

УДК 517.958:539.3

О. Чернуха

Ст. наук. співр., д-р техн. наук

А. Торський

Інженер

Центр математичного моделювання
Інституту прикладних проблем
механіки і математики
ім. Я. С. Підстригача НАН України,
м. Львів

МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ ТЕРМОМЕХАНОДИФУЗІЙНИХ ПРОЦЕСІВ РОЗПАДНИХ ЧАСТИНОК У ДВОФАЗНОМУ БАГАТОКОМПОНЕНТНОМУ СЕРЕДОВИЩІ

Ця епістола описує математичну модель процесів розпаду частинки в двофазному середовищі. Вона включає рівняння балансу маси, енергії та імпульсу, а також умови зв'язку між фазами. Модель враховує дифузійні процеси та механічні взаємодії між фазами. Результати моделювання показують, що розпад частинки призводить до утворення складної структури середовища.

математична модель, термомеханодифузія, розпад речовини, двофазне багатоконпонентне середовище, термодинаміка нерівноважних процесів

У багатьох випадках при математичному описі міграції домішкової речовини потрібно враховувати її природну деградацію (розпад) та структуру матеріалу тіла [4, 9, 10]. Зокрема, у радіоактивних паливовмісних матеріалах, що виникли в результаті аварії на четвертому енергоблоці ЧАЕС, унаслідок розпаду утворюються мікродефекти, які істотно впливають на інтенсивність дифузії [1, 9]. У той же час математичне моделювання переносу забруднень безпосередньо пов'язано з певними схематичними уявленнями про пористе середовище, а відповідні прогностичні оцінки, наприклад, захищеності ґрунтових вод, повинні враховувати розпад дифундуючої речовини [3, 8].

Сьогодні ще не існує математичної моделі, яка б на макроскопічному рівні повно описувала як фізичні процеси різної природи у взаємозв'язку, так і структуру матеріалу такого типу об'єктів. Тому в працях [5 — 7] досліджена міграція домішкової речовини в шарі

склоподібного паливовмісного матеріалу в наближенні гетеродифузії двома шляхами, моделі невзаємодіючих дифузійних потоків та дифузії в середовищі з ефективними характеристиками. Такі моделі дають можливість (у певному наближенні) описувати масоперенесення радіоактивних атомів у збурених областях склоподібного паливовмісного матеріалу і поза ними, приймаючи, що атоми знаходяться у фізично різних станах. Радіоактивний розпад радіонуклідів не враховувався.

Мета цієї статті — за допомогою континуально-термодинамічного підходу [2] побудувати математичну модель взаємозв'язаних механічних, теплових і дифузійних процесів з урахуванням розпаду мігруючої речовини типу ланцюгової хімічної реакції.

1. Об'єкт дослідження. Приймемо, що тіло K^* (дискретна сукупність матеріальних частинок) складається з двох фізично різних фаз $K^{*(j)}$ ($j = 1, 2$),

тобто $\mathbf{K}^* = \bigcup_{j=1}^2 \mathbf{K}^{*(j)}$. Кожна з фаз $\mathbf{K}^{*(j)}$ ($j=1,2$) є

багатокомпонентним твердим розчином і утворена частинками основної компоненти (матриці) $\mathbf{K}_1^{*(j)}$ та частинками домішкової речовини $\mathbf{K}_2^{*(j)}$ (рис. 1), які можуть розпадатися (наприклад, внаслідок хімічних реакцій) і утворювати частинки інших домішкових речовин $\mathbf{K}_3^{*(j)}$ і $\mathbf{K}_N^{*(j)}$, причому частинки $\mathbf{K}_N^{*(j)}$ не розпадаються або є нешкідливими. У свою чергу частинки домішки $\mathbf{K}_3^{*(j)}$ розпадаються і утворюють частинки речовини $\mathbf{K}_4^{*(j)}$ і нерозпадні (або нешкідливі) речовини, які віднесемо до $\mathbf{K}_N^{*(j)}$, і т. д., доки на $(N-1)$ -му кроці не отримаємо тільки нерозпадні частинки домішкової

речовини. Тоді $\mathbf{K}^{*(j)} = \bigcup_{i=1}^N \mathbf{K}_i^{*(j)}$. Частинки домішкової

речовини одного хімічного виду, перебуваючи у різних фазах, знаходяться в істотно різних фізичних станах, характеризуючись, зокрема, різною рухливістю (коефіцієнтами дифузії).

Вважаємо, що в умовах нестационарної взаємодії із зовнішнім середовищем, основними нерівноважними

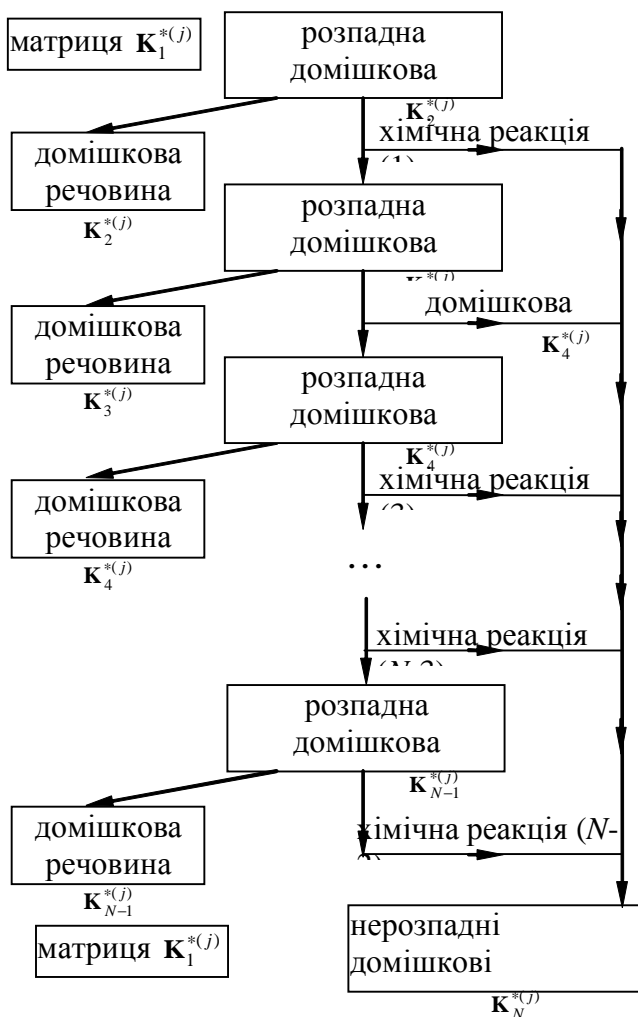


Рис. 1. Схема процесів розпаду домішкових речовин

процесами, що протікають у тілі, є процеси деформації, теплопровідності і дифузії домішкової речовини.

