

# МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ

## Сумський державний університет

Факультет електроніки та інформаційних технологій

(повна назва інституту/факультету)

Кафедра прикладної математики та моделювання складних систем

(повна назва кафедри)

«До захисту допущено»

Завідувач кафедри

\_\_\_\_\_ Ігор Коплик

(підпис)

(Ім'я та ПРІЗВИЩЕ)

\_\_\_\_\_ 2023 р.

## КВАЛІФІКАЦІЙНА РОБОТА

на здобуття освітнього ступеня магістр

(бакалавр / магістр)

зі спеціальності 113.2 «Прикладна математика»

(код та назва)

освітньо-професійної програми «Наука про дані та моделювання складних систем»

(освітньо-професійної / освітньо-наукової)

(назва програми)

на тему: Моделювання напружено-деформованого стану в багат шарових плівкових системах в залежності від теплового навантаження

Здобувача (ки) групи ПМ.м-21 Кравченко Тетяни Романівни

(шифр групи)

(прізвище, ім'я, по батькові)

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

\_\_\_\_\_

(підпис)

Тетяна Кравченко

(Ім'я та ПРІЗВИЩЕ здобувача)

Керівник професор, доктор фіз.-мат. наук Олександр Гончаров

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

\_\_\_\_\_

(підпис)

## АНОТАЦІЯ

**Кваліфікаційна робота:** 75 с., 22 рисунки, 2 таблиці і 32 джерела.

**Мета роботи:** простежити та змодельовати температурне й деформаційне поле в ріжучій пластині без захисного покриття, врахувавши задані граничні умови.

**Об'єкт дослідження:** процес зміни теплового поля та напружено-деформаційного стану на поверхні металевої пластини з різними типами захисних покриттів.

**Предмет дослідження:** простежити та змодельовати температурне поле та напружено-деформований стан в ріжучій пластині без захисного покриття та різними типами покриттів, врахувавши задані граничні умови.

**Методи дослідження:** аналітичний аналіз, метод прогонки, метод скінчених різниць, метод Рунге-Кутта 4-го порядку точності, метод фазової площини.

У результаті досліджень розглянуто комп'ютерно змодельовану систему, яка дозволяє дослідити напружено-деформаційні стани ріжучого інструменту та знайти зв'язок між ними в залежності від інтенсивності теплового навантаження.

Проведені експерименти, що досліджували температурне поле пластини ріжучого інструменту виготовленої з сталі марки 38ХМ (42CrMo4) без покриття, з одношаровим покриттям TiN, з двошаровим покриттям TiN/ $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> під дією зовнішнього теплового навантаження. На основі одержаних даних проаналізовано температурне поле всередині пластини та його вплив на напружено-деформаційні стани в ній, що в свою чергу зменшують термін експлуатації інструменту.

**КЛЮЧОВІ СЛОВА:** НАПРУЖЕННЯ, ДЕФОРМАЦІЯ, ЗАХИСНА ПЛІВКА, ТЕПЛОВЕ НАВАНТАЖЕННЯ, ЗАХИСНЕ ПОКРИТТЯ.

## ЗМІСТ

<b>ВСТУП.....</b>	<b>4</b>
<b>РОЗДІЛ 1.....</b>	<b>6</b>
<b>ЛІТЕРАТУРНИЙ ОГЛЯД.....</b>	<b>6</b>
<b>РОЗДІЛ 2.....</b>	<b>21</b>
<b>ФІЗИЧНА МОДЕЛЬ ЗАДАЧІ ДОСЛІДЖЕННЯ.....</b>	<b>21</b>
2.1 Рівняння теплового балансу під час процесу різання.....	21
2.2 Температурне поле інструменту різання.....	23
2.3 Напружено-деформовані стани в контактній зоні.....	25
2.4 Межовий режим тертя між твердою поверхнею та захисною плівкою.....	26
<b>РОЗДІЛ 3.....</b>	<b>30</b>
<b>МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ ЗАДАЧІ ТА ЇЇ РЕАЛІЗАЦІЯ.....</b>	<b>30</b>
3.1 Математична модель.....	30
3.2 Метод скінчених різниць(поздовжньо-поперечна схема).....	32
3.3 Метод фазової площини для дослідження залежності деформацій від температури.....	35
3.4 Метод фазової площини для дослідження залежності напружень від деформацій.....	40
3.5 Результати апробації математичної моделі.....	48
<b>ВИСНОВКИ.....</b>	<b>54</b>
<b>СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ.....</b>	<b>56</b>
<b>ДОДАТОК А.....</b>	<b>60</b>

## ВСТУП

Сучасний світ технологій неможливий без використання різноманітних матеріалів, серед яких особливе місце займають багатошарові плівкові системи. Ці системи, що виникли як результат розвитку матеріалознавства і технологій останніх десятиліть, сьогодні широко застосовуються у найрізноманітніших галузях, від мікроелектроніки до авіаційної промисловості, від медицини до енергетики. Особливо важливою є здатність цих матеріалів витримувати високі температури та інші складні умови експлуатації, що вимагає глибокого розуміння їхньої поведінки під впливом різних видів навантажень.

Напружено-деформований стан багатошарових плівкових систем є критичним аспектом, який впливає на їхню довговічність та функціональність. Цей стан особливо важливий при високих температурах, оскільки теплове розширення матеріалів може призвести до змін у їхніх фізичних властивостях, зокрема до зменшення міцності та жорсткості. Важливість розуміння цих процесів підвищується у контексті зростаючих вимог до ефективності та надійності сучасних технологічних систем.

Сучасні дослідження у цій області активно використовують методи комп'ютерного моделювання, що дозволяють детально аналізувати вплив теплових навантажень на напружено-деформований стан багатошарових плівкових систем. Зокрема, метод скінченних елементів (МСЕ) став незамінним інструментом для аналізу та проектування таких систем. МСЕ дозволяє враховувати складну взаємодію між різними шарами, а також ефекти, пов'язані з неоднорідністю матеріалів, їхніми гетерогенними властивостями та границями розділу.

Цей підхід особливо важливий у контексті багатошарових захисних покриттів, що використовуються у різних інструментах, зокрема в ріжучих пластинах. Вивчення напружено-деформованих станів у таких системах може значно підвищити розуміння механізмів зносу інструментів, а також сприяти

розробці більш довговічних та ефективних покриттів. Зокрема, важливість багат шарових покриттів у промисловості зростає у зв'язку з їх здатністю покращувати робочі характеристики інструментів, включаючи збільшення їх жорсткості, термічної стабільності та опорності до зносу.

Під час використання ріжучих пластин, наприклад, у металообробній промисловості, вони часто піддаються екстремальним температурам і механічним навантаженням. Такі умови викликають значні напруження всередині багат шарових покриттів, що може призвести до їхньої деформації або навіть руйнування. Оптимальне проектування таких покриттів вимагає глибокого розуміння впливу цих навантажень на поведінку матеріалів, що в свою чергу сприяє розробці більш довговічних та ефективних рішень для промислових застосувань.

## РОЗДІЛ 1

### ЛІТЕРАТУРНИЙ ОГЛЯД

З огляду на те, що багатошарові плівкові системи знаходять застосування в таких критичних галузях, як металообробка різанням, авіаційна промисловість, мікроелектроніка та багато інших, розуміння їхнього поведінки під впливом різних видів навантажень, зокрема теплових, є надзвичайно важливим. Літературний огляд охоплює дослідження [1-11], присвячені теорії та практичному застосуванню багатошарових плівкових систем, з акцентом на аналізі їх механічних та термічних властивостей.

У дослідженні [3] проводяться детальні експерименти та термодинамічне моделювання самоорганізації у трибосистемах, що функціонують в екстремальних умовах. Основний акцент дослідження зроблено на адаптивних PVD-покриттях, представлених нанобагатошаровим покриттям  $\text{TiAlCrSiYN/TiAlCrN}$ .

Стаття починається з аналізу поверхні, що зносилася, за допомогою скануючої електронної мікроскопії, енергодисперсійної спектроскопії, трансмісійної електронної мікроскопії, рентгенівської фотоелектронної спектроскопії та спектроскопії аугерових електронів. Встановлено, що покриття демонструє швидку адаптивну відповідь на екстремальні зовнішні стимули на початковому етапі зносу через формування захисних трибоплівок.

Важливим аспектом дослідження є термодинамічне моделювання формування трибоплівок, яке демонструє, що самоорганізація в трибо-системах призводить до значного зниження швидкості зносу. Така самоорганізація відбувається на початкових етапах взаємодії, що призводить до мінімізації інтегрального зносу системи.

У рамках експериментальної частини дослідження було вивчено адаптивне нано-багатошарове покриття  $\text{TiAlCrSiYN/TiAlCrN}$ . Покриття було

нанесено на карбід-вольфрамові торцеві фрези з кобальтовим сплавом. Використання сучасних методів дослідження, таких як трансмісійна електронна мікроскопія та рентгенівська фотоелектронна спектроскопія, дозволило вивчити мікроструктуру та фазові перетворення на інтерфейсі ріжучого інструменту/робочої деталі, а також хімічний склад утворених трибоплівків.

У розділі результатів та обговорення демонструється прискорена адаптивна відповідь покриття на екстремальні зовнішні стимули на початковому етапі зносу. Виявлено, що протягом перших хвилин різання формується максимальна кількість захисних трибо-керамічних плівок, що призводить до мінімізації сил різання. Дослідження також показало, що покриття може ефективно адаптуватися до складних умов завдяки його нестійкому стану та складній нано-кристалічній/багатошаровій структурі.

У висновках підкреслюється, що дослідження демонструє складні трибологічні процеси у PVD-покриттях, що працюють в екстремальних умовах. Виявлено, що адаптивні покриття ефективніше справляються з екстремальними умовами завдяки комплексним процесам самоорганізації. Ці процеси відбуваються на нано-масштабі та взаємодіють у високоорганізований спосіб, що призводить до значного зниження виробництва ентропії під час тертя.

Ця стаття вносить важливий вклад у розуміння складних процесів на нано-рівні у трибосистемах та висвітлює потенціал адаптивних покриттів для покращення різальної продуктивності та зменшення зносу в екстремальних умовах обробки.

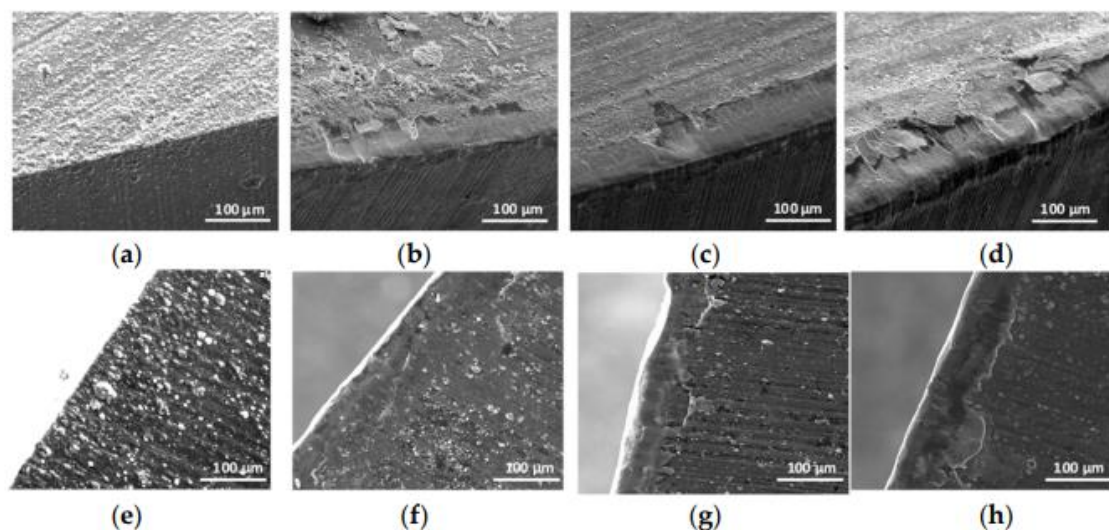


Рис. 1.1 – SEM зображення зношених поверхонь кульових кінцевих фрез С-2SB: передня поверхня у вихідному стані (а) після 2 (b); 15 (c) і 30 м (d) відповідно. Зношена бокова поверхня представлена на початковій частині (e).стан; (f) через 2 м; (g) 15 м; та (h) 30 м довжина розрізу, відповідно [3].

Автори статті [4] розглядають вплив теплової обробки на стан напруження та еволюцію мікроструктури в системах нано-багатошарових матеріалів з міді та вольфраму (Cu/W). Дослідження було проведено за допомогою високотемпературної рентгенівської дифракції (HT-XRD) та високороздільної скануючої електронної мікроскопії (SEM).

Ці нано-багатошарові (NML) архітектури можуть бути синтезовані за допомогою фізичного випарювання в вакуумі (PVD) із точним контролем над товщиною шарів, періодичністю модуляції та хімічним складом. Параметри процесу магнетронного розпилення (MS), такі як потужність мішені, тиск та упередження підкладки, можуть бути ефективно варійовані для формування мікроструктури. Загалом бажано створювати NML із чітко визначеними границями між шарами та обмеженими залишковими напруженнями зростання для забезпечення надійності пристрою. Композити Cu/W та NML з цими матеріалами привертають зростаючу увагу через високу теплопровідність міді та низький коефіцієнт теплового розширення вольфраму, що робить їх привабливими для застосувань у тепловому управлінні.



У минулому еластичні властивості вольфраму у Cu/W багатошарових системах були досліджені, і були виявлені незвичайно високі значення тензора напруження. Високий стан компресійного напруження у шарах вольфраму приписувався міжфазному ефекту. Рівень напружень зростання у складових шарах може суттєво відрізнятись. Наприклад, у шарах вольфраму завжди спостерігається високий компресійний стрес (до -5 ГПа), в той час як чергуючі шари міді можуть демонструвати різні стани напружень від компресійних до високо-тягових, в залежності від товщини та умов осадження.

Аналіз мікроструктури асиметрично осаджених та теплово оброблених Cu/W NML за допомогою SEM показав, що поверхня асиметрично осаджених NML дуже рівна та має зернисту морфологію, без тріщин, порожнин чи відшарувань. Після теплової обробки до 900 °C первісна стратифікована структура повністю деградує в нанокompозитну структуру, що складається з кулястих частинок вольфраму, вбудованих у мідь.

HT-XRD аналіз показав, що інтенсивність модуляції у рентгенограмі, характерна для періодичних шаруватих структур, зникає повністю під час нагрівання у діапазоні температур від 750 до 900 °C, незалежно від субстрату.

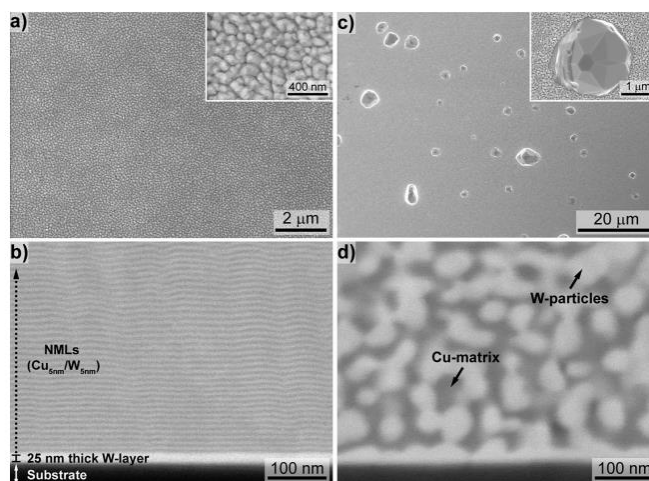


Рис. 1.2 – Типові (а) планарні та (б) поперечні SEM -зображення мультишару Cu/W у стані нанесення [4].

Загальний аналіз напружень в Cu та W шарах показав, що стан напруження Cu наночарів під час осадження та при нагріванні в значній мірі

визначається накопиченими напруженнями в більш жорстких нанощарах W. У результаті, вимірюваний перебіг еволюції напруження Cu з температурою відпалу якісно схожий для Cu та W. Напруження, що виникають у процесі зростання, є основною причиною високих компресійних напружень у нанощарах Cu та W.

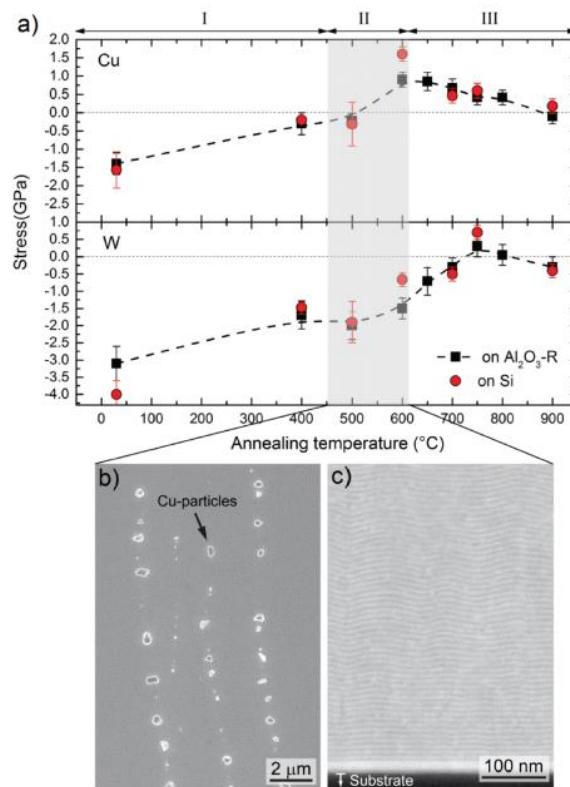


Рис. 1.3 – Графік напружень від температури на різних поверхнях [4].

Висновки дослідження підкреслюють вплив теплової обробки на стан напруження та еволюцію мікроструктури в Cu/W nano-багатошарових системах. Ця праця є основою для подальших розслідувань щодо впливу товщини шару, послідовності шарів та параметрів осадження на мікроструктуру, стан напруження та термічну стабільність систем Cu/W NML.

Стаття [5] зосереджується на дослідженні впливу багатошарових покриттів (TiCN/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-TiN) на вольфрам-карбідні різальні інструменти під час високошвидкісного різання.

