

ТЕОРИЯ ДИССИПАТИВНЫХ СТРУКТУР КИНЕТИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ ДЛЯ ДЕФЕКТОВ НЕЛИНЕЙНОЙ ФИЗИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ «МЕТАЛЛ+НАГРУЗКА+ОБЛУЧЕНИЕ».

ЧАСТЬ 4

В.А. Тарасов, Т.Л. Борилов, Т.В. Крыжановская, С.А. Чернеженко, В.Д. Русов
Одесский национальный политехнический университет, г. Одесса, Украина;
E-mail: siüs@te.net.ua, тел. (0482)64-16-72

Дано обоснование применимости к кинетической системе радиационных дефектов некоторых требований, характерных для компонент химической кинетической системы Гирера и Мейнхардта [1, 2] (например, автокатализ компонент). Проведенный сравнительный анализ этих кинетических систем позволил существенно уточнить кинетическую систему для дефектов физической нелинейной системы «металл + нагрузка + облучение» [3, 4]. Получена упрощенная кинетическая система для дефектов нелинейной физической системы «металл + нагрузка + облучение» сходная с кинетической системой типа Гирера-Мейнхардта. Проведены вычислительные компьютерные эксперименты по исследованию упрощенная кинетическая система для дефектов нелинейной физической системы «металл + нагрузка + облучение». Полученные результаты подтверждают образование диссипативных структур точечных дефектов.

УПРОЩЕННАЯ КИНЕТИЧЕСКАЯ СИСТЕМА ДЛЯ ДЕФЕКТОВ ТОПЛИВНЫХ МЕТАЛЛОВ И ЕЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Из-за сложности кинетической системы для точечных дефектов ((21) из части 1 статьи [10]) для наглядного подтверждения ее автокаталитических особенностей (сходство с системой Гирера-Мейнхардта), что является принципиальным для данной статьи, сначала представляется разумным перейти к упрощенной кинетической системе для точечных дефектов и ее компьютерному моделированию.

Упрощенную кинетическую систему для точечных дефектов делящегося металла под облучением и под действием нагрузки можно получить из (21) [10] статьи следующим образом.

При фиксированной температуре и плотности потока нейтронов кинетическая система (21) [10] принимает следующий вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_I(\vec{r}, t)}{\partial t} = & D_I(\vec{r}, T) \Delta C_I(\vec{r}, t) + \\ & + \nabla D_I(\vec{r}, T) \nabla C_I(\vec{r}, t) + \\ & + \nabla \left[\frac{D_I(\vec{r}, T) C_I(\vec{r}, t)}{kT} \nabla E_I(\vec{r}, t) \right] - \end{aligned} \quad (1)$$

$$\begin{aligned} & - q_I^S(\vec{r}, t) + \tilde{q}_I^{Irrad}(\vec{r}, \Phi, T, t) - \\ & - \alpha(T) C_I(\vec{r}, t) C_V(\vec{r}, t); \\ \frac{\partial C_V(\vec{r}, t)}{\partial t} = & D_V(\vec{r}, T) \Delta C_V(\vec{r}, t) + \\ & + \nabla D_V(\vec{r}, T) \nabla C_V(\vec{r}, t) + \\ & + \nabla \left[\frac{D_V(\vec{r}, T) C_V(\vec{r}, t)}{kT} \nabla E_V(\vec{r}, t) \right] - q_V^S(\vec{r}, t) + \\ & + \tilde{q}_V^{Irrad}(\vec{r}, \Phi, T, t) - \alpha(T) C_I(\vec{r}, t) C_V(\vec{r}, t). \end{aligned} \quad (2)$$

Если считать диффузию изотропной и пренебречь дрейфовой диффузией, то для (1) и (2) получим следующий вид:

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_I(\vec{r}, t)}{\partial t} = & D_I(T) \Delta C_I(\vec{r}, t) - q_I^S(\vec{r}, t) + \\ & + \tilde{q}_I^{Irrad}(\vec{r}, \Phi, T, t) - \alpha(T) C_I(\vec{r}, t) C_V(\vec{r}, t); \end{aligned} \quad (3)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_V(\vec{r}, t)}{\partial t} = & D_V(T) \Delta C_V(\vec{r}, t) - q_V^S(\vec{r}, t) + \\ & + \tilde{q}_V^{Irrad}(\vec{r}, \Phi, T, t) - \alpha(T) C_I(\vec{r}, t) C_V(\vec{r}, t). \end{aligned} \quad (4)$$

Последним уравнениям можно согласно вышеизложенному [10, 11, 12] придать следующий вид:

$$\frac{\partial C_I(\vec{r}, t)}{\partial t} = K_I(\Phi) + D_I(T)\Delta C_I(\vec{r}, t) + Q_I +$$

$$+ S_I - \alpha(T)C_I(\vec{r}, t)C_V(\vec{r}, t);$$

$$\frac{\partial C_V(\vec{r}, t)}{\partial t} = K_V(\Phi) + D_V(T)\Delta C_V(\vec{r}, t) +$$

$$+ Q_V + S_V - \alpha(T)C_I(\vec{r}, t)C_V(\vec{r}, t),$$

где $K_I(\Phi)$ и $K_V(\Phi)$ – скорости генерации облучением с плотностью потока Φ междоузельных атомов и вакансий соответственно; Q_I и Q_V – автокаталитические члены, связанные с рождением междоузельных атомов и вакансий соответственно при движении дислокаций со ступеньками; S_I и S_V – сток междоузельных атомов и вакансий соответственно на дислокации.