При макроскопічному описі тіло \mathbf{K}^* розглядається як термодинамічна система, яка вкладена в обмежену область евклідового простору \mathbf{x} , що віднесений до прямокутної декартової системи координат. Кожній компоненті тіла (підсистемам частинок $\mathbf{K}_1^{*(1)}$ і $\mathbf{K}_1^{*(2)}$, що утворюють матриці фаз, та частинкам домішки в цих фазах $\mathbf{K}_i^{*(1)}$ і $\mathbf{K}_i^{*(2)}$, $i=2, N$) співставляються у відповідність континууми $\mathbf{K}_i^{(j)}$ ($j=1,2; i=1, N$). Фазам у цілому співставляються континууми центрів мас $\mathbf{K}^{(j)}$ ($j=1,2$) компонент $\mathbf{K}_1^{*(j)}$ і $\mathbf{K}_i^{*(j)}$ ($i=2, N$). Приймається, що процеси деформації і теплопровідності описуються з використанням кінематичних характеристик континуумів $\mathbf{K}^{(j)}$ ($j=1,2$), а процеси дифузії розглядаються як відносний рух точок $K_i^{(j)}$ континуумів $\mathbf{K}_i^{(j)}$ ($j=1,2; i=1, N$) відносно континуумів $\mathbf{K}^{(j)}$ ($j=1,2$).

2. Балансові рівняння. За вихідні співвідношення прийемо закони збереження і балансові рівняння для маси, імпульсу та енергії, які сформулюємо для кожної з фаз. Зміна маси компоненти $m_i^{(j)}$ відбувається за рахунок масових потоків і внутрішніх джерел, тоді рівняння балансу маси i -тої компоненти j -тої фази має вигляд

$$\frac{\partial \rho_i^{(j)}}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho_i^{(j)} \mathbf{v}_i^{(j)}) + w_i^{(j)}, \quad (j=1,2; i=1, N), \quad (1)$$

де $\rho_i^{(j)}$ — густина компоненти i у фазі j ; $\mathbf{v}_i^{(j)}$ — швидкість руху матеріальних точок континууму $\mathbf{K}_i^{(j)}$; $w_i^{(j)}$ — густина внутрішнього джерела (або стоку) компоненти; ∇ — набла-оператор.

Просумуємо (1) за i та врахуємо, що

$$\rho^{(j)}(\mathbf{r}, t) \mathbf{v}^{(j)}(\mathbf{r}, t) = \sum_{i=1}^N \rho_i^{(j)}(\mathbf{r}, t) \mathbf{v}_i^{(j)}(\mathbf{r}, t),$$

тоді отримаємо рівняння балансу сумарної маси фази j

$$\frac{\partial \rho^{(j)}}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho^{(j)} \mathbf{v}^{(j)}). \quad (2)$$

Закон збереження маси компонент (1) з використанням (2) можемо записати у вигляді

$$\rho^{(j)} \frac{d_j C_i^{(j)}}{dt} = -\nabla \cdot \mathbf{J}_i^{(j)} + w_i^{(j)}, \quad \forall i, j, \quad (3)$$

де $C_i^{(j)} = \rho_i^{(j)} / \rho^{(j)}$ — масові концентрації компонент, які задовольняють умову нормування

$$\sum_{i=1}^N C_i^{(j)} = 1; \quad (4)$$

$\mathbf{J}_i^{(j)} = \rho_i^{(j)} (\mathbf{v}_i^{(j)} - \mathbf{v}^{(j)})$ — масовий дифузійний потік i -тої

компоненти j -тої фази; $\frac{d_j}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{v}^{(j)} \cdot \nabla$ — j -та повна

похідна за часом записана з використанням кінематичних характеристик фази j .

Оскільки ми прийняли, що джерелом (стоком) маси компоненти може бути тільки розпад домішкової речовини, то потужність виробництва маси $w_i^{(j)}$ задовольняє такі умови:

$$w_1^{(j)} = 0, \quad \sum_{i=2}^N w_i^{(j)} = 0 \quad \forall j. \quad (5)$$

Рівняння балансу імпульсу для фази в цілому має вигляд

$$\frac{\partial(\rho^{(j)} \mathbf{v}^{(j)})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho^{(j)} \mathbf{v}^{(j)} \otimes \mathbf{v}^{(j)}) = \nabla \cdot \mathcal{G}^{(j)} + \mathbf{F}^{(j)}, \quad (6)$$

де $\mathbf{v}^{(j)} \otimes \mathbf{v}^{(j)}$ — діада, утворена векторами швидкості; $\mathcal{G}^{(j)}$ — тензор напружень Коші у фазі j ; $\mathbf{F}^{(j)} = \sum_i \rho_i^{(j)} \mathbf{g}_i^{(j)}$ — густина масових сил; $\mathbf{g}_i^{(j)} = -\nabla \psi_i^{(j)}$

— масова густина потенціальної і консервативної ($\partial \psi_i^{(j)} / \partial t = 0$) сили; $\psi_i^{(j)}$ — потенціал сил (потенціальна енергія компоненти i фази j).

