

ПРАКТИЧНІ РОБОТИ 14, 15) Моделювання поведінки випадкового процесу та стаціонарної густини ймовірності у моделі багатовимірного потенціалу; 16) Фур'є - аналіз даних

Завдання. Побудувати рис. 2.1-2.7 – номер рисунка відповідає варіанту згідно зі списком групи. (Пояснення. Методика аналітичного розрахунку фазової діаграми в розд. 2 в файлі pract_6_variant_1.docx)

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ СКОРОЧЕНЬ

ГЕ – гвинтова екструзія

ІПД – інтенсивна пластична деформація

КЗПК – крупнозернистий полікристал, крупнозернистий полікристалний(а)

МЗ – межа зерна

НЕТ – нерівноважна еволюційна термодинаміка

НК – нанокристал, нанокристалічний(а)

СМК – субмікрокристал

ФД – фазова діаграма

СДР – стохастичне диференціальне рівняння

АКФ – автокореляційна функція

Equation Chapter (Next) Section 11 НАНОСТРУКТУРНІ МАТЕРІАЛИ. МЕТОДИ ОТРИМАННЯ ТА ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНІ ДОСЛІДЖЕННЯ (ЛІТЕРАТУРНИЙ ОГЛЯД)

1.1 Методи отримання наноструктурних матеріалів

Систематичне дослідження великих деформацій почалося із середини XIX століття. В цей час технологія обробки металів тиском була добре розвинена і тому природно, що поставали питання, щодо законів яким підкоряються тіла в процесі кування, прокатки, волочіння та ін. Більш ніж півтора століття дослідники шукають відповіді на питання, що стосуються зміцнення металів: від чого залежить зміцнення, що потрібно зробити, щоб якомога сильніше зміцнити метал, чому метали стають менш пластичними і чому вони руйнуються при деформації, що зробити, щоб підвищити їх пластичність. Причому, як це часто буває, питання, поставлені в рамках однієї системи понять, вимагають для свого вирішення виходу за її межі. Тому не тільки технологи і механіки, але і матеріалознавці, фізики, і хіміки активно підключилися до вивчення явищ, що відбуваються в матеріалах при великих пластичних деформаціях.

В даний час ці дослідження набули більшого значення у зв'язку із швидко зростаючим інтересом до так званих нано- та субмікроматеріалів, структурні елементи яких мають розміри 10-100 нм і 100-1000 нм. За порядком величини ці значення можна порівняти з характеристичною довжиною різних фізичних явищ (розміром петлі Франка-Ріда для ковзання дислокацій, довжиною вільного пробігу електронів для електрокінетичних явищ, розміром домена для магнітних явищ і т.д.), тому такі матеріали мають унікальні фізико-механічні характеристики.

В результаті великих пластичних деформацій металів розміри їх структурних елементів (кристалітів, фрагментів, меж розділу і т.д.) зменшуються і досягають значень, характерних для нано- та субмікроматеріалів. Внаслідок цього сильно деформовані метали набувають якісно нових властивостей, багато з яких

представляють практичний інтерес. Зокрема, вони мають аномально високу пластичність в поєднанні з високою міцністю. Є результати, які вказують на можливість отримання надпластичності деяких металів при кімнатних температурах. У сильно деформованому стані значно змінюються і фундаментальні характеристики металів, такі як пружні модулі, температури Кюрі і Дебая, намагніченість насичення та ін.

Для здійснення великих пластичних деформацій можна використовувати різні процеси обробки тиском: прокатку, волочіння, пресування та ін. Однак монотонна формозміна заготовки (постійне збільшення довжини при прокатці і волочіння, зменшення висоти при осаді), очевидно, призводить до того, що при великих деформаціях її розмір, хоча б в одному з напрямків, стає надзвичайно малим.

Дослідження показують, що ефект великих деформацій за певних умов можна отримати шляхом немонотонної формозміни заготовок. Це використовується в процесах обробки тиском, основною метою яких є накопичення деформацій в заготовках, а не зміна їх форми. До таких процесів відносяться: рівноканальна кутова екструзія, всебічне кування, гвинтова екструзія і ін., які називаються процесами інтенсивно пластичної деформації (ІПД) [11].

Оскільки форма заготовки після ІПД практично збігається з вихідною, тому є можливість багаторазової обробки заготовок для накопичення в них достатньої деформації.

ІПД може бути використана у всіх тих випадках, коли необхідно здійснити велику пластичну деформацію об'ємних заготовок без істотної зміни форми: при дослідженні явищ, що відбуваються в матеріалах при великих деформаціях; для отримання нано- та субмікросталічних металів; для обробки матеріалів з литою структурою, ущільнення порошкових і пористих тіл.

Equation Chapter (Next) Section 22 ПІДХІД НЕРІВНОВАЖНОЇ ЕВОЛЮЦІЙНОЇ ТЕРМОДИНАМІКИ З УРАХУВАННЯМ ШУМУ

2.1 Термодинамічний потенціал

Внутрішня енергія металів зростає під дією механічної роботи, яка виконується в процесі ПД. Під час холодного деформування, що відбувається за температур, нижчих від температури рекристалізації, більша частина роботи спрямована на формування структурних дефектів та нагрівання металу [28, 29]. Обмежимося спрощеною моделлю, яка враховує тільки ті дефекти, які грають найбільш істотну роль у формуванні дрібнозернистої структури і значно впливають на фізико-механічні властивості матеріалу. Очевидно, що межі зерен і дислокації є одними з найбільш важливих видів структурних дефектів. Саме концентрація меж зерен (МЗ) в оброблюваному матеріалі напряду визначає ступінь фрагментації твердого тіла, а щільність дислокацій в значній мірі впливає на формування властивостей пластичності і міцності матеріалу [28]. Вираз для щільності внутрішньої енергії в рамках розглянутого випадку зручно представити у формі поліноміальної залежності від щільності обраних двох типів дефектів:

$$u(h_g, h_D) = u_0 + \sum_{m=g,D} \left(\varphi_{0m} h_m - \frac{1}{2} \varphi_{1m} h_m^2 + \frac{1}{3} \varphi_{2m} h_m^3 - \frac{1}{4} \varphi_{3m} h_m^4 \right) + \\ + \varphi_{gD} h_g h_D - \psi_{gD} h_g^2 h_D - \phi_{gD} h_g h_D^2, \quad (2.1)$$

$u_0, \varphi_{km}, \varphi_{gD}, \psi_{gD}, \phi_{gD}$ – сталі коефіцієнти, які визначають початковий рівень внутрішньої енергії та енергію взаємодії між дефектами різних структурних рівнів, тобто характеризують загалом їх нерівноважність.

Коефіцієнти u_0 та φ_{km} ($k=0,1$) залежать від керуючого параметра ε_{ii}^e (пружної деформації) та визначаються за допомогою співвідношень:

$$u_0 = \frac{1}{2} M (\varepsilon_{ii}^e)^2 + 2\mu I_2 \quad (2.2)$$

$$\varphi_{0m} = \varphi_{0m}^* + g_m \varepsilon_{ii}^e + \left(\frac{1}{2} \bar{M}_m (\varepsilon_{ii}^e)^2 + 2\bar{\mu}_m I_2 \right), \quad (2.3)$$

$$\varphi_{1m} = \varphi_{1m}^* + 2e_m \varepsilon_{ii}^e \quad (2.4)$$

де $M = \lambda + 2\mu$ – модуль одностороннього стиснення матеріалу; λ, μ – пружні модулі Ламе; ε_{ii}^e , $I_2 = (-\varepsilon_{ii}^e \varepsilon_{jj}^e + \varepsilon_{ij}^e \varepsilon_{ji}^e) / 2$ – перший і другий інваріанти тензора пружних деформацій; позитивна константа g_m відповідає за генерацію дефектів при розтягуванні $\varepsilon_{ii}^e > 0$, або за їх анігіляцію при стисненні $\varepsilon_{ii}^e < 0$; $\bar{M}_m, \bar{\mu}_m$ – пружні сталі, обумовлені існуванням дефектів; e_m – пов'язана з прискоренням процесу анігіляції дефектів при додатньому значенні $\varepsilon_{ii}^e > 0$ а при від'ємному $\varepsilon_{ii}^e < 0$ – мається на увазі генерація. Значення індексів $m = g$ відносяться до меж зерен, а $m = D$ – до дислокацій.

Слід зазначити, що вираз, який визначає густину внутрішньої енергії (2.1), враховує взаємоузгоджену поведінку щільності МЗ h_g та дислокацій h_D (два останні доданки), на відміну від базового співвідношення визначеного у роботах [9, 8]. Це дозволяє точніше змодельовати взаємодію структурних дефектів в процесі переходу до граничних СМК чи НК структур. Знак мінус було обрано у відповідності до закономірностей розвинення, тобто із необхідності формування стаціонарних станів (максимумів термодинамічного потенціалу) за допомогою знаочергованості змінних. З фізичної точки зору, це пояснюється почерговістю процесів релаксації чи активації динаміки щільності дефектів. До того ж, введені доданки сприяють виникненню кольорового (мультиплікативного) результуючого шуму (залежного від зміни параметра порядку), який є причиною виникнення додаткових граничних станів та забезпечує перехід між стаціонарними структурами системи.

У представленому дослідженні обмежимося розглядом спрощеного випадку: степеневе розвинення (2.1) у випадку дислокацій будемо враховувати тільки до другої степені за щільністю дислокацій (при цьому $\varphi_{2D} = 0, \varphi_{3D} = 0$) [8], та у випадку реалізації взаємодії h_D з іншими структурними дефектами (з МЗ) – до першої (відповідно $\phi_{gD} = 0 \text{ Дж} \cdot \text{м}^2$). Такий вибір дозволяє досягти кращої відповідності з поведінкою реальних систем при великих пластичних деформаціях. Для числового аналізу визначений наступний набір коефіцієнтів:

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

Вибір сталих здійснюється феноменологічно, тобто значення обираються відповідно до спостережуваних під час оброблення методами ІПД закономірностей [28, 30, 31], у результаті яких у матеріалі формуються стаціонарні СМК чи НК структури. Техніка вибору деяких значень представлено у роботах [8, 9, 32]. Відмітимо, що значення основних коефіцієнтів отримано експериментально при дослідженні мідної структури, проте варто зазначити, що запропонована модель (2.1) має широкий спектр застосувань та, за необхідності, при відповідних параметрах буде відображати справедливі результати для будь-якого металу.

2.2 Вплив адитивного шуму

Дослідимо вплив адитивного гаусівського шуму на процес формування граничних СМК чи НК структур. Система еволюційних рівнянь для параметрів стану визначається наступним чином [33, 34, 35, 36]:

$$\tau_{h_D} \frac{\partial h_D}{\partial t} = \varphi_{0D} - \varphi_{1D} h_D + \varphi_{gD} h_g - \psi_{gD} h_g^2 + \sqrt{N_D} \xi_D(t), \quad (2.5)$$

$$\tau_{h_g} \frac{\partial h_g}{\partial t} = \varphi_{0g} - \varphi_{1g} h_g + \varphi_{2g} h_g^2 - \varphi_{3g} h_g^3 + \varphi_{gD} h_D - 2\psi_{gD} h_g h_D + \sqrt{N_g} \xi_g(t), \quad (2.6)$$

Де τ_{h_g} – обернено пропорційні величини кінетичних коефіцієнтів, що мають зміст часу релаксації параметрів порядку, які відображають інерційні властивості системи. У правих частинах рівнянь присутні стохастичні доданки, що моделюють вплив шумів основних параметрів (внутрішній шум) із інтенсивностями $N_{D,g}$ [37], які виникають у результаті впливу різних структурних неоднорідностей (фаз речовини, домішок, включень, вакансій, структурних дефектів інших рівнів, теплових флуктуацій та ін.) та дії зовнішнього силового поля. Як відомо, ПД обумовлює формування МЗ двох типів: висококутових або геометрично необхідних меж, які виникають у результаті різноманітної активності системи ковзання довкола МЗ; меж комірок або субмеж, які часто називають випадковими дислокаційними межами, оскільки такі межі виникають при взаємній реалізації статично-випадкового перетину дислокацій у середині зерен [38]. У ході деформації, за рахунок накопичення дислокацій, комірки поступово перетворюються у субзерна, що обмежені малокутовими межами, та в подальшому стають висококутовими нанозернами. Отже, взаємодія МЗ із дислокаціями, іншими межами та структурними неоднорідностями призводить до прояву внутрішніх флуктуацій та зміни розорієнтування зернистої структури металевого зразка. Розглядаючи найпростіший вид взаємодій між дефектами одного рівня, виникнення флуктуацій внутрішніх змінних відбувається за рахунок дії самоорганізованих процесів. Із точки зору параметра h_g це означає, що у початковий момент часу у матеріалі одночасно присутні як крупні розорієнтовані зерна, так і дрібні (що представляють статичний шум або хаос), взаємодія яких у процесі обробки визначає конкурентну боротьбу та переходи між різними структурними станами чи фазами речовини. У випадку h_D інтенсивність флуктуацій N_D враховує стохастичну взаємодію ансамблю дислокацій між собою, що супроводжується зміною коливальних спектрів та

проявом різного роду колективних ефектів (наприклад, формується комірчаста структура [28, 38]). Функції $\xi_i(t) (i = D, g)$ відображають випадкові гаусівські величини (білий шум), що мають АКФ, яка математичною описується за допомогою δ -функції Дірака, та задовільняють наступним моментам [39]:

$$\langle \xi_i(t) \rangle = 0, \langle \xi_i(t) \xi_j(t') \rangle = 2\delta_{ij}\delta(t - t'). \quad (2.7)$$

Множник перед символом Кронекера δ_{ij} дозволяє однозначно визначити вигляд рівняння Фоккера-Планка та придати виразу $N(h_g)$ сенс коефіцієнта дифузії. Зокрема, константа, яка визначає інтенсивність шуму (міру інтенсивності флуктуацій випадкової величини) також врахована у наведеній функції $N(h_g)$.

