра нерівноважності S_e сідло, що відповідає енергетичному бар'єру на залежності $V(\eta)$, наближається до вузла D і в точці S_c поглинає його. Подальше збільшення параметра нерівнова-

жності дає картину, що відповідає впорядкованій фазі для фазового переходу другого роду.

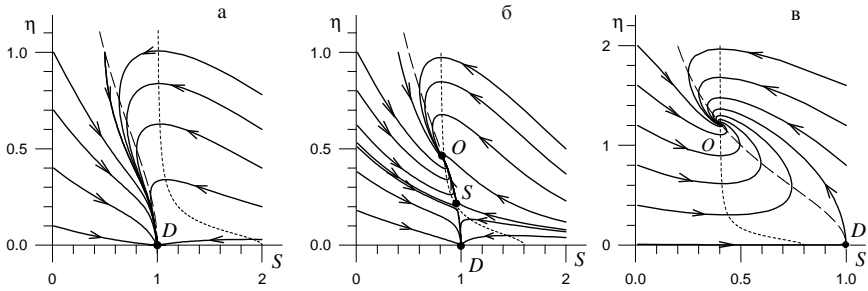


Рисунок 1.7 — Зміна виду фазових портретів з температурою для фазового переходу першого роду ($\kappa = 1, \alpha = 0.1, \tau_h \ll \tau_\eta = \tau_S$): а — $S_e = S_{c0}$; б — $S_e = 1.25S_{c0}$; в — $S_e = 2.5S_{c0}$

На рисунку 1.8 показано, як саме змінюється фазовий портрет упорядкованої фази ($S_c^0 < S_e < S_c$) зі збільшенням відношення часів релаксації $\tau = \tau_S/\tau_0$. Порівнюючи з рисунком 1.4, бачимо, що в навколо точки O поведінка є практично такою самою, що й для фазового переходу другого роду: в адиабатичній границі $\tau_S \ll \tau_0$ траєкторії швидко збігаються до універсальної ділянки MOS (рис. 1.8а), а в протилежній границі $\tau_S \gg \tau_0$ виявляється режим затухаючих коливань (рис. 1.8в). Єдина відмінність полягає в появі сепаратриси в області малих значень параметра порядку, що відображає наявність бар'єру на залежності $V(\eta)$. Дослідження часових залежностей шляху l , пройденого точкою по траєкторії, показує (див. рис. 1.5б), що як у разі фазового переходу другого роду тут відбувається уповільнення поблизу *русла великої річки MOS*, яке відповідає околиці мінімуму впорядкованої фази.

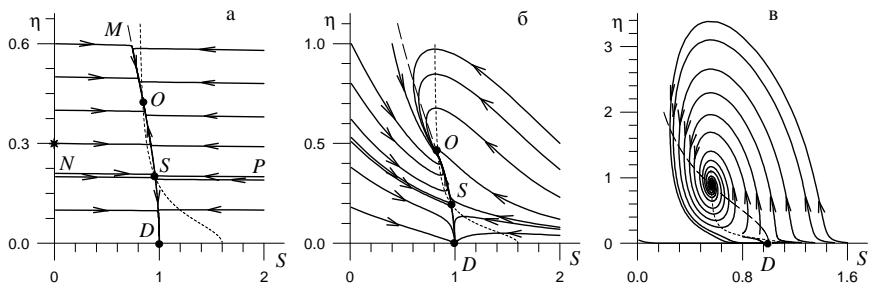


Рисунок 1.8 — Фазові портрети для фазового переходу першого роду ($\kappa = 1, \alpha = 0.1$): а - $S_e = 1.25S_{c0}, \tau_h \ll \tau_\eta = 10^2\tau_S$; б - $S_e = 1.25S_{c0}, \tau_h \ll \tau_\eta = \tau_S$; в - $S_e = 1.8S_{c0}, \tau_h \ll \tau_S = 10\tau_\eta$

1.2 Нерівноважні переходи

1.2.1 Основні визначення

У даному підрозділі буде досліджено самоорганізацію нелінійних систем в умовах стохастичності [3, 4, 7, 8]. Самоорганізація — це виникнення нових індукованих флуктуаціями стаціонарних станів. Така поведінка реалізується за механізмом фазових перетворень. Оскільки вони протікають у сильно нерівноважних системах під дією стохастичних потоків, то їх називають нерівноважними переходами. Особливо для них існує визначення *індуковані шумом переходи*, за яких густина ймовірності розподілення станів демонструє зміну кількості екстремумів. Із загального погляду границю малих флуктуацій (шумів) розглядають як рівноважний фазовий перехід. За великих інтенсивностей шуму потрібно враховувати обмінні потоки й, що система є нерівноважною. Такі перетворення подають біфуркаційною діаграмою. За визначених умов система випробовує лише кількісні зміни, проте під час її переходу через критичний стан відбувається якісна зміна поведінки у виді переходів 1-го та 2-го родів. Зовнішні флуктуації вимагають опису системи випадковою величиною. Перехід відбувається, коли актуальна якісна зміна випадкової величини, що відображує простір елемен-

тарних подій Ω у простір станів $[m_1, m_2]$. Тому *перехід відбувається, коли характер цієї функції якісно змінюється*.

Згідно з теорією рівноважних переходів, якісна зміна системи простежується за зміною кількості екстремумів стаціонарної густини ймовірності $p_s(x)$. Статистичні моменти в цьому разі не мають інформації як усереднені величини. Макроскопічні стани (фази) демонструють максимуми функції розподілення (найбільш імовірні стани). Однак максимуми не завжди описують стаціонарне розподілення ймовірності. Зовнішні флуктуації є макроскопічними й порівняні з внутрішнім шумом, що приводить до розмиття перехідної зони та піків, але дає можливість експериментального спостереження. Кількість і положення екстремумів $p_s(x)$ подають особливості стаціонарної поведінки в стохастичному випадку.

Екстремуми $p_s(x)$ важливі з погляду ергодичної теореми, оскільки для ергодичного процесу значення $p_s(x)dx$ подає час, упродовж якого система знаходиться поблизу точки x . Тому максимуми $p_s(x)$ відповідають станам, у яких система довго спостерігається. Густина ймовірності у квазігібсівському вигляді

$$p_s(x) = N \exp(-2U_{ef}(x)/\sigma^2) \quad (1.43)$$

задається ефективним синергетичним потенціалом

$$U_{ef}(x) = - \left[\int^x \frac{f(x')}{g^2(x')} dx' - \nu \frac{\sigma^2}{2} \ln g(x) \right] \quad (1.44)$$

із дрейфовою $f(x) = -dV(x)/dx$ та дифузійною $g(x)$ компонентами. У цьому разі максимуми $p_s(x)$ відповідають мінімумам $U_{ef}(x)$; $\nu = 2$ відповідає численню Іто, $\nu = 1$ – Стратоновича [7, 8]. Під час адитивного шуму $g(x) = \text{const}$ та

$$U_{ef}(x) = V(x). \quad (1.45)$$

Мінімуми потенціалів (максимуми $p_s(x)$) характеризують стійкі стани, тоді як максимуми потенціалів (мінімуми $p_s(x)$) відповідають нестійким станам. Як і для рівноважних переходів, максимуми $p_s(x)$ описують макроскопічні фази, що є експериментально спостережуваними. Під впливом зовнішніх флуктуацій система змінює фазовий стан швидше ніж у разі внутрішніх шумів.

Екстремуми функції розподілення $p_s(x)$ завжди відповідають детермінованим станам лише в разі білого шуму. Адитивний шум викликає лише зміщення екстремальних значень по ландшафту потенціалу, тобто має дезорганізувальний характер. Мультиплікативний шум $g(x) \neq \text{const}$ визначається станом системи, тобто частинка коливається не лише в потенціальному рельєфі, але й окремі ділянки потенціалу можуть випадково підійматися та опускатися, і частинка переходить між мінімумами. За умови малого шуму мінімуми потенціалу можуть підводитися, але залишаються мінімумами, а максимуми опускаються, але є максимумами. Система за цієї умови може знаходитися в стані, що відповідає вищій потенціальній ямі. За великих інтенсивностей шумів та істотній нелінійності $f(x)$ і $g(x)$ поведінка може змінитися. Мультиплікативний шум приводить до появи нових мінімумів, тобто виникнення фазового переходу та *утворення нових станів*. Він генерує нерівноважні переходи, що не можна прогнозувати в межах детерміністичного (феноменологічного) підходу. Із фізичного погляду система не пристосовується до середніх властивостей середовища, а поводить активним чином. Такі переходи мають назву *індуковані шумом переходи*. Термін «фаза» не використовують, оскільки випадкова величина x однорідна в просторі (нуль-вимірна система) та макроскопічні стани не мають меж. Звичайна ж термодинамічна фаза спостерігається в розподілених системах та обов'язково має межі. Отже, як у термодинаміці для макроскопічних станів можна використати споріднене визначення «фаза».

1.2.1.1 Випадок малого білого шуму

Слідуючи [7, 8], розглянемо границю малого білого шуму $\sigma^2 \ll 1$ та введемо позначення

$$U(x) = - \int^x \frac{f(u)}{g^2(u)} du.$$

Стационарне розподілення набуває вигляду

$$p_s(x) = N \exp\left(-\frac{2}{\sigma^2}U(x_0)\right) \exp\left(\frac{2}{\sigma^2}[-U(x) + U(x_0) - \frac{\nu\sigma^2}{2} \ln g(x)]\right), \quad (1.46)$$

де x_0 – координата найменшого мінімуму функції $U(x)$. Якщо $\sigma^2 \rightarrow 0$ при $x \neq x_0$, найбільший внесок у стаціонарну густину ймовірності вносить окіл головного мінімуму функції $U(x)$. Метод якнайшвидшого спуску дає

$$\langle x \rangle = x_0 - \frac{\sigma^2}{2U''(x_0)} \left(\frac{1}{2} \frac{U'''(x_0)}{U''(x_0)} - \frac{g'(x_0)}{g(x_0)} \right), \quad (1.47)$$

$$\sigma_x^2 \equiv \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle = \frac{2\sigma^2}{U''(x_0)}. \quad (1.48)$$

У разі адитивного шуму мінімуми вихідного потенціалу $V(x)$ відповідають мінімумам потенціалу $U(x)$. У цьому разі достатньо провести аналіз детермінованого рівняння еволюції для дослідження стійкості всіх стаціонарних локальних станів. Крім найглибшого мінімуму $V(x)$, усі локальні мінімуми являють метастабільні стани. Під час мультиплікативного шуму мінімуми вихідного потенціалу можуть не відповідати мінімумам потенціалу $U(x)$, тобто детермінований опис не має інформації.

1.2.1.2 Визначення границь дифузійного процесу

У фізичних задачах простір станів випадкового процесу не завжди є всією дійсною віссю \mathbb{R} [7, 8]. Наприклад, процес обмежений додатною підмножиною дійсної осі \mathbb{R}_0^+ (якщо стохастична величина є густиною речовини). Вважається, що простір станів дифузійного процесу знаходиться в інтервалі $[m_1, m_2]$, де одна або обидві границі можуть бути нескінченними. Крім того, функції $f(x)$ та $g(x)$ у рівнянні Ланжевена, задовольняють умову Ліпшица на довільному відрізку $[\overline{m}_1, \overline{m}_2]$ інтервалу (m_1, m_2) , тобто існує визначена стала K , така, що

$$|f(x) - f(y)| + |g(x) - g(y)| \leq K|x - y|, \quad x, y \in [\overline{m}_1, \overline{m}_2]. \quad (1.49)$$

Ця нерівність виконується, якщо функції $f(x)$ та $g(x)$ є неперервно диференційованими. У разі, коли процес не досягає границь, його називають найкращим дифузійним процесом і його простір станів не обмежується, а границі є недосяжними.

Недосяжні границі. Природні границі при $t \rightarrow \infty$ досягаються лише з нульовою ймовірністю. Нехай β – точка поблизу однієї із меж (m_1) та початковий стан $x_0 \in (m_1, \beta)$.

Природна границя, реалізується, якщо з імовірністю 1 дифузійний процес досягає точки β раніше, ніж точки m_1 . Отже, границя m_1 ніколи не буде досягнута, якщо процес Z_t , досягнувши точки β , повертається у відрізок (m_1, β) та з імовірністю одиниця Z_t досягне β ще раз раніше за m_1 .

Класифікацію границь здійснюють на основі інтегрування визначених функцій, зокрема

$$\phi(x) = \exp\left(-\int_{\beta}^x \frac{2f(y)}{\sigma^2 g^2(y)} dy\right). \quad (1.50)$$

Формально, m_1 природна границя, коли $\Phi_1(m_1)$,

$$\Phi_1(m_1) = \int_{m_1}^{\beta} \phi(x) dx = \infty. \quad (1.51)$$

Нехай за умови, що $t = 0$ процес знаходиться в точці $x_0 \in (m_1, \beta)$.

Границя є притягувальною, коли процес виходить з інтервалу (m_1, β) за кінцевий час, причому через β , або знаходиться в ньому, тоді $x(t) \rightarrow m_1$ при $t \rightarrow \infty$. Водночас справедливі умови:

$$\begin{aligned} \Phi_1(m_1) &= \int_{m_1}^{\beta} \phi(x) dx < \infty, \\ \Phi_2(m_1) &= \int_{m_1}^{\beta} \frac{dx}{\sigma^2 g^2(x)} \int_{m_1}^x \phi(x) \phi^{-1}(y) dy = \infty. \end{aligned} \quad (1.52)$$

Якщо $\Phi_1(m_i) \neq \infty$ та $\Phi_2(m_i) \neq \infty$, то з імовірністю відмінною від нуля траєкторії можуть досягати m_i за кінцевий час. Отже, процес відчуває границю, а його поведінка залежить не лише від дрейфової та дифузійної складових, але й граничних умов.

Типи граничних умов:

- *поглинання* – досягнувши границі m_i , дифузійний процес залишається в ній;

- *віддзеркалення* – досягнувши границі m_i , дифузійний процес неперервно або миттєво повертається у відрізок (m_1, m_2) (миттєве віддзеркалення) або знаходиться певний час на межі (відображення із запізненням);
- *віддзеркалення з відскоком* – досягнувши границі m_i , дифузійний процес різко повертається у випадкову точку відрізка (m_1, m_2) .

Поєднання цих умов приводять до більш складних граничних умов.

Досяжна границя називається поглинальною, якщо $\Phi_1(m_i) < \infty$ та $\Phi_2(m_i) < \infty$ за умови справедливості рівності

$$\Phi_3(m_1) = \int_{m_1}^{\beta} \frac{1}{\sigma^2 g^2(x)} \phi^{-1}(x) dx = \infty. \quad (1.53)$$

Таким чином, у разі початкового стану $x_0 \in (m_1, \beta)$ ймовірність досягнення точки β дорівнює нулю при $x_0 \rightarrow m_1$.

Границя регулярна в разі $\Phi_1(m_i) < \infty$, $\Phi_2(m_i) < \infty$, $\Phi_3(m_i) < \infty$. При цьому можуть накладатися довільні обмеження.

1.2.2 Модель популяційної динаміки Мальтуса – Ферхюльста

Термін «індукований шумом фазовий перехід» уперше з'явився під час розгляду біологічної популяції в моделі Мальтуса – Ферхюльста [7, 8]. Рівняння еволюції біологічної популяції, заданої чисельністю $x \in [0, \infty)$, має вигляд:

$$\dot{x} = \alpha x - x^2, \quad (1.54)$$

де параметр зростання Мальтуса α – різниця між смертністю й народжуваністю особин. Другий доданок описує автономне зменшення популяції. Розв'язком цього рівняння є

$$x(t) = \frac{x(0)e^{\alpha t}}{1 + x(0)[(e^{\alpha t} - 1)/\alpha]}. \quad (1.55)$$

За умови $\alpha < 0$ маємо стійкий розв'язок $x = 0$, а для $\alpha = 0$ унаслідок біфуркації генерується стаціонарний розв'язок $x = \alpha$.

Нехай флуктуації середовища відбуваються швидко порівняно з часом релаксації системи $\tau_{macro} = \alpha^{-1}$. Оскільки середовище впливає через керувальний параметр, припустимо, що останній флюктує з амплітудою σ в околі середнього значення

$$\alpha \rightarrow \alpha(t) = \alpha + \sigma\xi(t). \quad (1.56)$$

Тоді одержуємо рівняння Ланжевена

$$\dot{x} = \alpha x - x^2 + \sigma x \xi(t) = f(x) + g(x)\xi(t). \quad (1.57)$$

Моменти білого шуму $\xi(t)$ визначаються так:

$$\langle \xi(t) \rangle = 0, \quad \langle \xi(t)\xi(t') \rangle = \delta(t - t'). \quad (1.58)$$

Відповідне до (1.57) рівняння Фоккера – Планка записується так:

$$\frac{\partial}{\partial t} p(x, t) = -\frac{\partial}{\partial x} (\alpha x - x^2 + (2-\nu)\frac{\sigma^2}{2}x) p(x, t) + \frac{\sigma^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} x^2 p(x, t). \quad (1.59)$$

Оскільки процес відбувається в додатному просторі, то 0 та $+\infty$ є внутрішніми границями процесу, якщо $g(0) = 0$, $f(\infty) = -\infty$. Вони також природні

$$\Phi_1(0) = C \int_0^\beta x^{-2\alpha/\sigma^2 - 2 + \nu} \exp(2x/\sigma^2) dx = \infty, \quad (1.60)$$

$$\Phi_1(\infty) = C \int_0^\infty x^{-2\alpha/\sigma^2 - 2 + \nu} \exp(2x/\sigma^2) dx = \infty. \quad (1.61)$$

Границя $+\infty$ природна для довільних α , σ^2 . При $\alpha > \sigma^2(\nu - 1)/2$ нуль – природна. Для $\alpha < \sigma^2(\nu - 1)/2$ виконується

$$\Phi_2(0) = \infty, \quad (1.62)$$

тому 0 – притягувальна границя.

У стаціонарному випадку маємо розв'язок рівняння Фоккера – Планка у вигляді:

$$p_s(x) = Nx^{2\alpha/\sigma^2 - \nu} \exp\left(-\frac{2x}{\sigma^2}\right). \quad (1.63)$$

Густина ймовірності є інтегрованою за умови

$$2\alpha/\sigma^2 - \nu + 1 > 0, \quad (1.64)$$

що еквівалентно $\alpha > \sigma^2(\nu - 1)/2$ і визначає природність границі $m_1=0$. Нормуюча константа записується як

$$N^{-1} = \left(\left[\frac{2}{\sigma^2} \right]^{2\alpha/\sigma^2 - \nu + 1} \right)^{-1} \Gamma(2\alpha/\sigma^2 - \nu + 1). \quad (1.65)$$

За неможливості нормування необхідно врахувати, що точка $x = 0$ є стаціонарною, й оскільки вона притягувальна, то вся система знаходиться в нулі. Математично це описують дельта-функцією за умови $\alpha < (\nu - 1)\sigma^2/2$, тобто

$$p_s(x) = \delta(x). \quad (1.66)$$

Можливі стани визначаються параметром порядку згідно з рівнянням екстремумів

$$\alpha x_0 - x_0^2 - \frac{\nu\sigma^2}{2} x_0 = 0, \quad (1.67)$$

що має розв'язки

$$x_0^{(1)} = 0, \quad x_0^{(2)} = \alpha - \nu\sigma^2/2. \quad (1.68)$$

Другий корінь реалізується за $\alpha > \nu\sigma^2/2$ й завжди максимум. Корінь $x_0^{(1)}$ являє собою максимум за $0 < \alpha < \nu\sigma^2/2$.

Можна сказати, що реалізується два типи переходів індукованих шумом (рис. 1.9). Перше перетворення при $\alpha_c^{(1)} = \sigma^2(\nu - 1)/2$ пов'язане з тим, що змінюється вид границі дифузійного процесу. При $\alpha \gtrsim \alpha_c^{(1)}$

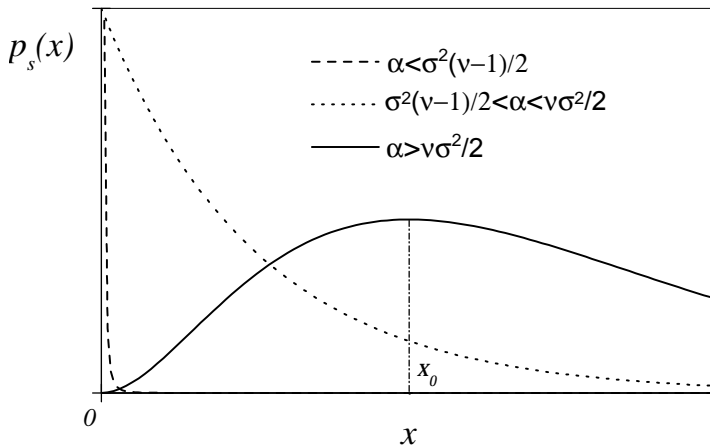


Рисунок 1.9 — Густина ймовірності в моделі Мальтуса – Ферхюльста [7, 8]

дельта-функція починає розмиватися вправо, і точка нуль перестає бути стійкою, хоча є найімовірнішою. Друге перетворення актуальне за $\alpha > \alpha_c^{(2)} = \sigma^2\nu/2$. У цьому разі на стаціонарній густині ймовірності реалізується новий максимум та індукована шумом фаза. Отже, за постійного стану середовища здійснюється перехід системи в нову фазу за рахунок лише зміни інтенсивності шуму в середовищі.

Відповідно до відомого розподілення (в численні Стратоновича) можна одержати

$$\begin{aligned}
 \langle x \rangle &= \alpha, & \langle x^2 \rangle &= \alpha^2 + \alpha\sigma^2/2, \\
 \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle &\equiv \langle (\delta x)^2 \rangle &= \alpha\sigma^2/2,
 \end{aligned}
 \tag{1.69}$$

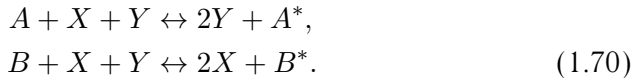
тобто статистичні моменти не змінюються під час переходу через критичні величини керувального параметра. Тому лише за екстремумами густини ймовірності можна виявити другу точку перетворення (перша пов'язана зі зміною характеру межі). Зазначимо, що другий перехід відповідає $\langle x \rangle = \langle (\delta x)^2 \rangle$.

Під час першого переходу реалізується перетворення від виродженої випадкової величини до достовірно випадкової. Його можна

спостерігати за величиною дисперсії (ширини розподілення) чи за рівнянням еволюції в лінійному наближенні (стаціонарна точка втрачає стійкість). Друге перетворення пов'язане з внутрішньою нелінійністю системи. Її стан задається взаємодією нелінійної динаміки та зовнішнього шуму, що вже не є величиною $O(V^{-d})$. Останній перехід є *індукованим шумом зсувом* — зсувом детермінованого перетворення. Індуковані шумом перетворення типу зсуву реалізуються в точках втрати стійкості систем, на яких діє мультиплікативний білий шум.

1.2.3 Модель генного відбору Арнольда, Хорстхемке, Лефевра

Розглянемо фазове перетворення, що відбувається лише за рахунок дії шуму — істинний індукований шумом перехід. Прикладом найпростішої моделі цього типу є модель, уперше сформульована Арнольдом, Хорстхемке, Лефевром [7, 8]. Це модель хімічної реакції речовин X, Y за умови, що зберігається повна кількість молекул $N = X + Y = \text{const}$



Еволюція відношення кількості молекул X до загальної кількості частинок описується детермінованим рівнянням

$$\dot{x} = \chi - x + \alpha x(1 - x), \quad x \in [0, 1], \quad (1.71)$$

де x — параметр стану, α — керувальний параметр (властивість середовища). У разі, коли $\chi = 1/2$, детермінований стаціонарний стан описується розв'язком

$$x_s = [\alpha - 1 + \sqrt{\alpha^2 + 1}]/2\alpha, \quad (1.72)$$

що є глобально стійким, незалежно від α .

Нехай на систему діють швидкі зовнішні флуктуації, тобто $\alpha \rightarrow \alpha + \sigma\xi(t)$. У межі дельта-корельованого гаусівського шуму рівняння Ланжевена має вигляд

$$\dot{x} = 1/2 - x + \alpha x(1-x) + \frac{\sigma^2}{2} x(1-x)(1-2x) + \sigma x(1-x)\xi(t). \quad (1.73)$$

Границі дифузійного процесу $m_1 = 0$, $m_2 = 1$ за визначенням внутрішні та природні. Стаціонарна густина ймовірності подається виразом

$$p_s(x) = Nx^{-1}(1-x)^{-1} \exp\left(\frac{2}{\sigma^2} \left[-\frac{1}{2x(1-x)} - \ln((1-x)x)\right]\right), \quad (1.74)$$

де нормувальна константа при $\alpha = 0$:

$$N = \frac{1}{2} \exp(2/\sigma^2) K_0^{-1}(2/\sigma^2), \quad (1.75)$$

K_0 – модифікована функція Бесселя.

Характер границь не змінюється, тому переходи описуються екстремумами густини ймовірності на основі рівняння

$$\frac{1}{2} - x_0 + \alpha x_0(1-x_0) - \frac{\sigma^2}{2} x_0(1-x_0)(1-2x_0) = 0. \quad (1.76)$$

За умови, якщо $\alpha = 0$, детерміністичне рівняння дає розв'язок $x_s = 1/2$. У разі швидких флуктуацій (1.76) приводить до станів (рис. 1.10)

$$x_0^{(1)} = 1/2, \quad x_0^{(2,3)} = (1/2)[1 \pm (1 - 4/\sigma^2)^{1/2}]. \quad (1.77)$$

У разі $\alpha \neq 0$ вплив поля викликає асиметрію функції розподілення, хоча якісних змін не спостерігається. Підвищення інтенсивності флуктуацій спричиняє появу максимумів, тобто переходи є шумовими. За умови $\alpha = 0$ маємо неперервне перетворення другого роду. При $\sigma^2 > \sigma_c^2$ функція розподілення є двомодовою й для відстані між максимумами одержуємо

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0} [x_0^{(2)}(\sigma^2 + \epsilon) - x_0^{(3)}(\sigma^2 + \epsilon)] \sim (\sigma^2 - \sigma_c^2)^{1/2} \rightarrow 0. \quad (1.78)$$

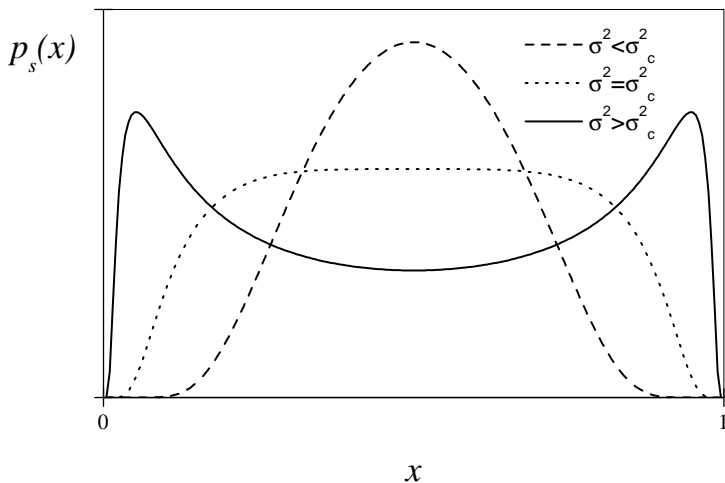


Рисунок 1.10 — Густина ймовірності в моделі генного відбору [7, 8]

Отже, зовнішні гаусівські флуктуації викликають критичну поведінку в точці $\alpha = 0$, $x_0^{(1)} = 1/2$, $\sigma^2 = 4$. У разі зміни значення α один із максимумів функції розподілення зсувається в різних напрямках залежно від знака α . Під час переходу рівня шуму через критичну точку механізм фазового перетворення змінюється, спостерігається гістерезис і реалізується перехід першого роду. Можна зробити висновок, що мультиплікативні флуктуації можуть бути організуючими й робити стабільними макроскопічні фази.

1.2.3.1 Особливості критичної поведінки

Щоб дослідити критичну поведінку використовується параметр порядку. Він в індукованих шумом переходах визначається положенням екстремуму функції густини ймовірності й тут має вигляд $\eta \equiv |x_0 - 1/2|$. Інтенсивність шуму відповідає температурі, а параметр середовища α — спряженому полю h [7, 8].

Рівняння екстремумів визначає показник β . При $\sigma^2 \rightarrow 4$ одержуємо $\beta = 1/2$ оскільки

$$\eta = \frac{1}{2}[(\sigma^2 - 4)/\sigma^2]^{1/2} \sim (\sigma^2 - \sigma_c^2)^{1/2}. \quad (1.79)$$

Розглядаючи систему при $\alpha \ll 1$, знаходимо критичний показник δ . Відповідно рівняння екстремумів при $\sigma^2 = \sigma_c^2 = 4$ дає

$$\eta^3 + \frac{\alpha}{4}\eta^2 - \frac{\alpha}{16} = 0. \quad (1.80)$$

Далі розв'язання кубічного рівняння для найістотніших компонент приводить до $\delta = 1/3$, оскільки

$$\eta \sim \alpha^{1/3}. \quad (1.81)$$

Обчислення сприйнятливості $\chi = (\partial\eta/\partial\alpha)|_{\alpha=0}$ дає показник γ . За допомогою диференціювання кубічного рівняння екстремумів за α , одержуємо асимптоту:

$$\chi(\sigma^2) \sim (\sigma^2 - \sigma_c^2)^{-1}. \quad (1.82)$$

Тобто нижче точки переходу ($\sigma^2 < \sigma_c^2$) індекси збігаються $\gamma = \gamma' = 1$.

Можна зробити висновок, що критичні показники індукованої точки дорівнюють класичним. Отже, опис рівноважних, нерівноважних та індукованих шумом перетворень проводиться як єдиного фундаментального явища — фазового перетворення.

1.2.4 Модель із шумом довільної інтенсивності

Під дією мультиплікативного шуму можуть як виникати нові екстремуми густини ймовірності, так і нескінченно зростати значення функції розподілення в околі особливих точок [7]. Зокрема, у точці $x = 0$ в моделі популяційної динаміки. Ця особливість може бути не інтегрованою, тоді нормування не є можливим, а поведінка системи задається границею дифузійного процесу. Звідси випливає, що в стохастичній системі є актуальною детерміністична конденсація — обмежена частина ступенів свободи (можливі часові залежності $x(t)$) зводиться

до $x(t) = 0$. Відповідно, виникає питання: як саме буде відбуватися перерозподілення між максимумами відповідними детерміністичному та впорядкованому станам?

Мета полягає в дослідженні особливостей рівноважного розподілення [7]

$$p(x) = Z^{-1} \exp\left(-\frac{U_{ef}(x)}{T}\right). \quad (1.83)$$

Будемо апроксимувати синергетичний потенціал x^4 -моделлю Ландау

$$V(x) = \frac{A}{2}x^2 + \frac{B}{4}x^4, \quad (1.84)$$

$$A = \alpha(T - T_c), \quad (1.85)$$

де $\alpha, T_c, B > 0$ – сталі, T – інтенсивність шуму, що відіграє роль температури. Для опису особливостей поблизу точки $x = 0$ для мультиплікативної функції приймемо

$$g(x) = 2^{1/2}x^a, \quad (1.86)$$

де $0 \leq a \leq 1$ – довільний показник. Тоді стаціонарний ефективний синергетичний потенціал має вигляд

$$U_{ef}(x) = 2Ta \ln x + U(x), \quad (1.87)$$

$$U(x) = \frac{A}{2(1-a)}x^{2(1-a)} + \frac{B}{2(2-a)}x^{2(2-a)}. \quad (1.88)$$

Характерна риса систем із мультиплікативним шумом подається неаналітичним виглядом (1.88) перенормованого потенціалу $U(x)$, при тому, що вигляд вихідного $V(x)$ є найпростішим (1.84). Якщо $a = 0$, маємо адитивний шум і $U(x) = V(x)$. У разі, якщо $a = 1$, приходимо до узагальнення моделі популяційної динаміки. У нестаціонарному автотомельному режимі потенціал (1.87) набуває доданку U_μ такого самого, як і перший компонент виразу (1.88), тобто цей член можна врахувати за допомогою перенормування температури T_c у виразі (1.85).

Особливість цього переходу полягає в тому, що під час зменшення інтенсивності шуму T на розподіленні (1.83) виникають максимуми в точках $\pm x_0 \neq 0$ за умови $\partial U_{ef}(x)/\partial x = 0$ реалізації мінімумів

ефективного синергетичного потенціалу. Підстановка виразів (1.85), (1.87), (1.88) дає рівняння для координат максимуму x_0 , вимірних в одиницях $\alpha T_c/B$,

$$x_0^2 + (2a/\alpha)\Theta x_0^{-2(1-a)} = 1 - \Theta, \quad (1.89)$$

де безрозмірна температура

$$\Theta = \frac{T}{T_c}. \quad (1.90)$$

Це рівняння розв'язується лише при $\Theta < \Theta_0$. Для цього врахуємо, що в точці $\Theta = \Theta_0$ функція $U_{ef}(x)$ має нульові першу та другу похідні. Остання приводить до рівняння

$$x_0^{2(2-a)} = (2a/\alpha)(1-a)\Theta_0. \quad (1.91)$$

Вилучення з рівнянь (1.89), (1.91) значення x_0 дає вираз для температури переходу

$$\frac{(1 - \Theta_0)^{2-a}}{\Theta_0} = \frac{2a}{\alpha} \frac{(2-a)^{2-a}}{(1-a)^{1-a}}, \quad \Theta_0 = \frac{T_0}{T_c}. \quad (1.92)$$

Рисунок 1.11 подає граничну температуру T_0 залежно від показника a за різних α . Під час адитивного шуму ($a = 0$) точка переходу $T_0 = T_c$. Зменшення a в області малих значень знижує T_0 – тим більше, чим менший параметр α , що відповідає за рушійну силу переходу. Подальше збільшення a приводить T_0 до мінімуму й далі до зростання до значення (1.95) при $a = 1$. Одночасно найбільш імовірне значення $x_0(T)$ спадає з ростом T відповідно до рисунка 1.12.

Зазначимо неперервність фазового переходу в граничних випадках $a = 0$, $a = 1$, та стрибок величини x_0 у точці переходу T_0 у проміжній області. Якщо $a = 1$ замість (1.87), маємо

$$\tilde{U} = 2T \ln x + U(x), \quad U = A \ln x + (B/2)x^2. \quad (1.93)$$

Водночас імовірність (1.83) є максимальною в точці

$$x_0 = (1 - (1 + 2/\alpha)\Theta)^{1/2}, \quad \Theta \equiv \frac{T}{T_c}, \quad (1.94)$$

а відповідна інтенсивність флуктуацій

$$T_0 = (1 + 2/\alpha)^{-1}T_c. \quad (1.95)$$

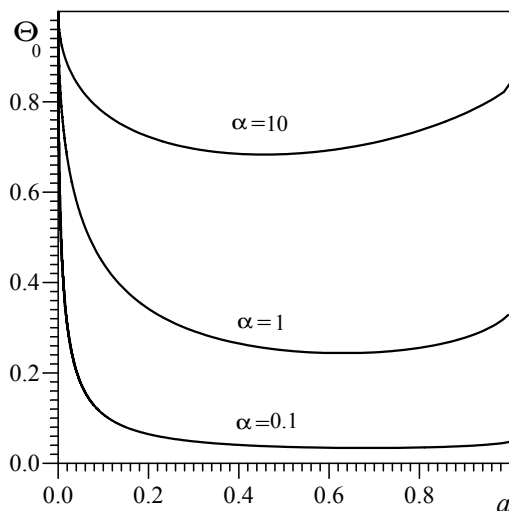


Рисунок 1.11 — Граничне значення інтенсивності флуктуацій Θ_0 залежно від показника a [7]

1.2.5 Багатопараметрична модель Лоренца – Хакена

Під час опису багатьох фазових переходів достатньо обмежитися однією гідродинамічною модою. На мікроскопічному рівні адитивний шум у стохастичному рівнянні еволюції має тепловий характер і залежить від розміру об'єкта. По-іншому стохастичність інтерпретується в разі впливу зовнішніх флуктуацій. Відповідно до детерміністичного рівняння передбачається, що керувальний параметр здійснює флуктуації поблизу середнього. У зв'язку з цим, потрібно перевіряти адекватність, одержаних таким способом моделей, тобто розглянути системи з декількома гідродинамічними ступенями вільності, що поведуться самоузгоджено та стохастично. Шукана мультиплікативна функція одержується виділенням одного з цих ступенів. Зазначимо, що багатопараметричні моделі істотно розширюють можливості опису самоорганізації під впливом зовнішнього середовища. Такою моделлю є трипараметрична система Лоренца – Хакена, що описує самоорганізацію.

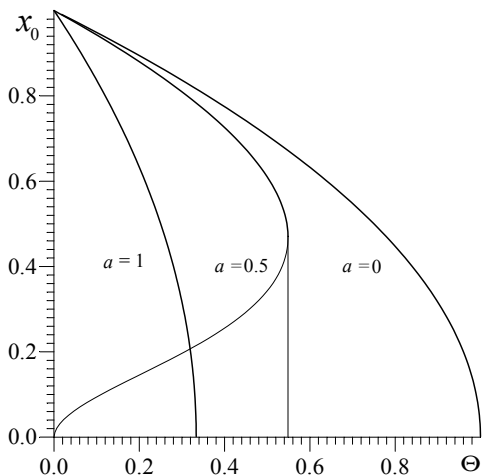


Рисунок 1.12 — Залежність найбільш імовірного значення x_0 від рівня шуму $\Theta = T/T_c$ [7]

нізацію як частковий випадок фазового переходу [3, 7] (підрозд. 1.1).

Як зазначено в підрозділі 1.1, у термодинаміці параметр порядку визначає поведінку підсистеми, що виділяється з термостата. Вплив останнього на підсистему здійснюється полем, спряженим параметру порядку, та керувальним параметром, що можуть мати, зокрема, механічний і термодинамічний характер, а зворотній зв'язок між підсистемою та термостатом відсутній. Синергетичний підхід передбачає, що підсистема є відкритою та реалізується взаємний вплив усіх ступенів вільності — параметра порядку, спряженого поля та керувального параметра. У цьому пункті розглядається синергетична трипараметрична модель з шумами кожної із зазначених мод [3, 4, 7]. Показано, що у межах принципу підпорядкування (адіабатичного наближення) внутрішні флуктуації спряженого поля та керувального параметра набувають зовнішнього характеру щодо параметра порядку.

Синергетична схема Лоренса — Хакена з параметром порядку η , спряженим полем h , керувальним параметром S та флуктуаційними

доданками має вигляд (пор. з (1.5) – (1.7)) [3, 7, 9]:

$$\dot{\eta} = -\frac{\eta}{\tau_\eta} + \gamma h + \sigma_\eta \xi, \quad (1.96)$$

$$\dot{h} = -\frac{h}{\tau_h} + g_h \eta S + \sigma_h \xi, \quad (1.97)$$

$$\dot{S} = \frac{S_e - S}{\tau_S} - g_S \eta h + \sigma_S \xi, \quad (1.98)$$

де ξ – δ -корельоване стохастичне джерело; $\sigma_\eta, \sigma_h, \sigma_S$ – інтенсивності флуктуацій відповідних величин.

Адіабатичні умови $\tau_h, \tau_S \ll \tau_\eta$ дозволяють покласти в (1.97), (1.98) $\tau_h \dot{h} \sim \tau_S \dot{S} \approx 0$, при цьому стохастичні доданки зберігаються. Ці рівняння дають вирази спряженого поля й керувального параметра залежно від параметра порядку

$$h = (1 + \eta^2 / \eta_m^2)^{-1} [A_h \eta (S_e + \sigma_S \tau_S \xi) + \sigma_h \tau_h \xi], \quad (1.99)$$

$$S = S_e - A_S \eta h + \sigma_S \tau_S \xi, \quad (1.100)$$

$$A_h = g_h \tau_h; \quad A_S = g_S \tau_S; \quad \eta_m^{-2} = A_S A_h. \quad (1.101)$$

Підстановка (1.99) у (1.96) приводить до стохастичного диференціального рівняння в інтерпретації Іто

$$\tau_\eta \dot{\eta} = -\eta + \frac{S_c^{-1} \eta (S_e + \sigma_S \tau_S \xi) + \sigma_h \tau_h \gamma \tau_\eta \xi}{1 + \eta^2 / \eta_m^2}, \quad (1.102)$$

$$S_c^{-1} = \gamma \tau_\eta g_h \tau_h. \quad (1.103)$$

Канонічну форму рівняння (1.102) одержують за допомогою розділення детерміністичної та стохастичної частин

$$\dot{\eta} = -\frac{\partial V(\eta)}{\partial \eta} + [\sigma_S g_S(\eta) + \sigma_h g_h(\eta)] \xi + \sigma_\eta \xi. \quad (1.104)$$

Тут величини вимірюються в таких одиницях: час t в τ_η ; параметр порядку в η_m ; інтенсивності шумів $\sigma_\eta, \sigma_h, \sigma_S$ в $\tau_\eta^{-1}, (\tau_\eta \tau_h \gamma)^{-1}$ та S_c / τ_S відповідно.

Розвинення за степенями $\eta^2 \ll 1$ потенціалу

$$V \equiv V(\eta) = \frac{1}{2} [\eta^2 - s \ln(1 + \eta^2)], \quad s \equiv \frac{S_e}{S_c}. \quad (1.105)$$

приводить до розвинення Ландау з параметрами $A = 1 - s, B = s \approx 1$, а мультиплікативні функції $g_S(\eta), g_h(\eta)$ записуються так:

$$g_S(\eta) = \eta g_h(\eta) = \eta (1 + \eta^2)^{-1}, \quad (1.106)$$

$$g_h(\eta) = (1 + \eta^2)^{-1}. \quad (1.107)$$

Принцип підпорядкування $\tau_h, \tau_S \ll \tau_\eta$ дозволяє звести модель Лоренца з адитивними шумами до однопараметричної системи з мультиплікативними флуктуаціями та синергетичним потенціалом (1.105) із мінімумом у точці

$$\eta_0 = \pm(s - 1)^{1/2}, \quad s = \frac{S_e}{S_c}. \quad (1.108)$$

Екстремальні (стаціонарні) точки розподілення $p(\eta)_s = Z^{-1} \exp \{-U_{ef}(\eta)\}$ системи (1.96)–(1.98) визначаються ефективним потенціалом

$$U_{ef}(\eta) = \ln g^2(\eta) - 2 \int \frac{\partial V / \partial \eta}{g^2(\eta)} d\eta \quad (1.109)$$

із потенціалом (1.105) і квадратом мультиплікативної функції

$$g^2(\eta) = \sigma_\eta^2 + \sigma_h^2 g_h^2(\eta) + \sigma_S^2 g_S^2(\eta). \quad (1.110)$$

Останній вираз впливає із властивості адитивності квадратів дисперсій незалежних випадкових величин, що мають нормальне розподілення. Формули (1.105)–(1.107), (1.109), (1.110) дозволяють одержати явний вигляд потенціалу $U_{ef}(\eta)$ та рівняння стаціонарних станів:

$$z^3 - sz^2 - \sigma_S^2 z + 2(\sigma_S^2 - \sigma_h^2) = 0, \quad z \equiv 1 + \eta^2. \quad (1.111)$$

Отже, екстремуми визначаються параметром зовнішньої дії s та величинами інтенсивностей σ_S^2, σ_h^2 мультиплікативних флуктуацій.

1.2.5.1 Синергетичний перехід при адитивних флуктуаціях

У найпростішому прикладі, коли $\sigma_\eta = \sigma_h = \sigma_S = 0$, рівняння (1.96)–(1.98) набувають вигляду детерміністичної моделі Лоренца, а стохастичне рівняння (1.104) записується у формі

$$\dot{\eta} = -\eta \left(1 - \frac{s}{1 + \eta^2} \right). \quad (1.112)$$

Уведення змінної $z = 1 + \eta^2$ дає

$$dt = \frac{-2zdz}{z^2 - z(s+1) + s}, \quad (1.113)$$

звідки одержуємо

$$t = -\ln \left[(z^2 - (s+1)z + s) \left(\frac{z-s}{z-1} \right)^{(s+1)/(s-1)} \right]. \quad (1.114)$$

Видно, що за умови $s < 1$ система переходить у стан $\eta_0 = 0$, а при $s > 1$ – в $\eta_0 \neq 0$. У статистичній фізиці фази $\eta_0 = 0$ і $\eta_0 \neq 0$ називаються симетричною та несиметричною. Стаціонарна густина ймовірності характеризується одним максимумом при $\eta_0 = 0$ у першому прикладі та двома максимумами в точках (1.108) – у другому. За відсутності флуктуацій ці максимуми δ -подібні:

$$p(\eta)_s \propto \delta\{dV/d\eta\}. \quad (1.115)$$

Адитивний шум параметра порядку ($\sigma_\eta \neq 0, \sigma_h = \sigma_S = 0$) не змінює положення стаціонарних станів. Водночас голкоподібні максимуми функції розподілення стають колоколоподібними з шириною залежною від рівня шуму параметра порядку

$$p(\eta)_s = Z^{-1} \exp\{-V(\eta)/\sigma_\eta^2\}. \quad (1.116)$$

1.2.5.2 Синергетичний перехід при мультиплікативному шумі

Інтегральний внесок $U(\eta)$ в ефективному потенціалі (1.109) за умови, якщо $\sigma_\eta = 0$, дається виразом

$$U(\eta) \equiv \int \frac{\eta(1+\eta^2)(1-s+\eta^2)}{\sigma_h^2 + \sigma_S^2 \eta^2} d\eta. \quad (1.117)$$

Уведення співвідношення інтенсивностей шуму $\alpha^2 \equiv \sigma_h^2/\sigma_S^2$ та змінної $y \equiv \alpha^2 + \eta^2$ приводить (1.117) до вигляду

$$\sigma_S^2 U(y) = \frac{y^2}{4} + \left(\frac{1}{2} - \alpha^2\right)y + \frac{1}{2}(1 - \alpha^2)(1 - \alpha^2 - s) \ln y - \frac{\alpha^2}{2}. \quad (1.118)$$

Повернення до вихідних змінних і врахування того, що потенціал одержано з точністю до довільної сталої, яку можна включити в нормувальну константу густини ймовірності, дає ефективний потенціал

$$\begin{aligned} U_{ef}(\eta) &= \frac{1}{2} [(\eta^4/2) + (2 - s - \alpha^2)\eta^2 + \\ &+ (1 - \alpha^2)(1 - s - \alpha^2) \ln(\alpha^2 + \eta^2)] + \\ &+ \sigma_S^2 \ln [g_S^2(\eta) + \alpha^2 g_h^2(\eta)], \quad \alpha^2 \equiv \frac{\sigma_h^2}{\sigma_S^2}. \end{aligned} \quad (1.119)$$

1.2.5.3 Вплив стохастичності спряженого поля

Відповідно в (1.119) знаходимо ліміт при $\sigma_S \rightarrow 0$ та проводимо розвинення за σ_S із точністю до неістотної константи

$$\sigma_h^2 U_{ef}(\eta) = \frac{2^{1/2}}{3} (g_h(\eta))^{-3} - 2s(g_h(\eta))^{-2} + 2\sigma_h^2 \ln g_h(\eta). \quad (1.120)$$

У цьому разі реалізується мінімум функції розподілення в точці $\eta_0=0$ (симетричний стан), якщо стаціонарний керувальний параметр s не більший від критичного значення

$$s_c^h = 1 - 4\sigma_h^2, \quad (1.121)$$

яке зменшується з ростом шуму спряженого поля. При $s > s_c^h$ розв'язок (1.111) визначає координати $\eta_{0+} = -\eta_{0-}$ максимумів несиметричної фази. Залежність $\eta_{0+}(s, \sigma_h)$ монотонно зростає в області вище за критичні значення s, σ_h .