Помножимо закон збереження маси компонент (1) на скалярний потенціал масових сил $\psi_i^{(j)}$ і врахуємо умову їх консервативності. Тоді знайдемо рівняння балансу потенціальної енергії компоненти. Підсумовуючи записане рівняння за індексом i та означуючи потенціальну енергію фази $\psi^{(j)}$ формулою

$$\rho^{(j)} \psi^{(j)} = \sum_i \rho_i^{(j)} \psi_i^{(j)}, \quad (7)$$

отримаємо рівняння балансу потенціальної енергії фази

$$\frac{\partial(\rho^{(j)} \psi^{(j)})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho^{(j)} \psi^{(j)} \mathbf{v}^{(j)}) = -\nabla \cdot \left(\sum_i \psi_i^{(j)} \mathbf{J}_i^{(j)} \right) - \sum_i \mathbf{J}_i^{(j)} \cdot \mathbf{g}_i^{(j)} - \mathbf{F}_i^{(j)} \cdot \mathbf{v}_i^{(j)} + \sum_{i=1}^N \psi_i^{(j)} w_i^{(j)}. \quad (8)$$

Домножимо скалярно рівняння балансу імпульсу (6) на вектор швидкості $\mathbf{v}^{(j)}$. Використаємо тотожність

$$\nabla \cdot (\mathcal{G}^{(j)} \cdot \mathbf{v}^{(j)}) = \mathbf{v}^{(j)} \cdot (\nabla \cdot \mathcal{G}^{(j)}) + \mathcal{G}^{(j)} : \nabla \otimes \mathbf{v}^{(j)}.$$

Тоді отримаємо рівняння балансу кінетичної енергії

$$\mathbf{v}^{(j)} \cdot \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\rho^{(j)} \mathbf{v}^{(j)2}}{2} \right) + \nabla \cdot \left(\frac{\rho^{(j)} \mathbf{v}^{(j)2}}{2} \mathbf{v}^{(j)} \right) = \nabla \cdot (\mathcal{G}^{(j)} \cdot \mathbf{v}^{(j)}) - \mathcal{G}^{(j)} : \nabla \otimes \mathbf{v}^{(j)} + \mathbf{F}^{(j)} \cdot \mathbf{v}^{(j)}, \quad (9)$$

де символ «:» означає подвійну внутрішню згортку.

Постулюємо, що повна енергія $e^{(j)}$ для кожної фази (з розрахунку на одиницю маси) задається виразом

$$\rho^{(j)} e^{(j)} = \frac{\rho^{(j)} \mathbf{v}^{(j)2}}{2} + \rho^{(j)} \psi^{(j)} + \rho^{(j)} u^{(j)} \quad (10)$$

і задовольняє закон збереження

$$\frac{\partial(\rho^{(j)} e^{(j)})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho^{(j)} e^{(j)} \mathbf{v}^{(j)}) = -\nabla \cdot \mathbf{J}_e^{(j)}, \quad (11)$$

де $u^{(j)}$ — питома внутрішня енергія фази j з розрахунку на одиницю її маси; $\mathbf{J}_e^{(j)}$ — потік повної енергії:

$$\mathbf{J}_e^{(j)} = \mathbf{J}_Q^{(j)} - \mathcal{G}^{(j)} \cdot \mathbf{v}^{(j)} + \sum_i (\psi_i^{(j)} + \mu_i^{(j)}) \mathbf{J}_i^{(j)}; \quad (12)$$

$\mathbf{J}_Q^{(j)}$ — потік енергії у формі тепла у фазі j ; $\mu_i^{(j)}$ — хімічний потенціал компоненти i у фазі j .

Якщо повна енергія фази підпорядковується співвідношенням (10) — (12), тоді, підставляючи в закон збереження повної енергії (11) її означення (10) і вираз для потоку (12) і використовуючи балансові співвідношення для потенціальної (8) та для кінетичної енергій (9), отримуємо рівняння балансу внутрішньої енергії фази $u^{(j)}$:

$$\frac{\partial(\rho^{(j)} u^{(j)})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho^{(j)} u^{(j)} \mathbf{v}^{(j)}) = -\nabla \cdot \mathbf{J}_Q^{(j)} + \mathcal{G}^{(j)} : \nabla \otimes \mathbf{v}^{(j)} - \nabla \cdot \sum_i (\psi_i^{(j)} + \mu_i^{(j)}) \mathbf{J}_i^{(j)} + \sum_i \psi_i^{(j)} w_i^{(j)}. \quad (13)$$

3. Рівняння Гібса. Приймаємо гіпотезу локальної термодинамічної рівноваги. Вважаємо, що стан фізично малої макрочастини ($\delta \mathbf{K}^{*(j)}$) фази j , задається значеннями спряжених макроскопічних параметрів:

$$T^{(j)} - s^{(j)}, \quad \bar{\sigma}_{(j)}^{\alpha\beta} - \varepsilon_{\alpha\beta}^j, \quad \mu_i^{(j)} - C_i^{(j)} \quad (\alpha, \beta = \overline{1,3}), \quad (14)$$

де $T^{(j)}$ — абсолютна температура фази j ; $s^{(j)}$ — масова густина ентропії; $\bar{\sigma}_{(j)}^{\alpha\beta}$ — контраваріантні компоненти тензора напружень Коші у рівновазі.

Шляхом граничного переходу до квазістатичних процесів у рівнянні балансу внутрішньої енергії (13) отримуємо рівняння Гібса для параметрів (14)

$$du^{(j)} = T^{(j)} ds^{(j)} + \frac{1}{\rho^{(j)}} \sum_{\alpha\beta} \bar{\sigma}_{(j)}^{\alpha\beta} d\varepsilon_{\alpha\beta}^{(j)} - \sum_i \mu_i^{(j)} dC_i^{(j)}. \quad (15)$$

Тут $\mu_i^{(j)} = \mu_i^{(j)} - \mu_1^{(j)}$ — відносний хімічний потенціал домішкових частинок у фазі j .

4. Рівняння стану. Якщо внутрішня енергія фази $u^{(j)}$

задана як функція змінних $s^{(j)}, \left\{ \varepsilon_{\alpha\beta}^j \right\}$ та $C_i^{(j)}$:

$$u^{(j)} = u^{(j)} \left(s^{(j)}, \left\{ \varepsilon_{\alpha\beta}^j \right\}, C_i^{(j)} \right),$$

тоді вона є термодинамічним потенціалом стосовно спряжених змінних $T^{(j)}$, $\left\{ \frac{1}{2\rho^{(j)}} \bar{\sigma}^{\alpha\beta} \right\}$ та $\mu_i'^{(j)}$. За означенням повного диференціалу з рівняння Гібса (14) впливають такі рівняння стану:

$$T^{(j)} = \left(\frac{\partial u^{(j)}}{\partial s^{(j)}} \right)_{\left\{ \varepsilon_{\alpha\beta}^j, C_i^{(j)} \right\}},$$

$$\frac{1}{2\rho^{(j)}} \bar{\sigma}^{\alpha\beta} = \left(\frac{\partial u^{(j)}}{\partial \varepsilon_{\alpha\beta}} \right)_{s^{(j)}, C_i^{(j)}},$$

$$\mu_i'^{(j)} = \left(\frac{\partial u^{(j)}}{\partial C_i^{(j)}} \right)_{T^{(j)}, \left\{ \varepsilon_{\alpha\beta}^j \right\}}. \quad (16)$$

Конкретна структура залежностей (16) за макроскопічним описом матеріальної системи може бути встановлена з використанням експериментальних даних або методами фізики твердого тіла.

