

Міністерство освіти і науки України  
Сумський державний університет

Хоменко О. В., Гончаров О. А.

## **МОДЕЛЮВАННЯ НЕЛІНІЙНИХ ПРОЦЕСІВ ТА СИСТЕМ**

Навчальний посібник

Рекомендовано вченого радою Сумського державного університету

Суми  
Сумський державний університет  
2023

УДК 577.3(075.8)

Д 24

Рецензенти:

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

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

*Рекомендовано до видання  
вченого радою Сумського державного університету  
як навчальний посібник  
(протокол № ?? від 25 квітня 2023 року)*

**Хоменко О. В.**

Д 24

Моделювання нелінійних процесів та систем:  
навчальний посібник / О. В. Хоменко, О. А. Гончаров.  
– Суми : Сумський державний університет, 2023. – 195 с.  
ISBN ...

Посібник присвячений теорії і методології нелінійних процесів та моделей. Він охоплює такі методи аналізу: метод фазової площини, розв'язання нелінійних диференціальних рівнянь та їх систем, в тому числі стохастичних, числові методи тощо. Посібник може бути корисний студентам та аспірантам, науковим співробітникам, математикам, фізикам та інженерам.

УДК 577.3(075.8)

©Хоменко О. В., Гончаров О. А., 2023  
©Сумський державний університет, 2023

ISBN...

## ЗМІСТ

	C.
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 Головні 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– Ферхольста . . . . .	32
1.2.3 Модель генного відбору Арнольда, Хорстхемке, Ле– февра . . . . .	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	45
1.2.5.2 Синергетичний перехід при мультиплікативному шумі . . . . .	46
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 і керуваль– ного параметра . . . . .	52

<b>РОЗДІЛ 2. ЕВОЛЮЦІЯ ІЄРАРХІЧНОЇ СИСТЕМИ</b>	<b>55</b>
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
<b>РОЗДІЛ 3. НЕЛІНІЙНА МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ МЕЖОВОГО ТЕРТЯ</b>	<b>67</b>
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 і 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 флюктуацій температури на плавлення плівки мастила	96
3.7.1 Представлення кольорового шуму і 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 Врахування деформаційного дефекту модуля зсуву .	115
3.7.4.1 Динамічна фазова діаграма . . . . .	116
3.7.4.2 Фазова кінетика . . . . .	119

3.8 Гістерезисні явища при залежності модуля зсуву від деформації	121
3.8.1 Гістерезисні явища при фазовому переході другого роду . . . . .	121
3.8.1.1 Стрибкоподібне плавлення . . . . .	121
3.8.1.2 Безперервне перетворення . . . . .	127
3.8.1.3 Фазова кінетика . . . . .	128
3.8.2 Гістерезисні явища при фазовому переході першого роду . . . . .	133
3.8.2.1 Стрибкоподібне плавлення . . . . .	133
3.8.2.2 Фазова кінетика . . . . .	135
3.9 Багатовимірний термодинамічний потенціал для опису плавлення ультратонкої плівки мастила	138
3.9.1 Основні рівняння . . . . .	138
3.9.2 Сила тертя . . . . .	143
3.9.3 Трибологічна система . . . . .	147

<b>РОЗДІЛ 4. АТОМІСТИЧНЕ ПРЕДСТАВЛЕННЯ МЕЖОВОГО ТЕРЯ</b>	<b>153</b>
4.1 Властивості тонких плівок рідин, обмежених твердими поверхнями	153
4.2 Модель молекулярної динаміки ультратонкого шару води, стиснутого між жорсткими алмазними поверхнями	155
4.2.1 Загальна схема комп’ютерного експерименту . . . . .	155
4.2.2 Модель води . . . . .	158
4.2.3 Рівняння руху . . . . .	160
4.2.4 Контроль температури . . . . .	162
4.2.5 Особливості вимірювань . . . . .	164
4.3 Результати обговорення	165
4.3.1 Плівка води між гладенькими поверхнями . . . . .	165
4.3.2 Плівка води між поверхнями із періодичним атомарним рельєфом . . . . .	172

РОЗДІЛ 5. ТЕРМОДИНАМІЧНЕ ПРЕДСТАВЛЕННЯ ФРАГМЕНТАЦІЇ МЕТАЛІВ	177
5.1 Основні поняття і співвідношення	177
5.2 Фазова діаграма	182
5.3 Кінетика встановлення стаціонарного значення густини енергії дефектів	188
5.3.1 Часові залежності . . . . .	188
5.3.2 Координати $\varphi - \dot{\varphi}$ . . . . .	191
СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ	194

## ПЕРЕДМОВА

В останні десятиріччя нові концепції та парадигми надали математиці та теоретичній фізиці вид, що ледве дізнається, завдяки переключенню інтересу від лінійних до нелінійних моделей та явищ. Вихідно з цього, коли аналітичні засоби, хоча доповнені топологічними та алгебраико-геометричними методами, ставали безсильними, на допомогу стали приходити прямі числові методи, що реалізуються на комп’ютерах, доступних зараз практично кожному. Все це вдохнуло життя в багато, як здається, формальних побудов попередників та відкрило нові горизонти. Ця ера не обійшла багатством результатів математики та фізики фазових переходів. Й якщо раніше переважало вивчення статичної та термодинамічної сторін проблеми, то зараз все більш глибоким становиться опис кінетики фазових перетворень й не тільки на феноменологічному, але й мікрокопічному рівні. До цього фундаментального напряму в математиці та фізиці примикає даний навчальний посібник.

Актуальність посібнику придає також свідоме підкреслення в ньому синергетичної парадигми, що сформульована на початку 70-х років Хакеном [1]. За крайньою мірою можливості синергетики як загальної теорії самоорганізації в кінетичних системах до кінця ще не зрозумілі, та ця обставина також підкреслює живі та 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 в свій час (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 не універсальну ділянку. Проведений аналіз відрізняє те, що врахування шумів дає змогу побудувати функції розподілу параметрів порядку та фазові діаграми різних моделей.

В розділі 2 досліджено макроскопічні особливості структурних перетворень у рамках подання про ієархічно підпорядковані структури. Це уявлення ґрунтуються на концепції ультраметричного простору, в якому неможливо побудувати трикутник із усіма різними сторонами. Відповідний формалізм, що становить основу подальшого викладу, пропонує рівняння, що дозволяє знайти різні види розподілу ймовірності за ієархічними рівнями. Ієархічний процес структурної релаксації, розглянутий у розділі, передбачає, що нижній рівень відповідає однорідним об'ємам; переход на наступний рівень означає зміщення в ультраметричному просторі та відповідає об'єднанню цих об'ємів у кластери; останні, у свою чергу, об'єднуються в суперкластери наступного рівня ієархії тощо – до повного об'єму зразка. В результаті розподіл атомів ієархічної структури представляється у виді розвинення за ультраметричним простором.

В розділі 3 розвинуту 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 флюктуацій температури. Досліджено фазову кінетику та часові ряди. Проведено дослідження гістерезису, який виникає при плавленні. Встановлено умови реалізації стрибкоподібного та безперервного плавлення при переходах 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 вивченням властивостей ультратонкої плівки води, яка складається із одного або двох шарів молекул й обмеже-

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

Наведений в розділі 5 розгляд, що базується на принципах теорії фазових переходів Ландау, дає цілісну картину фрагментації твердих тіл у процесі ПД. 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 із існуванням однієї стаціонарної структури та дві з існуванням двох. Встановлено, 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 рамках адіабатичного наближення за допомогою аналізу кінетично-го рівняння типу Ландау–Халатнікова отримано 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, що описує їх внутрішні властивості [2–7]. Зокрема, при утворенні просторово-періодичних структур твердих розчинів ступінь впорядкування визначається параметрами дальнього порядку, при переходах магнетик – немагнітний матеріал і рідина – газ роль параметрів порядку відіграють відношення спонтанної намагніченості до її максимального значення і густота середовища відповідно (у останніх двох випадках 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 невпорядкованої фази  $F_0$  і параметри  $A, B, D$  є функціями температури  $T$ , що плавно змінюються з нею. Останній доданок в правій частині (1.1) враховує наявність поля  $h$ , спряженого параметру порядку  $\eta$ . Для твердих розчинів, що упорядковуються, де параметр порядку визначає дальній порядок в чергуванні атомів різного сорту, спряжене поле дорівнює різниці хімічного потенціалу компонент. Якщо параметр порядку відповідає спонтанної намагніченості, то спряжене поле зводиться до магнітної індукції.

Розглянемо випадок, коли параметр фазового перетворення  $\eta$  є однокомпонентним і дійсним. При великих температурах залежність зміни вільної енергії  $\Delta F = F - F_0$  від параметра порядку  $\eta$  має монотонно зростаючий характер з мінімумом в точці  $\eta = 0$ , що від-

повідає невпорядкованому 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 невпорядкований ( $\eta = 0$ ) 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  $\eta = \eta_e$ .

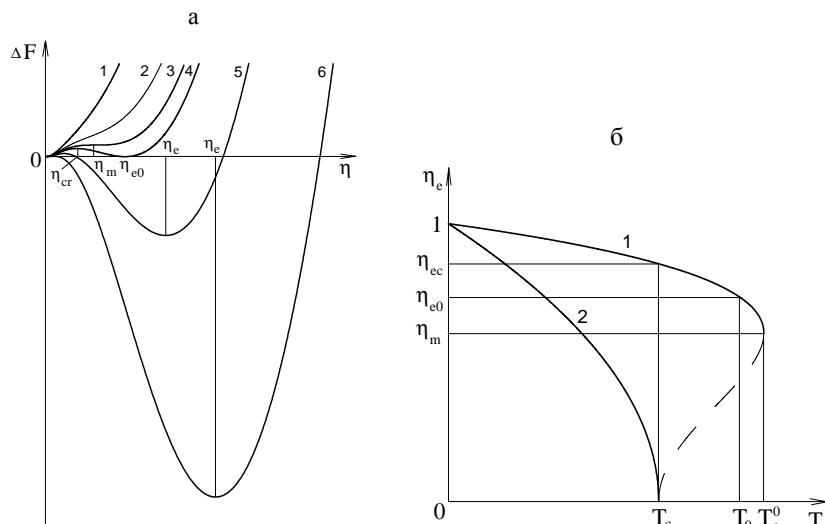


Рисунок 1.1 — а — вид залежності зміни вільної енергії при упорядкуванні від параметра порядку при різних температурах: 1 —  $T > T_c^0$ ; 3 —  $T = T_c^0$ ; 4 —  $T = T_c$ ; 5 —  $T_c < T < T_c$ ; 6 —  $T \leq T_c$ ; б — температурна залежність рівноважного параметра порядку при фазових переходах першого (1) і другого (2) родів (суцільна крива відповідає стійкому стану  $\eta_e$ , штрихова — нестійкому  $\eta_{cr}$ )

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

раметри розвинення у вигляді

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

вкажемо основні особливості температурної залежності величин при фазових переходах. 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 з подальшим зменшенням  $T$  у мінімум, відокремлений від точки  $\eta = 0$  бар'єром кінцевої висоти. Для кривої 3 зміна вільної енергії, що відповідає мінімуму, що з'являється, перевищує відповідне точці  $\eta = 0$ , тобто впорядкована фаза термодинамічно невигідна. 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 при значенні  $\eta = \eta_e$ , відповідному точці мінімуму (див. криву 4), впорядкована фаза стає стабільною. Залежність, зображеня кривою 6 на рисунку 1.1а, здійснюється при температурах, що не перевищують величину  $T_c$  і отже, що визначає точку втрати стійкості невпорядкованої фази. Для фазових переходів другого роду вона рівна 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  $\eta_e$  від 1 до 0, то у разі переходів першого роду до температури  $T_c^0$  відбувається плавне зменшення, а потім різкий стрибок від значення  $\eta_m$  до нуля. На залежності  $\Delta F(\eta)$  така поведінка відбувається зникненням мінімуму при  $T > T_c^0$ . У випадку переходу першого роду впорядкування з пониженням температури відбувається при  $T = T_c$  із стрибком параметра порядку  $\eta_{ec} = \sqrt{2}\eta_m$ , а розупорядкування при нагріві – у точці  $T_0$  (відповідний стрибок параметра порядку  $\eta_{e0} = \sqrt{3/2}\eta_m$ ). Проте, як указувалося вище, метастабільна впорядкована фаза може існувати до температури  $T_c^{01}$ ). Таким чином, при переходах 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 з рівноваги в результаті накачування в них надмірної енергії [3, 4]. У таких системах можливі якісні зміни поведінки мікрорівня, що носять колективний характер (наприклад, когерентне випускання електромагнітних хвиль заздалегідь збудженою системою електронів в лазері). В рамках синергетичної теорії кількісний опис вказаного переходу був здійснений в роботах Хакена. Лазерна модель з'явила-  
ся першим прикладом дослідження кооперативного перетворення при переході 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 ввести одну змінну – параметр порядку, *що задає густину бозе-конденсату хиггсова поля* – то для опису сильно нерівноважних систем необхідно використовувати три змінні: заселеність одночастковими збудженнями збудженого і незбудженого станів, *хиггсово поле*, що визначає колективну моду, і спряжене йому поле. У лазері роль вказаних змінних належить відповідно різниці заселеностей

---

<sup>1)</sup> Така поведінка реалізується при дуже швидкій зміні температури.

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 обумовлюється когерентним перерозподілом електронів між молекулярними рівнями.

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

Початковою посилюючою нашого підходу є синергетична концепція, в рамках якої фазовий переход 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 з 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 і представляє фазовий переход.

З математичної точки зору найбільш проста схема опису системи, що самоорганізується, представляється відомою схемою Лоренца [3, 4]. Вона представляє три диференціальні рівняння, що виражают швидкості  $\dot{\eta}$ ,  $\dot{h}$ ,  $\dot{S}$  зміни величин  $\eta$ ,  $h$ ,  $S$  через їх значення. Характерна особливість цих виразів полягає в тому, що всі вони містять дисипативні доданки, величини яких обернено пропорційні відповідним часам релаксації  $\tau_\eta$ ,  $\tau_h$ ,  $\tau_S$ . Зазвичай при дослідженні термодинаміки фазового переходу приймається адіабатичне наближення  $\tau_h, \tau_S \ll \tau_\eta$ , що 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]. При цьому еволюція системи описується рівнянням Ландау–Халатнікова, в якому роль вільної енергії відіграє синергетичний потенціал. В 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. Таким чином, величина  $S$  не зводиться до температури. Крім того, якщо для термодинамічних систем температура середовища збігається з її значенням для терmostата, то для синергетичних від'ємний зворотний зв'язок між параметром порядку і спряженим полем, що відображає принцип Ле–Шательє, знижує стаціонарне значення керувального параметра в порівнянні з його величиною, що фіксується зовнішньою дією. На відміну від термодинаміки у 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 і система Лоренца приймає вигляд [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  $t$ ;  $\tau_\eta, \tau_h, \tau_S$  – часи релаксації параметра порядку  $\eta$ , спряженого поля  $h$  і керувального параметра  $S$ ;  $A_\eta, A_h, A_S$  – додатні константи зв'язку;  $S_e$  – параметр зовнішньої дії. Характерна особливість системи (1.5) – (1.7) полягає у 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  $\eta S$  в (1.6) – додатний зворотний зв’язок параметра порядку і керувального параметра із спряженим полем, який є причиною са-моорганізації.

При виконанні 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)  $\dot{h} = 0, \dot{S} = 0$ . В результаті отримуємо 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 і керувальний параметр через параметр порядку. При  $\eta \ll \eta_m$  співвідношення (1.8) носить 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, котрий відповідає від’ємній сприйнятливості  $\chi \equiv d\eta/dh$  і не має фізичного сенсу. Звідси випливає, що стала  $\eta_m$ , 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 спадаючий 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  $S_e$  менше критичного значення  $S_c$ , визначеного рівністю (1.13), то залежність  $V(\eta)$  має монотонно зростаючий вигляд з мінімумом у точці  $\eta_0 = 0$  (див. рис. 1.2а). При цьому

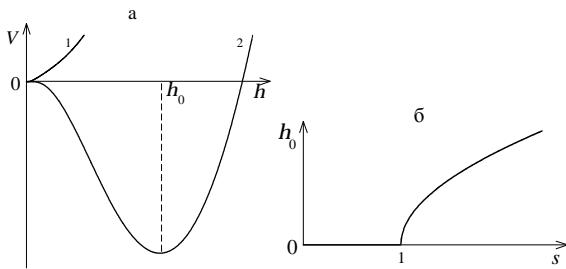


Рисунок 1.2 — а — залежність синергетичного потенціалу від параметра порядку для фазового переходу другого роду при різних значеннях параметра накачування  $S_e$  (крива 1 відповідає  $S_e < S_c$ , крива 2 —  $S_e > S_c$ ); б — залежність стаціонарного значення параметра порядку від  $s \equiv S_e/S_c$

система не впорядковується. У закритичній області  $S_e > S_c$  синергетичний потенціал набуває мінімум при ненульовому значенні параметра порядку<sup>2)</sup>

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

Як видно з рисунку 1.2б, стаціонарне значення параметра порядку  $\eta_0$  зростає кореневим чином при закритичному значенні параметра зовнішньої дії  $s > 1$ . При різкому переході системи в область  $s > 1$  вона за час

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

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

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

---

<sup>2)</sup> Оскільки величина  $\eta_0$  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

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

Враховуючи його в рівняннях (1.5) і (1.7), що залишилися, і використовуючи масштаби  $\eta_m, S_e, \tau_\eta$  для вимірювання параметра порядку, керувального параметра і 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 з яких визначає ступінь збудження системи, а другий – співвідношення характерних часів релаксації керувального параметра і параметра порядку. У граници  $\tau \ll 1$  права частина в (1.19) набуває настільки великих значень, що зліва можна покласти  $\dot{S} = 0$ , і після підстановки отриманої залежності (1.9) в (1.18) ми приходимо до розглянутого вище адіабатичного наближення, що представляється рівностями (1.11)–(1.13).

Оскільки аналітично отримати точні залежності  $\eta(t), S(t)$  з 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 траекторій), сукупність яких з різними початковими координатами визначає фазовий портрет системи. Точний його вигляд знайдемо шляхом числового інтегрування системи рівнянь (1.18), (1.19) методом Рунге–Кутта 4-го порядку точності.

Розділивши почленно рівняння (1.18) на (1.19), отримуємо 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, в 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  $D(S_e, 0), O(S_c, \eta_0)$  з координатами  $S = S_e, \eta = 0$  і  $S = S_c, \eta = \eta_0$  відповідно, де  $\eta_0$  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 отримуємо 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  $\lambda_D$

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

розв'язки якого мають вигляд

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

Аналіз виразу (1.27) показує, що в передкритичній області ( $s < 1$ ) значення  $\lambda_D$  дійсні і від'ємні, отже, точка  $D$  представляє 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. Приймаючи до уваги, що при таких значеннях  $s$  особлива точка  $O$  не реалізується, приходимо до висновку — з часом система еволюціонує в стаціонарний невпорядкований 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 із зростанням інерційності зміни керувального параметра в порівнянні з параметром порядку виявляється тенденція до виникнення коливального режиму. Оскільки в закритичній області  $s > 1$  показники Ляпунова (1.27) дійсні і мають різні знаки, точка  $D$  є сідлом (рис. 1.4). Так називається особлива точка, через яку проходять тільки дві інтегральні криві, що є асимптотами (решта всіх кривих, що мають вид гіпербол, через неї не проходять).

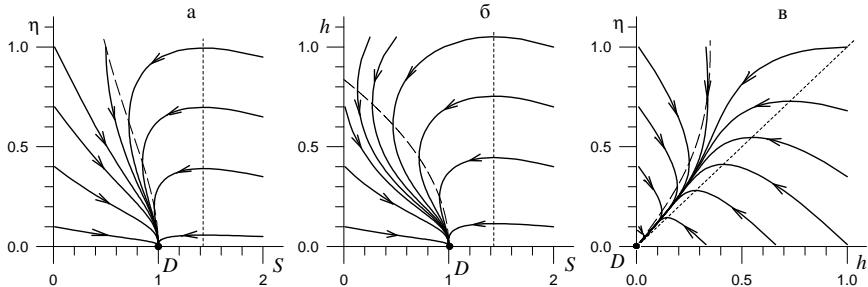


Рисунок 1.3 — Фазові портрети невпорядкованої фази ( $S_e = 0, 7S_c$ ) для фазового переходу другого роду: а —  $\tau_h \ll \tau_\eta = \tau_S$ ; б —  $\tau_\eta \ll \tau_h = \tau_S$ ; в —  $\tau_S \ll \tau_h = \tau_\eta$ . Примітка — тут і на всіх подальших малюнках штрихова лінія показує точки, у яких фазові траєкторії мають вертикальну дотичну, пунктирна — горизонтальну

Розглянемо особливу точку  $O(s^{-1}, \sqrt{s-1})$ . При малому відхиленні від неї розв'язок системи (1.18)(1.19) має вигляд

$$S = s^{-1} \left( 1 + ae^{\lambda_0 t} \right), \quad \eta = \sqrt{s-1} \left( 1 + be^{\lambda_0 t} \right), \quad (1.28)$$

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

женні за  $a, b$  отримуємо 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 при значеннях параметра  $\tau$ , обмежених зверху величиною

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

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

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

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

і коефіцієнтом загасання

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

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

Зворотна границя  $\tau_S \ll \tau_\eta$  відповідає адіабатичному наближенню, що представляє стандартну картину фазового переходу. Згідно з рисунком 1.4 зменшення параметра  $\tau \rightarrow 0$  приводить до виділення на

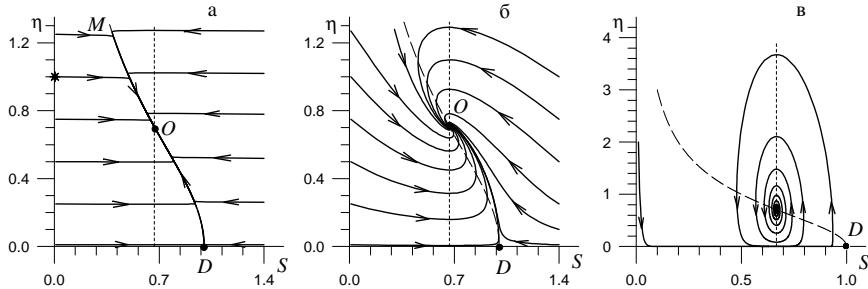


Рисунок 1.4 — Фазові портрети впорядкованої фази ( $S_e = 1,5S_c$ ) для фазового переходу другого роду: а —  $\tau_h \ll \tau_\eta = 10^2\tau_S$ ; б —  $\tau_h \ll \tau_\eta = \tau_S$ ; в —  $\tau_h \gg \tau_S = 10^2\tau_\eta$

фазовому портреті системи ділянки  $MOD$ , до якої збігаються з часом всі 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  $\tau$ . Очевидно, вказана ділянка  $MOD$  відповідає притягаючій множині відомій як «руслу великої річки». Універсальність кінетичної картини фазового переходу виявляється в тому, що незалежно від початкових умов при  $\tau \rightarrow 0$  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 первого роду

Викладена картина вважає, що час релаксації  $\tau_\eta$  є постійним в ході перетворення, хоча насправді його величина може зростати з параметром порядку  $\eta$ . Покажемо, що така дисперсія приводить до трансформації фазового перетворення з другого в перший рід. З цією

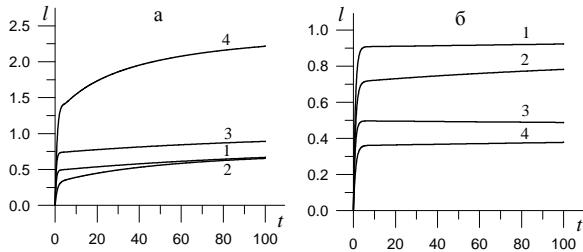


Рисунок 1.5 — Часова залежність шляху  $l$ , пройденого конфігуративною токою по фазовій траекторії: а — фазовий перехід другого роду (крива 1 відповідає фазовому портрету на рисунку 1.4а); б — фазовий перехід першого роду (крива 1 відповідає фазовому портрету на рисунку 1.8а). Початок відліку  $l$ 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

метою використовуємо просту залежність

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

що характеризується додатними константами  $\tau_0, \kappa, \eta_\tau$ . Тоді в рамках адіабатичного наближення  $\tau_h, \tau_S \ll \tau_0$  система Лоренца (1.5) – (1.7) зводиться до рівняння (1.11), в якому проведене перепозначення  $\tau_\eta$  на  $\tau_0$ , а синергетичний потенціал (1.12) набуває вигляд

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

де  $S_{c0} \equiv (A_\eta A_h)^{-1}$ . Згідно з рисунком 1.6а при малих значеннях  $S_e$  залежність  $V(\eta)$  має монотонно зростаючий вигляд, показаний кривою 1 з мінімумом в точці  $\eta = 0$ . При значенні

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

з'являється плато (крива 2), яке при  $S_e > S_c^0$  трансформується в мінімум, що відповідає значенню параметра порядку  $\eta_0 \neq 0$ , і максимум,

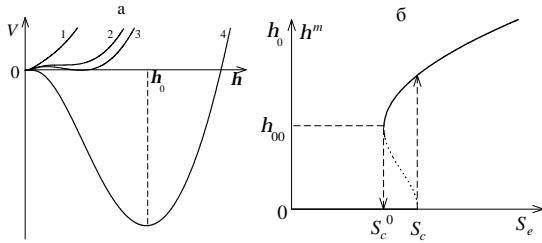


Рисунок 1.6 — а — вид залежності синергетичного потенціалу від параметра порядку при різних значеннях  $S_e$ : 1 —  $S_e < S_c^0$ ; 2 —  $S_e = S_c^0$ ; 3 —  $S_c^0 < S_e < S_c$ ; 4 —  $S_e \geq S_c$ ; б — залежність стаціонарних значень параметра порядку від параметра накачування  $S_e$  (суцільна крива відповідає стійкому стану  $\eta_0$ , пунктирна — нестійкому  $\eta^m$ )

що розділяє мініуми впорядкованої і невпорядкованої фаз (крива 3). З подальшим зростанням параметра нерівноважності  $S_e$  мініум впорядкованої фази заглибується, а висота міжфазного бар'єру спадає, набуваючи нульове значення при критичному значенні

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

При  $S_e \geq S_c$  залежність  $V(\eta)$  має той же вигляд, що і для фазово-го переходу другого роду (крива 4 на рис. 1.6а). Стационарні 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  $\eta^m$ , при якому синергетичний потенціал має максимум, нижній — стійкому  $\eta_0$ . Як видно з рисунку 1.6б, при повільному збільшенні параметра нерівноважності в точці  $S_e = S_c$  відбувається стрибок параметра  $\eta_0$  від нуля до  $\sqrt{2}\eta_{00}$ , а потім

його значення зростає плавно. При зворотному спаданні  $S_e$  від великих значень параметр порядку  $\eta_0$  плавно зменшується до точки  $S_e = S_c^0$ ,  $\eta_0 = \eta_{00}$ , а потім стрибком набуває нульове значення. Даний гістерезис обумовлений енергетичним бар'єром властивим переходу першого роду і виявляється при величинах параметра  $\alpha \equiv \eta_\tau / \eta_m$  менше значення 1. Із збільшенням швидкості зміни параметра нерівноважності петля гістерезису звужується.

Вимірюючи величини  $\eta, S, h$  в одиницях  $\eta_m, S_c$  (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  $\tau_0, \tau_h, \tau_S$ . При цьому в початковому рівнянні (1.5) ефективний час релаксації  $\tau_\eta$  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 виміряний в одиницях  $\tau_0$ )

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

що відрізняється від (1.18) наявністю останнього доданку. Друге рівняння, що випливає з (1.7), має той же вигляд (1.19), що і 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. У 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 із зростанням параметра нерівноважності  $S_e$  фазовий портрет системи змінюється таким чином (див. рис. 1.7). При  $S_e < S_c^0$ , коли залежність (1.36) має монотонно зростаючий вигляд, точки  $S, O$  не реалізуються, а  $D$  представляє стійкий вузол, що відповідає невпорядкованій фазі. При цьому фазовий портрет має вигляд, властивий фазовому переходу другого роду (див. рис. 1.3а).

З перевищеннем характерного значення (1.37) в системі відбувається біфуркація, що полягає в появі сідла  $S$  і стійкого вузла/фокусу  $O$ . При збільшенні 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 нерівноважності дає картину, що відповідає впорядкованій фазі для фазового переходу другого роду.

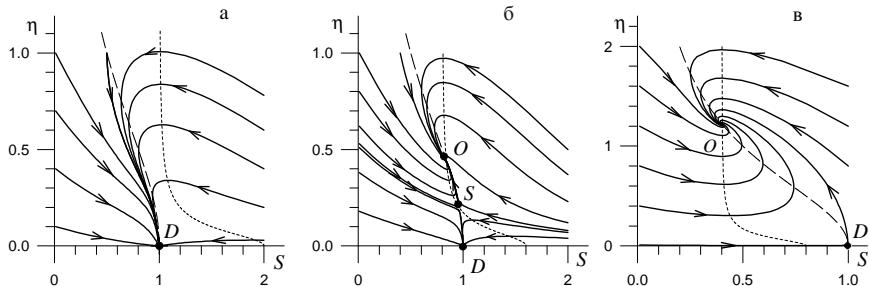


Рисунок 1.7 — Зміна виду фазових портретів з температурою для фазового переходу першого роду ( $\kappa = 1, \alpha = 0.1, \tau_h \ll \tau_\eta = \tau_S$ ): а —  $S_e = S_{c0}$ ; б —  $S_e = 1, 25S_{c0}$ ; в —  $S_e = 2, 5S_{c0}$

На рисунку 1.8 показано, яким чином змінюється фазовий портрет впорядкованої фази ( $S_c^0 < S_e < S_c$ ) із збільшенням відношення часів релаксації  $\tau = \tau_S/\tau_0$ . Порівнюючи з рисунком 1.4, бачимо, що в околиці точки  $O$  поведінка є практично такою же, що і для фазового переходу другого роду: у адіабатичної 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, яка 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*, що відповідає околиці мінімуму впорядкованої фази.

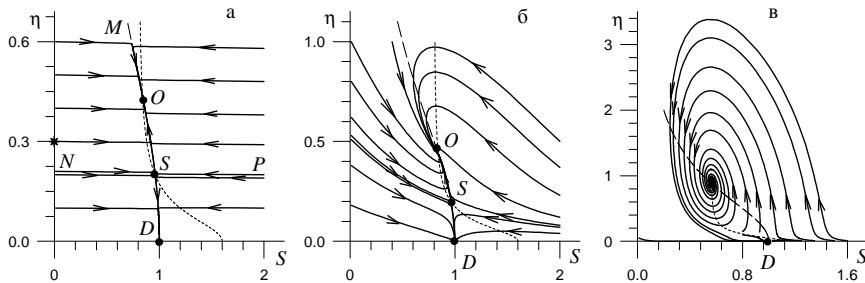


Рисунок 1.8 — Фазові портрети для фазового переходу першого роду ( $\kappa = 1, \alpha = 0, 1$ ): а —  $S_e = 1, 25S_{c0}, \tau_h \ll \tau_\eta = 10^2 \tau_S$ ; б —  $S_e = 1, 25S_{c0}, \tau_h \ll \tau_\eta = \tau_S$ ; в —  $S_e = 1, 8S_{c0}, \tau_h \ll \tau_S = 10\tau_\eta$

## 1.2 Нерівноважні переходи

### 1.2.1 Головні визначення

У даному підрозділі буде досліджено самоорганізацію нелінійних систем в умовах стохастичності [3, 4, 7, 8]. Самоорганізація — це виникнення нових індукованих флюктуаціями 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. Okремо для них існує визначення *індуковані шумом переходи*, за яких густина ймовірності розподілу станів демонструє зміну кількості екстремумів. Із загальної точки зору границя малих флюктуацій (шумів) розглядається як рівноважний фазовий перехід. За великих інтенсивностях шуму потрібно враховувати обмінні потоки і система є нерівноважною. Такі перетворення подаються біфуркаційною діаграмою. За визначених умов система випробовує лише кількісні зміни. Проте під час переходу системи через критичний стан відбувається якісна зміна поведінки у виді переходів 1-го та 2-го родів. Зовнішні флюктуації вимагають опису системи випадковою величиною. Перехід відбувається, коли має місце якісна зміна випадкової величини, що відображує простір елементар-

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

Згідно до теорії рівноважних переходів, якісна зміна системи простежується за зміною кількості екстремумів стаціонарної густини ймовірності  $p_s(x)$ . Статистичні моменти в цьому разі не носять інформації як усереднені величини. Макроскопічні стани (фази) демонструють максимуми функції розподілу (найбільш ймовірні стани). Однак максимуми не завжди описують стаціонарний розподіл ймовірності. Зовнішні флюктуації є макроскопічними і порівняні з внутрішнім шумом, що приводить до розмиття переходної зони і піків, але дає можливість експериментального спостереження. Число і положення екстремумів  $p_s(x)$  подають особливості стаціонарної поведінки у стохастичному випадку.

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

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

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. В цьому разі максимуми  $p_s(x)$  відповідають мінімумам  $U_{ef}(x)$ ;  $\nu = 2$  відповідає численню Іто,  $\nu = 1$  – Стратоновича [7, 8]. При адитивному шумі  $g(x) = \text{const}$  та

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

Мінімуми потенціалів (максимуми  $p_s(x)$ ) характеризують стійки 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 флюктуацій система змінює фазовий стан швидше ніж при внутрішніх шумах.

Екстремуми функції розподілу  $p_s(x)$  завжди відповідають детермінованим станам тільки у разі білого шуму. Адитивний шум викликає тільки зміщення екстремальних значень по ландшафті потенціалу, тобто *носить дезорганізуючий характер*. Мультиплікативний шум  $g(x) \neq \text{const}$  визначається станом системи, тобто частинка коливається не лише в потенціальному рельєфі, але і окремі ділянки потенціалу можуть випадково підійматися і опускатися, і частинка переходить між мінімумами. При малому шумі мінімуми потенціалу можуть підводитися, але залишаються мінімумами, а максимуми опускатися, але є максимумами. Система за цієї умови може знаходитися у стані, що відповідає вищій потенціальній ямі. За великих інтенсивностях шумів і суттєвій 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 нерівно-важні переходи, що не можна прогнозувати в межах детерміністичного (феноменологічного) підходу. З фізичної точки зору система не пристосовується до середніх властивостей середовища, а поводиться активним чином. Такі переходи мають назву *індуковані шумом переходами*. Термін «фаза» не використовується, оскільки випадкова величина  $x$  однорідна у просторі (нуль-вимірна система) та макроскопічні стани не мають меж. Звичайна ж термодинамічна фаза спостерігається у розподілених системах і обов'язково має межі. Таким чином, як в 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

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

Стаціонарний розподіл набирає вид

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

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

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

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

При адитивному шумі мінімуми вихідного потенціалу  $V(x)$  відповідають мінімумам потенціалу  $U(x)$ . У цьому разі достатньо провести аналіз детермінованого рівняння еволюції для дослідження стійкості усіх стаціонарних локальних станів. Крім найглибшого мінімуму  $V(x)$ , всі локальні мінімуми являють метастабільні стани. При мультиплікативному шумі мінімуми вихідного потенціалу можуть не відповідати мінімумам потенціалу  $U(x)$ , тобто детермінований опис не носить 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  $g(x)$  в рівнянні Ланже-вена, 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, він називається найкращим дифузійним процесом і його простір станів не обмежується, та границі є недосяжними.

