УДК 539.3:536.12:532.72

Механічні та теплові процеси в бінарних системах

Ярослав Бурак[1], Януш Луковський[2], Петро Пелех[3], Євген Чапля[4]

[1] д. ф.-м. н., чл.-кор. НАН України, проф., Центр математичного моделювання ІППММ ім. Я. С. Підстригача НАН України, вул. Дж. Дудаєва, 15, Львів, Україна, 79005, e-mail: burak@cmm.lviv.ua
[2] к. н., Університет Казиміра Великого в Бидгощі, Інститут механіки середовища і прикладної інформатики, вул. Ходкевича, 30, Бидгощ, Польща, 85-064, e-mail: januszl@ukw.edu.pl
[3] Інститут прикладних проблем механіки і математики ім. Я. С. Підстригача НАН України, вул. Наукова, 3Б, Львів, Україна, 79049, e-mail: ppetro@mail.lviv.ua
[4] д. ф.-м. н., с. н. с., Центр математичного моделювання ІППММ ім. Я. С. Підстригача НАН України, вул. Дж. Дудаєва, 15, Львів, Україна, 79005, e-mail: chaplia@cmm.lviv.ua; Університет Казиміра Великого в Бидгощі, Інститут механіки середовища і прикладної інформатики, вул. Ходкевича, 30, Бидгощ, Польща, 85-064, e-mail: czapla@ukw.edu.pl

На основі підходів теорії багатошвидкісного континуума сформульовано вихідні співвідношення математичної моделі механічних і теплових процесів у бінарних твердих розчинах. Ці співвідношення записано в наближенні континуума центрів мас і базової компоненти. Показано, що при використанні одноконтинуумних наближень природним чином виникають спряжені термодинамічні параметри, які описують відносні пружні зміщення компонент. Це, своєю чергою, дозволяє дати додаткову фізичну інтерпретацію параметрів і характеристик, які використовуються в теорії мікрополярних середовищ.

Ключові слова: бінарні системи, механічні й теплові процеси, пружна поляризація.

Вступ. В умовах нестаціонарних зовнішніх навантажень реальні тіла бінарної структури, зокрема сплави, можуть характеризуватися різною поведінкою [10]. Так, наприклад, якщо за певних умов частинки системи інтенсивно змінюють своїх найближчих сусідів, то за основні процеси необхідно прийняти механічні, теплові та дифузійні. Для їхнього макроскопічного опису використовують уявлення механіки суцільного середовища [9, 11] і методи нерівноважної термодинаміки [3, 4, 8, 13]. Локальний стан системи при цьому описується значеннями спряжених параметрів, а саме: компонентами тензора напружень — тензора деформації, абсолютною температурою — питомою ентропією, хімічними потенціалами — концентраціями компонент.

Якщо ж внаслідок деформування чи інших дій елементарні матеріальні частинки речовин кожного сорту зберігають своїх сусідів і дифузія окремих складових компонент є несуттєвою, то до основних процесів відносять деформування тіла, пружну поляризацію та теплопровідність. Ці процеси описують із використанням теорії мікрополярних середовищ [11, 12] або методів нерівноважної термодинаміки [1] шляхом введення додаткових параметрів локального стану системи. Під пружною поляризацією розуміємо відносні зміщення матеріальних

частинок різних складових компонент тіла. Така ситуація є характерною, зокрема, для бінарних твердих розчинів, які можна розглядати як тіла з мікроструктурою.

Нижче, на основі підходів теорії багатошвидкісного континуума [6], досліджено математичну модель механічних і теплових процесів у бінарних твердих деформівних розчинах і отримано наближені модельні співвідношення з використанням континуума центрів мас і базової компоненти, в яких враховано пружну поляризацію матеріалу — недифузійні ефекти відносного руху точок континуумів, тобто пружні зміщення точок різних континуумів, які співставлені окремим його компонентам.

1. Модель двошвидкісного континуума

Приймаємо, що тіло складається з частинок речовин двох хімічно різних сортів. Довільно вибрана фізично мала його доля (макрочастина) містить макроскопове число частинок кожного сорту. Локальні структурні особливості цієї фізично малої макрочастини, яка виділена за точками простору, визначаються особливостями її мікроскопічної будови.

Конфігураційні та кінематичні характеристики. Вважаємо, що дискретна сукупність матеріальних частинок $\mathbf{K}^*$ (далі матеріальне середовище), у кожен момент часу τ відображається у деяку обмежену область ($\mathbf{X}$) зі скінченною границею ($\partial\mathbf{X}$) тривимірного евклідового простору $\mathbf{X}$, який віднесений до декартової прямокутної системи координат.

Компонентам $\mathbf{K}_i^*$ матеріального середовища $\mathbf{K}^*$ ставимо у відповідність матеріальні континууми $\mathbf{K}_i$ ($i = 1, 2$). Матеріальні точки $K_i \in \mathbf{K}_i$ цих континуумів наділяються властивостями дискретної сукупності реальних матеріальних частинок компонент $\mathbf{K}_i^*$.