5. Рівняння балансу ентропії. Домножимо рівняння Гібса (15) на величину $\rho^{(j)}/dt$. В отримане рівняння підставимо співвідношення (1) і (13). Також врахуємо, що

$$\frac{1}{T^{(j)}} \nabla \cdot \mathbf{J}_Q^{(j)} = \nabla \cdot \frac{\mathbf{J}_Q^{(j)}}{T^{(j)}} - \mathbf{J}_Q^{(j)} \cdot \nabla \frac{1}{T^{(j)}},$$

$$\nabla \cdot \frac{1}{T^{(j)}} = -\nabla \cdot \frac{1}{T^{(j)2}} \mathbf{J}_Q^{(j)},$$

$$\mu_i'^{(j)} \nabla \cdot \mathbf{J}_i^{(j)} = \nabla \cdot (\mu_i'^{(j)} \mathbf{J}_i^{(j)}) - \mathbf{J}_i^{(j)} \cdot \nabla \mu_i'^{(j)}.$$

Знехтуємо ефектами в'язкості і прийемо $\sigma_{(j)}^{\alpha\beta} = \bar{\sigma}_{(j)}^{\alpha\beta}$. У результаті маємо:

$$\rho^{(j)} \frac{ds^{(j)}}{dt} = -\nabla \cdot \frac{\mathbf{J}_Q^{(j)}}{T^{(j)}} + \mathbf{J}_Q^{(j)} \cdot \nabla \frac{1}{T^{(j)}} +$$

$$+ \frac{1}{T^{(j)}} \left[\sum_i \mathbf{J}_i^{(j)} \cdot (\mathbf{F}_i^{(j)} - \nabla \mu_i'^{(j)}) - \right.$$

$$\left. - \sum_i \Psi_i^{(j)} w_i^{(j)} - \sum_i \mu_i'^{(j)} w_i^{(j)} \right], \quad (17)$$

де $\mathbf{F}_i^{(j)} = -\nabla \Psi_i^{(j)}$ — масова потенціальна сила, що діє на i -ту компоненту j -тої фази.

Позначимо $\mathbf{J}_s^{(j)} = \mathbf{J}_Q^{(j)} / T^{(j)}$ — потік ентропії у фазі

j ; $\mathbf{X}_Q^{(j)} = -\frac{1}{T^{(j)}} \nabla T^{(j)}$ — векторна термодинамічна сила,

що обумовлює теплопровідність і є спряженою до векторного потоку тепла $\mathbf{J}_Q^{(j)}$; $\mathbf{X}_i^{(j)} = -\nabla (\mu_i'^{(j)} + \Psi_i^{(j)})$ — векторні термодинамічні сили дифузії, спряжені до векторних дифузійних потоків маси $\mathbf{J}_i^{(j)}$.

Розглянемо дві останні суми рівності (17). Оскільки $\Psi_1^{(j)} = \Psi_1^{(j)} = \dots = \Psi_N^{(j)} = \Psi^{(j)}$, товрахуємо умови (5), яким задовольняють потужності виробництва маси $w_i^{(j)}$, і отримаємо

$$\sum_i \Psi_i^{(j)} w_i^{(j)} = \Psi^{(j)} \sum_i w_i^{(j)} = 0.$$

Крім цього, потужності виробництва маси $w_i^{(j)}$ для компонент $i = 2, N$ підпорядковуються умовам:

$$w_i^{(j)} = w_{i-1}^{(j)} + w_{i+1}^{(j)} + w_{iN}^{(j)}, \quad w_{21}^{(j)} = 0,$$

$$w_{i+1}^{(j)} = -w_{i+1}^{(j)} \quad (i = 2, N-1),$$

$$w_{i\pm l}^{(j)} = 0 \quad \text{для } l \geq 2; \quad w_i^{(j)} = 0 \quad \text{для } \forall i;$$

$$w_{iN}^{(j)} = -w_{Ni}^{(j)}, \quad w_N^{(j)} = \sum_{i=2}^{N-1} w_{Ni}^{(j)} = -\sum_{i=2}^{N-1} w_{iN}^{(j)}.$$

Тоді маємо

$$\sum_i \mu_i'^{(j)} w_i^{(j)} = -\sum_{i=2}^{N-1} (\mu_{i+1}'^{(j)} - \mu_i'^{(j)}) w_{i+1}^{(j)} - \sum_{i=2}^{N-1} (\mu_N'^{(j)} - \mu_i'^{(j)}) w_{iN}^{(j)}.$$

Таким чином, $w_{ik}^{(j)}$, $w_{iN}^{(j)}$ ($i, k = \overline{2, N-1}$) — скалярні масові потоки, які характеризують розпад частинок домішкової речовини; $X_i^{(j)} = \mu_{i+1}'^{(j)} - \mu_i'^{(j)}$, $X_{Ni}^{(j)} = \mu_N'^{(j)} - \mu_i'^{(j)}$ — скалярні термодинамічні сили, спряжені до масових потоків $w_{ik}^{(j)}$, $w_{iN}^{(j)}$ відповідно.

Тоді рівняння (17) перепишемо у вигляді

$$\rho^{(j)} \frac{ds^{(j)}}{dt} = -\nabla \cdot \mathbf{J}_s^{(j)} + \frac{1}{T^{(j)}} \left[\sum_i w_{i+1}^{(j)} X_i^{(j)} + \right.$$

$$\left. + \sum_i w_{Ni}^{(j)} X_N^{(j)} + \mathbf{J}_Q^{(j)} \cdot \mathbf{X}_Q^{(j)} + \sum_k \mathbf{J}_k^{(j)} \cdot \mathbf{X}_k^{(j)} \right],$$

або

$$\rho^{(j)} \frac{ds^{(j)}}{dt} = -\nabla \cdot \mathbf{J}_s^{(j)} + \frac{\sigma_s^{(j)}}{T^{(j)}}, \quad (18)$$

де $\sigma_s^{(j)} = \sum_i w_{i+1}^{(j)} X_i^{(j)} + \sum_i w_{Ni}^{(j)} X_N^{(j)} + \mathbf{J}_Q^{(j)} \cdot \mathbf{X}_Q^{(j)} +$

$+ \sum_k \mathbf{J}_k^{(j)} \cdot \mathbf{X}_k^{(j)} \geq 0$ — потужність виробництва ентропії.

