

# Фізико-Математична Модель Зв'язаних Теплових, Механічних і Дифузійних Процесів у Багатокомпонентних Тілах

В.Є. Гончарук

кафедра цивільної безпеки, Національний університет "Львівська політехніка";  
відділ математичного моделювання нерівноважних процесів, Центр математичного моделювання Інституту прикладних проблем механіки і математики ім. Я.С.Підстригача НАН України, Львів, Україна  
vegoncharuk@ukr.net

## Physical-Mathematical Model of Coupled Thermal, Mechanical and Diffusive Processes in Multicomponent Bodies

V. Goncharuk

Department of Civil Security, Lviv Polytechnic National University;  
Department of mathematical modeling nonequilibrium processes,  
Centre of Mathematical Modeling of Pidstryhach Institute for Applied Problems of Mechanics and Mathematics,  
Ukrainian Academy of Sciences  
Lviv, Ukraine  
vegoncharuk@ukr.net

**Анотація**—За континуально-термодинамічним підходом отримані вихідні співвідношення повної моделі механотермогетеродифузійних процесів з урахуванням розпаду мігруючої речовини. Проведена лінеаризація рівнянь стану та кінетичних співвідношень.

**Abstract**—By the continuum-thermodynamic approach the basic relationships of the complete model of mechanothermoheterodiffusive processes with taking into consideration of decay of migrating particles are obtained. Linearization of both the state equations and kinetic relations is carried out.

**Ключові слова**—континуально-термодинамічний підхід; фізико-математична модель; механотермогетеродифузія; багатокомпонентне середовище; балансове рівняння

**Keywords**—continuum-thermodynamic approach; physical-mathematical model; mechanothermoheterodiffusion; multicomponent media; balance equation

### I. Вступ

У багатьох випадках при математичному описі міграції домішкової речовини необхідно враховувати її природну деградацію та структуру матеріалу тіла [1-3]. Зокрема, у радіоактивних паливовмісних матеріалах, що виникли в результаті аварії на четвертому енергоблоці ЧАЕС, уна-

слідок розпаду утворюються мікроефекти, які істотно впливають на інтенсивність дифузії [1, 3]. У той же час математичне моделювання переносу забруднень безпосередньо пов'язано з певними схематичними уявленнями про пористе середовище, а відповідні прогнози оцінки, наприклад, захищеності ґрунтових вод, повинні враховувати розпад дифундуючої речовини [4, 5].

Тому в роботі запропоновано побудову фізико-математичної моделі за допомогою континуально-термодинамічного підходу [6] для опису взаємозв'язаних механічних, теплових і гетеродифузійних процесів з урахуванням розпаду мігруючої речовини.

### II. ОБ'ЄКТ ДОСЛІДЖЕННЯ

Вважаємо, що мала довільно вибрана область складається з монокристалів мінералів різного типу, які утворюють деформівний пористий скелет. Пори заповнені водним розчином домішкових речовин. Деяка частина води під впливом приповерхневих електричних полів скелету знаходиться в поляризованому зв'язаному стані [7, 8]. У певній мірі умовно в ній виділяється міцнозв'язана складова безпосередньо біля поверхні монокристалів мінералів (для якої ряд авторів зауважують помітну зміну густини та інших властивостей) та слабо адсорбований шар води, що шляхом нагрівання до температури кипіння пе-

ретвориться в пароподібний стан. Ця частина води, як правило, знаходиться у капілярно-зв'язаному або рухомому стані, а при наявності мережі крупних тріщин і пор – у гравітаційно-рухомому вигляді [7].

Частинки домішкової речовини одного сорту у рамках фізично малого елемента тіла (рис. 1) можуть знаходитись в об'ємі і на поверхні скелету (у зв'язаних зі скелетом поляризованих долях води) чи бути в розчині (капілярно-зв'язаній і гравітаційно рухомій долях води). З фізичної точки зору локально вони перебувають у різних станах. При цьому в наслідок радіоактивного розпаду, хімічних реакцій тощо вони розпадаються і утворюють частинки інших домішкових речовин. Таким чином вважаємо, що кожен довільний фізично малий елемент тіла містить частинки води, твердого скелету ґрунту, розпадні домішкові частинки і частинки, які утворилися внаслідок розпаду, у вказаних вище станах. При цьому ці складові розглядаються як термодинамічні компоненти системи.

