

Вінницький національний технічний університет  
Факультет машинобудування та транспорту  
Кафедра галузевого машинобудування

Савуляк В. І.

Опорний конспект лекцій  
з дисципліни «Системний аналіз, моделювання та дослідження  
в задачах підвищення якості деталей машин»  
(Електронний варіант)

Рекомендовано методичною  
радою ФМТ  
Протокол засідання  
№ \_\_\_ від \_\_\_\_\_ 2021р.  
Голова методичної комісії  
\_\_\_\_\_ С. І. Сухоруков

Завідувач кафедри ГМ  
\_\_\_\_\_ Л .К. Поліщук  
Протокол засідання кафедри ГМ  
№ 1 від \_01.09. 2021 р.

Вінниця 2021

## ЗМІСТ

Вступ.....	3
..	5
1. Основні поняття системного аналізу.....	9
1.1. Система та її властивості.....	1
1.2. Система та її властивості.....	3
1.3. Класифікація систем.....	1
1.4. Властивості систем.....	4
2 ЛОГІКА СИСТЕМНОГО АНАЛІЗУ.....	1
2.1 Принципи системного підходу та типи структур.....	7
2.2 Аналітичний підхід в науковому пізнанні та практиці.....	2
3 МЕТОДОЛОГІЯ ТА МОДЕЛЮВАННЯ СИСТЕМ.....	0
4 КЛАСИФІКАЦІЯ ПРОБЛЕМ, З ЯКИМИ ЗІШТОВХУЄТЬСЯ СИСТЕМНИЙ АНАЛІЗ.....	2
4.1 Недоліки та переваги системного аналізу.....	2
5 ТЕРМОДИНАМІЧНІ МЕТОДИ МОДЕЛЮВАННЯ СИСТЕМ. ФІЗИКО-ХІМІЧНІ ОСНОВИ.....	5
5.1 Вільна енергія сплавів.....	3
5.2 Концентраційна залежність вільної енергії бінарних сплавів.....	3
6 СТАБІЛЬНІСТЬ СИСТЕМИ КОМПОЗИЦІЙНЕ ЗНОСОСТІЙКЕ ПОКРИТТЯ – ОСНОВА.....	3
6.1. Дислокаційна структура та її вплив на стабільність композиційного матеріалу.....	4
7 ТЕРМОДИНАМІКА СИСТЕМ З НЕПЕРЕРВНИМ РОЗШАРУВАННЯМ.....	4
7.1 Термодинамічні моделі неперервного розшарування.....	6
7.2 Критерій існування області спінодального розпаду пересичених розчинів.....	0
7.3. Можливість існування області спінодального розпаду в системі Fe-C.	6
	9

7.4 Спінодальне розшарування в системі залізо – цементит.....	7 1
7.5. Деякі питання термодинаміки систем Fe-C- <i>i</i> , де <i>i</i> - третій сильно ліквуючий компонент.....	7 3
7.6. Стабільність карбідів в поверхневих шарах деталей із залізовуглецевих сплавів.....	7 8
Література.....	8 3 9 3

## Вступ

Системний аналіз - науковий метод пізнання, що являє собою послідовність дій з установлення структурних зв'язків між змінними або елементами досліджуваної системи. Спирається на комплекс загальнонаукових, експериментальних, природничих, статистичних, математичних методів.

Єдиної методики системного аналізу у наукових дослідженнях поки що немає. У практиці досліджень він застосовується з використанням таких методик:

- процедур теорії дослідження операцій, яка дає змогу дати кількісну оцінку об'єктам дослідження;
- аналізу систем дослідження об'єктів в умовах невизначеності;
- системотехніки, яка включає проектування і синтез складних систем у процесі дослідження їх функціонування (проектування і оцінка економічної ефективності АСК технологічних процесів та ін.).

Сучасний системний аналіз - прикладна наука, яка орієнтована на прояснення причин виникнення проблем і на формування варіантів їх усунення. Системний аналіз - сукупність методологічних засобів, які використовуються для підготовки та обґрунтування рішень зі складних проблем політичного, військового, соціального, економічного, технічного і наукового характеру. Основою є системний підхід і ряд методів, математичних дисциплін та сучасної теорії управління. Основна процедура - побудова узагальненої моделі, що відображає взаємозв'язки реальної ситуації. Технічною основою є ЕОМ та інформаційні системи.

Виникнення «системного аналізу» пов'язане з необхідністю проведення комплексних досліджень при:

- створенні складних технологічних і виробничих комплексів;
- створенні складних систем управління ними;
- синтезі та аналізі нових матеріалів тощо.

Системний аналіз - дисципліна, яка займається проблемами прийняття рішень в умовах, коли вибір альтернативи потребує аналізу складної інформації різної фізичної природи. Результатом системних досліджень є вибір конкретної альтернативи, наприклад, план розвитку, параметри конструкції, структура та склад матеріалів тощо.

*Основне завдання дисципліни:* показати, як різні знання (математика, фізика твердого тіла, матеріалознавство, теорія управління, методи оптимізації ...), можуть слугувати вирішенню складних прикладних задач, а системний інтегратор стає однією з головних дійових осіб, архітектором, конструктором складних систем. Для конструювання і дослідження складних систем немає наборів рецептів, є лише методологія.

Методи системного аналізу для вирішення складних комплексних проблем застосовуються з урахуванням того, що в процесі прийняття рішень вибір необхідно робити в умовах невизначеності. Процес системного аналізу по кожній проблемі можна розділити на чотири стадії:

- постановка проблеми, визначення мети і критеріїв оцінки;
- структурний аналіз досліджуваної системи;

- розробка концепції розвитку системи та підготовка можливих варіантів;
- безпосередній аналіз відібраних варіантів рішень та їх наслідків за допомогою ПЕОМ.

Витоки системного аналізу, методичних концепцій лежать в дисциплінах, які займаються проблемами прийняття рішень - теорії дослідження операцій та загальної теорії управління. Проектування складних систем управління поділяють на дві стадії: макропроектирування (зовнішнє), коли методами системотехнічного і синтезу вирішуються завдання функціонально-структурного характеру; мікропроектирування, коли розробляються технічні рішення в рамках проекту системи.

Для фахівців з автоматизації виробництва часто найбільш відповідальним етапом є початок розробки систем - аванпроектирування (вибір структури, технічних засобів, програмного забезпечення ...). Від цього залежить цілий ряд аспектів в майбутньому, в тому числі вартість розробки та експлуатації.

Системний аналіз виник у відповідь на вимоги практики, що поставила перед людством необхідність вивчати та проектувати складні системи, управляти ними в умовах неповної інформації, обмеженості ресурсів, дефіциту часу. СА - це особливий тип науково - технічного мистецтва, що виникає внаслідок органічної єдності суб'єктивного і об'єктивного, а тому досвідчений дослідник досягає значних результатів. Системний аналіз дозволяє розробити більш гнучку та ефективну теоретичну структуру, ніж той рівень теоретичного аналізу, який досяжний в рамках добре розвиненого рівноважного підходу. Для успішного застосування СА повинен базуватися на певному теоретичному фундаменті, а з іншого боку успішні приклади застосування СА повинні служити прикладами для наслідування. Перед усім, основним і найбільш цінним результатом системного аналізу визнається не кількісна визначеність рішення проблеми, а покращення її розуміння і виявлення суті різних шляхів рішення. Це розуміння і альтернативні рішення проблеми виробляються спеціалістами і експертами та надаються відповідальним людям для їх конструктивного обговорення.

СА - це методологія дослідження таких властивостей та відношень в об'єктах, що важко спостерігаються та важко розуміються, за допомогою представлення цих об'єктів у вигляді цілеспрямованих систем та вивчення властивостей цих систем та взаємних відношень як відношень між цілями та засобами їх досягнення. Метою застосування СА до конкретної проблеми є підвищення ступеня обґрунтованості рішення, що приймається. Сила СА в тому, що він дозволяє розкласти складну проблему на компоненти аж до постановки конкретних задач. СА застосовується для розв'язання складних проблем, що пов'язані з діяльністю людей.

## 1. Основні поняття системного аналізу

Фундаментальним поняттям системного аналізу і таких засадних теоретичних дисциплін, як теорія систем, кібернетика, дослідження операцій, є поняття «система». Незважаючи на інтуїтивну зрозумілість та велику важливість цього терміна для наукових досліджень, донині не існує загальноприйнятого його визначення.

Огляд різних трактувань поняття «система» показує, що можна виділити такі основні пов'язані з ним змістові аспекти:

- найпоширенішим, але й найвужчим є «інженерне» розуміння системи як взаємозв'язаного набору елементів та способів їх з'єднання, які слугують певній меті;
- у «конструкторському» розумінні «система» подається як проектування та створення певного комплексу методів і засобів, які дослідник або розробник застосовує для досягнення певної мети, для виконання свого завдання;
- в науково-дослідницькому трактуванні «система» уявляється як загальна методологія дослідження процесів і явищ, що відносяться до певної галузі людських знань;
- у теоретико-пізнавальному аспекті «система» розуміється як спосіб мислення.

У науковій літературі є багато визначень поняття «система», що відносяться як до загальних, так і до конкретних систем різних видів.

У перших визначеннях у тій чи іншій формі зазначалось, що система — це елементи та зв'язки між ними. Так, наприклад, основоположник теорії систем Людвіг фон Берталанфі визначав систему як комплекс взаємодіючих елементів, що перебувають у певних відношеннях між собою та зовнішнім середовищем.

Пізніше при визначенні цього терміна стало з'являтися поняття цілі. Так, у філософському словнику система визначається як «сукупність елементів, що знаходяться у відношеннях та зв'язках між собою певним чином та утворюють деяку єдність цілей». Останнім часом при визначенні системи поряд із елементами, зв'язками, їх властивостями та ціллю почали включати спостерігача, хоча на необхідність врахування взаємодії між дослідником та досліджуваною системою вказував ще один із основоположників кібернетики У. Р. Ешбі.

Зауважимо, що у різних визначеннях поняття «система» є багато спільного та взаємно доповняльного, тому краще використовувати найширше з них:

- наявність об'єкта, який являє собою множину підоб'єктів (або наявність множини об'єктів, які можуть розглядатися як один складний об'єкт);
- наявність суб'єкта дослідження, який називається спостерігачем;
- наявність завдання, яке визначає відношення спостерігача до об'єкта і є критерієм, за яким здійснюється відбір об'єктів та їх властивостей;
- наявність зв'язку між об'єктом, спостерігачем та завданням, що виражається у наявності певної мови описування.

Перші три умови утворюють єдність, що забезпечується наявністю мови, в якій проявляється їх взаємозв'язок. Це схематично показано на рис. 1.



Рисунок 1 - Умова існування системи

Тоді формально визначення системи можна виразити символами:

$$S \longrightarrow l^n \Omega(e,r)^p$$

де  $S$  — система,  $n$  — спостерігач,  $l$  — мова описування,  $p$  — завдання,  $e$  — множина підоб'єктів,  $r$  — множина відношень між ними,  $\Omega$  — оператор відображення.

У такий спосіб система  $S$  буде являти собою відображення властивостей підоб'єктів  $e$  та їх відношень  $r$  для  $n$  по  $p$  в  $l$ .

У теоретико-пізнавальному аспекті можна виділити три можливі аспекти розгляду систем:

1) система розглядається як взаємопов'язаний комплекс матеріальних об'єктів (такий підхід зручний, головне, при дослідженні природних об'єктів або процесів матеріального виробництва);

2) система включає, з одного боку, набір матеріальних об'єктів, а з іншого — інформацію про їхній стан (такий підхід застосовується при описуванні процесів управління матеріальним виробництвом);

3) система розглядається чисто в інформаційному аспекті як комплекс відношень, зв'язків, інформації (такий підхід прийнятий у теоретичних дослідженнях, за описування соціальних відносин та процесів управління).

Кожний із цих підходів потребує відповідного специфічного наукового інструментарію для розв'язання трьох різних видів завдань.

Системи оточують нас всюди: кожен предмет, явище, процес — це системи. Наприклад, системами є живі організми, технічні пристрої тощо. Безумовно, системами є фірми, корпорації, організації, банки, галузі економіки та вся економіка в цілому.

Розглянемо інші основні поняття, які використовуються при дослідженні систем.

Підсистемою називають сукупність елементів, які об'єднані єдиним процесом функціонування та при взаємодії реалізують певну операцію, що необхідна для досягнення поставленої перед системою в цілому мети. Надсистемою називають ширшу систему, в яку входить досліджувана система як складова частина.

Елементом системи називають її частину, яка виконує специфічну функцію і є неподільною з погляду завдання, що розв'язується. Внутрішня структура елементів не є предметом системного аналізу. Важливі лише властивості елемента, які визначаються його взаємодією з іншими елементами системи та справляють вплив на поведінку системи.

Стосовно матеріалознавства ми можемо розглядати сплав як систему, що складається з елементів, які мають комплекс властивостей. Елементами при цьому можуть виступати хімічні елементи з їх фізико-хімічними властивостями або частина елементів системи може бути хімічними сполуками.

Слід зауважити, що поділ системи на елементи та саме поняття елемента є певною мірою відносними й умовними. Для прикладу звернемо увагу на хімічні сполуки у метали, які є для нього елементами, а з іншого боку самі є системою. Тобто дані хімічні сполуки можна розглядати також як підсистеми.

Між елементами довільної системи та між різними системами існують зв'язки, за допомогою яких вони взаємодіють між собою. Ці зв'язки можуть виражатися в обміні речовиною, енергією чи інформацією між взаємодіючими системами або елементами. Система може мати зовнішні та внутрішні зв'язки. Зв'язки можуть бути також як прямими, так і зворотними.

Системи мають зовсім нові якості, які відсутні у її елементах. Ці якості виникають саме завдяки наявності зв'язків між елементами. Саме за допомогою зв'язків здійснюється перенесення властивостей кожного елемента системи до інших елементів.

Зворотні зв'язки є складною системою причинної залежності та полягають у тому, що результат попередньої дії впливає на наступний перебіг процесу в системі: причина підпадає під вплив зворотного впливу наслідку. Якщо зворотний зв'язок підсилює результат впливу наслідку, то його називають позитивним, а якщо послаблює — негативним. Негативні зворотні зв'язки сприяють збереженню стійкості системи. Тільки завдяки наявності зворотних зв'язків у системах можуть відбуватися процеси цілеспрямованої діяльності та регулювання.

Зв'язки перетворюють систему з простого набору компонентів у єдине ціле і разом з компонентами визначають стан та структуру системи, безумовно при визначальному впливі функції.

Важливими для описування систем є поняття структури та ієрархії. Під структурою системи розуміють її стійку впорядкованість та зв'язки між елементами і підсистемами. Структура відбиває найсуттєвіші зв'язки між елементами та підсистемами, які мало змінюються при змінах у системі та забезпечують існування системи і найважливіших її властивостей. Для визначення структури системи необхідно провести її послідовну декомпозицію, тобто виділити в ній підсистеми всіх рівнів, доступних аналізу, та їх елементи, які відповідно до завдань дослідження не поділяються на складові частини. Завдяки ієрархічності структура складних систем може бути подана через структуру їх частин — від підсистем до елементів.

Структуру системи можна зобразити графічно, у вигляді опису, матриць або іншими способами.



Під ієрархією системи розуміють розташування її підсистем або елементів за певним порядком від вищого до нижчого.

Головним системоутворювальним фактором є її функція. Існує кілька поглядів з приводу того, що являє собою функція системи. Так, під функцією системи можна розуміти перетворення її входів у виходи. З іншого погляду функція системи може полягати у збереженні її існування, підтримці її структури та впорядкованості (довговічність, зносостійкість деталі, вузла, машини). Іноді функцію системи ототожнюють із функціонуванням цієї ж системи, визначаючи її як спосіб, засіб або як дії для досягнення цілі системи.

Системи функціонують у певному зовнішньому середовищі. Зовнішнє середовище — це все те, що знаходиться зовні системи, включаючи необхідні умови для існування та розвитку системи. Зовнішнє середовище складається із ряду природних, штучних, суспільних, інформаційних, економічних, виробничих та інших факторів, що впливають на систему та самі певною мірою перебувають під впливом цієї системи.

Взаємодія між системою та зовнішнім середовищем здійснюється за допомогою входів та виходів. Вхід системи — це дія на неї зовнішнього середовища. Вихід системи — результат функціонування системи для досягнення певної мети або її реакція на вплив зовнішнього середовища. Загальна кількість взаємодій системи з зовнішнім середовищем дуже велика, тому на практиці обмежуються аналізом найсуттєвіших зв'язків, вибір яких визначається конкретними умовами управління тим чи іншим об'єктом.

Окрім функції система може мати ціль. Ціль системи — це бажаний стан її виходів. Системи, що мають ціль, називають цілеспрямованими. Будь-які соціально-економічні системи є цілеспрямованими, бо їх елементами є люди. Отже, у загальному вигляді систему (з контуром зворотного зв'язку) можна зобразити графічно у такий спосіб (рис. 2):

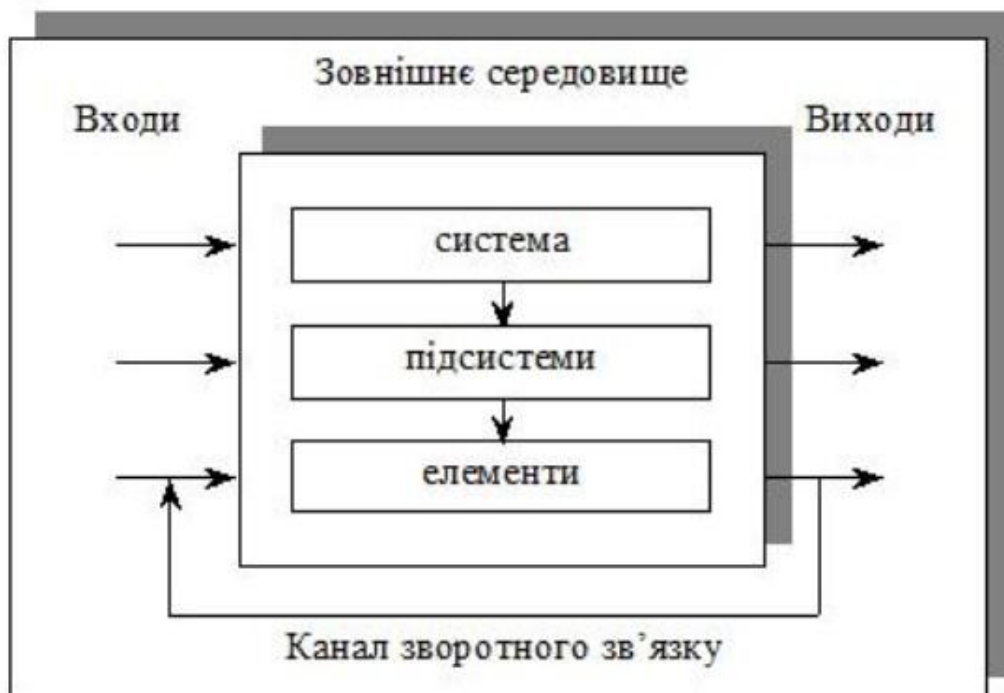


Рис.1. 2 – Графічне зображення системи

Стан системи характеризується кількісними та якісними значеннями внутрішніх параметрів (змінних) системи в даний момент. Функціонування системи або зміну станів системи у часі називають поведінкою або рухом. Отже, поведінка системи — це розгорнута у часі послідовність реакцій системи на внутрішні зміни та зовнішній вплив.

Рівновага — це здатність системи зберігати свій стан як можна довше (як за відсутності, так і за наявності зовнішніх збурюючих впливів).

Під стійкістю розуміють здатність системи повертатися в стан рівноваги після виведення її з цього стану впливом зовнішніх збурень. Стан рівноваги, у який система здатна повертатися, називають стійким станом рівноваги.

Важливе значення в системному аналізі має поняття управління. Управління системою необхідне для забезпечення її цілеспрямованої поведінки при зміні умов зовнішнього середовища або умов її функціонування. Управління досягається за рахунок відповідної організації системи, під якою розуміють її структуру та спосіб функціонування. Системи з управлінням, називають кібернетичними системами.

Отже, об'єктивною основою формування системи є проблемна ситуація, тобто такий незадовільний стан елементів зовнішнього середовища, який середовище власними засобами (сукупністю систем зовнішнього середовища) на даному етапі не в змозі нормалізувати.

## **1.2. Система та її властивості**

Термін "система" використовується у тих випадках, коли треба охарактеризувати об'єкт, який досліджується чи проектується як дещо ціле, складне, про який неможливо одразу дістати просте уявлення.

Існує понад 30 визначень системи. В енциклопедії система визначається прямим перекладом з грецької мови як об'єднання частин. Найбільш відомі визначення системи такі:

Система - це множина елементів, що знаходяться в певних співвідношеннях і зв'язках один з одним, взаємодіють між собою, утворюють певну цілісність, як ціле взаємодіють із навколишнім середовищем.

Система - це сукупність елементів, яка має нові властивості, відсутні у кожного елемента.

Система - це сукупність засобів вирішення проблеми.

Ці та інші визначення системи характеризують різні підходи до розгляду систем, аналізу закономірностей їх розвитку та функціонування.

Розрізняють матеріальні й абстрактні (ідеальні) системи.

Матеріальні системи - це системи, утворені засобами матеріального світу. Системи неживої природи (природні утворення: атоми, молекули, астрономічні об'єкти, хімічні сполуки та системи, створені людиною), системи живої природи (біологічні організми, популяції, екосистеми) і соціальні системи (етнос, нація, держава, партії та ін.).

Матеріальні системи можуть бути створені людьми або природними утвореннями, які існують незалежно від людини. Перші системи називають

штучними, другі природними. Проміжне положення займають змішані системи.

Абстрактні (ідеальні) системи - це системи, створені нашим мисленням, продукти розумової діяльності. До них відносяться мови, знакові системи, наукові й релігійні теорії тощо.

Поняття "система" найкраще конкретизується у процесі розгляду її властивостей. В.Н Спіцнандель у своєму підручнику [3] виділяє чотири основні властивості системи, а саме:

- система перш за все є сукупністю елементів. При певних умовах елементи можуть розглядатись як системи;

- між елементами існують суттєві зв'язки чи властивості, які за силою зв'язку перевищують зв'язки між елементами системи та елементами, які не входять у систему. Під суттєвими зв'язками розуміють такі, які закономірно з необхідністю визначають інтегровані властивості системи. Ці суттєві зв'язки визначають систему, відділяючи її від простої сукупності (конгломерату) і виділяють її з навколишнього середовища у вигляді цілого об'єкта;

- системі властива певна організація, що виявляється у зменшенні ентропії системи в порівнянні з ентропією сукупності елементів, які складають систему. Поняття ентропії більш детально розглядається далі. Воно визначає ступінь неорганізованості, безладу, хаосу. Організація системи приводить до зменшення безладу, зменшення кількості можливих станів системи;

- існування інтеграційних властивостей, тобто властивостей, які властиві системі в цілому і не властиві жодному елементу системи. Тобто властивості системи не зводяться тільки до властивостей її елементів.

Розглянемо більш детально ці властивості системи і виділимо основні ознаки. Такими ознаками системи є.

- цілісність;
- якісна визначеність;
- відмежованість відносно середовища;
- гетерогенність і структурованість;
- взаємодія частин системи між собою;
- взаємодія і зв'язок з навколишнім середовищем;
- наявність інтегральних характеристик;
- емержентність;
- наявність цілей та їх сукупності, ціленаправленість.

Наведемо в загальних рисах короткі характеристики вказаних ознак системи.

Цілісність означає, що система - це об'єднання частин, яке по відношенню до навколишнього оточення виступає як одне ціле.

Під якісною визначеністю розуміють, що система - це така сукупність елементів, яка має свої якісні ознаки, характерні тільки для даної системи і відсутні в інших системах. Ці ознаки проявляються тільки у даній системі. Вони визначають відношення до інших систем. Наприклад, система "автомобіль" має якісні ознаки, які характеризують його в цілому. Такими ознаками є: маса, потужність, швидкість, габаритні розміри, комфортність, естетичність та

багато інших. Якісні ознаки іншої системи, наприклад, тролейбуса, можуть бути зовсім іншими: споживання електроенергії, маневреність, місткість тощо. Тобто система є цілісністю, що має властиві тільки їй якісні ознаки, за якими вона відрізняється від інших систем. Якість здебільшого може бути виражена кількісними величинами, наприклад, місткість тролейбуса 105 пасажирів. Але наявність кількісного визначення не обов'язкова, наприклад, якісна ознака естетичності не може бути виражена кількісно.

Відмежованість системи від середовища означає, що всяка система має свої границі. Границі відділяють систему від навколишнього середовища. Вони визначають, що входить в систему і що в неї не входить, є зовнішнім по відношенню до системи. Переважна більшість систем має чіткі границі. Проте границі системи не завжди можуть визначатися однозначно. Деколи визначити границі дуже складно. Наприклад, визначення границь системи "річка": входять у систему її береги, чи "річка" закінчується там, де протікає вода? Якщо берег входить в систему, то на якій відстані від води проходить границя системи "річка"? На відстані 1 м, 10 м чи 100 м? А пойма річки входить в систему чи ні? Де її границя? Отже, навіть таке просте поняття, як визначення границь системи має особливості і їх необхідно враховувати при визначенні та дослідженні систем. Це стосується й інших характеристик системи.

Гетерогенність системи і структурованість. Під гетерогенністю розуміють неоднорідність, те, що система складається з різних частин. У визначенні системи вказано, що система це сукупність елементів. Але система - це не проста сукупність. Структурованість означає, що система є певним чином організованою сукупністю, має певну структуру. Всяка система також має певну структуру. Ця структура забезпечує об'єднання елементів системи таким чином, щоб дане об'єднання мало свою якісну визначеність, цілісність.

Гетерогенність поняття більш вузьке, воно просто означає неоднорідність складу, наявність складових частин. Наприклад, система "тролейбус" має такі частини, як двигун, ходова частина, кузов, електрообладнання тощо. Двигун, ходова частина складаються з окремих вузлів, а кожен вузол з окремих деталей. Така будова системи "тролейбус" відповідає поняттю структурованості.

Взаємодія частин системи між собою означає, що в системі частини взаємодіють між собою і тільки у даній взаємодії вони утворюють певну систему. З наведеного прикладу зрозуміло, що тролейбус буде системою тоді, коли складові його частини: двигун, ходова частина, електрообладнання певним чином взаємодіють між собою. Причому ця взаємодія однозначна, визначена, обумовлена в найдрібніших деталях.

Взаємодія з навколишнім середовищем означає, що система як ціле взаємодіє з іншими системами. Це зумовлене цілісністю системи, її якісною визначеністю. Під час взаємодії з навколишнім середовищем виявляються властивості системи. За характером взаємодії розрізняють відкриті й закриті системи. Відкрита система - це система, яка активно обмінюється з навколишнім середовищем речовиною, енергією та інформацією. У закритій системі такий

обмін обмежений або відсутній. Поняття відкритості системи має велике значення при вивченні питання розвитку й життєвого циклу системи. Для закритих систем характерні процеси старіння. У термодинаміці - дисципліні, що вивчає явища передачі енергії, процеси старіння визначаються зростанням ентропії. Ентропія - це характеристика, яка показує ступінь безладу системи, її неупорядкованість, хаотичність. Відповідно до другого начала термодинаміки в усіх закритих системах ентропія може тільки зростати. У результаті цього закриті системи прагнуть до дифузного, неупорядкованого стану. У них зникає будь-яка структурованість, зникають будь-які процеси передачі енергії, матерії. Цей стан називають "тепловою смертю". Зростання ентропії - універсальний закон природи, яким зумовлені процеси старіння, розпаду, загибелі замкнених систем. На відміну від замкнутих систем у відкритих системах крім процесів зростання ентропії є процеси, які приводять до її зменшення, до зростання організованості й впорядкованості системи.

Під поняттям інтегрованості розуміють, що в системі властивості окремих елементів об'єднуються і виступають разом у новій якості.

Емерджентність - це поява нових якостей, не властивих елементам, що складають систему.

Кожна система є сукупністю певних частин, певних елементів. Особливістю системи є те, що в результаті об'єднання декількох елементів і утворення системи з'являються нові властивості, яких не має жоден елемент до створення системи. Ця властивість системи і називається емерджентністю. Емерджентність (від англ. emergent - несподіване виникнення) визначає, що властивості системи не зводяться до властивостей елементів, з яких вона складається. Емерджентність системи може характеризувати ступінь організованості системи. Чим більше характеристики системи відрізняються від характеристик елементів, з яких вона утворена, тим більш організованою є система. Щоправда, величина емерджентності не має числового вираження і характеристика може бути тільки якісною. Наприклад, властивості автомобіля не зводяться до властивостей двигуна, кузова, ходової частини. У нього з'являється ряд нових якісних ознак, відмінних від ознак складових частин. Ще один приклад. Досить високо організованою системою є комп'ютер. Його властивості суттєво відрізняються від властивостей елементів, які входять до його складу, а саме мікросхем, вимикачів, елементів пам'яті, з'єднувальних провідників тощо. Якщо брати живі організми, то ступінь їх організованості значно вищий, оскільки неможливо звести характеристики до характеристик окремих частин організму.

Наявність цілей, ціленаправленість - одна з головних ознак системи. Кожна система має певну ціль існування або створена для певної цілі. У системі може бути одна ціль або сукупність цілей. У випадку сукупності цілей всі вони утворюють певну ієрархію, в якій є головні, першочергові цілі й другорядні, підпорядковані головним. Визначення цілей системи є завданням, що має свої особливості. Цілі по-різному визначаються для систем штучного походження й природних систем.

Штучні системи, системи, створені людиною, завжди мають суб'єктивні цілі, тобто цілі, поставлені суб'єктом, який створив систему. Визначити цілі таких систем, як правило, неважко. Наприклад, телевізор створений для прийому та відображення інформації. Автомобіль створений для перевезення людей і вантажів. Автобус, трамвай, тролейбус, метрополітен, таксі служать одній цілі — перевезенню людей, але вони мають свої особливості, служать для чого інших цілей, відмінних для кожного з вказаних видів транспорту. Досить точно та однозначно сформулювати ціль штучних систем подекуди буває важко.

Природні системи мають об'єктивні цілі. Зрозуміти ці цілі не завжди просто. Ще важче їх сформулювати. Наприклад, як сформулювати ціль існування людини? Під час вирішення питання визначення цілей системи допомагає поділ цілей на суб'єктивні й об'єктивні. Суб'єктивні цілі - це цілі, для яких створена система певним суб'єктом. Об'єктивні цілі - це стан ідеального майбутнього, до якого прагне система в своєму життєвому циклі. Як правило, таким майбутнім є продовження роду, зростання, розвиток системи. Структура системи, її склад, взаємодія частин завжди визначаються ціллю системи.

### **1.3. Класифікація систем**

Залежно від мети дослідження та враховуючи велике різноманіття систем можна обрати різні принципи та підходи до їх класифікації. При цьому систему можна характеризувати однією чи кількома ознаками.

Так, за походженням, розрізняють природні системи, які існують в об'єктивній дійсності — біологічні, фізичні, хімічні тощо (атом, молекула, організм, популяція, суспільство — приклади таких систем) та штучні — системи, які створені людиною. Вони включають як різноманітні технічні системи (від простих механізмів до найскладніших виробничих комплексів та інформаційних систем), так і організаційні системи, що складаються з груп людей, діяльність яких свідомо координується для досягнення певної мети або виконання деяких функцій (наприклад, система управління підприємством, система державного управління).

За взаємодією із зовнішнім середовищем розрізняють замкнені та відкриті системи. Замкнена система характеризується високим рівнем незалежності від навколишнього середовища (наприклад, годинник). Відкрита система активно взаємодіє із зовнішнім середовищем, що полягає в обміні речовинами, енергією, інформацією. Безумовно, значна більшість систем, особливо економічних, є відкритими, наприклад країна, суспільство, людина, фірма, організація тощо.

Розрізняють статичні та динамічні системи. У статичній системі фіксуються статичні взаємовідношення на певний момент. Статичні системи не змінюють своїх характеристик в часі. Опис структури статичної системи є початком систематизованого дослідження в довільній галузі науки. Системи статичної структури корисні для створення теоретичної бази з метою подальшого аналізу та синтезу систем. Якщо система переходить із часом від одного стану до іншого, то такі системи називають динамічними.

Системи поділяються також на детерміновані та стохастичні. У детермінованих системах перехід з одного стану в інший (тобто поведінка системи) є визначеним. На відміну від детермінованих систем рух (розвиток) стохастичних систем не є чітко визначеним та розглядається як випадковий процес.

Важливою класифікаційною ознакою систем є їх складність. Але й досі нема чіткого критерію визначення складності системи. Тому будемо розрізняти прості, складні та дуже складні системи. Ознакою простої системи може бути порівняно невеликий обсяг інформації, що необхідний для її описування та управління. Під дуже складними розуміють системи, стан яких неможливо достатньо вичерпно та точно описати. Приклади дуже складних систем: людина, корпорація з чисельністю співробітників понад 15 тис., композиційний матеріал значного обсягу.

Розрізняють також великі системи — системи, моделювання яких ускладнено внаслідок їх розмірності, хоча часто в літературі поняття складної та великої системи ототожнюють.

#### **1.4. Властивості систем**

Аналіз різноманітних тлумачень терміна «система» свідчить, що можна виділити такі головні групи притаманних системам властивостей, що характеризують:

- сутність та складність систем;
- зв'язок систем із зовнішнім середовищем;
- цілеспрямованість систем;
- параметри розвитку та функціонування систем.