6. Кінетичні співвідношення. Ми маємо сукупність спряжених величин — термодинамічні сили і відповідні термодинамічні потоки:

$$X_i^{(j)} \div w_{i+1}^{(j)}, \quad X_{Ni}^{(j)} \div w_{Ni}^{(j)}, \quad \mathbf{X}_Q^{(j)} \div \mathbf{J}_Q^{(j)}, \quad \mathbf{X}_k^{(j)} \div \mathbf{J}_k^{(j)}.$$

У вихідному рівноважному стані сукупність спряжених термодинамічних потоків і сил приймає значення:

$$X_{i(0)}^{(j)} \div w_{ii+1}^{(j)}, X_{Ni(0)}^{(j)} \div w_{Ni}^{(j)},$$

$$\dot{X}_{Q(0)}^{(j)} \div \dot{J}_{Q(0)}^{(j)}, \dot{X}_{k(0)}^{(j)} \div \dot{J}_{k(0)}^{(j)}.$$

Вважаємо, що термодинамічні потоки є функціями термодинамічних сил, структура функціональних залежностей яких задовольняє другий закон термодинаміки та умови взаємності Онзагера. Тобто є справедливими:

I. Функціональні залежності

$$w_{ii+1}^{(j)} = w_{ii+1}^{(j)}(X_{i=2}^{(j)}, \dots, X_{i=N-1}^{(j)},$$

$$X_{Ni=2}^{(j)}, \dots, X_{Ni=N-1}^{(j)}, X_Q^{(j)}, X_{k=2}^{(j)}, \dots, X_{k=N}^{(j)}),$$

$$w_{Ni}^{(j)} = w_{Ni}^{(j)}(X_{i=2}^{(j)}, \dots, X_{i=N-1}^{(j)},$$

$$X_{Ni=2}^{(j)}, \dots, X_{Ni=N-1}^{(j)}, X_Q^{(j)}, X_{k=2}^{(j)}, \dots, X_{k=N}^{(j)}),$$

$$J_Q^{(j)} = J_Q^{(j)}(X_{i=2}^{(j)}, \dots, X_{i=N-1}^{(j)},$$

$$X_{Ni=2}^{(j)}, \dots, X_{Ni=N-1}^{(j)}, X_Q^{(j)}, X_{k=2}^{(j)}, \dots, X_{k=N}^{(j)}),$$

$$J_k^{(j)} = J_k^{(j)}(X_{i=2}^{(j)}, \dots, X_{i=N-1}^{(j)},$$

$$X_{Ni=2}^{(j)}, \dots, X_{Ni=N-1}^{(j)}, X_Q^{(j)}, X_{k=2}^{(j)}, \dots, X_{k=N}^{(j)}). \quad (19)$$

Вирази (19) записані для скалярних компонент відповідних векторних потоків і сил.

II. Другий закон термодинаміки у вигляді

$$\sigma_s^{(j)} = \sum_i w_{ii+1}^{(j)} X_i^{(j)} + \sum_i w_{Ni}^{(j)} X_{Ni}^{(j)} + \dot{J}_Q^{(j)} \cdot \dot{X}_Q^{(j)} +$$

$$+ \sum_k \dot{J}_k^{(j)} \cdot \dot{X}_k^{(j)} \geq 0. \quad (20)$$

III. Умови взаємності Онзагера

$$\frac{\partial J_l^{(j)}}{\partial X_n^{(j)}} = \frac{\partial J_n^{(j)}}{\partial X_l^{(j)}}, \quad j = 1, 2; \quad l, n = Q, i, k, \quad \forall i, k. \quad (21)$$

Враховуючи вигляд функціональної залежності (19) виробництва ентропії від термодинамічних потоків і сил, можна ввести кінетичний потенціал

$$\Phi = \Phi(X_i^{(j)}, X_{Ni}^{(j)}, \dot{X}_Q^{(j)}, \dot{X}_k^{(j)}), \quad (22)$$

диференціал якого є таким:

$$d\Phi = \sum_i w_{ii+1}^{(j)} \cdot dX_i^{(j)} + \sum_i w_{Ni}^{(j)} \cdot dX_{Ni}^{(j)} +$$

$$+ \dot{J}_Q^{(j)} \cdot d\dot{X}_Q^{(j)} + \sum_k \dot{J}_k^{(j)} \cdot d\dot{X}_k^{(j)}. \quad (23)$$

Тут похідні означені формулами:

$$\frac{\partial \dot{J}}{\partial \dot{X}} \equiv \dot{i} \otimes \frac{\partial \dot{J}}{\partial X_0^\alpha}, \quad \dot{X} \equiv \dot{i} X_0^\alpha,$$

де $\dot{i} = g_0^{\alpha\beta} \dot{i}^\beta$ — контраваріантні базисні вектори; $g_0^{\alpha\beta}$ —

контраваріантні компоненти метричного тензора декартової системи координат.

Співвідношення (22) і (23) дають можливість записати загальну форму кінетичних рівнянь у вигляді:

$$w_{ii+1}^{(j)} = \frac{\partial \Phi}{\partial X_{ii+1}^{(j)}}, \quad w_{Ni}^{(j)} = \frac{\partial \Phi}{\partial X_{Ni}^{(j)}},$$

$$\dot{J}_Q^{(j)} = \frac{\partial \Phi}{\partial \dot{X}_Q^{(j)}}, \quad \dot{J}_k^{(j)} = \frac{\partial \Phi}{\partial \dot{X}_k^{(j)}}. \quad (24)$$

Зауважимо, що у вихідному рівноважному однорідному стані термодинамічні сили і потоки дорівнюють нулю:

$$X_{ii+1}^{(j)} = X_{Ni}^{(j)} = \dot{X}_{Qi}^{(j)} = \dot{X}_k^{(j)} = 0,$$

$$w_{ii+1}^{(j)} = w_{Ni}^{(j)} = \dot{J}_Q^{(j)} = \dot{J}_k^{(j)} = 0. \quad (25)$$

Зазначимо також, що залежність (22) може бути встановлена на основі експериментальних даних або визначена методами фізики твердого тіла.

