

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ

Сумський державний університет

Факультет електроніки та інформаційних технологій

(повна назва інституту/факультету)

Кафедра прикладної математики та моделювання складних систем

«До захисту допущено»

Завідувач кафедри

(підпис)

(Ім'я та ПРІЗВИЩЕ)

20\_\_ р.

КВАЛІФІКАЦІЙНА РОБОТА

на здобуття освітнього ступеня бакалавр

(бакалавр / магістр)

зі спеціальності 113 Прикладна математика

(код та назва)

освітньо-професійної програми Наука про дані та моделювання складних систем

(освітньо-професійної / освітньо-наукової)

(назва програми)

на тему: Математична модель фазової кінетики фрагментації металів при інтенсивній пластичній деформації

Здобувачки групи ПМ-01 Перебейнос Вікторії Юріївни

(шифр групи)

(прізвище, ім'я, по батькові)

Кваліфікаційна робота містить результати власних досліджень. Використання ідей, результатів і текстів інших авторів мають посилання на відповідне джерело.

(підпис)

Вікторія ПЕРЕБЄЙНОС

(Ім'я та ПРІЗВИЩЕ здобувача)

Керівник професор, д.ф.-м.н, професор, Олексій ХОМЕНКО

(посада, науковий ступінь, вчене звання, ім'я та ПРІЗВИЩЕ)

(підпис)

# СУМСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ

Факультет **електроніки та інформаційних технологій**  
Кафедра **прикладної математики та моделювання складних систем**

Рівень вищої освіти **бакалавр**

(перший (бакалавр) або другий (магістр))

Галузь знань **11 «Математика та статистика»**

Спеціальність **113 «Прикладна математика»**

Освітня

програма **освітньо-професійна «Наука про дані та моделювання складних систем»**

ЗАТВЕРДЖУЮ

Завідувач кафедри ПМтаМСС

Коплик І. В. \_\_\_\_\_

«\_\_\_» \_\_\_\_\_ 20\_\_ р.

## І Н Д И В І Д У А Л Ь Н Е З А В Д А Н Н Я НА КВАЛІФІКАЦІЙНУ РОБОТУ ЗДОБУВАЧЕВІ ВИЩОЇ ОСВІТИ

Перебейнос Вікторії Юрїївни

(прізвище, ім'я, по батькові)

1. Тема роботи Математична модель фазової кінетики фрагментації металів при інтенсивній пластичній деформації

Керівник роботи Хоменко Олексій Віталійович, професор, д.ф.-м.н, професор  
(прізвище, ім'я, по батькові, науковий ступінь, вчене звання, посада)

затверджено наказом по факультету ЕлІТ від «05» квітня 2024 р. № 0349-VI

2. Термін подання роботи здобувачем «02» червня 2024 р.

3. Вихідні дані до роботи: Математичні моделі та чисельні експерименти для опису інтенсивної пластичної деформації металів. Модель базується на рівняннях Ландау і законах Холла-Петча, враховуючи нерівноважну еволюційну термодинаміку.

4. Зміст розрахунково-пояснювальної записки (перелік питань, для розроблення): В рамках роботи розроблено математичну модель фазової кінетики фрагментації металів при інтенсивній пластичній деформації. Виконані чисельні експерименти

підтвердили теоретичні прогнози щодо змін мікроструктури і механічних властивостей металів.

5. Перелік графічного матеріалу:

Схематична діаграма методів інтенсивної пластичної деформації; Електронно-мікроскопічні зображення наноструктур металу; Фазова діаграма режимів фрагментації; Фазові портрети дводефектної системи за пружних деформацій  $\varepsilon_{ii}^e = -0.1\%$ ,  $I_2 = 5 \cdot 10^{-4}\%$ ; Фазові портрети дводефектної системи за пружних деформацій  $\varepsilon_{ii}^e = -0.05\%$ ,  $I_2 = 2.5 \cdot 10^{-4}\%$ ; Часова залежність пройденого конфігураційною точкою шляху 1 по фазовій траєкторії.

6. Консультанти проекту (роботи) із зазначенням розділів проекту, що їх стосується

Розділ	Прізвище, ініціали та посада консультанта	Підпис, дата	
		Завдання видав	Завдання прийняв
—	—	—	—

7. Дата видачі завдання «06» травня 2024р.

### КАЛЕНДАРНИЙ ПЛАН

№ п/п	Назва етапів кваліфікаційної роботи	Термін виконання роботи	Примітка
1	Ознайомлення з актуальними дослідженнями у галузі інтенсивної пластичної деформації (ІПД).	06.05-10.05	
2	Аналіз методології нерівноважної еволюційної термодинаміки та її застосування до фазової кінетики.	11.05-14.05	
3	Розробка математичної моделі для фазової кінетики дводефектної системи.	15.05-18.05	
4	Моделювання процесів ІПД з використанням розробленої моделі.	19.05-23.05	
5	Аналіз впливу часів релаксації на фазову кінетику.	24.05-27.05	
6	Збір та систематизація отриманих результатів для висновків.	28.05-30.05	
7	Оформлення звіту та підготовка до презентації.	31.05-02.06	

Здобувач вищої освіти

\_\_\_\_\_ (підпис)

\_\_\_\_\_ (прізвище та ініціали)

Керівник роботи

\_\_\_\_\_ (підпис)

\_\_\_\_\_ (прізвище та ініціали)

## АНОТАЦІЯ

**Кваліфікаційна робота:** 34 с., 5 рисунків, 11 джерел.

**Мета роботи:** розробка математичної моделі фазової кінетики фрагментації металів при інтенсивній пластичній деформації (ПД) та вивчення її впливу на мікроструктуру і механічні властивості матеріалів.

**Об'єкт дослідження:** метали, піддані інтенсивній пластичній деформації.

**Предмет дослідження:** фазова кінетика та еволюція структурних дефектів у металах в процесі інтенсивної пластичної деформації.

**Методи навчання:** теоретичний аналіз та чисельне моделювання на основі нерівноважної еволюційної термодинаміки, рівнянь Ландау для фазових перетворень, а також законів Холла-Петча для зміцнення матеріалів.

**Ключові слова:** ІНТЕНСИВНА ПЛАСТИЧНА ДЕФОРМАЦІЯ, ФАЗОВА КІНЕТИКА, МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ, СТРУКТУРНІ ДЕФЕКТИ, ТЕРМОДИНАМІКА, МЕТАЛУРГІЯ, МІКРОСТРУКТУРА, МЕХАНІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ.

## ЗМІСТ

ВСТУП.....	6
РОЗДІЛ 1. ЛІТЕРАТУРНИЙ ОГЛЯД .....	8
1.1. Огляд досліджень інтенсивної пластичної деформації металів .....	8
1.2. Фрагментація металів при інтенсивній пластичній деформації .....	11
1.3. Фазова кінетика в металургії .....	11
1.4. Необхідність математичного моделювання в дослідженні фрагментації металів .....	12
РОЗДІЛ 2. МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ФАЗОВОЇ КІНЕТИКИ ФРАГМЕНТАЦІЇ МЕТАЛІВ .....	14
2.1. Підхід нерівноважної еволюційної термодинаміки .....	15
2.2. Фазова кінетика дводефектної системи .....	20
ВИСНОВОК .....	28
ПЕРЕЛІК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ .....	29
ДОДАТКИ .....	30

## ВСТУП

У сучасному світі технологій та інновацій, інтенсивна пластична деформація (ПД) металів відкриває нові перспективи для створення матеріалів з унікальними властивостями. Цей метод широко використовується для поліпшення механічних та фізичних характеристик металів, зокрема їх міцності та стійкості до зносу. Він може викликати значні зміни у структурній цілісності металів, включаючи феномени як фрагментація зерен, рафінування мікроструктури та формування нових фаз. Проте процеси, які відбуваються на мікроскопічному рівні під час ПД, є складними та багатоаспектними, що потребує глибокого дослідження та розуміння.

Основною метою є розробка математичної моделі фазової кінетики фрагментації металів при ПД. Ця модель дозволить не тільки глибше зрозуміти фізичні процеси, що відбуваються в металах під час деформації, але й спрогнозувати поведінку матеріалів під час експлуатації.

Вибір теми зумовлений важливістю розвитку нових технологій обробки металів, які могли б забезпечити виробництво високоякісних матеріалів для сучасних технологічних застосувань. Розуміння мікроструктурних змін при ПД відкриває шлях для оптимізації виробничих процесів та підвищення якості продукції.

Дослідження буде базуватися на комбінованому підході, що включає теоретичний огляд наявних моделей і розробку нової математичної моделі, використовуючи чисельні методи. Використання програмного забезпечення для симуляції допоможе в оцінці потенційного впливу різних параметрів ПД на структурні та механічні властивості металів. Ці оцінки та припущення будуть представлені у вигляді графіків та діаграм, що сприятиме кращому розумінню та інтерпретації отриманих результатів.

Для досягнення поставлених цілей, у першому розділі роботи буде проведено детальний теоретичний огляд, в якому розглянуто основні концепції інтенсивної пластичної деформації та її вплив на мікроструктуру металів. У другому розділі

зосередимося на практичному моделюванні та аналізі фазових портретів, розглянемо кінетику фрагментації та вплив різних параметрів на структурні зміни в металах.

Ця робота спрямована на поглиблення розуміння взаємозв'язків між процесами, що відбуваються на мікроскопічному рівні під час ІПД, та їх впливу на макроскопічні властивості металів.

# РОЗДІЛ 1. ЛІТЕРАТУРНИЙ ОГЛЯД

## 1.1. Огляд досліджень інтенсивної пластичної деформації металів

### *Історичний аспект та сучасні дослідження*

Інтенсивна пластична деформація (ІПД) металів використовується з давніх часів, починаючи з таких традиційних методів обробки, як кування, вальцювання, тяга тощо. Структурні зміни металів під час інтенсивних деформацій були вперше описані в роботах Персі Бріджмена, який в 1930-х роках ввів техніку високого тиску з крученням, відому як високотискове торсійне кручення (НРТ) [1].

Значний розвиток ІПД отримав завдяки розробці нових методів на кшталт рівно канального кутового пресування (ЕСАР) у 1970-х роках, що дозволило реалізувати просте зсування в промислових масштабах, тим самим сприяючи виробництву великих зразків з ультрадрібнозернистою структурою [1].