Зупинимося на найважливіших властивостях систем.

**Цілісність та подільність.** Система є, передусім, цілісною сукупністю елементів. Це означає, що, з одного боку, система — це цілісне утворення, а з іншого — в її складі чітко можуть бути виділені окремі цілісні об'єкти (елементи). Але не компоненти утворюють ціле (систему), а навпаки, при поділі цілого виявляють компоненти системи. Первинність цілого — головний постулат теорії систем.

**Неадитивність** системи (емерджентність). Властивості системи хоча і залежать від властивостей елементів, але не визначаються ними повністю. Функціонування системи не може бути зведено до функціонування окремих її компонентів. Сукупне функціонування взаємозв'язаних елементів системи породжує якісно нові функціональні властивості системи. Звідси випливає важливий висновок: система не зводиться до простої сукупності елементів; розділяючи систему на частини, досліджуючи кожну з них окремо, неможливо пізнати всі властивості системи в цілому. Цю властивість ще називають системною, або інтегративною.

**Емерджентність** є результатом виникнення між елементами системи так званих синергічних зв'язків, які забезпечують загальний ефект функціонування системи, більший, ніж сума ефектів елементів системи, діючих незалежно.

**Синергетика** — науковий напрямок, що вивчає зв'язки між елементами структури (підсистемами), які утворюються у відкритих системах (біологічних, фізико-хімічних, економічних та інших) завдяки інтенсивному (потоківому) обміну речовинами й енергією з навколишнім середовищем за нерівноважних умов. Теоретичні засади синергетики — термодинаміка нерівноважних процесів, теорія випадкових процесів, теорія нелінійних коливань і хвиль.

У складних системах спостерігається погоджена поведінка підсистем, у результаті чого зростає рівень її впорядкованості (явище самоорганізації), тобто зменшується ентропія. Це, зокрема, стосується економічних систем. Результатом самоорганізації стає виникнення взаємодії (наприклад, кооперація) і, можливо, регенерація динамічних об'єктів (підсистем), складніших в інформаційному аспекті, ніж елементи (об'єкти) середовища, з яких вони виникають.

Спрямованість процесів самоорганізації обумовлена внутрішніми властивостями об'єктів (підсистем) у їх індивідуальному і колективному прояві, а також впливами з боку середовища, у яке «занурена» система. Але поведінка елементів (підсистем) і системи в цілому істотно характеризується спонтанністю — акти поведінки не є строго детермінованими.

**Ієрархічність** системи — це складність структури системи, яка характеризується такими показниками: кількістю рівнів ієрархії управління системою, різноманіттю компонентів та зв'язків, складністю поведінки та неадитивністю властивостей, складністю опису та управління системою, кількістю параметрів та необхідним обсягом інформації для управління системою. Ієрархічність системи також полягає у тому, що систему можна розглядати як елемент системи вищого порядку (надсистеми), а її елементи — як системи.

**Взаємозалежність** між системою та зовнішнім середовищем. Система формує та проявляє свої властивості при взаємодії із зовнішнім середовищем. Вона розвивається під впливом зовнішнього середовища, але при цьому намагається зберегти якісну визначеність та властивості, що забезпечують відносну стійкість та адаптивність її функціонування.

**Рівень самостійності та відкритості** системи визначається такими показниками: кількістю зв'язків системи із зовнішнім середовищем у середньому на один її елемент чи інший параметр; інтенсивністю обміну інформацією чи ресурсами між системою та зовнішнім середовищем; ступенем впливу інших систем.

**Цілеспрямованість** системи означає наявність у неї цілі.

**Надійність** системи (наприклад, організації) характеризується, зокрема: безперебійністю функціонування системи при виході із ладу одного із компонентів; фінансовою стійкістю та платоспроможністю організації; перспективністю запровадженої економічної, технічної, соціальної політики.

**Розмірність** системи — кількість компонентів системи та зв'язків між ними.

## **Висновки**



Фундаментальним поняттям системного аналізу і таких засадних теоретичних дисциплін, як теорія систем, кібернетика, дослідження операцій, є поняття «система». Незважаючи на інтуїтивну зрозумілість та велику важливість цього терміна для наукових досліджень, донині не існує загальноприйнятого його визначення.

Залежно від мети дослідження та враховуючи велике різноманіття систем можна обрати різні принципи та підходи до їх класифікації. При цьому систему можна характеризувати однією чи кількома ознаками.

Аналіз різноманітних тлумачень терміна «система» свідчить, що можна виділити такі головні групи притаманних системам характерних властивостей: сутність та складність систем; зв'язок систем із зовнішнім середовищем; цілеспрямованість систем; параметри розвитку та функціонування систем.

## Тема 2

### ЛОГІКА СИСТЕМНОГО АНАЛІЗУ

Системний аналіз - це взаємопов'язаний логіко-математичний та комплексний розгляд всіх питань, що відносяться не тільки до задуму, розробки та експлуатації але і до методів керівництва всіма цими етапами з урахуванням соціальних, політичних, стратегічних, психологічних, правових, географічних, демографічних, військових та інших аспектів.

Поняття "системний" використовується тому, що дослідження такого роду в своїй основі будується на використанні категорії системи.

З одного боку, системою називається та фізична реальність, по відношенню до якої необхідно прийняти рішення (будь-які природні та штучні об'єкти).

З іншого боку, в процесі системного аналізу створюється абстрактна і концептуальна система, що описується за допомогою символів або інших засобів, що являє собою певний структурно-логічний пристрій, мета якого - служити інструментом для розуміння, опису та якомога повнішої оптимізації поведінки зв'язків та відносин елементів реальної фізичної системи. Такого роду абстрактної системою може бути математична, машинна або словесна модель або система моделей і т.д. У фізичній та відповідній їй абстрактній системах повинно бути встановлено взаємооднозначне співвідношення між елементами і їхніми зв'язками. У цьому випадку виявляється можливим, не вдаючись до експериментів на реальних фізичних системах, оцінити роботу робочі гіпотези щодо доцільності тих чи інших дій, користуючись відповідної абстрактної системою, і виробити найбільш рекомендований.

Термін «аналіз» використовується для характеристики самої процедури проведення дослідження, яка перебуває в тому, щоб розбити проблему в цілому на її складові частини, більш доступні для рішення, використовувати найбільш підходящі спеціальні методи для вирішення окремих підпроблем і, нарешті, об'єднати приватні рішення так, щоб було побудовано спільне рішення проблеми. Очевидно, що найбільш ефективно аналіз може бути проведений лише на основі системного підходу, який передбачає не тільки органічне поєднання аналітичного розчленування проблем на частини і дослідження зв'язків і відносин між цими частинами, але також робить особливий наголос на розгляд цілей і задач, загальних для всіх частин, і відповідно до цього здійснюється синтез спільного рішення з приватних рішень. По суті справи, в системному аналізі методи аналізу і синтеза взаємно переплітаються, при здійсненні аналітичної процедури постійно звертається увага на способи об'єднання окремих результатів в єдине ціле і вплив кожного з елементів на інші елементи системи.

Сьогодні «системний аналіз» в цілому тлумачиться так широко і невідзначено, що практично не може бути реалізований в конкретних дослідженнях. І мабуть, не випадково, що сьогодні ще немає можливості підібрати приклад досить великого завершеного системного дослідження.

Торкаючись різних точок зору на термін «системний аналіз», фахівці виділяють два різних підходи.

Прихильники першого з них роблять наголос на математику, тобто на опис складної системи за допомогою формальних засобів (блокових діаграм, мереж, математичних рівнянь). На основі такого роду формального опису часто ставиться математична задача на відшукування оптимального проекту системи або найкращої складової режиму її функціонування, тобто знаходження максимуму (або мінімуму) цільової функції системи (наприклад, максимуму прибутку, максимуму числа виведених з ладу військових об'єктів, мінімуму часу виконання операцій, максимуму надійності і т.п.) при заданих обмеженнях на значення керованих змінних.

Інший підхід, у главу кута ставить логіку системного аналізу. У цьому випадку підкреслюється нерозривний зв'язок системного аналізу з прийняттям рішення, і що означає вибір певного способу або курсу дій серед декількох можливих альтернатив. Тут системний аналіз розглядається перш за все як методологія з'ясування й упорядкування або так званій структуризації проблеми, яку належить вирішити із застосуванням або без застосування математики і електронних обчислювальних машин. При цьому в поняття «структуризації» вкладається як пояснення реальних цілей самої системи, альтернативних шляхів досягнення цих цілей і взаємозв'язків між компонентами в процесі реалізації кожної альтернативи, так і досягнення поглибленого розуміння зовнішніх умов, в яких виникла проблема, а звідси обмеженням і наслідків того чи іншого курсу дій. Логічний системний аналіз в тій чи іншій мірі доповнюється математичними, статистичними та логічними методами, проте як сфера його застосування, так і методологія значно відрізняються від предмета та методології формально-математичних системних досліджень.

Спочатку системний аналіз базувався головним чином на застосуванні складних математичних прийомів. Через деякий час вчені прийшли до висновку, що математика неефективна при аналізі широких проблем з безліччю невизначеностей, які характерні для дослідження і розробки техніки як єдиного цілого. Про це говорять багато провідних фахівців системників. Тому стала вироблятися концепція такого системного аналізу, в якому робиться наголос переважно на розробку нових за своєю сутністю діалектичних принципів наукового мислення, логічного аналізу складних об'єктів з урахуванням їх взаємозв'язків і суперечливих тенденцій. При такому підході на перший план висуваються вже не математичні методи, а сама логіка системного аналізу, упорядкування процедури прийняття рішень. І мабуть, не випадково, що останнім часом під системним підходом найчастіше розуміється деяка сукупність системних принципів.

Підкреслимо, що сутність системного аналізу полягає не в математичних методах і процедурах: його рекомендації далеко не обов'язково витікають з обчислювань. Основні відмінності його від інших більш-менш формалізованих підходів при обґрунтуванні управлінських рішень зводяться до наступного:

- Відсутні стандартні рішення;

- Чітко викладаються різні погляди при рішенні однієї і тієї ж проблеми;
- Застосовуються до проблем, для яких не повністю визначені вимоги вартості або часу;
- Визнається принципове значення організаційних і суб'єктивних чинників у процесі розкриття рішень, і відповідно до цього розробляються процедури широкого використання якісних суджень у аналізі та погодження різних точок зору;
- Особлива увага приділяється факторам ризику і невизначеності, їх обліку та оцінки при виборі найбільш оптимальних рішень серед можливих варіантів.

Підвищена увага системотехніків до факторів ризику та невизначеності безпосередньо впливає з розповсюдження системного аналізу на перспективні проблеми. Якщо ризик розуміється як потенційна мінливість об'єктивних характеристик, то невизначеність висловлює відсутність суб'єктивних знань про те, в якій формі проявляться ці явища.

Тенденція до системного аналізу великих проблем з'являється тільки тоді, коли їхній масштаб зростає до такого ступеня, що рішення стають складними, трудомісткими і дорогими. При обґрунтуванні таких рішень, які стають предметом системного аналізу, все більшого значення набувають фактори, розраховані вперед на 10-15-річний період. До факторів такого роду відносяться перш за все величезне зростання капіталовкладень на здійснення великих програм, що охоплюють тривалий період, і все більша залежність цих програм від результатів наукових досліджень і технічних розробок.

Іншою важливою причиною необхідності обліку довготривалої перспективи є стратегічний характер самих цілей, які ставляться перед системним аналізом і які зумовлюють політику уряду на тривалий період.

Процедури і методи системного аналізу скеровані на пошук альтернативних варіантів вирішення проблем, визначення масштабів невизначеності у кожному з варіантів і їх порівняння за тими або іншими критеріями ефективності

Основні положення системного аналізу можна сформулювати так:

- 1) процес прийняття рішення повинен починатися з виявлення і чіткого формулювання кінцевої мети, а також критеріїв, за якими можна оцінити її досягнення;
- 2) необхідно розглядати всю проблему як ціле, тобто як єдиний комплекс, і виявляти всі наслідки і внутрішні зв'язки кожного часткового рішення;
- 3) необхідно виявити і проаналізувати можливі альтернативні шляхи досягнення мети;
- 4) цілі окремих підсистем не повинні конфліктувати з метою всієї системи.

Центральною процедурою у системному аналізі є побудова загальної моделі (моделей), що відображають всі фактори і взаємозв'язки реальної ситуації, котрі можуть проявитися у процесі втілення рішення. Отримана модель досліджується для визначення того, наскільки результат застосування будь-

якого альтернативного варіанту близький до бажаного, як співвідносяться затрати ресурсів і часу у кожному з варіантів, наскільки альтернативні моделі чутливі до різних небажаних внутрішніх впливів.

За визначенням Аллена Ентховена: „Системний аналіз - це ніщо інше, як освічений здоровий глузд, якому слугують аналітичні методи. Ми застосовуємо системний підхід до проблеми, намагаючись максимально широко дослідити поставлену задачу, визначити її раціональність і своєчасність, а далі забезпечити того, хто відповідає за прийняття рішення, такою інформацією, яка найкраще допоможе йому вибрати найефективніший шлях вирішення задачі”.

Присутність суб'єктивних елементів (знання, досвід, інтуїція, оцінка переваг) зв'язана з об'єктивними причинами, котрі впливають з обмеженої можливості застосування точних кількісних методів до всіх аспектів складних проблем.

Перед усім, основним і найбільш цінним результатом системного аналізу визнається не кількісна визначеність рішення проблеми, а покращення її розуміння і виявлення суті різних шляхів рішення. Це розуміння і альтернативні рішення проблеми виробляються спеціалістами і експертами та надаються відповідальним людям для їх конструктивного обговорення.

Системний аналіз включає методологію дослідження, виділення його етапів і обґрунтований вибір методики виконання кожного з етапів у конкретних умовах. Особливу увагу у таких роботах приділяється визначенню мети і моделі системи і їх формалізованому представленню.

Задачі дослідження системи можна розділити на задачі аналізу і задачі синтезу.

Задачі аналізу полягають у дослідженні особливостей і поведінки систем в залежності від їх структур, значень параметрів і характеристик зовнішнього середовища.

Задачі синтезу полягають у виборі структури і таких значень внутрішніх параметрів систем, щоб при заданих характеристиках зовнішнього середовища та інших обмеженнях, отримати задані властивості систем.

## **2.1 Принципи системного підходу та типи структур**

- Принцип остаточної глобальної мети: означає, що в системі все повинно бути спрямоване на досягнення призначення, підпорядковане глобальній меті. Будь-які зміни, удосконалення та управління повинні оцінюватися виходячи з того, що чи сприяють вони досягненню мети.

– Принцип єдності: сумісний розгляд системи і як цілого, і як сукупності компонент (елементів, підсистем, систему утворюваних відношень).

– Принцип зв'язаності: довільна компонента системи розглядається сумісно з її зв'язками з оточенням.

– Принцип модульності: вказує на можливість розгляду замість частини системи сукупності входів та виходів цієї частини, тобто дозволяє абстрагуватися від зайвої деталізації за умови збереження можливості адекватного описання системи.

– Принцип ієрархії: акцентує увагу на корисності відшукування або створення в системі ієрархічного характеру зв'язків між її елементами, цілями, модулями. У випадку відсутності ієрархії дослідник повинен вирішити, в якому порядку він буде розглядати складові системи та напрямок конкретизації своїх уявлень.

– Принцип функціональності: стверджує, що довільна структура тісно пов'язана з функціями системи та її складових, і створювати структуру необхідно після розуміння функцій системи

– Принцип розвитку: повинен закладатися при побудові штучних систем як здатність до вдосконалення, розвитку системи за умови збереження якісних особливостей. Структура системи та її функції повинні розглядатися сумісно з пріоритетом функцій над структурою.

– Принцип децентралізації: орієнтує на розумний компроміс між повною централізацією та наданням здатності реагувати на певні дії частинам системи. Система з повною централізацією буде негнучкою, нездатною до пристосування. Досягнення спільної мети в сильно децентралізованій системі може забезпечитися лише стійким механізмом регулювання, що не дозволяє сильно відхилятися від поведінки, що веде до досягнення спільної мети.

– Принцип невизначеності: стверджує, що в багатьох випадках працюють з системою, про не яку не все відомо, чи не все зрозуміло в її поведінці. Це може бути система з невідомою структурою, непередбачуваним перебігом деяких процесів, зі значними відмовами.

Структура - це множина частин або форм, що знаходяться у взаємодії та специфічному порядку, необхідному для реалізації функцій. Структура системи - це стійка упорядкованість у просторі і в часі її елементів і зв'язків. Властивістю структури є можливість існування протягом певного часу за допомогою зв'язуючого пристосування для збереження елементів та їх відношень приблизно в одному і тому ж порядку, реагуючи при цьому на дії середовища. Типи структур: мережу, кістякову, ієрархічну; ті, що включають різні комбінації взаємозв'язків елементів. Мережна модель може використовуватися як для описання фактичних структурних зв'язків між елементами системи, або ж абстрактним функціональним представленням взаємодій між підсистемами. Ієрархія - це структура з підпорядкованістю, тобто з нерівноправними зв'язками - дії в одному напрямку виявляють набагато більший вплив, ніж в оберненому.

Є два типи ієрархічних структур: деревоподібна та ромбовидна. Деревоподібна - є найпростішою для реалізації та аналізу. В майже всіх випадках в ній виділяються ієрархічні рівні - групи елементів, що знаходяться на однакової відстані від головного елемента. Структури цього типу є надзвичайно поширеними (ієрархія проектування складної програмної системи, ієрархія цілей у складній організаційній системі).

Ромбовидна - приводить до множинної підпорядкованості, належності елементів нижнього рівня. Приклади - участь одного технічного елемента в роботі більш ніж одного вузла, блока використання одних і тих самих даних або результатів вимірювань в різних завданнях.

Будь-яка ієрархія звужує можливості та гнучкість системи. Елементи нижнього рівня обмежуються домінуванням верхнього. Однак введення ієрархії різко спрощує створення та функціонування системи.

## **2.2 Аналітичний підхід в науковому пізнанні та практиці**

При аналітичному підході до дослідження систем цільовий аспект її функціонування практично не розглядається. Модель системи будується на ґрунті вивчення окремих підсистем та елементів з наступним формулюванням локальних цілей, що відображають окремі сторони процесу моделювання.

Використовуючи аналітичний підхід, дослідник вивчає систему "зсередини", маючи обмежений горизонт, тобто в стані досягнути лише одну або в кращому разі декілька компонентів системи зі зв'язками між ними. Успіх та значення аналітичного методу полягає не лише в тому, що складне поділяється на все менші складові частини, а в тому, що з'єднавши ці частини відповідним чином, знову утворюється єдине ціле.

Аналітичний метод має величезне значення в науці і на практиці. Розклад функцій в ряди, розбиття неоднорідних областей на однорідні з наступним "зшиванням розв'язків" - в математиці; аналізатори спектрів, всілякі фільтри, дослідження атомів і елементарних частинок - в фізиці; анатомія та нозологія - в медицині; значна частина схемотехніки, конвеєрна технологія виробництва - все це служить ілюстрацією ефективності аналізу. Успіхи аналітичного методу привели до того, що самі поняття "аналіз" та "наукове дослідження" стали сприйматися як синоніми.

Аналітичний метод дозволяє досягнути найвищих результатів за умови, що ціле вдається розділити на незалежні одна від одної частини, оскільки в цьому випадку їх окремий розгляд дозволяє скласти правильне уявлення про їх вкладення в загальний ефект. Ідеалом, остаточною метою аналітичного методу є встановлення причинно-наслідкових зв'язків між явищами.

У випадку складних систем виключення на перший погляд "непотрібних" чи "нецікавих" взаємодій може суттєво порушити адекватність моделі і є в багатьох випадках принципово неможливим. Отже, не лише аналітичний метод неможливий без синтезу, тобто агрегування частин в структуру, але й синтетичний метод неможливий без аналізу, бо необхідна дезагрегація цілого для пояснення функцій частин. Аналіз і синтез доповнюють, але не замінюють один одного. Системне мислення суміщає обидва ці методи на основі розгляду призначення складної системи.

Основною операцією аналізу є декомпозиція - поділ цілого на частини. Задача розпадається на підзадачі, система - на підсистеми, мета - на підцілі. При необхідності цей процес повторюється, що призводить до побудови ієрархічних деревоподібних структур - дерев декомпозиції. Звичайно, об'єкт аналізу є складним, слабо структурованим, погано визначеним, а тому операцію декомпозиції здійснює системний дослідник (СД-експерт), і отримані різними СД-ками результати будуть різними. Якість дерев декомпозиції залежатиме як від кваліфікації СД-ка, так і від застосованої методики декомпозиції. Операція

декомпозиції є не чим іншим, як співставлення об'єкта аналізу з деякою моделлю, виділення того, що відповідає елементам моделі, тобто питання повноти декомпозиції є питанням завершеності моделі. Однак і сама модель-основа може відображати реальний об'єкт з різним ступенем деталізації.

Основою для декомпозиції може служити лише конкретна, змістовна модель системи, що розглядається. Отже, в результаті декомпозиції виникає певна деревоподібна структура, що повинна забезпечувати виконання двох суперечливих вимог кількісного характеру: повноти та простоти. Принцип простоти вимагає зменшення розмірів дерева. Отже, аналіз, як спосіб подолання складності, дозволяє повністю звести складне до простого лише у випадку складності через непоінформованість. В дійсності новим знанням є не лише виявлення чи конкретизація того, що ми не знаємо, але й відповідним чином опрацьовані фрагменти старих знань, що набувають нової якості.

### **Агрегування. Види агрегатів в системному дослідженні**

**Агрегування** - це операція об'єднання декількох елементів в єдине ціле, протилежна до декомпозиції. Об'єднати елементи, що взаємодіють між собою, набувають не лише зовнішньої, але й внутрішньої цілісності, єдності. Зовнішня цілісність відображається моделлю „чорної скриньки”, а внутрішня - пов'язана зі структурою системи, і виявляється в тому, що властивості системи є більшими, ніж сума властивостей об'єднаних елементів.

**Агрегатами**, типовими для системного аналізу, є конфігуратор, агрегати-оператори та агрегати-структури. Конфігуратором будемо вважати агрегат, що складається з якісно різних мов описання системи, причому кількість цих мов є мінімальною необхідною для досягнення мети. Конфігуратор є змістовною моделлю найвищого рівня. Як і будь-яка модель, конфігуратор має цільовий характер і при зміні мети може втратити властивості конфігуратора. Особливістю агрегатів-операторів є зменшення розмірності, об'єднання частин в дещо ціле, окреме. Класифікація є дуже важливим, багатобічним, багатофункціональним явищем, і з практичної точки зору важливими проблемами є як визначення класів, так і визначення, до якого класу належить той чи інший конкретний елемент. Важливим видом агрегування даних є статистичний аналіз. Особливе місце займають достатні статистики, що дозволяють зменшити втрати до мінімуму в певному заданому сенсі. Наочним прикладом статистичного агрегування є факторний аналіз, в якому декілька змінних приводяться до одного фактора. **Агрегат-оператор** дозволяє зменшити розмірність інформації, але при його застосуванні слід вважати на можливі наступні негативні особливості:

- 1) втрата корисної інформації, оскільки агрегування є незворотнім перетворенням (за сумою неможливо повернутися до значень її складових);
- 2) агрегування - це вибір певної визначеної моделі системи, з чим пов'язані непрості проблеми оцінки адекватності;
- 3) для деяких агрегатів властива внутрішня суперечність.

**Агрегати-структури.** У процесі синтезу ми створюємо структуру майбутньої системи, що проектується. В реальній, а не абстрактній системі, вини-



кнуть, встановляться і почнуть функціонувати не лише ті зв'язки, що запроектовані, а й інші, властиві природі об'єднаних в систему елементів. Тому при проектуванні системи важливо задати структури в її суттєвих відношеннях. Процес розробки моделі на ґрунті системного підходу включає в себе дві основні складові макропроектування та мікропроектування. При макропроектуванні формується інформація про реальну систему та зовнішнє середовище, формулюються критерії якості функціонування системи, що відображають її мету, критерії оцінки адекватності моделі, критерії декомпозиції системи та будується її модель. Шляхом мікропроектування створюється інформаційне, математичне та програмне забезпечення. Здійснюється вибір технічних засобів реалізації моделі. Після цього визначаються необхідні витрати ресурсів на моделювання. В основі моделювання знаходяться інформаційні процеси: створення моделі ґрунтується на інформації про реальний об'єкт; в процесі моделювання отримується нова інформація про систему; отримана інформація опрацьовується та інтерпретується; в процесі експериментування на моделі вводиться керуюча інформація.

### Тема 3

## МЕТОДОЛОГІЯ ТА МОДЕЛЮВАННЯ СИСТЕМ

**Методологія** - це базовий початок СА. Вона включає визначення понять, що використовуються, принципи системного підходу, а також постановку та загальну характеристику основних проблем організації системних досліджень.

Більшість засобів проектування ґрунтується на парадигмі **методологія - метод - нотація - засіб**. Методологія визначає основні керуючі положення для оцінювання та розроблення проекту, кроки проектування, їх послідовність, правила.

**Засоби** - це інструментарій для підтримання та посилення методів. Ці інструменти підтримують роботу користувачів у процесі створення та редагування графічного проекту в інтерактивному режимі, вони сприяють організації проекту у вигляді ієрархії рівнів абстракції, реалізують перевірки компонент на відповідність.

**Методологія** системного дослідження орієнтована насамперед на дослідження існуючих систем та виявлення проблем і включає до складу наступні кроки.

#### **Формування загальних уявлень про систему:**

- Виявлення призначення, мети, головних цілей, функцій властивостей системи. Формування основних предметних понять що використовуються в системі.
- Виявлення основних складових (модулів) системи та їх функцій: розуміння єдності цих складових в межах системи.
- Виявлення основних процесів у системі, їх значення, умов перебігу, етапності, стрибків, змін стану та інших особливостей у функціонування системи, виокремлення основних керуючих факторів.
- Виявлення основних елементів оточення системи (не-системи), з якими пов'язана система, характеру зв'язків системи з елементами оточення.
- Виявлення невизначеностей та випадковостей у ситуаціях визначального впливу їх на систему. Цей крок виконується у випадку, коли дія невизначеностей та випадковостей у процесі функціонування є значною. Після виконання останнього пункту загальні уявлення про систему будуть сформованими.

#### **Формування поглиблених уявлень про систему:**

- Виявлення розгалуженої структури, ієрархії, формування уявлень про систему як про сукупність модулів, що пов'язані входами-виходами.
- Виявлення всіх елементів та зв'язків, важливих для цілей розгляду, їх співвідношення до ієрархії системи ранжирування елементів та зв'язків за важливістю.

- Врахування змін та невизначеностей у системі. Дослідження функцій та процесів у системі з метою управління ними. Формування управліннь та процедур прийняття рішень.
- Формування системи управління на основі окремих керуючих дій. Шляхом використання останніх чотирьох кроків реалізується поглиблене дослідження системи.

#### **Моделювання системи, як етап її дослідження:**

На цьому кроці система розглядається з точки зору зручного відображення її властивостей для створення описання системи, придатного для передбачення її поведінки та виведення неочевидних властивостей. Точність моделювання повинна бути мінімальною, що ще забезпечує відображення всіх важливих особливостей системи. Відсутність надлишкової деталізації - це зменшення об'єму вхідних даних, вимог до ресурсів моделюючої ЕОМ, але з іншого боку занадто проста модель не описує суттєві якісні особливості системи і приведе до формування неправильних висновків про поведінку системи. Отже ставиться мета - створити таке описання системи, що дозволяло б передбачити її поведінку та виявляти неочевидні властивості.

#### **Супровід системи:**

Накопичення досвіду роботи з системою та її моделлю, уточнення інформації про систему, вдосконалення моделей. Оцінювання граничних можливостей системи, дослідження відмов, виходів з ладу, відхилень від норми. Розширення функцій системи, зміна вимог до неї, нове коло задач, нові умови роботи, включення системи елементом в систему вищого рівня.

**Планування.** Прямий процес. Обернений процес. Порівняння основних підходів до планування.

Планування є одним із найважливіших процесів, що дозволяє сполучити найімовірніший результат розв'язку проблеми з бажаним результатом при певних діях оточуючого середовища, що вимагає розроблення нових дій та політик, скерованих на зменшення розбіжності між бажаним та найімовірнішим майбутнім результатом. Планування є процесом мислення, оскільки потребує певних припущень про існуючі реалії, майбутні імовірності та методи виявлення та оцінювання інформації про реалії та майбутнє.

Порівняння основних підходів до планування.

Види діяльності основного процесу планування.

Філософія планування. Структурування проблеми .Ідентифікація та оцінювання альтернативних реакцій . Реалізація обраної реакції:

Формальна. Вважається, що проблеми можуть точно характеризуватися за допомогою кількісних моделей та існує консенсус на визначення проблеми. Альтернативи можуть обмежуватися особами, чиї витрати та прибуток можуть бути вимірними об'єктивно в термінах спільних для всіх виборів критеріїв. Вважається, що здійснення плану є природнім наслідком з логіки його формування.

Інкрементна. Вважається, що консенсус з визначення проблеми відсутній, однак не пропонується метод, що дозволив би охарактеризувати багатог-

ранність. Альтернативи можуть обмежуватися особами, які являють маргінальні або малі модифікації існуючих планів. Припускаються торги та компроміси для обрання плану між "прийнятим" та оптимальним. Немає точного критерію. Попередня гнучкість дозволяє користувачам плану адаптувати його згідно потреб та інтерпретації мети планування.

Системна. Вважається, що консенсус відсутній та рекомендується використовувати точні методи структурування проблеми, що охоплюють діапазон можливих сприйнять. Обмеження на діапазон ідентифікованих альтернатив послаблені, і застосовується суміш якісних та кількісних методів, ідентифікації критеріїв, визначення їх важливості та обрання плану реалізації важливих критеріїв. Вважається, що на реалізацію впливають суб'єктивні оцінки адекватності та релевантності плану користувачами. Важлива модифікація плану, що забезпечуватиме збіжність із потребами користувача

Прямий процес (процес, що проектується) починається з малої кількості політик планування та продукує множину можливих результатів, а обернений (бажаний) починається з малого числа бажаних результатів та продукує множину варіантів політик. Прямий процес планування реалізується за допомогою наступних кроків:

Ідентифікується загальне призначення задачі планування.

Встановлюється єдиний елемент, або фокус (проблема в загальному), що розміщується у вершини ієрархії.

На другому рівні ієрархії включаються економічні, політичні та соціальні сили, що впливають на результат.

Третій рівень утворюють актори, які маніпулюють цими силами.

Четвертий рівень утворюють цілі кожного актора.

П'ятий рівень описує політику кожного з акторів, які вони використовують для досягнення своїх цілей. На шостому рівні описуються можливі сценарії, або результати, котрих прагне досягнути кожен актор, застосовуючи свої політики.

Останній рівень ієрархії - узагальнений результат, котрий є результатом реалізації всіх цих сценаріїв. Це є логічний результат як комбінація спроб різних акторів сформувати його так, щоб задовольнити свої інтереси. Внаслідок протилежності цих інтересів один або декілька акторів можуть почати змінювати свої політики, щоби спробувати досягнути нових планових результатів, що є ближчими до тих, котрих вони бажають.

Це й означає, по суті, перехід до оберненого процесу. Отже, процес планування в прямому напрямку починається з визначення мети планування і побудови ієрархії процесу.

Обернений процес реалізується в наступній послідовності:

Кожен актор визначає для свого другого рівня один або декілька бажаних сценаріїв, котрі він бажає реалізувати, та визначає пріоритети цих сценаріїв з точки зору їх впливу на узагальнений варіант бажаного майбутнього.

Третій рівень включає перелік проблем та ситуацій, що можуть завадити реалізації сценаріїв.

На четвертому рівні знаходяться актори (незалежно від того, чи вони згадані, чи ні при прямому процесі), які можуть вплинути на розв'язання проблем.

На п'ятому рівні описуються цілі акторів, що можуть вплинути на розв'язання проблем.

На шостому рівні описуються політики впливових акторів.

Сьомий рівень включає політики або зміни в цілях окремих акторів, котрі за умови їх використання можуть впливати на реалізацію бажаних майбутніх станів.

Після визначення пріоритетів цих політик або цілей в оберненому процесі повторюється ітерація прямого процесу з використанням лише найважливіших з них. Вони використовуються разом з політиками попередньої ітерації прямого процесу, що належать тим акторам, які прагнуть змін. Пріоритети в наступному прямому процесі переглядаються лише з рівня цілей, або якщо є рівень політик, то з цього нижчого рівня. Після цього порівнюються пріоритети узагальненого результату повторного прямого процесу з пріоритетами бажаних майбутніх станів першого прямого процесу, щоб визначити, чи наближається логічне майбутнє до бажаного. Якщо цього немає, то реалізується друга ітерація оберненого процесу, на котрій змінюються пріоритети бажаних майбутніх станів та/або перевіряються нові політики. Ті елементи, що знову отримали більший пріоритет, використовуються на третій ітерації прямого процесу.

## Тема 4

# КЛАСИФІКАЦІЯ ПРОБЛЕМ, З ЯКИМИ ЗІШТОВХУЄТЬСЯ СИСТЕМНИЙ АНАЛІЗ

Важливо відзначити, що чим більш загальні і важливі проблеми виникають перед керівниками різних рівнів, тим більше зростає значення системного аналізу для їх вирішення.