Записані співвідношення складають повну систему рівнянь для знаходження введених у розгляд величин.

7. Лінійні рівняння стану і кінетичні співвідношення. Зазначимо, що, якщо вільна енергія Гельмгольца $f^{(j)} = u^{(j)} - T^{(j)} s^{(j)}$, яка визначена в просторі температури $T^{(j)}$, коваріантних компонент тензора

деформації $\{\varepsilon_{\alpha\beta}^{(j)}\}$ і концентрації $C_i^{(j)}$, тобто

$$f^{(j)} = f^{(j)}\left(T^{(j)}, \left\{\varepsilon_{\alpha\beta}^{(j)}\right\}, \left\{C_i^{(j)}\right\}\right),$$

є дійсною тричі диференційованою функцією температури, коваріантних компонент тензора деформації та концентрацій, тому справедливими є такі лінійні рівняння стану:

$$s^{(j)} - s_0^{(j)} = (T_0^{(j)})^{-1} c_V^{(j)} t^{(j)} + \sum_{\alpha,\beta} \alpha_{(j)}^{\alpha\beta} \varepsilon_{\alpha\beta}^{(j)} - \sum_i d_i^{(j)} c_i^{(j)},$$

$$\frac{\bar{\sigma}^{\alpha\beta}}{\rho^{(j)}} = \alpha_{(j)}^{\alpha\beta} t^{(j)} + \beta_{(j)}^{\alpha\beta} \varepsilon_{\alpha\beta}^{(j)} + \sum_i \gamma_{i(j)}^{\alpha\beta} c_i^{(j)},$$

$$\mu_i^{(j)} - \mu_{i0}^{(j)} = d_i^{(j)} t^{(j)} + \sum_{\alpha,\beta} \gamma_{i(j)}^{\alpha\beta} \varepsilon_{\alpha\beta}^{(j)} + d_i^{(j)} c_i^{(j)}. \quad (26)$$

Тут $t^{(j)} = T^{(j)} - T_0^{(j)}$ — відхилення температури; $c_i^{(j)} = C_i^{(j)} - C_{i0}^{(j)}$ — відхилення концентрації, і так означено матеріальні характеристики системи:

$$c_V^{(j)} = T_0^{(j)} \left(\frac{\partial s^{(j)}}{\partial T^{(j)}} \right)_{(0)}, \quad d_i^{(j)} = \left(\frac{\partial \mu_i^{(j)}}{\partial C_i^{(j)}} \right)_{(0)},$$

$$d_{ii}^{(j)} = T_0^{(j)} \left(\frac{\partial \mu_i^{(j)}}{\partial T^{(j)}} \right)_{(0)}, \quad \alpha_{(j)}^{\alpha\beta} = \left(\frac{\partial (\sigma_{(j)}^{\alpha\beta} / \rho^{(j)})}{\partial T^{(j)}} \right)_{(0)},$$

$$\beta_{(j)}^{\alpha\beta} = \left(\frac{\partial (\sigma_{(j)}^{\alpha\beta} / \rho^{(j)})}{\partial \varepsilon_{\alpha\beta}^{(j)}} \right)_{(0)}, \quad \gamma_{i(j)}^{\alpha\beta} = \left(\frac{\partial \mu_i^{(j)}}{\partial (\sigma_{(j)}^{\alpha\beta} / \rho^{(j)})} \right)_{(0)}.$$

Для ізотропного тіла кінетичний потенціал Φ (22) є дійсною тричі диференційованою функцією термодинамічних сил.

Означимо кінетичні матеріальні характеристики (коефіцієнти) фаз так:

$$\lambda_{ii}^{(j)} = \left(\frac{\partial w_i^{(j)}}{\partial X_i^{(j)}} \right)_{(0)}, \quad \lambda_{NN}^{(j)} = \left(\frac{\partial w_{Ni}^{(j)}}{\partial X_{Ni}^{(j)}} \right)_{(0)},$$

$$\lambda_{iN}^{(j)} = \left(\frac{\partial w_i^{(j)}}{\partial X_{Ni}^{(j)}} \right)_{(0)} = \left(\frac{\partial w_{Ni}^{(j)}}{\partial X_i^{(j)}} \right)_{(0)}, \quad L_{QQ}^{(j)} = \left(\frac{\partial J_Q^{(j)}}{\partial X_Q^{(j)}} \right)_{(0)},$$

$$L_{kk}^{(j)} = \left(\frac{\partial J_k^{(j)}}{\partial X_k^{(j)}} \right)_{(0)}, \quad L_{Qk}^{(j)} = \left(\frac{\partial J_Q^{(j)}}{\partial X_k^{(j)}} \right)_{(0)} = \left(\frac{\partial J_k^{(j)}}{\partial X_Q^{(j)}} \right)_{(0)}.$$

Застосовуючи принцип Кюрі і враховуючи, що в рівновазі $w_i^{(j)} = w_{Ni}^{(j)} = J_Q^{(j)} = J_k^{(j)} = 0$, з формул (24) отримаємо лінійні кінетичні співвідношення:

$$\begin{aligned} w_{i+1}^{(j)} &= \lambda_{ii}^{(j)} X_i^{(j)} + \sum_l \lambda_{iN}^{(j)} X_{Ni}^{(j)}, \\ w_{iN}^{(j)} &= \lambda_{NN}^{(j)} X_{Ni}^{(j)} + \sum_l \lambda_{iN}^{(j)} X_l^{(j)}, \\ J_Q^{(j)} &= L_{QQ}^{(j)} \dot{X}_Q^{(j)} + \sum_k L_{Qk}^{(j)} \dot{X}_k^{(j)}, \\ J_k^{(j)} &= L_{Qk}^{(j)} \dot{X}_Q^{(j)} + \sum_l L_{kl}^{(j)} \dot{X}_l^{(j)}. \end{aligned} \quad (27)$$