Конкуренція сприяє розвитку високошвидкісного оброблення (HSM), метою якого є створення високої швидкості видалення матеріалу та високої

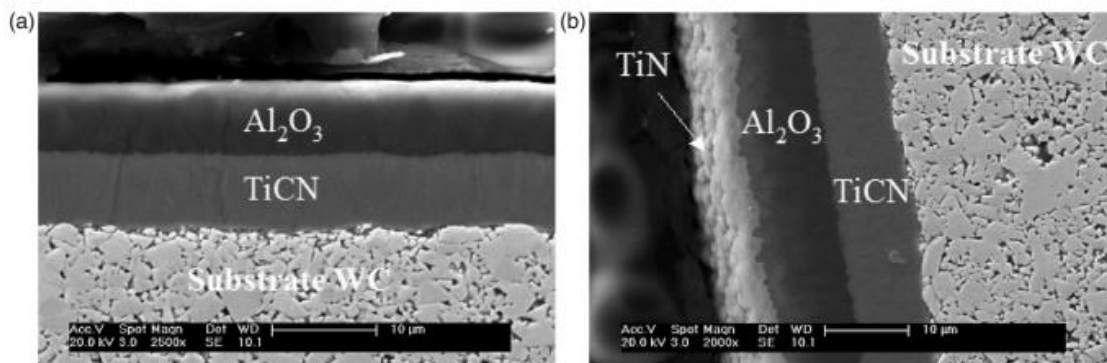
точності. HSM забезпечує високі рівні продуктивності, гарну якість поверхні, високу точність оброблених деталей і низькі різальні сили. Однак HSM також має недоліки, особливо через високий рівень деформації, який створюється під час процесу, що може призвести до серйозної пластичної деформації матеріалу робочої деталі.

Автори відзначають, що HSM часто використовується в сухих умовах обробки, оскільки високі різальні температури можуть призвести до теплових ударів, що негативно впливають на термін служби інструменту. Вони також вказують на важливість нових геометрій різальних інструментів та нових покриттів, які можуть компенсувати ці недоліки. Особливу увагу приділено багат шаровим покриттям на інструментах, які забезпечують значні переваги в термінах збільшення терміну служби інструменту або різальної швидкості. Вказується, що товщина шару покриття є однією з найважливіших характеристик, яка визначає продуктивність покриття. Водночас товстіші багат шарові покриття зазвичай мають кращу стійкість до подряпин і зносу завдяки їхній кращій здатності до перенесення навантаження.

Дослідники також відзначають, що теплові властивості матеріалу покриття можуть впливати на поведінку під час обробки. Теплопровідність робочого матеріалу та матеріалу, що використовується для покриття інструменту, контролює розсіювання тепла в інструмент. Цікаво, що теплопровідність вольфрам-карбіду (WC) та титанових покриттів зростає з температурою, тоді як для  $Al_2O_3$  вона зменшується. Вказується, що це зниження теплопровідності  $Al_2O_3$  є основною причиною його широкого застосування як проміжного шару та теплового бар'єру у багат шарових покриттях.

У дослідженні використовувалася гібридна методологія, що об'єднує моделювання методом скінченних елементів (FEM) та експериментальні випробування для оцінки продуктивності вольфрам-карбідних інструментів з багат шаровими покриттями. Основна мета полягала у вимірюванні розподілу

тепла в інструменті та росту зносу задньої поверхні. Різання проводилося на сталі AISI/SAE 4140 з низьким вмістом вуглецю, використовуючи інструменти з вольфрам-карбїду з багатошаровими покриттями  $\text{TiCN}/\text{Al}_2\text{O}_3$  на передній поверхні та  $\text{TiCN}/\text{Al}_2\text{O}_3/\text{TiN}$  на задній поверхні. Інструменти мали обмежений контакт з деталлю за рахунок наявності жолобків. Експерименти з різання проводилися при широкому діапазоні швидкостей різання від 200 до 879 м/хв.



**Fig. 6** SEM micrographs of the cross-sections of multilayer coated samples for the (a) rake face, and (b) flank face

Рис. 1.4 – SEM мікрофотографії поперечних перерізів зразків з багатошаровим покриттям для (a) передньої поверхні, і (b) бокова грань [5].

Сила різання є важливим вхідним параметром для аналізу FEM. На рисунку 1.14 показана зміна сил різання як функція швидкості різання. Можна побачити, що обидві складові сили, тобто сила різання та подача зусилля слідуєть основній теорії обробки сталі, тобто зі збільшенням швидкості різання зусилля зменшуються.

Зменшення сил різання є основною перевагою вищих швидкостей різання. Це зменшення сил різання можна віднести до до зниження сили течії матеріалу при підвищених температури. Також можна помітити, що для кожного моменту швидкість різання сила подачі вище в порівнянні з іншими дослідженнями, наприклад майже половина сили різання. Це пов'язано з рифленою передньою поверхнею інструмент, який обмежує прямий потік стружки, таким чином, це призводить до більшої сили подачі.

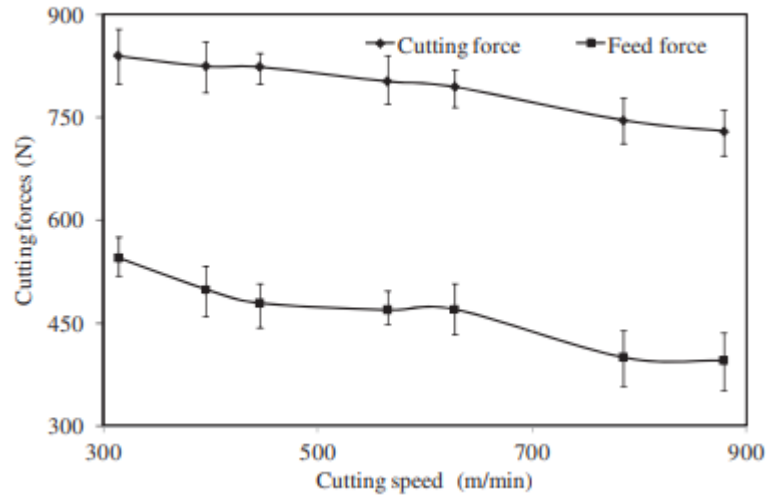


Рис. 1.5 –Зміна сил різання як функції швидкості різання (при  $f = 0,16$  мм/об і  $a_p = 2$  мм) [5].

Важливість зносостійкості інструменту є досить очевидною, оскільки вона впливає на температурні поля в різальному інструменті при триваліших різальних проходах, особливо при високошвидкісній обробці (HSM). Гаряча твердість є найважливішим фактором для зниження абразивного зносу, тому важливо, щоб покриття зберігало свою твердість навіть при підвищених температурах. На рисунку 1.15 показано зміну максимального зносу бічної поверхні в залежності від часу різання для швидкостей різання 200, 314 та 565 м/хв для багат шарового покритого інструменту з вольфрамового карбїду. При найнижчій швидкості різання, тобто 200 м/хв, прогрес зносу бічної поверхні є повільним, але коли швидкість різання збільшується до 315 м/хв, швидкість зносу починає зростати. При 565 м/хв спостерігається стрімке збільшення зносу інструменту, яке майже досягає середнього критерію життєздатності інструменту 0,3 мм. Цей стрімкий прогрес зносу бічної поверхні є однією з основних недоліків HSM. Для різальних інструментів, які тестувалися (п'ять разів повторно) при 879 м/хв, ріжуча кромка була сильно пошкоджена при середній довжині різання 35 мм на першому проході довжиною 80 мм. Тому подальші тести на цій швидкості не проводилися.

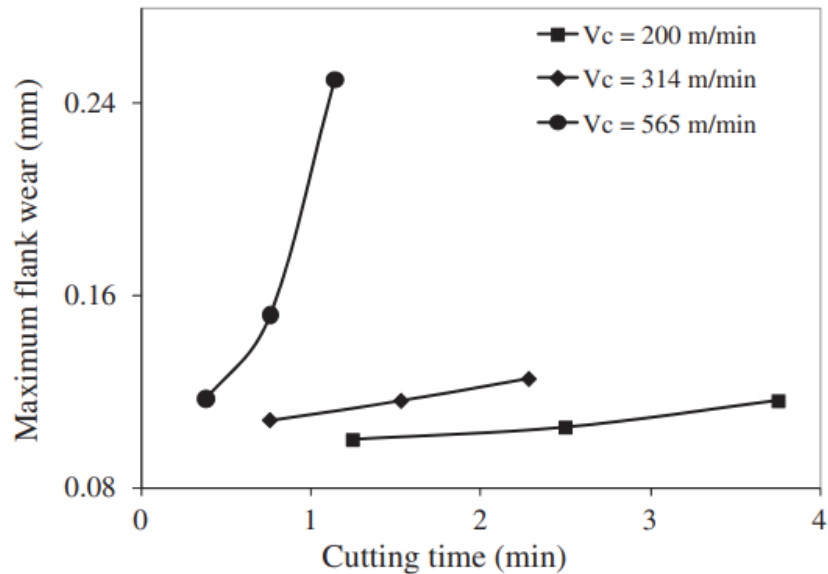


Рис. 1.6 – Зростання максимального бокового зносу (при  $f=0,16$  мм/об і  $a_p=1$  мм) [5].

На рисунках 1.16 (а-с) показано симульовані розподіли температур на ріжучому інструменті при швидкостях різання 314, 565 та 879 м/хв відповідно. На область контакту між інструментом і стружкою застосовувалася рівномірна або нерівномірна теплова потужність, в залежності від доцільності. Інструмент мав покриття TiCN/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> на ріжучій поверхні та TiCN/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/TiN на бічній поверхні.

Результати симуляції показують високі температури у дуже вузькій зоні біля ріжучого краю. Це очікувано, оскільки в режимі різання з вищими швидкостями довжина контакту зміщується до різального краю, і тому спостерігаються вищі температури. Зауважується з рисунку 1.16(а), що при відносно низькій швидкості різання 314 м/хв у зоні контакту інструменту зі стружкою можна спостерігати високі температури. У випадку швидкості різання 565 м/хв місце розташування високих температур зміщується у напрямку різального краю, як показано на рисунку 1.16(б). При 879 м/хв (рисунок 1.16(с)) профілі високих температур (червоний контур температури) перетинають різальний край і переміщуються до бічної поверхні. Це пов'язано зі зменшенням довжини контакту при збільшенні швидкостей різання, особливо

в традиційній обробці. Це є однією з основних причин зносу бічної поверхні при вищих швидкостях різання і може бути розглянуто як один з недоліків високошвидкісного механічного оброблення.

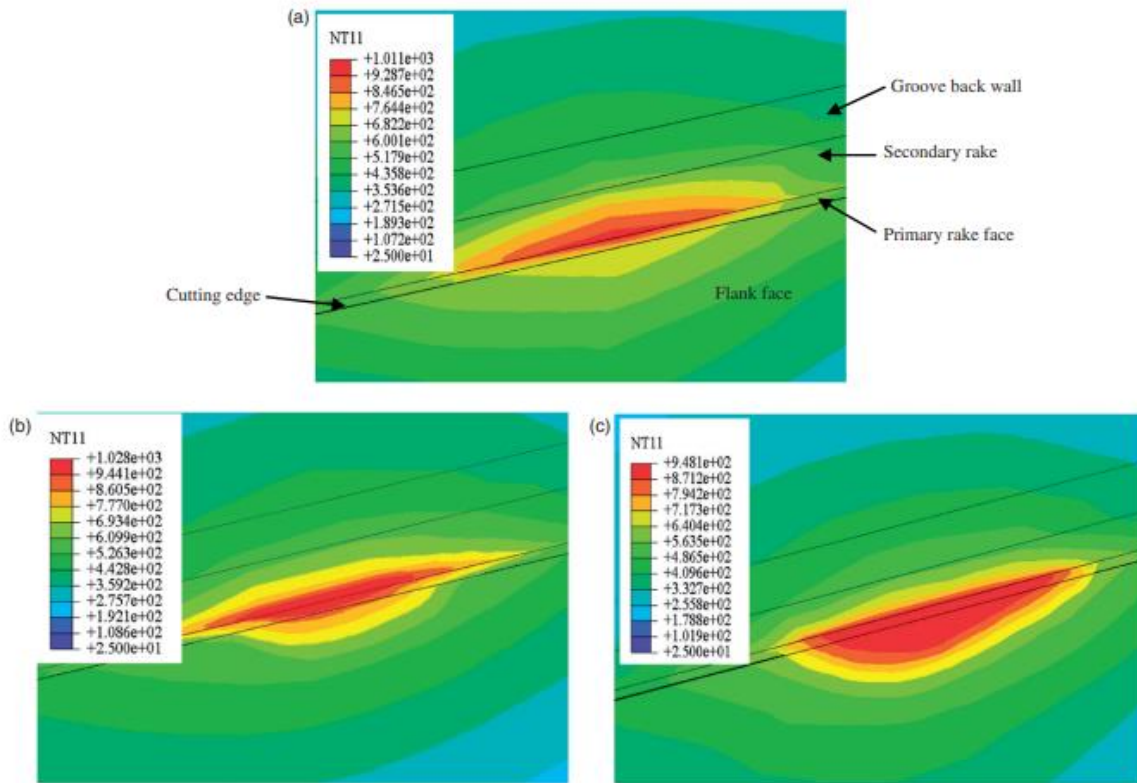


Рис. 1.7 – Розподіл температури, змодельований методом FEM, при швидкостях різання: (а) 314 м/хв; (б) 565 м/хв; і (с) 879 м/хв [5].

У рамках роботи [6] розроблено сучасну довільну лагранжево-ейлерову кінцево-елементну модель операції фрезерування. Представлено використання ріжучих пластин з твердого металу з покриттям. Під час фрезерування глибина різання постійно зменшується, модель враховує рух інструменту у вертикальному напрямку. Поведінка матеріалу заготовки 42CrMo<sub>4</sub> описана за допомогою стандартної моделі матеріалу Джонсона-Кука. Створено детальну модель інструменту, здатну представляти інструмент як без покриття, так і з покриттям. Досліджено три твердих покриття: одинарний шар TiAlN, наплавлений електродугою, подвійний шар TiCN/ $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, осаджений хімічним шляхом, і хімічний двошаровий TiAlN/ $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, осаджений з газової фази.

Модель інструменту без покриття використовується як еталон для порівняння результатів.

Досліджено навантаження інструменту під час фрезерування. Розрахунковими змінними є сили різання та інструмент-заготовка довжина контакту. Вплив покриттів на температуру, напругу фон Мізеса та накопичений пластичний еквівалент деформації імітується в покритті та підкладці.

Для опису поведінки напружено-деформованого стану матеріалу заготовки, використовується модель матеріалу Джонсона-Кука, яку можна представити у вигляді:

$$\sigma_{eq} = (A + B * \varepsilon^n) \left(1 + C * \ln\left(\frac{\dot{\varepsilon}}{\dot{\varepsilon}_0}\right)\right) \left(1 - \left(\frac{T - T_{room}}{T_m - T_{room}}\right)^m\right), \quad (1.1)$$

де  $\varepsilon$  - пластична деформація,  $\dot{\varepsilon}$  - швидкість деформації,  $\dot{\varepsilon}_0$  - початкова швидкість пластичної деформації,  $T$  і  $T_m$  відповідають температурі матеріалу заготовки ( $^{\circ}\text{C}$ ) та температурі плавлення матеріалу заготовки ( $1520^{\circ}\text{C}$ ) відповідно,  $T_{room}$  - кімнатна температура (RT)( $20^{\circ}\text{C}$ ). Коефіцієнт  $A$  позначає межу текучості (МПа),  $B$  - модуль пружності (МПа),  $C$  - коефіцієнт швидкості деформації,  $n$  - коефіцієнт зміцнення і  $m$  - коефіцієнт термічного розм'якшення.

Параметри Джонсона-Кука [7] представлені разом з теплофізичними даними в таблиці 1.1.

Thermo-physical properties and Johnson-Cook parameters [14] of the 42CrMo4 steel.

Thermo-physical properties	Value	Johnson-Cook parameters	Value [14]
Density ( $\rho$ ) [ $\text{kg m}^{-3}$ ]	7800	A [MPa]	600
Young's modulus ( $E$ ) [GPa]	210	B [MPa]	643
Poisson's ratio ( $\nu$ ) [-]	0.3	n	0.41
Conductivity ( $\lambda$ ) [ $\text{Wm}^{-1} \text{K}^{-1}$ ]	46	m	0.957
Thermal expansion ( $\alpha$ ) [ $\text{K}^{-1}$ ]	$1.2 \cdot 10^{-5}$	C	0.0037
Specific heat ( $c$ ) [ $\text{Jkg}^{-1} \text{K}^{-1}$ ]	476		



Таблиця 1.1 – Розподіл температури, змодельований методом FEM, при швидкостях різання: (а) 314 м/хв; (б) 565 м/хв; і (с) 879 м/хв [6].

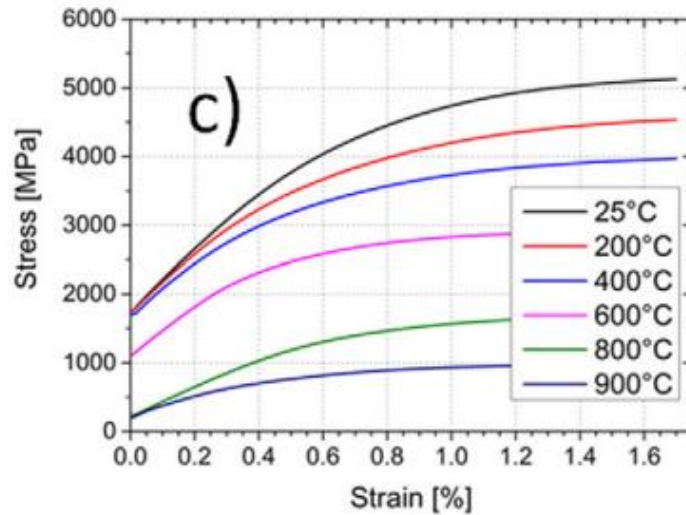


Рис. 1.8 – Залежність напруження-деформація [6].

Окрім того, в межах цього дослідження, науковці вкотре прийшли до висновку, що покриття з низькою теплопровідністю слугують слугують добрим тепловим екраном, знижуючи температуру в підкладці, що добре узгоджується з літературними даними.

Розвиток накопиченої еквівалентної пластичної деформації, напруження фон Мізеса і температури в підкладці зображено на глибині 7 мкм від глибини від точки А, див. рис. 1.18(a-d). Тут відбувається найбільша пластифікація в підкладці, див. рис. 1.19 і 1.20. Пік напружень фон Мізеса у всіх досліджуваних інструментах спостерігається безпосередньо на початку розрахунку під час початку формування стружки. Цей пік розраховується безпосередньо перед першим контактом стружки з інструментом. Після цього різання продовжується, а напруження фон Мізеса зменшуються до тих пір, поки вони знову не зростають і не починається друга безперервна пластифікація підкладки. Під час довшого часу різання (>0,4 мс) інструмент нагрівається до тих пір, поки матеріал підкладки послаблюється, а межа текучості та

напруження фон Мізеса зменшуються. Як наслідок, матеріал підкладки пластифікується далі.