Прийmemo, що тіло  $\mathbf{K}^*$  (дискретна сукупність матеріальних частинок) є багатокомпонентним розчином і утворене частинками домішкової речовини у поровому розчині  $\mathbf{K}_1^{*(1)}$ , поверхні  $\mathbf{K}_2^{*(1)}$  та об'ємі скелету  $\mathbf{K}_3^{*(1)}$ , які можуть розпадатися, та частинками порового розчину  $\mathbf{K}_4^{*(0)}$  і скелету  $\mathbf{K}_5^{*(0)}$ . При розпаді речовини  $\mathbf{K}_j^{*(1)}$  в стані  $j = \overline{1,3}$  утворюються частинки інших домішкових речовин  $\mathbf{K}_j^{*(2)}$  і  $\mathbf{K}_j^{*(3)}$ , причому частинки, що виникли внаслідок розпаду вже не розпадаються, тобто  $\mathbf{K}_j^{*(1)} \rightarrow \mathbf{K}_j^{*(2)} + \mathbf{K}_j^{*(3)}$ .

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

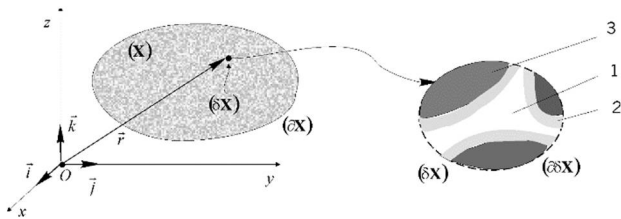


Рис. 1. Характерна структура фізично малого елемента тіла. Область 1 займає водний поровий розчин, область 2 – адсорбовані на скелеті ґрунту шари води, 3 – скелет ґрунту

При макроскопічному описі тіло  $\mathbf{K}^*$  розглядається як термодинамічна система, яка вкладає в обмежену область евклідового простору  $\mathbf{x}$ , що віднесений до декартової системи координат  $\{x^\alpha\}$  [6, 9]. Кожній компоненті тіла (підсистемам частинок  $\mathbf{K}_j^{*(0)}$ ,  $j = 4; 5$ , що утворюють скелет та розчин, а також частинкам розпадної домішкової речовини в різних станах  $\mathbf{K}_j^{*(1)}$  і частинкам, які утворилися внаслідок розпаду,  $\mathbf{K}_j^{*(i)}$ ,  $j = \overline{1,3}$ ,  $i = 2, 3$ ) співставляємо у відповідність континууми  $\mathbf{K}_j^{(i)}$  ( $i = \overline{0,3}$ ,  $j = \overline{1,5}$ ).

Розглянемо також континуум центрів мас  $\mathbf{K}_c$ , точкам яких приписуємо швидкість  $\vec{v}$  згідно із співвідношенням

$$\rho \vec{v} = \sum_{i=0}^3 \sum_{j=1}^5 \rho_j^{(i)}(\vec{r}, t) \vec{v}_j^{(i)}(\vec{r}, t), \quad (1)$$

де

$$\rho_j^{(i)}(\vec{r}, t) = \lim_{(\delta \mathbf{X}) \rightarrow 0} \left( \frac{\delta m_j^{(i)}}{\delta V} \right)$$

- густини компонент  $\mathbf{K}_j^{(i)}$ ,  $\delta m_j^{(i)}$  - їхня маса в області  $(\delta \mathbf{X})$  (рис. 1), об'єм якої  $\delta V$ :

$$\rho \equiv \rho(\vec{r}, t) = \sum_{i=0}^3 \sum_{j=1}^5 \rho_j^{(i)}(\vec{r}, t) \Phi \quad (2)$$

- сумарна густина тіла;  $\vec{v}_j^{(i)}$  - швидкості руху матеріальних точок континуумів  $\mathbf{K}_j^{*(i)}$ .

Вважаємо, що в умовах нестационарної взаємодії з зовнішнім середовищем, основними нерівноважними процесами, що протікають у тілі, є деформація, теплопровідність і дифузія домішкової речовини у кожному із вище згаданих станів, що супроводжуються взаємними переходами між ними та розпадом частинок.

### III. БАЛАНСОВІ РІВНЯННЯ

За вихідні співвідношення математичної моделі механотермогетеродифузії домішкової речовини двома шляхами у середовищі з пастками з урахуванням розпаду мігруючої речовини прийmemo закони збереження і балансові рівняння для маси, імпульсу та енергії, які сформулюємо для кожної з компонент або континууму центрів мас.