Закони руху матеріальних точок континуумів $\mathbf{K}_1$ і $\mathbf{K}_2$ є заданими, якщо відомі взаємнооднозначні залежності

$$\vec{r}_1 = \vec{r}_1(\vec{r}_0;\tau), \quad \vec{r}_2 = \vec{r}_2(\vec{r}_0;\tau), \tag{1}$$

де $\vec{r}_1$ і $\vec{r}_2$ — радіус-вектори матеріальних точок континуумів у момент часу τ, а $\vec{r}_0$ — радіус-вектор цих точок у момент часу τ_0 (вихідна конфігурація). Внаслідок бієктивності цих залежностей справджуються такі обернені зв'язки

$$\vec{r}_0 = \vec{r}_0(\vec{r}_1;\tau) \quad \text{або} \quad \vec{r}_0 = \vec{r}_0(\vec{r}_2;\tau). \tag{2}$$

Диференціюванням за часом залежностей (1) означуємо швидкості руху $\vec{v}_1$, $\vec{v}_2$ матеріальних точок континуумів $\mathbf{K}_1$, $\mathbf{K}_2$, а саме

$$\vec{v}_1(\vec{r}_0;\tau) = \frac{\partial \vec{r}_1(\vec{r}_0;\tau)}{\partial\tau}, \quad \vec{v}_2(\vec{r}_0;\tau) = \frac{\partial \vec{r}_2(\vec{r}_0;\tau)}{\partial\tau}. \tag{3}$$

Якщо умова індивідуалізації $x_0^\alpha \equiv \xi^\alpha$ ($\alpha = \overline{1,3}$) [9], тобто значення координат радіус-вектора $\vec{r}_0$ матеріальних точок континуумів $\mathbf{K}_1$ і $\mathbf{K}_2$ у початковій конфігурації, задана так, що

$$\vec{r}_0 = \vec{r}_1(\vec{r}_0;0), \quad \vec{r}_0 = \vec{r}_2(\vec{r}_0;0), \tag{4}$$

то швидкості $\vec{v}_1$, $\vec{v}_2$ можемо подати у вигляді

$$\vec{v}_1 = \vec{v}_1(\vec{r},\tau), \quad \vec{v}_2 = \vec{v}_2(\vec{r},\tau), \tag{5}$$

де $\vec{r}$ — радіус-вектор вибраної точки простору. Тоді швидкості $\vec{v}_1$ і $\vec{v}_2$ можна розуміти як питомі потоки імпульсу для матеріальних точок відповідних континуумів.

Диференціюванням залежностей (1) за змінними ξ^α означимо вектори координатних базисів супутніх (лагранжевих) систем координат континуумів $\mathbf{K}_1$ і $\mathbf{K}_2$, які рухаються разом з їхніми матеріальними точками, а саме

$$\vec{i}_\alpha^{\,1}(\vec{r}_0,\tau) = \frac{\partial \vec{r}_1(\vec{r}_0,\tau)}{\partial \xi^\alpha} \equiv \vec{i}_\alpha^{\,1}, \quad \vec{i}_\alpha^{\,2}(\vec{r}_0,\tau) = \frac{\partial \vec{r}_2(\vec{r}_0,\tau)}{\partial \xi^\alpha} \equiv \vec{i}_\alpha^{\,2} \quad \left(\alpha = \overline{1,3}\right). \tag{6}$$

Ці вектори, з використанням співвідношень (2), можемо також записати у вигляді

$$\vec{i}_\alpha^{\,1} = \vec{i}_\alpha^{\,1}(\vec{r},\tau), \quad \vec{i}_\alpha^{\,2} = \vec{i}_\alpha^{\,2}(\vec{r},\tau), \tag{7}$$

який відповідає польовому опису тіла.

Метричні властивості континуумів $\mathbf{K}_1$ і $\mathbf{K}_2$ визначаються компонентами коваріантних метричних тензорів

$$g_{\alpha\beta}^1 = \vec{i}_\alpha^{\,1} \cdot \vec{i}_\beta^{\,1}, \quad g_{\alpha\beta}^2 = \vec{i}_\alpha^{\,2} \cdot \vec{i}_\beta^{\,2}, \tag{8}$$

а їхня деформація — зміною метрики супутніх систем координат при переході з вихідної конфігурації в актуальну, тобто

$$\varepsilon_{\alpha\beta}^1 = \frac{1}{2}\left(g_{\alpha\beta}^1 - g_{\alpha\beta}^0\right), \quad \varepsilon_{\alpha\beta}^2 = \frac{1}{2}\left(g_{\alpha\beta}^2 - g_{\alpha\beta}^0\right), \tag{9}$$

де $g_{\alpha\beta}^0 = \vec{i}_\alpha^{\,0} \cdot \vec{i}_\beta^{\,0} = \delta_{\alpha\beta}$ — метрика у початковий момент часу $\tau = \tau_0$, $\vec{i}_\alpha^{\,0}$ — базисний орт декартової системи координат, $\delta_{\alpha\beta}$ — символ Кронекера. Крапка між величинами означає операцію згортки (скалярного добутку величин).

Балансові рівняння. Закони збереження та балансові рівняння записуються для фіксованої за точками простору **X** довільної області (**X**). Диференціальну (локальну) форму одержимо з використанням теореми Остроградського-Гауса та довільності вибору області (**X**).

Закон збереження маси складових компонент набуває вигляду

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial \tau} + \vec{\nabla} \cdot (\rho_i \vec{v}_i) = 0 \quad (i = 1, 2), \tag{10}$$

де ρ_i — густина компоненти i з розрахунку на одиницю об'єму в актуальній конфігурації; $\vec{\nabla}$ — оператор Гамільтона.

Відзначимо, що розв'язками рівнянь (10), у силу формул (3), (6) і (8), є

$$\rho_i = \rho_i^0 \left(g_i / g_0\right)^{1/2}, \quad g_i = \det\left\|g_{\alpha\beta}^i\right\| \quad \text{і} \quad g_0 = \det\left\|g_{\alpha\beta}^0\right\| \quad (i = 1, 2), \tag{11}$$

де ρ_i^0 — густини компонент у вихідній конфігурації (у момент часу $\tau = \tau_0$).

Рівняння балансу імпульсу приймемо у формі

$$\frac{\partial\left(\rho_i \vec{v}_i\right)}{\partial \tau} + \vec{\nabla} \cdot \left(\rho_i \vec{v}_i \otimes \vec{v}_i\right) = \vec{\nabla} \cdot \hat{\sigma}_i + \rho_i \vec{g}_i + \left(-1\right)^i \vec{P} \quad \left(i = \overline{1,2}\right), \tag{12}$$

де $\hat{\sigma}_i$ — тензор напружень Коші для компоненти i; $\vec{g}_i = -\vec{\nabla}\psi_i$ — масова потенціальна та консервативна ($\partial\psi_i / \partial\tau = 0$) сила, ψ_i — скалярний потенціал масових сил; $\vec{P}$ — сила взаємодії між континуумами; $\vec{v}_i \otimes \vec{v}_i$ — діада, утворена векторами швидкості.