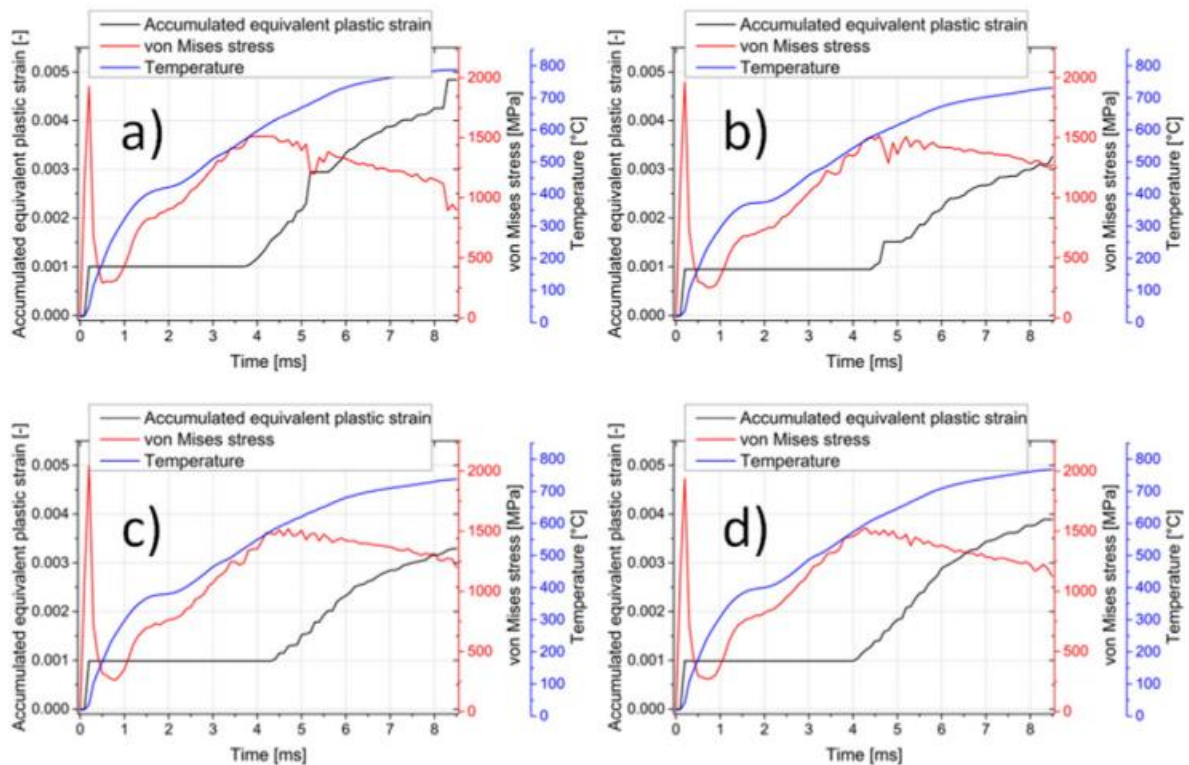


Рис. 1.9 – Еволюція накопиченої еквівалентної пластичної деформації, напруження фон Мізеса та температури від часу в підкладці для: а) інструменту з НМ без покриття; та НМ з покриттям б) TiAlN, в) TiAlN/ $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, г) TiCN/ $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> [6].

Поле накопиченої еквівалентної пластичної деформації (PEEQ) в інструментах без покриття та інструментах з покриттями представлено на рис. 1.19(a-d). Покриття визначаються як еластичні матеріали, які, таким чином, не можуть проявляти жодної пластичної деформації і показані чорним кольором на рис. 1.19(b-d). Деякі відмінності в кількості та розташування пластифікації можна спостерігати в підкладці. Так як, підкладка розм'якшується, і має найвищий показник PEEQ серед інструментів з покриттям, див. рис. 1.19d. Інструменти з покриттями TiAlN та TiAlN/ $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> зменшують пластифікацію в підкладці інструменту більш ефективно, ніж TiCN/ $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>.

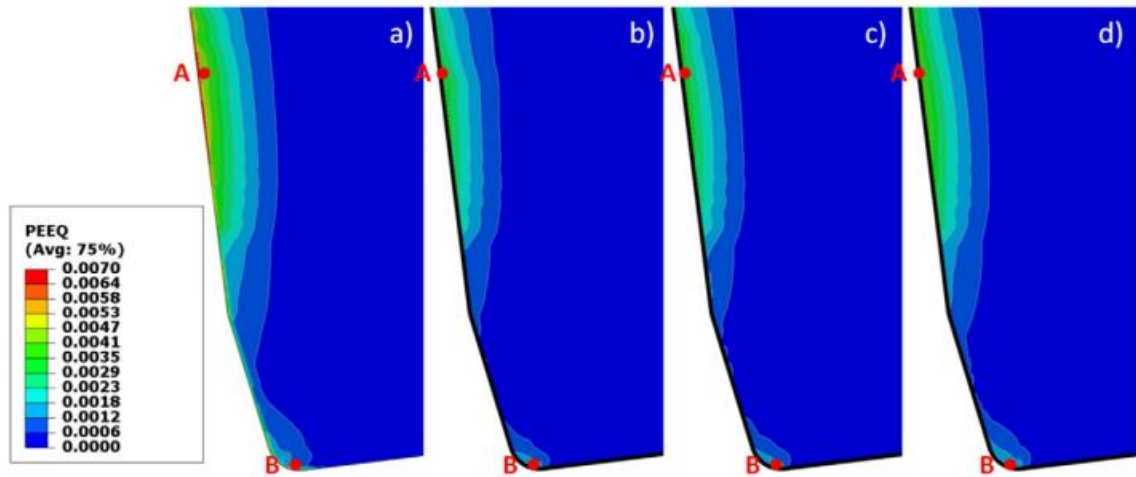


Рис. 1.10 – Накопичене еквівалентне поле пластичних деформацій в інструментах без покриття та з покриттям через 8,5 мс часу фрезерування: а) інструмент з НМ без покриття; інструмент з НМ з покриттям б) TiAlN, в) TiAlN/ $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, г) TiCN/ $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> [6].

РЕЕО в підкладці на глибині 7 мкм вздовж границі розділу покриття-підкладки показано на рис. 1.20, слідуючи червоній кривій, зазначеній на вклейці у верхньому лівому куті. Найвищі значення абсолютної пластичної деформації (РЕЕО) отримано на передній поверхні (точка А). Пластичні деформації є найвищими для інструменту без покриття і зменшуються для інструментів з покриттям, особливо для покриттів, що містять TiAlN. Модель включає термічні напруження, зумовлені різним розширенням покриттів відносно один одного та підкладки, але не враховує залишкові напруження, що виникають при виробництві інструменту.

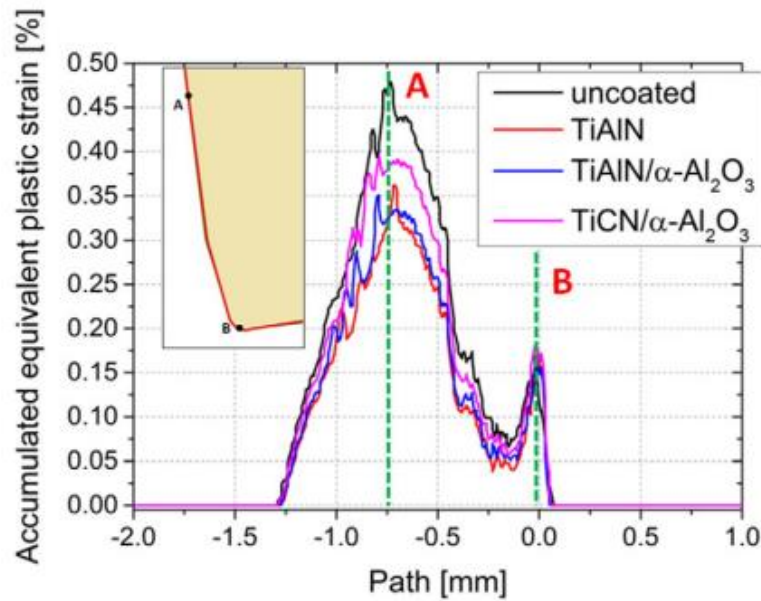


Рис. 1.11 – Накопичена еквівалентна пластична деформація вздовж поверхні інструменту на глибині 7 мкм для інструментів без покриття та з покриттям після 8,5 мс фрезерування. [6].

## Висновки до розділу 1

Проведений літературний огляд, охоплюючи широкий спектр досліджень, підкреслює актуальність та складність моделювання напружено-деформованого стану в багатошарових плівкових системах, особливо в умовах теплового навантаження. Аналіз наукових робіт вказує на значну роль таких систем у промислових застосуваннях, зокрема у металообробці різанням, де вони відіграють ключову роль у підвищенні ефективності та тривалості служби інструментів. Розглянуті дослідження, використовуючи методи, такі як скінченно-елементний аналіз, XFEM та різні експериментальні підходи, демонструють важливість розуміння впливу теплових навантажень на структуру та властивості багатошарових плівкових систем. Це підкреслює необхідність подальших досліджень у цій області, що відкриває шлях для розвитку нових матеріалів та технологій, які будуть більш стійкими до теплових та механічних навантажень.

## РОЗДІЛ 2

### ФІЗИЧНА МОДЕЛЬ ЗАДАЧІ ДОСЛІДЖЕННЯ

#### 2.1 Рівняння теплового балансу під час процесу різання

Тепловий баланс під час металообробки різанням є одним із ключових факторів. Важливість цього аспекту обумовлена впливом температурного режиму на властивості оброблюваного матеріалу, а також на зносостійкість та термічну стійкість ріжучих інструментів.

В процесі різання важливо забезпечити оптимальний тепловий баланс, що дозволяє підтримувати необхідну точність та якість обробки, а також знижує ризики виникнення термічних деформацій, підвищеного зносу інструментів та утворення тріщин на поверхні оброблюваних деталей. Рівняння теплового балансу в металообробці різанням включає в себе аналіз кількості тепла, що генерується під час різання, його розподіл між інструментом, стружкою та оброблюваним матеріалом, а також шляхи його відведення.

Загальноприйнято вважати, що майже вся енергія, необхідна для обробки металу, перетворюється в тепло. Хоча деякі дослідження показують, що лише від 85 до 95% [12].

Основне тепловиділення відбувається в трьох областях. Перша зона - це область зсуву або первинна зона деформації ( $Q_1$ ), де тепло генерується відразу після контакту ріжучого краю інструмента з заготівкою та початку зрізання матеріалу. В цій області тепло виникає через пластичну роботу, що виконується на площині зсуву.

Друге джерело тепла розташоване в зоні, де інструмент контактує зі стружкою, відомій як зона вторинної деформації ( $Q_2$ ). Тут тепло генерується через подолання тертя ковзання у трибоконтаті між стружкою та передньою

поверхнею інструмента. Це тепло переважно відповідає за кратерний знос на передній поверхні інструмента.

Третя зона, або зона третинної деформації ( $Q_3$ ), пов'язана з теплом, що утворюється через подолання тертя між бічною поверхнею інструмента та обробленою поверхнею деталі. Тепло, що генерується в цій зоні, призводить до зношування бокових поверхонь інструмента [13].

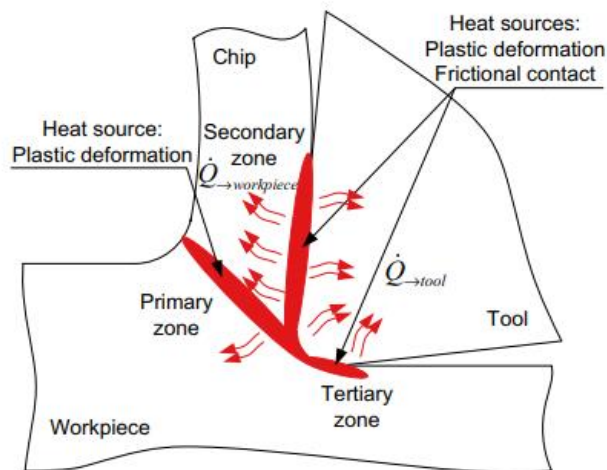


Рис. 2.1 – Зони генерування тепла під час формування стружки при механічному обробленні [14].

Враховуючи, що процес різання є достатньо тривалим і стійким, то теплота, що безперервно виділяється за час роботи, також безупинно відводиться із зони різання. Ілюстрацією цього процесу слугує рис. 2.2.

Основними джерелами відведеного тепла під час процесу різання є наступні: перше джерело,  $q_1$ , представляє собою частку теплоти  $Q_1$ , яка проникає в метал оброблюваної заготовки, нагріваючи її. Друге,  $q_2$ , охоплює частину теплоти  $Q_1$ , що використовується для нагрівання стружки, яка потім виноситься з зони різання. Третє джерело,  $q_3$ , стосується частини теплоти  $Q_2$ , що також спрямовується на нагрів стружки. Четверте джерело,  $q_4$ , є частиною теплоти  $Q_2$ , яка нагріває метал ріжучої частини різця та поступово розповсюджуючись по всьому його об'єму. П'яте джерело,  $q_5$ , представляє собою частку теплоти  $Q_3$ , що також нагріває метал ріжучої частини різця.

Нарешті, шосте джерело,  $q_6$ , відноситься до частини теплоти  $Q_3$ , яка проникає в метал оброблюваної заготовки, забезпечуючи її нагрівання.

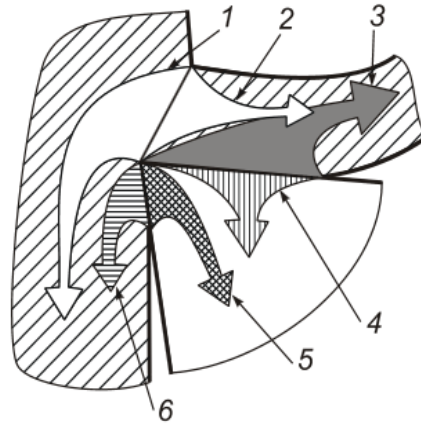


Рис. 2.2 – Схема руху теплових потоків при різанні без охолодження [15].

Тепловий баланс у процесі різання означає рівність між кількістю тепла, що генерується у зоні різання, та теплом, яке з цієї зони виводиться протягом одного і того ж часового періоду. Таким чином, отримаємо наступне рівняння:

$$Q_1 + Q_2 + Q_3 = q_1 + q_2 + q_3 + q_4 + q_5 + q_6. \quad (2.1)$$

Згідно з дослідженнями [15], основну частину відведеного тепла становить сума компонентів  $q_1$  та  $q_2$ , які вказують на те, що більшість тепла виводиться разом із стружкою, що утворюється під час різання. Порівняно невелика кількість тепла ( $q_3 + q_4$ ) відводиться в тіло різця. Третій компонент теплового балансу ( $q_5 + q_6$ ), який представляє тепло, що відводиться до оброблюваної заготовки, зростає з підвищенням швидкості різання.

## 2.2 Температурне поле інструменту різання

Тепло, що проникає в різець, викликає підвищення температури ріжучого леза, а також розподіляється усередині всього тіла інструменту. Такий розподіл теплової енергії залежить від різних чинників, включаючи теплопровідність, масу, а також температури ріжучої частини і корпусу різця. Візуалізація температурного поля в різці може бути представлена у вигляді ряду ізотерм.

В свою чергу нагрівання різального леза відбувається нерівномірно: найвища температура спостерігається на передній поверхні, зменшуючись до вершини леза. В порівнянні з температурою у різальному лезі, при віддаленні від передньої поверхні, температура у стружці змінюється значно швидше.

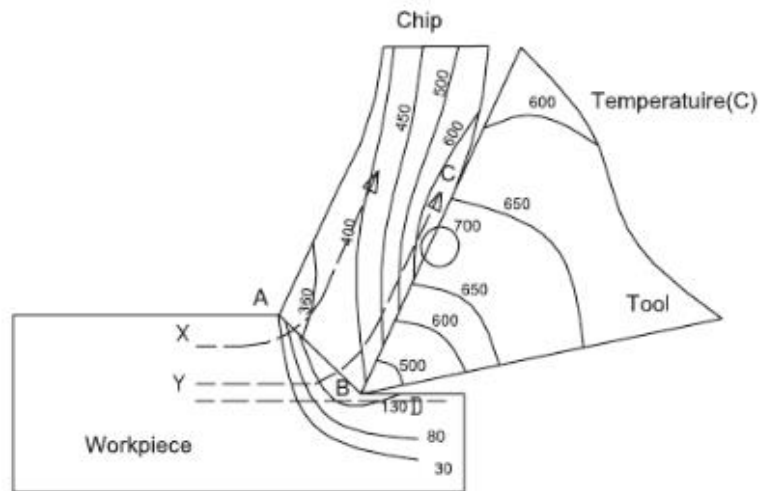


Рис. 2.3 – Розподіл температур в зоні різання [16].

На рисунку 2.3 показано типовий розподіл температури в зонах різання. Точка X на поверхні стружки, яка найшвидше відходить від ріжучого інструменту, нагрівається при проходженні через зону первинної деформації (зсуву). Точка X не проходить через зону вторинної деформації. Точка Y, навпаки, проходить через обидві зони деформації. Після перетину зони деформації точка Y відводить тепло в точку X, що призводить до зниження температури в точці Y і підвищення температури в точці X, яка досягає максимальної температури в точці поза межами обох зон деформації [16].

Аналізуючи результати досліджень [15-18], можна встановити, що найвищим температурам піддаються передня поверхня леза та прилеглий до неї граничний шар. У цих місцях стружка, що збігає, активно зношує лезо при високих температурах, що робить ці ділянки більш схильними до швидкого зносу. Задня поверхня леза менше зазнає впливу високих температур, але з часом її температура також підвищується, іноді досягаючи критичних показників. Такі процеси скорочують термін експлуатації різця.



### 2.3 Напружено-деформовані стани в контактній зоні

У процесі металорізання виокремлюються дві основні зони деформації та зсуву. Перша зона утворюється в місці, де відбувається головний зсув оброблюваного матеріалу. Окрім того, в області біля ріжучого краю інструмента та в зоні контакту інструменту зі стружкою формується зона вторинного зсуву. Реакція оброблюваного матеріалу на деформацію в них значно залежить від умов різання, які впливають на тертя між інструментом та заготовкою, взаємодію між інструментом та стружкою, а також напруження в потоці робочого матеріалу. Несприятливі умови, такі як високі напруження та температури в зоні контакту інструмент-стружка та біля ріжучого краю, можуть призвести до швидкого зносу інструменту, обмежуючи його подальше використання [19-25].

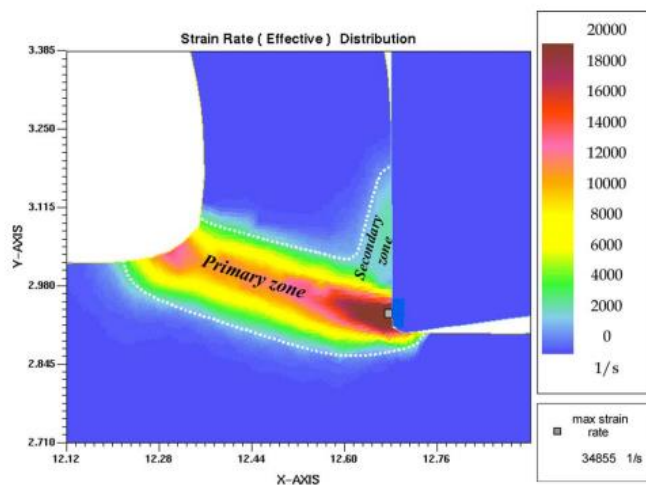


Рис. 2.4 – Зони деформації при ортогональному різанні, одержані методом скінченних елементів [20].