Сучасні техніки ІПД класифікуються за способом реалізації простого зсуву. Серед них:

- ***Високотискове торсійне кручення (НРТ)***. Здійснюється шляхом одночасного стискання та скручування зразка між двома жорсткими дисками під високим тиском. Зразок розміщується між двома матрицями, і плунжер створює осьовий тиск, тоді як один з дисків обертається відносно іншого. Це створює інтенсивний просторовий зсув, що призводить до значного подрібнення зерен [2].
- ***Рівноканальне кутове пресування (ЕСАР)***. Полягає в пропусканні металевого зразка через спеціальну матрицю з каналами, що перетинаються під прямим кутом. Під час проходження через ці канали зразок зазнає чистого зсуву без зміни свого загального розміру. Метод добре підходить для серійної обробки, оскільки зразок може піддаватись багаторазовому пресуванню для досягнення бажаного рівня деформації [2].
- ***Твіст-екструзія та інші модифікації ЕСАР***. Зразок піддається додатковому скручуванню під час екструзії. Це забезпечує більш рівномірний розподіл



деформації та кращий контроль над процесом. Інші модифікації можуть включати зміни в геометрії каналів або додаткові деформаційні кроки для оптимізації процесу [2].

Для візуалізації цих методів можна переглянути рисунок 1.1, який ілюструє кілька технік ІПД, включаючи НРТ та ЕСАР.

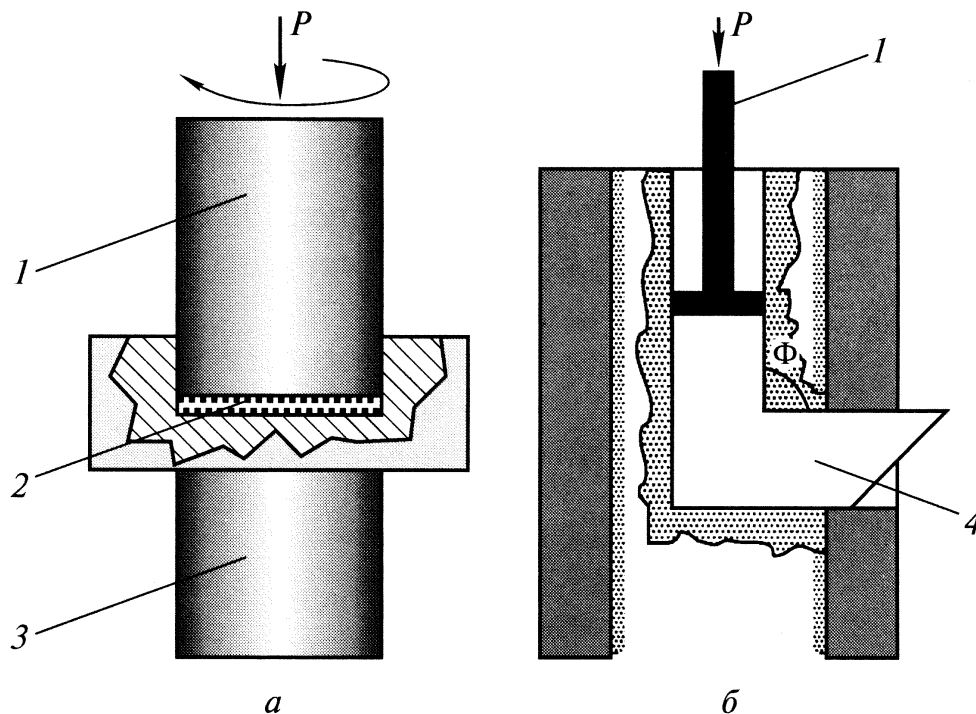


Рисунок 1.1 – Схематична діаграма методів інтенсивної пластичної деформації: (а) високотискове торсійне кручення (НРТ) та (б) рівно каналне кутове пресування (ЕСАР), де позначено: 1 – Плунжер, 2 – Зразок, 3 – Опора, 4 – Заготовка. [3]

### ***Вплив інтенсивної пластичної деформації на структуру та властивості металів***

ІПД спричиняє радикальні зміни у структурі металів, зокрема:

- ***Утворення ультрадрібнозернистої структури:*** ІПД може зменшити розмір зерен до нанорозмірів, значно збільшуючи міцність матеріалу внаслідок механізму зміцнення зеренного кордону. Зменшення розміру зерен підвищує міцність і твердість завдяки ефекту Холла-Петча [4].

- **Зміна текстури:** ПД змінює текстуру матеріалу, сприяючи орієнтації кристалічних площин у більш оптимальному напрямку для певних застосувань. Це покращує механічні властивості, такі як міцність і пластичність [4].
- **Підвищення втомної тривкості:** Зменшення розміру зерен також підвищує втомну тривкість матеріалів, що важливо для компонентів, які піддаються циклічним навантаженням. Більш дрібні зерна сприяють кращій деформаційній здатності та збільшують опір втомі [4].

Більш детальні візуальні приклади змін у наноструктурах можна побачити на рисунку 1.2.

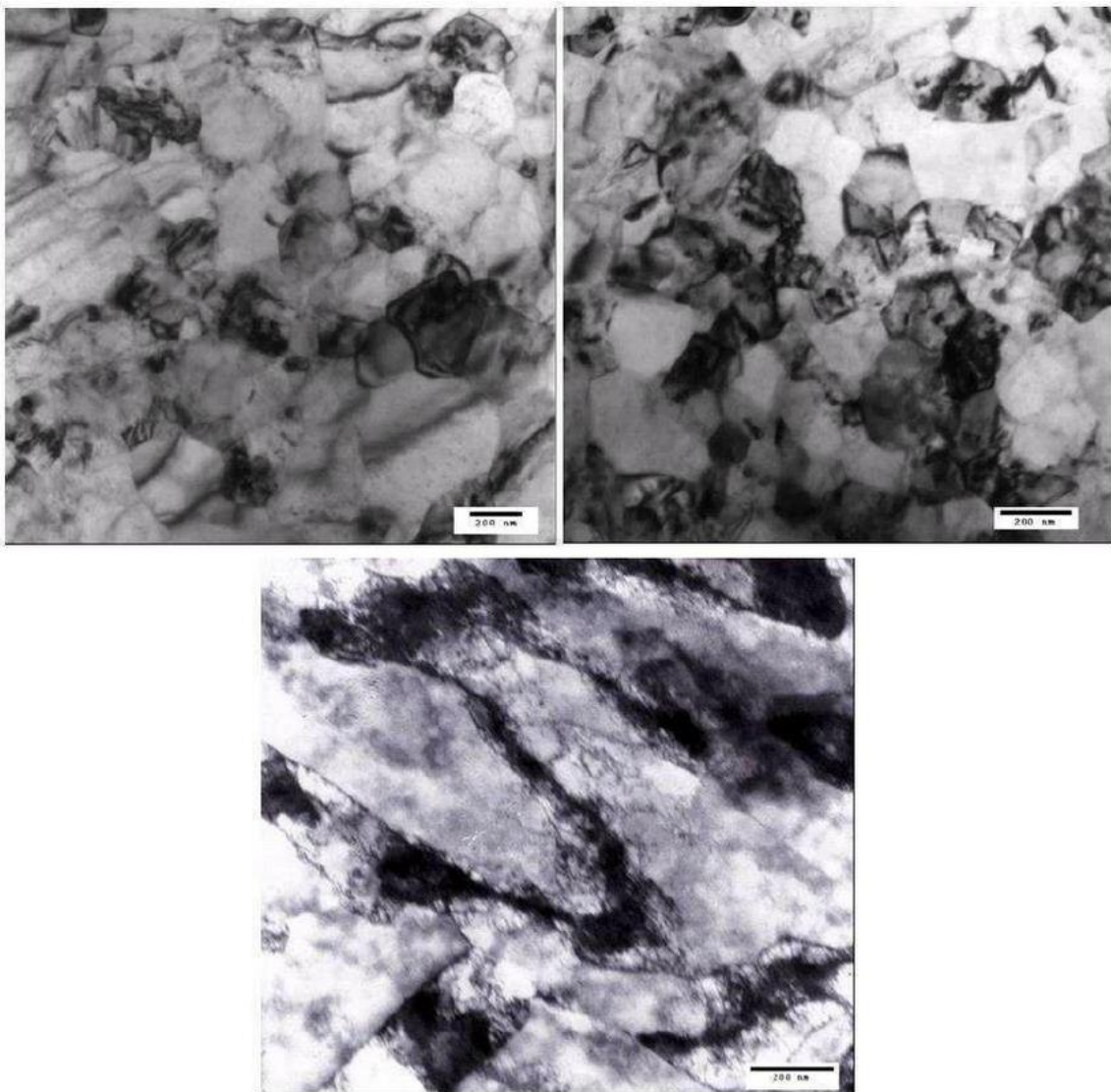


Рисунок 1.2 – Мікроструктура досліджуваних металів після інтенсивної пластичної деформації: (а) Титан (Ti), (б) Нікель (Ni), (в) Мідь (Cu) [5]

## **1.2. Фрагментація металів при інтенсивній пластичній деформації**

Фрагментація металів є ключовим аспектом, що відбувається під час ІПД, оскільки спричиняє суттєві зміни в їхній мікроструктурі та властивостях. Процес фрагментації включає кілька ключових етапів і механізмів.

Інтенсивна пластична деформація спричиняє зсуви в кристалічній решітці металу, що призводить до формування нових меж зерен. Ці нові межі є результатом накладання високих деформаційних навантажень. У процесі деформації виникають численні дислокації, які накопичуються і взаємодіють одна з одною, спричиняючи утворення нових зерен [6].

Після досягнення критичної щільності дефектів (дислокацій), матеріал починає рекристалізуватися. Це означає, що старі деформовані зерна замінюються новими, дрібнішими зернами, які мають меншу кількість дефектів. Нові зерна, що утворюються під час рекристалізації, зазвичай є значно дрібнішими, що покращує механічні властивості металу, зокрема міцність і пластичність [6].

Основним результатом ІПД є зменшення розміру зерен до нанорозмірів або ультрадрібнозернистих. Це зменшення відбувається через постійне утворення і міграцію меж зерен під час деформації. Ультрадрібні зерна забезпечують високий рівень зміцнення матеріалу завдяки ефекту Холла-Петча, де міцність зростає зі зменшенням розміру зерен [6].