Якщо домножити закон збереження маси (10) на скалярний потенціал масових сил ψ_i і врахувати умови їх консервативності, то одержимо рівняння балансу потенціальної енергії

$$\frac{\partial\left(\rho_i \psi_i\right)}{\partial \tau} + \vec{\nabla} \cdot \left(\rho_i \psi_i \vec{v}_i\right) = -\rho_i \vec{v}_i \cdot \vec{g}_i \ . \tag{13}$$

Відповідно, домножуючи скалярно рівняння балансу імпульсу (12) на вектор швидкості $\vec{v}_i$, після певних перетворень отримаємо рівняння балансу кінетичної енергії

$$\frac{\partial}{\partial \tau}\left(\frac{\rho_i \vec{v}_i^2}{2}\right) + \vec{\nabla} \cdot \left(\frac{\rho_i \vec{v}_i^2}{2} \vec{v}_i\right) = \vec{\nabla} \cdot \left(\hat{\sigma}_i \cdot \vec{v}_i\right) - \hat{\sigma}_i : \vec{\nabla} \otimes \vec{v}_i + \rho_i \vec{g}_i \cdot \vec{v}_i + \left(-1\right)^i \vec{P} \cdot \vec{v}_i \,. \tag{14}$$

Повна енергія для кожної компоненти тіла задовольняє балансове рівняння

$$\frac{\partial\ \left(\rho_i e_i\right)}{\partial \tau} + \vec{\nabla} \cdot \left(\rho_i e_i \vec{v}_i\right) = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_{ei} + \left(-1\right)^i e \,, \tag{15}$$

де $\rho_i e_i = \rho_i \vec{v}_i^2 / 2 + \rho_i \psi_i + \rho_i u_i$ — об'ємна густина повної енергії (з розрахунку на одиницю об'єму), e_i і u_i — масові густини повної та внутрішньої енергій компоненти i з розрахунку на одиницю її маси; $\vec{J}_{ei} = \vec{J}_{Qi} - \hat{\sigma}_i \cdot \vec{v}_i$ — потік повної енергії, $\vec{J}_{Qi}$ — потік тепла у компоненті i тіла; e — енергія, якою компоненти обмінюються локально.

Якщо у балансовому рівнянні (15) для повної енергії використати балансові співвідношення (13) і (14) для потенціальної та кінетичної енергій і вираз для потоку повної енергії, то отримаємо рівняння балансу внутрішньої енергії для компоненти тіла

$$\frac{\partial(\rho_i u_i)}{\partial\tau}+\vec{\nabla}\cdot(\rho_i u_i\vec{v}_i)=-\vec{\nabla}\cdot\vec{J}_{Qi}+\hat{\sigma}_i:\vec{\nabla}\otimes\vec{v}_i-(-1)^i\vec{P}\cdot\vec{v}_i+(-1)^i e\,. \tag{16}$$

Рівняння Гіббса. Приймемо принцип локальної термодинамічної рівноваги. Нехай рівноважний стан фізично малої макрочастини системи $(\delta\mathbf{K}^*)\subset\mathbf{K}^*$ визначається значеннями спряжених макроскопічних параметрів

$$T_i-s_i\,,\quad \tilde{\sigma}_i^{\alpha\beta}-g_{\alpha\beta}^i\quad(\alpha,\beta=\overline{1,3}\,;\,i=1,2), \tag{17}$$

де T_i — абсолютна температура, s_i — питома ентропія з розрахунку на одиницю маси компоненти i, $\tilde{\sigma}_i^{\alpha\beta}$ — контраваріантні компоненти тензора напружень Коші (хвилькою позначено значення у рівноважному стані).

Із врахуванням рівнянь балансу маси (10) і формул (3), (6), (8) та (9), рівняння балансу внутрішньої енергії (16) запишемо у вигляді

$$\rho_i\frac{d_i u_i}{d\tau}=-\vec{\nabla}\cdot\vec{J}_{Qi}+\frac{1}{2}\sigma_i^{\alpha\beta}\frac{d_i}{d\tau}\left(g_{\alpha\beta}^i\right)-(-1)^i\vec{P}\cdot\vec{v}_i+(-1)^i e\,, \tag{18}$$

де $d_i.../d\tau=\partial.../\partial\tau+\vec{v}_i\cdot\vec{\nabla}_i...$ — субстанціональна похідна за часом, $\vec{\nabla}_i=\vec{i}_i^{\,\alpha}\,\partial.../\partial\xi^\alpha$, $\vec{i}_i^{\,\alpha}$ — контраваріантні орти супутньої системи координат (i = 1, 2). Підсумовування виконується тільки за грецькими індексами, які повторюються в межах одного доданку.

Якщо локальний рівноважний стан підсистем задається значеннями величин T_i та $\left\{\tilde{\sigma}_i^{\alpha\beta}\right\}$, то зміну ентропії цих підсистем можемо означити формулою

$$ds_i=\frac{dQ_{ci}}{T_i}\,, \tag{19}$$

де dQ_{ci} — енергія, яку отримала підсистема $(\delta\mathbf{K}_i^*)$ фізично малої макрочастини системи $(\delta\mathbf{K}^*)$ у формі тепла. За відсутності джерел тепла маємо

$$\rho_i\frac{d_i Q_{ci}}{d\tau}=-\vec{\nabla}\cdot\vec{J}_{Qi}^{\,c}\,, \tag{20}$$

де $\vec{J}_{Qi}^{\,c}$ — потік тепла через граничну поверхню $(\partial\delta\mathbf{K}_i^*)$ підсистеми $(\delta\mathbf{K}_i^*)$.