Використовуючи адіабатичне наближення $\tau_{h_g} \gg \tau_{h_D}$, покладемо в (2.5) $\tau_{h_D} \dot{h}_D = 0$, та провівши перетворення отримуємо:

$$h_D = \frac{\varphi_{0D}}{\varphi_{1D}} + \frac{\varphi_{gD}}{\varphi_{1D}} h_g - \frac{\psi_{gD}}{\varphi_{1D}} h_g^2 + \frac{\sqrt{N_D}}{\varphi_{1D}} \xi_D(t). \quad (2.8)$$

Підставляючи отриманий вираз (2.8) до рівняння (2.6), отримуємо нелінійне рівняння типу Ланжевена для однієї випадкової змінної h_g :

$$\tau_{h_g} \dot{h}_g = F(h_g) + \sqrt{N(h_g)} \xi(t), \quad (2.9)$$

де $\xi(t)$ - результуюча сила Ланжевена (гаусів білий шум). Узагальнена сила $F(h_g)$, що визначає детерміновану кінетику системи, та ефективна інтенсивність флуктуацій випадкової величини $\sqrt{N(h_g)}$ (квадрат якої визначає коефіцієнт дифузії $N(h_g)$) задаються співвідношеннями:

$$\begin{aligned} F(h_g) \equiv & \varphi_{0g} + \frac{\varphi_{0D}\varphi_{gD}}{\varphi_{1D}} + \left(\frac{\varphi_{gD}^2}{\varphi_{1D}} - 2\frac{\psi_{gD}\varphi_{0D}}{\varphi_{1D}} - \varphi_{1g} \right) h_g + \\ & + \left(\varphi_{2g} - 3\frac{\psi_{gD}\varphi_{gD}}{\varphi_{1D}} \right) h_g^2 + \left(2\frac{\psi_{gD}^2}{\varphi_{1D}} - \varphi_{3g} \right) h_g^3, \end{aligned} \quad (2.10)$$

$$N(h_g) \equiv \frac{(\varphi_{gD} - 2\psi_{gD}h_g)^2}{\varphi_{1D}^2} N_D + N_g. \quad (2.11)$$

Останнє визначається відповідно до властивостей дисперсії гаусівських випадкових величин [39]. Очевидно, що $N(h_g)$ залежить від параметра порядку h_g , тому шум у рівнянні (2.9) має мультиплікативний характер, а отже може призвести до нерівноважних фазових чи структурних переходів та формування нових станів системи (максимумів синергетичного потенціалу), що неможливо в рамках вивченого раніше детерміністичного підходу [33, 34, 35].

Відомо, що рівнянню Ланжевена (2.9) ставиться у відповідність безліч форм рівнянь Фоккера – Планка, яке описує еволюцію функції густини розподілу $p(h_g, t)$ стохастичних флуктуюючих змінних (у даному випадку параметра h_g). Найчастіше для обчислення розв’язку використовують такі підходи: числення в інтерпретації Іто (I -форма), числення Стратоновича (S -форма) та кінетична форма (K -форма) числення [37, 39].

У даній роботі з метою опису процесу фрагментації полікристалічної структури металу під дією ПД використовується підхід Стратоновича, оскільки розглядається фізичний процес з неперервним часом та присутня кореляція основного параметра системи із випадковими процесами (діє мультиплікативний шум).

Відповідне рівняння Фоккера – Планка визначається співвідношенням:

$$\frac{\partial}{\partial t} p(h_g, t) = -\frac{\partial}{\partial h_g} D^{(1)}(h_g) p(h_g, t) + \frac{\partial^2}{\partial h_g^2} D^{(2)}(h_g) p(h_g, t), \quad (2.12)$$

де функції (або коефіцієнти Крамерса-Мойала) [39]:

$$D^{(1)}(h_g) = \frac{F(h_g)}{\tau_{h_g}} + \sqrt{\frac{N(h_g)}{\tau_{h_g}^2}} \frac{d\sqrt{N(h_g)/\tau_{h_g}^2}}{dh_g}, \quad (2.13)$$

$$D^{(2)}(h_g) = \frac{N(h_g)}{\tau_{h_g}^2} \quad (2.14)$$

Коефіцієнти $D^{(1)}$ та $D^{(2)}$ відіграють в інтерпретації Стратоновича роль коефіцієнтів дрейфу та дифузії. Рівняння (2.12), як було згадано раніше, дозволяє знайти густину ймовірності $p(h_g(t))$ розподілу випадкових значень h_g у будь-який момент часу t . Із математичної точки зору воно представляє лінійне диференціальне рівняння у частинних похідних параболічного типу. Зокрема, у випадку розгляду детерміністичного підходу нехтують флуктуаціями макроскопічних (N_g) та мезоскопічних (N_D) змінних, тобто в рівнянні (2.12) та визначеннях (2.13), (2.14) нівелюють дифузійним членом $N(h_g)$ [39]. Відповідно рівняння Фоккера – Планка (2.12) втрачає сенс.

Оскільки густина розподілу розв'язків рівняння (2.9) із часом набуває стаціонарного значення, то її явний вигляд може бути знайдено із рівняння (2.12) при виконанні умови $\partial p(h_g, t) / \partial t = 0$:

$$-\frac{\partial}{\partial h_g} D^{(1)}(h_g) p(h_g, t) + \frac{\partial^2}{\partial h_g^2} D^{(2)}(h_g) p(h_g, t) = 0,$$

Провівши ряд математичних перетворень, отримуємо відповідне визначення стаціонарної густини розподілу ймовірності реалізації станів h_g :

$$p(h_g) = Z^{-1} \exp(U_{ef}(h_g)), \quad (2.15)$$

що визначається за допомогою нормуючої константи

$$Z = \int_0^{+\infty} \exp(U_{ef}(\hat{h}_g)) d\hat{h}_g$$

та ефективного синергетичного потенціалу

$$U_{ef}(h_g) = -\frac{1}{2} \ln(N(h_g)) + \tau_{h_g} \int_0^{h_g} \frac{F(\hat{h}_g)}{N(\hat{h}_g)} d\hat{h}_g, \quad (2.16)$$

який відображає ефективну енергію системи та не має фізичного змісту внутрішньої енергії.

Вочевидь, що закон розподілу (або інтегральний закон розподілу) неперервної випадкової величини h_g , тобто функція розподілу ймовірності $F_p(h_g)$, визначається відповідно до визначення:

$$F_p(h_g) = \int_{-\infty}^{h_g} p(h_g) dh_g. \quad (2.17)$$

Разом із тим густина розподілу (2.15) задовільняє властивостям:

$$1) p(h_g) = F'_p(h_g);$$

$$2) p(h_g) \geq 0;$$

$$3) \int_{-\infty}^{+\infty} p(h_g) dh_g = 1$$

$$4) P(a \leq h_g \leq b) = \int_a^b p(h_g) dh_g = F_p(b) - F_p(a).$$

Знайдемо стаціонарні значення для щільності МЗ h_g , що визначаються за допомогою необхідної умови існування екстремумів ($dp(h_g)/dh_g = 0$) густини розподілу (2.15) (чи ефективного потенціалу (2.16), що рівноцінно). Водночас максимуми ефективного синергетичного потенціалу відповідають максимумам густини розподілу, що визначають формування стійких станів (граничних структур), а відповідно мінімуми – нестійких реалізацій. Отже, умова стаціонарності призводить до виразу:

$$dU_{ef}(h_g)/dh_g \equiv F(h_g) - \frac{1}{2\tau_{h_g}} \frac{dN(h_g)}{dh_g} = 0,$$

перетворення та спрощення якого дозволяє одержати рівняння, що визначає положення стаціонарних станів (екстремумів функції $p(h_g)$ (2.15))

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

$$\left. -4 \frac{\psi_{gD}^2}{\tau_{h_g} \varphi_{1D}^2} N_D - \varphi_{1g} \right) h_g + \varphi_{0g} + \frac{\varphi_{0D} \varphi_{gD}}{\varphi_{1D}} + 2 \frac{\psi_{gD} \varphi_{gD}}{\tau_{h_g} \varphi_{1D}^2} N_D = 0, \quad (2.18)$$

Вираз (2.18) одержано в рамках числення Стратоновича. В рамках числення Іто, доданки, які враховують взаємодію з флуктуаціями N_D додатково множаться на 2.

На рис. 2.1 представлено розв'язок рівняння (2.18) у залежності від значень зсувної деформації I_2 (другого інваріанта тензора пружних деформацій) та при визначеній інтенсивності шуму N_D .

Згідно з рисунком, при невеликих інтенсивностях флуктуацій шуму N_D існує три стаціонарні стани системи, два з яких відповідають формуванню максимумів ефективного синергетичного потенціалу (2.16) і відповідно стійких граничних структур, а один його мінімуму.

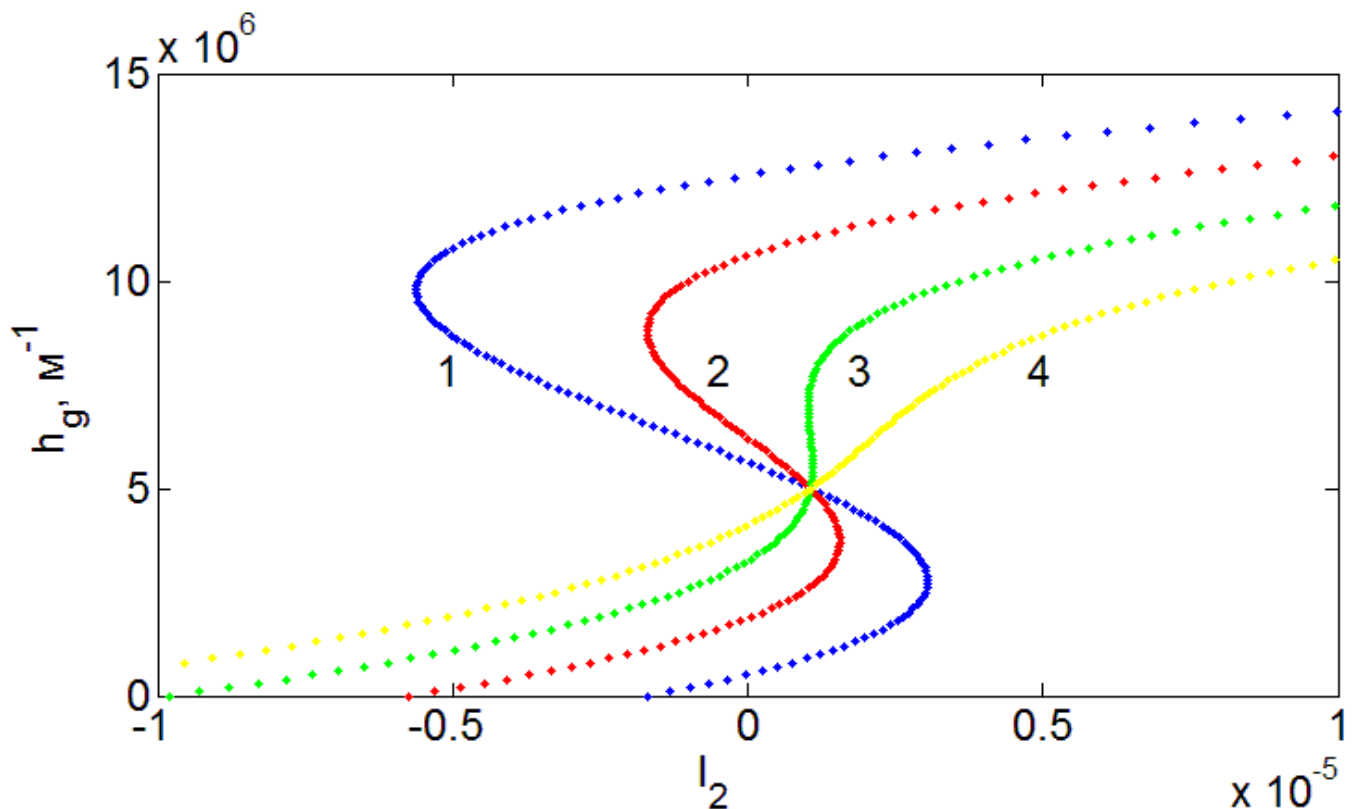


Рис. 2.1. Залежність стаціонарних розв'язків h_g рівняння екстремумів (2.18) від значень зсувної деформації I_2 при сталому значенні $\varepsilon_{ii}^e = -0.1\%$. Криві 1 – 4 (зліва на право) побудовані при відповідних інтенсивностях шуму $N_D = (0, 10^{-15}, 2 \cdot 10^{-15}, 3 \cdot 10^{-15})$

Крива 1 демонструє детерміністичний випадок при відсутності шумового ефекту $N_D = 0$, врахування якого необхідно для подальшого дослідження. Очевидно, що реалізація першого максимуму синергетичного потенціалу, залежно від величин другого інваріанта I_2 , може мати як нульові так і ненульові значення щільності МЗ h_g , що відповідає формуванню монокристала чи КЗПК. Крім того, як відмічалось у роботах [33, 2, 35, 40, 41], ненульові значення для щільності МЗ починають формуватися тільки при досягненні пружними напруженнями границі текучості (плинності) σ_T , що обумовлює виникнення пластичної (залишкової) деформації та активізує процес фрагментації кристалітів у структурі металу чи сплаву.