**Недосяжні границі.** Природні границі при  $t \rightarrow \infty$  досягаються тільки з нульовою ймовірністю. Нехай  $\beta$  – 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  $\beta$  раніше, ніж точки  $m_1$ .

Таким чином, границя  $m_1$  ніколи не буде досягнута, якщо процес  $Z_t$ , досягнувши точки  $\beta$ , повертається у відрізок  $(m_1, \beta)$  та з імовірністю одиниця  $Z_t$  досягне  $\beta$  ще раз раніше за  $m_1$ .

Класифікація границь проводиться 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 при  $t = 0$  процес знаходиться у точці  $x_0 \in (m_1, \beta)$ .

**Границя є притягувальною**, коли процес виходить з інтервалу  $(m_1, \beta)$  за кінцевий час, причому через  $\beta$ , або знаходиться в ньому, тоді  $x(t) \rightarrow m_1$  при  $t \rightarrow \infty$ . При цьому 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. Таким чином, процес відчуває границю і його поведінка залежить не тільки 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 відрізку  $(m_1, m_2)$ .

Поєднання цих умов приводять до більш складних граничних умов.

**Досяжна границя називається поглиноподібною**, якщо  $\Phi_1(m_i) < \infty$  та  $\Phi_2(m_i) < \infty$  при 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, при початковому стані  $x_0 \in (m_1, \beta)$  ймовірність досягнення точки  $\beta$  дорівнює нулю при  $x_0 \rightarrow m_1$ .

**Границя регулярна** у 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–Ферхольста

Термін «індукований шумом фазовий перехід» уперше з'явився при розгляді біологічної популяції в моделі Мальтуса–Ферхольста [7, 8]. Рівняння еволюції біологічної популяції, яка задається чисельністю  $x \in [0, \infty)$ , має вигляд:

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

де параметр зростання Мальтуса  $\alpha$  – різниця між смертністю і народжуваністю особин. Другий доданок описує автономне зменшення популяції. Розв'язком даного рівняння є

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

При  $\alpha < 0$  маємо стійкий розв'язок  $x = 0$ , а для  $\alpha = 0$  внаслідок біфуркації генерується стаціонарний розв'язок  $x = \alpha$ .

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

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

Тоді отримуємо 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 таким чином:

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

Так як процес відбувається у 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  $\alpha, \sigma^2$ . При  $\alpha > \sigma^2(\nu - 1)/2$  нуль – природна границя. 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 виді:

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

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 описується дельта-функцією за умови  $\alpha < (1/2 - \nu)\sigma^2$ , тобто

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

Можливі стани визначаються параметром порядку згідно до рівняння 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  $\alpha > \nu\sigma^2/2$  і завжди максимум. Корінь  $x_0^{(1)}$  являє 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 із тим, що змінюється вид границі дифузійного процесу. При  $\alpha \gtrsim \alpha_c^{(1)}$  дельта-функція починає розмиватися вправо, і точка нуль перестає бути стійкою, хоча є найімовірніша. Друге перетворення має

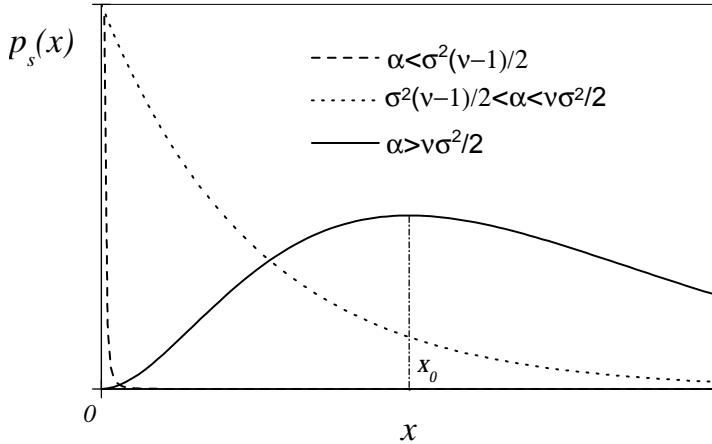


Рисунок 1.9 — Густина ймовірності в моделі Мальтуса–Ферхольста [7, 8]

місце за  $\alpha > \alpha_c^{(2)} = \sigma^2\nu/2$ . У цьому разі на стаціонарній густині ймовірності реалізується нові максимум і індукована шумом фаза. Таким чином, за постійного стану середовища здійснюється перехід системи в нову фазу за рахунок лише зміни інтенсивності шуму в середовищі.

Відповідно до відомого розподілу (в численні Стратоновича) можна одержати

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

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

При першому переході реалізується перетворення від виродженої випадкової величини до достовірно випадкової. Його можна спостерігати за величиною дисперсії (шириною розподілу) чи за рівнянням

еволюції у лінійному наближенні (стационарна точка втрачає стійкість). Друге перетворення пов'язане з внутрішньою нелінійністю системи. Її стан задається взаємодією нелінійної динаміки і зовнішнього шуму, що вже не являє величину  $O(V^{-d})$ . Останній перехід є *індукованим шумом зсувом* — зсувом детермінованого перетворення. Індуковані шумом перетворення типу зсуву реалізуються в точках втрати стійкості систем, на яких діє мультиплікативний більшій 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, вперше сформульована Арнольдом, Хорстхемке, Лефевром [7, 8]. Це модель хімічної реакції речовин  $X, Y$  за умови, що зберігається повна кількість молекул  $N = X + Y = \text{const}$ :

$$\begin{aligned} A + X + Y &\leftrightarrow 2Y + A^*, \\ B + X + Y &\leftrightarrow 2X + B^*. \end{aligned} \quad (1.70)$$

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,  $\alpha$  — керувальний параметр (властивість середовища). У разі, коли  $\chi = 1/2$ , детермінований стационарний стан описується розв'язком:

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

що є глобально стійким, незалежно від  $\alpha$ .

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

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

Границі дифузійного процесу  $m_1 = 0$ ,  $m_2 = 1$  за визначенням внутрішні і природні. Стационарна 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:

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

При  $\alpha = 0$  детерміністичне рівняння дає розв'язок  $x_s = 1/2$ . При швидких флюктуаціях (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 розподілу, хоча якісних змін не спостерігається. Підвищення інтенсивності флюктуацій спричиняє появу максимумів, тобто переходи є шумовими. При  $\alpha = 0$  маємо неперервне перетворення другого роду. При  $\sigma^2 > \sigma_c^2$  функція розподілу є двомодовою і для відстані між максимумами отримуємо:

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

Таким чином, зовнішні гаусівські флюктуації викликають критичну поведінку у точці  $\alpha = 0$ ,  $x_0^{(1)} = 1/2$ ,  $\sigma^2 = 4$ . При зміні значення  $\alpha$  один із максимумів функції розподілу зсувається у різних напрямках залежно від знака  $\alpha$ . Під час переходу рівня шуму через критичну точку механізм фазового перетворення змінюється, спостерігається гістерезис і реалізується переход першого роду. Можна заключити, що мультиплікативні флюктуації можуть бути організуючими і робити стабільними макроскопічні фази.

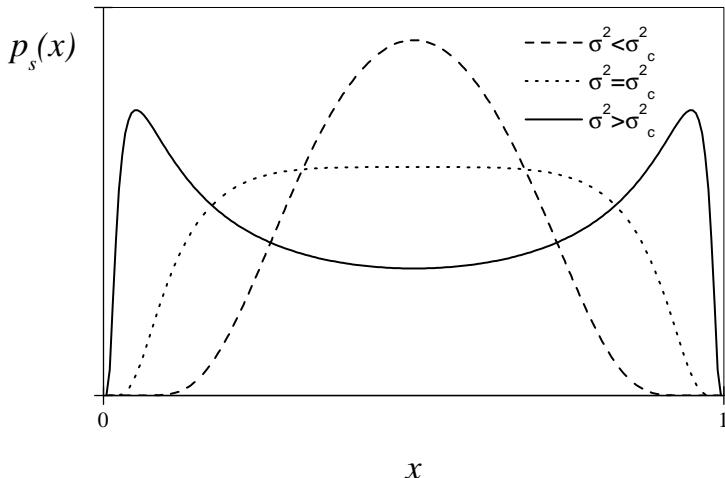


Рисунок 1.10 — Густина ймовірності в моделі генного відбору [7, 8]

### 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 вид  $\eta \equiv |x_0 - 1/2|$ . Інтенсивність шуму відповідає температурі, а параметр середовища  $\alpha$  — спряженому полю  $h$  [7, 8].

Рівняння екстремумів визначає показник  $\beta$ . При  $\sigma^2 \rightarrow 4$  отримуємо  $\beta = 1/2$  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  $\delta$ . 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  $\delta = 1/3$  так як

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

Обчислення сприйнятливості  $\chi = (\partial\eta/\partial\alpha)|_{\alpha=0}$  дає показник  $\gamma$ . За допомогою диференціювання кубічного рівняння екстремумів за  $\alpha$ , отримуємо 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 заключити, що критичні показники індукованої точки дірвнюють класичним. Таким чином, 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 розподілу в околі особливих точок [7]. Зокрема, у точці  $x = 0$  в моделі популяційної динаміки. Дано особливість може бути не інтегрованою, тоді нормування не є можливим, її поведінка системи задається границею дифузійного процесу. Звідси випливає, що у стохастичній системі має місце детерміністична конденсація – обмежена частина ступенів свободи (можливі часові залежності  $x(t)$ ) зводиться до  $x(t) = 0$ . Відповідно виникає питання: яким чином буде відбуватися перерозподіл між максимумами відповідними детерміністичному та впорядкованому станам?

Мета полягає у дослідженні особливостей рівноважного розподілу [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 вид

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

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

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

Особливість цього переходу складається у тому, що при зменшенні інтенсивності шуму  $T$  на розподілі (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  $x_0$ , вимірюваних 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 у 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 із 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  $\alpha$ . При адитивному шумі ( $a = 0$ ) точка переходу  $T_0 = T_c$ . Зменшення  $a$  в області малих значень знижує  $T_0$  — тим більше чим менше параметр  $\alpha$ , що відповідає за рушійну силу переходу. Подальше збільшення  $a$  приводить  $T_0$  до мінімуму і далі до зростання до значення (1.95) при  $a = 1$ . Одночасно найбільш ймовірне значення  $x_0(T)$  спадає із ростом  $T$  відповідно до рисунку 1.12.

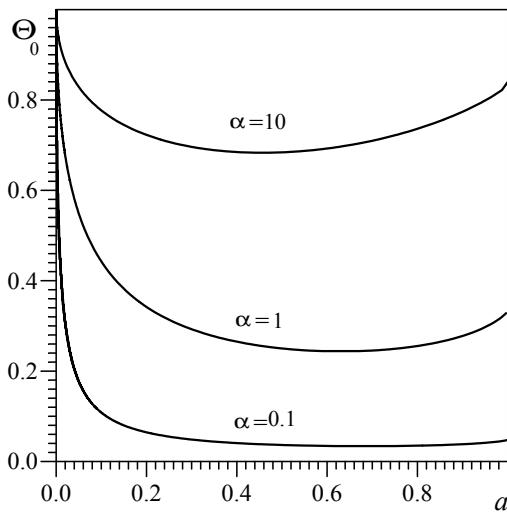


Рисунок 1.11 — Граничне значення інтенсивності флюктуацій  $\Theta_0$  залежно від показника  $a$  [7]

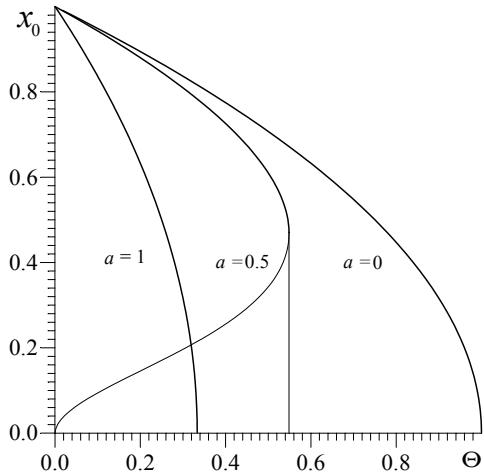


Рисунок 1.12 — Залежність найбільш ймовірного значення  $x_0$  від рівня шуму  $\Theta = T/T_c$  [7]

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

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

При цьому ймовірність (1.83) є максимальною у точці

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

а відповідна інтенсивність флуктуацій

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

### 1.2.5 Багатопараметрична модель Лоренца–Хакена

При описі 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'єкту. По іншому стохастичність інтерпретується у разі впливу зовнішніх флуктуацій. Відповідно до детерміністичного рівняння передбачається, що керувальний параметр здійснює флуктуації поблизу середнього. У зв'язку з цим, потрібно перевіряти адекватність, отриманих таким чином моделей, тобто розглянути системи із декількома гідродинамічними ступенями вільності, що поводяться самоузгоджено та стохастично. Шукана мультиплікативна функція отримується виділенням однієї з цих ступеней. Зазначимо, що багатопараметричні моделі суттєво розширюють можливості опису самоорганізації під впливом зовнішнього середовища. Такою моделлю є трипараметрична система Лоренца–Хакена, що описує самоорганізацію, як частковий випадок фазового переходу [3, 7] (підрозд. 1.1).

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

Синергетична схема Лоренца–Хакена з параметром порядку  $\eta$ , 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  $\xi$  –  $\delta$ -корельоване стохастичне джерело;  $\sigma_\eta, \sigma_h, \sigma_S$  – інтенсивності флюктуацій 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 і керувального параметра залежно від параметра порядку:

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

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

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

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

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

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

Канонічна форма рівняння (1.102) отримується 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  $\tau_\eta$ ; параметр порядку в  $\eta_m$ ; інтенсивності шумів  $\sigma_\eta, \sigma_h, \sigma_S$  в  $\tau_\eta^{-1}, (\tau_\eta \tau_h \gamma)^{-1}$  та  $S_c/\tau_S$  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 таким чином:

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

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

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) з мінімумом в точці:

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

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

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

з 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 випливає із властивості адитивності квадратів дисперсій незалежних випадкових величин, що мають нормальній розподіл. Формули (1.105)–(1.107), (1.109), (1.110) дозволяють отримати явний вид потенціалу  $U_{ef}(\eta)$  та рівняння стаціонарних станів:

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

Таким чином, екстремуми визначаються параметром зовнішньої дії  $s$  та величинами інтенсивностей  $\sigma_S^2, \sigma_h^2$  мультиплікативних флуктуацій.

### 1.2.5.1 Синергетичний перехід при адитивних флуктуаціях

У найпростішому разі, коли  $\sigma_\eta = \sigma_h = \sigma_S = 0$ , рівняння (1.96)–(1.98) набирають виду детерміністичної моделі Лоренца, а стохастичне рівняння (1.104) записується у формі:

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

Введення змінної  $z = 1 + \eta^2$  дає

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

звідки отримуємо:

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

Видно, що при  $s < 1$  система переходить в стан  $\eta_0 = 0$ , а при  $s > 1$  – в  $\eta_0 \neq 0$ . В статистичній фізиці фази  $\eta_0 = 0$  і  $\eta_0 \neq 0$  називаються симетричною та несиметричною. Стационарна густина ймовірності характеризується одним максимумом при  $\eta_0 = 0$  у першому випадку та двома максимумами в точках (1.108) – у другому. За відсутності флюктуацій дані максимуми  $\delta$ -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 стационарних станів. При цьому голкоподібні максимуми функції розподілу стають колоколоподібними із 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) при  $\sigma_\eta = 0$  дається виразом:

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

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

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

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

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

### 1.2.5.3 Вплив стохастичності спряженого поля

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

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

В цьому випадку реалізується мінімум функції розподілу у точці  $\eta_0 = 0$  (симетричний стан), якщо стаціонарний керувальний параметр  $s$  не більше критичного значення

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

яке зменшується ізростом 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  $s, \sigma_h$ .

За малих  $s$  і  $\sigma_h$  стаціонарний параметр порядку задається вира-  
зами

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

які характерні для перетворення другого роду за критичного значення  $s = s_c$ . Зазначемо, що за умов  $s = 0$  та  $\sigma_h > \sigma_c = 1/4$  може мати місце синергетичний (індукований шумом) перехід у несиметричний стан.

### 1.2.5.4 Вплив стохастичності керувального параметра

Дослідимо стаціонарні стани системи, враховуючи шум керувального параметра. Стационарна 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) випливає із (1.111) за умови  $\sigma_h = 0$ . Аналіз розв'язків якого залежно від величин  $s$  і  $\sigma_S$  вказує, 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 до якого 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:

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

які не мають фізичного змісту за умови  $s < 4/3$ , так як  $\eta$  комплексні. В точці  $s = 4/3$  вони дорівнюють нулю, а за  $s > 4/3$  є дійсними й  $\eta_{0+} = -\eta_{0-}$ , відповідно у 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 при  $\eta_{0+}^2$  реалізуються два мінімуми.

Визначимо критерії існування кратних дійсних розв'язків рівняння (1.111), а саме, розглянемо умову рівності нулю його дискримінанта. В даному випадку 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) дается 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  $\sigma_{S-}$  у (1.130) і крива (1.123) мають спільну точку (1.128).

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 і несиметричної фаз обмежена лініями (1.123) і (1.130). Трикритична точка (1.128) визначається перетином ліній 1 і

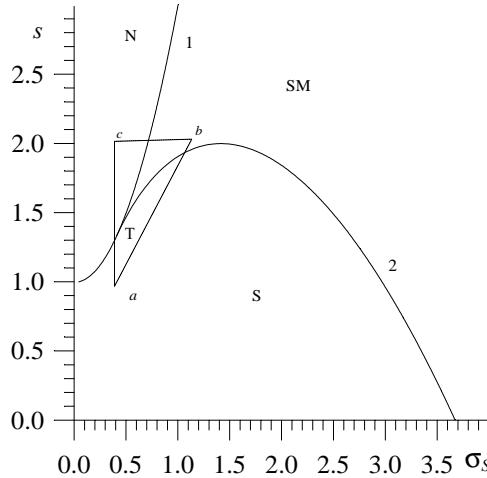


Рисунок 1.13 — Фазова діаграма при флуктуаціях керувального параметра [7,9]

2. При переведенні системи із 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  $b$ . Зазначемо, 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  $N$ . Дане перетворення не є переходом першого роду, втім метастабільна несиметрична фаза на цій траекторії стрибком становиться стабільною та визначається  $\eta_{0+}$  (1.127).

Біфуркаційні діаграми (рис. 1.14) демонструють залежності стаціонарних станів від інтенсивності  $\sigma_S$  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  $\eta_u$ , а інший — метастабільний  $\eta_m$ .

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 до [8] другий випадок відповідає абсолютно поглинаючій границі за  $\eta = 0$ , а третій — абсолютно відобража-

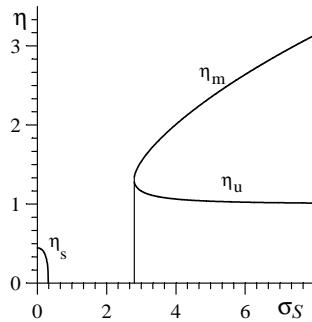
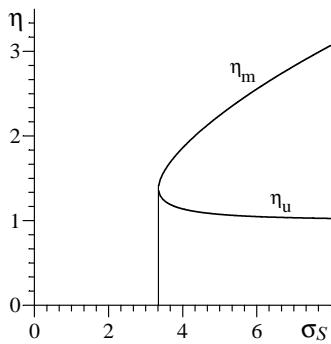
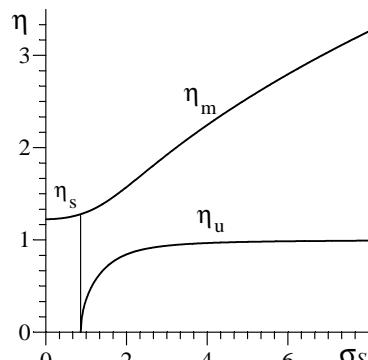
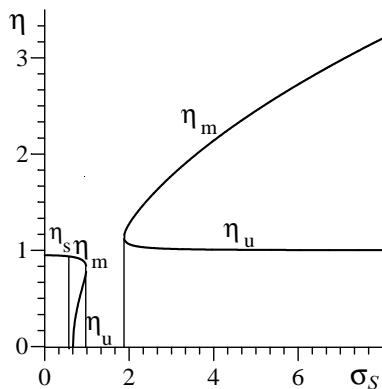
$s < 1$  $1 < s < 4/3$  $4/3 < s < 2$  $s > 2$ 

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

ючій. 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  $m \rightarrow 0$  отримуємо  $L = \infty$  в області, що обмежена 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  $\sigma_S^2 > \sigma_c^2$  отримуємо  $\Phi_2 = \infty$ , таким чином, 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 тільки за  $t \rightarrow \infty$ . Дано поведінка реалізується лише за відсутності флюктуацій спряженого поля.

### 1.2.5.5 Сумісна дія шумів спряженого поля і керувального параметра

У більш загальному випадку впливу двох мультиплікативних шумів  $\sigma_h$  і  $\sigma_S$  на основі рівняння (1.104), стаціонарна густина ймовірності визначається потенціалом (1.119), що на відміну від (1.122) характеризується скінченою границею за  $\eta \rightarrow 0$ . Введення 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 змогу знайти при  $\alpha < 1$  вираз (1.119) у виді  $\tilde{U}_{ef}/\tilde{\sigma}^2$ , де  $\tilde{U}_{ef}$  отримується з (1.122) за допомогою заміни  $\sigma_S$ ,  $s$ ,  $\eta$  на величини (1.137).

Одночасно флюктуації 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, яка знаходиться нижче ніж вказана вище та дотикається до неї у трикритичній 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 осіх  $\sigma_S - s$  при заданих значеннях  $\sigma_h$  наведена на рисунку 1.15 та за  $\sigma_h^2 < 1$  якісно збігається з зображену на рисунку 1.13. За рівності  $\sigma_h^2 = 1$  трикритична точка (1.138) опиняється на осі

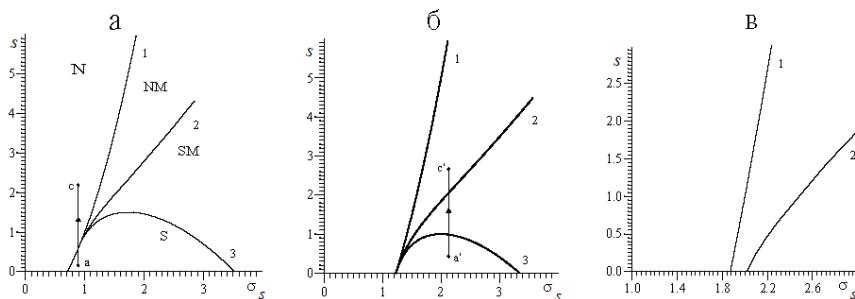


Рисунок 1.15 — Фазова діаграма при дії флюктуацій спряженого поля і керувального параметра: а, б, в —  $\sigma_h^2 = 0, 5, 1, 0, 2, 0$ . Криві 1, 2, 3 являють спінодаль, бінодаль та лінію існування кратних коренів [7, 9].

$\sigma_S$ , 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 і 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 тільки стійкий несиметричний стан. За заданих  $\sigma_h$  при зміні

$s$  відбувається фазове перетворення другого роду, коли  $\sigma_S$  менше за критичне (1.138) (пряма  $a \rightarrow c$  на рисунку 1.15а). Якщо  $\sigma_S$  більше ніж вказане значення, то реалізується перехід першого роду (пряма  $a' \rightarrow c'$  на рисунку 1.15б).

## РОЗДІЛ 2

### ЕВОЛЮЦІЯ ІєРАРХІЧНОЇ СИСТЕМИ

#### 2.1 Теорія ієрархічного зв'язку

Не дивлячись на повсякденний прояв ієрархічності в соціумі і усвідомлення її ролі в інших системах теорія ієрархічності супідрядних ансамблів отримала свій розвиток тільки при описі динаміки спінових стекол. 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 числом кроків  $k$  до спільного предка, яке задає відстань  $\zeta \sim k$  в ультраметричному просторі [3]. Мета підрозділу – визначення можливих типів функції  $w(\zeta)$ , що реалізовуються для різних ієрархічних дерев.

Характеризуватимемо ієрархічний об'єкт (вузол дерева) на рівні  $k$  інтенсивністю  $z_k$ , яка зростає з переходом на вищий рівень  $k - 1$  (найочевидніше це виявляється на прикладі службової ієрархії). Дано 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,  $N_k$  – число вузлів на рівні  $k$ . Для простого випадку регулярного дерева, показаного на рис. 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,  $j = 2$ ),  $\zeta$  – 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 випадку  $j \gg 1$ . І нарешті, можна вважати, що в загальному випадку дерева, типу зображеного на рис. 2.1в, застосовна степенева апроксимація

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

Рівняння (2.1), вперше використане для опису ієархії резонансів нелінійних коливань, має чудову властивість самоподібності, яка являє основну властивість ієархічних 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  $z_{k-1} \sim z_k$ , отримуємо звичайний зв'язок

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

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

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

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

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

В результаті для регулярного дерева, що характеризується розподілом вузлів (2.2), отримуємо

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

де прийнято  $w(0)=1$ . Таким чином, із зростанням відстані  $\zeta$ , на якої знаходиться спільній предок, сила ієархічного зв'язку  $w(\zeta)$  і інтенсивність  $z(\zeta)$  затухають експоненціальним чином (рис. 2.2). Декремент  $\Delta$  загасання сили зв'язку набуває нульове значення при переході до

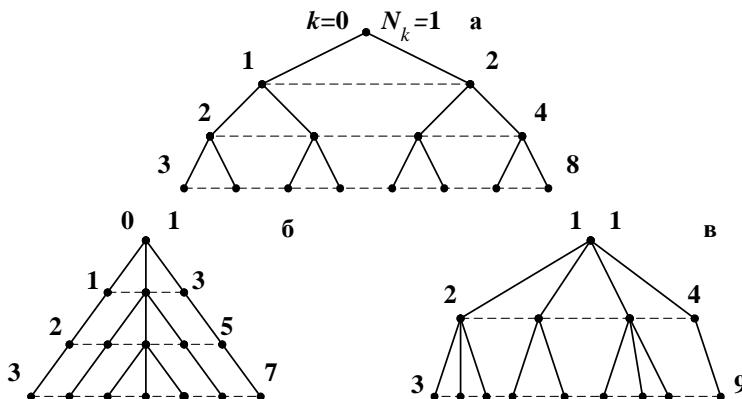


Рисунок 2.1 — Основні типи ієрархічних дерев (номер рівня показано ліворуч, число вузлів — праворуч): а — регулярне дерево з  $j=2$ ; б — вироджене дерево з  $j=3$ ; в — нерегулярне дерево для  $a=2$

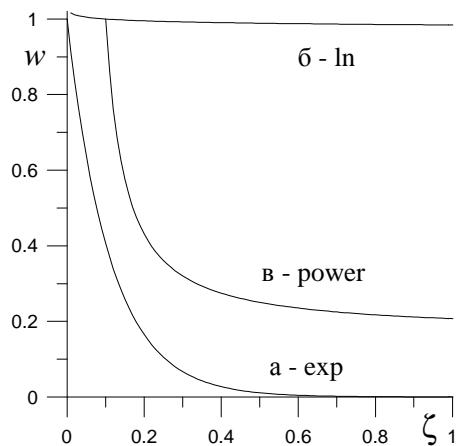


Рисунок 2.2 — Функція ієрархічного зв’язку для різних типів ієрархічних дерев, наведених на рисунку 2.1

системи із розмірністю  $D=1$  (згідно з (2.7) вона відповідає ідеальному ієрархічному зв'язку). При цьому декремент загасання  $D^{-1}$  інтенсивності  $z(\zeta)$  набуває мінімального значення 1. Із 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  $\zeta_0 < \zeta$ , при якому виявляється дискретність ультраметричного простору. Порівняння (2.9) з (2.8) показує, що перехід від регулярного дерева до виродженого приводить до логарифмічного уповільнення експоненціально спадаючого ієрархічного зв'язку (рис. 2.2).

У проміжному випадку дерева, що характеризується степеневим наростанням (2.4) числа 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 з співвідношеннями (2.8)–(2.10) випадок регулярного дерева (рис. 2.1а) виділений в тому сенсі, що йому відповідає слабка ієрархічна супідрядність рівнів, число яких обмежене значенням

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

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

При переході до нерегулярних дерев ієрархічний зв'язок забезпечує супідрядність всіх рівнів і загасає степеневим чином. Очевидно, такий випадок є найпоширенішим. Найбільш повільне, логарифмічне загасання вимагає побудови виродженої ієрархії (рис. 2.1б). Вона здійснюється єдиним об'єктом на кожному рівні  $i$ , як неважко бачити, відповідає системі відбору. Згідно з (2.9), (2.10) при сильному ієрархічному зв'язку параметр  $\Delta$  визначає не глибину зв'язку (2.11), а швидкість його загасання. Зокрема, при ідеальній ієрархічній 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 при заданій конфігурації ієрархічного дерева визначальну роль грає фрактальна розмірність  $D$ , величина якої задає силу ієрархічного зв'язку  $w(\zeta)$ . Згідно з (2.7) при фіксованій 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. При цьому з'являється додатковий параметр  $q \in (-\infty, \infty)$ , за значеннями якого сила зв'язку  $w_q(\zeta)$  розподілена з густиноро  $\rho(q)$ . Так, при ідеальному ієрархічному 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 із зростанням  $q$  в обмеженому інтервалі. В результаті повна сила ієрархічного зв'язку визначається рівністю

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

де в якості ядра  $w_q(\zeta)$  слід використовувати залежності (2.8)–(2.10) із змінним значенням фрактальної розмірності  $D(q)$ . Визначення ви-ду залежностей  $D(q), \rho(q)$ , що характеризують мультифрактал, пред-ставляє окреме завдання.

Слід мати на увазі, що наведені співвідношення визначають лише асимптотичну поведінку ієрархічної системи у границі  $\zeta >> \zeta_0$ . Інакше виявляється дискретний характер зв'язку, і слід розв'язувати си-стему скінченнорізницевих рівнянь (2.1), (2.7), де розподіл числа вузлів  $N_k$  за рівнями задається структурою досліджуваного ієрархічного дерева. До такої постановки приводить розгляд ієрархічних систем, що мають мале число рівнів і складну конфігурацію дерева Кейлі. Очеви-дно, в більшості практичних застосувань дискретний характер ієрархі-чної системи виявляється істотним чином, і розв'язання задачі досяга-ється тільки числовими методами. При цьому отримані вище асимpto-тики являють якісний характер поведінки ієрархічної системи.

## 2.2 Мікрокопічна теорія структурної релаксації. Ієрархічно підпорядковані статистичні ансамблі

Розглянемо спочатку фазовий перехід, в якому відсутня ієрархія. Оскільки в упорядкованому стані вільна енергія менша ніж в неупо-рядкованому ( $\Delta F(\eta_0) < 0$ ), то система флюктуаційним чином перехо-дить з нульового мінімуму в мінімум  $\eta_0$  (рис. 2.3). Час цього переходу підпорядкований співвідношенню Ареніуса

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

де  $\tau_0$  – мікрокопічний час релаксації,  $Q$  – висота енергетичного бар'-єру,  $T$  – температура.

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

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

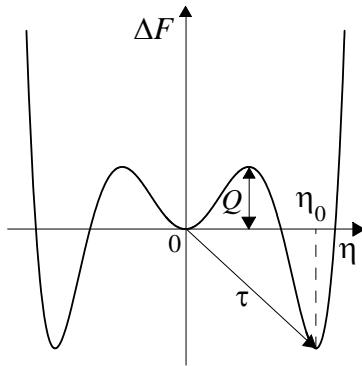


Рисунок 2.3 — Залежність зміни вільної енергії від параметра порядку

де  $\gamma$  — 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), не важко 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  $\eta(0, 0) \equiv \eta_i$  і здійснюючи усереднення за статистичним ансамблем отримаємо:

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

Характерно, що при обчислюванні початкового значення структурного фактора (2.18) усереднення здійснюється за статистичним ансамблем, відповідним мінімуму упорядкованої фази  $\eta_0$ .

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 припустив, що вона побудована ієрархічно. Це означає, що під час структурної релаксації, при якій об'єднуються вказани мінімуми, їх об'єднання відбувається поетапно. Наприклад, спочатку пари мінімумів об'єднуються в один супермінімум, а потім пари супермінімумів об'єднуються далі і т. д. (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, зветься 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 рис. 2.4, має геометричний вигляд простору з ультраметричною топологією. Точки ультраметричного простору являють собою вузли на нижньому рівні. В 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  $\alpha$  в ансамбль  $\beta$  визначається співвідношенням

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

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

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

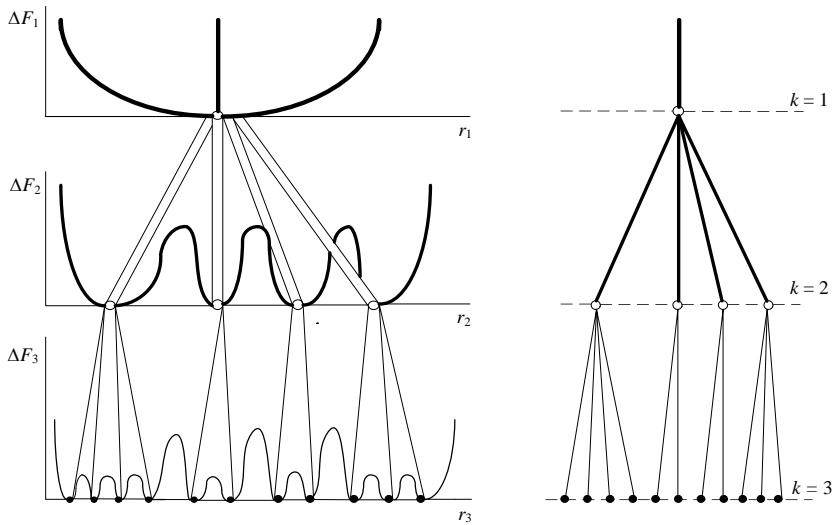


Рисунок 2.4 — Ієрархічне дерево, що описує структурну релаксацію

де  $Q_{\alpha\beta}$  — бар'єр між ансамблями  $\alpha$  і  $\beta$ . Припустимо, що кожний ансамбль  $\alpha$  і  $\beta$  реалізується з ймовірністю  $\omega_\alpha$ . 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 формул (2.20) в (2.19), а результату в (2.21) дозволяє найти структурний фактор скла, тобто описати структурну релаксацію.