Тоді для квазістатичних змін стану, з використанням рівняння притоку тепла (20) та означення ентропії (19), рівняння балансу внутрішньої енергії (18) набувають вигляду

$$\rho_i\frac{d_i u_i}{d\tau}=T_i\rho_i\frac{d_i s_i}{d\tau}+\frac{1}{2}\tilde{\sigma}_i^{\alpha\beta}\frac{d_i}{d\tau}g_{\alpha\beta}^i\quad(i=1,2). \tag{21}$$

Підкреслимо, що отримане рівняння, як і рівняння (18), пов'язує відповідні фізичні величини для одних і тих же інфінітизимально близьких станів, заданих значеннями параметрів (17). Тому рівняння (21) можемо записати у формі кінцевого співвідношення — рівняння Гіббса [2, 5]

$$d\,u_i = T_i d\,s_i + \frac{1}{2\rho_i}\tilde{\sigma}_i^{\alpha\beta} d\left(g_{\alpha\beta}^i\right). \tag{22}$$

Диференціальна 1-форма (22) пов'язує між собою дві термодинамічні величини екстенсивної природи — внутрішню енергію u_i й ентропію s_i, кожна з яких може розглядатись як функція стану за відповідного вибору незалежних параметрів, що задають цей стан. Ця форма може бути використана для встановлення рівнянь стану.

Якщо внутрішня енергія u_i є термодинамічним потенціалом, тобто $u_i = u_i\left(s_i, \left\{g_{\alpha\beta}^1\right\}\right)$, то з рівняння Гіббса (22) маємо таку загальну форму рівнянь стану

$$T_i = \left(\frac{\partial u_i}{\partial s_i}\right)_{\left\{g_{\alpha\beta}^i\right\}}, \qquad \frac{1}{2\rho_i}\tilde{\sigma}_i^{\alpha\beta} = \left(\frac{\partial u_i}{\partial g_{\alpha\beta}^i}\right)_{s_i}. \tag{23}$$

Конкретна структура залежностей (23) визначається з використанням експериментальних даних або методами фізики твердого тіла.

Рівняння балансу ентропії. Співставляючи рівняння балансу внутрішньої енергії (18) і рівняння Гіббса у формі (21) та приймаючи $\sigma_i^{\alpha\beta} = \tilde{\sigma}_i^{\alpha\beta}$ (не розглядаються нерівноважні процеси, які пов'язані з релаксацією механічних напружень), отримаємо рівняння балансу ентропії компонент тіла у вигляді

$$\frac{\partial\left(\rho_i s_i\right)}{\partial\tau} + \vec{\nabla}\cdot\left(\rho_i s_i \vec{v}_i\right) = -\vec{\nabla}\cdot\left(\frac{\vec{J}_{Qi}}{T_i}\right) + \vec{J}_{Qi}\cdot\vec{\nabla}\left(\frac{1}{T_i}\right) - \left(-1\right)^i \vec{P}\cdot\frac{\vec{v}_i}{T_i} + \left(-1\right)^i \frac{e}{T_i}. \tag{24}$$

Підсумовуванням рівняння (24) за індексом i одержимо балансове рівняння для ентропії підсистеми $\delta\mathbf{K}^* = \delta\mathbf{K}_1^* \bigcup \delta\mathbf{K}_2^*$ загалом, а саме

$$\frac{\partial}{\partial\tau}\left(\rho_1 s_1 + \rho_2 s_2\right) + \vec{\nabla}\cdot\left(\rho_1 s_1 \vec{v}_1 + \rho_2 s_2 \vec{v}_2\right) = -\vec{\nabla}\cdot\vec{J}_s + \sigma_s. \tag{25}$$

Тут введено такі позначення: $\vec{J}_s = \vec{J}_{s1} + \vec{J}_{s2}$ — сумарний потік ентропії, $\vec{J}_{s1} = \vec{J}_{Q1}/T_1$, $\vec{J}_{s2} = \vec{J}_{Q2}/T_2$ — потоки ентропії у підсистемах $\mathbf{K}_1$ і $\mathbf{K}_2$; $\sigma_s = \vec{J}_{Q1}\cdot\vec{X}_{Q1} + \vec{J}_{Q2}\cdot\vec{X}_{Q2} + \vec{P}\cdot\vec{X}_p + eX_T \geq 0$ — потужність виробництва ентропії; $\vec{X}_{Qi} = \vec{\nabla}\left(1/T_i\right)$, $\vec{X}_p = \vec{v}_1/T_1 - \vec{v}_2/T_2$, $X_T = 1/T_2 - 1/T_1$ — термодинамічні сили, які спряжені до відповідних векторних потоків $\vec{J}_{Qi}$ ($i = 1, 2$), $\vec{P}$ і скалярного потоку e. Додатна означеність виробництва ентропії є наслідком другого закону термодинаміки.

Кінетичні співвідношення. Термодинамічні потоки вважаємо функціями термодинамічних сил. Тоді при виконанні умов взаємності Онзагера [4] існує кінетичний потенціал [7] $\Pi = \Pi\left(\vec{X}_{Q1}, \vec{X}_{Q2}, \vec{X}_p, X_T\right)$, диференціал якого

$$d\Pi = \vec{J}_{Q1} \cdot d\vec{X}_{Q1} + \vec{J}_{Q2} \cdot d\vec{X}_{Q2} + \vec{P} \cdot d\vec{X}_p + e\, dX_T . \tag{26}$$

Якщо залежність $\Pi = \Pi\left(\left\{ \vec{X}_{Q\,i} \right\}, \vec{X}_p, X_T \right)$ є відомою, то з формули (29) отримуємо загальну форму кінетичних співвідношень

$$\vec{J}_{Qi} = \frac{\partial \Pi}{\partial \vec{X}_{Qi}}, \quad \vec{P} = \frac{\partial \Pi}{\partial \vec{X}_p}, \quad e = \frac{\partial \Pi}{\partial X_T} \quad (i = 1, 2). \tag{27}$$

Як і у випадку рівнянь стану, залежність $\Pi = \Pi\left(\left\{ \vec{X}_{Q\,i} \right\}, \vec{X}_p, X_T \right)$ визначається експериментальними чи іншими методами.

