УДК 539.3

Модель термопружного твердого розчину з урахуванням необоротності та інерції локального зміщення маси

Ольга Грицина

д. ф.-м. н., с. н. с., Центр математичного моделювання ІППММ ім. Я. С. Підстригача НАН України, вул. Дж. Дудаєва, 15, Львів, 79005; e-mail: gryt@cmm.lviv.ua

*У межах континуально-феноменологічного підходу сформульовано замкнену систему рівнянь градієнтного типу математичної моделі термопружних хімічно інертних **n**-компонентних твердих розчинів. Модель враховує взаємозв'язок процесів деформування, теплопровідності, дифузії та локального зміщення маси. Показано, що наслідком врахування необоротності та інерції локального зміщення маси є реологічні визначальні співвідношення. Розроблена теорія може бути використана для вивчення динаміки формування приповерхневої неоднорідності фізико-механічних полів у твердих розчинах, а також дослідження зв'язаних процесів за високоградієнтної зовнішньої дії (високочастотних хвиль, зосереджених чинників тощо).*

Ключові слова: градієнтна модель, взаємозв'язані процеси, термопружний твердий розчин, локальне зміщення маси, необоротне зміщення маси, інерційність.

Вступ. Уперше локальне зміщення маси під час розгляду термопружних систем враховано у праці Я. Й. Бурака [1]. У розвиток ідей, закладених там, пов'язавши локальне зміщення маси зі зміною структури фізично малого елемента тіла, у праці [2] було побудовано градієнтного типу математичну модель деформівного твердого розчину, фазовий простір параметрів стану якої розширено двома парами додаткових параметрів стану, зумовлених локальним зміщенням маси. Ця модель дозволила описати вплив приповерхневих та масштабних ефектів на закономірності розподілу домішок у твердих розчинах. Однак у силу нехтування кінетичною енергією локального зміщення маси та припущення про оборотність цього процесу, вона не передбачала можливості вивчення перехідних режимів формування приповерхневої неоднорідності. Згадані припущення також наклали певні обмеження на ефективність використання одержаних співвідношень для дослідження полів у твердих розчинах за дії швидкозмінних навантажень, у тому числі високочастотних хвиль, зосереджених чинників тощо.

У праці [3] сформульовано базові співвідношення градієнтної математичної моделі n-компонентного твердого розчину з урахуванням необоротності локального зміщення маси. Метою пропонованого дослідження є розвиток модельних уявлень про процес деформування термопружних твердих розчинів з урахуванням як необоротності, так і інерції локального зміщення маси.

1. Об'єкт дослідження

Розглядаємо ізотропне тіло, яке є багатокомпонентним хімічно інертним твердим розчином, що складається з підсистем скелета (підсистема n) та домішок (підсистеми 1, … $(n-1)$). Вважаємо, що тіло займає область (V) евклідового простору та обмежене гладкою поверхнею (Σ). Під дією зовнішніх навантажень у ньому поряд із процесами деформування й теплопровідності відбувається перерозподіл маси компонент твердого розчину, наслідком чого є дифузійні потоки маси $\mathbf{J}_m^k$ $\left(k=\overline{1,n-1}\right)$, які пов'язані з перенесенням домішок відносно центра маси фізично малого елемента тіла. Тут і надалі, величини, що відповідають підсистемам домішок, будемо відзначати верхнім індексом k $\left(k=\overline{1,n-1}\right)$, а величини, пов'язані з підсистемою скелета (розчинника) — індексом n. Врахуємо також, що у твердих розчинах можуть реалізуватися інші механізми масоперенесення. Наприклад, якщо молекули твердого розчину характеризуються несиметричною структурою, то прискорений рух тіла призведе до поворотів таких молекул, що відповідатиме потоку маси $\mathbf{J}_{ms}^n$ у них. Потоки маси недифузійної та неконвективної природи, спричинені змінами структури фізично малого елемента тіла, спостерігають також у приповерхневих областях новоутворених поверхонь. Під час побудови математичної моделі термопружних твердих розчинів будемо враховувати потоки маси такої природи.

2. Балансові співвідношення

2.1. Рівняння балансу наведеної маси. Для опису процесу локального зміщення маси формулами

$$\boldsymbol{\Pi}_m^n\left(\mathbf{r},t\right)=\int_0^t \mathbf{J}_{ms}^n\left(\mathbf{r},t'\right)dt' \quad \Rightarrow \quad \mathbf{J}_{ms}^n=\frac{\partial \boldsymbol{\Pi}_m^n}{\partial t} \tag{1}$$

$$\int_{(V)} \boldsymbol{\Pi}_m^n dV=\int_{(V)} \rho_{m\pi}^n \,\mathbf{r}\, dV\,. \tag{2}$$

означимо вектор $\boldsymbol{\Pi}_m^n$ зміщення маси скелета та густину $\rho_{m\pi}^n\left(\mathbf{r},\,t\right)$ наведеної маси скелета [2, 3]. Тут $\mathbf{r}$ — радіус-вектор, t — час.

Як наслідок із формули (2) маємо [4]

$$\rho_{m\pi}^n=-\nabla\cdot\boldsymbol{\Pi}_m^n, \tag{3}$$

де ∇ — оператор Ґамільтона.