З цією метою слід провести складання за всіма ансамблями  $\alpha$ ,  $\beta$ . 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  $\alpha$  та інтегрування за відстанями  $l_{\beta-\alpha} \equiv l$ . Тоді формули (2.19) — (2.21) приводять до

результату:

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

Для отримання часової залежності потрібно знати дві функції:

1)  $\omega(l)$  – описує, як змінюється ймовірність реалізації статистичного ансамблю при віддаленні його від початкового на відстань  $l$ . Інакше кажучи,  $\omega(l)$  вказує глибину ієрархічного зв’язку ансамблю, віддаленого від початкового на відстань  $l$ . Очевидно, з зростанням  $l$  ієрархічний зв’язок послаблюється і, отже,  $\omega(l)$  є монотонно спадаючою функцією;

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

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

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

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 з 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’єру (найповільніше), степеневе й експоненціальне (найшвидше). Величина  $Q$  відіграє роль характерної висоти бар’єру. В слабкоієрархічних системах реалізується логарифмічне зростання, далі йде степеневе та в міцноієрархічних

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

Хай нам треба обчислити інтеграл:

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

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

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

Оскільки в точці  $x_0$  мінімум, то  $\partial f / \partial x|_{x=x_0} = 0$ . Позначимо  $\partial^2 f / \partial x^2|_{x=x_0} = \alpha$  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  $\partial^2 f / \partial x^2|_{x=x_0}$ , 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 $\exp \left[ -\left( t/\tau_0 \right)^\beta \right],$ $\beta = \left[ 1 + \left( \frac{Q}{T} \right) \right]^{-1}$	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

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

Експериментально виявлено, що в процесі тертя рідка плівка стає все більш тонше, спочатку її фізичні властивості змінюються поступово кількісним чином, а потім зміни набувають різкого якісного характеру [10, 11]. Якісні зміни виражаються в неньютонівському механізмі течії і заміні звичайного плавлення на склування, проте плівка мастила продовжує поводитися як рідина. У трибології таку поведінку називають «змішаним змазуванням», яке представляє проміжний режим тертя, що характеризується переходом від об’ємних властивостей до граничних.

Для тонших плівок зміни найчастіше значніше, оскільки їх властивості змінюються якісно. Так, в даному випадку можуть відбуватися фазові переходи першого роду в твердоподібні або рідиноподібні фази властивості яких неможливо описати — навіть якісно — у 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 в твердих тілах, а їх часи молекулярної дифузії і релаксації можуть більш, ніж на

десять порядків перевищувати значення відповідних часів для об'ємної рідини.

У даному 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, із слюди, кварцу, оксидів металів і мономолекулярних поверхнево-активних речовин між якими при ковзанні поміщалися різноманітні органічні рідини і водні розчини, показали, що такі фазові переходи є швидше правилом, ніж виключенням. При цьому вони проявляють себе в появі переривчастого руху (stick-slip motion), який характеризується періодичними переходами між двома або більшою кількістю динамічних станів під час стаціонарного ковзання.

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

На рисунку 3.1 показана механічна схема взаємодії, яка 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 з постійною швидкістю  $V_0$ . При русі блоку виникає сила тертя  $F$ , що чинить опір його пересуванню. Для ультратонких шарів змащувальних матеріалів в режимі межового тертя швидкості блоку  $V$  і пружини  $V_0$  можуть не збігатися із-за осцилюючого характеру сили  $F$ , що приводить до переривчастого руху блоку. Даний 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 (у англомовній термінології – surface force apparatus (SFA)) і в атомно-силовому мікроскопі (atomic force microscope (AFM)) [12].

Найпростіший спосіб вимірювання динамічних параметрів мастила при терти між двома твердими поверхнями – використання двох атомарно-гладких поверхонь невеликого розміру, наклеєних на сфери-

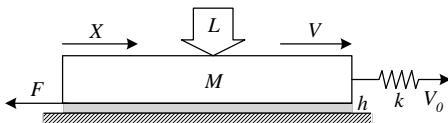


Рисунок 3.1 — Схема трибологічної системи

чні або циліндрові поверхні, які трутуться між собою. Цей принцип використаний при побудові апарату поверхневих сил і атомно-силового мікроскопа.

На верхній панелі рисунку 3.2 зображені типові траєкторії тертя, які отримані за допомогою апарату поверхневих сил для двох ковзаючих поверхонь слюди, розділених змащувальним шаром гексадекана товщиною  $\sim 1$  нм. На нижній панелі малюнка приведені 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 наступає режим переривчастого тертя. З порівняння малюнків видно, що для впорядкування ланцюгових молекул необхідний більший час, ніж для сферичних. Також слід зазначити, що у 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 і зношування деталей, що трутуться. При цьому переривчасте тертя представляє поширеніше явище, яке також обумовлює генерацію звуку (звук струни скрипки, скрип дверей, деренchanня машин), плотське сприйняття (структура смаку і дотики), землетруси, неоднорідні потоки рідини. Переривчастий режим тертя також може служити механізмом, лежачим в основі дискретизації іонних струмів, що управлюють, і дії потенціалів через біологічні мембрани. Таким чином, перед тим як продовжити виклад, розглянемо теоретичні передумови, що по-

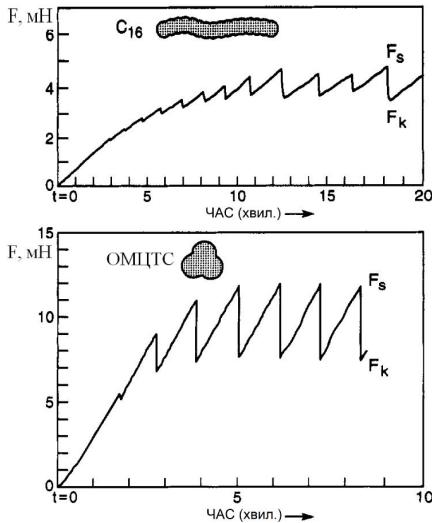


Рисунок 3.2 — Залежність повної сили тертя від часу в експерименті із тертям двох атомарно-гладких поверхонь в апараті поверхневих сил при початку руху у момент часу  $t = 0$ : верхня панель — шар мастила складається з ланцюгових молекул гексадекана; нижня панель — шар складається з квазісферичних молекул октаметилциклотетрасилоксана [13]

яснюють виникнення переривчастого режиму тертя.

### 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 і рідиноподібним станами, і навколо 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, чим унаслідок поступових або безперервних змін. Відповідна модель, показана на рисунку 3.3, припу-

сказає, що внутрішня сила тертя змінюється переривистим чином (під час фазових переходів), а не безперервно. Результатуючий переривчастий режим також відрізняється, наприклад, максимуми є гострішими, і він може зникнути після перевищення деякої критичної швидкості  $V_c$  — наступає кінетичний режим ковзання. Відзначимо, що показаний на рисунку 3.3 зсув при ковзанні порядку тільки двох постійних решітк, в багатьох же практичних випадках він набагато більше. Вказаній тип тертя головним чином можна спостерігати в експериментах з гладкими поверхнями за наявності різних рідких змащувальних матеріалів або парів, що конденсуються [13]. Моделювання проводилося 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 випадку, показаного на рисунку 3.2.

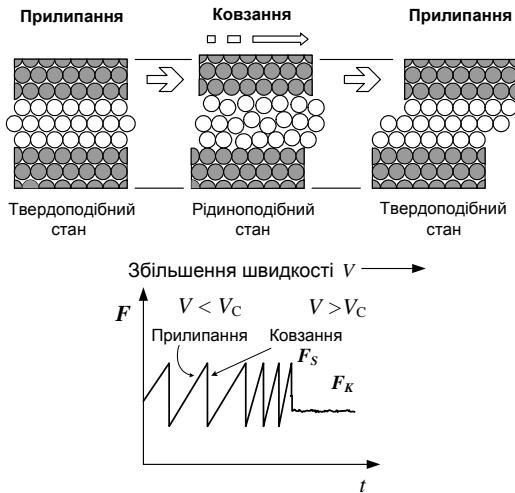


Рисунок 3.3 — Модель «фазових переходів» переривчастого режиму тертя, в якій тонка плівка рідини поперемінно твердне або плавиться впродовж зсуву між двома твердими кристалічними поверхнями, і часова еволюція сили тертя  $F$  при температурі  $T < T_c$  із збільшенням швидкості  $V$  [13]

Оскільки переривчастий рух спостерігається і в експериментах

при незмінній температурі поверхонь тертя, для його пояснення вводиться концепція «зсувного плавлення», яка схематично показана на рисунку 3.3. Цей малюнок пояснює переривчастий (stick-slip) режим. Спочатку мастило твердоподібне (stick), потім при перевищенні деякого критичного напруження  $\sigma$  (напруження текучості) воно різко переходить в рідиноподібну фазу (slip) за рахунок розупорядкування, при цьому верхня поверхня трохи підвідиться. При подальшому русі 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 і об’ємна рідка або тверда фази [13]. Властиві 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 тільки в міжповерхневих плівках властивості яких визначаються не стільки взаємодією молекул мастила друг з другом (що має місце в об’ємних рідинах), як обмеженням і епітаксіальними взаємодіями між атомами плівки і поверхні. При цьому результати моделювання молекулярної динаміки показують, що структура ланцюгових молекул як в твердоподібному, так в рідиноподібному станах (режими злипання і ковзання) не відрізняється.

### 3.1.3 Нова карта і 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;  $\eta_b$  – об’ємна в’язкість змащувального матеріалу;  $h$  – товщина мастила. За традиційною схемою суцільна крива на малюнку показує силу тертя  $F$ , причому виникаюче механічне напруження визначається стандартним чином  $\sigma = F/A$ , а швидкість зсувної деформації –  $\dot{\varepsilon} \equiv V/h$ . Для тонких шарів, поведінка яких відрізняється від об’ємних мастил, сила тертя

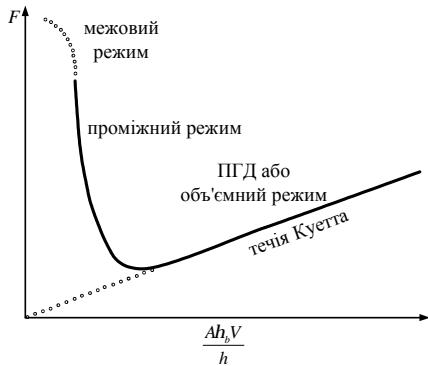


Рисунок 3.4 — Традиційна крива Герсі-Штрибека, на якій суцільна лінія показує, як сила тертя змащувального матеріалу залежить від експериментальних параметрів (ПГД – пружно-гідродинамічний режим) [13]

дається класичним рівнянням для течії Куетта:

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

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]. Ця карта, показана на рисунку 3.5, представляє узагальнену діаграму Герсі-Штрибека<sup>3)</sup>. Із збільшенням навантаження  $L$  ньютонівська течія в'язкої рідини в пружно-гідродинамічному режимі переходить у межовий режим. При великих навантаженнях  $L$  і малій товщині  $h$  мастила сила тертя має максимум (статичне тертя  $F_s$ ). Якщо тепер підвищити швидкість, встановиться переривистий (stick-slip) режим, а подальше зростання  $V$  приведе до постійного значення коефіцієнта тертя  $\mu$ , не залежного від величини швидкості, і відповідно, постійної кінетичної сили тертя  $F_k$ .

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

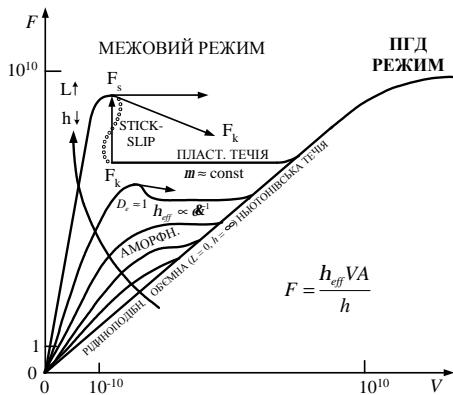


Рисунок 3.5 — Нова карта тертя, що розкриває особливості межового режиму [13]

При малих швидкостях рух може бути ньютонівським навіть для великих значень прикладеного навантаження, але тільки при дуже великих величинах ефективної в'язкості  $\eta_{eff}$ . Швидкість ковзання  $V$  вимірюна в довільних одиницях і значення  $10^{-10}, 10^{10}$  умовно показують великий діапазон.

Для пояснення результатів експериментів в основному використовується феноменологічна концепція фазового переходу плівки мастила з рідиноподібного в твердоподібний стан і навпаки. Слід 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 з тим, що він відбувається в умовах, коли симетрія обох станів плівки істотно змінена, у-перших, наявністю обмежуючих твердих тіл і, в-других, наявністю пружної деформації.

Опису переривчастого руху присвячений ряд теоретичних робіт. У одній з перших представлених феноменологічне матеріальне рівняння, що зв’язує сили тертя з швидкістю, координатами і змінною, що грає роль параметра порядку і відображає ступінь плавлення плівки. Також існує підхід, у якому фазовий перехід плівки мастила розглядається з погляду теорії Ландау в припущені, що є стан часткової термодинамічної рівноваги при повільно змінному параметрі порядку, ква-

драт якого дорівнює модулю зсуву.

Пояснити природу аномальних особливостей межового тертя дозволило, зокрема, експериментальне дослідження реологічних властивостей плівки мастила [13]. Крім того, з цією метою використовувалося теоретичне представлення змашувального матеріалу як в'язко-пружного середовища, що має тепlopровідність. Так, на основі рівняння Гінзбурга–Ландау, де параметр порядку визначає зсувне плавлення і тверднення описана експериментально спостережувана поведінка ультратонкої плівки мастила. Побудована динамічна фазова діаграма, що визначає області рідинного, переривчастого і сухого тертя у координатах температура – товщина плівки. Фазова динаміка у 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.

В якості мастил в таких системах можуть використовуватися металеві монослої, осаджені на слюду. Причому в режимі межового тертя формується фрактальна морфологія поверхні. Наведено експериментальні дані і теоретичні моделі, які свідчать про самоподібний характер переривчастого режиму при сухому терти. Зокрема, за допомогою приладу для випробувань гладких поверхонь тертя із сталі та алюмінію за схемою «штифт–диск» показано, що розподіл імовірності стрибків сили тертя має степеневий вигляд з показником в інтервалі 2.2–5.4, а спектральна густина потужності слідує співвідношенню  $1/f^\alpha$  із  $\alpha$  в інтервалі 1–2.6.

### 3.2 Основні рівняння для опису плавлення ультратонкої плівки мастила

На основі реологічного опису в'язкопружного середовища, що має тепlopровідність, отримаємо систему кінетичних рівнянь, що визначають взаємно узгоджену поведінку зсувних напружень  $\sigma$  і деформації  $\varepsilon$ , а також температури  $T$  в ультратонкій плівці мастила під час тертя між атомарно-гладкими твердими поверхнями. Основою викла-

деного підходу є синергетична концепція фазового переходу [1, 3, 4], яка представляє узагальнення феноменологічної теорії Ландау. Згідно з останньою, фазове перетворення описується параметром порядку  $\phi$ , за степенями якого проводиться розвинення вільної енергії  $F$  [2]. Рівноважне значення  $\phi$  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  $\eta$  – кінетичний коефіцієнт, який можна розглядати як узагальнену в'язкість. При величині  $\phi$  близькій до рівноважного значення  $\phi_0 = 0$ , використовується лінійне наближення  $\partial F / \partial \phi \approx \phi / \chi$ , де  $\chi \equiv \partial \phi / \partial h = (\partial^2 F / \partial \phi^2)^{-1}$  – сприйнятливість. В результаті релаксаційне рівняння (3.3) набирає лінійний вид

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

де

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

представляє час релаксації.

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

Для в'язкопружного середовища модуль зсуву  $G$  грає роль зворотної сприйнятливості. У випадках в'язкопружного переходу і переходу типу зміщення (наприклад, мартенситного) модуль  $G$  прямує до нуля поблизу точки переходу, і час релаксації розходиться. У деяких роботах використовується той факт, що узагальнена сприйнятливість фактично не залежить від температури, а в'язкість сильно зростає

при температурі склування. Таким чином, аномальне велике значення сприйнятливості типово для фазового переходу, і аномальне велике значення кінетичного коефіцієнта (в'язкості) властиво склуванню.

Згідно з наведеними в попередньому підрозділі даними, мастило представляє дуже в'язку рідину, яка поводиться подібно аморфному твердому тілу — має велику ефективну в'язкість і характеризується межею текучості [13]. Основне припущення використаного підходу полягає в тому, що релаксаційне рівняння для  $\sigma$  має вид, 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 дебайську релаксацію за час  $\tau_\sigma \equiv \eta_\sigma/G$ , що визначається ефективною в'язкістю  $\eta_\sigma$  та нерелаксованим модулем зсуву  $G \equiv G(\omega)|_{\omega \rightarrow \infty}$  ( $\omega$  — кругова частота періодичного зовнішнього впливу). Через заміну  $\varepsilon/\tau_\sigma$  на  $\partial\varepsilon/\partial t$  рівняння (3.6) зводиться до співвідношення Максвелла для опису в'язкопружного середовища, що широко використовується в теорії межового тертя [10]:

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

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

Релаксаційна поведінка в'язкопружного мастила в процесі тертя описується також рівнянням Кельвіна—Фойгта

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

де  $\tau_\varepsilon$  — час релаксації деформації,  $\eta$  — зсувна в'язкість. Другий доданок у правій частині описує течію в'язкої рідини під дією зсувної компоненти напружень. В стаціонарному випадку  $\dot{\varepsilon} = 0$  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  $\eta$ . Okрім цього, слід 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  $\eta_0$  – характерне значення зсувної в'язкості  $\eta$  при  $T = 2T_c$ . Це обумовлено тим, що параметри  $G_\varepsilon$ ,  $G$ ,  $\eta_\sigma$  дуже слабко залежать від температури, у той час як дійсна в'язкість  $\eta$  має розбіжність при зменшенні температури до критичного значення  $T_c$ . Реологічні властивості плівок мастила досліджуються експериментально, що дозволяє побудувати фазову діаграму [13].

Згідно з синергетичною концепцією [1] для доповнення системи рівнянь (3.6), (3.8), які мають параметр порядку  $\sigma$ , спряжене поле  $\varepsilon$  та керувальний параметр  $T$ , необхідно отримати кінетичне рівняння для температури. Таке рівняння може бути виведене із основних співвідношень теорії пружності. Будемо виходити із виразу, який 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 у випадку механічного навантаження твердого тіла (в рівновазі зміна кількості тепла  $\delta Q = TdS$ ). В нерівноважному випадку неоднорідного нагріву середовища цей зв'язок має вид:

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

Тут потік тепла визначається співвідношенням Онзагера

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

де  $\kappa$  – коефіцієнт теплопровідності і повне напруження  $\sigma = \sigma_{el} + \sigma_v$  містить також в'язку складову  $\sigma_v = \eta \dot{\varepsilon}$ . Відімакаючи (3.11) від (3.10), враховуючи 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 та 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  $\rho$  — густина мастила,  $c_v$  — питома теплоємність,  $h$  — товщина мастила або відстань між поверхнями, що трутися, а також використані наближення  $(\kappa/h^2)(T_e - T) \approx -\operatorname{div} \mathbf{q}$  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 у лінійному наближенні  $T(\partial \sigma_{el}/\partial T)\dot{\varepsilon} \approx \sigma_{el}\dot{\varepsilon}$ . В 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 і, при цьому, має три ступеня свободи, що дозволяє описувати нетривіальну поведінку при плавленні тонкої плівки мастила [1].

Обезроздріювання рівнянь (3.6), (3.8), (3.15) дозволить скоротити число сталих, що розглядаються. Введемо одиниці виміру для змінних  $\sigma, \varepsilon, T$ :

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

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 з синергетичною системою Лоренца, в 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.

В рівняннях (3.17)–(3.19) для урахування впливу флуктуацій основних параметрів введені  $\delta$ -корельовані гаусові стохастичні джерела  $\xi_i(t)$  з інтенсивностями  $I_\sigma$ ,  $I_\varepsilon$  та  $I_T$ , котрі в свою чергу виміряні в одиницях  $\sigma_s^2$ ,  $\varepsilon_s^2 \tau_\varepsilon^{-2}$ ,  $(T_c \kappa / h)^2$  відповідно. Моменти функцій  $\xi_i(t)$  визначаються так<sup>4)</sup>:

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

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

Згідно з таким підходом твердоподібний стан мастила відповідає зсувиною напруженням  $\sigma = 0$ , оскільки при цьому рівняння (3.17) випадає із розгляду ( $\dot{\sigma} = 0$ ). Рівняння (3.18), що містить в'язкі напруження, можна звести до закону Дебая, що представляє швидку релаксацію зсувиної 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. При цьому рівняння тепlopровідності (3.19) набуває виду найпростішого виразу для релаксації температури до значення  $T_e$ , з якого зникають доданки, що представляють 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 адіабатичним наближенням, в рамках 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  $T(t)$  слідують зміні напружень  $\sigma(t)$ . Використовуючи визначення

---

<sup>4)</sup>Множник 2 вибраний для того, щоб відповідне рівняння Фоккера–Планка мало більш простий вид.

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 виді:

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

згідно котрому 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 і отримуємо рівняння типу Ландау–Халатнікова:

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

де синергетичний потенціал має вигляд

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

У стаціональному стані виконується умова  $\dot{\sigma} = 0$ , і потенціал (3.25) набирає мінімум. При температурі  $T_e$  менше критичного значення

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

даний мінімум відповідає напруженню  $\sigma = 0$ , при цьому плавлення не відбувається, і реалізується твердоподібний стан мастила (крива 1 на рис. 3.6a). У протилежному разі при  $T_e > T_{c0}$  стаціонарне значення напруження відмінно 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 і його переходу в рідиноподібний стан. Відповідні стаціонарні значення деформації і температури:

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

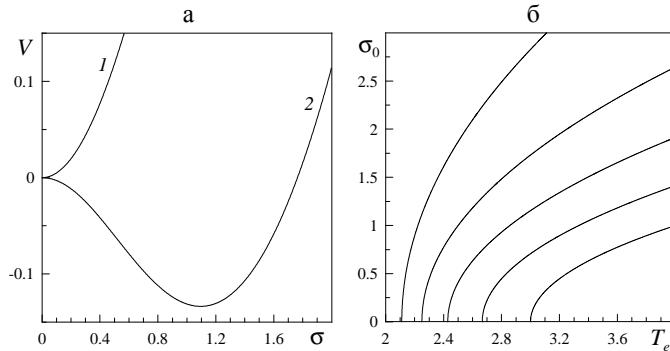


Рисунок 3.6 — Залежність синергетичного потенціалу (3.25) від напруження для фазового переходу другого роду (а) при  $g = 0.5$  (крива 1 відповідає  $T_e = 1 \leq T_{c0}$ , крива 2 —  $T_e = 4.2 > T_{c0}$ ) і залежність стаціонарних значень зсувних напружень  $\sigma_0$  від температури  $T_e$  (3.27) (б). Криві відповідають значенням  $g = 0.5, 0.6, 0.7, 0.8, 0.9$  і розташовані справа наліво

Слід зазначити, що, з одного боку, величина температури плавлення  $T_0$  співпадає з критичним значенням (3.26) і, з іншого боку, вона відрізняється від температури  $T_e$ . Це має місце завдяки тому, що в стаціональному стані реалізується перша рівність (3.28) замість зв'язку  $\sigma_0 = \varepsilon_0$ . Оскільки  $T_{c0}$  представляє мінімальне значення температури, при якій починається перехід з твердоподібного в рідиноподібний стан, вказане означає, що від'ємний зворотний зв'язок зсувних напружень  $\sigma$  і деформації  $\varepsilon$  з температурою  $T$  (див. третій доданок в правій частині рівняння (3.19)) зменшує температуру мастила настільки, що процес самоорганізації забезпечується тільки на межі. У стаціональному стані в'язкість при плавленні приймає значення

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

Можливі дві протилежні ситуації залежно від величини параметра  $g = G/G_0$ . У випадку  $g \gg 1$ , при якому характерна в'язкість  $\eta_0$  має мале значення, вирази (3.26) — (3.28) набирають вигляд:

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

Така ситуація відповідає межі дуже в'язкої рідини. У протилежному випадку  $g \ll 1$ , що відповідає великому значенню  $\eta_0$ , замість (3.30), маємо межу твердоподібного (замерзлого) стану

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

При ненульових значеннях напружень  $\sigma$  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  $\sigma_v$  приводить до пластичної течії рідиноподібного мастила зі швидкістю  $V = h\dot{\varepsilon}/dt$ . Зокрема, у випадку апарату поверхневих сил [12] в 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  $\varepsilon$  та частоти коливань  $\omega$ .

Показано, що пластична течія шару мастила реалізується при наявності у ньому пружних напружень. При цьому 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  $\eta_{eff}$  – ефективна в'язкість, котра не співпадає з дійсною в'язкістю і знаходиться лише експериментально,  $A$  – площа контакту. Комбінування рівнянь (3.32) і (3.33) дає вираз для швидкості через напруження:

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

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

Більш того, при відсутності деформації зсуву теплове середньоквадратичне відхилення молекул (атомів) визначається рівністю  $\langle u^2 \rangle = T/Ga$ . Середнє значення відхилення за рахунок зсуву знаходиться із співвідношення  $\langle u^2 \rangle = \sigma^2 a^2 / G^2$ . Повне середнє квадратичне відхилення дорівнює сумі цих виразів за умови, що теплові флюктуації і напруження незалежні. Це означає, що плавлення мастила спричиняється як нагріванням, так і впливом напружень, створених твердими поверхнями під час тертя. Останнє узгоджується із розглядом нестійкого твердоподібного стану в межах подання зсувного динамічного плавлення при відсутності теплових флюктуацій. Таким чином, флюктуації деформації, що пов'язані з напруженнями і теплові флюктуації слід розглядати окремо. Будемо вважати, що плівка мастила стає більш рідиноподібною і 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  $\varepsilon \geq \varepsilon_m$  ( $\sigma_m, \varepsilon_m$  – 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 полога 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 при характерних значеннях зсувних напру-

жень  $\sigma_p$  і деформації  $\varepsilon_p$ . Слід зазначити, що при описі структурних фазових переходів рідиноподібного мастила характерна наявність інваріантів третього порядку, що порушують парність залежності синергетичного потенціалу  $V$  від напружень  $\sigma$ . Тому в наближенні (3.35) використовувався лінійний член  $\sigma/\sigma_p$  ( $\beta = 1$ ), замість квадратичного  $(\sigma/\sigma_p)^2$  ( $\beta = 2$ ), і відповідна залежність  $V(\sigma)$  вже не була парною. Таким чином, непарні значення  $\beta$  відповідають експерименту, в якому ковзання блока у взаємно протилежних напрямках не еквівалентно з енергетичної точки зору.

Перехід до розгляду фазового перетворення першого роду досягається заміною постійного коефіцієнта  $g$  у (3.17) залежністю (3.35) в 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 даного випадку 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 варіанту вдалося провести повніше аналітичне дослідження, тому він представлений докладніше. Нижче показано, що для значення  $\beta = 1$  результати аналогічні.

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

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

При малих значеннях  $T_e$  залежність  $V(\sigma)$  має монотонно зростаючий

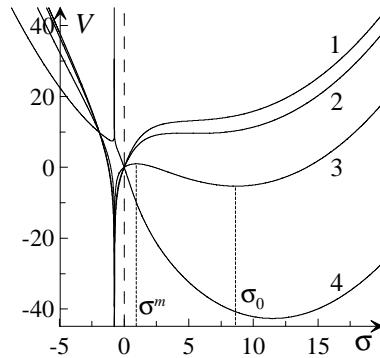


Рисунок 3.7 — Залежність синергетичного потенціалу (3.42) від напруженень для фазового переходу першого роду при  $g_\theta = 0.6$ ,  $\theta = 0.1$ ,  $\alpha = 0.75$  і різних температурах: 1 —  $T_e < T_c^0$ ; 2 —  $T_e = T_c^0$ ; 3 —  $T_c^0 < T_e < T_{c0}$ ; 4 —  $T_e \geq T_{c0}$

вигляд з мінімумом в точці  $\sigma = 0$  (крива 1). При температурі

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

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

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» і твердоподібної «невпорядкованої» фаз (крива 3). З подальшим зростанням температури поверхонь  $T_e$  мінімум рідиноподібної фази заглибується, а висота міжфазного бар'єру спадає, зникаючи при критичному значенні  $T_{c0} = 1 + \theta/g_\theta = 1 + g^{-1}$  (3.26). Стационарні значення напруженень даються 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. При  $T_e \geq T_{c0}$  крива  $V(\sigma)$  має той же вигляд, що і для фазового переходу другого роду (крива 4).

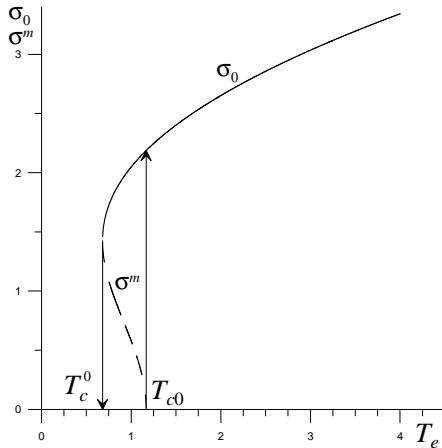


Рисунок 3.8 — Залежність стаціонарних значень напружень від температури  $T_e$  при  $g_\theta = 0.6$ ,  $\theta = 0.1$ ,  $\alpha = 0.75$  (сущільна крива відповідає стійкому значенню  $\sigma_0$ , штрихова крива — нестійкому  $\sigma^m$ )

У разі, коли  $\beta = 1$ , синергетичний потенціал є непарною функцією  $\sigma$  і визначається виразом (див. рис. 3.7)

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

Залежність  $V(\sigma)$  при  $\sigma > 0$  аналогічна випадку  $\beta = 2$ . Для визначення координат осібливих точок системи необхідно розв'язати кубічне рівняння, в результаті виходять громіздкі вирази, які тут не наводяться.

### 3.5 Вплив адитивного некорельованого шуму

У будь-якій системі існують флюктуації, і вони математично описуються шумами. Шуми вводяться тоді, коли розв'язується завдання з безліччю неоднорідностей, дефектів, зовнішніх дій і т.д. Коли не можна описати всі існуючі дії якось об'єктивно. Дій множина, і їх вплив якісно можна представити як шум. Урахування шуму узагальнює описане явище, оскільки вже припускає синергетичний підхід, в якому реалізуються не рівноважні термодинамічні стани, а стаціонарні. Таким чином, урахування шуму дозволяє зробити модель, що спочатку ідеалізується, більш наближено до експерименту. Фактично робиться наступний висновок — якщо в системі присутні флюктуації, то може встановлюватися переривчасте тертя, спостережуване експериментально. Тобто робота присвячена з'ясуванню причин, що приводять до переривчастого тертя, і така причина знайдена.

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  $\sigma(t)$ , в цьому випадку часові ряди є мультифрактальними. Тому введення випадкових сил (шумів) якраз покликане врахувати шорсткості поверхонь і неоднорідності, які не присутні в моделі явним чином.

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  $d(\sigma) \equiv (1 + \sigma^2)^{-1}$ . В них флюктуаційні складові походять із відомої властивості адитивності дисперсії гаусових випадкових величин.

Таким чином, синергетичний принцип підпорядкування [1] перетворює адитивні шуми деформації  $\varepsilon$  і температури  $T$  на мультиплікативні. В 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  $t$  вимірюється в одиницях часу релаксації напружень  $\tau_\sigma$ .

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

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

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). Більш того, безпосереднє використання адіабатичного наближення в (3.18) і (3.19) приводить до флюктуаційних доданків в залежностях (3.43) у виді  $\tilde{\varepsilon} \equiv (I_\varepsilon^{1/2} + I_T^{1/2}\sigma)d(\sigma)$ ,  $\tilde{T} \equiv (I_T^{1/2} - I_\varepsilon^{1/2}\sigma)d(\sigma)$ . Останній доданок очевидно не є фізичним, оскільки ефективний шум температури  $\tilde{T}$  повністю зникає при напруженнях  $\sigma = \sqrt{I_T/I_\varepsilon}$ . Формальною причиною такого протиріччя є те, що до рівняння Ланжевена не можуть бути застосовані звичайні методи аналізу.

Для подальшого розгляду доможемо (3.45) на  $dt$  і отримаємо 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 з властивостями:

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

В загальному випадку рівнянню (3.48) може відповідати множина форм рівняння Фоккера–Планка. Рівняння Фоккера–Планка у формі Іто має більш простий вид. У подальшому будемо виходити із числення

Стратоновича, оскільки останнє дозволяє автоматично врахувати ефекти пам'яті, що мають місце при плавленні ультратонких плівок мастила за рахунок їх малих розмірів. Відповідне рівняння Фоккера–Планка з урахуванням (3.49) записується у виді:

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

З часом розподіл розв'язків (3.48) стає стаціонарним, і його явний вид може бути знайдений з (3.50) при  $\partial P(\sigma, t)/\partial t = 0$ :

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

де ефективний потенціал подається рівністю

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

Точки екстремуму розподілу (3.51) визначаються умовою  $dU/d\sigma \equiv dI/d\sigma - 2f = 0$ . Або у явному виді:

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

де  $x \equiv 1 + \sigma^2$ . Вираз (3.53) відрізняється від отриманого у разі числення Іто. Однак при збільшенні в (3.53) інтенсивностей шумів  $I_T, I_\varepsilon$  в 2 рази розрізnenня зникає. Тому проведений далі аналіз, що базується на вивчені екстремумів функцій розподілу (побудова фазових діаграм, інтерпретування стаціонарних станів) при використанні числення Стратоновича співпадає з результатами, отриманими в рамках підходу Іто. Однак потенціал (3.52) не можна звести до раніш отриманого простим перенормуванням інтенсивностей шумів, оскільки він відрізняється від останнього тільки видом першого доданку (наявністю коефіцієнту  $1/2$ ). Тому часові ряди напружень різняться. Оскільки запропонована робота має за мету дослідження особливостей еволюції напружень у часі, то ми використовуємо числення Стратоновича.