Записані співвідношення складають повну систему рівнянь для визначення введених у розгляд фізичних величин. Частина з цих співвідношень, наприклад, рівняння стану (23) і кінетичні рівняння (27), є кінцевими аналітичними виразами. Це дозволяє зменшити кількість невідомих функцій розв'язку. Вибір мінімальної кількості таких функцій є неєдиним і визначається специфікою конкретної задачі. Так, якщо вивчаються переміщення точок тіла та його деформація, то до кінцевих аналітичних виразів належать також зв'язки (3) й (11) (рівняння балансу маси компонент (10) інтегруються в явному вигляді).

2. Одноконтинуумні наближення

При розгляді конкретних задач для реальних бінарних сплавів виникають труднощі, зумовлені визначенням та інтерпретацією фізичних величин, які пов'язані з міжкомпонентною взаємодією. Для цього, як правило, необхідно виконати цільові експериментальні вимірювання, тоді як практичний інтерес часто мають лише властивості тіла в цілому або однієї з його компонент. У зв'язку з цим сформулюємо одноконтинуумні варіанти опису систем.

2.1. Наближення континуума центрів мас. Конфігураційні та кінематичні характеристики континуума центрів мас $\mathbf{K}_c$, континуумів $\mathbf{K}_1$ і $\mathbf{K}_2$ означуються аналогічно. При польовому їх поданні ці характеристики пов'язані співвідношеннями

$$\rho\vec{r} = \rho_1\vec{r}_1 + \rho_2\vec{r}_2 , \quad \rho\vec{v} = \rho_1\vec{v}_1 + \rho_2\vec{v}_2 , \quad \rho = \rho_1 + \rho_2 , \tag{28}$$

де $\vec{r}, \vec{v}$ — радіус-вектор довільної матеріальної точки континуума центрів мас і її швидкість, ρ — сумарна густина.

Балансові рівняння. Підсумовуючи рівняння збереження маси окремих компонент системи (10) за індексом *i*, отримаємо закон збереження маси для тіла загалом

$$\frac{\partial \rho}{\partial \tau} + \vec{\nabla} \cdot \left(\rho\vec{v}\right) = 0 . \tag{29}$$

Із законів збереження маси тіла (29) та маси окремих компонент системи (10), випливають такі рівняння балансу концентрацій компонент

$$\rho\frac{dC_i}{d\tau}=-\vec{\nabla}\cdot\left(\rho_i\vec{w}_i\right), \tag{30}$$

де $C_i=\rho_i/\rho$ — масові концентрації компонент, які задовольняють умову нормування $C_1+C_2=1$; $\vec{w}_i=\vec{v}_i-\vec{v}$ — відносні швидкості компонент тіла ($i=1,2$); $d.../d\tau=\partial.../\partial\tau+\vec{v}\cdot\vec{\nabla}...$ — субстанціональна похідна, яка означена для континуума центрів мас $\mathbf{K}_c$.

Рівняння балансу імпульсу для матеріальних точок континуума центрів мас

$$\rho\frac{d\vec{v}}{d\tau}=\vec{\nabla}\cdot\hat{\sigma}^*+\rho\vec{g} \tag{31}$$

одержимо як наслідок рівнянь балансу імпульсу окремих компонент (12), якщо їх просумувати, прийняти, що $\hat{\sigma}^*=\sum_i\left(\hat{\sigma}_i-\rho_i\vec{w}_i\otimes\vec{w}_i\right)$ і $\rho\vec{g}=\rho_1\vec{g}_1+\rho_2\vec{g}_2$, та використати закон збереження маси (29).

З рівнянь балансу внутрішньої енергії окремих компонент (16) і закону збереження маси (29) отримаємо балансове співвідношення для внутрішньої енергії

$$\rho\frac{du}{d\tau}=-\vec{\nabla}\cdot\vec{J}_Q+\left(\hat{\sigma}_1+\hat{\sigma}_2\right):\vec{\nabla}\otimes\vec{v}+\hat{\sigma}_1:\vec{\nabla}\otimes\vec{w}_1+\hat{\sigma}_2:\vec{\nabla}\otimes\vec{w}_2-\vec{P}\cdot\left(\vec{w}_2-\vec{w}_1\right), \tag{32}$$

де $\rho u=\rho_1u_1+\rho_2u_2$ — питома внутрішня енергія з розрахунку на одиницю об'єму, $\vec{J}_Q=\vec{J}_{Q1}+\vec{J}_{Q2}+\sum_i\rho_iu_i\vec{w}_i$ — результуючий потік тепла.