Якщо співвідношення (3) продиференціювати за часом і врахувати формулу (1), то одержимо рівняння

$$\frac{\partial \rho_{m\pi}^n}{\partial t}+\nabla\cdot\mathbf{J}_{ms}^n=0\,, \tag{4}$$

яке має форму закону збереження наведеної маси скелета [2, 3].

2.2. Рівняння балансу маси. Для опису процесу масоперенесення введемо скалярні поля хімічних потенціалів $\mu_k(\mathbf{r}, t)$, густин $\rho_k(\mathbf{r}, t)$ і векторні поля дифузійних потоків маси $\mathbf{J}_m^k(\mathbf{r}, t)$ $\left(k=\overline{1,n}\right)$ компонент твердого розчину. Поряд із континуумами скелета та домішок введемо також у розгляд континуум центрів мас, який характеризуватимемо вектором $\mathbf{v}(\mathbf{r}, t)$ швидкості та густиною $\rho(\mathbf{r}, t)$ (масою твердого розчину в одиниці об'єму). Означимо [3, 5]

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \sum_{k=1}^{n} \rho_k(\mathbf{r}, t). \tag{5}$$

$$\mathbf{v} = \frac{1}{\rho}\left(\sum_{k=1}^{n} \rho_k \mathbf{v}_k + \frac{\partial \mathbf{\Pi}_m^n}{\partial t}\right). \tag{6}$$

Рівняння балансу маси континууму центрів мас та домішок запишемо так [3]

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{v}) = 0. \tag{7}$$

$$\rho \frac{dC_k}{dt} + \nabla \cdot \mathbf{J}_m^k = 0, \quad k = \overline{1, n-1}. \tag{8}$$

Тут $\dfrac{d\ldots}{dt} = \dfrac{\partial\ldots}{\partial t} + \mathbf{v}\cdot\nabla\ldots$ — оператор субстанціональної похідної за часом, а вектори потоку маси $\mathbf{J}_m^k$ та концентрації C_k компонент твердого розчину означені формулами

$$\mathbf{J}_m^k = \rho_k(\mathbf{v}_k - \mathbf{v}), \quad C_k = \frac{\rho_k}{\rho}, \tag{9}$$

$\mathbf{v}_k$ — вектор швидкості k-ої компоненти у точці евклідового простору з радіус-вектором $\mathbf{r}$.

Зазначимо, що наслідком співвідношень (6) та (9) є формула

$$\sum_{k=1}^{n} \mathbf{J}_m^k = -\frac{\partial \mathbf{\Pi}_m^n}{\partial t}. \tag{10}$$

2.3. Рівняння балансу енергії. Під час формулювання рівняння балансу повної енергії врахуємо, що процесу локального зміщення маси властива інерційність і пов'яжемо цю інерційність із деякою скалярною величиною d_m [6]. Відтак, повну енергію $\mathscr{E}$ системи у довільний момент часу означимо як суму внутрішньої енергії ρu, кінетичних енергій центра маси $\frac{1}{2}\rho\mathbf{v}^2$ та локального зміщення маси $\frac{1}{2}\rho d_m\left(\frac{d\boldsymbol{\pi}_m^n}{dt}\right)^2$ [6]:

$$\mathscr{E} = \rho u + \frac{1}{2}\rho \mathbf{v}^2 + \frac{1}{2}\rho d_m \left(\frac{d\boldsymbol{\pi}_m^n}{dt} \right)^2 . \tag{11}$$

Тут $\boldsymbol{\pi}_m^n = \rho^{-1}\boldsymbol{\Pi}_m^n$.

Врахуємо, що зміна енергії твердого розчину може відбутися внаслідок наявності конвективного складника потоку; дії внутрішніх поверхневих сил потужності $\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{v}$; потоку тепла $\mathbf{J}_q$; потоку енергії $\sum_{k=1}^{n} \mu_k \mathbf{J}_m^k$, зумовленого дифузією компонент твердого розчину у полі відповідних їм хімічних потенціалів; потоку енергії $\mu_\pi^n \frac{\partial \boldsymbol{\Pi}_m^n}{\partial t}$, зумовленого зміною структури фізично малого елемента тіла, а також дії масових сил $\mathbf{F}$ та розподілених теплових джерел потужності $\Re$:

$$\frac{d}{dt}\int_{(V)} \mathscr{E}\, dV = -\oint_{(\Sigma)} \Big[\mathscr{E}\, \mathbf{v} - \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{v} + \mathbf{J}_q + \\ + \sum_{k=1}^{n} \mu_k \mathbf{J}_m^k + \mu_\pi^n \frac{\partial \boldsymbol{\Pi}_m^n}{\partial t} \Big] \cdot \mathbf{n}\, d\Sigma + \int_{(V)} \left(\rho \mathbf{F} \cdot \mathbf{v} + \rho \Re \right) dV . \tag{12}$$

Тут μ_π^n — міра зміни внутрішньої енергії багатокомпонентного твердого розчину, зумовленої локальним зміщенням маси скелета; μ_k — хімічний потенціал; $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ — тензор напружень Коші.