При фіксованій інтенсивності  $I_\varepsilon$  фазова діаграма має вигляд, показаний на рисунку 3.9а, при фіксованій інтенсивності  $I_T$  – на рисунку 3.9б. Лінії 1', 2' на діаграмах відповідають межам 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 цієї прямої завжди реалізується максимум  $P(\sigma)$  при  $\sigma = 0$ , а вище неї цей максимум не існує. На діаграмі видно три області, які 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 ненормований розподіл 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 розподілу при  $\sigma_0 = 0$ . Двофазна область  $SS$  діаграми характеризується співіснуванням максимумів розподілу  $P(\sigma)$  при нульовому і ненульовому значеннях напружень (точка 2). Точка 3 знаходиться в області, де спостерігається один максимум розподілу ймовірності при  $\sigma_0 \neq 0$ , що відповідає режиму рідинного тертя або ковзанню. Залежності  $P(\sigma)$  на рисунку 3.10 побудовані в подвійному логарифмічному масштабі. Видно, що для кривих  $DF$  и  $SS$  розподіл набуває спадаючого степеневого виду. Такий режим відповідає значенням  $\sigma \ll 1$  і  $I_\sigma, I_\varepsilon \ll I_T$ , при котрих (3.51) можна звести до виду

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

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

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

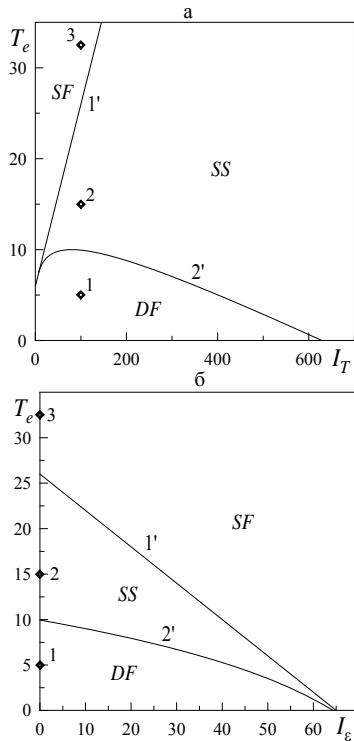


Рисунок 3.9 — Фазові діаграми при  $g = 0.2$  з областями рідинного ( $SF$ ), сухого ( $DF$ ) і переривчастого ( $SS$ ) тертя: а — при  $I_\varepsilon = 0$ ; б — при  $I_T = 100$

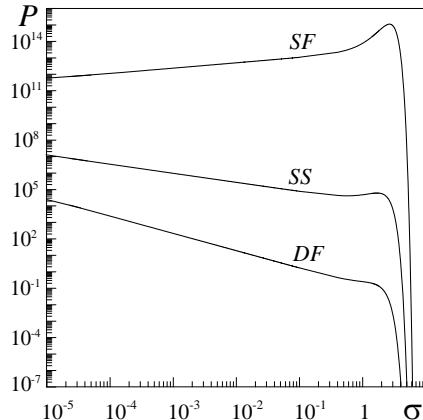


Рисунок 3.10 — Функція розподілу (3.51) при  $I_\sigma = 10^{-20}$ ,  $I_\varepsilon = 0$ ,  $I_T = 100$  і режимах, показаних точками на рисунку 3.9: 1 —  $T_e = 5$  ( $DF$ ); 2 —  $T_e = 15$  ( $SS$ ); 3 —  $T_e = 32.5$  ( $SF$ )

Відомо, що самоподібним системам відповідає однорідна функція розподілу. Розподіл (3.55) буде однорідним в тому випадку, коли функція (3.56) — константа. При малих значеннях напружень множник перед експонентою  $1 + \sigma^2 \rightarrow 1$ . Проаналізуємо доданки під знаком експоненти, котрі роблять внесок у розподіл. Перший доданок під час малих напружень за рахунок четвертої степені робить незначний внесок, а оскільки  $g < 1$ , він завжди від'ємний, тобто, з іншого боку, під час великих напружень розподіл набуває експоненціально спадаючого виду. Другий та третій доданки при високих значеннях температури із зростом напружень також зростають, тому, як видно із рисунку 3.10, в режимі  $SF$  степенева асимптотика  $P(\sigma) \propto \sigma^{-1}$  не спостерігається, і ймовірність при малих значеннях стає зростаючою функцією. Таким чином, наявну самоподібну поведінку слід очікувати при температурах, для яких в області  $\sigma < 1$  другий і третій доданки із зростом напружень зменшуються, тобто при  $T_e < 1 + g^{-1}$ .

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

## 3.6 Часові ряди напружень

Для числового розв'язання рівняння (3.48) скористуємося методом Ейлера. В нашому випадку (3.48) являє собою стохастичне диференціальне рівняння (СДУ) Стратоновича. Для застосування звичайної ітераційної процедури необхідно від СДУ Стратоновича перейти до еквівалентного СДУ Ито. Рівнянню (3.48) з урахуванням (3.49) відповідає СДУ Ито у виді [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) отримуємо 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  $t \in [0, T]$ . При заданій 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 рівномірний розподіл. Ефективний потенціал (3.52) має мініуми при додатному та від'ємному значеннях напружень  $\sigma$ . Тому при числовому розв'язанні рівняння (3.57) за рахунок флюктуацій можуть здійснюватись переходи системи між станами, що відповідають зазначеним мініумам. Оскільки ми розглядаємо рух верхньої поверхні, що зсувається

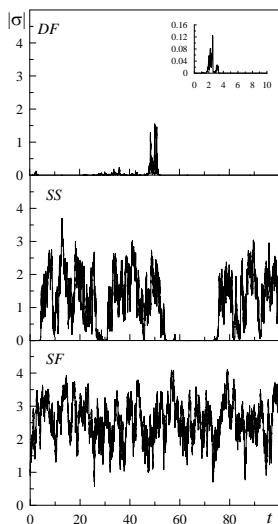


Рисунок 3.11 — Часові ряди напруженень  $|\sigma|(t)$ , отримані в результаті ітераційної процедури (3.58) при  $N = 10^4$ ,  $t = 100$ ,  $\Delta t = 0.01$ . Режими, вказані на рисунку, відповідають точкам на фазовій діаграмі (рис. 3.9)

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

При сухому терти (режим  $DF$ ) видно довготривалі ділянки, на яких напруження близькі до нульового значення, розмежовані вузькими піками. На вставленні до рисунку показана залежність  $|\sigma|(t)$  при багатократному збільшенні. Видно, що характер поведінки при збільшенні масштабу не змінюється, що відповідає самоподібній поведінці. При параметрах переривчастого тертя ( $SS$ ) відбуваються випадкові переходи між нульовим і ненульовим значеннями напружень  $\sigma$ . В режимі рідинного тертя  $SF$  відбуваються флюктуації біля ненульового середнього значення напружень.

## 3.7 Вплив корельованих флюктуацій температури на плавлення плівки мастила

У даному 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. Врахування шуму дозволяє описати переривчастий stick-slip режим.

### 3.7.1 Представлення кольорового шуму і 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 випадок, коли сила тертя змінюється в часі випадковим чином. Такий режим виявлений методами молекулярної динаміки і 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 швидкість зсуву близька до критичного значення. Очевидно,

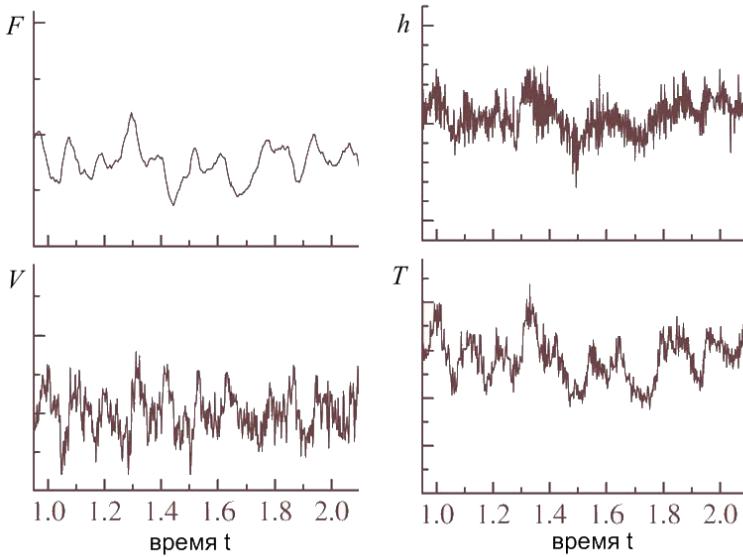


Рисунок 3.12 — Часові залежності сили тертя  $F$ , швидкості верхньої зсувної поверхні  $V$ , товщини мастила  $h$  і температури мастила  $T$  [14].

даний режим викликаний флюктуаціями, які виявляються істотними за рахунок малого розміру. Причому флюктуації здійснюють також температура мастила  $T$ , яка представляє середню величину. З'ясуємо причину таких флюктуацій.

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  $N$  — повне число атомів. Вираз (3.61) представляє середнє значення, біля якого відбуваються флюктуації енергії частинок, що складають систему. При великій кількості частинок система з часом приходить до стану термодинамічної рівноваги, при якому значення (3.61) не змінюється у часі. Проте ми розглядаємо систему, в якій кількість частинок обмежена

(плівка мастила має товщину в декілька атомних шарів). Тому значення (3.61) змінюється з часом випадковим чином за рахунок флюктуацій швидкості обмеженого числа частинок і його вже не можна вважати за постійне середнє значення. Таким чином, енергія буде флюктуювати. При змінах кінетичної енергії (3.61) потенційна енергія змінюється таким чином, що повна енергія системи завжди залишається постійною.

Кінетична енергія системи і її температура зв'язані наступним співвідношенням:

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

де  $i$  – число ступенів свободи (у нашому випадку  $i = 3$ ),  $k$  – стала Больцмана. Порівнюючи (3.61) і (3.62), набуваємо миттєвого значення температури:

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

Для обчислення температури даної системи необхідно в (3.63) додатково проводити усереднювання за часом. Проте, як показано вище, дане значення для ультратонких плівок не є постійним. Наприклад, коли зсувні напруження перевищують критичне значення, настає плавлення, при якому швидкості частинок мастила зростають, оскільки система стає менш упорядкованою. Збільшенню флюктуацій також сприяє неоднорідність системи – дефекти кристалічної будови мастила, нерівності поверхонь тертя, домішки у використовуваному мастилі, неоднорідний розподіл температури термостата і тому подібне. Вказані ефекти в експериментальних ситуаціях завжди мають місце. Для їх врахування і вводяться в розгляд флюктуації енергії.

Далі розглядається вплив флюктуацій енергії (3.61). Використовуючи лінійний зв'язок між енергією і температурою (3.62), врахуємо флюктуації енергії, ввівши флюктуації температури, яка явно входить в еволюційні рівняння. Далі під флюктуаціями температури маються на увазі флюктуації кінетичної енергії частинок мастила. Проте флюктуації температури таким чином можна вводити тільки для ультратонких плівок мастил, що складаються з обмеженого числа частинок.

Флюктуації температури, показані на рисунку 3.12, на відміну від білого шуму, є корельованими. Це вітікає з того, що згідно з рисунком,

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

Введемо флюктуації 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 і середньою температурою. В рамках припущення про квазістационарність флюктуацій  $\Delta T_D$  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 зв'язані рівністю  $t + \tau = t'$ , отримуємо:

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

Тоді, підстановка середнього квадрата флюктуацій 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 флюктуації описуються процесом Орнштайн–Уленбека  $\lambda(t)$  [8], який має наступні 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 флюктуацій температури, а  $\tau_\lambda$  – часу їх кореляції. Для опису впливу кореляції температури процес  $\lambda(t)$  далі враховується в безрозмірному рівнянні (3.19) як додатковий температурний доданок. Тому величини  $\lambda$ ,  $I$  в (3.68) вже 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) отримуємо:

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

Отже, величина інтенсивності шуму  $I$  однозначно визначається температурою і 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 у вказаних координатах, рух по якій і описує еволюцію системи. Проте, це не має місця, оскільки параметр  $T_e$  представляє температуру термостата, яка не визначає однозначно температуру  $T$ . Слід 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  $c_v$  з часом. Таким чином, доречно говорити про існування фазової діаграми. Інтенсивність  $I$  можна також змінювати за рахунок вибору параметра  $\zeta$ , що характеризує конкретну систему. Останнє означає, що в одних системах шум не робить істотного впливу на їх поведінку з часом, а в інших впливає критичним чином.

Проте, тут, не обмежуючись таким підходом, флюктуації температури розуміються в ширшому сенсі. Це пов'язано з тим, що як правило, термічний вплив роблять різні зовнішні стохастичні джерела. Крім того, шум можна рівноправним чином інтерпретувати як при допомозі флюктуацій  $T$ , так і  $T_e$ . Дане представлення шуму часто використовується при моделюванні його в реальних фізичних системах [8].

Процес Орнштайн-Уленбека  $\lambda(t)$  представляє реалізацію корельованих випадкових блукань. Мається на увазі, що із збільшенням швидкості частинки збільшується імовірність її зіткнення з іншою частинкою. При цьому всі частинки повертаються до нульової швидкості тим швидше, чим більше їх швидкість. Процес є коловоровим гауссовим шумом з ненульовим часом кореляції  $\tau_\lambda$  і інтенсивністю  $I$ . Він може бути отриманий при розв'язанні 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 з нульовим середнім значенням і інтенсивністю  $I$ :

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

При цьому джерело  $\lambda(t)$  на великих часових інтервалах подібне більшому шуму  $\xi(t)$ , а на малих – броунівському руху, і в стаціонарній межі ( $t, t' \gg \tau_\lambda$ ) має моменти (3.68).

Помноживши (3.71) на  $dt$  отримаємо 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 володіє властивостями:

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

Для числової реалізації  $\lambda(t)$  розв’яжемо рівняння (3.73), скориставшись при цьому методом Ейлера. З урахуванням визначення дискретного аналогу диференціала випадкової сили  $dW(t) \equiv \sqrt{\Delta t}W_n$  отримаємо наступну 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 при заданій кількості ітерацій  $N$  приріст часу визначається як  $\Delta t = T/N$ . Випадкова сила  $W_n$  має наступні 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 число із властивостями (3.76). Псевдовипадкові числа  $r_1$  і  $r_2$  мають рівномірний розподіл і повторюються через певний інтервал.

На рисунку 3.13 представлена реалізація (3.77) для різних часових масштабів. Характер поведінки для обох масштабів подібний, шум

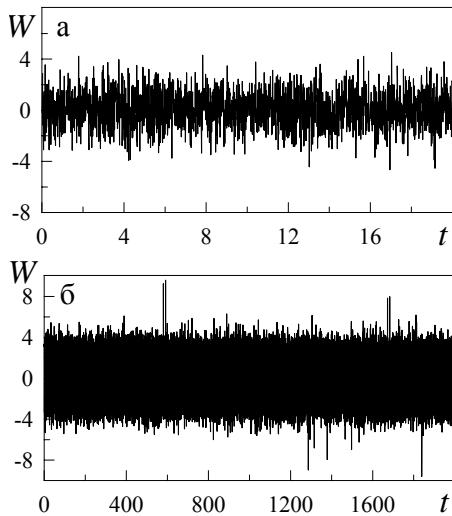


Рисунок 3.13 — Реалізація білого шуму (3.77) при  $I = 1$  ( $\mu^2 = 2I$ ): а —  $N = 2 \cdot 10^3$ ,  $T = 20$ ,  $\Delta t = 0.01$ ; б —  $N = 2 \cdot 10^5$ ,  $T = 2 \cdot 10^3$ ,  $\Delta t = 0.01$ .

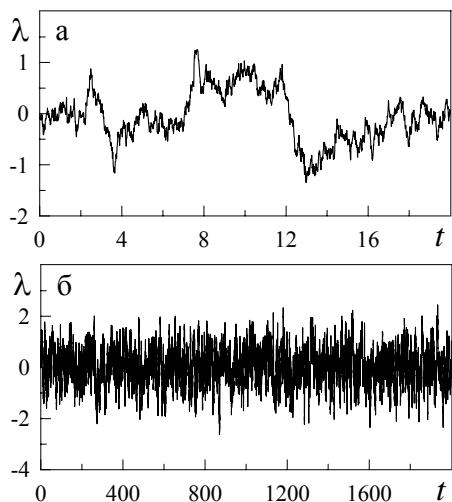


Рисунок 3.14 — Реалізація кольорового шуму (3.75) при  $I = 1$  ( $\mu^2 = 2I$ ),  $\tau_\lambda = 2.0$ : а —  $N = 2 \cdot 10^3$ ,  $T = 20$ ,  $\Delta t = 0.01$ ; б —  $N = 2 \cdot 10^5$ ,  $T = 2 \cdot 10^3$ ,  $\Delta t = 0.01$ .

є некорельзованим. Процес Орнштайні—Уленбека  $\lambda(t)$  для аналогічних інтервалів часу представлений на рисунку 3.14. Видно, що на коротких інтервалах (рис. 3.14а) він подібний броунівському руху, і тут кожне подальше значення залежить від попереднього, тобто шум є корельзованим. 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 Орнштайні—Уленбека має кінцеву дисперсію, його часто використовують як модель реального шумового сигналу.

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

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

В рамках адіабатичного наближення

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

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

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

Додамо системі (3.17), (3.18), (3.80) більш простий вигляд, 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) із врахуванням (3.81) набирають 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), отримаємо 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  $\gamma$ , сила  $f$ , амплітуда шуму  $\phi$  і параметр  $m$ , що зводиться до маси системи, визначаються виразами

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

### 3.7.2 Метод ефективного потенціалу

Знайдемо розподіл системи у фазовому просторі, що параметризується узагальненими «координатою»  $\sigma$  і «імпульсом»  $p \equiv m\dot{\sigma}$  залежно від часу  $t$ . З цією метою скористаємося методом ефективного потенціалу, описаним тут на основі роботи [15]. Представимо 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 імовірності наявності значення напружень  $\sigma$  і швидкості його зміни  $\dot{\sigma}$  у заданий момент часу  $t$ . Вона є усередненою за шумом  $\lambda$  функцією розподілу  $\rho(\sigma, p, t)$  розв'язків системи (3.86):

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

Припускається, 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

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

де введені оператори

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

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

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

Враховуючи, що фізичний час  $t$  набагато перевищує час кореляції шуму  $\tau_\lambda$ , верхню межу інтегрування можна покласти рівною  $\infty$ . Тоді розвинення експонент в (3.91) приводить до виразу

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

де оператор розсіяння

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

визначається комутаторами за рекурентною формулою

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

$([\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})$  і моментами кореляційної 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 рівні

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

У загальному випадку подальший розгляд не представляється можливим, тому скористаємося спрощуючим припущенням, яке полягає в видленні малого параметра  $\epsilon \ll 1$ , співпадаючого з числом Кубо [15]. Вважаючи в рівнянні (3.84) коефіцієнт  $m = \epsilon^2$  і вимірюючи

узагальнений «імпульс» у одиницях  $\epsilon$ , досліджуємо випадок передемпфованого осцилятора, в якому сила рідкого тертя перевищує решту складових в  $\epsilon^{-1} \gg 1$  разів. Тоді рівняння (3.86) набирають 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

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

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

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

Оскільки плавлення мастила характеризується напруженнями  $\sigma$  і часом  $t$ , то розглянемо проекцію функції розподілу на напівпростір  $(\sigma, t)$ . Для цього перейдемо до рівняння Фоккера–Планка відносно функції  $P(\sigma, t)$ , використовуючи моменти початкового розподілу  $P_n(\sigma, t) \equiv \int p^n \Pi(\sigma, p, t) dp$ , нульовий з яких дає необхідний результат. Умножаючи рівняння (3.98) на  $p^n$  і інтегруючи за всіма імпульсами приходимо до рекурентного співвідношення

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

Далі на основі ієрархічного підходу до (3.100) запишемо рівняння Фоккера–Планка. При  $n = 0$  отримуємо 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

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

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

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

В 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 і дифузії

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

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

Стаціонарний розв'язок рівняння (3.104) приводить до розподілу

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

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 і дифузії в явному вигляді:

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

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

Розподіл (3.107), показаний на рисунку 3.15, має максимуми, положення яких визначаються набором величин  $T_e$ ,  $g$ ,  $I$ ,  $\tau_\lambda$ ,  $\tau_\varepsilon$  і  $\tau_\sigma$ . При малих

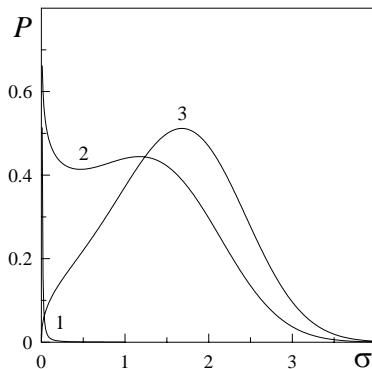


Рисунок 3.15 — Функція розподілу зсувних напружень (3.107) для переходу другого роду при  $g = 0.2$ ,  $\tau_\sigma = \tau_\varepsilon = 0.1$ ,  $\tau_\lambda = 0.2$  і  $I = 5$ . Криві 1, 2, 3 відповідають температурам  $T_e = 5, 16, 20$  відповідно.

значеннях температури поверхонь  $T_e$  реалізується єдиний максимум в точці  $\sigma_0 = 0$ , відповідаючий твердоподібному станові мастила і режиму сухого тертя (крива 1). Із зростанням  $T_e$  з'являються два максимуми в точках  $\sigma_0 = 0$  і  $\sigma_0 \neq 0$  (крива 2), перший з них відповідає сухому терту,

другий — ковзанню поверхонь. Тут реалізується режим переривчастого (stick-slip) руху, при якому відбуваються випадкові переходи між вказаними динамічними режимами тертя. Це характерно для режиму перемежання при плавленні мастила, коли має місце суміш твердоподібного і рідиноподібного станів. З подальшим збільшенням  $T_e$  максимум  $P(\sigma)$  при нульовому значенні напруженень зникає (крива 3), і спостерігається режим рідинного тертя, відповідаючий ковзанню.

Стаціонарний стан зсувних напруженень визначається умовою екстремуму розподілу (3.107)

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

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

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

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

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

яке забезпечує перехід системи до рідинного режиму тертя. Видно, що  $T_{e0}$  росте при збільшенні інтенсивності шуму  $I$  і часу кореляції  $\tau_\lambda$ . Зворотним чином впливають величини часів релаксації зсувних напруженень і деформації. На фазовій діаграмі, наведеній на рисунку 3.17, реалізується область сухого (DF), рідинного (SF) і переривчастого (SS) режимів тертя. Зростання часу кореляції  $\tau_\lambda$  приводить до збільшення значення  $T_e$ , що відповідає трикритичній точці  $T$  при певній інтенсивності  $I$ . При цьому область сухого тертя розширяється, а рідинне і переривчасте тертя стає все більш важко реалізуючим оскільки наступає при більшому значенні  $T_e$ .

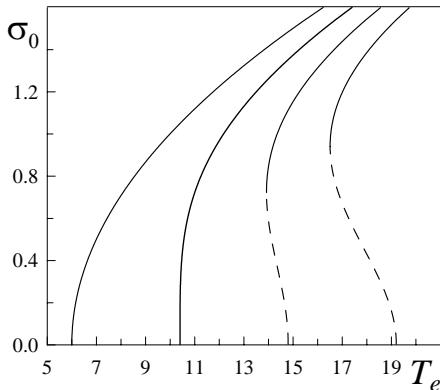


Рисунок 3.16 — Залежність стаціонарного значення зсувних напружень  $\sigma_0$  від температури  $T_e$  при параметрах рисунку 3.15 і  $I = 0, 2, 4, 6$  (відповідні криві розташовані зліва направо).

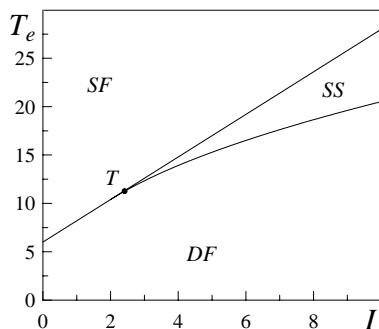


Рисунок 3.17 — Фазова діаграма, що відповідає параметрам рисунку 3.15 з областями рідинного (SF), сухого (DF) і переривчастого (SS) тертя ( $T$  — трикритична точка).

Очевидно, що збільшення температури зсувних поверхонь  $T_e$  переводить мастило в рідиноподібний стан. Це видно також з рівняння (3.84), що описує затухаючі коливання. Тут температура поверхонь входить тільки у вираз для сили  $f$ , значення якої зростає із зростанням  $T_e$ . Як видно з фазових портретів на рисунку 3.18, рідиноподібний стан відповідає коливанням з великою амплітудою. Із збільшенням ефективної сили в (3.84) амплітуда коливань збільшується, і реа-

лізується 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 розподіл  $P(\sigma)$  положенням його максимуму  $\tilde{\sigma}$ . Це досягається використанням формалізму інтегралів за траєкторіями, в рамках якого екстремальні значення  $\tilde{\sigma} = \tilde{\sigma}(t)$  початкової функції розподілу (3.107) еволюціонують у згоді з ефективним розподілом

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

Тут функція Онзагера–Махлупа  $\Lambda$ , що відіграє роль лагранжіана евклидової 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

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

яке 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  $\sqrt{2D^{(2)}}$ . З цією метою слід 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 врахуванням (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  $\tilde{\sigma}(t)$  отримуємо 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 в 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 випадку лагранжіан (3.122) описуватиме поведінку системи згідно з отриманим раніше розподілом (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  $\dot{\tilde{\sigma}} = (2D^{(2)})^{1/2}\dot{x}$  набирає 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, засноване 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 рисунку 3.15.

Область сухого тертя (DF) (рис. 3.18а) характеризується наявністю однієї особливої точки  $D$ , яка відповідає максимуму імовірності  $P(\sigma)$  при  $\sigma = 0$ . Ця точка є нестандартною і вимагає інтерпретації. Вона розташована на початку координат, і навколо неї згинаються фазові траєкторії таким чином, що система ніколи не приходить до значення  $\sigma = 0$ , тобто ця точка не є стаціонарною. Розглянемо поведінку 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 встигне вирости). А потім величина напруженень асимптотично зменшуватиметься до нуля зі збільшенням швидкості їх убування. Мабуть, описана ситуація відповідає режиму вибухової аморфізації, при якому система дуже швидко переходитиме в аморфний твердоподібний стан. Той факт, що нульові напруження ніколи не досягаються, свідчить про розбіжність імовірності  $P(\sigma)$  у нульовій точці. Це пов'язано з нескінченним нарощуванням швидкості убування напруженень при наближенні системи до  $\sigma = 0$ . Припустимо, що система підходить до точки, в якій швидкість зміни зменшення напруженень стає критичною. У такому разі слідує чекати

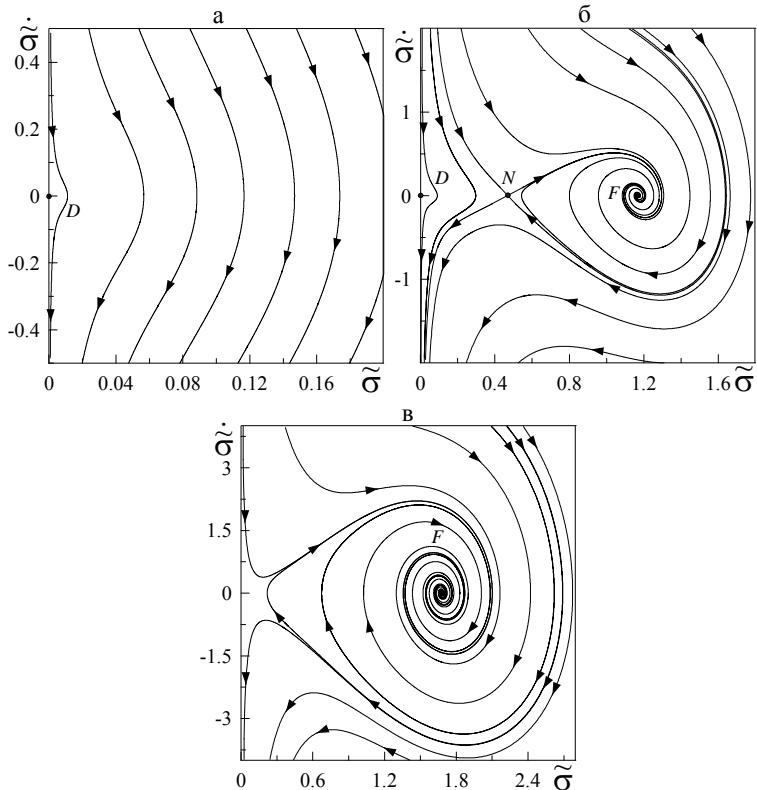


Рисунок 3.18 — Фазові портрети системи, що відповідають параметрам рисунку 3.15: а — DF режим відповідає кривій 1 рисунку 3.15; б — SS — кривій 2 рисунку 3.15; в — SF — кривій 3 рисунку 3.15

збільшення значення напружень, яке супроводитиметься зміною знаку швидкості і переходом системи в додатну область фазової площини. Далі знову послідує зменшення значення напружень, і описана ситуація повториться. Або ж у такому разі може послідувати не зміна знаку швидкості, а лише її зменшення, що перекине систему на сусідню фазову траекторію, по якій вона ще швидше наблизятиметься до нульового значення напружень. В результаті за довільних початкових умов в системі з часом встановиться коливальний режим сухого тертя в околі точки  $\sigma = 0$ . При цьому амплітуда коливань мала, і мастило має твер-

доподібну 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. Слід зазначити, що при початковому значенні зсувних напружень правіше точки  $N$  і нульовій швидкості їх зміни у системі з часом встановиться рідинний режим тертя. Якщо ж початкове значення напружень виявиться лівішим за сідло  $N$ , то у аналогічному випадку в системі встановиться сухе тертя. Таким чином, точка  $N$  розмежовує два максимуми функції розподілу  $P(\sigma)$ . Фокус  $F$  відповідає ненульовому максимуму розподілу 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 встановиться стійке рідинне тертя. Мабуть, дані коливання обумовлені наявністю шуму у системі.

На рисунку 3.18в наведений фазовий портрет, що відповідає області рідинного тертя (SF), яка характеризується єдиним ненульовим максимумом функції розподілу  $P(\sigma)$ . Він характеризується однією особливою точкою — стійким фокусом  $F$ , який відповідає стійкому рідинному тертию. На це також указує велика розтягненість фазових траєкторій поблизу нього уздовж осей ординат і абсцис. Проте, видно, що при початковому великому значенні  $\sigma$  система не попадає в точку  $F$ , а асимптотично наближається до нульового значення напружень. Дано обставина говорить про те, що можуть реалізуватися умови, при яких система наближатиметься до режиму сухого тертя. Як описано раніше, досягши значення критичної швидкості її знак змінюється, і вона стане додатною. З фазового портрета видно, що у такому разі система перейде до режиму стійкого рідинного тертя.

### 3.7.4 Врахування деформаційного дефекту модуля зсуву

Як було показано раніше, рівняння (3.17) зводиться до співвідношення Максвелла, яке припускає використання моделі Генкі. Вико-

ристовуватимемо просте наближення (3.35), що описує представлений вище перехід режиму пружної деформації у пластичний.

В результаті час релаксації  $\tau_\sigma$  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 введений 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,  $\Theta$  – коефіцієнт змінення,  $\theta = \Theta/G < 1$  – параметр, що визначає відношення кутів нахилу кривої деформації на пластичній і гуківській ділянках. При цьому рівняння (3.17) приймає вигляд:

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

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

### 3.7.4.1 Динамічна фазова діаграма

При врахуванні деформаційного дефекту модуля зсуву слід аналізувати систему рівнянь (3.129), (3.18), (3.78). Тоді в рамках наближення (3.79) ця система, як і раніше, зводиться до рівняння (3.84), де параметр  $m$ , коефіцієнт тертя  $\gamma$ , сила  $f$  і амплітуда шуму  $\phi$  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 методу ефективного потенціалу ми отримаємо рівняння Фоккера–Планка (3.104) з відповідними коефіцієнтами  $D^{(1)}$ , (3.105)

i  $D^{(2)}$ , (3.106), які при використанні (3.130) запищуться в явному вигляді

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

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

Стаціонарний стан зсувних напружень визначається умовою (3.111), яка з врахуванням (3.131), (3.132) набирає 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 розподілу (3.107) при нульовому значенні 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), переривчастого і рідинного (SS+SF), рідинного метастабільного і стійкого (MSF+SF), рідинного тертя (SF). Режими тертя, показані на фазовій діаграмі (рис. 3.20), відповідають кривим рисунку 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, які відповідають максимумам  $P(\sigma)$ . Це має на увазі можливість реалізації переривчастого (stick-slip) тертя, при якому відбуваються періодичні переходи між динамічними режимами, які відповідають вказанім станам. Слід зазначити, що дана область, на відміну від інших, при зміні параметрів системи може не реалізуватися.

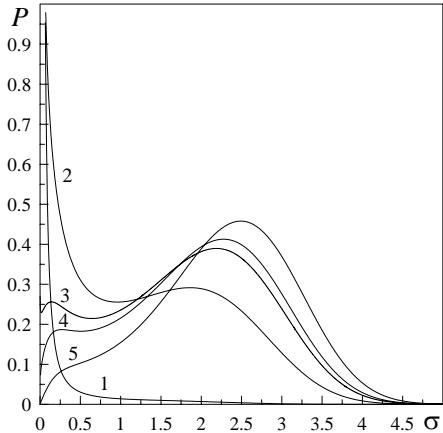


Рисунок 3.19 — Функція розподілу зсувних напруженень (3.107) для фазового переходу першого роду при  $\tau_p = \tau_\varepsilon = \tau_\lambda = 0.1$ ,  $\theta^{-1} = 7$ ,  $\alpha = 0.3$ ,  $g_\Theta = 0.4$ ,  $I = 4.5$ . Криві 1 – 5 відповідають температурам  $T_e = 16, 21, 23.25, 24, 26$

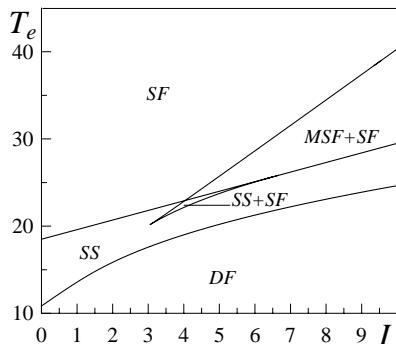


Рисунок 3.20 — Фазова діаграма з областями рідинного (SF), сухого (DF) і переривчастих (SS, MSF+SF, SS+SF) режимів тертя, відповідаюча параметрам рисунку 3.19

В області MSF+SF режими метастабільного і 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. При врахуванні деформаційного дефекту модуля зсуву всі співвідношення даного розділу залишаються колишніми, тільки коефіцієнти  $D^{(1)}$  і  $D^{(2)}$  даються виразами (3.131), (3.132). Згідно цьому досліджуємо кінетичне рівняння (3.126) з коефіцієнтами (3.131), (3.132).