8. Ключова система рівнянь моделі. Частина із записаних рівнянь є кінцевими співвідношеннями, зокрема, рівняння стану і кінетичні рівняння, які дають можливість подати ряд функцій шуканого розв'язку, наприклад, $s^{(j)}$, $\mu_i^{(j)}$, $\sigma_{(j)}^{\alpha\beta}$, $w_{i+1}^{(j)}$, $w_{iN}^{(j)}$, $J_Q^{(j)}$, $J_k^{(j)}$ через спряжені $t^{(j)}$, $\varepsilon_{\alpha\beta}^{(j)}$, $c_i^{(j)}$, $X_i^{(j)}$, $X_{iN}^{(j)}$, $\dot{X}_Q^{(j)}$, $\dot{X}_k^{(j)}$. Це дає можливість зменшити кількість шуканих функцій невідомого розв'язку. Вибір мінімальної кількості функцій, які називають розв'язуючими, потрібних для подання повного розв'язку, неоднозначний і залежить від специфіки задачі та потреби максимального спрощення її математичної постановки. Виберемо надалі в якості розв'язуючих функцій $t^{(j)}$, $\rho^{(j)}$, $\mathbf{u}^{(j)}$, $c_i^{(j)}$, де $\mathbf{u}^{(j)}$ — вектор переміщення точок континуумів фаз ($j=1, 2$).

Підставимо у кінетичні рівняння для термодинамічних потоків (27) вирази для термодинамічних сил. Хімічний потенціал виразимо через розв'язуючі функції за допомогою лінійних рівнянь стану (26). Прийемо

матеріальні характеристики фаз незалежними від координат.

У співвідношення балансу концентрації компонент (3) підставимо вираз для термодинамічного потоку домішки, тоді отримаємо рівняння дифузії у вигляді

$$\rho^{(j)} \frac{d_j c_i^{(j)}}{dt} = \nabla \cdot \left(\bar{L}_{Qi}^{(j)} \nabla T^{(j)} + \sum_k \bar{L}_{iek}^{(j)} \nabla \varepsilon + \sum_k \bar{L}_{ik}^{(j)} \nabla c_k^{(j)} \right) - \bar{d}_i^{(j)} t^{(j)} - \bar{\gamma}^{(j)} \varepsilon + \bar{\lambda}_{i-1}^{(j)} c_{i-1}^{(j)} - \bar{\lambda}_i^{(j)} c_i^{(j)} - \bar{\lambda}_{iN}^{(j)} c_i^{(j)}. \quad (28)$$

Приймаємо коефіцієнти $\bar{L}_{mQ}^{(j)}$, $\bar{L}_{m\varepsilon}^{(j)}$, $\bar{L}_{mm}^{(j)}$ незалежними від координат і нехтуємо конвективною складовою, тобто $d_j/dt \equiv \partial/\partial t$, тоді

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_i^{(j)}}{\partial t} &= D_t \Delta T^{(j)} + D_\varepsilon \Delta \varepsilon + D \Delta c^{(j)} - \bar{d}_i^{(j)} t^{(j)} - \bar{\gamma}^{(j)} \varepsilon +, \\ &+ \bar{\lambda}_{i-1}^{(j)} c_{i-1}^{(j)} - \bar{\lambda}_i^{(j)} c_i^{(j)} - \bar{\lambda}_{iN}^{(j)} c_i^{(j)}, \end{aligned}$$

де $D_t = \bar{L}_{mQ}^{(j)} / \rho^{(j)}$, $D_\varepsilon = \bar{L}_{m\varepsilon}^{(j)} / \rho^{(j)}$, $D = \bar{L}_{mm}^{(j)} / \rho^{(j)}$ — коефіцієнти дифузії.

Якщо ж знехтуємо впливом теплових і механічних процесів на масоперенос, а також перехресними ефектами, то отримаємо рівняння:

$$\begin{aligned} \rho^{(1)} \left[\frac{\partial c_i^{(1)}}{\partial t} + \mathbf{v}_i^{(1)} \cdot \nabla c_i^{(1)} \right] &= \nabla \cdot \left(\bar{L}_{ii}^{(1)} \nabla c_i^{(1)} \right) + \\ &\bar{\lambda}_{i-1}^{(1)} c_{i-1}^{(1)} - \bar{\lambda}_i^{(1)} c_i^{(1)} - \bar{\lambda}_{iN}^{(1)} c_i^{(1)}, \quad \mathbf{r} \in (\mathbf{X}^{(1)}); \\ \rho^{(2)} \left[\frac{\partial c_i^{(2)}}{\partial t} + \mathbf{v}_i^{(2)} \cdot \nabla c_i^{(2)} \right] &= \nabla \cdot \left(\bar{L}_{ii}^{(2)} \nabla c_i^{(2)} \right) + \\ &\bar{\lambda}_{i-1}^{(2)} c_{i-1}^{(2)} - \bar{\lambda}_i^{(2)} c_i^{(2)} - \bar{\lambda}_{iN}^{(2)} c_i^{(2)}, \quad \mathbf{r} \in (\mathbf{X}^{(2)}), \end{aligned}$$

які враховують конвективне перенесення.

Зазначимо, що частинки скелету є нерухомими та не змінюють свій стан. Концентрації частинок скелету у фазі 1 і 2 можна визначити з умови нормування (4). Також враховано, що хімічні реакції, які призвели до розпаду домішкових речовин є незворотними.

Рівняння теплопровідності отримуємо з рівняння балансу ентропії (18), підставляючи до нього вираз для густини ентропії з рівнянь стану (26) і потоку тепла з кінетичних рівнянь (27). Беручи до уваги, що

$$\frac{\partial (\rho^{(j)} s^{(j)})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho^{(j)} s^{(j)} \mathbf{v}^{(j)}) = \rho^{(j)} \frac{d_j s^{(j)}}{dt},$$

і приймаючи матеріальні характеристики незалежними від часу, знайдемо

$$\frac{\rho^{(j)} c_V^{(j)} d_j T^{(j)}}{T_0^{(j)} dt} + \rho^{(j)} \alpha^{(j)} \frac{d_j \varepsilon^{(j)}}{dt} - \rho^{(j)} \sum_i d_{ii}^{(j)} \frac{d_j c_i^{(j)}}{dt} =$$

$$= \mathbf{r} \cdot \left(\kappa^{(j)} \nabla T^{(j)} + \kappa_{\varepsilon}^{(j)} \nabla \varepsilon + \sum_i \kappa_i^{(j)} \nabla c_i^{(j)} \right) + Q_n, \quad (29)$$

де $Q_n = \sigma_s^{(j)} (\nabla T^{(j)}, \nabla \varepsilon, \nabla c_i^{(j)}) / T^{(j)}$ — некомпенсоване тепло, $\kappa = \bar{L}_{QQ}^{(j)} / T^{(j)}$, $\kappa_{\varepsilon} = \bar{L}_{Q\varepsilon}^{(j)} / T^{(j)}$, $\kappa_m = \bar{L}_{Qm}^{(j)} / T^{(j)}$ — коефіцієнти теплопровідності.