Локальною формою рівняння (12) є

$$\frac{\partial \mathscr{E}}{\partial t} = -\nabla \cdot \left(\mathbf{v} \mathscr{E} \right) + \nabla \cdot \left(\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathbf{v} \right) - \nabla \cdot \mathbf{J}_q - \\ - \sum_{k=1}^{n} \nabla \cdot \left(\mu_k \mathbf{J}_m^k \right) - \nabla \cdot \left(\mu_\pi^n \frac{\partial \boldsymbol{\Pi}_m^n}{\partial t} \right) + \rho \mathbf{F} \cdot \mathbf{v} + \rho \Re .$$

Якщо у цьому співвідношенні врахувати рівняння балансу ентропії, яке у локальній формі має вигляд

$$\rho T \frac{ds}{dt} = -\nabla \cdot \mathbf{J}_q + \frac{1}{T} \mathbf{J}_q \cdot \nabla T + T \sigma_s + \rho \Re , \tag{13}$$

а також формули (3), (7)-(11), то у результаті низки перетворень надамо йому вигляду

$$\rho \frac{du}{dt} = \rho T \frac{ds}{dt} + \hat{\boldsymbol{\sigma}}_* : \frac{d\hat{\mathbf{e}}}{dt} + \sum_{k=1}^{n-1} \rho \mu_k' \frac{dC_k}{dt} + \rho \mu_\pi'^n \frac{d\rho_m^n}{dt} - \rho \nabla \mu_\pi'^n \cdot \frac{d\boldsymbol{\pi}_m^n}{dt} - \\ - \sum_{k=1}^{n-1} \mathbf{J}_m^k \cdot \nabla \mu_k' - \mathbf{J}_q \cdot \frac{\nabla T}{T} - \rho d_m \frac{d^2 \boldsymbol{\pi}_m^n}{dt^2} \cdot \frac{d\boldsymbol{\pi}_m^n}{dt} - T \sigma_s - \mathbf{v} \cdot \left(\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} - \nabla \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_* - \rho \mathbf{F}_* \right) . \tag{14}$$

Тут s — питома ентропія; σ_s — виникнення ентропії за одиницю часу; T — абсолютна температура; $\hat{\boldsymbol{e}} = \left[\nabla \otimes \mathbf{u} + \left(\nabla \otimes \mathbf{u}\right)^T\right] \big/ 2$ — тензор деформації, $\mathbf{u}$ — вектор переміщення, «$\otimes$» — знак діадного (мультиплікативного) добутку; $\mu_\pi'^n = \mu_\pi^n - \mu_n$, $\mu_k' = \mu_k - \mu_n$, ρ_m^n — питома густина наведеної маси

$$\rho_m^n = \frac{1}{\rho}\rho_{m\pi}^n, \tag{15}$$

а $\hat{\boldsymbol{\sigma}}_*$ та $\mathbf{F}_*$ означені згідно формул

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}_* = \hat{\boldsymbol{\sigma}} - \rho\left(\rho_m^n \mu_\pi'^n - \boldsymbol{\pi}_m^n \cdot \nabla \mu_\pi'^n\right)\hat{\mathbf{I}}, \qquad \mathbf{F}_* = \mathbf{F} - \rho_m^n \nabla \mu_\pi'^n + \boldsymbol{\pi}_m^n \cdot \nabla \otimes \nabla \mu_\pi'^n, \tag{16}$$

де $\hat{\mathbf{I}}$ — одиничний тензор.

Із умови інваріантності рівняння (14) відносно просторових трансляцій [7] одержуємо рівняння балансу механічного імпульсу

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \nabla \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_* + \rho \mathbf{F}_*. \tag{17}$$

Відтак, на основі (14) та (17) запишемо рівняння балансу внутрішньої енергії

$$\rho \frac{du}{dt} = \rho T \frac{ds}{dt} + \hat{\boldsymbol{\sigma}}_* : \frac{d\hat{\boldsymbol{e}}}{dt} + \sum_{k=1}^{n-1} \rho \mu_k' \frac{dC_k}{dt} + \rho \mu_\pi'^n \frac{d\rho_m^n}{dt} - \rho \nabla \mu_\pi'^n \cdot \frac{d\boldsymbol{\pi}_m^n}{dt} -$$
$$-\sum_{k=1}^{n-1} \mathbf{J}_m^k \cdot \nabla \mu_k' - \mathbf{J}_q \cdot \frac{\nabla T}{T} - \rho d_m \frac{d^2 \boldsymbol{\pi}_m^n}{dt^2} \cdot \frac{d\boldsymbol{\pi}_m^n}{dt} - T\sigma_s. \tag{18}$$

Подамо вектор $\nabla \mu_\pi'^n$ сумою його оборотного $\left(\nabla \mu_\pi'^n\right)^r$ та необоротного $\left(\nabla \mu_\pi'^n\right)^i$ складників, тобто

$$\nabla \mu_\pi'^n = \left(\nabla \mu_\pi'^n\right)^r + \left(\nabla \mu_\pi'^n\right)^i. \tag{19}$$