Під час ІПД відбувається динамічний баланс між утворенням і релаксацією дефектів, утворенням нових зерен і їхнім ростом. Це призводить до встановлення стабільного стану матеріалу після досягнення певного рівня деформації.

## **1.3. Фазова кінетика в металургії**

### ***Поняття фазової кінетики***

Фазова кінетика в металургії вивчає процеси, що відбуваються на межах фаз і впливають на структуру та властивості металів під час різних технологічних операцій. Це включає зародження, ріст і перетворення фаз у матеріалах.

### ***Основні теорії та моделі фазової кінетики.***

Фазові перетворення в металах можуть бути аналізовані за допомогою різноманітних теоретичних підходів, зокрема термодинаміки, кінетики реакцій, і дифузійної теорії. Основні моделі включають:

- ***Термодинамічні моделі*** аналізують енергетичні зміни під час фазових перетворень. Вони використовують принципи термодинаміки для прогнозування стабільності фаз і їхніх перетворень. Основна увага приділяється рівноважним станам та критеріям стабільності фаз. Наприклад, модель Гіббса може бути використана для розрахунку змін вільної енергії при фазових перетвореннях [7].
- ***Кінетичні моделі*** описують швидкість фазових перетворень. Вони враховують вплив температури, часу та інших факторів на кінетику росту та зародження фаз. Важливими є поняття про активовані стани та енергетичні бар'єри [7].
- ***Моделі дифузії*** досліджують процеси перенесення атомів або молекул в металах під час фазових перетворень. Вони включають аналіз дифузійних коефіцієнтів та механізмів дифузії, що впливають на формування мікроструктури.

### ***Роль фазової кінетики в технологіях інтенсивної пластичної деформації***

Фазова кінетика грає важливу роль у процесах інтенсивної пластичної деформації, де високі деформації та температури можуть спричинити значні зміни в фазовому складі матеріалів. Зокрема, швидкі зміни умов (наприклад, температури або тиску) під час ПД можуть призводити до аномальних фазових перетворень, що впливають на властивості кінцевого продукту. Використання математичних моделей для прогнозування цих змін дозволяє розробляти технологічні параметри, які забезпечують оптимальні механічні властивості та структурну цілісність металів.

### **1.4. Необхідність математичного моделювання в дослідженні фрагментації металів**

#### ***Застосування математичних моделей у металургії.***

Математичне моделювання є невід'ємною частиною сучасної металургії та матеріалознавства, забезпечуючи необхідні інструменти для аналізу складних процесів, що відбуваються на різних рівнях виробництва металів. Моделі дозволяють передбачити результати різних технологічних операцій, таких як вальцювання, кування, термообробка, і допомагають у розробці нових сплавів та вдосконаленні технологічних процесів. Застосування математичних моделей у дослідженні фрагментації металів, зокрема при інтенсивній пластичній деформації, дає можливість глибокого аналізу змін мікроструктури, оцінки впливу різних факторів на фрагментацію зерен та оптимізації властивостей металів.

### ***Переваги та недоліки існуючих підходів.***

Однією з основних переваг математичного моделювання є здатність проводити чисельні експерименти з великою кількістю параметрів, які можуть бути недоступні або важкодоступні при реальних виробничих умовах. Це дозволяє значно скоротити витрати на розробку та тестування нових матеріалів. Моделі також забезпечують краще розуміння взаємозв'язків між мікроструктурою та властивостями, допомагаючи в налагодженні процесів для отримання бажаних характеристик продукту.

Попри значні переваги, чинні підходи до математичного моделювання мають і свої недоліки. Одним із головних є складність моделей та необхідність використання великих обчислювальних ресурсів, особливо при моделюванні складних багаторівневих процесів, таких як фрагментація зерен при високих деформаціях. Також важливим обмеженням є точність вхідних даних: помилки в експериментальних даних або неповнота фізичних знань можуть значно вплинути на результати моделювання. Крім того, багато моделей вимагають спрощення реальних умов до ідеалізованих сценаріїв, що може обмежувати їх застосовність для конкретних промислових завдань.

Ці аспекти необхідно враховувати при виборі та розробці математичних моделей для конкретних досліджень у металургії, зокрема при вивченні фазової кінетики фрагментації металів при інтенсивній пластичній деформації.

## РОЗДІЛ 2. МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ФАЗОВОЇ КІНЕТИКИ ФРАГМЕНТАЦІЇ МЕТАЛІВ

У цьому розділі ми поглибимося в теоретичне та практичне дослідження фазової кінетики фрагментації металів під час інтенсивної пластичної деформації (ІПД). Математичне моделювання цих процесів дозволяє вивчати складні зміни, що відбуваються на мікроструктурному рівні під час ІПД, включають утворення висококутових меж зерен, фрагментацію дислокаційних структур, а також зміни в енергії та структурних дефектах, які не можуть бути достатньо описані без застосування комплексних математичних теорій.

Серед них, важливу роль відіграють рівняння Ландау для фазових перетворень, які дозволяють досліджувати динаміку переходів між різними стабільними та метастабільними станами в системах зі складними взаємодіями. Застосування цих рівнянь допомагає в моделюванні не лише статичних, але й динамічних характеристик фазових переходів у процесах ІПД.

Також, важливе місце у моделюванні займають закони Холла-Петча, які описують зміцнення матеріалу через утворення дислокацій та зменшення розмірів зерен до нанорозмірів. Зміцнення, яке має особливе значення при аналізі механічних властивостей металів після ІПД, може бути ефективно модельоване з використанням цих закономірностей.

Цей розділ також зосередиться на підходах нерівноважної еволюційної термодинаміки, яка надає рамки для розгляду систем з високим ступенем дисперсності та мікроскопічних неоднорідностей. Використання цього підходу дозволить глибше дослідити мікроструктурні перетворення, які відбуваються під час ІПД, та їх вплив на загальні властивості матеріалу.

Таким чином, в рамках другого розділу буде здійснено комплексний аналіз різних теоретичних підходів та моделей, які дозволяють описати складні фізичні процеси, що відбуваються під час інтенсивної пластичної деформації металів. Результати моделювання будуть представлені у формі детальних графіків та діаграм, що допоможуть краще зрозуміти динаміку фазових та структурних перетворень.

## 2.1. Підхід нерівноважної еволюційної термодинаміки

### *Основи нерівноважної еволюційної термодинаміки (НЕТ)*

Звичайна термодинаміка стає менш ефективною при аналізі малих систем і об'ємів, особливо при спробі встановити детальну рівновагу між нанозернами. На відміну від неї, нерівноважна термодинаміка не прагне до встановлення детальної рівноваги, що дозволяє їй ефективніше працювати з дрібними зернами завдяки зростанню числа елементів середовища. Розглянемо основні положення НЕТ [8].

Будь-яка фізична система, що складається з багатьох частинок, повинна дотримуватися закону збереження енергії, навіть якщо їх взаємодії складні. Цей принцип описується першим законом термодинаміки:

$$dU = \delta A + \delta Q, \quad (2.1)$$

де  $dU$  – приріст внутрішньої енергії системи,  $\delta A$  – робота зовнішніх сил,  $\delta Q$  – тепловий потік. Внутрішня енергія системи змінюється лише через зовнішній вплив, тоді як внутрішні процеси лише перетворюють один вид енергії в інший [8].

Для простих систем це рівняння виглядає так:

$$dU = -pdV + TdS, \quad (2.2)$$

де  $\delta A = -pdV$  і  $\delta Q = TdS$ . Якщо  $dU$  – повний диференціал, то

$$p = -\frac{\partial U}{\partial V}, \quad T = \frac{\partial U}{\partial S}. \quad (2.3)$$

Таким чином, змінні  $p$  (тиск) і  $T$  (температура) визначаються диференціюванням внутрішньої енергії [8].

Вплив сильних механічних дій на тверді тіла призводить до руйнування і фрагментації, які з термодинамічного погляду відрізняються каналами дисипації енергії. Нерівноважні процеси, що виникають під час фрагментації, можна описати за допомогою спеціальних підходів: процес фрагментації є стаціонарним, де сильні нерівноважні потоки збалансовані й слабо впливають на квазірівноважні процеси [8].

Основний закон термодинаміки для простих тіл можна записати так:

$$du = \sigma_{ij}\delta\varepsilon_{ij} + T\delta s', \quad (2.4)$$

де  $u$  – густина внутрішньої енергії,  $\sigma_{ij}$  і  $\varepsilon_{ij}$  – тензори напружень і деформацій,  $T$  і  $s'$  – температура і густина ентропії [8].

Для реальних систем частина роботи зовнішніх сил перетворюється на тепло:

$$\sigma_{ij} \delta \varepsilon_{ij}^n = \delta Q^{in} \equiv T \delta s'', \quad (2.5)$$

де  $s''$  – додаткова ентропія від внутрішніх процесів [8]. Загальний енергетичний баланс для простих тіл виглядає так:

$$du = \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij}^e + T \delta s' + \tilde{T} \delta \tilde{s} + \varphi \delta h, \quad (2.6)$$

де  $\varphi$  і  $h$  – термодинамічні змінні, що характеризують дефектність матеріалу [8].

Умови нерівноважної термодинаміки та теорії фазових переходів Ландау показують зв'язок між конфігураційною ентропією та параметрами порядку, що дозволяє описувати фазові переходи через внутрішню енергію:

$$F = U - TS \quad (2.7)$$

та відповідні еволюційні рівняння:

$$\frac{\partial \tilde{s}_l}{\partial t} = \gamma_{sl} \left( \frac{\partial u}{\partial \tilde{s}_l} - \tilde{T}_{ls} \right), \quad \frac{\partial h_l}{\partial t} = \gamma_{hl} \left( \frac{\partial u}{\partial h_l} - \varphi_{ls} \right) \quad (2.8)$$

де  $\gamma_{sl}$  і  $\gamma_{hl}$  – кінетичні коефіцієнти. Ці рівняння враховують перехресні внески від термодинамічних потоків різної природи [8].