За малих s і σ_h стаціонарний параметр порядку задається виразами

$$\eta_{0\pm}^2 \approx \begin{cases} (4\sigma_h^2)^{1/3} - 1 + (s/3)(1 + 3^{-1/2}), & \text{якщо } s \rightarrow 0, \\ s - 1 + 4\sigma_h^2/s^2, & \text{якщо } \sigma_h^2 \rightarrow 0, \end{cases}$$

характерними для перетворення другого роду за критичного значення $s = s_c$. Зазначимо, що за умов $s = 0$ та $\sigma_h > \sigma_c = 1/4$ може бути актуальним синергетичний (індукований шумом) перехід у несиметричний стан.

1.2.5.4 Вплив стохастичності керувального параметра

Дослідимо стаціонарні стани системи, враховуючи шум керувального параметра. Стаціонарна густина ймовірності реалізації параметра порядку дається ефективним потенціалом

$$U_{ef}(\eta) = \frac{\eta^4}{4} + \left(1 - \frac{s}{2}\right) \eta^2 + (1 - s + 2\sigma_S^2) \ln \eta - 2\sigma_S^2 \ln(1 + \eta^2). \quad (1.122)$$

Рівняння екстремумів (1.122) впливає з (1.111) за умови $\sigma_h = 0$, аналіз розв'язків якого залежно від величин s і σ_S указує, що нульовий корень рівняння (1.111) існує нижче кривої

$$s = 1 + 2\sigma_S^2. \quad (1.123)$$

Також реалізуються ще два розв'язки. Виключення кореня $\eta^2 = 0$ приводить до квадратного рівняння:

$$\eta^4 + (3 - s)\eta^2 - (2s + 2\sigma_S^2 - 3) = 0. \quad (1.124)$$

Згідно з яким нульовий розв'язок визначається рівністю

$$s = (3 - 2\sigma_S^2)/2. \quad (1.125)$$

Іншими розв'язками рівняння (1.124) є

$$\eta_{\pm}^2 = \frac{1}{2} \left[s - 3 \pm \sqrt{(3-s)^2 + 4(2s-3+2\sigma_S^2)} \right]. \quad (1.126)$$

Відповідно на кривій (1.123) існують два ненульові розв'язки

$$\eta_{0\pm}^2 = \frac{1}{2} \left\{ s - 3 \pm [(s-3)^2 - 4(4-3s)]^{1/2} \right\}, \quad (1.127)$$

що не мають фізичного змісту за умови $s < 4/3$, оскільки η комплексні. У точці $s = 4/3$ вони дорівнюють нулю, а за $s > 4/3$ є дійсними й $\eta_{0+} = -\eta_{0-}$, відповідно в точці

$$s = 4/3, \quad \sigma_S^2 = 1/6 \quad (1.128)$$

існує кратний нуль рівняння (1.111). Симетрія потенціалу (1.122) свідчить, що за виконання умови (1.123) корінь $\eta^2 = 0$ відповідає його мінімуму в області $s < 4/3$. При цьому за $s > 4/3$ він задає максимум, а за умови η_{0+}^2 реалізуються два мінімуми.

Визначимо критерії існування кратних дійсних розв'язків рівняння (1.111), зокрема розглянемо умову рівності нулю його дискримінанта. В нашому прикладі основним параметром є інтенсивність шуму керувального параметра. Рівність нулю дискримінанта приводить до виразів

$$\sigma_S^2 = 0, \quad \sigma_S^4 - \sigma_S^2(27(1-s/3)/2 - s^2/8) + s^3/2 = 0, \quad (1.129)$$

розв'язання яких дає кратні дійсні корені, що знаходяться на двох кривих та відрізняються знаками «+» та «-» у записі

$$2\sigma_{S\pm}^2 = \left(\frac{27}{2} \left(1 - \frac{s}{3} \right) - \frac{s^2}{8} \right) \pm \left[\left(\frac{27}{2} \left(1 - \frac{s}{3} \right) - \frac{s^2}{8} \right)^2 - 2s^3 \right]^{1/2}. \quad (1.130)$$

Як видно з (1.130), крива зі знаком «-» при $s = 0$ має початок у точці $\sigma_S^2 = s = 0$, друга (зі знаком «+») за відсутності впливу керувального параметра – у точці $\sigma_S^2 = 27/2$, $s = 0$. Точка дотику кривих (1.130) дається виразом

$$\left(\frac{27}{2} - \frac{9s}{2} - \frac{s^2}{8} \right)^2 - 2s^3 = 0, \quad (1.131)$$

тобто має координати

$$s = 2; \quad \sigma_S^2 = 2. \quad (1.132)$$

Можна показати, що лінія σ_{S-} у (1.130) і крива (1.123) мають спільну точку (1.128).

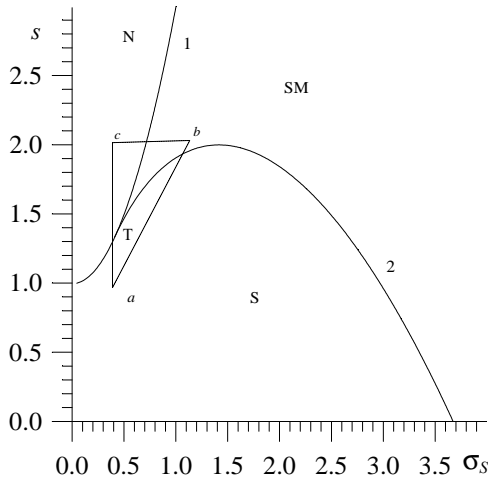


Рисунок 1.13 — Фазова діаграма при флуктуаціях керувального параметра [7, 9]

Фазова діаграма на рисунку 1.13 має область S стабільної симетричної фази ($\eta = 0$) нижче ліній (1.123), (1.130) та область N стабільної несиметричної фази вище кривої (1.123). Область SM метастабільності симетричної та несиметричної фаз обмежена лініями (1.123) та (1.130). Трикритична точка (1.128) визначається перетином ліній 1 і 2. Під час переведення системи зі стану a у c відбувається перехід другого роду. За шляхом $a \rightarrow b \rightarrow c$ система переходить в область стабільної несиметричної фази c , минаючи метастабільний стан b . Зазначимо, що ефективний потенціал (1.122) стрибкоподібно рухається від значення $-\infty$ в області S (точка $\eta_0 = 0$) до нуля на лінії (1.123), а далі — від нуля до $+\infty$ в домені N . Це перетворення не є переходом

першого роду, утім, метастабільна несиметрична фаза на цій траєкторії стрибком становиться стабільною та визначається η_{0+} (1.127).

Біфуркаційні діаграми (рис. 1.14) демонструють залежності стаціонарних станів від інтенсивності σ_S при заданому значенні s . Видно, що на межі домену S при $\sigma_S^2 > 1/6$ стрибком виникають два екстремуми потенціалу (1.122), один дає нестабільний стан η_u , а інший – метастабільний η_m .

Синергетичний потенціал (1.122) характеризується логарифмічною особливістю при $\eta \rightarrow 0$, $U_{ef}(\eta) \rightarrow -\infty$ нижче кривої (1.123) та $U_{ef}(\eta) \rightarrow +\infty$ вище неї. Згідно з [8] другий приклад відповідає абсолютно поглинальній границі за $\eta = 0$, а третій – абсолютно відображальній. На кривій (1.123) границя зникає через обернення на нуль коефіцієнта перед $\ln \eta$ у (1.122). Обчислимо граничні функціонали поблизу сингулярної точки $\eta = 0$

$$\Phi_1(m, \beta) = \left(\frac{1-s}{\sigma_S^2} + 1 \right)^{-1} \left[\beta \frac{1-s}{\sigma_S^2} + 1 - m \frac{1-s}{\sigma_S^2} + 1 \right], \quad (1.133)$$

де введено позначення $\beta = (s-1)^2$. За умови $m \rightarrow 0$ одержуємо $L = \infty$ в області, обмеженій рівнем шуму

$$\sigma_c^2 = s - 1, \quad (1.134)$$

і $\Phi_1 < \infty$ при $\sigma_S^2 > \sigma_c^2$. Для іншого одержуємо

$$\Phi_2(m, \beta) = (1 - s + \sigma_S^2)^{-1} \ln \left(\frac{\beta}{m} \right). \quad (1.135)$$

За $\sigma_S^2 > \sigma_c^2$ одержуємо $\Phi_2 = \infty$, отже, в області $\sigma_S^2 < \sigma_c^2$ ліва границя є недосяжною навіть за час $t = \infty$, а за $\sigma_S^2 > \sigma_c^2$ вона досягається лише за $t \rightarrow \infty$. Така поведінка реалізується лише за відсутності флуктуацій спряженого поля.

1.2.5.5 Сумісна дія шумів спряженого поля й керувального параметра

У більш загальному прикладі впливу двох мультиплікативних шумів σ_h і σ_S на основі рівняння (1.104), стаціонарна густина ймовір-

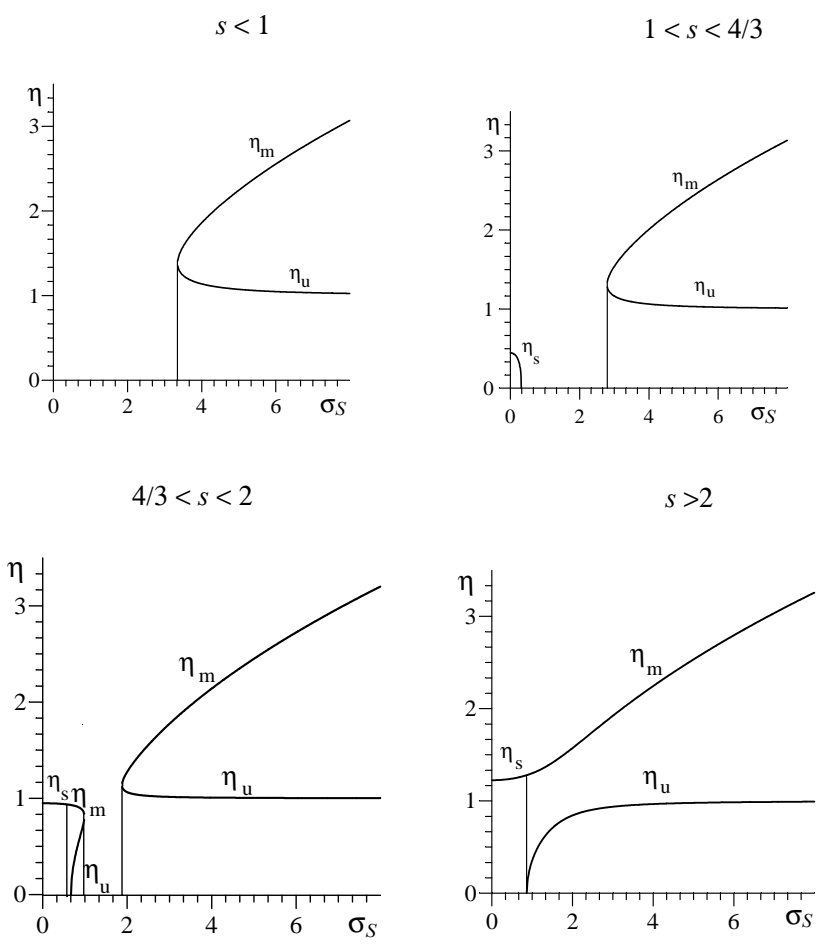


Рисунок 1.14 — Біфуркаційні діаграми при флуктуаціях керувального параметра [7, 9]

ності визначається потенціалом (1.119), що, на відміну від (1.122), характеризується скінченною границею за $\eta \rightarrow 0$. Уведення параметра

$$a = 1 - \alpha \quad (1.136)$$

та перенормування величин

$$\tilde{\sigma} \equiv \frac{\sigma_S}{a}, \quad \tilde{s} \equiv \frac{s}{a}, \quad \tilde{\eta}^2 = \frac{1 + \eta^2}{a} - 1, \quad (1.137)$$

дає можливість знайти при $\alpha < 1$ вираз (1.119) у вигляді $\tilde{U}_{ef}/\tilde{\sigma}^2$, де \tilde{U}_{ef} одержується з (1.122) за допомогою заміни σ_S , s , η на величини (1.137). Одночасно флуктуації спряженого поля враховуються перенормуванням мінімального параметра порядку значенням $(a^{-1} - 1)^{1/2}$, отже розбіжність при $\tilde{\eta} \approx 0$ не реалізується.

Рівняння стаціонарних станів для потенціалу (1.119) має дві компоненти, перша є тривіальною $\eta = 0$, а друга визначається виразом (1.111), аналіз якого для кривої існування нульового розв'язку дає вираз, що відрізняється від (1.123) доданком $-4\sigma_h^2$ у правій частині. Кратні дійсні корені лежать на лінії, що знаходиться нижче, ніж зазначено вище, та дотикається до неї в трікритичній точці

$$s = \frac{4}{3}(1 - \sigma_h^2), \quad \sigma_S^2 = \frac{1}{6}(1 + 8\sigma_h^2). \quad (1.138)$$

Фазова діаграма в осях $\sigma_S - s$ при заданих значеннях σ_h наведена на рисунку 1.15 та за $\sigma_h^2 < 1$ якісно збігається із зображеною на рисунку 1.13. За рівності $\sigma_h^2 = 1$ трікритична точка (1.138) опиняється на осі σ_S , а за $\sigma_h^2 > 2$ потрапляє в домен $s < 0$. Через скінченність потенціалу (1.119) за обмежених значеннях параметра порядку на діаграмі є крива 2 співіснування симетричної та несиметричної фаз (бінодаль). Нижче цієї лінії симетрична фаза стабільна, а несиметрична – метастабільна, вище бінодалі маємо протилежну картину. Крива 1 (спінодаль) є границею абсолютної втрати стійкості фази з $\eta = 0$. Вище спінодалі реалізується лише стійкий несиметричний стан. За заданих σ_h під час зміни s відбувається фазове перетворення другого роду, коли σ_S менше за критичне (1.138) (пряма $a \rightarrow c$ на рисунку 1.15а). Якщо σ_S більше, ніж вказане значення, то реалізується перехід першого роду (пряма $a' \rightarrow c'$ на рисунку 1.15б).

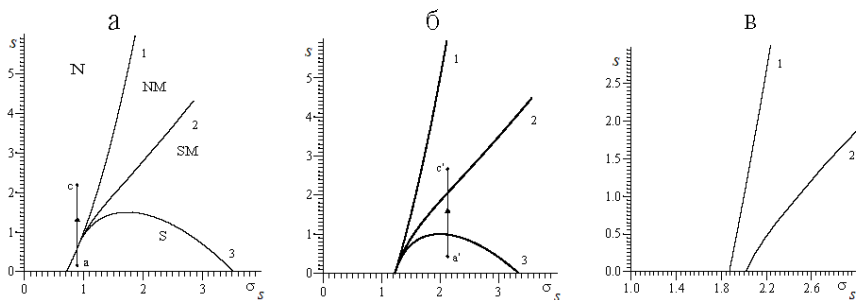


Рисунок 1.15 — Фазова діаграма при дії флуктуацій спряженого поля і керувального параметра: а, б, в — $\sigma_h^2 = 0, 5, 1, 0, 2, 0$. Криві 1, 2, 3 являють спін-одаль, бінодаль та лінію існування кратних коренів [7, 9].

РОЗДІЛ 2 ЕВОЛЮЦІЯ ІЕРАРХІЧНОЇ СИСТЕМИ

2.1 Теорія ієрархічного зв'язку

Не дивлячись на повсякденний прояв ієрархічності в соціумі та усвідомлення її ролі в інших системах теорія ієрархічності супідрядних ансамблів набула розвитку лише під час опису динаміки спінових стеккол. Основна ідея полягає в тому, що ієрархічно супідрядні об'єкти утворюють ультраметричний простір, геометричним образом якого є дерево Кейлі. Ступінь ієрархічного зв'язку w (спорідненості — в генеалогії) об'єктів, що відповідають вузлам дерева на заданому рівні, визначається кількістю кроків k до спільного предка, яке задає відстань $\zeta \sim k$ в ультраметричному просторі [3]. Мета підрозділу — визначення можливих типів функції $w(\zeta)$, що реалізуються для різних ієрархічних дерев.

Характеризуватимемо ієрархічний об'єкт (вузол дерева) на рівні k інтенсивністю z_k , що зростає з переходом на вищий рівень $k - 1$ (найочевидніше це виявляється на прикладі службової ієрархії). Ця обставина відображається рекурентним співвідношенням

$$z_{k-1} = z_k + N_k^{-1} w(z_k), \quad (2.1)$$

де $w(z_k)$ — шукана функція ієрархічного зв'язку, N_k — кількість вузлів на рівні k . Для простого прикладу регулярного дерева, показаного на рисунку 2.1а, реалізується властива фрактальним об'єктам експоненціальна залежність

$$N_k = j^k \equiv e^\zeta, \quad \zeta \equiv k \ln j, \quad (2.2)$$

де j — гіллястість дерева (на рис. 2.1а, $j = 2$), ζ — відстань в ультраметричному просторі. Для виродженого дерева, кожен рівень якого містить лише один вузол (рис. 2.1б, $j = 3$), що гілкується, маємо лінійне співвідношення

$$N_k = (j - 1)k + 1 \approx kj, \quad (2.3)$$

де наближена рівність відповідає прикладу $j \gg 1$. І нарешті, можна вважати, що в загальному прикладі дерева, типу зображеного на рисунку 2.1в, застосовна степенева апроксимація

$$N_k = nk^a; a > 1, n > 0. \quad (2.4)$$

Рівняння (2.1) уперше використане для опису ієрархії резонансів нелінійних коливань, має чудову властивість самоподібності, що є основою властивістю ієрархічних систем. Дійсно, вважаючи, що величина інтенсивності $z_k \sim \xi^{-k}$ задається параметром подібності $\xi < 1$, а функція зв'язку задовольняє умові однорідності $w(\xi z) = \xi^\alpha w(z)$, з (2.1), (2.2) для $k \gg 1$, коли $z_{k-1} \sim z_k$, одержуємо звичайний зв'язок

$$\alpha = 1 - D, D \equiv \ln j / \ln \xi^{-1} \quad (2.5)$$

між показником α фізичної характеристики та фрактальною розмірністю $D \leq 1$ самоподібного об'єкта. При $k \rightarrow \infty$ у (2.1) можна перейти до континуальної межі, замінюючи різницю $z_k - z_{k-1}$ похідною $dz(k)/dk$. У результаті одержуємо

$$\int \frac{dz}{w(z)} = - \int \frac{dk}{N(k)}. \quad (2.6)$$

Оскільки основний внесок у ліву частину дають малі z , то через властивість однорідності можна скористатися асимптотикою

$$w(z) = Wz^{1-D}, z \rightarrow 0. \quad (2.7)$$

У результаті для регулярного дерева, що характеризується розподіленням вузлів (2.2), одержуємо

$$\begin{aligned} w &= e^{-\Delta\zeta}, \quad \Delta \equiv (1 - D)/D; z = [WD(\ln j)^{-1}]^{1/D} e^{-\zeta/D}, \\ W &= (D^{-1} \ln j)^{1-D}, \end{aligned} \quad (2.8)$$

де прийнято $w(0)=1$. Отже, зі зростанням відстані ζ , на якій знаходиться спільний предок, сила ієрархічного зв'язку $w(\zeta)$ та інтенсивність $z(\zeta)$ затухають експоненціальним чином (рис. 2.2). Декремент Δ загасання сили зв'язку набуває нульового значення під час переходу до

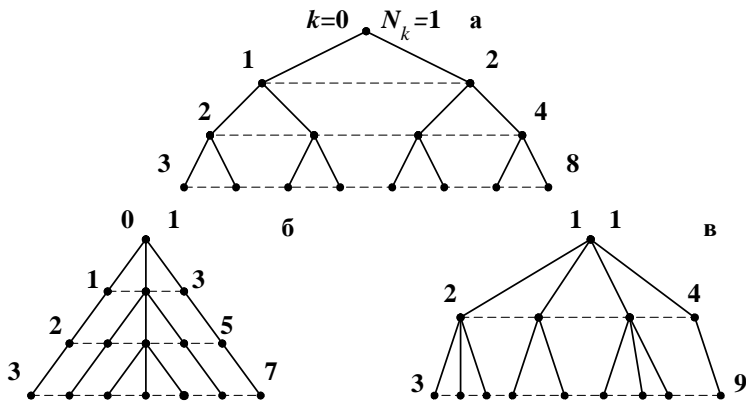


Рисунок 2.1 — Основні типи ієрархічних дерев (номер рівня показано ліворуч, кількість вузлів — праворуч): а — регулярне дерево з $j=2$; б — вироджене дерево з $j=3$; в — нерегулярне дерево для $a=2$

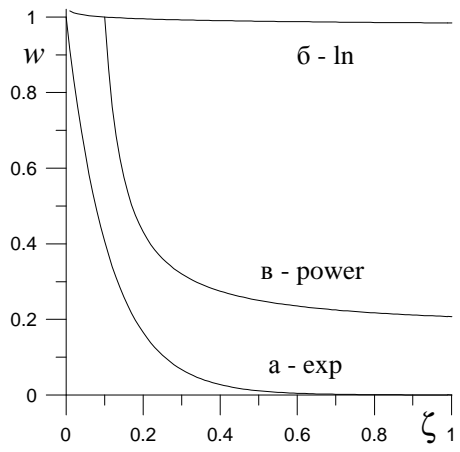


Рисунок 2.2 — Функція ієрархічного зв'язку для різних типів ієрархічних дерев, наведених на рисунку 2.1

системи з розмірністю $D=1$ (згідно з (2.7) вона відповідає ідеальному ієрархічному зв'язку). Водночас декремент загасання D^{-1} інтенсивності $z(\zeta)$ набуває мінімального значення 1. Зі зменшенням параметра зв'язку D обидва вказані декременти необмежено зростають.

У разі виродженого дерева (рис. 2.1б) рівності (2.3), (2.6), (2.7) дають

$$\begin{aligned} w &= [1 + u \ln(\zeta_0/\zeta)]^\Delta, \\ z &= W^{-(1-D)^{-1}} [1 + u \ln(\zeta_0/\zeta)]^{D^{-1}}; \\ u &\equiv (D/j)W^{(1-D)^{-1}}. \end{aligned} \quad (2.9)$$

Тут прийнято нормування $w(\zeta_0) = 1$ і введений параметр обрізання $\zeta_0 < \zeta$, за якого виявляється дискретність ультраметричного простору. Порівняння (2.9) з (2.8) показує, що перехід від регулярного дерева до виродженого приводить до логарифмічного уповільнення експоненціально спадного ієрархічного зв'язку (рис. 2.2).

У проміжному прикладі дерева, що характеризується степеневим наростанням (2.4) кількості вузлів, (рис. 2.1в) маємо

$$\begin{aligned} w &= \left\{ 1 + u \left[\left(\frac{\zeta_0}{\zeta} \right)^{a-1} - 1 \right] \right\}^\Delta, \\ z &= W^{-(1-D)^{-1}} \left\{ 1 + u \left[\left(\frac{\zeta_0}{\zeta} \right)^{a-1} - 1 \right] \right\}^{D^{-1}}; \\ a &> 1, \quad u \equiv \frac{DW^{(1-D)^{-1}}}{(a-1)k_0^{a-1}}, \end{aligned} \quad (2.10)$$

де $\zeta_0 = k_0 \ln j$ – параметр обрізання ($\zeta \geq \zeta_0$), для якого, як і вище, прийнято $w(\zeta_0) = 1$. На відміну від виродженого дерева тут ієрархічний зв'язок спадає не логарифмічно, а степеневим чином (рис. 2.2).

Згідно зі співвідношеннями (2.8)–(2.10) приклад регулярного дерева (рис. 2.1а) виділений у тому сенсі, що йому відповідає слабка ієрархічна супідрядність рівнів, кількість яких обмежено значенням

$$\kappa = (\Delta \ln j)^{-1} \equiv D[(1-D) \ln j]^{-1}. \quad (2.11)$$

Згідно з (2.11) особливе місце посідає приклад тоталітарної ієрархії, коли фрактальна розмірність $D = 1$, і глибина зв'язку $\kappa = \infty$ – ієрархічний зв'язок є ідеальним. Проте інтенсивність ієрархічних об'єктів водночас, як і раніше, експоненціально спадає на відстані $\zeta = D = 1$, тобто не дивлячись на ідеальну супідрядність тоталітарна система приречена на нульову ефективність. Соціальний експеримент, що підтверджує цей висновок, добре відомий.

Під час переходу до нерегулярних дерев ієрархічний зв'язок забезпечує супідрядність всіх рівнів і загасає степеневим чином. Очевидно, такий приклад є найпоширенішим. Найбільш повільне логарифмічне загасання вимагає побудови виродженої ієрархії (рис. 2.1б). Вона здійснюється єдиним об'єктом на кожному рівні і, як неважко побачити, відповідає системі відбору. Згідно з (2.9), (2.10) при сильному ієрархічному зв'язку параметр Δ визначає не глибину зв'язку (2.11), а швидкість його загасання. Зокрема, у разі ідеальної ієрархічної супідрядності ($D=1$) маємо $\Delta=0$, і подібно до регулярних систем ієрархічний зв'язок $w(\zeta)$ не затухає. Проте при цьому інтенсивність $z(\zeta)$ спадає з показником $D^{-1} = 1$.

Наведений розгляд показує, що за заданою конфігурації ієрархічного дерева визначальну роль відіграє фрактальна розмірність D , величина якої задає силу ієрархічного зв'язку $w(\zeta)$. Згідно з (2.7) у разі фіксованої інтенсивності z зростання D викликає збільшення $w(\zeta)$, приводячи до ідеального зв'язку $w(\zeta)=\text{const}$ при $D = 1$. Скрізь вище ми приймали, що сила ієрархічного зв'язку характеризується єдиним значенням D . Проте насправді ієрархічний зв'язок може виявитися мультифрактальним. Водночас з'являється додатковий параметр $q \in (-\infty, \infty)$, за значеннями якого сила зв'язку $w_q(\zeta)$ розподілена з густиною $\rho(q)$. Так, за умови ідеального ієрархічного зв'язку $\rho(q) = |D'(q_0)|^{-1} \delta(q - q_0)$, де штрих означає похідну, q_0 – корінь рівняння $D(q) = 1$. Фрактальна розмірність $D(q)$ спадає зі зростанням q в обмеженому інтервалі. У результаті повна сила ієрархічного зв'язку визначається рівністю

$$w(\zeta) = \int_{-\infty}^{\infty} w_q(\zeta) \rho(q) dq, \quad (2.12)$$

де за ядро $w_q(\zeta)$ потрібно використовувати залежності (2.8)–(2.10)

зі змінним значенням фрактальної розмірності $D(q)$. Визначення виду залежностей $D(q)$, $\rho(q)$, що характеризують мультифрактал, є окремим завданням.

Необхідно мати на увазі, що наведені співвідношення визначають лише асимптотичну поведінку ієрархічної системи у границі $\zeta \gg \zeta_0$. Інакше виявляється дискретний характер зв'язку, і потрібно розв'язувати систему скінченнорізнцевих рівнянь (2.1), (2.7), де розподілення кількості вузлів N_k за рівнями задається структурою досліджуваного ієрархічного дерева. До такої постановки приводить розгляд ієрархічних систем, що мають малу кількість рівнів і складну конфігурацію дерева Кейлі. Очевидно, у більшості практичних застосувань дискретний характер ієрархічної системи виявляється істотним чином, і розв'язання задачі досягається лише числовими методами. Водночас одержані вище асимптотики становлять якісний характер поведінки ієрархічної системи.

2.2 Мікроскопічна теорія структурної релаксації. Ієрархічно підпорядковані статистичні ансамблі

Розглянемо спочатку фазовий перехід, у якому відсутня ієрархія. Оскільки в упорядкованому стані вільна енергія менша, ніж у неупорядкованому ($\Delta F(\eta_0) < 0$), то система флуктуаційним чином переходить із нульового мінімуму в мінімум η_0 (рис. 2.3). Час цього переходу підпорядкований співвідношенню Ареніуса

$$\tau = \tau_0 \exp\left(\frac{Q}{T}\right), \quad (2.13)$$

де τ_0 – мікроскопічний час релаксації, Q – висота енергетичного бар'єра, T – температура.

Визначимо часову залежність параметра порядку під час такого перетворення. Будемо виходити з рівняння Ландау – Халатнікова:

$$\dot{\eta} = -\gamma \frac{\partial \Delta F}{\partial \eta}, \quad (2.14)$$

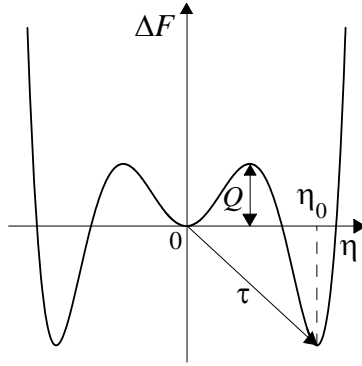


Рисунок 2.3 — Залежність зміни вільної енергії від параметра порядку

де γ — кінетичний коефіцієнт, $f \equiv -\partial\Delta F/\partial\eta$ — термодинамічна сила.

Скористаємося першим доданком розвинення Ландау

$$\Delta F = \frac{A}{2}\eta^2. \quad (2.15)$$

Після підстановки (2.15) в (2.14) знаходимо вираз, який має дебаєвський вигляд

$$\eta = \eta_i e^{-t/\tau_0}, \quad (2.16)$$

де $\tau_0^{-1} = \gamma A$ — характерний час.

Використовуючи (2.16), легко знайти часову залежність для структурного фактора

$$S(t) \equiv \langle \eta(0, t) \cdot \eta(0, 0) \rangle. \quad (2.17)$$

Дійсно, помножуючи (2.16) на $\eta(0, 0) \equiv \eta_i$ та здійснюючи усереднення за статистичним ансамблем одержимо:

$$S(t) = S_i e^{-t/\tau}, \quad S_i = \langle \eta_i^2 \rangle. \quad (2.18)$$

Характерно, що під час обчислювання початкового значення структурного фактора (2.18) усереднення здійснюється за статистичним ансамблем, відповідним мінімуму упорядкованої фази η_0 .

Таульс, Андерсон, Пальмер, досліджуючи конкретну модель скла, з'ясували, що воно відповідає не одному мінімуму вільної енергії, а їх нескінченній множині. Сомполінські дослідив цю модель і припустили, що вона побудована ієрархічно. Це означає, що під час структурної релаксації, за якої об'єднуються вказані мінімуми, їх об'єднання відбувається поетапно. Наприклад, спочатку пари мінімумів об'єднуються в один супермінімум, а потім пари супермінімумів об'єднуються далі і тощо (рис. 2.4). Очевидно, що для поетапного об'єднання мінімумів бар'єри між ними повинні мати різну висоту, тобто реалізується не одне значення Q в (2.13). Головною відмінністю скла від інших матеріалів є те, що в ньому реалізується не єдиний статистичний ансамбль, а їх повний набір — ансамбль ансамблів.

Очевидно, за шляхом структурної релаксації можна простежити, якщо вказати схему об'єднання ансамблів. Набір прямих ліній, що об'єднують статистичні ансамблі на різних рівнях, називають деревом Кейлі. Схема структурної релаксації міститься не в конкретній залежності $F_k(\eta)$ (k — рівні ієрархії), а у вигляді ієрархічного дерева. Описане ієрархічне дерево подано на рисунку 2.4.

З'ясувалося, що ієрархічне дерево, показане на рисунку 2.4, має геометричний вигляд простору з ультраметричною топологією. Точки ультраметричного простору являють собою вузли на нижньому рівні. У результаті відстань між точками ультраметричного простору буде змінюватися безперервно. Отже в такому просторі можна ввести операції диференціювання та інтегрування.

2.3 Часова залежність структурного фактора скла

У склі процес переходу з ансамбля α в ансамбль β визначається співвідношенням

$$S_{\alpha\beta}(t) = S_{\alpha} \exp(-t/\tau_{\alpha\beta}). \quad (2.19)$$

Тут S_{α} — структурний фактор початкового ансамблю, $\tau_{\alpha\beta}$ — час переходу з α в β . Цей час визначається узагальненням формули Ареніуса

$$\tau_{\alpha\beta} = \tau_0 \exp(Q_{\alpha\beta}/T), \quad (2.20)$$

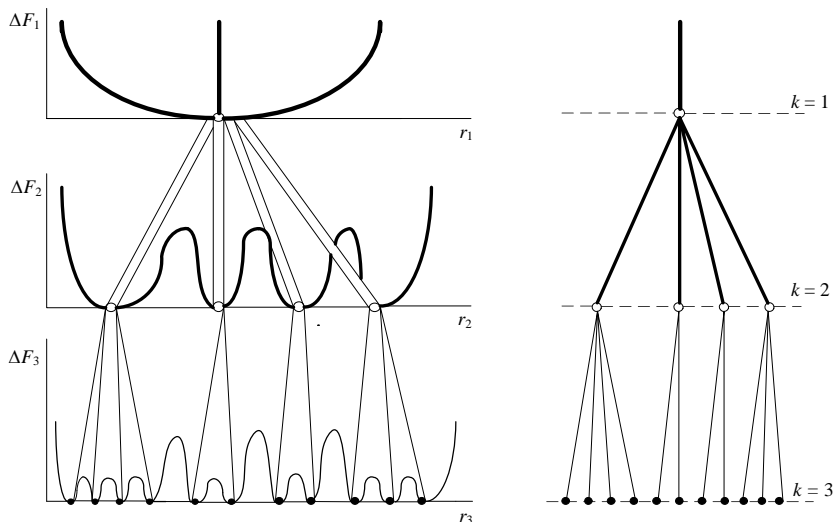


Рисунок 2.4 — Ієрархічне дерево, що описує структурну релаксацію

де $Q_{\alpha\beta}$ — бар'єр між ансамблями α і β . Припустимо, що кожний ансамбль α і β реалізується з імовірністю ω_α . Тоді повний структурний фактор ансамблю статистичних ансамблів має вигляд

$$S(t) \equiv \sum_{\alpha\beta} \omega_\alpha \omega_\beta S_{\alpha\beta}(t). \quad (2.21)$$

Підстановка формули (2.20) в (2.19), а результату в (2.21) дозволяє знайти структурний фактор скла, тобто описати структурну релаксацію.

Для цього потрібно провести складання за всіма ансамблями α , β . Аналітично це неможливо, і тому від складання перейдемо до інтегрування за ультраметричним простором. Якщо останній однорідний, то результат не буде залежати від вибору початку координат. Інакше кажучи, можна провести складання за точками відліку α та інтегрування за відстанями $l_{\beta-\alpha} \equiv l$. Тоді формули (2.19)–(2.21) приводять до

результату

$$\begin{aligned}
 S(t) &= \left(\sum_{\alpha} \omega_{\alpha} S_{\alpha} \right) \sum_{\beta-\alpha} \omega_{\beta-\alpha} \exp \left\{ - \left(\frac{t}{\tau_0} \right) \left[\exp \left(\frac{Q_{\beta-\alpha}}{T} \right) \right]^{-1} \right\} = \\
 &= \text{const} \int_0^{\infty} \omega(l) \exp \left\{ - \frac{t}{\tau_0} \left[\exp \left(- \frac{Q(l)}{T} \right) \right] \right\} dl. \quad (2.22)
 \end{aligned}$$

Для одержання часової залежності потрібно знати дві функції:

1) $\omega(l)$ — описує, як змінюється ймовірність реалізації статистичного ансамблю в разі віддалення його від початкового на відстань l . Інакше кажучи, $\omega(l)$ указує глибину ієрархічного зв'язку ансамблю, віддаленого від початкового на відстань l . Очевидно, із зростанням l ієрархічний зв'язок послаблюється, а, отже, $\omega(l)$ є монотонно спадною функцією;

2) $Q(l)$ — залежність висоти бар'єру між початковим ансамблем та ансамблем, віддаленим від нього на відстань l . Функція $Q(l)$ — монотонно наростаюча функція.

Визначення явного виду $\omega(l)$ та $Q(l)$ є окремою задачею мікроскопічної теорії нерівноважних систем. До теперішнього часу вона не розв'язана. Тому обмежимося простим перебиранням функцій. Для спадної функції $\omega(l)$ набір цих функцій зводиться до:

$$\omega_w(l) = \exp(-l/l_0), \quad \omega_s(l) = l^{-D}. \quad (2.23)$$

Експоненціальне швидке спадання, де l_0 визначає глибину ієрархічного зв'язку, характерно для систем зі слабким ієрархічним зв'язком. Уповільнене степеневе спадання характерно для систем із міцним ієрархічним зв'язком. Для зростаючої функції $Q(l)$ вибір є більш широким

$$Q_l(l) = Q \ln l, \quad Q_p(l) = Q l^a, \quad Q_e(l) = Q \exp(l). \quad (2.24)$$

Тут виділено логарифмічне зростання висоти бар'єра (найповільніше), степеневе й експоненціальне (найшвидше). Величина Q відіграє роль характерної висоти бар'єра. У слабоієрархічних системах реалізується логарифмічне зростання, далі йде степеневе та в міцноієрархічних

системах – експоненціальне. Вибираючи кожну пару функцій і підставляючи їх в інтеграл, одержуємо інтеграл, який береться методом перевалу (найшвидшого спуску).

Нехай нам треба обчислити інтеграл

$$I = \int_0^{+\infty} e^{-f(x)} dx. \quad (2.25)$$

Нехай функція $f(x)$ має достатньо глибокий мінімум у точці x_0 . Оскільки в (2.25) стоїть вираз $e^{-f(x)}$, то в інтеграл буде давати значний внесок лише найближча область точки x_0 . Розвинемо $f(x)$ в ряд Тейлора в точці x_0 :

$$f(x) = f(x_0) + \left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{x=x_0} (x - x_0) + \frac{1}{2} \left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_{x=x_0} (x - x_0)^2. \quad (2.26)$$

Оскільки в точці x_0 мінімум, то $\left. \frac{\partial f}{\partial x} \right|_{x=x_0} = 0$. Позначимо $\left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_{x=x_0} = \alpha$ та підставимо (2.26) в (2.25)

$$I = e^{-f(x_0)} \int_0^{+\infty} \exp[-\alpha(x - x_0)^2/2] dx = e^{-f(x_0)} \sqrt{\frac{\pi}{2\alpha}}. \quad (2.27)$$

Знайшовши $f(x_0)$ та $\left. \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} \right|_{x=x_0}$, обчислюємо даний інтеграл (табл. 2.1).

Таблиця 2.1 — Можливі значення структурного фактора

$S(t)$	$Q_l(l)$	$Q_p(l)$	$Q_e(l)$
$\omega_w(l)$	Закон Колерауша $\exp \left[- (t/\tau_0)^\beta \right],$ $\beta = \left[1 + \left(\frac{Q}{T} \right) \right]^{-1}$	Степенева $\exp \left[- \left(\frac{T}{Q} \right) \left(\ln \frac{t}{\tau_0} \right)^{1/a} \right]$	Логарифмічна $\left(\frac{T}{Q} \ln \frac{t}{\tau_0} \right)^{-1/l_0}$
$\omega_s(l)$	Степенева $t^{-\gamma},$ $\gamma = \frac{T}{Q} (D - 1)$	Логарифмічна $\left(\frac{T}{Q} \ln \frac{t}{\tau_0} \right)^{-D/a}$	Подвійна логарифмічна $\left[\ln \left(\frac{T}{Q} \ln \frac{t}{\tau_0} \right) \right]^{-D}$

РОЗДІЛ 3

НЕЛІНІЙНА МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ МЕЖОВОГО ТЕРТЯ

3.1 Фазова динаміка тертя ультратонких плівок мастила

3.1.1 Межовий режим тертя

В останні тридцять років за допомогою експериментального [10, 11] і теоретичного дослідження, а також комп'ютерного моделювання [4, 10] вдалося значно просунути в розумінні фізики тертя ковзання гладких твердих поверхонь за наявності тонкої плівки рідини між ними. Дослідження в цій області являють собою як фундаментальний, так і практичний інтерес оскільки потреба в гладких деталях, що слабо труться, росте в таких високотехнологічних компонентах як комп'ютерні пристрої, що запам'ятовують, мініатюрні двигуни, аерокосмічні прилади.

Експериментально виявлено, що в процесі тертя рідка плівка стає все тоншою, спочатку її фізичні властивості змінюються поступово кількісно, а потім зміни набувають різкого якісного характеру [10, 11]. Якісні зміни виражаються в неньютонівському механізмі течії й заміні звичайного плавлення на склування, проте плівка мастила продовжує поводитися як рідина. У трибології таку поведінку називають «змішаним змазуванням», що є проміжним режимом тертя, що характеризується переходом від об'ємних властивостей до граничних.

Для тонших плівок зміни здебільшого значніші, оскільки їх властивості змінюються якісно. Так, в цьому разі можуть відбуватися фазові переходи першого роду в твердоподібні або рідиноподібні фази властивості яких неможливо описати навіть якісно в термінах, прийнятних для властивостей рідини, що займає великий об'єм (об'ємної рідини), таких, наприклад, як в'язкість. Ці плівки характеризуються межею текучості, яка є характеристикою руйнування у твердих тілах, а їх часи молекулярної дифузії та релаксації можуть більш, ніж на десять порядків перевищувати значення відповідних часів для об'ємної ріди-

ни.

У цьому розділі описуються динамічні властивості плівок у межовому режимі, зокрема, коли відбуваються переходи між різними типами динамічних фаз під час ковзання. Недавні експерименти з поверхнями, наприклад, зі слюди, кварцу, оксидів металів і мономолекулярних поверхнево-активних речовин між якими під час ковзання поміщалися різноманітні органічні рідини й водні розчини, показали, що такі фазові переходи є більше правилом, ніж виключенням. При цьому вони проявляють себе в появі переривчастого руху (stick-slip motion), що характеризується періодичними переходами між двома або більшою кількістю динамічних станів під час стаціонарного ковзання.

Дослідження властивостей ультратонких шарів мастила вимагає спеціального високотехнологічного устаткування, пов'язаного з їх молекулярними розмірами. Проте незважаючи на складність існують експериментальні установки й відповідні методики, що дозволяють вимірювати товщину молекулярних шарів, їх в'язкість, коефіцієнт тертя, звувні компоненти в'язких і пружних напружень тощо.

На рисунку 3.1 показана механічна схема взаємодії, що характеризує більшість трибологічних експериментів. Пружину із жорсткістю k пов'язано з блоком масою M , до якого прикладено додаткове навантаження L . Блок розташований на гладкій поверхні, від якої відокремлений шаром мастила товщиною h . Вільний кінець пружини приводиться в рух із постійною швидкістю V_0 . Під час руху блоку виникає сила тертя F , що чинить опір його пересуванню. Для ультратонких шарів змащувальних матеріалів у режимі межового тертя швидкості блоку V і пружини V_0 можуть не збігатися через осцилюючий характер сили F , що приводить до переривчастого руху блоку. Цей режим нагадує сухе тертя без мастила. Згідно з рисунком 3.1, механічна взаємодія забезпечується через матеріал мастила. Це простий тип механічного з'єднання, використовуваний в апараті поверхневих сил (в англійській термінології — surface force apparatus (SFA)) і в атомно-силовому мікроскопі (atomic force microscope (AFM)) [12].

Найпростіший спосіб вимірювання динамічних параметрів мастила під час тертя між двома твердими поверхнями — використання двох атомарно-гладких поверхонь невеликого розміру, наклеєних на сферичні або циліндрові поверхні, що труться між собою. Цей принцип

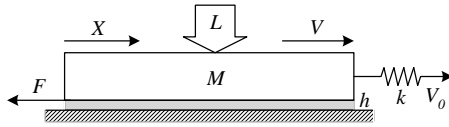


Рисунок 3.1 — Схема трибологічної системи

використаний під час побудови апарату поверхневих сил та атомно-силового мікроскопа.

На верхній панелі рисунка 3.2 зображені типові траєкторії тертя, одержані за допомогою апарату поверхневих сил для двох ковзаючих поверхонь слюди, розділених змащувальним шаром гексадекану товщиною ~ 1 нм. На нижній панелі малюнка наведені результати експерименту для сферичних молекул октаметилциклотетрасилоксану. Ці максимуми переривчастого режиму представляють твердоподібний і рідиноподібний стани плівки, спочатку даючи статичну силу тертя F_s (сухе тертя), а потім — кінетичну силу тертя F_k (рідинне тертя). У цьому експерименті зсувна швидкість і температура постійні. На початковому етапі сила тертя F монотонно росте, а потім настає режим переривчастого тертя. Із порівняння малюнків видно, що для впорядкування ланцюгових молекул необхідний більший час, ніж для сферичних. Також потрібно зазначити, що в разі сферичних молекул сталий stick-slip режим більш стаціонарний (значення F_s і F_k не змінюються з часом).

Розуміння причин переривчастого режиму тертя особливо важливе в трибології оскільки його максимуми є основною причиною руйнування та зношування деталей, що труться. Водночас переривчасте тертя є більш поширеним явищем, яке також обумовлює генерацію звуку (звук струни скрипки, скрип дверей, деренчання машин), плотське сприйняття (структура смаку й дотики), землетруси, неоднорідні потоки рідини. Переривчастий режим тертя також може служити механізмом, що лежить в основі дискретизації керівних іонних струмів і дії потенціалів через біологічні мембрани. Отже, перед тим, як продовжити виклад, розглянемо теоретичні передумови, що пояснюють виникнення переривчастого режиму тертя.

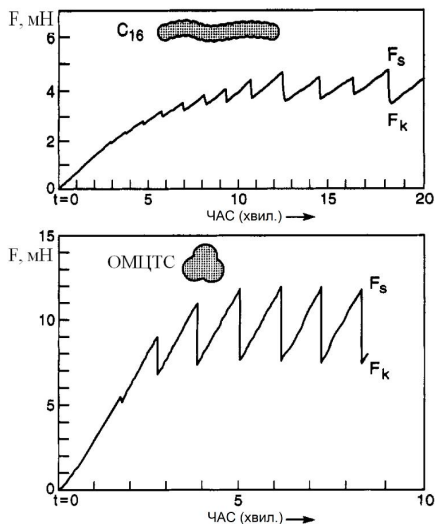


Рисунок 3.2 — Залежність повної сили тертя від часу в експерименті з тертя двох атомарно-гладких поверхонь в апараті поверхневих сил під час початку руху на момент часу $t = 0$: верхня панель — шар мастила складається з ланцюгових молекул гексадекана; нижня панель — шар складається з квазі-сферичних молекул октаметилциклотетрасилоксану [13]

3.1.2 Модель фазових переходів переривчастого режиму тертя

Комп'ютерне моделювання молекулярної динаміки показало, що тонка міжповерхнева плівка під час ковзання піддається фазовому переходу першого роду між твердоподібним та рідиноподібним станами, і навело на думку, що він є причиною спостережуваного переривчастого режиму поведінки простих ізотропних рідин між двома твердими кристалічними поверхнями. Згідно з такою інтерпретацією переривчастий режим виникає швидше в результаті різких змін текучих властивостей плівки під час переходу, ніж унаслідок поступових або безперервних змін. Відповідна модель, показана на рисунку 3.3, припускає, що внутрішня сила тертя змінюється переривисто (під час фазових переходів), а не безперервно. Результуючий переривчастий режим також

відрізняється, наприклад, максимуми є гострішими, і він може зникнути після перевищення деякої критичної швидкості V_c — настає кінетичний режим ковзання. Відзначимо, що показаний на рисунку 3.3 зсув під час ковзання порядку лише двох постійних решітки, у багатьох же практичних ситуаціях він набагато більший. Зазначений тип тертя здебільшого можна спостерігати в експериментах із гладкими поверхнями за наявності різних рідких змащувальних матеріалів або парів, що конденсуються [13]. Моделювання було проведено для багатьох властивостей ультратонких рідких плівок, що піддаються зсуву між молекулярно-гладкими поверхнями, і, як буде уточнено далі, до цих пір пропонує найбільш адекватне пояснення експериментальних даних для прикладу, показаного на рисунку 3.2.