Всі проблеми в залежності від глибини їх пізнання поділяються на три класи:

а) добре структуризовані або кількісно сформульовані проблеми, в яких істотні залежності з'ясовані настільки добре, що вони можуть бути виражені в числах і символах, які здобувають у кінці чисельні оцінки;

б) неструктуризовані, що містять лише опис важків ресурсів, ознак і характеристик, кількість залежності між якими зовсім невідомі;

в) слабо структуризовані або змішані проблеми, які містять як якісні, так і кількісні елементи, причому якісні маловідомі і невизначені проблеми мають тенденцію домінувати.

Для вирішення добре структуризованих проблем використовується методологія дослідження операцій (ДО). Вона полягає в застосуванні математичних моделей і методів (лінійного, нелінійного, динамічного програмування, теорії масового обслуговування, теорії ігор і т.д.) для відшукування оптимальної стратегії управління цілеспрямованими діями. Основна проблема застосування методів дослідження операцій полягає в тому, щоб правильно підібрати типovu або розробити нову математичну модель, зібрати необхідні вихідні дані і переконатися шляхом аналізу вихідних передумов і результатів математичного розрахунку, що ця модель відображає явність розв'язуваної задачі.

У неструктуризованих проблемах традиційним є евристичний метод, який полягає в тому, що досвідчений фахівець збирає максимум різних фактів про розв'язання тої чи іншої проблеми, вживається в неї і на основі інтуїції і суджень вносить пропозиції про доцільні заходи.

При такому підході відсутня будь-яка впорядкована логічна процедура відшукування рішення, і спеціаліст, який висуває певні пропозиції, не може скільки-небудь чітко викласти спосіб, на основі якого він від сукупності розрізнених вихідних відомостей прийшов до остаточних рекомендацій. При вирішенні проблеми такий фахівець покладається на наявний власний досвід, на досвід своїх колег, на професійну підготовленість, на вивчення аналогічних проблем методом ситуацій, але не на чітко сформульовану методику.

До слабо структуризованих проблем, для вирішення яких призначений системний аналіз, відноситься більшість найбільш важливі економічні, технічні, політичні і військово-стратегічні завдання великого масштабу.

Типовими проблемами такого роду є такі:

а) намічені для вирішення в майбутньому;

б) стикаються з широким набором альтернатив;

в) залежать від поточної неповноти технологічних доповнення;

г) вимагають великих вкладень капіталу і містять елементи ризику;

д) внутрішньо складні внаслідок комбінування ресурсів, необхідних для їх вирішення;

е) для яких не повністю визначені вимоги вартості або часу.

При здійсненні системного аналізу в процес структуризації проблеми деякі її елементи-підзадачі отримують кількісне вираження, і відносини між усіма елементами стають все більш визначеними. Виходячи з цього, при використанні системного аналізу зовсім не обов'язкова початкова чітка і вичерпна постановка проблеми, ця чіткість повинна досягатися в процесі самого аналізу і розглядається як одна з його головних цілей.

Завдання методів Дослідження операцій можуть бути поставлені в кількісній формі і вирішені на ЕОМ. На противагу цьому стратегічні проблеми, що складаються у виробленні довгострокової політики, в галузі виробництва, як правило, не можуть бути сформульовані як задачі дослідження Операцій, Проблеми такого роду є предметом системного аналізу. Стратегічні завдання не легко кваліфікуються (тобто виражається кількісно) з причини відсутності однозначного критерію оптимальності для фірми в цілому і вимагають при прийнятті рішень залучення суб'єктивних суджень досвідчених керівників та експертів.

#### **4.1 Недоліки та переваги СА**

Але суб'єктивність суджень, неточність знань, інтуїтивність оцінок і невизначеність відомостей про дії інших людей приводять до того, що на базі дослідження можна досягти не більше, ніж оцінки деякої переваги вибору однієї альтернативи в порівнянні з іншою.

Системний аналіз має і обмеження, як і інші способи дослідження. Наприклад, чиста інтуїція. При використанні чистої інтуїції в протилежність інтуїції, яка застосовується в системному аналізі, не вживають жодних зусиль, щоб виявити структуру проблеми або встановити причинно-наслідкові зв'язки отримати рішення. Інтуїтивний процес полягає в тому, щоб дізнатися про все, що можна, про проблему, вжитися в неї і підсвідомо знайти рішення. Обмеженість системного аналізу обумовлена:

- Неминучою неповнотою аналізу;
- Наближеністю міри ефективності;
- Відсутністю способів точного передбачення майбутнього.

Деякі фактори соціально-політичного характеру повинні грати важливу роль при розробці і виборі альтернатив. Проте в даний час не існує навіть наближених способів виміряти ці чинники, і доводиться їх враховувати інтуїтивно.

Недоліки системного аналізу полягають в наступному. Багато факторів, що мають фундаментальне значення, не піддаються кількісній обробці та можуть бути упущені з розгляду або навмисне залишені для подальшого розгляду, а потім забуті. Іноді їм може надаватися неправильна вага в самому аналізі або в рішенні, заснованому на такому аналізі.

Інша причина в тому, що дослідження може зовнішньо виглядати до такої міри науковим і кількісно точним, що йому може бути приписана абсолютно невинуватена обгрунтованість, незважаючи на те що вона включає багато суб'єктивних суджень. Іншими словами, ми можемо бути так зачаровані привабливістю і точністю чисел, що переглянемо спрощення, зроблені для досягнення цієї точності, упустимо аналіз якісних факторів і перебільшимо важливість абстрактних обчислень в процесі вирішення. Але без аналізу ми зіштовхуємося з ще більшою небезпекою втратою поліпшень тих чи інших міркувань і неправильного зважування окремих факторів.

Ще одним недоліком системного аналізу є те, що він перебуває на початковій стадії свого розвитку, його методологію ще ніяк не можна назвати укоріненою, а практична застосовність і ефективність багато в чому залежать від досконалості економічних, математичних, логічних методів і рівня конкретних знань про найскладніші процеси, від можливостей отримання відповідної інформації про них.

Навіть при чіткій логічно-структурній основі дослідження і застосування формальних методів оцінки альтернатив і пошуку найкращих рішень величезну роль на всіх його стадіях продовжують грати суб'єктивні судження та інтуїція експертів та осіб, відповідальних за прийняття рішень. Тому системний аналіз практично ніколи повністю не досягає таких стандартів наукового дослідження, як об'єктивність, точність і відтворення результатів.

У чому полягає основне значення системного аналізу?

В якості основного і найціннішого результату системного аналізу визнається не кількісне певне рішення проблеми, а збільшення ступеня її розуміння і можливих шляхів вирішення у фахівців і експертів, що беруть участь в дослідженні проблеми, і, що особливо важливо, у відповідальних осіб, яким надається набір добре опрацьованих і оцінених альтернатив.

Корисність нових методів аналізу та управління і в першу чергу системного аналізу полягає:

1) у більшому розумінні і проникненні в суть проблеми: практичні зусилля виявити взаємозв'язки та кількісні цінності допоможуть виявити приховані точки зору за тими чи іншими рішеннями;

2) у більшій точності: більш чітке формулювання цілей, завдань ... знизить, хоча і не усуне, неминуче неясні боки багатопланових цілей;

3) більшою порівняльністю: аналіз може бути здійснено таким чином, що плани для одних проблем можуть бути з користю ув'язані і пореоцінені з планами щодо інших проблем; при цьому можна виявити загальні елементи;

4) у більшій ефективності: розробка нових методів повинна призвести до розподілу грошових ресурсів ... більш впорядкованим чином і повинна надати допомогу в перевірці цінності інтуїтивних суджень.

### **Висновки**

За своєю природою системний аналіз є міждисциплінарною, узагальнюючою наукою, яка виступає засобом формування цілісного світогляду, оскільки є методом дослідження об'єкта як цілого (тобто сукупності елементів, що перебувають у взаємодії та породжують цілісні властивості).



На сьогоднішній день системний аналіз широко використовується у різних галузях знань, що дає підставу говорити про його універсальність. Ефективність його застосування пов'язана з відносно закінченим процесом формування його як цілісної методології (зокрема, розробки його понятійно-категоріального апарату).

## Тема 5

# ТЕРМОДИНАМІЧНІ МЕТОДИ МОДЕЛЮВАННЯ СИСТЕМ. ФІЗИКО-ХІМІЧНІ ОСНОВИ

### 5.1 Вільна енергія сплавів

**5.1.1 Термодинамічний потенціал.** Одними з основних понять термодинаміки є поняття фази та системи. Фазою називається макроскопічна однорідна частина неоднорідної системи, яка взаємодіє з іншими частинами системи та відділена від них поверхнею розділу. Фізичні та хімічні властивості фази, як і її склад в середньому, однакові по всьому об'єму фази або плавно змінюються від точки до точки. Стрибкоподібна зміна складу та властивостей при перетині поверхні розділення свідчить про перехід з однієї фази в іншу.

Сказане вище відноситься до макроскопічних тіл. При наближенні до атомних масштабів стає важко, а потім і неможливо розрізнити однофазні суміші (розчини) від сильнодиспергованих багатофазних сумішей. Зокрема, рідкий чавун розглядається одними дослідниками як однофазний розчин вуглецю та інших елементів в рідкому залізі (хоча і допускається, що атоми вуглецю можуть асоціюватися в достатньо великі комплекси), а інші дослідники - як коллоїд або квазіколлоїд (останій відрізняється від попереднього відсутністю прагнення до коагуляції диспергованої фази), тобто як двофазне тіло, що складається з рідини та зважених в ній частин вуглецевої фази.

Говорячи про фази, ми не обмежуємо тіло, що складає дану фазу, будь-якими просторовими рамками. Зовсім іншим в цьому відношенні є поняття системи (термодинамічної). Системою називається деяке взятє в контур, звичайно багатофазне тіло, виділене фактично або подумки із навколишнього середовища. Від розглядаємої системи зовнішнє середовище відділене визначеною межею розділення, реально або подумки проведеною в просторі. Якщо межа повністю непроникна, система є замкненою. Замкнена система характеризується відсутністю масопереносу (хімічна ізоляція системи), теплопереносу (термічна ізоляція) і передачі механічної роботи (механічна ізоляція). Хімічна ізоляція відповідає умові постійності маси, термічна ізоляція - постійності ентропії, механічна ізоляція - постійності об'єму. Термодинамічні системи можуть також розглядатися в умовах часткової ізоляції.

Нижче будуть розглянуті системи, як правило, з масонепроникними межами. Такою є, наприклад, подумки взятий в контур кусок металевого сплаву з заданою масою, великим об'ємом того ж сплаву. Через межу нашої системи речовина все ж таки переноситься (за рахунок динтенсивний параметр):

$$Q=TS, \tag{5.1}$$

$$A=pV, \tag{5.2}$$

де  $Q$  - теплота (термічна енергія);  $A$  - робота (механічна енергія).

Нижче буде показано, що хімічна енергія  $Ch$ , яка є в хімічному компоненті  $i$  системи, також може бути представлена у вигляді добутку двох параметрів - екстенсивного (числа молей  $n$  речовини) і інтенсивного (хімічного потенціалу  $\mu$  речовини):

$$Ch_i = \mu_i n_i, \quad (5.3)$$

Поняття хімічного потенціалу було введено Гіббсом в якості аналогу електричного потенціалу  $u$  в формулі для електричної енергії:

$$El = uq, \quad (5.4)$$

де  $q$  - кількість електрики.

Таким чином, якщо  $u$  є електрорушійною силою в процесах електропереносу, то  $\mu_i$  є "хімічною рушійною" силою в процесах масопереносу. Ця думка підкреслена Гіббсом стосовно дифузійного масопереносу в листі до Банкрофта "Про рівняння руху електрики".

Довільна система має визначений термодинамічний потенціал. Він визначає здатність системи виконувати корисну роботу (передавати у зовнішнє середовище механічну, термічну, хімічну, електричну енергію). При цьому *термодинамічний потенціал* системи  $Z$  зменшується. Термодинамічний потенціал системи не може самовільно підвищитись. Нерівність

$$\Delta Z \leq 0 \quad (5.5)$$

є однією з форм запису другого початку термодинаміки. В умовах рівноваги

$$Z = \text{const}; \Delta Z = 0. \quad (5.6)$$

Термодинамічний потенціал - це та енергетична властивість системи, яка прямує до абсолютного мінімуму, при встановленні метастабільної рівноваги. Розглянемо це положення на прикладі чисто механічної системи - кулі, яка перекочується по нерівній поверхні (рис. 5.1). В цьому випадку  $Z$  - потенціальна енергія кулі. Прагнення кулі зайняти положення з найнижчим рівнем потенційної енергії і неможливістю самостійного переміщення кулі догори і є відображення другого начала термодинаміки, тобто нерівності (5.5).

Куля в положенні  $II$  знаходиться в нерівноважному стані. Положення  $I$  - стану рівноваги ( $a$  - лабільної,  $b$  - метастабільної,  $v$  - стабільної рівноваги). Переміщення кулі із положення  $II$  в положення  $Ib$  буде відповідати меншому зниженню  $Z$ , чим в положенні  $Iv$ , коли

$$\Delta Z_{\text{max}} = mg\Delta h, \quad (5.7)$$

де  $m$  - маса кулі;  $g$  - прискорення сили тяжіння.

Все ж таки, якщо межа  $\Delta h_a$  достатньо висока, то система може достатньо довгий час знаходитись в стані метастабільної рівноваги  $1б$ . Приклад - сталеві конструкції, що містять метастабільну фазу цементит (зокрема, цементит перліта), яка при відсутності джерела енергії активації процесу графітизації не розпадається на більш стабільну суміш залізо+графіт на протязі деякого часу. (На рис. 5.1 енергія активації аналогічного переходу, який може довгий час не протікати, рівна  $\Delta Z_a = mg\Delta h_a$ , де  $\Delta h_a$  - висота потенціальної межі).

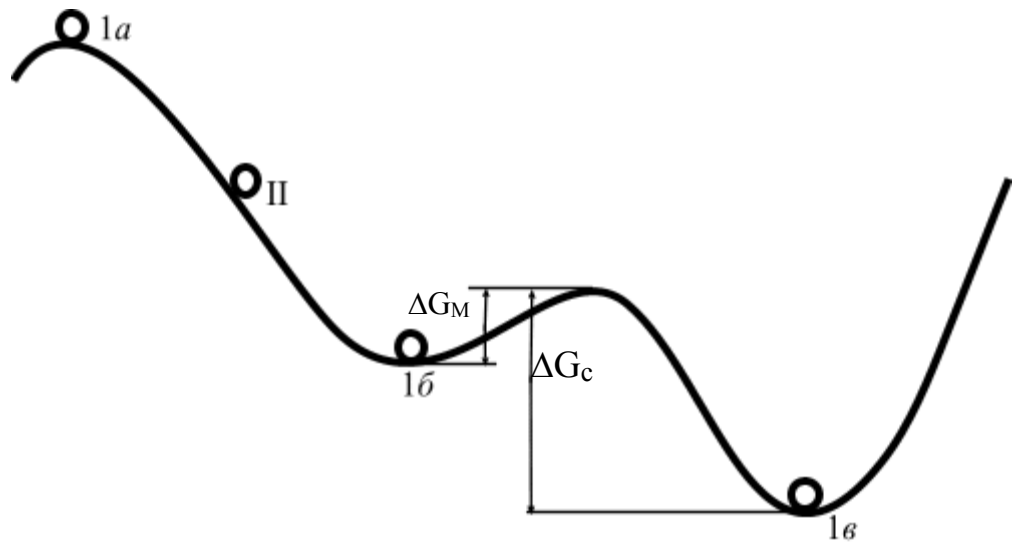


Рис.5.1. Види рівноваги термодинамічної системи (моделюється кулькою): 1а – лабільна, 1б – метастабільна, 1в – стабільна рівновага; II – нерівноважний стан

При переході до термодинамічних систем, характерних тим, що в них змінюються і взаємоперетворюються, по крайній мірі два види енергії - механічної і термічної, поняття термодинамічного потенціалу ускладнюється, проте загальні принципи залишаються незмінними. Якщо в чисто механічній системі  $Z$  визначався однозначно як її потенційна енергія, то в термодинамічній системі в залежності від умов її ізоляції термодинамічними потенціалами будуть виступати вже різні енергетичні параметри - *внутрішня енергія, ентальпія, вільна енергія Гельмгольца* (або просто енергія Гельмгольца), *вільна енергія Гіббса* (або просто енергія Гіббса).

Повернемося до системи з масонепроникними межами і розглянемо чотири варіанти її ізоляції. Вивчаємо систему зобразимо схемою, яка представлена на рис. 5.2, де хвиляста лінія моделює теплоізоляцію (або теплопровідну у випадку зняття термічної ізоляції) межу системи, а циліндр з поршнем служить для передачі механічної енергії в тому чи іншому напрямку.

Припустимо, що всередині системи є невеликий заряд вибухівки, який запалюється гранично слабким радіосигналом (межа системи для нього проникна, але він настільки слабкий, що достатньо не змінює енергетичний стан системи).

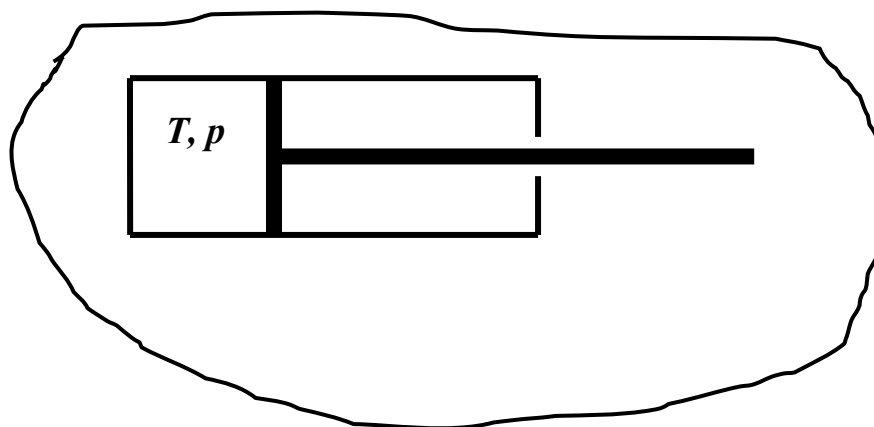


Рис. 5.2 – Модель термодинамічної системи

Варіант 1. Система *замкнена* (термічна ізоляція+механічна ізоляція). Вибух заряду викликає підвищення  $T$  і  $p$  в системі. Так як система термічно ізольована і теплота не передається в навколишнє середовище, кількісний параметр термічної енергії не змінюється, ентропія, тобто  $S=const$  (*нпу*  $T \neq const$ ).

Так як система ізольована також механічно, поршень в циліндрі застопорений і переміщуватись не може (інакше це призвело б до передачі механічної енергії в зовнішнє середовище). Отже,  $V=const$  (*нпу*  $p \neq const$ ).

Отже, така система являється ізоентропійно-ізохорною. Її термо-динамічний потенціал визначається рівнем накопичених в системі усіх видів енергії в зв'язку з цим носить назву *внутрішня енергія*  $U$ . Ця величина є функцією тільки одних незалежних змінних (які не задаються системі навколишнім середовищем) - ентропії  $S$  та об'єму  $V$ :

$$U=f(S,V); \quad dU=TdS-pdV. \quad (5.8)$$

Другий закон термодинаміки в цьому випадку має вигляд  $\Delta U \leq 0$ . В процесі вибуху розглянутого вище заряду хімічна енергія, збережена в ньому, перетворилась в більш "низькосортні" види енергії - термічну та механічну. При цьому  $\Delta U < 0$ . Зворотній процес - самовільна рекомбінація продуктів вибуху - неможливий, так як він відповідає  $\Delta U > 0$ .

Варіант 2. Система частково замкнута - термічна ізоляція збережена, механічної ізоляції немає. Вибух заряду викликає підвищення тільки  $T$ . Так як поршень в циліндрі може вільно переміщуватись,  $p$  знову знижується до початкового значення, що задається зовнішнім середовищем, а поршень, переміщуючись доверху, виконує роботу, передаючи механічну енергію зовнішньому середовищу. Зрозуміло, що термодинамічний потенціал системи буде в цьому випадку іншим, ніж у варіанті 1, та буде відрізнятись від  $U$  на величину

механічної енергії  $pV$ . В даному варіанті, коли зберігається одна тільки термічна ізоляція системи, термодинамічним потенціалом є її тепловміст  $H$ , який називається *ентальпією*:

$$H=f(s,v)=U+pV: dH=TdS+Vdp. \quad (5.9)$$

Другий закон термодинаміки в цьому випадку має вид  $\Delta H \leq 0$ . Оскільки  $\Delta H = -Q$ , де  $Q$  - теплота реакції, ми переконуємось в тому, що в такій ізоентропійно-ізобарній системі ендотермічні реакції заборонені.

Варіант 3. Система також частково замкнута, але в цьому випадку збережена механічна ізоляція системи, а термічної ізоляції немає.

Вибух заряду викликає підвищення  $p$ , але не  $T$ . Термодинамічний потенціал буде і в цьому випадку відрізнятись від  $U$ , але вже на величину  $TS$ . Він отримав назву - *вільна енергія Гельмгольца*, або ізотермо-ізохорний потенціал:

$$F=f(T,V)=U-TS: dF=-SdT-pdV. \quad (5.10)$$

Другий закон термодинаміки в цьому випадку має вигляд  $\Delta F \leq 0$ .

Варіант 4. Система є відкритою, нема ні термічної, ні механічної ізоляції. Термодинамічним потенціалом в цьому випадку є - *вільна енергія Гіббса*, або ізотермно-ізобарний потенціал:

$$G=f(T, p) = U + p - TS = H - TS; dG = -SdT + Vdp. \quad (5.11)$$

Другий закон термодинаміки в цьому випадку має вигляд  $\Delta G \leq 0$ .

Легко пересвідчитись в тому, що в ізотермно-ізобарних системах, які частіше за все зустрічаються на практиці, ендотермічні реакції та процеси можливі, але при такому обмеженні:

$$0 < \Delta H < TS; -TS < Q < 0, \quad (5.12)$$

де  $Q$  - теплота реакції, рівна  $-\Delta H$ .

В конденсованих системах, якими являються рідкі метали та сплави, розплави, які кристалізуються, та повністю затверділі металеві тіла, різниця між  $F$  і  $G$

$$G = F - pV \quad (5.13)$$

невелика, особливо при низькому тиску (наприклад, атмосферний тиск), так як питомий об'єм систем малий.

Ще менша різниця між  $\Delta G$  та  $\Delta F$ , так як зміни об'єму не перевищують декількох відсотків навіть при кристалізації розплавів, а при перетворенні в твердих металах складають частки відсотка. Тому часто параметри  $G$  і  $F$  в цих

випадках не розрізняють, називаючи обидва просто - *вільна енергія*, і позначають загальним символом  $Z$ .

Вільна енергія системи - це та частина загальної енергії, яка може бути перетворена в роботу, яка виконується проти зовнішнього середовища. При постійному об'ємі ця робота дорівнює  $A_v = -\Delta F$ , а при постійному тиску

$$A_p = -\Delta G.$$

Вільна енергія є величиною екстенсивною. В фізичній хімії її зручно приводити до одного моля речовини:

$$Z = n\bar{Z}, \quad (5.14)$$

де  $n$  - число молів;  $\bar{Z}$  - мольна (раніше використовували термін молярна) вільна енергія. В літературі замість риски для позначення мольних величин застосовують також індекси  $m$ ,  $M$  та інші. В останній час умовно прийнято вважати, що якщо автор не обумовлює кількість речовини, до якої відноситься розглядаємий екстенсивний параметр, то він автоматично вважається мольним навіть при відсутності спеціального позначення.

Доречно відмітити, що в зв'язку з відсутністю молекул в металевих сплавах поняття "моль" і "грам-атом" в фізичній хімії металів співпадають. Один моль сплаву, що складається з різних елементів, містить кількість атомів цих елементів, яка дорівнює числу Авогадро.

В фізичній хімії вміст компонентів складних систем (наприклад, концентрації розчинів) визначається в мольних частках. В металевих сплавах останні співпадають з атомними частками. Розглянемо це питання на прикладі феросиліцію марки  $\Phi C75$ , що вміщує близько 75%  $Si$  і 25%  $Fe$ . Так як атомна маса кремнію (28.1 г) набагато менше атомної маси заліза (55.8 г), відносна кількість атомів кремнію в феросиліції  $\Phi C75$  буде значно більша 75%:

$$X_{Si} = \frac{75/28.1}{\frac{75}{28.1} + 25/55.8} = 8,86, \text{ або } 86\% \text{ (ат.)}.$$

Величина  $X_{Si}$  називається атомною часткою кремнію в сплаві. Вона рівна відношенню кількості атомів кремнію в визначеній масі сплаву до загальної кількості атомів в ній. Так як оперувати кількістю атомів незручно, то беруться відношення кількостей компонентів, виражених в грам-атомах. Сума атомних часток компонентів рівна 1,0,  $\sum X_i = 1$ .

## 5.2 Концентраційна залежність вільної енергії бінарних сплавів

Дуже важливими є функції залежності вільної енергії сплавів від їх концентраційних характеристик. Розглянемо з початку два крайніх випадки - повної взаємної нерозчинності та повної взаємної розчинності компонентів 1 та 2 бінарної системи 1-2.

На рис. 5.3,а показана концентраційна залежність вільної енергії сплаву 1-2 у випадку повної незмішуваності компонентів 1 та 2. Система складається

з двох фаз, утворених чистими компонентами, та вільна енергія суміші є аддитивною функцією вільної енергії кожної з фаз та їх часткою у вказаній суміші. Тому вказана залежність є лінійною (суцільна пряма на рис. 5.3,а).

Оскільки величини термодинамічних потенціалів відносні і залежать від баз відліку, то зручно оперувати не самими цими величинами, а їх різницями, які від бази відліку не залежать. Такою диференційною характеристикою слугуватиме вільна енергія змішування  $\bar{G}_{\text{зм}}$ , яка відкладається від прямої  $\bar{G}_1^0 \bar{G}_2^0$  на рис. 5.3,а.

Ми бачимо, що якщо двоє розглядаємих незмішуваних компоненти 1 та 2 примусити утворювати однорідний однофазний розчин (наприклад, шляхом гартування з високих температур), то така система буде нестабільною і крива вільної енергії в цьому випадку буде лежати вище прямої  $\bar{G}_1^0 \bar{G}_2^0$  (пунктирна крива на рис. 5.3,а). Отже, в розглядаємії системі енергія змішування  $\bar{G}_{\text{зм}}$  додатна на всьому інтервалі концентрацій (рис. 5.3,б); самовільного утворення розчину відбуватись не може, так як воно супроводжувалось би підвищенням вільної енергії системи.

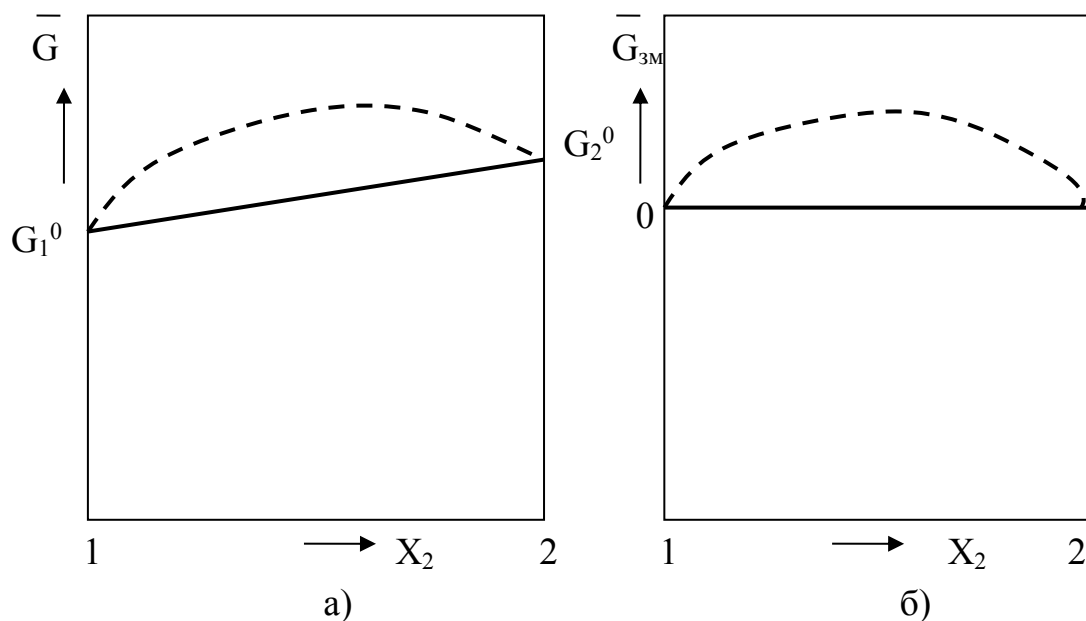


Рисунок 5.3 – Концентраційна енергія вільної енергії системи і енергії змішування для випадку повної незмішуваності компонентів 1 та 2

Розглянемо тепер протилежний випадок, коли компоненти 1 та 2 утворюють систему з повною змішуваністю. Ми бачимо, що в цьому випадку крива концентраційної залежності вільної енергії повинна лежати нижче прямої  $\bar{G}_1^0 \bar{G}_2^0$ , яка відповідає двофазній механічній суміші чистих компонентів, так як взаємне розчинення останніх відбувається самовільно, тобто при  $\Delta\bar{G} < 0$  (рис. 5.4,а). Відповідно  $\bar{G}_{\text{зм}} < 0$  в усьому інтервалі концентрацій (рис. 5.4,б).



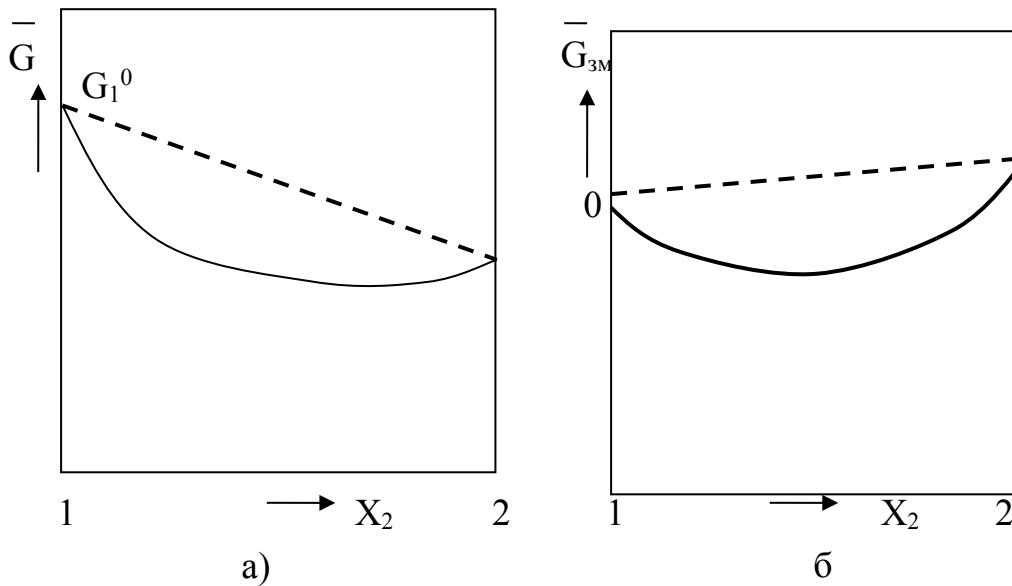


Рисунок 5.4 – Концентраційна енергія вільної енергії системи і енергії змішування для випадку повної змішуваності компонентів 1 та 2

В області незмішування  $\alpha_A + \beta_B$  крива  $G=f(X_2)$  може лежати цілком нижче прямої  $\overline{G}_1^0 \overline{G}_2^0$  (див. рис.5.4). Це значить, що пересичені розчини типу  $M$  все ж стабільніші, ніж механічна суміш фаз  $\alpha_0$  і  $\beta_0$  чистих компонентів 1 і 2. Тим паче такі розчини нестабільні, так як існує ще більш стабільний стан - механічна суміш, але вже не фаз  $\alpha_0$  і  $\beta_0$ , а взаємонасичених фаз  $\alpha_A$  і  $\beta_B$ .

Необхідно також зазначити, що наявність однієї загальної кривої  $\overline{G} = f(X_2)$  на всьому інтервалі концентрацій ненасичених, насичених і перенасичених розчинів необов'язкова для проведеного вище аналізу. Результат принципово не зміниться, якщо кожна з фаз  $\alpha$  і  $\beta$  буде мати власну криву  $\overline{G}_\alpha = f(X_2)$  і  $\overline{G}_\beta = f(X_2)$ . В таких випадках необхідно уточнювати, на основі якої фази ( $\alpha$  чи  $\beta$ ) побудований розглядаємий вихідний однорідний перенасичений розчин  $M$ . Від цього будуть залежати значення  $\overline{G}_{\text{поч}}$  і величина  $\Delta \overline{G}_{\text{max}} = \overline{G}_{\text{стаб}} - \overline{G}_{\text{поч}}$ .

Із сказаного вище впливає декілька простих правил геометричної термодинаміки, зокрема, **правило загальної дотичної**. Воно може бути сформульоване так.