Зміна маси компоненти  $m_j^{(i)}$  відбувається за рахунок масових потоків і внутрішніх джерел, тоді мають місце рівняння балансу маси компоненти  $ij$

$$\frac{\partial \rho_j^{(i)}}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot (\rho_j^{(i)} \vec{v}_j^{(i)}) + w_j^{(i)} \quad (i = \overline{0,3}, j = \overline{1,5}), \quad (3)$$

де  $\vec{\nabla}$  - набла-оператор Гамільтона;  $w_j^{(i)}$  - густина внутрішнього джерела (або стоку) компоненти; крапкою позначений скалярний добуток.

Оскільки ми прийняли, що джерелом маси компоненти можуть бути процеси сорбції-десорбції частинок і розпад домішкової речовини, то потужність виробництва маси  $w_j^{(i)}$  в загальному випадку можна подати у вигляді суми

$$w_j^{(i)} = \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^5 \omega_{jk}^{(i)} + \bar{w}_j^{(i)} \quad (i = \overline{0,3}, j = \overline{1,5}),$$

де  $\omega_{jk}^{(i)}$  - потужність виробництва маси компоненти  $i$  у стані  $j$  у зв'язку з її переходом з континууму  $\mathbf{K}_k^{(i)}$ ;  $\bar{w}_j^{(i)}$  - потужність виробництва маси компоненти  $ij$  за

рахунок розпаду частинок компоненти  $i=1$  ( $i=2,3$ ,  $j=1,3$ ). Тоді

$$w_j^{(0)} = w_j^{(1)} = 0 \quad (\forall j), \quad \sum_{j=1}^3 \sum_{i=2}^3 w_j^{(i)} = 0; \quad (4)$$

У тому числі

$$\omega_{ij}^{(i)} = 0 \quad (\forall j), \quad \omega_{jk}^{(i)} = -\omega_{kj}^{(i)} \quad (\forall i, j, k), \quad \sum_{j=1}^5 \sum_{k=1}^5 \omega_{jk}^{(i)} = 0 \quad (\forall i).$$

Балансове рівняння (2) можна подати у вигляді

$$\frac{\partial \rho_j^{(i)}}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_j^{(i)0} + w_j^{(i)} \quad (i = \overline{0,3}, j = \overline{1,5}), \quad (5)$$

де  $\vec{J}_j^{(i)0} = \rho_j^{(i)} \vec{v}_j^{(i)}$  - масовий потік частинок компоненти  $i$  у стані  $j$ .

Просумуємо рівняння (3) або (5) за всіма індексами  $i$ ,  $j$  та врахуємо, що сумарна густина маси вводитьсья співвідношенням (2), а швидкість  $\vec{v}$  - рівнянням (1) або

$$\vec{v} = \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^3 \rho_j^{(i)} \vec{v}_j^{(i)} / \rho, \quad \text{тоді отримаємо}$$

$$\frac{d\rho}{dt} = -\rho \vec{\nabla} \cdot \vec{v}, \quad (5a)$$

де  $\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla}$  - повна похідна за часом.

Оскільки  $\rho = 1/v$ , де  $v$  - питомий об'єм, то формула (5a) еквівалентна

$$\frac{dv}{dt} = v \vec{\nabla} \cdot \vec{v}. \quad (5b)$$

Враховуючи, що  $\rho_j^{(i)} = C_j^{(i)} \rho$ , одержимо рівняння балансу для концентрацій компонент:

$$\rho \frac{dC_j^{(i)}}{dt} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_j^{(i)} + w_j^{(i)}, \quad i = \overline{0,3}, j = \overline{1,5}, \quad (6)$$

де  $\vec{J}_j^{(i)} = \rho_j^{(i)} (\vec{v}_j^{(i)} - \vec{v})$  - масовий потік компоненти  $ij$ ;

$C_j^{(i)} = \rho_j^{(i)} / \rho$  - масові концентрації компонент, які задовольняють умову нормування

$$\sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^3 C_j^{(i)} = 1. \quad (7)$$

Якщо використати умову нормування (7), то балансове рівняння (6) можна записати у вигляді

$$\rho \frac{dC_j^{(i)}}{dt} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_j^{(i)} + w_j^{(i)}, \quad i = \overline{0,3}, j = \overline{1,4}, \quad C_5^{(0)} = 1 - \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^3 C_j^{(i)}.$$

Рівняння балансу імпульсу для тіла в цілому (континууму  $\mathbf{K}_c$ ) має вигляд

$$\rho \frac{d\vec{v}}{dt} = \vec{\nabla} \cdot \hat{\Pi} + \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^3 \rho_j^{(i)} \vec{F}_j^{(i)}, \quad (8)$$