Дальнейшее упрощение кинетической системы (5), (6) связано с упрощением членов Q_I , Q_V и S_I , S_V , что возможно лишь при упрощенном описании дислокационной системы (вклад пор и других дефектов здесь не рассматривается), т.е. при отказе от компьютерного моделирования [12]. Поэтому полагаем, что все дислокации всегда прямолинейные (жесткие дислокации), их средняя длина \bar{l} , плотность дислокаций ρ . Упрощая, также полагаем, что автокаталитические члены, связанные с рождением междоузельных атомов и вакансий соответственно при движении дислокаций со ступеньками, могут быть заданы в следующем виде:

$$Q_I = A^I v_{дисл} \text{ и } Q_V = A^V v_{дисл}, \quad (7)$$

где A^I и A^V – константы, характеризующие скорости рождения междоузельных атомов и вакансий единичным участком длины дислокации соответственно; $v_{дисл}$ – скорость движения дислокации.

Для скорости движения прямолинейной дислокации можно записать приблизительное выражение (справедливое при $v_{ск} \gg v_{неп}$, где $v_{ск}$ и $v_{неп}$ – скорость скольжения и скорость переползания дислокации соответственно) согласно (7) из [12] в виде

$$v_{дисл} = \frac{\ell}{\lambda} \cdot v_{неп}, \quad (8)$$

где ℓ – среднее расстояние скольжения дислокации до остановки на препятствиях ($\ell \sim$ расстояние

между препятствиями в плоскости скольжения в направлении скольжения); λ – расстояние, на которое должна переползти дислокация для преодоления препятствия (λ обычно полагается равным размеру препятствия).

Теперь выражения (7) можно записать следующим образом:

$$Q_I = \rho \bar{l} A^I \frac{\ell}{\lambda} v_{неп} \text{ и } Q_V = \rho \bar{l} A^V \frac{\ell}{\lambda} v_{неп}. \quad (9)$$

Скорость переползания дислокации задается выражением (33) из [12]:

$$v_{i\dot{a}\dot{o}} = V_{i\dot{a}\dot{o}}^I - V_{i\dot{a}\dot{o}}^V = \frac{4\pi D_S^I}{akT \ln(\bar{z}_I/b)} \times$$

$$\times \left[\exp\left(\frac{F_{\dot{o}i\dot{o}}^I \cdot v_a}{LbkT}\right) \cdot \exp\left(\beta \ln \frac{C_I}{C_I^0}\right) - 1 \right] \times$$

$$\times \exp\left(\frac{\Delta W_S^I - 2F_{\dot{N}\dot{O}}}{2kT}\right) - \frac{4\pi D_S^V}{akT \ln(\bar{z}_V/b)} \times$$

$$\times \left[\exp\left(\frac{F_{\dot{o}i\dot{o}}^V \cdot v_a}{LbkT}\right) \cdot \exp\left(-\beta \ln \frac{C_V}{C_V^0}\right) - 1 \right] \times$$

$$\times \exp\left(\frac{\Delta W_S^V - 2F_{\dot{N}\dot{O}}}{2kT}\right), \quad (10)$$

где $\beta = \frac{b_{кр}}{b}$.

Если для упрощения выкладок обозначить константы в (33) [12] через

$$C_1 = \frac{4\pi D_S^I}{akT \ln(\bar{z}_I/b)}, C_2 = \frac{4\pi D_S^V}{akT \ln(\bar{z}_V/b)};$$

$$C_3 = C_1 \exp\left(\frac{\Delta W_S^I - 2F_{CT}}{2kT}\right);$$

$$C_4 = C_2 \exp\left(\frac{\Delta W_S^V - 2F_{CT}}{2kT}\right) \text{ и } C_5 = C_3 + C_4, \quad (11)$$

то выражение (10) можно записать в следующем виде:

$$v_{i\dot{a}\dot{o}} = C_3 \exp(F_I) \left(\frac{C_I}{C_I^0}\right)^\beta -$$

$$- C_4 \exp(F_V) \left(\frac{C_V}{C_V^0}\right)^{-\beta} + C_5, \quad (12)$$

где $F_I = \frac{F_{ynp}^I \nu_a}{LbkT}$ и $F_V = \frac{F_{ynp}^V \nu_a}{LbkT}$.

