

ТЕХНИЧЕСКИЕ НАУКИ

УДК 621.785:541.12:536.75

М. Л. ХЕЙФЕЦ

АНАЛИЗ ПРОЦЕССОВ САМООРГАНИЗАЦИИ
ПРИ ОБРАБОТКЕ МЕТАЛЛОВ ПО ДИАГРАММАМ СОСТОЯНИЙ
ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ СИСТЕМ

(Представлено академиком П. И. Ящерицыным)

Проектирование изделий и технологических процессов их изготовления ставит проблему по обеспечению длительного существования во времени и структурной устойчивости рассматриваемой технологическо-эксплуатационной системы. Эта проблема наиболее остро встает в процессах формирования эксплуатационных свойств поверхностного слоя деталей, которые тесно взаимосвязаны с процессами самоорганизации в физико-химических системах [1, 2].

Физико-химический анализ сложных систем обычно проводится на диаграммах — геометрических образах отношений состав — свойство системы. Основными принципами анализа физико-химических диаграмм являются предложенные Н. С. Курнаковым принципы непрерывности и соответствия [3—5].

Принцип непрерывности затрагивает образование и распад фаз физико-химической системы, описывающиеся уравнением Гиббса [6]:

$$\Phi = K + P - C,$$

где Φ — число однородных структур, фаз, под которыми подразумеваются массы, отличающиеся по составу и по термодинамическим свойствам; K — число компонентов, т. е. число веществ, достаточных для того, чтобы определить состав любой фазы; P — число переменных налагаемых полей (давления, гравитационных, электрических, магнитных и др.); C — число степеней свободы, т. е. число параметров, которые можно произвольно изменять без изменения числа фаз системы [7].

Кроме того, в принципе непрерывности рассматриваются особенности совокупности фаз с учетом кооперативных процессов, ведущие к изменениям свойств системы в целом. Это позволяет подойти к физико-химической системе с позиций самоорганизации ее элементов и исследовать изменения системы во времени t согласно фундаментальной теореме Пригожина—Глендсдорфа, определяющей по производству энтропии σ условия [8]: $d\sigma \leq 0$ — эволюции, $d\sigma = 0$ — стационарности и $d\sigma \geq 0$ — устойчивости, при производной по времени $d\sigma/dt \leq 0$.

Возникновение новых и исчезновение старых структур и фаз, прерывисто, скачком изменяющие состояние системы, при использовании принципа непрерывности ставят вопрос о структурно-фазовой устойчивости физико-химической системы в целом. Это требует исследования системы в окрестностях замечательных точек диаграмм (минимумов, максимумов, точек перегиба, эвтектических, эвтонических) и особенно сингулярных точек, в которых физико-химический состав сохраняется с изменением внешних условий.

Следуя принципу соответствия, представим традиционно: компоненты K физико-химической системы — точками диаграммы, которые образуют для комплекса узлы графа или вершины V многогранника; переменные, налагаемые на систему поля Π , — поверхностями или гранями Γ комплексов. Тогда образующиеся при появлении новых и исчезающие при распаде старых структур, фаз Φ линии соединения вершин V или пересечения граней Γ целесообразно обозначить ребрами P формируемого графа или многогранника. При этом необходимо отметить, что вместо соответствий $K \rightarrow V$ и $\Pi \rightarrow \Gamma$ можно рассматривать $K \rightarrow \Gamma$ и $\Pi \rightarrow V$. Это возможно не только в силу того, что образующиеся ребра P графа могут быть получены как соединением вершин V , так и пересечением граней Γ , но и вследствие того, что между веществом компонент K и энергией полей Π на более низком структурном уровне существует взаимное соответствие.

Формирующийся геометрический образ можно рассматривать как многомерный граф или многогранник, проекция которого на плоскость — многоугольник — также представляет собой замкнутый граф. Если граф вложим в плоскость, то он разбивает ее на определенное число областей, граней Γ [9]:

$$\Gamma = C_B - V + P + 1,$$

где C_B — число связанных кусков, из которых состоит граф. Тогда для связанного графа, начерченного на сфере ($C_B = 1$), справедливо равенство

$$V + \Gamma - P = 2 = C_B + 1 = X,$$

называемое формулой Эйлера. В частности, это соотношение справедливо для любого выпуклого многогранника.

Число $X = V + \Gamma - P$ называется эйлеровой характеристикой многогранника и показывает, сколько отверстий имеет многогранник. Число дырок $d = 1 - X/2$.

Коши доказано, что всякий выпуклый многогранник с жесткими гранями Γ , шарнирно соединенными в ребрах P , остается тем не менее твердым телом [10]. Это определяет однозначность описываемого многогранником состояния системы. Шлефли распространил формулу Эйлера на случай любого числа измерений [11]. Это позволяет в рамках предлагаемой модели рассматривать неограниченное число компонент K , полей Π и фаз Φ физико-химической системы.

Таким образом, между физико-химической системой произвольного, неограниченного состава, описывающейся уравнением Гиббса

$$K + \Pi - \Phi - C = 0,$$

и диаграммой состояния — геометрическим образом системы любой размерности, описывающейся формулой Эйлера

$$V + \Gamma - P - X = 0,$$

существует соответствие, позволяющее рассматривать степени свободы S системы как эйлеровы характеристики: $X = C = C_B + 1 = 2 - 2d$.