Другий максимум $U_{ef}(h_g)$ завжди має ненульові значення h_g , разом із тим розмір зерен у отриманих структурах має субмікроскопічні нанорозміри, а на границі зразок розглядається як аморфна структура. Видно, що нестійкі стаціонарні конфігурації сформовані при значеннях щільності МЗ h_g , що відповідають мінімумам ефективного синергетичного потенціалу (2.16), розділяють вище зазначені стійкі структури.

Якщо під час обробки зразок має крупнозернисту структуру або є монокристалом, то активна фаза фрагментації відбудеться при досягненні нульовим максимумом ненульових значень. Це пояснюється тим, що на початковому етапі відсутня пластична течія, тільки при досягненні внутрішньою енергією певного рівня почнуть діяти канали дисипації, що пов'язані з генерацією структурних дефектів [42]. Якщо зразок вже має дрібнозернисту структуру, то відповідно до кривих на рисунку (2.1), незначне підвищення зсувних деформацій призводить до формування нової граничної структури з більшою щільністю меж зерен.

На кривій 1 при досягненні певного рівня деформації I_2 можливе співіснування нульового і ненульового максимумів ефективного синергетичного потенціалу. В цьому випадку, інтенсивність шуму є не достатньою для переходу системи з одного стану в інший, через наявність енергетичного бар'єру у вигляді потенціальної ями кінцевої глибини.

При збільшенні інтенсивності внутрішнього шуму N_D реалізація ефективного синергетичного потенціалу з одночасним співіснуванням нульових і ненульових максимумів стає неможливою (криві 2, 3). Криві 1-3 характеризуються схожою поведінкою, але у випадку кривих 2 та 3 флуктуацій щільності дислокацій N_D буде достатньо для подолання енергетичного бар'єру. При цьому система зазнає фазовий перехід 1 роду та здійснює різкий перехід в стан із більшою щільністю МЗ.

Крива 4 демонструє можливість реалізації неперервного переходу від КЗПК до СМК чи НК структури. Згідно кривих 1-3, з підвищенням інтенсивності шуму глибина потенційної ями зменшується. Значення інтенсивності N_D , що відповідають кривій 4, більше деякого критичного значення, при якому енергетичний бар'єр зникає. В цьому випадку перехід між двома фазами відповідає фазовому переходу 2-го роду.

Визначимо умови формування СМК чи НК структур залежно від зміни пружних деформацій та інтенсивності флуктуацій шуму. Дослідимо втрату стійкості стаціонарних станів системи (тобто розв'язків рівняння (2.18)), які відповідають максимальним значенням ефективного синергетичного потенціалу $U_{ef}(h_g)$ (2.16) (чи густини розподілу $p(h_g)$ (2.15)), та визначимо біфуркаційне (критичне) співвідношення для I_2 :

$$\begin{aligned}
 I_2(\varepsilon_{ii}^e, h_g^c, N_D) = & -\frac{1}{\left(2\bar{\mu}_D\left(\frac{\varphi_{gD}}{\varphi_{1D}} - 2\frac{\psi_{gD}}{\varphi_{1D}}h_g^c\right) + 2\bar{\mu}_g\right)} \left[\left(2\frac{\psi_{gD}^2}{\varphi_{1D}} - \varphi_{3g}\right)h_g^{c3} + \left(\varphi_{2g} - 3\frac{\psi_{gD}\varphi_{gD}}{\varphi_{1D}}\right)h_g^{c2} + \right. \\
 & + \left(\frac{\varphi_{gD}^2}{\varphi_{1D}} - \varphi_{1g} - 2\frac{\psi_{gD}}{\varphi_{1D}}(\varphi_{0D}^* + g_D\varepsilon_{ii}^e + \frac{1}{2}\bar{M}_D(\varepsilon_{ii}^e)^2) - 4\frac{\psi_{gD}^2}{\tau_{h_g}\varphi_{1D}^2}N_D \right)h_g^c + 2\frac{\psi_{gD}\varphi_{gD}}{\tau_{h_g}\varphi_{1D}^2}N_D + \\
 & \left. + \varphi_{0g}^* + g_g\varepsilon_{ii}^e + \frac{1}{2}\bar{M}_g(\varepsilon_{ii}^e)^2 + \frac{\varphi_{gD}}{\varphi_{1D}}(\varphi_{0D}^* + g_D\varepsilon_{ii}^e + \frac{1}{2}\bar{M}_D(\varepsilon_{ii}^e)^2) \right]. \quad (2.19)
 \end{aligned}$$

Одержаний вираз демонструє умови розгалуження чи злиття положень рівноваги (розв'язків рівняння (2.18)): визначає умови зміни кількості граничних структур.

Типові ФД режимів фрагментації металів чи сплавів представлено на рис. 2.2. Ці діаграми одержано згідно з аналітично знайденими виразами для густини розподілу $p(h_g)$ та ефективного синергетичного потенціалу $U_{ef}(h_g)$. Рисунок 2.2а відповідає детерміністичному наближенню за відсутності шумового впливу та виражає залежність $I_2(\varepsilon_{ii}^e, h_g^c)$ (2.19) від ε_{ii}^e . Випадок, який представлено на рис. 4.2б, побудовано при фіксованому значенні першого інваріанта ε_{ii}^e , що відповідає реалізації процесу стиснення ($\varepsilon_{ii}^e < 0$), та демонструє залежність $I_2(\varepsilon_{ii}^e, h_g^c, N_D)$ (2.19) від флуктуацій інтенсивності шуму N_D .

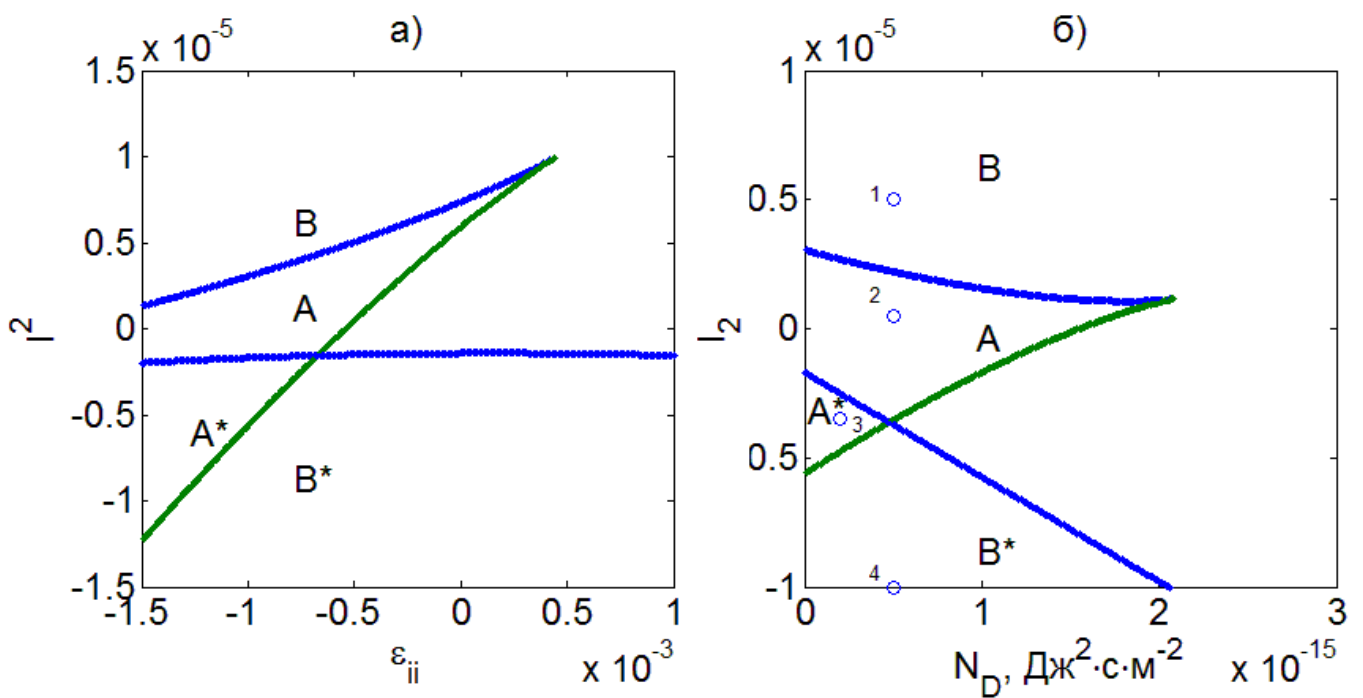


Рис. 2.2. Рівноважна діаграма режимів фрагментації полікристалічного зразка при ПД: детермінований випадок, коли $N_D = 0$ (а), залежність з урахуванням шуму при постійному значенні $\varepsilon_{ii}^e = -0.1\%$ (б). Області (А, А*) відображають формування одночасно двох і (В, В*) - однієї граничної структури.

Збіжні лінії за відповідних умов визначають межі втрати стійкості системи. Криві одержано з виразу (2.19) при критичних значеннях щільності МЗ, що відповідають точкам переходу від мінімуму $U_{ef}(h_g)$ до максимумів. Лінії, що перетинають області обмежені збіжними кривими, встановлюють границі існування нульового стаціонарного розв'язку рівняння (2.18) та визначаються співвідношенням:

$$I_2(\varepsilon_{ii}^e, N_D) = -\frac{1}{2\left(\bar{\mu}_D \frac{\varphi_{gD}}{\varphi_{1D}} + \bar{\mu}_g\right)} \left[\left(\varepsilon_{ii}^e\right)^2 \left(\frac{1}{2} \bar{M}_D \frac{\varphi_{gD}}{\varphi_{1D}} + \frac{1}{2} \bar{M}_g \right) + \varepsilon_{ii}^e \left(g_D \frac{\varphi_{gD}}{\varphi_{1D}} + g_g \right) + \right. \\ \left. + 2 \frac{\psi_{gD} \varphi_{gD}}{\tau_{h_g} \varphi_{1D}^2} N_D + \varphi_{0D}^* \frac{\varphi_{gD}}{\varphi_{1D}} + \varphi_{0g}^* \right],$$

Фазові діаграми демонструють схожі характеристики – в залежності від значень керуючих параметрів формуються чотири області режимів фрагментації при ПД. Для дослідження детерміністичного випадку нехтуємо дифузійним членом $N(h_g)$ у рівнянні (2.9), при цьому ФД визначає області в яких можливе формування двох та однієї граничних структур) [33, 34, 40, 43].

Згідно з рис. 2.2б, при підвищенні інтенсивності шуму система може здійснювати фазові переходи між різними станами речовини, що визначається наявністю чотирьох областей, в яких реалізуються різні режими функціонування системи. Для інтерпретації отриманих на фазовій діаграмі областей на рис. 2.3 представлено вид ефективного синергетичного потенціалу U_{ef} (точки 1–4 представлені відповідними кривими 1-4). Загалом, області A та A^* характеризують схожу поведінку при ПД, можливе одночасне співіснування системи у двох ненульових стаціонарних станах: з великими розмірами зерен та більш дрібною структурою. Але в області A^* щільність меж зерен першого стаціонарного стану набуває нульових значень (див. криву 3 на рис. 2.3). При цьому вважається, що пружна внутрішня енергія системи не досягає стадії насичення, тобто, канали дисипації, які відповідають за генерацію дефектів, не активуються, що характеризується наявністю потенційної ями. В області A , при достатній інтенсивності шуму, система може здійснювати переходи між стаціонарними станами навіть за умови існування енергетичного бар'єру (криві 2, 3 на рис. 2.1, крива 2 на рис. 2.3). В області B формується єдина гранична структура з НК розмірами зерен (крива 1 на рис. 2.3). В області B^* реалізується один стаціонарний стан, що відповідає зразку з КЗПК структурою (крива 4 на рис. 2.3). Слід зазначити,

що найкраще узгоджуються із реальною поведінкою матеріалів випадки представлені областями A та B .

На рисунку 2.4 представлено густини розподілу $p(h_g)$ (2.15) випадкових реалізацій h_g у процесі ПД та відповідний закон розподілу $F_p(h_g)$ (2.17) (інтегральна функція розподілу випадкової змінної h_g). Криві 1-4 визначені при параметрах, що відповідають точкам 1-4 на ФД.