*Правило. Якщо відома форма кривих концентраційної залежності вільної енергії фаз, які утворюють бінарну систему, то найбільш стабільний стан останньої описується ниткою, яка обтягує вказану сукупність кривих зі сторони мінімальних значень вільної енергії.*

Це правило іноді називають правилом натягнутої нитки (рис. 5.5). Як видно з рис. 5.5, натягнута нитка охоплює криву фази  $\alpha$  на двох ділянках:  $ab$  і  $cd$ , яким відповідають однофазні області  $\alpha_1$  і  $\alpha_2$ . Крива фази  $\gamma$  охоплюється ниткою тільки на одній ділянці  $ef$ , яка відповідає однофазній області  $\gamma$ , а крива фази  $\beta$  не дотикається з ниткою. Це означає, що фаза  $\beta$  метастабільна при даній

температурі і може приймати участь тільки в метастабільних рівновагах. В повністю стабільних системах 1-2 фаза  $\beta$  відсутня.

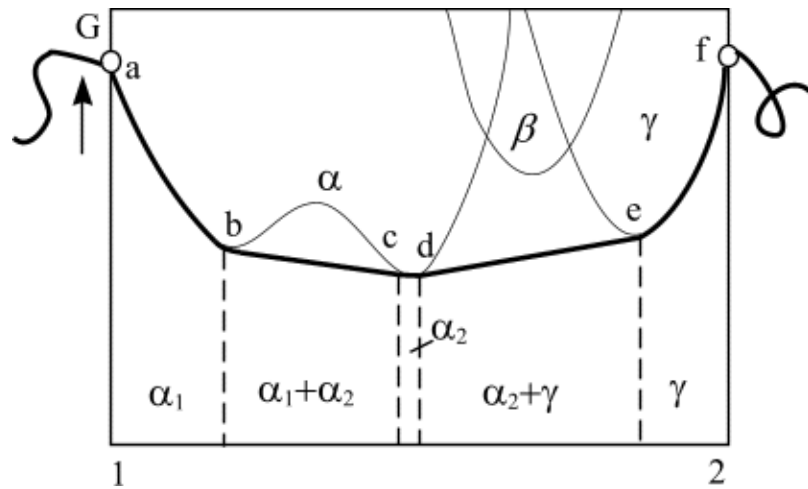


Рисунок 7.6 – Концентраційна залежність вільної енергії фаз багатofазної бінарної системи. Облягання натягнутої нитки вказує на стабільні фази (фаза  $\beta$  метастабільна)

## ТЕМА 6

### СТАБІЛЬНІСТЬ СИСТЕМИ «КОМПОЗИЦІЙНЕ ЗНОСОСТІЙКЕ ПОКРИТТЯ – ОСНОВА»

В даному розділі увага зосереджена на проблемі стабільності поверхневих шарів або покриттів з точки зору термодинаміки. Матеріал розглядається як складна відкрита термодинамічна система, яка може знаходитись в деякому стані рівноваги або в нерівноважному стані. Схематично види рівноваги показано на рис. 5.1.

Прикладом для демонстрації може слугувати сплав Fe – C – X, де X – легувальний елемент хром, марганець, нікель і т. п. - утворює на відміну від вуглецю тверді розчини заміщення в аустеніті або фериті, ми маємо два елементи (Fe і X), які мають порівняно малу дифузійну рухомість, і один елемент (C), коефіцієнт дифузії якого на декілька порядків більший (вуглець утворює тверді розчини впровадження і дифундує по міжвузлях). В цих умовах часто не досягається повна рівновага в системі або орторівновага за термінологією Хультгрена [184]. При цьому перерозподіляється тільки вуглець. Залізо і елемент X ніби залишаються на своїх місцях; отже, відношення їх концентрацій в різних фазах не змінюється (парарівновага за Хультгреном).

Така система не є метастабільною. Вона лабільна, оскільки при довільній температурі вище 0 K повільно проходить дифузія Fe і X, і система еволюціонує в бік орторівноваги. Тому поняття парарівноваги є умовним, але воно в повній мірі може застосовуватися до низькотемпературних умов, коли дифузійні процеси практично повністю загальмовані.

По аналогії з орто- і парарівновагою може бути розглянута метарівновага, при якій концентрація одного компонента залишається постійною у всіх фазах, а інші два компоненти мають змінну концентрацію. Метарівновага є свого роду абстракцією, оскільки немає того простого фізичного змісту, який притаманний орто- і парарівновазі.

Коноди орто-, мета- і парарівноваги в ізотермічному перерізі трикомпонентної системи показані на рис. 6.1.

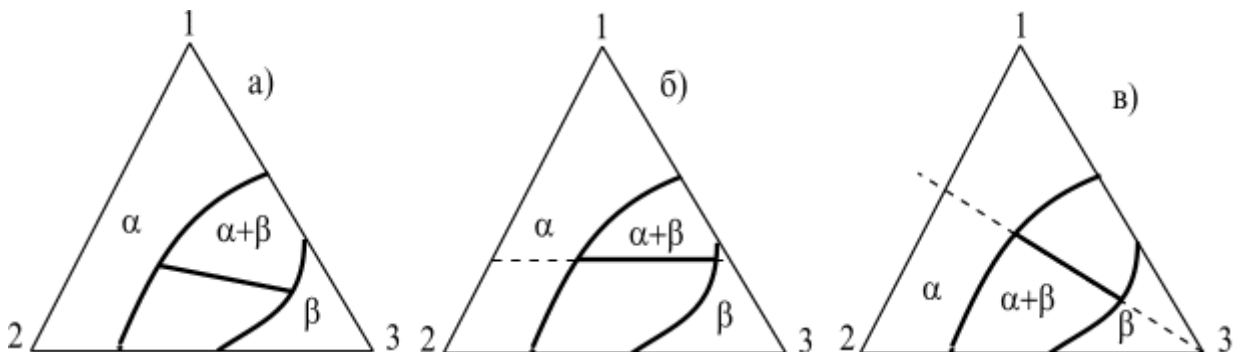


Рис. 6.1. Положення коноди  $\alpha + \beta$  в умовах повної (а) і неповної (б і в) двофазної рівноваги: а – орторівновага; б – метарівновага; в - парарівновага

На ньому двофазна область  $\alpha + \beta$  показана однаковою для всіх трьох видів рівноваги. Насправді розмір цієї області залежить від типу рівноваги. При парарівновазі (а також при будь-якому іншому відхиленні від орторівноваги) двофазна область звужується.

З фізичної точки зору порушення рівноваги в системі може привести до розшарування однофазного твердого розчину, яким є сплав, на дві чи декілька стабільних фаз з утворенням їх механічної суміші, або розпаду хімічних з'єднань на елементи чи стабільні з'єднання. В композиційних зносостійких матеріалах такому розшаруванню можуть піддаватися тверді розчини матриці, а також деякі зміцнюючі метастабільні фази. Накопичення енергії в сплаві як цілісній системі (наприклад за рахунок нагрівання) та флуктуація енергії в локальних мікрооб'ємах (наприклад концентрація дислокацій на потужних стопорах та формування субструктури) також може викликати втрату стабільності структурного стану: рух структурних компонентів (дифузія включень), розпад хімічних з'єднань, фазові перетворення, зміна форми границь розділення фаз та інше.

Користуючись схемою, показаною на рис. 6.1, легко можна побачити, що для переведення системи з метастабільної в стабільну рівновагу (з положення 1б у положення 1в) необхідно подолати енергетичний бар'єр  $\Delta G_M$ , а потім створити умови для розсіювання надлишкової вільної енергії  $\Delta G_C$ . В залежності від глибини потенціальної ями, досягнутої при розсіюванні вільної енергії (від значення  $\Delta G_C$ ), залежить запас стабільності системи. Очевидно, що цей критерій залежить не тільки від абсолютного значення  $\Delta G_C$ , а й від умов експлуатації системи, тобто від потужності потоків енергії, які нею поглинаються та розсіюються.

## **6.1. Дислокаційна структура та її вплив на стабільність композиційного матеріалу**

**6.1.1. Загальні положення.** Як показано вище, система в стані рівноваги має мінімальне значення внутрішньої енергії, що стосовно до конденсованих систем це відповідає стану з мінімальною енергією Гіббса. Суттєвий вклад в значення внутрішньої енергії вносять недосконалість кристалічної ґратки : дефекти та дислокації.

Найбільш розповсюдженими представниками точкових дефектів є вакансії. Термічні вакансії є рівноважними дефектами. Їх атомна частка визначається методами статистичної фізики [185, 186]. Окрім рівноважних вакансій в кристалах під впливом нестационарних термічних полів, деформацій або фазових перетворень утворюється надлишок дефектів. Пересичення матеріалу надлишковими вакансіями та дислокаціями приводить до дестабілізації структури. Процеси утворення, час життя і релаксація надлишкових вакансій значно впливають на кінетику перетворень та еволюцію матеріалу в стабільний стан [185].

Дислокації є головним джерелом внутрішньої напруги у кристалі [187, 188, 189]. Дислокації - термодинамічно нерівноважний дефект кристалічної ґратки, який збільшує вільну енергію всієї системи. Разом з цим, вони порівняно стійкі і схильні до переходу із однієї модифікації в іншу, змінюючи при цьому свої кристалоструктурні параметри орієнтації [190]. Володіючи високою енергією утворення, дислокації в пружно деформованій області створюють навколо себе значну пружну енергію. Абсолютна величина цієї пружної енергії відповідає роботі, яку необхідно виконати для утворення дислокації в ідеальному кристалі. Для гвинтової дислокації довжиною  $L$  і зовнішнім та внутрішнім радіусами  $R$  і  $r_0$  відповідно, вона дорівнює:

$$U_{np.зв.} = \frac{Gb^2L}{4\pi} \ln \frac{R}{r_0} \quad (6.1)$$

Енергія поля пружних напружень крайової дислокації за умов суцільності та безперервності:

$$U_{np.кр.} = \frac{Gb^2L}{4\pi} \frac{1}{1-\nu} \ln \frac{R}{r_0} \quad , \quad (6.2)$$

де  $\nu$  – коефіцієнт Пуассона,  $G$  - модуль зсуву.

Для змішаної дислокації, що описується як адитивна величина крайової і гвинтової дислокацій, енергія поля пружних напружень дорівнює сумі енергій кожної із двох дислокацій:

$$U_{np.зм.} = \frac{Gb^2L}{4\pi(1-\nu)} \ln \frac{R}{r_0} (1-\nu \cos^2 \alpha) \quad (6.3)$$

де  $\alpha$  – кут між векторами Бюргерса крайової і гвинтової дислокацій.

Щоб отримати повну енергію дислокації, потрібно до вказаної пружної енергії додати енергію, зосереджену всередині ядра дислокації. За різними оцінками енергія ядра дислокації значно менша енергії, що зосереджена зовні ядра дислокації. Ця енергія достатньо велика, щоб вивести кристал з дислокаціями з термодинамічної рівноваги.

Внаслідок пружної взаємодії може бути досягнуто перерозподіл дислокацій і зниження термодинамічного потенціалу.

Дві крайові дислокації з паралельними векторами Бюргерса взаємодіють з силою [190, 191] :

$$P_x = \frac{Gb^2}{2\pi(1-\nu)} \cdot \frac{x^2(x^2 - h^2)}{(x^2 + h^2)^2} \quad (6.4)$$

$$P_y = \frac{Gb^2}{2\pi(1-\nu)} \cdot \frac{h(3x^2 + h^2)}{(x^2 + h^2)^2} \quad (6.5)$$

Сила, що діє на другу дислокацію в її площині ковзання  $g = h$  визначається величиною дотичних напружень першої дислокації в координатних точках  $x$  і  $h$ . Таким чином дислокації одного знаку відштовхуються при  $x > h$  і притягуються при  $x < h$ . При значеннях сил  $x=0$  – стійка рівновага і при  $x = h$  – нестійка рівновага. Дислокації протилежних знаків взаємно притягуються вздовж площин ковзання при  $x > h$  і відштовхуються при  $x < h$ . Стійка рівновага при  $x = h$  і нестійка при  $x = 0$ .

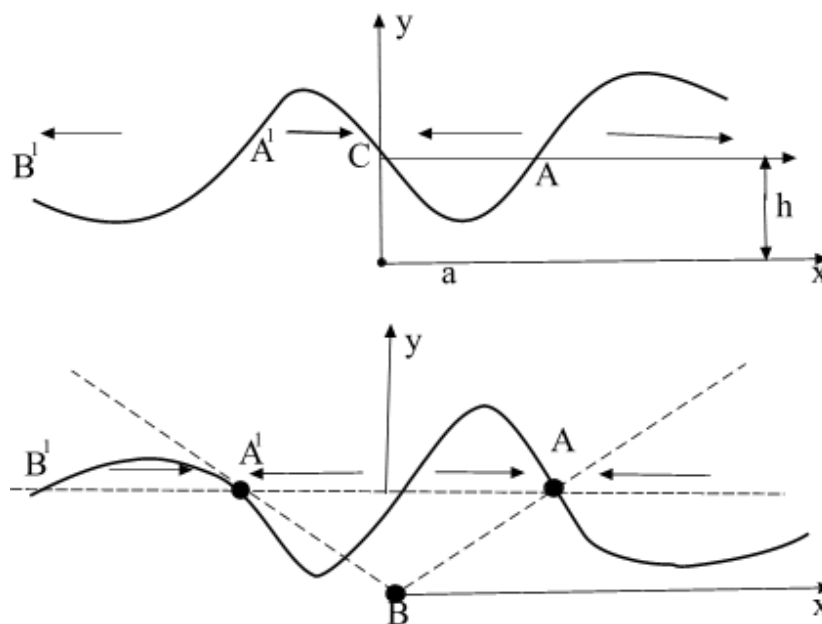


Рисунок 6.2 – Силова схема взаємодії між двома паралельними дислокаціями

Для гвинтової дислокації аналогічно маємо:

$$P_x = \frac{Gb^2x}{2\pi(x^2 + y^2)}, \quad P_y = \frac{Gb^2y}{2\pi(x^2 + y^2)}. \quad (6.6)$$

Таким чином, пружна взаємодія дислокацій може привести до утворення дислокаційної стінки. Щоб опинитись в положенні рівноваги, дислокації не тільки переміщуються в площині ковзання, але й нормально до неї “сходять”. Останнє можливо, якщо край площини поглинає або випускає вакансії [190, 192].

Іншими словами, сходження дислокацій пов’язано з дифузією вакансій, яка з помітною швидкістю проходить лише при підвищених температурах [193]. Якщо число атомів краю півплощини  $n$ , то ймовірність переміщення :

$$W \approx \exp\left(-n \frac{E_d}{kT}\right), \quad (6.7)$$

де  $E_d$  – енергія утворення дислокації.

Найбільш ймовірно, що взаємодіяти з вакансіями будуть в більшій мірі сходинки на дислокаціях. Внаслідок малої енергії їх утворення при підвищених температурах виникає значна кількість сходинок. Концентрація таких сходинок пропорційна ймовірності їх утворення:

$$C \approx \exp\left(-\frac{E_j}{kT}\right), \quad (6.8)$$

де  $E_j$  – енергія утворення сходинок.

Переповзання дислокації проходить за рахунок самодифузії, при цьому швидкість переповзання пропорційна добутку концентрації сходинок на швидкість їх переміщення вздовж дислокації:

$$V = \nu l \frac{b^2 F}{kT} \exp\left(-\frac{E_T E_j}{kT}\right), \quad (6.9)$$

де  $\nu$  – частота коливань атомів;

$F$  – сила, що необхідна для переміщення дислокації довжиною  $l$ ;

$E$  – енергія активації самодифузії.

Для даного матеріалу енергія активації самодифузії є постійною величиною і рівняння запишеться у вигляді:

$$V \approx \frac{D}{kT} F \cdot l \cdot \exp\left(-\frac{E_j}{kT}\right). \quad (6.10)$$

Вишикувані біля стінки дислокації утворюють субзерна, повернуті одні відносно інших на невеликі кути. Сформовані субграниці достатньо стабільні, оскільки спотворення, викликані дислокаціями, розповсюджуються не на весь кристал, а локалізуються поблизу ядер дислокацій на границі субзерен і величина пружної енергії при цьому зменшується [190, 194].

Різноманітність видів субграниць обумовлює їх різну стійкість. В процесі тривалого термічного впливу субграниця може змінюватись: збільшується відстань між дислокаційними стінками, розпадаються менш стійкі, об'єднуються при цьому з сусідніми, більш стійкими стінками [190, 195, 196]. Таким чином, деформовані матеріали, що мають високу ступінь дефектності, зокрема, високу густину дислокацій, являються термодинамічно нестабільними. При нагріванні, в першу чергу, знімаються пружні спотворення кристалічної ґратки. Далі відбувається взаємне знищення дислокацій протилежних знаків і нарешті формування субструктури.

Усі процеси взаємодії і перерозподілу недосконалостей кристалічної будови супроводжуються зменшенням вільної енергії матеріалу, відповідають законам теорії утворення фаз. Фазові перетворення відбуваються тоді, коли вони супроводжуються зменшенням вільної енергії:

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S < 0. \quad (6.11)$$

Зміна ентальпії  $\Delta H$  системи в результаті перетворення рівна тепловому ефекту з протилежним знаком. В свою чергу

$$\Delta H = \Delta U + P\Delta V. \quad (6.12)$$

Для конденсованих систем  $\Delta H \approx \Delta U$ . Згідно другого закону термодинаміки, самовільний процес в ізольованій системі проходить, якщо ентропія зростає. Проте в реальних умовах досліджувані тіла не є ізольованими, можливий теплообмін з оточуючим середовищем. З цієї причини істинним критерієм процесу є не ентропія, а вільна енергія. Процес проходить, якщо  $\Delta G < 0$ . Таким чином, в неізольованих системах умовою рівноваги являється не максимум ентропії, а мінімум вільної енергії  $G$ .

Велике значення для підвищення стабільності реальних полікристалічних матеріалів має вивчення механізмів зниження рівня їх внутрішньої енергії. Ефективним напрямком в даній роботі є використання механізмів внутрішнього тертя (ВТ), які дозволяють значно зменшувати накопичену внутрішню енергію та релаксувати напруження, що виникають в процесі фазових перетворень і дії зовнішніх експлуатаційних факторів. До таких факторів в першу чергу потрібно віднести потоки енергії та маси, які зумовлені фрикційною взаємодією, технологічним та навколишнім середовищем.

**6.1.2. Взаємодія між дислокаціями і некогерентними компонентами евтектичних структур.** Зміцнення дисперсних систем значною мірою залежить від того, чи є частки другої фази або неметалічні включення ефективними бар'єрами, що перешкоджають руху дислокації. Виникаючі в результаті взаємодії дислокацій і включень пружні напруження приводять до збільшення значення границі текучості, тобто поліпшують характеристики міцності матеріалу. З іншого боку, концентрація цієї напруги на границі поверхні розділу матриця — включення створює умови для зародження і розвитку тріщин, що впливає на особливості руйнування матеріалу при досить сильних пластичних деформаціях. Тому докладний аналіз механічних властивостей реальних дисперсійно зміцнених матеріалів повинен містити дослідження взаємодії між дислокаціями і дисперсними частками. При цьому насамперед необхідно вирішити пружну задачу з заданими граничними умовами і визначити розподіл напруги навколо включення (і усередині нього), якщо поблизу включення розташована дислокація. Очевидно, що отримане рішення буде залежати від пружних постійних матриці і включення, від форми поверхні розділу, типу і конфігурації дислокації (чи від структури скупчення дислокацій), а також від умов на границі [197].

У роботах Хеда [198,199] приведені аналітичні рішення пружної задачі для одиничних крайових і гвинтових дислокацій поблизу границі між двома напівнескінченими твердими тілами, причому розглянуті три основних типи граничних умов: вільна границя, границя зварювання і ковзна границя. Чоу



[201] використовував рішення Хеда [199] для дослідження накопичення гвинтових дислокацій поблизу плоскої границі з твердою напівнескінченною другою фазою. У роботі Дандерса і Мура [200] представлено точне рішення пружної задачі для випадку, коли прямолінійна крайова дислокація розташована поблизу циліндричного включення у припущенні, що границя між матрицею і включенням є досконалою (границя зварювання). Використовуючи рішення для однієї гвинтової дислокації за методикою, запропонованою у роботі [200], Барнет і Тетельман розглянули [202] гвинтове накопичення дислокацій поблизу твердого циліндричного включення радіуса  $R$ .

Достатньо коректні результати вдається отримати при моделюванні евтектичних систем шляхом представлення її структурних складових у вигляді циліндричних включень (карбіди, бориди, силіциди та інші) у матриці, яка є твердим розчином металоїдів у залізі.

У даній роботі проведено розрахунок поля напруги, створюваної поблизу циліндричного включення прямолінійною крайовою дислокацією, коли на границі розділу відбулася релаксація дотичних напружень. При цьому, так само як і в роботі [200], був використаний метод комплексних потенціалів [203]. Отримана також оцінка швидкості дифузійного руху такого включення, зв'язаного з наявністю градієнта пружних напружень.

Взаємне розташування площини ковзання, напрямок вектора Бюргерса дислокації й осі циліндричного включення в загальному випадку може бути довільним. При цьому лінія дислокації в результаті пружної взаємодії з включенням буде вигинатися, приймаючи складну форму. У випадку, коли площина ковзання рівнобіжна осі циліндричного виділення, лінію заблокованої таким виділенням дислокації може з достатньою підставою вважатися прямолінійною. При цьому відповідна задача теорії пружності в гарному наближенні може розглядатися як плоска задача, що дозволяє одержати вирази для компонентів тензора напруги  $\sigma_{ij}$  і вектора зсувів  $U$  в аналітичному вигляді.

Розглянемо крайову дислокацію, розташовану в нескінченному середовищі поблизу циліндричного включення так, що площина ковзання дислокації рівнобіжна осі циліндра. Як відомо [203], для здійснення випадку плоскої деформації необхідно, щоб на граничних площинах, перпендикулярних осі циліндра, діяли нормальні напруги  $\sigma_{nl}$ , які визначаються за формулою

$$\sigma_{nl} = \left(K - \frac{2}{3}\mu\right)\Theta, \quad (6.13)$$

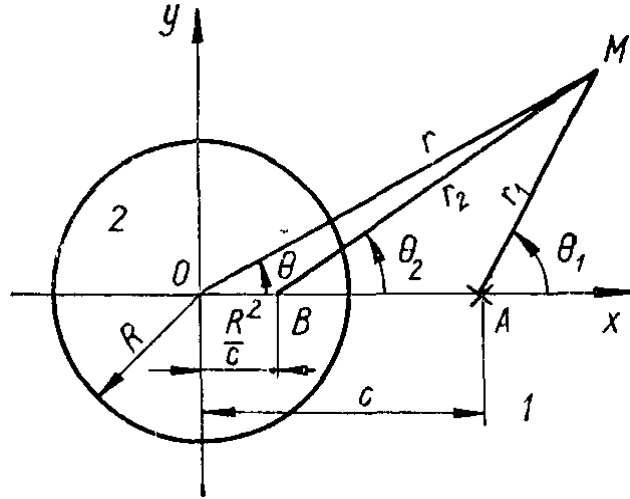
де  $K$  і  $\mu$  — модуль всебічного стиску і модуль зсуву, а  $\Theta$  — відносне об'ємне розширення, зв'язане з даним напруженим станом. Величина  $\sigma_{nl}$  не може бути обрана довільно, а визначається після рішення основної задачі плоскої теорії пружності. Це незручність легко усувається у випадку досить довгого циліндра (коли його довжина  $L$  значно більше радіуса  $R$ ).

Задача про рівновагу довгого циліндра під дією нормальної напруги, прикладених до основ, розв'язується елементарним шляхом, і з цього рішення і рішення плоскої задачі при заданих граничних умовах на поверхні циліндра

і відповідним чином розташованої сингулярності одержимо рішення задачі рівноваги циліндра під дією тієї же напруги, але у випадку, коли основи вільні від напруги. Варто помітити, що в цьому випадку деформація вже не буде плоскою.

На рис. 6.3 представлений перетин, перпендикулярний лінії прямолінійної крайової дислокації, що у свою чергу рівнобіжна осі циліндричного включення.

Рисунок 6.3 – Схема розташування крайової дислокації біля циліндричного включення



ного включення

Позначимо величини, обумовлені в матриці і у включенні, відповідно індексами  $m$  і  $вкл$ . Граничні умови у випадку, коли напруги на нескінченності зникають і дотичні напруження на границі розділу цілком релаксують, можуть бути записані в наступному вигляді:

$$\sigma^m \Big|_{R=r} = \sigma^{вкл} \Big|_{r=R}, \quad (6.14)$$

$$\tau^m \Big|_{R=r} = \tau^{вкл} \Big|_{r=R}, \quad (6.15)$$

$$u_1^m \Big|_{\kappa=K} = u_1^m \Big|_{r=R}, \quad \sigma_{ij} = 0, \quad (6.16)$$

де компоненти тензора напруги  $\sigma = \sigma_{rr}$ ,  $\tau = \tau_{rr}$  і вектора зсувів  $U_r$  представлені в полярній системі координат  $(R, \Theta)$ , центр якої розташований на осі включення, а кут  $\Theta$  відраховується від лінії, що лежить у площині, перпендикулярній цій осі, і з'єднує центр виділення з лінією дислокації. Необхідно зажадати, щоб у точці  $A$ , у якій розташована крайова дислокація, мала місце сингулярність, так що

$$\oint_L dU = b, \quad (6.17)$$

для будь-якого контуру  $L$ , що охоплює точку  $A$  ( $b$  — вектор Бюргерса дислокації).

Для рішення задачі скористаємося функцією Ейрі  $U$ , що у випадку відсутності об'ємних сил є бігармонічною, і представимо її за допомогою комплексних потенціалів  $\varphi(z)$  і  $\chi(z)$ , де комплексна перемінна  $z = r^{i\Theta}$ . При цьому виконується рівність [203]

$$U = \operatorname{Re}\{\bar{z} \varphi(z) + \chi(z)\}, \quad (6.18)$$

де  $\operatorname{Re}$  — дійсна частина, а риска над  $z$  означає операцію комплексного спряження.

Компоненти тензора напруги знаходять з виразів

$$\sigma + \sigma_{\Theta\Theta} = 2[\varphi'(z) + \overline{\varphi'(z)}]; \quad (6.19)$$

$$\sigma_{\Theta\Theta} - \sigma + 2i\tau = 2[\bar{z}\varphi''(z) + \psi'(z)]e^{2i\Theta}, \quad (6.20)$$

де  $\psi(z) = \frac{d\chi(z)}{dz}$ , а штрих означає операцію диференціювання по  $z$ .

Компоненти вектора зсуву  $U_r, V_\Theta$  у полярній системі координат визначаються зі співвідношення

$$U_r + iV_\Theta = \frac{1}{2\mu} e^{-i\Theta} [\varkappa \varphi(z) - \overline{z\varphi'(z)} - \overline{\psi(z)}], \quad (6.21)$$

де

$$\varkappa = 3 - 4\nu, \quad (6.22)$$

( $\nu$  — коефіцієнт Пуассона).

З виразів (6.19), (6.20) випливає, що напружений стан не зміниться, якщо до функції  $\varphi(z)$  додати доданок  $iCz + \gamma$ , а до функції  $\psi(z)$  — доданок  $\gamma'$ , де  $C$  — дійсна, а  $\gamma$  і  $\gamma'$  — довільні комплексні постійні. Це дозволяє, наприклад, вибрати функції  $\varphi(z)$  і  $\psi(z)$  так, щоб  $\varphi(0) = 0$ ,  $\psi(0) = 0$  і  $\varphi'(0) - \overline{\varphi'(0)} = 0$ .

При заданих зсувах, як випливає з виразів (6.21) [203],  $C=0$  і  $\varkappa\gamma - \gamma' = 0$  і певним вибором  $\gamma$  або  $\gamma'$  можна домогтися, щоб  $\varphi(0) = 0$  або  $\psi(0) = 0$ .

Граничні умови (6.14), (6.15) за допомогою комплексних потенціалів можна записати в наступному вигляді:

$$\Delta_1[\varphi(z_0)]' + \Delta_1[\overline{\varphi(z_0)}]' - \operatorname{Re}^{i\Theta} \Delta_1[\varphi(z_0)]' - e^{2i\Theta} \Delta_1[\psi(z_0)]' = 0; \quad (6.23)$$

$$R\{[\varphi^m(z_0)]'' e^{i\Theta} - [\overline{\varphi^m(z_0)}]'' e^{i\Theta}\} + [\psi^m(z_0)]' e^{2i\Theta} - [\overline{\psi^m(z_0)}]' e^{-2i\Theta} = 0; \quad (6.24)$$

$$y^{-2i\Theta} \Delta_2[\varkappa \varphi(z_0)] + e^{i\Theta} \Delta_2[\overline{\varkappa \varphi(z_0)}] - R\{\Delta_2[\varphi(z_0)]' + \Delta_2[\overline{\varphi(z_0)}]\} - e^{i\Theta} \Delta_2[\psi(z_0)] - e^{-i\Theta} \Delta_2[\overline{\psi(z_0)}] = 0, \quad (6.25)$$

де введені наступні позначення:

$$\Delta_1[f(z_0)] \equiv f^M(z_0) - f^{6\kappa l}(z_0), \quad (6.26)$$

$$\Delta_2[f(z_0)] \equiv f^M(z_0) - \frac{\mu^M}{\mu^{6\kappa l}} f^{6\kappa l}(z_0), \quad z_0 = \text{Re}^{i\Theta}, \quad (6.27)$$

і індекс  $l$  означає, що дана величина розглядається у відповідній  $l$ -області ( $l=1(m), 2(вкл)$ ).

Таким чином, задавання функцій  $\varphi(z)$  і  $\psi(z)$  із зазначеними вище умовами цілком визначають напружений стан.

**6.1.3. Обчислення компонентів тензора пружних напружень.** У загальному випадку, коли напрямок вектора Бюргерса дислокації складає з обраною нами (див. рис.6.4) полярною віссю  $Ox$  кут  $\Theta_0$ , функція напруги Ейрі  $U$  може бути записана у вигляді двох доданків:

$$U = U_{\parallel} \cos \Theta_0 + U_{\perp} \sin \Theta_0, \quad (6.28)$$

де  $U_{\parallel}$  і  $U_{\perp}$  - функції напруги Ейрі для випадку, коли напрямок вектора Бюргерса дислокації  $b$  збігається з напрямком зовнішньої нормалі  $n$  до поверхні виділення, і для випадку, коли ці напрямки ортогональні один одному.