де  $\hat{\Pi} = \Pi^{\alpha\beta} \vec{i}^\alpha \otimes \vec{i}^\beta$  - симетричний тензор напружень Коші [10, 11],  $\vec{F}_j^{(i)}$  - масова потенціальна ( $\vec{F}_j^{(i)} = -\vec{\nabla} \psi_j^{(i)}$ ) і консервативна ( $\partial \psi_j^{(i)} / \partial t = 0$ ) сила, яка діє на  $i$ -ту компоненту у стані  $j$ ,  $\psi_j^{(i)}$  - потенціал сил (потенціальна енергія одиниці маси компоненти  $i$  у стані  $j$ ).

Домножимо закон збереження маси компонент (3) на скалярний потенціал  $\psi_j^{(i)}$ , віднесений до одиниці маси компоненти, і врахуємо умову їх консервативності. Тоді знайдемо рівняння балансу потенціальної енергії компоненти. Підсумовуючи записане рівняння за індексами  $i$  та  $j$ , означаючи потенціальну енергію точок континууму  $\mathbf{K}_c$   $\Psi$  формулою

$$\rho \Psi = \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^3 \rho_j^{(i)} \psi_j^{(i)}$$

і враховуючи  $\vec{J}_j^{(i)0} = \vec{J}_j^{(i)} + \rho_j^{(i)} \vec{v}$ , отримаємо рівняння балансу потенціальної енергії для тіла в цілому

$$\begin{aligned} \rho \frac{d\Psi}{dt} = & -\vec{\nabla} \cdot \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^3 \psi_j^{(i)} \vec{J}_j^{(i)} - \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^3 \rho_j^{(i)} \vec{F}_j^{(i)} \cdot \vec{v} - \\ & - \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^3 \vec{J}_j^{(i)} \cdot \vec{F}_j^{(i)} + \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^3 \psi_j^{(i)} w_j^{(i)}. \end{aligned}$$

Домножимо скалярно рівняння балансу імпульсу (8) на  $\vec{v}$  і використаємо тотожність  $\vec{\nabla} \cdot (\hat{\Pi} \cdot \vec{v}) \equiv \vec{v} \cdot (\vec{\nabla} \cdot \hat{\Pi}) + \hat{\Pi} : \vec{\nabla} \otimes \vec{v}$ , де знак «:» означає подвійну внутрішню згортку. Тоді маємо рівняння балансу кінетичної енергії

$$\rho \frac{d}{dt} \left( \frac{v^2}{2} \right) = \vec{\nabla} \cdot (\vec{v} \cdot \hat{\Pi}) - \hat{\Pi} : \vec{\nabla} \otimes \vec{v} + \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^3 \rho_j^{(i)} \vec{F}_j^{(i)} \cdot \vec{v}.$$

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

$$e \equiv \rho (u + \Psi + v^2/2) \quad (9)$$

і задовольняє закон збереження

$$\frac{\partial e}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_e, \quad (10)$$

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

$$\vec{J}_e = \rho(u + \Psi + v^2/2)\vec{v} + \vec{J}_Q - \hat{\Pi} \cdot \vec{v} + \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^3 (\psi_j^{(i)} + \mu_j^{(i)}) \vec{J}_j^{(i)}. \quad (11)$$

Тут  $\vec{J}_Q^{(j)}$  - потік енергії у формі тепла,  $\mu_j^{(i)}$  - хімічний потенціал компоненти  $i$  у стані  $j$  [12].

Якщо повна енергія підпорядковується (9)-(11), тоді має місце рівняння балансу питомої внутрішньої енергії

$$\rho \frac{du}{dt} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_Q - \vec{\nabla} \cdot \left( \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^3 \mu_j^{(i)} \vec{J}_j^{(i)} \right) + \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^3 \vec{J}_j^{(i)} \cdot \vec{F}_j^{(i)} + \hat{\Pi} : (\vec{\nabla} \otimes \vec{v})^T + \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^3 \psi_j^{(i)} w_j^{(i)}, \quad (12)$$

де операція  $(\dots)^T$  означає операцію транспонування.