### ***Аналіз закону зміцнювання - знеміцнювання***

Основним структурним дефектом при інтенсивній пластичній деформації (ПД) є межі зерен (МЗ), а дислокації відіграють ключову роль у процесах фрагментації. Закон зміцнення дислокацій в рамках нерівноважної термодинаміки (НЕТ) записується як:

$$\varepsilon^e = \alpha b \sqrt{h_D}, \quad (2.9)$$

де  $\alpha$  – коефіцієнт в інтервалі 0.2 – 1.0,  $\mu$  - модуль зсуву,  $b$  - вектор Бюргерса,  $h_D$  - густина дислокацій. Це співвідношення допомагає встановити взаємозв'язок між процесом формування граничної структури та напруженням.

### ***Двомодова дворівнева модель ПД***

У межах нерівноважної еволюційної термодинаміки розглядається поліноміальна залежність внутрішньої енергії від густини двох типів структурних



дефектів — меж зерен (МЗ) та дислокацій. У термінах дводефектної моделі, що враховує внески густини дефектів до четвертої степені. Визначальна формула виглядає так:

$$u(h_g, h_D) = u_0 + \sum_{m=g,D} \left( \varphi_{0m} h_m - \frac{1}{2} \varphi_{1m} h_m^2 + \frac{1}{3} \varphi_{2m} h_m^3 - \frac{1}{4} \varphi_{3m} h_m^4 \right) + \varphi_{gD} h_g h_D, \quad (2.10)$$

де  $u_0$  представляє базовий рівень внутрішньої енергії, що не залежить від дефектності, та включає лінійні та нелінійні складові залежно від пружних деформацій і є виразом:

$$u_0 = \frac{1}{2} M (\varepsilon_{ii}^e)^2 + 2\mu I_2, \quad (2.11)$$

де  $M$  і  $\mu$  — модулі одностороннього стиснення та Ламе відповідно,  $\varepsilon_{ii}^e$  і  $I_2$  — інваріанти тензора пружних деформацій. Коефіцієнти представляють вплив пружних деформацій, виражаючи процеси генерації та анігіляції дефектів:

$$\varphi_{0m} = \varphi_{0m}^* + g_m \varepsilon_{ii}^e + \left( \frac{1}{2} \bar{M}_m (\varepsilon_{ii}^e)^2 + 2\bar{\mu}_m I_2 \right), \quad (2.12)$$

$$\varphi_{1m} = \varphi_{1m}^* + 2e_m \varepsilon_{ii}^e, \quad (2.13)$$

де  $g_m$  і  $e_m$  є константами, що описують реакцію матеріалу на розтягнення чи стиск, відповідно. Загальний вираз для внутрішньої енергії описує взаємодію між структурними дефектами, інтегруючи як лінійні, так і нелінійні вклади, що впливають на формування та розпад дефектних структур [9].

Розглядаючи енергетичний потенціал для густини внутрішньої енергії, отримаємо еволюційні рівняння для нерівноважних змінних:

$$\tau_{h_m} \frac{\partial h_m}{\partial t} = \frac{\partial \bar{u}}{\partial h_m}, \quad (2.14)$$

де  $\tau_{h_m}$  — часи релаксації відповідних дефектних підструктур, які задають інерційні властивості системи,  $h_m$  — щільність дефектів типу  $m$ ,  $\bar{u}$  — ефективна внутрішня енергія, яка в цьому випадку визначається за формулою:

$$\bar{u} = u - \sum_{m=g,D} \varphi_m^{st} h_m, \quad (2.15)$$

де  $\varphi_m^{st}$  — стаціонарне значення енергії дефектів  $m$ -го типу [9].

Стаціонарні стани визначаються максимумами ефективної внутрішньої енергії. Таким чином, рівняння (2.14) набуває вигляду:

$$\tau_{h_D} \frac{\partial h_D}{\partial t} = \varphi_{0D} - \varphi_{1D} h_D + \varphi_{gD} h_g, \quad (2.16)$$

$$\tau_{h_g} \frac{\partial h_g}{\partial t} = \varphi_{0g} - \varphi_{1g} h_g + \varphi_{2g} h_g^2 - \varphi_{3g} h_g^3 + \varphi_{gD} h_D, \quad (2.17)$$

де стаціонарні значення  $\varphi_m^{st}$  входять у комбінації з лінійним по густині дефектів вкладом, таким чином можна об'єднати з відповідним коефіцієнтом:  $\varphi_{0m} = \varphi_{0m} - \varphi_m^{st}$  ( $m = g, D$ ) [9].

Теорія також враховує пружні та пластичні деформації та представляє деформацію як суму пружної  $\varepsilon_{ij}^e$  та пластичної  $\varepsilon_{ij}^p$  складових:

$$\varepsilon_{ij} = \varepsilon_{ij}^e + \varepsilon_{ij}^p. \quad (2.18)$$

Ця сума відображає здатність матеріалу акумулювати внутрішні структурні дефекти у відповідь на зовнішні механічні впливи, що є ключовим для розуміння процесів фрагментації під час інтенсивної пластичної деформації [9].

### ***Варіації параметрів ІПД***

Модель, що використовується для опису фрагментації металів під час інтенсивної пластичної деформації (ІПД), містить багато параметрів і коефіцієнтів. Ці параметри відіграють важливу роль у визначенні реального процесу фрагментації. Основна мета теорії нерівноважної еволюційної термодинаміки (НЕТ) полягає у створенні узагальненої термодинамічної моделі, яка дозволить якісно моделювати процес обробки металів методом ІПД та отримати результати, що відповідають експериментальним даним.

Однак фізична інтерпретація та встановлення інтервалів зміни основних параметрів теорії все ще мало вивчені. Більшість параметрів є феноменологічними, оскільки складно врахувати всі можливі взаємодії у структурі матеріалу і визначити точні значення величин, що описують ці процеси.

Коефіцієнт  $\varphi_{gD}$  у співвідношенні (2.10) відображає енергію взаємодії між дефектами в системі. Змінну  $\varphi_{0m}$  (де  $m = g, D$ ) можна інтерпретувати як загальну поверхневу густину енергії для відповідного типу дефекту.

Перший доданок  $\varphi_{0m}^*$  у визначенні поліноміальної залежності внутрішньої енергії від густини дефектів (2.12) представляє власну енергію дефектів за

відсутності інших впливів. Для міді під час холодновальцьованої обробки поверхнева енергія МЗ складає приблизно 4 Дж/м<sup>2</sup>, тоді як енергія добре відрелаксованої МЗ – близько 0.4 Дж/м<sup>2</sup>.

Внесок другого доданка  $g_m \varepsilon_{ii}^e$  у полі стискального гідростатичного напруження знижує енергію межі зерен. При пружній деформації  $\varepsilon_{ii}^e = 0.2\%$ , що відповідає напруженню  $\sigma_{ij} \approx 180$  МПа для міді, то значення коефіцієнта  $g_g$  визначається в межах 10% від добре відрелаксованої МЗ (приблизно  $g_g = 12$  Дж/м<sup>2</sup>).

При тому ж рівні пружного тиску (180 МПа), величини  $M_g$  і  $\bar{\mu}_g$  не повинні перевищувати загальну ефективну поверхневу енергію  $\varphi_{0g}$ . Приймаються значення  $\bar{M}_g = 2.5 \times 10^5$  Дж/м<sup>2</sup> і  $\bar{\mu}_g = 3 \times 10^5$  Дж/м<sup>2</sup>. Основна відмінність між коефіцієнтами полягає в тому, що зсувні пружні деформації є більш вагомими у фрагментації металевої структури.

Визначення основних оцінок дислокаційної підструктури проводиться аналогічно. Наприклад, для міді мінімальна надлишкова енергія для дислокації становить  $\varphi_{0D}^* = 5 \times 10^{-9}$  Дж/м, а параметр взаємодії дислокацій та МЗ має значення  $\varphi_{gD} = 10^{-16}$  Дж.

Виходячи з наведеного вище аналізу, для розрахунків було прийнято набір параметрів і коефіцієнтів, які враховують реальні закономірності у процесі обробки металів або сплавів методами ПД. Ці параметри допомагають моделювати процеси формування стаціонарних структур під час інтенсивної пластичної деформації (ПД), забезпечуючи відповідність з експериментальними даними. Ось набір основних параметрів для дводефектної моделі [9]:

$$\begin{aligned}
 M = \mu &= 2.08 \cdot 10^{10} \text{ Па}, \varphi_{0g}^* = 0.4 \text{ Дж} \cdot \text{м}^{-2}, g_g = 12 \text{ Дж} \cdot \text{м}^{-2}, \bar{M}_g = 2.5 \cdot 10^5 \text{ Дж} \cdot \text{м}^{-2}, \\
 \bar{\mu}_g &= 3 \cdot 10^5 \text{ Дж} \cdot \text{м}^{-2}, \varphi_{1g}^* = 3 \cdot 10^{-6} \text{ Дж} \cdot \text{м}^{-1}, e_g = 3.6 \cdot 10^{-4} \text{ Дж} \cdot \text{м}^{-1}, \varphi_{2g} = 5.6 \cdot 10^{-13} \text{ Дж}, \\
 \varphi_{3g} &= 3 \cdot 10^{-20} \text{ Дж} \cdot \text{м}, \varphi_{0D}^* = 5 \cdot 10^{-9} \text{ Дж} \cdot \text{м}^{-1}, g_D = 2 \cdot 10^{-8} \text{ Дж} \cdot \text{м}^{-1}, \bar{M}_D = 0 \text{ Дж} \cdot \text{м}^{-1}, \\
 \bar{\mu}_D &= 1.65 \cdot 10^{-4} \text{ Дж} \cdot \text{м}^{-1}, \varphi_{1D}^* = 10^{-24} \text{ Дж} \cdot \text{м}, e_D = 6 \cdot 10^{-23} \text{ Дж} \cdot \text{м}, \varphi_{gD} = 10^{-16} \text{ Дж}, \\
 \tau_{hD} &= \frac{1}{\gamma_D} = 3^{-1} \cdot 10^{-25} \text{ Дж} \cdot \text{м} \cdot \text{с}, \tau_{hg} = \frac{1}{\gamma_g} = 10^{-6} \text{ Дж} \cdot \text{м}^{-1} \cdot \text{с}
 \end{aligned}$$

## 2.2. Фазова кінетика дводефектної системи

### Фазова діаграма

Враховуючи адіабатне наближення  $\tau_{h_g} \gg \tau_{h_D}$ , зміна густини дислокацій слідує за перетвореннями густини МЗ. Здійснивши відповідні перетворення, отримуємо рівняння типу Ландау-Халатнікова:

$$\tau_{h_g} \frac{\partial h_g}{\partial t} = \frac{\partial V}{\partial h_g}, \quad (2.19)$$

де  $V$  обумовлено термодинамічним потенціалом  $V(h_g) = \int_0^{h_g} F(h'_g) dh'_g$ , в якому функція  $F(h_g)$  визначає поведінку змінної  $h_g$  й задає перетворення густини дефектів до стаціонарного стану [9].