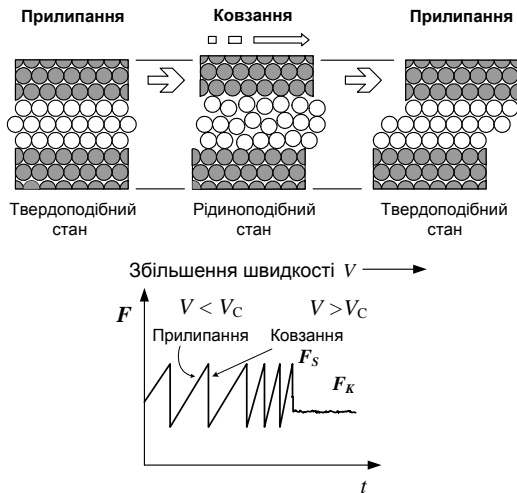


Рисунок 3.3 — Модель «фазових переходів» переривчастого режиму тертя, у якій тонка плівка рідини поперемінно твердне або плавиться впродовж зсуву між двома твердими кристалічними поверхнями, і часова еволюція сили тертя F за температури $T < T_c$ зі збільшенням швидкості V [13]

Оскільки переривчастий рух спостерігається також і в експериментах за незмінної температури поверхонь тертя, для його пояснення вводиться концепція «зсувного плавлення», що схематично пока-

зана на рисунку 3.3. Цей малюнок пояснює переривчастий (stick-slip) режим. Спочатку мастило твердоподібне (stick), потім у разі перевищення деякого критичного напруження σ (напруження текучості) воно різко переходить у рідиноподібну фазу (slip) за рахунок розупорядкування, водночас верхня поверхня трохи підводиться. Під час подальшого руху за рахунок стиснення стінок під дією навантаження L (див. рис. 3.1) мастило знову твердне (stick).

Проте два стани тонкої міжповерхневої плівки — це не є в точності те ж саме, що об'ємна рідка або тверда фази [13]. Притаманні їм властивості зазвичай сильно відрізняються, і коректніше було б розглядати їх як рідиноподібний і твердоподібний, або, можливо, як динамічний і статичний «епітаксіальні» стани. Це обумовлено тим, що вони виникають лише в міжповерхневих плівках властивості яких визначаються не стільки взаємодією молекул мастила однієї з іншою (що має місце в об'ємних рідинах), як обмеженням та епітаксіальними взаємодіями між атомами плівки й поверхні. Водночас результати моделювання молекулярної динаміки показують, що структура ланцюгових молекул як у твердоподібному, так і в рідиноподібному станах (режими злипання та ковзання) не відрізняється.

3.1.3 Нова карта й теоретичні підходи для опису межового режиму тертя

На рисунку 3.4 наведена крива Герсі — Штрибека, яка широко використовується у трибології для представлення відомих режимів тертя для тонких шарів мастил. На цій кривій сила тертя F представлена як функція аргументу $A\eta_b V/h$, де A — площа контакту; η_b — об'ємна в'язкість змащувального матеріалу; h — товщина мастила. За традиційною схемою суцільна крива на малюнку показує силу тертя F , причому механічне напруження, яке виникає, визначається стандартним чином $\sigma = F/A$, а швидкість зсувної деформації — $\dot{\epsilon} \equiv V/h$. Для тонких шарів, поведінка яких відрізняється від об'ємних мастил, сила тертя подається класичним рівнянням для течії Куетта

$$F = AV\eta_b/h = A\eta_b\dot{\epsilon}, \quad \sigma = F/A = V\eta_b/h = \eta_b\dot{\epsilon}. \quad (3.1)$$

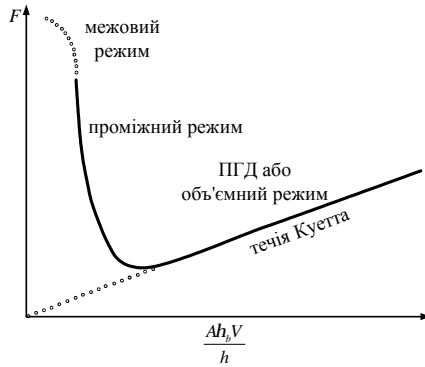


Рисунок 3.4 — Традиційна крива Герсі – Штрибека, на якій суцільна лінія показує, як сила тертя змащувального матеріалу залежить від експериментальних параметрів (ПГД – пружно-гідродинамічний режим) [13]

Межовий режим тертя (який далі розглядається) приводить до безлічі ефектів проте, вони ніяк не відображені на діаграмі Герсі – Штрибека (рис. 3.4). Тому для врахування перерахованих ефектів була запропонована нова карта тертя, що узгоджується з наявними експериментальними даними [12, 13]. Вона показана на рисунку 3.5 та представляє узагальнену діаграму Герсі – Штрибека³⁾. Зі збільшенням навантаження L ньютонівська течія в'язкої рідини в пружно-гідродинамічному режимі переходить у межовий режим. За великих навантажень L і малої товщини h мастила сила тертя має максимум (статичне тертя F_s). Якщо тепер підвищити швидкість, установиться переривистий (stick-slip) режим, а подальше зростання V приведе до постійного значення коефіцієнта тертя μ , не залежного від величини швидкості й відповідно до постійної кінетичної сили тертя F_k .

За малих швидкостей рух може бути ньютонівським навіть для великих значень прикладеного навантаження, але лише в разі дуже великих величин ефективної в'язкості η_{eff} . Швидкість ковзання V вимі-

³⁾ Тут ефективна в'язкість $\eta_{eff} = Fh/AV$ не співпадає з об'ємною й може бути знайдена лише експериментально, причому вона вже не є константою, а залежить від швидкості зсувної деформації $\dot{\epsilon}$.

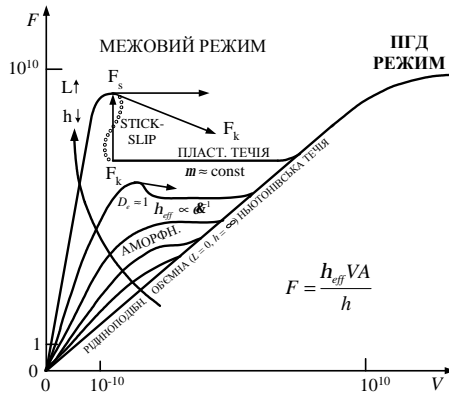


Рисунок 3.5 — Нова карта тертя, що розкриває особливості межового режиму [13]

ряна в довільних одиницях і значення 10^{-10} , 10^{10} умовно показують великий діапазон.

Для пояснення результатів експериментів здебільшого використовується феноменологічна концепція фазового переходу плівки мастила з рідиноподібного в твердоподібний стан і навпаки. Потрібно зазначити, що це фазове перетворення на відміну від звичайного переходу рідина—тверде тіло може бути як першого, так і другого родів. Останній варіант пов'язаний із тим, що він відбувається в умовах, коли симетрія обох станів плівки істотно змінена, по-перше, наявністю обмежуючих твердих тіл і, по-друге, наявністю пружної деформації.

Опису переривчастого руху присвячений ряд теоретичних робіт. В одній із перших подано феноменологічне матеріальне рівняння, що зв'яже сили тертя зі швидкістю, координатами та змінною, що відіграє роль параметра порядку й відображає ступінь плавлення плівки. Також існує підхід, у якому фазовий перехід плівки мастила розглядається з погляду теорії Ландау в припущенні, що є стан часткової термодинамічної рівноваги при повільно змінному параметрі порядку, квадрат якого дорівнює модулю зсуву.

Пояснити природу аномальних особливостей межового тертя дозволило зокрема експериментальне дослідження реологічних влас-

тивостей плівки мастила [13]. Крім того, для цього використовували теоретичне представлення змашувального матеріалу як в'язкопружного середовища, що має теплопровідність. Так, на основі рівняння Гінзбурга — Ландау, де параметр порядку визначає зсувне плавлення та тверднення описана експериментально спостережувана поведінка ультратонкої плівки мастила. Побудована динамічна фазова діаграма, що визначає області рідинного, переривчастого й сухого тертя в координатах температура — товщина плівки. Фазова динаміка в разі адсорбованих молекул розглянута в роботі [10], у якій відмічено важливе значення зсувного плавлення. За допомогою дослідження часових рядів сили тертя представлений зв'язок тертя на макрорівні з утворенням і руйнуванням молекулярних зв'язків.

Як мастило в таких системах можуть використовуватися металеві монослої, осаджені на слюду. Причому в режимі межового тертя формується фрактальна морфологія поверхні. Наведено експериментальні дані й теоретичні моделі, що свідчать про самоподібний характер переривчастого режиму під час сухого тертя. Зокрема, за допомогою приладу для випробувань гладких поверхонь тертя із сталі та алюмінію за схемою «штифт—диск» показано, що розподілення імовірності стрибків сили тертя має степеневий вигляд із показником в інтервалі 2.2—5.4, а спектральна густина потужності відповідає співвідношенню $1/f^\alpha$ із α в інтервалі 1—2.6.

3.2 Основні рівняння для опису плавлення ультратонкої плівки мастила

На основі реологічного опису в'язкопружного середовища, що має теплопровідність, одержуємо систему кінетичних рівнянь, що визначають взаємно узгоджену поведінку зсувних напружень σ і деформації ϵ , а також температури T в ультратонкій плівці мастила під час тертя між атомарно-гладкими твердими поверхнями. Основою викладеного підходу є синергетична концепція фазового переходу [1, 3, 4], яка представляє узагальнення феноменологічної теорії Ландау. Згідно з останньою фазове перетворення описується параметром порядку ϕ ,

за степенями якого проводиться розвинення вільної енергії F [2]. Рівноважне значення ϕ визначається умовою

$$\partial F / \partial \phi = h, \quad (3.2)$$

де h – зовнішнє поле; F – вільна енергія при $h = 0$.

Процес релаксації до рівноваги описується рівнянням

$$\dot{\phi} = -\frac{1}{\eta} \left(\frac{\partial F}{\partial \phi} - h \right). \quad (3.3)$$

Тут η – кінетичний коефіцієнт, який можна розглядати як узагальнену в'язкість. У разі величини ϕ близької до рівноважного значення $\phi_0 = 0$, використовують лінійне наближення $\partial F / \partial \phi \approx \phi / \chi$, де $\chi \equiv \partial \phi / \partial h = (\partial^2 F / \partial \phi^2)^{-1}$ – сприйнятливість. У результаті релаксаційне рівняння (3.3) набирає лінійного вигляду

$$\tau \dot{\phi} = -\phi + \chi h, \quad (3.4)$$

де

$$\tau = \chi \eta \quad (3.5)$$

представляє час релаксації.

Вирази (3.4), (3.5) використовувалися Ландау й Халатніковим для дослідження аномального поглинання звуку поблизу точки фазового переходу другого роду. Вони припустили, що тут сприйнятливість розходиться $\chi \rightarrow \infty$, а в'язкість η практично не залежить від температури T . У їх теорії аномально велика величина τ відповідає процесу заморожування.

Для в'язкопружного середовища модуль зсуву G відіграє роль зворотної сприйнятливості. У разі в'язкопружного переходу й переходу типу зміщення (наприклад, мартенситного) модуль G прямує до нуля поблизу точки переходу, і час релаксації розходиться. У деяких роботах використовують той факт, що узагальнена сприйнятливість фактично не залежить від температури, а в'язкість сильно зростає за температури склування. Отже, аномальне велике значення сприйнятливості типово для фазового переходу, а аномальне велике значення кінетичного коефіцієнта (в'язкості) властиво склуванню.

Згідно з наведеними в попередньому підрозділі даними мастило – це дуже в'язка рідина, яка поводить себе подібно до аморфного твердого тіла – має велику ефективну в'язкість і характеризується межею текучості [13]. Основне припущення використаного підходу полягає в тому, що релаксаційне рівняння для σ має вигляд, подібний за математичною структурою рівнянню Ландау – Халатнікова (3.4)

$$\tau_\sigma \dot{\sigma} = -\sigma + G\varepsilon, \quad (3.6)$$

де перший доданок правої частини описує дебаївську релаксацію за час $\tau_\sigma \equiv \eta_\sigma/G$, що визначається ефективною в'язкістю η_σ та нерелаксованим модулем зсуву $G \equiv G(\omega)|_{\omega \rightarrow \infty}$ (ω – кругова частота періодичного зовнішнього впливу). Через заміну ε/τ_σ на $\partial\varepsilon/\partial t$ рівняння (3.6) зводиться до співвідношення Максвелла для опису в'язкопружного середовища, широко використовуваного в теорії межового тертя [10]

$$\frac{\partial\sigma}{\partial t} = -\frac{\sigma}{\tau_\sigma} + G\frac{\partial\varepsilon}{\partial t}. \quad (3.7)$$

У стаціонарному прикладі $\dot{\sigma} = 0$ (3.6) приводить до закону Гука $\sigma = G\varepsilon$.

Релаксаційну поведінку в'язкопружного мастила в процесі тертя описується також рівнянням Кельвіна – Фойгта

$$\dot{\varepsilon} = -\varepsilon/\tau_\varepsilon + \sigma/\eta, \quad (3.8)$$

де τ_ε – час релаксації деформації, η – зсувна в'язкість. Другий доданок у правій частині описує течію в'язкої рідини під дією зсувної компоненти напружень. У стаціонарному прикладі $\dot{\varepsilon} = 0$ маємо вираз подібний до закону Гука $\sigma = G_\varepsilon\varepsilon$, де $G_\varepsilon \equiv \eta/\tau_\varepsilon \equiv G(\omega)|_{\omega \rightarrow 0}$ – релаксоване значення модуля зсуву. Оскільки формально рівняння (3.6) не може бути зведене до рівняння Кельвіна – Фойгта (3.8), припускається, що ефективна в'язкість $\eta_\sigma \equiv \tau_\sigma G$ не збігається з дійсним значенням η . Крім того, потрібно прийняти найпростіше наближення для температурних залежностей: $G_\varepsilon(T)$, $G(T)$, $\eta_\sigma(T) = \text{const}$,

$$\eta = \frac{\eta_0}{T/T_c - 1}, \quad (3.9)$$

де η_0 – характерне значення зсувної в'язкості η при $T = 2T_c$. Це обумовлено тим, що параметри G_ε , G , η_σ дуже слабко залежать від температури, у той час як дійсна в'язкість η має розбіжність під час зменшення температури до критичного значення T_c . Реологічні властивості плівок мастила досліджують експериментально, що дозволяє побудувати фазову діаграму [13].

Згідно із синергетичною концепцією [1] для доповнення системи рівнянь (3.6), (3.8), що мають параметр порядку σ , спряжене поле ε та керувальний параметр T , необхідно одержати кінетичне рівняння для температури. Таке рівняння може бути виведене з основних співвідношень теорії пружності. Будемо виходити із виразу, що пов'язує похідні за часом від ентропії S та внутрішньої енергії U з рівноважним пружним напруженням $\sigma_{el} = G\varepsilon_{el}$,

$$T \frac{dS}{dt} = \frac{dU}{dt} - \sigma_{el} \frac{d\varepsilon}{dt}, \quad (3.10)$$

що являє собою перший початок термодинаміки в разі механічного навантаження твердого тіла (в рівновазі зміна кількості тепла $\delta Q = T dS$). У нерівноважному прикладі неоднорідного нагріву середовища цей зв'язок має вигляд

$$-\text{div } \mathbf{q} = \frac{dU}{dt} - \sigma \frac{d\varepsilon}{dt}. \quad (3.11)$$

Тут потік тепла визначається співвідношенням Онзагера

$$\mathbf{q} = -\kappa \nabla T, \quad (3.12)$$

де κ – коефіцієнт теплопровідності та повне напруження $\sigma = \sigma_{el} + \sigma_v$ містить також в'язку складову $\sigma_v = \eta \dot{\varepsilon}$. Віднімаючи (3.11) від (3.10), урахувавши вираз

$$\begin{aligned} \frac{dS}{dt} &= \frac{\partial S}{\partial U} \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_\varepsilon \frac{dT}{dt} + \frac{\partial S}{\partial U} \frac{\partial U}{\partial \varepsilon} \frac{d\varepsilon}{dt} + \left(\frac{\partial S}{\partial \varepsilon} \right)_U \frac{d\varepsilon}{dt} = \\ &= \frac{\rho c_v}{T} \frac{dT}{dt} + \frac{1}{T} \frac{\partial U}{\partial \varepsilon} \frac{d\varepsilon}{dt} - \frac{\sigma_{el}}{T} \frac{d\varepsilon}{dt} \end{aligned} \quad (3.13)$$

та припускаючи, що шар мастила й атомарно-гладкі поверхні тертя мають різні температури T і T_e відповідно, маємо

$$\rho c_v \dot{T} = \frac{\kappa}{h^2} (T_e - T) + \sigma_v \dot{\varepsilon} + T \frac{\partial \sigma_{el}}{\partial T} \dot{\varepsilon}. \quad (3.14)$$

В останньому рівнянні ρ – густина мастила, c_v – питома теплоємність, h – товщина мастила або відстань між поверхнями, що труться, а також використані наближення $(\kappa/h^2)(T_e - T) \approx -\text{div } \mathbf{q}$ і $\partial U/\partial \varepsilon = \sigma_{el} - T \partial \sigma_{el}/\partial T$. Перший доданок у правій частині (3.14) описує передачу тепла від шару мастила до поверхонь тертя, другий враховує дисипативний розігрів в'язкої рідини, що тече під дією напружень, а третій представляє джерело тепла, обумовлене оборотним механокалоричним ефектом, для якого в лінійному наближенні $T(\partial \sigma_{el}/\partial T)\dot{\varepsilon} \approx \sigma_{el}\dot{\varepsilon}$. У результаті рівняння теплопровідності набуває вигляду

$$\rho c_v \dot{T} = \frac{\kappa}{h^2}(T_e - T) + \sigma \dot{\varepsilon}. \quad (3.15)$$

Тепер система рівнянь (3.6), (3.8), (3.15) є повною та водночас має три ступені свободи, що дозволяє описувати нетривіальну поведінку під час плавлення тонкої плівки мастила [1].

Обезрозмірювання рівнянь (3.6), (3.8), (3.15) дозволить скоротити кількість сталих, що розглядаються. Уведемо одиниці вимірювання для змінних σ, ε, T

$$\sigma_s = \left(\frac{\rho c_v \eta_0 T_c}{\tau_T} \right)^{1/2}, \quad \varepsilon_s = \frac{\sigma_s}{G_0}, \quad T_c, \quad (3.16)$$

де $G_0 \equiv \eta_0/\tau_\varepsilon$ – характерне значення модуля зсуву, $\tau_T \equiv \rho h^2 c_v/\kappa$ – час теплопровідності. Тоді після підстановки в (3.15) похідної $\dot{\varepsilon}$, вираженої з формули (3.8), рівняння (3.6), (3.8), (3.15) набувають вигляду

$$\tau_\sigma \dot{\sigma} = -\sigma + g\varepsilon + \sqrt{I_\sigma} \xi_1(t), \quad (3.17)$$

$$\tau_\varepsilon \dot{\varepsilon} = -\varepsilon + (T - 1)\sigma + \sqrt{I_\varepsilon} \xi_2(t), \quad (3.18)$$

$$\tau_T \dot{T} = (T_e - T) - \sigma\varepsilon + \sigma^2 + \sqrt{I_T} \xi_3(t), \quad (3.19)$$

де введено константу $g = G/G_0 < 1$. Ці рівняння формально збігаються із синергетичною системою Лоренца, у якій зсувні напруження відіграють роль параметра порядку, спряжене поле зводиться до зсувної деформації, а температура є керувальним параметром. Відомо, що така система використовується для опису як фазових термодинамічних [2], так і кінетичних [1] перетворень.

У рівняннях (3.17)–(3.19) для врахування впливу флуктуацій основних параметрів уведені δ -корельовані гаусові стохастичні джерела $\xi_i(t)$ з інтенсивностями I_σ , I_ε та I_T , що зі свого боку виміряні в одиницях σ_s^2 , $\varepsilon_s^2 \tau_\varepsilon^{-2}$, $(T_c \kappa / h)^2$ відповідно. Моменти функцій $\xi_i(t)$ визначаються так⁴⁾:

$$\langle \xi_i(t) \rangle = 0, \quad \langle \xi_i(t) \xi_j(t') \rangle = 2\delta_{ij} \delta(t - t'). \quad (3.20)$$

Початковою причиною процесу самоорганізації (плавлення мастила) є додатний зворотний зв'язок T і σ з ε [див. (3.18)], обумовлений температурною залежністю зсувної в'язкості (3.9), що приводить до її розбіжності. З іншого боку, від'ємний зворотний зв'язок σ і ε з T в (3.19) відіграє важливу роль, оскільки забезпечує стійкість системи.

Згідно з таким підходом твердоподібний стан мастила відповідає зсувним напруженням $\sigma = 0$, оскільки при цьому рівняння (3.17) випадає з розгляду ($\dot{\sigma} = 0$). Рівняння (3.18), що містить в'язкі напруження, можна звести до закону Дебая, що представляє швидку релаксацію зсувної деформації за мікроскопічний час $\tau_\varepsilon \approx a/c \sim 10^{-12}$ с, де $a \sim 1$ нм – стала решітки або міжмолекулярна відстань і $c \sim 10^3$ м/с – швидкість звуку. Водночас рівняння теплопровідності (3.19) набуває вигляду найпростішого виразу для релаксації температури до значення T_e , із якого зникають доданки, що являють собою дисипативний розігрів та механокалоричний ефект в'язкої рідини.

3.3 Умови переходу

Для аналізу системи (3.17) – (3.19) за відсутності шумів ($I_\sigma, I_\varepsilon, I_T=0$) скористаємося адиабатичним наближенням, в межах якого характерні часові масштаби задовольняють нерівностям

$$\tau_\varepsilon \ll \tau_\sigma, \quad \tau_T \ll \tau_\sigma. \quad (3.21)$$

Вони означають, що в процесі еволюції деформація $\varepsilon(t)$ і температура $T(t)$ слідує зміні напружень $\sigma(t)$. Використовуючи визначення

⁴⁾Множник 2 вибраний для того, щоб відповідне рівняння Фоккера–Планка мало більш простий вигляд.

температуропровідності $\chi \equiv \kappa/c_v$, ефективної кінематичної в'язкості $\nu_\sigma \equiv \eta_\sigma/\rho$ і швидкості звуку $c \equiv (G/\rho)^{1/2}$, другу умову (3.21) можна записати у вигляді

$$h \ll L, \quad (3.22)$$

згідно з яким характерна товщина мастила не повинна перевищувати значення

$$L = \sqrt{\frac{\chi\nu_\sigma}{\rho c^2}}. \quad (3.23)$$

Тоді ліві частини рівнянь (3.18), (3.19) прирівнюємо до нуля та одержуємо рівняння типу Ландау – Халатнікова:

$$\tau_\sigma \dot{\sigma} = -\partial V/\partial \sigma, \quad (3.24)$$

де синергетичний потенціал має вигляд

$$V = \frac{1}{2}(1-g)\sigma^2 + g(1 - \frac{T_e}{2}) \ln(1 + \sigma^2). \quad (3.25)$$

У стаціонарному стані виконується умова $\dot{\sigma} = 0$, і потенціал (3.25) на-бирає мінімум. За температури T_e менше від критичного значення

$$T_{c0} = 1 + g^{-1}, \quad g \equiv G/G_0 < 1, \quad G_0 \equiv \eta_0/\tau_\varepsilon \quad (3.26)$$

цей мінімум відповідає напруженню $\sigma = 0$, водночас плавлення не відбувається, й реалізується твердоподібний стан мастила (крива 1 на рис. 3.6а). У протилежному разі за умови, якщо $T_e > T_{c0}$, стаціонарне значення напруження відмінне від нуля (крива 2)

$$\sigma_0 = \left(\frac{gT_e - (g+1)}{1-g} \right)^{1/2} \quad (3.27)$$

і зростає з T_e згідно з кореневою залежністю (рис. 3.6б). Це приводить до плавлення мастила та його переходу в рідиноподібний стан. Відповідні стаціонарні значення деформації та температури

$$\varepsilon_0 = \sigma_0/g, \quad T_0 = 1 + g^{-1}. \quad (3.28)$$

Потрібно зазначити, що, з одного боку, величина температури плавлення T_0 співпадає з критичним значенням (3.26), а з іншого боку, вона відрізняється від температури T_e . Це актуально завдяки тому, що в

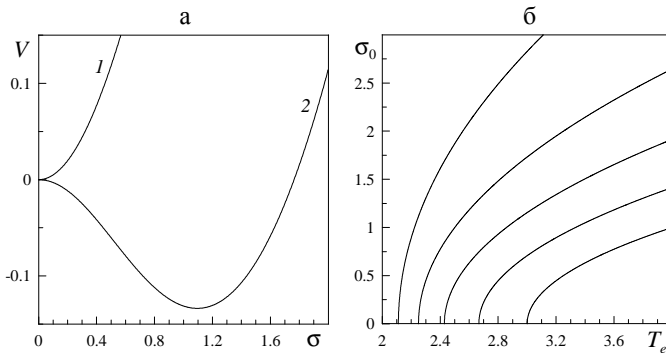


Рисунок 3.6: Залежність синергетичного потенціалу (3.25) від напруження для фазового переходу другого роду: а – при $g = 0.5$ (крива 1 відповідає $T_e=1 \leq T_{c0}$, крива 2 – $T_e = 4.2 > T_{c0}$) і залежність стаціонарних значень зсувних напружень σ_0 від температури T_e (3.27); б – криві відповідають значенням $g = 0.5, 0.6, 0.7, 0.8, 0.9$ і розташовані справа наліво

стаціонарному стані реалізується перша рівність (3.28) замість зв'язку $\sigma_0 = \varepsilon_0$. Оскільки T_{c0} представляє мінімальне значення температури, за якої починається перехід із твердоподібного в рідиноподібний стан, зазначене означає, що від'ємний зворотний зв'язок зсувних напружень σ і деформації ε з температурою T (див. третій доданок у правій частині рівняння (3.19)) зменшує температуру мастила настільки, що процес самоорганізації забезпечується лише на межі. У стаціонарному стані в'язкість під час плавлення набуває значення

$$\eta_m = \eta_0 g. \quad (3.29)$$

Можливі дві протилежні ситуації залежно від величини параметра $g = G/G_0$. У прикладі $g \gg 1$, за якого характерна в'язкість η_0 має мале значення, вирази (3.26) – (3.28) набувають вигляду

$$\sigma_0 = (1 - T_e)^{1/2}, \quad T_0 = T_{c0} = 1. \quad (3.30)$$

Така ситуація відповідає межі дуже в'язкої рідини. У протилежному разі $g \ll 1$, що відповідає великому значенню η_0 , замість (3.30), ма-

емо межу твердоподібного (замерзлого) стану

$$\sigma_0 = (gT_e - 1)^{1/2}, \quad T_0 = T_{c0} = g^{-1} \equiv \eta_0/\tau_\varepsilon G. \quad (3.31)$$

За ненульових значень напружень σ рівняння (3.17)–(3.19) описують зазначені вище властивості, притаманні рідиноподібному стану мастила. Така поведінка сильно відрізняється від об'ємних змашувальних матеріалів і потребує детального пояснення. Згідно з рівнянням (3.18) поява в'язких напружень σ_v приводить до пластичної течії рідиноподібного мастила зі швидкістю $V = h\partial\varepsilon/\partial t$. Зокрема, у прикладі апарата поверхневих сил [12] у рівняннях (3.17)–(3.19) ефективна амплітуда деформації $\varepsilon = x_{max}/h$ визначається через відношення амплітуди деформації (відхилення) x_{max} до товщини мастила h . Ефективна швидкість зсуву $\dot{\varepsilon} = \varepsilon\omega = V/h = \varepsilon/\tau_\sigma$ являє собою добуток деформації ε та частоти коливань ω .

Показано, що пластична течія шару мастила реалізується за наявності в ньому пружних напружень. Водночас дія зсувних напружень приводить до зменшення модуля зсуву змашувального матеріалу. Під час межового режиму тертя зі збільшенням в'язких напружень

$$\sigma_v = \frac{F_v}{A} \quad (3.32)$$

збільшується в'язка сила тертя

$$F_v = \frac{\eta_{eff}VA}{h}, \quad (3.33)$$

де η_{eff} – ефективна в'язкість, що не співпадає з дійсною в'язкістю та знаходиться лише експериментально, A – площа контакту. Комбінування рівнянь (3.32) та (3.33) дає вираз для швидкості через напруження

$$V = \frac{\sigma_v h}{\eta_{eff}}. \quad (3.34)$$

Отже, зі зростанням зсувних напружень збільшується відносна швидкість руху контактуючих поверхонь і мастило плавиться.

Більше того, за відсутності деформації зсуву теплове середньоквадратичне відхилення молекул (атомів) визначається рівністю $\langle u^2 \rangle = T/Ga$. Середнє значення відхилення за рахунок зсуву

знаходиться зі співвідношення $\langle u^2 \rangle = \sigma^2 a^2 / G^2$. Повне середнє квадратичне відхилення дорівнює сумі цих виразів за умови, що теплові флуктуації та напруження незалежні. Це означає, що плавлення мастила спричинене як нагріванням, так і впливом напружень, створених твердими поверхнями під час тертя. Останнє узгоджується з розглядом нестійкого твердоподібного стану в межах подання зсувного динамічного плавлення за відсутності теплових флуктуацій. Отже, флуктуації деформації, пов'язані з напруженнями й теплові флуктуації потрібно розглядати окремо. Будемо вважати, що плівка мастила стає більш рідиноподібною, а сила тертя зменшується зі зростанням температури за рахунок зменшення енергії активації стрибків молекул.

3.4 Гістерезисні явища при залежності модуля зсуву від напружень

Рівняння Максвелла припускає використання ідеалізованої моделі Генкі. Для залежності напружень від деформації $\sigma(\varepsilon)$ ця модель подається законом Гука $\sigma = G\varepsilon$ при $\varepsilon < \varepsilon_m$ і константою $\sigma_m = G\varepsilon_m$ при $\varepsilon \geq \varepsilon_m$ (σ_m, ε_m — максимальні значення пружних зсувних напружень і деформації для гуківської ділянки, $\sigma > \sigma_m$ приводить до в'язкої течії зі швидкістю деформації $\dot{\varepsilon} = (\sigma - \sigma_m) / \eta$). Фактично, крива залежності $\sigma(\varepsilon)$ має дві ділянки: перша, гуківська, має великий кут нахилу, обумовлений модулем зсуву G , а за ним слідує більш полого ділянка пластичної деформації, нахил якої визначається коефіцієнтом зміцнення $\Theta < G$. Очевидно, зазначена картина означає, що модуль зсуву залежить від величини напружень. Для врахування цієї обставини скористаємося найпростішим наближенням

$$G(\sigma) = \Theta + \frac{G - \Theta}{1 + (\sigma/\sigma_p)^\beta}, \quad \beta = \text{const} > 0, \quad (3.35)$$

що описує поданий вище перехід режиму пружної деформації в пластичний. Він відбувається за характерних значень зсувних напружень σ_p і деформації ε_p . Потрібно зазначити, що під час опису структурних фазових переходів рідиноподібного мастила характерна наявність

інваріантів третього порядку, що порушують парність залежності синергетичного потенціалу V від напружень σ . Тому в наближенні (3.35) використовувався лінійний член σ/σ_p ($\beta = 1$), замість квадратичного $(\sigma/\sigma_p)^2$ ($\beta = 2$), і відповідна залежність $V(\sigma)$ уже не була парною. Отже, непарні значення β відповідають експерименту, у якому ковзання блока у взаємно протилежних напрямках нееквівалентно з енергетичного погляду.

Перехід до розгляду фазового перетворення першого роду досягається заміною постійного коефіцієнта g у (3.17) залежністю (3.35) у безрозмірній формі $g(\sigma) = G(\sigma)/G_0$

$$g(\sigma) = g_\theta \left[1 + \frac{\theta^{-1} - 1}{1 + (\sigma/\alpha)^\beta} \right], \quad (3.36)$$

де $g_\theta = \Theta/G_0$; $\theta = \Theta/G$; $\alpha = \sigma_p/\sigma_s$. Для цього прикладу досліджено два значення коефіцієнта: $\beta = 1$ і $\beta = 2$. Згідно з проведеним розглядом для кожного з них плавлення плівки мастила відбувається за механізмом фазового переходу першого роду, але для другого варіанта вдалося провести повніше аналітичне дослідження, тому він представлений докладніше. Нижче показано, що для значення $\beta = 1$ результати аналогічні.

У разі, коли $\beta = 2$, в межах адіабатичного наближення $\tau_\epsilon, \tau_T \ll \tau_\sigma$ система Лоренца (3.17)–(3.19) зводиться до рівняння Ландау – Халатнікова (3.24), у якому синергетичний потенціал є парною функцією напруження σ і визначається виразом (див. додатну область σ на рисунку 3.7)

$$\begin{aligned} V = & \frac{1}{2}(1 - g_\theta)\sigma^2 + g_\theta \left(1 - \frac{T_e}{2} \right) \ln(1 + \sigma^2) - \\ & - \frac{1}{2}g_\theta\alpha^2(\theta^{-1} - 1)(\alpha^2 - 1)^{-1} \times \\ & \times [(T_e - 2) \ln(1 + \sigma^2) + (\alpha^2 - T_e + 1) \ln(1 + \sigma^2/\alpha^2)]. \end{aligned} \quad (3.37)$$

За малих значень T_e залежність $V(\sigma)$ має монотонно зростаючий вигляд із мінімумом у точці $\sigma = 0$ (крива 1). За температури

$$T_c^0 = g_\theta^{-2} \left[g_\theta (\alpha^2 + g_\theta + 1 - \alpha^2 g_\theta \theta^{-1}) + 2\alpha^2 g_\theta \theta^{-1} (g_\theta - 1) + \frac{\alpha^4}{2} D^{1/2} \right], \quad (3.38)$$

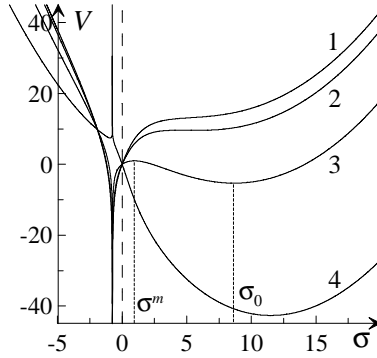


Рисунок 3.7 — Залежність синергетичного потенціалу (3.42) від напружень для фазового переходу першого роду при $g_\theta = 0.6$, $\theta = 0.1$, $\alpha = 0.75$ і різних температурах: 1 — $T_e < T_c^0$; 2 — $T_e = T_c^0$; 3 — $T_c^0 < T_e < T_{c0}$; 4 — $T_e \geq T_{c0}$

$$D = 16g_\theta^2\alpha^{-4}(g_\theta - 1)(\theta^{-1} - 1)(\alpha^{-2} - \theta^{-1}) \quad (3.39)$$

з'являється плато (крива 2), яке при $T_e > T_c^0$ трансформується в мінімум, що відповідає значенню напруження $\sigma_0 \neq 0$, і максимум, що розділяє мінімуми рідиноподібної «впорядкованої» та твердоподібної «невпорядкованої» фаз (крива 3). Із подальшим зростанням температури поверхонь T_e мінімум рідиноподібної фази заглиблюється, а висота міжфазного бар'єру спадає, зникаючи за критичного значення $T_{c0} = 1 + \theta/g_\theta = 1 + g^{-1}$ (3.26). Стационарні значення напружень задаються виразом (рис. 3.8)

$$\sigma_0^m = \left\{ \frac{1}{2} \alpha^2 (g_\theta - 1)^{-1} \left[1 + \alpha^{-2} - g_\theta \alpha^{-2} (T_e - 1) - g_\theta \theta^{-1} \pm D_0^{1/2} \right] \right\}^{1/2}, \quad (3.40)$$

$$D_0 = \left[g_\theta \frac{T_e - 1}{\alpha^2} + \frac{g_\theta}{\theta} - 1 - \alpha^{-2} \right]^2 - 4\alpha^{-2} (g_\theta - 1) \left[\frac{g_\theta}{\theta} (T_e - 1) - 1 \right], \quad (3.41)$$

і верхній знак відповідає максимуму функції $V(\sigma)$, а нижній — мінімуму. За $T_e \geq T_{c0}$ крива $V(\sigma)$ має той самий вигляд, що й для фазового переходу другого роду (крива 4).

У разі, коли $\beta = 1$, синергетичний потенціал є непарною функці-

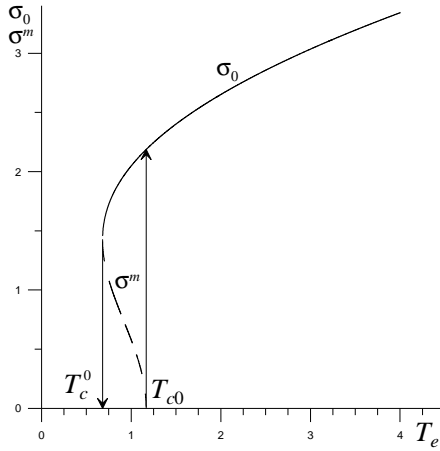


Рисунок 3.8 — Залежність стаціонарних значень напружень від температури T_e при $g_\theta = 0.6$, $\theta = 0.1$, $\alpha = 0.75$ (суцільна крива відповідає стійкому значенню σ_0 , штрихова крива — нестійкому σ^m)

єю σ і визначається виразом (див. рис. 3.7)

$$\begin{aligned}
 V &= \frac{1}{2}(1 - g_\theta)\sigma^2 + g_\theta \left(1 - \frac{T_e}{2}\right) \ln(1 + \sigma^2) - g_\theta(\theta^{-1} - 1)\alpha \times \\
 &\times \left\{ \sigma - \alpha \ln \left|1 + \frac{\sigma}{\alpha}\right| + (T_e - 2) \left[\frac{\alpha}{1 + \alpha^2} \ln \left|1 + \frac{\sigma}{\alpha}\right| + \right. \right. \\
 &\left. \left. + \frac{\alpha}{2(1 + \alpha^2)} \ln(1 + \sigma^2) + (1 + \alpha^2)^{-1} \arctg \sigma \right] \right\}. \quad (3.42)
 \end{aligned}$$

Залежність $V(\sigma)$ при $\sigma > 0$ аналогічна прикладу $\beta = 2$. Для визначення координат особливих точок системи необхідно розв'язати кубічне рівняння, у результаті виходять громіздкі вирази, не наведені тут.

3.5 Вплив адитивного некорельованого шуму

У будь-якій системі існують флуктуації, і їх можна математично описати шумами. Шуми вводяться тоді, коли розв'язується завдання з безліччю неоднорідностей, дефектів, зовнішніх дій тощо. Коли не можна описати всі наявні дії якось об'єктивно. Дій множина, і їх вплив якісно можна представити як шум. Урахування шуму узагальнює описуване явище, оскільки вже припускає синергетичний підхід, у якому реалізуються не рівноважні термодинамічні стани, а стаціонарні. Отже, урахування шуму дозволяє зробити модель, що спочатку ідеалізується, більш наближеною до експерименту. Фактично робиться такий висновок: якщо в системі є флуктуації, то може встановлюватися переривчасте тертя, спостережуване експериментально. Тобто робота присвячена з'ясуванню причин, що приводять до переривчастого тертя, і таку причину знайдено.

У реальних умовах пара тертя має шорстку поверхню – систему западин і виступів. І стохастична модель переривчастого тертя повинна бути пов'язана саме з фрактальною природою контактуючих тіл. Показано, що дія шуму температури приводить до самоподібної поведінки часових рядів напружень $\sigma(t)$, у цьому разі часові ряди є мультифрактальними. Тому введення випадкових сил (шумів) якраз покликане врахувати шорсткості поверхонь і неоднорідності, не наявні в моделі.

Для подальшого дослідження системи будемо діяти в межах методу ефективного потенціалу, описаного в пункті 1.2.5 [9]. Використовуючи адіабатичне наближення $\tau_\sigma \gg \tau_\varepsilon, \tau_T$ в рівняннях (3.18), (3.19) можна покласти $\tau_\varepsilon \dot{\varepsilon} \approx 0, \tau_T \dot{T} \approx 0$, після чого останні приводять до залежностей

$$\varepsilon(t) = \bar{\varepsilon} + \tilde{\varepsilon}\xi_4(t), \quad T(t) = \bar{T} + \tilde{T}\xi_5(t); \quad (3.43)$$

$$\bar{\varepsilon} \equiv \sigma (T_e - 1 + \sigma^2) d(\sigma), \quad \tilde{\varepsilon} \equiv \sqrt{I_\varepsilon + I_T \sigma^2} d(\sigma),$$

$$\bar{T} \equiv (T_e + 2\sigma^2) d(\sigma), \quad \tilde{T} \equiv \sqrt{I_T + I_\varepsilon \sigma^2} d(\sigma), \quad (3.44)$$

де $d(\sigma) \equiv (1 + \sigma^2)^{-1}$. У них флуктуаційні складові походять із відомої властивості адитивності дисперсій гаусових випадкових величин. Отже, синергетичний принцип підпорядкування [1] перетворює адитивні

шуми деформації ε і температури T на мультиплікативні. У результаті вирази (3.17), (3.43) і (3.44) приводять до рівняння Ланжевена

$$\dot{\sigma} = f(\sigma) + \sqrt{I(\sigma)} \xi(t), \quad (3.45)$$

де час t вимірний в одиницях часу релаксації напружень τ_σ .

Узагальнена сила $f(\sigma)$, а також ефективна інтенсивність шуму $I(\sigma)$ подаються рівностями

$$\begin{aligned} f(\sigma) &\equiv -\sigma + g\sigma [1 - (2 - T_\varepsilon)(1 + \sigma^2)^{-1}], \\ I(\sigma) &\equiv I_\sigma + g^2(I_\varepsilon + I_T\sigma^2)(1 + \sigma^2)^{-2}. \end{aligned} \quad (3.46)$$

Для запобігання непорозумінь варто зазначити, що безпосереднє підставлення (3.43) і (3.44) в (3.17) приводить до стохастичної добавки

$$\left[I_\sigma^{1/2} + g \left(I_\varepsilon^{1/2} + I_T^{1/2} \sigma \right) (1 + \sigma^2)^{-1} \right] \xi(t), \quad (3.47)$$

квадрат амплітуди якої відрізняється від ефективної інтенсивності шуму (3.46). Більше того, безпосереднє використання адіабатичного наближення в (3.18) і (3.19) приводить до флуктуаційних доданків у залежностях (3.43) у вигляді $\tilde{\varepsilon} \equiv (I_\varepsilon^{1/2} + I_T^{1/2} \sigma)d(\sigma)$, $\tilde{T} \equiv (I_T^{1/2} - I_\varepsilon^{1/2} \sigma)d(\sigma)$. Останній доданок очевидно не є фізичним, оскільки ефективний шум температури \tilde{T} повністю зникає в разі напружень $\sigma = \sqrt{I_T/I_\varepsilon}$. Формальною причиною такого протиріччя є те, що до рівняння Ланжевена не можуть бути застосовані звичайні методи аналізу.

Для подальшого розгляду домножимо (3.45) на dt і одержимо диференціальне співвідношення Ланжевена

$$d\sigma = f(\sigma)dt + \sqrt{I(\sigma)}dW(t), \quad (3.48)$$

де $dW(t) = W(t + dt) - W(t) \equiv \xi(t)dt$ – вінерівський процес із властивостями

$$\langle dW(t) \rangle = 0; \quad \langle (dW(t))^2 \rangle = 2dt. \quad (3.49)$$

Загалом рівнянню (3.48) може відповідати множина форм рівняння Фоккера – Планка. Рівняння Фоккера–Планка у формі Іто має більш простий вигляд. У подальшому будемо брати до уваги числення Стра-тоновича, оскільки останнє дозволяє автоматично врахувати ефекти

пам'яті, що актуальні під час плавлення ультратонких плівок мастила за рахунок їх малих розмірів. Відповідне рівняння Фоккера – Планка з урахуванням (3.49) записується у вигляді:

$$\frac{\partial P(\sigma, t)}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial \sigma} [f(\sigma)P(\sigma, t)] + \frac{\partial}{\partial \sigma} \left[\sqrt{I(\sigma)} \frac{\partial}{\partial \sigma} \sqrt{I(\sigma)} P(\sigma, t) \right]. \quad (3.50)$$

Із часом розподілення розв'язків (3.48) стає стаціонарним, і його вигляд може бути знайдений з (3.50) за $\partial P(\sigma, t)/\partial t = 0$

$$P(\sigma) = \mathcal{Z}^{-1} \exp\{-U(\sigma)\}, \quad (3.51)$$

де ефективний потенціал поданий рівністю

$$U(\sigma) = \frac{1}{2} \ln I(\sigma) - \int_0^{\sigma} \frac{f(\sigma')}{I(\sigma')} d\sigma'. \quad (3.52)$$

Точки екстремуму розподілення (3.51) визначаються умовою $dU/d\sigma \equiv dI/d\sigma - 2f = 0$. Або в явному вигляді

$$(1 - g)x^3 + g(2 - T_e)x^2 - g^2 I_T x + 2g^2 (I_T - I_\varepsilon) = 0, \quad (3.53)$$

де $x \equiv 1 + \sigma^2$. Вираз (3.53) відрізняється від одержаного в разі числення Іто. Однак під час збільшення в (3.53) інтенсивностей шумів I_T, I_ε у 2 рази розрізнення зникає. Тому проведений далі аналіз, що ґрунтується на вивченні екстремумів функцій розподілення (побудова фазових діаграм, інтерпретування стаціонарних станів) під час використання числення Стратоновича співпадає з результатами, одержаними в межах підходу Іто. Однак потенціал (3.52) не можна звести до раніш одержаного простим перенормуванням інтенсивностей шумів, оскільки він відрізняється від останнього лише виглядом першого доданка (наявністю коефіцієнта 1/2). Тому часові ряди напружень різняться. Оскільки запропонована робота має за мету дослідження особливостей еволюції напружень у часі, то ми використовуємо числення Стратоновича.

За умови фіксованої інтенсивності I_ε фазова діаграма має вигляд, показаний на рисунку 3.9а, у разі фіксованої інтенсивності I_T — на рисунку 3.9б. Лінії $1'$, $2'$ на діаграмах відповідають межах утрати стійкості системи. Пряма $1'$ визначається рівністю

$$T_e = 1 + g^{-1} + g(I_T - 2I_\varepsilon), \quad (3.54)$$

що походить із (3.53), і подає межу існування ненульового стаціонарного розв'язку $\sigma_0 = 0$. Нижче від цієї прямої завжди реалізується максимум $P(\sigma)$ при $\sigma = 0$, а вище від неї цього максимуму не існує. На діаграмі видно три області, що відповідають різним режимам тертя. Фактично обидва рисунки є площинними перерізами тривимірної фазової діаграми в координатах $T_e - I_\varepsilon - I_T$. Тому аналізовані далі точки 1–3 на обох діаграмах вибрані на перетині січних площин у такий спосіб, що відповідають однаковим параметрам системи.