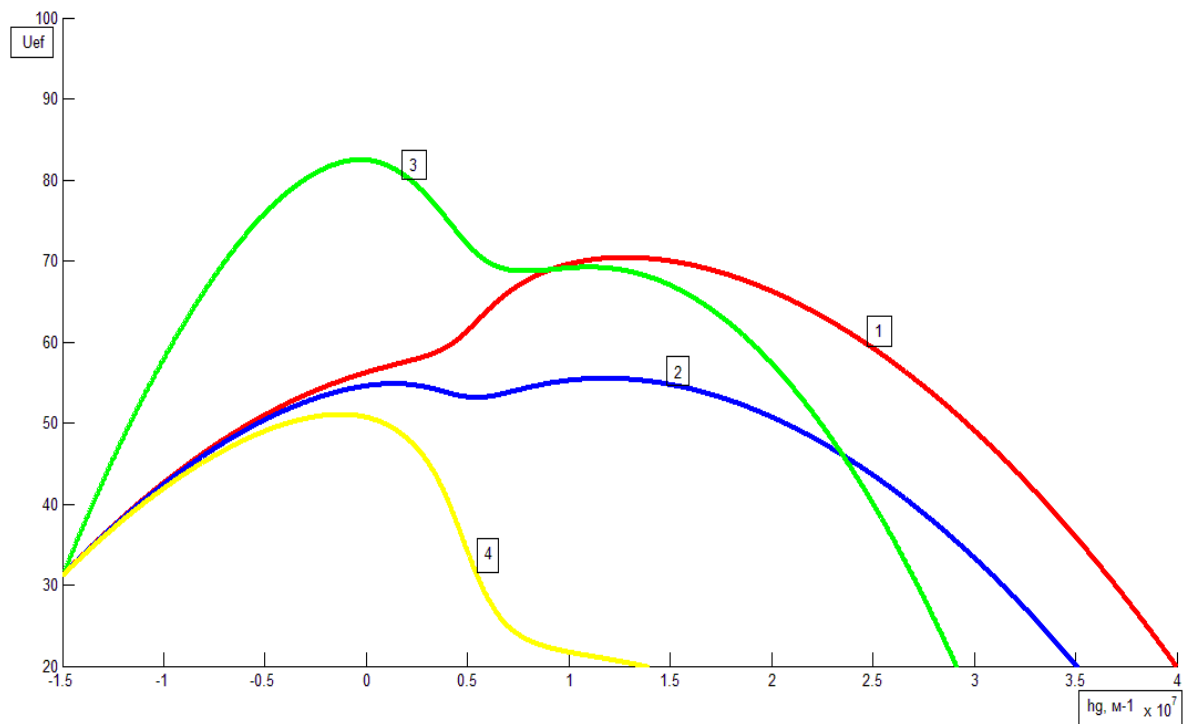


Рис. 2.3. Вид ефективного синергетичного потенціалу U_{ef} (2.16) в залежності від значень щільності МЗ h_g при інтенсивності $N_g = 1 \text{ Дж}^2 \cdot \text{с} \cdot \text{м}^{-4}$ та стисненні $\varepsilon_{ii}^e = -0.1\%$. Кривим 1–4 відповідають значення I_2 та N_D , представлені у вигляді точок 1 – 4 на фазовій діаграмі (рис. 2.2,б). Ефективний синергетичний потенціал U_{ef} вимірюється в умовних одиницях.

Максимуми кривих 1-4 на рис. 2.4 відповідають максимумам ефективного синергетичного потенціалу представленого на рис. 2.3. На кривих 2 та 3, що відповідають областям A та A^* , бачимо, що система може функціонувати у двох метастабільних фазах. Перший максимум на кривій 2 відповідає формуванню структури з великими СМК розмірами зерен ($p(h_g) \approx 5.7 \cdot 10^{-8}$ та $h_g \approx 1.4 \cdot 10^6 \text{ м}^{-1}$), другий – з НК розмірами ($p(h_g) \approx 1.1 \cdot 10^{-7}$ та $h_g \approx 1.2 \cdot 10^7 \text{ м}^{-1}$). В області A^* реалізації

максимальних значень щільності МЗ мають ймовірності $p(h_g) \approx 3.3 \cdot 10^{-7}$ та $p(h_g) \approx 5.8 \cdot 10^{-7}$, але першому максимуму відповідає нульове значення h_g , а другий реалізується при щільності МЗ, які характерні для НК граничної структури $h_g \approx 1.15 \cdot 10^7 \text{ м}^{-1}$. Криві 1 та 4 демонструють можливість формування однієї граничної структури, НК ($h_g \approx 1.3 \cdot 10^7 \text{ м}^{-1}$ при $p(h_g) \approx 1.7 \cdot 10^{-7}$) та КПЗК ($h_g = 0 \text{ м}^{-1}$ при $p(h_g) \approx 2.4 \cdot 10^{-7}$) відповідно. Оскільки максимумами на кривих 3 та 4 відповідають від'ємним значенням h_g , що не має фізичного сенсу, вважається, що при досягненні нульових значень щільність МЗ продовжує функціонувати у режимі $h_g = 0 \text{ м}^{-1}$.

На рисунку 2.4б представлено закон розподілу $F_p(h_g)$ (2.17) ймовірностей випадкової величини h_g . Очевидно, що максимумами розподілу щільності МЗ досягаються у тих точках, де функція розподілу має найбільшу крутизну, а мінімальні розташовуються в околі центрів пологих ділянок.

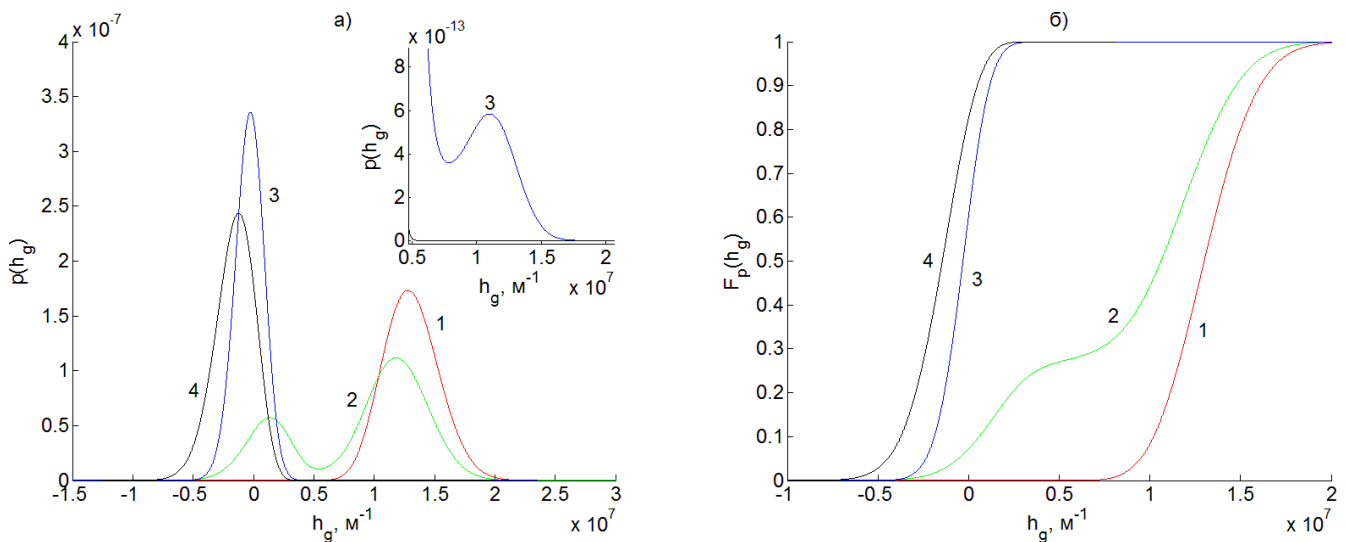


Рис. 2.4. Розподіл щільності МЗ у металевій структурі при ПД: а – функція густини розподілу $p(h_g)$ (2.15); б – інтегральний закон розподілу $F_p(h_g)$ (2.17). Криві побудовано для відповідних точок на ФД.

Залежності $F_p(h_g)$ дозволяють кількісно визначити скільки відсотків щільності МЗ буде формуватися в тому чи іншому діапазоні та наближені значення розмірів зерен для кожного інтервалу. Таким чином, у випадку, представленою кривою 1,

показано, що щільність МЗ активно реалізується в інтервалі $[0.75 \cdot 10^7, 1.75 \cdot 10^7]$, якому відповідають наближені розміри зерен $d \sim 133 - 57$ нм, при цьому імовірність формування граничної структури з щільністю МЗ у наведеному діапазоні, згідно до властивостей функції розподілу, складає $p(0.75 \cdot 10^7 \leq h_g < 1.75 \cdot 10^7) = F_p(1.75 \cdot 10^7) - F_p(0.75 \cdot 10^7) \approx 0.95$ (95%). Ймовірності того, що щільність МЗ прийме значення в межах інтервалів $[x_0, x_1]$ та $[x_2, x_3]$ (див. криву 2) становлять $p(x_0 \leq h_g < x_1) = F_p(x_1) - F_p(x_0) \approx 0.22 - 0.07 = 0.15$ (15%) та $p(x_2 \leq h_g < x_3) = F_p(x_3) - F_p(x_2) \approx 0.9 - 0.3 = 0.6$ (60%). Цим інтервалам відповідають наближені розміри зерен: до 285 нм та межі $d \sim 125 - 66$ нм. Очевидно, що імовірність формування нестійкої конфігурації на проміжку $[x_1, x_2]$ складає $p(x_1 \leq h_g < x_2) = F_p(x_2) - F_p(x_1) \approx 0.3 - 0.22 = 0.08$ (8%). Оскільки система може одночасно функціонувати у двох станах чи фазах, що визначаються крутими ділянками на кривій 2, вважається, що металевий зразок при ПД буде визначатися граничною (стаціонарною) структурою з сумішшю зерен різного розміру. Тобто об'ємна доля СМК зерен (до 285 нм) у структурі матеріалу становить 15%, а нанорозмірних кристалітів (в межах $d \sim 125 - 66$ нм) – 60%, відповідно. Випадки, представлені кривими 3 та 4 на рис. 2.4б, наведені для повноти аналізу, оскільки демонструють формування монокристалічної чи КЗПК структур, що зазвичай не реалізуються в реальних металах при ПД.

2.3 Часові залежності густин МЗ

Дослідимо кінетику щільності МЗ h_g враховуючи флуктуацій основних параметрів $N_{D,g}$. Запишемо рівняння Ланжевена з мультиплікативним шумом у стохастичній диференціальній формі. Для цього помножимо рівняння (2.9) на dt .

Отримаємо:

$$\tau_{h_g} dh_g = F(h_g)dt + \sqrt{N(h_g)} dW(t), \quad (2.20)$$

де $dW(t) = W(t+dt) - W(t) \equiv \xi(t)dt$ – вінерівський процес, який має властивості білого шуму [44, 37]

$$\langle dW(t) \rangle = 0, \langle (dW(t))^2 \rangle = 2dt \quad (2.21)$$

При цьому шум визначається як похідна від вінерівського процесу $\xi(t) = dW(t)/dt$. Розподіл випадкових блукань $\xi(t)$ є нормальним (гаусівським) розподілом.

Запишемо рівняння (2.20) у більш загальному виді

$$dh_g = D^{(1)}(h_g)dt + \sqrt{D^{(2)}(h_g)} dW(t). \quad (2.22)$$

Таким чином, дифузійний процес визначається коефіцієнтами дрейфу $D^{(1)}(h_g)$ та дифузії $D^{(2)}(h_g)$, що в рамках підходу Іто (I-форма) та Стратоновича (S-форма) задовільняють визначенням [39]

$$(I): \quad D^{(1)}(h_g) = \frac{F(h_g)}{\tau_{h_g}}, \quad (2.23)$$

$$(S): \quad D^{(1)}(h_g) = \frac{F(h_g)}{\tau_{h_g}} + \sqrt{\frac{N(h_g)}{\tau_{h_g}^2}} \frac{d\sqrt{N(h_g)/\tau_{h_g}^2}}{dh_g}, \quad (2.24)$$

$$(I, S): \quad D^{(2)}(h_g) = \frac{N(h_g)}{\tau_{h_g}^2}. \quad (2.25)$$

Відмітимо, що зазначені коефіцієнти передбачають реалізацію єдиної процедури стохастичного інтегрування в рамках числення Іто [44]. Вирази (2.23) та (2.25) відповідають СДР в формі Іто, а визначення (2.24) та (2.25) – еквівалентному

початковому СДР у формі Стратоновича. Проте у всіх випадках представлення стохастичних процесів відбувається в рамках інтерпретації Іто, що задовольняє умові марковості (тобто демонструє незалежність прирощувань $dW(t) = W(t + dt) - W(t)$). При цьому стохастичний інтеграл визначається відповідно до інтеграла типу Рімана, якому відповідають звичайні правила математичного аналізу [44]. Зауважимо, що представлені форми числення пов'язані між собою та дозволяють здійснити взаємне перетворення [44]. Якщо початкове СДР (2.20) задано в інтерпретації Стратоновича, то, враховуючи властивості (2.21), можна завжди перейти до еквівалентного СДР в рамках інтерпретації Іто за рахунок додавання виразу $g(h_g)dg(h_g)/dh_g$, де $g(h_g) = \sqrt{N(h_g)/\tau_{h_g}^2}$ (див. визначення коефіцієнта дрейфу (2.24)). У свою чергу, зворотній перехід здійснюється за рахунок віднімання $g(h_g)dg(h_g)/dh_g$. Таким чином, початкова та еквівалентна форма СДР будуть мати єдиний розв'язок.