В даному випадку спостерігається складніший вид розподілу імовірності  $i$ , як наслідок, складніші фазові портрети. На рисунку 3.21 наведені фазові портрети, відповідаючи кривим рисунку 3.19.

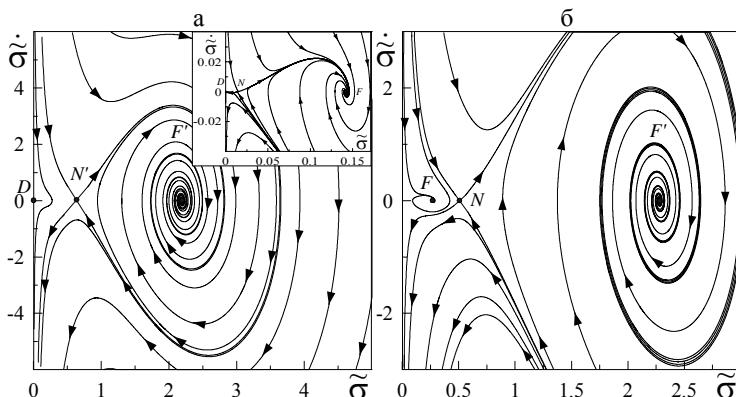


Рисунок 3.21 — Фазові портрети системи, відповідаючи параметрам рисунку 3.19: а – SS+SF – відповідає кривий 3 рисунку 3.19; б – MSF+SF – кривий 4 рисунку 3.19

Фазовий портрет області сухого тертя (DF) подібний до відповідного при безперервному перетворенні (рис. 3.18а). Це означає, що області DF при врахуванні дефекту модуля і без нього еквівалентні.

Фазовий портрет, що описує область переривчастого тертя (SS) також аналогічний характерному для області SS при безперервному перетворенні (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. Видно, в даному режимі мастило є дуже в'язкою рідинною, оскільки в такого роду рідині 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 в твердоподібний стан. Фокус  $F'$  відповідає другому ненульовому максимуму функції  $P(\sigma)$ , навколо нього вже існують коливання з великою амплітудою. Дано поведінка відповідає текучому стану мастила, і відповідно, ковзанню. Точка  $F'$  відокремлена від всіх останніх на більшу відстань по осі абсцис. Даний режим тертя лише найбільш імовірний в системі, оскільки точки  $D$  і  $F$ , що відповідають сухому і метастабільному рідинному тертию, також володіють великою стійкістю і імовірністю реалізації. Звідси слідує висновок, що система може заливати періодичні переходи (stick-slip) між режимами, відповідаючими точкам  $D, F$  і  $F'$ . Оскільки ці режими самі по собі стійкі і розділені вираженими мінімумами функції розподілу  $P(\sigma)$  (сідлами), то переходи між ними слід чекати через великі проміжки часу.

Фазовий портрет області  $MSF+SF$  представлений на рисунку 3.21б. На ньому присутні три особливі точки – стійкі фокуси  $F, F'$  і сідло  $N$ . Останнє аналогічно раніше описанім сідлам і відповідає мінімуму залежності імовірності від напружень. Точка  $F$  відповідає першому максимуму розподілу, який описує метастабільний рідинний режим ( $MSF$ ), а  $F'$  – другому максимуму, який відповідає стійкому рідинному тертию ( $SF$ ). Як видно, навколо фокусу  $F$  існують лише незначні коливання, проте мастило в цьому режимі є менш в'язкою рідинною, 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 говорить про більшу текучість мастила і стійкість даного режиму. Тому в порівнянні з переднім випадком тут імовірніше виникнення режиму рідинного тертя

(SF).

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

## 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 при плавленні тонкого шару мастила тільки в координатах  $T_e - \sigma$  [4]. При цьому крива деформації  $\sigma(\varepsilon)$  є монотонною і дозволяє представити лише безперервний переход. Проте експериментальні дані однозначно вказують на те, що плавлення молекулярно-тонкої плівки мастила має стрибкоподібний характер [13], хоча і може відбуватися за механізмом фазового переходу другого роду. Як показано нижче, опис вказаної особливості досягається за допомогою заміни залежно-

сті  $g(\sigma)$  у (3.17) на  $g(\varepsilon) \equiv G(\varepsilon)/G_0$ , де

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

При цьому величина параметра  $\beta > 0$ , що визначає характер потенці-  
алу, також грає ключову роль.

Розглянемо стаціонарний стан, при якому в (3.17) похідна  $\dot{\sigma} = 0$   
і величина напружень  $\sigma$  у мастилі не змінюється. Цей випадок згідно  
з (3.34) відповідає ковзанню з постійною швидкістю. Тоді отримуємо  
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, і з'яв-  
ляються нові коефіцієнти  $g_\theta = \Theta/G_0 < 1$ ,  $\alpha = \varepsilon_p/\varepsilon_s$ . Залежність  
(3.137) в координатах  $\beta - \varepsilon - \sigma$  при заданих  $\alpha$ ,  $g_\theta$  і  $\theta$  наведена на  
рисунку 3.22. Для експериментів з апаратом поверхневих сил [12] він

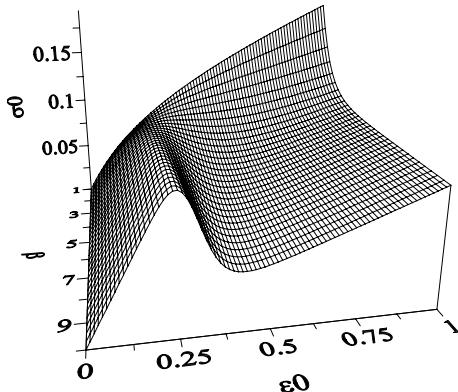


Рисунок 3.22 — Залежність стаціонарного значення зсувних напружень  $\sigma_0$   
від деформації  $\varepsilon_0$  і параметра  $\beta$  (3.137) при  $\theta = 0.2$ ,  $g_\theta = 0.1$ ,  $\alpha = 0.3$

представляє залежність повних внутрішніх зсувних напружень в ма-  
стилі  $\sigma = \sigma_{el} + \sigma_v$  від амплітуди відхилення  $x_{max}$ , де  $\sigma_{el}$  і  $\sigma_v$  — пружна і

в'язка компоненти відповідно, причому  $\sigma_v$  визначається співвідношенням (3.34). Звідси випливає, що можуть реалізуватися дві ситуації: при малих  $\beta$  крива  $\sigma(\varepsilon)$  монотонно зростає, а при

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

вона стає немонотонною. У першому випадку відбувається безперервне плавлення мастила. Другий випадок детальніше представлений на рисунку 3.23, згідно з яким мастило при підвищенні напружень до точки  $A$  стрибкоподібно плавиться, переходячи в точку  $B$ . При подаль-

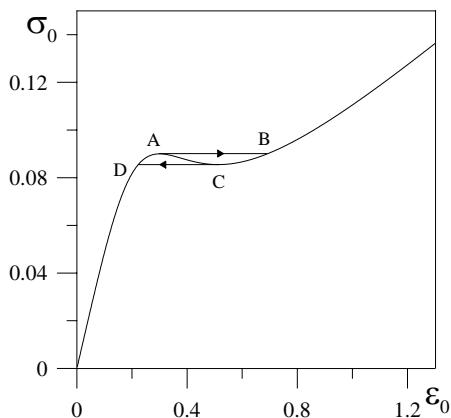


Рисунок 3.23 — Залежність стаціонарних значень зсувних напружень  $\sigma_0$  від деформації  $\varepsilon_0$  (3.137) при  $\theta = 0.2$ ,  $g_\theta = 0.1$ ,  $\alpha = 0.3$ ,  $\beta = 3.0$ , на якій показано гістерезисну поведінку

шому збільшенні напружень деформація монотонно зростає, і мастило залишається рідиноподібним. Якщо тепер зменшувати напруження, то до точки  $C$  мастило зберігає рідиноподібну структуру, а потім стрибкоподібно твердіє при переході в точку  $D$ . При подальшому зменшенні напружень мастило твердоподібне. Дані переходи представлені як фазові переходи першого роду, але між станами, які не є істинними термодинамічними фазами. Для пояснення цих перетворень вводиться поняття зсувного плавлення. Відмітимо, 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 при плавленні зростає із зростанням  $\alpha$ , а із збільшенням  $\beta$  різниця  $\varepsilon_A - \varepsilon_C$  прямує до нуля. Таким чином, при великих  $\beta$  (малих  $\alpha$ ) плавлення і твердіння здійснюються практично при однакових значеннях деформації ( $\varepsilon_A \approx \varepsilon_C$ ), але при різних величинах напружень  $\sigma$ . Як і раніше, приймемо в якості параметра порядку зсуvin напруження  $\sigma$ : 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.

В рамках адіабатичного 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) отримаємо рівняння Ландау-Халатнікова, де синергетичний потенціал має вид

$$V = \frac{\sigma^2}{2} - g_\theta \int_0^\sigma \left[ \sigma - (2 - T_e) \frac{\sigma}{1 + \sigma^2} \right] \times \\ \times \left[ 1 + \frac{\theta^{-1} - 1}{1 + (\sigma/\alpha - \sigma(2 - T_e)/(\alpha + \alpha\sigma^2))^\beta} \right] d\sigma. \quad (3.142)$$

На рисунку 3.24 подано залежність стаціонарних зсуvin напружень  $\sigma_0$  від температури поверхонь тертя  $T_e$ . Нижче за критичне значення  $T_{c0}$  напруження в мастилі відсутні ( $\sigma = 0$ ), і воно твердоподібне. З подальшим зростанням температури до точки  $A$  напруження збільшуються, але відповідають гуківській пружній ділянці залежності, наведений на рисунку 3.23, і отже, мастило твердоподібне. При подальшому

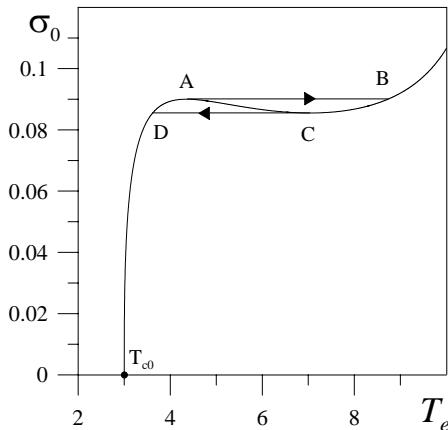


Рисунок 3.24 — Залежність стаціонарних значень зсувних напружень  $\sigma_0$  від температури поверхонь тертя  $T_e$  при параметрах рисунку 3.23

зростанні температури в інтервалі  $T_{cA} < T_e < T_{cB}$  ( $T_{cA}, T_{cB}$  відповідають точкам  $A, B$ ) напруження зберігаються, і мастило не змінює свою структуру. 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  $T_{c0}$  отримаємо 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 із збільшенням температури при  $T_{cA} < T_e < T_{cB}$ , оскільки мастилу для плавлення необхідно передати енергію. В області  $T_{cD} < T_e < T_{cC}$  при зменшенні температури поверхонь, що зсуваються, напруження зберігаються, оскільки для переходу мастила в твердоподібний стан воно повинне віддати енергію. Слід вважати, що твер-

доподібні структури мастила нижче і вище за точку  $T_{c0}$  відрізняються, оскільки згідно із 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 при фіксованих температурах поверхонь тертя. Крива 1 відповідає значенню температури нижче за  $T_{c0}$ . Видно, що

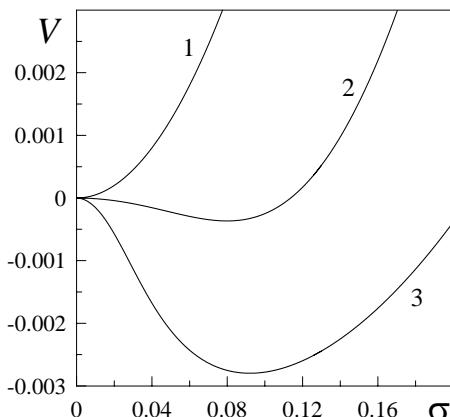


Рисунок 3.25 — Залежність синергетичного потенціалу  $V$  (3.142) від величини зсувних напружень  $\sigma$  при параметрах рисунку 3.23 і  $T_e = 1.0, 3.4, 9.0$  (криві 1–3)

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, який відповідає гуківській ділянці рисунку 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 таких умов система знаходиться на ділянці пластичної течії, мастило рідиноподібне.

Перехід між першою і другою ситуаціями здійснюється за механізмом фазового переходу другого роду оскільки нульовий мінімум плавно перетворюється на ненульовий. Оскільки криві 2, 3 мають однакову форму, то перехід між відповідними режимами тертя слід інтерпретувати як кінетичне, а не фазове перетворення. Таким чи-

ном, твердоподібна структура мастила при температурі 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. При подальшому переході до рідинного режиму тертя в'язкість мастила зменшується, і воно тече.

### 3.8.1.2 Безперервне перетворення

Розглянемо тепер простіший випадок безперервного плавлення мастила, коли не виконується умова (3.138). При температурі поверхонь тертя нижче значення (3.143) мастило твердоподібне, оскільки зсувне напруження дорівнює нулю. При  $T_e > T_{c0}$  воно починає плавитися і стає рідиноподібним. З подальшим підвищеннем температури зсувні напруження ростуть і, як наслідок, наступає ковзання, яке відповідає переходу на ділянку пластичної деформації.

На рисунку 3.26 подані стаціонарні значення зсувних напружень  $\sigma_0$  при безперервному перетворенні. Звідси видно, що із збільшен-

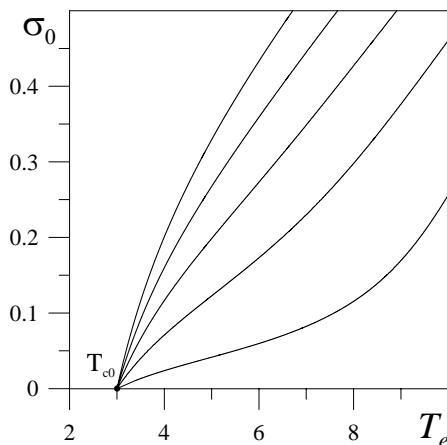


Рисунок 3.26 — Залежність стаціонарного значення зсувних напружень  $\sigma_0$  від температури поверхонь тертя  $T_e$  для випадку безперервного перетворення при  $\theta = 0.2$ ,  $g_\theta = 0.1$ ,  $\beta = 1.0$  і  $\alpha = 0.1, 0.3, 0.5, 0.7, 0.9$  (відповідні криві розташовані справа наліво)

ням коефіцієнта  $\alpha$  при заданому значенні температури  $T_e$  реалізується більші значення стаціонарних напружень. Відповідно, при великих  $\alpha < 1$  плавлення наступає швидше, і такі мастила є кращими для зменшення тертя. Згідно з формулою (3.143), для зменшення температури плавлення потрібно зменшувати  $\theta$  і збільшувати  $g_\theta$ . Мінімальне значення критичної температури зсувних поверхонь обмежено величиною  $T_{c0} = 1$  при  $\theta \ll g_\theta$ .

Вид синергетичного потенціалу в даному випадку якісно збігається з показаним на рисунку 3.25, оскільки він дається тією ж 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 змащувальних матеріалів [13], час релаксації напружень при нормальному тиску складає  $\tau_\sigma \sim 10^{-10}$  с. Оскільки ультратонка плівка мастила має менше чотирьох молекулярних шарів, час релаксації температури до значення  $T_e$  задовільняє умові:

$$\tau_T \ll \tau_\sigma, \tau_\varepsilon. \quad (3.144)$$

У відповідності із цим покладемо в рівнянні (3.19)  $\tau_T \dot{T} \approx 0$ . Також для зручності будемо вимірювати час в одиницях  $\tau_\sigma$ . В результаті отримаємо двопараметричну систему наступного виду:

$$\dot{\sigma} = -\sigma + g(\varepsilon)\varepsilon, \quad (3.145)$$

$$\tau \dot{\varepsilon} = -\varepsilon + (T_e - 1 - \sigma\varepsilon + \sigma^2)\sigma, \quad (3.146)$$

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 (при значенні температури поверхонь тертя нижче, ніж  $T_{c0}$ ), для різних співвідношень часів релаксації  $\tau$ . Зокрема, рисунок 3.27а відповідає випадку  $\tau = 0.01$ . Штриховими лініями 1 і 2 показано ізокліни, що отримуються при прирівнюванні

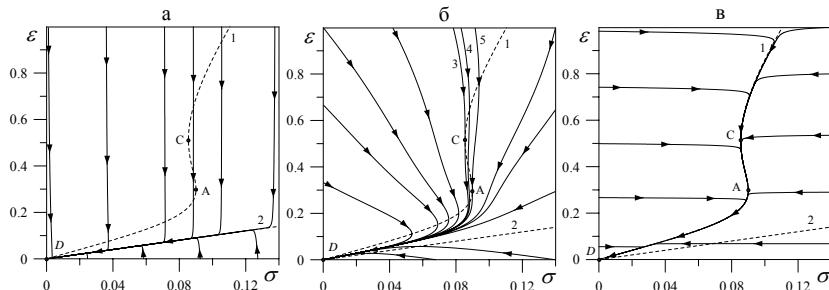


Рисунок 3.27 — Фазові портрети при параметрах рисунку 3.23 і  $T_e = 2$ : а —  $\tau_T \ll \tau_\varepsilon = 0.01\tau_\sigma$ ; б —  $\tau_T \ll \tau_\varepsilon = \tau_\sigma$ ; в —  $\tau_T \ll \tau_\varepsilon = 100\tau_\sigma$

до нуля похідних в рівняннях (3.145) і (3.146) відповідно. Таким чином, крива 1 відповідає параметрам системи, при яких напруження не змінюються, а лінія 2 відповідає випадку 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 при русі 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. Відмітимо, 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 до твердого тіла.

Фазовий портрет, показаний на рисунку 3.27б, побудований для випадку, коли часи релаксації напружень і деформації збігаються ( $\tau = 1$ ). Він також характеризується особливою точкою  $D$ , що представляє вузол. Тут можливі випадки, коли напруження  $\sigma$  спочатку збільшується, 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, які починаються при  $\sigma = 0$ , мастило спочатку твердо-

подібне (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, які є дотичними до ізокліні 1. Тут система поводить себе подібно до кривої 4, тобто напруження спочатку збільшуються, потім зменшуються (після першого перетину ізокліні 1), потім знову збільшуються (після другого перетину), і нарешті релаксують до нуля (після третього й останнього перетинів).

Рисунок 3.27в відповідає випадку  $\tau = 100$ . Тут, як і на рисунку 3.27а, виділено два етапи: швидка релаксація до лінії, близької до ізокліні 1, і далі повільний рух по ній. На першому етапі деформація слабо змінюється, а напруження дуже швидко зменшуються, якщо початкові їх значення  $\sigma$  правіше ізокліні 1, або збільшуються при початкових  $\sigma$  лівіше її. На другому етапі у верхній частині фазового портрету (вище точки  $C$ ) конфігураційна точка рухається по пластичній ділянці, нижче  $A$  відбувається рух по гуківській. На останній ділянці система знаходиться більш тривалий час, оскільки вона ближче до ізокліні, ніж перша.

На рисунку 3.28 подано фазові портрети для таких же параметрів і співвідношень часів релаксації, як і на рисунку 3.27, але при температурі, що відповідає ділянці пластичної деформації ( $T_e > T_B$ ). Тут

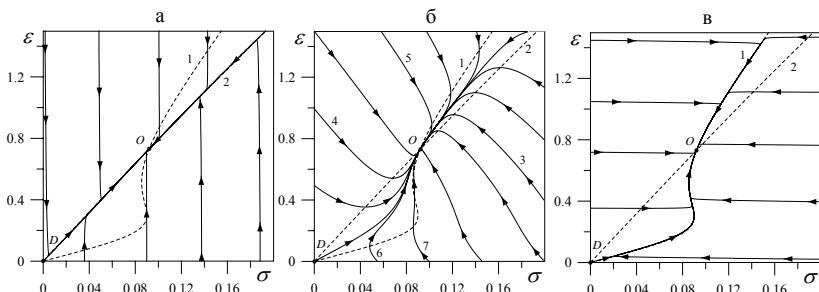


Рисунок 3.28 — Фазові портрети при параметрах рисунку 3.23 і  $T_e = 9$ : а —  $\tau_T \ll \tau_\varepsilon = 0.01\tau_\sigma$ ; б —  $\tau_T \ll \tau_\varepsilon = \tau_\sigma$ ; в —  $\tau_T \ll \tau_\varepsilon = 100\tau_\sigma$

реалізується рідинне тертя, і з часом встановлюється ненульове стаціонарне значення зсувних напружень  $\sigma_0 \neq 0$ , що відповідає мінімуму потенціалу. Як і раніше, лінії 1 і 2 є ізоклінами фазових траєкторій. Фа-

зові портрети характеризуються двома особливими точками — сідлом  $D$  на початку координат і вузлом  $O$  при ненульових значеннях 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 при збереженні 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  $\sigma(\varepsilon)$ , тобто система завжди рідиноподібна, за винятком тих випадків, коли початкові значення напружень знаходяться поблизу нуля (відбувається плавлення). Відзначимо, що з часом мастило стає більш рідким, якщо  $\sigma_i < \sigma_O$ , і навпаки більш в'язким при  $\sigma_i > \sigma_O$ , де  $\sigma_i$  і  $\sigma_O$  — початкове і стаціонарне значення напружень.

Як видно з рисунку 3.28б, для  $\tau = 1$  при встановленні стаціонарного значення напружень і деформації можливі наступні випадки: мастило стає більш в'язким з часом (крива 3), воно плавиться (крива 4) і 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 при еволюції система знаходиться на ній більше часу, ніж на гуківській. Стационарна 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  $\sigma$  і деформації  $\varepsilon$ , отримаємо рівняння другого порядку для  $\sigma$ . З цією метою з (3.145) необхідно виразити  $\varepsilon$  через  $\sigma$  і записати похідну за часом від цього виразу. Далі, підставивши отримані залежності  $\varepsilon(\sigma, \dot{\sigma})$ ,  $\dot{\varepsilon}(\sigma, \dot{\sigma})$  у (3.146), знайдемо шукане рівняння. Проте аналітично виразити  $\varepsilon$  з (3.145) не представляється можливим. Тому скористаємося виразом (3.135), що описує безперервне плавлення, і отримаємо

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 і першу похідні за часом. Відповідні фазові портрети представлені на рисунку 3.29. Тут штрихова крива 1 є ізокліною, на якій швидкість

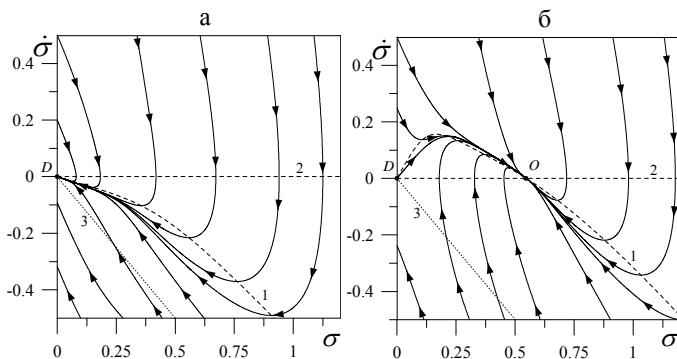


Рисунок 3.29 — Фазові портрети при параметрах рисунку 3.23 і з використанням залежності (3.135) для  $\tau_\varepsilon = \tau_\sigma$ : а —  $T_e = 2$ ; б —  $T_e = 9$

zmіни напружень залишається постійною ( $\dot{\sigma} = 0$ ). 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  $\sigma, \dot{\sigma}$ . 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 вказаної лінії, виходять у від'ємну область напружень. Оскільки у запропонованому підході розглядаються тільки додатні значення напруженень і деформації, початкові умови слід вибирати не нижче вказаної прямої.

На рисунку 3.29а представлений фазовий портрет, що відповідає температурі поверхонь тертя нижче критичної  $T_{c0}$  (3.143). Тут мастило

твёрдоподібне, і спостерігається релаксація  $\sigma$  до вузла  $D$  на початку координат. Згідно з фазовими траєкторіям, при цьому також можливий переривчастий рух.

Випадку, 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 пряму 3) приходить до стаціонарного стану, який 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 первого роду

#### 3.8.2.1 Стрибкоподібне плавлення

Рисунок 3.24 відповідає випадку фазового переходу другого роду, оскільки у точці  $T_{c0}$  відбувається безперервний перехід, напруження при цьому стають ненульовими. Немонотонність на рисунку 3.24 викликана наявністю нестійкої ділянки на рисунку 3.23. Можна підібрати параметри таким чином, 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  $\sigma_0$ ,  $\sigma^m$  від температури поверхонь тертя і деформації. Видно, що на рисунку 3.30б з'являється немонотонність, і в інтервалі  $T_c^0 < T_e < T_{c0}$  реалізується двозначна ділянка, яка властива фазовим переходам первого роду. Штрихова крива відповідає нестійким стаціонарним значенням напружень  $\sigma^m$ , суцільна – стійким  $\sigma_0$ . 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, яка відповідає параметрам рисунку 3.30. Нижче за критичне значення  $T_c^0$  напруження в мастилі відсутні ( $\sigma_0 = 0$ ). Даному діапазону температур відповідає вид потенціалу, поданий кривою 1 на рисунку 3.31, де

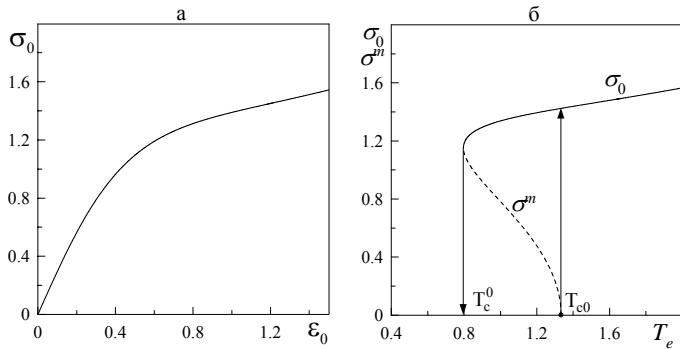


Рисунок 3.30 — Залежності стаціонарних значень зсувних напружень  $\sigma_0, \sigma^m$ : а — від зсувної деформації  $\varepsilon_0$ ; б — від температури поверхонь тертя  $T_e$  при  $\theta = 0.2, g_\theta = 0.6, \alpha = 0.7, \beta = 2.0$

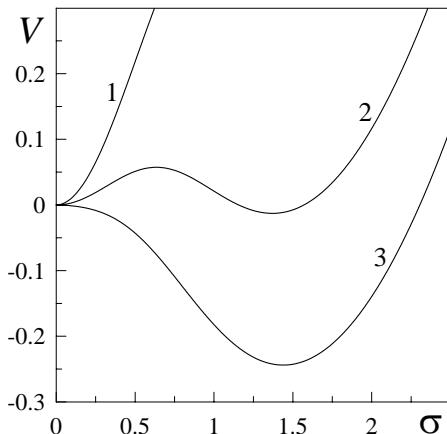


Рисунок 3.31 — Залежність синергетичного потенціалу  $V$  (3.142) від величин зсувних напружень  $\sigma$  при параметрах рисунку 3.30, криві 1–3 відповідають значенням температури  $T_e = 0.6, 1.1, 1.4$  відповідно

реалізується один нульовий мінімум при  $\sigma_0 = 0$ , при цьому 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 потенціальній бар'єр, який розмежовує нульовий і ненульовий мінімуми потенціалу. У зв'яз-

ку з цим система не може прийти в стійкий стан  $\sigma_0 \neq 0$  і реалізується нульове значення зсувних напружень  $\sigma$ . Пунктирна крива на рисунку 3.30 відповідає максимуму потенціалу, суцільна крива — його ненульовому мінімуму. Як видно з рисунку, при  $T_e = T_{c0}$  (3.143) відбувається стрибкоподібне збільшення значення  $\sigma$ , і система переходить на ділянку залежності  $\sigma_0(T_e)$ . Цей перехід пов'язаний з тим, що при  $T_e = T_{c0}$  максимум  $V(\sigma)$  зникає, і з подальшим зростанням  $T_e$  реалізується один ненульовий мінімум потенціалу (крива 3 на рис. 3.31). З подальшим збільшенням температури  $T_e$  стаціонарні значення напружень  $\sigma_0$  зростають, і мастило стає менш в'язким. При цьому  $V(\sigma)$  має вигляд кривої 3. Тепер із зменшенням температури до значення  $T_c^0$  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), отриманими раніше.

При цьому фазові портрети в області температур  $T_e < T_c^0$  виявляються аналогічними до наведених на рисунку 3.27. Кінетика системи в температурній області  $T_e > T_{c0}$  рисунку 3.30б, яка відповідає стійкому рідинному тертию, якісно співпадає з показаною на рисунку 3.28. Реалізується рідинне тертя, і з часом встановлюється 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, яка відповідає ділянці  $T_c^0 < T_e < T_{c0}$  рисунку 3.30б, на якій реалізуються стійкі та нестійкі значення стаціонарних зсувних напружень. Потенціал системи в цьому випадку має вигляд кривої 2 на рисунку 3.31.

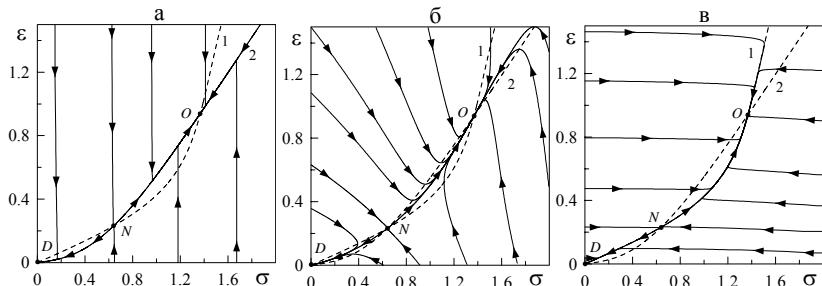


Рисунок 3.32 — Фазові портрети при параметрах рисунку 3.30 і  $T_e = 1.1$ : а —  $\tau_T \ll \tau_\varepsilon = 0.01\tau_\sigma$ ; б —  $\tau_T \ll \tau_\varepsilon = \tau_\sigma$ ; в —  $\tau_T \ll \tau_\varepsilon = 100\tau_\sigma$

Як і раніше, лінії 1 і 2 є ізоклінами. Фазові портрети характеризуються трьома особливими точками: вузлом  $D$  на початку координат, який 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, який 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. З часом мастило стає більш рідким, якщо  $\sigma_N < \sigma_i < \sigma_O$ , і навпаки — більш в'язким при  $\sigma_i > \sigma_O$ , де  $\sigma_i$  і  $\sigma_O$  — початкове і стаціонарне значення напружень. У цих випадках система приходить до особливої точки  $O$ . При  $\sigma_i < \sigma_N$  мастило з часом твердне, і реалізується сухе тертя (точка  $D$ ).

Як видно з рисунку 3.32б, для  $\tau = 1$  при встановленні стаціонарного значення напружень і деформації можливий переривчастий рух.

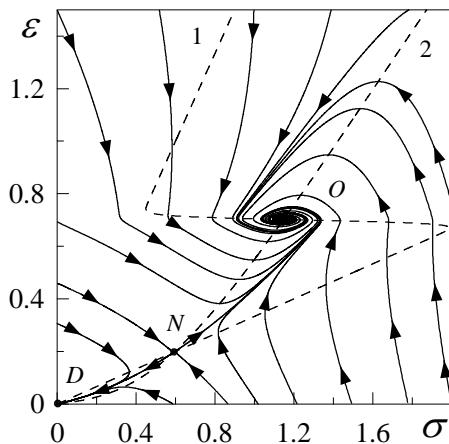


Рисунок 3.33 — Фазовий портрет при параметрах рисунку 3.32б і  $\beta = 100$

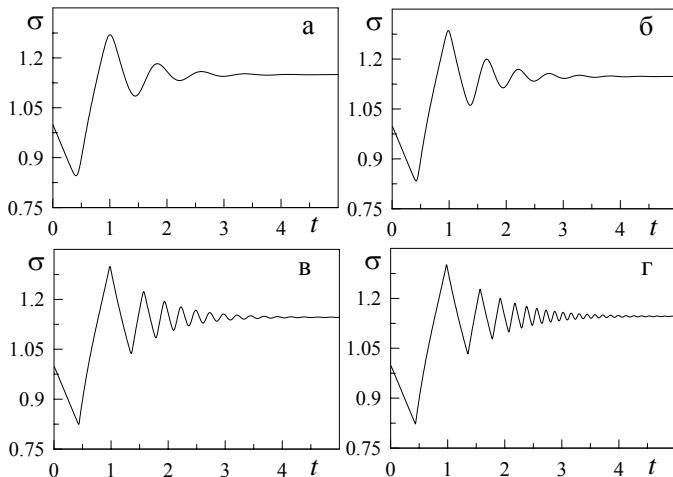


Рисунок 3.34 — Релаксаційні залежності  $\sigma(t)$ , отримані при сумісному розв'язку рівнянь (3.145), (3.146) для параметрів рисунку 3.33. Рисунки а, б, в, г відповідають значенням параметру  $\beta = 50, 100, 500, 1500$  відповідно

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 вста-

новлення стаціонарного стану. Оскільки ізокліни 1 і 2 не мають якісних відмінностей (на обох реалізується пластична і 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 вид фазових портретів істотний вплив має величина параметра  $\beta$ . На рисунку 3.33 подано фазовий портрет при  $\beta = 100$ . Із вигляду ізокліни 1 можна зробити висновок, що гуківська і пластична ділянки на відповідній діаграмі навантаження стають при цьому більш вираженими. Проте основна відмінність цього випадку від наведеного на рисунку 3.32б полягає в тому, що точка  $O$  представляє не вузол, а фокус, що описує релаксаційні коливання аж до встановлення рівноваги. Такі коливання відповідають *stick – slip* режиму тертя. При збільшенні параметра  $\beta$  фазові траєкторії навколо фокусу розтягаються уздовж осі напружень, при цьому амплітуда *stick – slip* переходів зростає. Релаксаційні часові залежності напружень для параметрів рисунку 3.33 наведені на рисунку 3.34. Тут із збільшенням  $\beta$  коливання стають більш тривалими. На рисунку 3.34г залежність  $\sigma(t)$  стає пилкоподібною, що спостерігається в експериментах. Режим, в якому при сталих швидкостях зсуву переривчасте тертя з часом переходило у режим ковзання, знайдений експериментально.