Важливо зазначити, що в процесі металорізання важливу роль відіграють два основні типи деформацій: пружна та пластична. Пружна деформація характеризується здатністю матеріалу повертатися до своєї первісної форми після припинення дії навантаження. Це обумовлено властивостями молекулярної структури матеріалу, яка дозволяє витримувати певні навантаження без постійних змін у своїй формі. Така деформація відбувається в межах пружності матеріалу, яка визначається його модулем Юнга.

Натомість, пластична деформація є необоротною зміною форми матеріалу, що відбувається після перевищення межі текучості. В металорізанні це основний механізм видалення металу. Під час пластичної деформації відбувається зсув кристалічних решіток, що призводить до змін у мікроструктурі матеріалу і супроводжується утворенням стружки.

Під час різання металів, спочатку відбувається пружна деформація, коли інструмент тільки починає контактувати з матеріалом. Як тільки навантаження на матеріал перевищує його межу текучості, починається процес пластичної деформації, який відповідає за основний процес обробки матеріалу. Важливо відзначити, що умови різання, такі як високі температури і напруження в зоні контакту інструменту з матеріалом, мають значний вплив на швидкість зносу інструменту та якість обробки заготовки.

Однією з найчастіше використовуваних методик для аналізу процесів високошвидкісної деформації є модель, розроблена Джонсоном та Куком. Вона визначає, що напруження в стані пластичної деформації ( $\sigma$ ) залежить від самої деформації ( $\varepsilon$ ), швидкості зміни деформації ( $\dot{\varepsilon}$ ) та температури ( $T$ ). Математично ця залежність може бути представлена наступним чином [21]:

$$\sigma = [A + B\varepsilon^n][1 - C \ln \dot{\varepsilon}^*][1 - T^{*m}], \quad (2.2)$$

де  $\varepsilon$  – ефективна пластична деформація;  $A$ ,  $B$ ,  $C$ ,  $n$ ,  $m$  – емпірично визначені параметри моделі;  $\dot{\varepsilon}^* = \frac{\dot{\varepsilon}}{\dot{\varepsilon}_0}$  – безрозмірна швидкість пластичної деформації ( $\dot{\varepsilon}_0 = 0.1 \text{ s}^{-1}$ );  $T^* = \frac{T - T_e}{T_m - T_e}$  – гомологічна температура,  $T_m$  – температура плавлення матеріалу заготовки,  $T_e$  – температура навколишнього середовища.

## 2.4 Межовий режим тертя між твердою поверхнею та захисною плівкою

Упродовж останніх трьох десятиліть, завдяки експериментальним, теоретичним підходам та комп'ютерному моделюванню, було зроблено значний прогрес у розумінні фізики ковзного тертя між гладкими твердими поверхнями з тонкою рідинною плівкою між ними [26].

Експерименти показали, що під час тертя товщина рідинної плівки зменшується, спочатку її властивості змінюються поступово, а потім відбуваються різкі якісні зміни. Ці зміни проявляються у вигляді неньютонівських потоків та переходу від звичайного плавлення до стеклування, проте плівка залишається рідиною. У трибології цей процес називають "змішаним змащуванням", який є проміжним режимом тертя, переходячи від об'ємних до граничних властивостей.

Для тонших плівок зміни більш значні, оскільки їх властивості якісно змінюються. Це може включати фазові переходи в твердоподібні або рідиноподібні стани, властивості яких відрізняються від тих, які характерні для об'ємних рідин, як-от в'язкість. Ці плівки відрізняються наявністю межі текучості, характерною для твердих тіл, та значно відрізняються часами молекулярної дифузії та релаксації порівняно з об'ємними рідинами.

У більшості трибологічних експериментів використовується модель, де пружина з певною жорсткістю  $k$  з'єднана з блоком маси  $M$ , на який тиснуть додатковим навантаженням  $L$  і розміщують на поверхні з шаром мастила товщиною  $h$ . Рух пружини з постійною швидкістю  $V_0$  викликає силу тертя  $F$ , яка опирається переміщенню блоку. В умовах дуже тонких мастильних шарів, швидкість блоку може коливатися через осцилюючу силу  $F$ , що може призвести до нерівномірного руху, подібного до сухого тертя.

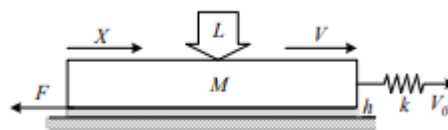


Рис. 2.5 – Схема трибологічної системи [26].

Вивчення переривчастого режиму тертя має ключове значення в області трибології, оскільки його пікові величини часто призводять до пошкоджень і зносу деталей. Моделювання молекулярної динаміки виявило, що тонкі міжповерхневі плівки можуть переходити між твердими та рідкими станами, що може викликати переривчастість у поведінці рідин при ковзанні між кристалічними поверхнями. Це вказує на те, що переривчасте тертя виникає через різкі зміни в текучості плівки, а не через плавні або постійні зміни. Запропонована модель (див. рис. 2.6), що ілюструє це явище, передбачає стрибкоподібну зміну внутрішньої сили тертя під час фазових переходів. Такий режим відрізняється особливо різкими піками та може змінитись на кінетичний режим при перевищенні певної критичної швидкості. Хоча модель показує зсуви на рівні двох решіткових констант, в реальних умовах зсув може бути значно більшим. Цей феномен часто спостерігається в експериментах із гладкими поверхнями та різними змащувальними рідинами чи конденсованими парами. Дослідження ультратонких плівок при зсуві між гладкими поверхнями досі надають найточніше пояснення спостережуваних експериментальних результатів.

Спершу мастильний матеріал знаходиться в твердому стані, але коли він досягає певного порогового рівня напруження, відомого як напруження текучості, він раптово переходить в рідкий стан через втрату впорядкованості, при цьому верхній шар трохи піднімається. Після цього, під впливом компресійних сил, які виникають через навантаження  $L$ , мастильний матеріал знову стає твердим.

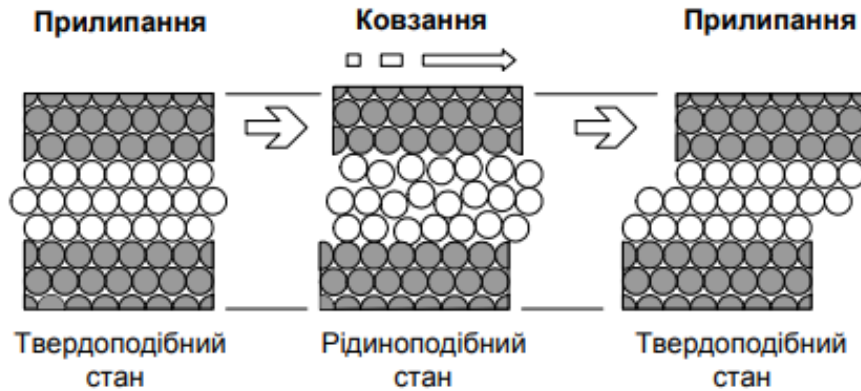


Рис. 2.6 – Модель «фазових переходів» переривчастого режиму тертя, де тонка плівка рідини попеременно твердне або плавиться впродовж зсуву між двома твердими кристалічними поверхнями [26].

## Висновки до розділу 2

У цьому розділі було детально досліджено фізичні аспекти, що впливають на процеси різання в металообробці, з особливим акцентом на важливість теплового балансу. Аналіз кількості тепла, що генерується під час різання, його розподіл між інструментом, стружкою та оброблюваним матеріалом, а також методи його відведення виявилися ключовими для забезпечення ефективності процесу та довговічності інструменту. Особлива увага була приділена вивченню температурного поля інструменту різання, яке відіграє вирішальну роль у підтримці точності та якості обробки. Також були розглянуті напружено-деформовані стани в контактній зоні, що мають значний вплив на процес різання і знос інструменту. Застосування моделі Джонсона-Кука забезпечило глибоке розуміння динаміки процесів високошвидкісної деформації, особливо з урахуванням впливу швидкості деформації та температури. Нарешті, дослідження межового режиму тертя між твердою поверхнею та захисною плівкою дозволило розширити розуміння трибологічних процесів, що відіграють важливу роль у зносі та терті.

## РОЗДІЛ 3

### МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ ЗАДАЧІ ТА ЇЇ РЕАЛІЗАЦІЯ

#### 3.1 Математична модель

В даному випадку розглядається ріжуча пластина з розмірами  $(L_x \times L_y)$  (0.01x0.01), як це зображено на фігурі 3.1. Розглянемо ситуацію, коли одна сторона цієї пластини піддається тепловому впливу у зоні  $(T_k)$ , де вона отримує теплове навантаження  $(Q)$ , яке рівномірно розподілене по даній ділянці. На верхній частині пластини, найближчій до джерела зовнішнього тепла, розташовано двошарове покриття. Товщина першого шару визначається як  $(h_1 = L_y - y_1)$ , а другого –  $(h_2 = y_1^* - y^*)$ . Ми виходимо з припущення, що усі інші поверхні пластини ізолювані від тепла і температурне поле не залежить від координати  $(z)$ . Для спрощення аналітичних обчислень, детальну геометрію ріжучого інструмента у розрахунках не враховуємо.

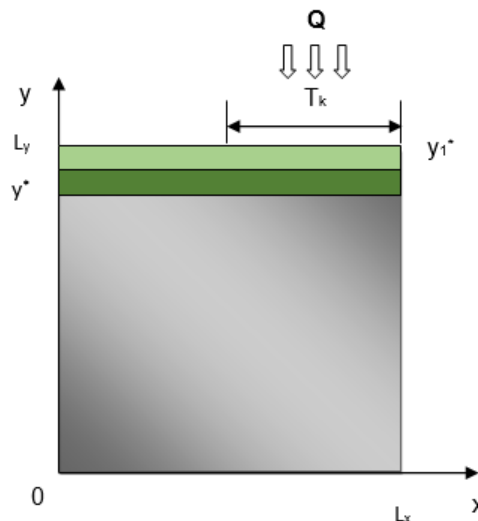


Рис. 3.1 – Схема ріжучої пластини із двошаровим захисним покриттям, котра знаходиться під частковим впливом теплового джерела.

Сформулюємо математичну постановку задачі виходячи з диференціального рівняння теплопровідності. Одержимо систему :

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho_1 c_1 \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda_1 \left( \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right), \quad \begin{cases} 0 < x < Lx \\ 0 < y < y^* \end{cases} \\ \rho_2 c_2 \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda_2 \left( \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right), \quad \begin{cases} 0 < x < Lx \\ y^* < y < y_1^* \end{cases} \\ \rho_3 c_3 \frac{\partial T}{\partial t} = \lambda_3 \left( \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} \right), \quad \begin{cases} 0 < x < Lx \\ y_1^* < y < Ly \end{cases} \end{array} \right. , \quad (3.1)$$

де  $c$  – теплоємність середовища (Дж/кг·°К);  $\rho$  – густина середовища(кг/м<sup>3</sup>);  $\lambda$  – теплопровідність середовища(Вт/кг·°К).

Задамо початкову умову, за якої температура всіх точок перед початком дії тепловго навантаження рівна  $T_0 = 20^\circ\text{C}$  :

$$t = 0: T = T_0, \quad 0 < x < Lx, \quad 0 < y < Ly. \quad (3.2)$$

Для знаходження розв'язку системи (3.1) задамо граничні умови.

Беручи до уваги розміри пластини ( $L_x \times L_y$ ), можна зазначити, що на межі ( $L_y$ ) розташована частина ріжучої пластини ( $T_k$ ) довжиною ( $\frac{L_x}{2}$ ), яка безпосередньо контактує з оброблюваною деталлю. У результаті цього контакту, зовнішнє тепло передається до різця. Цей процес можна описати як граничну умову третього роду.

$$y = Ly: \frac{Lx}{2} < Lx, \quad -\lambda \frac{\partial T}{\partial x} = k(T_k - T_0), \quad t > 0, \quad (3.3)$$

де  $T_k = \theta$  – температура в зоні різання,  $k$  – коефіцієнт теплообміну між нагрітою стружкою та ріжучою пластиною.

На держаку різця встановлюються граничні умови першого роду. Тут температура приймається як стала:

$$y = 0: T = T_0, t > 0. \quad (3.4)$$

На зовнішніх границях встановлюються умови теплообміну третього роду з навколишнім середовищем:

$$\left\{ \begin{array}{l} x = 0, x = Lx \\ 0 < x < \frac{Lx}{2}, y = Ly; \end{array} \right. -\lambda \frac{\partial T}{\partial x} = k(T_c - T_0), t > 0, k > 0. \quad (3.5)$$

де  $T_c$  – температура навколишнього середовища,  $k$  – коефіцієнт теплообміну між навколишнім середовищем (повітрям) і ріжучим інструментом.

На межах  $(y^*)$  та  $(y_1^*)$  встановлюються граничні умови четвертого типу, оскільки сама пластина та обидва захисні шари мають різні коефіцієнти теплопровідності. Вважається, що між ріжучою пластиною та захисними шарами існує ідеальне теплове зчеплення. Контакт між захисними шарами та пластиною вважатимемо ідеальним

$$\left\{ \begin{array}{l} T_1(t, y^*) = T_2(t, y^*) \\ T_2(t, y_1^*) = T_3(t, y_1^*) \\ -\lambda_1 \frac{\partial T_1}{\partial y} |_{y=y^*} = -\lambda_2 \frac{\partial T_2}{\partial y} |_{y=y^*} \\ -\lambda_2 \frac{\partial T_2}{\partial y} |_{y=y_1^*} = -\lambda_3 \frac{\partial T_3}{\partial y} |_{y=y_1^*} \end{array} \right. \quad (3.6)$$

Таким чином, математичну модель з заданням граничних умов сформульовано.

### 3.2 Метод скінчених різниць(поздовжньо-поперечна схема)



Для вирішення цієї задачі було застосовано метод скінчених різниць із використанням поздовжньо-поперечної схеми. Основна ідея методу полягає в заміні похідних на їх різницеві аналоги, тобто вираженні через значення невідомої функції в індивідуальних дискретних точках, відомих як вузли сітки. Це перетворює задачу на систему алгебраїчних рівнянь, де невідомими є значення шуканої функції в цих вузлах. Розв'язання цієї системи дає наближене числове вирішення задачі.

Для апроксимації системи диференціальних рівнянь (3.1) методом скінчених різниць введемо просторово-часову сітку з координатами:

$$x_i = (i - 1) * h_x, \quad y_j = (j - 1) * h_y, \quad t_n = n * \tau, \quad (3.7)$$

де  $h_x, h_y$  – крок сітки по координатам  $x, y$  відповідно;  $\tau$  - крок по часу;  $i = \overline{1, N_x}; j = \overline{1, N_y}; n = \overline{0, K}$ .

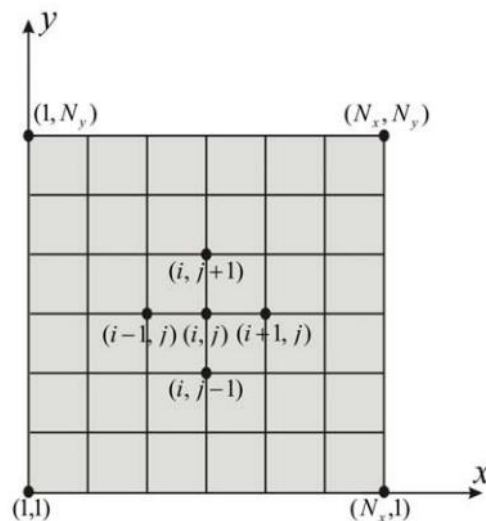


Рис. 3.2 – Різницева сітка поставленої задачі [27].

Введемо позначення:

$$T(x_i, y_j, t_n) = T_{i,j}^n. \quad (3.8)$$

Для дискретизації рівняння використовується одновимірна схема Самарського [26], що включає два етапи: спочатку дискретизація відбувається вздовж осі ОХ, а потім – вздовж осі ОУ, що дозволяє отримати розподіл температур на заданому часовому кроці.

Виконаємо заміну диференціальних операторів на їх кінцево-різницеві аналоги:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{T_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} - T_{i,j}^n}{\tau}, \quad (3.9)$$

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = \frac{T_{i+1,j}^{n+\frac{1}{2}} - 2 * T_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} + T_{i-1,j}^{n+\frac{1}{2}}}{h_x^2}, \quad (3.10)$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{T_{i,j}^{n+1} - T_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}}{\tau}, \quad (3.11)$$

$$\frac{\partial^2 T}{\partial y^2} = \frac{T_{i,j+1}^{n+1} - 2 * T_{i,j}^{n+1} + T_{i,j-1}^{n+1}}{h_y^2}. \quad (3.12)$$

Таким чином, система диференціальних рівнянь (3.1) перетвориться в систему лінійних алгебраїчних рівнянь:

$$\begin{cases} \rho * c * \frac{T_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} - T_{i,j}^n}{\tau} = \lambda \left( \frac{T_{i+1,j}^{n+\frac{1}{2}} - 2 * T_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} + T_{i-1,j}^{n+\frac{1}{2}}}{h_x^2} \right), \\ \rho * c * \frac{T_{i,j}^{n+1} - T_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}}{\tau} = \lambda \left( \frac{T_{i,j+1}^{n+1} - 2 * T_{i,j}^{n+1} + T_{i,j-1}^{n+1}}{h_y^2} \right) \end{cases} \quad (3.13), (3.14)$$

Спершу ми аналізуємо рівняння (3.13) у всій заданій області, розв'язуючи його за допомогою методу прогонки. Далі робимо подібні перетворення з рівнянням (3.14).

### 3.3 Метод фазової площини для дослідження залежності деформацій від температури

Згідно з синергетичною теорією, як зазначено у джерелах [27–32], процеси пластичної деформації характеризуються взаємозв'язком та взаємозалежністю змін у деформаціях, напруженнях та концентрації дефектів, які не можуть бути розглянуті ізольовано. На рівні феноменологічного аналізу ця взаємодія виражається за допомогою набору диференціальних рівнянь, що містять нелінійні елементи.