За врахування подання (19) рівняння (18) балансу внутрішньої енергії набуде вигляду

$$\rho \frac{du}{dt} = \rho T \frac{ds}{dt} + \hat{\boldsymbol{\sigma}}_* : \frac{d\hat{\boldsymbol{e}}}{dt} + \sum_{k=1}^{n-1} \rho \mu_k' \frac{dC_k}{dt} + \rho \mu_\pi'^n \frac{d\rho_m^n}{dt} - \rho \left(\nabla \mu_\pi'^n\right)^r \cdot \frac{d\boldsymbol{\pi}_m^n}{dt} -$$
$$-\sum_{k=1}^{n-1} \mathbf{J}_m^k \cdot \nabla \mu_k' - \mathbf{J}_q \cdot \frac{\nabla T}{T} - \rho \frac{d\boldsymbol{\pi}_m^n}{dt} \cdot \left[\left(\nabla \mu_\pi'^n\right)^i + d_m \frac{d^2 \boldsymbol{\pi}_m^n}{dt^2}\right] - T\sigma_s.$$

Звідси, як наслідок одержуємо узагальнене рівняння Гіббса

$$du = Tds + \frac{1}{\rho}\hat{\boldsymbol{\sigma}}_* : d\hat{\boldsymbol{e}} + \sum_{k=1}^{n-1} \mu_k' dC_k + \mu_\pi'^n d\rho_m^n - \left(\nabla \mu_\pi'^n\right)^r \cdot d\boldsymbol{\pi}_m^n, \tag{20}$$

та вираз для виробництва ентропії

$$\sigma_s = -\mathbf{J}_q \cdot \frac{\nabla T}{T^2} - \sum_{k=1}^{n-1} \mathbf{J}_m^k \cdot \frac{\nabla \mu'_k}{T} - \rho \frac{d\boldsymbol{\pi}_m^n}{dt} \cdot \frac{1}{T}\left[\left(\nabla \mu_\pi'^n\right)^i + d_m \frac{d^2\boldsymbol{\pi}_m^n}{dt^2}\right]. \tag{21}$$

3. Визначальні співвідношення

Із використанням перетворення Лежандра $f = u - Ts + \left(\nabla \mu_\pi'^n\right)^r \cdot \boldsymbol{\pi}_m^n$ перейдемо в рівнянні (20) до узагальненої вільної енергії Ґельмгольца f. Одержимо:

$$df = -sdT + \frac{1}{\rho}\hat{\boldsymbol{\sigma}}_* : d\hat{\boldsymbol{e}} + \sum_{k=1}^{n-1} \mu'_k dC_k + \mu_\pi'^n d\rho_m^n + \boldsymbol{\pi}_m^n \cdot d\left(\nabla \mu_\pi'^n\right)^r. \tag{22}$$

Із рівняння Гіббса (22) у силу незалежності параметрів T, $\hat{\boldsymbol{e}}, \{C_k\}$, ρ_m^n та $\left(\nabla \mu_\pi'^n\right)^r$ ($k = \overline{1, n-1}$) маємо такі рівняння стану

$$s = -\left.\frac{\partial f}{\partial T}\right|_{\hat{\boldsymbol{e}}, \{C_k\}, \rho_m^n, \left(\nabla \mu_\pi'^n\right)^r}, \quad \hat{\boldsymbol{\sigma}}_* = \rho \left.\frac{\partial f}{\partial \hat{\boldsymbol{e}}}\right|_{T, \{C_k\}, \rho_m^n, \left(\nabla \mu_\pi'^n\right)^r},$$

$$\mu'_k = \left.\frac{\partial f}{\partial C_k}\right|_{T, \hat{\boldsymbol{e}}, \rho_m^n, \left(\nabla \mu_\pi'^n\right)^r} \; (k = \overline{1, n-1}), \quad \mu_\pi'^n = \left.\frac{\partial f}{\partial \rho_m^n}\right|_{T, \hat{\boldsymbol{e}}, \{C_k\}, \left(\nabla \mu_\pi'^n\right)^r},$$

$$\boldsymbol{\pi}_m^n = \left.\frac{\partial f}{\partial \left(\nabla \mu_\pi'^n\right)^r}\right|_{T, \hat{\boldsymbol{e}}, \{C_k\}, \rho_m^n}. \tag{23}$$

Нехай у вихідному стані $\hat{\boldsymbol{e}} = 0$, $\hat{\boldsymbol{\sigma}}_* = 0$, $T = T_0$, $s = s_0$, $C_k = C_{k0}$, $\mu'_k = \mu'_{k0}$ ($k = \overline{1, n-1}$), $\rho_m^n = 0$, $\left(\nabla \mu_\pi'^n\right)^r = 0$, $\mu_\pi'^n = \mu'_{\pi 0}$, $\boldsymbol{\pi}_m^n = 0$. Розкладемо вільну енергію f в ряд за збуреннями параметрів стану та для малих збурень

$$\frac{T - T_0}{T_0} \ll 1, \quad e_{ij} \ll 1, \quad \frac{C_k - C_{ko}}{C_{ko}} \ll 1, \quad \rho_m^n \ll 1, \quad \nabla \mu_\pi'^n \ll 1$$