Тогда согласно (9) получим

$$Q_I = \rho \bar{l} A^I \frac{\ell}{\lambda} v_{nep} = (\rho_0 + \rho_{\Phi-P}) \bar{l} A^I \frac{\ell}{\lambda} v_{nep} \quad (13)$$

и

$$Q_V = \rho \bar{l} A^V \frac{\ell}{\lambda} v_{nep} = (\rho_0 + \rho_{\Phi-P}) \bar{l} A^V \frac{\ell}{\lambda} v_{nep}, \quad (14)$$

где ρ_0 – начальная плотность дислокаций; $\rho_{\Phi-P}$ – плотность дислокаций, создаваемых источниками дислокаций типа Франка-Рида.

В первом приближении можно принять, что

$$\rho_{\Phi-P} = C^{\Phi-P} \cdot V_{nep}, \quad (15)$$

где $C^{\Phi-P} \approx const$.

Поэтому для (13) и (14) с учетом (15) получим:

$$Q_I = \rho_0 \bar{l} A^I \frac{\ell}{\lambda} v_{nep} + C^{\Phi-P} \bar{l} A^I \frac{\ell}{\lambda} v_{nep}^2; \quad (16)$$

$$Q_V = \rho_0 \bar{l} A^V \frac{\ell}{\lambda} v_{nep} + C^{\Phi-P} \bar{l} A^V \frac{\ell}{\lambda} v_{nep}^2. \quad (17)$$

Преобразуем (16), используя выражение (12) для v_{nep} :

$$\begin{aligned} Q_I &= \rho_0 \bar{l} A^I \frac{\ell}{\lambda} \times \\ &\times \left[C_3 e^{F_I} \left(\frac{C_I}{C_I^0} \right)^\beta - C_4 e^{F_V} \left(\frac{C_V}{C_V^0} \right)^{-\beta} + C_5 \right] + \\ &+ C^{\Phi-P} \bar{l} A^I \frac{\ell}{\lambda} \times \\ &\times \left[C_3 e^{F_I} \left(\frac{C_I}{C_I^0} \right)^\beta - C_4 e^{F_V} \left(\frac{C_V}{C_V^0} \right)^{-\beta} + C_5 \right]^2 = \\ &= C_6 + C_7 \cdot e^{F_I} \left(\frac{C_I}{C_I^0} \right)^\beta - C_8 \cdot e^{F_V} \left(\frac{C_V}{C_V^0} \right)^{-\beta} + \\ &+ C_9 \cdot e^{2F_I} \left(\frac{C_I}{C_I^0} \right)^{2\beta} - C_{10} \cdot e^{(F_I+F_V)} \times \\ &\times \left(\frac{C_V^0}{C_I^0} \right)^\beta \left(\frac{C_I}{C_V} \right)^\beta + C_{11} \cdot e^{2F_V} \left(\frac{C_V}{C_V^0} \right)^{-2\beta}, \end{aligned} \quad (18)$$

где

$$C_6 = \rho_0 \bar{l} A^I \frac{\ell}{\lambda} C_5 + C^{\Phi-P} \bar{l} A^I \frac{\ell}{\lambda} C_5^2;$$

$$C_7 = \rho_0 \bar{l} A^I \frac{\ell}{\lambda} \cdot C_3 + 2C^{\Phi-P} \bar{l} A^I \frac{\ell}{\lambda} C_3 \cdot C_5;$$

$$C_8 = \rho_0 \bar{l} A^I \frac{\ell}{\lambda} C_4 + 2C^{\Phi-P} \bar{l} A^I \frac{\ell}{\lambda} C_4 C_5;$$

$$C_9 = C^{\Phi-P} \bar{l} A^I \frac{\ell}{\lambda} C_3^2;$$

$$C_{10} = 2C^{\Phi-P} \bar{l} A^I \frac{\ell}{\lambda} C_3 C_4;$$

$$C_{11} = C^{\Phi-P} \bar{l} A^I \frac{\ell}{\lambda} C_4^2.$$

Аналогичным образом можно получить выражение для Q_V :

$$\begin{aligned} Q_V &= C_{12} + C_{13} \cdot e^{F_I} \left(\frac{C_I}{C_I^0} \right)^\beta - \\ &- C_{14} \cdot e^{F_V} \left(\frac{C_V}{C_V^0} \right)^{-\beta} + C_{15} \cdot e^{2F_I} \left(\frac{C_I}{C_I^0} \right)^{2\beta} - \\ &- C_{16} \cdot e^{(F_I+F_V)} \left(\frac{C_V^0}{C_I^0} \right)^\beta \left(\frac{C_I}{C_V} \right)^\beta + \\ &+ C_{17} \cdot e^{2F_V} \left(\frac{C_V}{C_V^0} \right)^{-2\beta}, \end{aligned} \quad (19)$$