Проведем анализ соответствия степеней свободы S физико-химической системы числу связанных кусков C_B , составляющих диаграмму в виде графа, и количеству дырок d , впадин и выступов графического образа в виде многогранника (табл. 1).

$S = 0$. При отсутствии степеней свободы системы число связанных кусков $C_B = -1$, а количество дырок $d = 1$. Это означает, что при $S = 0$ в многограннике образуется сквозная дырка, а связанный граф единым куском может быть расположен на поверхности дырки (во внутренней полости, так как получен знак «—»). Следовательно, при $S = 0$ происходит смена рассматриваемых структурных уровней: переход от наружных (внешних) к внутренним (вложенным) структурам.

$C=1$. При единственной степени свободы число связанных кусков отсутствует $C_B=0$, т. е. поверхность вырождается в линию, а дырка превращается во впадину $d=1/2$.

$C=2$. Двум степеням свободы системы соответствует единый связный граф $C_B=1$, расположенный на наружной поверхности, у которой нет ни впадин, ни выступов $d=0$ и описывающийся, согласно формуле Эйлера, выпуклым многогранником.

$C=3$. Третья степень свободы создает раздвоение, бифуркацию в системе и обеспечивает распад единого связного графа на два куска $C_B=2$ — два независимых состояния системы. Это сопровождается образованием выступа на многограннике $d=-1/2$.

$C=4$. Четвертая степень свободы обеспечивает распад графа на три куска $C_B=3$ — три различных состояния, что сопровождается образованием двух выступов. Это можно представить как образование нового многогранника, насквозь пересекающего старый, т. е. формирование «антидырки» $d=-1$ на многограннике.

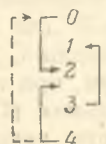
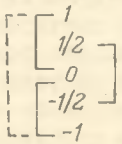
При $C=4$ два пересекающихся многогранника целесообразно рассматривать раздельно, так как их можно распределить на независимые фигуры; тогда $d=-1$ стремится к $d=0$ или к $d=1$, когда одна из фигур остается с дыркой. Происходит это путем соединения образовавшимся третьим двух кусков несвязных графов или путем разрыва и вырождения третьего куска (т. е. $C_B=3$ превращается в $C_B=1$ или $2C_B=2$) (табл. 1). Структуры образующихся систем с $C=2$ по первому пути усложняются, но становятся аналогичными, а по второму упрощаются, но в общем случае различны.

При отсутствии у системы степеней свободы $C=0$ образовавшаяся сквозная дырка $d=1$ стремится захлопнуться $d=0$ аналогично предыдущему случаю с «антидыркой» $d=-1$, а связный кусок из внутренней полости $C_B=-1$ стремится перейти на наружную поверхность $C_B=1$ (табл. 1). Происходит это в силу того, что при $C=2$ выпуклый многогранник обладает наивысшим порядком, и вследствие этого ($\delta\sigma \geq 0$) система — максимальной устойчивостью в отличие от квазиустойчивых стационарных состояний ($\delta\sigma=0$) с $C=0$ и $C=4$, при минимальных отклонениях из которых начинается процесс эволюции ($\delta\sigma \leq 0$) к состоянию с $C=2$.

При $C=3$ система стремится перейти в состояние с $C=1$ так, чтобы выступ на многограннике $d=-1/2$ превратился во впадину $d=1/2$, т. е. к эволюции ($\delta\sigma \leq 0$), переходу из одного квазиустойчивого стационарного состояния (с $\delta\sigma_1=0$) в другое (с $\delta\sigma_2=0$). При этом, несмотря на то что устойчивость системы повышается, как первое, так и второе состояние не обладает ею в достаточной мере (при которой $\delta\sigma \geq 0$). Происходит этот переход путем слияния и вырождения двух несвязных кусков графа (т. е. $C_B=2$ превращается в $C_B=0$) (табл. 1).

Обратный переход из состояния с $C=1$ в состояние с $C=3$ возможен

Таблица 1. Анализ соответствия степеней свободы C числу связанных кусков C_B и количеству дырок d , выраженных через эйлеровы характеристики X

Степени свободы C системы, эйлеровы характеристики X , $C=X$	Число связанных кусков C_B , составляющих граф $C_B=X-1$	Количество дырок d , впадин ($1/2$) и выступов ($-1/2$) многогранника, $d=1-X/2$
	-1 0 1 2 3	

при определенных пороговых энергозатратах, но формирующееся раздвоение и последующие бифуркации в системе могут привести ее в режим хаоса [12]. Это возможно вследствие того, что даже смена состояний с $C=1$ на $C=3$ при изменении выступа во впадину придает некоторую неопределенность физико-химической системе в результате потери жесткости многогранником [10].