Відповідні вирази для величин  $U_{\parallel}$  і  $U_{\perp}$  можуть бути отримані незалежно. Наприклад, для крайової дислокації, коли площина ковзання проходить через осі симетрії включення, відповідно до робіт [197, 200] комплексні потенціали будемо шукати в наступному вигляді:

$$\varphi_{\parallel}^M(z) = P \left\{ -\ln(z-c) + E \ln\left(z - \frac{R^2}{c}\right) + F \left(z - \frac{R^2}{c}\right)^{-1} + H \ln z \right\}; \quad (6.29)$$

$$\begin{aligned} \varphi_{\parallel}^M(z) = P \left\{ \chi^M \ln(z-c) + b(z-c)^{-1} + I \ln\left(z - \frac{R^2}{c}\right) + J \left(z - \frac{R^2}{c}\right)^{-1} + \right. \\ \left. + K \left(z - \frac{R^2}{c}\right)^{-2} + L \ln z + Mz^{-1} + Nz^{-2} \right\}; \end{aligned} \quad (6.30)$$

$$\varphi_{\parallel}^{6\kappa l}(z) = P \left\{ Q \ln(z-c) + R \ln\left(z - \frac{R^2}{c}\right)^{-1} + sz + Tz^2 \right\}; \quad (6.31)$$

$$\varphi_{\parallel}^{6\kappa l}(z) = P \left\{ U \ln(z-c) + V \left(z - \frac{R^2}{c}\right)^{-1} + W \left(z - \frac{R^2}{c}\right)^{-2} \right\}; \quad (6.32)$$

Підставляючи вирази (6.29)—(6.32) в умови (6.23)—(6.25) і розв'язуючи отриману систему рівнянь, відшукаємо значення довільних постійних і за допомогою формули (6.18) одержимо явний вираз для  $U_{\parallel}$ :

$$U_{\parallel}^M = \frac{\mu^M b}{\pi(\chi^M + 1)} \left\{ -2r_1 \ln r_1 \sin \Theta_1 + (A + B)(r_2 \ln r_2 \sin \Theta_2 - \right. \\ \left. - r \ln r \sin \Theta) + 2(B - A)(r_2 \Theta_2 \cos \Theta_2 + r \Theta \cos \Theta + \frac{R}{\beta} \Theta) - \right. ; \quad (6.33)$$

$$\left. - A \frac{\beta^2 - 1}{\beta^3} R [\sin 2\Theta_2 + 2 \frac{\beta^2 - 1}{\beta} R \frac{\sin \Theta_2}{r_2}] - AR^2 \frac{\sin \Theta}{r} \right\}$$

$$U_{\parallel}^{6\kappa l} = \frac{\mu^M b}{\pi(\chi^M + 1)} \left\{ -(2 - A + B)r_1 \ln r_1 \sin \Theta_1 + \right. \\ \left. + 2(B - A)(r_1 \Theta_1 + r \Theta \cos \Theta_1 + \frac{\beta^2 - 1}{\beta} R \Theta_1) \right\} , \quad (6.34)$$

$$\text{де} \quad \beta = \frac{c}{R} \geq 1; \quad (6.35)$$

$$A = \frac{1 - \Gamma}{1 + \chi^M \Gamma}; \quad (6.36)$$

$$B = \frac{\chi^{6\kappa l} - \chi^M \Gamma}{\chi^{6\kappa l} + \Gamma}; \quad (6.37)$$

$$\Gamma = \frac{\mu^{6\kappa l}}{\mu^M}, \quad (6.38)$$

а позначення величин  $c$ ,  $r$ ,  $\Theta$ ,  $r_1$ ,  $\Theta_1$ ,  $r_2$ ,  $\Theta_2$  показані на рис.6.3. Компоненти тензора напруги можуть бути легко отримані з виразів для функції Ейрі (6.33) і (6.34) за допомогою відомих співвідношень

$$\sigma_{xx} = \frac{\partial^2 U}{\partial y^2}; \quad \sigma_{xy} = -\frac{\partial^2 U}{\partial x \partial y}; \quad \sigma_{yy} = \frac{\partial^2 U}{\partial x^2}. \quad (6.39)$$

Аналогічно, використовуючи дані робіт [197, 200] і підставляючи відповідні вирази для  $\varphi_1(z)$  і  $\psi_1(z)$  в співвідношення (6.23) — (6.25), одержимо явний  $\perp$  вигляд функції  $U_{\perp}$ :

$$U_{\perp}^M = \frac{\mu^M b}{\pi(\chi^M + 1)} \{2r_1 \ln r_1 \cos \Theta_1 - (A + B)(r_2 \ln r_2 \cos \Theta_2 - r \ln r \sin \Theta) +$$

$$+ 2(B - A)(r_2 \Theta_2 \sin \Theta_2 + r \Theta \sin \Theta) + A \frac{\beta^2 - 1}{\beta^3} R [2\beta^2 \ln r - \cos 2\Theta_2 - \quad ; \quad (6.40)$$

$$- 2 \frac{\beta^2 - 1}{\beta} R \frac{\cos \Theta_2}{r_2}] - 2[A(2\beta^2 - 1) + M(\chi^{6\kappa l} + 1) - 1] \frac{R}{\beta} \ln R + AR^2 \frac{\sin \Theta}{r} \}$$

$$U_{\perp}^{6\kappa l} = \frac{\mu^M b}{\pi(\chi^M + 1)} \{(2 - A + B)r_1 \ln r_1 \cos \Theta_1 + 2(B - A)[r_1 \Theta_1 \sin \Theta_1 +$$

$$+ \frac{\beta^2 - 1}{\beta} R \ln r_1] - M \frac{1 - \Gamma}{\beta R} r^2 \} \quad ; \quad (6.41)$$

де

$$M = \frac{(\chi^M + 1)\Gamma}{(\chi^{6\kappa l} + \Gamma)(\chi^{6\kappa l} - 1 + 2\Gamma)} . \quad (6.42)$$

Підставляючи  $U_{||}$  і  $U_{\perp}$  зі співвідношень (6.33), (6.34) і (6.40), (6.41) у (6.28), з допомогою (6.39) легко показати, що загальний вираз для компонентів тензора напруги може бути записане в наступному виді:

$$\sigma_{ij}^l = \frac{\mu^M (b, \Phi_{ij}^l)}{\pi(\chi^M + 1)r_1}, \quad (6.43)$$

де  $\Phi_{ij}^l$ -вектор, довжина якого порядку  $r_1$ , а напрямок складним чином залежить від  $r_1$  і  $\theta$ . За допомогою зазначених операцій визначення компонент  $\Phi_{ij}^l$  не зустрічає труднощів, однак у силу громіздкості не будемо приводити тут явних виразів для них. Як приклад приведемо вирази для компонентів вектора  $\Phi_{xx}^m$  :

$$\Phi_{xx}^{x..m} = 2y \left\{ \frac{2x_1^2 + 1}{\rho_1^2} + (A + B) \left[ \frac{1 + 2x_2^2}{\rho_2^2} - (1 + 2x^2) \right] + (B - A) \left( x^2 - \frac{2R}{\beta r} x - \frac{x_2^2}{\rho_2^2} \right) - \right.$$

$$\left. - A \frac{\beta^2 - 1}{\beta^3} \cdot \frac{R}{r} \left[ 2 \frac{x_2(1 - 4x_2^2)}{\rho_2^3} - \frac{\beta^2 - 1}{\beta} \cdot \frac{R}{r} \cdot \frac{1 - 4x_2^2}{\rho_2^4} \right] - A \left( \frac{R}{r} \right)^2 \frac{1 - 4x_2^2}{r^2} \right\}; \quad (6.44)$$

$$\Phi_{xx}^{y..m} = 2x_1 \frac{2x_1^2 - 1}{\rho_1} - (A + B) \left[ \frac{2x_2^2 - 1}{\rho_2} x_2 - x(1 - 2x^2) \right] + 2(B - A) \left( \frac{x_2^3}{\rho_2} - x^3 \right) +$$

$$+ 2A \frac{\beta^2 - 1}{\beta^3} \cdot \frac{R}{r_2 \rho_2} [\beta(2x_2^3 - 1) - x_2(3 - 4x_2^2)] (2x_2 - \frac{\beta^2 - 1}{\beta} \cdot \frac{R}{r_2}) - [A(2\beta^2 - 1) +$$

$$+ M(\chi^M + 1) - 1] \frac{R}{\beta r} (2x^2 - 1) + 2A \frac{R^2}{r^2} x(3 - 4x^2); \quad (6.45)$$

Для спрощення у формулах (6.44), (6.45) використані наступні позначення безрозмірних перемінних:

$$X_l = \frac{x_l}{r_l}; \quad X = \frac{x}{r_1}; \quad Y = \frac{y}{r_1}; \quad \rho_l = \frac{r_l}{r_1}, \quad (l=1,2). \quad (6.46)$$

Легко бачити, що в граничному випадку ( $R \rightarrow \infty$ ,  $\Theta_0 = 0$ ) формули (6.43), (6.44) і (6.45) переходять у відповідні вирази, отримані в роботі Хеда [198] для ковзної границі.

**6.1.4. Оцінка швидкості дифузійного руху включення.** У полі пружних напружень з'являються дифузійні потоки вакансій, що приводять до неоднорідного дифузійно-в'язкого переміщення різних частин матеріалу один відносно іншого. Дифузійний рух включень у твердих тілах при наявності неоднорідної напруги розглядалося в роботі [197]. При досить високій температурі величина швидкості переміщення включення може бути значною, що може привести до якісної перебудови структури дисперсійної системи. Дифузійна рухливість включень може також безпосередньо впливати на пластичні властивості матеріалу, приводячи до виникнення особливого механізму подолання перешкод при русі дислокації [197, 202].

Проведемо оцінку швидкості такого руху для розглянутого вище випадку полів пружних напружень, що виникають у результаті взаємодії прямолінійної крайової дислокації і циліндричного включення.

З формул (6.33) — (6.42) легко обчислити суму діагональних елементів тензора напруги  $\sigma_{ij}$ , значення якої поблизу поверхні розділу в матриці визначає дифузійні потоки атомів матриці уздовж границі розділення. Величина  $\sigma_{ij}^l$  може також бути представлена за допомогою виразу (6.43), у якого замість вектора  $\Phi_{ij}^l$  варто підставити вектор  $\Phi_{ij}^l = \sum_l \Phi_{ij}^l \delta_{ij}$ . Розглядаючи, зокрема, значення  $\sigma_{ij}^m$  в області матриці, одержуємо

$$\begin{aligned} \Phi_{ii}^{x,m} &= 4(1+\nu^m)y \left[ -\frac{1}{\rho_1^2} + A \left( \frac{1}{\rho_2^2} - 1 \right) - 2A \frac{\beta^2 - 1}{\beta^3} \cdot \frac{R}{r} \cdot \frac{x_2}{\rho_2^2} \right]; \\ \Phi_{ii}^{y,m} &= 4(1+\nu^m)y \left[ -\frac{x_1}{\rho_1^2} + A \left( \frac{x_2}{\rho_2} - x \right) - 2A \frac{\beta^2 - 1}{\beta^3} \cdot \frac{R}{r} \cdot \frac{2x_2^2 - 1}{\rho_2^2} \right], \end{aligned} \quad (6.47)$$

де використані безрозмірні змінні, які визначені в формулах (6.46).

З формул (6.43) і (6.47) видно, що величина  $\sigma_{ij}^m$  має складну кутову залежність. У випадку циліндричного включення в перетині, що нормальне до осі циліндра, симетрія розподілу напруги на поверхні включення відсутня. Це утруднює знаходження швидкості дифузійно-в'язкого руху виділення тому,

що не можна апріорно визначити напрямок цієї швидкості. В загальному випадку величина і напрямок дифузійного переміщення включення виявляється функцією радіуса-вектора  $\mathbf{c}$ , що з'єднує лінію дислокації з центром включення, і рух буде відбуватися по складному криволінійному шляху.

Розглянемо випадок, коли дифузійний рух включення відбуватися за рахунок граничної дифузії. При цьому як модель некогерентної границі частка-матриця можна розглядати тонкий аморфізований шар, кожна ділянка якого може бути джерелом або стоком вакансій і може «розчиняти» атоми матриці.

При наявності градієнта напруги відбувається безперервний процес «розчинення» і руху атомів матриці уздовж границі, що приводить до появи граничного потоку атомів  $j_s$ , який викликає рух елемента границі зі швидкістю  $v$ , яка визначається з такого виразу:

$$(v, n) = - \frac{D_s a}{kT} \Delta_s \mu_s; \quad \mu_s = \mu_0 - \frac{1}{3} \omega \sigma_{ii(s)}^M, \quad (6.48)$$

де  $n$  — вектор нормалі до поверхні границі;

$D_s$  — коефіцієнт граничної дифузії, віднесений до одноатомного шару товщиною  $a$ ;

$\Delta_s$  - поверхневий лапласіан;

$\mu_s$  — хімічний потенціал атома матриці на поверхні;

$\mu_0$  — хімічний потенціал на поверхні при відсутності напруги;

$\omega$  - атомний об'єм атомів матриці.

Величина суми діагональних елементів тензора напруги в матриці  $\sigma_{ij(s)}^M$  на поверхні циліндричного включення за допомогою формул (6.43) і (6.47) може бути записана у вигляді:

$$\sigma_{ii(s)}^M = \frac{4\mu^M(1+\nu^M)b}{\pi(\aleph^M+1)c} \left\{ \cos \theta_0 \sin \theta_0 \left[ \frac{2A\varepsilon \cos \theta - 1 - \varepsilon^2}{1 + \varepsilon^2 - 2\varepsilon \cos \theta} - 2\varepsilon(1 - \varepsilon^2) \frac{\cos \theta - \varepsilon}{(1 + \varepsilon^2 - 2\varepsilon \cos \theta)^2} \right] + \left[ \frac{\varepsilon \cos \theta - 1}{1 + \varepsilon^2 - 2\varepsilon \cos \theta} + A \frac{1 - 2 \cos^2 \theta - \varepsilon \cos \theta}{1 + \varepsilon^2 - 2\varepsilon \cos \theta} + A(1 - \varepsilon^2) \frac{2 \cos^2 \theta - 1 - 2\varepsilon \cos \theta + \varepsilon^2}{(1 + \varepsilon^2 - 2\varepsilon \cos \theta)^2} \right] \right\}, \quad (6.49)$$

де  $\varepsilon = \frac{R}{c}$ .

Напрямок швидкості дифузійного переміщення повинен збігатися з напрямком нормалі до поверхні включення в точці, де величина  $\Delta_s \sigma_{ij(s)}^M$  має максимальне значення. У випадку, коли  $\varepsilon \ll 1$ , вираз (6.49) з точністю до лінійних по  $\varepsilon$  членів, може бути представлено у вигляді

$$\sigma_{ii(s)}^M = - \frac{4\mu^M(1+\nu^M)b}{\pi(\aleph^M+1)c} \left[ \cos \theta_0 \cos \varphi (1 - 2(A-2)\varepsilon \sin \varphi) + \varepsilon \sin \theta_0 (1 - 2A \sin^2 \varphi) \right], \quad (6.50)$$



де зроблена заміна  $\varphi = \frac{\pi}{2} - \Theta$ . Величина  $\Delta_s \sigma_{ij(s)}^M$  набуває максимального значення при  $\varphi = 0$ , і напрям швидкості руху включення в цьому випадку увесь час залишається ортогональним напрямку вектора  $\mathbf{c}$ . Величина швидкості дифузійного переміщення включення після деякого часу релаксації буде визначатися тільки членом, пропорційним виразу (6.50). Дифузійні потоки, які викликані факторами, що описуються іншими членами у виразі (6.50), будуть викликати ефект ущільнення речовини поблизу поверхні розділення, який для жорстких включень ( $\mu^M \ll \mu^{вкл}$ ) приведе до незначної зміни форми виділення. Внеском цього ефекту у величину швидкості переміщення включення як цілого будемо нехтувати. Тоді швидкість переміщення включення буде визначатися за наступним виразом:

$$v = - \frac{4}{3} \cdot \frac{\mu^M (1 - \nu^M)}{\pi (\kappa^M + 1) R c^2} \cdot \frac{D_s}{kT} \cdot \cos \Theta. \quad (6.51)$$

При значеннях  $\theta(0) = 0$ ;  $\nu = 1/3$ ;  $\mu^M = 10^5$  Дж/см;  $R \cong c \cong 1000$  В;  $\omega \cong 10^{-23}$  см<sup>2</sup>;  $T \cong 1000$  К;  $D_s \cong 10^{-8}$  см<sup>2</sup>/с;  $a \cong b \cong 30$  нМ; величина швидкості  $v \cong 20$  нм/с і за порівняно малий час включення може переміщатися на відстані більше його радіуса. У результаті такого руху включення будуть іти з площини ковзання дислокацій в площину підвищеного стиску або розтягу.

Це приведе до розблокування дислокацій, до релаксації створеної напруги, тобто, у кінцевому рахунку, до підвищення пластичності та міцності металу.

## ТЕМА 7

### ТЕРМОДИНАМІКА СИСТЕМ З НЕПЕРЕРВНИМ РОЗШАРУВАННЯМ

**7.1. Термодинамічні моделі неперервного розшарування.** Цікаво прослідкувати за поведінкою функції  $\bar{G}_{з.м} = f(X_2)$  зі зміною відношення  $T/\alpha$  (або  $RT/\alpha$ ).

I. Мейерінг побудував криві функції  $\bar{G} = f(X_2, RT/\alpha)$  для розчинів субрегулярного типу:

$$\bar{H}_{з.м} = \alpha(2X_2 - X_2^2 - X_2^3) = \alpha X_2 \left[ (1 - X_2) + (1 - X_2^2) \right] \quad (7.1)$$

$$\bar{G}_{з.м} = \alpha X_2 \left[ (1 - X_2) + (1 - X_2^2) \right] + RT \left[ X_2 \ln X_2 + (1 - X_2) \ln(1 - X_2) \right] \quad (7.2)$$

За цими кривими (наведеними на рис.7.1,*а*) методом загальної дотичної побудовані відповідні коноди (рис.7.1,*б*). Виявилось, що отримані ноди лежать на одній кривій, яка названа куполом розшарування, або бінодальною кривою, або просто бінодаллю. Вище цієї кривої лежить однофазна область  $\varphi$ , нижче – двофазна  $\varphi_1 + \varphi_2$ . Точка максимуму на бінодалі називається критичною точкою ( $W$  на рис. 7.1,*б*). В цій точці відбувається перехід однофазних сплавів в двофазний стан при охолодженні. При цьому на відміну від інших фазових переходів такого роду (наприклад, евтектоїдне розпадання) всі три фази ізоморфні та материнська фаза розшарується на дві близькі за складом та структурою фази, а не перетворюється в них. Тому в таких випадках дочірні фази позначаються тим же символом, що і материнська (наприклад,  $\varphi \rightarrow \varphi_1 + \varphi_2$  на рис.7.1,*б*). Використання кубічної функції  $\bar{H}_{з.м} = \alpha(2X_2 - X_2^2 - X_2^3)$  привело до асиметричних відносно абсциси  $X_1=X_2=0,5$  кривих на рис.7.1. При використанні більш простих залежностей типу  $\bar{H}_{з.м} = \alpha X_2(1 - X_2)$  отримуються симетричні криві (нульове наближення теорії регулярних розчинів).

Купол розшарування (бінодаль) спостерігається порівняно рідко на діаграмах стану сплавів на залізній основі. На рис.7.2 показана діаграма стану сплавів Fe-Cr з прихованою вершиною куполу розшарування (показана пунктиром).

Цікаво відзначити, що купол розшарування з'являється в системі Fe-Ni при високих тисках. При атмосферному тиску крива діаграми стану Fe-Ni, яка розділяє фазові області  $\gamma$  і  $(\alpha + \gamma)$ , мають ділянку з малим нахилом (рис.2.6,*а*). Остання обставина трактується як ознака підвищеної тенденції  $\gamma$ -фази до розшарування.

Разом з тим відомо, що ця тенденція повинна посилюватися з пониженням температури. Отже, якби не було фазового переходу вздовж цієї межі, десь нижче неї повинно було б відбуватись розшарування залізонікелевого аустеніту.

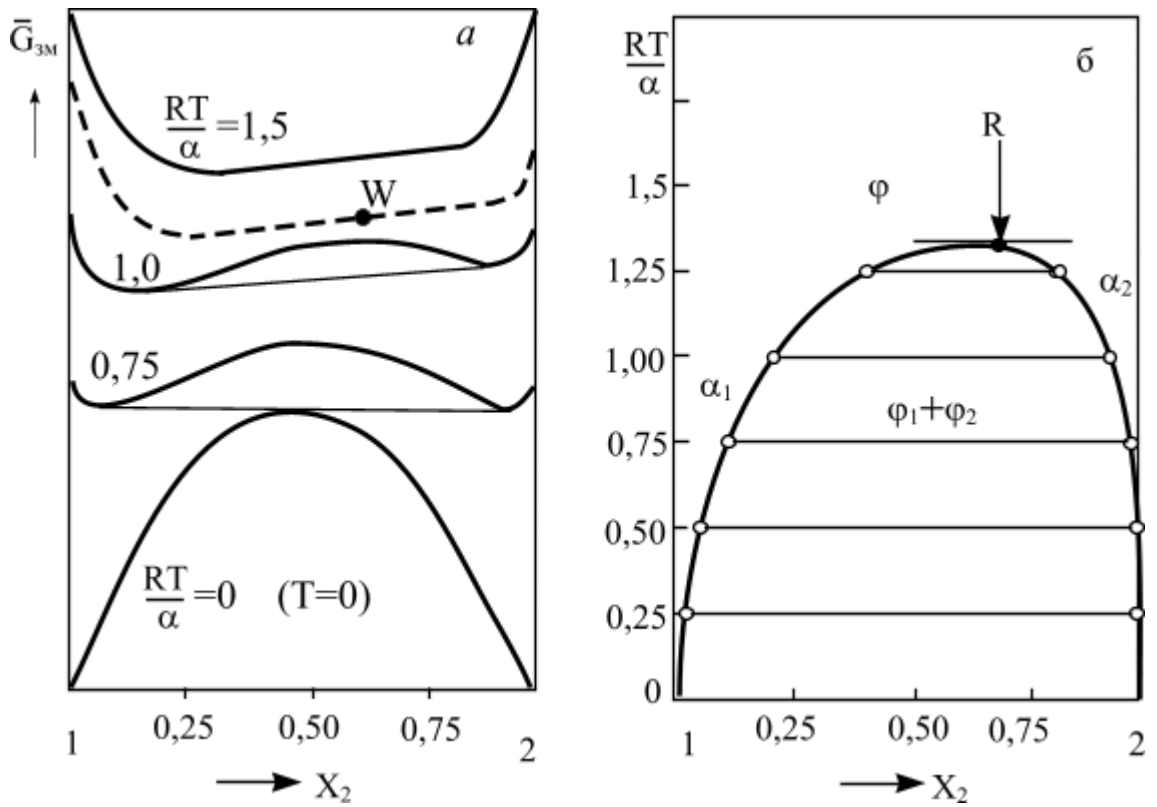


Рис. 7.1. Концентраційна залежність вільної енергії двокомпонентної системи 1-2, яка утворює регулярні розчини

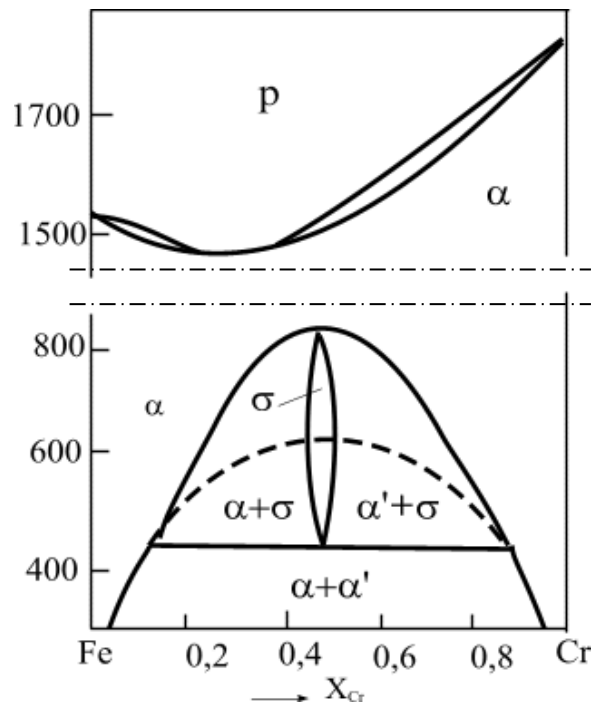


Рисунок 7.2 – Діаграма стану системи Fe - Cr

З підвищенням тиску до  $5000 \text{ МН/м}^2$  (МПа) дана крива стає майже горизонтальною в середній її частині (рис.7.3,б). Отже, прихований купол розшарування повинен знаходитись десь дуже близько під кривою (див. пунктир на рис.7.3,б). І дійсно, при підвищенні тиску до 10000 МПа цей купол стає явним (рис.7.3,в) і в середині нього нікелевий аустеніт розшаровується на  $\gamma_1$ - і  $\gamma_2$ - фази.

Симетричне розташування бінодалей відносно осі на рис. 7.2 і 7.3 говорить про те, що системи Fe-Cr і Fe-Ni в основному підкоряються нульовому наближенню теорії регулярних розчинів.

На рис. 7.2 показано випадок, коли верхня частина бінодалі зрізана лініями діаграми стану, які відносяться до інших видів фазових переходів. В багатьох роботах діаграми з евтектикою чи з перитектикою, які мають області гомогенності фаз, і беруть участь в евтектичній чи перитектичній реакціях, отожнюються з такими системами (рис. 7.4,а).

Якщо межі однофазних областей  $\alpha$  і  $\beta$  екстраполювати вище лінії солідуса та замкнути одна на одну (див. рис. 7.3,а), то отримується гіпотетичний купол розшарування. В такому випадку фази  $\alpha$  і  $\beta$  можна розглядати як про-

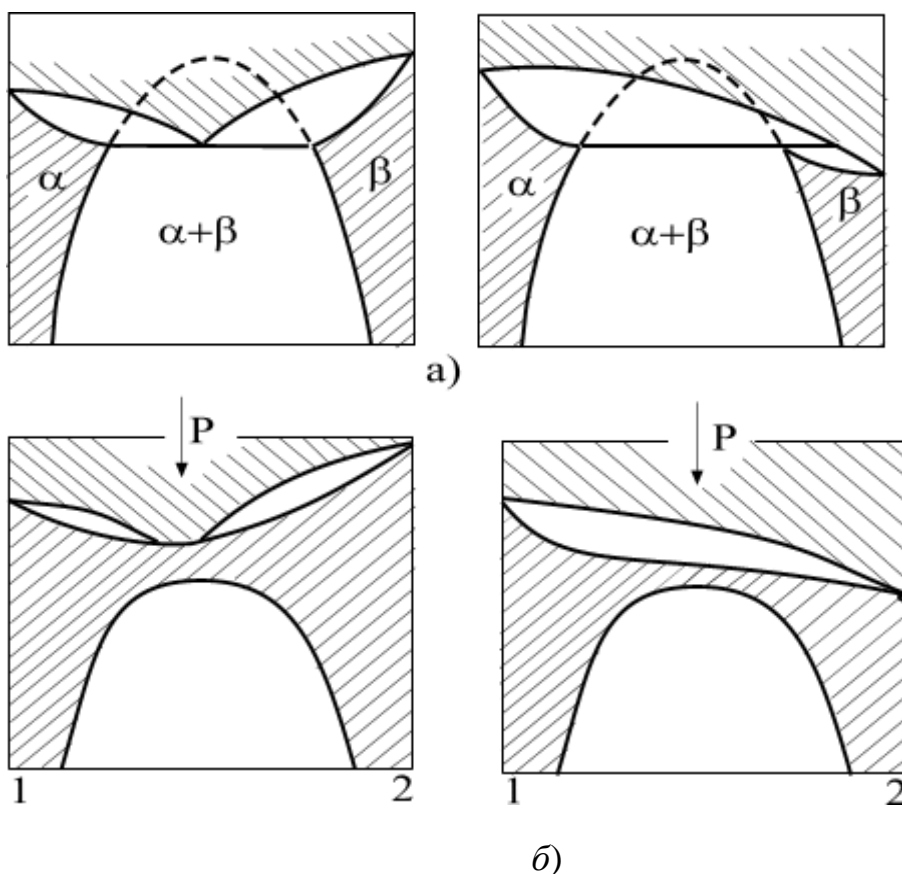


Рисунок 7.3 – Розшарування меж областей діаграм стану дукт розшарування деякої уявної високотемпературної твердої фази, яка могла б існувати, якби не наставало плавлення системи.

Але наведене вище тлумачення не може претендувати на загальність. Воно, безумовно, правомірне в тих випадках, коли фази  $\alpha$  і  $\beta$  ізоморфні і в метастабільному стані можуть утворювати безперервний ряд розчинів (або нестабільних розчинів, які спінодально розшаровуються). Прикладом може

служити система Ag-Cu, в якій в стабільному стані спостерігається евтектичне перетворення, але яку шляхом швидкої кристалізації рідких сумішей (мають властивість необмежено змішуватись) можна примусити затверднути у вигляді пересиченого розчину будь-якої концентрації.

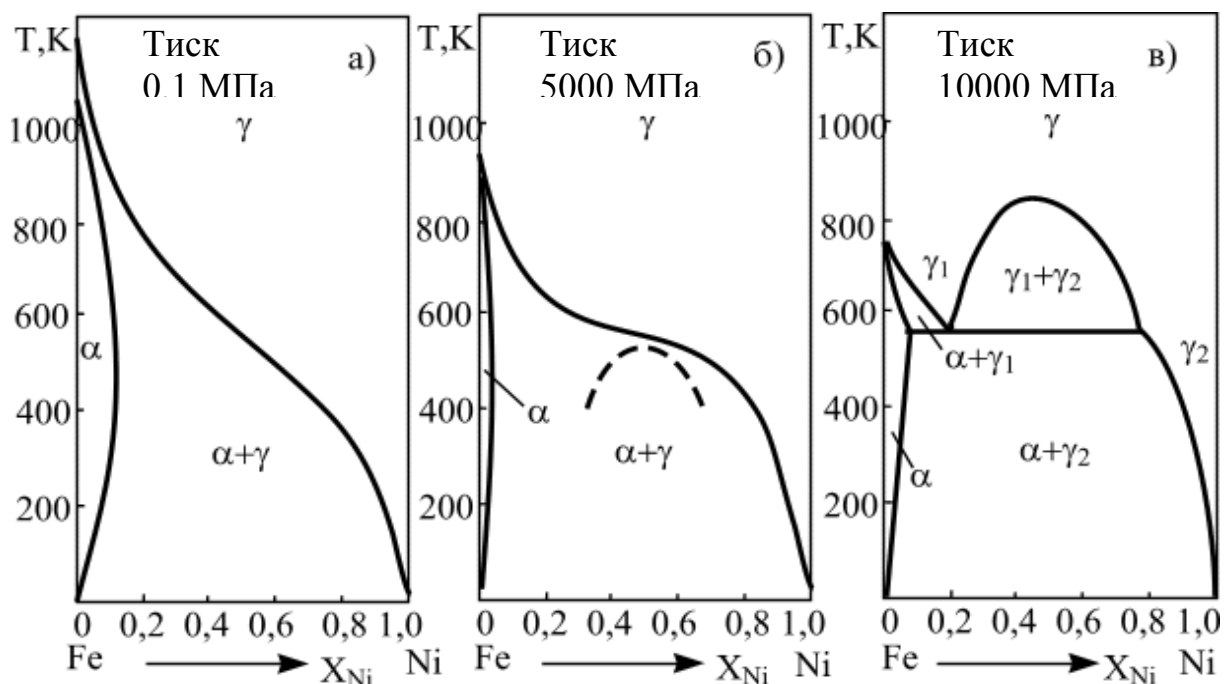


Рисунок 7.4 - Діаграма стану системи Fe – Ni нижче лінії солідуса:

а – 0,1 МПа; б – 5000 МПа; в – 10000 МПа

Таке твердження може залишатись правомірним і у випадку, коли фази  $\alpha$  і  $\beta$  не ізоморфні, але мають деяку подібність.

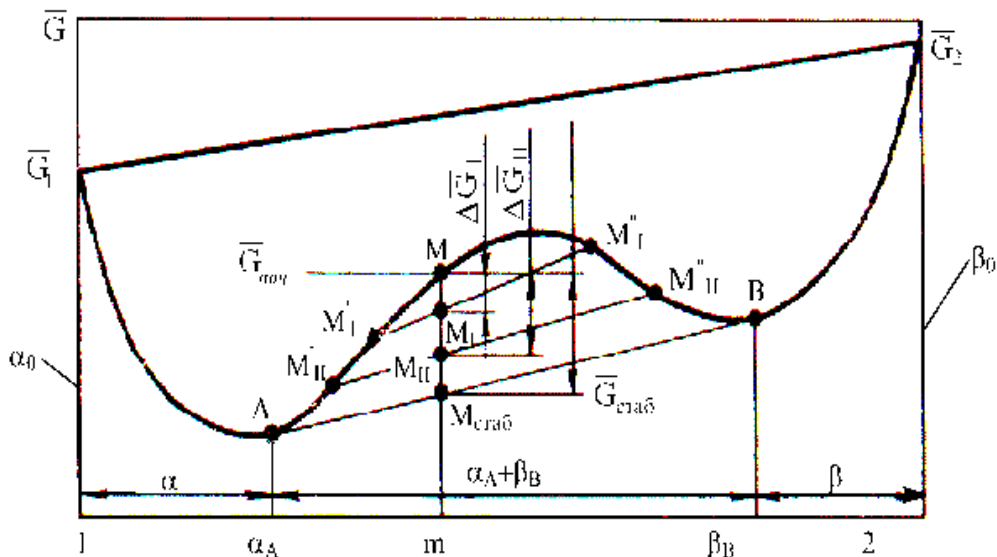


Рисунок 7.5 – Схема розшарування перенасиченого сплаву М з утворенням рівноважної суміші фаз  $\alpha_A$  та  $\beta_B$ , яка має мінімальну мольну вільну енергію

Система аустеніт-цементит сплавів Fe-C, можливо, відноситься до такого типу, в той час як система аустеніт-графіт через різку відмінність кристалічних структур цих фаз навряд чи може бути віднесена до таких систем. Отже, фази  $\alpha$  і  $\beta$  на рис. 7.5 відносяться до системи з явним (рис. 7.1,б) або з прихованим (рис.7.4,а або нижня частина рис. 7.2) куполом розшарування. Фази  $\alpha$  і  $\beta$  (або  $\beta$  і  $\gamma$ ) на рис. 7.6 не можуть утворювати безперервного ряду пересичених розчинів і не можуть, таким чином, відноситись до системи з явною або з прихованою бінодаллю.

Вище були розглянуті випадки, коли криві концентраційної залежності вільної енергії сплавів мають від'ємну кривизну  $\partial^2 \bar{G} / \partial X_i^2 < 0$  (рис.7.1). Але в області над спільною дотичною ми не робили різниці між ділянками з додатною та від'ємною кривизною, справедливо вважаючи, що однофазні сплави, які їм відповідають, і в тому, і в іншому випадку схильні до розпаду з утворенням стабільного двофазного стану. Це справедливо тільки частково, оскільки механізм розпаду є різним в залежності від знака кривизни кривої  $\bar{G} = f(X_i)$  і також не завжди можливий поступовий перехід системи із початкового однофазного стану  $M$  в кінцевий  $M_{стаб}$  через проміжні стани  $M_I, M_{II}, \dots$  і т.д. (рис.7.5).