Рівняння Гіббса. Використовуючи субстанціональну форму, яка пов'язана з рухом матеріальних точок континуума центрів мас $\mathbf{K}_c$, а також означення ентропії $ds=dQ_c/T$ і відповідне рівняння притоку тепла $\rho\,dQ_c/d\tau=-\vec{\nabla}\cdot\vec{J}_Q^c$, рівняння балансу внутрішньої енергії (32) запишемо у вигляді

$$\begin{aligned}\rho\frac{du}{d\tau}&=T\rho\frac{ds}{d\tau}+\left(\hat{\sigma}'_1+\hat{\sigma}'_2\right):\frac{d}{d\tau}\left(\vec{\nabla}_0\otimes\vec{u}\right)^{\mathrm{T}}+\\&+\hat{\sigma}'_1:\frac{d}{d\tau}\left(\vec{\nabla}_0\otimes\vec{u}_1\right)^{\mathrm{T}}+\hat{\sigma}'_2:\frac{d}{d\tau}\left(\vec{\nabla}_0\otimes\vec{u}_2\right)^{\mathrm{T}},\end{aligned} \tag{33}$$

де $\hat{\sigma}'_i=\left(\vec{\nabla}\otimes\vec{r}_0\right)^{\mathrm{T}}\cdot\hat{\sigma}_i^*$ — тензор напружень, який має структуру тензора Піоли-Кірхгофа ($i=1,2$), $\vec{\nabla}$ і $\vec{\nabla}_0$ — оператори Гамільтона в актуальній і вихідній конфігураціях; $\vec{u}_i=\vec{r}_i-\vec{r}$ — зміщення точок континуумів $\mathbf{K}_i$ відносно континуума $\mathbf{K}_c$; $\vec{u}=\vec{r}_2-\vec{r}_1$; індекс «T» означає операцію транспонування.

Із рівняння балансу внутрішньої енергії (33) отримаємо таке рівняння Гіббса

$$du=Tds+\frac{1}{\rho}\left(\hat{\sigma}'_1+\hat{\sigma}'_2\right):d\left(\vec{\nabla}_0\otimes\vec{r}\right)^{\mathrm{T}}+\frac{1}{\rho}\hat{\sigma}'_1:d\left(\vec{\nabla}_0\otimes\vec{u}_1\right)^{\mathrm{T}}+\frac{1}{\rho}\hat{\sigma}'_2:d\left(\vec{\nabla}_0\otimes\vec{u}_2\right)^{\mathrm{T}}. \tag{34}$$

Величини $\vec{u}_1$ і $\vec{u}_2$ пов'язані між собою умовою $C_1\vec{u}_1 + C_2\vec{u}_2 = 0$. Перейдемо до нових змінних $\vec{r}$ і $\vec{u}$. При цьому $\vec{w}_1 = -C_2\vec{w}$ і $\vec{w}_2 = C_1\vec{w}$, $\vec{w} = \vec{v}_2 - \vec{v}_1$.

Приймемо, що внутрішня енергія є термодинамічним потенціалом змінних $s, \vec{\nabla}_0 \otimes \vec{r}$ і $\vec{\nabla}_0 \otimes \vec{u}$. Тоді, із врахуванням рівняння Гіббса (34) у нових змінних, одержимо такі рівняння стану

$$T = \frac{\partial u}{\partial s}, \quad \hat{\sigma}'_1 + \hat{\sigma}'_2 = \rho \frac{\partial u}{\partial\left(\vec{\nabla}_0 \otimes \vec{r}\right)^{\mathrm{T}}}, \quad \left(C_1\hat{\sigma}'_2 - C_2\hat{\sigma}'_1\right) = \rho \frac{\partial u}{\partial\left(\vec{\nabla}_0 \otimes \vec{u}\right)^{\mathrm{T}}}. \tag{35}$$

Тут $\partial u / \partial \hat{C} = \left(\partial u / \partial C^{\alpha\beta}\right)\vec{i}_\alpha \otimes \vec{i}_\beta$ — похідна скалярної функції за тензором $\hat{C}$.

Рівняння балансу ентропії та кінетичні співвідношення. Співставляючи рівняння балансу внутрішньої енергії у формі (32) і (33), отримуємо таке рівняння балансу ентропії

$$\rho \frac{ds}{d\tau} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_s + \vec{J}_Q \cdot \vec{\nabla}\left(\frac{1}{T}\right) - \vec{P} \cdot \frac{\vec{w}}{T} + \sigma_{cs}, \tag{36}$$

де $\vec{J}_s = \vec{J}_Q / T$ — потік ентропії, σ_{cs} — виробництво ентропії.

Якщо прийняти співвідношення взаємності Онзагера та ввести кінетичний потенціал $\Pi_c = \Pi_c\left(\vec{X}_Q, \vec{X}_p\right)$, то із врахуванням принципу Кюрі кінетичні рівняння для континуума центрів мас набувають вигляду

$$\vec{J}_Q = \frac{\partial \Pi_c}{\partial \vec{X}_Q}, \quad \vec{P} = \frac{\partial \Pi_c}{\partial \vec{X}_p}, \tag{37}$$

де $\vec{X}_Q = \vec{\nabla}(1/T)$, $\vec{X}_p = \vec{w}/T$ — термодинамічні сили та $\sigma_{cs} = \vec{J}_Q \cdot \vec{X}_Q - \vec{P} \cdot \vec{X}_p \geq 0$.

Із вихідних рівнянь балансу імпульсу (12) й маси (10) компонент тіла маємо

$$\rho \frac{d\vec{w}}{d\tau} = C_2^{-1}\vec{\nabla} \cdot \hat{\sigma}_2 - C_1^{-1}\vec{\nabla} \cdot \hat{\sigma}_1 + \rho\left(\vec{g}_2 - \vec{g}_1\right) + \vec{f}_w, \tag{38}$$

де $\vec{f}_w = \rho\vec{w} \cdot \left[\vec{\nabla} \otimes \vec{v} - C_1\vec{\nabla} \otimes \left(C_1\vec{w}\right) + C_2\vec{\nabla} \otimes \left(C_2\vec{w}\right)\right]$ — сила, пропорційна до швидкості відносного зміщення $\vec{w}$.

Відзначимо, що рівняння (38) можна також подати у вигляді

$$\rho \frac{d\vec{w}}{d\tau} = \vec{\nabla} \cdot \left(C_2^{-1}\hat{\sigma}_2 - C_1^{-1}\hat{\sigma}_1\right) + \rho\left(\vec{g}_2 - \vec{g}_1\right) + \vec{f}^*_w, \tag{39}$$

де $\vec{f}^*_w = \vec{f}_w + \hat{\sigma}_1 \cdot \vec{\nabla}\left(C_1^{-1}\right) - \hat{\sigma}_2 \cdot \vec{\nabla}\left(C_2^{-1}\right)$.