где

$$C_{12} = \frac{C_6}{A^I} \cdot A^V; \quad C_{13} = \frac{C_7}{A^I} \cdot A^V;$$

$$C_{14} = \frac{C_8}{A^I} \cdot A^V; \quad C_{15} = \frac{C_9}{A^I} \cdot A^V;$$

$$C_{16} = \frac{C_{10}}{A^I} \cdot A^V; \quad C_{17} = \frac{C_{11}}{A^I} \cdot A^V.$$

Теперь рассмотрим S_I и S_V . Потoki точечных дефектов на единицу длины дислокации задаются выражениями (24) и (25) [12], которые можно записать в виде:

$$I_I = 4\pi D_I \cdot b \cdot C_I^0 \left[e^{F_I} \left(\frac{C_I}{C_I^0} \right)^\beta - 1 \right], \quad (20)$$

$$I_V = 4\pi D_V \cdot b \cdot C_V^0 \left[e^{F_V} \left(\frac{C_V}{C_V^0} \right)^{-\beta} - 1 \right]. \quad (21)$$

Пусть $C_{18} = 4\pi D_I b \cdot C_I^0$ и $C_{19} = 4\pi D_V b \cdot C_V^0$, тогда (20) и (21) имеет вид:

$$I_I = \tilde{N}_{18} \cdot e^{F_I} \left(\frac{C_I}{C_I^0} \right)^\beta - \tilde{N}_{18}; \quad (22)$$

$$I_V = C_{19} \cdot e^{F_I} \left(\frac{C_V}{C_V^0} \right)^\beta - C_{19} \quad (23)$$

Тогда для S_I и S_V получаем следующие выражения:

$$\begin{aligned} S_I = \rho \bar{I} I_I &= [\rho_0 + C^{\Phi-P} \cdot v_{nep}] \cdot \bar{I} \times \left[C_{18} \cdot e^{F_I} \left(\frac{C_I}{C_I^0} \right)^\beta - C_{18} \right] = \\ &= -C_{20} + C_{21} \cdot e^{F_I} \left(\frac{C_I}{C_I^0} \right)^\beta + C_{22} e^{F_V} \left(\frac{C_V}{C_V^0} \right)^{-\beta} + \\ &+ C_{23} e^{2F_I} \left(\frac{C_I}{C_I^0} \right)^{2\beta} - C_{24} e^{(F_I+F_V)} \left(\frac{C_I}{C_V} \right)^\beta \left(\frac{C_V^0}{C_I^0} \right)^\beta, \end{aligned} \quad (24)$$

где

$$\begin{aligned} C_{20} &= \rho_0 \cdot \bar{I} \cdot \tilde{N}_{18} + C^{\hat{O}-D} \cdot \bar{I} \cdot \tilde{N}_{18} \cdot C_5; \\ C_{21} &= \rho_0 \cdot \bar{I} \cdot \tilde{N}_{18} + C^{\hat{O}-D} \cdot \bar{I} \cdot \tilde{N}_{18} \cdot C_5 - \\ &- C^{\hat{O}-D} \cdot \bar{I} \cdot \tilde{N}_{18} \cdot C_3; \\ C_{22} &= C^{\hat{O}-D} \cdot \bar{I} \cdot \tilde{N}_{18} \cdot C_4; C_{23} = \\ &= C^{\hat{O}-D} \cdot \bar{I} \cdot \tilde{N}_{18} \cdot C_3; C_{24} = C^{\hat{O}-D} \cdot \bar{I} \cdot \tilde{N}_{18} \cdot C_4 \end{aligned}$$

и

$$\begin{aligned} S_V = \rho \bar{I} I_V &= [\rho_0 + C^{\Phi-P} \cdot v_{nep}] \cdot \bar{I} \times \\ &\times \left[C_{19} \cdot e^{F_V} \left(\frac{C_V}{C_V^0} \right)^{-\beta} - C_{19} \right] = \\ &= -C_{25} - C_{26} \cdot e^{F_I} \left(\frac{C_I}{C_I^0} \right)^\beta + C_{27} e^{F_V} \left(\frac{C_V}{C_V^0} \right)^{-\beta} - \\ &- C_{28} e^{2F_V} \left(\frac{C_V}{C_V^0} \right)^{-2\beta} + C_{29} e^{(F_I+F_V)} \left(\frac{C_I}{C_V} \right)^\beta \left(\frac{C_V^0}{C_I^0} \right)^\beta, \end{aligned} \quad (25)$$

где

$$\begin{aligned} C_{25} &= \rho_0 \cdot \bar{I} \cdot C_{19} + C^{\Phi-P} \cdot \bar{I} \cdot C_{19} \cdot C_5; \\ C_{26} &= C^{\Phi-P} \cdot \bar{I} \cdot C_{19} \cdot C_3; \\ C_{27} &= \rho_0 \cdot \bar{I} \cdot C_{19} + C^{\Phi-P} \cdot \bar{I} \cdot C_{19} \cdot C_5 - \\ &- C^{\Phi-P} \cdot \bar{I} \cdot C_{19} \cdot C_4; C_{28} = C^{\Phi-P} \cdot \bar{I} \cdot C_{19} \cdot C_4; \\ C_{29} &= C^{\Phi-P} \cdot \bar{I} \cdot C_{19} \cdot C_3. \end{aligned}$$