Для аналізу полів зсувних напружень, деформацій та температурних характеристик півки застосуємо метод фазової площини. Цей підхід дозволяє детально вивчати системи наступного типу:

$$\frac{dx}{dt} = f_1(x, y), \quad (3.15)$$

$$\frac{dy}{dt} = f_2(x, y). \quad (3.16)$$

Аналіз виконується через візуалізацію руху в двовимірній системі координат, де  $(x, y)$  є фазовими координатами, а час  $(t)$  не відображається безпосередньо. Кожна точка системи координат відповідає певному стану системи в момент часу  $(t_k)$ , утворюючи фазовий портрет, який демонструє траєкторію системи у фазовому просторі.

Досліджувана модель являє собою структуру поверхневого плівкового шару, яка застосовується для зміцнення та підвищення термічної стійкості різального інструменту [32]. Розглянемо систему:

$$\tau_\varepsilon \frac{d\varepsilon}{dt} = -\varepsilon + \sigma, \quad (3.17)$$

$$\tau_\sigma \frac{d\sigma}{dt} = -\sigma + g(T - 1)\varepsilon, \quad (3.18)$$

$$\tau_T \frac{dT}{dt} = (T_e - T) - \sigma\varepsilon. \quad (3.19)$$

Тут введено додаткові параметри як час релаксації напружень  $\tau_\sigma$ , температура  $T_e$  вдалині від поверхні різання (термостату), стала  $g = \frac{G}{G_0} < 1$ , де  $G$  – модуль зсуву мастила.

Ці рівняння походять з синергетичної моделі Лоренца, де деформація виступає як параметр порядку, спряжене поле визначається через напруження, а температура розглядається як контрольний параметр.

Точний аналітичний розв'язок системи рівнянь (3.17) – (3.19) неможливий. Використаємо метод фазової площини для визначення фазових портретів системи та її еволюції, а їх точний вигляд отримаємо через числове інтегрування цих рівнянь за методом Рунге-Кутта 4-го порядку.

Метод Рунге-Кутта 4-го порядку є числовим методом для розв'язання звичайних диференціальних рівнянь. Він використовується для апроксимації розв'язку диференціального рівняння на кожному кроці ітерації. Основна ідея методу полягає в обчисленні середньої вагової суми чотирьох приблизних значень на кожному кроці.

Для системи з  $(n)$  диференціальних рівнянь, метод Рунге-Кутта 4-го порядку виглядає наступним чином:

1. Обчислити  $(k_1 = h \cdot f(t_n, y_n))$ , де  $(h)$  - розмір кроку,  $(t_n)$  - поточний час,  $(y_n)$ - поточний вектор значень.

$$2. \text{ Обчислити } (k_2 = h \cdot f(t_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_1}{2})).$$

$$3. \text{ Обчислити } (k_3 = h \cdot f(t_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{k_2}{2})).$$

$$4. \text{ Обчислити } (k_4 = h \cdot f(t_n + h, y_n + k_3)).$$

$$5. \text{ Оновити значення: } (y_{n+1} = y_n + \frac{1}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)).$$

Цей процес повторюється для кожного кроку ітерації. Метод забезпечує числовий розв'язок ЗДР з високою точністю порівняно з менш ефективними методами меншого порядку.

Розглянемо перший випадок, коли  $\tau_\sigma \ll \tau_\varepsilon, \tau_T$ .

На практиці, система рівнянь, яку ми розглядаємо, є безрозмірною. Проте, для полегшення обчислень введемо масштаб  $\tau_\varepsilon$  для вимірювання часу. Оскільки  $\tau_\sigma \ll \tau_\varepsilon, \tau_T$ , то в (3.18) можна покласти  $\frac{d\sigma}{dt} = 0$ , що дає зв'язок:

$$\sigma = g(T - 1)\varepsilon. \quad (3.20)$$

Підставивши його в рівняння (3.17), (3.19), що залишилися, приходимо до системи:

$$\frac{d\varepsilon}{dt} = \frac{-\varepsilon}{\tau_\varepsilon} + \frac{(T-1)g\varepsilon}{\tau_\varepsilon}, \quad (3.21)$$

$$\frac{dT}{dt} = \frac{(T_e - T) - g(T-1)\varepsilon^2}{\tau_T}. \quad (3.22)$$

Введемо безрозмірний час  $z = \frac{t}{\tau_\varepsilon}$  і параметр  $\tau = \frac{\tau_T}{\tau_\varepsilon}$ . Одержимо:

$$\frac{\partial \varepsilon}{\tau_\varepsilon \partial z} = \frac{-\varepsilon + (T-1)g\varepsilon}{\tau_\varepsilon}, \quad (3.23)$$

$$\frac{\partial T}{\tau_\varepsilon \partial z} = \frac{(T_e - T) - g(T-1)\varepsilon^2}{\tau_\varepsilon \tau}. \quad (3.24)$$

Скоротимо на  $\tau_\varepsilon$  та отримаємо рівняння в безрозмірному вигляді:

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial z} = -\varepsilon + (T-1)g\varepsilon, \quad (3.25)$$

$$\frac{\partial T}{\partial z} = \tau^{-1}(T_e - T - g(T-1)\varepsilon^2). \quad (3.26)$$

Для визначення стійких станів системи з точки зору методу фазової площини необхідно знайти координати особливих точок. Це можна здійснити шляхом поділу рівняння (3.25) на (3.26):

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial T} = \frac{-\varepsilon + (T-1)g\varepsilon}{\tau^{-1}(T_e - T - g(T-1)\varepsilon^2)}. \quad (3.27)$$

Використовуючи отриманий вираз (3.27), знайдемо особливі точки фазової площини, тобто ті, в котрих напрям дотичної до фазової траєкторії  $\varepsilon = \varepsilon(T)$  не визначено. Для цього запишемо систему рівнянь  $\frac{\partial \varepsilon}{\partial T} = 0, \frac{\partial \varepsilon}{\partial T} = \infty$ :

$$-\varepsilon[1 - g(T-1)] = 0, \quad (3.28)$$

$$\tau^{-1}(T_e - T - g(T-1)\varepsilon^2) = 0. \quad (3.29)$$

Розглянемо два можливі випадки:

1)  $\varepsilon = 0$ . Тоді в (3.28) набуває будь-яких значень. Підставимо  $\varepsilon = 0$  в (3.29) та отримаємо  $T = T_e$ . Маємо координати першої особливої точки  $D(T_e, 0)$ .

2)  $\varepsilon \neq 0$ . У цьому випадку вираз зліва в (3.28) дорівнює нулю, якщо дорівнює нулю вираз в дужках:

$$T_c = 1 + g^{-1}. \quad (3.30)$$

Підставимо в (3.29), тоді маємо координати другої точки  $O(T_c, \sqrt{T_e - T_c})$ .

Знайдемо показники Ляпунова для особливих точок.

1) Для точки  $D(T_e, 0)$ . показник Ляпунова має вигляд:

$$\lambda_d = \frac{1}{2} [g(T_e - 1) - \tau^{-1} - 1] \left\{ 1 \pm \sqrt{1 + 4\tau \left[ \frac{g(T_e - 1) - 1}{(\tau^{-1} - g(T_e - 1) + 1)^2} \right]} \right\}. \quad (3.31)$$

2) Для точки  $O(T_c, \sqrt{T_e - T_c})$ :

$$\lambda_o = \frac{1}{2\tau} \left[ (1 + g(T_e - T_c)) \left\{ 1 \pm \sqrt{1 - 8\tau \left( \frac{g(T_e - T_c)}{(1 + g(T_e - T_c))^2} \right)} \right\} \right]. \quad (3.32)$$

Для визначення виду особливих точок необхідно визначити, за яких значень параметрів показники Ляпунова набувають комплексних, а за яких — дійсних значень.

Для точки  $D$  показники  $\lambda_D$  будуть дійсними, якщо підкореневий вираз в (3.31) буде невід'ємним:

$$1 + 4\tau \left[ \frac{g(T_e - 1) - 1}{(\tau^{-1} - g(T_e - 1) + 1)^2} \right] \geq 0. \quad (3.33)$$

Аналіз останнього виразу вказує на те, що показники Ляпунова можуть мати лише дійсні значення, що означає, що точка  $D$  може бути або вузлом, або сідлом.

2) Для точки  $O$  можна записати вираз для показників Ляпунова, що відображений у формулі (3.32). З врахуванням відношення ( $\varepsilon = \sqrt{T_e - T_c}$ ) виходить, що дана точка реалізується лише при ( $T_e > 1 + g^{-1}$ ), оскільки фізична величина  $\varepsilon$  не може мати комплексних значень. Таким чином, можна зазначити, що точка  $O$  може бути або вузлом, або фокусом.

Аналіз показників Ляпунова вказує на те, що при значеннях ( $0 < T_e < T_c$ ) точка  $D$  представляє собою стійкий вузол. За таких умов, оскільки особлива точка  $O$  не реалізується, ми можемо зробити висновок, що система з часом еволюціонує до стаціонарного теплового режиму, відповідного точці  $D$ . При ( $T_e > T_c$ ), ми спостерігаємо стійкий фокус в точці  $O$ .

### 3.4 Метод фазової площини для дослідження залежності напружень від деформацій

Відповідно до даних, представлених у попередньому розділі, мастильний матеріал веде себе як високов'язка рідина з властивостями, схожими на аморфні тверді речовини, включаючи значну ефективну в'язкість та визначену межу текучості. Головна гіпотеза застосованої моделі базується на припущенні, що рівняння релаксації для  $\sigma$  має форму, яка математично аналогічна рівнянню Ландау-Халатникова.

$$\tau_\sigma \dot{\sigma} = -\sigma + G\varepsilon, \quad (3.34)$$



де перший доданок правої частини описує ідеальну релаксацію за час  $\tau_\sigma = \eta_\sigma / G$ , що визначається ефективною в'язкістю  $\eta_\sigma$  та нерелаксованим модулем зсуву  $G$ .

У стаціонарному стані  $\dot{\sigma} = 0$  приводить до закону Гука  $\sigma = G\varepsilon$ .

Шляхом заміни  $\varepsilon/\tau$  на  $\frac{\partial\varepsilon}{\partial t}$  зведемо попереднє рівняння до співвідношення Максвела для опису для опису в'язкопружного середовища:

$$\frac{\partial\varepsilon}{\partial t} = -\frac{\sigma}{\tau_\sigma} + G\frac{\partial\varepsilon}{\partial t}. \quad (3.35)$$

Релаксаційну поведінку в'язкопружного мастила в процесі тертя можна описати рівнянням Кельвіна – Фойгта:

$$\dot{\varepsilon} = -\frac{\varepsilon}{\tau_\varepsilon} + \frac{\sigma}{\eta}, \quad (3.36)$$

де  $\tau_\varepsilon$  – час релаксації напружень,  $\eta$  – зсувна в'язкість.

У стаціонарному стані  $\dot{\varepsilon} = 0$  приводить до закону Гука  $\sigma = G_\varepsilon\varepsilon$ , де  $G_\varepsilon$  – релаксоване значення модулю зсуву. Прийmemo найпростіше наближення для температурних залежностей:

$$\eta = \frac{\eta_0}{\frac{T}{T_c} - 1}, \quad (3.37)$$

Де  $\eta_0$  – характерне значення зсувної в'язкості  $\eta$  при  $T = 2T_c$  (температура критичного значення).

Відповідно до концептуальних засад синергетики, для доповнення набору рівнянь (3.34) та (3.38) з порядковим параметром  $\sigma$ , спряженим полем  $\varepsilon$  та контрольним параметром  $T$ , потрібно розробити кінетичне рівняння температури. Це рівняння можна отримати з фундаментальних відношень теорії еластичності. Ми відштовхуватимемося від залежності, яка зв'язує часові похідні ентропії  $S$  і внутрішньої енергії  $U$  із рівноважним еластичним напруженням  $\sigma_{el}$ , яке дорівнює добутку модуля пружності  $G$  та еластичної деформації  $\varepsilon_{el}$ .

$$T \frac{dS}{dt} = \frac{dU}{dt} - \sigma_{el} \frac{d\varepsilon}{dt}, \quad (3.38)$$

що являє собою перший початок термодинаміки в разі механічного навантаження твердого тіла. В умовах нерівноважного нагрівання середовища, коли існує неоднорідність температурного поля, дана залежність приймає наступний вигляд:

$$-\text{div}q = \frac{dU}{dt} - \sigma \frac{d\varepsilon}{dt}. \quad (3.39)$$

В цьому рівнянні поті тепла визначається співвідношенням Онзагера:

$$q = -\kappa \nabla T, \quad (3.40)$$

де  $\kappa$  – коефіцієнт теплопровідності та повне напруження  $\sigma = \sigma_{el} + \sigma_v$  містить також в'язку складову  $\sigma_v = \eta \dot{\varepsilon}$ . Шляхом подальших перетворень та припускаючи, що шар мастила й атомарно-гладкі поверхні тертя мають різні температури  $T$  і  $T_e$  відповідно, прийдемо до рівняння виду:

$$\rho c_v \dot{T} = \frac{\kappa}{h^2} (T_e - T) + \sigma_v \dot{\varepsilon} + T \frac{\partial \sigma_{el}}{\partial T} \dot{\varepsilon}. \quad (3.41)$$

Тут  $\rho$  – густина мастила,  $c_v$  – питома теплоємність,  $h$  - товщина мастила або відстань між поверхнями. Перший термін у правій частині рівняння (3.41) відображає теплопередачу від мастильного шару до поверхонь тертя, другий термін враховує тепловиділення через в'язкісну дисипацію в рідині, що піддається напруженням, в той час як третій термін відображає тепловий вплив від зворотного механокалоричного ефекту. З врахуванням подальших наближень отримаємо:

$$\rho c_v \dot{T} = \frac{\kappa}{h^2} (T_e - T) + \sigma \dot{\varepsilon}. \quad (3.42)$$

Отже, отримали систему рівнянь, що характеризує нетривіальну поведінку під час плавлення тонкої плівки мастила. Подана система є повною та має 3 ступені свободи.

$$\begin{cases} \tau_\sigma \dot{\sigma} = -\sigma + G\varepsilon \\ \dot{\varepsilon} = -\frac{\varepsilon}{\tau_\varepsilon} + \frac{\sigma}{\eta} \\ \rho c_v \dot{T} = \frac{\kappa}{h^2} (T_e - T) + \sigma \dot{\varepsilon} \end{cases}. \quad (3.43)$$

Процес безрозмірного представлення рівнянь спрощує систему за рахунок зменшення кількості враховуваних констант. Для цього введемо масштаби для змінних, таких як  $\sigma$ ,  $\varepsilon$  та  $T$ .

$$\sigma_s = \left( \frac{\rho c_v \eta_0 T_c}{\tau_T} \right)^{1/2}, \quad \varepsilon_s = \frac{\sigma_s}{G_0} = \left( \frac{T_\varepsilon}{\tau_T} \right)^{1/2} \left( \frac{\rho c_v T_c \tau_\varepsilon}{\eta_0} \right)^{1/2}, \quad T_c, \quad (3.44)$$

для змінних  $\sigma$ ,  $\varepsilon$ ,  $T$  відповідно, де  $\rho$  – густина мастила;  $c_v$  – питома теплоємність,  $T_c$  – критична температура,  $\eta_0 = \eta(T = 2T_c)$  – характерне значення зсувної в'язкості  $\eta = \eta_0 \left( \frac{T}{T_{c0}} - 1 \right)^{-1}$ ,  $\tau_T = \rho l^2 c_v / k$  – час теплопровідності,  $l$  – довжина теплопровідності,  $k$  – коефіцієнт теплопровідності,  $\tau_\varepsilon$  – час релаксації деформації,  $G_0 = \frac{\eta_0}{\tau_\varepsilon}$  – характерне значення модуля зсуву.

Підставимо похідну  $\dot{\varepsilon}$  виражену з формули (3.36) в рівняння (3.42) та одержимо:

$$\begin{cases} \tau_0 \dot{\sigma} = -\sigma + g\varepsilon + \sqrt{I_\sigma} \xi_1(t), & (3.45) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \tau_\varepsilon \dot{\varepsilon} = -\varepsilon + (T - 1)\sigma + \sqrt{I_\varepsilon} \xi_2(t), & (3.46), \end{cases}$$

$$\begin{cases} \tau_T \dot{T} = (T_e - T) - \sigma\varepsilon + \sigma^2 + \sqrt{I_T} \xi_3(t), & (3.47) \end{cases}$$

У рівняннях (3.45)–(3.47), для врахування впливу флуктуацій основних параметрів, вводяться  $\delta$ -корельовані гаусівські стохастичні джерела  $\xi_i(t)$  з інтенсивностями  $I_\sigma, I_\varepsilon$  та  $I_T$ .

Тут введено константу  $g = \frac{G}{G_0} < 1$ .

Ці рівняння є аналогом системи Лоренца в синергетиці, де напруження зсуву служать як порядковий параметр, спряжене поле відповідає за деформацію зсуву, а температура діє як контрольний параметр. Відомо, що така система застосовується для моделювання термодинамічних фазових переходів, а також кінетичних перетворень

Процес самоорганізації (перехід мастила в рідкий стан) ініціюється через позитивну зворотну взаємодію між  $T$  та  $\sigma$  і їх впливом на  $\varepsilon$  [див. рівняння (3.46)], що викликається залежністю в'язкості від температури, що в свою чергу

призводить до її розбіжності. В той же час, негативна взаємодія між  $\sigma$  та  $\varepsilon$ , вказана в (3.47), має критичне значення для забезпечення стабільності системи.

Для подальшого аналізу системи розглядаємо випадок без шумів ( $I_\sigma, I_\varepsilon$  та  $I_T = 0$ ).

$$\tau_\varepsilon \ll \tau_\sigma, \tau_T \ll \tau_\sigma. \quad (3.48)$$

В реальності, графік залежності  $\sigma(\varepsilon)$  складається з двох частин: на початку йде ділянка, яка відповідає закону Гука, з високим коефіцієнтом нахилу, що визначається значенням модуля зсуву  $G$ . Після неї йде більш полого секція, що відображає пластичну деформацію, кут нахилу якої зумовлений величиною коефіцієнта зміцнення  $\Theta$ , який є меншим за  $G$ . Це свідчить про те, що модуль зсуву варіюється залежно від напруження. Для моделювання цього аспекту застосуємо найпростіше припущення.

$$G(\sigma) = \Theta + \frac{G - \Theta}{1 + (\sigma/\sigma_p)^\beta}, \quad \beta = \text{const} > 0, \quad (3.49)$$

котре описує поданий вище перехід режиму пружної деформації в пластичний. Він відбувається за характерних значень зсувних напружень  $\sigma_p$  і деформації  $\varepsilon_p$ .