обмежимося в цьому розвиненні квадратичними членами. Таким чином для ізотропних матеріалів запишемо

$$\begin{aligned} f = {} & f_0 - s_0\left(T - T_0\right) + \mu'_{\pi 0}\rho_m^n + \frac{1}{2\rho_0}\left(K - \frac{2}{3}G\right) I_1^2 + \frac{G}{\rho_0} I_2 - \frac{C_V}{2T_0}\left(T - T_0\right)^2 + \\ & + \frac{d_\rho}{2}\left(\rho_m^n\right)^2 + \frac{1}{2}\sum_{k=1}^{n-1}\sum_{l=1}^{n-1} d_{kl} c_l c_k - \frac{\chi_m}{2}\left(\nabla \mu_\pi'^n\right)^r \cdot \left(\nabla \mu_\pi'^n\right)^r - \\ & - \frac{K\alpha_T}{\rho_0} I_1\left(T - T_0\right) - \beta_{T\rho}\rho_m^n\left(T - T_0\right) - \sum_{k=1}^{n-1} K \frac{\alpha_{ck}}{\rho_0} I_1 c_k + \\ & + \sum_{k=1}^{n-1} d_k^s c_k\left(T - T_0\right) + \sum_{k=1}^{n-1} d_k^\rho \rho_m^n c_k - \frac{K\alpha_\rho}{\rho_0} I_1 \rho_m^n . \end{aligned} \tag{24}$$

Тут $c_k = C_k - C_{ko}$; f_0 — значення вільної енергії у вихідному стані; K та G — модулі об’ємного стиску та зсуву; α_T — температурний коефіцієнт об’ємного розширення; α_ρ — коефіцієнт об’ємного розширення, спричиненого локальним зміщенням маси за незмінної температури; C_V — питома теплоємність; $\beta_{T\rho}$ — коефіцієнт, що описує залежність ентропії від питомої густини наведеної маси; d_ρ — коефіцієнт залежності потенціалу μ'_π від питомої густини наведеної маси; χ_m — коефіцієнт, що характеризує локальне зміщення маси, зумовлене градієнтом потенціалу μ'_π; d_{kl} — коефіцієнт, що характеризує зміну хімічного потенціалу компоненти k зі зміною концентрації компоненти l; α_{ck} — концентраційний коефіцієнт об’ємного розширення; d_k^s — температурний коефіцієнт зміни хімічного потенціалу компоненти k; d_k^ρ — коефіцієнт, що характеризує зміну хімічного потенціалу компоненти k зі зміною питомої густини наведеної маси підсистеми скелета.

На основі співвідношень (23) та (24) отримаємо такі лінійні рівняння стану

$$\hat{\boldsymbol{\sigma}}_* = 2G\hat{\boldsymbol{e}} + \left[\left(K - \frac{2}{3}G\right)e - K\left(\alpha_T\left(T - T_0\right) + \alpha_\rho \rho_m^n + \sum_{k=1}^{n-1}\alpha_{ck}c_k\right)\right]\hat{\mathbf{I}}, \qquad (25)$$

$$s = s_0 + \frac{C_V}{T_0}\left(T - T_0\right) + K\frac{\alpha_T}{\rho_0}e + \beta_{T\rho}\,\rho_m^n - \sum_{k=1}^{n-1} d_k^s c_k, \qquad (26)$$

$$\mu'_k = \sum_{l=1}^{n-1} d_{kl}c_l - K\frac{\alpha_{ck}}{\rho_0}e + d_k^s\left(T - T_0\right) + d_k^\rho \rho_m^n, \ \left(k = \overline{1, n-1}\right), \qquad (27)$$

$$\mu'^n_\pi = \mu'_{\pi 0} + d_\rho \rho_m^n - \beta_{T\rho}\left(T - T_0\right) - K\frac{\alpha_\rho}{\rho_0}e + \sum_{k=1}^{n-1} d_k^\rho c_k, \qquad (28)$$

$$\boldsymbol{\pi}_m^n = -\chi_m\left(\nabla\mu'^n_\pi\right)^r. \qquad (29)$$

Бачимо, що наслідком врахування локального зміщення маси підсистеми скелета є переозначення тензора напружень і вектора масових сил (див. формули (16)), а також розширення, порівняно з класичною моделлю, простору параметрів стану (поряд із $\{s, T\}$, $\{\hat{\boldsymbol{\sigma}}, \hat{\boldsymbol{e}}\}$, $\{\mu'_k, c_k\}$ $\left(k = \overline{1, n-1}\right)$ параметрами стану також є $\{\mu'^n_\pi, \rho_m^n\}$ та $\left\{\boldsymbol{\pi}_m^n, \left(\nabla\mu'^n_\pi\right)^r\right\}$).