## 3.9 Багатовимірний терmodинамічний 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 терmodинамічні, механістична і 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 режи-

мів, між якими в процесі тертя відбуваються переходи, що приводять до переривчастого руху [13]. У теоретичній роботі знайдено три режими тертя: режим ковзання за малих швидкостях зсуву, регулярний переривчастий режим і режим ковзання за великих швидкостях зсуву. Існування цих режимів підтверджують численні експерименти [10, 13].

У роботі [4] в рамках моделі Лоренца для апроксимації в'язко-пружного середовища розвинено підхід, згідно з яким перехід ультратонкої плівки мастила з твердоподібного в рідиноподібний стан відбувається в результаті термодинамічного і зсувного плавлення. Проведено опис цих процесів, що відбуваються в результаті самоорганізації полів зсувних напружень і деформації, а також температури мастила з урахуванням адитивних шумів вказаних величин і корельованих флюктуацій температури. Показано, що у випадку адитивних шумів встановлюється самоподібний режим плавлення мастила, у якому часові ряди напружень набувають мультифрактальних властивостей. Причины стрибкоподібного плавлення і гістерезису, які спостерігалися в експериментах, розглянуту в [12]. Тут також визначено умови реалізації означених особливостей при врахуванні деформаційного дефекту модуля зсуву. В рамках вказаної моделі також описано періодичний переривчастий режим тертя, який, проте, має стохастичну складову, і може реалізовуватися тільки за наявності у системі флюктуацій. Ще одним недоліком вказаної моделі є те, що вона не враховує навантаження, яке прикладено до поверхонь тертя і при отриманні основних рівнянь застосовано ряд наближень [4].

У даному розгляді запропоновано термодинамічну теорію, що заснована на розвиненні вільної енергії системи за степенями параметра  $f$ , який є надлишковим об'ємом, що виникає в результаті формування дефектної структури в мастилі при його плавленні. Рідиноподібний стан інтерпретується як ділянка пластичної течії на діаграмі навантаження і характеризується наявністю в мастилі дефектів. Для опису сильно нерівноважних процесів, що відбуваються при ковзанні двох твердих тіл, що трутися та розділені шаром мастила, використовується підхід, заснований на теорії фазових переходів Ландау [5]. Метою запропонованого дослідження є виявлення особливостей періодичного режиму переривчастого тертя у рамках механічного еквівалента трибологічної системи, оскільки численні експерименти вказують саме

на періодичний характер переривчастого руху [13].

При плавленні мастила товщиною менше ніж 10 молекулярних шарів стаціонарні стани, в яких воно знаходиться, не є термодинамічними фазами, а подають кінетичні режими тертя, яких може бути декілька. При цьому говорять не про тверду і рідку, а про твердоподібну і рідиноподібну фази. Про плавлення таких мастил судять за збільшенням їх об'єму і коефіцієнта дифузії [14]. Оскільки експериментально спостережувано величиною 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. Із зростанням параметра  $f$  росте густина дефектів в мастилі, яке за рахунок їх транспорту, що відбувається під дією прикладеного дотичного напруження, переходить в кінетичний режим пластичної течії (рідиноподібна фаза).

Запишемо розвинення для густини вільної енергії з урахуванням внесків від пружних компонент зсувних деформацій  $\varepsilon_{ij}^e$  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  $\Phi_0^*$ ,  $\lambda$ ,  $\mu$ ,  $\alpha$ ,  $c$ ,  $\varphi_0$ ,  $\varphi_1$ ,  $\varphi_2$ ,  $\varphi_3$  – 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  $\varepsilon_{ii}^e$ ,  $(\varepsilon_{ij}^e)^2 = \varepsilon_{ij}^e \varepsilon_{ji}^e$ , де під індексами, що повторюються, мається на увазі підсумування. При цьому перший інваріант подає слід тензора деформацій  $\varepsilon_{ii}^e = \varepsilon_1^e + \varepsilon_2^e + \varepsilon_3^e$ , а другий визначається виразом [16]

$$\begin{aligned}(\varepsilon_{ij}^e)^2 &\equiv (\varepsilon_{ll}^e)^2 - 2I_2 = (\varepsilon_1^e + \varepsilon_2^e + \varepsilon_3^e)^2 - \\ &- 2(\varepsilon_1^e \varepsilon_2^e + \varepsilon_1^e \varepsilon_3^e + \varepsilon_2^e \varepsilon_3^e) = (\varepsilon_1^e)^2 + (\varepsilon_2^e)^2 + (\varepsilon_3^e)^2.\end{aligned}\quad (3.150)$$

Згідно з виразом (3.148) в 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 параметрами<sup>5)</sup>

$$\mu_{eff} = \mu - \bar{\mu}f, \quad (3.153)$$

$$\lambda_{eff} = \lambda - \bar{\lambda}f, \quad (3.154)$$

які зменшуються з плавленням при зростанні параметра  $f$ .

Нескладно показати, що інваріанти визначаються як

$$\varepsilon_{ii}^e = \frac{n}{\lambda_{eff} + \mu_{eff}}, \quad (3.155)$$

$$(\varepsilon_{ij}^e)^2 = \frac{1}{2} \left[ \left( \frac{\tau}{\mu_{eff}} \right)^2 + (\varepsilon_{ii}^e)^2 \right], \quad (3.156)$$

де  $n$ ,  $\tau$  – нормальна і дотична (зсувна) компоненти напружень, які діють на мастило з боку поверхонь, що трутися<sup>6)</sup>. 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  $\tau_f$ . 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 доданку пов'язана з тим, що інваріанти (3.155) і (3.156) залежать від величини надлишкового об'єму  $f$ .

---

<sup>5)</sup>При  $f > \mu/\bar{\mu}$  слід вважати  $\mu_{eff} = 0$ , а коли  $f > \lambda/\bar{\lambda}$ , необхідно приймати  $\lambda_{eff} = 0$ .

<sup>6)</sup> Зсувні напруження  $\tau$  визначаються із виразу (3.152) при  $i \neq j$ , тобто при  $\delta_{ij} = 0$ . У випадку  $\mu_{eff} = 0$  доданок  $\tau/\mu_{eff}$  в (3.156) слід замінити у відповідності з (3.152) на  $2\varepsilon_{ij}^e$ .

Температура мастила визначається через вільну енергію системи

$$T = -\frac{\partial \Phi}{\partial s} = 2\alpha s + \alpha_\varphi f. \quad (3.159)$$

Таким чином, ентропія є функцією температури і надлишкового об'єму. При цьому вільна енергія (3.148) також є функцією температури та об'єму.

Для опису процесів теплообміну мастила з навколоишнім середовищем введемо температуру поверхонь тертя  $T_e$  [4]. У випадку неоднорідного нагріву середовища рівняння теплопровідності є звичайним рівнянням безперервності [2]

$$T \frac{\partial s}{\partial t} = \kappa \nabla^2 T, \quad (3.160)$$

де коефіцієнт теплопровідності  $\kappa$  вважається постійним. Для нормальної складової  $\nabla_z^2$  з достатньою точністю можна використовувати наближення  $\kappa \nabla_z^2 T \approx (\kappa/h^2)(T_e - T)$ , де  $h$  – товщина мастила. Із врахуванням 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  $h^2/\kappa$  відіграє роль часу релаксації, протягом якого відбувається вирівнювання температур по товщині мастила за рахунок теплопровідності.

Скористаємося дебайським наближенням, що зв'язує пружну деформацію  $\varepsilon_{ij}^e$  з пластичною  $\varepsilon_{ij}^{pl}$ :

$$\dot{\varepsilon}_{ij}^{pl} = \frac{\varepsilon_{ij}^e}{\tau_\varepsilon}, \quad (3.162)$$

де  $\tau_\varepsilon$  – 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 наступним зв'язком:

$$V_{ij} = h \dot{\varepsilon}_{ij} = h(\dot{\varepsilon}_{ij}^e + \dot{\varepsilon}_{ij}^{pl}). \quad (3.164)$$

З трьох останніх співвідношень слідує 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 рамках 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 і може бути використана для дослідження кінетики процесу плавлення. У даному підрозділі розглянемо стаціонарні режими тертя. Відповідно до рівнянь (3.161) і (3.165) з часом встановлюються стаціонарні значення температури мастила  $T_0$  і пружної компоненти зсувної деформації  $\varepsilon_{ij0}^e$ :

$$T_0 = T_e, \quad \varepsilon_{ij0}^e = \frac{V_{ij}\tau_\varepsilon}{h}. \quad (3.166)$$

Для знаходження стаціонарних станів всіх 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).

У експериментальних роботах часто наводяться залежності сили тертя від швидкості зсуву, товщини шарів мастил, нормального тиску [10, 12, 13]. В цьому розділі проаналізуємо вплив на силу тертя температури мастила і швидкості зсуву.

У мастилі, окрім пружних  $\sigma_{ij}^e$ , виникають також і в'язкі  $\sigma_{ij}^{visc}$  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 стандартним чином:

$$F_{ij} = \sigma_{ij} A, \quad (3.168)$$

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  $\eta_{eff}$  – ефективна в'язкість, яка знаходиться тільки експериментально і в межовому 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 <sup>7)</sup>:

$$F_{ij} = \left[ \sigma_{ij}^e + \text{sgn}(V_{ij}) \left( \frac{|V_{ij}|}{h} \right)^{\gamma+1} \right] A, \quad (3.172)$$

де  $\sigma_{ij}^e$  задається формулою (3.152) при  $i \neq j$ .

В експериментах у якості поверхонь тертя зазвичай використовуються атомарно-гладкі поверхні слюди, а в ролі мастила – квазі-сферичні молекули октаметилциклотрасілоксана і лінійні ланцюгові молекули тетрадекана, або гексадекана [12, 13]. Вказані експерименти проводяться за наступних умов: товщина мастила  $h \sim 10^{-9}$  м, площа контакту  $A \sim 3 \cdot 10^{-9}$  м<sup>2</sup>, 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 при цьому складає  $F \sim (2 \div 40) \cdot 10^{-3}$  Н. В межах зазначених експериментальних робіт виявлено, що мастило плавиться при перевищенні критично-го значення температури  $T_e > T_0 \sim 300$  К або при швидкості зсуву  $V > V_c \sim 400$  нм/с. Ці значення можуть істотно змінюватися залежно від типу мастила і геометрії експерименту.

---

<sup>7)</sup> Тут введено знакову функцію  $\text{sgn}(x)$  і абсолютне значення швидкості зсуву  $|V_{ij}|$ , оскільки вона може приймати також і від'ємні значення.

У даній моделі, відповідно до експериментальних даних, обираються наступні значення констант теорії:  $\Phi_0^* = 20 \text{ Дж}/\text{м}^3$ ,  $\lambda = 2 \cdot 10^{11} \text{ Па}$ ,  $\bar{\lambda} = 10^8 \text{ Па}$ ,  $\mu = 4.1 \cdot 10^{11} \text{ Па}$ ,  $\bar{\mu} = 4 \cdot 10^{11} \text{ Па}$ ,  $\varphi_0^* = 5 \text{ Дж}/\text{м}^3$ ,  $\varphi_1 = 1100 \text{ Дж}/\text{м}^3$ ,  $\varphi_2 = 2700 \text{ Дж}/\text{м}^3$ ,  $\varphi_3 = 2070 \text{ Дж}/\text{м}^3$ ,  $\alpha = 0.055 \text{ K}^2 \cdot \text{м}^3/\text{Дж}$ ,  $\alpha_\varphi = 0.05 \text{ K}$ ,  $h = 10^{-9} \text{ м}$ ,  $\tau_f = 1 \text{ Па} \cdot \text{с}$ ,  $\tau_e = 10^{-8} \text{ с}$ . Зазначимо, що час релаксації надлишкового об'єму  $\tau_f$  має розмірність в'язкості. Фактично це означає, що із зростанням ефективної в'язкості мастила час встановлення стаціонарного режиму тертя збільшується.

Залежність (3.172) показана на рисунку 3.35. Рисунок 3.35а

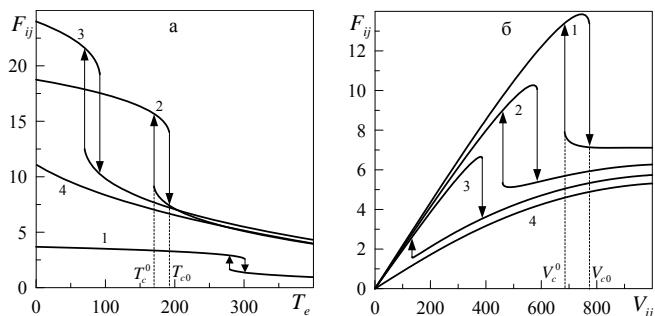


Рисунок 3.35 — Залежність стаціонарного значення повної сили тертя  $F_{ij}$  (мН) (3.172) від температури поверхонь тертя  $T_e$  (К) і швидкості зсуву  $V_{ij}$  (нм/с) при  $\gamma = 2/3$ ,  $A = 3 \cdot 10^{-9} \text{ м}^2$ ,  $n = -7 \cdot 10^5 \text{ Па}$ : а — криві 1–4 відповідають постійним значенням швидкості зсуву  $V_{ij} = 150 \text{ нм/с}, 800 \text{ нм/с}, 1100 \text{ нм/с}, 1400 \text{ нм/с}; б — криві 1–4 відповідають фіксованим значенням температури  $T_e = 200 \text{ К}, 245 \text{ К}, 279 \text{ К}, 310 \text{ К}$$

ілюструє той факт, що із підвищенням температури сила тертя зменшується. Розглянемо детальніше криву 2. Спочатку при підвищенні температури надлишковий об'єм монотонно зростає. При цьому ефективний модуль зсуву  $2\mu_{eff}$  (3.153) зменшується, що приводить до зниження значення пружної компоненти зсувних напружень (3.152) і, відповідно, до зменшення значення сили тертя (3.172). При перевищенні температурою критичного значення  $T_e > T_{c0}$ , величина надлишкового об'єму  $f$  стрибкоподібно збільшується і мастило плавиться, що приводить до різкого зниження повної сили тертя. З подальшим пониженням температури мастило твердне тепер уже при  $\bar{\mu}$  меншому значенні

$T_e = T_c^0$ . При цьому залежність має гістерезисний характер, що відповідає фазовим переходам першого роду. Згідно з рисунком 3.35а з підвищеннем швидкості зсуву мастило плавиться при меншому значенні температури. При швидкості вищій за деяке критичне значення мастило незалежно від температури завжди рідиноподібне (крива 4), і сила тертя зменшується разом з температурою за рахунок зменшення модуля зсуву (розрідження мастила).

Таким чином, при малих температурах ( $T_e < T_c^0$ ) реалізується один мінімум потенціалу  $\Phi(f)$ , який 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 у стан, що відповідає другому мінімуму, оскільки ці мінімуми розділяє максимум енергії. При подальшому збільшенні температури  $T_e > T_{c0}$  розмежовуючий максимум зникає, і мастило за механізмом фазового перетворення першого роду переходить в стан, що відповідає єдиному мінімуму при великому значенні  $f$ , тобто плавиться. Якщо після цього знижувати температуру, то з появою першого мінімуму система знову не зможе перейти у відповідаючий йому стан із-за наявності розмежовуючого максимуму. З його зникненням при  $T_e = T_c^0$  мастило стрибкоподібно твердне.

Рисунок 3.35б демонструє декілька іншу поведінку. Тут, згідно з (3.172), за малих швидкостей зсуву мастило твердоподібне, і відповідне значення  $\sigma_{ij}^e$  велике. Підвищення швидкості в такому режимі приводить до зростання обох компонент сили тертя (3.172) і тому вона швидко збільшується. При подальшому підвищенні швидкості мастило плавиться і пружне зсувне напруження (3.152) істотно зменшується, що, в свою чергу, приводить до різкого зниження повної сили тертя. З подальшим збільшенням швидкості значення  $F_{ij}$  зростає за рахунок обох компонент сили тертя, які ростуть із 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 при підвищенні температури (рис. 3.35а), з тією відмінністю, що у разі зсувного плавлення із збільшенням температури поверхонь тертя зростає площа фігури, яку обмежує гістерезис. З підвищеннем температури мастило плавиться при менших швидкостях зсуву. Зазначимо, що результати, які подано 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, в даний час експериментально не вимірюються.

### 3.9.3 Трибологічна система

Подані на рисунку 3.35 залежності отримано за фіксованої швидкості зсуву верхньої поверхні тертя. Проте динамічні характеристики трибологічної системи визначаються не тільки силою тертя, наведеною на вказаному рисунку, а також і властивостями системи в цілому. Зокрема, згідно з експериментами, в області гістерезису залежності на рисунку 3.35 можлива реалізація переривчастого режиму тертя (*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]<sup>8)</sup>

$$M\ddot{X} = k \left( \int_0^t V_0 dt' - X \right) - F, \quad (3.173)$$

де  $t = t'$  – час руху. У випадку 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 при цьому силу тертя з (3.172). Проте, часи релаксації деформації  $\tau_\varepsilon$  і ентропії  $\tau_s = h^2/\kappa$  за рахунок тонкості мастила, можна покласти малими в порівнянні з часом релаксації надлишкового об'єму  $\tau_f$ . Тому, в межах наближення  $\tau_f \gg \tau_\varepsilon, \tau_s$ , розв'язуватимемо спільно два рівняння (3.173), (3.158), визначаючи температуру і деформацію з (3.166), а ентропію з (3.159).

Результат розв'язку вказаних рівнянь наведений на рисунку 3.36. Згідно з останнім сила тертя спочатку монотонно зростає, ос-

---

<sup>8)</sup> Оскільки розглядається зсув в одному напрямі, далі для зручності запису опускатимемо тензорні позначення.

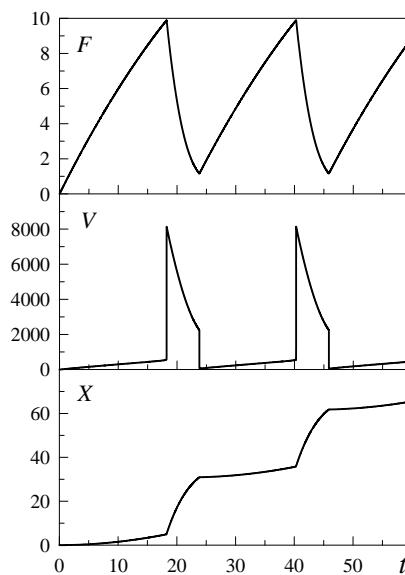


Рисунок 3.36 — Залежність сили тертя  $F$  (мН), швидкості зсуву поверхні тертя  $V$  (нм/с) та її координати  $X$  (мкм) від часу  $t$  (с) при параметрах  $n = -7 \cdot 10^5$  Па,  $M = 0.4$  кг,  $k = 480$  Н/м,  $T_e = 250$  К,  $V_0 = 1400$  нм/с

кільки 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. При цьому зменшується натягнення пружини і, відповідно, швидкість зсуву. Коли вона стає меншою за значення, що необхідне для підтримки мастила в рідиноподібному стані, останнє твердне, і сила тертя починає зростати. Описаний процес періодично повторюється у часі. Зазначимо, що швидкість, при якій мастило твердне, не збігається з аналогічною швидкістю, наведеною на рисунку 3.35. Це пов'язано з різким збільшенням швидкості зсуву  $V$  при плавленні і відповідним збільшенням параметра  $f$ . Згідно з (3.153) модуль зсуву при цьому стає менше нуля і його необхідно вважати за нульовий, що змінює вид потенціалу (3.148). При цьому за наявності пружних деформацій (3.165) пружні напруження в мастилі згідно з (3.152) стають нульовими, що і обумов-

лює зниження сили тертя, а мастило при цьому тече.

На рисунку 3.37 показано залежність повної сили тертя  $F$  (3.172), надлишкового об'єму  $f$  і пружної компоненти зсувних напружень  $\sigma_{ij}^e$  (3.152) від часу при збільшенні швидкості зсуву  $V_0$ . Споча-

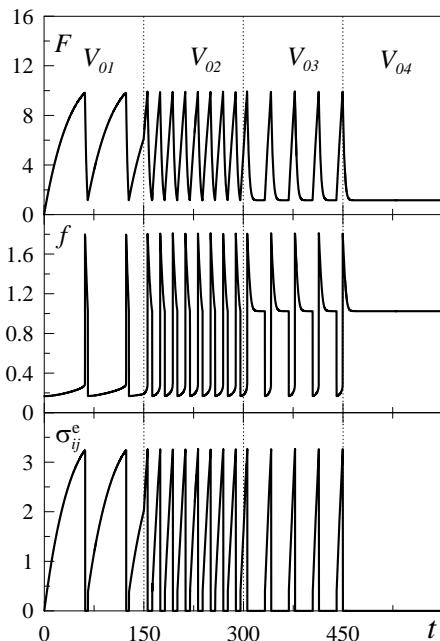


Рисунок 3.37 — Залежність сили тертя  $F$  (мН), надлишкового об'єму  $f$  і пружної компоненти напружень  $\sigma_{ij}^e$  (МПа) від часу  $t$  (с) при параметрах рисунку 3.36 і швидкостях зсуву  $V_{01} = 650$  нм/с,  $V_{02} = 1800$  нм/с,  $V_{03} = 2246.7$  нм/с,  $V_{04} = 2247$  нм/с

тку рух верхнього зрушуваного блоку ( $V_0 = V_{01}$ ) приводить до зростання надлишкового об'єму  $f$ . Коли  $f$  досягає критичного значення, мастило плавиться за механізмом фазового перетворення першого роду, при цьому 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. В результаті встановлюється періодичний переривчастий (*stick–slip*) режим плавлення/твірдення. При підвищенні швидкості до значення  $V_0 = V_{02}$  частота *stick–slip* піків збільшується за рахунок того, що при цій швидкості у системі швидше встановлюється критичне значення  $f$ . Відповідно, мастило швидше плавиться, а тому за один і той же проміжок часу система встигає зробити більшу кількість переводів плавлення/твірдення. З 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  $F = \text{const}$ . Слід зазначити, що в цьому режимі параметр  $f$  при плавленні спочатку різко зростає завдяки швидкому збільшенню швидкості зсуву верхнього блоку  $V$ . Стационарній кінетичній ділянці відповідає менше значення надлишкового об'єму  $f$ , що встановлюється після різкого початкового зсуву верхньої поверхні, що третється, за рахунок вивільнення частини механічної потенціальної енергії розтишнутої пружини. При подальшому зростанні швидкості  $V_0 = V_{04}$  перевивчастий режим зникає і встановлюється кінетичний режим тертя рідиноподібного мастила, що характеризується більшим значенням надлишкового об'єму  $f$  і нульовими пружними зсувними напруженнями  $\sigma_{ij}^e$ . Зазначимо, що рідиноподібний стан не завжди характеризується нульовим значенням напружень  $\sigma_{ij}^e$ , і в даному випадку цей факт обумовлений рівністю ефективного модуля зсуву мастила (3.153) нулю в рідиноподібному стані. Таким чином, при збільшенні швидкості частота *stick – slip* піків спочатку збільшується, а потім зменшується за рахунок появи довгих кінетичних ділянок. При перевищенні критично-го значення швидкості  $V_0$  режим *stick–slip* зникає. Описана поведінка добре узгоджується з експериментальними даними [13].

У експериментах також часто досліджується вплив на характер плавлення мастила зовнішнього нормального тиску, що прикладений до поверхонь тертя [13]. Такі експерименти показують, що тиск впливає на параметри трибологічної системи нетривіальним чином. Наприклад, для мастил з ланцюгових молекул гексадекана із зростанням тиску критична швидкість зсуву зменшується, а для квазісферичних молекул октаметилциклотетрасилоксана вона, навпаки, збільшується [13]. Тиск також впливає на частоту і амплітуду *stick – slip* пере-

ходів [13]. В 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 при різних значеннях нормального тиску, дію якого направлено на стиснення поверхонь тертя. При температурі, нижчій за критичне значення (верх-

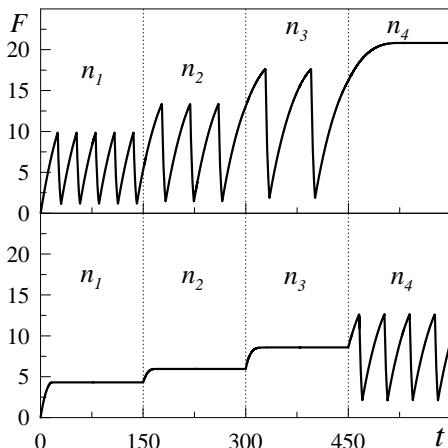


Рисунок 3.38 — Залежність сили тертя  $F$  (мН) від часу  $t$  (с) при параметрах рисунку 3.36 і зовнішньому нормальному навантаженні  $n_1 = -7 \cdot 10^5$  Па,  $n_2 = -50 \cdot 10^5$  Па,  $n_3 = -80 \cdot 10^5$  Па,  $n_4 = -100 \cdot 10^5$  Па. Верхня панель відповідає температурі  $T_e = 250$  К, нижня —  $T_e = 400$  К

ня панель рисунка), реалізується переривчастий режим тертя. Причому, із зростанням тиску збільшується амплітуда *stick – slip* переходів та значення кінетичної і статичної сил тертя, а також зменшується частота переходів. При тиску, що відповідає нормальному напруженню  $n = n_4$ , *stick – slip* режим не реалізується. Проте, при цьому встановлюється не кінетичний режим, що відповідає рідиноподібному мастилу, а відбувається тверднення мастила унаслідок стиснення стінок. За рахунок цього мастило вже не може розплавитися, тому встановлюється велике значення сили тертя  $F$ , що відповідає твердоподібному мастилу і малому значенню надлишкового об'єму  $f$ , оскільки стиснення стінок сприяє виникненню в мастилі дальнього порядку чергування атомів.

На нижній панелі рисунка подано залежність, яка має місце при підвищенні температурі поверхонь тертя  $T_e$ . Тут видно, що встановлюється кінетичний режим тертя, який відповідає малому значенню сили тертя і великому значенню надлишкового об'єму  $f$ . Проте, при  $n = n_4$  наступає *stick – slip* режим, оскільки при такому значенні нормального напруження  $n$  згідно з рівнянням (3.158) мастило вже не може бути завжди рідиноподібним. З подальшим зростанням тиску слід чекати повного тверднення мастила, як на верхній панелі рисунка при  $n = n_4$ . Таким чином, виявлено три режими тертя: 1) кінетичний режим, в якому мастило завжди рідиноподібне; 2) переривчастий режим, що відповідає періодичному плавленню/тврдненню; 3) режим сухого тертя, що характеризується великим значенням сили тертя і твердо-подібною структурою мастила. Ці режими знайдено також в рамках стохастичної моделі.

На рисунку 3.39 подано залежність сили тертя від часу при підвищенні температури поверхонь тертя, яка в даному розгляді збігається з температурою мастила. Видно, що підвищення температури

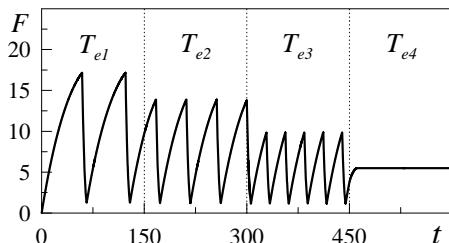


Рисунок 3.39 — Залежність сили тертя  $F$  (мН) від часу  $t$  (с) при параметрах рисунку 3.36 і температурі поверхонь тертя  $T_{e1} = 150$  К,  $T_{e2} = 200$  К,  $T_{e3} = 250$  К,  $T_{e4} = 300$  К

приводить до зниження амплітуди коливань сили тертя і збільшення частоти фазових переходів рідиноподібне – твердоподібне мастило. При  $T_e = T_{e4}$  наступає режим ковзання, що характеризується постійним значенням кінетичної сили тертя і незмінною швидкістю зсуву верхнього блоку. Таким чином, підвищення температури сприяє плавленню мастила. Данна залежність є прогнозуючою, 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, які мають місце в межовій плівці мастила. Основною слабкістю даного підходу і подібних ідеалізованих моделей є те, що для їх застосування необхідні припущення ѹ апроксимації, що можуть привести до некоректних результатів. Також феноменологічний підхід як правило 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 ѹ експериментальними умовами і дуже широко використовується для розв'язання нанотрибологічних задач [6, 14].

У даному розділі описано МД моделювання ультратонкого шару води, стиснутого між абсолютно жорсткими алмазними поверхнями. У першому підрозділі дається короткий огляд основних властивостей межових плівок і обґрунтування вибору досліджуваної системи. У другому підрозділі докладно описані умови моделювань, і в третьому підрозділі наведено основні результати комп'ютерних експериментів.

Як показують експерименти ѹ комп'ютерні моделювання, поведінка ультратонких плівок рідин, стиснутих між двома поверхнями, істотно відрізняється від поведінки об'ємних рідин. Для межових плівок є характерними наступні особливі властивості [13, 14]:

1. Молекули рідин, стиснутих між атомарно-гладенькими поверхнями стають більш упорядкованими і прагнуть утворювати квазідискретні шари, у яких середня локальна густина рідини осцилює із відстанню, нормальнюю до поверхонь.

2. Рухливість молекул у стиснутих плівках суттєво зменшується у порівнянні із об'ємними рідинами. Це виявляється у зменшенні коефіцієнту дифузії і у 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 у  $10^{10}$  разів.
3. Межове мастило може проявляти дві різні реакції на зсув: рідиноподібну, за якої рідина тече при появі деформації, і твердоподібну, що характеризується наявністю границь текучості у плівці. У комп'ютерних моделюваннях простих леннард-ジョンсівських рідин між атомарно-структурзованими поверхнями було передбачено різкі переходи рідина-тверде тіло у плівках, тонших 6 молекулярних діаметрів. При цьому 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 тільки взаємними взаємодіями молекул рідини, а й наявністю двох близько розташованих твердих поверхонь.
4. Для швидкостей зсувних поверхонь, менших деякого критичного значення, може мати місце 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 із сферичними молекулами, й алканів, молекули яких мають ланцюгову форму [14].

У даному розділі проведено комп'ютерні експерименти для ультратонкої плівки води, стиснутої між абсолютно жорсткими алмазними поверхнями. Вибір води в якості рідини для моделювання обумовлений її важливістю, повсюдністю, й унікальними властивостями, зокрема у трибологічному відношенні [12]. Так, введення моношару води (товщиною лише 0.25 нм) між атомарно-плоскими поверхнями слюди в апараті поверхневих сил обумовлює зменшення тертя більш, ніж на по-

рядок величини. Ефективність моношару води у зменшенні тертя пояснюється «гідрофільністю» слюдяних поверхонь їх існуванням у водних розчинах сильних відштовхуючих короткодіючих 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 до зовнішнього навантаження.

Метою даних досліджень є вивчення поведінки плівки води, яка складається з TIP4P молекул, стиснутої між абсолютно жорсткими алмазними пластинаами, і перевірка відповідності моделі до експериментів їх інших моделювань. Результати, у свою чергу, можуть дати оцінку надійності використання TIP4P моделі молекул води її 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 проводилися для плоскої геометрії Куетта, що сильно нагадує експериментальні системи, досліджувані за допомогою апарату поверхневих сил [14]. Розглядалася тонка плівка молекул води, обмежена двома твердими стінками із періодичними граничними умовами в площині пластин, застосованими як до рідини, так і до поверхонь. Вивчалися атомарно-гладенькі й атомарно-шорсткі пластини. У першому випадку кожна стінка складається із 1152 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 у випадку шорстких поверхонь введена слабка взаємодія поверхонь однієї з одною. Хоча вивчення тертя алмазних

поверхонь, розділених плівкою води, ще не проводилися експериментально, однак діамант є прозорим для світла, і, отже, може бути використаний у дослідженнях з апаратом поверхневих сил. Для спрощення задачі пластиини вважаються абсолютно жорсткими, і модель не враховує пружності поверхонь. Але, беручи до уваги, що алмаз є одним із найтвердіших матеріалів, у даній роботі вирішено перевірити це наближення. Досліджувалися плівки води, що складаються з одного і двох шарів молекул. Кожний шар містить  $14 \cdot 14 = 196$  молекул, отже максимальна кількість молекул, що використовувалася в моделюваннях, дорівнює 2696.

На рисунку 4.1 подані 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 і кристалічної площини.

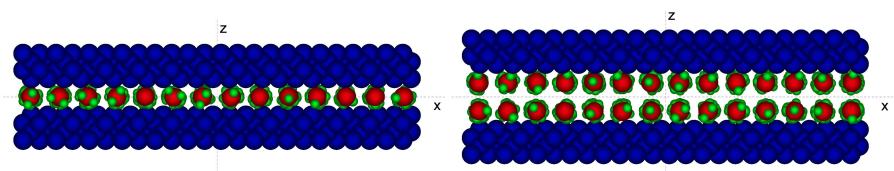


Рисунок 4.1 — Початкова конфігурація системи для плівки води з одного і двох шарів молекул, стиснутої між гладенькими поверхнями. Атоми вуглецю, кисню й водню зображені відповідно синіми, червоними й зеленими кульками

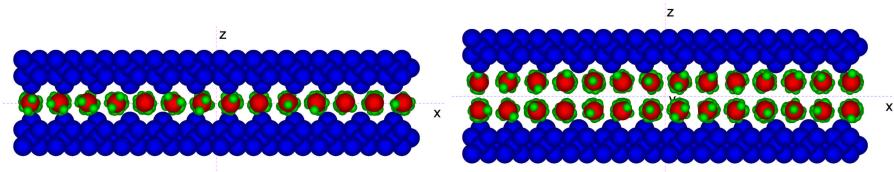


Рисунок 4.2 — Початкова конфігурація системи для плівки води з одного і двох шарів молекул, стиснутої між атомарно-шорсткими поверхнями із періодичним рельєфом

Для візуалізації атомів використовувалися емпіричні значення їх

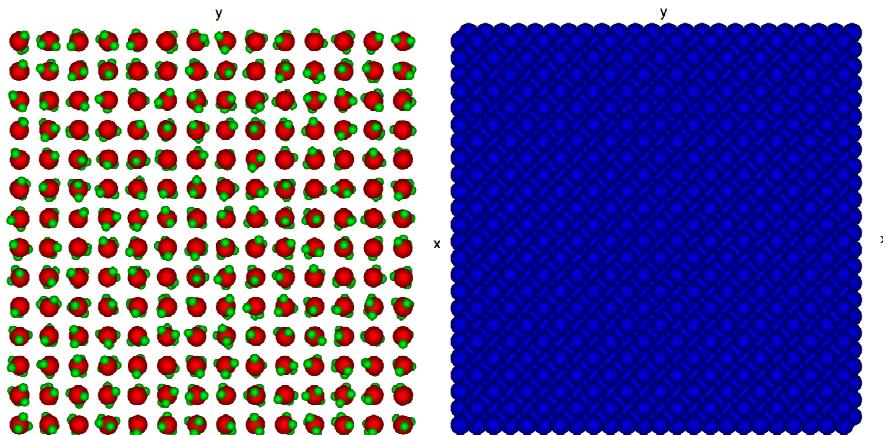


Рисунок 4.3 — Розташування молекул води (ліворуч) і вид алмазної поверхні (праворуч) у площині  $xy$  на початку моделювань

ковалентних радіусів, які для вуглецю, кисню і 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 із сталовою решіткою, що відповідає значенню 1048  $\text{кг}/\text{м}^3$  густини води, яке є близьким до об'ємного (за нормальних умов) значення — 1000  $\text{кг}/\text{м}^3$ . Пластини і молекули води несумірні, 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 напрямах осей  $x$  і  $y$  однакові й дорівнюють 42.81 Å.