Залежно від вибору форми інтерпретації дифузійних коефіцієнтів (2.23)-(2.25) СДР Ланжевена (2.22) буде відрізнятись за видом та мати різний фізичний сенс. Очевидно, що СДР у формі Стратоновича визначає дифузійний процес з переносом, оскільки другий доданок у визначенні коефіцієнта дрейфу (2.24) $g(h_g)dg(h_g)/dh_g$, де $g(h_g) = \sqrt{N(h_g)/\tau_{h_g}^2}$, породжує індукований шумом перехід. У літературі цей доданок більш відомий за назвою “хибного” переносу, оскільки він не входить до вихідного феноменологічного рівняння (2.9) (чи СДР (2.5)-(2.6)) [44, 39]. Проте відомо, що він приводить лише до фізичних наслідків, оскільки моделює реальні системи з середовищем, що здійснює швидкі флуктуації (тобто враховує кореляцію між випадковим середовищем та системою).

Варто зазначити, що у випадку впливу адитивного шуму, тобто при $N(h_g) = \text{const}$ у рівнянні (2.20), не існує принципової різниці між численнями Іто та Стратоновича. Проте, якщо на кінетику системи діє мультиплікативний шум, тобто при $N(h_g) \neq \text{const}$, коли вплив випадкової сили залежить від стану системи, кореляція закладена у інтегралі Стратоновича призводить до систематичного внеску

в еволюцію випадкового процесу $h_g(t)$. Отже, СДР у формі Стратоновича з урахуванням визначень (2.24) та (2.25) найбільш доцільно використовувати для опису реальної фізичної ситуації, що пов'язана зі швидкою зміною середовища. Однак, варто зазначити, що не існує об'єктивних причин за яких слідє надавати однозначну перевагу певній інтерпретації СДР, у будь-якому випадку вирішальним критерієм правильності вибору є відповідність аналітично знайдених результатів до експериментальних даних.

Зокрема, підтвердження коректності теоретичного дослідження поведінки основних змінних фізичної системи (у данному випадку h_g) зазвичай відбувається шляхом порівняння результатів числового моделювання декількох форм СДР. Незважаючи на широкий спектр існуючих форм числення, найбільш виправданими вважають саме підхід Стратоновича з урахуванням визначення дифузійного процесу за допомогою коефіцієнтів (2.24) та (2.25), та форми Іто, що визначається коефіцієнтами дрейфу (2.23) та дифузії (2.25). Таким чином, проведемо порівняння кінетики випадкового процесу h_g з огляду зазначених форм числення. Числовий розв'язок співвідношення (2.22) знаходиться за допомогою методу Ейлера. Диференціал випадкової величини розглядається у дискретному наближенні $dW(t) = \sqrt{\Delta t} W_i$. Ітераційна процедура для розв'язання (інтегрування) рівняння (2.22) має вигляд

$$h_{gi+1} = h_{gi} + D^{(1)}(h_{gi})\Delta t + \sqrt{D^{(2)}(h_{gi})\Delta t} W_i.$$

Використовуючи визначення коефіцієнтів дифузії (2.24)-(2.25) та виразів (2.10), (2.11), обчислимо часову залежність щільності МЗ h_g . Зокрема, у випадку числення Стратоновича ітераційна процедура з урахуванням математичних перетворень має явний вид

$$h_{gi+1} = h_{gi} + \left[\frac{F(h_{gi})}{\tau_{h_g}} + 2 \frac{(2\psi_{gD}^2 h_{gi} + \varphi_{gD} \psi_{gD})}{\tau_{h_g}^2 \varphi_{1D}^2} N_D \right] \Delta t + \sqrt{\frac{N(h_{gi})}{\tau_{h_g}^2} \Delta t} W_i. \quad (2.26)$$

Розв'язок СДР (2.22) знаходиться на часовому проміжку $t \in [0, T]$ для визначеної кількості ітерацій N (кількості точок на часовій залежності). Відповідно приріст часу визначається за виразом $\Delta t = T / N$. Сила W_i має наступні характеристики

$$\langle W_i \rangle = 0, \langle W_i W_{i'} \rangle = 0, \langle W_i^2 \rangle = 2, \quad (2.27)$$

що відповідають моментам білого шуму (2.21).

Моделювання випадкової сили, що відповідає властивостям білого шуму, проводиться за допомогою моделі Бокса-Мюллера [45]

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

де, згідно до другого моменту в (2.27), дисперсія $\mu = \sqrt{2}$, а W_i - абсолютно випадкове число, яке підпорядковується нормальному розподілу та властивостям (2.27). Псевдо-випадкові числа r_1 та r_2 мають рівномірний розподіл та повторюються через певний період.

На рис. 2.5 представлені часові траєкторії $h_g(t)$, що отримані за допомогою числового розрахунку рівняння (2.22) та визначають режими фрагментації металевої структури у процесі ІПД згідно з областями A , B на ФД (рис. 2.2). На рис. 2.6 зображено густини імовірності реалізації щільності МЗ для значень побудованих на рис. 2.5. Випадки (а), (в) розраховані в рамках числення Стратоновича та відповідають точкам 1, 2 на рис. 2.2б. Залежності на рисунках (б), (г) отримані згідно з ФД, що побудована в інтерпретації Іто. Як відмічалось раніше, основна відмінність при побудові ФД для зазначених форм числення полягає у визначенні рівняння стаціонарних станів (2.18): внески доданків, що враховують взаємодію з флуктуаціями щільності дислокацій, різняться в 2 рази. Відповідно ФД в інтерпретації Іто має аналогічний рис. 2.2б вид, проте межі за N_D набувають в 2 рази менші значення.

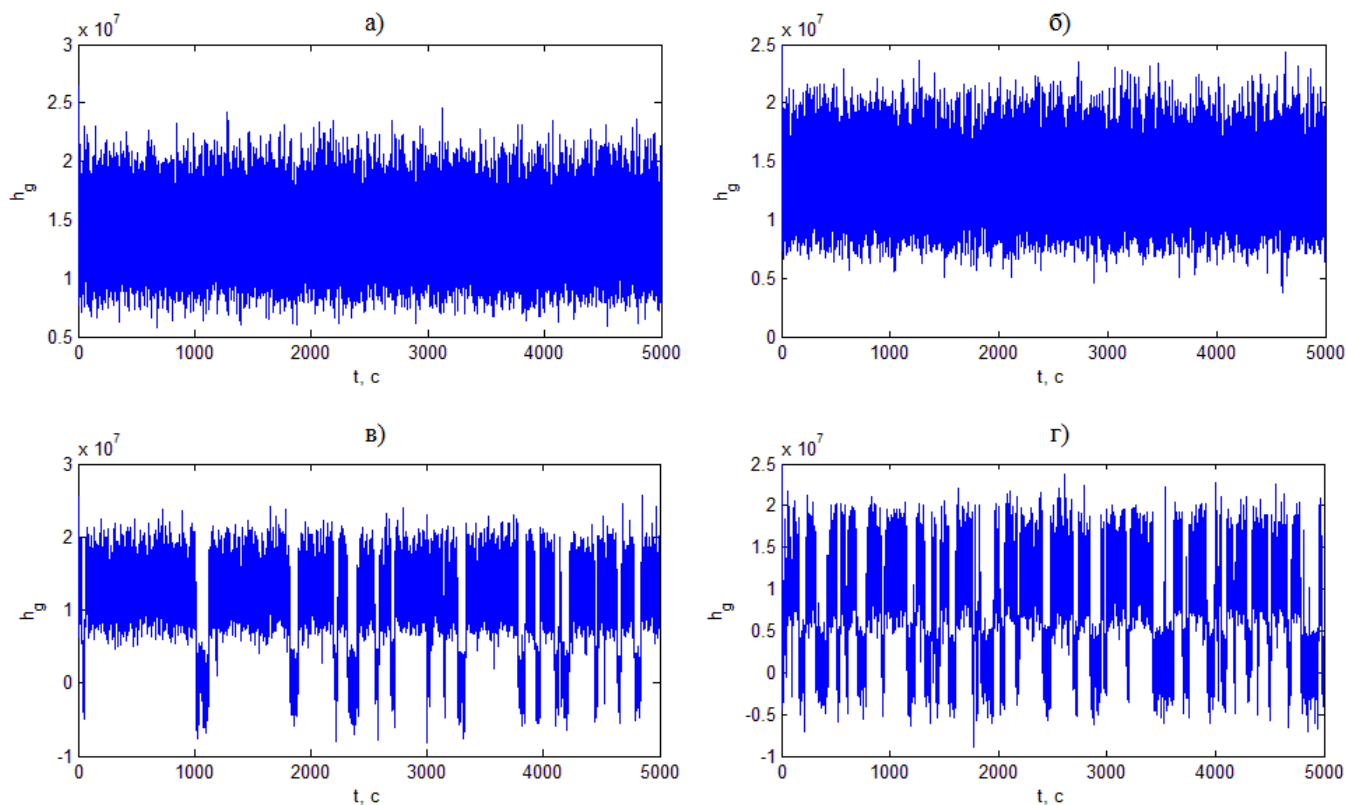


Рис. 2.5. Часові залежності $h_g(t)$ режимів фрагментації відповідно до областей (А, В) на ФД при параметрах $N_g = 1 \text{ Дж}^2 \cdot \text{с} \cdot \text{м}^{-4}$, $\varepsilon_{ii} = -0.1\%$, $N = 10^6$, $T = 5 \cdot 10^3 \text{ с}$, $\Delta t = 0.005 \text{ с}$: (а), (в) – побудовані в рамках числення Стратоновича та відповідають точкам 1, 2 на рис. 2.2б; (б), (г) - отримані для значень $N_D = (0.25 \cdot 10^{-15}, 0.25 \cdot 10^{-15}) \text{ Дж}^2 \cdot \text{с} \cdot \text{м}^{-2}$ та $I_2 = (0.5 \cdot 10^{-3}, 0.05 \cdot 10^{-3}) \%$ в рамках інтерпретації Іто.

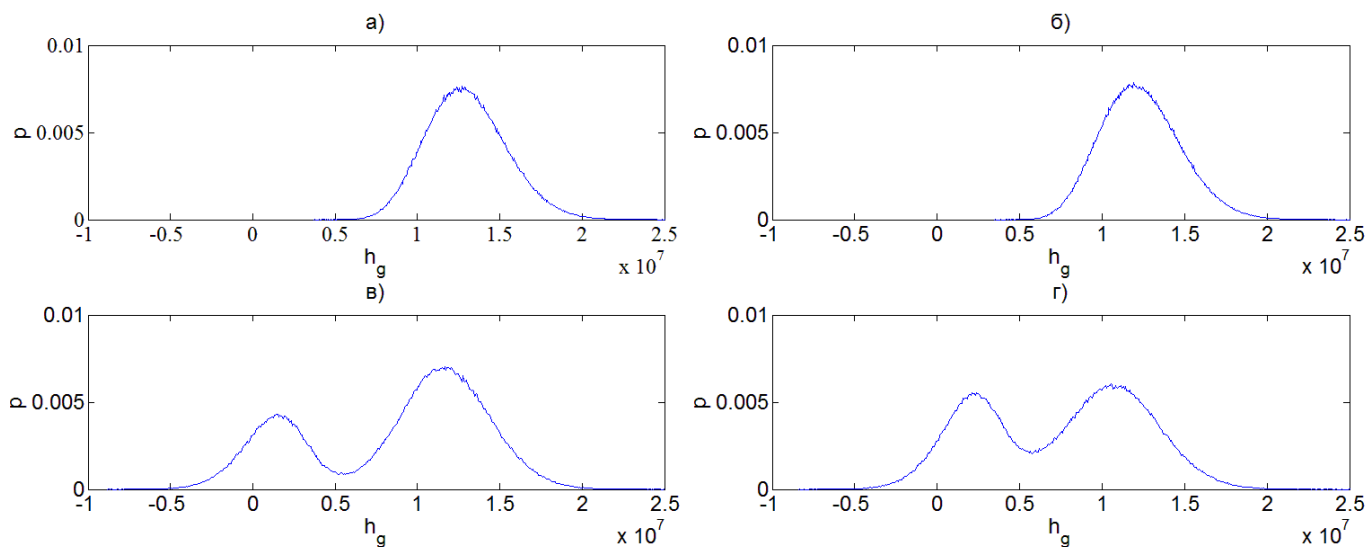


Рис. 2.6. Числовий розподіл імовірності щільності МЗ $h_g(t)$. Області (а)-(в) побудовані для часових залежностей (а)-(в) на рис. 2.5 відповідно.