Кінетичні рівняння формулюємо на основі виразу (21) для виробництва ентропії, який подамо у вигляді

$$\sigma_s = \sum_{k=1}^{n+1} \mathbf{j}_k \cdot \mathbf{X}_k.$$

Тут термодинамічні потоки $\mathbf{j}_k$ та сили $\mathbf{X}_k$, означені формулами

$$\mathbf{j}_k = \mathbf{J}_m^k,\ k = \overline{1, n-1}, \quad \mathbf{j}_n = \mathbf{J}_q, \quad \mathbf{j}_{n+1} = \rho \frac{d\boldsymbol{\pi}_m^n}{dt}, \tag{30}$$

$$\mathbf{X}_k = -\frac{\nabla \mu'_k}{T},\ k = \overline{1, n-1}, \quad \mathbf{X}_n = -\frac{\nabla T}{T^2}, \quad \mathbf{X}_{n+1} = -\frac{1}{T}\left[\left(\nabla \mu'^n_\pi\right)^i + d_m \frac{d^2\boldsymbol{\pi}_m^n}{dt^2}\right]. \tag{31}$$

Аналіз співвідношень (31) показує, що результатом врахування інерції та необоротності локального зміщення маси є виникнення додаткової термодинамічної сили $\mathbf{X}_{n+1} = -\frac{1}{T}\left[\left(\nabla \mu'^n_\pi\right)^i + d_m \frac{d^2\boldsymbol{\pi}_m^n}{dt^2}\right]$ та відповідного потоку $\mathbf{j}_{n+1} = \rho \frac{d\boldsymbol{\pi}_m^n}{dt}$. Приймаючи лінійний зв'язок між термодинамічними потоками та силами, матимемо

$$\mathbf{j}_k = \sum_{l=1}^{n-1} L_{kl}\mathbf{X}_l + L_{kq}\mathbf{X}_n + L_{k\pi}\mathbf{X}_{n+1}, \quad k = \overline{1, n-1}, \tag{32}$$

$$\mathbf{j}_n = \sum_{l=1}^{n-1} L_{ql}\mathbf{X}_l + L_{qq}\mathbf{X}_n + L_{q\pi}\mathbf{X}_{n+1}, \tag{33}$$

$$\mathbf{j}_{n+1} = \sum_{l=1}^{n-1} L_{\pi l}\mathbf{X}_l + L_{\pi q}\mathbf{X}_n + L_{\pi\pi}\mathbf{X}_{n+1}. \tag{34}$$

Тут L_{qq}, L_{qk}, L_{kq}, L_{kl}, $L_{\pi\pi}$, $L_{\pi k}$, $L_{\pi q}$, $L_{q\pi}$, $L_{k\pi}$ $\left(k, l = \overline{1, n-1}\right)$ — феноменологічні коефіцієнти, які є функціями параметрів термодинамічного стану. Зважаючи на принцип Онзаґера [8], маємо: $L_{qk} = L_{kq}$, $L_{kl} = L_{lk}$, $L_{\pi k} = L_{k\pi}$, $L_{\pi q} = L_{q\pi}$.

Враховуючи вирази для термодинамічних сил (31) та потоків (30), а також рівняння стану (29) й подання (19), запишемо феноменологічні співвідношення (32)-(34) у формі

$$\mathbf{J}_m^k = -\frac{L_{kq}}{T^2}\nabla T - \frac{1}{T}\sum_{l=1}^{n-1} L_{kl}\nabla \mu'_l - \frac{L_{k\pi}}{T}\left[\nabla \mu'^n_\pi + \frac{1}{\chi_m}\boldsymbol{\pi}_m^n + d_m \frac{d^2\boldsymbol{\pi}_m^n}{dt^2}\right], \quad k = \overline{1, n-1}, \tag{35}$$

$$\mathbf{J}_q = -\frac{L_{qq}}{T^2}\nabla T - \frac{1}{T}\sum_{l=1}^{n-1} L_{ql}\nabla \mu'_l - \frac{L_{q\pi}}{T}\left[\nabla \mu'^n_\pi + \frac{1}{\chi_m}\boldsymbol{\pi}_m^n + d_m \frac{d^2\boldsymbol{\pi}_m^n}{dt^2}\right], \tag{36}$$

$$\rho \frac{d\boldsymbol{\pi}_m^n}{dt} = -\frac{L_{\pi q}}{T^2}\nabla T - \frac{1}{T}\sum_{l=1}^{n-1} L_{\pi l}\nabla \mu'_l - \frac{L_{\pi\pi}}{T}\left[\nabla \mu'^n_\pi + \frac{1}{\chi_m}\boldsymbol{\pi}_m^n + d_m \frac{d^2\boldsymbol{\pi}_m^n}{dt^2}\right]. \tag{37}$$

Для лінеаризованого наближення, зважаючи на рівняння стану (27), надамо цим співвідношенням вигляду

$$\mathbf{J}_m^k = -\frac{1}{T_0^2}\bar{L}_{kq}\nabla T - \frac{1}{T_0}\sum_{l=1}^{n-1} \bar{L}_{kl}\nabla \mu'_l + \rho_0 \frac{L_{k\pi}}{L_{\pi\pi}}\frac{\partial \boldsymbol{\pi}_m^n}{\partial t}, \quad k = \overline{1, n-1}, \tag{38}$$

$$\mathbf{J}_q = -\frac{1}{T_0^2}\bar{L}_{qq}\nabla T - \frac{1}{T_0}\sum_{l=1}^{n-1}\bar{L}_{ql}\nabla\mu'_l + \rho_0\frac{L_{q\pi}}{L_{\pi\pi}}\frac{\partial\boldsymbol{\pi}_m^n}{\partial t}, \tag{39}$$