#### IV. РІВНЯННЯ ГІББСА

Приймаємо гіпотезу локальної термодинамічної рівноваги. Нехай термодинамічний стан довільного макроскопічного елемента системи, який займає її малу підобласть, означений з допомогою таких спряжених параметрів як абсолютна температура  $T$ , питома ентропія  $s$ ; тензор напружень Коші у рівновазі  $\bar{\sigma}$ , тензор деформації  $\bar{\varepsilon}$ ; хімічний потенціал  $\mu_j^{(i)}$  і масова концентрація  $C_j^{(i)}$  компоненти  $i$  у стані  $j$ :

$$T - s, \quad \bar{\sigma}^{\alpha\beta} - \varepsilon_{\alpha\beta}, \quad \mu_j^{(i)} - C_j^{(i)},$$

де  $s = S/m$ ,  $S$  - ентропія системи в цілому;  $\bar{\sigma}^{\alpha\beta}$  - контраваріантні компоненти тензора напружень Коші у рівновазі,  $\varepsilon_{\alpha\beta}$  - коваріантні компоненти тензора деформації.

Питома внутрішня енергія системи є такою функцією стану  $u = u(s, v, \{C_j^{(i)}\})$ , яка задовольняє співвідношення

$$u = Ts + \frac{1}{\rho} \Pi^{\alpha\beta} \varepsilon_{\alpha\beta} + \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^3 \mu_j^{(i)} C_j^{(i)} \quad (\text{рівняння Ейлера}), \quad (13)$$

за умови, що в той же час інфінітимально малі зміни масової густини ентропії  $ds$ , питомого об'єму  $dv$  та масових концентрацій  $dC_j^{(i)}$  задовольняють рівняння

$$du = Tds + \frac{1}{\rho} \Pi^{\alpha\beta} d\varepsilon_{\alpha\beta} + \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^3 \mu_j^{(i)} dC_j^{(i)} \quad (\text{рівняння Гіббса}). \quad (14)$$

Оскільки масові концентрації задовольняють умову (7), то рівняння Гіббса (14) можна переписати у вигляді

$$du = Tds + \frac{1}{\rho} \Pi^{\alpha\beta} d\varepsilon_{\alpha\beta} + \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^3 \mu_j^{(i)} dc_j^{(i)}, \quad (15)$$

де  $\mu_j^{(i)} = \mu_j^{(i)} - \mu_5^{(0)}$ .

Субстанціональна форма рівняння Гіббса (15) буде

$$\rho \frac{du}{dt} = T\rho \frac{ds}{dt} + \Pi^{\alpha\beta} \frac{d\varepsilon_{\alpha\beta}}{dt} + \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^3 \mu_j^{(i)} \frac{dc_j^{(i)}}{dt}. \quad (16)$$

#### V. РІВНЯННЯ СТАНУ

Якщо питома внутрішня енергія  $u$  є функцією змінних  $s, \varepsilon_{\alpha\beta}, \{c_j^{(i)}\}$  (де  $\{c_j^{(i)}\}$  - набір  $c_j^{(i)}$  для  $\forall i, j$ ) і підпорядковується (13), (14), то рівняння стану мають вигляд

$$T = \left( \frac{\partial u}{\partial s} \right)_{\varepsilon_{\alpha\beta}, c_j^{(i)}}, \quad \frac{1}{\rho} \bar{\sigma}^{\alpha\beta} = \left( \frac{\partial u}{\partial \varepsilon_{\alpha\beta}} \right)_{s, c_j^{(i)}}, \quad \mu_j^{(i)} = \left( \frac{\partial u}{\partial c_j^{(i)}} \right)_{T, \varepsilon_{\alpha\beta}, \{c_{l \neq j}^{(k)}\}}, \quad (17)$$

Конкретна структура залежностей (17) за макроскопічним описом матеріальної системи може бути встановлена з використанням експериментальних даних або методами фізики твердого тіла.

#### VI. РІВНЯННЯ БАЛАНСУ ЕНТРОПІЇ

Домножимо рівняння Гіббса (15) на величину  $\rho/dt$ . В отримане рівняння підставимо співвідношення (3), (5б) і (12). Також врахуємо, що

$$\frac{1}{T} \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_Q = \vec{\nabla} \cdot \frac{\vec{J}_Q}{T} - \vec{J}_Q \cdot \vec{\nabla} \frac{1}{T}, \quad \vec{\nabla} \frac{1}{T} = -\frac{1}{T^2} \vec{\nabla} T,$$