Перехід до розгляду фазового перетворення першого роду досягається заміною постійного коефіцієнта  $g$  у (3.45) залежністю (3.49) у безрозмірній формі  $g(\sigma) = G(\sigma)/G_0$ .

$$g(\varepsilon) = g_\theta \left( 1 + \frac{\theta^{-1}-1}{1+(\frac{\varepsilon}{\alpha})^\beta} \right), \quad (3.50)$$

$$\text{Де } g_0 = \frac{\Theta}{G_0}; \quad \theta = \frac{\Theta}{G}; \quad \alpha = \frac{\sigma_p}{\sigma_s}.$$

Однак дані, отримані в ході експериментів, недвозначно свідчать про те, що перехід молекулярно-тонкої плівки мастила в рідкий стан відбувається раптово, незважаючи на можливість процесу переходу відповідно до механізму фазового переходу другого порядку. Далі буде продемонстровано, що ця характеристика може бути описана через введення функції залежності  $g(\varepsilon)$ , що визначається як  $G(\varepsilon)/G_0$ , замість  $g(\sigma)$  в рівнянні (3.45), де:

$$G(\varepsilon) = \Theta + \frac{G-\Theta}{1+(\varepsilon/\varepsilon_p)^\beta}. \quad (3.51)$$

Розглянемо стаціонарний стан, за якого в (3.45) похідна  $\sigma' = 0$  і величина напружень  $\sigma$  у мастилі не змінюється. Цей випадок відповідає ковзанню з постійною швидкістю. Тоді одержуємо рівняння, подібне до закону Гука:

$$\sigma = g(\varepsilon)\varepsilon, \quad g(\varepsilon) = g_\theta \left( 1 + \frac{\theta^{-1}-1}{1+(\frac{\varepsilon}{\alpha})^\beta} \right). \quad (3.52)$$

Тут параметр  $\theta = \Theta/G < 1$ , як і раніше, визначає відношення кутів нахилу кривої деформації на пластичній і гуківській ділянках, а також з'являються нові коефіцієнти  $g_\theta = \Theta/G_0 < 1$ ,  $\alpha = \varepsilon_p/\varepsilon_s$ .

З аналізу поданого вище співвідношення випливає, що за малих значень  $\beta$  крива  $\sigma(\varepsilon)$  монотонно зростає, а при  $\beta > \frac{1+\sqrt{\theta}}{1-\sqrt{\theta}}$  вона стає немонотонною. Абсциси точок фазових переходів можна обчислити за формулою:

$$\varepsilon_{A,C} = 2\beta^{-\frac{1}{\beta}}\alpha \left[ b(\beta - 1) - 2 \pm \sqrt{(1 - \beta)^2 - \frac{4\beta}{b}} \right]^{-\frac{1}{\beta}}, \quad b = \theta^{-1} - 1, \quad (3.53)$$

Де точці А відповідає знак “-“, в точці С – знак “+”.

У межах адіабатичного наближення покладемо  $\tau_\varepsilon \dot{\varepsilon} \approx 0$ ,  $\tau_T \dot{T} \approx 0$ , тоді з рівнянь (3.46), (3.47) одержимо:

$$\varepsilon = \sigma - (2 - T_e) \frac{\sigma}{1 + \sigma^2}, \quad (3.54)$$

$$T = T_e + (2 - T_e) \frac{\sigma^2}{1 + \sigma^2}. \quad (3.55)$$

Перейдимо до розгляду координат  $\sigma - \varepsilon$ .

Експерименти з органічними мастильними речовинами виявили, що час, необхідний для релаксації напружень під стандартним тиском, приблизно дорівнює  $\tau_\sigma \sim 10^{-10}$  секунд. Враховуючи, що молекулярно-тонка плівка мастила складається з менш ніж чотирьох шарів молекул, час релаксації температури до рівня  $T_e$  відповідає встановленому критерію:

$$\tau_T \ll \tau_\sigma, \tau_\varepsilon. \quad (3.56)$$

Згідно з припущенням вище покладемо  $\tau_T \dot{T} \approx 0$  в (3.47). З метою зручності вимірюватиме час в одиницях  $\tau_\sigma$ . Зрештою маємо двопараметричну систему вигляду:

$$\dot{\sigma} = -\sigma + g(\varepsilon)\varepsilon, \quad (3.57)$$

$$\tau \dot{\varepsilon} = -\varepsilon + (T_e - 1 - \sigma\varepsilon + \sigma^2)\sigma, \quad (3.58)$$

Де  $\tau = \frac{\tau_\varepsilon}{\tau_\sigma}$ .

### 3.5 Результати апробації математичної моделі

Моделювання теплових та напружено-деформаційних процесів під час обробки плоскої пластини різанням з наявним на неї впливом джерела тепла було виконано в середовищі Jupiter Notebook мовою програмування Python. Обчислювалися теплові та деформаційні поля для пластини з сталі 38XM (42CrMo4) без покриття, з одношаровим покриттям TiN, з двошаровим покриттям TiN/ $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>.

Термофізичні властивості матеріалу, котрий використовували при проведенні розрахунків наведені в таблиці 3.1 [28].

Таблиця 3.1

Термофізичні властивості матеріалів при 900 °C [28]

(Temperature dependent mechanical and thermal properties of cutting tool system)

	38XM (42CrMo4)	TiN	$\alpha$ -Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>
Density ( $\rho$ ), kg/m <sup>3</sup>	7800	5420	3780
Specific heat capacity ( $c$ ), J/(kg·°C)	476	857.6	1252
Thermal conductivity ( $\lambda$ ), W/(m·°C)	46	25.5	5.5

Одержане теплове поле пластини ріжучого інструменту зображено на рисунку 3.3(а-в).



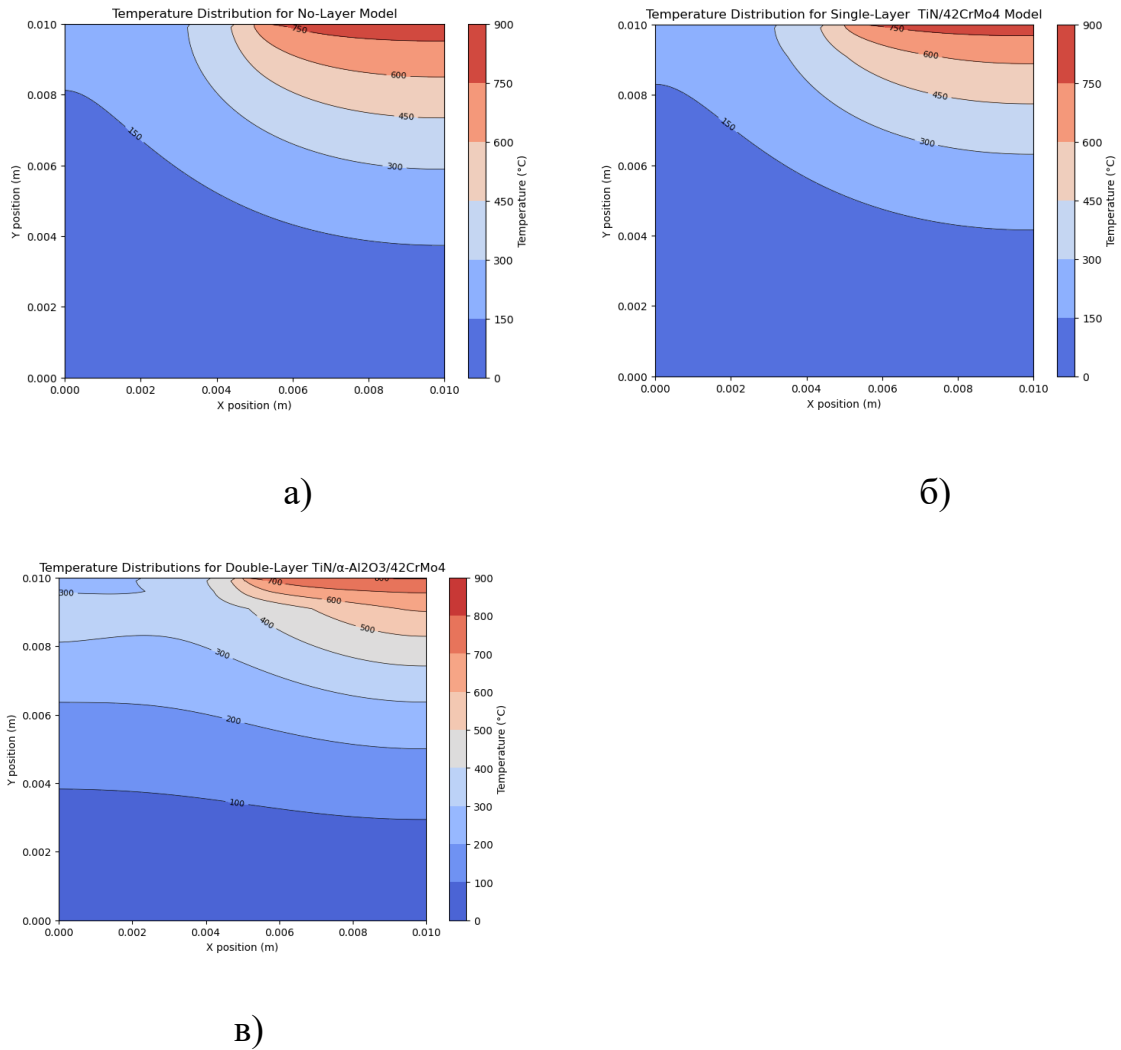


Рис. 3.3 – Температурне поле ріжучої пластини: а) без покриття; б) з одношаровим покриттям TiN/42CrMo4; в) з двошаровим покриттям TiN/α-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/42CrMo4.

На підставі одержаних теплових полів ріжучих пластин, можна зробити висновок про значну ефективність використання покриттів для підвищення термічної стабільності інструментів при різанні.

У випадку теплового поля без покриття бачимо, що температурні градієнти високі, і температурні рівні є порівняно вищими близько джерела тепла. Це свідчить про швидке нагрівання пластини та потенційно меншу термічну стабільність, що може призводити до зношування інструменту і зниження якості різання. Одношарове покриття TiN знижує температурний градієнт на поверхні пластини, що вказує на кращу теплову захисту порівняно з варіантом без покриття. TiN відомий своєю здатністю до теплоізоляції та

зносостійкості, що може покращувати робочі характеристики інструменту. Двошарове покриття покриттям  $\text{TiN}/\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  показує ще менший температурний градієнт і нижчі температурні рівні у порівнянні з одношаровим  $\text{TiN}$ . Слід зазначити, що  $\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  має низьку теплопровідність, що допомагає підтримувати стабільнішу температуру на робочій поверхні інструменту, що сприятливо впливає на тривалість його служби і якість різання.

Узагальнюючи, обидва типи покриттів покращують теплову стабільність інструменту, зменшуючи ризик термічного пошкодження. Однак, двошарове покриття  $\text{TiN}/\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3$  здається більш ефективним, оскільки воно забезпечує нижчі температурні рівні та рівномірніше теплове поле. Це вказує на те, що це покриття може бути більш вигідним варіантом для збільшення ефективності та довговічності ріжучих інструментів при високотемпературних процесах різання.

Проаналізувавши теплові поля всередині пластини перейдемо до аналізу впливу одержаних теплових полів на перебіг деформаційних процесів всередині ріжучої пластини без покриття та з двошаровим покриттям  $\text{TiN}/\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3/42\text{CrMo}_4$ .

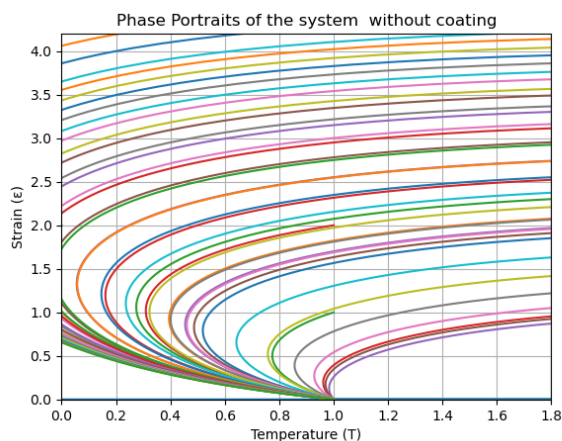
З метою аналізу математичних співвідношень та визначення стійких станів системи, наведених в попередньому розділі, було обрано числове інтегрування рівнянь методом Рунге-Кутта 4-го порядку точності, завдяки якому й було побудовано одержані фазові портрети та знайдено особливі точки.

Отримали фазовий портрет пластичної деформації характеризується наявністю двох особливих точок (рис. 3.4), розглянутих для поверхні без покриття і з покриттям. У якості вхідних параметрів системи були обрані наступні значення:  $T_e = 2.5$  та  $T_e = 5$ ,  $g = 0.5$ ,  $\tau = 1$ .

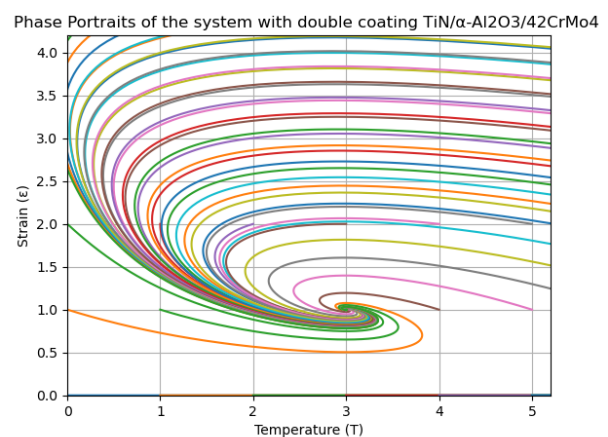
Спостерігається еволюція системи у відповідній точці  $D(T_e, 0)$  у стаціонарному стані згідно з графіком, який наведений на рис. 3.4(а). У передкритичній області, де  $T_e \leq T_c$  вона дає стійкий вузол, характерний для пластини без покриття. За таких умов особлива точка  $O$  не реалізується. Це вказує на те, що матеріал зберігає свої механічні властивості до певного порогу

температури. Експеримент показують, що зростання параметра  $\tau = \frac{\tau_T}{\tau_\epsilon}$  приводить до закручування траєкторій навколо особливої точки. Можна прийти до висновку, що цей стан відповідає відносно повільній зміні температури та швидкій зміні напружень, що характерно переривчастому режиму оброблення різанням. При малих напруженнях або значному їх пониженні пластична деформація розвивається в режимі близькому до плазучости (рис. 3.4 а). При цьому втрати стійкості не відбуваються.

Пластина із двохшаровими покриттями TiN/ $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> характеризуються збільшенням густини матеріалу і зменшенням теплового потоку від тертя в зоні різання. Зростання густини дислокацій у поверхневому покритті приводить до відчутного впливу релаксації напруження. При  $T_e > T_c$  одержимо стійкий фокус O (рис. 3.4 б). Це вказує на те, що система з покриттям має вищу стійкість до теплових деформацій і може витримувати більш високі температури без різких змін у структурній цілісності. З ростом густини дислокацій, що характерно для багатшарового покриття, до значень, за яких їх взаємодія характеризується напруженням, створеним зовнішнім полем, поведінка ансамблю дефектів стає колективною, і принципова роль належить процесам релаксації напруження. Фазовий портрет (рис. 3.4 б) вказує на те, що за напружень, набагато вищих поля взаємодії дислокації, колективні ефекти піддаються зовнішньому впливу, й ансамбль дефектів еволюціонує до кінцевих густин дефектів.



а)



б)

Рис. 3.4 – Фазові портрети залежності деформацій від температури : а) без покриття  $T_e = 2.5$ ,  $g = 0.5$ ,  $\tau = 1$ ; б) з двошаровим покриттям  $\text{TiN}/\alpha\text{-Al}_2\text{O}_3/42\text{CrMo4}$   $T_e = 5$ ,  $g = 0.5$ ,  $\tau = 1$ .

Надалі в ході роботи було розглянуто формування напружено-деформаційних станів системи та їх вплив на характеристики зносостійкості ріжучого інструменту. У якості вхідних параметрів системи були обрані наступні значення:  $\theta = 0.2$ ,  $g_\theta = 0.1$ : а)  $\alpha = 0.3$ ,  $\beta = 3.0$ ; б)  $\alpha = 2$ ,  $\beta = 1.3$ .

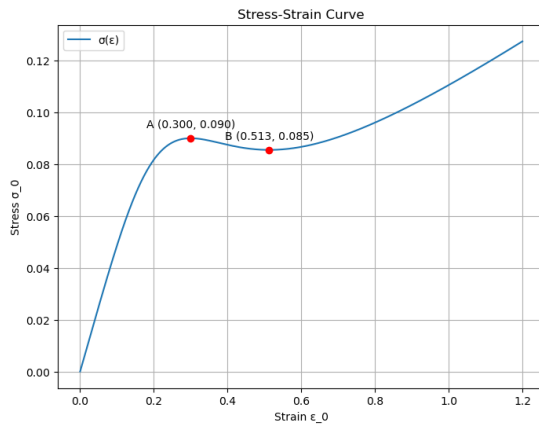
Було розглянуто стаціонарний стан, за якого в (3.45) похідна  $\sigma' = 0$  та величина напружень  $\sigma$  у мастилі не змінюється. Дослідження показали, що існують два можливі варіанти: при низьких значеннях  $\beta$  графік  $\sigma(\varepsilon)$  неперервно зростає, тоді як при  $\beta$ , що перевищує  $1 + \sqrt{\theta}/(1 - \sqrt{\theta})$ , крива стає немонотонною. В першому випадку спостерігається безперервне розм'якшення захисної плівки, тобто процес пластичної деформації (див. рис. 3.5б).

Відповідно до цієї концепції, захисна плівка, при досягненні напружень у точці  $A$ , стрипкоподібно розмякшується(плавиться). З подальшим зростанням напружень, деформація в плівці збільшується поступово(монотонно зростає), зберігаючи її рідкий стан. При зниженні напружень до точки  $B$ , плівка залишається в рідкому стані, але далі відбувається різкий перехід у твердий стан при за умови зниження поля напружень (див. рис. 3.5а). При подальшому зменшенні напружень, вона й надалі залишається у твердому стані. Ці зміни описуються як фазові переходи першого порядку, хоча стани, між якими відбувається перехід, не є справжніми термодинамічними фазами. Це явище пояснюється концепцією зсувного плавлення.

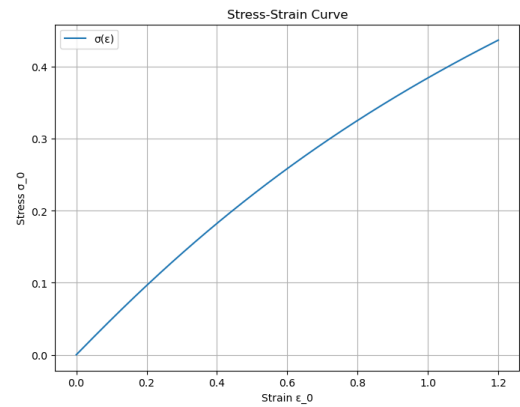
Таким чином, при високих значеннях  $\beta$  (низьких  $\alpha$ ), процеси плавлення та твердіння відбуваються при приблизно однакових рівнях деформації ( $\varepsilon_A \approx \varepsilon_B$ ), але за різних значень напружень  $\sigma$ .