За визначенням максимуми ефективного синергетичного потенціалу (2.16) та функції густини розподілу $p(h_g)$ (2.15) відповідають формуванню стійких стаціонарних станів (граничних структур). Таким чином, під час числового розв'язання рівняння (2.22) за рахунок дії стохастичного джерела, система (тобто параметр порядку h_g) може здійснювати вимушені коливання довкола стаціонарних значень та, при достатній інтенсивності шуму, переходить між цими стійкими станами. У випадку розгляду великих пружних деформацій та флуктуацій щільності дислокацій з інтенсивністю N_D , які визначаються в області B (див. рис. 2.2б), видно, що на рис. 2.5а щільність МЗ здійснює інтенсивні коливання довкола єдиного стаціонарного стану, що в даному випадку відповідає середньому розміру зерен $d \sim 76$ нм. Відповідно у зразку формується НК структура з розмірами зерен в межах встановленого значення. Пружні деформації та інтенсивність N_D з області A (див. рис. 2.2б) приводять до реалізації випадкових коливань довкола двох стаціонарних станів системи, що визначаються розмірами кристалітів: $d \sim 714$ нм та $d \sim 83$ нм. Оскільки шум має мультиплікативний характер, у матеріалі постійно відбуваються індуковані шумом структурні перетворення (переходи). Відповідно до тенденції еволюційної залежності з часом формується гранична структура, що має одночасно як СМК, так і НК розміри зерен. Імовірності реалізації щільності МЗ на рис. 2.6, що побудовані за часовими залежностями, дозволяють оцінити співвідношення різних типів зернистих структур у зразку при заданих параметрах задачі. Очевидно, що внесок НК зерен у об'ємі металевого зразка майже в 2 рази переважає у порівнянні з об'ємом СМК. Відмітимо, що сформовані у результаті числового аналізу розподіли щільності МЗ на рис. 2.6а,в повністю співпадають з отриманими аналітичними залежностями $p(h_g)$ (2.15) на рис. 2.4а (відповідні криві 1, 2).

У роботі [38] дослідження мікромеханізмів ПД ультрадрібнозернистої міді встановило, що в процесі деформації відносна зміна долі основних типів зерен (з дислокаційною структурою, зерна без дислокацій та зерна з комірками чи фрагментами) має квазіосцилючий характер. При цьому виявлено, що основний вплив на процес деформації мають крупні зерна. Зокрема, встановлено, що саме

внутрішньозеренне ковзання дислокацій, прослизання по МЗ та кореляція цих процесів між собою має основний вплив на зміну морфології досліджуваного зразка. Таким чином, формування нанокристалічного стану відбувається за рахунок реалізації дислокаційної системи ковзання у крупних зернах, що забезпечує активацію субструктурних перетворень та формування висококутових меж зерен. Доля найдрібніших зерен ($d < 100$ нм) у структурі міді збільшується майже вдвічі, в той час як внесок більш крупних зерен (з дислокаціями та фрагментами) зменшується, але їх середній розмір збільшується майже вдвічі. Незмінним залишається тільки середній розмір бездислокаційних зерен, оскільки вплив самоорганізованих систем ковзання у таких конфігураціях відсутній. Наведені у роботі [38] результати демонструють, що спектральний розподіл розмірів зерен у ході обробки має квазіосцилюючий характер, оскільки ІПД при кімнатній температурі протікає в умовах динамічної рекристалізації. Таким чином, отримані на рис. 3.1 стохастичні залежності еволюції h_g корелюють з експериментальними даними та дозволяють пояснити тенденцію формування наноструктурного стану на різних стадіях деформування.

Розглядаючи підхід Іто, що визначається СДР (2.22) з коефіцієнтами (2.23) та (2.25), бачимо, що числові залежності на рис. 2.5б,г відрізняються від отриманих результатів в інтерпретації Стратоновича. Очевидно, що коливання параметра порядку довкола стаціонарних станів (стійких граничних структур) відбуваються з меншою дисперсією за щільністю МЗ h_g . Крім того, доля СМК зерен, у випадку одночасного існування двох граничних структур, приймає значно менші значення у морфології зразка. Проте виявлено, що стаціонарні значення та максимуми розподілів $p(h_g)$ набувають єдині значення незалежно від інтерпретації. Така поведінка пов'язана з тим, що форма числення при визначенні синергетчного потенціалу (2.16) та густини розподілу $p(h_g)$ (2.15) приводить лише до перенормування ефективної інтенсивності шуму $N(h_g)$. У випадку підходу Іто константа $1/2$ у першому члені (див. вираз (2.16)) змінюється на значення 1. Отже, флуктуації основних структурних дефектів, які визначаються ефективною

інтенсивністю шуму $N(h_g)$, неістотно впливають на процес фрагментації металевого зразка, тобто передісторія стохастичного процесу майже не враховується. Таким чином, оскільки метою даної роботи є дослідження особливостей еволюції h_g та супроводжуваних процесів формування стаціонарних СМК чи НК структур при обробці ПД, тому саме підхід Стратоновича дозволяє отримати результати, що відповідають реальному процесу фрагментації.

Крім того, основна перевага визначення Стратоновича для стохастичного диференціального рівняння (2.22) полягає у тому, що зазначений підхід безпосередньо демонструє характеристики дифузійного процесу, що дозволяють провести моделювання системи з надзвичайно швидкою зміною флуктуацій параметрів стану та врахувати передісторію розвитку кристалічної структури. Що справедливо, оскільки дрейф системи (див. визначення (2.24) визначається феноменологічною частиною $F(h_g)$ (2.10) та індукованим шумом переносом $g(h_g)dg(h_g)/dh_g$, де $g(h_g) = \sqrt{N(h_g)/\tau_{h_g}^2}$. Останній доданок демонструє, що в флуктуючому середовищі систематичні зміни відбуваються лише у тому випадку, якщо шум є наближено білим.

З фізичної точки зору саме флуктуації основних параметрів стану системи зароджують виникнення самоорганізаційних процесів, що забезпечують утворення нових індукованих шумом станів (фаз речовини) чи сприяють зміні характеру поведінки системи під час обробки. Відомо, що структурні перетворення при ПД характеризуються деякою циклічністю. Зокрема, стрибкоподібні структурні переходи та відповідні зміни властивостей зразка часто спостерігаються на практиці [28]. В роботі [27] виявлено, що в процесі фрагментації металевого зразка після активації динамічної рекристалізації чи аморфізації процес пластичної деформації має рекурсивний характер, тобто у сформованих рекристалізованих зернах чи в межах аморфної фази зароджуються вторинні процеси фрагментації. Таким чином, під дією виникаючих напружень відбувається накопичення щільності дефектів, що в подальшому супроводжується аналогічними перетвореннями у структурі. В цілому важливо пам'ятати, що хід структурних перетворень при ПД залежить від набору

факторів: температури обробки, інтенсивності та швидкості деформації, концентрації домішок та структурних дефектів різних рівнів, здатності дислокацій до дифузійної перебудови (величина бар'єру Пайерлса), різниці енергій кристалічного та аморфного станів металевих зразків [46].

Проведемо спектральний аналіз часових залежностей густин МЗ $h_g(t)$, представлених на рис. 2.5а,в. Зокрема, перевіримо еволюційні залежності наявності гармонічних складових, які можуть виникати за рахунок впливу стохастичного джерела (дії адитивного некорельованого шуму). Процедура визначення спектру сигналу зводиться до застосування перетворення Фур'є [47].

Побудуємо амплітудний спектр для отриманих часових залежностей. Для цього використаємо алгоритм швидкого перетворення Фур'є реалізований у програмному середовищі MATLAB (функція `fft()`). Перед початком обробки сигналу, необхідно забезпечити щоб кількість точок сигналу дорівнювала $N = 2^m$. В отриманому векторі частот відкинемо від'ємні частоти, оскільки весь спектр є еквівалентним додатній частині з подвоєнням амплітудою.

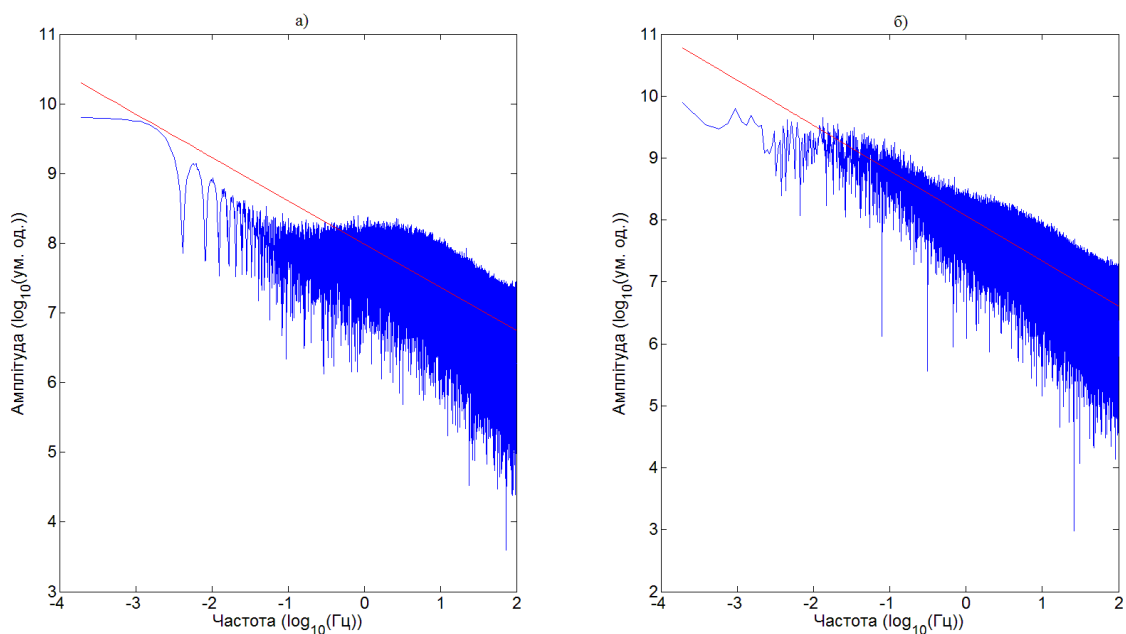


Рис. 2.7. Амплітудний спектр сигналу для режимів фрагментації А (а) та В (б), що показані на рис. 2.5а,в при частоті дискретизації $\omega_n = 1/\Delta t$ Гц та заданій кількості 2^{20} частотних смуг (ліній Фур'є). Прямі спадні лінії є лінійною апроксимацією отриманих значень після логарифмування та визначаються МНК. Амплітуда вимірюється в умовних одиницях.

Із вигляду спектру на рис. 2.7 можна дійти висновку, що часові залежності $h_g(t)$ не мають виражених (значущих) частот їх регулярних (періодичних) складових, адже максимальні амплітуди у спектрі сигналу відсутні. Отримані залежності побудовані при частоті дискретизації $\omega_n = 1/\Delta t$ с та згідно з визначеною кількістю 2^{20} частотних смуг (ліній Фур'є). Нагадаємо, що відповідні часові ряди на рис. 2.5а,в отримані за допомогою ітераційної процедури (2.26) при $N=10^6$, $T=5\cdot 10^3$ с, $\Delta t=0.005$ с та відображають режими фрагментації відповідно до областей (A, B) на ФД (рис. 2.3б).

З рисунку 2.7 видно, що амплітудний спектр сигналів має майже ідентичний характер незалежно від вибору режиму фрагментації при ПД (значень керуючих параметрів відповідно до рис. 2.2б) та рівномірно зменшується на логарифмічній шкалі зі збільшенням частоти флуктуацій структурних складових у металевому зразку. Це означає, що на низьких частотах ω інтенсивність флуктуацій N_D має більшу енергію. У свою чергу, лінії, що апроксимують спектральні залежності, також вказують на спадну тенденцію з підвищенням частоти. Тільки у випадку, представленому на рис. 2.7а, видно, що при малих частотах $S_p(\omega) \approx \text{const}$ (при $\omega < 0.5 \sim \text{Гц}$), проте в подальшому залежність монотонно спадає. Таким чином, очевидно, що для всіх режимів фрагментації металевого зразка при ПД спектр (потужність) флуктуацій еволюційних змінних буде визначатись єдиною формою, обернено пропорційною частоті, а отже в досліджуваній моделі існують різні часові кореляції. Така поведінка суперечить властивостям білого шуму, адже амплітудний спектр випадкового сигналу у випадку реалізації білого шуму приймає стале значення, що відповідає діапазону всіх можливих частот (тобто потужність сигналу на всіх частотах однакова) [37]. Відповідно кореляції в системі відсутні.

Стохастичні (флуктуаційні) процеси із амплітудним спектром, який визначається обернено пропорційно частоті, є характерною особливістю більшості реальних фізичних, економічних та біологічних систем, яким притаманні фазові переходи. Такий шум та має назву $1/\omega$ шум, шум мерехтіння, флікер-шум або фрактальний шум [48]. Зокрема, схожа поведінка притаманна великій кількості

існуючих динамічних систем, які мають джерело “білого” шуму та характеризуються нерівноважними переходами [49].

Очевидно, що область зародження та хід реалізації пластичної течії у комірчастій структурі металів є статистично незалежним процесом, тому припускається, що флуктуації в кристалічній структурі повинні відображати “білий” шум. Проте, нелінійна взаємодія МЗ з дислокаційними ансамблями та іншими структурними неоднорідностями приводить до більш складного характеру флуктуацій внутрішнього шуму в системі. В результаті у структурі матеріалу активуються різного роду самоорганізовані процеси, що приводять до формування нових станів чи фаз.

Спадна залежність амплітудного спектру пояснюється тим, що у вихідному рівнянні Ланжевена (2.9) нелінійні внески, які відображають взаємодії нерівноважних параметрів стану (структурних дефектів різних рівнів), перешкоджають реалізації високих частот. У результаті відбувається перехід від білого шуму $\xi(t)$, що характеризує більшість фізичних систем, до кольорового з ненульовим часом кореляції.

Проведемо додатковий аналіз випадкових коливань щільності МЗ h_g за допомогою побудови автокореляційної функції (АКФ), що для випадкових процесів визначається за формулою [50]

$$R(\tau) = E\{X(t)X^*(t - \tau)\},$$

де $X(t)$ – функція (сигнал) випадкового процесу, E – оператор математичного сподівання, символ зірочка позначає комплексно-спряжену величину. Наведена формула демонструє залежність між двома випадковими процесами, що зміщені один відносно одного на декілька часових відліків τ (мається на увазі затримка сигналу).