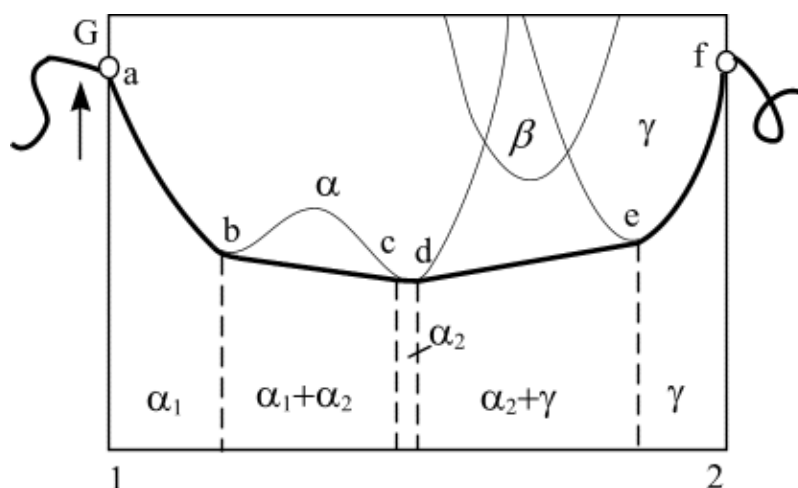


Рисунок 7.6 – Концентраційна залежність вільної енергії фаз багатофазної бінарної системи. Облягання натягнутої нитки вказує на стабільні фази (фаза  $\beta$  метастабільна)

В області перенасичених розчинів, де ще зберігається додатна кривизна кривої  $\bar{G} = f(X_i)$ , діє класичний (фольмерівський) механізм їх розпаду, зумовлений тим, що самовільне прогресуюче розшарування такого розчину неможливе.

Дійсно, як показано на рис. 7.7,а, розшарування перенасиченого розчину  $M$  на два близьких по складу розчини  $m_1$  і  $m_2$  термодинамічно не вигідно, оскільки воно супроводжується підвищенням вільної енергії системи  $G' - G$ . Таке

випадкове розшарування системи не може закріпитися і підсилитись, воно повинно самовільно зникнути із поверненням системи в початковий метастабільний стан.

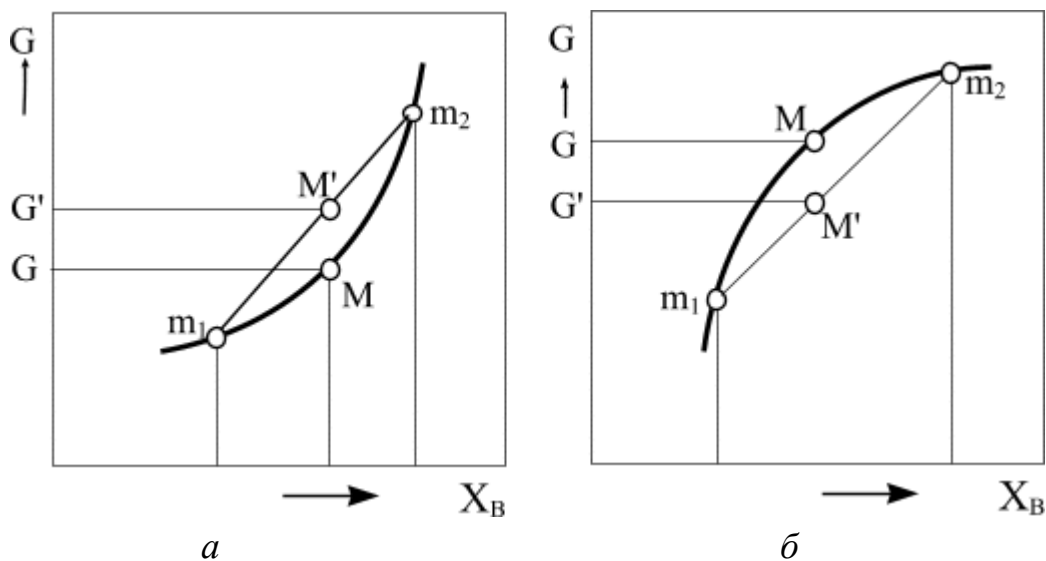


Рис. 7.7. Зміна вільної енергії перенасичених розчинів при "ближньому" розшаруванні: *a* – ступінь перенасичення знаходиться до межі метастабільності (спінодалі); *б* – ступінь перенасичення знаходиться за цією межею (всередині спінодальної області)

Вивести таку систему із метастабільної рівноваги може лише утворення порівняно великого зародка другої фази надкритичного розміру (механізм утворення таких зародків тут не розглядається). На рис. 7.8,*a* показано утворення такого зародка в бінарному сплаві *A-B*, який в початковому стані знаходився у вигляді перенасиченого розчину  $\alpha$ .

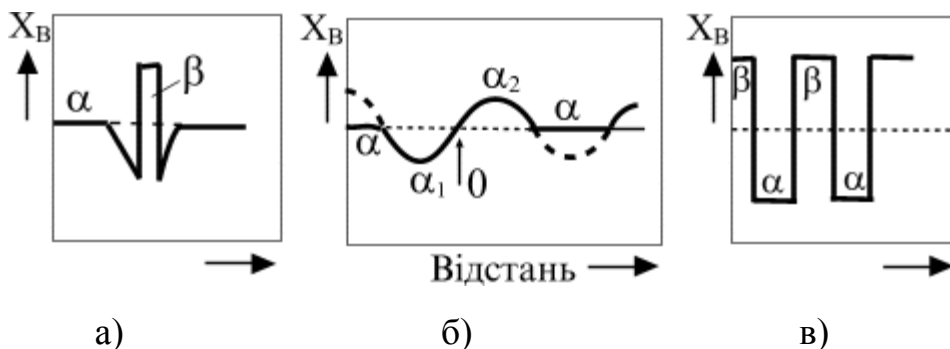


Рис. 7.8. Механізм розпадання перенасичених розчинів: *a* – фольмерівський (за рис.7.7,*a*); *б* – спінодальний механізм (за рис.7.7,*б*); *в* – заключний дорозпад

На рис. 7.8,*a* також показано, що навколо цього зародка утворюється "подвір'я" кристалізації - область збіднілого компонентом *B*  $\alpha$ -розчину. В умовах, коли коефіцієнт дифузії компонента *B* додатний (звичайний випадок), в утворений концентраційний стік по компоненту *B* прямує дифузійний потік останнього і встановлюється стаціонарний або квазістаціонарний режим, коли

приток цього компонента компенсується його витратою на ріст включення  $\beta$ -фази. Як бачимо, такий механізм є “бар’єрним”, тобто для його виконання необхідно подолати потенціальний бар’єр, який пов’язаний з витратою енергії на утворення зародків критичного розміру. Якщо система не в змозі подолати даний бар’єр, вона буде невизначено довго знаходитись в метастабільному стані (наприклад, вуглецева сталь, яка не графітизується через відсутність умов для виникнення центрів графітизації). Але, навіть якщо система спроможна подолати вказаний бар’єр, на початку процесу завжди є в наявності незначний, але визначений інкубаційний період, під час якого система готується до переходу.

Зовсім інша картина спостерігається тоді, коли пересичений розчин знаходиться в концентраційній зоні, яка відповідає області від’ємної кривизни на кривій  $\bar{G} = f(X_i)$ . В цьому випадку, як показано на рис. 7.8,б, довільне “ближнє” розшарування пересиченого розчину  $M$  на близькі по складу розчини  $m_1$  і  $m_2$  термодинамічно вигідно, оскільки воно супроводжується зниженням вільної енергії системи на  $G - G'$ .

Таке мікророзшарування не потребує утворення нових кристалів, нових міжфазних поверхонь, тому енергія активації цього процесу відповідає енергії звичайних дифузних актів. Отже, такий процес протікає безінкубаційно при будь-якій температурі вище 0 К. Його швидкість залежить тільки від рухомості атомів в системі. Тому таке перетворення називають “безбар’єрним”.

Нижче буде показано, що в тих випадках, коли  $\partial^2 \bar{G} / \partial X_i^2 < 0$ , ефективний коефіцієнт дифузії (фіковський)  $D_i$  від’ємний і повинна спостерігатись висхідна дифузія (компоненти самовільно переходять в області, які збагачені ними, а не в збіднілі, як у випадку звичайної дифузії при додатному знаку  $D_i$ ). У відповідності до цього на рис. 7.8,б, показано механізм розглянутого вище “безбар’єрного” розпаду, який отримав назву спінодального розшарування (поняття спінодалі розглянуто нижче).

Допустимо, що в мікрообласті  $O$  (рис. 7.8,б) пройшло “ближнє” розшарування пересиченого розчину  $\alpha$  на малі області  $\alpha_1$  і  $\alpha_2$ , причому  $\alpha_2$  збагачена компонентом  $B$ . Така мікронеоднорідність не може самовільно зникнути. Навпаки, через висхідну дифузію (uphill diffusion) область  $\alpha_1$  буде ще більше збіднюватись компонентом  $B$ , а область  $\alpha_2$  – збагачуватись [206,207]. Разом з тим процес буде розвиватись не тільки в глибину, але і в ширину. Дійсно, висхідну дифузію викликає градієнт концентрації не тільки між ділянками  $\alpha_1$  і  $\alpha_2$ , але і на межах між цими ділянками і вихідним розчином  $\alpha$ . Це призводить до утворення і нарощування нових “виступів” і “впадин”, як показано на рис. 7.8,б. Виникає хвильовий процес, який розповсюджується на весь об’єм розчину.

Якщо всякі неоднорідності, дефекти, мікро-, і макровключення, що забруднюють метал, сприяють звичайному (фольмеровському) розпаду (див. рис. 7.8,а), то при спінодальному розшаруванні вони гальмують хвилю розпаданя. Механізм такого розшарування не потребує в ендо-, або екзогенних центрах кристалізації.



Запропоновані й інші механізми утворення модульованих структур в сплавах, які спінодально розпадаються. Зокрема показано, що в багатьох випадках модулювання структури виникає не на початковій стадії в результаті виникнення і розповсюдження "хвиль" розпадання, а на більш пізній стадії в результаті взаємодії полів напружень. Сплав, цілком розшарований на стабільні фази  $\alpha$  і  $\beta$ , деколи спадкує "модуляцію" хвилі розпадання, як показано на рис.7.8,в. Проте в металевих сплавах цілком двофазна структура в більшості випадків не спадкує структуру частково розшарованого розчину і модульована структура останнього характерна лише для проміжної стадії неповністю стабілізованого сплаву. Якщо ця стадія швидкоплинна, її можна не спостерегти і по кінцевій структурі сплаву зробити хибний висновок про повністю фольмерівський механізм структуроутворення, в той же час як початкова його стадія могла носити характер спінодального розшарування.

Повернемося до розгляду кривих функції  $\bar{G} = f(X_i)$ . На рис.7.9 показані різні типи таких кривих, причому в усіх випадках фазовий склад повністю стабільних сплавів  $A-B$  однаковий - в області спільної дотичної (показаний штрих-пунктиром) структура металу двофазна.

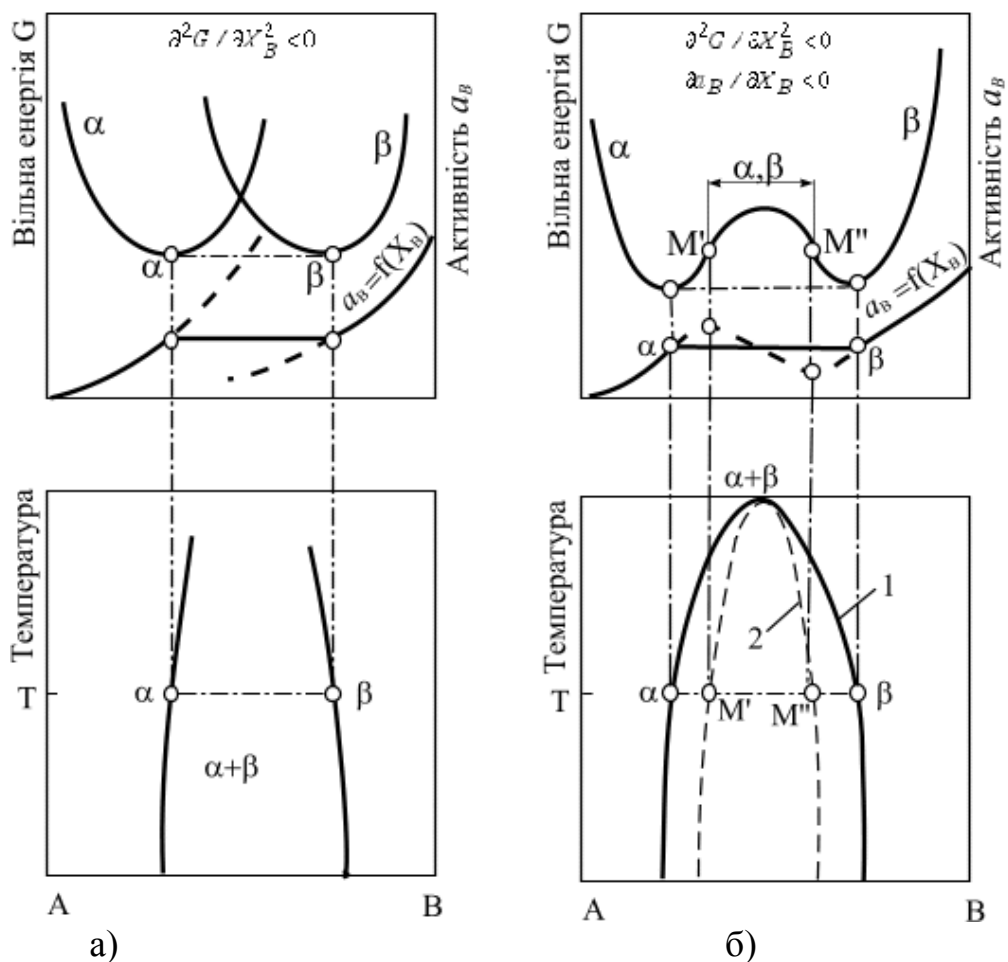


Рисунок 7.9 – Концентраційна залежність вільної енергії двокомпонентної системи  $A-B$  з областю незмішуєності  $\alpha + \beta$

На рис. 7.9,а показано варіант, коли на кривих  $\bar{G} = f(X_i)$  немає області з від'ємною кривизною. В таких системах розпад пересичених розчинів може мати тільки фольмерівський механізм, спінодального розпаду не спостерігається.

На рис. 7.9,б показано випадок, який вже обговорювався вище, коли гілки кривих  $\bar{G}_\alpha$  і  $\bar{G}_\beta$  з від'ємною кривизною зливаються в загальну криву. Показані також точки перегину  $M'$  і  $M''$ , які обмежують області фольмерівського і спінодального розпаду пересичених розчинів. Проеціювання цих точок на відповідну діаграму стану (див. ізотермічний переріз  $T = \text{const}$  в нижній частині рис. 7.9,б) дає одноіменні точки кривої 2, названої Ван-дер-Ваальсом спінодальною або просто спінодаллю (показана пунктиром). Ця крива сходиться з бінодаллю  $I$  в критичній точці  $W$ , оскільки, згідно рис. 7.1,а, з підвищенням температури область всередині спільної дотичної і область з від'ємною кривизною одночасно звужуються і зникають в точці  $W$  ("хімічна" спінодаль).

**7.2. Критерій існування області спінодального розпаду пересичених розчинів.** З позицій геометричної термодинаміки умова існування області спінодального розпаду зводиться до того, що на кривій (кривих) концентраційної залежності вільної енергії фаз системи, що розглядається, повинен існувати відповідний проміжок з від'ємною кривизною (рис. 7.9). Ця умова виконується в тому випадку, коли вказані криві для фаз  $\alpha$  і  $\beta$  зливаються в одну спільну (рис. 7.9,б). Розглянемо деякі аспекти цього питання.

В роботах Дж. Елліота і С. Люпіса, Е. Бонье з співробітниками та інших дослідників розвивається і узагальнюється метод параметрів (коефіцієнтів) взаємодії, що дозволяє розповсюджувати цей метод на область порівняно концентрованих розчинів [208]. Нижче цей метод використаний для отримання критеріїв двох типів кривих концентраційної залежності вільної енергії фаз  $\alpha$  і  $\beta$ , а також відповідних кривих термодинамічних активностей компонентів в двокомпонентній системі  $A-B$  з областю незмішуваності (рис. 7.9,а і б).

В багатокомпонентних системах  $Fe-C-i-j-...-l-...-n$  при невеликих концентраціях легувальних елементів і відсутності помітної взаємодії між ними можна вважати їх вплив на хімічний потенціал вуглецю адитивним. Тоді

$$\gamma_c = \gamma_c^0 \gamma_c^{(i)} \gamma_c^{(j)} \dots \gamma_c^{(l)} \dots \gamma_c^{(n)} \quad (7.3)$$

$$\text{або} \quad \ln \gamma_c = \ln \gamma_c^0 + \sum_{l=1}^n \ln \gamma_c^{(l)}. \quad (7.4)$$

Незручність користування парціальними коефіцієнтами активності в тому, що вони відображають інтегральний вплив на хімічний потенціал вуглецю  $\gamma_c$  всієї кількості легувального елемента, присутнього в системі, а не вплив одиничної концентрації цього елемента. Для відображення питомого

взаємного впливу компонентів системи на величину термодинамічної активності Е. Гугенгеймом і К. Вагнером були введені так звані параметри (або коефіцієнти) взаємодії [209].

При зменшенні концентрації компонента 2 в бінарному розчині 1-2 коефіцієнт активності  $\gamma_2$  прямує до певної граничної величини  $\gamma_2^\infty$ , що відповідає нескінченному розбавленню.

Цілком зрозуміло, що значення  $\gamma_2^\infty$  повинно залежати від вибору стандартного стану компонента 2. При виборі стандартного стану за Льюїсом (стандартний стан Генрі)  $\gamma_2^\infty = 1$ , згідно визначення. При виборі стандартного стану згідно Гільдебранду (стан Рауля)  $\gamma_2^\infty$  може відрізнитись від одиниці, якщо розчин не ідеальний згідно Рауля. Зокрема  $\gamma_2^\infty < 1$ , якщо спостерігається тенденція до асоціації між компонентами 1 і 2, і  $\gamma_2^\infty > 1$  при зворотній тенденції.

Для опису відхилення  $\gamma_2$  від  $\gamma_2^\infty$  по мірі підвищення концентрації компонента 2 в системі 1-2 К. Вагнером був введений параметр  $\varepsilon_2^{(2)}$ , який названий параметром взаємодії:

$$\ln \gamma_2 \approx \ln \gamma_2^\infty + \varepsilon_2^{(2)} X_2, \quad (7.5)$$

де 
$$\varepsilon_2^{(2)} = \partial \ln \gamma_2 / \partial X_2. \quad (7.6)$$

Для потрійної системи 1-2-3, порівняно розбавленій по компонентах 2 і 3 ( $X_2 \rightarrow 0$  і  $X_3 \rightarrow 0$ ), К. Вагнером введено параметр взаємодії  $\varepsilon_2^{(3)}$ , рівний

$$\varepsilon_2^{(3)} = \partial \ln \gamma_2 / \partial X_3. \quad (7.7)$$

В цьому випадку рівняння (7.5) приймає вигляд

$$\ln \gamma_2 \approx \ln \gamma_2^\infty + \varepsilon_2^{(2)} X_2 + \varepsilon_2^{(3)} X_3. \quad (7.8)$$

Параметри взаємодії типу  $\varepsilon_2^{(2)}$ , які відображають вплив розчиненого компоненту 2 на його термодинамічну активність, ми будемо нижче називати діагональними параметрами взаємодії. Параметри типу  $\varepsilon_2^{(3)}$ , які відображають вплив на термодинамічну активність розчиненого компоненту 2 іншого розчиненого компоненту 3, будемо називати перехресними параметрами взаємодії, позначаючи їх для системи 1-2-...i-...-m символом  $\varepsilon_i^{(1)}$ .

В останній час в зв'язку з широким застосуванням параметрів взаємодії для практичних інженерних розрахунків введена так звана практична система, в якій натуральні логарифми замінені десятковими, а концентрація компонентів вимірюється не в атомних частках, а в відсотках по масі. В цьому випадку коефіцієнти взаємодії дорівнюють

$$e_i^{(j)} = \partial \lg f_i / \partial (\%j). \quad (7.9)$$

При перерахунку коефіцієнтів взаємодії з переходом від однієї системи до іншої необхідно враховувати не тільки приведені відмінності, але також і ту обставину, що в практичній системі використовуються, як правило, коефіцієнти активності Генрі, а в рівняннях типу (7.8) - Рауля.

Дж. Еліот і С. Люпіс показали, що лінійні залежності типу рівняння (7.8) можуть виявитись недостатньо строгими при використанні їх для порівняно концентрованих сплавів. При розкладі в ряд Тейлора надлишкової вільної енергії отримуємо [210]

$$\begin{aligned} \mu_2^{надл} / RT = \ln \gamma_2 = \ln \gamma_2^\infty + \sum_{j=2}^n \varepsilon_2^{(j)} X_j + \sum_{\substack{j=2 \\ k=2}}^n \rho_2^{(j,k)} X_j X_k + \\ + \sum_{\substack{j=2 \\ k=2 \\ l=2}}^n \tau_2^{(j,k,l)} X_j X_k X_l + \Lambda, \end{aligned} \quad (7.10)$$

$$\text{де } \mu_2^{надл} = \mu_2 - \mu_2^{i0} = RT \ln a_2 - RT \ln X_2 = RT \ln \gamma_2.$$

При цьому коефіцієнти  $\varepsilon$  при лінійних доданках названі параметрами взаємодії першого порядку, коефіцієнти  $\rho$  при квадратичних доданках - параметрами другого порядку, а коефіцієнти  $\tau$  при кубічних доданках - параметрами третього порядку і т. ін.

Вище було показано розкладання в ряд Тейлора величини  $\mu_2^{надл}$  для двокомпонентної системи 1-2 при обмеженні ряду кубічним членом (рівняння (7.10)).

На рис.7.8 була дана геометрична інтерпретація варіанту, коли  $\varepsilon_2^{(2)} > 0$ ,  $\rho_2^{(2)} < 0$  і  $\tau_2^{(2)} > 0$ . Але цієї умови недостатньо для отримання "синусоїдальної" форми кривої на рис.7.8, характерної для системи зі спінодальною областю (див. відповідну криву на рис. 7.9,б). Дійсно, якщо абсолютне значення коефіцієнта взаємодії другого порядку  $|\rho_2^{(2)}|$  невелике в порівнянні з коефіцієнтами першого та третього порядку, то на кривій  $a_2=f(X_2)$  буде помітний лише невеликий прогин в середній частині, але відрізок з від'ємним нахилом може існувати.

Умова існування такої ділянки записується у вигляді нерівності

$$\partial a_2 / \partial X_2 < 0 \quad (7.11)$$

$$\text{або} \quad \partial \ln \gamma_2 < -\partial X_2 / X_2 \quad (7.12)$$

Диференціюючи рівняння (7.8), отримаємо

$$d \ln \gamma_2 = \varepsilon_2^{(2)} dX_2 + 2\rho_2^{(2)} X_2 + 3\tau_2^{(2)} X_2^2 dX_2 \quad (7.13)$$

і, підставляючи отримане значення  $d \ln \gamma_2$  в нерівність (7.12), записуємо умову існування спінодальної області у наступному вигляді :

$$1 + \varepsilon_2^{(2)} X_2 + 2\rho_2^{(2)} X_2^2 + 3\tau_2^{(2)} X_2^3 < 0. \quad (7.14)$$

Аналогічний критерій був отриманий С. Люпісом (в ньому відповідний ряд обмежений квадратичним членом).

**7.3. Можливість існування області спінодального розпаду в системі Fe-C.** Спінодальний розпад в сплавах на основі заліза спостерігався до цих пір лише в окремих випадках. Було показано, що так звана 475-градусна крихкість в сплавах Fe-Cr є результатом спінодального розшарування (на рис. 7.2 спінодаль показана штрих-пунктиром).

Виявлено, що при надшвидкому нагріванні і охолодженні цементиту, які запобігають графітизації цієї метастабільної фази, протікає її збіднення вуглецем і наступне розшарування по сталих кристалографічних площинах, головним чином по (001). Аналіз показав, що при такому розшаруванні проходить модуляція кристалів цементиту по будові ґратки і по концентрації вуглецю, причому при кінцевому дорозпаді знеуглецьовані прошарки перетворюються в аустеніт (при кімнатній температурі в мартенсит) [210].

Розглянемо деякі аспекти висунутої нами гіпотези про спінодальний розпад в системі Fe-Fe<sub>3</sub>C [211].

Передбачуване існування спінодалі в цій системі визначає і існування бінодалі, причому обидві криві повинні дотикатись в критичній точці. На рис.7.10 представлена гіпотетична діаграма станів сплавів Fe-Fe<sub>3</sub>C, яка дозволяє пояснити спінодальне розшарування частково знеуглецьованого цементиту Ц при охолодженні до температур нижчих спінодалі (показаної схематично штрих-пунктиром).

Отже, якби у вказаній системі не наступало плавлення по лініях солідусу, області аустеніту  $\gamma$  і цементиту  $\text{Fe}_3\text{C}_{1-x}$  змикалися б над критичною точкою, утворюючи спільну фазу. Хоча аустеніт і цементит неізоструктуровані, можна цілком представити собі таке явище. Так, А. М. Беліковим і А. А. Сави-

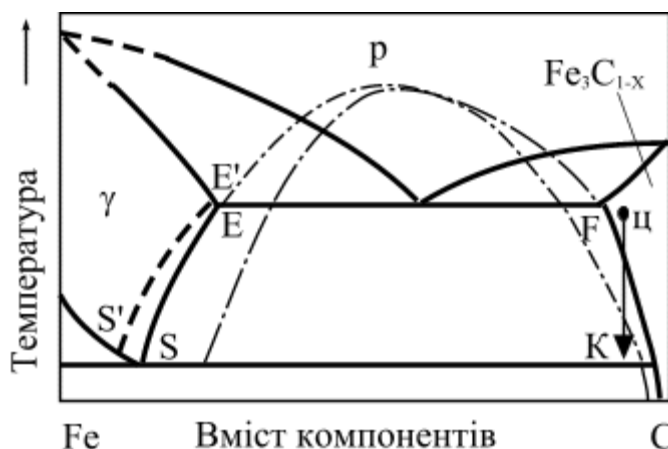


Рисунок 7.10 – Діаграма стану сплавів Fe-Fe<sub>3</sub>C<sub>1-x</sub> з областю гомогенності цементиту (Fe<sub>3</sub>C<sub>1-x</sub>) та екстрапольованими бінодаллю та спінодаллю в область розплавів

нською було показано, що при нагріванні цементиту відбувається спотворення його ґратки, яке полягає в аномально великому її подовженні вздовж осі Z, на один порядок більше, ніж по інших осях. Авторами показано, що це відповідає частковому виправленню зигзагоподібних ланцюгів октаедричних комірок залізної підґратки цементиту. Якщо врахувати, що вказані комірки мають дуже близькі розміри в аустеніті і цементиті, то можна зробити висновок, що при нагріванні будова цементиту наближається до будови аустеніту, який характеризується прямолінійним розміщенням вказаних комірок.

Іншим підтвердженням можливості існування області метастабільних і лабільних сплавів, які мають проміжну структуру між аустенітом і цементитом, служать роботи В. А. Леонтьєва, які вказують на мартенситоподібний механізм росту “голок” (фактично пластин) вторинного цементиту в аустеніті, аналогічний мартенситоподібному механізму росту відманштетового фериту в аустеніті. В обох випадках спостерігається утворення рельєфу на мікрошліфах при високотемпературному металографічному дослідженні фазового переходу - основної ознаки мартенситних перетворень. Ці перетворення є бездифузійними лише по відношенню до заліза, атоми якого перебудовуються колективно, в той час як атоми вуглецю мігрують із фази в фазу в результаті дифузії.

Підтвердження приведеної вище гіпотези буде мати великі наслідки у фізичній хімії твердого тіла. До цих пір спостерігалось лише обмежене число прикладів розпаду типу спінодального в системі неізоморфних компонентів (наприклад, Cu-CuBe, де мідь має г.ц.к. ґратку, а CuBe - о.ц.к. ґратку).

Як видно, ізоморфізм вже не можна вважати явною умовою існування спінодалі в системі. Достатньо того, щоб в ній міг спостерігатися неперервний перехід від одного типу ґратки до другого в області метастабільних і нестабільних перенасичених розчинів.

Велика гетерогенізація аустеніту по вуглецю (до 300%) при бейнітному перетворенні помічена Р. І. Ентіним в легованих сталях, мала швидкість перетворення, що дозволяла проводити рентгеноструктурні дослідження в процесі ізотермічної витримки. Можна передбачити, що аналогічні явища відбуваються і в нелегованих сталях, але із більшою швидкістю.

Розшарування перенасиченої вуглецем  $\alpha$ -фази (мартенситу) ще до випадання карбідної фази при відпуску спостерігалось М. П. Арбузовим і Ю. Є. Бушуєвим.

Але в цьому випадку особливу роль може грати анізотропія напруженого стану, коли в одних кристалографічних напрямках пружна спінодаль повністю “закривається”, а в інших напрямках істотно розширюється.

#### **7.4 Спінодальне розшарування в системі залізо – цементит**

Питання про можливість розшарування пересичених розчинів проникнення за спінодальним механізмом до цього часу активно дискутується, а в пересичених розчинах заміщення воно відбувається лише тоді, коли відповідні не перенасичені фази системи є ізоморфними. Тому важко було очікувати спінодального розшарування в системах залізо-графіт і залізо-цементит. Між тим існування мартенситоподібного механізму росту “голок” вторинного цементиту в аустеніті вже вказувало на можливість неперервних переходів ґратки аустеніту в ґратку цементиту і навпаки [209].

Нами були отримані експериментальні дані, які підтверджували можливість здійснення спінодального розпаду в частково знеуглецьованому цементиті [206, 207, 211, 212].

**7.4.1. Розшарування цементиту.** Спінодальне розшарування має місце в частково знеуглецьованому цементиті. Для здійснення цього процесу необхідні імпульсний (наприклад, лазерний) нагрів білого чавуну до високих температур, дифузійний відвід частини вуглецю із цементиту в оточуючу фазу (аустеніт) і швидке охолодження. При цьому вздовж площин  $\{002\}$  цементиту частина орторомбічної ґратки останнього перебудовується в шари г.ц.к. - ґратки аустеніту (товщиною 5 - 20 нм). При цьому утворюється смугаста двофазна структурна складова (байковіт) [213]. Можна припустити, що вона є продуктом фольмерівського дорозпаду спінодально розшарованого знеуглецьованого (тобто “пересиченого” залізом) цементиту. Тільки в цьому випадку процес не потребує зародкоутворення і проходить за мілісекунди. Звичайний байковіт складається з пластин стехіометричного цементиту і тонких прошарків надлишкового аустеніту, що виділяється з знеуглецьованого аустеніту. Рифоподібний байковіт, який відкрито недавно [214, 215], теж утворюється в результаті розпаду частково знеуглецьованого цементиту на стехіометричний карбід  $Fe_3C$  і надлишковий аустеніт. Однак останній випадає не у вигляді

прошарків по певних кристалографічних напрямках, а у вигляді окремих “острівців” на більш-менш постійній відстані від міжфазної межі цементит-аустеніт (продукт аустенізації перліту при нагріванні).

Якщо сольвуси ES і FK діаграми стану Fe - C є гілками однієї бінодалі зі зрізаним ізотермою евтектичного розпаду “куполлом”, то наявність хімічної спінодалі під правою гілкою дозволяє припускати її наявність і під лівою гілкою [216], тобто можливість спінодального розшарування в сильно переохолодженому і перенасиченому вуглецем аустеніті на збагачені і збіднені вуглецем мікрооб’єми.

Із робіт Б.П.Бурильова та інших авторів відомо, що вуглецевий аустеніт зовні коректно описується формалізмом регулярних і особливо субрегулярних розчинів. В монографіях [212, 217] показано, як на діаграмі стану однофазного розчину з’являється з пониженням температури область розшарування. Ця область при подальшому пониженні температури розширюється, охоплює весь концентраційний інтервал при абсолютному нулі по шкалі Кельвіна.

Відома думка, що теорію регулярних і субрегулярних розчинів розроблено лише щодо розчинів заміщення, однак автори в роботі по статистичній термодинаміці [209] показали, що ця теорія може бути розповсюдженою на довільні типи розчинів, в тому числі і на розчини втілення. Це дозволило запропонувати свій підхід до визначення і розрахунку координат спінодального інтервалу лівої області системи аустеніт - цементит.

В процесі розшарування цементиту за розглянутим вище механізмом відбувається самоприсосування системи до змін під впливом потоків енергії, які отримує сплав в процесі тертя та від інших факторів.

#### 7.4.2. Розрахунок хімічної спінодалі в системі аустеніт-цементит.

Розклад виду (1.4) було виконано для системи Fe-C (підсистеми аустеніт-цементит) при обмеженні ряду складовою п’ятого порядку для температур 1420 К і 1011 К.

$$RT \ln \frac{a_c}{X_c} = \sum_{n=d}^5 A_n (1 - X_c)^n, \quad (7.15)$$

де  $n$  - цілі числа,  $X_c$  - концентрація вуглецю в мольних частках.

Для визначення концентраційної залежності термодинамічної активності вуглецю в системі *аустеніт - цементит* складено математичну модель.