На рисунку 3.10 показаний ненормоване розподілення ймовірності (3.51), що відповідає точкам на рисунку 3.9. Точка 1 знаходиться в області сухого тертя DF фазової діаграми, тому спостерігається один максимум функції розподілення при $\sigma_0 = 0$. Двофазна область SS діаграми характеризується співіснуванням максимумів розподілення $P(\sigma)$ за нульового й ненульового значень напружень (точка 2). Точка 3 знаходиться в області, де спостерігається один максимум розподілення ймовірності за $\sigma_0 \neq 0$, що відповідає режиму рідинного тертя або ковзання. Залежності $P(\sigma)$ на рисунку 3.10 побудовані в подвійному логарифмічному масштабі. Видно, що для кривих DF и SS розподілення набуває спадного степеневого вигляду. Такий режим відповідає значенням $\sigma \ll 1$ і $I_\sigma, I_\varepsilon \ll I_T$, за котрих (3.51) можна звести до вигляду

$$P(\sigma) = \sigma^{-1} \mathcal{P}(\sigma), \quad (3.55)$$

де функція $\mathcal{P}(\sigma)$ визначається виразом

$$\begin{aligned} \mathcal{P}(\sigma) = & \mathcal{Z}^{-1} g^{-1} I_T^{-1/2} (1 + \sigma^2) \times \\ & \times \exp \left\{ I_T^{-1} g^{-1} \left[\frac{\sigma^4}{4} (1 - g^{-1}) + \right. \right. \\ & \left. \left. + (T_e - 1 - g^{-1}) \ln \sigma + \sigma^2 \left(\frac{T_e}{2} - g^{-1} \right) \right] \right\}. \quad (3.56) \end{aligned}$$

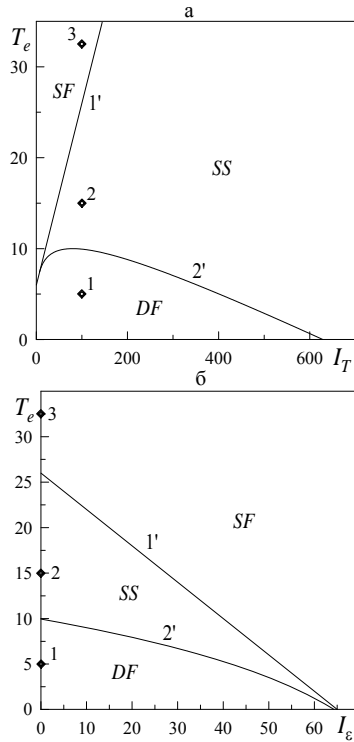


Рисунок 3.9 — Фазові діаграми при $g = 0.2$ з областями рідинного (SF), сухого (DF) і переривчастого (SS) тертя: а — при $I_\varepsilon = 0$; б — при $I_T = 100$

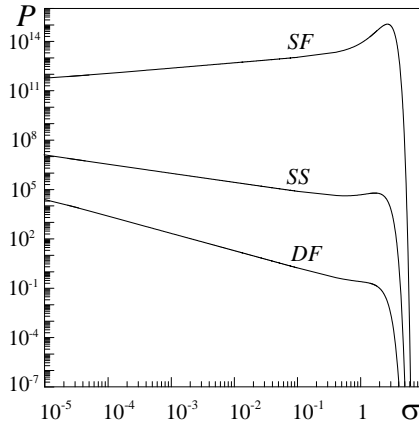


Рисунок 3.10 — Функція розподілення (3.51) при $I_\sigma = 10^{-20}$, $I_\varepsilon = 0$, $I_T = 100$ і режимах, показаних точками на рисунку 3.9: 1 — $T_e = 5$ (*DF*); 2 — $T_e = 15$ (*SS*); 3 — $T_e = 32.5$ (*SF*)

Відомо, що самоподібним системам відповідає однорідна функція розподілення (3.55). Воно буде однорідним тоді, коли функція (3.56) — константа. У разі малих значень напружень множник перед експонентою $1 + \sigma^2 \rightarrow 1$. Проаналізуємо доданки під знаком експоненти, що роблять внесок у розподілення. Перший доданок під час малих напружень за рахунок четвертого степеня робить незначний внесок, а оскільки $g < 1$, він завжди від'ємний, тобто, з іншого боку, під час великих напружень розподілення набуває експоненціально спадного вигляду. Другий та третій доданки за високих значень температури зі зростанням напружень також зростають, тому, як видно із рисунка 3.10, у режимі *SF* степенева асимптотика $P(\sigma) \propto \sigma^{-1}$ не спостерігається, а ймовірність за малих значень стає зростаючою функцією. Отже, наявну самоподібну поведінку потрібно очікувати за температур, для котрих в області $\sigma < 1$ другий і третій доданки зі зростанням напружень зменшуються, тобто при $T_e < 1 + g^{-1}$.

Числення Стратоновича привело до першої вагомої відмінності порівняно з підходом Іто: в (3.55) показник розподілення дорівнює -1 , у той час, як раніше він набував значення -2 .

3.6 Часові ряди напружень

Для числового розв'язання рівняння (3.48) скористаємося методом Ейлера. У нашому прикладі (3.48) являє собою стохастичне диференціальне рівняння (СДУ) Стратоновича. Для застосування звичайної ітераційної процедури необхідно від СДУ Стратоновича перейти до еквівалентного СДУ Іто. Рівнянню (3.48) з урахуванням (3.49) відповідає СДУ Іто у вигляді [8]

$$d\sigma = \left[f(\sigma) + \sqrt{I(\sigma)} \frac{\partial}{\partial \sigma} \sqrt{I(\sigma)} \right] dt + \sqrt{I(\sigma)} dW(t). \quad (3.57)$$

З урахуванням визначення дискретного аналога диференціала випадкової сили $dW(t) \equiv \sqrt{\Delta t} W_i$ і (3.46) одержуємо ітераційну процедуру для розв'язання рівняння (3.57)

$$\begin{aligned} \sigma_{i+1} = \sigma_i &+ \left(f(\sigma_i) + \frac{g^2 \sigma_i [I_T(1 - \sigma_i^2) - 2I_\varepsilon]}{(1 + \sigma_i^2)^3} \right) \Delta t + \\ &+ \sqrt{I(\sigma_i)} \Delta t W_i. \end{aligned} \quad (3.58)$$

Рівняння розв'язується на часовому проміжку $t \in [0, T]$. У разі заданої кількості ітерацій N (кількості точок часового ряду) приріст часу визначається як $\Delta t = T/N$. Сила W_i має такі властивості (пор. з (3.49)):

$$\langle W_i \rangle = 0, \quad \langle W_i W_{i'} \rangle = 0, \quad \langle W_i^2 \rangle \rightarrow 2. \quad (3.59)$$

Адекватно представити випадкову силу, що має властивості білого шуму, дозволяє модель Бокса – Мюллера:

$$W_i = \sqrt{\mu^2} \sqrt{-2 \ln r_1} \cos(2\pi r_2), \quad r_n \in (0, 1], \quad (3.60)$$

де, відповідно до (3.59), дисперсія $\mu^2 = 2$, а W_i – абсолютно випадкове число з властивостями (3.59). Псевдовипадкові числа r_1 і r_2 мають рівномірне розподілення. Ефективний потенціал (3.52) має мінімуми при додатному та від'ємному значеннях напружень σ . Тому в разі числового розв'язання рівняння (3.57) за рахунок флуктуацій можуть здійснюватися переходи системи між станами, що відповідають зазначеним мінімумам. Оскільки ми розглядаємо рух верхньої поверхні, що зсувається

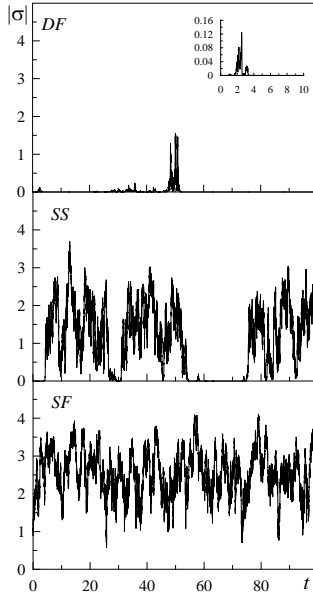


Рисунок 3.11 — Часові ряди напружень $|\sigma|(t)$, одержані в результаті ітераційної процедури (3.58) при $N = 10^4$, $t = 100$, $\Delta t = 0.01$. Режими, вказані на рисунку, відповідають точкам на фазовій діаграмі (рис. 3.9)

в один бік, далі проаналізована поведінка $|\sigma|(t)$. Типові реалізації $|\sigma|(t)$ для режимів, що розглядаються, наведені на рисунку 3.11.

Під час сухого тертя (режим DF) видно довготривалі ділянки, на яких напруження близькі до нульового значення, розмежовані вузькими піками. На вставленні до рисунка показано залежність $|\sigma|(t)$ під час багатократного збільшення. Видно, що характер поведінки при збільшенні масштабу не змінюється, що відповідає самоподібній поведінці. У разі параметрів переривчастого тертя (SS) відбуваються випадкові переходи між нульовим і ненульовим значеннями напружень σ . У режимі рідинного тертя SF відбуваються флуктуації біля ненульового середнього значення напружень.

3.7 Вплив корельованих флуктуацій температури на плавлення плівки мастила

У цьому підрозділі проведений аналіз впливу корельованого шуму температури на процес плавлення ультратонкої плівки мастила. Оскільки система має малі розміри, вплив шуму виявляється істотним, і для повноти аналізу його необхідно врахувати. Урахування шуму дозволяє описати переривчастий stick-slip режим.

3.7.1 Представлення кольорового шуму та основні рівняння

Продовжимо дослідження системи рівнянь (3.17)–(3.19), що описує плавлення ультратонкої плівки мастила з температурою T , затиснутою між двома атомарно-гладкими поверхнями з температурою T_e [4].

Можливий приклад, коли сила тертя змінюється в часі випадково. Такий режим виявлений методами молекулярної динаміки й показаний на рисунку 3.12. Подібний нерегулярний режим спостерігався в експериментах, у яких як мастило використовувалася плівка тетрадекана товщиною 0.8 нм, що відповідає двом моношарам речовини, і

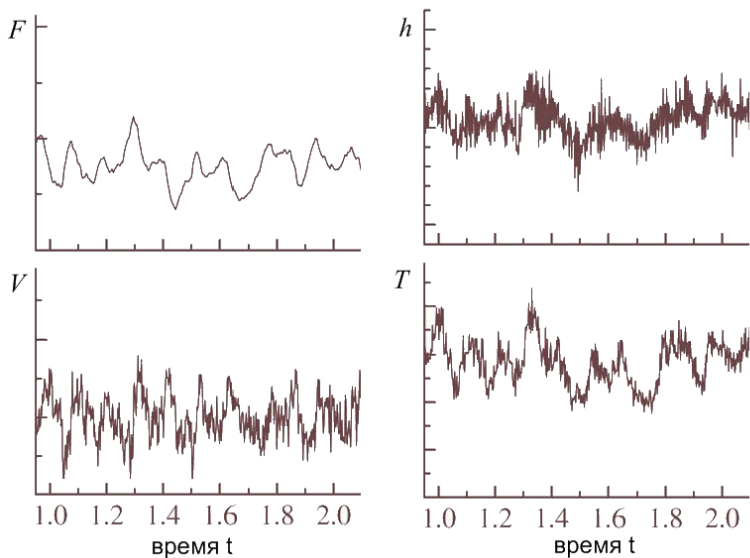


Рисунок 3.12 — Часові залежності сили тертя F , швидкості верхньої зсувної поверхні V , товщини мастила h і температури мастила T [14].

швидкість зсуву близька до критичного значення. Очевидно, цей режим викликаний флуктуаціями, що виявляються істотними за рахунок малого розміру. Причому флуктуації здійснює також температура мастила T , що репрезентує середню величину. З'ясуємо причину таких флуктуацій.

У молекулярній динаміці температура системи вводиться через питоме середнє значення кінетичної енергії

$$E = \frac{\sum_{n=1}^N m_n v_n^2}{2N}, \quad (3.61)$$

де m — молекулярна маса атома, v — його швидкість та N — повна кількість атомів. Вираз (3.61) являє собою середнє значення, біля якого відбуваються флуктуації енергії частинок, що становлять систему. За великої кількості частинок система з часом приходить до стану термодинамічної рівноваги, за якої значення (3.61) не змінюється у часі. Проте ми розглядаємо систему, у якій кількість частинок обмежена

(плівка мастила має товщину в декілька атомних шарів). Тому значення (3.61) змінюється з часом випадково за рахунок флуктуацій швидкості обмеженої кількості частинок і його вже не можна вважати за постійне середнє значення. Отже, енергія буде флуктуувати. У разі зміни кінетичної енергії (3.61) потенціальна енергія змінюється так, що повна енергія системи завжди залишається постійною.

Кінетична енергія системи та її температура пов'язані таким співвідношенням:

$$E = \frac{i}{2}kT, \quad (3.62)$$

де i – кількість ступенів свободи (у нашому прикладі $i = 3$), k – стала Больцмана. Порівнюючи (3.61) і (3.62), маємо миттєве значення температури

$$T = \frac{\sum_{n=1}^N m_n v_n^2}{3kN}. \quad (3.63)$$

Для обчислення температури цієї системи необхідно в (3.63) додатково проводити усереднення за часом. Проте, як показано вище, це значення для ультратонких плівок не є постійним. Наприклад, коли зсувні напруження перевищують критичне значення, настає плавлення, за якого швидкості частинок мастила зростають, оскільки система стає менш упорядкованою. Збільшенню флуктуацій також сприяє неоднорідність системи – дефекти кристалічної будови мастила, нерівності поверхонь тертя, домішки у використовуваному мастилі, неоднорідне розподілення температури термостата тощо. Указані ефекти в експериментальних ситуаціях завжди актуальні. Для їх урахування і вводять до розгляду флуктуації енергії.

Далі розглядається вплив флуктуацій енергії (3.61). Використовуючи лінійний зв'язок між енергією та температурою (3.62), урахуємо флуктуації енергії, увівши флуктуації температури, яка явно входить до еволюційного рівняння. Далі під флуктуаціями температури маються на увазі флуктуації кінетичної енергії частинок мастила. Проте флуктуації температури в такий спосіб можна вводити лише для ультратонких плівок мастил, що складаються з обмеженої кількості частинок.

Флуктуації температури, показані на рисунку 3.12, на відміну від білого шуму, є корельованими. Це впливає з того, що згідно з рисун-

ком, якщо температура збільшується, то в наступний момент імовірність того, що вона продовжуватиме збільшуватися більша, ніж імовірність її зменшення.

Уведемо флуктуації температури, слідуючи [2]. Часова кореляція розмірної температури T_D мастила визначається середнім значенням добутку

$$\varphi(\tau) = \langle \Delta T_D(t) \Delta T_D(t + \tau) \rangle, \quad (3.64)$$

де $\Delta T_D(t)$ – різниця між поточною та середньою температурою. У межах припущення про квазістаціонарність флуктуацій ΔT_D функція $\varphi(\tau)$ набуває вигляду

$$\varphi(\tau) = \langle (\Delta T_D)^2 \rangle \exp(-\zeta|\tau|). \quad (3.65)$$

Тут $1/\zeta$ задає час релаксації для встановлення рівноваги. Вважаючи, що у формулах (3.64) і (3.65) моменти часу пов'язані рівністю $t + \tau = t'$, одержуємо

$$\varphi(t' - t) = \langle \Delta T_D(t) \Delta T_D(t') \rangle = \langle (\Delta T_D)^2 \rangle \exp(-\zeta|t' - t|). \quad (3.66)$$

Тоді, підстановка середнього квадрата флуктуацій температури $\langle (\Delta T_D)^2 \rangle = T_D^2/c_v$ у вираз (3.66) дає

$$\langle \Delta T_D(t) \Delta T_D(t') \rangle = \frac{T_D^2}{c_v} \exp(-\zeta|t' - t|). \quad (3.67)$$

Такого типу флуктуації описуються процесом Орнштейна – Уленбека $\lambda(t)$ [8], який має такі моменти (пор. з (3.67)):

$$\langle \lambda(t) \rangle = 0, \quad \langle \lambda(t) \lambda(t') \rangle = \frac{I}{\tau_\lambda} \exp\left(-\frac{|t - t'|}{\tau_\lambda}\right), \quad (3.68)$$

тут I відіграє роль інтенсивності флуктуацій температури, а τ_λ – часу їх кореляції. Для опису впливу кореляцій температури процес $\lambda(t)$ далі враховується у безрозмірному рівнянні (3.19) як додатковий температурний доданок. Тому величини λ , I в (3.68) уже виміряні в одиницях

$$\lambda_s = T_c, \quad I_s = T_c^2. \quad (3.69)$$

Порівнюючи формулу (3.67) з другою рівністю (3.68), з урахуванням одиниць вимірювання (3.69) одержуємо:

$$\lambda(t) = \Delta T(t), \quad \tau_\lambda = \frac{1}{\zeta}, \quad I = \frac{T^2}{\zeta c_v}. \quad (3.70)$$

Отже, величина інтенсивності шуму I однозначно визначається температурою та теплоємністю мастила c_v . На перший погляд може здатися, що на наведених далі фазових діаграмах $T_e(I)$ кожному значенню I відповідає єдине T_e , і замість областей повинна існувати крива в зазначених координатах, рух по якій описує еволюцію системи. Проте це не актуально, оскільки параметр T_e представляє температуру термостата, що не визначає однозначно температури T . Потрібно лише вважати, що в результаті самоорганізації системи певному значенню T_e може відповідати безліч значень T , і згідно з (3.70), інтенсивностей I у різні моменти часу. Крім того, до зміни I приводить варіація c_v із часом. Отже, доречно говорити про існування фазової діаграми. Інтенсивність I можна також змінювати за рахунок вибору параметра ζ , що характеризує конкретну систему. Останнє означає, що в одних системах шум не робить істотного впливу на їх поведінку з часом, а в інших впливає критично.

Проте, тут, не обмежуючись таким підходом, флуктуації температури можна розуміти в ширшому сенсі. Це пов'язано з тим, що зазвичай термічний вплив роблять різні зовнішні стохастичні джерела. Крім того, шум можна рівноправним чином інтерпретувати як у разі допомоги флуктуацій T , так і T_e . Таке представлення шуму часто використовується під час моделювання його в реальних фізичних системах [8].

Процес Орнштайна – Уленбека $\lambda(t)$ представляє реалізацію корельованих випадкових блукань. Мається на увазі, що зі збільшенням швидкості частинки збільшується ймовірність її зіткнення з іншою частинкою. Водночас усі частинки повертаються до нульової швидкості тим швидше, чим більша їх швидкість. Процес є кольоровим гаусовим шумом із ненульовим часом кореляції τ_λ та інтенсивністю I . Він може бути одержаний під час розв'язання рівняння Орнштайна – Уленбека

$$\frac{d\lambda(t)}{dt} = -\frac{1}{\tau_\lambda}\lambda(t) - \frac{1}{\tau_\lambda}\xi(t), \quad (3.71)$$

де $\xi(t)$ представляє гаусів білий шум із нульовим середнім значенням та інтенсивністю I

$$\langle \xi(t) \rangle = 0, \quad \langle \xi(t)\xi(t') \rangle = 2I\delta(t - t'). \quad (3.72)$$

Водночас джерело $\lambda(t)$ на великих часових інтервалах подібне до білого шуму $\xi(t)$, а на малих — до броунівського руху, і в стаціонарній межі ($t, t' \gg \tau_\lambda$) має моменти (3.68).

Помноживши (3.71) на dt одержуємо стохастичне диференціальне рівняння

$$d\lambda(t) = -\frac{1}{\tau_\lambda}\lambda(t)dt - \frac{1}{\tau_\lambda}dW(t), \quad (3.73)$$

де вінерівський процес має властивості

$$\langle dW(t) \rangle = 0; \quad \langle (dW(t))^2 \rangle = 2I dt. \quad (3.74)$$

Для числової реалізації $\lambda(t)$ розв'яжемо рівняння (3.73), скориставшись при цьому методом Ейлера. З урахуванням визначення дискретного аналогу диференціала випадкової сили $dW(t) \equiv \sqrt{\Delta t}W_n$ одержуємо таку ітераційну процедуру:

$$\lambda_{n+1} = \lambda_n \left(1 - \frac{\Delta t}{\tau_\lambda} \right) - \frac{\sqrt{\Delta t}}{\tau_\lambda} W_n. \quad (3.75)$$

Розв'язання проводиться на інтервалі $t \in [0, T]$, і за заданої кількості ітерацій N приріст часу визначається як $\Delta t = T/N$. Випадкова сила W_n має такі властивості:

$$\langle W_n \rangle = 0, \quad \langle W_n W_{n'} \rangle = 0 \quad \langle W_n^2 \rangle \rightarrow 2I. \quad (3.76)$$

Для її моделювання використовується функція Бокса — Мюллера

$$W_n = \mu \sqrt{-2 \ln r_1} \cos(2\pi r_2), \quad r_i \in (0, 1], \quad (3.77)$$

де дисперсія $\mu = \sqrt{2}$, а W_n — абсолютно випадкове кількість із властивостями (3.76). Псевдовипадкові числа r_1 і r_2 мають рівномірний розподілення і повторюються через певний інтервал.

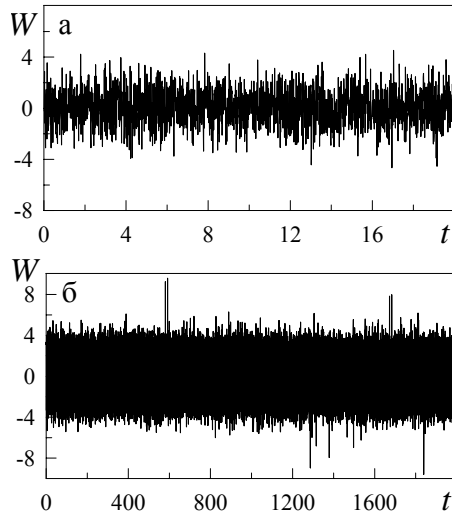


Рисунок 3.13 — Реалізація білого шуму (3.77) при $I = 1$ ($\mu^2 = 2I$): а — $N = 2 \cdot 10^3$, $T = 20$, $\Delta t = 0.01$; б — $N = 2 \cdot 10^5$, $T = 2 \cdot 10^3$, $\Delta t = 0.01$

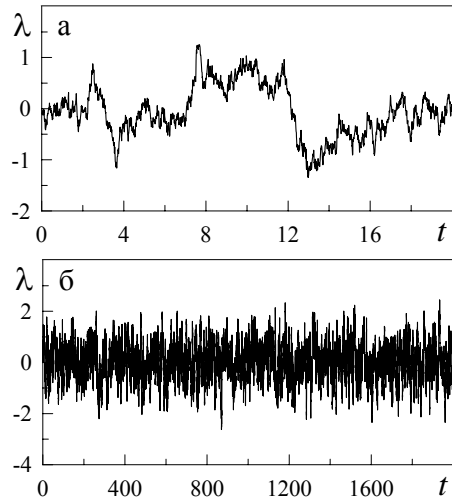


Рисунок 3.14 — Реалізація кольорового шуму (3.75) при $I = 1$ ($\mu^2 = 2I$), $\tau_\lambda = 2.0$: а — $N = 2 \cdot 10^3$, $T = 20$, $\Delta t = 0.01$; б — $N = 2 \cdot 10^5$, $T = 2 \cdot 10^3$, $\Delta t = 0.01$

На рисунку 3.13 представлена реалізація (3.77) для різних часових масштабів. Характер поведінки для обох масштабів подібний, шум є некорельованим. Процес Орнштайна – Уленбека $\lambda(t)$ для аналогічних інтервалів часу представлений на рисунку 3.14. Видно, що на коротких інтервалах (рис. 3.14а) він подібний до броунівського руху, і тут кожне подальше значення залежить від попереднього, тобто шум є корельованим. На довгих же інтервалах (рис. 3.14б) кореляція втрачається, процес стає подібним до білого шуму, реалізація якого показана на рисунку 3.13. Оскільки, на відміну від білого шуму, стаціонарний процес Орнштайна – Уленбека має кінцеву дисперсію, його часто використовують як модель реального шумового сигналу.

З урахуванням стохастичного доданка останнє рівняння системи, що розглядається (3.19) набуває вигляду

$$\tau_T \dot{T} = (T_e - T) - \sigma \varepsilon + \sigma^2 + \lambda(t). \quad (3.78)$$

У межах адіабатичного наближення

$$\tau_T \ll \tau_\sigma, \tau_\varepsilon, \quad (3.79)$$

коли температура мастила T слідує за зміною зсувних компонент напружень σ і деформації ε , у рівнянні (3.78) можна виділити малий параметр, і покласти $\tau_T \dot{T} \simeq 0$. У результаті одержуємо вираз для температури

$$T = T_e - \sigma \varepsilon + \sigma^2 + \lambda(t). \quad (3.80)$$

Додамо системі (3.17), (3.18), (3.80) більш простого вигляду, звівши її до єдиного рівняння для зсувних напружень $\sigma(t)$. Рівняння (3.17) дає деформацію

$$\varepsilon = \frac{1}{g} [\sigma + \tau_\sigma \dot{\sigma}], \quad (3.81)$$

а рівності (3.18), (3.80) з урахуванням (3.81) набувають вигляду

$$\tau_\varepsilon \dot{\varepsilon} = -\frac{1}{g} [\sigma + \tau_\sigma \dot{\sigma}] + \sigma \left[T_e - 1 - \frac{\sigma}{g} (\sigma + \tau_\sigma \dot{\sigma}) + \sigma^2 \right] + \sigma \lambda(t), \quad (3.82)$$

$$T = T_e - \frac{\sigma}{g} [\sigma + \tau_\sigma \dot{\sigma}] + \sigma^2 + \lambda(t). \quad (3.83)$$

Підставляючи (3.82) в результат диференціювання виразу (3.81), одержимо еволюційне рівняння в канонічному вигляді рівняння нелінійного стохастичного осцилятора типу генератора Ван дер Поля

$$m\ddot{\sigma} + \gamma(\sigma)\dot{\sigma} = f(\sigma) + \phi(\sigma)\lambda(t), \quad (3.84)$$

де коефіцієнт тертя γ , сила f , амплітуда шуму ϕ і параметр m , що зводиться до маси системи, визначаються виразами

$$\begin{aligned} \gamma(\sigma) &\equiv \frac{1}{g} [\tau_\varepsilon + \tau_\sigma(1 + \sigma^2)], & f(\sigma) &\equiv \sigma (T_e - 1 - g^{-1}) - \sigma^3 (g^{-1} - 1), \\ \phi(\sigma) &\equiv \sigma, & m &\equiv \frac{\tau_\sigma \tau_\varepsilon}{g}. \end{aligned} \quad (3.85)$$

3.7.2 Метод ефективного потенціалу

Знайдемо розподілення системи у фазовому просторі, що параметризується узагальненими «координатою» σ і «імпульсом» $p \equiv m\dot{\sigma}$ залежно від часу t . Для цього скористаємося методом ефективного потенціалу, описаним тут на основі роботи [15]. Подамо рівняння Ейлера (3.84) в гамільтоновій формі

$$\dot{\sigma} = m^{-1}p, \quad \dot{p} = -m^{-1}\gamma(\sigma)p + f(\sigma) + \phi(\sigma)\lambda(t). \quad (3.86)$$

Статистичне дослідження зводиться до визначення функції $\Pi(\sigma, p, t)$, що представляє густину ймовірності наявності значення напружень σ і швидкості його зміни $\dot{\sigma}$ в заданий момент часу t . Вона є усередненою за шумом λ функцією розподілення $\rho(\sigma, p, t)$ розв'язків системи (3.86)

$$\Pi(\sigma, p, t) = \langle \rho(\sigma, p, t) \rangle. \quad (3.87)$$

Припустимо, що функція $\rho = \rho(\sigma, p, t)$ задовольняє рівнянню безперервності

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \left[\frac{\partial}{\partial \sigma}(\dot{\sigma}\rho) + \frac{\partial}{\partial p}(\dot{p}\rho) \right] = 0. \quad (3.88)$$

Підставляючи сюди рівність (3.86), приходимо до рівняння Ліувіля

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \left(\widehat{L} + \widehat{N}\lambda \right) \rho, \quad (3.89)$$

де введені оператори

$$\widehat{L} \equiv -\frac{p}{m} \frac{\partial}{\partial \sigma} - \frac{\partial}{\partial p} \left(f - \frac{\gamma}{m} p \right), \quad \widehat{N} \equiv -\phi \frac{\partial}{\partial p}. \quad (3.90)$$

В межах представлення взаємодії мікроскопічна функція розподілення визначається виразом $\varpi = e^{-\widehat{L}t} \rho$, і рівняння (3.89) набуває вигляду $\partial \varpi / \partial t = \widehat{\mathcal{R}} \varpi$, $\widehat{\mathcal{R}} \equiv \lambda \left(e^{-\widehat{L}t} \widehat{N} e^{\widehat{L}t} \right)$. Метод кумулянтного розвинення [15] із точністю до доданків порядку $O(\widehat{\mathcal{R}}^2)$ приводить до лінійного диференціального кінетичного рівняння $\partial \langle \varpi \rangle (t) / \partial t = \left[\int_0^t \langle \widehat{\mathcal{R}}(t) \widehat{\mathcal{R}}(t') \rangle dt' \right] \langle \varpi \rangle (t)$. Перехід від представлення взаємодії до початкового дає рівняння для функції розподілення (3.87)

$$\frac{\partial}{\partial t} \Pi(t) = \left\{ \widehat{L} + \int_0^t \langle \lambda(\tau) \lambda(0) \rangle \left[\widehat{N} \left(e^{\widehat{L}\tau} \widehat{N} e^{-\widehat{L}\tau} \right) \right] d\tau \right\} \Pi(t). \quad (3.91)$$

Ураховуючи, що фізичний час t набагато перевищує час кореляції шуму τ_λ , верхню межу інтегрування можна дорівняти ∞ . Тоді розвинення експонент в (3.91) приводить до виразу

$$\frac{\partial \Pi}{\partial t} = \left(\widehat{L} + \widehat{\Lambda} \right) \Pi, \quad (3.92)$$

де оператор розсіяння

$$\widehat{\Lambda} \equiv \sum_{n=0}^{\infty} \widehat{\Lambda}^{(n)}, \quad \widehat{\Lambda}^{(n)} \equiv C^{(n)} \left(\widehat{N} \widehat{L}^{(n)} \right) \quad (3.93)$$

визначається комутаторами за рекурентною формулою

$$\widehat{L}^{(n+1)} = [\widehat{L}, \widehat{L}^{(n)}], \quad \widehat{L}^{(0)} \equiv \widehat{N} \quad (3.94)$$

($[\widehat{A}, \widehat{B}] = \widehat{A}\widehat{B} - \widehat{B}\widehat{A}$) та моментами кореляційній функції (3.68)

$$C^{(n)} = \frac{1}{n!} \int_0^{\infty} \tau^n \langle \lambda(\tau) \lambda(0) \rangle d\tau. \quad (3.95)$$

Перші з них дорівнюють

$$C^{(0)} = I, \quad C^{(1)} = I\tau_\lambda. \quad (3.96)$$

Загалом подальший розгляд не видається можливим, тому скористаємося спрощеним припущенням, що полягає у виділенні малого параметра $\epsilon \ll 1$, який співпадає з числом Кубо [15]. Вважаючи в рівнянні (3.84) коефіцієнт $m = \epsilon^2$ і вимірюючи узагальнений «імпульс» в одиницях ϵ , досліджуємо приклад передемпфованого осцилятора, у якому сила рідкого тертя перевищує решту складових в $\epsilon^{-1} \gg 1$ разів. Тоді рівняння (3.86) набувають вигляду

$$\frac{\partial \sigma}{\partial t} = \epsilon^{-1} p, \quad \frac{\partial p}{\partial t} = -\epsilon^{-2} \gamma(\sigma) p + \epsilon^{-1} [f(\sigma) + \phi(\sigma) \lambda(t)]. \quad (3.97)$$

Відповідне рівняння Фоккера – Планка (3.92) записується у формі

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - \widehat{L} \right) \Pi = \epsilon^{-2} \widehat{\Lambda} \Pi, \quad (3.98)$$

де оператор $\widehat{L} \equiv \epsilon^{-1} \widehat{L}_1 + \epsilon^{-2} \widehat{L}_2$ складається з компонент $\widehat{L}_1 \equiv -p(\partial/\partial\sigma) - f(\partial/\partial p)$, $\widehat{L}_2 \equiv \gamma(\partial/\partial p)p$. Оператор розсіяння $\widehat{\Lambda}$ визначається виразами (3.90), (3.93)–(3.95) і з точністю до доданків другого порядку малості має вигляд

$$\begin{aligned} \widehat{\Lambda} = & \left(C^{(0)} + \gamma C^{(1)} \right) \phi^2 \frac{\partial^2}{\partial p^2} + \\ & + \epsilon C^{(1)} \phi^2 \left[-\frac{1}{\phi} \left(\frac{\partial \phi}{\partial \sigma} \right) \left(\frac{\partial}{\partial p} + p \frac{\partial^2}{\partial p^2} \right) + \frac{\partial^2}{\partial \sigma \partial p} \right] + O(\epsilon^2). \end{aligned} \quad (3.99)$$

Оскільки плавлення мастила характеризується напруженнями σ і часом t , то розглянемо проєкцію функції розподілення на напівпростір (σ, t) . Для цього перейдемо до рівняння Фоккера – Планка відносно функції $P(\sigma, t)$, використовуючи моменти початкового розподілення $P_n(\sigma, t) \equiv \int p^n \Pi(\sigma, p, t) dp$, нульовий із яких дає необхідний результат. Перемножуючи рівняння (3.98) на p^n та інтегруючи за всіма імпульса-

ми приходимо до рекурентного співвідношення

$$\begin{aligned} \epsilon^2 \frac{\partial P_n}{\partial t} - n\gamma P_n + \epsilon \left(\frac{\partial P_{n+1}}{\partial \sigma} + n f P_{n-1} \right) = \\ = n(n-1) \left(C^{(0)} + \gamma C^{(1)} \right) \phi^2 P_{n-2} + \\ + \epsilon n C^{(1)} \left[\phi^2 \frac{\partial P_{n-1}}{\partial \sigma} - n\phi \left(\frac{\partial \phi}{\partial \sigma} \right) P_{n-1} \right] + O(\epsilon^2). \end{aligned} \quad (3.100)$$

Далі на основі ієрархічного підходу до (3.100) запишемо рівняння Фоккера – Планка. За умови, якщо $n = 0$, одержуємо рівняння для шуканої функції $P = P_0(\sigma, t)$

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -\epsilon^{-1} \frac{\partial P_1}{\partial \sigma}. \quad (3.101)$$

Момент першого порядку P_1 задається рівністю

$$P_1 = \frac{\epsilon}{\gamma} \left\{ f P + \frac{\partial P_2}{\partial \sigma} - C^{(1)} \left[\phi^2 \frac{\partial P}{\partial \sigma} - \phi \left(\frac{\partial \phi}{\partial \sigma} \right) P \right] \right\}, \quad (3.102)$$

що впливає з (3.100), де $n = 1$ і враховуються члени першого порядку за $\epsilon \ll 1$. Урахування членів нульового порядку за ϵ при $n = 2$ дозволяє записати вираз для моменту другого порядку P_2

$$P_2 = - \left(\frac{C^{(0)}}{\gamma} + C^{(1)} \right) \phi^2 P. \quad (3.103)$$

У результаті рівняння Фоккера – Планка

$$\frac{\partial P}{\partial t} = - \frac{\partial}{\partial \sigma} \left(D^{(1)} P \right) + \frac{\partial}{\partial \sigma} \left(D^{(2)} \frac{\partial P}{\partial \sigma} \right) \quad (3.104)$$

виражається через коефіцієнти дрейфу й дифузії

$$D^{(1)} = \frac{1}{\gamma} \left\{ f - C^{(0)} \phi^2 \frac{\partial \gamma^{-1}}{\partial \sigma} - \phi \frac{\partial \phi}{\partial \sigma} \left(\frac{2C^{(0)}}{\gamma} + C^{(1)} \right) \right\}, \quad (3.105)$$

$$D^{(2)} = \frac{\phi^2}{\gamma} \left(\frac{C^{(0)}}{\gamma} + 2C^{(1)} \right). \quad (3.106)$$

Стационарний розв'язок рівняння (3.104) приводить до розподілення

$$P(\sigma) = \mathcal{Z}^{-1} \exp \{-E(\sigma)\} \quad (3.107)$$

з ефективним потенціалом

$$E(\sigma) = - \int_0^\sigma \frac{D^{(1)}(x)}{D^{(2)}(x)} dx \quad (3.108)$$

і нормуючою сталою \mathcal{Z} .

3.7.3 Безперервне перетворення

3.7.3.1 Динамічна фазова діаграма

Підставляючи у вирази (3.105), (3.106) співвідношення (3.85), знайдемо коефіцієнти дрейфу й дифузії в явному вигляді

$$D^{(1)} = \frac{g}{\tau_\varepsilon + \tau_\sigma(1 + \sigma^2)} \left\{ \sigma^3 \left[\frac{2I g \tau_\sigma}{[\tau_\varepsilon + \tau_\sigma(1 + \sigma^2)]^2} + \frac{g - 1}{g} \right] + \sigma \left[T_e - \frac{1 + g}{g} - \frac{2I g}{\tau_\varepsilon + \tau_\sigma(1 + \sigma^2)} - I \tau_\lambda \right] \right\}, \quad (3.109)$$

$$D^{(2)} = \frac{I g \sigma^2}{\tau_\varepsilon + \tau_\sigma(1 + \sigma^2)} \left[\frac{g}{\tau_\varepsilon + \tau_\sigma(1 + \sigma^2)} + 2\tau_\lambda \right]. \quad (3.110)$$

Розподілення (3.107), показане на рисунку 3.15, має максимуми, положення яких визначаються набором величин T_e , g , I , τ_λ , τ_ε і τ_σ . За малих значень температури поверхонь T_e реалізується єдиний максимум у точці $\sigma_0 = 0$, що відповідає твердоподібному стану мастила й режиму сухого тертя (крива 1). Зі зростанням T_e з'являються два максимуми в точках $\sigma_0 = 0$ і $\sigma_0 \neq 0$ (крива 2), перший із них відповідає сухому тертю, другий – ковзанню поверхонь. Тут реалізується режим переривчастого (stick-slip) руху, за якого відбуваються випадкові переходи між указаними динамічними режимами тертя. Це характерно для режиму перемежання під час плавлення мастила, коли має місце суміш

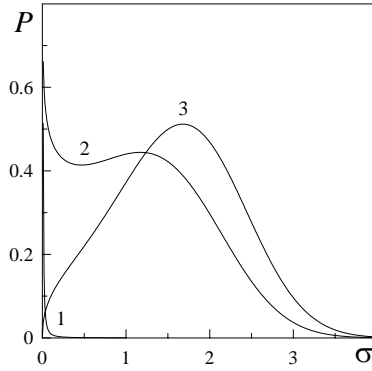


Рисунок 3.15 — Функція розподілення зсувних напружень (3.107) для переходу другого роду при $g = 0.2$, $\tau_\sigma = \tau_\varepsilon = 0.1$, $\tau_\lambda = 0.2$ і $I = 5$. Криві 1, 2, 3 відповідають температурам $T_e = 5, 16, 20$ відповідно.

твердоподібного й рідиноподібного станів. Із подальшим збільшенням T_e максимум $P(\sigma)$ при нульовому значенні напружень зникає (крива 3), і спостерігається режим рідинного тертя, що відповідає ковзанню.

Стационарний стан зсувних напружень визначається умовою екстремуму розподілення (3.107)

$$\frac{D^{(1)}(\sigma)}{D^{(2)}(\sigma)} = 0. \quad (3.111)$$

Підставляючи сюди вирази (3.109), (3.110), приходимо до рівняння

$$\left[T_e - \frac{1+g}{g} - \sigma^2 \left(\frac{1-g}{g} \right) - I\tau_\lambda \right] \times \\ \times [\tau_\varepsilon + \tau_\sigma(1+\sigma^2)]^2 - 2Ig(\tau_\varepsilon + \tau_\sigma) = 0. \quad (3.112)$$

Його розв'язок показаний на рисунку 3.16, згідно з яким зростання інтенсивності шуму I приводить до появи на монотонній залежності $\sigma_0(T_e)$ двозначної ділянки, властивої переходам першого роду. Вважаючи в (3.112) $\sigma = 0$, знаходимо граничне значення температури поверхонь тертя

$$T_{e0} = \frac{1+g}{g} + \left(\tau_\lambda + \frac{2g}{\tau_\varepsilon + \tau_\sigma} \right) I, \quad (3.113)$$

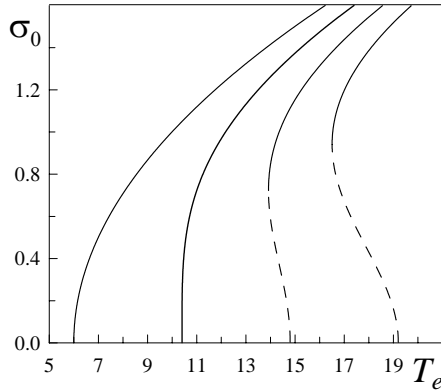


Рисунок 3.16 — Залежність стаціонарного значення зсувних напружень σ_0 від температури T_e за параметрах рисунка 3.15 і $I = 0, 2, 4, 6$ (відповідні криві розташовані зліва направо)

що забезпечує перехід системи до рідинного режиму тертя. Видно, що T_{e0} росте під час збільшення інтенсивності шуму I та часу кореляції τ_λ . Зворотним чином впливають величини часів релаксації зсувних напружень і деформації. На фазовій діаграмі, наведеній на рисунку 3.17, реалізуються області сухого (DF), рідинного (SF) і переривчастого (SS) режимів тертя. Зростання часу кореляції τ_λ приводить до

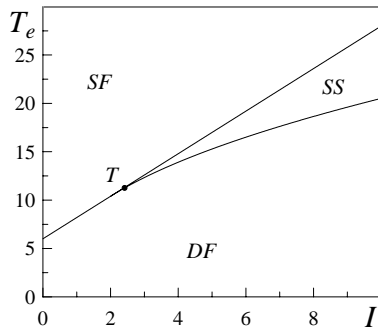


Рисунок 3.17 — Фазова діаграма, що відповідає параметрам рисунку 3.15 з областями рідинного (SF), сухого (DF) і переривчастого (SS) тертя (T — трикритична точка)

збільшення значення T_e , що відповідає трикритичній точці T за певної інтенсивності I . Водночас область сухого тертя розширюється, а рідинне й переривчасте тертя все більш важче реалізуються, оскільки настає при більшому значенні T_e .

Очевидно, що збільшення температури зсувних поверхонь T_e переводить мастило в рідиноподібний стан. Це видно також із рівняння (3.84), що описує затухаючі коливання. Тут температура поверхонь входить лише у вираз для сили f , значення якої зростає зі зростанням T_e . Як видно із фазових портретів на рисунку 3.18, рідиноподібний стан відповідає коливанням із великою амплітудою. Зі збільшенням ефективної сили в (3.84) амплітуда коливань збільшується, і реалізується триваліший коливальний процес, до встановлення певного режиму тертя в системі.

3.7.3.2 Фазова кінетика

Для з'ясування динаміки зміни режимів тертя досить представити розподілення $P(\sigma)$ положенням його максимуму $\tilde{\sigma}$. Це досягається використанням формалізму інтегралів за траєкторіями, у межах якого екстремальні значення $\tilde{\sigma} = \tilde{\sigma}(t)$ початкової функції розподілення (3.107) еволюціонують у згоді з ефективним розподіленням

$$\Pi\{\dot{\tilde{\sigma}}, \tilde{\sigma}\} \propto \exp\left(-\int \Lambda(\dot{\tilde{\sigma}}, \tilde{\sigma}, t) dt\right). \quad (3.114)$$

Тут функція Онзагера – Махлупа Λ , що відіграє роль лагранжіана евклідової теорії поля, підлягає знаходженню.

Спершу початкове рівняння Фоккера – Планка (3.104) перетворимо до форми Іто, використовуючи інтегрування за частинами

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial \sigma} \left[\left(D^{(1)} + \frac{\partial D^{(2)}}{\partial \sigma} \right) P \right] + \frac{\partial^2}{\partial \sigma^2} \left(D^{(2)} P \right). \quad (3.115)$$

Для знаходження залежності $\Lambda(\dot{\tilde{\sigma}}, \tilde{\sigma}, t)$ використовуємо диференціальне співвідношення Ланжевена

$$d\tilde{\sigma} = \left(D^{(1)} + \frac{\partial D^{(2)}}{\partial \sigma} \right) dt + \sqrt{2D^{(2)}} dW(t), \quad (3.116)$$

що відповідає рівнянню (3.115). Вінерівський процес $dW(t)$ тут має властивості

$$\langle dW(t) \rangle = 0, \quad \langle (dW(t))^2 \rangle = dt. \quad (3.117)$$

Особливість стохастичних рівнянь полягає в тому, що диференціал $dW(t)$ не може бути визначений простим діленням рівності (3.116) на $\sqrt{2D^{(2)}}$. Для цього потрібно перейти від випадкового процесу $\tilde{\sigma}(t)$ до білого шуму $x(t)$, пов'язаного з початковим якобіаном

$$\frac{dx}{d\tilde{\sigma}} = \left(2D^{(2)}\right)^{-1/2}. \quad (3.118)$$

Тоді підстановка рівності (3.116) в стохастичний диференціал Іто

$$dx = \frac{dx}{d\tilde{\sigma}} d\tilde{\sigma} + \frac{1}{2} \frac{d^2x}{d\tilde{\sigma}^2} (d\tilde{\sigma})^2 \quad (3.119)$$

приводить з урахуванням (3.117) до виразу

$$dx = \left(\frac{dx}{d\tilde{\sigma}} \left(D^{(1)} + \frac{\partial D^{(2)}}{\partial \tilde{\sigma}} \right) + \frac{d^2x}{d\tilde{\sigma}^2} D^{(2)} \right) dt + \frac{dx}{d\tilde{\sigma}} \sqrt{2D^{(2)}} dW(t). \quad (3.120)$$

Тут опущені доданки, порядок яких перевищує $(dW(t))^2$. Після зворотного переходу від білого шуму $x(t)$ до початкового процесу $\tilde{\sigma}(t)$ одержуємо рівність

$$\frac{dW(t)}{dt} = \frac{\dot{\tilde{\sigma}}}{\sqrt{2D^{(2)}}} - \frac{2D^{(1)} + (D^{(2)})'}{2\sqrt{2D^{(2)}}}, \quad (3.121)$$

де штрих означає диференціювання за $\tilde{\sigma}$. Підставляючи цей вираз у гаусіан

$$\Pi \propto \exp \left\{ -\frac{1}{2} \int \left(\frac{dW(t)}{dt} \right)^2 dt \right\},$$

після порівняння з (3.114) приходимо до лагранжіану

$$\Lambda = \frac{1}{4} \frac{\dot{\tilde{\sigma}}^2}{D^{(2)}} - U \quad (3.122)$$

з потенціальною енергією у вигляді

$$U = -\frac{(2D^{(1)} + (D^{(2)})')^2}{16D^{(2)}}. \quad (3.123)$$

Видно, що потенціальна енергія U не збігається з ефективним потенціалом (3.108), і для подальшого розгляду необхідно провести заміну виразу U (3.123) на $E(\tilde{\sigma})$ (3.108). У такому разі лагранжіан (3.122) описуватиме поведінку системи згідно з одержаним раніше розподіленням (3.107).

Кінетика системи визначається рівнянням Ейлера – Лагранжа

$$\frac{\partial \Lambda}{\partial \tilde{\sigma}} - \frac{\partial}{\partial t} \frac{\partial \Lambda}{\partial \dot{\tilde{\sigma}}} = \frac{\partial R}{\partial \dot{\tilde{\sigma}}}. \quad (3.124)$$

У представленні білого шуму дисипативна функція має просту форму $R = \dot{x}^2/2$, а з переходом до змінної $\dot{\tilde{\sigma}} = (2D^{(2)})^{1/2}\dot{x}$ набуває вигляду

$$R = \frac{\dot{\tilde{\sigma}}^2}{4D^{(2)}}. \quad (3.125)$$

Підставляючи в (3.124) рівності (3.122), (3.108), (3.125), приходимо до диференціального рівняння

$$\ddot{\tilde{\sigma}} + \dot{\tilde{\sigma}}^2 \frac{(D^{(2)})'}{2D^{(2)}} + \dot{\tilde{\sigma}} - 2 \frac{D^{(1)}}{D^{(2)}} D^{(2)} = 0. \quad (3.126)$$

Його дослідження, що ґрунтується на методі фазової площини $(\dot{\tilde{\sigma}}, \tilde{\sigma})$, викладено нижче. Розглянемо спочатку стаціонарні стани. Вважаючи в (3.126) $\dot{\tilde{\sigma}} = 0$, приходимо до рівняння (3.111).

Розглянемо кінетику поведінки системи, що слідує з фазових портретів, визначених рівнянням (3.126). На рисунку 3.18 наведені фазові портрети, відповідні кривим рисунка 3.15.