Відомо, що АКФ використовується для аналізу складних коливань та виступає характеристикою часових залежностей, оскільки дозволяє зробити висновок про наявність періодичних складових в еволюційній залежності та отримати їх частотні характеристики. Дослідження екстремальних значень отриманих корелограм

дозволяє визначити відповідні часи кореляції у динамічній системі. Вважається, що автокореляційна залежність буде мати періодичний характер, якщо початкова функція є періодичною.

За визначенням АКФ завжди визначається в межах від -1 до 1 та з підвищенням τ (лагу або часу затримки) буде загасати. При цьому, якщо значення АКФ близькі до нуля, вважається що енергія випадкового сигналу (еволюція щільності МЗ), яка в даному випадку залежить від інтенсивності флуктуацій N_D , формується випадковим чином та періодичність у залежності не проявляється. У свою чергу, періодичні часові залежності визначаються АКФ, що приймають максимальні значення близькі до 1. Крім того, вид корелограми дозволяє зробити висновок про стаціонарність часового ряду, властивості якого залишаються сталими незалежно від зміни початку відліку часу [50].

Для дискретного часового ряду з відомим математичним сподіванням μ та дисперсією σ АКФ обчислюється наступним чином [50]

$$A_{cf}(\tau) = \frac{1}{N\sigma^2} \sum_{t=1}^{N-\tau} (x_t - \mu)(x_{t-\tau} - \mu), \quad (2.28)$$

де N – довжина часового ряду, τ – лаг або час затримки.

Таким чином, на рис. 3.4 представлено автокореляційні залежності двох функцій (базової еволюційної залежності та зміщеної на величину τ) від величини зсуву τ у часі, що обчислюються за формулою (2.28). Відмітимо, що розрахунки АКФ проведені за допомогою функції `autocorr()` у програмному середовищі MATLAB. Випадок, представлений на рис. 3.3а, демонструє корелограму, що отримана у результаті числового моделювання “білого” шуму. Залежності, що зображені на рис. 3.4б,в, побудовані для відповідних на рис. 3.1а,в часових залежностей еволюції щільності МЗ. При цьому варто відмітити, що для обчислення АКФ використовувалися часові ряди, які отримані при значеннях $N = 10^6$, $T = 5 \cdot 10^4$ с, $\Delta t = 0.05$ с, що дозволило більш точно оцінити поведінку динамічної системи.

Аналіз отриманих рисунків демонструє, що значення АКФ експоненційно зменшуються до нуля (див. вставки) та проявляють незначні згасні коливання

довкола встановленої величини. Таким чином, періодичність у отриманих залежностях не спостерігається, а отже еволюція щільності МЗ та автокореляція у системі формуються випадковим чином. Очевидно, що з часом АКФ приймає стабільне значення, що дозволяє зробити висновки про стаціонарність часових залежностей.

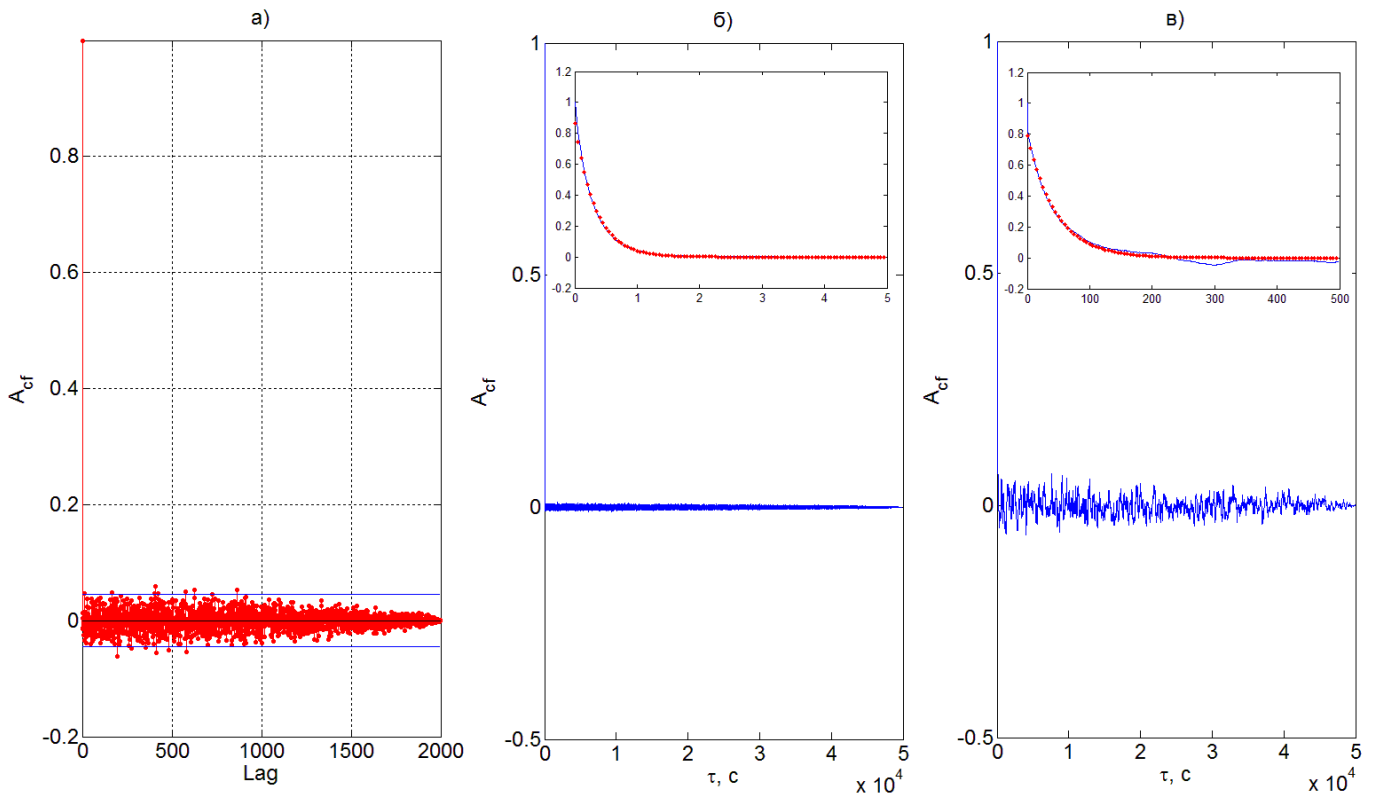


Рис. 2.8. Автокореляційні функції $A_{cf}(\tau)$ (2.28) часових залежностей. Рисунок (а) відповідає числовому представленню “білого” шуму. Корелограми, що показані на рисунках (б), (в), побудовані для часових залежностей щільності МЗ при умовах вказаних на рис. 2.5а,в та значеннях $N=10^6$, $T=5 \cdot 10^4 c$, $\Delta t=0.05 c$. Лінії з кружками визначаються рівняннями $A_{cf}(\tau) = 0.867 \cdot \exp(-3.054\tau)$ (б) та $A_{cf}(\tau) = 0.79 \cdot \exp(-0.022\tau)$ (в).

З рисунків видно, що АКФ у всіх випадках набуває максимального значення при $\tau=0$ (тобто час кореляції дорівнює нулю), що відповідає визначенню абсолютно випадкового процесу: “білого шуму”, що має у якості АКФ функцію Дірака. Проте, отримані результати на рис. 2.8б,в (див. вставки) демонструють, що досліджуваній системі притаманна автокореляція протягом певного часового інтервалу. Таким чином, система (2.9) демонструє немарківську поведінку, що в даному випадку реалізується за рахунок наявності кольорового шуму з ненульовим часом кореляції.

Відомо, що кольоровий шум $\zeta(t)$ описується процесом Орнштейна-Уленбека [37], який визначається рівнянням:

$$\tau \frac{d\zeta(t)}{dt} = -\zeta(t) + \xi(t), \quad (2.29)$$

де $\xi(t)$ - представлення білого шуму з інтенсивністю $\sigma^2 = 1$ та моментами

$$\langle \xi(t) \rangle = 0, \langle \xi(t)\xi(t') \rangle = \sigma^2 \delta(t-t').$$

При цьому кореляційна функція процесу $\zeta(t)$ має вид

$$\langle \zeta(t)\zeta(t') \rangle = \frac{\sigma^2}{2\tau} \exp\left(-\frac{|t-t'|}{\tau}\right),$$

де τ - час автокореляції.

Процес (2.29) виступає свого роду “фільтром” для “білого” шуму, оскільки згладжує часові флуктуації параметра порядку. Відповідно при наближенні часу автокореляції τ до нуля, отримуємо “білий” шум, де $\tau=0$. Очевидно, що з підвищенням τ , система демонструє більше інформації стосовно еволюції випадкового процесу, тобто спостерігається явна залежність від передісторії.

Апроксимуючи отримані залежності на рис. 2.8б,в (див. лінії з кружками на вставках), отримуємо відповідні рівняння $A_{cf}(\tau) = 0.867 \cdot \exp(-3.054\tau)$ (випадок б) та $A_{cf}(\tau) = 0.79 \cdot \exp(-0.022\tau)$ (випадок в), що визначають вид АКФ. Таким чином, еволюційні залежності щільності МЗ h_g , що представлені на рис. 3.1а,в, мають часи автокореляції $\tau \equiv 1/0.172 = 0.32$ с та $\tau \equiv 1/0.022 = 45.45$ с. Наведені значення означають, що протягом визначеного періоду часу τ хід еволюції щільності МЗ найбільш імовірно буде зберігати тенденцію випадкового процесу. Варто зазначити, що кореляція може мати як позитивно спрямований, якщо зберігається тенденція процесу, так і проявляти антикорельований, тобто від'ємний ефект -- мають місце зворотні процеси (наприклад, чергування підвищення та спадання залежності). Очевидно, що зі збільшенням значення часу автокореляції τ проявляється

сильніший зв'язок майбутнього з передісторією процесу. З фізичної точки зору ми можемо припустити, яким буде розмір зерен у досліджуваному зразку у наступний момент часу. Тобто мають місце виникнення прогнозованих результатів обробки ІПД.

У випадку, що відповідає еволюції щільності МЗ на рис. 2.5в, вважається, що час автокореляції $\tau \equiv 45.45$ с має “ефективне” значення, оскільки система здійснює постійні структурні перетворення. Ці перетворення проявляються у реалізації динамічних переходів між двома граничними структурами (фазами) з визначеними розмірами зерен. З огляду на це припускається, що система (кристалічна структура металу) за визначених умов та протягом деякого періоду τ найбільш імовірно (переважно) буде функціонувати у певному, визначеному стаціонарному стані. Згідно до отриманих у підрозділі 2 розподілів реалізації щільності МЗ (див. рис. 2.4) це означає, що гранична структура металічного зразка визначається різним відсотковим співвідношенням об'ємної долі кристалітів визначених розмірів. Таким чином, у наступні моменти часу можливо передбачити переважаючу фазу чи стійкий структурний стан з відповідним розміром зерен у граничній структурі, що формується.

Отже, проведений аналіз АКФ виявив, що під час фрагментації полікристалічної структури металу чи сплаву до визначеного моменту часу τ буде існувати пам'ять про передісторію попередніх значень h_g чи в цілому стійких станів у структурі зразка. Звідси висновок, що величина часу автокореляції впливає на ступінь відхилення щільності МЗ від середнього значення, а отже розмір зерен у сформованій граничній структурі може приймати різні значення при однакових умовах обробки. З цього приводу вважається, що чим більше τ у досліджуваній системі (кристалічній структурі), тим більше потрібно часу на обробку металевого зразка для отримання бажаного результату. Таким чином, отримані результати можуть бути корисними з точки зору технічних застосувань, зокрема при встановленні умов обробки для досягнення бажаного результату: стійкої граничної структури з СМК чи НК розмірами зерен.

ВИСНОВКИ

1. В рамках підходу нерівноважної еволюційної термодинаміки проведено дослідження режимів фрагментації металів при ПД. Процеси дефектоутворення було змодельовано в рамках дводефектної моделі з урахуванням шуму. В якості основних дефектів було прийнято межі зерен та дислокації. Керуючі параметри (ε_{ii}^e і I_2) є парою інваріантів тензора пружних деформацій, що характеризують зовнішній вплив, що реалізується при ПД.

2. Степеневе розвинення для густини внутрішньої енергії було модифіковано, а саме, додано складники, які враховують взаємодію структурних дефектів різних рівнів. Враховано вплив адитивного некорельованого шуму основних параметрів в еволюційних рівняннях. Отримана модель дозволяє більш якісно описати процес формування стаціонарних СМК чи НК структур.

3. За допомогою адіабатичного наближення, що було застосовано у відповідності до характеру еволюції основних змінних (щільності меж зерен та дислокацій), отримано основні співвідношення: стохастичне рівняння Ланжевена та пов'язане з ним рівняння Фоккера-Планка, яке визначає еволюцію функції густини розподілу щільності дефектів. Встановлено, що максимальним значенням ефективного синергетичного потенціалу відповідають максимуми значень густини розподілу.