Для 1420 К:

$$\begin{cases} 680978.7 = 82.9A_2 + 75.5A_3 + 68.7A_4 + 62.6A_5 \\ 591830.4 = 90.3A_2 + 85.7A_3 + 81.5A_4 + 77.4A_5 \\ 435710.7 = 59.9A_2 + 46.4A_3 + 35.9A_4 + 27.8A_5 \\ 257049.8 = 35.5A_2 + 28.3A_3 + 24.0A_4 + 20.3A_5 \end{cases} \quad (7.16)$$

Для 1011 К:



$$\begin{cases} 659900.2 = 93.8A_2 + 90.9A_3 + 88.1A_4 + 85.3A_5 \\ 681394.3 = 96.0A_2 + 94.1A_3 + 92.2A_4 + 90.4A_5 \\ 310247.9 = 56.3A_2 + 42.2A_3 + 31.6A_4 + 23.7A_5 \\ 476026.2 = 78.8A_2 + 68.3A_3 + 59.4A_4 + 52.0A_5 \end{cases} \quad (7.17)$$

Визначивши  $A_2$ ,  $A_3$ ,  $A_4$  і  $A_5$ , можна розрахувати значення  $a_c$  для конкретних значень  $X_c$

$$a_c = x_c \exp \left[ \sum_{n=2}^6 A_n (1-x_c)^n / RT \right]. \quad (7.18)$$

Для  $T=1420$  К перші три рівняння складено із умови задоволення шуканою функцією  $a_c=f(X_c)$  експериментальних даних в точках з координатами  $a_c^{sp}=1,0$  при  $X_c=0,0895$ ;  $a_c=0,407$  при  $X_c=0,05$  і, нарешті,  $a_c^{cem}=1,05$  при  $X_c=0,0923$  і  $X_c=0,2257$ .

Ці три рівняння відповідають точкам E', E і F діаграми стану, а також фігуративної точки недонасиченого вуглецем аустеніту з  $X_c=0,05$ . В розрахунках використовувалась формула М.І. Темкіна і Л.А. Шварцмана з поправкою Х. Шенка і Х. Кайзера [219]:

$$a_c = \frac{x_c}{1-5x_c} + 0.9x_c^2. \quad (7.19)$$

Для перерахунків  $a_c$  при зміні стандартного стану вуглецю і виборі в цій якості графіту ( $a_c^{sp}=1,0$  вздовж ізотерми E'C'F діаграми Fe-C) одержані значення були помножені на 5,91.

При складанні четвертого рівняння було припущено, що шукана функція  $a_c=f(X_c)$  є неперервною у всьому концентраційному інтервалі Fe - Fe<sub>3</sub>C. В основу розрахунків покладено умову повної взаємної компенсації витраченої та одержаної вільної енергії при переході компоненту із однієї фази в іншу, що знаходиться у рівновазі з першою. Додатково враховується фактична зміна вільної енергії вуглецю при переході із насиченого аустеніту в цементит за рахунок зміни концентрації в одному умовному молі сплаву.

В метастабільній системі Fe-Fe<sub>3</sub>C четверте рівняння:

$$(0.2257 - 0.0923) (\mu_0 + RT \ln a_c) = \int_{0.0923}^{0.2257} (\mu_0 + RT \ln a_c) dX_c \quad (7.20)$$

або

$$0.1334 \ln a_c = \int_{0.0923}^{0.2257} \ln a_c dX_c. \quad (2.21)$$

При складанні п'ятого рівняння виходили із діаграми стану сплавів Fe-C з нанесеними на неї лініями ізоактивності вуглецю, згідно з якою у вузькій

області гомогенності цементиту (праворуч від точки F) активність вуглецю піднімається від 1,05 до 1,96 із-за високої щільності ліній ізоактивності в цій області ( $a_C=1,96$  в діаграмі при 1420 К, а отже, і в області *цементит + алмаз*).

Розрахунки на комп'ютері дали такі результати:  $A_2=-796288$ ;  $A_3=5208459$ ;  $A_4=-11807619$ ;  $A_5=11370935$ . Таким чином, правило чергування знаків (+,-) підтверджується.

Отримані результати зображені графічно на рис. 7.11. На кривій концентраційної залежності термодинамічної активності цементиту  $a_C$  екстремальна точка M належить спінодалі.

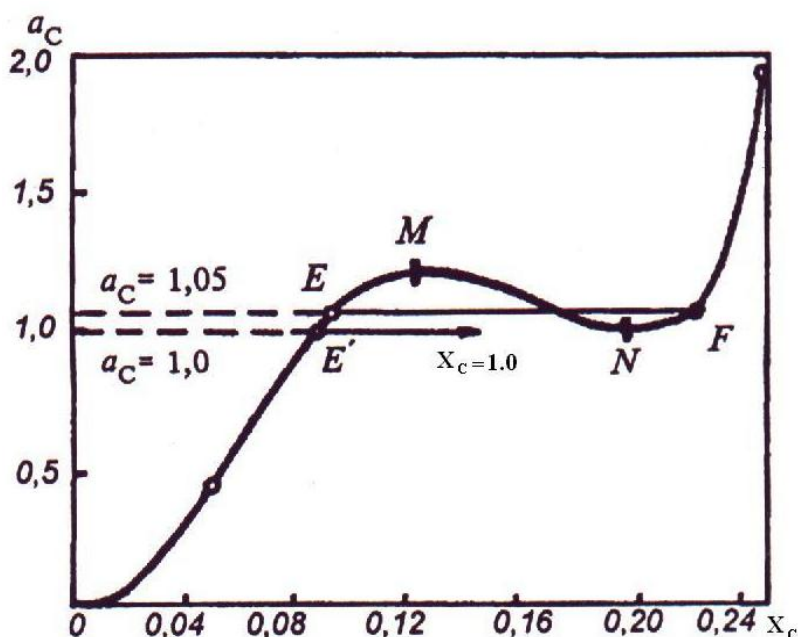


Рисунок 7.11 - Концентраційна залежність активності вуглецю в системі *аустеніт – цементит* при 1420К; MN – область спінодалі

Аналогічні результати одержано і для  $T=1000\text{K}$  - спінодальну точку  $M'$ . На рис. 7.4 розраховану ділянку спінодалі нанесено на діаграму стану Fe-C. Бінодаль (1) і хімічна спінодаль (2) екстрапольовані в область знижених температур, і тут же дуже приблизно показано пружну спінодаль 3. На скільки остання лежить нижче, ніж хімічна спінодаль, вирішити поки що важко [217], але із-за великої різниці ґраток і щільності аустеніту і цементиту відрив пружної спінодалі від хімічної повинен бути значним. В процесі тертя та зношування, як це показано в розділі 3, виникають значні термічні напруження, що суттєво впливає на можливість запуску механізмів розшарування та розпаду структур.

**7.4.3 Спінодальне розшарування переохолодженого аустеніту.** Класична теорія розглядає бейніт як дуже дисперсний евтектоїд (перліт) з елементами голчастості, що характерно для мартенситу (особливо для нижнього бейніту) [216].

Теорія спінодального розшарування пояснює особливості бейнітної структури тим, що з пониженням температури на кривих залежності вільної

енергії  $G$  аустеніту від концентрації вуглецю є ділянка з від'ємною кривизною  $\frac{\partial^2 G}{\partial X_C^2} < 0$ , де знаходиться спінодальний інтервал Ван-дер-Ваальса.

При цій температурі нижче ніж  $500^\circ\text{C}$  вуглецевий аустеніт за цією причиною починає безінкубаційно розшаровуватись на низьковуглецеві і високовуглецеві ділянки. Природно, що саме на низьковуглецевих ділянках  $\gamma$ -фази і випадає пересичений ферит голчастої будови.

В останній час з'явилось ряд досліджень бейнітного перетворення без виділення карбідної фази [220,221]. Пересичений аустеніт розпадається на 2 пересичених розчини -  $\alpha$  і  $\gamma$ . Частина вуглецю із  $\alpha$ -твердого розчину переходить в  $\gamma$ -твердий розчин, який внаслідок цього стабілізується. Такий безкарбідний бейніт запропоновано називати "аусферитом". Пересичений вуглецем аустеніт сприяє одержанню в чавуні високих пластичності та ударної в'язкості (при умові досить високої компактності графітної фази), а також викликає схильність до наклепу при деформуванні та зношуванні. З часом при досить тривалій ізотермічній витримці з пересиченого фериту починає виділятися карбідна фаза (так звана друга стадія бейнітного перетворення). При такому механізмі бейнітного перетворення особливе значення має легування чавунів "некарбідоутворюючими" елементами, такими як Si, Ni, Al та ін.

Перша стадія бейнітного перетворення (в аусферит) проходить шляхом виділення з переохолодженого аусфериту дисперсних голок (в нижньому бейніті і частково в верхньому) або пелюстків (в верхньому бейніті) пересиченого твердого розчину вуглецю в  $\alpha$ -залізі і відтиснення в аустеніт надлишкової кількості вуглецю, що не вміщується в межах пересиченого фериту.

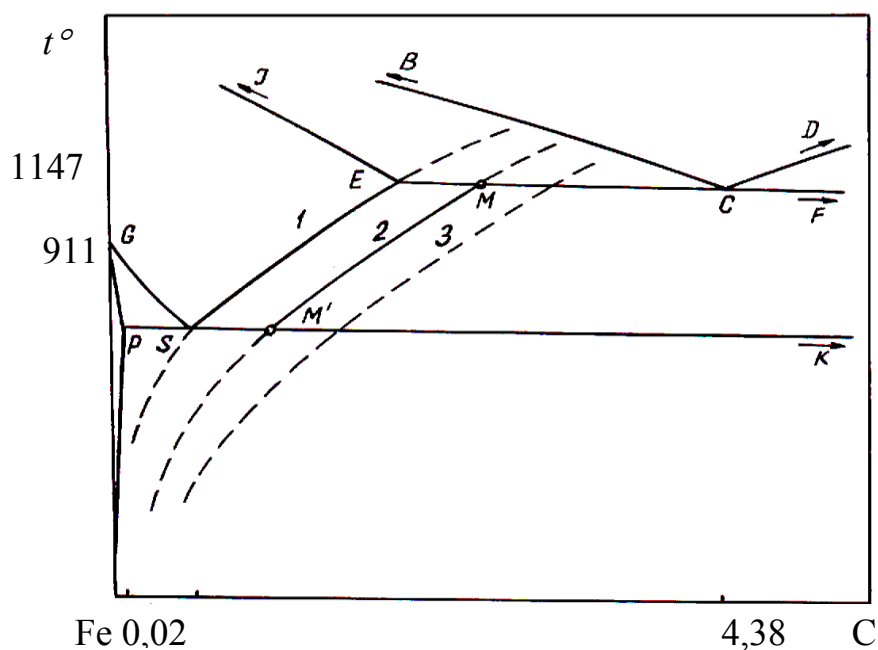


Рис. 7.12 – Положення бінодалі (1), хімічної (2) та пружної спінодалі (3)

Таким чином, на місці переохолодженого аустеніту утворюється два пересичених твердих розчини -  $\alpha'$  (ферит) і більш м'який і в'язкий  $\gamma$  (аустеніт аусфериту). Ферит  $\alpha'$  звичайно має голчасту, мартенситоподібну або "перисту" будову.

Аналіз наведених даних показує, що існують два різних типи аустеніту в бейнітних структурах. Дійсно, при спінодальному розшаруванні утворюються зони з високовуглецевим аустенітом  $\gamma'$  і з низьковуглецевим аустенітом, що перетворюється в аусферит, тобто суміш фаз  $\alpha'+\gamma''$ , де  $\gamma''$  - аустеніт аусферитного розпаду. Він також пересичений вуглецем (на цей раз іншого походження – вуглецем, що є витісненим із  $\alpha'$ -фази). Може існувати і третій тип аустеніту, додатково не збагаченого вуглецем. Це ті ділянки переохолодженого аустеніту, які розташовані по границях евтектичних колоній ("зерен") і тому збагачені марганцем і збіднені кремнієм. В них довгий час може зберігатися не перетворений аустеніт, що відрізняється від аустенітів  $\gamma'$  і  $\gamma''$  тим, що він практично не збагачений вуглецем - в ньому спінодальне розшарування або не відбувається, або сильно уповільнене [222].

Право на існування мають різні механізми бейнітного перетворення. Вони альтернативні в залежності від температури, легуючих елементів і навіть можуть спостерігатися одночасно, конкурувати. Стверджувати однозначно справедливості тієї чи іншої теорії важко. Очевидно, що гетерогенізація аустеніту завжди в тій чи іншій мірі спрацьовує, як перша стадія процесу, спінодальне розшарування безінкубаційне, контролюється тільки дифузією (висхідною), величиною її рушійних сил. Друга стадія процесу (дорозпад аустеніту) може здійснюватись за фольмерівським механізмом.

**7.5. Деякі питання термодинаміки систем Fe-C-і, де і - третій сильно ліквуючий компонент.** В найбільш поширених конструкційних матеріалах на основі заліза легуючі елементи відіграють значну роль. Забезпечення їх зносостійкості та міцності досягається за рахунок формування відповідної структури, створення твердих (наприклад, карбіди) або м'яких (наприклад, графіт) включень. Під час подальшої експлуатації створена на початку структура повинна зберігати свої основні властивості або еволювати в напрямку більш сприятливих для даних умов експлуатації структур. Важливим критерієм характеристики сплавів в цьому плані є ступінь їх термодинамічної стабільності (метастабільності).

В залізовуглецевих сплавах сильно ліквуючими компонентами вважаються фосфор та сірка. На рис.3 статті [229] показані конодні трикутники евтектичних перетворень в системі Fe-C-P в умовах стабільної і метастабільної рівноваги. Тальвеги стабільних і метастабільних евтектичних перетворень пролягають практично паралельно один одному. Як впливає з цих даних, фосфор дійсно є сильно ліквуючим компонентом цих сплавів. Діаграма на цьому рисунку побудована в координатах Скрейнемакерса  $v_n=X_n/X_{Fe}$ , де  $X_n$ - атомна доля компонента n,  $X_{Fe}$ - атомна доля Fe, що дозволяє використовувати в розрахунках рівняння Хіллерта-Жукова [236, 217]

$$\ln a_C^{(i)} - \ln a_C^0 = -\operatorname{tg} \theta, \quad (7.22)$$

де  $a_C^0$  - активність вуглецю в бінарному сплаві Fe-C;  $a_C^{(i)}$  - те ж в потрібному сплаві Fe-C-i;  $\theta$  - кут нахилу відповідної коноди при умові використання ортогональної системи координат Скрейнмакерса при рівності шкал по осях абсцис і ординат.

При цьому активність  $a_C=1$  в стабільній системі Fe-C-P, при умові вибору графіту в якості стандартного стану вуглецю. В метастабільній системі активність вуглецю  $a_C^{(i)}=1,05$ , тобто постійна і не залежить від вмісту фосфору, що відповідає даним [237]. В статті [229] показано, що параметр  $\Delta T_e^i$  схильності сплавів до графітизації, запропонований А.Кагава и Т.Окамото [232,233], гранично малий в системі Fe-C-P і дорівнює -0,04. Значить, фосфор необхідно вважати практично нейтральним елементом в залізовуглецевих сплавах за його впливом на термодинаміку графітизації.

Аналогами фосфору (з точки зору схильності до мікроліквації і накопичення в рідкій фазі при евтектичних перетвореннях) є елементи типу Ti, Mo, W, які на відміну від фосфору є карбідоутворюючими елементами.

В металознавстві сплавів заліза поширена хибна точка зору про те, що термін "карбідоутворюючий елемент" являється синонімом терміну "карбідостабілізуючий елемент". Справді, найбільш сильним карбідостабілізуючим компонентом чавунів являється хром [229], а елементи, які розташовані лівіше і нижче хрому в таблиці Менделєєва є, з одного боку, більш сильними карбідоутворюючими елементами, але, з іншої боку, є більш слабкими карбідостабілізуючими елементами, причому в системі залізо-вуглець-титан параметр  $\Delta T_e^i$  тільки дещо більше, чим в системі Fe-C-P і складає всього-на-всього -1,24. Це дозволило автору в статті [229] класифікувати Ti в якості аналога фосфору як майже "нейтральний" елемент. І, дійсно, практика чавуноливарного виробництва показує, що невеликі добавки титану можуть навіть впливати графітизуюче при твердненні чавунних виливків [238].

Вольфрам дещо відрізняється від титана більш вираженою карбідостабілізуючою дією, що також підтверджується практикою, але легування чавунів вольфрамом лише на небагато підвищує їх схильність до відбілювання ( $\Delta T_e^W = -2,80$  згідно з [229]).

Молібден ще більше віддаляється від титану по цьому показнику ( $\Delta T_e^{Mo} = -3,27$ ). Проте добавка молібдену в чавун значно покращує його структуру і механічні властивості, але все ще мало відбивається на підсиленні його відбілюваності. Тому молібден неможливо рахувати аналогом хрому, у якого  $\Delta T_e^{Cr} = -16,16$  [229].

Титан, вольфрам і молібден являються тугоплавкими металами, які утворюють не менш тугоплавкі карбіди. Тому деяким парадоксом вважається те, що вони знижують температуру ледебуритного і аустенітно-графітного перетворень в залізовуглецевих сплавах. Це дозволяє використовувати їх в пове-

рхневих зносостійких покриттях через дуже великий інтервал температур ліквідус-солідус, коли надлишкова карбідна фаза утворюється при дуже високих температурах, а закінчення ледебуритного перетворення в лікватах відбувається навпаки, при дуже низьких температурах.

В даній роботі наведені розрахунки з використанням рівняння (7.22), а також рівняння

$$\varphi = \pi + 0,0109 (t_e - 1148^\circ\text{C}), \quad (7.23)$$

що пов'язує кут  $\varphi$  при вершині конодного трикутника ледебуритного перетворення (в радіанах) зі зміною температури  $t_e$  перетворення під впливом легування [217].

На рис.7.13 показано ізотермічний переріз при  $1085^\circ\text{C}$  кута Fe діаграми стану системи Fe-C-W, побудований нами за даними [239] в координатах Скрейнемакерса (для зручності проведення розрахунків за рівняннями (7.22) і (2.86)). На цьому ізотермічному перерізі збережено умову рівності шкал по осях абсцис і ординат.

Це дозволило розрахувати нахили трьох конод евтектичного трикутника, виходячи з наступних координат трьох нод: аустеніт  $\gamma$  ( $v_C=0,0725$ ;  $v_W=0,0069$ ), цементит  $\kappa$  ( $v_C=0,331$ ;  $v_W=0,0073$ ) і евтектичний розплав  $\rho$  ( $v_C=0,24$ ;  $v_W=0,071$ ). При виборі графіту в якості єдиного стандартного стану вуглецю у всіх цих трьох фазах ми маємо  $a_C=\text{const}$  по всьому периметру конодного трикутника і всередині нього.

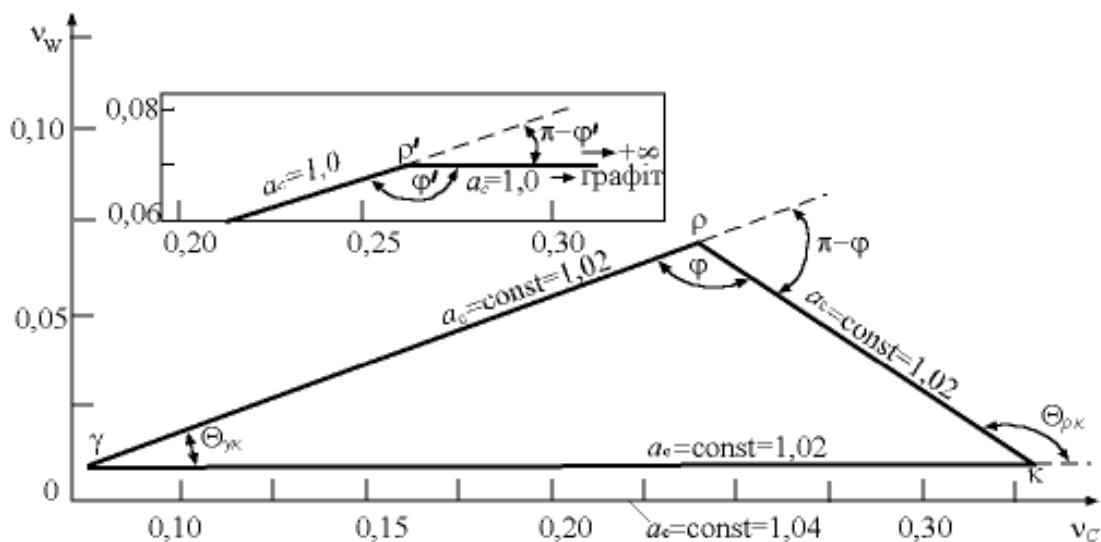


Рис.7.13. Ізотермічний переріз при  $1085^\circ\text{C}$  кута Fe діаграми стану Fe-C-W (ортогональні координати Скрейнемакерса з однаковою ціною поділок)

Розрахунок активності вуглецю вздовж коноди  $\gamma\kappa$

Дана конода на рис. 7.13 практично горизонтальна. Значить, тангенс кута її нахилу дорівнює нулю і активність  $a_C=a_C^0$  в бінарній системі Fe-C при

1085°C. Згідно з [230]  $a_C^\circ$  при 1085°C дорівнює 1,04. З врахуванням незначного нахилу коноди  $\gamma\kappa$  на рис. 1 цифра  $a_C=1,04$  дещо зменшується і стає рівною 1,02.

Розрахунок активності вуглецю вздовж коноди  $\gamma\rho$

Для двофазної рівноваги *аустеніт+розплав* при 1085°C в умовах, коли бінарна система Fe - C переохолоджена тільки по відношенню до цементитного ліквідуса,  $a_C^\circ$  дорівнює 1,50 [217]. На рис. 7.13 відповідна точка показана як точка М, що розташована на перетині ізотерми 1085°C з лінією ізоактивності  $a_C=1,50$  в області пересичених і переохолоджених розчинів Fe-C та з екстрапольованою гілкою ліквідуса *аустеніт+розплав*.

Нахил коноди  $\gamma\rho$  на рис. 7.13 дорівнює +0,38 і тоді рівняння (7.22) набуде вигляду

$$\ln a_C = \ln 1,50 - \operatorname{tg} \theta_{\rho\kappa} = 0,40 - 0,38 = 0,02 \quad \text{або} \quad a_C = 1,02.$$

Як бачимо, ця цифра не відрізняється від отриманої вище для коноди  $\gamma\kappa$ .

Розрахунок активності вуглецю вздовж коноди  $\rho\kappa$

Внаслідок відсутності точно встановлених експериментальних значень нахилу лінії цементитного ліквідуса CD діаграми метастабільної рівноваги в системі залізо-цементит і даних про температурну залежність  $a_C^\circ$  вздовж екстрапольованої гілки вказаного ліквідуса, ми задаємося значенням  $a_C = 1,02$  (див. вище) і отримуємо з рівняння (7.23)

$$\ln 1,02 = \ln a_C^\circ - \operatorname{tg} \theta_{\rho\kappa} = \ln a_C^\circ + 0,70,$$

звідки  $\ln a_C^\circ = -0,68$  або  $a_C^\circ = 0,50$ .

На рис. 7.14 точка N лежить на перетині екстрапольованої частини лінії ізоактивності  $a_C = 0,50$  в рідкому металі і ізотерми 1085°C. З рис. 7.14 видно, що точка N лежить на лінії NCD цементитного ліквідуса за умови, що точка конгруентного плавлення цементиту складає 1260°C [240].

Розрахунок по конодах  $\gamma\kappa$ ,  $\gamma\rho$  і  $\rho\kappa$  дав значення  $a_C$ , що співпадають але дещо перевищують значення  $a_C=1,0$  в графіті, як стандартному стані вуглецю. Це значить, що легування залізобуглецевих сплавів вольфрамом тільки незначно зменшує їх термодинамічну схильність до графітизації, що відповідає висновкам роботи [229].

Представлений на рис. 7.13 ізотермічний переріз діаграми Fe-C-W відноситься до метастабільної рівноваги і в сплавах ще зберігається здатність графітуватися. На рис. 7.13 показано кут  $\phi$  при вершині конодного трикутника  $\gamma\rho\kappa$ . Цей кут  $\phi$  може бути розрахований за рівнянням (7.24)

$$\phi = \pi + 0,0109 (1085^\circ\text{C} - 1148^\circ\text{C}) \quad \text{або} \quad \phi = 2,45 \text{ рад.}$$

На рис. 7.13 цей кут  $\phi$  складає 2,18 рад.

Ця помітна різниця між кутами  $\phi = 2,45$  рад. і  $\phi = 2,18$  рад. може бути пояснена тим, що рівняння (7.24) одержано для невеликих відхилень кутів  $\phi$  від  $\pi$ , а в нашому випадку ця умова не виконується.

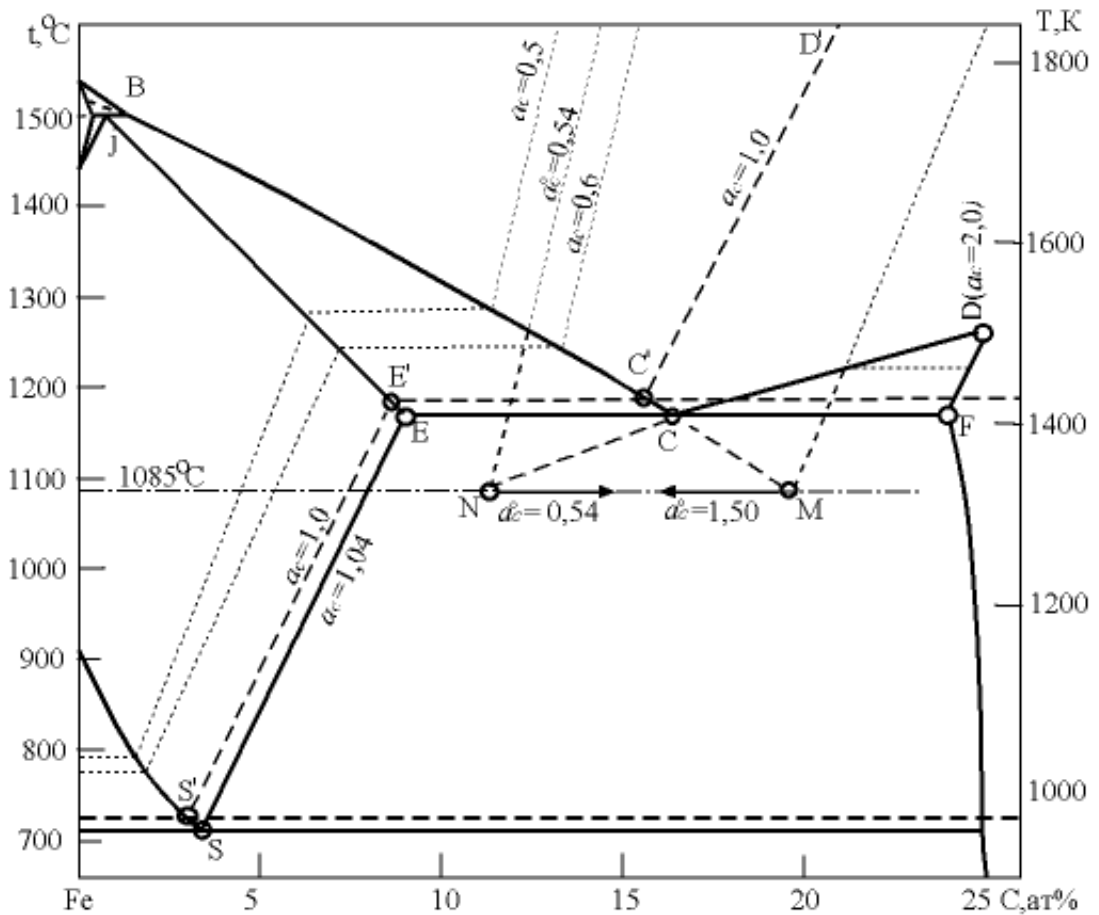


Рисунок 7.14 – Діаграма стану сплавів системи Fe-C з нанесеними лініями ізоактивності вуглецю і з розрахунком профілю цементитного ліквідуса

Крім того, можливим джерелом похибок в розрахунках може бути апроксимація, яка використана при виведенні формули (7.24) в роботі [241], в якій тангенси кутів нахилу конод прирівнювались до самих кутів в радіанах, що допустимо тільки для невеликих кутів.

На рис.7.13 показана вставка, яка ілюструє стабільну систему залізо-графіт-вольфрам, лінії якої дуже близько розташовані до ліній системи залізо-цементит-вольфрам. В цьому випадку по периметру конодного трикутника евтектичного перетворення  $\rho \rightarrow \gamma + \text{графіт}$  ми маємо  $a_C = \text{const} = 1,00$ . Кут  $\varphi'$  при вершині  $\rho'$  цього трикутника може бути розрахований за рівнянням [241]

$$\varphi' = \pi + 0,0066 (t_e' - 1154^\circ\text{C}) . \quad (7.24)$$

При  $t_e' = 1085^\circ\text{C}$  ми отримуємо  $\varphi' = \pi - 0,455 = 2,68$  рад. Фактичний кут на вставці до рис.7.13 склав  $\varphi' = 2,79$  рад.

Як бачимо, в стабільній системі залізо-графіт-вольфрам відмінність між розрахунковим значенням  $\varphi'$  і фактичним значенням невелика (7.17 і 7.24).

Рис. 7.13 відображає початкову стадію затвердіння евтектичного чавуну, легованого великою кількістю вольфраму, коли останній тільки в невеликій степені переходить в тверді фази (аустеніт і цементит) і в своїй основній масі концентрується в лікваті. На більш пізньому етапі затвердіння накопичення вольфраму в лікватах приводить до появи карбідних евтектик нецементитного



типу, які містять карбіди WC і W<sub>2</sub>C, і картина міжфазного розподілення елементів сильно ускладнюється. Аналогічна ситуація спостерігається в сплавах, легуваних Ti, Mo і їх аналогами. Титан при невеликих добавках, як і фосфор, практично не відбілює чавун. Молибден, навпаки, дещо відбілює чавун, але значно слабше, ніж хром. Останній, на відміну від Mo і W, дуже слабо ліквідує і при евтектичних перетвореннях сегрегуює в цементитну фазу.

## ВИСНОВКИ

1. Поняття "карбідоутворюючий елемент" і "карбідостабілізуючий елемент" не являються синонімами в металознавстві сплавів заліза.

2. Вольфрам, який має великий атомний радіус, порівняно мало розчиняється як в аустеніті, так і в цементиті. Він накопичується при ледебуритному розпаданні в рідкій фазі, а потім утворює зносостійкі карбідні евтектики.

3. Хоча вольфрам є тугоплавким металом, він, проте, сприяє зниженню температури ледебуритного перетворення в повній відповідності з закономірностями геометричної термодинаміки, так як в цьому випадку кут при вершині конодного трикутника  $\varphi < \pi$ .

4. На відміну від легування хромом, легування залізовуглецевих сплавів вольфрамом тільки в дуже невеликій степені послаблює його схильність до графітизації при затвердінні виливків.

5. За розглянутими вище властивостями титан і молибден являються близькими аналогами вольфраму.

## 7.6. Стабільність карбідів в поверхневих шарах деталей із залізовуглецевих сплавів

В даній роботі розглядається проблема стабільності включень зміцнення, зокрема карбідів, під впливом енергії різної природи та походження. Розмова йде про стабільність з термодинамічної точки зору. Втрата карбідом стабільності означає початок його розпаду з виділенням вуглецю, який може утворити окрему графітну фазу. Цей процес отримав назву графітизації, якій приділено немало уваги в роботах українських та зарубіжних дослідників [15, 212, 223 - 228]. Велике значення для надійності і довговічності деталей, виготовлених із залізовуглецевих сплавів мають також фізико-механічні властивості карбідів, їх взаємодія з іншими фазами. Потрібно зробити наголос, що в реальних сплавах не завжди справджується стехіометричне співвідношення компонентів у карбідах. Тому в ряді випадків ми будемо використовувати хімічну формулу карбідів Me<sub>x</sub>C<sub>y</sub>, де Me – карбідотворний елемент.

Нижче представлено розрахунковий метод врахування впливу легувальних елементів на зміну стабільності залізовуглецевих сплавів. Використання запропонованого підходу дозволяє детермінувати легувальний комплекс для одержання сплавів з заданими властивостями.

**7.6.1. Стабільність карбідів заліза (схильність до графітизації).** Під впливом комплексу явищ, що відбуваються при терті та зношуванні в поверхневих шарах пар тертя, накопичуються значні термічні напруження, перепади температур та щільність пошкоджень. Ці фактори можуть викликати фазові перетворення, масоперенос, контактне плавлення і навіть утворення плазми. Експериментальні дослідження цих процесів, що відбуваються в дуже невеликих за розмірами мікронах, утруднені. Тому доводиться обмежуватися в багатьох випадках теоретичним аналізом з розробкою відповідних розрахункових методів.

Доцільно розглядати діаграми стану стабільної і метастабільної рівноваги з врахуванням також і можливих нерівноважних станів.

Нелеговані сплави залізо-вуглець описується двома типами діаграм стану: залізо-графіт (стабільна рівновага) і залізо-карбіди заліза (метастабільна рівновага). В сталях графіт за кінетичними причинами звичайно не утворюється. Виключенням є графітизовані сталі – єдині антифрикційні сталі серед величезної множини цих сплавів.

Чавуни, навпаки, часто використовуються в графітизованому стані. Графіт є м'яким антифрикційним матеріалом, але крихким. Тому сірі чавуни добре обробляються різанням, мають підвищені антифрикційні та протизадирні властивості, але натомість знижені механічні характеристики. Білі чавуни не мають антифрикційних властивостей, але, як тверді матеріали, широко використовуються в якості високотвердих.