$$\frac{L_{\pi\pi}}{\chi_m T_0}\boldsymbol{\pi}_m^n + \rho_0\frac{\partial\boldsymbol{\pi}_m^n}{\partial t} + d_m\frac{L_{\pi\pi}}{T_0}\frac{\partial^2\boldsymbol{\pi}_m^n}{\partial t^2} = -\frac{L_{\pi q}}{T_0^2}\nabla T - \frac{1}{T_0}\sum_{l=1}^{n-1}L_{\pi l}\nabla\mu'_l - \frac{L_{\pi\pi}}{T_0}\nabla\mu'^n_\pi. \tag{40}$$

Тут

$$\bar{L}_{kq} = L_{kq} - \frac{L_{\pi q}L_{k\pi}}{L_{\pi\pi}}, \quad \bar{L}_{kl} = L_{kl} - \frac{L_{k\pi}}{L_{\pi\pi}}L_{\pi l}, \quad \bar{L}_{qq} = L_{qq} - \frac{L_{q\pi}^2}{L_{\pi\pi}}.$$

Зазначимо, що наявність у рівнянні (40) другої похідної за часом від вектора локального зміщення маси зумовлена врахуванням інерції локального зміщення маси, а першої – необоротністю цього процесу. Бачимо, що внаслідок взаємозв'язку процесів окрім формули (40) для вектора локального зміщення маси реологічного характеру набули також співвідношення для векторів потоку тепла та маси домішок.

4. Ключова система рівнянь

Сформульовані вище рівняння балансу наведеної маси (4) та маси компонент твердого розчину (8), ентропії (13), механічного поступального імпульсу (17), визначальні співвідношення (25)-(29), (38)-(40), разом із геометричними співвідношеннями Коші, виразом для виробництва ентропії (21), поданням (19) й формулою (15) складають замкнену систему рівнянь градієнтної механотермодифузії.

Наведемо нижче лінійну розв'язувальну систему рівнянь моделі для двокомпонентного ізотропного твердого розчину. При цьому обмежимося розглядом ізотермічного наближення. На основі формул (38), (40), (27) й (28) для бінарних розчинів для векторів потоку маси й локального зміщення маси отримаємо такі вирази

$$\mathbf{J}_m^1 = -\rho_0\left(\bar{D}_1^1\nabla c_1 + \bar{D}_e^1\nabla e + \bar{D}_\rho^1\nabla\rho_m^n - L_\pi\frac{\partial\boldsymbol{\pi}_m^n}{\partial t}\right), \tag{41}$$

$$\boldsymbol{\pi}_m - \tau_\pi\frac{\partial\boldsymbol{\pi}_m^n}{\partial t} + d_m\chi_m\frac{\partial^2\boldsymbol{\pi}_m^n}{\partial t^2} = -\chi_m\tilde{d}_1^\rho\nabla c_1 + K\tilde{\alpha}_\rho\frac{\chi_m}{\rho_0}\nabla e - \frac{1}{\lambda_*^2}\nabla\rho_m^n, \tag{42}$$

де

$$L'_{\pi\pi} = \frac{L_{\pi\pi}}{T_0}, \quad L'_{\pi 1} = \frac{L_{\pi 1}}{T_0}, \quad L'_{11} = \frac{L_{11}}{T_0}, \quad \bar{L}'_{11} = L'_{11} - \frac{(L'_{\pi 1})^2}{L'_{\pi\pi}}, \quad L_\pi = \frac{L'_{1\pi}}{L'_{\pi\pi}},$$

$$\bar{D}_1^1 = d_{11}\frac{\bar{L}'_{11}}{\rho_0}, \quad \bar{D}_\rho^1 = d_1^\rho\frac{\bar{L}'_{11}}{\rho_0}, \quad \bar{D}_e^1 = -K\alpha_{c1}\frac{\bar{L}'_{11}}{\rho_0^2}, \quad \tau_\pi = -\frac{\rho_0\chi_m}{L'_{\pi\pi}},$$

$$\lambda_*^2 = \frac{\lambda_\mu^2}{1 + L_\pi d_1^\rho / d_\rho}, \quad \tilde{\alpha}_\rho = \alpha_\rho\left(1 + L_\pi\frac{\alpha_{c1}}{\alpha_\rho}\right), \quad \tilde{d}_1^\rho = d_1^\rho\left(1 + L_\pi\frac{d_{11}}{d_1^\rho}\right).$$