Рівняння (38) або (39) для знаходження вектора $\vec{w}$ доповнює необхідну систему співвідношень для знаходження введених у розгляд величин.

2.2. Наближення базового континуума. Наведемо вихідні модельні співвідношення для випадку, коли перша компонента приймається за базову. При цьому вважаємо, що справджується така умова $\rho_1 >> \rho_2$. Балансові співвідношення для маси (10), імпульсу (12) і внутрішньої енергії (16) запишемо у субстанціональній формі, яка пов'язана з рухом матеріальних точок континуума $\mathbf{K}_1$.

Балансові співвідношення. Рівняння балансу маси компонент матеріального середовища (10) набувають вигляду

$$\frac{\partial \rho_1}{\partial \tau} + \vec{\nabla} \cdot \left(\rho_1 \vec{v}_1\right) = 0\,, \qquad \frac{\partial \rho_2}{\partial \tau} + \vec{\nabla} \cdot \left(\rho_2 \vec{v}_1\right) = -\vec{\nabla}\left(\rho_2 \vec{w}\right). \tag{40}$$

Баланс імпульсу (12) запишеться у формі

$$\rho_1 \frac{d_1 \vec{v}_1}{d\tau} = \vec{\nabla} \cdot \hat{\sigma}_1 + \rho_1 \vec{g}_1 - \vec{P}\,,$$
$$\rho_1 \frac{d_1}{d\tau}\left(\frac{\rho_2 \vec{v}_2}{\rho_1}\right) = \vec{\nabla} \cdot \left(\hat{\sigma}_2 - \rho_2 \vec{v}_2 \otimes \vec{w}\right) + \rho_2 \vec{g}_2 + \vec{P}\,. \tag{41}$$

Рівняння балансу внутрішньої енергії (16) для компонент матеріального середовища є такими

$$\rho_1 \frac{d_1 u_1}{d\tau} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_{Q_1} + \hat{\sigma}_1 : \vec{\nabla} \otimes \vec{v}_1 + \vec{P} \cdot \vec{v}_1 - e\,,$$
$$\rho_1 \frac{d_1}{d\tau}\left(\frac{\rho_2 u_2}{\rho_1}\right) = -\vec{\nabla} \cdot \left(\vec{J}_{Q_2} + \rho_2 u_2 \vec{w}\right) + \hat{\sigma}_2 : \vec{\nabla} \otimes \vec{v}_2 - \vec{P} \cdot \vec{v}_2 + e\,. \tag{42}$$

У співвідношеннях (41), (42) перейдемо до незалежних змінних $\vec{v}_1$ і $\vec{w} = \vec{v}_2 - \vec{v}_1$. Тоді з рівнянь балансу імпульсу (41) одержуємо

$$\rho_1 \frac{d_1}{d\tau}\left[\left(1 + \frac{\rho_2}{\rho_1}\right)\vec{v}_1\right] = \left(1 + \frac{\rho_2}{\rho_1}\right)\vec{\nabla} \cdot \hat{\sigma}_1 - \vec{v}_1 \otimes \vec{\nabla} \cdot \left(\rho_2 \vec{w}\right) + \rho \vec{g}_1 - \vec{P}\left(1 + \frac{\rho_2}{\rho_1}\right), \tag{43}$$

$$\rho_1 \frac{d_1 \vec{w}}{d\tau} = \frac{\rho_1}{\rho_2}\vec{\nabla} \cdot \hat{\sigma}_2 - \vec{\nabla} \cdot \hat{\sigma}_1 - \rho_1 \vec{w} \cdot \left(\vec{\nabla} \otimes \vec{v}_1 + \vec{\nabla} \otimes \vec{w}\right) + \rho_1\left(\vec{g}_2 - \vec{g}_1\right) + \vec{P}\left(1 + \frac{\rho_1}{\rho_2}\right). \tag{44}$$

Додаючи рівняння балансу внутрішньої енергії (42) для першої та другої компоненти та використовуючи введені змінні, отримаємо

$$\rho_1 \frac{d_1 u^*}{d\tau} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_Q + \left(\hat{\sigma}_1 + \hat{\sigma}_2\right) : \vec{\nabla} \otimes \vec{v}_1 + \hat{\sigma}_2 : \vec{\nabla} \otimes \vec{w} - \vec{P} \cdot \vec{w}, \tag{45}$$

де приведена внутрішня енергія задається виразом $u^* = u_1 + \rho_2 u_2 / \rho_1$, а величина приведеного потоку тепла — співвідношенням $\vec{J}_Q = \vec{J}_{Q1} + \vec{J}_{Q2} + \rho_2 u_2 \vec{w}$.

Рівняння Гіббса. Рівняння (45) при квазістатичних переходах набуває вигляду

$$\rho_1 \frac{d_1 u^*}{d\tau} = T\rho_1 \frac{d_1 s^*}{d\tau} + \left(\hat{\sigma}_1'' + \hat{\sigma}_2''\right) : \frac{d_1}{d\tau}\left(\vec{\nabla}_0 \otimes \vec{r}_1\right) + \hat{\sigma}_1'' : \frac{d_1}{d\tau}\left(\vec{\nabla}_0 \otimes \vec{u}\right), \tag{46}$$

де величина приведеної ентропії задається виразом $s^* = s_1 + \rho_2 s_2 / \rho_1$, тензор напружень зі структурою тензора напружень Піоли-Кірхгофа вводиться тут із використанням конфігураційних і кінематичних характеристик континуума $\mathbf{K}_1$, тобто $\hat{\sigma}_i'' = \left(\vec{\nabla}_1 \otimes \vec{r}_0\right)^{\mathrm{T}} \cdot \hat{\sigma}_i$, а набла-оператор Гамільтона означається формулою $\vec{\nabla}_1 = \vec{i}_1^{\,\alpha}\, \partial .../\partial \xi^{\alpha}$.