Подставляя полученные выражения для Q_I , Q_V и S_I , S_V в уравнения кинетической системы (5) и (6), после алгебраических преобразований получаем следующий вид кинетической системы:

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_I(\vec{r}, t)}{\partial t} &= \tilde{K}_I(\Phi) - \alpha C_I(\vec{r}, t) C_V(\vec{r}, t) + \\ &+ C_{31} e^{F_I} (C_I)^\beta - C_{32} e^{F_V} (C_V)^{-\beta} + \\ &+ C_{33} e^{2F_I} (C_I)^{2\beta} + C_{34} \cdot e^{2F_V} (C_V)^{-2\beta} + \end{aligned} \quad (26, a)$$

$$+ C_{35} e^{(F_I+F_V)} \left(\frac{C_I}{C_V} \right)^\beta + D_I \Delta C_I(\vec{r}, t);$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_V(\vec{r}, t)}{\partial t} &= \tilde{K}_V(\Phi) - \alpha C_I(\vec{r}, t) C_V(\vec{r}, t) + \\ &+ C_{37} e^{F_I} (C_I)^\beta - C_{38} e^{F_V} (C_V)^{-\beta} + \\ &+ C_{39} e^{2F_I} (C_I)^{2\beta} + C_{40} \cdot e^{2F_V} (C_V)^{-2\beta} - \end{aligned} \quad (26, b)$$

$$- C_{41} e^{(F_I+F_V)} \left(\frac{C_I}{C_V} \right)^\beta + D_V \Delta C_V(\vec{r}, t),$$

где введены обозначения

$$\begin{aligned} C_{30} &= C_6 + C_{20}; C_{31} = (C_7 - C_{21})(C_I^0)^{-\beta}; \\ C_{32} &= (C_8 + C_{22})(C_V^0)^\beta; \\ C_{33} &= (C_9 - C_{23})(C_I^0)^{-2\beta}; C_{34} = C_{11}(C_V^0)^{2\beta}; \end{aligned}$$

$$C_{35} = (C_{24} - C_{10}) \left(\frac{C_V^0}{C_I^0} \right)^\beta;$$

$$C_{36} = C_{12} + C_{25}; C_{37} = (C_{13} + C_{26})(C_I^0)^{-\beta};$$

$$C_{38} = (C_{14} - C_{27})(C_V^0)^\beta; C_{39} = C_{15};$$

$$C_{40} = (C_{17} + C_{28})(C_V^0)^{2\beta};$$

$$C_{41} = (C_{16} + C_{23}) \left(\frac{C_V^0}{C_I^0} \right)^\beta;$$

$$\tilde{K}_I(\Phi) = K_I(\Phi) + C_{30}; \tilde{K}_V(\Phi) = K_V(\Phi) + C_{36}.$$

Если пренебречь внутренними локальными напряжениями по сравнению с внешним напряжением и ввести обозначения

$$K_1 = C_{31} e^{F_I}; \quad K_2 = C_{32} e^{F_V}; \quad K_3 = C_{33} e^{2F_I};$$

$$K_4 = C_{34} \cdot e^{2F_V}; \quad K_5 = C_{35} e^{(F_I+F_V)}; \quad K_6 = C_{37} e^{F_I};$$

$$K_7 = C_{38} e^{F_V}; \quad K_8 = C_{39} e^{2F_I}; \quad K_9 = C_{40} \cdot e^{2F_V};$$

$$K_{10} = C_{41} e^{(F_I+F_V)},$$

то получим окончательный вид кинетической системы:

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial C_I(\vec{r}, t)}{\partial t} &= \tilde{K}_I(\dot{O}) - \alpha C_I(\vec{r}, t) C_V(\vec{r}, t) + \\
 &+ K_1 (C_I(\vec{r}, t))^\beta - K_2 (C_V(\vec{r}, t))^{-\beta} + \\
 &+ K_3 (C_I(\vec{r}, t))^{2\beta} + K_4 (C_V(\vec{r}, t))^{-2\beta} + \\
 &+ K_5 \left(\frac{C_I(\vec{r}, t)}{C_V(\vec{r}, t)} \right)^\beta + D_I \Delta C_I(\vec{r}, t); \\
 \frac{\partial C_V(\vec{r}, t)}{\partial t} &= \tilde{K}_V(\dot{O}) - \alpha C_I(\vec{r}, t) C_V(\vec{r}, t) + \\
 &+ K_6 (C_I(\vec{r}, t))^\beta - K_7 (C_V(\vec{r}, t))^{-\beta} + \\
 &+ K_8 (C_I(\vec{r}, t))^{2\beta} + K_9 (C_V(\vec{r}, t))^{-2\beta} - \\
 &- K_{10} \left(\frac{C_I(\vec{r}, t)}{C_V(\vec{r}, t)} \right)^\beta + D_V \Delta C_V(\vec{r}, t),
 \end{aligned}
 \tag{27}$$

где все $K_i, i=1..10$ – константы; β – также константа для заданного типа дислокаций ($0, 0 \leq \beta \leq 1, 0$).