Рівняння нерозривності має вигляд

$$\frac{1}{\rho^{(j)}} \frac{d_j \rho^{(j)}}{dt} = -\mathbf{r} \cdot \mathbf{v}^{(j)}. \quad (30)$$

Рівняння для визначення переміщення $\mathbf{u}^{(j)}$ отримуємо з рівняння балансу імпульсу (6), рівнянь стану (26) та кінематичних залежностей.

Диференціальні рівняння (28) — (30) складають ключову систему рівнянь моделі механотермодифузії розпадної речовини у двофазних багатокомпонентних системах, яка є базовою для постановки відповідних контактних-крайових задач, зокрема, і для тіл з випадковою неоднорідною структурою.

Висновки. Побудована математична модель взаємозв'язаних теплових, механічних і дифузійних процесів з урахуванням розпаду типу хімічних реакцій домішкової речовини в двофазному багатокомпонентному середовищі. При цьому були використані уявлення, підходи і методи термодинаміки нерівноважних процесів та механіки суцільного середовища.

Сформульовано рівняння балансу маси компоненти і сумарної маси фази, записаний закон збереження імпульсу для фази в цілому та отримано балансові співвідношення для потенціальної і кінетичної енергій. Вираз для повної енергії постулюється, і на цій основі отримано рівняння балансу внутрішньої енергії фази. Прийнята гіпотеза локальної термодинамічної рівноваги та отримано рівняння Гібса для заданої термодинамічної системи шляхом граничного переходу до квазістатичних процесів у рівнянні балансу внутрішньої енергії. Побудовані нелінійні рівняння стану, якщо внутрішня енергія фази є функцією змінних ентропії фази, тензора деформації і концентрацій компонент. Отримано рівняння балансу ентропії. Введено кінетичний потенціал та отримано нелінійні кінетичні співвідношення.

Лінійні рівняння стану отримані за умови, що вільна енергія Гельмгольца є тричі диференційованою функцією температури, коваріантних компонент тензора деформації та концентрацій, і лінійні кінетичні співвідношення за умови, що кінетичний потенціал є тричі диференційованою функцією термодинамічних сил. Побудовано ключову систему рівнянь термомеханодифузії у двофазному багатокомпонентному тілі у випадку вибору в якості розв'язуючих функцій температури фази, густини фази, вектора переміщення точок континууму фаз та концентрації домішкових розпадних компонент.

1. Барьяхтар В.Г., Гончар В.В., Жидков А.В., Ключников А.А. Радиационные повреждения в лавообразных топливосодержащих материалах объекта «Укрытие» — Чернобыль, 1998. — 18 с. (Препр. / НАН Украины. МНТЦ «Укрытие»; 98-12).

2. Бурак Я.Й., Чапля Є.Я., Чернуха О.Ю. Континуально-термодинамічні моделі механіки твердих розчинів. — К.: Наук. думка, 2006. — 272 с.

3. Бэр Я., Заславски Д., Ирмей С. Физико-математические основы фильтрации воды. — М.: Мир, 1971. — 451 с.

4. Каспаров В.А., Зварич С.И., Процак В.П., Журба М.А. Кинетика растворения чернобыльских топливных частиц. I. Растворение топливных частиц в естественных условиях в почве // Радиохимия. — 2000. — 42, №6. — С. 533—541.

5. Токарчук М., Жаліло А., Чапля Є., Чернуха О. Кінетика переносу радіонуклідів у склоподібних радіоактивно збуджених матеріалах // Фізико-математичне моделювання та інформаційні технології. — 2005. — Вип. 2. — С. 87—99.

6. Токарчук М., Чапля Є.Я., Чернуха О.Ю., Гончарук В.С. Математичні моделі міграції радіонуклідів у лавоподібних паливовмістких матеріалах // Машинознавство. — 2006. — №2 (104). — С. 23—29.

7. Торський А.Р. Гетеродифузія домішки в шарі склоподібного паливовмісного матеріалу // Моделювання та інформаційні технології. Зб. наук. праць. — 2007. — Вип. 42. — С. 42—50.

8. Фрид Дж. Загрязнение подземных вод. — М.: Недра, 1981. — 304 с.

9. Юхновський І.Р., Кобрин О.С., Токаревський В.В., Токарчук М.В. Проблеми взаємодії води з паливовмісними масами в об'єкті «Укриття» ЧАЕС // Журнал фізичних досліджень. — 1997. — Т. 1. — Число 2. — С. 169—180.

10. Baryakhtar V., Gonchar V., Zhidkov A. Radiation damages and self-sputtering of high-radioactive dielectrics: spontaneous emission of submicronic dust particles // Condens. Matt. Phys. — 2002. — Vol. 5. — No. 3 (31). — P. 1—23.

Робота виконана за часткової підтримки Державного фонду фундаментальних досліджень МОН України (Ф25/95-2009, ДР № 0108U006606).

Отримана 16.05.08

O. Chernuha, A. Torskyj

A mathematical model of termomechanodiffusive processes of decay particles in a two-phase multicomponent medium

Pidstryhach Institute for Applied Problems of Mechanics and Mathematics National Academy of Sciences of Ukraine, Lviv, Ukraine

In the paper a mathematical model of coupled thermal, mechanical and diffusive processes accompanied by decay of migrating substance of type chain chemical reactions is constructed in a two-phase multicomponent medium by the continual-thermodynamical approach. A key set of equations is constructed for thermal mechanodiffusion in a two-phase multicomponent body in the case of choice of a phase temperature, phase density, vector of phase continuum points displacements and concentrations of admixture decaying component as solving functions.