Щоб імітувати експерименти, моделювання проводилися при стаїх значеннях температури і навантаження, прикладеного до стінок. Температура становила 298 K, а навантаження моделювалося шляхом дії сталої сили  $L$  на кожен атом площин вздовж осі  $z$ . Зсув також імітувався прикладенням сталої горизонтальної сили  $F_S$  до кожного атому верхньої площини вздовж осі  $x$ , і в даній роботі використовувався алгоритм сталої сили зсуву [14].

## 4.2.2 Модель води

Для пояснення властивостей води потрібна деяка картина розподілу 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 у всіх трьох фазах (лід, рідина і пара) [12]. Основною вимогою до будь-якої моделі води є те, що вона повинна відтворювати тетраедричну структуру, обумовлену водневими зв'язками.

У даній роботі використовується модель, яка задовольняє вказану умову, і в якій молекула вважається жорсткою, — TIP4P модель [17]. Взаємодія між жорсткими молекулами найбільш легко вводиться шляхом визначення розташування на молекулі ділянок (сайтів або центрів), на які діють сили. Тоді результатуюча сила, що діє між двома молекулами, буде просто дорівнювати сумі сил між усіма парами сайтів взаємодії. Щоб розрахувати взаємодію між парами сайтів, достатньо знати відстань між центрами мас двох молекул і їх орієнтацію у просторі.

Модель молекули подана на рисунку 4.4. Вона базується на чотирьох сайтах, розміщених в одній площині. Два з них — позначені як M і O — пов'язані із ядром кисню, інші два — позначені через H — із ядрами водню. Сайт M лежить на осі симетрії молекули між сайтом O і лінією, яка з'єднує H сайти.

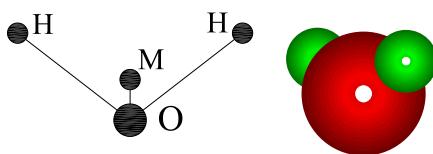


Рисунок 4.4 — Схематичне зображення TIP4P молекули води (ліворуч) [17], вид молекули при візуалізації в програмі (праворуч)

Відстані та кут, необхідні для повного визначення координат сайтів, мають наступні 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 із

подвійної суми за всіма сайтами обох молекул. Члени з індексами  $k$  і  $l$  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 наступні 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 тільки між О сайтами, наступні:  $A_{OO} \equiv A = 600 \times 10^3$  (ккал/моль) $\text{\AA}^{12}$ ,  $C_{OO} \equiv C = 610$  (ккал/моль) $\text{\AA}^6$ , і 1 ккал/моль=4184 Дж/моль.

У моделюваннях використовуються безрозмірні одиниці вимірювання. Одиниця виміру довжини  $\sigma = (A/C)^{1/6} = 3.154 \text{ \AA}$ , одиниця виміру енергії  $\varepsilon = A/(4\sigma)^{12} = 0.155$  ккал/моль. За одиницю виміру маси вибираємо масу молекули води  $m = 2.987 \times 10^{-27}$  г й одиниця виміру часу  $t_0 = \sqrt{m\sigma^2/\varepsilon} = 5.253 \times 10^{-12}$  с. Також визначимо безрозмірні одиниці виміру заряду, у яких  $q_H = 1$ . Часовий крок, що використовувався, мав значення  $\Delta t = 0.0005$ ; у розмірних одиницях це дорівнює  $2.627 \times 10^{-15}$  с.

Наведемо безрозмірній 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 кожну поверхню від 0.43 ГПа до 32.254 ГПа. Враховуючи, що поріг пластичності алмазу порядку 100 ГПа [14], обробці підлягали результати для тисків, менших 20 ГПа, оскільки для більших значень тисків деформація поверхонь, яка не взята до уваги в розглядуваній моделі, 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, діючих на кожен атом.

Що стосується взаємодії води із алмазними поверхнями, вважається, що із атомами вуглецю взаємодіє лише сайт О молекули води, потенціал має леннард-джонсівський вид:

$$u_{ij} = \begin{cases} 4\varepsilon_{\text{CO}} \left[ \left( \frac{\sigma_{\text{CO}}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma_{\text{CO}}}{r_{ij}} \right)^6 \right], & r_{ij} < r_c \\ 0, & r_{ij} \geq r_c \end{cases}, \quad (4.3)$$

де  $r_c = 7.5 \text{ \AA}$  (або 2.38 у безрозмірних одиницях) – відсічна відстань, і  $\varepsilon_{\text{CO}} = 2$ ,  $\sigma_{\text{CO}} = 0.86$ . Значення останніх параметрів вибрано таким чином, щоб задовольнити експериментальний факт, що алмаз є гідрофільним. Вони відповідають удвічі більшому притяганню молекул води до атомів вуглецю, ніж до молекул води.

### 4.2.3 Рівняння руху

У моделюваннях використовувалися класичні рівняння руху. Завдяки абсолютної жорсткості пластин до уваги береться рух їх центрів мас. Для верхньої пластиини рівняння руху мають наступний 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 пластиини,  $N_p$  – кількість атомів стінки,  $M = N_p m_C$  – маса пластиини,  $m_C = 0.67$  – маса атому вуглецю,  $F_x, F_y, F_z$  – компоненти результиуючої 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 має виконуватися закон збереження імпульсу вздовж осей  $x$  та  $y$ , і центр мас пластиин не повинен рухатися у цих напрямах. У даній роботі дрейф центру мас (внаслідок чисельних округлень і, можливо, через ефекти, обумовлені способом підтримання сталої температури) протягом періоду обчислень мав величину порядку одного значення сталої решітки алмазу.

Рівняння руху для нижньої стінки аналогічні до (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 підримку сталої температури) для центру мас  $i$ -ї молекули води має вид:

$$\ddot{\mathbf{r}}_i = \sum_j \mathbf{F}_{ij} + \sum_k \mathbf{f}_{ik}, \quad (4.5)$$

де  $\sum_j \mathbf{F}_{ij}$  – сила, що діє з боку всіх атомів вуглецю, які 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 розглядуваній моделі також враховується обертальний рух молекул води. Для опису обертання застосовуються гамільтонови кватерніони [17]. Одна із очевидних переваг кватерніонів – відсутність тригонометричних функцій при побудові матриці повороту. Компоненти кутової швидкості  $\omega'_x, \omega'_y, \omega'_z$  пов'язані із 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, які описують обертання твердого тіла, мають вид:

$$I_x \dot{\omega}'_x = n_x + (I_y - I_z) \omega'_y \omega'_z \quad (4.8)$$

ї 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 O і H,  $m_O = 2m_H$ . Рівняння руху через кватерніони має вид:

$$\begin{pmatrix} \ddot{q}_1 \\ \ddot{q}_2 \\ \ddot{q}_3 \\ \ddot{q}_4 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} W^T \begin{pmatrix} \dot{\omega}'_x \\ \dot{\omega}'_y \\ \dot{\omega}'_z \\ -2 \sum \dot{q}_m^2 \end{pmatrix}. \quad (4.9)$$

Можна виключити компоненти  $\dot{\omega}'_i$  із правої частини (4.9), використовуючи рівняння Ейлера (4.8). Після заміни компонент  $\dot{\omega}'_i$  лінійними комбінаціями величин  $\dot{q}_i$  із (4.6) отримуємо набір рівнянь руху, виражених повністю через кватерніони і 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, наблизених до експериментів, необхідно використовувати канонічний ансамбль, і, отже, підтримувати сталою температуру. Оскільки зовнішніми силами над системою виконується робота, то підтримання сталої температури означає вибір способу відведення надлишку тепла або сполучення системи із термостатом. У реальних тілах відтік тепла відбувається за рахунок багатьох механізмів, наприклад, збудження фононів або генерації пар електрон-дірка, енергія яких потім перетворюється в тепло [14]. У моделюваннях можна як явно вводити способи відведення тепла, так цього і не робити. Наприклад, для досліджуваної у даній 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 при моделюванні трибологічних явищ є застосування термостату Ланжевена [14]. У даному 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 заснований на апроксимаційних вихідних положеннях, наприклад таких, як частота Дебая, що має місце у спрощеному термостаті Ланжевена. Тому втрати і приріст тепла визначаються лише неявними властивостями системи.
2. Оскільки не вимагаються випадкові сили, цей метод значно прискорює обчислення.
3. Рівняння руху (на відміну від термостату Ланжевена) є оборотними за часом.
4. Диференціюючи енергію за часом, можна безпосередньо обчислити втрати (або приріст) тепла завдяки термостатові.

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. Відмітимо, що внаслідок абсолютної жорсткості поверхонь модифікувалися лише рівняння руху молекул води.

Опишемо більш докладно розглядуваний метод. Накладання сталої температури зводиться до введення неголономного зв'язку у рівняння руху для фіксування кінетичної енергії. Насправді це грає роль математичного термостату. Доведення випливає не із гамільтонового варіаційного принципу, а з іншого формульовання механіки, відомого як гаусівський принцип найменшого обмеження. Можна показати, що рівноважні властивості такої ізотермічної системи будуть такими ж, як і канонічного ансамблю. Границя умова базується на поступальній і обертельній кінетичній енергіях. Для кожної молекули у поступальній 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 отримаємо:

$$\alpha = -\frac{\sum_i \dot{\mathbf{r}}_i \mathbf{f}_i + \sum_i \omega'_i \mathbf{n}_i}{m \sum_i \dot{\mathbf{r}}_i^2 + \sum_x I_x \sum_i \omega'_{ix}^2}, \quad (4.11)$$

де  $\mathbf{f}_i$  і  $\mathbf{n}_i$  — повні сила і момент сил, що діють на  $i$ -ту молекулу. Для проведених у даній роботі обчислень дрейф температури становив порядку кількох відсотків від значення температури системи.

#### 4.2.5 Особливості вимірювань

У процесі моделювання проводилися дві групи вимірювань. Одні мали місце 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 загальнийй силі, яка діє з боку води на поверхню.

Коефіцієнт дифузії розраховувався 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  $D$ , заснованого 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 відмічалося, на початку кожного моделювання молекули во-ди розміщуються у вершинах кубічної решітки. При цьому молекулярна орієнтація набуває випадкових значень, кутова і лінійна швидкості кожної молекули мають фіксоване значення, залежне від температури, і випадково вибраний напрямок. Кутові координати і швидкості переводяться у кватерніонну форму, а лінійні та кутові прискорення, що використовуються при інтегруванні рівнянь руху, покладаються рівними нулю. Під час моделювання протягом перших 2 000 часових кроків відбувалося досягнення системою рівноважного стану, після чого або одразу вимірювалися рівноважні властивості, або прикладалася зсу-на сила і вимірювалася сила тертя. Максимальна тривалість моделю-вань складала 55 000 часових кроків або 144.4 пс.

## 4.3 Результати й обговорення

### 4.3.1 Плівка води між гладенькими поверхнями

На рисунку 4.5 подані розраховані часові залежності автокоре-ляційних функцій швидкостей молекул води для різних значень наван-таження. Видно, що із зростанням навантаження амплітуда і кількість осциляцій зростає. Це вказує на те, що за високих навантажень швид-кості молекул стають більш корельованими.

Поступове спадання коефіцієнту дифузії із зростанням зовні-шнього навантаження на рисунках 4.6 і 4.7, вказує на перехід плівки води до твердоподібного стану. Особливістю останнього, як відмічало-ся, є впорядкування молекул плівки, яке може бути як вертикальним, тобто у вигляді шарів, так і площинним. Аналітично перше виявляє-ться у набутті просторовою залежністю густини плівки осцилюючого вигляду, а друге — в особливій формі структурного фактору рідини. У

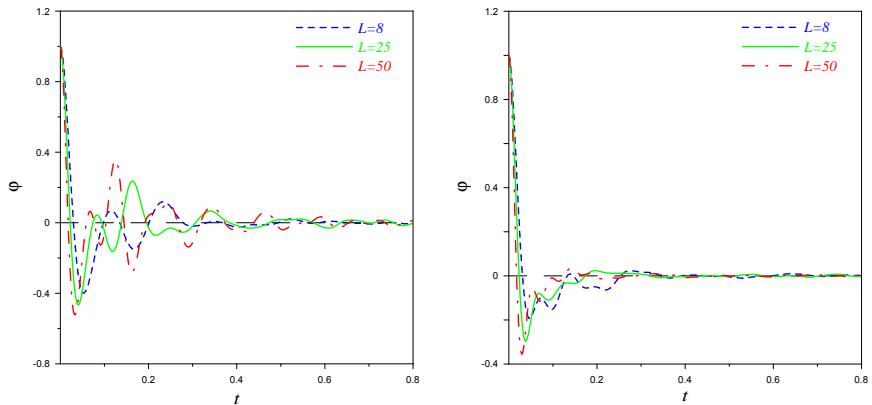


Рисунок 4.5 — Часові залежності автокореляційних функцій швидкості (4.14) для плівок товщиною один (ліворуч) і два (праворуч) молекулярні діаметри між гладенькими пластинами за різних значень навантаження

даній роботі розрахунок вказаних величин не проводився, але утворення шарів можна було спостерігати візуально. На рисунку 4.8 наведено

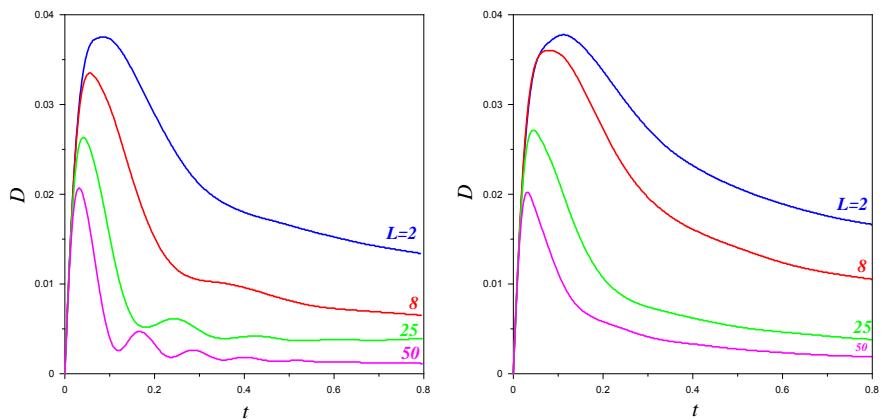


Рисунок 4.6 — Часові залежності коефіцієнту дифузії, розраховані за формулою (4.12) Ейнштейна для плівки води з одного (ліворуч) і двох (праворуч) шарів молекул між гладенькими алмазними стінками для різних значень навантаження

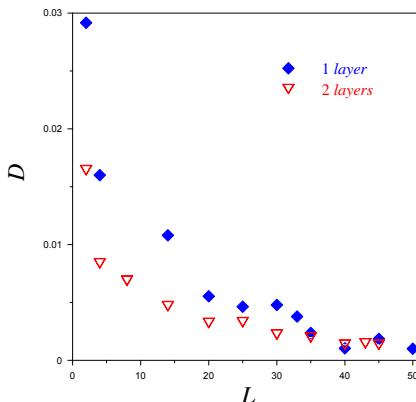


Рисунок 4.7 — Залежності коефіцієнту дифузії від навантаження для плівки з одного і двох шарів молекул між гладенькими алмазними пластинами, розраховані із використанням відповідних автокореляційних функцій і формули Гріна – Кубо (4.13)

типове вертикальне впорядкування молекул води для двох значень навантаження.

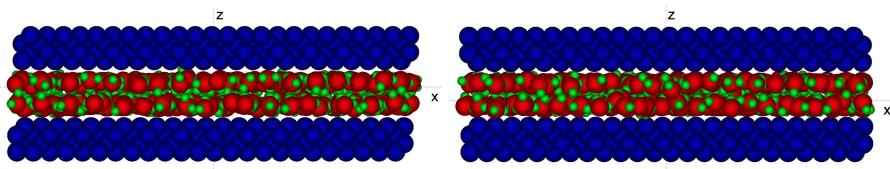


Рисунок 4.8 — Організація молекул у шари для значень навантаження 8 (ліворуч) і 14 (праворуч) і нульової сили зсуву

Для плівки товщиною один молекулярний діаметр горизонтальне впорядкування не спостерігалося за всіх значень навантаження і зсувної сили. Однак для плівки товщиною два молекулярні діаметри площинне впорядкування має місце, особливо за високих навантажень. На рисунку 4.9 подано невпорядкований стан молекул і декілька варіантів впорядкованих конфігурацій у кінці відповідних моделювань для різних значень навантаження і зсувної сили. Наявність зсуву, як правило, приводила до появи впорядкованої структури за більш низьких

навантажень, ніж за його відсутності. Також зсув сприяє більш швидкому досягненню впорядкованого стану. Таким чином, для двох шарів спостерігається впорядкування молекул зсувом, яке має місце в експериментах [13]. Необхідно відмітити, що для низьких швидкостей зсуву і середніх навантажень молекулярні конфігурації не однозначно 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 же значень параметрів отримуються невпорядковані конфігурації. Навпаки, за високих тисків завжди спостерігається впорядкований стан, як показано на нижній правій частині рисунку 4.9.

Відсутність впорядкування в одношаровій плівці можна пояснити особливостями моделі. Поведінка такої плівки повинна бути схожою на поведінку простої леннард-джонсівської рідини, стиснутої між гладенькими поверхнями. Це випливає із фактів, що шорсткість поверхонь є малою, і в таких тонких плівках води у напрямі осі  $z$  молекули можуть взаємодіяти лише з атомами поверхонь. Останні, у свою чергу, 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 у сусідніх шарах можуть взаємодіяти одна з одною, і кулонівська взаємодія може викликати виникнення впорядкованих структур. Необхідно відмітити, 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 і епітаксійними взаємодіями між плівкою й атомами поверхонь [13].

Часові залежності сили тертя на рисунку 4.10 для одного шару молекул мають нерегулярну форму із значними флюктуаціями. Для плівки товщиною два молекулярні діаметри на цьому ж рисунку за високих зсувних сил спостерігаються періодичні піки, які мають місце 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 дозво-

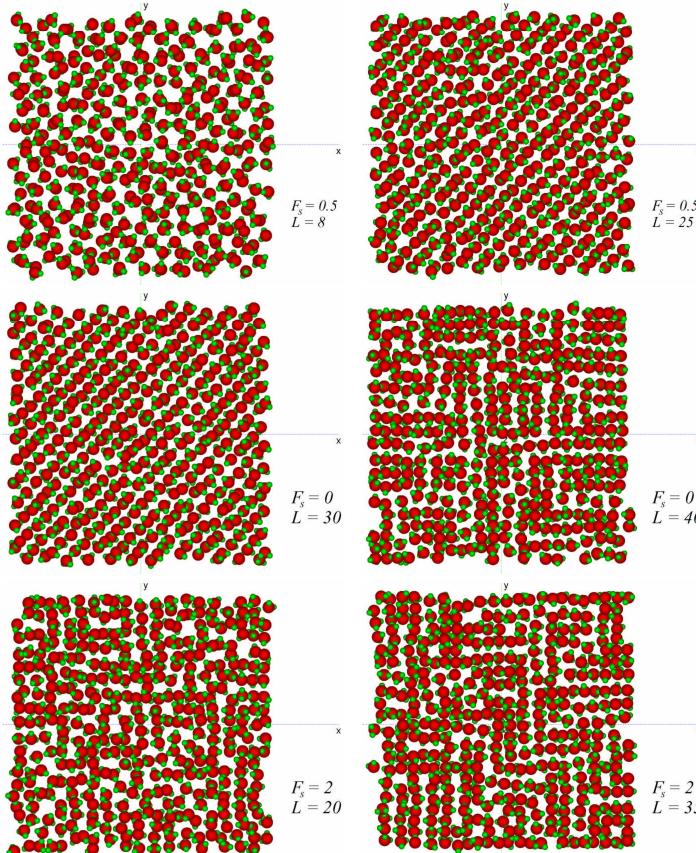


Рисунок 4.9 — Конфігурації молекул у площині  $xy$  для різних навантажень і зсувних сил у кінці відповідних моделювань для плівки товщиною два молекулярні діаметри, стиснутої між атомарно-гладенькими алмазними пластинами

ляє однозначно проводити порівняння із 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

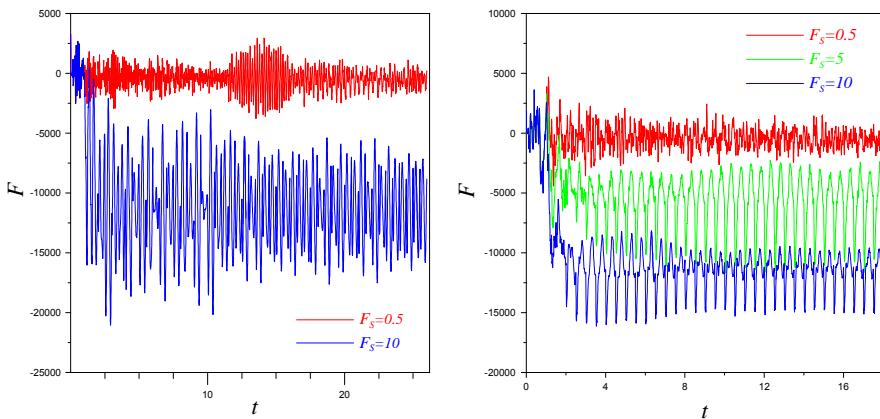


Рисунок 4.10 — Часові залежності сили тертя для плівок товщиною один (ліворуч) і два (праворуч) молекулярні діаметри, стиснутих між гладенькими пластинами, і різних зсувних сил. Значення навантаження дорівнює 50. Від'ємний тренд є наслідком факту, що сила тертя діє у напрямі, протилежному напряму ковзання

із якою сила тертя для межового режиму визначається двома складовими. Перша виникає через наявність внутрішніх адгезійних сил між молекулами плівки і поверхнями, а друга обумовлена дією зовнішнього навантаження. Сила тертя визначається співвідношенням:

$$F = S_c A + CL, \quad (4.15)$$

де сталі  $S_c$  і  $C$  – критичне зсувне напруження і коефіцієнт тертя,  $A$  – площа контакту і  $L$  – зовнішнє навантаження. Величина  $S_c$  залежить від адгезійних взаємодій плівки із поверхнями. Коефіцієнт тертя  $C$  пов'язаний із атомною гранулярністю (шорсткістю) поверхонь і розмірами, формою і конфігурацією молекул рідини між поверхнями. У загальному випадку, чим більш гладенькими є поверхні, тим меншим повинно бути значення  $C$ . Слід відмітити, що макроскопічний коефіцієнт тертя  $\mu$  для пошкоджених поверхонь має різне походження і величину по відношенню до  $C$ .

Графіки на рисунку 4.11 можна пояснити наступним чином. Оскільки поверхні в моделі є абсолютно гладенькими, і молекули мають

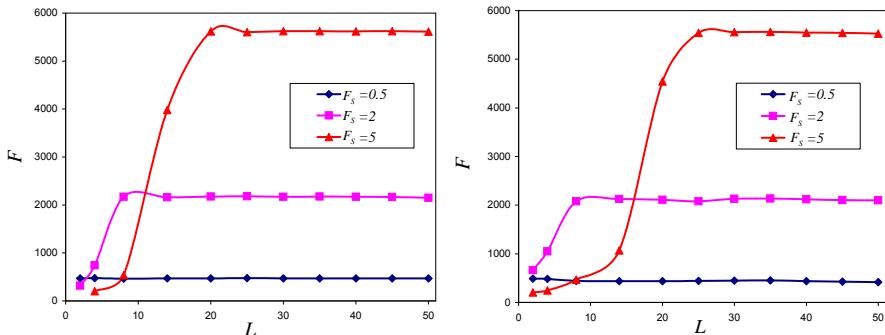


Рисунок 4.11 — Залежності середнього за часом значення сили тертя від навантаження для плівок товщиною один (ліворуч) і два (праворуч) молекулярні діаметри між гладенькими стінками за різних значень зсувної сили

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 із зростанням навантаження різко збільшується кількість і величина адгезійних зв'язків молекул води із поверхнями, тому на рисунку 4.11 спостерігається зростання сили тертя із збільшенням  $L$ . Після досягнення деякого значення навантаження для даної величини сили зсуву встановлюються деякі стаціонарні значення кількості адгезійних зв'язків і величини сил адгезії. Оскільки у модель не включені деформації поверхонь, то при збільшенні  $L$  площа контакту не змінюється, перший доданок у (4.15) і, відповідно, сила тертя залишаються сталими із збільшенням  $L$ . Можна також говорити про аналогічну зміну зсувних напружень  $S = F/A$ , які часто використовуються в експериментах. Відмітимо, що експерименти із простими сферичними молекулами дають схожі залежності зсувних напружень  $S$  від навантаження  $L$ . Однак, для реальних поверхонь стало значення  $S$  для високих  $L$  обумовлене пропорційними змінами  $F$  і  $A$  внаслідок деформації поверхонь, а в моделюваннях сталість зсувних напружень обумовлена сталістю даних величин.

Таким чином, модель дає результати, які у багатьох відношеннях 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. Дані розбіжності можна пояснити простотою досліджуваної моделі. У ній не враховуються пружність поверхонь, їх шорсткість, взаємодія однієї з одною (яка відбуває наявність сил гідратації у водних розчинах). Необхідним є врахування взаємодії поверхонь із молекулами води, оскільки моделювання гідрофільних поверхонь леннард-джонсівським потенціалом є спрощеним. Ці фактори можуть мати значний вплив на поведінку системи і привести до переваги другого доданку в (4.15). У наступному пункті наведено результати для моделі, у якій введено атомарний періодичний рельєф поверхонь.

### 4.3.2 Плівка води між поверхнями із періодичним атомарним рельєфом

На рисунках 4.12 – 4.14 подано результати вимірювань автокореляційної функції швидкості й коефіцієнту дифузії для плівок води, стиснутих між абсолютно жорсткими алмазними стінками із періодичним рельєфом атомарного масштабу. Отримані залежності мають вид, аналогічний до залежностей для системи із гладенькими пластинами, і вказують на наявність твердоподібного стану ультратонкої плівки води.

Основною відмінністю поведінки межової плівки води між атомарно-шорсткими поверхнями є вигляд конфігурацій молекул. Так, шари не утворювалися, а мали місце структури, наведені на рисунку 4.15. Також на відміну від гладеньких поверхонь за високих навантажень спостерігалося горизонтальне впорядкування для одношарової плівки води (як за відсутності, так і за наявності зсуву), що також мало місце для леннард-джонсівських рідин між шорсткими поверхнями у комп’ютерних експериментах. На рисунку 4.16 подано впорядковані конфігурації молекул у плівці товщиною один молекулярний діаметр.

Горизонтальне впорядкування для плівки води товщиною два молекулярні діаметри між шорсткими поверхнями відсутнє і, отже, не спостерігається впорядкування молекул зсувом. На рисунку 4.17 подано типові конфігурації молекул у горизонтальній площині у плівці

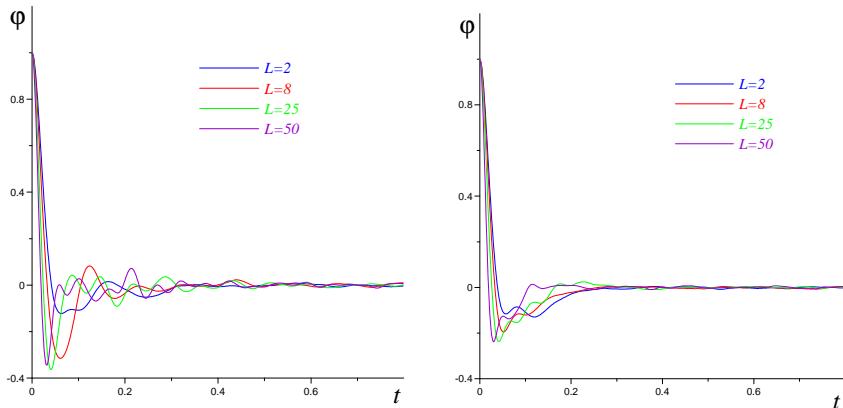


Рисунок 4.12 — Часові залежності автокореляційних функцій швидкості (4.14) для плівок товщиною один (ліворуч) і два (праворуч) молекулярні діаметри, стиснутих між алмазними стінками із періодичним рельєфом атомарного масштабу, за різних значень навантаження

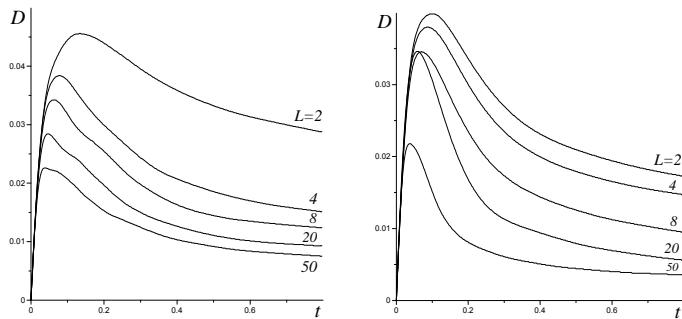


Рисунок 4.13 — Часові залежності коефіцієнту дифузії, розраховані за формулою (4.12) Ейнштейна для плівки води з одного (ліворуч) і двох (праворуч) шарів молекул, стиснутих між алмазними стінками із періодичним рельєфом атомарного масштабу, для різних значень навантаження

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 наводяться. На рисунку 4.18 подано залежності середнього за часом значення сили тертя від

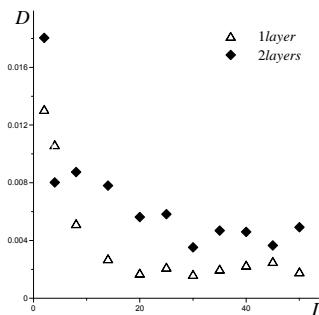


Рисунок 4.14 — Залежності коефіцієнту дифузії від навантаження для плівки з одного і двох шарів молекул, стиснутих між алмазними стінками із періодичним рельєфом атомарного масштабу, розраховані із використанням відповідних автокореляційних функцій і формули Гріна – Кубо (4.13)

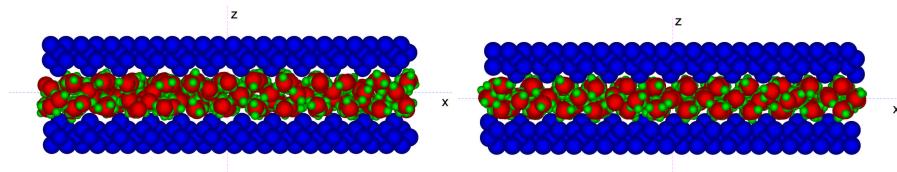


Рисунок 4.15 — Типові конфігурації молекул у вертикальному перерізі у плівці води між шорсткими поверхнями для навантажень 8 (ліворуч) і 30 (праворуч) і нульової сили зсуву

навантаження. Порівняння з рисунком 4.11 показує, що періодичний атомарний рельєф не приводить до якісних змін залежностей  $F(L)$ .

Таким чином, як випливає з проведених комп’ютерних експериментів, характер впорядкування молекул води в значній мірі визначається рельєфом алмазних стінок. Для шорстких пластин шари молекул не формуються, площинне впорядкування відсутнє. Періодичний рельєф поверхонь якісно не змінює часові залежності сили тертя, а також залежності середнього за часом значення сили тертя від навантаження.

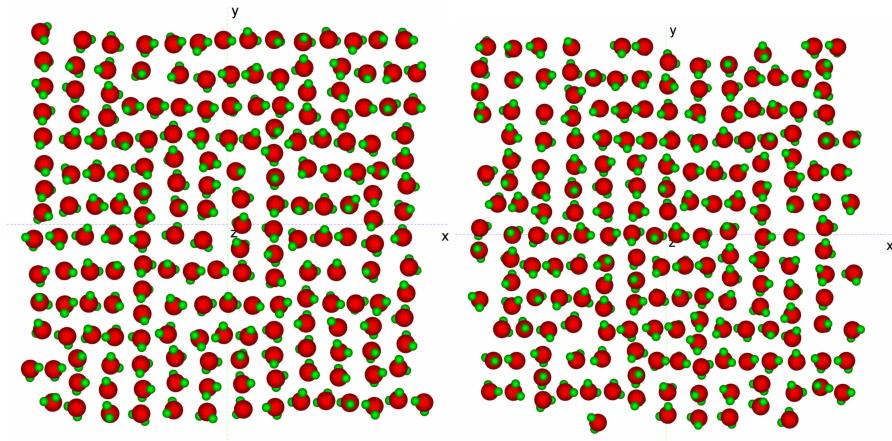


Рисунок 4.16 — Конфігурації молекул в площині  $xy$  в одношаровій плівці води між шорсткими поверхнями за відсутності зсуву для навантажень 20 (ліворуч) і 40 (праворуч)

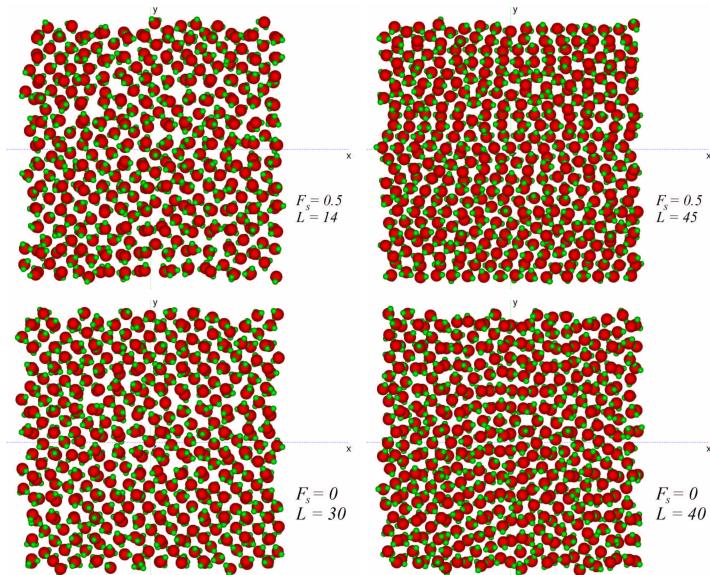


Рисунок 4.17 — Конфігурації молекул у площині  $xy$  для різних навантажень і зсувних сил у кінці відповідних моделювань для плівки товщиною два молекулярні діаметри, стиснутої між атомарно-шорсткими алмазними пластиналами

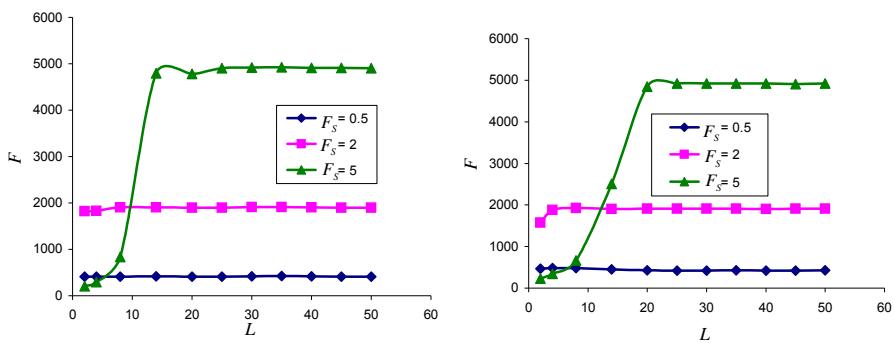


Рисунок 4.18 — Залежності середнього за часом значення сили тертя від навантаження для плівок товщиною один (ліворуч) і два (праворуч) молекулярні діаметри між шорсткими стінками за різних значень зсувної сили

## РОЗДІЛ 5

# ТЕРМОДИНАМІЧНЕ ПРЕДСТАВЛЕННЯ ФРАГМЕНТАЦІЇ МЕТАЛІВ

### 5.1 Основні поняття і співвідношення

Одним з перспективних способів отримання дрібнозернистих матеріалів з розміром зерна менше 100 нм є інтенсивна пластична деформація [5, 18–22]. При великих величинах деформацій в зразках (як правило металевих) формується фрагментована структура, яка зберігає залишкові ознаки аморфного стану.