Таким образом, получили кинетическую систему, аналогичную кинетической системе типа Гирера-Мейнхардта [1, 2].

Для решения системы надо задать начальные и граничные условия:

$$C_V(\vec{r}, t=0) = C_V^0 = const \text{ и}$$

$$C_I(\vec{r}, t=0) = C_I^0 = const ;$$

и

$$C_V(\vec{r}|_{\text{граница}}, t) = C_V^0 = const$$

$$\text{и } C_I(\vec{r}|_{\text{граница}}, t) = C_I^0 = const . \tag{28}$$

Кинетическая система (27) с начальными и граничными условиями (28) в настоящее время исследуется нами с помощью компьютерного эксперимента. В процессах исследований используются основные математические пакеты для численных расчётов: Mathematica 5.1.1...5.2.0, Maple 10, MatLab 7 и другие, а также специально написанные под эту задачу приложения. С учётом возможности распараллеливания процессов вычислений, а также поддержки 64-битных вычислений в последних версиях этих пакетов основные расчёты и анализ будут проведены на мультипроцессорных системах. Несмотря на сложность и нестандартный тип системы, в результате исследований её структуры были найдены области, расчёт в которых можно провести с высокой точностью (порядка 0.1%) и на достаточных для предварительного анализа интервалах. На данный момент основные расчёты проводились

для 2-мерных ситуаций при β порядка 1 (в частности, на приведённых ниже рисунках для $\beta = 0.9$), так как естественно предположить, что именно максимальный порядок этого показателя сможет выявить наиболее характерные эффекты, связанные

с нелинейностью и диссипацией. Ограничения 2-мерностью вызвано исключительно техническими соображениями и невозможностью на момент проведения расчётов использовать суперЭВМ. Следует также отметить возможность "расширения" областей счёта, так сказать, искусственным образом в результате использования многомерной экстраполяции на основе полученных точек в считаеваемых областях. Таким образом, можно будет расширить область графиков в несколько раз, а также закрыть проблемные места в самой картинке (иногда из-за сбоя метода в нём возникают "дырки"). Приведенные ниже графики (рис. 1-5) являются результатом компьютерного моделирования упрощённой системы, входящими параметрами и начальными условиями которой являются величины наиболее характерные, на наш взгляд, для описываемых выше ситуаций. Помимо этого они подбирались из соображений максимальной наглядности иллюстрации диссипативности структур. А именно: температуру T мы принимали равной 400 К, начальные концентрации вакансий и междоузельных атомов 10^{-10} и 10^{-30} соответственно, соответствующая плотность потока нейтронов $10^{13} \text{ i\ddot{a}e\ddot{o}d\ddot{o} / \ddot{n}i^2 \ddot{n}}$, нагрузка 3 кГ/мм^2 . На представленных ниже рисунках расчёты приведены для различных моментов времени с шагом 0.1 с, т.е. ситуация рассматривается как бы в динамике, и мы можем наблюдать эволюционирование процессов во времени. Причём можно заметить, что имеется цикличность процессов. А учитывая размеры просчитанных областей, можно говорить о макроскопической пространственной корреляции с радиусом, значительно превышающим радиус потенциала межатомного взаимодействия, что характерно для диссипативных, нелинейных структур.

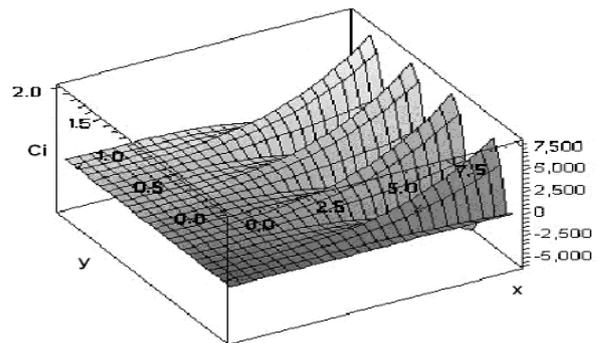


Рис. 1. Результаты моделирования упрощённой кинетической системы при $t=0.1$ с (x, y – линейные размеры кристалла в 10^4 см; C_i – концентрация междоузельных атомов, умноженная на 10^{-10})