Критичні значення для реалізації стаціонарних розв'язків визначаються з рівняння:

$$\varphi_{3g} h_g^3 - \varphi_{2g} h_g^2 + \left( \varphi_{1g} - \frac{\varphi_{gD}^2}{\varphi_{1D}} \right) h_g - \varphi_{0g} - \varphi_{gD} \frac{\varphi_{0D}}{\varphi_{1D}} = 0 \quad (2.20)$$

Розв'язок цього рівняння може мати три різних стани: два стійких і один нестійкий, що відповідають максимумам і мінімуму ефективного потенціалу. Стійкі стани визначають формування двох різних граничних структур, а нестійкий стан є проміжним.

Щоб визначити критичні значення другого інваріанту, виразимо  $I_2$  з рівняння (2.20), використовуючи коефіцієнти, що залежать від пружних деформацій (2.12):

$$\begin{aligned} I_2 = & -\frac{1}{2(\varphi_{1D}\bar{\mu}_g + \varphi_{gD}\bar{\mu}_D)} \left[ \left( \frac{1}{2}\bar{M}_g\varphi_{1D} + \frac{1}{2}\bar{M}_D\varphi_{gD} \right) (\varepsilon_{ii}^e)^2 + \right. \\ & + (g_g\varphi_{1D} + g_D\varphi_{gD})\varepsilon_{ii}^e + (\varphi_{0g}^*\varphi_{1D} + \varphi_{0D}^*\varphi_{gD}) - \\ & \left. - (\varphi_{1g}\varphi_{1D} - \varphi_{gD}^2)h_g + \varphi_{1D}\varphi_{2g}(h_g^c)^2 - \varphi_{1D}\varphi_{3g}(h_g^c)^3 \right]. \quad (2.21) \end{aligned}$$

Критичні значення реалізації інших розв'язків стаціонарного рівняння визначаємо за допомогою умови існування екстремумів, яка полягає в тому, що перша похідна рівняння (2.20) за  $h_g$  дорівнює нулю:

$$\frac{d}{dh_g} \left( \varphi_{3g} h_g^3 - \varphi_{2g} h_g^2 + \left( \varphi_{1g} - \frac{\varphi_{gD}^2}{\varphi_{1D}} \right) h_g - \varphi_{0g} - \varphi_{gD} \frac{\varphi_{0D}}{\varphi_{1D}} \right) = 0 \quad (2.22)$$

Це дає нам квадратне рівняння:

$$3\varphi_{3g}h_g^2 - 2\varphi_{2g}h_g + \left(\varphi_{1g} - \frac{\varphi_{gD}^2}{\varphi_{1D}}\right) = 0 \quad (2.23)$$

Розв'язки якого дозволяють одержати граничні стаціонарні співвідношення для густини МЗ:

$$h_g = \frac{2\varphi_{2g} \pm \sqrt{4\varphi_{2g}^2 - 12\varphi_{3g}\left(\varphi_{1g} - \frac{\varphi_{gD}^2}{\varphi_{1D}}\right)}}{6\varphi_{3g}} \quad (2.24)$$

На рисунку 2.1 представлено фазову діаграму, що визначає різні режими фрагментації, формуючи чотири області, де кожна характеризується своїм специфічним набором дефектів і зеренних меж. Це дозволяє точніше моделювати процеси фрагментації та передбачати структуру матеріалу після обробки.

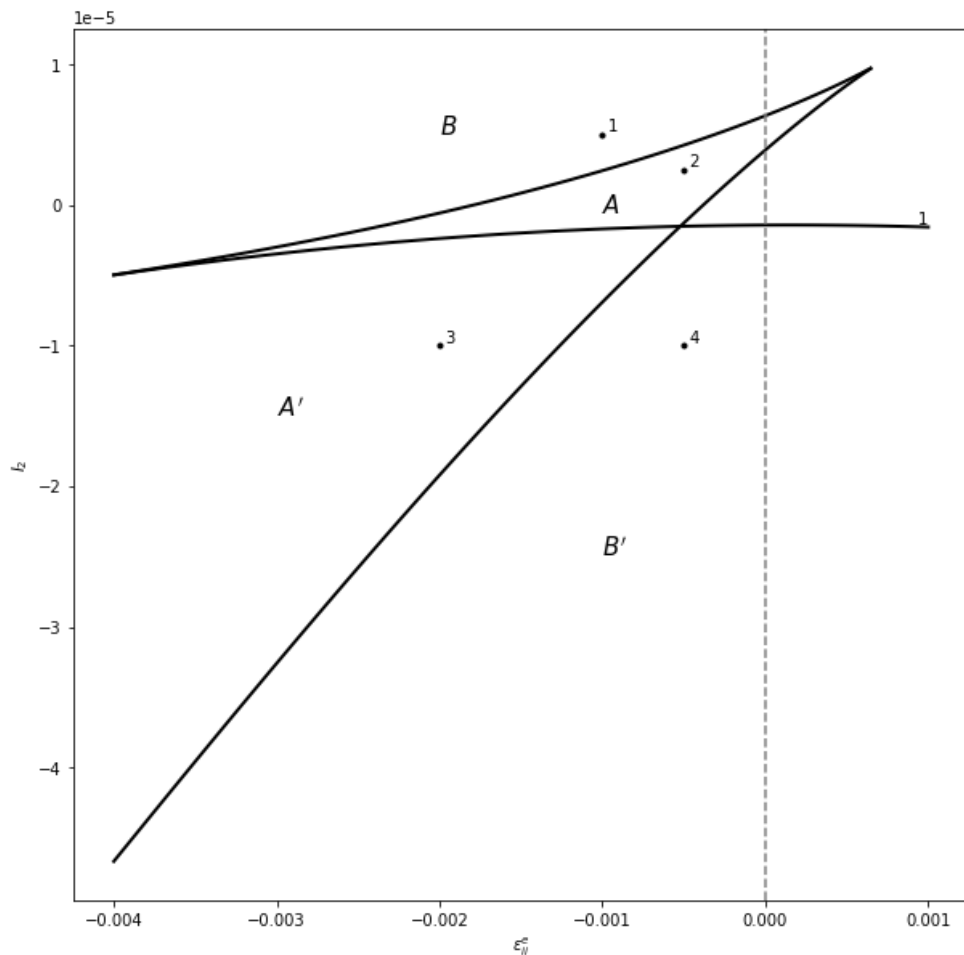


Рисунок 2.1 – Фазова діаграма режимів фрагментації з областями формування двох (А, А') та однієї (В, В') граничних структур

## Вплив часів релаксації на кінетику дводефектної системи

Дослідження кінетики дводефектної системи відкриває, що основні нерівноважні параметри, такі як часи релаксації  $\tau_{h_m}$  (для  $m = g, D$ ), є обернено пропорційними до кінетичних коефіцієнтів. Ці часи релаксації впливають на фазову кінетику, проте не вносять якісних змін, а лише дозволяють розкрити універсальність кінетичної поведінки. [9].

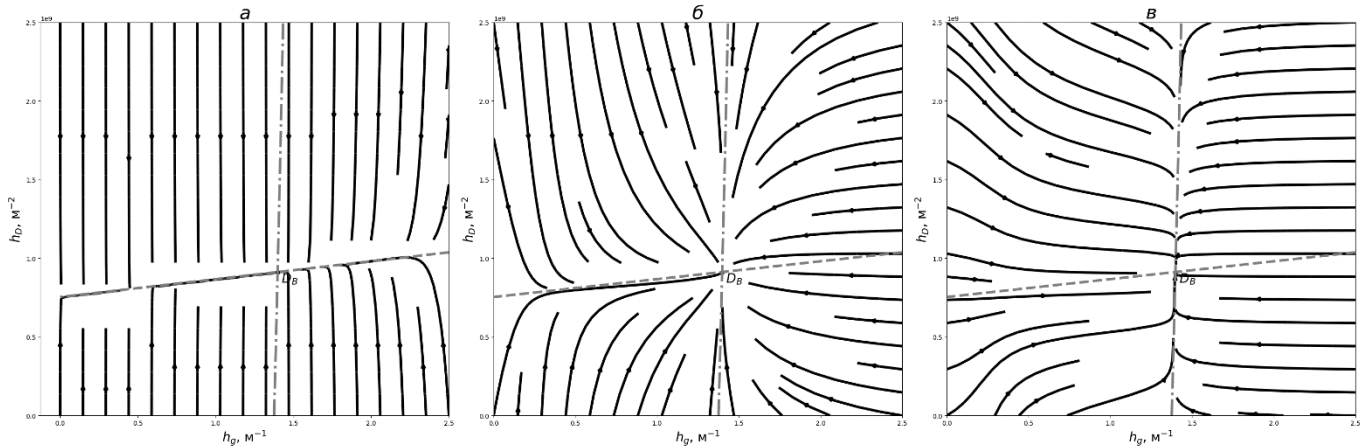


Рисунок 2.2 – Фазові портрети дводефектної системи (2.16), (2.17) за пружних деформацій  $\varepsilon_{ii}^e = -0.1\%$ ,  $I_2 = 5 \cdot 10^{-4}\%$  (точка 1 на рисунку 2.1) та значень часів релаксації: (а)  $\tau_{h_g} > 10^{-1}\tau_{h_D}$ ; (б)  $10^{-1}\tau_{h_g} > \tau_{h_D}$ ; (в)  $10^{-2}\tau_{h_g} > \tau_{h_D}$