4. Побудована фазова діаграма, що встановлює умови формування граничних (стаціонарних) структур різних типів. Для кожної області фазової діаграми досліджено поведінку ефективного синергетичного потенціалу. Також було побудовано густину розподілу щільності МЗ, який дозволяє оцінити кількісний склад зерен різних типів. Показано, що можливе формування одночасно двох стаціонарних станів із СМК та НК зернами, при чому отримані залежності дозволяють оцінити їх процентне співвідношення.

5. Встановлено, що шум є причиною нерівноважних переходів та формування нових станів.

6. Отримано числовий розв'язок рівняння Ланжевена та побудовано часові залежності щільності МЗ, які демонструють процес перетворення кристалічної структури зразка в ході ПД.

7. Побудований для отриманих часових залежностей амплітудний спектр демонструє, що адитивний шум нижнього рівня має мультиплікативний характер, що характерно для більшості реальних систем.

8. Проведено дослідження АКФ часових залежностей та виявлено, що АКФ має експоненційну залежність від лагу. Визначено часи автокореляції, які можуть бути використані для прогнозування домінуючого розміру зерен у кристалічній структурі протягом заданого моменту часу.

Таким чином, в даній роботі удосконалено підхід нерівноважної еволюційної термодинаміки та отримано модель, що дозволяє більш якісно описати процеси, які відбуваються в металах та сплавах під час інтенсивної пластичної деформації. Отримані залежності дозволяють визначити межі для керуючих параметрів, що характеризують зовнішній вплив, залежно від типу структури, що необхідно досягти.

ПЕРЕЛІК ПОСИЛАНЬ

- [1] Глезер А. М., Пермякова. И. Е. Нанокристаллы, закаленные из расплава. – Москва: Физматлит, 2012. – 360 с..
- [2] Rusz S., Klyszewski A., Salajka M. Possibilities of Application Methods Drece in Forming of Non-Ferrous Metals // Arch. Metall. Mater. – 2015. – Vol. 30, № 4. – P. 3011–3016..
- [3] Соколенко В. И., Мац А. В., Мац В. А. Механические характеристики наноструктурированных циркония и цирконий-ниобиевых сплавов // ФТВД. – 2013. – Т. 23, № 2. – С. 96–102.
- [4] Максакова А. А., Ольшанецкий В. Е., Пашинская Е. Г., Климов А. В. Особенности структуры и свойств проволоки в зависимости от степени деформации при волочении со сдвигом // НМТ. – 2014. – № 2. – С. 26–29..
- [5] Мальцева Л. А., Носкова Н. И., Мальцева Т. В., Косицына И. И., Озерец Н. Н., Мисарь А. В., Левина А. В. Эволюция структуры и фазовых превращений в метастабильной аустенитной стали при интенсивной пластической деформации //ФТВД.–2009.–Т.19, № 1.–С.83-9.
- [6] Олейнич-Лысюк А. В., Раранский Н. Д. Особенности магнитопластического эффекта в бериллиевом конденсате // ФТТ. – 2012. – Т. 54, № 3. – С. 417–421.
- [7] Pogrebnjak A. D. Structure and properties of nanostructured Ti-Hf-Zr-V-NbN coatings // J. Nanomater. – 2013. – Vol. 2013. – P. 1–12..
- [8] Метлов Л. С. Неравновесная эволюционная термодинамика и ее приложения. – Донецк: Ноулидж, 2014. – 250 с..
- [9] Metlov L. S. Nonequilibrium dynamics of a two-defect system under severe load // Phys. Rev. E. – 2014. – Vol. 90, № 2. – P. 022124 (8 pp)..
- [10] Khomenko A.V., Troshchenko D.S., Solonar I.O., Khomenko M.A., Litsman A.M. Phase Portraits of Metals Fragmentation Modes during Severe Plastic Deformation // Proceedings of 9th International Conference on Nanomaterials: Applications & Properties (NAP-2016), (Lviv, 14–19 September 2016). – Sumy, 2016. – P. 01PCSI07 (4 pp).

- [11] Бейгельзимер Я. Е., Варюхин В. Н., Орлов Д. В., Сынков. С. Г. Винтовая экструзия – процесс накопления деформации. – Донецк: Фирма ТЕАН, 2003. – 87 с..
- [12] Валиев Р.З., Александров И.В. Наноструктурные материалы, полученные интенсивной пластической деформацией. – М.: Логос, 2000.– 271 с..
- [13] Рыбин В.В. Большие пластические деформации и разрушение металлов. — М.: Металлургия, 1986. — 224 с.: ил..
- [14] Чувильдеев В. Н. Теория неравновесных границ зерен в металлах и её приложения для описания нано- и микрокристаллических материалов // Вестник ННГУ. – 2010. – Т. 5, № 2. – С. 124–131..
- [15] Kopylov V. I., Chuvil'deev V. N. Chapter 1.3: The limit of grain refinement during ECAP deformation // Severe Plastic Deformation. – New York: Nova Science Publishers, 2006. – P. 37–58..
- [16] Segal V. M., Beyerlein I. J., Tome C. N., Chuvil'deev V. N., Kopylov V. I. Fundamentals and Engineering of Severe Plastic Deformation. – New York: Nova Science Publishers, 2010. – 542 с..
- [17] Малыгин Г. А. Дислокационный механизм динамической полигонизации кристаллов при изгибе // ФТТ. – 2002. – Т. 44, № 7. – С. 1249–1253..
- [18] Малыгин Г. А. Кинетический механизм образования фрагментированных дислокационных структур при больших пластических деформациях // ФТТ. – 2002. – Т. 44, № 11. – С. 1249–1253..
- [19] Малыгин Г. А. Дислокационно-кинетическая модель формирования дислокационной структуры при распространении интенсивной ударной волны в нанокристаллическом материале // ФТТ. – 2015. – Т. 57, № 5. – С. 955–960..
- [20] Панин В. Е., Лихачев В. А., Гриняев Ю. В. Структурные уровни деформации твердых тел. – Новосибирск: Наука, 1985. – 1256 с.
- [21] Панин В. Е., Егорушкин В. Е. Неравновесная термодинамика деформируемого твердого тела как многоуровневой системы. Корпускулярно-волновой дуализм пластического сдвига // Физическая мезомеханика – 2008. – Т. 12, № 2. – Р. 5–26.

- [22] Naimark O.B. Defect induced transitions as mechanisms of plasticity and failure in multifield continua. In: Advances in multifield theories of continua with substructure. Ed.: G.Capriz, P.Mariano.- Boston, Birkhauser. 2004. P.75-114..
- [23] Олемской А. И., Хоменко А. В. Трехпараметрическая кинетика фазового перехода // ЖЭТФ. – 1996. – Т. 110, № 6(12). – С. 2144–2167..
- [24] Олемской А. И., Валиев Р. З., Хоменко А. В. О возбужденном состоянии границ зерна в нано- и субмикрорекристаллах // Металлофиз. новейшие технол. – 1999. – Т. 21, № 4. – С. 43–58..
- [25] Зельцер А. С., Соболева Т. К., Филиппов А. Э. Автоблокировка зародышеобразования и универсальность кинетических явлений при фазовых переходах первого рода // ЖЭТФ. – 1995. – Т. 108, № 1. – С. 356–372..
- [26] Прокофьева О. В., Бейгельзимер Я. Е., Кулагин Р. Ю., Эстрин Ю. З., Варюхин В. Н. Получение субмикрорекристаллических композитов с большим равномерным удлинением методом винтовой экструзии: мат. моделирование процесса // Металлы. – 2017. – Т. 2. – С. 76–81..
- [27] Фирстов С. А., Даниленко Н. И., Копылов В. И., Подрезов Ю. Н. Структурные изменения при больших пластических деформациях в железе и их влияние на комплекс механических свойств // Изв. вузов. Физика. – 2002. Т. 3. – С. 41–49..
- [28] Валиев Р. З., Александров И. В. Объемные наноструктурные металлические материалы: получение, структура и свойства. – Москва: ИКЦ “Академкнига”, 2007. – 398 с..
- [29] Estrin Y., Vinogradov A. Extreme grain refinement by severe plastic deformation: A wealth of challenging science // Acta Mater. – 2013. – Vol. 61, № 3. – P. 782–817..
- [30] Исламгалиев Р. К., Нестеров К. М., Валиев Р. З. Эволюция структуры меди при консолидации порошков методом интенсивной пластической деформации кручением // Вестник УГАТУ. – 2013. – Т. 17, № 4. – С. 81–89..
- [31] Сергеев С. Н., Сафаров И. М., Корзников А. В., Галеев Р. М., Гладковский С. В., Бородин Е. М. Влияние всесторонней изотермическойковки на структуру и свойства низкоуглеродистой стали 12ГБА // Письма о материалах. – 2012. – Т. 2, № 3. – С. 117–120..
- [32] Метлов Л. С. Двухуровневая неравновесная эволюционная термодинамика ИПД

// Вестник ДонГУ, Сер. А: Естественные науки. – 2009. – Т. 2. – С. 144–161..

- [33] Хоменко А. В., Трощенко Д. С., Бойко Д. В., Захаров М. В. Влияние внешнего периодического воздействия на кинетику фрагментации металлов при интенсивной пластической деформации // Ж. нано-электрон. физ. – 2015. – Т. 7, № 1. – С. 01039 (11 сс)..
- [34] Khomenko A. V., Troshchenko D. S., Metlov L. S. Thermodynamics and kinetics of solids fragmentation at severe plastic deformation // Condens. Matter Phys. – 2015. – Vol. 18, № 3. – P. 33004 (14 pp)..
- [35] Khomenko A. V. , Troshchenko D. S., Khomenko K. P., Solonar I. O. Phase diagram of metals fragmentation modes at severe plastic deformation // Proceedings of 2016 Int.Conf. on Nanomat.: App. and Prop.(NAP-2016), (Lviv, 14–19.09.16).–Sumy,P. 01PCSI07 (4 pp)..
- [36] Хоменко А.В., Трощенко Д.С., Кравченко Я.О., Хоменко М.А. Влияние аддитивного гаусового шума на фазовую диаграмму режимов фрагментации металла при интенсивной пластической деформации // Журнал нано- и электронной физики – 2017. – Т. 9, №. 3.- P.03045 (8pp).
- [37] Харченко Д. О. Методи описання і моделювання стохастичних систем: навчальний посібник. – Суми: Вид-во СумДУ, 2007. – 206 с..
- [38] Козлов Э. В., Попова Н. А., Конева Н. А. Закономерности пластической деформации ультрамелкозернистых металлических материалов // Деформация и разрушение материалов. – 2014. – Т. 56, № 8. – С. 2–7..
- [39] Risken H. The Fokker-Planck Equation. Methods of Solution and Applications. – Berlin: Springer-Verlag, 1989. – 454 p..
- [40] Хоменко А. В., Трощенко Д. С., Метлов Л. С. Моделирование кинетики режимов фрагментации материалов при интенсивной пластической деформации // Металлофиз. новейшие технол. – 2017. – Т. 39, № 2. – С. 265–284..
- [41] Хоменко А. В., Трощенко Д. С., Метлов Л. С. Фазовая динамика фрагментации металлов при мегапластической (интенсивной) деформации // Деформация и разрушение материалов. – 2017. – № 8. – С. 2–10..
- [42] Глезер А. М., Метлов Л. С. Физика мегапластической (интенсивной) деформации твердых тел // ФТТ. – 2010. – Т. 6, № 52. – С. 1090–1097..

- [43] Трощенко Д. С., Хоменко А. В. Modeling of the phase diagram and kinetics of materials fragmentation modes under severe plastic deformation // Материалы VIII Международной научно-инновационной молодежной конференции “Современные твердофазные технологии: теория, практика и инновационный менеджмент”, (Тамбов, 27-28 октября 2016). – Тамбов, 2016. – Т. 1. – С. 365–367.
- [44] Хорстхемке В., Лефевр Р. Индуцированные шумом переходы. Теория и применение в физике, химии и биологии. – Москва: Мир, 1987. – 400 с.
- [45] Press W. H., Flannery B. P., Teukolsky S. A., Vetterling W. T. Numerical Recipes in C: The Art of Scientific Computing – 2nd edn. – New York: Cambridge University Press, 2002. – 949 p.
- [46] Глезер А. М., Метлов Л. С. Физика мегапластической (интенсивной) деформации твердых тел // ФТТ. – 2010. – Т. 6, № 52. – С. 1090–1097..
- [47] Press W. H., Teukolsky S. A., Vetterling W. T., Flannery. B. P. Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing – 3rd edn. – New York: Cambridge university press, 2007. – 1256 p.
- [48] Гардинер К. В Стохастические методы в естественных науках. – Москва: Наука, 1985. – 526 с..
- [49] Kogan Sh. Electronic Noise and Fluctuations in Solids. – Cambridge: Cambridge University Press, 1996. – 374 p.
- [50] Box G. E. P., Jenkins G. M., Reinsel G. C., Ljung. G. M. Time Series Analysis: Forecasting and Control – 5th edn. – Wiley: Wiley Series in Probability and Statistics, 2015. – 712 p.
- [51] Козлов Э. В., Попова Н. А., Конева Н. А. Закономерности пластической деформации ультрамелкозернистых металлических материалов // Деформация и разрушение материалов. – 2014. – Т. 56, № 8. – С. 2–7..
- [52] Качанов Л.М., Основы теории пластичности. – М.: Наука, 1969 – 420 с..