Область сухого тертя (DF) (рис. 3.18а) характеризується наявністю однієї особливої точки D , що відповідає максимуму ймовірності $P(\sigma)$ при $\sigma = 0$. Ця точка є нестандартною та вимагає інтерпретації. Вона розташована на початку координат, і навколо неї згинаються фазові траєкторії так, що система ніколи не приходить до значення $\sigma = 0$, тобто ця точка не є стаціонарною. Розглянемо поведінку

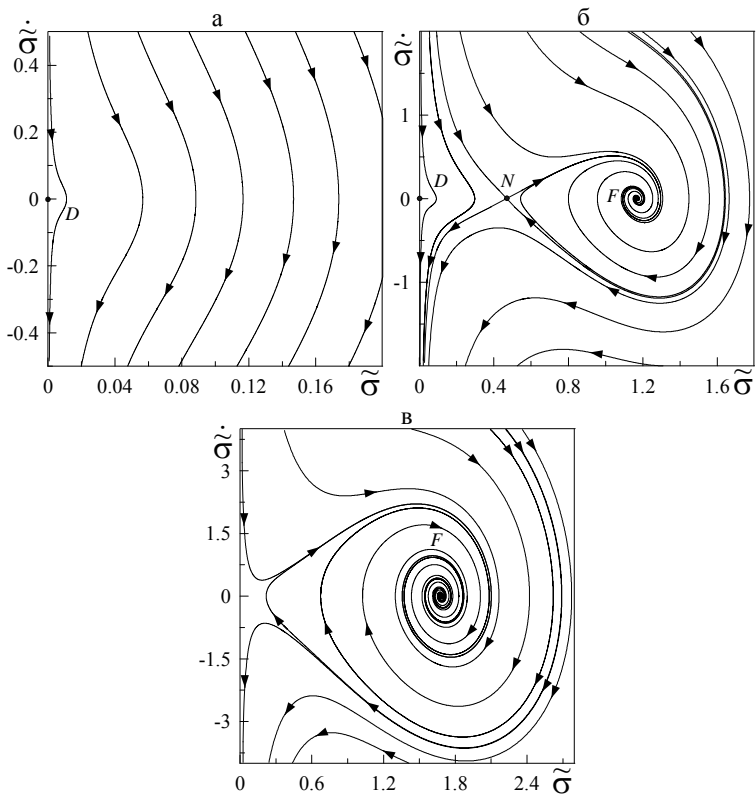


Рисунок 3.18 — Фазові портрети системи, що відповідають параметрам рисунку 3.15: а – DF режим відповідає кривій 1 рисунку 3.15; б – SS – кривій 2 рисунку 3.15; в – SF – кривій 3 рисунку 3.15

системи за довільних початкових умов. Згідно з фазовими траєкторіями система прагне до нульового значення напружень. Причому якщо в початкових умовах швидкість росту напружень додатна, то вона спочатку спаде до нуля (за цей час значення напружень устигне вирости). А потім величина напружень асимптотично зменшуватиметься до нуля зі збільшенням швидкості їх убавання. Мабуть, описана ситуація відповідає режиму вибухової аморфізації, за якого система дуже швидко переходить в аморфний твердоподібний стан. Той факт, що нульові напруження ніколи не досягаються, свідчить про розбіжність імовір-

ності $P(\sigma)$ у нульовій точці. Це пов'язано з нескінченним наростанням швидкості убування напружень під час наближення системи до $\sigma = 0$. Припустимо, що система підходить до точки, у якій швидкість зміни зменшення напружень стає критичною. У такому разі потрібно чекати збільшення значення напружень, що буде супроводжуватися зміною знака швидкості й переходом системи в додатну область фазової площини. Далі знову настане зменшення значення напружень і описана ситуація повториться. Або ж у такому разі може послідувати не зміна знака швидкості, а лише її зменшення, що перекине систему на сусідню фазову траєкторію, по якій вона ще швидше наблизатиметься до нульового значення напружень. У результаті за довільних початкових умов у системі з часом установиться коливальний режим сухого тертя в околі точки $\sigma = 0$. Водночас амплітуда коливань мала, і мастило має твердоподібну структуру.

Фазовий портрет системи, що характеризує область переривчастого тертя (SS), наведений на рисунку 3.18б. Тут з'являються три особливі точки: D , сідло N і стійкий фокус F . Точка D , як і раніше реалізується на початку координат і відповідає режиму сухого тертя в системі. Сідло N відповідає мінімуму $P(\sigma)$, і тому є нестійкою стаціонарною точкою. Потрібно зазначити, що у разі початкового значення зсувних напружень правіше точки N і нульової швидкості їх зміни в системі з часом установиться рідинний режим тертя. Якщо ж початкове значення напружень виявиться лівішим за сідло N , то в аналогічному прикладі в системі встановиться сухе тертя. Отже, точка N розмежовує два максимуми функції розподілення $P(\sigma)$. Фокус F відповідає ненульовому максимуму розподілення напружень, тобто описує рідиноподібний стан мастила. Відповідаючи цій точці, затухаючі коливання означають, що мастило ставатиме то більш рідким, то більш в'язким. Проте завжди з часом установиться стійке рідинне тертя. Мабуть, дані коливання обумовлені наявністю шуму в системі.

На рисунку 3.18в наведений фазовий портрет, що відповідає області рідинного тертя (SF), яка характеризується єдиним ненульовим максимумом функції розподілення $P(\sigma)$. Він характеризується однією особливою точкою — стійким фокусом F , що відповідає стійкому рідинному тертю. На це також указує велика розтягненість фазових траєкторій поблизу нього вздовж осей ординат та абсцис. Проте вид-

но, що за умови початкового великого значення σ система не попадає в точку F , а асимптотично наближається до нульового значення напружень. Ця обставина говорить про те, що можуть реалізуватися умови, за яких система наближатиметься до режиму сухого тертя. Як описано раніше, досягши значення критичної швидкості її знак змінюється, і вона стане додатною. Із фазового портрета видно, що в такому разі система перейде до режиму стійкого рідинного тертя.

3.7.4 Урахування деформаційного дефекту модуля зсуву

Як було показано раніше, рівняння (3.17) зводиться до співвідношення Максвелла, що припускає використання моделі Генкі. Використовуватимемо просте наближення (3.35), що описує представлений вище перехід режиму пружної деформації в пластичний.

У результаті час релаксації τ_σ набуває залежності від величини напружень

$$\frac{1}{\tau_\sigma(\sigma)} = \frac{1}{\tau_p} \left(1 + \frac{\theta^{-1} - 1}{1 + \sigma/\sigma_p} \right). \quad (3.127)$$

Тут уведений час релаксації на ділянці пластичної течії

$$\tau_p = \frac{\eta_\sigma}{\Theta}, \quad (3.128)$$

де $\eta_\sigma \equiv \tau_\sigma G$ — ефективна в'язкість, Θ — коефіцієнт зміцнення, $\theta = \Theta/G < 1$ — параметр, що визначає відношення кутів нахилу кривої деформації на пластичній і гуківській ділянках. Водночас рівняння (3.17) набуває вигляду

$$\tau_p \dot{\sigma} = -\sigma \left(1 + \frac{\theta^{-1} - 1}{1 + \sigma/\alpha} \right) + g_\Theta \varepsilon, \quad (3.129)$$

де $g_\Theta \equiv G^2/\Theta G_0$ і $\alpha = \sigma_p/\sigma_s$ — додатні сталі.

3.7.4.1 Динамічна фазова діаграма

Під час врахування деформаційного дефекту модуля зсуву потрібно аналізувати систему рівнянь (3.129), (3.18), (3.78). Тоді в межах наближення (3.79) ця система, як і раніше, зводиться до рівняння (3.84), де параметр m , коефіцієнт тертя γ , сила f та амплітуда шуму ϕ визначаються виразами

$$\begin{aligned} m &\equiv \frac{\tau_p \tau_\varepsilon}{g_\Theta}, \quad \gamma(\sigma) \equiv \frac{1}{g_\Theta} \left[\tau_\varepsilon \left(1 + \frac{\theta^{-1} - 1}{(1 + \sigma/\alpha)^2} \right) + \tau_p (1 + \sigma^2) \right], \\ f(\sigma) &\equiv \sigma \left[T_e - 1 - \frac{1}{g_\Theta} \left(\frac{\theta^{-1} + \sigma/\alpha}{1 + \sigma/\alpha} \right) \right] - \sigma^3 \left[\frac{1}{g_\Theta} \left(\frac{\theta^{-1} + \sigma/\alpha}{1 + \sigma/\alpha} \right) - 1 \right], \\ \phi(\sigma) &\equiv \sigma. \end{aligned} \quad (3.130)$$

Згідно з методом ефективного потенціалу ми одержимо рівняння Фоккера – Планка (3.104) з відповідними коефіцієнтами $D^{(1)}$, (3.105) і $D^{(2)}$, (3.106), які під час використання (3.130) запишуться в явному вигляді

$$\begin{aligned} D^{(1)} &= \frac{1}{\gamma} \left\{ \sigma \left[T_e - 1 - \frac{1}{g} \left(\frac{\theta^{-1} + \sigma/\alpha}{1 + \sigma/\alpha} \right) \right] + \sigma^3 \left[1 - \frac{1}{g} \left(\frac{\theta^{-1} + \sigma/\alpha}{1 + \sigma/\alpha} \right) \right] - \right. \\ &\quad \left. - I\sigma\tau_\lambda - \frac{2I\sigma}{\gamma^2} \left[\gamma - \frac{\sigma}{g} \left(\frac{\tau_\varepsilon(1 - \theta^{-1})}{(1 + \sigma/\alpha)^3 \alpha} + \sigma\tau_p \right) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (3.131)$$

$$D^{(2)} = \frac{I\sigma^2}{\gamma} [\gamma^{-1} + 2\tau_\lambda]. \quad (3.132)$$

Стационарний стан зсувних напружень визначається умовою (3.111), яка з урахуванням (3.131), (3.132) набуває вигляду

$$\begin{aligned} &\left\{ T_e - 1 - \frac{1}{g_\Theta} \left(\frac{\theta^{-1} + \sigma/\alpha}{1 + \sigma/\alpha} \right) - \sigma^2 \left[\frac{1}{g_\Theta} \left(\frac{\theta^{-1} + \sigma/\alpha}{1 + \sigma/\alpha} \right) - 1 \right] - I\tau_\lambda \right\} \gamma^2 - \\ &- 2I\gamma + \frac{2I\sigma}{g_\Theta} \left[\tau_p \sigma - \tau_\varepsilon \frac{\theta^{-1} - 1}{\alpha(1 + \sigma/\alpha)^3} \right] = 0. \end{aligned} \quad (3.133)$$

Вважаючи в (3.133) $\sigma = 0$, знаходимо рівність, аналогічну за сенсом (3.113), яка дає межу існування максимуму розподілення (3.107)

за умови нульового значення напружень відповідному твердоподібному стану мастила

$$T_{e0} = \frac{\theta^{-1} + g_{\Theta}}{g_{\Theta}} + \left(\tau_{\lambda} + \frac{2g_{\Theta}}{\theta^{-1}\tau_{\varepsilon} + \tau_p} \right) I. \quad (3.134)$$

Залежності $P(\sigma)$ для різних режимів тертя показані на рисунку 3.19. Криві 1–5 відповідають областям сухого (DF), переривчастого (SS),

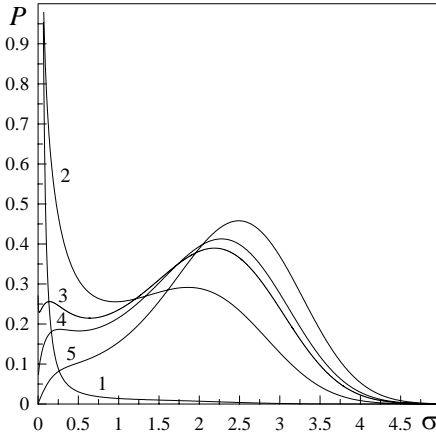


Рисунок 3.19 — Функція розподілення зсувних напружень (3.107) для фазового переходу першого роду при $\tau_p = \tau_{\varepsilon} = \tau_{\lambda} = 0.1$, $\theta^{-1} = 7$, $\alpha = 0.3$, $g_{\Theta} = 0.4$, $I = 4.5$. Криві 1–5 відповідають температурам $T_e = 16, 21, 23.25, 24, 26$

переривчастого і рідинного (SS+SF), рідинного метастабільного та стійкого (MSF+SF), рідинного тертя (SF). Режими тертя, показані на фазовій діаграмі (рис. 3.20), відповідають кривим рисунка 3.19. Найскладніша форма функції $P(\sigma)$ спостерігається в області SS+SF (крива 3 на рис. 3.19). Тут співіснують твердоподібний, а також метастабільний і стійкий рідиноподібні стани мастила, що відповідають максимумам $P(\sigma)$. Це має на увазі можливість реалізації переривчастого (stick-slip) тертя, за якого відбуваються періодичні переходи між динамічними режимами, що відповідають указаним станам. Потрібно зазначити, що ця область, на відміну від інших, під час зміни параметрів системи може не реалізуватися.

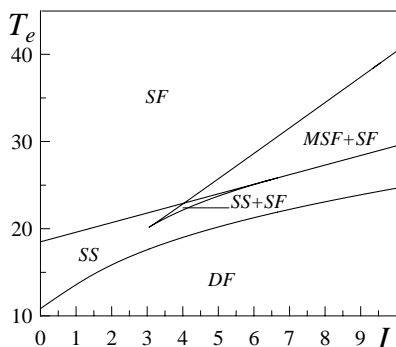


Рисунок 3.20 — Фазова діаграма з областями рідинного (SF), сухого (DF) і переривчастих (SS, MSF+SF, SS+SF) режимів тертя, що відповідає параметрам рисунка 3.19

В області MSF+SF режими метастабільного та стійкого рідинного тертя можуть періодично змінювати один одного, забезпечуючи переривчасте тертя (крива 4 на рис. 3.19). Відзначимо, що перехід від SS+SF режиму до MSF+SF супроводжується зникненням сухого тертя в системі.

3.7.4.2 Фазова кінетика

Для дослідження кінетики системи скористаємося раніше викладеним методом. У разі врахування деформаційного дефекту модуля зсуву всі співвідношення цього розділу залишаються колишніми, лише коефіцієнти $D^{(1)}$ і $D^{(2)}$ подаються виразами (3.131), (3.132). Згідно з цим досліджуємо кінетичне рівняння (3.126) з коефіцієнтами (3.131), (3.132).

В цьому прикладі спостерігаються складніший вид розподілення ймовірності та, внаслідок цього, складніші фазові портрети. На рисунку 3.21 наведені фазові портрети, відповідаючи кривим рисунка 3.19.

Фазовий портрет області сухого тертя (DF) подібний до відповідного в разі безперервного перетворення (рис. 3.18а). Це означає, що області DF під час врахування дефекту модуля й без нього еквіва-

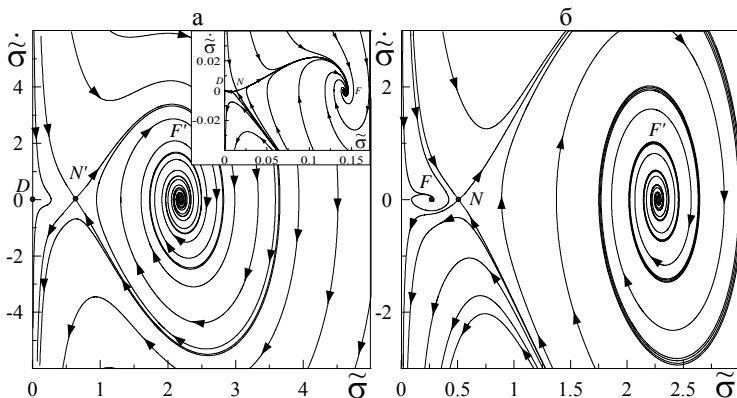


Рисунок 3.21 — Фазові портрети системи, що відповідають параметрам рисунка 3.19: а – SS+SF – відповідає кривій 3 рисунка 3.19; б – MSF+SF – кривій 4 рисунка 3.19

лентні.

Фазовий портрет, що описує область переривчастого тертя (SS) також аналогічний характерному для області SS у разі безперервного перетворення (рис. 3.18б). Основна їх відмінність полягає в тому, що тут траєкторії навколо фокусу значно більш витягнуті уздовж обох осей, що говорить про більшу стійкість режиму рідинного тертя в системі.

Найскладніша область (SS+SF) представлена фазовим портретом, показаним на рисунку 3.21а. Тут реалізуються п'ять особливих точок: D , сідла N , N' , стійкі фокуси F , F' . Як і раніше, сідла відповідають мінімумам залежності $P(\sigma)$. Точка D відповідає твердоподібній поведінці мастила. Стійкий фокус F визначає перший ненульовий максимум імовірності. Видно, що навколо цієї точки коливання слабо виражені. У цьому режимі мастило є дуже в'язкою рідиною, оскільки в ній за наявності шуму коливання сильно демпфуються. Дійсно, точка F відповідає малим значенням напружень, а чим вони менші, тим мастило стає більш в'язким, і при $\sigma = 0$ воно переходить у твердоподібний стан. Фокус F' відповідає другому ненульовому максимуму функції $P(\sigma)$, навколо нього вже існують коливання з великою амплітудою. Така поведінка відповідає текучому стану мастила, і відповідно,

ковзанню. Точка F' відокремлена від усіх останніх на більшу відстань по осі абсцис. Цей режим тертя лише найбільш імовірний, оскільки точки D і F , що відповідають сухому й метастабільному рідинному тертю, також наділені великою стійкістю та ймовірністю реалізації. Звідси робимо висновок, що система може зазнавати періодичних переходів (stick-slip) між режимами, що відповідають точкам D , F і F' . Оскільки ці режими самі по собі стійкі й розділені вираженими мінімумами функції розподілення $P(\sigma)$ (сідлами), то переходи між ними потрібно чекати через великі проміжки часу.

Фазовий портрет області MSF+SF представлений на рисунку 3.21б. На ньому наявні три особливі точки — стійкі фокуси F , F' і сідло N . Останнє аналогічно раніше описаним сідлам і відповідає мінімуму залежності ймовірності від напружень. Точка F відповідає першому максимуму розподілення, що описує метастабільний рідинний режим (MSF), а F' — другому максимуму, який відповідає стійкому рідинному тертю (SF). Як видно, навколо фокуса F існують лише незначні коливання, проте мастило в цьому режимі є менш в'язкою рідиною, чим в околиці точки F на рисунку 3.21а. На початку координат особлива точка відсутня, і сухий режим тертя не реалізується. Фокус F' аналогічний описаному на рисунку 3.21а, проте його область «притягнення» більш розтягнута уздовж обох осей, що свідчить про більшу текучість мастила та стійкість цього режиму. Тому порівняно з попереднім прикладом тут імовірніше виникнення режиму рідинного тертя (SF).

Вид фазового портрета для області SF аналогічний рисунку 3.18в, тому тут не наведений. На ньому реалізується один стійкий фокус F , що представляє стійке рідинне тертя (SF), яке характеризується коливаннями в його околиці. Основна відмінність полягає в тому, що в цьому разі коливання відбуваються з великою амплітудою, що говорить про виражену стійкість такого режиму. Проте, як і в усіх раніше розглянутих ситуаціях, із часом у мастилi встановиться стаціонарне значення напружень, що відповідає максимуму початкового розподілення $P(\sigma)$.

3.8 Гістерезисні явища при залежності модуля зсуву від деформації

3.8.1 Гістерезисні явища при фазовому переході другого роду

3.8.1.1 Стрибкоподібне плавлення

Припустимо, що в рівнянні (3.17) параметр $g \equiv G/G_0$ замінюється на залежність $g \equiv G(\sigma)/G_0$, де $G(\sigma)$ визначається виразом

$$G(\sigma) = \Theta + \frac{G - \Theta}{1 + (\sigma/\sigma_p)^\beta}, \quad \beta > 0. \quad (3.135)$$

Особливість залежності (3.135) полягає в тому, що вона описує гістерезис під час плавлення тонкого шару мастила лише в координатах $T_e - \sigma$ [4]. Водночас крива деформації $\sigma(\varepsilon)$ є монотонною та дозволяє представити лише безперервний перехід. Проте експериментальні дані однозначно вказують на те, що плавлення молекулярно-тонкої плівки мастила має стрибкоподібний характер [13], хоча й може відбуватися за механізмом фазового переходу другого роду. Як показано нижче, опис указаної особливості досягається за допомогою заміни залежності $g(\sigma)$ у (3.17) на $g(\varepsilon) \equiv G(\varepsilon)/G_0$, де

$$G(\varepsilon) = \Theta + \frac{G - \Theta}{1 + (\varepsilon/\varepsilon_p)^\beta}. \quad (3.136)$$

Водночас величина параметра $\beta > 0$, що визначає характер потенціалу, також відіграє ключову роль.

Розглянемо стаціонарний стан, за якого в (3.17) похідна $\dot{\sigma} = 0$ і величина напружень σ у мастилі не змінюється. Цей приклад згідно з (3.34) відповідає ковзанню з постійною швидкістю. Тоді одержуємо рівняння, подібне до закону Гука

$$\sigma = g(\varepsilon)\varepsilon, \quad g(\varepsilon) = g_\theta \left(1 + \frac{\theta^{-1} - 1}{1 + (\varepsilon/\alpha)^\beta} \right), \quad (3.137)$$

де параметр $\theta = \Theta/G < 1$, як і раніше, визначає відношення кутів нахилу кривої деформації на пластичній і гуківській ділянках, а також з'являються нові коефіцієнти $g_\theta = \Theta/G_0 < 1$, $\alpha = \varepsilon_p/\varepsilon_s$. Залежність (3.137) у координатах $\beta - \varepsilon - \sigma$ при заданих α , g_θ і θ наведена на рисунку 3.22. Для експериментів з апаратом поверхневих сил [12] він яв-

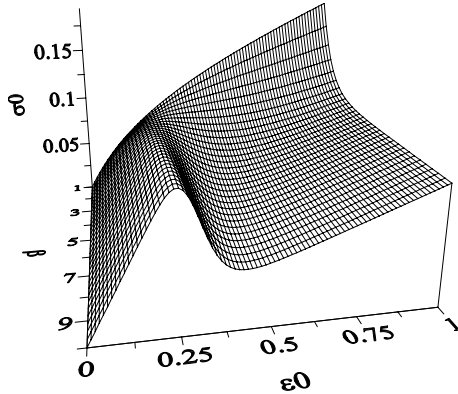


Рисунок 3.22 — Залежність стаціонарного значення зсувних напружень σ_0 від деформації ε_0 і параметра β (3.137) при $\theta = 0.2$, $g_\theta = 0.1$, $\alpha = 0.3$

ляє собою залежність повних внутрішніх зсувних напружень у мастилі $\sigma = \sigma_{el} + \sigma_v$ від амплітуди відхилення x_{max} , де σ_{el} і σ_v — пружна та в'язка компоненти відповідно, причому σ_v визначається співвідношенням (3.34). Звідси випливає, що можуть реалізуватися дві ситуації: при малих β крива $\sigma(\varepsilon)$ монотонно зростає, а при

$$\beta > \frac{1 + \sqrt{\theta}}{1 - \sqrt{\theta}} \quad (3.138)$$

вона стає немонотонною. У першому прикладі відбувається безперервне плавлення мастила. Другий детальніше показано на рисунку 3.23, згідно з яким мастило під час підвищення напружень до точки A стрибкоподібно плавиться, переходячи в точку B . У разі подальшого збільшення напружень деформація монотонно зростає, і мастило залишається рідиноподібним. Якщо тепер зменшувати напруження, то до точки C мастило зберігає рідиноподібну структуру, а потім стрибкоподібно твердіє під час переходу в точку D . У разі подальшого змен-

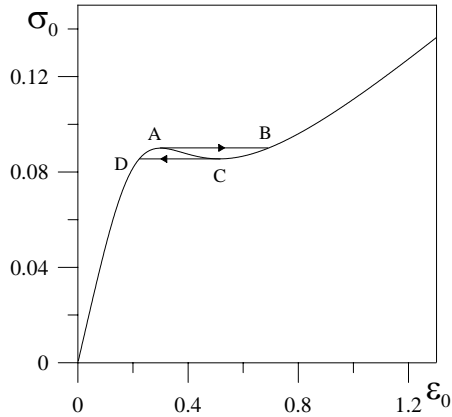


Рисунок 3.23 — Залежність стаціонарних значень зсувних напружень σ_0 від деформації ε_0 (3.137) при $\theta = 0.2$, $g_\theta = 0.1$, $\alpha = 0.3$, $\beta = 3.0$, на якій показано гістерезисну поведінку

шення напружень мастило твердоподібне. Ці переходи представлено як фазові переходи першого роду, але між станами, які не є істинними термодинамічними фазами. Для пояснення цих перетворень вводиться поняття зсувного плавлення. Зазначимо, що така гістерезисна поведінка спостерігалася в експериментах [12].

Використовуючи рівняння (3.137), можна знайти абсциси точок переходу A і C :

$$\varepsilon_{A,C} = 2^{-\frac{1}{\beta}} \alpha \left[b(\beta-1) - 2 \mp b \sqrt{(1-\beta)^2 - 4\beta/b} \right]^{-\frac{1}{\beta}}, \quad b = \theta^{-1} - 1, \quad (3.139)$$

де точці A відповідає знак « $-$ », а точці C — знак « $+$ ». З (3.139) видно, що величина стрибка під час плавлення збільшується зі зростанням α , а із збільшенням β різниця $\varepsilon_A - \varepsilon_C$ прямує до нуля. Отже, при великих β (малих α) плавлення і твердіння здійснюються практично за однакових значень деформації ($\varepsilon_A \approx \varepsilon_C$), але за різних величин напружень σ . Як і раніше, візьмемо як параметр порядку зсувни напруження σ : при $\sigma > \sigma_A$ мастило рідиноподібне, а якщо $\sigma < \sigma_C$, воно твердоподібне. У проміжній області $\sigma_C < \sigma < \sigma_A$ стан мастила є нестійким, оскільки воно може знаходитися в обох фазах.

У межах адиабатичного наближення можна покласти $\tau_{\varepsilon}\dot{\varepsilon} \approx 0$, $\tau_T\dot{T} \approx 0$, і рівняння (3.18), (3.19) дають

$$\varepsilon = \sigma - (2 - T_e) \frac{\sigma}{1 + \sigma^2}, \quad (3.140)$$

$$T = T_e + (2 - T_e) \frac{\sigma^2}{1 + \sigma^2}. \quad (3.141)$$

Після підстановки виразу (3.140) в (3.17) одержимо рівняння Ландау – Халатнікова, де синергетичний потенціал має вигляд

$$V = \frac{\sigma^2}{2} - g\theta \int_0^{\sigma} \left[\sigma - (2 - T_e) \frac{\sigma}{1 + \sigma^2} \right] \times \\ \times \left[1 + \frac{\theta^{-1} - 1}{1 + (\sigma/\alpha - \sigma(2 - T_e)/(\alpha + \alpha\sigma^2))^{\beta}} \right] d\sigma. \quad (3.142)$$

На рисунку 3.24 подано залежність стаціонарних зсувних напружень σ_0 від температури поверхонь тертя T_e . Нижче за критичне значення T_{c0} напруження в мастилі відсутні ($\sigma = 0$), і воно твёрдоподібне. З

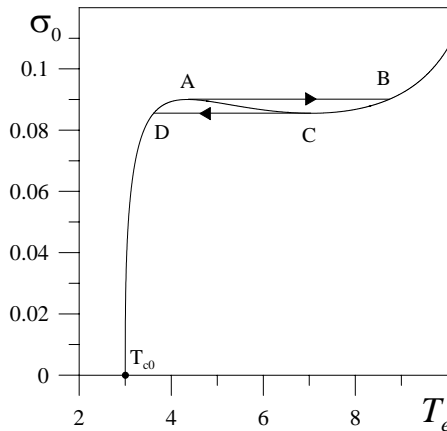


Рисунок 3.24 — Залежність стаціонарних значень зсувних напружень σ_0 від температури поверхонь тертя T_e при параметрах рисунка 3.23

ня T_{c0} напруження в мастилі відсутні ($\sigma = 0$), і воно твёрдоподібне. З

подальшим зростанням температури до точки A напруження збільшуються, але відповідають гуківській пружній ділянці залежності, наведеній на рисунку 3.23, а отже, мастило твердоподібне. Під час подальшого зростання температури в інтервалі $T_{cA} < T_e < T_{cB}$ (T_{cA} , T_{cB} відповідають точкам A , B) напруження зберігаються, і мастило не змінює своєї структури. Вище T_{cB} реалізується пластична ділянка залежності, показаної на рисунку 3.23, мастило стає рідиноподібним. Якщо потім знижувати температуру поверхонь тертя, то до значення T_{cC} мастило рідиноподібне, далі до $T_e = T_{cD}$ напруження зберігається, і нижче за це значення воно має твердоподібну структуру. Вираз для критичної температури T_{c0} одержимо з умови $\partial V / \partial \sigma = 0$, де V – синергетичний потенціал (3.142):

$$T_{c0} = 1 + \theta / g\theta \equiv 1 + G_0 / G \equiv 1 + g^{-1}. \quad (3.143)$$

В області температур $T_{cD} < T_e < T_{cB}$ мастило може бути як рідиноподібним, так і твердоподібним залежно від передісторії системи. В інтервалі $T_{cA} < T_e < T_{cC}$, що входить в цю область, стаціонарні значення напружень зберігаються. Очевидно, що рівність $\sigma_0 = \text{const}$ виконується зі збільшенням температури при $T_{cA} < T_e < T_{cB}$, оскільки мастилу для плавлення необхідно передати енергію. В області $T_{cD} < T_e < T_{cC}$ під час зменшення температури поверхонь, що зсуваються, напруження зберігаються, оскільки для переходу мастилу у твердоподібний стан воно повинне віддати енергію. Потрібно вважати, що твердоподібні структури мастила нижче та вище за точку T_{c0} відрізняються, оскільки згідно з рисунком 3.24 перехід між ними відбувається за механізмом фазового переходу другого роду.

На рисунку 3.25 показано залежність потенціалу (3.142) від величини напружень за умови фіксованих температур поверхонь тертя. Крива 1 відповідає значенню температури нижче за T_{c0} . Видно, що на ній реалізується єдиний нульовий мінімум, і в мастилі напруження відсутні, тобто воно твердоподібне. Крива 2 відповідає температурі $T_{c0} < T_e < T_{cD}$, і тут спостерігається ненульовий мінімум потенціалу, що відповідає гуківській ділянці рисунка 3.23. Це означає, що мастило також твердоподібне. Криву 3 побудовано при $T_e > T_{cB}$, і вона характеризується одним ненульовим мінімумом потенціалу. Оскільки за

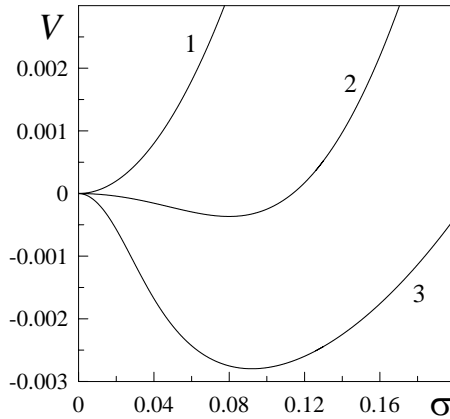


Рисунок 3.25 — Залежність синергетичного потенціалу V (3.142) від величини зсувних напружень σ при параметрах рисунку 3.23 і $T_e = 1.0, 3.4, 9.0$ (криві 1–3)

таких умов система знаходиться на ділянці пластичної течії, мастило рідиноподібне.

Перехід між першою та другою ситуаціями здійснюється за механізмом фазового переходу другого роду, бо нульовий мінімум плавно перетворюється на ненульовий. Оскільки криві 2, 3 мають однакову форму, то перехід між відповідними режимами тертя потрібно інтерпретувати як кінетичне, а не фазове перетворення. Отже, твердоподібна структура мастила за температур нижче за T_{c0} є близькою до твердого стану. Твердоподібна ж структура вище вказаної температури несе ознаки рідкого стану, але в цілому мастило поводить себе як твердоподібне. У разі подальшого переходу до рідинного режиму тертя в'язкість мастила зменшується, і воно тече.

3.8.1.2 Безперервне перетворення

Розглянемо тепер простіший приклад безперервного плавлення мастила, коли не виконується умова (3.138). За температури поверхонь тертя нижче значення (3.143) мастило твердоподібне, оскільки зсувне напруження дорівнює нулю. За умови, якщо $T_e > T_{c0}$, воно по-

чинає плавитися та стає рідиноподібним. Із подальшим підвищенням температури зсувні напруження ростуть і внаслідок цього настає ковзання, що відповідає переходу на ділянку пластичної деформації.

На рисунку 3.26 подані стаціонарні значення зсувних напружень σ_0 під час безперервного перетворення. Звідси видно, що зі збільшен-

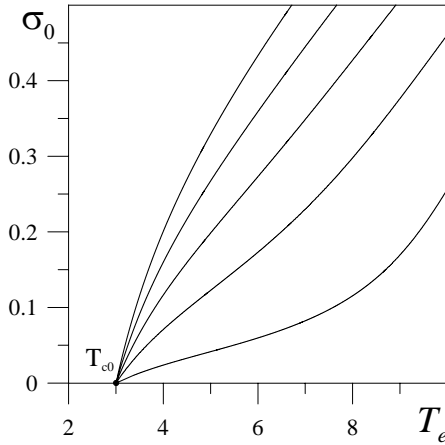


Рисунок 3.26 — Залежність стаціонарного значення зсувних напружень σ_0 від температури поверхонь тертя T_e для прикладу безперервного перетворення при $\theta = 0.2$, $g_\theta = 0.1$, $\beta = 1.0$ і $\alpha = 0.1, 0.3, 0.5, 0.7, 0.9$ (відповідні криві розташовані справа наліво)

ням коефіцієнта α при заданому значенні температури T_e реалізуються більші значення стаціонарних напружень. Відповідно, в разі великих $\alpha < 1$ плавлення настає швидше, й такі мастила є кращими для зменшення тертя. Згідно з формулою (3.143), для зменшення температури плавлення потрібно зменшувати θ і збільшувати g_θ . Мінімальне значення критичної температури зсувних поверхонь обмежено величиною $T_{c0} = 1$ при $\theta \ll g_\theta$.

Вид синергетичного потенціалу в цьому разі якісно збігається з показаним на рисунку 3.25, оскільки він подається тією самою формулою (3.142). Твердоподібному стану мастила відповідає нульовий мінімум потенціалу, рідиноподібному – ненульовий мінімум.

3.8.1.3 Фазова кінетика

Координати $\sigma - \varepsilon$ Згідно з експериментальними даними для органічних змашувальних матеріалів [13], час релаксації напружень за нормального тиску становить $\tau_\sigma \sim 10^{-10}$ с. Оскільки ультратонка плівка мастила має менше чотирьох молекулярних шарів, час релаксації температури до значення T_e задовольняє умови

$$\tau_T \ll \tau_\sigma, \tau_\varepsilon. \quad (3.144)$$

Відповідно із цим покладемо в рівнянні (3.19) $\tau_T \dot{T} \approx 0$. Також для зручності будемо вимірювати час в одиницях τ_σ . У результаті одержимо двопараметричну систему такого вигляду

$$\dot{\sigma} = -\sigma + g(\varepsilon)\varepsilon, \quad (3.145)$$

$$\tau \dot{\varepsilon} = -\varepsilon + (T_e - 1 - \sigma\varepsilon + \sigma^2)\sigma, \quad (3.146)$$

де $\tau \equiv \tau_\varepsilon/\tau_\sigma$. Відповідні фазові портрети наведені на рисунку 3.27 і 3.28.

На рисунку 3.27 показані фазові портрети, що описують поведінку мастила у твердоподібному стані (за значення температури поверхонь тертя нижче, ніж T_{c0}), для різних співвідношень часів релаксації τ . Зокрема, рисунок 3.27а відповідає прикладу $\tau = 0.01$. Штриховими

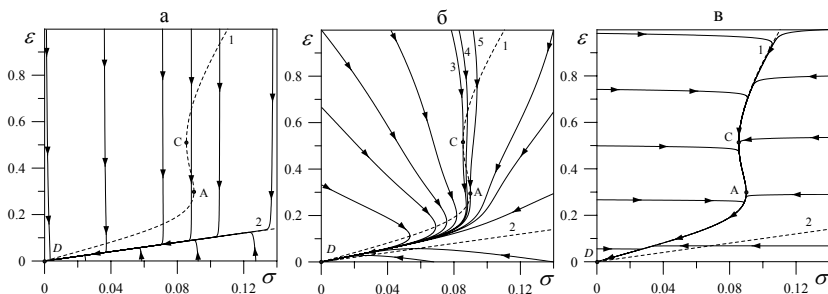


Рисунок 3.27 — Фазові портрети при параметрах рисунка 3.23 і $T_e = 2$: а — $\tau_T \ll \tau_\varepsilon = 0.01\tau_\sigma$; б — $\tau_T \ll \tau_\varepsilon = \tau_\sigma$; в — $\tau_T \ll \tau_\varepsilon = 100\tau_\sigma$

лініями 1 і 2 показано ізокліни, що одержуються під час порівнювання

до нуля похідних в рівняннях (3.145) і (3.146) відповідно. Отже, крива 1 відповідає параметрам системи, за яких напруження не змінюються, а лінія 2 відповідає прикладу збереження деформації. Ці лінії перетинаються на початку координат, утворюючи єдину стаціонарну точку D , яка є вузлом. Видно, що фазові траєкторії сходяться до вузла D , тобто з часом напруження релаксують до нульового значення. Причому під час руху по фазовій площині за довільних початкових умов спостерігаються два етапи: на першому відбувається миттєва релаксація системи до лінії, близької до ізокліни 2, на другому – повільний рух по вказаній кривій. На першому етапі напруження зберігаються, що нагадує описаний раніше перехід між режимами тертя. Зазначимо, що лінія, по якій рухається система на другому етапі, відповідає гуківській ділянці залежності $\sigma(\varepsilon)$. Таким чином, відбувається повільний перехід мастила з твердоподібної структури, що є близькою до рідини, до твердоподібної структури, схожої на тверде тіло.

Фазовий портрет, показаний на рисунку 3.27б, побудований для прикладу, коли часи релаксації напружень і деформації збігаються ($\tau=1$). Він також характеризується особливою точкою D , що є вузлом. Тут можливі ситуації, коли напруження σ спочатку збільшуються, а потім зменшуються, і навпаки. Це означає, що до того моменту, коли система прийде до рівноваги (початку координат), представляється можливим переривчастий рух. Наприклад, згідно з фазовими траєкторіями, що починаються при $\sigma = 0$, мастило спочатку твердоподібне (напруження дорівнюють нулю), потім воно починає плавитися (напруження зростають), і потім знову твердне. Найскладніший тип переривчастого руху описується фазовими траєкторіями, розташованими між траєкторіями 3 і 5, що є дотичними до ізокліни 1. Тут система поводиться подібно до кривої 4, тобто напруження спочатку збільшуються, потім зменшуються (після першого перетину ізокліни 1), потім знову збільшуються (після другого перетину), і нарешті релаксують до нуля (після третього й останнього перетинів).

Рисунок 3.27в відповідає прикладу $\tau = 100$. Тут, як і на рисунку 3.27а, виділено два етапи: швидка релаксація до лінії, близької до ізокліни 1, і далі повільний рух по ній. На першому етапі деформація слабо змінюється, а напруження дуже швидко зменшуються, якщо початкові їх значення σ правіше ізокліни 1, або збільшуються при почат-

кових σ лівіше неї. На другому етапі у верхній частині фазового портрета (вище від точки C) конфігураційна точка рухається по пластичній ділянці, нижче від A відбувається рух по гуківській. На останній ділянці система знаходиться більш тривалий час, оскільки вона ближче до ізокліни, ніж перша.

На рисунку 3.28 подано фазові портрети для таких самих параметрів і співвідношень часів релаксації, як і на рисунку 3.27, але за температури, що відповідає ділянці пластичної деформації ($T_e > T_B$). Тут реалізується рідинне тертя, і з часом устанавлюється ненульове

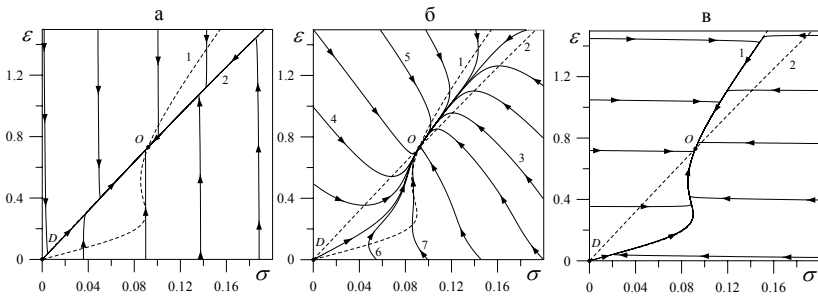


Рисунок 3.28 — Фазові портрети при параметрах рисунка 3.23 і $T_e = 9$: а — $\tau_T \ll \tau_\epsilon = 0.01\tau_\sigma$; б — $\tau_T \ll \tau_\epsilon = \tau_\sigma$; в — $\tau_T \ll \tau_\epsilon = 100\tau_\sigma$

стаціонарне значення зсувних напружень $\sigma_0 \neq 0$, що відповідає мінімуму потенціалу. Як і раніше, лінії 1 і 2 є ізоклінами фазових траєкторій. Фазові портрети характеризуються двома особливими точками — сідлом D на початку координат і вузлом O у разі ненульових значень напружень і деформації, які даються перетином ізоклін.

При $\tau = 0.01$ спостерігається картина, показана на рисунку 3.28а. Тут, як і на рисунку 3.27а, фазові траєкторії швидко збігаються до лінії, близької до ізокліни 2 з будь-якої точки фазової площини за умови збереження напружень. Далі система релаксує до ненульового значення $\sigma_0 \neq 0$, і встановлюється стаціонарне рідинне тертя. Проте пряма, по якій здійснюється рух на другому етапі, відповідає пластичній ділянці залежності $\sigma(\epsilon)$, тобто система завжди рідиноподібна, за винятком тих ситуацій, коли початкові значення напружень знаходяться поблизу нуля (відбувається плавлення). Відзначимо, що з часом мастило стає більш рідким, якщо $\sigma_i < \sigma_0$, і навпаки більш в'язким при

$\sigma_i > \sigma_O$, де σ_i і σ_O – початкове й стаціонарне значення напружень.

Як видно з рисунка 3.28б, для $\tau = 1$ у разі встановлення стаціонарного значення напружень і деформації можливі такі ситуації: мастило стає більш в'язким із часом (крива 3), воно плавиться (крива 4) й реалізуються різні переривчасті режими тертя (криві 5, 6, 7).

На рисунку 3.28в наведено фазовий портрет для $\tau = 100$, де як і на рисунку 3.27в, наявні два етапи. Основна відмінність цих рисунків полягає в тому, що на першому пластична ділянка є більш близькою до ізокліни, і в разі еволюції система знаходиться на ній більше часу, ніж на гуківській. Стаціонарна точка O знаходиться на пластичній ділянці.

Координати $\dot{\sigma} - \sigma$. Дослідимо кінетику системи, прослідкувавши еволюцію напружень і швидкості їх зміни. Для цього з двох диференціальних рівнянь першого порядку (3.145), (3.146), залежних від напружень σ і деформації ε , одержимо рівняння другого порядку для σ . Для цього з (3.145) необхідно виразити ε через σ і записати похідну за часом від цього виразу. Далі, підставивши одержані залежності $\varepsilon(\sigma, \dot{\sigma})$, $\dot{\varepsilon}(\sigma, \dot{\sigma})$ у (3.146), знайдемо шукане рівняння. Проте аналітично виразити ε з (3.145) не є можливим. Тому скористаємося виразом (3.135), що описує безперервне плавлення, й одержимо шукане рівняння у вигляді

$$A\ddot{\sigma} + B\dot{\sigma}^2 + C\dot{\sigma} + D = 0, \quad (3.147)$$

$$A \equiv \frac{\tau}{g\theta} \left[\frac{1 + (\sigma/\alpha)^\beta}{\theta^{-1} + (\sigma/\alpha)^\beta} \right], \quad B \equiv \frac{\tau\beta}{g\theta\alpha^\beta} \left[\frac{(\theta^{-1} - 1)\sigma^{\beta-1}}{(\theta^{-1} + (\sigma/\alpha)^\beta)^2} \right],$$

$$C \equiv A\tau^{-1} [\tau + 1 + \sigma^2] + \sigma B, \quad D \equiv A\tau^{-1}\sigma [1 + \sigma^2] - \sigma(T_e - 1 + \sigma^2).$$

Воно описує реактивно-дисипативний режим, оскільки має другу й першу похідні за часом. Відповідні фазові портрети представлено на рисунку 3.29. Тут штрихова крива 1 є ізокліною, на якій швидкість зміни напружень залишається постійною ($\ddot{\sigma} = 0$). Штрихова пряма 2 відповідає ізокліні, де напруження не змінюються ($\dot{\sigma} = 0$). Оскільки в рівнянні (3.147) деформація в явному вигляді відсутня, її початкові значення задаються за допомогою σ , $\dot{\sigma}$. Виявляється, що області, нижче за пунктирну пряму 3, що визначається рівністю $\dot{\sigma} = -\sigma$, відповідають від'ємні значення деформації. Тому деякі фазові траєкторії, що починаються нижче від вказаної лінії, виходять у від'ємну область напружень.

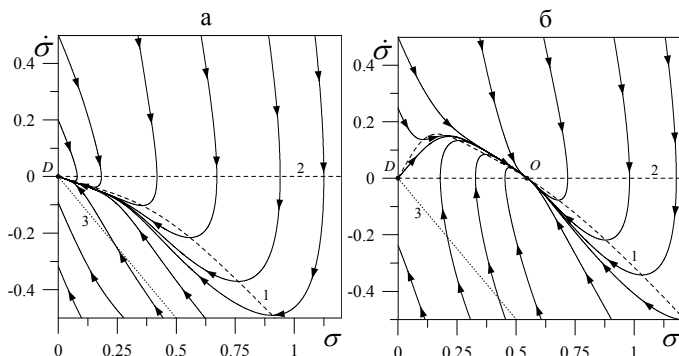


Рисунок 3.29 — Фазові портрети при параметрах рисунку 3.23 і з використанням залежності (3.135) для $\tau_\varepsilon = \tau_\sigma$: а — $T_e = 2$; б — $T_e = 9$

Оскільки в запропонованому підході розглядаються лише додатні значення напружень і деформації, початкові умови потрібно вибирати не нижче від указаної прямої.

На рисунку 3.29а представлений фазовий портрет, що відповідає температурі поверхонь тертя нижче критичної T_{c0} (3.143). Тут мастило твердоподібне, і спостерігається релаксація σ до вузла D на початку координат. Згідно з фазовими траєкторіям, водночас також можливий переривчастий рух.

Прикладу, коли температура T_e вище T_{c0} і мастило рідиноподібне, відповідає фазовий портрет, показаний на рисунку 3.29б. Він характеризується двома особливими точками — сідлом D і стійким вузлом O . Система з часом за довільних початкових умов (вище за прямою 3) приходить до стаціонарного стану, що відповідає точці O , і далі напруження не змінюються ($\dot{\sigma} = 0$). Видно, що релаксація напружень може відбуватися за наявності переривчастих режимів тертя.

3.8.2 Гістерезисні явища при фазовому переході першого роду

3.8.2.1 Стрибкоподібне плавлення

Рисунок 3.24 відповідає прикладу фазового переходу другого роду, оскільки в точці T_{c0} відбувається безперервний перехід, напруження водночас стають ненульовими. Немонотонність на рисунку 3.24 викликана наявністю нестійкої ділянки на рисунку 3.23. Можна підібрати параметри так, що крива $\sigma_0(\varepsilon_0)$ є монотонною, проте на залежності $\sigma_0(T_e)$ реалізується гістерезис.