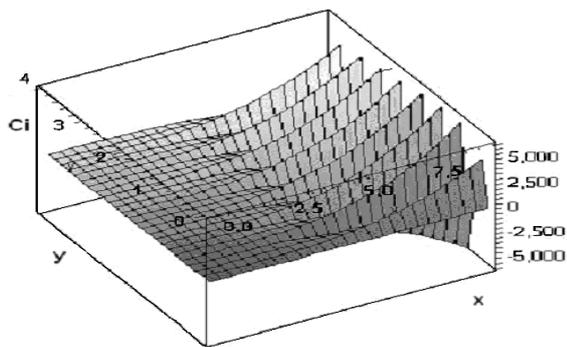


Рис. 2. Результаты моделирования упрощённой кинетической системы при $t=0.4$ с (x, y – линейные размеры кристалла в 10^{-4} см; C_i – концентрация междоузельных атомов, умноженная на 10^{-10})

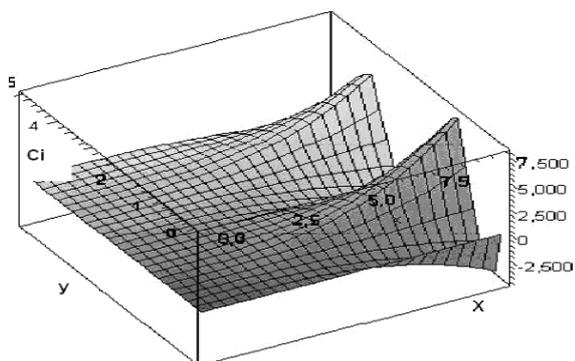


Рис. 3. Результаты моделирования упрощённой кинетической системы при $t=0.6$ с (x, y – линейные размеры кристалла в 10^{-4} см; C_i – концентрация междоузельных атомов, умноженная на 10^{-10})

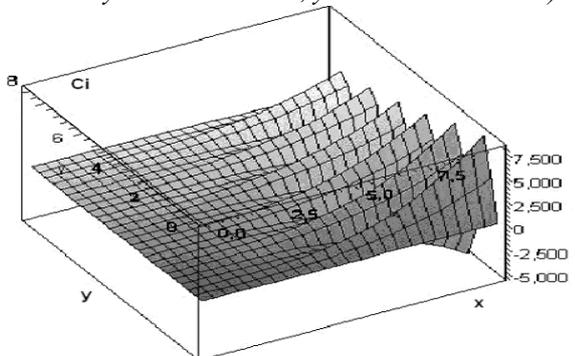


Рис. 4. Результаты моделирования упрощённой кинетической системы при $t=0.8$ с (x, y – линейные размеры кристалла в 10^{-4} см; C_i – концентрация междоузельных атомов, умноженная на 10^{-10})

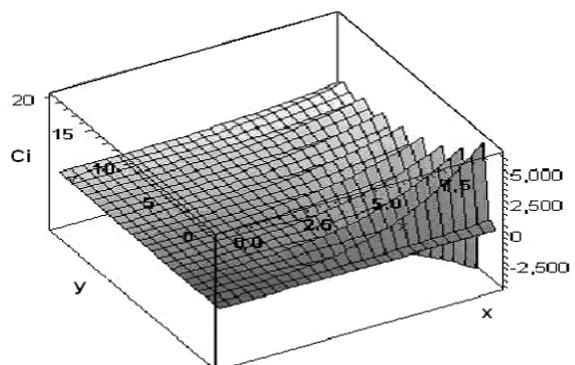


Рис. 5. Результаты моделирования упрощённой кинетической системы при $t=1$ с (x, y – линейные размеры кристалла в 10^{-4} см; C_i – концентрация междоузельных атомов, умноженная на 10^{-10})

Данные расчёты являются предварительными, в дальнейшем планируется проведение более детального анализа уравнений в 3D с использованием кластерных систем, а также выявление внешних ограничений (начальные, граничные условия и др. параметры), определяющих степень и вид проявления диссипативности в этой системе. На этот момент были рассмотрены уравнения с начальными концентрациями в диапазоне $10^8 \dots 10^{10}$ и $10^{-26} \dots 10^{-30}$, причём в этих интервалах диссипативность в той или иной степени проявила себя и наиболее часто встречаемым распределением для пространственной концентрации дефектов была поверхность с двумя или тремя пиками (аналогично рис. 3), либо поверхность в виде достаточно резко изогнутого плато.

3. ВЫВОДЫ

Получена упрощенная кинетическая система для дефектов нелинейной физической системы «металл + нагрузка + облучение», сходная с кинетической системой типа Гирера-Мейнхардта [1,2] (система (1) [10]).

Проведены вычислительные компьютерные эксперименты по исследованию упрощенной кинетической системы для дефектов нелинейной физической системы «металл + нагрузка + облучение». Полученные результаты подтверждают образование диссипативных структур точечных дефектов.