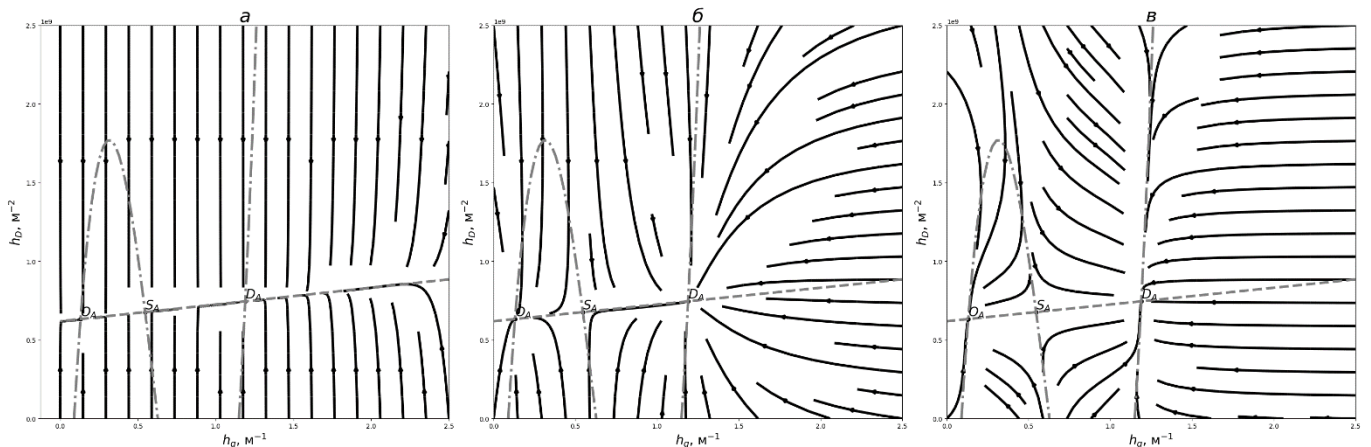


Рисунок 2.3 – Фазові портрети дводефектної системи (2.16), (2.17) за пружних деформацій  $\varepsilon_{ii}^e = -0.05\%$ ,  $I_2 = 2.5 \cdot 10^{-4}\%$  (точка 2 на рисунку 2.1) та значень часів релаксації: (а)  $\tau_{h_g} > 10^{-1}\tau_{h_D}$ ; (б)  $10^{-1}\tau_{h_g} > \tau_{h_D}$ ; (в)  $10^{-2}\tau_{h_g} > \tau_{h_D}$

Фазові портрети на рисунках 2.2 та 2.3 демонструють взаємодію структурних дефектів при різних часах релаксації, зокрема, у рисунку 2.2 великі деформації з зони В з нормальними і зсувними напруженнями приблизно  $-10^{-3}$   $\mu\text{Па}$  і  $2.2 \cdot 10^{-3}$   $\mu\text{Па}$  відповідно. На рисунку 2.3 система реагує на аналогічні напруження з які становлять близько  $-5 \cdot 10^{-4}$   $\mu\text{Па}$  і  $1.6 \cdot 10^{-3}$   $\mu\text{Па}$  з області А.

На цих діаграмах штрихові та штрихпунктирні лінії представляють ізокліни — лінії, уздовж яких фазові траєкторії мають вертикальні чи горизонтальні дотичні. Ізокліни отримано шляхом обернення похідних у рівняннях (2.16) і (2.17) до нуля. Штрихпунктирні криві відображають умови, за яких густина МЗ  $h_g$  залишається незмінною, тоді як штрихові лінії позначають стабільний стан густини дислокацій  $h_D$ . Точки, де ці лінії перетинаються, утворюють стаціонарні стани системи, кількість та стабільність яких залежать від механічної обробки матеріалу.

На рисунку 2.2 спостерігається формування однієї стаціонарної точки  $D_B$ , яка представляє стійкий "вузол" та визначає граничну структуру в той час, як рисунок 2.3 показує три стаціонарні точки: дві стійкі  $O_A$  й  $D_A$  та одну нестійку  $S_A$  [9].

На ранніх етапах обробки матеріалу відбувається швидке накопичення дислокацій, які подальше рекомбінуються і перерозподіляються, сприяючи формуванню більш дрібнозернистої структури через пластичну течію. Важливо також звернути увагу на можливі інші шляхи еволюції структурних дефектів, що вимагає уважного вивчення поведінки системи за різних умов [9].

Зокрема, фазовий портрет на рисунку 2.2 (а) демонструє, що з часом усі фазові траєкторії конвергують до однієї лінійної ділянки. У початковий період густина границь зерен  $h_g$  залишається незмінною, тоді як густина дислокацій  $h_D$  швидко змінюється — зменшується чи збільшується залежно від початкових умов [9]. Це підтверджується даними на кривій рисунку 2.4 (а), де конфігураційна точка швидко переміщується вздовж траєкторії поза лінійною зоною. Коли точка досягає спеціальної зони, її рух різко сповільнюється, особливо при зменшенні значення  $\tau_{h_D}$ .

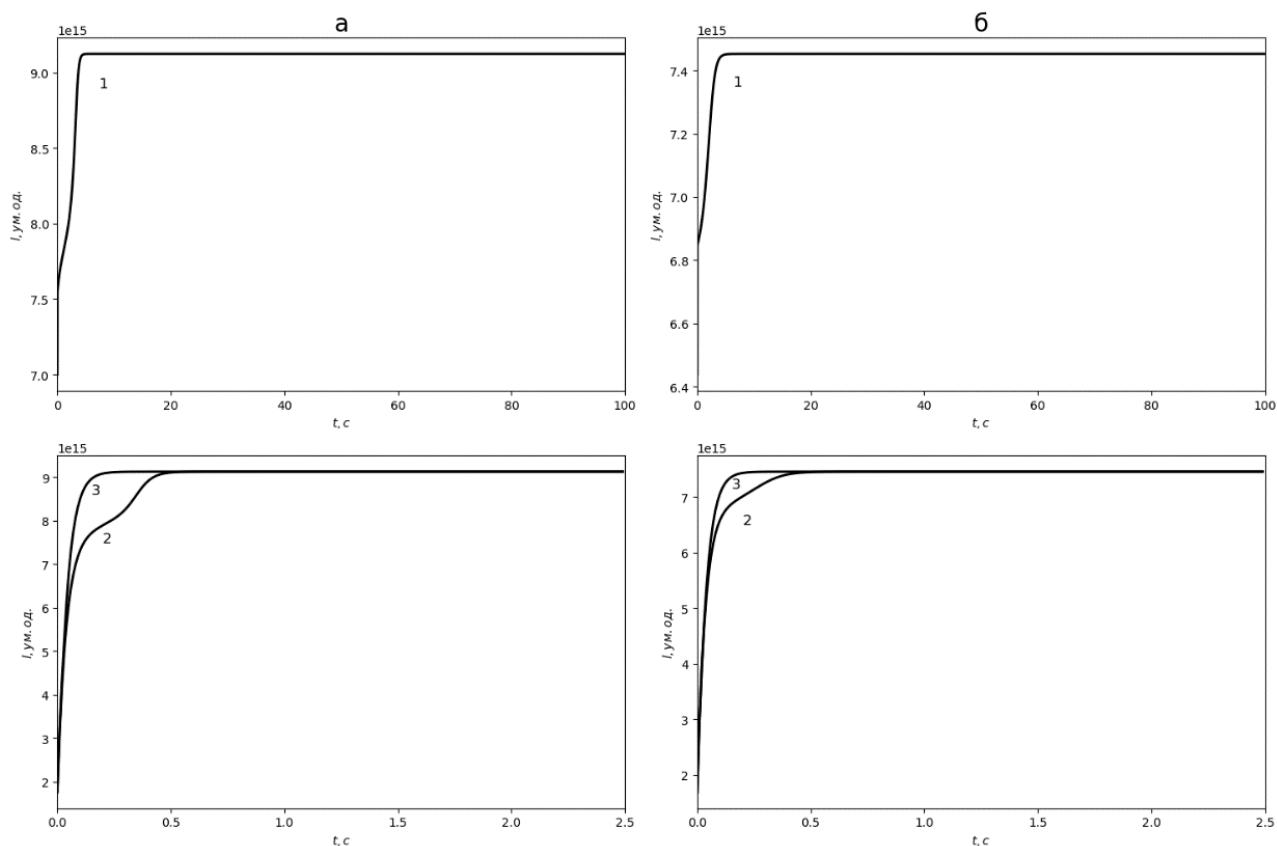


Рисунок 2.4 – Часова залежність пройденого конфігураційною точкою шляху  $l$  по фазовій траєкторії: (а) крива 1 відповідає фазовому портрету на рис. 2.2 (а), крива 2 — рис. 2.2 (б) та крива 3 — рис. 2.2 (в); (б) крива 1 відповідає випадку, представленому на рис. 2.3 (а), крива 2 — рис. 2.3 (б) та крива 3 — рис. 2.3 (в)

Додатково, порівнюючи часову динаміку шляху, що був пройдений, з кінетикою густин структурних дефектів (представлена на кривих 1 і 2 рисунку 2.5), можна відзначити, що процес досягнення стаціонарного стану при зменшенні  $\tau_{h_D}$  до  $10^{-1}$  сповільнюється приблизно в десять разів. Це свідчить про значний вплив параметра  $\tau_{h_D}$  на швидкість руху конфігураційної точки та процесів стабілізації системи [9].

На рисунку 2.2 (б) зображено ситуацію, коли час релаксації для густини дефектів встановлюється на рівні  $10^{-1}\tau_{h_g} > \tau_{h_D}$ , що веде до зміни кінетики нерівноважного параметра  $h_D$  – сповільнення або прискорення  $h_g$ , залежно від контексту. Як показано, особливі ділянки у цьому випадку практично не формуються. Процес фрагментації проходить інтенсивно, і система швидко досягає стабільних стаціонарних станів [9].



Аналізуючи рух конфігураційної точки на кривій 2 рисунка 2.4 (а), можна побачити, що вона спочатку переміщується швидко вздовж фазової траєкторії. Це спричиняє інтенсивне енергетичне "насичення" через підвищення внутрішньої енергії системи. Після досягнення певної критичної концентрації дефектів процес стає значно повільнішим, що сприяє поступовому упорядкуванню кристалічної структури матеріалу. Відзначається, що досягнення стаціонарного режиму в цьому випадку потребує менше часу в порівнянні з ситуаціями, представленими на кривих 1 і 2 рисунку 2.5, що свідчить про більш ефективну адаптацію системи до змінених умов [9].