На рисунку 3.30 наведені відповідні залежності стаціонарних зсувних напружень σ_0 , σ^m від температури поверхонь тертя й деформації. Видно, що на рисунку 3.30б з'являється немонотонність, і в ін-

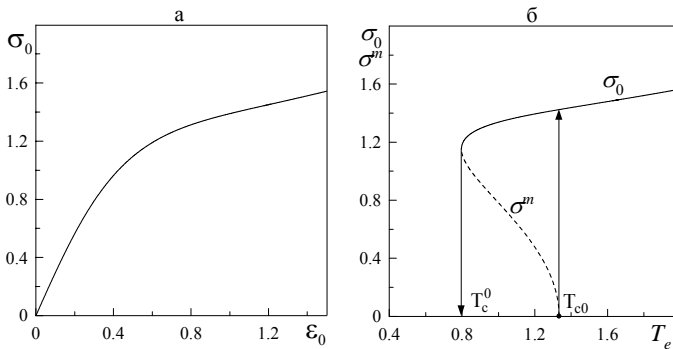


Рисунок 3.30 — Залежності стаціонарних значень зсувних напружень σ_0 , σ^m : а — від зсувної деформації ε_0 ; б — від температури поверхонь тертя T_e при $\theta = 0.2$, $g_\theta = 0.6$, $\alpha = 0.7$, $\beta = 2.0$

тервалі $T_c^0 < T_e < T_{c0}$ реалізується двозначна ділянка, властива фазовим переходам першого роду. Штрихова крива відповідає нестійким стаціонарним значенням напружень σ^m , суцільна — стійким σ_0 . Відзначимо, що $\sigma^m(T_e)$ відповідає гуківській ділянці залежності $\sigma_0(\varepsilon_0)$, яку показано на рисунку 3.30а.

На рисунку 3.31 подано залежність потенціалу (3.142) від величини напружень при фіксованих температурах поверхонь тертя, що

відповідає параметрам рисунка 3.30. Нижче за критичне значення T_c^0

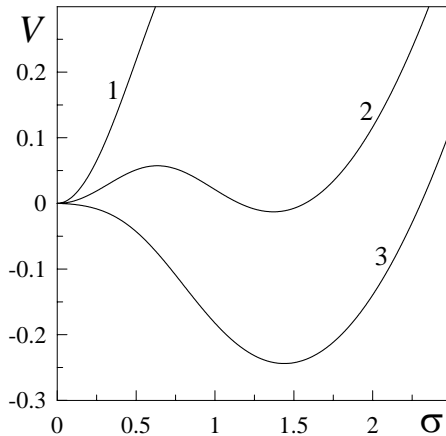


Рисунок 3.31 — Залежність синергетичного потенціалу V (3.142) від величини зсувних напружень σ при параметрах рисунка 3.30, криві 1–3 відповідають значенням температури $T_e = 0.6, 1.1, 1.4$ відповідно

напруження в мастилі відсутні ($\sigma_0 = 0$). Цьому діапазону температур відповідає вид потенціалу, поданий кривою 1 на рисунку 3.31, де реалізується один нульовий мінімум за умови, якщо $\sigma_0 = 0$, водночас мастило твердоподібне. У точці $T_e = T_c^0$ на залежності $V(\sigma)$ з'являється плато. Із подальшим збільшенням температури в області $T_c^0 < T_e < T_{c0}$ потенціал має вигляд кривої 2. Тут з'являється потенціальний бар'єр, що розмежовує нульовий і ненульовий мінімуми потенціалу. У зв'язку із цим система не може прийти в стійкий стан $\sigma_0 \neq 0$ і реалізується нульове значення зсувних напружень σ . Пунктирна крива на рисунку 3.30 відповідає максимуму потенціалу, суцільна крива — його ненульовому мінімуму. Як видно з рисунка, при $T_e = T_{c0}$ (3.143) відбувається стрибкоподібне збільшення значення σ , і система переходить на ділянку залежності $\sigma_0(T_e)$. Цей перехід пов'язаний із тим, що в разі, $T_e = T_{c0}$ максимум $V(\sigma)$ зникає, і з подальшим зростанням T_e реалізується один ненульовий мінімум потенціалу (крива 3 на рис. 3.31). Із подальшим збільшенням температури T_e стаціонарні значення напружень σ_0 зростають, і мастило стає менш в'язким. Водночас $V(\sigma)$ має вигляд кривої 3. Тепер із зменшенням температури до значе-

ння T_c^0 мастило рідиноподібне ($\sigma_0 \neq 0$), при $T_e = T_c^0$ воно стрибкоподібно твердіє ($\sigma_0 = 0$), оскільки на потенціалі зникає бар'єр і залишається один нульовий мінімум $V(\sigma)$.

Відмінною особливістю такої поведінки є те, що гуківська ділянка залежності цілком є нестійкою, оскільки відповідає максимуму потенціалу й існує лише один тип твердоподібного стану мастила з нульовим значенням напружень.

3.8.2.2 Фазова кінетика

Для дослідження поведінки системи до встановлення стаціонарного стану методом фазової площини скористаємося рівняннями (3.145), (3.146), одержаними раніше.

Водночас фазові портрети в області температур $T_e < T_c^0$ виявляються аналогічними до наведених на рисунку 3.27. Кінетика системи в температурній області $T_e > T_{c0}$ рисунка 3.30б, що відповідає стійкому рідинному тертю, якісно співпадає з показаною на рисунку 3.28. Реалізується рідинне тертя, і з часом установлюється ненульове стаціонарне значення зсувних напружень $\sigma_0 \neq 0$, що відповідає мінімуму синергетичного потенціалу $V(\sigma)$.

На рисунку 3.32 наведені фазові портрети для температури, що відповідає ділянці $T_c^0 < T_e < T_{c0}$ рисунку 3.30б, на якій реалізуються стійкі та нестійкі значення стаціонарних зсувних напружень. Потенці-

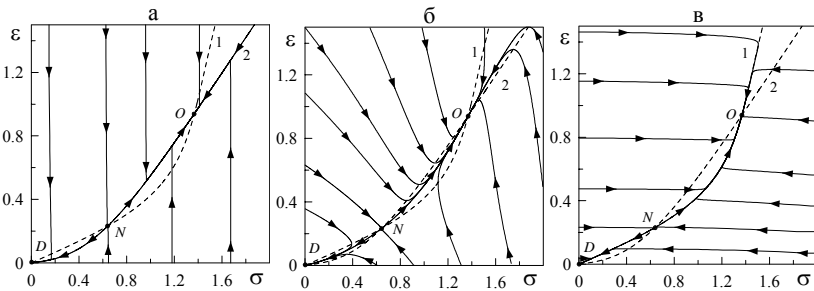


Рисунок 3.32 — Фазові портрети при параметрах рисунку 3.30 і $T_e = 1.1$: а — $\tau_T \ll \tau_\epsilon = 0.01\tau_\sigma$; б — $\tau_T \ll \tau_\epsilon = \tau_\sigma$; в — $\tau_T \ll \tau_\epsilon = 100\tau_\sigma$

ал системи в цьому разі має вигляд кривої 2 на рисунку 3.31. Як і раніше, лінії 1 і 2 є ізоклінами. Фазові портрети характеризуються трьома особливими точками: вузлом D на початку координат, що описує сухе тертя; сідлом N , що відповідає максимуму залежності $V(\sigma)$ (нестійка стаціонарна точка); вузлом O , якому відповідає ділянка пластичної течії на залежностях, наведених на рисунку 3.30. Ці точки даються перетином ізоклін. Залежно від початкових умов система в результаті релаксації може прийти як до режиму стійкого сухого тертя (вузол D), так і до режиму тертя ковзання (точка O).

При $\tau = 0.01$ спостерігається картина, наведена на рисунку 3.32а. Тут, як і на рисунку 3.27а, фазові траєкторії швидко збігаються до лінії, близької до ізокліни 2, з будь-якої точки фазової площини при збереженні напружень. Далі система релаксує до вузла D або O , і встановлюється стаціонарний режим тертя, що визначається цими точками. Нахил кривої, по якій здійснюється рух на другому етапі, залежить від початкових умов. Так, до точки O система релаксує по пластичній ділянці ізокліни 2, до точки D – по її гуківській ділянці. Із часом мастило стає більш рідким, якщо $\sigma_N < \sigma_i < \sigma_O$, і навпаки – більш в'язким при $\sigma_i > \sigma_O$, де σ_i і σ_O – початкове й стаціонарне значення напружень. У цих ситуаціях система приходять до особливої точки O . При $\sigma_i < \sigma_N$ мастило з часом твердне й реалізується сухе тертя (точка D).

Як видно з рисунка 3.32б, для $\tau = 1$ у разі встановлення стаціонарного значення напружень і деформації можливий переривчастий рух.

На рисунку 3.32в наведено фазовий портрет для $\tau = 100$, де, як і раніше, можна виділити два етапи. Спочатку напруження швидко релаксують до ізокліни 1, а потім здійснюється повільний рух до встановлення стаціонарного стану. Оскільки ізокліни 1 і 2 не мають якісних відмінностей (на обох реалізується пластична й гуківська ділянки залежності $\sigma_0(\varepsilon_0)$), поведінка системи на цьому рисунку якісно збігається з описаною для $\tau = 0.01$ (рис. 3.32а). Відмінність полягає в тому, що на першому етапі тут постійна деформація, а не напруження.

На вигляд фазових портретів істотний вплив має величина параметра β . На рисунку 3.33 подано фазовий портрет за умови, якщо $\beta = 100$. Із вигляду ізокліни 1 можна зробити висновок, що гуківська й

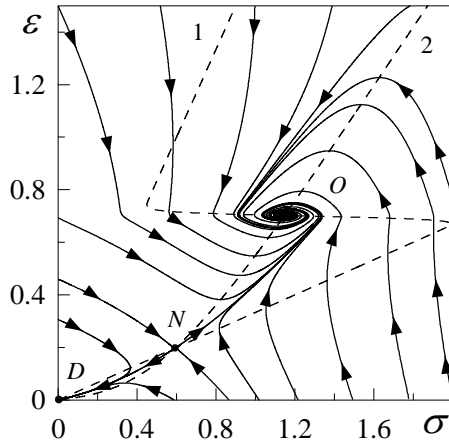


Рисунок 3.33 — Фазовий портрет при параметрах рисунка 3.32б і $\beta = 100$

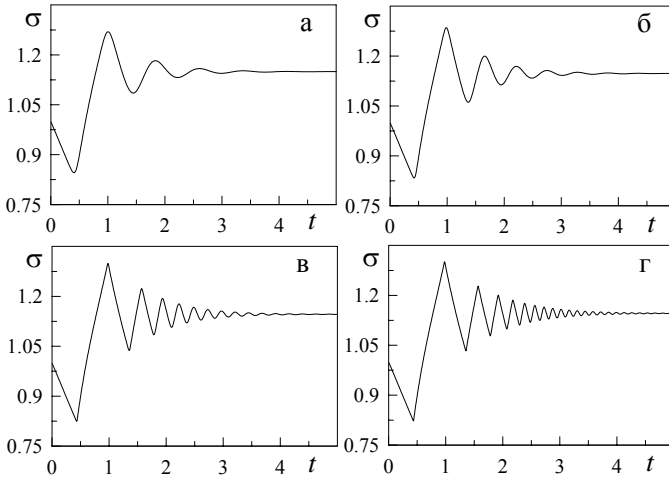


Рисунок 3.34 — Релаксаційні залежності $\sigma(t)$, одержані при сумісному розв'язку рівнянь (3.145), (3.146) для параметрів рисунка 3.33. Рисунки а, б, в, г відповідають значенням параметра $\beta = 50, 100, 500, 1\ 500$ відповідно

пластична ділянки на відповідній діаграмі навантаження водночас стають більш вираженими. Проте основна відмінність цього прикладу від наведеного на рисунку 3.32б полягає в тому, що точка O є не вузлом, а

фокусом, що описує релаксаційні коливання аж до встановлення рівноваги. Такі коливання відповідають *stick – slip* режиму тертя. Під час збільшення параметра β фазові траєкторії навколо фокусу розтягуються уздовж осі напружень, водночас амплітуда *stick – slip* переходів зростає. Релаксаційні часові залежності напружень для параметрів рисунка 3.33 наведені на рисунку 3.34. Тут зі збільшенням β коливання стають більш тривалими. На рисунку 3.34г залежність $\sigma(t)$ стає пилкоподібною, що спостерігається в експериментах. Режим, у якому за умов сталих швидкостей зсуву переривчасте тертя з часом переходило в режим ковзання, знайдений експериментально.

3.9 Багатовимірний термодинамічний потенціал для опису плавлення ультратонкої плівки мастила

3.9.1 Основні рівняння

Існує декілька феноменологічних моделей, що дозволяють частково пояснити експериментально спостережувані результати. Наприклад, такі як термодинамічні, механістична й синергетична [4]. Вони мають як детерміністичну, так і стохастичну природу. Дослідження також проводяться за допомогою методів молекулярної динаміки [6, 14]. Виявляється, що мастило може забезпечувати кілька кінетичних режимів, між якими в процесі тертя відбуваються переходи, що приводять до переривчастого руху [13]. У теоретичній роботі знайдено три режими тертя: режим ковзання за малих швидкостей зсуву, регулярний переривчастий режим і режим ковзання за великих швидкостей зсуву. Існування цих режимів підтверджують численні експерименти [10, 13].

У роботі [4] в межах моделі Лоренца для апроксимації в'язкопружного середовища розвинено підхід, згідно з яким перехід ультратонкої плівки мастила з твердоподібного в рідиноподібний стан відбувається в результаті термодинамічного та зсувного плавлення. Проведено опис цих процесів, що відбуваються в результаті самоорганізації полів зсувних напружень і деформації, а також температури мастила з урахуван-

ням адитивних шумів зазначених величин і корельованих флуктуацій температури. Показано, що в разі адитивних шумів установлюється самоподібний режим плавлення мастила, у якому часові ряди напружень набувають мультифрактальних властивостей. Причини стрибкоподібного плавлення й гістерезису, які спостерігалися в експериментах, розглянуто в [12]. Тут також визначено умови реалізації означених особливостей за умов урахування деформаційного дефекту модуля зсуву. У межах указаної моделі також описано періодичний переривчастий режим тертя, який, проте, має стохастичну складову, й може реалізовуватися лише за наявності в системі флуктуацій. Ще одним недоліком зазначеної моделі є те, що вона не враховує навантаження, яке прикладено до поверхонь тертя й під час одержання основних рівнянь застосовано ряд наближень [4].

У нашому розгляді запропоновано термодинамічну теорію, яка ґрунтується на розвиненні вільної енергії системи за степенями параметра f , який є надлишковим об'ємом, що виникає в результаті формування дефектної структури в мастилі під час його плавлення. Рідиноподібний стан інтерпретується як ділянка пластичної течії на діаграмі навантаження й характеризується наявністю в мастилі дефектів. Для опису сильно нерівноважних процесів, що відбуваються під час ковзання двох твердих тіл, які труться й розділені шаром мастила, використовується підхід, що ґрунтується на теорії фазових переходів Ландау [5]. Метою запропонованого дослідження є виявлення особливостей періодичного режиму переривчастого тертя в межах механічного еквівалента трибологічної системи, оскільки численні експерименти вказують саме на періодичний характер переривчастого руху [13].

Під час плавлення мастила товщиною менше ніж 10 молекулярних шарів стаціонарні стани, у яких воно знаходиться, не є термодинамічними фазами, а подають кінетичні режими тертя, яких може бути декілька. Водночас говорять не про тверду й рідку, а про твердоподібну й рідиноподібну фази. Про плавлення таких мастил судять за збільшенням їх об'єму й коефіцієнта дифузії [14]. Оскільки експериментально спостережуваною величиною з зазначених двох є об'єм, для опису стану мастила введемо параметр f , який має фізичний сенс надлишкового об'єму, що виникає за рахунок хаотизації структури твердого тіла в процесі плавлення. Зі зростанням параметра f росте густина дефек-

тів у мастилі, яке за рахунок їх транспорту, що відбувається під дією прикладеного дотичного напруження, переходить у кінетичний режим пластичної течії (рідиноподібна фаза).

Запишемо розвинення для густини вільної енергії з урахуванням унесків від пружних компонент зсувних деформацій ε_{ij}^e та ентропії s у вигляді

$$\begin{aligned} \Phi &= \Phi_0^* + \frac{1}{2}\lambda(\varepsilon_{ii}^e)^2 + \mu(\varepsilon_{ij}^e)^2 - \alpha s^2 + \frac{c}{2}(\nabla f)^2 - \\ &- \varphi_0 f + \frac{1}{2}\varphi_1 f^2 - \frac{1}{3}\varphi_2 f^3 + \frac{1}{4}\varphi_3 f^4, \end{aligned} \quad (3.148)$$

де Φ_0^* , λ , μ , α , c , φ_0 , φ_1 , φ_2 , φ_3 – константи розвинення. Причому, у свою чергу,

$$\varphi_0 = \varphi_0^* + \frac{1}{2}\bar{\lambda}(\varepsilon_{ii}^e)^2 + \bar{\mu}(\varepsilon_{ij}^e)^2 + \alpha\varphi s. \quad (3.149)$$

Пружні напруження враховуються з точністю до квадратичних внесків через інваріанти тензора деформацій ε_{ii}^e , $(\varepsilon_{ij}^e)^2 = \varepsilon_{ij}^e \varepsilon_{ji}^e$, де під індексами, що повторюються, мається на увазі підсумовування. Водночас перший інваріант подає слід тензора деформацій $\varepsilon_{ii}^e = \varepsilon_1^e + \varepsilon_2^e + \varepsilon_3^e$, а другий визначається виразом [16]

$$\begin{aligned} (\varepsilon_{ij}^e)^2 &\equiv (\varepsilon_{ii}^e)^2 - 2I_2 = (\varepsilon_1^e + \varepsilon_2^e + \varepsilon_3^e)^2 - \\ &- 2(\varepsilon_1^e \varepsilon_2^e + \varepsilon_1^e \varepsilon_3^e + \varepsilon_2^e \varepsilon_3^e) = (\varepsilon_1^e)^2 + (\varepsilon_2^e)^2 + (\varepsilon_3^e)^2. \end{aligned} \quad (3.150)$$

Згідно з виразом (3.148) у мастилі виникають пружні напруження

$$\sigma_{ij}^e = \frac{\partial \Phi}{\partial \varepsilon_{ij}^e} = \lambda \varepsilon_{ii}^e \delta_{ij} + 2\mu \varepsilon_{ij}^e - (\bar{\lambda} \varepsilon_{ii}^e \delta_{ij} + 2\bar{\mu} \varepsilon_{ij}^e) f. \quad (3.151)$$

Вираз (3.151) можна представити у вигляді ефективного закону Гука

$$\sigma_{ij}^e = 2\mu_{eff} \varepsilon_{ij}^e + \lambda_{eff} \varepsilon_{ii}^e \delta_{ij} \quad (3.152)$$

з ефективними пружними параметрами⁵⁾

$$\mu_{eff} = \mu - \bar{\mu}f, \quad (3.153)$$

$$\lambda_{eff} = \lambda - \bar{\lambda}f, \quad (3.154)$$

⁵⁾За умови $f > \mu/\bar{\mu}$ потрібно вважати $\mu_{eff} = 0$, а коли $f > \lambda/\bar{\lambda}$, необхідно приймати $\lambda_{eff} = 0$.

які зменшуються з плавленням під час зростання параметра f .

Нескладно показати, що інваріанти визначаються як

$$\varepsilon_{ii}^e = \frac{n}{\lambda_{eff} + \mu_{eff}^2}, \quad (3.155)$$

$$(\varepsilon_{ij}^e)^2 = \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\tau}{\mu_{eff}} \right)^2 + (\varepsilon_{ii}^e)^2 \right], \quad (3.156)$$

де n , τ – нормальна й дотична (зсувна) компоненти напружень, які діють на мастило з боку поверхонь, що труться⁶⁾. Співвідношення (3.155) та (3.156) подають зв'язок між компонентами тензорів і їх інваріантами лінійної теорії пружності [16].

Запишемо еволюційне рівняння для нерівноважного параметра f у вигляді рівняння Ландау – Халатнікова

$$\tau_f \dot{f} = -\frac{\partial \Phi}{\partial f}, \quad (3.157)$$

де введено час релаксації τ_f . У явному вигляді воно запишеться як

$$\tau_f \frac{\partial f}{\partial t} = -c \nabla^2 f + \varphi_0 - \varphi_1 f + \varphi_2 f^2 - \varphi_3 f^3 - \frac{n^2 (\bar{\lambda} + \bar{\mu})}{(\lambda_{eff} + \mu_{eff})^2}, \quad (3.158)$$

де поява останнього доданка пов'язана з тим, що інваріанти (3.155) і (3.156) залежать від величини надлишкового об'єму f .

Температура мастила визначається через вільну енергію системи

$$T = -\frac{\partial \Phi}{\partial s} = 2\alpha_s + \alpha_\varphi f. \quad (3.159)$$

Отже, ентропія є функцією температури й надлишкового об'єму. Водночас вільна енергія (3.148) також є функцією температури та об'єму.

Для опису процесів теплообміну мастила з навколишнім середовищем уведемо температуру поверхонь тертя T_e [4]. У разі неоднорідного нагрівання середовища рівняння теплопровідності є звичайним рівнянням безперервності [2]

$$T \frac{\partial s}{\partial t} = \kappa \nabla^2 T, \quad (3.160)$$

⁶⁾Зсувні напруження τ визначаються із виразу (3.152) при $i \neq j$, тобто при $\delta_{ij} = 0$. У разі $\mu_{eff} = 0$ доданок τ/μ_{eff} в (3.156) потрібно замінювати відповідно до (3.152) на $2\varepsilon_{ij}^e$.

де коефіцієнт теплопровідності κ вважається постійним. Для нормальної складової ∇_z^2 з достатньою точністю можна використовувати наближення $\kappa \nabla_z^2 T \approx (\kappa/h^2)(T_e - T)$, де h – товщина мастила. З урахуванням цього рівняння (3.160) записується у вигляді

$$\frac{\partial s}{\partial t} = \frac{\kappa}{h^2} \left(\frac{T_e}{T} - 1 \right) + \frac{\kappa}{T} \nabla_{xy}^2 T, \quad (3.161)$$

де величина h^2/κ відіграє роль часу релаксації, упродовж якого відбувається вирівнювання температур по товщині мастила за рахунок теплопровідності.

Скористаємося дебаївським наближенням, що пов'язує пружну деформацію ε_{ij}^e з пластичною ε_{ij}^{pl} :

$$\dot{\varepsilon}_{ij}^{pl} = \frac{\dot{\varepsilon}_{ij}^e}{\tau_\varepsilon}, \quad (3.162)$$

де τ_ε – максвеллівський час релаксації внутрішніх напружень. Повна деформація в шарі визначається як

$$\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ij}^e + \varepsilon_{ij}^{pl}. \quad (3.163)$$

Ця деформація задає швидкість руху верхнього блоку V_{ij} згідно з таким зв'язком:

$$V_{ij} = h \dot{\varepsilon}_{ij} = h(\dot{\varepsilon}_{ij}^e + \dot{\varepsilon}_{ij}^{pl}). \quad (3.164)$$

Із трьох останніх співвідношень впливає вираз для пружної компоненти зсувної деформації

$$\tau_\varepsilon \dot{\varepsilon}_{ij}^e = -\varepsilon_{ij}^e + \frac{V_{ij} \tau_\varepsilon}{h}. \quad (3.165)$$

Далі, в межах цієї роботи для спрощення розглядається однорідна система і в співвідношеннях (3.148), (3.158), (3.161) вважається $\nabla \equiv 0$.

3.9.2 Сила тертя

Система кінетичних рівнянь (3.158), (3.161), (3.165) з урахуванням визначень (3.149), (3.152)–(3.156), (3.159) є замкненою та може бути використана для дослідження кінетики процесу плавлення. У

цьому підрозділі розглянемо стаціонарні режими тертя. Відповідно до рівнянь (3.161) і (3.165) із часом устанавлюються стаціонарні значення температури мастила T_0 і пружної компоненти зсувної деформації ε_{ij0}^e :

$$T_0 = T_e, \quad \varepsilon_{ij0}^e = \frac{V_{ij}\tau_\varepsilon}{h}. \quad (3.166)$$

Для знаходження стаціонарних станів усіх величин необхідно чисельно розв'язати еволюційне рівняння (3.158), використовуючи (3.149), (3.152)–(3.156) і визначаючи поточну ентропію з (3.159) при $T = T_e$, а значення деформації з (3.166).

В експериментальних роботах часто наводяться залежності сили тертя від швидкості зсуву, товщини шарів мастил, нормального тиску [10, 12, 13]. У цьому розділі проаналізуємо вплив на силу тертя температури мастила та швидкості зсуву.

У мастилі, крім пружних σ_{ij}^e , виникають також і в'язкі σ_{ij}^{visc} напруження. Повне напруження в шарі є сумою цих двох внесків

$$\sigma_{ij} = \sigma_{ij}^e + \sigma_{ij}^{visc}. \quad (3.167)$$

Повна сила тертя визначається стандартно:

$$F_{ij} = \sigma_{ij}A, \quad (3.168)$$

де A – площа контактуючих поверхонь. В'язкі напруження в шарі подаються формулою

$$\sigma_{ij}^{visc} = \frac{\eta_{eff}V_{ij}}{h}, \quad (3.169)$$

де η_{eff} – ефективна в'язкість, що знаходиться лише експериментально і в межевому режимі

$$\eta_{eff} \sim (\dot{\varepsilon}_{ij})^\gamma, \quad (3.170)$$

де $\gamma < 0$ для псевдопластичних мастил та $\gamma > 0$ для ділатантних. З урахуванням (3.164), (3.170) вираз для в'язких напружень (3.169) запишеться у вигляді

$$\sigma_{ij}^{visc} = \left(\frac{V_{ij}}{h}\right)^{\gamma+1}. \quad (3.171)$$

Після підстановки (3.167) і (3.171) в (3.168) маємо шуканий вираз для сили тертя ⁷⁾

$$F_{ij} = \left[\sigma_{ij}^e + \operatorname{sgn}(V_{ij}) \left(\frac{|V_{ij}|}{h} \right)^{\gamma+1} \right] A, \quad (3.172)$$

де σ_{ij}^e задається формулою (3.152) при $i \neq j$.

В експериментах за поверхні тертя зазвичай використовуються атомарно-гладкі поверхні слюди, а за мастило — квазісферичні молекули октаметилциклотетрасилоксану й лінійні ланцюгові молекули тетрадекану, або гексадекану [12, 13]. Зазначені експерименти проводяться за таких умов: товщина мастила $h \sim 10^{-9}$ м, площа контакту $A \sim 3 \cdot 10^{-9}$ м², навантаження на верхню поверхню тертя $L = (2 \div 60) \cdot 10^{-3}$ Н, що відповідає нормальним напруженням $n = -L/A = -(6.67 \div 200) \cdot 10^5$ Па. Сила тертя водночас становить $F \sim (2 \div 40) \cdot 10^{-3}$ Н. У межах зазначених експериментальних робіт виявлено, що мастило плавиться в разі перевищення критичного значення температури $T_e > T_0 \sim 300$ К або швидкості зсуву $V > V_c \sim 400$ нм/с. Ці значення можуть істотно змінюватися залежно від типу мастила й геометрії експерименту.

У цій моделі, відповідно до експериментальних даних обираються такі значення констант теорії: $\Phi_0^* = 20$ Дж/м³, $\lambda = 2 \cdot 10^{11}$ Па, $\bar{\lambda} = 10^8$ Па, $\mu = 4.1 \cdot 10^{11}$ Па, $\bar{\mu} = 4 \cdot 10^{11}$ Па, $\varphi_0^* = 5$ Дж/м³, $\varphi_1 = 1100$ Дж/м³, $\varphi_2 = 2700$ Дж/м³, $\varphi_3 = 2070$ Дж/м³, $\alpha = 0.055$ К²·м³/Дж, $\alpha_\varphi = 0.05$ К, $h = 10^{-9}$ м, $\tau_f = 1$ Па·с, $\tau_\varepsilon = 10^{-8}$ с. Зазначимо, що час релаксації надлишкового об'єму τ_f має розмірність в'язкості. Фактично це означає, що зі зростанням ефективної в'язкості мастила час установлення стаціонарного режиму тертя збільшується.

Залежність (3.172) показана на рисунку 3.35. Рисунок 3.35а ілюструє той факт, що з підвищенням температури сила тертя зменшується. Розглянемо детальніше криву 2. Спочатку під час підвищення температури надлишковий об'єм монотонно зростає. Водночас ефективний модуль зсуву $2\mu_{eff}$ (3.153) зменшується, що приводить до зниження значення пружної компоненти зсувних напружень (3.152) і

⁷⁾ Тут уведено знакову функцію $\operatorname{sgn}(x)$ та абсолютне значення швидкості зсуву $|V_{ij}|$, оскільки вона може набувати також і від'ємного значення.

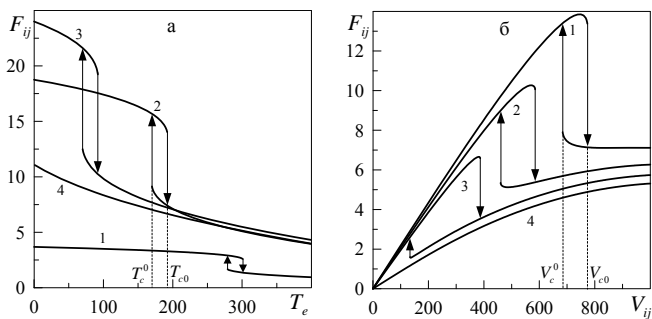


Рисунок 3.35 — Залежність стаціонарного значення повної сили тертя F_{ij} (мН) (3.172) від температури поверхонь тертя T_e (К) і швидкості зсуву V_{ij} (нм/с) при $\gamma = 2/3$, $A = 3 \cdot 10^{-9} \text{ м}^2$, $n = -7 \cdot 10^5 \text{ Па}$: а – криві 1–4 відповідають постійним значенням швидкості зсуву $V_{ij} = 150 \text{ нм/с}$, 800 нм/с , 100 нм/с , 400 нм/с ; б – криві 1–4 відповідають фіксованим значенням температури $T_e = 200 \text{ К}$, 245 К , 279 К , 310 К

відповідно до зменшення значення сили тертя (3.172). Під час підвищення температурою критичного значення $T_e > T_{c0}$, величина надлишкового об'єму f стрибкоподібно збільшується й мастило плавиться, що приводить до різкого зниження повної сили тертя. З подальшим пониженням температури мастило твердне тепер уже за її меншого значення $T_e = T_c^0$. Водночас залежність має гістерезисний характер, що відповідає фазовим переходам першого роду. Згідно з рисунком 3.35а з підвищенням швидкості зсуву мастило плавиться за умови меншого значення температури. За швидкості вищій за деяке критичне значення мастило незалежно від температури завжди рідиноподібне (крива 4), і сила тертя зменшується разом із температурою за рахунок зменшення модуля зсуву (розрідження мастила).

Отже, за малих температур ($T_e < T_c^0$) реалізується один мінімум потенціалу $\Phi(f)$, що відповідає стаціонарному стану з малим значенням f (твердоподібне мастило). В області температур $T_c^0 < T_e < T_{c0}$ співіснують два мінімуми $\Phi(f)$. Проте система не може перейти в стан, що відповідає другому мінімуму, оскільки ці мінімуми розділяє максимум енергії. Під час подальшого збільшення температури $T_e > T_{c0}$ розмежовувальний максимум зникає й мастило за механізмом фазового

перетворення першого роду переходить у стан, що відповідає єдиному мінімуму за великого значення f , тобто плавиться. Якщо після цього знижувати температуру, то з появою першого мінімуму система знову не зможе перейти у відповідний йому стан через наявність розмежувального максимуму. У разі його зникнення, за умови, якщо $T_e = T_c^0$, мастило стрибкоподібно твердне.

Рисунок 3.35б демонструє дещо іншу поведінку. Тут згідно з (3.172) за малих швидкостей зсуву мастило твердоподібне й відповідне значення σ_{ij}^e велике. Підвищення швидкості в такому режимі приводить до зростання обох компонент сили тертя (3.172) і тому вона швидко збільшується. Під час подальшого підвищення швидкості мастило плавиться й пружне зсувне напруження (3.152) істотно зменшується, що зі свого боку приводить до різкого зниження повної сили тертя. З подальшим збільшенням швидкості значення F_{ij} зростає за рахунок обох компонент сили тертя, що збільшуються зі швидкістю зсуву. Згідно з кривою 4 в рідиноподібному стані сила тертя (3.172) також зростає за рахунок збільшення швидкості. Тобто реалізується ситуація, схожа з поведінкою системи під час підвищення температури (рис. 3.35а), з тією відмінністю, що в разі зсувного плавлення зі збільшенням температури поверхонь тертя зростає площа фігури, яку обмежує гістерезис. Під час підвищення температури мастило плавиться за менших швидкостей зсуву. Зазначимо, що результати, подані на рисунку 3.35б, якісно збігаються з новою картою тертя для межового режиму, запропонованою в результаті узагальнення експериментальних даних. Залежності сили тертя від температури, типу поданих на рисунку 3.35а, на цей час експериментально не вимірюються.

3.9.3 Трибологічна система

Подані на рисунку 3.35 залежності одержано за фіксованої швидкості зсуву верхньої поверхні тертя. Проте динамічні характеристики трибологічної системи визначаються не лише силою тертя, наведеною на зазначеному рисунку, а також і властивостями системи в цілому. Зокрема, згідно з експериментами в області гістерезису залежності на рисунку 3.35 можлива реалізація переривчастого режиму тер-

тя (*stick – slip*) [12–14], з’ясуванню особливостей якого присвячено цю роботу. Типова схема трибологічної системи подана на рисунку 3.1.

Рівняння руху верхнього блоку має вигляд [13]⁸⁾

$$M\ddot{X} = k \left(\int_0^t V_0 dt' - X \right) - F, \quad (3.173)$$

де $t = t'$ – час руху. У разі постійного значення швидкості зсуву V_0 інтеграл у (3.173) звичайно можна замінити виразом $V_0 t$. Для обчислення часової еволюції сили тертя останнє рівняння необхідно розв’язувати спільно з (3.158), (3.161), (3.165), визначаючи водночас силу тертя з (3.172). Проте часи релаксації деформації τ_ε та ентропії $\tau_s = h^2/\kappa$ за рахунок тонкості мастила можна покласти малими порівняно з часом релаксації надлишкового об’єму τ_f . Тому в межах наближення $\tau_f \gg \tau_\varepsilon, \tau_s$, розв’язуватимемо спільно два рівняння (3.173), (3.158), визначаючи температуру й деформацію з (3.166), а ентропію з (3.159).

Результат розв’язку зазначених рівнянь наведений на рисунку 3.36. Згідно з останнім сила тертя спочатку монотонно зростає, оскільки мастило твердоподібне, а швидкість зсуву збільшується. Коли вона перевищує критичне значення V_{c0} , мастило плавиться, за рахунок чого зменшується сила тертя, росте швидкість руху верхнього блоку V і він швидко переміщується на велику відстань. Водночас зменшується натягнення пружини й відповідно – швидкість зсуву. Коли вона стає меншою за значення, необхідне для підтримки мастила в рідиноподібному стані, останнє твердне й сила тертя починає зростати. Описаний процес періодично повторюється в часі. Зазначимо, що швидкість, за якої мастило твердне, не збігається з аналогічною швидкістю, наведеною на рисунку 3.35. Це пов’язано з різким збільшенням швидкості зсуву V під час плавлення й відповідним збільшенням параметра f . Згідно з (3.153) модуль зсуву водночас стає менше нуля і його необхідно вважати за нульовий, що змінює вид потенціалу (3.148). Водночас за наявності пружних деформацій (3.165) пружні напруження в мастилі згідно з (3.152) стають нульовими, що й обумовлює зниження сили тертя, а мастило при цьому тече.

⁸⁾Оскільки розглядається зсув в одному напрямі, далі для зручності запису опустимо тензорні позначення.

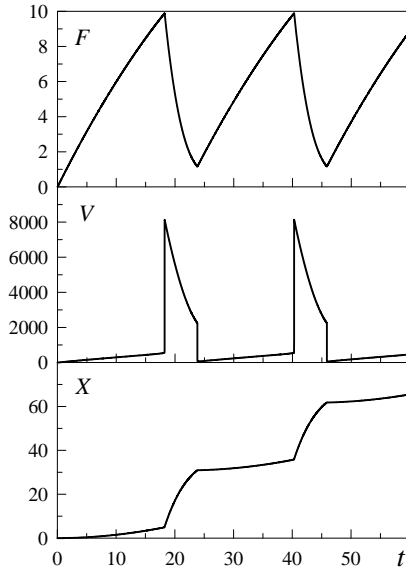


Рисунок 3.36 — Залежність сили тертя F (мН), швидкості зсуву поверхні тертя V (нм/с) та її координати X (мкм) від часу t (с) при параметрах $n = -7 \cdot 10^5$ Па, $M = 0.4$ кг, $k = 480$ Н/м, $T_e = 250$ К, $V_0 = 1400$ нм/с

На рисунку 3.37 показано залежність повної сили тертя F (3.172), надлишкового об'єму f і пружної компоненти зсувних напружень σ_{ij}^e (3.152) від часу в разі збільшення швидкості зсуву V_0 . Спочатку рух верхнього зрушуваного блока ($V_0 = V_{01}$) приводить до зростання надлишкового об'єму f . Коли f досягає критичного значення, мастило плавиться за механізмом фазового перетворення першого роду, водночас параметр f стрибкоподібно збільшується. Мастило після цього знову починає тверднути, оскільки зменшується відносна швидкість зсуву поверхонь тертя (див. рис. 3.36). Після повного тверднення в ньому з'являється пружне напруження, подальше зростання якого знову приводить до збільшення параметра f , поки той досягне критичного значення, необхідного для плавлення, і процес повторюється знову. У результаті встановлюється періодичний переривчастий (*stick – slip*) режим плавлення / тверднення. Під час підвищення швидкості до значення $V_0 = V_{02}$ частота *stick – slip* піків збільшується

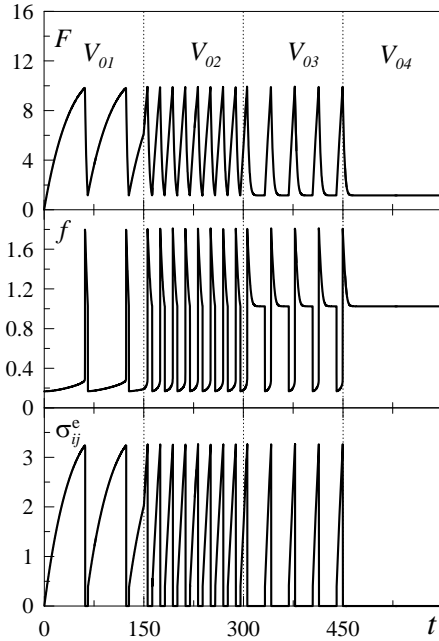


Рисунок 3.37 — Залежність сили тертя F (мН), надлишкового об'єму f і пружної компоненти напружень σ_{ij}^e (МПа) від часу t (с) при параметрах рисунку 3.36 і швидкостях зсуву $V_{01} = 650$ нм/с, $V_{02} = 1800$ нм/с, $V_{03} = 2246.7$ нм/с, $V_{04} = 2247$ нм/с

за рахунок того, що за цієї швидкості в системі швидше встановлюється критичне значення f . Відповідно мастило швидше плавиться, а тому за один і той самі проміжок часу система встигає зробити більшу кількість переходів плавлення / тверднення. Із подальшим збільшенням швидкості $V_0 = V_{03}$ частота *stick – slip* піків знову зменшується. Це відбувається за рахунок того, що на залежності $F(t)$ з'являються довгі кінетичні ділянки $F = \text{const}$. Потрібно зазначити, що в цьому режимі параметр f під час плавлення спочатку різко зростає завдяки швидкому збільшенню швидкості зсуву верхнього блоку V . Стаціонарній кінетичній ділянці відповідає менше значення надлишкового об'єму f , який установлюється після різкого початкового зсуву верхньої поверхні, що треться, за рахунок вивільнення частини механічної потен-

ціальної енергії розтиснутої пружини. Під час подальшого зростання швидкості $V_0 = V_{04}$ переривчастий режим зникає та встановлюється кінетичний режим тертя рідиноподібного мастила, яке характеризується більшим значенням надлишкового об'єму f і нульовими пружними зсувними напруженнями σ_{ij}^e . Зазначимо, що рідиноподібний стан не завжди характеризується нульовим значенням напружень σ_{ij}^e , і в нашому прикладі цей факт зумовлений рівністю ефективного модуля зсуву мастила (3.153) нулю в рідиноподібному стані. Отже, під час збільшення швидкості частота *stick – slip* піків спочатку збільшується, а потім зменшується за рахунок появи довгих кінетичних ділянок. У разі перевищення критичного значення швидкості V_0 режим *stick – slip* зникає. Описана поведінка добре узгоджується з експериментальними даними [13].

В експериментах також часто досліджується вплив на характер плавлення мастила зовнішнього нормального тиску, прикладеного до поверхонь тертя [13]. Такі експерименти показують, що тиск впливає на параметри трибологічної системи нетривіально. Наприклад, для мастил із ланцюгових молекул гексадекана зі зростанням тиску критична швидкість зсуву зменшується, а для квазісферичних молекул октаметилциклотетрасилоксану вона, навпаки, збільшується [13]. Тиск також впливає на частоту й амплітуду *stick – slip* переходів [13]. У межах нашої моделі згідно з рівнянням (3.158) зростання навантаження на поверхні тертя приводить до зменшення надлишкового об'єму, що повинно сприяти твердненню мастила.

На рисунку 3.38 подано часову залежність сили тертя за різних значень нормального тиску, дію якого спрямовано на стиснення поверхонь тертя. За температури, нижчої за критичне значення (верхня панель рисунка), реалізується переривчастий режим тертя. Причому, зі зростанням тиску збільшується амплітуда *stick – slip* переходів та значення кінетичної та статичної сил тертя, а також зменшується частота переходів. У разі тиску, що відповідає нормальному напруженню $n = n_4$, *stick – slip* режим не реалізується. Проте водночас встановлюється не кінетичний режим, що відповідає рідиноподібному мастилу, а відбувається тверднення мастила внаслідок стиснення стінок. За рахунок цього мастило вже не може розплавитися, тому встановлюється велике значення сили тертя F , що відповідає твердоподібному масти-

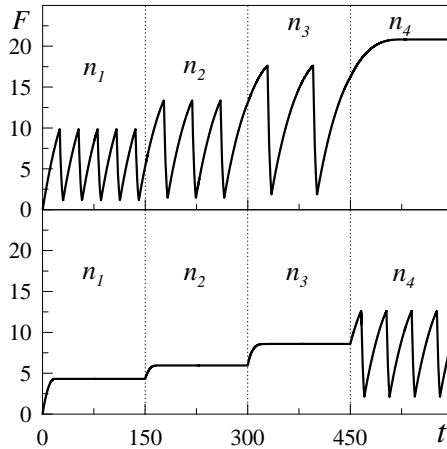


Рисунок 3.38 — Залежність сили тертя F (мН) від часу t (с) при параметрах рисунка 3.36 і зовнішньому нормальному навантаженні $n_1 = -7 \cdot 10^5$ Па, $n_2 = -50 \cdot 10^5$ Па, $n_3 = -80 \cdot 10^5$ Па, $n_4 = -100 \cdot 10^5$ Па. Верхня панель відповідає температурі $T_e = 250$ К, нижня — $T_e = 400$ К

лу й малому значенню надлишкового об'єму f , оскільки стиснення стінок сприяє виникненню в мастилі дальнього порядку чергування атомів. На нижній панелі рисунка подано залежність, яка актуальна у разі підвищеної температури поверхонь тертя T_e . Тут видно, що встановлюється кінетичний режим тертя, який відповідає малому значенню сили тертя й великому значенню надлишкового об'єму f . Проте, за умови, якщо $n = n_4$, настає *stick – slip* режим, оскільки за такого значення нормального напруження n згідно з рівнянням (3.158) мастило вже не може бути завжди рідиноподібним. У разі подальшого зростання тиску потрібно чекати повного тверднення мастила, як на верхній панелі рисунка, коли $n = n_4$. Отже, виявлено три режими тертя: 1) кінетичний, у якому мастило завжди рідиноподібне; 2) переривчастий, що відповідає періодичному плавленню /твердненню; 3) режим сухого тертя, що характеризується великим значенням сили тертя й твердоподібною структурою мастила. Ці режими знайдено також у межах стохастичної моделі.

На рисунку 3.39 подано залежність сили тертя від часу в разі під-

вищення температури поверхонь тертя, яка в цьому розгляді збігається з температурою мастила. Видно, що підвищення температури приво-

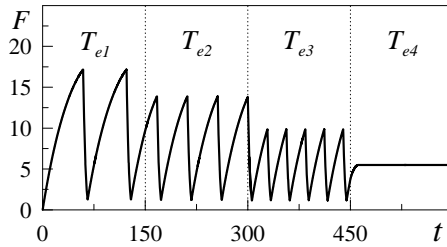


Рисунок 3.39 — Залежність сили тертя F (мН) від часу t (с) при параметрах рисунка 3.36 і температурі поверхонь тертя $T_{e1} = 150$ К, $T_{e2} = 200$ К, $T_{e3} = 250$ К, $T_{e4} = 300$ К

дить до зниження амплітуди коливань сили тертя та збільшення частоти фазових переходів рідиноподібне – твердоподібне мастило. За умови, якщо $T_e = T_{e4}$, настає режим ковзання, що характеризується постійним значенням кінетичної сили тертя й незмінною швидкістю зсуву верхнього блока. Отже, підвищення температури сприяє плавленню мастила. Ця залежність є прогнозувальною, оскільки експерименти з подібним дослідженням впливу температури нам невідомі.

РОЗДІЛ 4

АТОМІСТИЧНЕ ПРЕДСТАВЛЕННЯ МЕЖОВОГО ТЕРТЯ

4.1 Властивості тонких плівок рідин, обмежених твердими поверхнями

У попередніх розділах наведено результати застосування феноменологічної моделі, а саме синергетичної системи Лоренца для опису процесів, що протікають у межовій плівці мастила. Основною слабкістю цього підходу й подібних ідеалізованих моделей є те, що для їх застосування необхідні припущення та апроксимації, що можуть привести до некоректних результатів. Також феноменологічний підхід зазвичай дає лише якісний опис нанотрибологічних процесів.

Комп'ютерне моделювання методом молекулярної динаміки (яке ще називають комп'ютерним експериментом) є альтернативним методом для теоретичного дослідження процесів тертя на атомарному рівні. Воно подає компроміс між аналітичними моделями й експериментальними умовами та дуже широко використовується для розв'язання нанотрибологічних задач [6, 14, 18, 19].

У цьому розділі описано МД моделювання ультратонкого шару води, стиснутого між абсолютно жорсткими алмазними поверхнями. У першому підрозділі подано короткий огляд основних властивостей межових плівок та обґрунтування вибору досліджуваної системи. У другому підрозділі докладно описані умови моделювань, а в третьому підрозділі наведено основні результати комп'ютерних експериментів.

Як показують експерименти й комп'ютерні моделювання, поведінка ультратонких плівок рідин, стиснутих між двома поверхнями, істотно відрізняється від поведінки об'ємних рідин. Для межових плівок є характерними такі особливі властивості [13, 14]:

1) молекули рідин, стиснутих між атомарно-гладенькими поверхнями стають більш упорядкованими та прагнуть утворювати квазідискретні шари, у яких середня локальна густина рідини осцилює із відстанню, нормальною до поверхонь;

2) рухливість молекул у стиснутих плівках істотно зменшується

порівняно з об'ємними рідинами. Це виявляється в зменшенні коефіцієнта дифузії та в збільшенні в'язкості й молекулярних часів релаксації. «Ефективна» в'язкість може перевищувати об'ємну в 10^5 разів, а часи релаксації можуть бути більшими за об'ємні в 10^{10} разів;

3) межове мастило може проявляти дві різні реакції на зсув: рідиноподібну, за якої рідина тече в разі появи деформації, і твердоподібну, що характеризується наявністю границь текучості в плівці. У комп'ютерних моделюваннях простих леннард-джонсівських рідин між атомарно-структурованими поверхнями було передбачено різкі переходи рідина – тверде тіло в плівках, тонших від 6 молекулярних діаметрів. Водночас молекули впорядковуються як перпендикулярно, так і паралельно до поверхонь, однак горизонтальне впорядкування зникає для неструктурованих, тобто математично гладеньких поверхонь. У стиснутих плівках як позиційне, так і орієнтаційне впорядкування обумовлені не лише взаємними взаємодіями молекул рідини, а й наявністю двох близько розташованих твердих поверхонь;

4) для швидкостей зсувних поверхонь, менших за деяке критичне значення, може бути актуальним переривчастий рух (stick–slip motion). Він характеризується почерговими зупинками (stick) і проковзуваннями (slip).