При терті та зношуванні в точках високотемпературної взаємодії поверхонь тертя може відбуватися як карбідизація сплавів заліза з їх переходом в метастабільний стан та загартовуванням при швидкому відведенні тепла в навколишнє середовище та металоконструкцію, так і навпаки, перехід в більш стабільний стан системи з виділенням графіту. При цьому утворюються так звані білі шари, які можуть дуже сильно впливати на трибологію цих систем. Крім того, у вказаних мікронах може відбуватися взаємодія металів з киснем і азотом повітря та утворенням вторинних сполук і структур.

Як у випадку розпаду карбідів (графітизація), так і у випадку їх додаткового утворення під впливом факторів процесу тертя структура і склад поверхневого шару змінюється, що може привести до зміни ступеню метастабільності системи. Цілеспрямоване управління ступенем метастабільності поверхневого шару металу може суттєво впливати на процес накопичення пошкоджень в ньому та процеси релаксації, підвищуючи зносостійкість.

В даному розділі розглядаються питання схильності систем на прикладі сплавів заліза до графітизації, тобто вплив легувальних елементів на ступінь стабільності системи та розпад карбідів. Для оцінки цього параметру використано як критерій коефіцієнти розподілу легувальних компонентів між фазами по ізотермічних розрізах діаграм стану. Інший підхід, політермічний («по вертикалі»), був використаний в статті [229].

Такий ізотермічний підхід до розв'язання проблеми використовувався в роботах [212, 217, 230], де запропоновано методи конодної і евтектичної поліедрації діаграм стану. В даній роботі цей підхід розвинутий з використанням даних А. Кагави і Т.Окамото [231-233].

**7.6.1.1. Коефіцієнти розподілу елементів між надлишковим аустенітом і розплавом.** Умови рівноваги можуть бути записані для потрійних сплавів Fe-C-*i* як рівності хімічних потенціалів компонентів в цих двох фазах:

$$\overset{\circ}{\mu}_i^L + RT \ln(\gamma_i^L X_i^L) = \overset{\circ}{\mu}_i^A + RT \ln(\gamma_i^A X_i^A), \quad (7.25)$$

де  $\overset{\circ}{\mu}_i$  - хімічний потенціал елемента, а  $\gamma_i$  - коефіцієнт активності елемента *i*;  $X_i$  - мольна доля елемента *i* в фазі, що розглядається. Літери *L* і *A* відносяться до рідини і аустеніту відповідно.

З рівняння (7.25) отримано вираз :

$$K_i^{A/L} = \frac{\overset{\circ}{\gamma}_i^L / \overset{\circ}{\gamma}_i^A}{F} \exp\left[\frac{\overset{\circ}{\mu}_i^L - \overset{\circ}{\mu}_i^A}{RT} + (\varepsilon_i^{i,L} - F\varepsilon_i^{i,A} K_i^{A/L}) X_i^L + (\varepsilon_i^{C,L} - F\varepsilon_i^{C,A} K_C^{A/L}) X_C^L\right], \quad (7.26)$$

де  $K_i^{A/L}$  - рівноважний коефіцієнт розподілу елемента *i* між аустенітом та евтектичним розплавом (відношення мас.% елемента *i* в аустеніті та в розплаві);  $\overset{\circ}{\gamma}_i$  - коефіцієнт активності при гранично сильному розбавленні розчину;  $\varepsilon_i^C$  і  $\varepsilon_i^i$  - параметри взаємодії Вагнера;  $X_C$  і  $X_i$  - мольні доли вуглецю і компонента *i*; *F* - фактор конверсії рівний:

$$F = \frac{(\%Fe)^L / M_{Fe} + (\%C)^L / M_C + (\%i)^L / M_i}{(\%Fe)^A / M_{Fe} + (\%C)^A / M_C + (\%i)^A / M_i}, \quad (7.27)$$

де %Fe, %C, %*i* і  $M_{Fe}$ ,  $M_C$ ,  $M_i$  означають вміст в мас.% і атомні маси відповідних компонентів.

Аналогічне рівняння отримано для вуглецю:

$$K_C^{A/L} = \frac{\overset{\circ}{\gamma}_C^L / \overset{\circ}{\gamma}_C^A}{F} \exp\left[(\varepsilon_C^{C,L} - F\varepsilon_C^{C,A} K_C^{A/L}) X_C^L + (\varepsilon_C^{i,L} - F\varepsilon_C^{i,A} K_i^{A/L}) X_i^L\right]. \quad (7.28)$$

Тут вираз  $\overset{\circ}{\mu}_C^L - \overset{\circ}{\mu}_C^A$  опущено, так як графіт вибрано в якості стандартного стану вуглецю як в рідкому металі, так і в аустеніті. Коефіцієнти розподілу  $K_i^{A/L}$  і  $K_C^{A/L}$  розраховані шляхом спільного розв'язання рівнянь (7.26) і (7.28). Для розбавлених розчинів елемента *i* ми маємо:

$$K_i^{A/L} = (K_i^{A/L})_{Fe-i} \exp(\varepsilon_C^{C,L} X_C^L - \varepsilon_C^{i,L} X_i^L), \quad (7.29)$$

де  $(K_i^{A/L})_{Fe-i}$  - рівноважний коефіцієнт розподілу в сплаві Fe- $i$ .

Термохімічні дані, що відносяться до рівнянь (7.25), (7.26) і (7.27), взяті з роботи [231], результати розрахунків з використанням рівнянь (7.28) і (7.29) представлені для деяких елементів  $i$  на рис.7.15, де показані також деякі експериментальні дані ряду дослідників. Експериментальні і розрахункові дані задовільно корелюють.

#### **Коефіцієнти розподілу між рідкою та твердою евтектиками.**

При дослідженні твердіння метастабільних евтектик необхідно розглядати три типи рівноваги для кожного легуючого елемента: між евтектичним розплавом і аустенітом, між евтектичним розплавом і цементитом і між цементитом та аустенітом. Відповідно  $K_i^{A/L} = (\%i)^A / (\%i)^L$ ,  $K_i^{C/L} = (\%i)^C / (\%i)^L$  і  $K_i^{C/A} = (\%i)^C / (\%i)^A$ .

Тут літерою  $C$  позначено цементит.

При стабільній евтектичній кристалізації легувальні елементи знаходяться в рівновазі тільки з рідкою евтектикою і аустенітом, так як їх розчинність в графіті незначна.

Нижче стабільні рівноваги будуть позначатися літерою  $S$ , а метастабільні рівноваги літерою  $M$ :

$$K^S = f^A K_i^{A/L}. \quad (7.30)$$

$$K^M = f^{A'} K_i^{A/L} + (1 - f^{A'}) K_i^{C/L} = [f^{A'} + (1 - f^{A'}) K_i^{C/A}] K_i^{A/L}, \quad (7.31)$$

де  $K^S$  і  $K^M$  представляють собою співвідношення концентрацій елементів в твердій і рідкій евтектиках стабільної і метастабільної діаграм, а  $f^A$  і  $f^{A'}$  позначають масові частки аустеніту в затверділих евтектиках стабільної і метастабільної систем відповідно. Розрахунки  $K_i^{C/A}$  проведені на основі даних М. Ко та інш. [234].

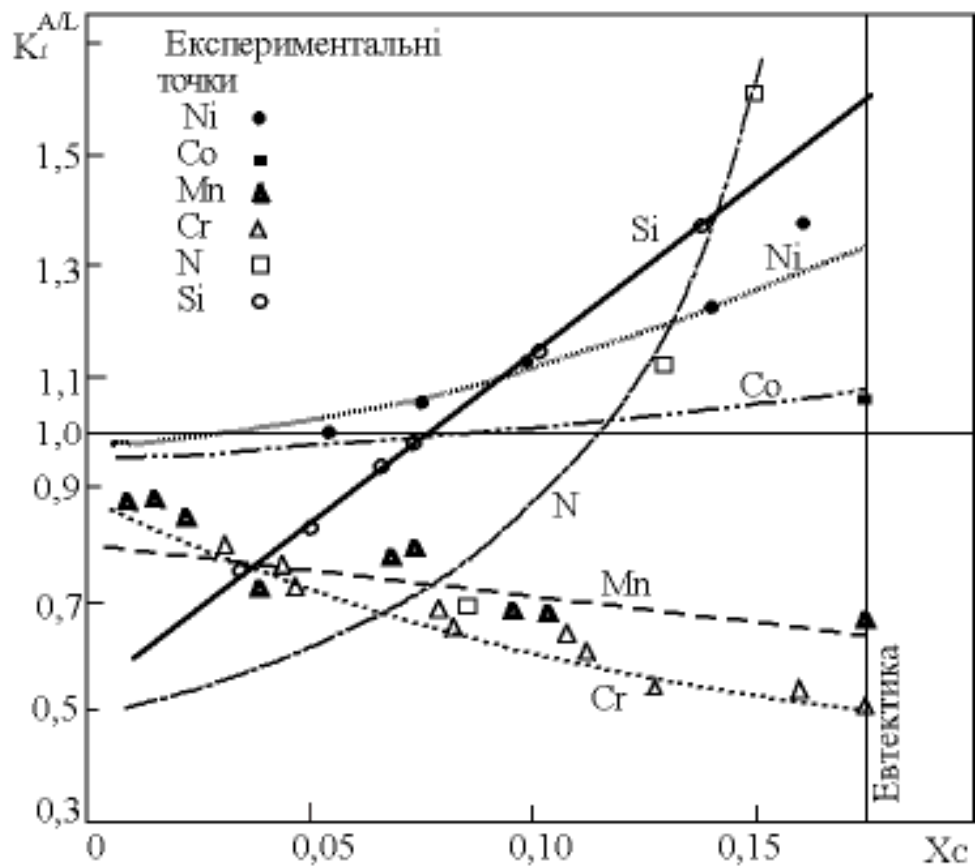


Рис. 7.15. Коефіцієнти  $K_i^{A/L}$  рівноважного розподілення третього елемента  $i$  між аустенітом та рідким сплавом

В таблиці 7.1 приведені отримані значення  $K^S$  і  $K^M$ , розрахункові і експериментальні дані  $K_i^{A/L}$  при евтектичних температурах, а також дані статті [229] по розрахунках температурних перепадів між рівноважними евтектичними точками  $T^S$  і  $T^M$  стабільних і метастабільних систем Fe-C- $i$ . В таблицю включені також дані М. Ко та інш. по значеннях  $K_i^{C/A}$  також при евтектичних температурах.

Аналіз таблиці 7.1 показує, що найбільш близькі розрахункові і експериментальні дані спостерігаються тоді, коли розрахунки ведуться по «вертикалі» при порівнянні параметрів стабільних і метастабільних систем Fe-C- $i$ . При використанні в розрахунках даних про термодинамічну активність вуглецю в сильно перегрітих вище ліквідусу однофазних розплавах Fe-C- $i$  спостерігається значна кількість виключень. Так, елементи N, P, S і В в останній колонці таблиці 1 потрапляють в розряд «графітизаторів», що не відповідає дійсності. В передостанній колонці таблиці 7.1 таких виключень з загального правила немає. Відповідно, використання розробленого розрахункового термодинамічного метода є більш коректним.

Таблиця 7.1 – Рівноважні коефіцієнти розподілення і фактори, що впливають на графітизацію карбідів

Елемент	$K_i^{A/L}$		$K_i^{C/A}$		$K^S$	$K^M$	$\Delta K = K^S - K^M$	$\Delta T_E^S$ К/ат%	$\Delta T_E^M$ К/ат%	$\Delta T_E^{(i)} = \Delta T_E^S - \Delta T_E^M$	Вплив на графітизацію	Вплив на активність вуглецю
	розр	експ	розр	експ								
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
Si	1.59	1.6	-0.34	$\cong 0$	1.55	0.78	0.77	10.73	-4.14	18.87	+	+
Ni	1.36	1.5	0.5	0.32	1.33	0.90	0.43	6.44	-1.88	8.32	+	+
Co	1.10	1.05	8	0.54	1.07	0.86	0.21	1.37	-2.63	4.00	+	+
Cu	1.46	1.5	-	0.09	1.43	0.78	0.65	8.39	-4.14	12.53	+	+
Al	-	1.07	-	0.04	1.05	0.55	0.50	0.98	-8.46	9.44	+	+
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
Cr	0.49	0.51	4.3	4	0.48	1.32	-0.84	-10.14	6.02	-16.16	-	-
Mn	0.65	0.7	1.7	1.6	0.64	0.90	-0.26	-7.02	-1.88	-5.14	-	-
Mo	0.38	0.35	-	1.7	0.37	0.52	-0.15	-12.29	-9.02	-3.27	-	-
W	0.24	0.39	-	1.9	0.23	0.35	-0.12	-15.02	-12.22	-2.80	-	-
Ti	0.04	-	-	2.42	0.04	0.07	-0.03	-18.72	-17.48	-1.24	-	-
N	1.90	1.9	-	1.2	1.86	2.09	-0.23	16.77	20.49	-3.72	-	+
S	0.06	-	-	-	0.06	-	-	-	-	-	???	+
B	0.06	-	-	4	0.06	0.15	-0.09	-18.33	-15.98	-2.35	-	+
P	0.14	-	-	0.63	0.14	0.11	0.03	-16.77	-16.73	-0.04	Нейтр	+

### Коефіцієнти розподілу компонентів четверних сплавів Fe-C-i-j.

Відомо, що коефіцієнти розподілення компонентів четверних і складніших систем можуть відрізнятися від коефіцієнтів розподілення в потрійних системах за рахунок взаємодії розчинених елементів один з одним.

Для четверних систем запропоновані такі рівняння.

Для третього компонента  $i$ :

$$FK_i^{A/L,q} = \left[ \frac{\gamma_i^L}{\gamma_i^A} \right] \exp\left(\frac{\mu_i^L - \mu_i^A}{RT} + (\varepsilon_i^{i,L} - F\varepsilon_i^{i,A} K_i^{A/L,q}) X_i^L + \right. \\ \left. + (\varepsilon_i^{C,L} - F\varepsilon_i^{C,A} K_C^{A/L,q}) X_C^L + (\varepsilon_i^{j,L} - F\varepsilon_i^{j,A} K_j^{A/L,q}) X_j^L \right) \quad (7.32)$$

а для вуглецю

$$FK_C^{A/L,q} = \left[ \frac{\gamma_C^L}{\gamma_C^A} \right]^b \exp\left(\frac{\mu_C^L - \mu_C^A}{RT} + (\varepsilon_C^{i,L} - F\varepsilon_C^{i,A} K_i^{A/L,q}) X_i^L - \right. \\ \left. - (\varepsilon_C^{j,L} - F\varepsilon_C^{j,A} K_j^{A/L,q}) X_j^L \right) \quad (7.33)$$

де літери  $q$  і  $b$  відносяться відповідно до четверної і бінарної систем.

Для елемента  $j$  може бути складено рівняння, аналогічне рівнянню (7.25). Тоді коефіцієнти розподілення для четверної системи можуть бути

розраховані шляхом одночасного розв'язання трьох рівнянь для вуглецю, елементів  $i$  та  $j$ .

В потрійній системі Fe – C –  $i$  вплив взаємодії вуглецю з третім елементом  $i$  на його коефіцієнт розподілення може бути визначений через співвідношення коефіцієнта розподілення в потрійній системі Fe – C –  $i$ , який позначено через  $K_i^{A/L}$ , і аналогічного коефіцієнта для бінарної системи Fe –  $i$ , тобто  $Z_i = K_i^{A/L,t} / K_i^{A/L,b}$ . Тут  $t$  і  $b$  відносяться до потрійної і бінарної системи відповідно. Це співвідношення визначається правою частиною рівняння (7.34). У випадку розбавленого розчину:

$$Z_i = \exp[(\varepsilon_i^{C,L} - F\varepsilon_i^{C,A}K_C^{A/L,t})X_C^L] . \quad (7.34)$$

У випадку четверної системи співвідношення коефіцієнта розподілення  $i$  в цій системі та такого ж коефіцієнта в потрійній системі, ми маємо  $Z_i = K_i^{A/L,q} / K_i^{A/L,t}$  і спільне розв'язання рівнянь (7.25) і (7.34) дає:

$$\ln Z_i = \alpha_i(1 - Z_i) + \beta_i(1 - Z_C) + \gamma_i \quad (7.35)$$

$$\left. \begin{aligned} \alpha_i &= K_i^{A/L,t} \varepsilon_i^{i,A} X_i^L \\ \beta_i &= K_C^{A/L,t} \varepsilon_i^{i,A} X_C^L \\ \gamma_i &= (\varepsilon_i^{j,L} - F\varepsilon_i^{j,A}K_j^{A/L,q})X_j^L \cong \varepsilon_i^{j,L}(1 - K_j^{A/L,q})X_j^L \\ Z_C &= K_C^{A/L,q} / K_C^{A/L,t} \end{aligned} \right\} , \quad (7.36)$$

де, для розбавлених розчинів елементів  $i$  і  $j$ ,  $X_i^{L,q} \approx X_i^{L,t} \approx X_i^L$ , а  $X_C^{L,q} \approx X_C^{L,t} \approx X_C^L$ . Тут значення  $F$  для потрійної і четверної системи в першому наближенні прирівняні до одиниці. З рівняння (7.36) видно, що значення  $\alpha_i$  в основному обумовлені третім компонентом  $i$ , а значення  $\beta_i$  – вуглецем. Взаємодія між вуглецем і елементом  $i$ , а також  $\gamma_i$ , обумовлені дією четвертого компонента  $j$  і взаємодією між  $i$  і  $j$ .

У статті [233] наведені конкретні розрахунки по четверних системах Fe-C-3%Cr-1%Si, Fe-C-1%Cr-1%Ni, Fe-C-1%Cr-1%Ti, Fe-C-Si-Mn з використанням рівнянь (7.35, 7.36). Результати розрахунків показані на рис. 7.16 разом з експериментальними точками, які добре накладаються на теоретичні криві. Було помічено, що суттєві ефекти від комплексного легування спостерігаються тільки для хрому в системі Fe-C –1%Cr-1%Ti.

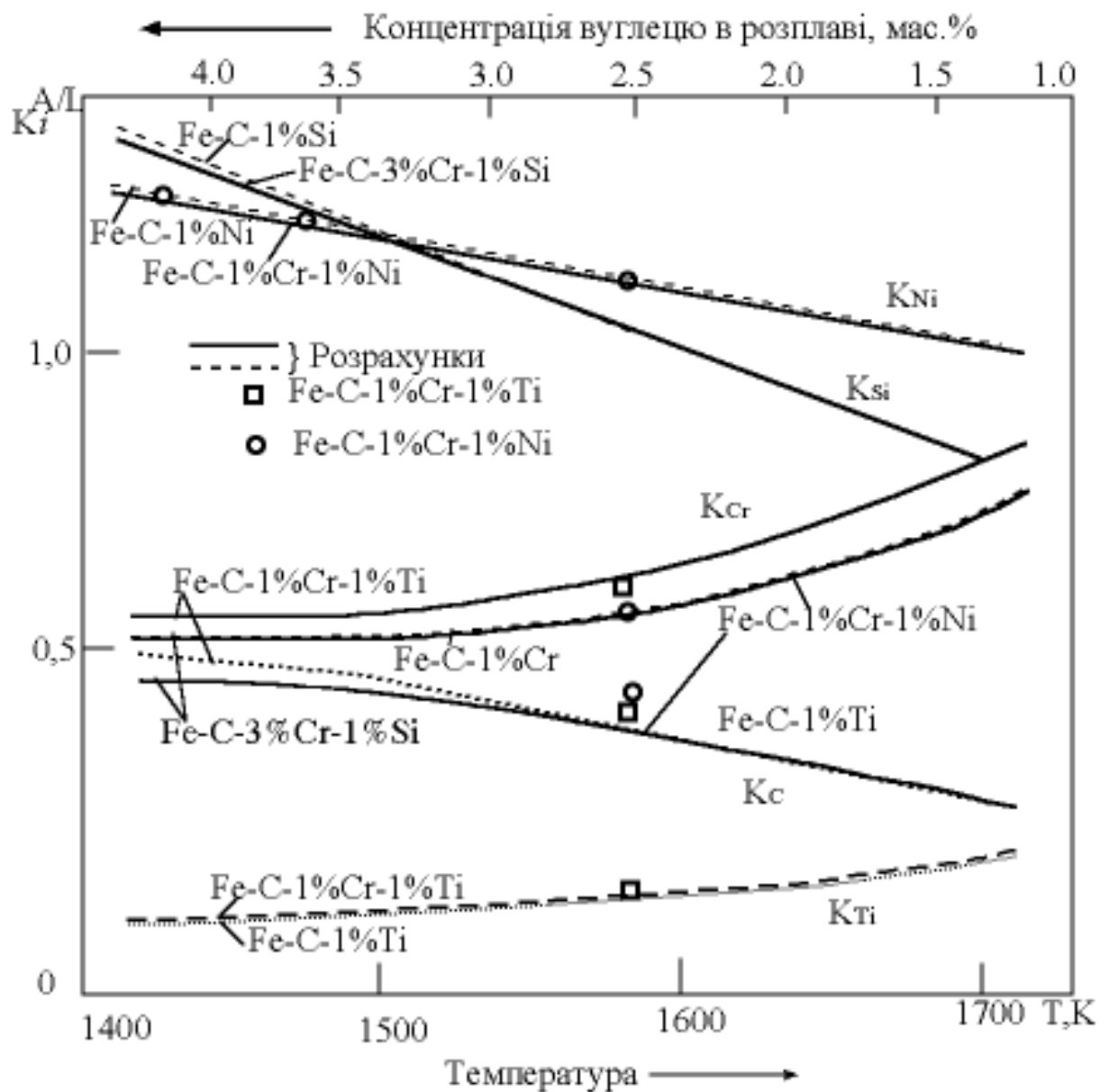


Рисунок 7.16 – Розраховані і виміряні коефіцієнти рівноважного розподілення розчинених елементів між аустенітом і розплавом в четверних системах Fe-C-Cr- $j$  ( $j = \text{Si, Ni, Ti}$ ). Вміст вуглецю в розплаві приведено для бінарної системи Fe-C

З рівняння (7.35) видно, що коефіцієнт розподілення елемента  $i$  в четверній системі обумовлене трьома факторами:  $P_1 = \alpha_1(1 - Z_i)$ ,  $P_2 = \beta_1(1 - Z_C)$ ,  $P_3 = \gamma_i$ . Фактор  $P_1$  залежить в основному від характеристик компонента  $i$ , а фактор  $P_2$  відображує в основному вплив елемента  $j$  на взаємодію елемента  $i$  з вуглецем. Фактор  $P_3$  характеризує взаємодію елементів  $i - j$ .

В роботі [235] розглядається внесок цих трьох факторів в  $Z_i$  для хрому і марганцю в четверних системах Fe-C-Cr-Si, Fe-C-Cr-Ti, Fe-C-Si-Mn. Результати розрахунків наведені на рис.7.17.



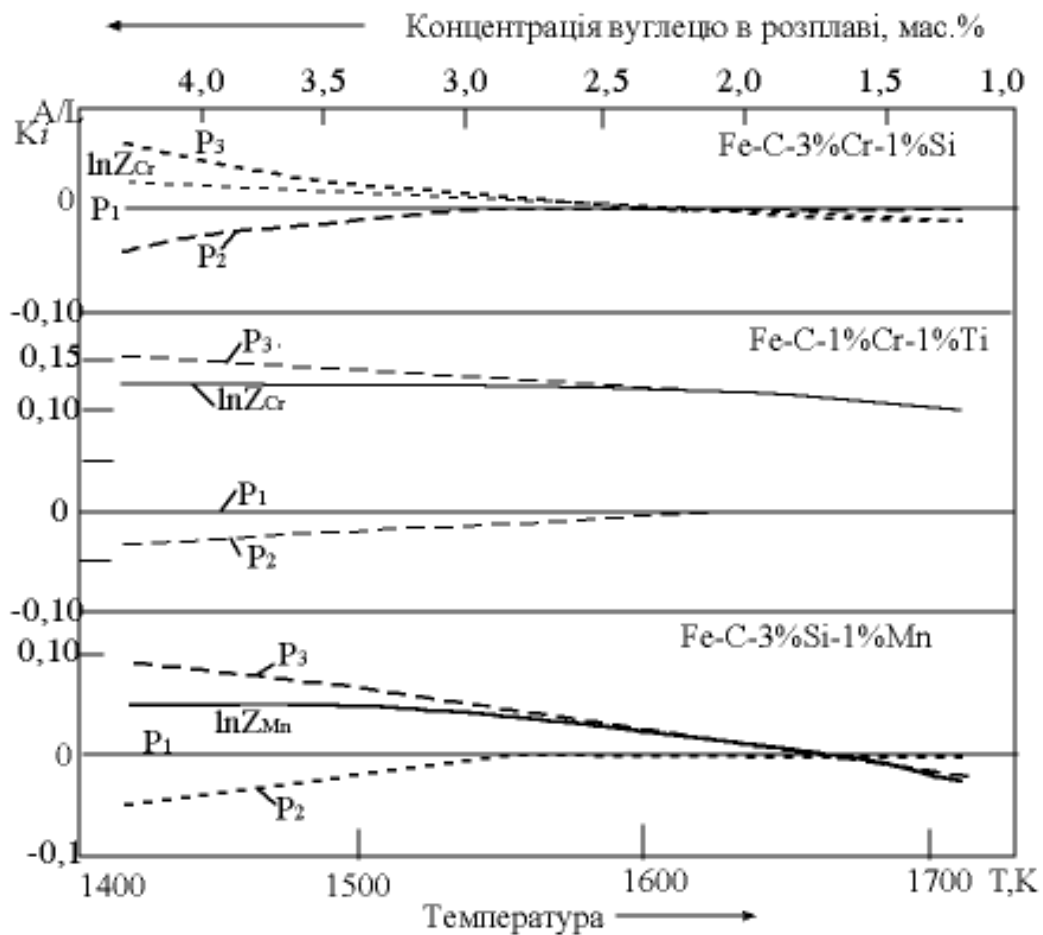


Рис. 7.17. Внесок факторів  $P_1$ ,  $P_2$  і  $P_3$  в  $\ln Z_{Cr}$  в системах Fe-C-Cr-Si, Fe-C-Cr-Ti, а також в  $\ln Z_{Mn}$  в системі Fe-C-Si-Mn

Дані, приведені на рис. 7.17, показують, що фактори  $P_2$  та  $P_3$  роблять протилежні внески в  $Z_i$  і що внесок  $P_1$  незначний в даній температурній області. З підвищенням температури внесок фактора  $P_2$  наближається до нуля і переважаючим стає внесок фактора  $P_3$ . Значення  $Z_i$  і  $Z_j$  приведені в табл. 7.2. При вмісті легувальних елементів, що переважає декілька мас.%, допустимі похибки розрахунків стають відчутними і виникає необхідність розробки більш точних розрахункових методик.

Таблиця 7.2 – Вплив добавки четвертого компонента  $j$  на коефіцієнт розподілення третього елемента  $i$  потрійної системи Fe-C- $i$  (3 мас.%C; 1573K)

$i$	$j$	$\varepsilon_i^j$	$Z_i$	$K_i^{A/L,q}$	$Z_j$	$K_j^{A/L,t}$	$K_j^{A/L,q}$
Si*	B	11,56	1,064	1,18	0,936	0,05	0,05
	Cr	-2,91	0,987	1,10	1,011	0,55	0,56
	Cu	4,20	0,977	1,08	0,989	1,19	1,18
	Mn	-2,98	0,982	1,09	1,010	0,71	0,72
	N	7,07	0,973	1,08	0,978	1,12	1,10
	Ni	1,38	0,985	1,09	0,999	1,20	1,20

	P	17,24	1,100	1,22	0,901	0,10	0,09
	S	9,31	1,021	1,13	0,979	0,04	0,04
	V	6,35	1,035	1,15	0,958	0,41	0,39
Cr**	Co	-5,56	1,033	0,57	0,979	1,03	1,01
	Cu	-4,82	1,041	0,57	0,987	1,19	1,17
	Mo	-0,01	1,021	0,56	0,985	0,42	0,41
	N	-12,16	1,027	0,56	0,955	1,12	1,07
	Ni	-1,28	1,022	0,56	0,999	1,20	1,20
	P	-7,53	0,953	0,52	0,972	0,10	0,10
	S	-2,63	1,002	0,55	1,021	0,04	0,04
	Ti	14,03	1,140	0,63	1,038	0,15	0,16

- \*  $K_{Si}^{A/L,t} = 1,11$ ,  $\varepsilon_{Si}^{Si,A} = 11,25$ ,  $X_{Si}^L = 0,02$
- \*\*  $K_{Cr}^{A/L,t} = 0,55$ ,  $\varepsilon_{Cr}^{Cr,A} = -6,29$ ,  $X_{Cr}^L = 0,01$

1. Наведені критерії класифікації впливу легувальних елементів дозволяють визначати їх роль в легувальному комплексі на підвищення ступеню стабільності (графітизацію) чи метастабільності залізовуглецевого сплаву.

2. Використання запропонованої методики дозволяє цілеспрямовано впливати на процеси накопичення пошкоджень та утворення вторинних структур в зоні фрикційного контакту за рахунок спеціально створеної метастабільності в матеріалі поверхні шляхом раціонального легування та введення необхідних інгредієнтів в мастила.

## ЛІТЕРАТУРА

1. Савуляк В.І. Побудова та аналіз моделей металевих сплавів/ В.І. Савуляк, А.О. Жуков, Г.О. Чорна. Вінниця.: Універсум.1999, 200 с.
2. Савуляк В.І. Синтез зносостійких композиційних матеріалів та поверхневих шарів з екзотермічних компонентів/ В.І. Савуляк. Вінниця.: Універсум. 2002, - 160 с.
3. Жуков А. А. Расчет химической спинодали в системе аустенит-цементит и некоторые практические приложения/ А. О. Жуков, В. И. Савуляк, Р. Л. Снежной, Т. Ф. Архіпова//Доклады РАН. Серия “Металлы”, №5, 1998.
4. Жуков А. А. О влиянии элементов на равновесные температуры эвтектических превращений/ А.О.Жуков, В. І. Савуляк, Т.Ф.Архіпова. //Металловедение и термическая обработка металлов, №2, 2000.
5. Савуляк В.І. Деякі питання термодинаміки систем Fe-C-і, де і –третій сильно ліквуючий компонент/ В.І. Савуляк //Вісник технічного університету “Поділля”.№1. 2001.
6. Жуков А. А. Об образовании карбина (цианополиина) и алмаза в Fe-C сплавах/ А. О. Жуков, В. И. Савуляк //Металловедение и термическая обработка металлов, №3.2001.
7. Савуляк В. І. Термодинаміка синтезу композиційних матеріалів на основі тугоплавких металів/ В.І. Савуляк, Г.О. Чорна//. Вісник Сумського державного університету, №9, 2002, с.83-87.
8. Савуляк В. І. Термодинаміка утворення сполук під час легування розплаву системи Fe-Cr-Ni-Si-C-O манганом / В.І. Савуляк, О. В. Поступайло, О. В. Шаповалова//«Наукові нотатки» : міжвузівський збірник. – Луцьк, 2015. – Вип. 50. – С. 194-198.
9. Савуляк В. І. Економічні технології високоміцних графітизованих сплавів заліза/ В.І. Савуляк, О.Б. Янченко// Вінниця: ВНТУ, 2014. 160 с.
10. Савуляк В. І. Наплавлення високовуглецевих зносостійких покриттів/ В.І. Савуляк, В.Й. Шенфельд// Вінниця: ВНТУ, 2014. 124 с.
11. Савуляк В. І. Ремонт та локальне зміцнення рам транспортних машин: монографія/ В.І. Савуляк, Д.В. Бакалець. Вінниця: ВНТУ, 2014. 122 с.
12. Кузнецов Ю.М. Прогнозування розвитку технічних систем/ Ю.М. Кузнецов, Р.А. Склярів. Київ-Тернопіль.: ТОВ “ЗМОК”, 2004. –323 с.
13. Струтинський В.Б. Математичне моделювання процесів та систем механіки: Підручник/В.Б. Струтинський. – Житомир: ЖІТІ, 2001. – 612 с.
14. Радченко С.Г. Математическое моделирование технологических процессов в машиностроении/ Радченко С.Г. – К: ЗАО Укрспецмонтажпроект, 1998. – 258 с.
- 15.Кузнецов Ю.М. Теорія технічних систем: Навчальний посібник/ Ю.М. Кузнецов, І.В. Луців, С.А.Дубиняк. – Тернопіль: ТДТУ, 1997. – 624 с.
- 16.Голубенко А.Л. Теория технических систем: Учебное пособие/ А.Л. Голубенко, А.С. Петров, А.Л. Кашура. – К.: Аристей, 2005. – 240 с.
- 17.Гультяев А. Имитационное моделирование в среде Windows. – С-Пб.: КОРОНАпринт, 1999. – 288 с.

18. Ермаков С.М., Жиглявский А.А. Математическая теория оптимального эксперимента. – М.: Наука, 1987. – 320 с.
19. Вильям Орвис. EXCEL для ученых, инженеров и студентов. - 1999.
20. Черненко В.С., Кіндрачук М.В., Дудка О.І. Променеві методи обробки: Навч. посібник. - К.: Кондор, 2004. - 166 с.
21. Костін О.М. Зварювальні матеріали: Навч. посібник. - Миколаїв: НУК, 2004. - 225 с.