Тепер у якості міри стану використовуємо зсувні напруження  $\sigma$ : плівка перебуває в рідкому стані при  $\sigma > \sigma_A$ , та в твердому стані при  $\sigma < \sigma_B$ . Між

цими точками, у діапазоні  $\sigma_B < \sigma < \sigma_A$ , стан захисної плівки є нестабільним, оскільки вона може перебувати як в рідкій, так і в твердій фазі.



а)



б)

Рис. 3.5 – Залежність стаціонарних значень зсувних напружень  $\sigma_0$  від деформації  $\epsilon_0$  при  $\theta = 0.2$ ,  $g_\theta = 0.1$ : а)  $\alpha = 0.3, \beta = 3.0$ ; б)  $\alpha = 2, \beta =$

1.3

## ВИСНОВКИ

1. В ході роботи проведено літературний огляд на тему моделювання напружено-деформованого стану в багат шарових плівкових системах в залежності від теплового навантаження. Було встановлено взаємозв'язок цих явищ та зроблено висновок, що дане питання залишається актуальним для науковців.
2. Розглянуто фізичну модель задачі. Отримано рівняння теплового балансу, визначено зони деформації та зсуву. Було детальніше розглянуто перехід пружної деформації в пластичну та з'ясовано вплив захисних покриттів на межовий режим тертя.
3. Вивчено фізичну модель поставленої задачі, в результаті чого отримано рівняння теплового балансу та визначено зони деформації та зсуву. Детальніше розглянутий перехід від пружної до пластичної деформації, а також розглянуто вплив захисних покриттів на межовий режим тертя.
4. Побудовано математичну модель для поставленої задачі, враховуючи як початкові, так і граничні умови. Для вирішення цієї задачі обрано метод скінчених різниць. Вибір методу обумовлено тим, що в області рішення не враховано точну геометрію різця, що дозволило побудувати різницеву сітку.
5. Проведено моделювання теплових та напружено-деформаційних процесів при обробці ріжучим інструментом з плоскою пластиною. Використовуючи середовище Jupiter Notebook та мову програмування Python, обчислені теплові та деформаційні поля для пластилини з різними покриттями: без покриття, з одношаровим покриттям TiN, з двошаровим покриттям TiN/ $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>.

Узагальнюючи отримані результати, виявлено значний позитивний ефект від використання покриттів для підвищення термічної стабільності інструментів при різанні. Поверхня без покриття вказує на швидке нагрівання та меншу термічну стабільність, що може призводити до зношування інструменту та зниження якості різання. Покриття TiN та двошарове покриття TiN/ $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>

показують покращений ці показники, знижуючи температурні градієнти та підтримуючи стабільніше теплове поле.

В результаті числового інтегрування рівнянь методом Рунге-Кутта 4-го порядку отримано фазові портрети та особливі точки системи пластичної деформації для поверхні без покриття та з двошаровим покриттям TiN/ $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>. Показано, що параметр ( $\tau$ ) впливає на еволюцію системи, зокрема, при його зростанні спостерігається закручування траєкторій, що вказує на переривчастий режим оброблення різанням. Виявлено, що двошарове покриття TiN/ $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> збільшує стійкість системи до теплових деформацій, знижуючи температурні рівні та рівномірно розподіляючи теплове поле. Колективна еволюція дефектів при вищих напруженнях свідчить про важливу роль процесів релаксації напруження в багатошарових покриттях. Аналізуючи напружено-деформаційні стани та їх вплив на зносостійкість ріжучого інструменту, було виявлено два можливих сценарії. При низьких ( $\beta$ ) спостерігалася безперервна пластична деформація захисної плівки. При високих значеннях ( $\beta$ ) виникало зсувне плавлення плівки, яке пояснюється концепцією фазових переходів першого порядку, де стани, між якими відбувається перехід, не є справжніми термодинамічними фазами.

## СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Fox-Rabinovich G, Gershman IS, Locks E, Paiva JM, Endrino JL, Dosbaeva G, Veldhuis S. The Relationship between Cyclic Multi-Scale Self-Organized Processes and Wear-Induced Surface Phenomena under Severe Tribological Conditions Associated with Buildup Edge Formation. *Coatings*. 2021; 11(8):1002. doi:10.3390/coatings11081002
2. Du, Jin & Hao, Tianmei & Zhang, Xue & Su, Guosheng & Zhang, Peirong & Sun, Yujing & Zhang, Jingjie & Xu, Chonghai. (2022). Finite element investigation of cutting performance of Cr/W-DLC/DLC composite coated cutting tool. *The International Journal of Advanced Manufacturing Technology*. 118. 10.1007/s00170-021-08093-0.
3. Gershman IS, Fox-Rabinovich GS, Veldhuis SC, Yamamoto K, Beake BD, Endrino JL. Experimental Investigations and Thermodynamic Modeling of Self-Organization in Tribo-Systems Operating under Extreme Conditions. *Entropy*. 2018; 20(12):989.
4. Cancellieri C, Moszner F, Chiodi M, Yoon S, Janczak-Rusch J, Jeurgens LPH. Influence of Thermal Treatment on the Stress State and Microstructure Evolution in Cu/W Nano-Multilayer Systems. *Journal of Applied Physics*. 2016; 120(19):195107. doi:10.1063/1.4967492
5. An investigation of multilayer coated (TiCN/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-TiN) tungsten carbide tools in high speed cutting using a hybrid finite element and experimental technique. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers Part B Journal of Engineering Manufacture*. November 2011; DOI: 10.1177/0954405411404504
6. Krajinović I, Daves W, Tkadletz M, Teppernegg T, Klünsner T, Schalk N, Mitterer C, Tritremmel C, Ecker W, Czettl C. Finite element study of the influence of hard coatings on hard metal tool loading during milling. *Surface & Coatings Technology*. 2016; 304:134-141
7. Bencheikh I, Nouari M, Bilteryst F. Multi-step simulation of multi-coated tool wear using the coupled approach XFEM/multi-Level-set.



8. W. Grzesik, P. Nieslony, Physics based modelling of interface temperatures in machining with multilayer coated tools at moderate cutting speeds, *Int. J. Mach. Tools Manuf.* 44 (2004) 889–901.
9. Z. Shijun, L. Zhanqiang, An analytical model for transient temperature distribution in coated carbide cutting tools, *Int. Commun. Heat Mass Transfer* 35 (2008) 1311–1315.
10. F. Kone, C. Czarnota, B. Haddag, M. Nouari, Finite element modeling of thermo-mechanical behavior of coatings under extreme contact loading in dry machining, *Surf. Coat. Technol.* 205 (2010) 3559–3566.
11. W. Grzesik, M. Bartoszek, P. Nieslony, Finite element modelling of temperature distribution in the cutting zone in turning process with differently coated tools, *J. Mater. Process. Technol.* 164-165 (2005) 1204–1211.
12. Dogu, Y., Aslan, E. and Camuscu, N. A numerical model to determine temperature distribution in orthogonal metal cutting. *Journal of Materials Processing Technology*, 2006, 171(1), 1-9.
13. FAHAD, Muhammad. A heat partition investigation of multilayer coated carbide tools for high speed machining through experimental studies and finite element modelling. The University of Manchester (United Kingdom), 2012.
14. B. Haddag, S. Atlati, M. Nouari, M. Zenasni, Analysis of the heat transfer at the tool–workpiece interface in machining: determination of heat generation and heat transfer coefficients, *Heat and Mass Trans.* 51(10) (2015), 1355-1370.
15. A. N. Reznikov, *Teplofizika Protsessov Mekhanicheskoy Obrabotki Materialov* (Moscow: Mashinostroenie: 1981) (in Russian).
16. PALANISAMY, P., et al. Prediction of cutting force and temperature rise in the end-milling operation. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part B: Journal of Engineering Manufacture*, 2006, 220.10: 1577-1587.
17. LAZOGLU, Ismail; ALTINTAS, Yusuf. Prediction of tool and chip temperature in continuous and interrupted machining. *International Journal of Machine tools and manufacture*, 2002, 42.9: 1011-1022.

18. A.N. Reznikov, and L.A. Reznikov, *Teplovyye protsessy v tekhnologicheskikh sistemakh* [Thermal processes in technological systems] (Moskva: Mashinostroenie: 1990) (in Russian).
19. Гончаров О. А., Білоус Д. О., Юнда А. М., Хоменко О. В., Міроненко Є. В., Васильєва Л. В., Гончарова С. А. Процеси теплоперенесення в багатощарових нанокompозитних системах під час різання. *Наносистеми, наноматеріали, нанотехнології*. 2022; 20(2):385–422.
20. Özel, T. The influence of friction models on finite element simulations of machining. *International Journal of Machine Tools & Manufacture*. 2006; 46:518–530. doi:10.1016/j.ijmachtools.2005.07.001.
21. G.R. Johnson, and W.H. Cook, *Eng. Fract. Mech.*, 21: 31 (1985). 48 doi: 10.1016/0013-7944(85)90052-9.
22. N.N. Zorev, *International Research in Production Engineering* (New York: ASME: 1963), p. 165.
23. N. Maharjan, W. Zhou, and N. Wu, *Surf. Coat. Technol.*, 385: 125399 (2020).
24. E. Usui and T. Shirakashi, *Proceedings of the Winter Annual Meeting of the American Society Mechanical Engineers*, 7: 13 (1982).
25. M. H. Dirikolu, T. H. C. Childs, and K. Maekawa, *Int. J. of Mechanical Sciences*, 43, No. 11: 2699 (2001).
26. Хоменко О. В. *Моделювання нелінійних процесів та систем: навчальний посібник* / О. В. Хоменко, О. А. Гончаров. – Суми : Сумський державний університет, 2023. – 198 с. ISBN 978-966-657-934-1
27. Самарський А. А. *Теорія різницевого схем*. М. 1977. – 656 с.
28. A. V. Khomenko, D. S. Troshchenko, L. S. Metlov, and P. E. Trofimenko, *Nanosistemi, Nanomateriali, Nanotehnologii*, 15, No. 2: 203 (2017) (in Russian).
29. A. V. Khomenko and I. A. Lyashenko, *J. Phys. Studies*, 11, No. 3: 268 (2007).
30. A. V. Khomenko and I. A. Lyashenko, *Fluctuation and Noise Letters*, 7, No. 2: 111 (2007).

31. O. Mazur, K.-I. Tozaki, Y. Yoshimura, and L. Stefanovich, *Physica A: Statistical Mechanics and Its Applications*, 599: 127436 (2022).
32. A. Khomenko, M. Khomenko, B. Persson, and K. Khomenko, *Tribology Letters*, 65, No. 2: 71 (2017)

## ДОДАТОК А

```
#####Temperature field

#Import needed libraries
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

# Constants and parameters
X = 0.01 # Plate dimensions in meters (X direction)
Y = 0.01 # Plate dimensions in meters (Y direction)
total_time = 1 # Total simulation time in seconds
spatial_step = X / 100 # Spatial step size
time_step = 0.01 # Temporal step size
num_steps_x = int(X / spatial_step) # Number of spatial steps in X
num_steps_y = int(Y / spatial_step) # Number of spatial steps in Y
x = np.arange(0, X + spatial_step, spatial_step) # Start from 0 for X-axis
y = np.arange(0, Y + spatial_step, spatial_step) # Start from 0 for Y-axis

# Material properties and thermal diffusivity calculations
lamda_base = 46 # Base
density_base = 7800 # Base
specific_heat_base = 476 # Base
lamda_layer2 = (5.5 + 25.5) / 2 # Layer TiN-Al2O3
density_layer2 = (3780 + 5420) / 2 # Layer TiN-Al2O3
specific_heat_layer2 = (1252 + 857.6) / 2 # Layer TiN-Al2O3
lamda_layer3 = 35 # Layer TiN
density_layer3 = 4180 # Layer TiN
specific_heat_layer3 = 1810 # Layer TiN
diffusivity_base = lamda_base / (density_base * specific_heat_base)
diffusivity_layer2 = lamda_layer2 / (density_layer2 * specific_heat_layer2)
diffusivity_layer3 = lamda_layer3 / (density_layer3 * specific_heat_layer3)

# Heat transfer coefficients
heat_transfer_coeff1 = 100
heat_transfer_coeff2 = 100000

# Initial temperatures
```

```

t = np.arange(0, total_time + time_step, time_step)
starting_temp = 20
ambient_temp = 20
cutting_zone_temp = 900

# Initialize temperature matrices
temp_without_layer = np.zeros((num_steps_x, num_steps_y))
temp_single_layer = np.zeros((num_steps_x, num_steps_y))
temp_double_layer = np.zeros((num_steps_x, num_steps_y))

temp_single_layer[:, :] = starting_temp
temp_without_layer[:, :] = starting_temp
temp_double_layer[:, :] = starting_temp

# Layer and indentation parameters
layer_num = 10
indent_depth = 50
boundary1 = int(100 - layer_num)
boundary_2 = int(100 - layer_num / 2)
indentation_boundary = int(100 - indent_depth)
alpha_coeff = np.zeros(num_steps_x)
beta_coeff = np.zeros(num_steps_y)

#debugging
print(f"Boundary 1: {boundary_2}, Num steps x: {num_steps_x}")
print(f"Boundary 2: {boundary_2}, Num steps x: {num_steps_y}")
print(f"Indentation boundary: {indentation_boundary}")
print(f"alpha_coef: {alpha_coeff}")
print(f"beta_coef: {beta_coeff}")

# no layer model
current_time = 0

while current_time < total_time:
    # Forward traversal along the X-axis
    for j in range(num_steps_y):

```

```

# Lower boundary conditions
alpha_coeff[0] = 0
beta_coeff[0] = ambient_temp

# Calculations for the first layer
for i in range(1, num_steps_x - 1):
    ai = lamda_base / (spatial_step**2)
    bi = 2 * lamda_base / (spatial_step**2) + density_base * specific_heat_base
/ time_step
    ci = lamda_base / (spatial_step**2)
    fi = -density_base * specific_heat_base * temp_without_layer[i, j] /
time_step
    alpha_coeff[i] = ai / (bi - ci * alpha_coeff[i - 1])
    beta_coeff[i] = (ci * beta_coeff[i - 1] - fi) / (bi - ci * alpha_coeff[i -
1])

# Upper boundary conditions
if j < indentation_boundary:
    temp_without_layer[-1, j] = (lamda_base * spatial_step**2 *
temp_without_layer[-1, j] +
                                2 * diffusivity_base * time_step * (lamda_base *
beta_coeff[num_steps_y - 2] +
                                heat_transfer_coeff1 * spatial_step *
cutting_zone_temp)) / (
                                lamda_base * spatial_step**2 + 2 *
diffusivity_base * time_step *
                                (lamda_base * (1 - alpha_coeff[num_steps_y -
2]) + heat_transfer_coeff1 * spatial_step))
    else:
        temp_without_layer[-1, j] = (lamda_base * spatial_step**2 *
temp_without_layer[-1, j] +
                                2 * diffusivity_base * time_step * (lamda_base *
beta_coeff[num_steps_y - 2] +
                                heat_transfer_coeff2 * spatial_step *
cutting_zone_temp)) / (
                                lamda_base * spatial_step**2 + 2 *
diffusivity_base * time_step *
                                (lamda_base * (1 - alpha_coeff[num_steps_y -
2]) + heat_transfer_coeff2 * spatial_step))

# Backward sweep for updating temperatures along X-axis
for i in range(num_steps_x - 2, -1, -1): # Python uses zero-based indexing

```

```

temp_without_layer[i, j] = alpha_coeff[i] * temp_without_layer[i + 1, j] +
beta_coeff[i]

# Forward traversal along the Y-axis
for i in range(1, num_steps_x - 1):
    # Left boundary conditions
    alpha_coeff[0] = 2 * diffusivity_base * time_step * lamda_base / (lamda_base *
spatial_step**2 + 2 * diffusivity_base * time_step * (lamda_base + heat_transfer_coeff1 *
spatial_step))
    beta_coeff[0] = (lamda_base * spatial_step**2 * temp_without_layer[i, 0] + 2 *
diffusivity_base * time_step * heat_transfer_coeff1 * spatial_step * ambient_temp) /
(lamda_base * spatial_step**2 + 2 * diffusivity_base * time_step * (lamda_base +
heat_transfer_coeff1 * spatial_step))

    # Calculations for internal nodes along Y-axis
    for j in range(1, num_steps_y - 1):
        ai = lamda_base / (spatial_step**2)
        bi = 2 * lamda_base / (spatial_step**2) + density_base * specific_heat_base
/ time_step
        ci = lamda_base / (spatial_step**2)
        fi = -density_base * specific_heat_base * temp_without_layer[i, j] /
time_step
        alpha_coeff[j] = ai / (bi - ci * alpha_coeff[j - 1])
        beta_coeff[j] = (ci * beta_coeff[j - 1] - fi) / (bi - ci * alpha_coeff[j -
1])

    # Right boundary conditions for Y-axis
    temp_without_layer[i, -1] = (lamda_base * spatial_step**2 *
temp_without_layer[i, -1] + 2 * diffusivity_base * time_step * (lamda_base *
beta_coeff[num_steps_y - 2] + heat_transfer_coeff1 * spatial_step * ambient_temp)) /
(lamda_base * spatial_step**2 + 2 * diffusivity_base * time_step * (lamda_base * (1 -
alpha_coeff[num_steps_y - 2]) + heat_transfer_coeff1 * spatial_step))

    # Backward sweep for updating temperatures along Y-axis
    for j in range(num_steps_y - 2, -1, -1):
        temp_without_layer[i, j] = alpha_coeff[j] * temp_without_layer[i, j + 1] +
beta_coeff[j]

    current_time += time_step

# Print information about temp_without_layer
print(f"Temp without_layer: {temp_without_layer}")

```

```

# Assuming temp_without_layer.T has dimensions (rows, columns)
rows, columns = temp_without_layer.T.shape
print(f"Rows: {rows}")
print(f"Columns: {columns}")

# Create 2D grids for X and Y
X, Y = np.meshgrid(np.arange(columns), np.arange(rows))

# Plotting the temperature distribution for the no-layer model
plt.figure(figsize=(8, 6))
contourf_set = plt.contourf(X, Y, temp_without_layer, cmap='coolwarm')
contour_set = plt.contour(X, Y, temp_without_layer, colors='black', linewidths=0.5)
plt.colorbar(contourf_set, label='Temperature (°C)')
plt.clabel(contour_set, inline=True, fontsize=8)
plt.title('Temperature Distribution for No-Layer Model')
plt.xlabel('X position (m)')
plt.ylabel('Y position (m)')
plt.show()

# Initialize parameters
current_time = 0
alpha_coeff = np.zeros(num_steps_x)
beta_coeff = np.zeros(num_steps_y)

while current_time < total_time:
    # Forward traversal along the X-axis
    for j in range(num_steps_y): # Python uses 0-based indexing
        # Lower boundary conditions
        alpha_coeff[0] = 0
        beta_coeff[0] = ambient_temp

        # Calculations for the first layer
        for i in range(1, boundary1): # Adjusted range for 0-based indexing
            ai = lamda_base / (spatial_step**2)
            bi = 2 * lamda_base / (spatial_step**2) + density_base * specific_heat_base
            / time_step
            ci = lamda_base / (spatial_step**2)