Особым образом следует рассмотреть сингулярные точки, показывающие на диаграмме образование новых недиссоциированных химиче-

Таблица 2. Стадии формирования недиссоциированного соединения из диссоциированного с образованием сингулярной точки M на диаграмме состояний

Элементы диаграммы состояний	Эйлера характеристика: $X = B + G - P$	Степени свободы системы: $C = C_B + 1$
	$1 = 0 + 1 - 0$	$1 = 0 + 1$
	$1 = 1 + 2 - 2$	$1 = 0 + 1$
	$1 = 1 + 1 - 1$	$1 = 0 + 1$

ских соединений — дальтони́дов. В отличие от дальтони́дов частично диссоциированные соединения — бертолиды — формируют максимумы и минимумы на линиях, но не образуют особых точек на диаграмме [3, 4].

Согласно принципу соответствия, на диаграмме каждой фазе должен отвечать определенный геометрический образ. Согласно принципу непрерывности, этот образ должен быть непрерывным. Однако при образовании недиссоциированного соединения жидкой фазе соответствует не одна кривая, а две, точка пересечения которых показывает состав образующегося химического соединения.

Для устранения этого противоречия Н. С. Курнаковым и С. Ф. Жемчужным было предложено [5] считать эти две линии за две ветви одной и той же кривой, которая пересекает сама себя в точке M (табл. 2). В этом случае M является двойной узловой точкой, в окрестности которой следует рассматривать устойчивость формирующихся состояний системы [13].

Необходимо отметить, что петля, добавленная в сингулярной точке M , не является чисто гипотетической, как принималось ранее [3]. Петля показывает процесс формирования нового недиссоциированного химического соединения из диссоциированного в растворе, т. е. превращение бертолидов в дальтони́ды с образованием сингулярной точки M , при котором число степеней свободы C системы не изменяется (табл. 2). Но вместе с тем образование сингулярных точек создает предпосылки для формирования новых связей (фаз, структур и т. п.) [14], что отражается на числе ребер P , влияет и может изменить число степеней свободы C системы.

Проведенные исследования замечательных, особых и сингулярных элементов диаграмм, согласно предложенной топологической модели, с позиций самоорганизации физико-химических систем позволили сделать следующие выводы: 1) чувствительно зависящая от начального состояния физико-химическая система представляет собой странный аттрактор, которому достаточно трех степеней свободы ($C \geq 3$) для возникновения хаотического режима; 2) при числе степеней свободы $C \geq 3$ физико-химическая система переходит в неустойчивый режим, при котором в результате эволюции возможна стабилизация в нескольких ($C_B = C - 1$) стационарных состояниях; 3) стабилизация системы при неустойчивом режиме ее существования может быть обеспечена физико-химическими

превращениями на ином структурном уровне ($C=0 \Rightarrow C_b=-1$); 4) существует два основных пути эволюции физико-химической системы: на первом последовательность состояний системы имеет четное число степеней свободы ($C=2n$), на втором — нечетное ($C=2n+1$); 5) переход физико-химической системы с одного пути эволюции на другой возможен при формировании в системе особых и сингулярных элементов с их последующим обособлением.

Таким образом, существование двух основных путей эволюции физико-химической системы определяет принципы построения рациональных технологическо-эксплуатационных процессов при разработке новых материалов, деталей и изделий. Переход с одного пути на другой возможен при создании особых сингулярных ситуаций (в результате введения новых компонентов, полей или формирования их при кооперативных процессах в системе).

Summary

The study of remarkable, special and singular elements of matter state diagrams described by Euler formula for graph or polyhedron was carried out from the standpoint of selforganization of physicochemical systems described by Gibbs phase equation.

Литература

1. Ящерицын П. И., Кожуро Л. М., Сенчило И. А., Хейфец М. Л. // Докл. АН Беларуси. 1995. Т. 39, № 1. С. 112—116.
2. Саввакин Г. И., Саввакин Д. Г. // Порошковая металлургия. 1993. № 7. С. 70—83.
3. Аносов В. Я., Озерова М. И., Фиалков Ю. Я. Основы физико-химического анализа. М., 1976.
4. Курнаков Н. С. Введение в физико-химический анализ. Изд. 4-е. М.; Л., 1940.
5. Курнаков Н. С. // Избр. тр. М., 1960. Т. 1. 6. Гиббс Дж. В. Термодинамические работы. М.; Л., 1950.
7. Ван Флек Л. Теоретическое и прикладное материаловедение. М., 1975.
8. Гленсдорф П., Пригожин И. Термодинамическая теория структуры, устойчивости и флуктуации. М., 1973.
9. Пойа Д. Математика и правдоподобные рассуждения. М., 1975.
10. Коши О. // Успехи математических наук. 1944. Т. 10. С. 5—17.
11. Стрингхем В. И. // Успехи математических наук. 1944. Т. 10. С. 22—33.
12. Берже П., Помо И., Видал К. Порядок в хаосе. О детерминистическом подходе к турбулентности. М., 1991.
13. Эбелинг В. Образование структур при обратимых процессах: Введение в теорию диссипативных структур. М., 1979.
14. Физическое материаловедение. Вып. II. Фазовые превращения. Металлография / Под ред. Р. Кана. М., 1968.

Полоцкий государственный университет

Поступило 10.01.95