Рівнянню балансу (46) для приведеної внутрішньої енергії u^* відповідає така диференціальна 1-форма — рівняння Гіббса

$$d_1 u^* = T d_1 s^* + \frac{1}{\rho_1}\left(\hat{\sigma}_1'' + \hat{\sigma}_2''\right) : d_1\left(\vec{\nabla}_0 \otimes \vec{r}_1\right) + \frac{1}{\rho_1}\hat{\sigma}_2'' : d_1\left(\vec{\nabla}_0 \otimes \vec{u}\right). \qquad (47)$$

При відомій функціональній залежності приведеної внутрішньої енергії u^* від макроскопічних змінних s^*, $\vec{\nabla}_0 \otimes \vec{r}_1$, $\vec{\nabla}_0 \otimes \vec{u}$, із співвідношення (47) отримаємо такі рівняння стану

$$T = \frac{\partial u^*}{\partial s^*}, \quad \hat{\sigma}_1'' + \hat{\sigma}_2'' = \rho_1 \frac{\partial u^*}{\partial\left(\vec{\nabla}_0 \otimes \vec{r}_1\right)}, \quad \hat{\sigma}_2'' = \rho_1 \frac{\partial u^*}{\partial\left(\vec{\nabla}_0 \otimes \vec{u}\right)}. \qquad (48)$$

Рівняння балансу ентропії, кінетичні рівняння, вирази для термодинамічних потоків і сил за своєю структурою аналогічні до співвідношень, одержаних у попередньому випадку — наближенні континуума центрів мас.

Висновки. З наведеного розгляду випливає, що при використанні наближення континуума центрів мас і наближення базової компоненти для опису механічних, теплових і дифузійних процесів у бінарних системах, поряд з традиційними термодинамічними параметрами (абсолютною температурою — питомою ентропією та компонентами тензора напружень — тензора деформації) виникають параметри, які враховують пружну поляризацію матеріалу, тобто недифузійні ефекти відносного руху точок континуумів. Це, своєю чергою, дозволяє дати додаткову фізичну інтерпретацію цілому ряду параметрів і характеристик, які використовуються в теорії мікрополярних середовищ. Окрім цього, шляхом наступних перетворень можемо ввести термодинамічні параметри: хімічний потенціал — концентрацію компонент, які відповідають дифузійному наближенню опису масоперенесення у таких системах.

Література

[1] *Бурак Я. Й., Чапля Є. Я.* Континуальні моделі нелінійної термомеханіки бінарних систем // Фіз.-хім. мех. матеріалів. — 1995. — № 4. — С. 7-15.

[2] *Гиббс Дж. В.* Термодинамика. Статистическая механика. — М.: Наука, 1982. — 584 с.

[3] *Де Гроот С. П., Мазур П.* Неравновесная термодинамика. — М.: Мир, 1964. — 456 с.

[4] *Дьярмати И.* Неравновесная термодинамика. — М.: Мир, 1974. — 304 с.

[5] *Мюнстер А*. Химическая термодинамика. — М.: Мир, 1971. — 295 с.
[6] *Нигматулин Р. И*. Динамика многофазных сред: в 2-х т. — М.: Наука, 1987. — Т. 1. — 464 с.; т. 2. — 360 с.
[7] *Подстригач Я. С., Швец Р. Н*. Термоупругость тонких оболочек. — К.: Наук. думка, 1978. — 344 с.
[8] *Пригожин И*. Введение в термодинамику необратимых процессов. — М.: Изд-во иностр. литературы, 1960. — 127 с.
[9] *Седов Л. И*. Механика сплошной среды: в 2-х т. — М.: Наука, 1976. — Т. 1. — 536 с.; т. 2. — 573 с.
[10] Физическое материаловедение: под ред. *Кана Р*.: в 3-х т. — М.: Мир, 1967. — Вып. 1. — 333 с., 1968. — Вып. 2. — 490 с., вып. 3. — 484 с.
[11] *Eringen A. C*. Mechanics of continuum. — New York: John Wiley and Sons, 1967. — 397 p.
[12] *Jakowluk A*. Procesy pełzania i zmęczenia w materiałach. — Warszawa: Wyd-wo Naukowo-Techniczne, 1993. — 484 s.
[13] *Nowacki W., Olesiak Z. S*. Termodyfuzja w ciałach stałych. — Warszawa: Państwowe Wyd-wo Naukowe, 1991. — 272 s.

Mechanical and Thermal Processes in Binary Systems

Jaroslav Burak, Janusz Lukowski, Petro Pelech, Yevhen Chaplya

On the basis of the multivelocity continuum theory approaches we formulate constructive relationships for a mathematical model of mechanical and thermal processes in binary solid solutions. These relationships are written in an approximation of both a mass centre continuum and dominant component. We show that use of one-continual approach leads naturally to taking into consideration conjugated thermodynamical parameters describing elastic relative displacements of components. Its introduction takes the opportunity of new physically interpretation for the parameters and characteristics which are used in the theory of micropolar media.

Механические и тепловые процессы в бинарных системах

Ярослав Бурак, Януш Луковски, Петро Пелех, Евгений Чапля

На основании подходов теории многоскоростного континуума сформулированы исходные соотношения математической модели механических и тепловых процессов в бинарных твердых растворах. Эти соотношения записаны в приближении континуума центра масс и базовой компоненты. Показано, что при использовании одноконтинуумных приближений естественным образом возникают сопряженные термодинамические параметры, которые описывают относительные упругие смещения компонент. Это, в свою очередь, позволяет дать дополнительную физическую интерпретацию параметрам и характеристикам, используемым в теории микрополярных сред.

Отримано 09.11.06