```





```

(lamda_layer3 * beta_coeff[num_steps_y - 2] +
# Adjusted index for 0-based indexing
heat_transfer_coeff1 * spatial_step *
cutting_zone_temp)) / (
lamda_layer3 * spatial_step**2 +
2 * diffusivity_layer3 * time_step *
(lamda_layer3 * (1 - alpha_coeff[num_steps_y -
2])) + # Adjusted index for 0-based indexing
heat_transfer_coeff1 * spatial_step))
else:
temp_single_layer[-1, j] = (lamda_layer3 * spatial_step**2 *
temp_single_layer[-1, j] +
2 * diffusivity_layer3 * time_step *
(lamda_layer3 * beta_coeff[num_steps_y - 2] +
# Adjusted index for 0-based indexing
heat_transfer_coeff2 * spatial_step *
cutting_zone_temp)) / (
lamda_layer3 * spatial_step**2 +
2 * diffusivity_layer3 * time_step *
(lamda_layer3 * (1 - alpha_coeff[num_steps_y -
2])) + # Adjusted index for 0-based indexing
heat_transfer_coeff2 * spatial_step))

# Backward sweep for updating temperatures along X-axis
for i in range(num_steps_x - 2, -1, -1): # Adjusted range for 0-based indexing
temp_single_layer[i, j] = alpha_coeff[i] * temp_single_layer[i + 1, j] +
beta_coeff[i]

# Forward traversal along the Y-axis
for i in range(1, num_steps_x - 1): # Adjusted range for 0-based indexing
# Left boundary conditions
alpha_coeff[0] = 2 * diffusivity_base * time_step * lamda_base / (lamda_base *
spatial_step**2 + 2 * diffusivity_base * time_step * (lamda_base + heat_transfer_coeff1 *
spatial_step))
beta_coeff[0] = (lamda_base * spatial_step**2 * temp_single_layer[i, 0] + 2 *
diffusivity_base * time_step * heat_transfer_coeff1 * spatial_step * ambient_temp) /
(lamda_base * spatial_step**2 + 2 * diffusivity_base * time_step * (lamda_base +
heat_transfer_coeff1 * spatial_step))

# Calculations for internal nodes along Y-axis
for j in range(1, num_steps_y - 1): # Adjusted range for 0-based indexing
ai = lamda_base / (spatial_step**2)

```

```

        bi = 2 * lamda_base / (spatial_step**2) + density_base * specific_heat_base
/ time_step
        ci = lamda_base / (spatial_step**2)
        fi = -density_base * specific_heat_base * temp_single_layer[i, j] /
time_step
        alpha_coeff[j] = ai / (bi - ci * alpha_coeff[j - 1])
        beta_coeff[j] = (ci * beta_coeff[j - 1] - fi) / (bi - ci * alpha_coeff[j -
1])

    # Right boundary conditions for Y-axis

    temp_single_layer[i, -1] = (lamda_base * spatial_step**2 * temp_single_layer[i,
-1] + 2 * diffusivity_base * time_step * (lamda_base * beta_coeff[num_steps_y - 2] +
heat_transfer_coeff1 * spatial_step * ambient_temp)) / (lamda_base * spatial_step**2 +
2 * diffusivity_base * time_step * (lamda_base * (1 - alpha_coeff[num_steps_y - 2]) +
heat_transfer_coeff1 * spatial_step))

    # Backward sweep for updating temperatures along Y-axis
    for j in range(num_steps_y - 2, -1, -1): # Adjusted range for 0-based indexing
        temp_single_layer[i, j] = alpha_coeff[j] * temp_single_layer[i, j + 1] +
beta_coeff[j]

    current_time += time_step

# Print information about temp_single_layer
print(f"Temp single_layer: {temp_single_layer}")
# Assuming temp_single_layer.T has dimensions (rows, columns)
rows, columns = temp_single_layer.T.shape
print(f"Rows: {rows}")
print(f"Columns: {columns}")

# Create 2D grids for X and Y
X, Y = np.meshgrid(np.arange(columns), np.arange(rows))

# Plotting the temperature distribution for the single-layer model
plt.figure(figsize=(8, 6))
contourf_set = plt.contourf(X, Y, temp_single_layer, cmap='coolwarm')
contour_set = plt.contour(X, Y, temp_single_layer, colors='black', linewidths=0.5)
plt.colorbar(contourf_set, label='Temperature (°C)')
plt.clabel(contour_set, inline=True, fontsize=8)
plt.title('Temperature Distribution for Single-Layer TiN/42CrMo4 Model')
plt.xlabel('X position (m)')

```

```

plt.ylabel('Y position (m)')
plt.show()

# Simulation loop for two-layer model
current_time = 0
alpha_coeff = np.zeros(num_steps_x)
beta_coeff = np.zeros(num_steps_y)

while current_time < total_time:
    # Forward traversal along the X-axis
    for j in range(num_steps_y):
        # Lower boundary conditions
        alpha_coeff[0] = 0
        beta_coeff[0] = ambient_temp

        # Calculations for the first layer
        for i in range(1, boundary1):
            ai = lamda_base / (spatial_step**2)
            bi = 2 * lamda_base / (spatial_step**2) + density_base * specific_heat_base
/ time_step
            ci = lamda_base / (spatial_step**2)
            fi = -density_base * specific_heat_base * temp_double_layer[i, j] /
time_step
            alpha_coeff[i] = ai / (bi - ci * alpha_coeff[i - 1])
            beta_coeff[i] = (ci * beta_coeff[i - 1] - fi) / (bi - ci * alpha_coeff[i -
1])

        # Transition to the second layer
        alpha_coeff[boundary1] = 2 * diffusivity_base * diffusivity_layer2 * time_step *
lamda_layer2 / (2 * diffusivity_base * diffusivity_layer2 * time_step * (lamda_layer2 +
lamda_base * (1 - alpha_coeff[boundary1])) + spatial_step**2 * (lamda_base *
diffusivity_layer2 + lamda_layer2 * diffusivity_base))

        beta_coeff[boundary1] = (2 * diffusivity_base * diffusivity_layer2 * time_step *
lamda_base * beta_coeff[boundary1] + spatial_step**2 * (lamda_base * diffusivity_layer2 +
lamda_layer2 * diffusivity_base) * temp_double_layer[boundary1 + 1, j]) / (2 *
diffusivity_base * diffusivity_layer2 * time_step * (lamda_layer2 + lamda_base * (1 -
alpha_coeff[boundary1])) + spatial_step**2 * (lamda_base * diffusivity_layer2 +
lamda_layer2 * diffusivity_base))

```

```

# Calculations for the second layer
for i in range(boundary1 + 1, boundary_2):
    ai = lamda_layer2 / (spatial_step**2)
    bi = 2 * lamda_layer2 / (spatial_step**2) + density_layer2 *
specific_heat_layer2 / time_step
    ci = lamda_layer2 / (spatial_step**2)
    fi = -density_layer2 * specific_heat_layer2 * temp_double_layer[i, j] /
time_step
    alpha_coeff[i] = ai / (bi - ci * alpha_coeff[i - 1])
    beta_coeff[i] = (ci * beta_coeff[i - 1] - fi) / (bi - ci * alpha_coeff[i -
1])

# Transition to the third layer
alpha_coeff[boundary_2] = 2 * diffusivity_layer2 * diffusivity_layer3 * time_step *
lamda_layer3 / (2 * diffusivity_layer2 * diffusivity_layer3 * time_step * (lamda_layer3 +
lamda_layer2 * (1 - alpha_coeff[boundary_2 - 1])) + spatial_step**2 * (lamda_layer2 *
diffusivity_layer3 + lamda_layer3 * diffusivity_layer2))
beta_coeff[boundary_2] = (2 * diffusivity_layer2 * diffusivity_layer3 * time_step *
lamda_layer2 * beta_coeff[boundary_2 - 1] + spatial_step**2 * (lamda_layer2 *
diffusivity_layer2 + lamda_layer3 * diffusivity_layer2) * temp_double_layer[boundary_2, j])
/ (2 * diffusivity_layer2 * diffusivity_layer3 * time_step * (lamda_layer3 + lamda_layer2 *
(1 - alpha_coeff[boundary_2 - 1])) + spatial_step**2 * (lamda_layer2 * diffusivity_layer3
+ lamda_layer3 * diffusivity_layer2))

# Calculations for the third layer
for i in range(boundary_2 + 1, num_steps_x - 1):
    ai = lamda_layer3 / (spatial_step**2)
    bi = 2 * lamda_layer3 / (spatial_step**2) + density_layer3 *
specific_heat_layer3 / time_step
    ci = lamda_layer3 / (spatial_step**2)
    fi = -density_layer3 * specific_heat_layer3 * temp_double_layer[i, j] /
time_step
    alpha_coeff[i] = ai / (bi - ci * alpha_coeff[i - 1])
    beta_coeff[i] = (ci * beta_coeff[i - 1] - fi) / (bi - ci * alpha_coeff[i -
1])

# Upper boundary conditions for the last layer
if j < indentation_boundary:
    temp_double_layer[-1, j] = (lamda_layer3 * spatial_step**2 *
temp_double_layer[-1, j] + 2 * diffusivity_layer3 * time_step * (lamda_layer3 *
beta_coeff[num_steps_y - 2] + heat_transfer_coeff1 * spatial_step * cutting_zone_temp))
/ (lamda_layer3 * spatial_step**2 + 2 * diffusivity_layer3 * time_step * (lamda_layer3 *
(1 - alpha_coeff[num_steps_y - 2]) + heat_transfer_coeff1 * spatial_step))
else:

```

```

        temp_double_layer[-1, j] = (lamda_layer3 * spatial_step**2 *
temp_double_layer[-1, j] + 2 * diffusivity_layer3 * time_step * (lamda_layer3 *
beta_coeff[num_steps_y - 2] + heat_transfer_coeff2 * spatial_step * cutting_zone_temp))
/ (lamda_layer3 * spatial_step**2 + 2 * diffusivity_layer3 * time_step * (lamda_layer3 *
(1 - alpha_coeff[num_steps_y - 2]) + heat_transfer_coeff2 * spatial_step))

        # Backward sweep for updating temperatures along X-axis
        for i in range(num_steps_x - 2, -1, -1):
            temp_double_layer[i, j] = alpha_coeff[i] * temp_double_layer[i + 1, j] +
beta_coeff[i]

        # Forward traversal along the Y-axis
        for i in range(1, num_steps_x - 1):
            # Left boundary conditions
            alpha_coeff[0] = 2 * diffusivity_base * time_step * lamda_base / (lamda_base *
spatial_step**2 + 2 * diffusivity_base * time_step * (lamda_base + heat_transfer_coeff1 *
spatial_step))
            beta_coeff[0] = (lamda_base * spatial_step**2 * temp_double_layer[i, 0] + 2 *
diffusivity_base * time_step * heat_transfer_coeff1 * spatial_step * ambient_temp) /
(lamda_base * spatial_step**2 + 2 * diffusivity_base * time_step * (lamda_base +
heat_transfer_coeff1 * spatial_step))

            # Calculations for internal nodes along Y-axis
            for j in range(1, num_steps_y - 1):
                ai = lamda_base / (spatial_step**2)
                bi = 2 * lamda_base / (spatial_step**2) + density_base * specific_heat_base
/ time_step
                ci = lamda_base / (spatial_step**2)
                fi = -density_base * specific_heat_base * temp_double_layer[i, j] /
time_step
                alpha_coeff[j] = ai / (bi - ci * alpha_coeff[j - 1])
                beta_coeff[j] = (ci * beta_coeff[j - 1] - fi) / (bi - ci * alpha_coeff[j -
1])

            # Right boundary conditions for Y-axis
            temp_double_layer[i, -1] = (lamda_base * spatial_step**2 * temp_double_layer[i,
-1] + 2 * diffusivity_base * time_step * (lamda_base * beta_coeff[num_steps_y - 2] +
heat_transfer_coeff1 * spatial_step * ambient_temp)) / (lamda_base * spatial_step**2 +
2 * diffusivity_base * time_step * (lamda_base * (1 - alpha_coeff[num_steps_y - 2]) +
heat_transfer_coeff1 * spatial_step))

            # Backward sweep for updating temperatures along Y-axis
            for j in range(num_steps_y - 2, -1, -1):

```

```

        temp_double_layer[i, j] = alpha_coeff[j] * temp_double_layer[i, j + 1] +
beta_coeff[j]

    current_time += time_step

print(f"Temp double_layer: {temp_double_layer}")
# Assuming temp_double_layer.T has dimensions (rows, columns)
rows, columns = temp_double_layer.T.shape
print(f"Rows: {rows}")
print(f"Columns: {columns}")

# Create 2D grids for X and Y
X, Y = np.meshgrid(np.arange(columns), np.arange(rows))

plt.figure(figsize=(8, 6))
contourf_set = plt.contourf(X, Y, temp_double_layer, cmap='coolwarm')
contour_set = plt.contour(X, Y, temp_double_layer, colors='black', linewidths=0.5)
plt.colorbar(contourf_set, label='Temperature (°C)')
plt.clabel(contour_set, inline=True, fontsize=8)
plt.title('Temperature Distributions for Double-Layer TiN/ $\alpha$ -Al2O3/42CrMo4')
plt.xlabel('X position (m)')
plt.ylabel('Y position (m)')
plt.show()

####Strain-Temp dependency

import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt

# System parameters
g = 0.5
tau = 1
Te_min = 0
Te_max = 5
Te_step = 0.1

```

```

# Differential equations system function
def system(epsilon, T, Te):
    # Differential equation for deformation (epsilon)
    d_epsilon_dt = -epsilon + g * epsilon * (T - 1)
    # Differential equation for temperature (T)
    dT_dt = (1 / tau) * (-T + Te - g * epsilon**2 * (T - 1))
    return np.array([d_epsilon_dt, dT_dt])

# Runge-Kutta 4th order method
def runge_kutta_4(y0, t0, tf, dt, Te):
    # Time steps
    t = np.arange(t0, tf, dt)
    # Initialize solution array
    y = np.zeros((len(t), len(y0)))
    y[0, :] = y0

    # Runge-Kutta 4th order integration
    for i in range(1, len(t)):
        k1 = dt * system(y[i-1, 0], y[i-1, 1], Te)
        k2 = dt * system(y[i-1, 0] + 0.5 * k1[0], y[i-1, 1] + 0.5 * k1[1], Te)
        k3 = dt * system(y[i-1, 0] + 0.5 * k2[0], y[i-1, 1] + 0.5 * k2[1], Te)
        k4 = dt * system(y[i-1, 0] + k3[0], y[i-1, 1] + k3[1], Te)
        y[i, :] = y[i-1, :] + (k1 + 2*k2 + 2*k3 + k4) / 6

    return t, y

# Perform calculations and visualization
y0 = [2.5, 0] # Initial conditions
#y0 = [5, 0] # Initial conditions
t0 = 0 # Start time
tf = 50 # End time
dt = 0.1 # Time step

# Iterate over a range of Te values and plot phase portraits
Te_values = np.arange(Te_min, Te_max + Te_step, Te_step)
for Te in Te_values:
    t, y = runge_kutta_4(y0, t0, tf, dt, Te)

```



```

plt.plot(y[:, 0], y[:, 1])

plt.xlabel('Temperature (T)')
plt.ylabel('Strain ( $\epsilon$ )')
plt.title('Phase Portraits of the system without coating (Runge-Kutta 4th Order)')
plt.legend()
plt.grid(True)
plt.show()

#####Stress-strain dependency
# Given parameters
theta = 0.2
g0 = 0.1
alpha = 0.3
beta = 3.0

# Equation (3.137)
def g(epsilon, theta=theta, alpha=alpha, beta=beta, g0=g0):
    return g0 * (1 + (theta**(-1) - 1) / (1 + (epsilon/alpha)**beta))

# The stress function ( $\sigma$ ) as a product of  $g(\epsilon)$  and  $\epsilon$ 
def sigma_function(epsilon):
    return g(epsilon) * epsilon

# Define a new epsilon range for better resolution
epsilon_fine = np.linspace(0, 1.2, 50000)

# Numerical first derivative of the sigma function
def first_derivative(epsilon):
    return np.gradient(sigma_function(epsilon), epsilon)

# Finding the approximate locations where the first derivative is zero
# A zero crossing is where the sign of the first derivative changes
sign_changes = np.where(np.diff(np.sign(first_derivative(epsilon_fine))))[0]

```

```

# Use a simple average of the intervals where sign change occurs to estimate the zero
location
zero_locations = (epsilon_fine[sign_changes] + epsilon_fine[sign_changes + 1]) / 2

# Calculate the corresponding  $\sigma$  values for the zero locations
sigma_zeros = sigma_function(zero_locations)

# Plotting the graph with the points marked
plt.figure(figsize=(8, 6))
plt.plot(epsilon_fine, sigma_function(epsilon_fine), label=' $\sigma(\epsilon)$ ')
plt.scatter(zero_locations, sigma_zeros, color='red', zorder=5) # Points where first
derivative is zero

# Annotate the points on the graph
for i, (x, y) in enumerate(zip(zero_locations, sigma_zeros)):
    plt.annotate(f'{"A" if i == 0 else "B"} ({x:.3f}, {y:.3f})', xy=(x, y),
textcoords="offset points", xytext=(0,10), ha='center')

plt.title('Stress-Strain Curve')
plt.xlabel('Strain  $\epsilon_0$ ')
plt.ylabel('Stress  $\sigma_0$ ')
plt.grid(True)
plt.legend()
plt.show()

# Output the coordinates of the zero derivative points
zero_coordinates = list(zip(zero_locations, sigma_zeros))
zero_coordinates

# Given parameters
theta = 0.2
g0 = 0.1
alpha = 2
beta = 1.3

# Equation (3.137)
def g(epsilon, theta, alpha, beta, g0):
    return g0 * (1 + (theta**(-1) - 1) / (1 + (epsilon/alpha)**beta))

```

```
# Generate values for strain
epsilon = np.linspace(0, 1.2, 500) # considering the range of epsilon_0 from the graph

# Calculate stress values from the strain using the provided equation
sigma = g(epsilon, theta, alpha, beta, g0)*epsilon

# Plotting the graph
plt.figure(figsize=(8, 6))
plt.plot(epsilon, sigma, label='σ(ε)')
plt.title('Stress-Strain Curve')
plt.xlabel('Strain ε_0')
plt.ylabel('Stress σ_0')
plt.grid(True)
plt.legend()
plt.show()
```