Для пояснення наведених властивостей межових плівок різноманітних рідин широко застосовують МД моделювання. Зокрема досліджено властивості рідин зі сферичними молекулами, й алканів, молекули яких мають ланцюгову форму [14].

У цьому розділі проведено комп'ютерні експерименти для ультратонкої плівки води, стиснутої між абсолютно жорсткими алмазними поверхнями. Вибір води як рідини для моделювання обумовлений її важливістю, повсюдністю й унікальними властивостями, зокрема в трибологічному відношенні [12]. Так, уведення моношару води (товщиною лише 0.25 нм) між атомарно-плоскими поверхнями слюди в апараті поверхневих сил обумовлює зменшення тертя більш, ніж на порядок величини. Ефективність моношару води в зменшенні тертя пояснюється «гідрофільністю» слюдяних поверхонь та існуванням у водних розчинах сильних відштовхувальних короткодійочих сил гідратації між цими поверхнями, які ефективно усувають контрольований адгезією внесок у силу тертя. За описуваних умов сила тертя відповідає

першому закону Амонтона, який стверджує, що сила тертя є пропорційною зовнішньому навантаженню.

Метою цих досліджень є вивчення поведінки плівки води, що складається з TIP4P молекул, стиснутої між абсолютно жорсткими алмазними пластинами, і перевірка відповідності моделі до експериментів та інших моделювань. Результати зі свого боку можуть дати оцінку надійності використання TIP4P моделі молекул води й апроксимації абсолютно жорстких пластин у моделюваннях нанотрибологічних систем.

4.2 Модель молекулярної динаміки ультратонкого шару води, стиснутого між жорсткими алмазними поверхнями

4.2.1 Загальна схема комп'ютерного експерименту

Моделювання проведено для плоскої геометрії Куетта, що сильно нагадує експериментальні системи, досліджувані за допомогою апарата поверхневих сил [14]. Розглядалася тонка плівка молекул води, обмежена двома твердими стінками з періодичними граничними умовами в площині пластин, застосованими як до рідини, так і до поверхонь. Вивчено атомарно-гладенькі й атомарно-шорсткі пластини. У першому прикладі кожна стінка складається з 1 152 атомів, що утворюють дві кристалічні (001) поверхні з алмазною решіткою. У другому періодичний атомарний рельєф забезпечувався видаленням 144 атомів, що знаходяться безпосередньо на поверхні. Усі значення параметрів моделювання поверхонь із різним рельєфом є однаковими, за винятком того, що в разі шорстких поверхонь уведена слабка взаємодія поверхонь однієї з одною. Хоча вивчення тертя алмазних поверхонь, розділених плівкою води, ще не проводилися експериментально, однак діамант є прозорим для світла, а, отже, може бути використаний у дослідженнях з апаратом поверхневих сил. Для спрощення задачі пластини вважаються абсолютно жорсткими, а модель не враховує пружності поверхонь. Але, беручи до уваги те, що алмаз є одним із найтвердіших

матеріалів, у цій роботі вирішено перевірити це наближення. Досліджено плівки води, що складаються з одного та двох шарів молекул. Кожний шар містить $14 \cdot 14 = 196$ молекул, отже максимальна кількість молекул, використовувана в моделюваннях, дорівнює 2 696.

На рисунку 4.1 подано початкові конфігурації системи для плівок товщиною один і два молекулярних шари, стиснутих між гладенькими поверхнями. На рисунку 4.2 — між атомарно-шорсткими, а на рисунку 4.3 — вид «згори» (у від'ємному напрямку осі z) початкової конфігурації молекул води й кристалічної площини.

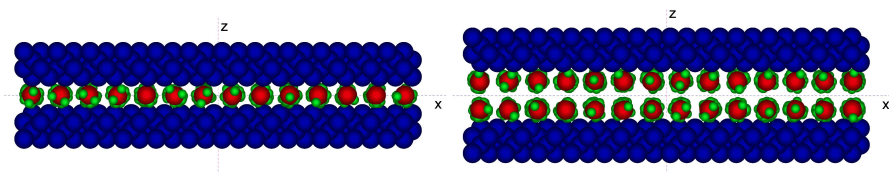


Рисунок 4.1 — Початкова конфігурація системи для плівки води з одного та двох шарів молекул, стиснутої між гладенькими поверхнями. Атоми вуглецю, кисню й водню зображені відповідно синіми, червоними й зеленими кульками

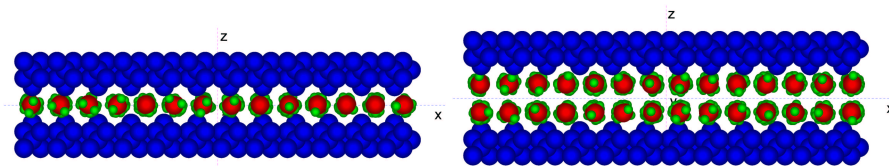


Рисунок 4.2 — Початкова конфігурація системи для плівки води з одного та двох шарів молекул, стиснутої між атомарно-шорсткими поверхнями з періодичним рельєфом

Для візуалізації атомів використано емпіричні значення їх ковалентних радіусів, які для вуглецю, кисню та водню відповідно становлять 77, 73 і 37 пм ($1 \text{ пм} = 10^{-12} \text{ м}$), стала решітки алмазу дорівнює 356.68 пм. Молекули води на початку моделювань розміщувалися у вершинах кубічної решітки зі сталою решітки, що відповідає значенню $1\,048 \text{ кг/м}^3$ густини води, яке є близьким до об'ємного (за нормальних умов) значення — $1\,000 \text{ кг/м}^3$. Пластини й молекули води несумір-

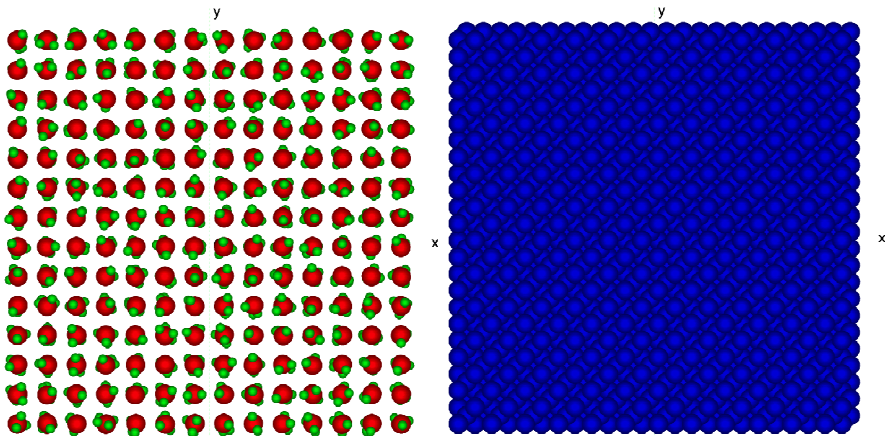


Рисунок 4.3 — Розташування молекул води (ліворуч) і вид алмазної поверхні (праворуч) у площині xy на початку моделювань

ні, оскільки стала решітки алмазу й відстань між молекулами води не співпадають. Початкова відстань (щілина) між поверхнями для одного шару молекул становить 0.3104 нм, для двох шарів — 0.6207 нм. Горизонтальні розміри комірки моделювання в напрямках осей x і y однакові й дорівнюють 42.81 Å.

Щоб імітувати експерименти моделювання проводилися за сталих значень температури й навантаження, прикладеного до стінок. Температура становила 298 К, а навантаження моделювалося методом дії сталої сили L на кожен атом площин уздовж осі z . Зсув також імітувався прикладенням сталої горизонтальної сили F_S до кожного атома верхньої площини вздовж осі x , і в цій роботі використовувався алгоритм сталої сили зсуву [14].

4.2.2 Модель води

Для пояснення властивостей води потрібна деяка картина розподілення заряду в її молекулі. Були запропоновані різноманітні моделі, наприклад, ST2, TIP3P та ін., але ще досі не існує єдиної моделі, яка була б спроможною задовільно врахувати властивості води в усіх

трьох фазах (лід, рідина й пара) [12]. Основною вимогою до будь-якої моделі води є те, що вона повинна відтворювати тетраедричну структуру, обумовлену водневими зв'язками.

У цій роботі використовується модель, що задовольняє вказану умову, і в якій молекула вважається жорсткою, – TIP4P модель [17]. Взаємодія між жорсткими молекулами найбільш легко вводиться методом визначення розташування на молекулі ділянок (сайтів або центрів), на які діють сили. Тоді результуюча сила, що діє між двома молекулами, буде просто дорівнювати сумі сил між усіма парами сайтів взаємодій. Щоб розрахувати взаємодію між парами сайтів, достатньо знати відстань між центрами мас двох молекул і їх орієнтацію в просторі.

Модель молекули подано на рисунку 4.4. Вона ґрунтується на чотирьох сайтах, розміщених в одній площині. Два з них – позначені як М і О – пов'язані з ядром кисню, інші два – позначені через Н – із ядрами водню. Сайт М лежить на осі симетрії молекули між сайтом О та лінією, що з'єднує Н сайти.

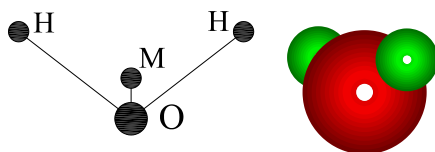


Рисунок 4.4 — Схематичне зображення TIP4P молекули води (ліворуч) [17], вид молекули під час візуалізації в програмі (праворуч)

Відстані та кут, необхідні для повного визначення координат сайтів, мають такі значення: $r_{OH} = 0.957 \text{ \AA}$, $r_{OM} = 0.15 \text{ \AA}$, $\angle HOH = 104.5^\circ$. Енергія взаємодії між двома молекулами i та j складається з подвійної суми за всіма сайтами обох молекул. Члени з індексами k та l враховують кулонівську взаємодію між електричними зарядами, пов'язаними із сайтами, а також внески леннард-джонсівського типу

$$u_{ij} = \sum_{k \in i} \sum_{l \in j} \left(\frac{q_k q_l}{r_{kl}} + \frac{A_{kl}}{r_{kl}^{12}} - \frac{C_{kl}}{r_{kl}^6} \right), \quad (4.1)$$

де $\mathbf{r}_{kl} = \mathbf{r}_k - \mathbf{r}_l$ – відстань між сайтами k і l , $r_{kl} \equiv |\mathbf{r}_{kl}|$. Відповідна сила визначається виразом

$$\mathbf{f}_{ij} = \sum_{k \in i} \sum_{l \in j} \left(\frac{q_k q_l}{r_{kl}^3} + \frac{12A_{kl}}{r_{kl}^{14}} - \frac{6C_{kl}}{r_{kl}^8} \right) \mathbf{r}_{kl}. \quad (4.2)$$

Заряди мають такі значення: $q_H = 0.52e$, $q_O = 0$, $q_M = -2q_H$, де $e = 1.6 \times 10^{-19}$ Кл. Параметри леннард-джонсівської частини потенціалу, що діє лише між O сайтами, такі: $A_{OO} \equiv A = 600 \times 10^3$ (ккал/моль) \AA^{12} , $C_{OO} \equiv C = 610$ (ккал/моль) \AA^6 , і 1 ккал/моль = 4184 Дж/моль.

У моделюваннях використовуються безрозмірні одиниці вимірювання. Одиниця вимірювання довжини $\sigma = (A/C)^{1/6} = 3.154 \text{\AA}$, одиниця вимірювання енергії $\varepsilon = A/(4\sigma)^{12} = 0.155$ ккал/моль. За одиницю вимірювання маси обираємо масу молекули води $m = 2.987 \times 10^{-27}$ г й одиниця вимірювання часу $t_0 = \sqrt{m\sigma^2/\varepsilon} = 5.253 \times 10^{-12}$ с. Також визначимо безрозмірні одиниці вимірювання заряду, у яких $q_H = 1$. Часовий крок, що використовувався, мав значення $\Delta t = 0.0005$; у розмірних одиницях це дорівнює 2.627×10^{-15} с.

Наведемо безрозмірні й розмірні значення сил, що використовувалися в моделюваннях. Значення сили L на кожен атом змінювалися від 2 (у системі СІ це 6.838 пН) до 150 (0.513 нН), що відповідають значенням тиску на кожную поверхню від 0.43 ГПа до 32.254 ГПа. Ураховуючи, що поріг пластичності алмазу порядку 100 ГПа [14], обробленню підлягали результати для тисків, менших 20 ГПа, оскільки для більших значень тисків деформація поверхонь, не взята до уваги в моделі, що розглядається, повинна відігравати значну роль. Горизонтальна сила F_S зсуву на кожен атом верхньої пластини змінювалася від 0.5 (1.71 пН) до 100 (0.342 нН), або повна горизонтальна сила на поверхню змінювалася від 1.97 нН до 0.394 мкН. У подальшому викладенні будуть використовуватися лише безрозмірні значення сил, що діють на кожен атом.

Що стосується взаємодії води з алмазними поверхнями, вважається, що з атомами вуглецю взаємодіє лише сайт O молекули води, потенціал має леннард-джонсівський вигляд

$$u_{ij} = \begin{cases} 4\varepsilon_{CO} \left[\left(\frac{\sigma_{CO}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{CO}}{r_{ij}} \right)^6 \right], & r_{ij} < r_c \\ 0, & r_{ij} \geq r_c \end{cases}, \quad (4.3)$$

де $r_c = 7.5 \text{ \AA}$ (або 2.38 у безрозмірних одиницях) – відсічна відстань, $i \epsilon_{CO} = 2$, $\sigma_{CO} = 0.86$. Значення останніх параметрів вибрано так, щоб задовольнити експериментальний факт, що алмаз є гідрофільним. Вони відповідають удвічі більшому притягання молекул води до атомів вуглецю, ніж до молекул води.

4.2.3 Рівняння руху

У моделюваннях використовувалися класичні рівняння руху. Завдяки абсолютній жорсткості пластин до уваги береться рух їх центрів мас. Для верхньої пластини рівняння руху мають такий вигляд

$$\begin{aligned} M\ddot{X} &= F_x + F_S N_p, \\ M\ddot{Y} &= F_y, \\ M\ddot{Z} &= F_z + L N_p, \end{aligned} \quad (4.4)$$

де X, Y, Z – координати центру мас верхньої пластини, N_p – кількість атомів стінки, $M = N_p m_C$ – маса пластини, $m_C = 0.67$ – маса атома вуглецю, F_x, F_y, F_z – компоненти результуючої сили, що діє на поверхню з боку води. Останні дорівнюють сумі похідних (із від'ємним знаком) за відповідною координатою від потенціалу (4.3) для всіх молекул. За відсутності зовнішніх горизонтальних сил повинен виконуватися закон збереження імпульсу вздовж осей x та y , і центр мас пластин не повинен рухатися в цих напрямках. У цій роботі дрейф центру мас (унаслідок чисельних округлень і, можливо, через ефекти, обумовлені способом підтримання сталої температури) упродовж періоду обчислень мав величину порядку одного значення сталої решітки алмазу. Рівняння руху для нижньої стінки аналогічні (4.4). Різниця полягає у відсутності компоненти, відповідальної за зсув, у правій частині першого рівняння у (4.4).

Рівняння поступального руху (без компоненти, відповідальної за підтримання сталої температури) для центру мас i -ї молекули води має вигляд

$$\ddot{\mathbf{r}}_i = \sum_j \mathbf{F}_{ij} + \sum_k \mathbf{f}_{ik}, \quad (4.5)$$

де $\sum_j \mathbf{F}_{ij}$ – сила, що діє з боку всіх атомів вуглецю, що знаходяться від i -ї молекули на відстані, меншій r_c , і визначається аналогічно як і для поверхонь; $\sum_k \mathbf{f}_{ik}$ – сила, що діє на i -ту молекулу з боку інших молекул води, які знаходяться від даної молекули на відстані, меншій r_c , і визначається за формулою (4.2).

У моделі, що розглядається, також враховується обертальний рух молекул води. Для опису обертання застосовуються гамільтонові кватерніони [17]. Одна з очевидних переваг кватерніонів – відсутність тригонометричних функцій під час побудови матриці повороту. Компоненти кутової швидкості $\omega'_x, \omega'_y, \omega'_z$ пов'язані з похідними за часом від компонент q_1, q_2, q_3, q_4 кватерніону співвідношенням

$$\begin{pmatrix} \omega'_x \\ \omega'_y \\ \omega'_z \\ 0 \end{pmatrix} = 2W \begin{pmatrix} \dot{q}_1 \\ \dot{q}_2 \\ \dot{q}_3 \\ \dot{q}_4 \end{pmatrix}, \quad (4.6)$$

де

$$W = \begin{pmatrix} q_4 & q_3 & -q_2 & -q_1 \\ -q_3 & q_4 & q_1 & -q_2 \\ q_2 & -q_1 & q_4 & -q_3 \\ q_1 & q_2 & q_3 & q_4 \end{pmatrix}. \quad (4.7)$$

Рівняння Ейлера, що описують обертання твердого тіла, мають вигляд

$$I_x \dot{\omega}'_x = n_x + (I_y - I_z) \omega'_y \omega'_z \quad (4.8)$$

й аналогічно для інших компонент. У (4.8) \mathbf{n} – момент сил, що діють на тіло, I_x, I_y, I_z – головні моменти інерції молекули, $I_y = m_O z_O^2 + 2m_H z_H^2 = 0.0034$, $I_z = 2m_H y_H^2 = 0.0064$, $I_x = I_y + I_z$, маси m_O і m_H асоціюються із сайтами О і Н, $m_O = 2m_H$. Рівняння руху через кватерніони має вигляд

$$\begin{pmatrix} \ddot{q}_1 \\ \ddot{q}_2 \\ \ddot{q}_3 \\ \ddot{q}_4 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} W^T \begin{pmatrix} \dot{\omega}'_x \\ \dot{\omega}'_y \\ \dot{\omega}'_z \\ -2 \sum \dot{q}_m^2 \end{pmatrix}. \quad (4.9)$$

Можна виключити компоненти ω'_i з правої частини (4.9), використовуючи рівняння Ейлера (4.8). Після заміни компонент ω'_i лінійними комбінаціями величин \dot{q}_i із (4.6) одержуємо набір рівнянь руху, виражених повністю через кватерніони та їх похідні. Рівняння руху як для координат центрів мас пластин і молекул, так і для кватерніонів інтегрувалися із застосуванням алгоритму предиктор-коректор четвертого порядку.

4.2.4 Контроль температури

Звичайна МД відрізняється від більшості експериментальних досліджень тим, що у моделюванні фіксованими є енергія E і об'єм V , а не температура T і тиск P . У термінах статистичної механіки МД дає середні за мікроканонічним ансамблем NVE (N — кількість молекул), у той час як експерименти із сталою температурою відповідають канонічному ансамблю NVT .

Для проведення моделювань, наближених до експериментів, необхідно використовувати канонічний ансамбль, а, отже, підтримувати сталою температуру. Оскільки зовнішніми силами над системою виконується робота, то підтримання сталої температури означає вибір способу відведення надлишку тепла або сполучення системи з термостатом. У реальних тілах відтік тепла відбувається за рахунок багатьох механізмів, наприклад, збудження фононів або генерації пар електрон-дірка, енергія яких потім перетворюється на тепло [14]. У моделюваннях можна як явно вводити способи відведення тепла, так цього й не робити. Наприклад, для досліджуваної в цій роботі системи електронну теплопровідність можна не брати до уваги внаслідок чудових діелектричних властивостей алмазу, а для металів внеском електронної теплопровідності нехтувати не можна.

Найбільш поширеним способом контролю температури під час моделювання трибологічних явищ є застосування термостата Ланжевена [14]. У цьому розділі використовуються нерівноважні рівняння руху, або, як ще кажуть, накладаються механічні обмеження (або граничні умови) [17]. Існує декілька очевидних переваг цього підходу:

1) він не ґрунтується на апроксимаційних вихідних положеннях, наприклад, таких, як частота Дебая, що актуальна в спрощеному термостаті Ланжевена. Тому втрати та приріст тепла визначаються лише неявними властивостями системи;

2) оскільки не вимагається випадкових сил, цей метод значно прискорює обчислення;

3) рівняння руху (на відміну від термостата Ланжевена) є оборотними за часом;

4) диференціюючи енергію за часом, можна безпосередньо обчислити втрати (або приріст) тепла завдяки термостату.

Однак прив'язування тертя до глобальних властивостей системи зазвичай є повільним, щоб зробити випадковими нефізичні вібраційні збурення. Останні могли бути причиною згадуваного вище дрейфу центру мас поверхонь. Відзначимо, що внаслідок абсолютної жорсткості поверхонь модифікувалися лише рівняння руху молекул води.

Опишемо більш докладно метод, що розглядається. Накладання сталої температури зводиться до введення неголономного зв'язку в рівняння руху для фіксування кінетичної енергії. Насправді це відіграє роль математичного термостата. Доведення впливає не з гамільтонового варіаційного принципу, а з іншого формулювання механіки, відомого як гаусівський принцип найменшого обмеження. Можна показати, що рівноважні властивості такої ізотермічної системи будуть такими самими, як і канонічного ансамблю. Гранична умова ґрунтується на поступальній та обертальній кінетичній енергіях. Для кожної молекули в поступальні рівняння руху (4.5) вводиться доданок, що містить множник Лагранжа, а також у кожне з рівнянь Ейлера (4.8) додається член загального виду $\alpha I_x \omega'_x$. Оскільки повна кінетична енергія дорівнює

$$N_m E_k = \frac{1}{2} m \sum_i \dot{\mathbf{r}}_i^2 + \frac{1}{2} \sum_x I_x \sum_i \omega'_{ix}{}^2, \quad (4.10)$$

де \sum_x означає суму за всіма векторними компонентами, m – маса молекули води і N_m – кількість молекул води, то, покладаючи $\dot{E}_k = 0$, ми одержимо

$$\alpha = - \frac{\sum_i \dot{\mathbf{r}}_i \mathbf{f}_i + \sum_i \omega'_i \mathbf{n}_i}{m \sum_i \dot{\mathbf{r}}_i^2 + \sum_x I_x \sum_i \omega'_{ix}{}^2}, \quad (4.11)$$

де \mathbf{f}_i і \mathbf{n}_i – повні сила й момент сил, що діють на i -ту молекулу. Для проведених у цій роботі обчислень дрейф температури становив порядку кількох відсотків від значення температури системи.

4.2.5 Особливості вимірювань

У процесі моделювання здійснено дві групи вимірювань. Одні були актуальними за відсутності зсувної сили F_S , і в них вимірювалися коефіцієнт дифузії та зсувна в'язкість. Для інших зсувні сили були ненульовими, вимірювалася кінетична сила тертя, що діє на верхню поверхню. Вона подана першим доданком у першому рівнянні (4.4), що дорівнює загальній силі, яка діє з боку води на поверхню.

Коефіцієнт дифузії розраховано двома способами. Перший – із використанням формули Ейнштейна, яка має вигляд [17]

$$D = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{6N_m t} \left\langle \sum_{j=1}^{N_m} [\mathbf{r}_j(t) - \mathbf{r}_j(0)]^2 \right\rangle, \quad (4.12)$$

де t – час вимірювання. У (4.12) кутові дужки означають усереднення за достатньо великою кількістю незалежних зразків системи.

Другий спосіб – із застосуванням альтернативного виразу Гріна – Кубо для D , що ґрунтується на інтегрованій автокореляційній функції швидкості $\varphi(t)$ [17]

$$D = \frac{1}{3N_m} \int_0^\infty \varphi(t) dt, \quad (4.13)$$

$$\varphi(t) = \left\langle \sum_{j=1}^{N_m} \mathbf{v}_j(t) \cdot \mathbf{v}_j(0) \right\rangle, \quad (4.14)$$

де \mathbf{v}_j – швидкість j -ї молекули. Можна показати, що два вирази (4.12) і (4.13) дають абсолютно еквівалентні результати.

Як зазначено, на початку кожного моделювання молекули води розміщуються у вершинах кубічної решітки. Водночас молекулярна орієнтація набуває випадкових значень, кутова й лінійна швидкості кожної молекули мають фіксоване значення, залежне від температури, і випадково вибраний напрямок. Кутові координати та швидкості переводяться у кватерніонну форму, а лінійні та кутові прискорення, що використовуються під час інтегрування рівнянь руху, покладаються рівними нулю. Під час моделювання впродовж перших 2 000 часових кроків відбувалося досягнення системою рівноважного стану, після чого або одразу було виміряно рівноважні властивості, або прикладено зсувну силу і виміряно силу тертя. Максимальна тривалість моделювань становила 55 000 часових кроків або 144.4 пс.

4.3 Результати та обговорення

4.3.1 Плівка води між гладенькими поверхнями

На рисунку 4.5 подано розраховані часові залежності автокореляційних функцій швидкостей молекул води для різних значень навантаження. Видно, що зі зростанням навантаження амплітуда та кількість осциляцій зростає. Це вказує на те, що за високих навантажень швидкості молекул стають більш корельованими.

Поступове спадання коефіцієнта дифузії зі зростанням зовнішнього навантаження на рисунках 4.6 і 4.7 вказує на перехід плівки води до твердоподібного стану. Особливістю останнього, як зазначено, є впорядкування молекул плівки, що може бути як вертикальним, тобто у вигляді шарів, так і площинним. Аналітично перше виявляється в набутті просторовою залежністю густини плівки осцилюючого вигляду, а друге – в особливій формі структурного фактора рідини. У цій роботі розрахунок зазначених величин не проведено, але утворення шарів можна було спостерігати візуально. На рисунку 4.8 наведено типове вертикальне впорядкування молекул води для двох значень навантаження.

Для плівки товщиною один молекулярний діаметр горизонталь-

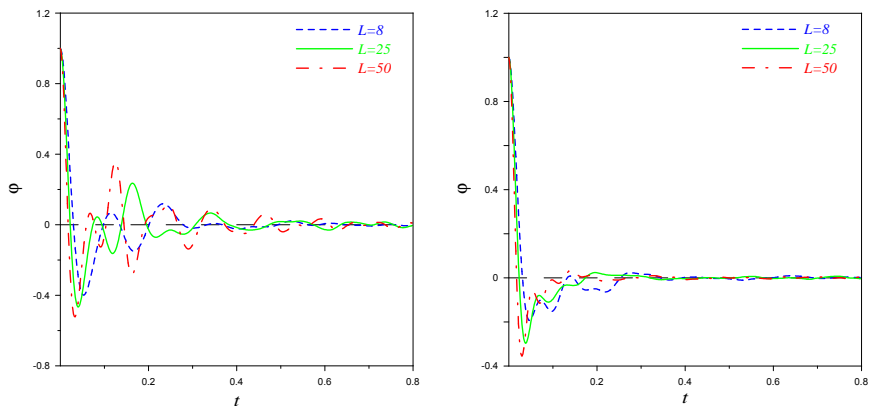


Рисунок 4.5 — Часові залежності автокореляційних функцій швидкості (4.14) для плівок товщиною один (ліворуч) і два (праворуч) молекулярні діаметри між гладенькими пластинами за різних значень навантаження

не впорядкування не спостерігалось за всіх значень навантаження та зсувної сили. Однак для плівки товщиною два молекулярні діаметри

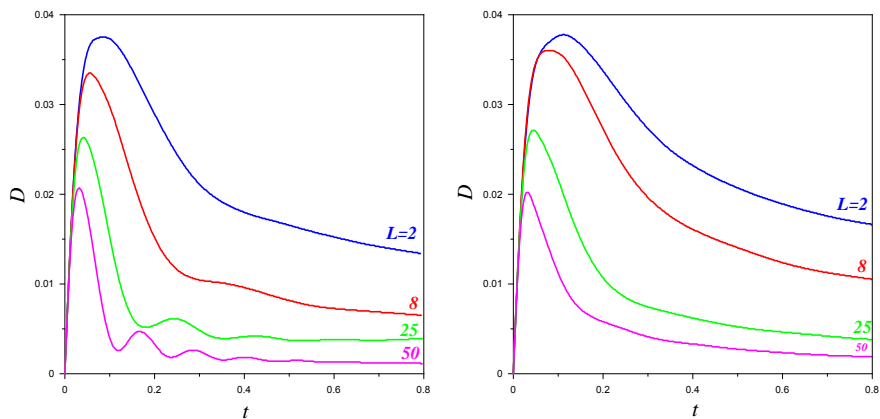


Рисунок 4.6 — Часові залежності коефіцієнту дифузії, розраховані за формулою (4.12) Ейнштейна для плівки води з одного (ліворуч) і двох (праворуч) шарів молекул між гладенькими алмазними стінками для різних значень навантаження

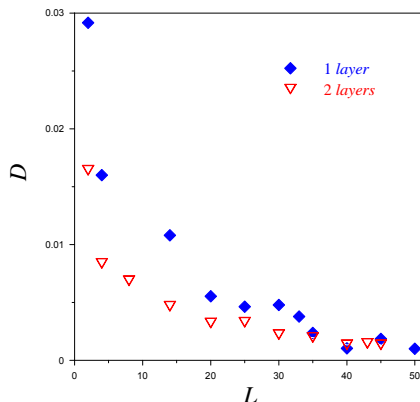


Рисунок 4.7 — Залежності коефіцієнта дифузії від навантаження для плівки з одного та двох шарів молекул між гладенькими алмазними пластинами, розраховані із використанням відповідних автокореляційних функцій і формули Гріна – Кубо (4.13)

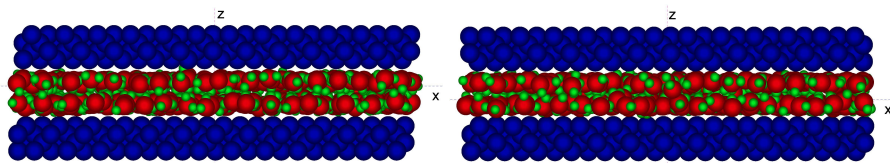


Рисунок 4.8 — Організація молекул у шари для значень навантаження 8 (ліворуч) і 14 (праворуч) і нульової сили зсуву

площинне впорядкування актуальне, особливо за високих навантажень. На рисунку 4.9 подано невпорядкований стан молекул і декілька варіантів упорядкованих конфігурацій у кінці відповідних моделювань для різних значень навантаження та зсувної сили. Наявність зсуву зазвичай приводила до появи впорядкованої структури за більш низьких навантажень, ніж за його відсутності. Також зсув сприяв більш швидкому досягненню впорядкованого стану. Отже, для двох шарів спостерігається впорядкування молекул зсувом, яке що актуальне в експериментах [13]. Необхідно зазначити, що для низьких швидкостей зсуву й середніх навантажень молекулярні конфігурації неоднозначно визначаються значеннями цих сил. Наприклад, структури на рисунку 4.9 для

$F_S = 0.5$, $L = 25$ і $F_S = 0$, $L = 30$ не є абсолютно відтворюваними, і в інших серіях моделювань для цих самих значень параметрів одержуються неупорядковані конфігурації. Навпаки, за високих тисків завжди спостерігається впорядкований стан, як показано на нижній правій частині рисунку 4.9.

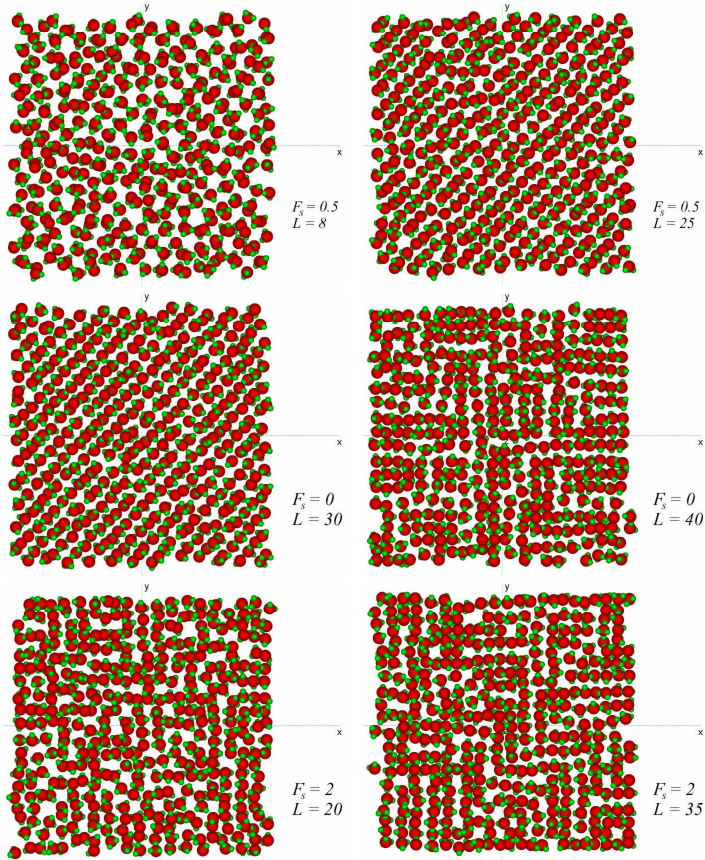


Рисунок 4.9 — Конфігурації молекул у площині xy для різних навантажень і зсувних сил у кінці відповідних моделювань для плівки товщиною два молекулярні діаметри, стиснутої між атомарно-гладенькими алмазними пластинами

Відсутність упорядкування в одношаровій плівці можна пояснити особливостями моделі. Поведінка такої плівки повинна бути схо-

жою на поведінку простої леннард-джонсівської рідини, стиснутої між гладенькими поверхнями. Це впливає з фактів, що шорсткість поверхонь є малою, і в таких тонких плівках води у напрямі осі z молекули можуть взаємодіяти лише з атомами поверхонь. Останні зі свого боку взаємодіють лише з О сайтами молекул і лише через леннард-джонсівський потенціал. Отже, леннард-джонсівський внесок переважає у взаємодіях молекул води в одношаровій плівці. Для більш товстої плівки молекули в сусідніх шарах можуть взаємодіяти одна з одною, і кулонівська взаємодія може викликати виникнення впорядкованих структур. Необхідно зазначити, що впорядкування, яке спостерігається, не є істинним термодинамічним фазовим перетворенням, і рідиноподібний та твердоподібний стани не є тотожними рідкій і твердій об'ємним фазам. Більш коректно їх називати статичним і динамічним епітаксійними станами, оскільки вони виникають лише в межових плівках, властивості яких визначаються стисканням й епітаксійними взаємодіями між плівкою й атомами поверхонь [13].

Часові залежності сили тертя на рисунку 4.10 для одного шару молекул мають нерегулярну форму зі значними флуктуаціями. Для плівки товщиною два молекулярні діаметри на цьому самому рисунку за високих зсувних сил спостерігаються періодичні піки, які актуальні в експериментах, коли плівка рідини знаходиться у твердоподібному стані, і які відповідають переривчастому руху [13]. Однак часовий масштаб у моделюваннях (порядку десятків – сотень пікосекунд) не дозволяє однозначно проводити порівняння з експериментом, у якому час набуває макроскопічних значень порядку секунд.

На залежностях середнього за часом значення сили тертя від навантаження, поданих на рисунку 4.11, можна виділити дві основні ділянки: лінійну для малих L , що відповідає першому закону Амонтона, і горизонтальну для більш високих навантажень. Дані залежності можна пояснити за допомогою моделі «булижної мостової» [13], згідно з якою сила тертя для межового режиму визначається двома складовими. Перша виникає через наявність внутрішніх адгезійних сил між молекулами плівки й поверхнями, а друга обумовлена дією зовнішнього навантаження. Сила тертя визначається співвідношенням

$$F = S_c A + CL, \quad (4.15)$$

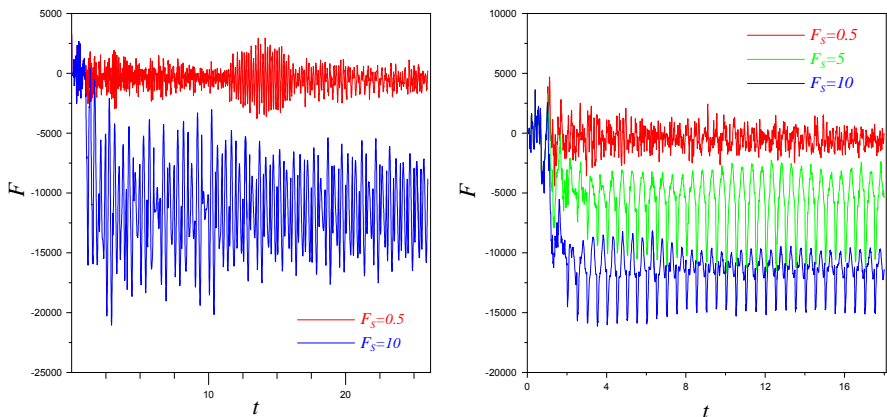


Рисунок 4.10 — Часові залежності сили тертя для плівок товщиною один (ліворуч) і два (праворуч) молекулярні діаметри, стиснутих між гладенькими пластинами, і різних зсувних сил. Значення навантаження дорівнює 50. Від’ємний тренд є наслідком факту, що сила тертя діє в напрямі, протилежному напрямку ковзання

де сталі S_c і C — критичне зсувне напруження та коефіцієнт тертя, A — площа контакту і L — зовнішнє навантаження. Величина S_c залежить від адгезійних взаємодій плівки з поверхнями. Коефіцієнт тертя C пов’язаний із атомною гранулярністю (шорсткістю) поверхонь і розмірами, формою та конфігурацією молекул рідини між поверхнями. Загалом, чим більш гладенькими є поверхні, тим меншим повинно бути значення C . Потрібно зазначити, що макроскопічний коефіцієнт тертя μ для пошкоджених поверхонь має різне походження й величину відносно C .

Графіки на рисунку 4.11 можна пояснити так: оскільки поверхні в моделі є абсолютно гладенькими, і молекули мають просту форму, то можна вважати, що в силу тертя дають внесок лише адгезійні взаємодії, тобто $C \approx 0$, і сила тертя визначається першим доданком в (4.15). Спочатку з зростанням навантаження різко збільшується кількість і величина адгезійних зв’язків молекул води із поверхнями, тому на рисунку 4.11 спостерігається зростання сили тертя зі збільшенням L . Після досягнення деякого значення навантаження для даної

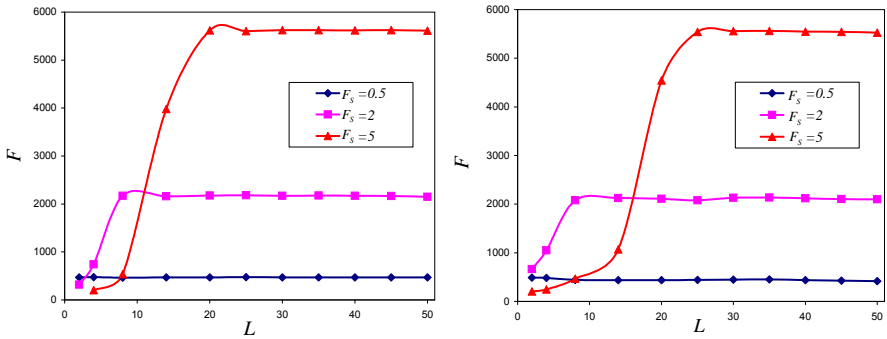


Рисунок 4.11 — Залежності середнього за часом значення сили тертя від навантаження для плівок товщиною один (ліворуч) і два (праворуч) молекулярні діаметри між гладенькими стінками за різних значень зсувної сили

величини сили зсуву встановлюються деякі стаціонарні значення кількості адгезійних зв'язків і величини сил адгезії. Оскільки в модель не входять деформації поверхонь, то в разі збільшення L площа контакту не змінюється, перший доданок у (4.15) і, відповідно, сила тертя залишаються сталими зі збільшенням L . Можна також говорити про аналогічну зміну зсувних напружень $S = F/A$, які часто використовуються в експериментах. Зазначимо, що експерименти з простими сферичними молекулами дають схожі залежності зсувних напружень S від навантаження L . Однак для реальних поверхонь сталі значення S для високих L обумовлене пропорційними змінами F і A внаслідок деформації поверхонь, а в моделюваннях сталість зсувних напружень зумовлена сталістю цих величин.

Отже, модель дає результати, які здебільшого відповідають поведінці плівок рідин із молекулами сферичної форми. Однак молекули води не можна віднести до простих сферичних, і, до того ж, для води між атомарно-шорсткими поверхнями в експериментах спостерігається виконання закону Амонтона для широкого діапазону навантажень. Ці розбіжності можна пояснити простотою досліджуваної моделі. У ній не враховано пружність поверхонь, їх шорсткість, взаємодія однієї з одною (що відбиває наявність сил гідратації у водних розчинах). Необхідним є врахування взаємодії поверхонь із молеку-

лами води, оскільки моделювання гідрофільних поверхонь леннард-джонсівським потенціалом є спрощеним. Ці фактори можуть мати значний вплив на поведінку системи й привести до переваги другого доданка в (4.15). У наступному пункті наведено результати для моделі, у якій уведено атомарний періодичний рельєф поверхонь.

4.3.2 Плівка води між поверхнями з періодичним атомарним рельєфом

На рисунках 4.12–4.14 подано результати вимірювань автокореляційної функції швидкості й коефіцієнта дифузії для плівок води, стиснутих між абсолютно жорсткими алмазними стінками з періодичним рельєфом атомарного масштабу. Одержані залежності мають вигляд, аналогічний залежностям для системи з гладенькими пластинами, і вказують на наявність твердоподібного стану ультратонкої плівки води.

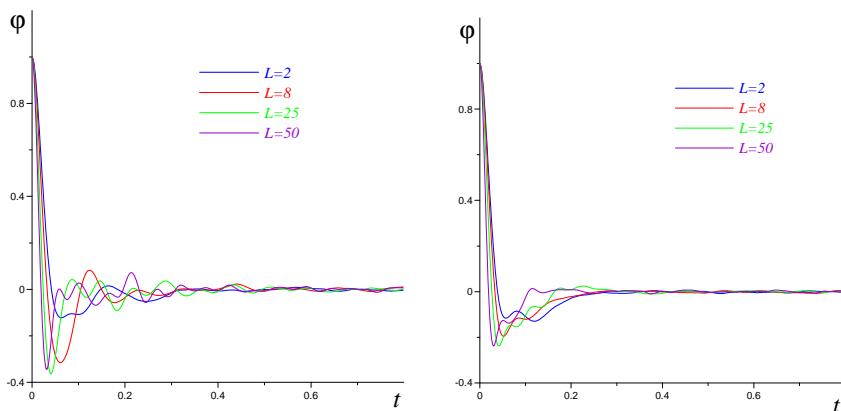


Рисунок 4.12 — Часові залежності автокореляційних функцій швидкості (4.14) для плівок товщиною один (ліворуч) і два (праворуч) молекулярні діаметри, стиснутих між алмазними стінками з періодичним рельєфом атомарного масштабу за різних значень навантаження

Основною відмінністю поведінки межової плівки води між атомарно-жорсткими поверхнями є вигляд конфігурацій молекул. Так,

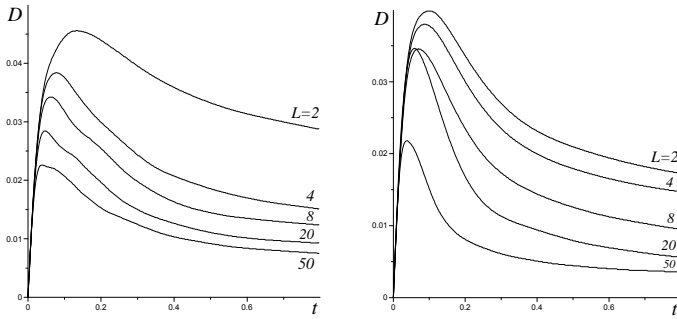


Рисунок 4.13 — Часові залежності коефіцієнта дифузії, розраховані за формулою (4.12) Ейнштейна для плівки води з одного (ліворуч) і двох (праворуч) шарів молекул, стиснутих між алмазними стінками з періодичним рельєфом атомарного масштабу, для різних значень навантаження

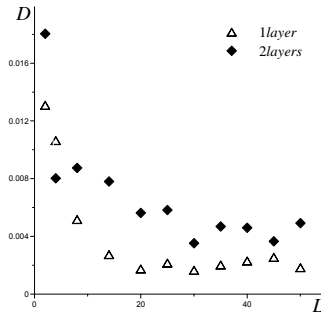


Рисунок 4.14 — Залежності коефіцієнта дифузії від навантаження для плівки з одного та двох шарів молекул, стиснутих між алмазними стінками з періодичним рельєфом атомарного масштабу, розраховані з використанням відповідних автокореляційних функцій і формули Гріна – Кубо (4.13)

шари не утворювалися, а були актуальними структури, наведені на рисунку 4.15. Також, на відміну від гладеньких поверхонь, за високих навантажень спостерігалось горизонтальне впорядкування для одношарової плівки води (як за відсутності, так і за наявності зсуву), що також було актуальним для леннард-джонсівських рідин між шорсткими поверхнями в комп'ютерних експериментах. На рисунку 4.16 подано впорядковані конфігурації молекул у плівці товщиною один молекулярний

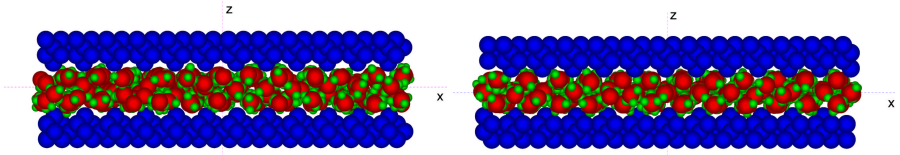


Рисунок 4.15 — Типові конфігурації молекул у вертикальному перерізі в плівці води між шорсткими поверхнями для навантажень 8 (ліворуч) і 30 (праворуч) і нульової сили зсуву

діаметр.

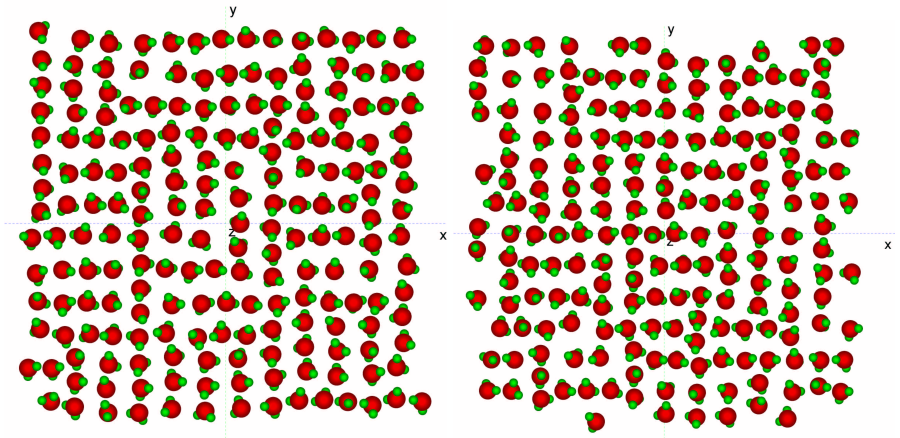


Рисунок 4.16 — Конфігурації молекул у площині xy в одношаровій плівці води між шорсткими поверхнями за відсутності зсуву для навантажень 20 (ліворуч) і 40 (праворуч)

Горизонтальне впорядкування для плівки води товщиною два молекулярні діаметри між шорсткими поверхнями відсутнє, а, отже, не спостерігається впорядкування молекул зсувом. На рисунку 4.17 подано типові конфігурації молекул у горизонтальній площині в плівці товщиною два молекулярні діаметри для різних значень навантажень і зсуву.