Розв'язувальну систему рівнянь моделі отримаємо, підставивши співвідношення Коші та визначальні співвідношення (25)-(28), (41), (42) у балансові рівняння (4), (8), (17). Врахувавши, що для лінійного наближення $\rho = \rho_0$, одержимо

$$\rho_0 \frac{\partial^2 \mathbf{u}}{\partial t^2} = \left(K + \frac{1}{3} G \right) \nabla \left(\nabla \cdot \mathbf{u} \right) + G \Delta \mathbf{u} - K \alpha_\rho \nabla \rho_m^n - K \alpha_{c1} \nabla c_1 + \rho_0 \mathbf{F}, \tag{43}$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(c_1 - L_\pi \rho_m^n \right) = \bar{D}_1^1 \Delta c_1 + \bar{D}_\rho^1 \Delta \rho_m^n - \bar{D}_e^1 \Delta \left(\nabla \cdot \mathbf{u} \right), \tag{44}$$

$$\Delta \rho_m^n - \lambda_*^2 \left(\rho_m^n + \tau_\pi \frac{\partial \rho_m^n}{\partial t} + d_m \chi_m \frac{\partial^2 \rho_m^n}{\partial t^2} \right) = \lambda_*^2 \chi_m \left(\frac{K \tilde{\alpha}_\rho}{\rho_0} \Delta \left(\nabla \cdot \mathbf{u} \right) - \tilde{d}_1^\rho \Delta c_1 \right). \tag{45}$$

Інерція та необоротність локального зміщення маси не вплинули на рівняння руху, але змінили коефіцієнти дифузії у рівнянні (44) для концентрації домішок. Також у рівнянні (44) присутній доданок, пропорційний похідній по часу від густини наведеної маси. Результатом врахування інерційності та необоротності локального зміщення є зміна коефіцієнтів у рівнянні (45) та наявність у ньому доданків, пропорційних другій та першій похідній по часу від густини наведеної маси.

Висновки. З використанням підходів та методів термодинаміки нерівноважних процесів та механіки суцільних середовищ побудовано градієнтного типу математичну модель для опису механотермодифузійних процесів у деформівних хімічно інертних n-компонентних твердих розчинах. Модель враховує взаємозв'язок процесів деформування, масо- та теплоперенесення з локальним зміщенням маси. Показано, що врахування необоротності та інерції локального зміщення маси призводить до нелокальних реологічних визначальних співвідношень. Розроблена математична модель буде корисна для дослідження процесу формування приповерхневої неоднорідності зв'язаних фізико-механічних полів у твердих розчинах, вивчення дифузійного зміцнення поверхні, аналізу впливу приповерхневих ефектів на процес масоперенесення домішки через межу розділу середовищ тощо.

Література

[1] *Бурак Я. Й.* Визначальні співвідношення локально-градієнтної термомеханіки // Доп. АН УССР. Сер. А. — 1987. — № 12. — С. 19-23.

[2] *Бурак Я. Й., Кондрат В. Ф., Грицина О. Р.* Математичне моделювання механотермодифузійних процесів у твердих розчинах при врахуванні локального зміщення маси // Доп. НАН України. — 2007. — № 3. — С. 59-64.

[3] *Грицина О.* Механотермодифузійні процеси в багатокомпонентних твердих розчинах з урахуванням необоротності локальних зміщень маси // Фіз.-мат. моделювання та інформ. технології. — 2007. — Вип. 5. — С. 30-41.

[4] *Бредов М. М., Румянцев В. В., Топтыгин И. Н.* Классическая электродинамика. — Москва: Наука, 1985. — 400 с.

[5] *Седов Л. И.* Механика сплошной среды: в 2 т. — Москва: Наука, 1976. — Т. 1. — 536 с.

[6] *Kondrat V., Hrytsyna O.* Mechanical and electromagnetic wave interaction in linear isotropic dielectrics with local mass displacement and polarization inertia // Vibrations in Physical Systems. Vol. XXIV. — Poznan, 2010. — P. 227-232.

[7] *Green A. E., Rivlin R. S.* 1964. Multipolar continuum mechanics. Arch. Rat. Mech. Anal. 17, 113-147.
[8] *Гроот де С., Мазур П. Ш.* Неравновесная термодинаміка. — Москва: Мир, 1964. — 456 с.

The model of thermo-elastic solid solution which incorporate the irreversibility and inertia of local mass displacement

Olha Hrytsyna

In the framework of continuum-phenomenological approach the complete set of equations of gradient-type mathematical model of thermo-elastic chemically-inert ***n****-component solid solution is obtained. This model takes into account the coupled processes of deformation, thermal conduction and local mass displacement. It is shown that the rheological constitutive equations are the consequences of an accounting for the irreversibility and inertia of the process of local mass displacement. This model allows one to study the dynamics of formation of near-surface inhomogeneity of physical and mathematical fields in solid solutions. It is effective also for investigation of coupled processes in solids under high-gradient loading (high-frequency waves, concentrated forces etc.).*

Модель термоупругого твердого раствора с учетом необратимости и инерции локального смещения массы

Ольга Грицина

В рамках континуально-феноменологического подхода сформулирована полная система уравнений градиентного типа математической модели термоупругих химически инертных ***n****-компонентных твердых растворов. Модель учитывает взаимосвязь процессов деформирования, теплопроводности и локального смещения массы. Показано, что следствием учета необратимости и инерции локального смещения массы являются реологические определяющие соотношения. Разработанную теорию можно использовать для изучения динамики формирования приповерхностной неоднородности физико-механических полей в твердых растворах и исследования связанных процессов в случае высокоградиентного внешнего воздействия (высокочастотных волн, сосредоточенных нагрузок и др.).*

Отримано 27.04.16