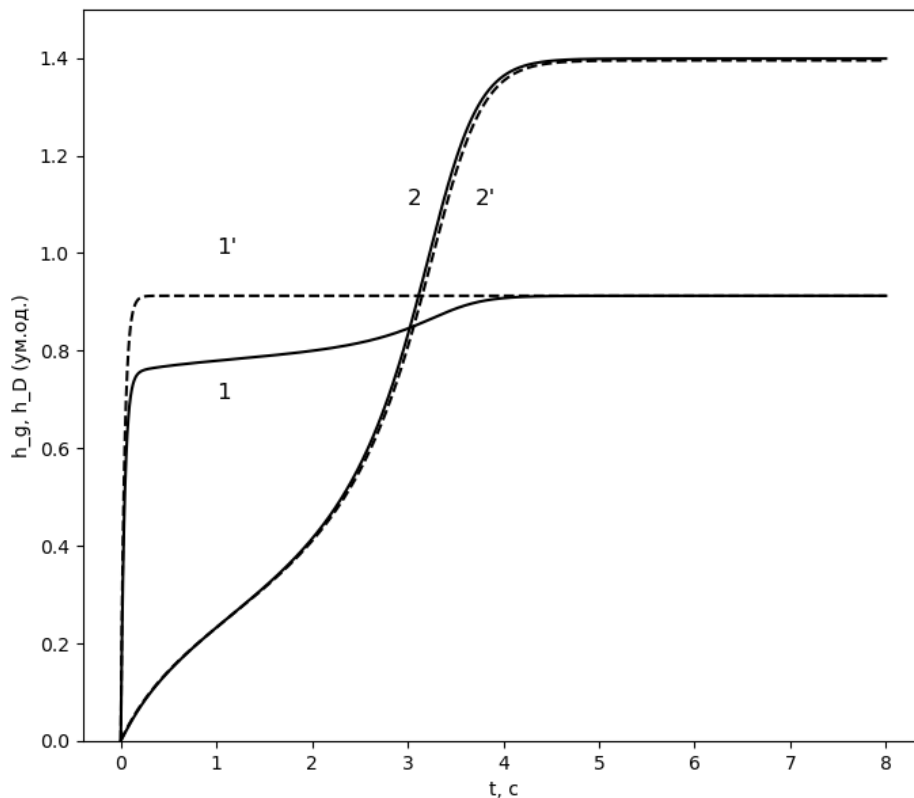


Рисунок 2.5 – Кінетика фрагментації металів під час ПД за значеннями інваріантів:  $\varepsilon_{ii}^e = -0.1\%$ ,  $I_2 = 5 \cdot 10^{-4}\%$ . Крива 1 демонструє еволюцію щільності дислокацій  $h_D(t)$  згідно з (2.16), а крива 2 – зміни  $h_g(t)$  для (2.17) при  $\tau_{h_D} = \gamma_D^{-1} = 3^{-1} \cdot 10^{-25}$  Дж·м·с,  $\tau_{h_g} = \gamma_g^{-1} = 10^{-6}$  Дж·м<sup>-1</sup>·с. Криві 1' і 2' відображають часові залежності в рамках адіабатних наближень  $\tau_{h_D} \gg \tau_{h_g}$  та, відповідно,  $\tau_{h_g} \gg \tau_{h_D}$

На рисунку 2.2 (в) представлена ситуація, коли параметр  $10^{-2}\tau_{h_g}$  значно перевищує  $\tau_{h_D}$ . Це відображається у двоетапному процесі: спочатку швидка релаксація до майже вертикальної лінійної ділянки, яка наближається до штрихпунктирної лінії ізоклін, а потім повільне рухання вздовж цієї ділянки. Ця особлива зона досягається через відносно малі зміни у густині дислокацій  $h_D$  та швидку релаксацію густини зеренних границь  $h_g$ . Якщо початкові умови знаходяться праворуч від штрихпунктирної лінії, настає швидка релаксація  $h_g$ , а якщо  $h_{g0}(t = 0)$  є зліва, спостерігається інтенсивне збільшення густини зеренних границь[9].

Цей процес формування стаціонарного стану займає менше часу, порівняно з процесом, представленим кривою 2 на рисунку 2.4 (а) та еволюцією системи при умовах  $\tau_{h_g} > \tau_{h_D}$  (криві 1 і 2 на рисунку 2.5). Зменшення параметра  $\tau_{h_g}$  до нуля призводить до того, що  $h_D$  залишається стабільним на першій стадії процесу фрагментації, в кінцевому підсумку формуючи виразну майже вертикальну лінійну ділянку, яка повністю збігається з лінією ізоклін, розглядаючи це як приклад зворотного адіабатного наближення  $\tau_{h_D} \gg \tau_{h_g}$  [9].

На рисунку 2.3 (а), де  $\tau_{h_g} > 10^{-1}\tau_{h_D}$ , система швидко еволюціонує до лінійних ділянок, що наближені до штрихової лінії ізоклін, зі стабілізацією значень змінної  $h_g$ . Залежно від розташування початкових умов відносно особливих ділянок, процес досягнення станів може бути динамічним на початковому етапі обробки матеріалу. Зближення до адіабатного кордону  $\tau_{h_D} \rightarrow 0$  як на рисунку 2.2 (а) призводить до затримки у формуванні стаціонарних режимів, що також спостерігається у часовій залежності руху по фазовій траєкторії, представленої кривою 1 на рисунку 2.4 (б). [9].

У випадках, показаних на рисунках 2.3 (б) та (в), де досліджується наближення до зворотного адіабата  $\tau_{h_D} \gg \tau_{h_g}$ , можна помітити значне зменшення параметра  $\tau_{h_g}$ , що супроводжується плавним переходом від майже горизонтальних лінійних ділянок до більш вертикальних. Цей перехід є індикатором того, що час еволюції до

стабільних стаціонарних станів зменшується з наближенням до крайнощів, де  $\tau_{h_g}$  наближається до нуля. Динаміка таких змін відображена на кривих 2 та 3 рисунку 2.4 (б).

На рисунку 2.3 (в) детально показано формування трьох особливих ділянок у фазовій динаміці. Дві з цих ділянок виявляють притягальний характер і описуються як "річище великої ріки", тоді як третя ділянка, яка розділяє квазівертикальні сегменти, має відштовхувальний характер, відомий як "репелер". Фазові траєкторії уникають перетину з цією "репелерною" областю. З подальшим зменшенням  $\tau_{h_g}$ , м вертикальні ділянки поступово збільшуються і в кінцевому підсумку зливаються зі стаціонарною кривою, що відображає майже ідеальний адіабатний режим, де  $\tau_{h_D}$  значно перевищує  $\tau_{h_g}$  [9].

Таким чином, універсальність кінетичної поведінки дводефектної системи виявляється в тому, що незалежно від наближення – чи то прямої  $\tau_{h_g} \gg \tau_{h_D}$ , чи зворотного адіабата  $\tau_{h_D} \gg \tau_{h_g}$  – основні залежності залишаються однаковими. Це демонструється на рисунку 2.5, де система, в рамках різних адіабатних наближень (криві 1' і 2'), еволюціонує до стаціонарних станів, що збігаються за часом з реальними часовими залежностями (криві 1 і 2). Однак спосіб, яким нерівноважні змінні досягають цих станів, може проявляти різку динаміку, зокрема, виявляючи значні переходи [9].

## ВИСНОВОК

1. *Моделювання фазової кінетики:* У рамках дипломної роботи було розроблено математичну модель, яка дозволяє глибоко аналізувати процеси фазової кінетики фрагментації металів. Зокрема, програмування моделей забезпечило точне відтворення взаємодії дислокацій і границь зерен, що є ключовими у визначенні фізико-механічних властивостей металів.

2. *Роль нерівноважної термодинаміки:* Основний акцент був зроблений на фрагментації зерен і висококутових межах, що формуються в результаті деформацій. Використання рівнянь Ландау й еволюційної нерівноважної термодинаміки допомогло в моделюванні динамічних і статичних властивостей фазових переходів. Закони Холла-Петча забезпечили розуміння механізмів зміцнення металів через утворення дислокацій і зменшення розміру зерен до нанорозмірів.

3. *Імітація стаціонарних станів:* Математичні моделі дозволили відтворити умови, за яких матеріал досягає стаціонарних станів, що кореспондують із теоретичними прогнозами про максимуми внутрішньої енергії, підтверджуючи чинні теорії й моделі. Аналіз фазових діаграм і динаміки фазових переходів дав змогу визначити умови, за яких можлива оптимізація властивостей матеріалів. Також, важливу роль відіграли параметри релаксації, що впливають на кінетику процесів і дають можливість контролювати фрагментацію на різних стадіях деформації.

4. *Аналіз програмно описаних фізичних процесів:* Всі процеси, що були моделюванні програмно, відповідають заздалегідь визначеним параметрам і підтверджують вже відомі закономірності взаємодії висококутових меж зерен і дислокацій, які сприяють зміцненню металів.

## ПЕРЕЛІК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Review: modes and processes of severe plastic deformation (SPD). MDPI. URL: <https://www.mdpi.com/1996-1944/11/7/1175> (дата звернення: 10.04.2024).
2. Giuliano G. Superplastic forming of advanced metallic materials. Woodhead Publishing Limited, 2011. URL: <https://doi.org/10.1533/9780857092779> (дата звернення: 31.05.2024).
3. Карабасова Ю.С. Новые материалы. МИСИС, 2002. 736 с.
4. Metals. MDPI - Publisher of Open Access Journals. URL: <https://www.mdpi.com/si/76008> (дата звернення: 31.05.2024).
5. Cavaliere, P. & Panella, F. & Suresh, S.. Gue crack behavior of ultra fine grain pure metals produced via severe plastic deformation, 2008.
6. Structure Refinement and Fragmentation of Precipitates under Severe Plastic Deformation: A Review. MDPI. URL: <https://www.mdpi.com/1448894> (дата звернення: 31.05.2024).
7. Metals. MDPI - Publisher of Open Access Journals. URL: <https://www.mdpi.com/si/130679> (дата звернення: 31.05.2024).
8. Трощенко Д. С.. Нерівноважна еволюційна термодинаміка фрагментації металів з урахуванням стохастичності : thesis. 2018. URL: <http://essuir.sumdu.edu.ua/handle/123456789/67849> (дата звернення: 31.05.2024).
9. Khomenko O. V., Troshchenko D. S., Metlov L. S. Modelling of kinetics of modes of a fragmentation of materials at a severe plastic deformation. Metallofizika i noveishie tekhnologii. 2017. Vol. 39, no. 2. P. 265–284. URL: <https://doi.org/10.15407/mfint.39.02.0265> (date of access: 13.12.2023).
10. О.В. Хоменко, Інтенсивна пластична деформація: методи та математичні моделі формування наноматеріалів // Журнал фізичних досліджень. – 2020. – Т. 24, № 2. 2001(20 с.)
11. Porter D. A., Porter D. A., Easterling K. Phase transformations in metals and alloys. Chapman & Hall, 1992.