ЛИТЕРАТУРА

1. A. Gierer, H. Meinhardt. *Lectures on Mathematics in the Life Sciences*. Berlin: Springer, 1974, v. 7, p. 163–183.
2. H. Meinhardt. *Pattern formation in biology: a comparison of models and experiments* /UK: IOP Publishing Ltd. Reports On Progress In Physics, 1992, v. 55, p. 797–849.
3. В.Д. Русов, В.А. Тарасов и др. Моделирование диссипативных структур и волн концентраций точечных дефектов в открытой нелинейной физической системе «металл + нагрузка + облучение» // *Вопросы атомной науки техники. Серия «Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение»* (80). 2001, №4, с. 3–8.
4. В.Д. Русов, В.А. Тарасов и др. Механизмы радиационной ползучести металлического уранового топлива и ее температурные нелинейности // *Вопросы атомной науки техники. Серия «Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение»* (84). 2003, № 6, с. 20–23.

5. *Режимы с обострением. Эволюция идеи: законы коэволюции сложных структур.* М.: «Наука», 1998, 255 с.
6. В.А. Тарасов. Математическое моделирование радиационной ползучести реакторного топлива на примере урана и его сплавов // *Вопросы атомной науки техники. Серия «Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение»* (79). 2001, №2, с. 23–30.
7. В.А. Тарасов. Компьютерное моделирование радиационной ползучести реакторного топлива // *УФЖ.* 2000, №10, с. 23–35.
8. W.G. Wolfer, L.K. Mansur, J.A. Sprague // *Rad. Eff. in Breeder Reactor Structural Materials.* Scottsdale, Ariz., 1977, 841 p.
9. Ш.Ш. Ибрагимов и др. *Радиационное повреждение металлов и сплавов* М.: «Энергоатомиздат», 1985, 239 с.
10. В.А. Тарасов, Т.Л. Бориков, Т.В. Крыжановская, С.А. Чернеженко, В.Д. Руссов. Теория диссипативных структур кинетической системы для дефектов нелинейной физической системы «металл + нагрузка + облучение». Ч. 1 // *Вопросы атомной науки техники. Серия «Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение»* (90). 2007, №2, с. 63–71.
11. В.А. Тарасов, Т.Л. Бориков, Т.В. Крыжановская, С.А. Чернеженко, В.Д. Руссов. Теория диссипативных структур кинетической системы для дефектов нелинейной физической системы «металл + нагрузка + облучение». Ч. 2 // *Вопросы атомной науки техники. Серия «Физика радиационных повреждений и радиационное материаловедение»* (90). 2007, №2, с. 72-75.
12. *Наст. журнал,* с. 29-34.

ТЕОРІЯ ДИСИПАТИВНИХ СТРУКТУР КІНЕТИЧНОЇ СИСТЕМИ ДЛЯ ДЕФЕКТИВ НЕЛІНІЙНОЇ ФІЗИЧНОЇ СИСТЕМИ «МЕТАЛ+НАВАНТАЖЕННЯ+ОПРОМІНЕННЯ».
ЧАСТИНА 4

В.О. Тарасов, Т.Л. Боріков, Т.В. Крижанівська, С.А. Чернеженко, В.Д. Русов

Дано обґрунтування застосовності до кінетичної системи радіаційних дефектів деяких вимог, характерних для компонентів хімічної кінетичної системи Гірера й Мейнхардта [1, 2] (наприклад, автокаталіз компонентів). Проведений порівняльний аналіз цих кінетичних систем дозволив істотно уточнити кінетичну систему для дефектів фізичної нелінійної системи «метал + навантаження + опромінення» [3, 4]. Отримано спрощену кінетичну систему для дефектів нелінійної фізичної системи «метал + навантаження + опромінення» подібну з кінетичною системою типу Гірера-Мейнхардта. Проведені обчислювальні комп'ютерні експерименти по дослідженню спрощеної кінетичної системи для дефектів нелінійної фізичної системи «метал + навантаження + опромінення». Отримані результати підтверджують утворення дисипативних структур крапкових дефектів.

THE THEORY OF DISSIPATIVE STRUCTURES OF THE KINETIC SYSTEM FOR DEFECTS OF NONLINEAR PHYSICAL SYSTEM "METAL + LOADING + IRRADIATION".
PART 4

V.A. Tarasov, T.L. Borikov, T.V. Kryzhanovskaja, S.A. Chernegenko, V.D. Rusov

The applicability ground of some requirements characteristic for the components of Gierer and Meinhardt chemical kinetic system [1, 2] (for example, component autocatalysis) to the radiation defect kinetic system is given. Our fulfilled comparative analysis of these kinetic systems has permitted essentially to amend the kinetic system for the defects of nonlinear physical system "metal + load + irradiation" [3, 4]. The simplified kinetic system for defects of nonlinear physical system "metal + load + irradiation" similar to Gierer-Meinhardt kinetic system is received. Computer experiments on research the simplified kinetic system for defects of nonlinear physical system "metal + load + irradiation" are lead. The received results confirm formation of dissipative structures of point defects.