Часові залежності сили тертя для шорстких поверхонь аналогічні залежностям для гладеньких стінок і тому не наведені. На рисун-

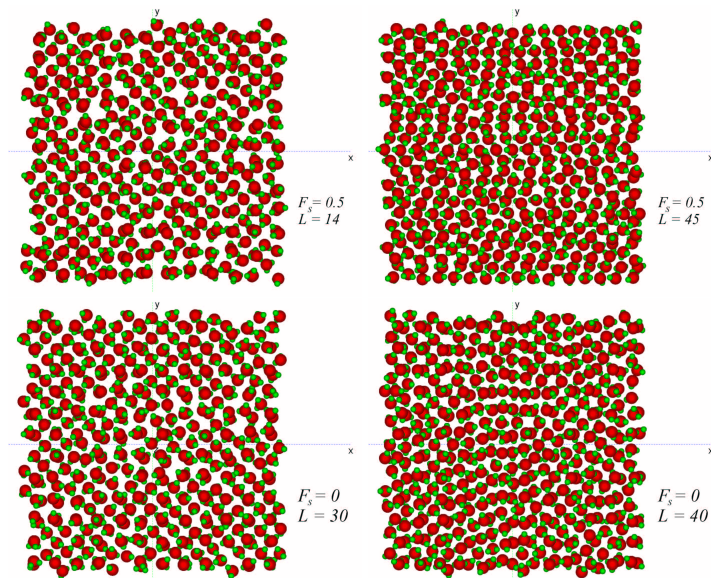


Рисунок 4.17 — Конфігурації молекул у площині xy для різних навантажень і зсувних сил у кінці відповідних моделювань для півки товщиною два молекулярні діаметри, стиснутої між атомарно-шорсткими алмазними пластинами

ку 4.18 подано залежності середнього за часом значення сили тертя від навантаження. Порівняння з рисунком 4.11 показує, що періодичний атомарний рельєф не приводить до якісних змін залежностей $F(L)$.

Отже, як впливає з проведених комп'ютерних експериментів, характер упорядкування молекул води здебільшого визначається рельєфом алмазних стінок. Для шорстких пластин шари молекул не формуються, площинне впорядкування відсутнє. Періодичний рельєф поверхонь якісно не змінює часових залежностей сили тертя, а також залежностей середнього за часом значення сили тертя від навантаження.

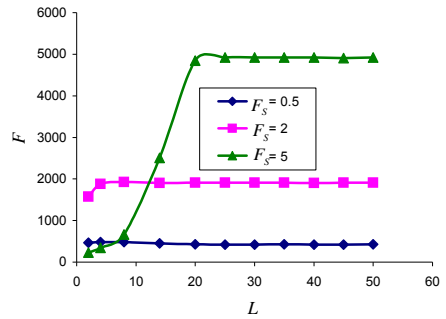
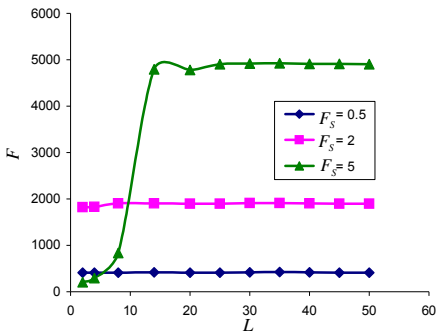


Рисунок 4.18 — Залежності середнього за часом значення сили тертя від навантаження для плівок товщиною один (ліворуч) і два (праворуч) молекулярні діаметри між шорсткими стінками за різних значень зсувної сили

РОЗДІЛ 5

ТЕРМОДИНАМІЧНЕ ПРЕДСТАВЛЕННЯ ФРАГМЕНТАЦІЇ МЕТАЛІВ

5.1 Основні поняття та співвідношення

Одним із перспективних способів одержання дрібнозернистих матеріалів із розміром зерна менше 100 нм є інтенсивна пластична деформація [5, 20–24]. У разі великих величин деформацій у зразках (звичай металевих) формується фрагментована структура, що зберігає залишкові ознаки аморфного стану.

Існує декілька методів ІПД: гвинтова екструзія, кручення під квазігідростатичним тиском, рівноканальне кутове пресування, усебічне кування тощо. В усіх цих способах фрагментований зразок піддається багатократній ІПД. Використання методів ІПД дозволяє одержати масивні зразки з практично безпористою структурою матеріалу, що не вдається іншими способами одержання наноструктурованих об'ємних матеріалів.

У процесі ІПД в матеріалі утворюється безліч різних дефектних структур, що еволюціонують у ході деформації. Основна особливість матеріалів, сформованих при ІПД – наявність нерівноважних меж зерен, які служать джерелом великих пружних напружень [21]. Потрібно зазначити, що межі зерен містять велику кількість дислокацій. Причому густина дислокацій усередині зерен значно менша, ніж на їх межах. Дислокації створюють далекодіючі поля напружень, і є причиною надмірної енергії меж зерен. Релаксації напружень і встановлення рівноважного стану меж зерен можна добитися за допомогою відпалу деформованого матеріалу.

Процес ІПД складний і багаторівневий. Через це теоретичний опис ІПД є надзвичайно складним завданням, і необхідно вітати всі спроби в цьому напрямі. Проблема полягає в розумному виборі основних параметрів завдання та в обґрунтованому нехтуванні практично нескінченною сукупністю інших параметрів. Фактично, у процесі ІПД між собою взаємодіють безліч дефектних підсистем, проте головним вирішальним дефектом розумно покласти найбільший із них, якою є

межа зерна. По суті, процес фрагментації зерен зводиться до продукування нових меж і як наслідок до подрібнення зерна. Це не є прямим перетворенням роботи зовнішніх сил на енергію меж зерен, а проходить як через проміжні етапи через формування ієрархії дефектних підструктур, і вплив цього ланцюжка можна врахувати коефіцієнтами теорії.

У зв'язку з тим, що процеси, які відбуваються при ІПД, досить складні й почали досліджуватися недавно, на сьогодні не існує змістовної теорії, яка дозволяє описати їх повністю. Дослідженням ІПД займаються здебільшого експериментатори, що також свідчить про відсутність достатнього теоретичного рівня опису. Теорія, яка ґрунтується на узагальненні експериментальних даних, не може пояснити причину формування граничного стану, коли в разі подальших циклів ІПД зерна перестають подрібнюватися [22]. Щоб описати цей процес штучно вводиться деякий притягувальний атрактор. Не одержала пояснення наявність у структурі зерен двох розмірів, що різко відрізняються [21]. Крім того, у теорії відсутній температурний аспект завдання, через що «за бортом» опинилися такі важливі варіанти проблеми як низькотемпературне рівноканальне кутове пресування, низькотемпературна квазігідроекструзія тощо. У зв'язку із цим розроблена термодинамічна теорія [23, 24], що дозволяє якісно описати вказані ефекти, з огляду на багатовимірний термодинамічний потенціал. Мета розділу – використовуючи багатовимірний термодинамічний потенціал, побудувати фазову діаграму, що прогнозує різні режими фрагментації тобто дроблення зерен.

Закон збереження енергії повинен виконуватися як при зовнішніх взаємодіях виділеного об'єму, так і при внутрішніх перетвореннях різних видів енергії в результаті проходження необоротних внутрішніх процесів. Перший закон термодинаміки регулює саме зовнішні взаємодії виділеного об'єму у формі роботи й теплового обміну. Перетворення енергії на внутрішніх ступенях свободи задається розподіленням необоротної частини зовнішньої роботи між різними каналами дисипації. Перехід частини необоротної роботи в теплоту це лише один із каналів дисипації. Другим каналом дисипації може бути формування дефектної структури зокрема за наявності лише одного типу дефектів.

Основний закон термодинаміки для простих тіл має вигляд [2]

$$du = \delta A + \delta Q = \sigma_{ij}d\varepsilon_{ij} + Tds', \quad (5.1)$$

де u – густина внутрішньої енергії; A – робота зовнішніх сил; Q – теплота; $\sigma_{ij}, \varepsilon_{ij}$ – тензори напружень і деформацій; T, s' – температура та ентропія, пов'язана із зовнішніми джерелами тепла.

Ліва частина рівності представляє закон збереження енергії – внутрішня енергія системи змінюється на величину роботи, здійсненої зовнішніми тілами, й тепла, що ввійшло до системи через її зовнішні межі. Ця частина рівності виконується для рівноважних (оборотних) і нерівноважних (необоротних) процесів. Права рівність актуальна лише для рівноважних процесів, оскільки для її запису використовується специфічно визначена величина – ентропія. У зв'язку з тим, що частина роботи зовнішніх сил витрачається на внутрішнє розігрівання, то її величина складається з оборотної та необоротної складових [23, 24]

$$du = \sigma_{ij}d\varepsilon_{ij}^e + \sigma_{ij}d\varepsilon_{ij}^n + Tds'. \quad (5.2)$$

Необоротна компонента роботи зовнішніх напружень, що представляється другим членом, іде на утворення теплових фонових, мікротріщин, меж зерен тощо, що задають канали дисипації енергії. За наявності лише теплового каналу дисипації необоротна частина роботи перетворюється на тепло, і можна покласти [23, 24]

$$\sigma_{ij}d\varepsilon_{ij}^n \equiv Tds'', \quad (5.3)$$

де s'' – ентропія, зумовлена внутрішніми процесами. Методом об'єднання ентропійних внесків від зовнішніх і внутрішніх джерел виходить термодинамічна тотожність, що представляє перший і другий закони термодинаміки для простих тіл [23, 24]:

$$du = \sigma_{ij}d\varepsilon_{ij}^e + Tds. \quad (5.4)$$

Звичайна термодинамічна нерівність впливає з виразу (5.4), якщо до нього додати необоротну складову роботи зовнішніх сил, уже враховану в тепловому доданку

$$du \leq \sigma_{ij}d\varepsilon_{ij} + Tds. \quad (5.5)$$

Отже, нерівність (5.5) узагальнює термодинамічну тотожність (5.4) [23, 24].

Якщо необоротна робота витрачається як на розігрівання, так і на створення дефектів, зокрема додаткових меж зерен при ІПД, то (5.3) можна записати у вигляді [23, 24]

$$\sigma_{ij} d\varepsilon_{ij}^n \equiv T ds'' + \varphi dh, \quad (5.6)$$

де φ і h — зв'язана пара термодинамічних змінних, що характеризує дефектність матеріалу — середні поверхнева густина надлишкової енергії та об'ємна густина сумарної поверхні меж зерен. Тоді термодинамічна тотожність має вигляд [23, 24]

$$du = \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij}^e + T ds + \varphi dh. \quad (5.7)$$

Змінна φ росте під час збільшення енергії кожного атома й «товщини» межі, тобто рівня її нерівноваги. Останній підвищується зі зростанням рівня фрагментації матеріалу. Тому між φ і розміром зерна в разі ІПД існує монотонна залежність. Малі значення φ відповідають крупнішим зернам, у границі монокристалу, великі значення цієї змінної відповідають більш дрібним зернам, а нескінченно великі φ — аморфному стану.

Для простоти мається на увазі наявність дефектів лише одного типу. Вважається, що основним дефектом є найбільший дефект структури — межа зерна, а решта дефектів може бути врахована значеннями параметрів теорії.

Усі величини, що входять до (5.7) можуть бути експериментально виміряні або обчислені. Перший доданок описує оборотну частину зовнішньої роботи (зміну пружної енергії), другий доданок — тепловий канал дисипації, останній доданок — канал дисипації, пов'язаний з утворенням дефектів. Енергія, уведена в систему за рахунок необоротної частини зовнішньої роботи, розподіляється між цими двома каналами, які з математичного та фізичного погляду є рівноправними.

У цілому процес ІПД можна представити так [23, 24]. Матеріал, що піддається обробці ІПД, має зернисту структуру з великим початковим середнім розміром зерна. Під час пропускання матеріалу через установку ІПД в області найбільш інтенсивної деформації виникають

процеси пластичної течії. Вони здебільшого здійснюються прослизанням по межах зерен, унаслідок чого відбувається релаксація механічних напружень. Водночас через неузгоджену деформацію різних зерен під час прослизання в матеріалі утворюються локальні напруження, що впливають на об'єми зерен. Ці напруження збільшуються зі зростанням швидкості деформації. За рахунок їх в об'ємі зерна реалізуються процеси генерації дислокацій, об'єднання їх у хаотичні скупчення, формування комірчастої структури обірваних меж, які, об'єднуючись, приводять до подрібнення зерен. Водночас нові внутрішні межі є елементами моделі описуваними співвідношенням (5.7). Інші мікроскопічні елементи системи (дислокації, скупчення дислокацій тощо) даним виразом у явному вигляді не описуються але чинять вплив на властивості матеріалу. Напруження, що діють у матеріалі представлені пружною частиною тензора деформацій. Його компоненти визначаються геометрією та типом будови установки ІПД, а величина задається швидкістю деформації.

Співвідношення (5.7) є еквівалентом першого закону термодинаміки після встановлення в системі стаціонарного стану. Цей стаціонарний стан не є строго рівноважним, оскільки супроводжується дисипативними процесами. Зазначимо, що його можна розглядати як один із видів рівноваги в системі, коли процеси, що проходять у взаємно зворотних напрямках збалансовані й «не змінюються» в часі. Водночас в системі може сформуватися специфічне розподілення типовий для цього стану.

У процесі дисипації частина енергії зв'язується полем теплових коливань Ts , частина ж — дефектами φh . Запишемо вираз для густини вільної енергії у вигляді

$$f = u - Ts - \varphi h. \quad (5.8)$$

Оскільки точний аналітичний вираз для вільної енергії невідомий, розглянемо спрощену модель, розклавши вільну енергію в ряд за

її аргументами до кубічних внесків [23, 24]

$$\begin{aligned}
 f(\varphi, T, \varepsilon_{ij}^e) = & f'_0 - h'_0\varphi + \frac{1}{2}a'\varphi^2 - \frac{1}{3}b\varphi^3 + \frac{1}{2}\lambda(\varepsilon_{ii}^e)^2 + \\
 & + \mu(\varepsilon_{ij}^e)^2 - g\varphi\varepsilon_{ii}^e - \frac{1}{2}\bar{\lambda}\varphi(\varepsilon_{ii}^e)^2 - \bar{\mu}\varphi(\varepsilon_{ij}^e)^2 - e\varphi^2\varepsilon_{ii}^e + \\
 & + \alpha'\varphi\Delta T + \alpha_g\varphi\Delta T\varepsilon_{ii}^e + \beta\varphi^2\Delta T - \gamma(\Delta T)^2, \quad (5.9)
 \end{aligned}$$

де $\Delta T = T - T_0$, T_0 – початкова температура до ПД для бездефектного стану. Сталі h'_0 , a' , b виражають залежність вільної енергії квазірівноважної підсистеми від густини енергії меж зерен за відсутності зовнішніх дій. Решта параметрів описує зовнішні механічні, температурні або змішані дії. Передостанній доданок уведено для опису взаємно погодженої поведінки φ та ΔT . Пружні напруження враховуються з точністю до квадратичних внесків через перших два інваріанти тензора деформацій $\varepsilon_{ii}^e \equiv \varepsilon_1^e + \varepsilon_2^e + \varepsilon_3^e$, $(\varepsilon_{ij}^e)^2 \equiv \varepsilon_{ij}^e\varepsilon_{ij}^e \equiv (\varepsilon_1^e)^2 + (\varepsilon_2^e)^2 + (\varepsilon_3^e)^2$, де $\varepsilon_1^e, \varepsilon_2^e, \varepsilon_3^e$ – головні значення тензора деформацій [16]. Тут за індексами, що повторюються, мається на увазі підсумовування. Вважається, що внаслідок швидкої релаксації в нерівноважній підсистемі напруження, за яких стають істотними кубічні внески за тензором деформацій ε_{ij}^e , не встигають розвинутися. Далі під час аналізу беруться від'ємні значення інваріанта ε_{ii}^e (сліду тензора деформації), оскільки описується процес стиснення об'єкта, що деформується, що й реалізується під час ПД.

Компоненти деформації ε_{ij}^e є керувальними параметрами й представляють зовнішню дію і їх можна вважати константами. Тоді після визначення сталих

$$\begin{aligned}
 f_0 = & f'_0 + \frac{1}{2}\lambda(\varepsilon_{ii}^e)^2 + \mu(\varepsilon_{ij}^e)^2, \\
 h_0 = & h'_0 + g\varepsilon_{ii}^e + \frac{1}{2}\bar{\lambda}(\varepsilon_{ii}^e)^2 + \bar{\mu}(\varepsilon_{ij}^e)^2, \\
 a = & a' - 2e\varepsilon_{ii}^e, \quad \alpha = \alpha' + \alpha_g\varepsilon_{ii}^e \quad (5.10)
 \end{aligned}$$

вільна енергія набуває більш простого вигляду

$$\begin{aligned}
 f(\varphi, T) = & f_0 - h_0\varphi + \frac{1}{2}a\varphi^2 - \frac{1}{3}b\varphi^3 + \\
 & + \alpha\varphi\Delta T + \beta\varphi^2\Delta T - \gamma(\Delta T)^2. \quad (5.11)
 \end{aligned}$$

5.2 Фазова діаграма

Запишемо тепер для тих компонент, що залишилися, рівняння руху

$$\tau_\varphi \dot{\varphi} = -\frac{\partial f}{\partial \varphi}, \quad \tau_T \dot{T} = -\frac{\partial f}{\partial T}, \quad (5.12)$$

де введено часи релаксації τ_φ , τ_T відповідних величин, що характеризують інерційні властивості системи. Вимірюючи для зручності час в одиницях τ_φ , одержимо двопараметричну систему рівнянь для параметрів стану:

$$\dot{\varphi} = h_0 - a\varphi + b\varphi^2 - \alpha\Delta T - 2\beta\varphi\Delta T, \quad (5.13)$$

$$\tau\dot{T} = -\alpha\varphi - \beta\varphi^2 + 2\gamma\Delta T, \quad (5.14)$$

де $\tau \equiv \tau_T/\tau_\varphi$.

Використовуємо адіабатичне наближення $\tau_\varphi \gg \tau_T$, за якого еволюція температури T прямує за змінами параметра φ . Водночас у рівнянні (5.14) можна покласти $\tau\dot{T} \approx 0$, та одержати залежність для температури

$$T = T_0 + \frac{\alpha}{2\gamma}\varphi + \frac{\beta}{2\gamma}\varphi^2. \quad (5.15)$$

Підставивши ΔT з (5.15) в (5.13), маємо рівняння типу Ландау – Халатнікова

$$\dot{\varphi} = -\frac{\partial V}{\partial \varphi}, \quad (5.16)$$

де похідна $-\partial V/\partial \varphi \equiv F(\varphi)$ задає термодинамічну силу F

$$F(\varphi) = h_0 - \left(a + \frac{\alpha^2}{2\gamma}\right)\varphi + \left(b - \frac{3\beta\alpha}{2\gamma}\right)\varphi^2 - \left(\frac{\beta^2}{\gamma}\right)\varphi^3, \quad (5.17)$$

що прагне привести параметр φ у притягувальний аттрактор, що відповідає стаціонарному значенню. Система водночас описується термодинамічним потенціалом

$$V(\varphi) \equiv -\int_0^\varphi F(\varphi')d\varphi', \quad (5.18)$$

що збігається з (5.11) під час використання підстановки (5.15).

Стационарні стани густини енергії меж зерен φ задаються умовою екстремуму потенціалу (5.18), оскільки при $\partial V/\partial\varphi = 0$, згідно з (5.16) $\dot{\varphi} = 0$. Водночас максимуми потенціалу відповідають нестійким станам, а його мінімуми – стійким. Умова стаціонарності $\partial V/\partial\varphi = 0$ приводить до виразу

$$2\beta^2\varphi^3 - (2b\gamma - 3\alpha\beta)\varphi^2 + (\alpha^2 + 2a\gamma)\varphi - 2h_0\gamma = 0. \quad (5.19)$$

Отже, положення екстремумів потенціалу залежать від параметрів завдання $a, b, \alpha, \beta, \gamma, h_0$ і не залежать від рівня відліку енергії f_0 . Ці екстремуми визначають режими фрагментації під час ІПД.

Розв'язок (5.19) показано на рисунку 5.1, згідно з яким у разі великих за абсолютним значенням інваріантів ε_{ii}^e існують три стаціонарні стани, два з яких відповідають мінімуму потенціалу $V(\varphi)$ (суцільна та штрихова крива), а один – його максимуму (штрихпунктирна крива). Перший мінімум може досягатися за нульового й ненульового значення густини енергії меж зерен φ_0 залежно від величини $(\varepsilon_{ij}^e)^2$. Ненульових значень він набуває лише в тому разі, коли $(\varepsilon_{ij}^e)^2$ більше деякої критичної величини. Це пов'язано з тим, що при ІПД процес фрагментації може проходити, коли пружні деформації ε_{ij}^e та пов'язані з ними напруження σ_{ij} перевищують межу текучості. Стационарні стани в процесі ІПД можуть бути досягнуті лише під час виконання цієї умови. Якщо вона не виконується, то система також може прагнути до стаціонарних станів, проте з іншою істотно нижчою швидкістю. Згідно з кривими 1–3, менше зі стійких стаціонарних значень φ_0 відповідає більшому розміру зерна (штрихові частини кривих), більше (суцільна) – меншому його розміру. Їх розділяє нестійкий стан (штрихпунктирна крива) при значенні густини енергії меж зерен φ^m , що відповідає максимуму потенціалу. Потрібно зазначити, що нульовий мінімум відповідає грубозернистому полікристалу – в границі монокристалу. У разі монокристала спочатку реалізується нульовий мінімум потенціалу, і лише коли він стає ненульовим процес фрагментації починає проходити.

Якщо зразок до ІПД вже має дрібнозернисту структуру (реалізується стан близький до ненульового мінімуму $V(\varphi)$), то, згідно з кри-

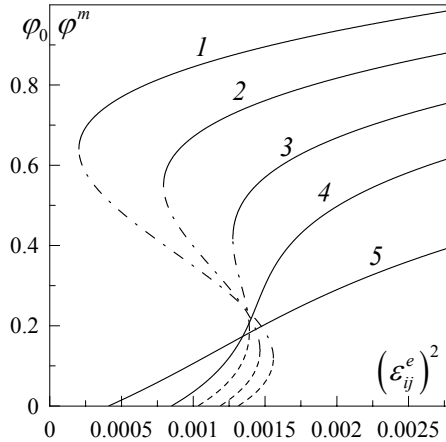


Рисунок 5.1 — Залежність стаціонарних значень густини енергії меж зерен φ_0, φ^m [Дж/м²] від інваріанта $(\varepsilon_{ij}^e)^2$ при параметрах $h'_0 = 0.005 \text{ м}^{-1}$, $\bar{\lambda} = 9.6 \text{ м}^{-1}$, $\bar{\mu} = 105 \text{ м}^{-1}$, $\alpha' = 1.7 \text{ К}^{-1}\cdot\text{м}^{-1}$, $\alpha_g = 31 \text{ К}^{-1}\cdot\text{м}^{-1}$, $e = 1.55 \text{ Дж}^{-1}\cdot\text{м}$, $g = 3.1 \text{ м}^{-1}$, $a' = 0.3 \text{ Дж}^{-1}\cdot\text{м}$, $\gamma = 2.4 \text{ м}^{-3}\cdot\text{К}^{-2}\cdot\text{Дж}$, $\beta = 2.2 \text{ Дж}^{-1}\cdot\text{К}^{-1}\cdot\text{м}$, $b = 2.5 \text{ Дж}^{-2}\cdot\text{м}^3$. Криві 1–5 відповідають значенням $\varepsilon_{ii}^e = -0.05, -0.045, -0.039, -0.032, -0.016$

вою 1, еволюція структури матеріалу до стаціонарного стану є можливою навіть за малих значень $(\varepsilon_{ij}^e)^2$.

Для всіх наведених на рисунку кривих при $(\varepsilon_{ij}^e)^2 = 0$ зразок є монокристалом (або грубозернистим полікристалом). Якщо збільшувати деформацію $(\varepsilon_{ij}^e)^2$, то якийсь час реалізується монокристал ($\varphi_0 = 0$). Згідно з кривими 1 і 2, у разі збільшення $(\varepsilon_{ij}^e)^2$ до значення, коли співіснують нульовий і ненульовий мінімуми потенціалу процес фрагментації не може відбутися, оскільки ці мінімуми розділені потенціальним бар'єром (штрихпунктирною лінією). Потім нульовий мінімум стає ненульовим (штрихова лінія), і відбувається безперервний процес фрагментації. У разі подальшого збільшення деформації перший мінімум зникає разом із потенціальним бар'єром, і система за механізмом фазового переходу першого роду різко переходить у стан, описаний другим мінімумом потенціалу (суцільною лінією). Водночас відбувається

різке зменшення розмірів зерен. Відомо, що під час фазового переходу першого роду через наявність одночасно двох мінімумів термодинамічного потенціалу система може знаходитися у двох метастабільних фазах [2]. Тут це означає співіснування стаціонарних структур із різним розміром зерна [21].

У прикладі описаному кривою 3, на відміну від кривих 1, 2 реалізація потенціалу одночасно з нульовим і ненульовим мінімумами неможлива. У решті криві 1–3 еквівалентні.

У разі подальшого зменшення ε_{ii}^e за абсолютним значенням (криві 4, 5) буде реалізуватися безперервний перехід другого роду між монокристалом і фрагментованим зразком за відсутності потенціального бар'єру. Водночас є можливим формування лише однієї стаціонарної структури.

Критичне значення квадрата зсувних деформацій впливає з (5.19) при $\varphi = 0$

$$(\varepsilon_{ij}^e)_c^2 = -\frac{1}{\bar{\mu}} \left(h'_0 + g\varepsilon_{ii}^e + \frac{1}{2}\bar{\lambda}(\varepsilon_{ii}^e)^2 \right). \quad (5.20)$$

У координатах $(\varepsilon_{ij}^e)^2 - \varepsilon_{ii}^e$ співвідношення (5.20) представляє криву другого порядку, нижче за яку існує стаціонарний розв'язок (5.19), що відповідає мінімуму $V(\varphi)$ у точці $\varphi_0 = 0$. На рисунку 5.1 криві виходять із точки (5.20) на осі абсцис. Тому вираз (5.20) являє собою значення другого інваріанта, за якого починає проходити процес фрагментації. Оскільки (5.20) містить величину ε_{ii} , усі криві виходять із різних точок.

На рисунку 5.2 наведено фазову діаграму, де лінії відповідають межам втрати стійкості системи. Крива 1, нижче за яку є можливим нульовий стаціонарний розв'язок, визначається виразом (5.20). За умови, якщо $\varphi_0 = 0$, відсутній канал дисипації енергії, пов'язаний з утворенням дефектних структур, і система є монокристалом або структурою близькою до нього. Точки 1–4 на фазовій діаграмі відповідають кривим потенціалу на рисунку 5.3, який має мінімуми. Їх положення визначаються параметрами завдання.

Область A відповідає реалізації двох ненульових мінімумів потенціалу $V(\varphi)$ (крива 2 на рис. 5.3). Тут спостерігаються дві стаціонар-

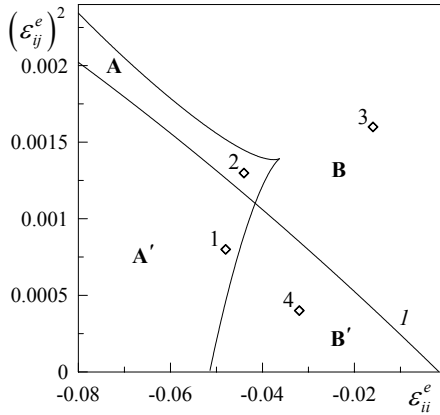


Рисунок 5.2 — Фазова діаграма системи з областями формування двох (A, A') і одної (B, B') стаціонарних структур відповідна параметрам рисунка 5.1

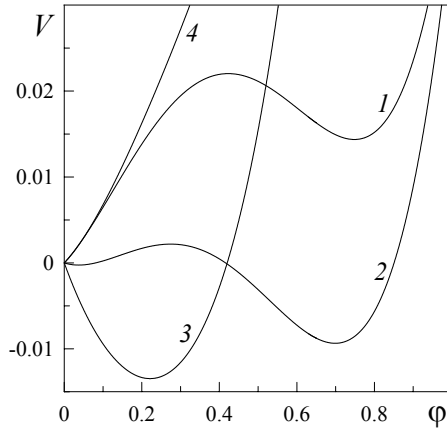


Рисунок 5.3 — Залежність термодинамічного потенціалу V [Дж/м³] (5.18) від густини енергії меж зерен φ [Дж/м²] за умови параметрів рисунка 5.1. Криві 1–4 відповідають значенням інваріанта $(\varepsilon_{ij}^e)^2 = 0.0008, 0.0013, 0.0016, 0.0004$ та сліду тензора деформації $\varepsilon_{ii}^e = -0.048, -0.044, -0.016, -0.032$ відповідно (точки 1–4 на рисунку 5.2)

ні структури з великим (перший мінімум потенціалу) й малим (другий мінімум) розмірами зерна.

Область діаграми A' подібна до області A , але з тією відмінністю, що перший мінімум потенціалу тут нульовий (крива 1 рис. 5.3). Оскільки перша стаціонарна структура формується при $\varphi_0 = 0$, вона є монокристалом. У цій області в процесі ІПД фрагментація матеріалу може не реалізуватися. Потрібно зазначити, що переходи між мінімумами потенціалу можливі безпосередньо під час ІПД. Завдяки ним в областях A, A' формуються дві стаціонарні структури, що відповідає режиму, за якого актуальна суміш зерен різного розміру. Коли процес ІПД закінчений, можна вважати, що зразок сформований, і подальші переходи не здійснюються.

В області великих деформацій B , згідно з кривою 3 на рисунку 5.3, формується одна стаціонарна структура. Під час збільшення $(\varepsilon_{ij}^e)^2$ розмір зерна зменшуватиметься, і в границі $(\varepsilon_{ij}^e)^2 \rightarrow \infty$ оброблений зразок має аморфну структуру.

Єдиний нульовий мінімум $V(\varphi)$ (крива 4 на рис. 5.3) реалізується в області малих деформацій B' . Тут система є монокристалом.

5.3 Кінетика встановлення стаціонарного значення густини енергії дефектів

5.3.1 Часові залежності

Проведемо дослідження кінетики даної системи. Для аналізу методом фазової площини [3] за умови заданих співвідношень часів релаксації τ_φ, τ_T необхідно уточнювати вид термодинамічного потенціалу (5.11) згідно з експериментальними даними. Це пов'язано з тим, що система рівнянь (5.13), (5.14) загалом при довільних параметрах може виявитися такою, що розходиться й не буде описувати встановлення стаціонарного стану. У зв'язку із цим, розглянемо спрощений варіант еволюції системи в межах адіабатичного наближення $\tau_\varphi \gg \tau_T$. Водночас дослідження зводиться до аналізу кінетичного рівняння Ландау –

Халатнікова (5.16), яке в явному вигляді представляється як

$$\dot{\varphi} = h_0 - \left(a + \frac{\alpha^2}{2\gamma}\right) \varphi + \left(b - \frac{3\beta\alpha}{2\gamma}\right) \varphi^2 - \left(\frac{\beta^2}{\gamma}\right) \varphi^3. \quad (5.21)$$

Релаксаційні часові залежності $\varphi(t)$, одержані під час розв'язання диференціального рівняння (5.21) і відповідні параметрам рисунка 5.1, для різних областей фазової діаграми наведені на рисунку 5.4. Рисунки 5.4а–г відповідають точкам 1–4 рисунку 5.2.

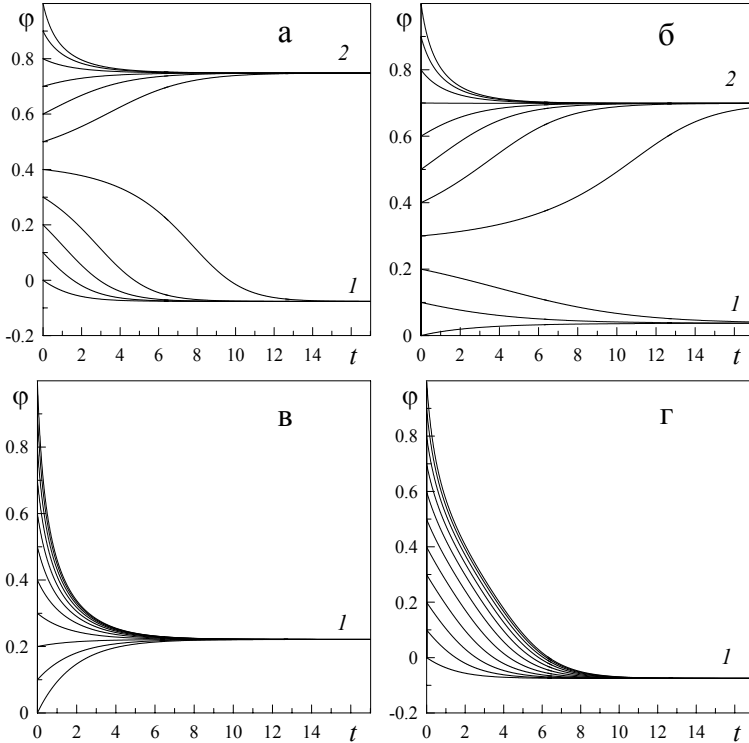


Рисунок 5.4 — Релаксаційні залежності $\varphi(t)$ [Дж/м²], одержані під час розв'язання рівняння (5.21) для параметрів рисунка 5.1. Рисунки а–г відповідають точкам 1–4 на рисунку 5.2. Час t [Дж/м] виміряно в одиницях $\tau_{\varphi} = [\text{Дж}^{-1} \cdot \text{м} \cdot \text{с}]$

На рисунку 5.4а показано залежності, що описують фрагментацію матеріалу в області A' фазової діаграми за різних початкових умов $\varphi(0)$. Відповідний потенціал показаний кривою 1 на рисунку 5.3. Стаціонарне значення, що перше встановлюється, (за малих початкових φ) знаходиться у від'ємній області φ . Це пов'язано з тим, що насправді перший мінімум потенціалу реалізується за умови $\varphi < 0$. Проте від'ємні φ не мають фізичного сенсу, оскільки при них канал дисипації енергії, пов'язаний з утворенням дефектів, стає джерелом виділення додаткової енергії, а це суперечить законам збереження. Тому потрібно вважати, що в разі досягнення нульового значення густини енергії меж зерен перестає спадати, і система переходить у режим $\dot{\varphi} = 0$. Згідно з рисунком, залежно від початкових умов може реалізуватися як монокристал (коли система виходить на стаціонарне значення, описане прямою 1), так і дрібнозерниста стаціонарна структура (пряма 2).

Часові залежності, що відповідають області A фазової діаграми, показано на рисунку 5.4б. Його відмінність від попереднього полягає в тому, що тут перша стаціонарна точка реалізується в додатній області густини енергії меж зерен φ . Відповідно формуються дві стаціонарні структури з великим (пряма 1) і дрібнішим (пряма 2) зерном.

Область B діаграми представлена рисунком 5.4в. Тут існує один стаціонарний стан (пряма 1), що відповідає єдиному мінімуму потенціалу $V(\varphi)$ (крива 3 на рис. 5.3). За будь-яких початкових умов система релаксує до цього значення та утворюється стаціонарна структура з відповідним розміром зерна.

Останній області B' діаграми відповідає рисунок 5.4г. Оскільки мінімум потенціалу $V(\varphi)$ спостерігається за умови $\varphi < 0$, стаціонарне значення формується у від'ємному діапазоні φ . Як і для рисунка 5.4а, φ_0 потрібно вважати нульовим. Водночас у результаті швидкої релаксації системи до стаціонарної точки формуються великі монокристалічні зерна. Відповідний потенціал показано кривою 4 на рисунку 5.3.

Зазначимо, що перший доданок h_0 у (5.21) описує деяке постійне джерело дефектів, що приводить до зростання густини енергії меж зерен φ . Більші значення параметра h_0 зміщують стаціонарні точки завдання в область більш високих значень дефектності та сприяють формуванню дрібніших зерен. Існування цього джерела пов'язане з дефектністю матеріалу глибших структурних рівнів — наявністю дисло-

каційної підструктури, домішок тощо. Зокрема в разі сплавів параметром h_0 визначається залежність граничного розміру зерна від процентного змісту легуючих елементів. Так, наприклад, для сплавів на основі алюмінію наведені дані, з яких випливає, що середній розмір зерна в сплавах Al–Mg становить 150 і 90 нм для 5 і 10% Mg; для сплавів Al–5% Zn–2% Mg і Al–10% Zn–4% Mg величина зерна дорівнює відповідно 150 і 120 нм (до деформації – 500 мкм). Це підтверджує вказану вище закономірність.

5.3.2 Координати $\varphi - \dot{\varphi}$

Проведемо дослідження впливу деформації ε_{ij}^e на процес устанавлення рівноваги в системі з урахуванням визначення (5.10). Функцію, що знаходиться в правій частині (5.21), представлено на рисунку 5.5. Крива 1 побудована за найменшого значення деформації. Перший перетин кривої з віссю абсцис відповідає нестійкій стаціонарній точці (максимуму потенціалу $V(\varphi)$ (5.18)), оскільки під час відхилення від неї система назад не повертається. Другий перетин відповідає мінімуму потенціалу й відповідно стійкому значенню φ . Як видно з рисунка, при $\varphi = 0$ швидкість зміни густини енергії меж зерен від'ємна. Це пов'язано з тим, що $V(\varphi)$ має мінімум в області значень $\varphi < 0$. Тому, як і раніше, потрібно вважати, що досягши нульового значення густини енергії меж зерен перестає зменшуватися.

Нехай в системі встановилося рівноважне значення $\varphi > 0$, що відповідає другому перетину кривої 1 з віссю абсцис, і водночас утворилася відповідна стаціонарна структура. Якщо тепер швидко збільшувати значення деформації, густина енергії меж зерен росте, як показано кривою 2. Розмір зерна в стаціонарній структурі водночас зменшується. Тут кінетика наближення до стійкого стаціонарного значення має експоненціальний характер, оскільки залежність поблизу точки перетину близька до лінійного вигляду. У разі подальшого збільшення $(\varepsilon_{ij}^e)^2$, як показано кривою 3, спостерігаються три точки перетину залежності з віссю абсцис. Водночас додається новий стаціонарний стійкий стан, описаний першим перетином. Оскільки він близький до значення $\varphi = 0$, реалізується стаціонарна структура з великим розміром

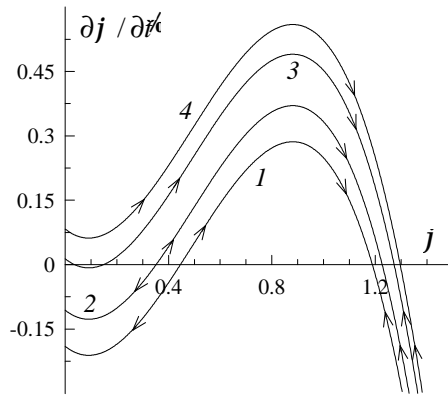


Рисунок 5.5 — Швидкість зміни густини енергії меж зерен $\partial\varphi/\partial t$ [м^{-1}] (5.21) як функція φ [$\text{Дж}/\text{м}^2$] за параметрів $h'_0 = 0.005 \text{ м}^{-1}$, $\bar{\lambda} = 2.2 \text{ м}^{-1}$, $\bar{\mu} = 2.1 \text{ м}^{-1}$, $\alpha' = 1.7 \text{ К}^{-1}\cdot\text{м}^{-1}$, $\alpha_g = 1.0 \text{ К}^{-1}\cdot\text{м}^{-1}$, $e = 0.05 \text{ Дж}^{-1}\cdot\text{м}$, $g = 2.1 \text{ м}^{-1}$, $a' = 0.3 \text{ Дж}^{-1}\cdot\text{м}$, $\gamma = 2.4 \text{ м}^{-3}\cdot\text{К}^{-2}\cdot\text{Дж}$, $\beta = 2.2 \text{ Дж}^{-1}\cdot\text{К}^{-1}\cdot\text{м}$, $b = 2.8 \text{ Дж}^{-2}\cdot\text{м}^3$, $\mu = 0.3 \text{ Дж}\cdot\text{м}^{-3}$, $\varepsilon_{ii}^e = -1.8$. Криві 1–4 відповідають значенням $(\varepsilon_{ij}^e)^2 = 0.01, 0.05, 0.107, 0.14$ відповідно

зерна. Водночас потенціал має два мінімуми й один максимум у додатній області φ , у від'ємній же він монотонно зростає. Під час подальшого збільшення $(\varepsilon_{ij}^e)^2$ існує лише один стаціонарний стан (крива 4), що відповідає реалізації стаціонарної структури з малим розміром зерна.

Потрібно зазначити, що в реальному експерименті через геометричні особливості методів ІПД досягнення стаціонарного режиму неможливе. У таких класичних методах, як рівноканальне кутове пресування, гвинтова екструзія, багатокутова рівноканальна гідроекструзія тощо, для яких характерно збереження перетину зразка до та після обробки ІПД, цього не можна досягти з причини неможливості забезпечення постійного в часі пружного напруження (в нашому прикладі ε_{ij}^e). Зразок з деякою постійною швидкістю входить до активної зони експериментальної установки й виходить із неї. Водночас зсувні напруження, що діють σ_{ij} ($i \neq j$) змінюються від нуля до деякого максимального значення при вході в активну зону й від максимального

значення до нуля під час виходу з неї. Проте в активній зоні структура матеріалу еволюціонуватиме в бік стаціонарного значення, але за час перебування в зоні система встигне пройти лише частину шляху в цьому напрямі. Тому для досягнення стаціонарного граничного середнього розміру зерна широко практикується багатократне повторення обробки матеріалу на одній і тій самій установці або комбінування обробки на установках різного типу.

Використовують також ідею інтенсивного однорідного навантаження зразка в процесі його обробки. У цьому разі стаціонарний режим за напруженням $\varepsilon_{ij}^e = \text{const}$ у принципі може бути досягнутий, але через зміну перетину зразка в процесі такої обробки, лише на обмеженому проміжку часу.

Із проведеного розгляду випливає, що дослідження ІПД в межах теорії фазових переходів передбачає можливість виникнення нових режимів фрагментації та відповідно одержання матеріалів із заданими властивостями. Побудовано фазову діаграму, де перші два інваріанти пружної частини тензора деформації визначають області реалізації різних типів стаціонарних структур. Установлено, що зі збільшенням пружних деформацій розмір зерен у стаціонарних структурах зменшується. Знайдено умови формування двох стаціонарних структур, що відповідає режиму, за якого існує суміш зерен різного розміру.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Хакен Г. Синергетика : монографія / Г. Хакен; пер. с англ. В. Емельянов. — Москва : Мир, 1980. — 404 с.
2. Ландау Л. Д. Теоретическая физика : учебное пособие: в 10 т. / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. — Москва : Наука, 1995. — Т. 5: Статистическая физика. Ч.1. Изд. 4, 1995. — 608 с.
3. Олемской А. И. Синергетика конденсированной среды : учебное пособие / А. И. Олемской, А. В. Хоменко. — Сумы : Сумский государственный университет, 2002. — 373 с.
4. Хоменко А. В. Синергетика фазовых и кинетических переходов в низкоразмерных системах. Физические основы, концепции, методы : монография / А. В. Хоменко. — Saarbrücken, Deutschland / Германия : Palmarium Academic Publishing, 2015. — 328 с.
5. Khomenko A. V., Troshchenko D. S. Nonequilibrium thermodynamics and kinetics of metals fragmentation during severe plastic deformation // M. C. Wythers (ed.), *Advances in Materials Science Research* / A. V. Khomenko, D. S. Troshchenko. — New York : Nova Science Publishers, Inc., 2018. — Vol. 33, Chap. 9. — P. 231–273.
6. Хоменко А. Формирование и трение наносистем с углеродными поверхностями. Компьютерное моделирование, физические концепции и технологии : монография / А. Хоменко. — Riga, Latvia / Латвия : LAP Lambert Academic Publishing, 2020. — 173 с.
7. Харченко Д. О. Методи описання і моделювання стохастичних систем : навч. посіб. / Д. О. Харченко. — Суми : Сумський державний університет, 2008. — 206 с.
8. Horstemke V., Lefever R. Noise-induced transitions / V. Horstemke, R. Lefever. — Berlin : Springer-Verlag, 1984. — 400 с.
9. Торопов Е. А. Влияние шума на характер поведения синергетической системы / Е. А. Торопов, Д. О. Харченко // *Известия вузов. Физика*. — 1996. — № 4. — С. 75–82.
10. Persson B. N. J. Sliding friction. Physical principles and applications / B. N. J. Persson. — Berlin : Springer-Verlag, 2000. — 515 p.

11. Bowden F. P. The friction and lubrication of solids / F. P. Bowden, D. Tabor. — Oxford : Clarendon Press, 1986. — 381 p.
12. Israelachvili J. N. Intermolecular and surface forces / J. N. Israelachvili. — [2nd ed.] — London : Academic Press, 1998. — 450 p.
13. Yoshizawa H. Fundamental mechanisms of interfacial friction. 2. Stick-slip friction of spherical and chain molecules / H. Yoshizawa, J. Israelachvili // Journal of Physical Chemistry. — 1993. — Vol. 97, № 43. — P. 11300–11313.
14. Braun O. M. Nanotribology : Microscopic mechanisms of friction / O. M. Braun, A. G. Naumovets // Surface Science Reports. — 2006. — Vol. 60. — P. 79–158.
15. Olemskoi A. I. Phase transitions induced by noise cross-correlations / A. I. Olemskoi, D. O. Kharchenko, I. A. Knyaz' // Physical Review E. — 2005. — Vol. 71, № 4. — P. 041101 (12).
16. Можаровський М. С. Теорія пружності, пластичності і повзучості : підручник / М. С. Можаровський. — Київ : Вища шк., 2002. — 308 с.
17. Rapaport D. C. The art of molecular dynamics simulation, 2nd ed / D. C. Rapaport. — Cambridge : Cambridge University Press, 2004. — 550 p.
18. Хоменко О. В. Атомістичне моделювання формування та тертя матеріалів із нанорозмірними поверхнями / О. В. Хоменко, М. В. Захаров, М. О. Горпинченко // Журнал фізичних досліджень. — 2022. — Т. 26, № 1. — 1302 (8 с.)
19. Khomenko O. V. Computer modelling of metal nanoparticles adsorbed on graphene / O. V. Khomenko, A. A. Biesiedina, K. P. Khomenko, R. R. Chernushchenko // Progress in Physics of Metals. — 2022. — Vol. 23, No. 2. — P. 239-267.
20. Multiscale biomechanics and tribology of inorganic and organic systems / G.-P. Ostermeyer, V. L. Popov, E. V. Shilko, O. S. Vasiljeva. — Cham : Springer, 2021. — 571 p.
21. Renk O. Saturation of grain refinement during severe plastic deformation of single phase materials: reconsiderations, current status and open questions / O. Renk, R. Pippan // Materials Transactions. — 2019. — Vol. 60, No. 7. — P. 1270–1282.

22. Beygelzimer Y. Twist extrusion as a potent tool for obtaining advanced engineering materials: a review / Y. Beygelzimer, R. Kulagin, Y. Estrin, L. S. Toth, H. S. Kim, M. I. Latypov // *Advanced Engineering Materials*. – 2017. – Vol. 19, No. 8. – P. 1600873(24).
23. Метлов Л. С. Неравновесная эволюционная термодинамика и ее приложения : монография / Л. С. Метлов. – Донецк : Ноулидж, 2014. – 176 с.
24. Хоменко О. В. Інтенсивна пластична деформація : методи та математичні моделі формування наноматеріалів / О. В. Хоменко // *Журнал фізичних досліджень*. – 2020. – Т. 24, № 2. – 2001(20 с.)

Навчальне видання

Хоменко Олексій Віталійович,
Гончаров Олександр Андрійович

МОДЕЛЮВАННЯ НЕЛІНІЙНИХ ПРОЦЕСІВ ТА СИСТЕМ

Навчальний посібник

Художнє оформлення обкладинки О. В. Хоменка
Редактор О. Ф. Дубровіна
Комп'ютерне верстання О. В. Хоменка

Формат 60×84/16. Ум. друк. арк. 11,45. Обл.-вид. арк. 11,87. Тираж 300 пр. Зам. № .

Видавець і виготовлювач
Сумський державний університет,
вул. Римського-Корсакова, 2, м. Суми, 40007
Свідцтво суб'єкта видавничої справи ДК № 3062 від 17.12.2007.