## ДОДАТОК А

Код 2.1 – Фазова діаграма режимів фрагментації

Цей розділ містить код для побудови фазової діаграми режимів фрагментації з областями формування двох (А, А') та однієї (В, В') граничних структур.

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

# Параметри моделі
phi_0g_star, g_g, M_bar_g, mu_bar_g = 0.4, 12, 2.5e5, 3e5
phi_1g_star, e_g, phi_2g, phi_3g = 3e-6, 3.6e-4, 5.6e-13, 3e-20
phi_0D_star, g_D, M_bar_D, mu_bar_D = 5e-9, 2e-8, 0, 1.65e-4
phi_1D_star, e_D, phi_2D, phi_3D = 1e-24, 6e-23, 0, 0
phi_gD, tau_h_D, tau_h_g = 1e-16, 3**(-1) * 1e-25, 1e-6

def phi_1m(epsilon_ii_e, phi_1m_star, e_m):
    return phi_1m_star + 2 * e_m * epsilon_ii_e

def h_g(phi_1g, phi_1D):
    discriminant = 4 * phi_2g**2 - 12 * phi_3g * (phi_1g - (phi_gD**2) / phi_1D)
    if discriminant < 0:
        return np.nan, np.nan, 0
    sqrt_discriminant = np.sqrt(discriminant)
    h_g_plus = (2 * phi_2g + sqrt_discriminant) / (6 * phi_3g)
    h_g_minus = (2 * phi_2g - sqrt_discriminant) / (6 * phi_3g)
    return h_g_plus, h_g_minus, 0

def I_2(h_g, phi_1g, phi_1D):
    numerator = (0.5 * M_bar_g * phi_1D + 0.5 * M_bar_D * phi_gD) *
    epsilon_ii_e**2 + \
        (g_g * phi_1D + g_D * phi_gD) * epsilon_ii_e + \
```

```

    phi_0g_star * phi_1D + phi_0D_star * phi_gD - \
    (phi_1g * phi_1D - phi_gD**2) * h_g + \
    phi_1D * phi_2g * h_g**2 - phi_1D * phi_3g * h_g**3
denominator = 2 * (phi_1D * mu_bar_g + phi_gD * mu_bar_D)
return -numerator / denominator if denominator != 0 else np.nan

```

```
epsilon_ii_e_vals = np.linspace(-0.004, 0.001, 100)
```

```
I_2_plus_vals, I_2_minus_vals, I_2_zero_vals = [], [], []
```

```
for epsilon_ii_e in epsilon_ii_e_vals:
```

```

    phi_1g = phi_1m(epsilon_ii_e, phi_1g_star, e_g)
    phi_1D = phi_1m(epsilon_ii_e, phi_1D_star, e_D)
    h_g_plus, h_g_minus, h_g_zero = h_g(phi_1g, phi_1D)
    I_2_plus_vals.append(I_2(h_g_plus, phi_1g, phi_1D))
    I_2_minus_vals.append(I_2(h_g_minus, phi_1g, phi_1D))
    I_2_zero_vals.append(I_2(h_g_zero, phi_1g, phi_1D))

```

```
plt.figure(figsize=(10, 10))
```

```
plt.plot(epsilon_ii_e_vals, I_2_plus_vals, 'k-', linewidth=2, label='$h_g^{+}$')
```

```
plt.plot(epsilon_ii_e_vals, I_2_minus_vals, 'k-', linewidth=2, label='$h_g^{-}$')
```

```
plt.plot(epsilon_ii_e_vals, I_2_zero_vals, 'k-', linewidth=2, label='$h_g^0$')
```

```
plt.axvline(x=0, color='gray', linestyle='dashed')
```

```
plt.text(epsilon_ii_e_vals[-1], I_2_zero_vals[-1], '$ 1$', verticalalignment='bottom',
horizontalalignment='right')
```

```
plt.annotate('$B$', xy=(-0.002, 0.5e-5), fontsize=15)
```

```
plt.annotate('$A\$', xy=(-0.003, -1.5e-5), fontsize=15)
```

```
plt.annotate('$A$', xy=(-0.001, -0.05e-5), fontsize=15)
```

```
plt.annotate('$B\$', xy=(-0.001, -2.5e-5), fontsize=15)
```

```
special_points_epsilon = [-0.001, -0.0005, -0.002, -0.0005]
```

```
special_points_I2 = [5e-6, 2.5e-6, -1e-5, -1e-5]
```

```

for idx, (e, I2) in enumerate(zip(special_points_epsilon, special_points_I2)):
    plt.plot(e, I2, 'k.')
    plt.text(e, I2, f' ${idx+1}$', color='black', verticalalignment='bottom')

plt.xlabel('\epsilon^e_{ii}$')
plt.ylabel('$I_2$')
plt.show()

```

### Код 2.2 – Фазові портрети дводефектної системи

Цей розділ містить код для побудови фазових портретів системи за різних значень часу релаксації та параметрів деформації.

```

import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from scipy.optimize import fsolve

# Параметри моделі
phi_0g_star, g_g, M_bar_g, mu_bar_g = 0.4, 12, 2.5e5, 3e5
phi_1g_star, e_g, phi_2g, phi_3g = 3e-6, 3.6e-4, 5.6e-13, 3e-20
phi_0D_star, g_D, M_bar_D, mu_bar_D = 5e-9, 2e-8, 0, 1.65e-4
phi_1D_star, e_D, phi_2D, phi_3D = 1e-24, 6e-23, 0, 0
phi_gD, tau_hD, tau_hg = 1e-16, 3**(-1) * 1e-25, 1e-6

epsilon_ii_e, I_2 = -0.001, 0.05e-4
scale_g, scale_D = 1e7, 1e7

def phi_0m(epsilon_ii_e, I_2, phi_0m_star, g_m, M_bar_m, mu_bar_m):
    return phi_0m_star + g_m * epsilon_ii_e + (0.5 * M_bar_m * epsilon_ii_e**2 +
2 * mu_bar_m * I_2)

```



```
def phi_1m(epsilon_ii_e, phi_1m_star, e_m):
```

```
    return phi_1m_star + 2 * e_m * epsilon_ii_e
```

```
phi_0g = phi_0m(epsilon_ii_e, I_2, phi_0g_star, g_g, M_bar_g, mu_bar_g)
```

```
phi_0D = phi_0m(epsilon_ii_e, I_2, phi_0D_star, g_D, M_bar_D, mu_bar_D)
```

```
phi_1g = phi_1m(epsilon_ii_e, phi_1g_star, e_g)
```

```
phi_1D = phi_1m(epsilon_ii_e, phi_1D_star, e_D)
```

```
def dhg_iso(H_g, H_D):
```

```
    return (phi_0g - phi_1g * H_g * scale_g + phi_2g * (H_g * scale_g)**2 - phi_3g * (H_g * scale_g)**3 + phi_gD * H_D * scale_D)
```

```
def dhD_iso(H_g, H_D):
```

```
    return (phi_0D - phi_1D * H_D * scale_D + phi_gD * H_g * scale_g)
```

```
def equations(p):
```

```
    h_g, h_D = p
```

```
    eq1 = phi_0D - phi_1D * h_D * scale_D + phi_gD * h_g * scale_g
```

```
    eq2 = phi_0g - phi_1g * h_g * scale_g + phi_2g * (h_g * scale_g)**2 - phi_3g * (h_g * scale_g)**3 + phi_gD * h_D * scale_D
```

```
    return (eq1, eq2)
```

```
initial_guess = (1.4, 0.91e9)
```

```
h_g_st, h_D_st = fsolve(equations, initial_guess)
```

```
w_g, w_D = 2.5, 2.5e9
```

```
H_D, H_g = np.mgrid[0:w_D:100j, 0:w_g:100j]
```

```
def plot_phase_portrait(ax, tau_hg, tau_hD, title):
```

```
    dh_g_dt = (phi_0g - phi_1g * H_g * scale_g + phi_2g * (H_g * scale_g)**2 - phi_3g * (H_g * scale_g)**3 + phi_gD * H_D * scale_D) / tau_hg
```

```
dh_D_dt = (phi_0D - phi_1D * H_D * scale_D + phi_gD * H_g * scale_g) /  
tau_hD
```

```
ax.streamplot(H_g, H_D, dh_g_dt, dh_D_dt, density=0.8, linewidth=2,  
color='black')
```

```
ax.plot(h_g_st, h_D_st, 'ko')
```

```
ax.text(h_g_st, h_D_st, f' $D_B$', color='black', verticalalignment='top',  
fontsize=15)
```

```
ax.contour(H_g, H_D, dhg_iso(H_g, H_D), levels=[0], colors='gray',  
linestyles='dashed')
```

```
ax.contour(H_g, H_D, dhD_iso(H_g, H_D), levels=[0], colors='gray',  
linestyles='dashed')
```

```
ax.set_xlabel('$h_g$, m$^{-1}$')
```

```
ax.set_ylabel('$h_D$, m$^{-2}$')
```

```
ax.set_title(title)
```

```
fig, axes = plt.subplots(1, 3, figsize=(30, 10))
```

```
plot_phase_portrait(axes[0], tau_hg, tau_hD * 1e-1, title='$a$')
```

```
plot_phase_portrait(axes[1], tau_hg * 1e-1, tau_hD, title='$\zeta$')
```

```
plot_phase_portrait(axes[2], tau_hg * 1e-2, tau_hD, title='$B$')
```

```
plt.tight_layout()
```

```
plt.show()
```