Існує декілька методів ІПД: гвинтова екструзія, кручення під квазігідростатичним тиском, рівноканальне кутове пресування, всестороннє кування тощо. У всіх цих способах фрагментований зразок піддається багатократній ІПД. Використання методів ІПД дозволяє отримати масивні зразки з практично безпористою структурою матеріалу, що не вдається іншими способами отримання наноструктурованих об'ємних матеріалів.

В процесі ІПД в матеріалі утворюється безліч різних дефектних структур, які еволюціонують в ході деформації. Основна особливість матеріалів, сформованих при ІПД – наявність нерівноважних меж зерен, які служать джерелом великих пружиних напружень [19]. Слід за-значити, що межі зерен містять велику кількість дислокацій. Причому густота дислокаций усередині зерен значно менше, чим 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. Із цієї причини теоретичний опис ІПД є надзвичайно складним завданням, і необхідно віта-ти всі спроби в цьому напрямі. Проблема полягає в розумному виборі основних параметрів завдання і в обґрунтованому нехтуванні практи-чно нескінченною сукупністю інших параметрів. Фактично, в процесі ІПД між собою взаємодіють безліч дефектних підсистем, проте головним вирішальним дефектом розумно покласти найбільший з них, якою

є межа зерна. По суті, процес фрагментації зерен зводиться до продуктування нових меж і, як наслідок, до подрібнення зерна. Даний процес не є прямим перетворенням роботи зовнішніх сил на енергію меж зерен, а проходить як через проміжні етапи через формування ієархії дефектних підструктур, і вплив цього ланцюжка можна врахувати ко-ефіцієнтами теорії.

У зв'язку з тим, що процеси, що відбуваються при ІПД, досить складні і почали досліджуватися недавно, в даний час не існує змістової теорії, яка дозволяє описати їх повністю. Дослідженням ІПД займаються в основному експериментатори, що також говорить про відсутність достатнього теоретичного рівня опису. Існуюча теорія, яка базується на узагальненні експериментальних даних, не може пояснити причину формування граничного стану, коли при подальших циклах ІПД зерна перестають подрібнюватися [20]. Щоб описати цей процес штучно вводиться деякий притягаючий атрактор. Не отримала пояснення наявність в структурі зерен двох розмірів, що різко відрізняються [19]. Крім того, в 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 з цим розроблена термодинамічна теорія [21, 22], яка дозволяє якісно описати вказані ефекти, виходячи з багатовимірного термодинамічного потенціалу. 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 як раз регулює зовнішні взаємодії виділеного об'єму у формі роботи і теплового обміну. Перетворення енергії на внутрішніх ступенях свободи задається розподілом необоротної частини зовнішньої роботи між різними каналами дисипації. Переход частини необоротної роботи в теплоту це тільки один з каналів дисипації. Другим каналом дисипації може бути формування дефектної структури, зокрема, за наявності тільки одного типу дефектів.

Основний закон термодинаміки для простих тіл має вигляд [2]:

$$du = \delta A + \delta Q = \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij} + T ds', \quad (5.1)$$

де  $u$  — густина внутрішньої енергії;  $A$  — робота зовнішніх сил;  $Q$  — теплота;  $\sigma_{ij}$ ,  $\varepsilon_{ij}$  — тензори напружень і деформацій;  $T$ ,  $s'$  — температура і ентропія, пов'язана із зовнішніми джерелами тепла.

Ліва частина рівності представляє закон збереження енергії — внутрішня енергія системи змінюється на величину роботи, здійсненої зовнішніми тілами, і тепла, що увійшло до системи через її зовнішні межі. Ця частина рівності виконується для рівноважних (оборотних) і нерівноважних (необоротних) процесів. Права рівність має місце тільки 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 і необоротної складових [21, 22]:

$$du = \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij}^e + \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij}^n + T ds'. \quad (5.2)$$

Необоротна компонента роботи зовнішніх напружень, що представляється другим членом, йде на утворення теплових фононів, мікротріщин, меж зерен тощо, які задають канали дисипації енергії. За наявності лише теплового каналу дисипації необоротна частина роботи перетворюється на тепло, і можна покласти [21, 22]

$$\sigma_{ij} d\varepsilon_{ij}^n \equiv T ds'', \quad (5.3)$$

де  $s''$  — ентропія, обумовлена внутрішніми процесами. Шляхом об'єднання ентропійних внесків від зовнішніх і внутрішніх джерел виходить термодинамічна тотожність, що представляє перший і другий закони термодинаміки для простих тіл [21, 22]:

$$du = \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij}^e + T ds. \quad (5.4)$$

Звичайна термодинамічна нерівність виходить з виразу (5.4), якщо до нього додати необоротну складову роботи зовнішніх сил, яка вже врахована в тепловому доданку:

$$du \leq \sigma_{ij} d\varepsilon_{ij} + T ds. \quad (5.5)$$

Таким чином, нерівність (5.5) узагальнює термодинамічну тотожність (5.4) [21, 22].

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 [21, 22]:

$$\sigma_{ij}d\varepsilon_{ij}^n \equiv Tds'' + \varphi dh, \quad (5.6)$$

де  $\varphi$  і  $h$  – зв’язана пара термодинамічних змінних, яка характеризує дефектність матеріалу – середні поверхнева густина надлишкової енергії і об’ємна густина сумарної поверхні меж зерен. Тоді термодинамічна тотожність має вигляд [21, 22]:

$$du = \sigma_{ij}d\varepsilon_{ij}^e + Tds + \varphi dh. \quad (5.7)$$

Змінна  $\varphi$  росте при збільшенні енергії кожного атома і «товщини» межі, тобто рівня її нерівноваги. Останній підвищується із зростанням рівня фрагментації матеріалу. Тому між  $\varphi$  і розміром зерна у разі ІПД існує монотонна залежність. Малі значення  $\varphi$  відповідають крупнішим зернам, у границі монокристалу, великі значення цієї змінної відповідають більш дрібним зернам, а нескінченно великі  $\varphi$  – аморфному стану.

Для простоти мається на увазі наявність дефектів тільки одного типу. Вважається, що головним дефектом є найкрупніший дефект структури – межа зерна, а решта дефектів може бути врахована значеннями параметрів теорії.

Всі величини, що входять в (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, введена в систему за рахунок необоротної частини зовнішньої роботи, розподіляється між цими двома каналами, які з математичної і фізичної точкою зору є рівноправними.

В цілому процес ІПД можна представити таким чином [21, 22]. Матеріал, що піддається обробці ІПД, має зернисту структуру з великим початковим середнім розміром зерна. При пропусканні матеріалу через установку ІПД в області найбільш інтенсивної деформації виникають процеси пластичної течії. Вони в основному здійснюються

прослизанням по межах зерен, внаслідок чого відбувається релаксація механічних напружень. В той же час із-за неузгодженої деформації різних зерен при прослизанні в матеріалі утворюються локальні напруження, що впливають на об'єми зерен. Ці напруження зростають із зростанням швидкості деформації. За рахунок їх в об'ємі зерна реалізуються процеси генерації дислокаций, об'єднання їх в хаотичні скучення, формування комірчастої структури обірваних меж, які, об'єднуючись, приводять до подрібнення зерен. При цьому нові внутрішні межі є елементами моделі описуваними співвідношенням (5.7). Інші мікроскопічні елементи системи (дислокації, скучення дислокаций тощо) даним виразом в явному вигляді не описуються але роблять вплив на властивості матеріалу. Напруження, що діють в матеріалі представлени пружною частиною тензора деформацій. Його компоненти визначаються геометрією і 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 з видів рівноваги в системі, коли процеси, що йдуть у взаємно зворотних напрямах збалансовані і «не змінюються» у часі. При цьому в системі може сформуватися специфічний розподіл типовий для даного стану.

В процесі дисипації частина енергії зв'язується полем теплових коливань  $T_s$ , частина ж – дефектами  $\varphi h$ . Запишемо вираз для густини вільної енергії у виді:

$$f = u - T_s - \varphi h. \quad (5.8)$$

Оскільки точний аналітичний вираз для вільної енергії невідомий розглянемо спрощену модель, розкладши вільну енергію в ряд за її аргументами до кубічних внесків [21, 22]:

$$\begin{aligned} f(\varphi, T, \varepsilon_{ij}^e) &= f'_0 - h'_0 \varphi + \frac{1}{2} a' \varphi^2 - \frac{1}{3} b \varphi^3 + \frac{1}{2} \lambda (\varepsilon_{ii}^e)^2 + \\ &+ \mu (\varepsilon_{ij}^e)^2 - g \varphi \varepsilon_{ii}^e - \frac{1}{2} \bar{\lambda} \varphi (\varepsilon_{ii}^e)^2 - \bar{\mu} \varphi (\varepsilon_{ij}^e)^2 - e \varphi^2 \varepsilon_{ii}^e + \\ &+ \alpha' \varphi \Delta T + \alpha_g \varphi \Delta T \varepsilon_{ii}^e + \beta \varphi^2 \Delta T - \gamma (\Delta T)^2, \end{aligned} \quad (5.9)$$

де  $\Delta T = T - T_0$ ,  $T_0$  – початкова температура до ІПД для бездефектного стану. Сталі  $h'_0$ ,  $a'$ ,  $b$  виражають залежність вільної енергії квазіріноважної підсистеми від густини енергії меж зерен за відсутності зовнішніх дій. Решта параметрів описує зовнішні механічні, температурні або змішані дії. Передостанній доданок введено для опису взаємно погодженої поведінки  $\varphi$  та  $\Delta T$ . Пружні напруження враховуються з точністю до квадратичних внесків через перших два інваріанті 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 неріноважній підсистемі напруження, за яких стають суттєвими кубічні внески за тензором деформацій  $\varepsilon_{ij}^e$ , не встигають розвинутися. Далі при аналізі беруться від'ємні значення інваріанті  $\varepsilon_{ii}^e$  (сліду тензора деформації), оскільки описується процес стиснення об'єкту, що деформується, що і реалізується при ІПД.

Компоненти деформації  $\varepsilon_{ij}^e$  є керувальними параметрами і представляють зовнішню дію і їх можна вважати константами. Тоді після визначення сталіх

$$\begin{aligned} f_0 &= f'_0 + \frac{1}{2}\lambda(\varepsilon_{ii}^e)^2 + \mu(\varepsilon_{ij}^e)^2, \\ h_0 &= h'_0 + g\varepsilon_{ii}^e + \frac{1}{2}\bar{\lambda}(\varepsilon_{ii}^e)^2 + \bar{\mu}(\varepsilon_{ij}^e)^2, \\ a &= a' - 2e\varepsilon_{ii}^e, \quad \alpha = \alpha' + \alpha_g\varepsilon_{ii}^e \end{aligned} \quad (5.10)$$

вільна енергія набуває більш простий вигляд:

$$\begin{aligned} f(\varphi, T) = f_0 &- h_0\varphi + \frac{1}{2}a\varphi^2 - \frac{1}{3}b\varphi^3 + \\ &+ \alpha\varphi\Delta T + \beta\varphi^2\Delta T - \gamma(\Delta T)^2. \end{aligned} \quad (5.11)$$

## 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  $\tau_\varphi$ ,  $\tau_T$  відповідних величин, що характеризують інерційні властивості системи. Вимірюючи для зручності час в одиницях  $\tau_\varphi$ , отримаємо 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  $\tau_\varphi \gg \tau_T$ , при якому еволюція температури  $T$  слідує за змінами параметра  $\varphi$ . При цьому в рівнянні (5.14) можна покласти  $\tau\dot{T} \approx 0$ , і отримати залежність для температури

$$T = T_0 + \frac{\alpha}{2\gamma}\varphi + \frac{\beta}{2\gamma}\varphi^2. \quad (5.15)$$

Підставивши  $\Delta T$  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  $F$ :

$$F(\varphi) = h_0 - \left(a + \frac{\alpha^2}{2\gamma}\right)\varphi + \left(b - \frac{3\beta\alpha}{2\gamma}\right)\varphi^2 - \left(\frac{\beta^2}{\gamma}\right)\varphi^3, \quad (5.17)$$

яка прагне привести параметр  $\varphi$  у притягаючий атрактор, що відповідає стаціонарному значенню. Система при цьому описується термодинамічним потенціалом

$$V(\varphi) \equiv - \int_0^\varphi F(\varphi') d\varphi', \quad (5.18)$$

що збігається з (5.11) при використанні підстановки (5.15).

Стаціонарні стани густини енергії меж зерен  $\varphi$  задаються умовою екстремуму потенціалу (5.18), оскільки при  $\partial V/\partial \varphi = 0$ , згідно з (5.16)  $\dot{\varphi} = 0$ . При цьому максимуми потенціалу відповідають нестійким

станам, а його мініуми — стійким. Умова стаціонарності  $\partial V/\partial\varphi = 0$  приводить до виразу

$$2\beta^2\varphi^3 - (2b\gamma - 3\alpha\beta)\varphi^2 + (\alpha^2 + 2a\gamma)\varphi - 2h_0\gamma = 0. \quad (5.19)$$

Таким чином, положення екстремумів потенціалу залежать від параметрів завдання  $a, b, \alpha, \beta, \gamma, h_0$  і не залежать від рівня відліку енергії  $f_0$ . Дані екстремуми визначають режими фрагментації при ІПД.

Розв'язок (5.19) показано на рисунку 5.1, згідно з яким при великих за абсолютним значенням інваріантах  $\varepsilon_{ij}^e$  існують три стаціонарні стани, два з яких відповідають мініуму потенціалу  $V(\varphi)$  (суцільна і штрихова крива), а один — його максимуму (штрихпунктирна крива). Перший мініум може досягатися при нульовому і ненульовому зна-

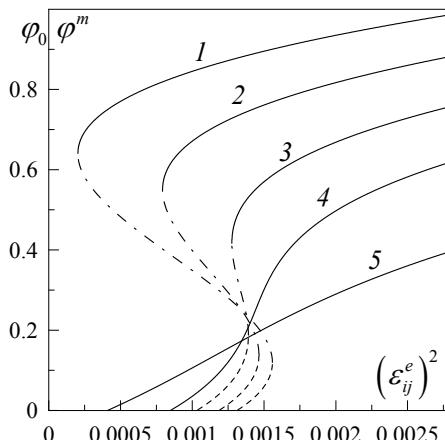


Рисунок 5.1 — Залежність стаціонарних значень густини енергії меж зерен  $\varphi_0, \varphi^m$  [Дж/ $\text{м}^2$ ] від інваріанта  $(\varepsilon_{ij}^e)^2$  при параметрах  $h'_0 = 0.005 \text{ м}^{-1}$ ,  $\bar{\lambda} = 9.6 \text{ м}^{-1}$ ,  $\bar{\mu} = 105 \text{ м}^{-1}$ ,  $\alpha' = 1.7 \text{ К}^{-1}\cdot\text{м}^{-1}$ ,  $\alpha_g = 31 \text{ К}^{-1}\cdot\text{м}^{-1}$ ,  $e = 1.55 \text{ Дж}^{-1}\cdot\text{м}$ ,  $g = 3.1 \text{ м}^{-1}$ ,  $a' = 0.3 \text{ Дж}^{-1}\cdot\text{м}$ ,  $\gamma = 2.4 \text{ м}^{-3}\cdot\text{К}^{-2}\cdot\text{Дж}$ ,  $\beta = 2.2 \text{ Дж}^{-1}\cdot\text{К}^{-1}\cdot\text{м}$ ,  $b = 2.5 \text{ Дж}^{-2}\cdot\text{м}^3$ . Криві 1–5 відповідають значенням  $\varepsilon_{ii}^e = -0.05, -0.045, -0.039, -0.032, -0.016$

ченні густини енергії меж зерен  $\varphi_0$  залежно від величини  $(\varepsilon_{ij}^e)^2$ . Ненульові значення він приймає тільки у тому випадку, коли  $(\varepsilon_{ij}^e)^2$  більше

деякої критичної величини. Це пов'язано з тим, що при ІПД процес фрагментації може проходити, коли пружні деформації  $\varepsilon_{ij}^e$  і пов'язані з ними напруження  $\sigma_{ij}$  перевищують межу текучості. Стационарні стани в процесі ІПД можуть бути досягнуті тільки при виконанні цієї умови. Якщо вона не виконується, то система також може прагнути до стационарних станів, проте з іншою істотно нижчою швидкістю. Згідно з кривими 1–3, менше з стійких стационарних значень  $\varphi_0$  відповідає більшому розміру зерна (штрихові частини кривих), більше (сущільна) – меншому його розміру. Їх розділяє нестійкий стан (штрихпунктирна крива) при значенні густини енергії меж зерен  $\varphi^m$ , яке відповідає максимуму потенціалу. Слід зазначити, що нульовий мінімум відповідає грубозернистому полікристалу, а в границі монокристалу. У випадку 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 кривою 1, еволюція структури матеріалу до стационарного стану є можливою навіть при малих значеннях  $(\varepsilon_{ij}^e)^2$ .

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, при збільшенні  $(\varepsilon_{ij}^e)^2$  до значення, коли співіснують нульовий і ненульовий мінімуми потенціалу процес фрагментації не може відбутися, оскільки ці мінімуми розділені потенціальним бар'єром (штрихпунктирна лінія). Потім нульовий мінімум стає ненульовим (штрихова лінія), і відбувається безперервний процес фрагментації. При подальшому збільшенні деформації перший мінімум зникає разом з потенціальним бар'єром, і система за механізмом фазового переходу першого роду різко переходить в стан, що описується другим мінімумом потенціалу (сущільна лінія). При цьому відбувається різке зменшення розмірів зерен. Відомо, що при фазовому переході першого роду через наявність одночасно двох мінімумів термодинамічного потенціалу система може знаходитися в двох метастабільних фазах [2]. Тут це означає співіснування стационарних структур з різним розміром зерна [19].

У випадку, що описується кривою 3, на відміну від кривих 1, 2 реалізація потенціалу одночасно з нульовим і ненульовим мінімумами неможлива. У решті криві 1–3 еквівалентні.

З подальшим зменшенням  $\varepsilon_{ii}^e$  за абсолютною значенням (кри-  
ві 4, 5) буде реалізуватися безперервний перехід другого роду між мо-  
нокристалом і фрагментованим зразком за відсутності потенціального  
бар'єру. При цьому є можливим формування тільки однієї стаціонарної  
структурі.

Критичне значення квадрата зсувних деформацій виходить 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 з точки (5.20) на осі абсцис. Тому вираз (5.20) представляє значення другого інваріанта, при якому починає проходити процес фрагментації. Оскільки (5.20) містить величину  $\varepsilon_{ii}$ , всі криві виходять з різних точок.

На рисунку 5.2 наведена фазова діаграма, де лінії відповідають межам втрати стійкості системи. Крива 1, нижче за яку є можливим нульовий стаціонарний розв'язок, визначається виразом (5.20). При  $\varphi_0 = 0$  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 стаціонарні структури з великим (перший мінімум потенціалу) і малим (другий мінімум) розміром 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. Слід зазначити, що переходи між мінімумами

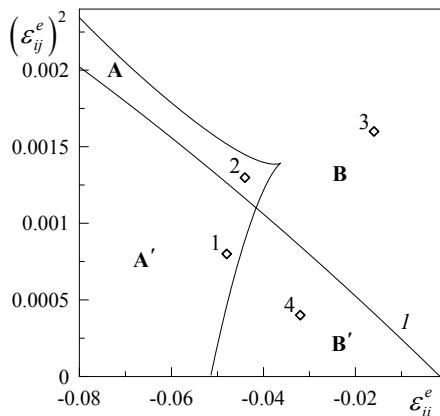


Рисунок 5.2 — Фазова діаграма системи з областями формування двох ( $A, A'$ ) і одної ( $B, B'$ ) стаціонарних структур відповідна параметрам рисунку 5.1

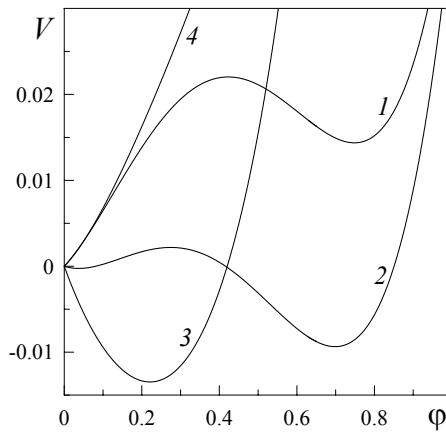


Рисунок 5.3 — Залежність термодинамічного потенціалу  $V$  [ $Дж/m^3$ ] (5.18) від густини енергії меж зерен  $\varphi$  [ $Дж/m^2$ ] при параметрах рисунку 5.1. Криві 1–4 відповідають значенням інваріантів  $(\varepsilon_{ij}^e)^2 = 0.0008, 0.0013, 0.0016, 0.0004$  і сліду тензора деформації  $\varepsilon_{ii}^e = -0.048, -0.044, -0.016, -0.032$  відповідно (точки 1–4 на рисунку 5.2)

потенціалу можливі безпосередньо під час ПД. Завдяки ним в областях  $A, A'$  формуються дві стаціонарні структури, що відповідає режиму, при якому має місце суміш зерен різного розміру. Коли процес ПД закінчений, слід 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. При збільшенні  $(\varepsilon_{ij}^e)^2$  розмір зерна зменшується, 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] при заданих співвідношеннях часів релаксації  $\tau_\varphi, \tau_T$  необхідно уточнювати вид термодинамічного потенціалу (5.11) згідно з експериментальними даними. Це пов'язано з тим, що система рівнянь (5.13), (5.14) в загальному випадку при довільних параметрах може виявитися такою, що розходиться і не описувати встановлення стаціонарного стану. У зв'язку з цим, розглянемо спрощений варіант еволюції системи в рамках адіабатичного наближення  $\tau_\varphi \gg \tau_T$ . При цьому 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  $\varphi(t)$ , отримані при розв'язанні 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.

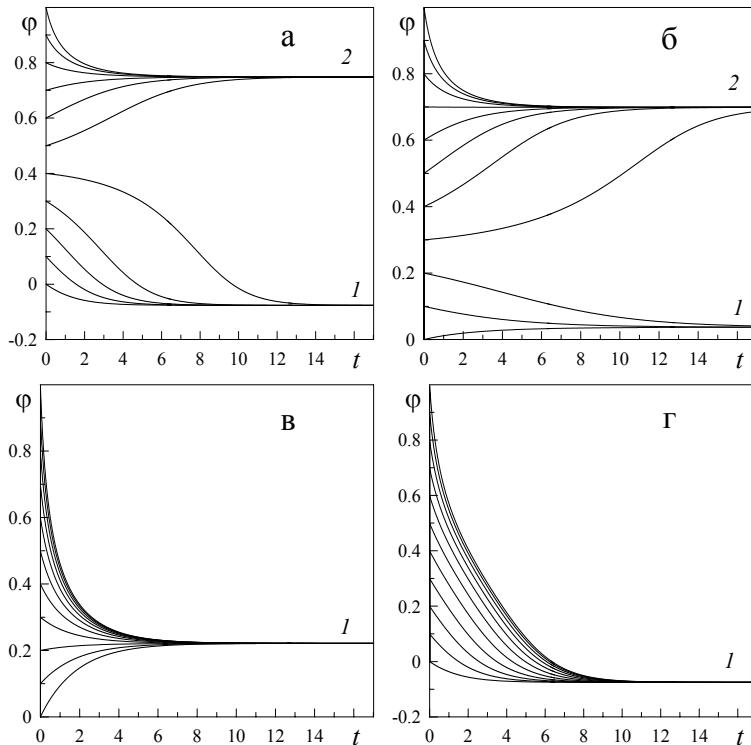


Рисунок 5.4 — Релаксаційні залежності  $\varphi(t)$  [Дж/ $\text{м}^2$ ], отримані при розв'язанні рівняння (5.21) для параметрів рисунку 5.1. Рисунки а–г відповідають точкам 1–4 на рисунку 5.2. Час  $t$  [Дж/м] вимірюється в одиницях  $\tau_\varphi = [\text{Дж}^{-1} \cdot \text{м} \cdot \text{с}]$

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. Стационарне значення, що перше встановлюється, (при малих початкових  $\varphi$ ) знаходитьться в від'ємній області  $\varphi$ . Це пов'язано з тим, що, насправді, перший мінімум потенціалу реалізується при  $\varphi < 0$ . Проте від'ємні  $\varphi$  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 слід вважати,

що при досягненні нульового значення густини енергії меж зерен перестає спадати, і система переходить в режим  $\dot{\varphi} = 0$ . Згідно з рисунком, залежно від початкових умов може реалізуватися як монокристал (коли система виходить на стаціонарне значення, що описується прямою 1), так і дрібнозерниста стаціонарна структура (пряма 2).

Часові залежності, відповідні 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  $\varphi$ . 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). При будь-яких початкових умовах система релаксує до цього значення, і утворюється стаціонарна структура з відповідним розміром зерна.

Останній області  $B'$  діаграми відповідає рисунок 5.4г. Оскільки мінімум потенціалу  $V(\varphi)$  спостерігається при  $\varphi < 0$ , стаціонарне значення формується в від'ємному діапазоні  $\varphi$ . Як і для рисунку 5.4а,  $\varphi_0$  слід вважати нульовим. При цьому в результаті швидкої релаксації системи до стаціонарної точки формуються крупні 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  $\varphi$ . Більші значення параметра  $h_0$  зміщують стаціонарні точки завдання в область більш високих значень дефектності і сприяють формуванню дрібніших зерен. Існування цього джерела пов'язане з дефектністю матеріалу глибших структурних рівнів — наявністю дислокаційної підструктури, домішок тощо. Зокрема, у 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 виходить, що середній розмір зерна в сплавах Al–Mg складає 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  $\varepsilon_{ij}^e$  на процес встановлення рівноваги в системі з урахуванням визначення (5.10). Функцію, що знаходиться в правій частині (5.21), представлено на рисунку 5.5. Крива 1 побудована при найменшому значенні деформації. Перший перетин кривої з віссю абсцис відповідає нестійкій стаціонарній точці (максимуму потенціалу  $V(\varphi)$  (5.18)), оскільки при відхиленні від неї система назад не повертається. Другий перетин відповідає мінімуму потенціалу, і відповідно стійкому значенню  $\varphi$ . 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, слід вважати, що досягши нульового значення густини енергії меж зерен перестає зменшуватися.

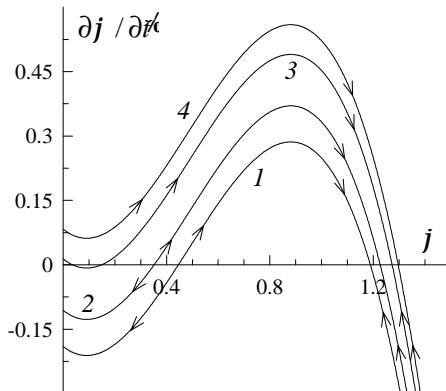


Рисунок 5.5 — Швидкість зміни густини енергії меж зерен  $\partial\varphi/\partial t [\text{м}^{-1}]$  (5.21) як функція  $\varphi [\text{Дж}/\text{м}^2]$  при параметрах  $h'_0 = 0.005 \text{ м}^{-1}$ ,  $\bar{\lambda} = 2.2 \text{ м}^{-1}$ ,  $\bar{\mu} = 2.1 \text{ м}^{-1}$ ,  $\alpha' = 1.7 \text{ К}^{-1} \cdot \text{м}^{-1}$ ,  $\alpha_g = 1.0 \text{ К}^{-1} \cdot \text{м}^{-1}$ ,  $e = 0.05 \text{ Дж}^{-1} \cdot \text{м}$ ,  $g = 2.1 \text{ м}^{-1}$ ,  $a' = 0.3 \text{ Дж}^{-1} \cdot \text{м}$ ,  $\gamma = 2.4 \text{ м}^{-3} \cdot \text{К}^{-2} \cdot \text{Дж}$ ,  $\beta = 2.2 \text{ Дж}^{-1} \cdot \text{К}^{-1} \cdot \text{м}$ ,  $b = 2.8 \text{ Дж}^{-2} \cdot \text{м}^3$ ,  $\mu = 0.3 \text{ Дж} \cdot \text{м}^{-3}$ ,  $\varepsilon_{ii}^e = -1.8$ . Криві 1-4 відповідають значенням  $(\varepsilon_{ij}^e)^2 = 0.01, 0.05, 0.107, 0.14$  відповідно

Нехай в системі встановилося рівноважне значення  $\varphi > 0$ , що відповідає другому перетину кривої 1 з віссю абсцис, і при цьому утво-

рилася відповідна стаціонарна структура. Якщо тепер швидко збільшувати значення деформації, густина енергії меж зерен росте як показано кривою 2. Розмір зерна в стаціонарній структурі при цьому зменшується. Тут кінетика наближення до стійкого стаціонарного значення має експоненціальний характер, оскільки залежність поблизу точки перетину близька до лінійного вигляду. При подальшому збільшенні  $(\varepsilon_{ij}^e)^2$ , як показано кривою 3, спостерігаються три точки перетину залежності з віссю абсцис. При цьому додається новий стаціонарний стійкий стан, що описується першим перетином. Оскільки він близький до значення  $\varphi = 0$ , реалізується стаціонарна структура з крупним розміром зерна. Потенціал має при цьому два мініуми і один максимум в додатній області  $\varphi$ , у від'ємній же він монотонно зростає. При подальшому збільшенні  $(\varepsilon_{ij}^e)^2$  існує тільки один стаціонарний стан (крива 4), який відповідає реалізації стаціонарної структури з малим розміром зерна.

Слід 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 і після обробки ІПД, цього не можна досягти із причини неможливості забезпечення постійного в часі пружного напруження (у нашому випадку  $\varepsilon_{ij}^e$ ). Зразок з деякою постійною швидкістю входить в активну зону експериментальної установки і виходить з неї. При цьому зсуви напруження, що діють  $\sigma_{ij}$  ( $i \neq j$ ) міняються від нуля до деякого максимального значення при вході в активну зону і від максимального значення до нуля при виході з неї. Проте, в активній зоні структура матеріалу еволюціонуватиме у бік стаціонарного значення, але за час перебування в зоні система встигне пройти тільки частину шляху в цьому напрямі. Тому для досягнення стаціонарного граничного середнього розміру зерна широко практикується багатократне повторення обробки матеріалу на одній і тій же установці або комбінування обробки на установках різного типу.

Використовують також ідею інтенсивного однорідного навантаження зразка в процесі його обробки. В цьому випадку стаціонарний режим за напруженням  $\varepsilon_{ij}^e = \text{const}$ , в принципі, може бути досягнутий.

тий, але через зміну перетину зразка в процесі такої обробки, тільки на обмеженому проміжку часу.

Із проведеного розгляду випливає, що дослідження ІПД в рамках теорії фазових переходів передбачає можливість виникнення нових режимів фрагментації і відповідно отримання матеріалів із заданими властивостями. Побудована фазова діаграма, де перші два інваріанта пружної частини тензора деформації визначають області реалізації різних типів стаціонарних структур. Встановлено, що із збільшенням пружних деформацій розмір зерен в стаціонарних структурах зменшується. Знайдено умови формування двох стаціонарних структур, що відповідає режиму, при якому існує суміш зерен різного розміру.

## СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Хакен Г. Синергетика : монография / Г. Хакен; [пер. с англ. В. Емельянов]. – М. : Мир, 1980. – 404 с.
2. Ландау Л. Д. Теоретическая физика : учебное пособие: в 10 т. / Л. Д. Ландау, Е. М. Либшиц. – М. : 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: Сумський юридичний університет, 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 / Латвія : 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. – К. : 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. Multiscale biomechanics and tribology of inorganic and organic systems / G.-P. Ostermeyer, V. L. Popov, E. V. Shilko, O. S. Vasilejeva. – Cham : Springer, 2021. – 571 p.
19. 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.
20. 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).
21. Метлов Л. С. Неравновесная эволюционная термодинамика и ее приложения : монография / Л. С. Метлов. – Донецк : Ноулидж, 2014. – 176 с.
22. 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

Редактори: Н. З. Клочко, С. М. Симоненко

Комп'ютерне верстання О. В. Хоменка

Формат 60×84/16. Ум. друк. арк. 13,72. Обл.-вид. арк. 10,24. Тираж 300 пр. Зам. № \_\_\_\_.

Видавець і виготовлювач

Сумський державний університет,  
вул. Римського-Корсакова, 2, м. Суми, 40007

Свідоцтво суб'єкта видавничої справи ДК № 3062 від 17.12.2007.