Знехтуємо ефектами в'язкості і приймемо  $\hat{\Pi} = -P\hat{I}$  ( $\hat{I}$  - одиничний тензор). Маємо

$$\rho \frac{ds}{dt} = -\vec{\nabla} \cdot \frac{\vec{J}_Q}{T} + \vec{J}_Q \cdot \vec{\nabla} \frac{1}{T} + \frac{1}{T} \left[ \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^3 \vec{J}_j^{(i)} \cdot (\vec{F}_j^{(i)} - \vec{\nabla} \mu_j^{(i)}) - \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^3 \psi_j^{(i)} w_j^{(i)} - \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^3 \mu_j^{(i)} w_j^{(i)} \right]. \quad (18)$$

Позначимо  $\vec{J}_s = \vec{J}_Q/T$  - потік ентропії;  $\vec{X}_Q = -\vec{\nabla} T/T$  - векторна термодинамічна сила, що обумовлює теплопровідність і є спряженою до потоку тепла  $\vec{J}_Q$ ;  $\vec{X}_j^{(i)} = -\vec{\nabla}(\mu_j^{(i)} + \psi_j^{(i)})$  - векторні термодинамічні сили дифузії, спряжені до векторних потоків дифузії  $\vec{J}_j^{(i)}$ .

Розглянемо дві останні суми рівності (18). Оскільки  $\psi_j^{(0)} = \psi_j^{(1)} = \dots = \psi_j^{(N)} = \psi$ , то враховуючи (4), отримаємо

$$\sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^3 \psi_j^{(i)} w_j^{(i)} = \psi \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^3 w_j^{(i)} = 0.$$

Приймемо до уваги тільки процеси переходу домішкових частинок між адсорбованими на скелеті шарами води і поровим розчином  $\omega_{12}^{(i)}$  ( $i = \overline{1,3}$ ) та поверхнею і об'ємом скелету  $\omega_{23}^{(i)}$  ( $i = \overline{1,3}$ ). Потужності виробництва маси  $\bar{w}_j^{(i)}$  для компонент  $i = \overline{1,3}$  підпорядковуються умовам

$$\begin{aligned}\bar{w}_j^{(i)} &= \bar{w}_j^{(i-1)} + \bar{w}_j^{(i2)} + \bar{w}_j^{(i3)}, \quad \bar{w}_j^{(i)} = 0 \quad (j = 4; 5); \\ \bar{w}_j^{(i+1)} &= -\bar{w}_j^{(i+1)} \quad (i = \overline{1,3}, j = \overline{1,3}), \quad \bar{w}_j^{(ii)} = 0 \quad (\forall i); \\ \bar{w}_j^{(ii\pm 1)} &= 0 \quad (l = 2; 3), \quad \bar{w}_j^{(il)} = -\bar{w}_j^{(li)} \quad (i = 2; 3, j = \overline{1,3}); \\ \bar{w}^{(i)} &= \bar{w}_1^{(i)} = \bar{w}_2^{(i)} = \bar{w}_3^{(i)} \quad (i = \overline{1,3}).\end{aligned}$$

Тоді маємо

$$\sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^3 \mu_j^{(i)} w_j^{(i)} = \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^3 \mu_j^{(i)} \left[ \sum_{k=1}^3 \omega_{jk}^{(i)} + \bar{w}_j^{(i)} \right]. \quad (19)$$

Перший доданок правої частини (19) можна перетворити до вигляду

$$\sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^3 \sum_{k=1}^3 \mu_j^{(i)} \omega_{jk}^{(i)} = \sum_{i=1}^3 \left[ -(\mu_2^{(i)} - \mu_1^{(i)}) \omega_{12}^{(i)} - (\mu_3^{(i)} - \mu_2^{(i)}) \omega_{23}^{(i)} \right].$$

Позначимо

$$\omega_1^{(i)} = \omega_{12}^{(i)}, \quad \omega_2^{(i)} = \omega_{23}^{(i)} \quad (i = \overline{1,3}) \quad (20)$$

- скалярні масові потоки, які характеризують домішкових частинок відповідно між поровим розчином і поверхнею скелету та між адсорбованою водою і об'ємом скелету;

$$X_1^{(i)} = \mu_2^{(i)} - \mu_1^{(i)}, \quad X_2^{(i)} = \mu_3^{(i)} - \mu_2^{(i)} \quad (i = \overline{1,3}) \quad (21)$$

- скалярні термодинамічні сили, спряжені до відповідних масових потоків  $\omega_j^{(i)}$ .

Другий доданок правої частини рівності (19) можемо подати так

$$\sum_{i=0}^3 \mu_j^{(i)} \bar{w}_j^{(i)} = -\sum_{i=1}^2 (\mu_j^{(i+1)} - \mu_j^{(i)}) \bar{w}_j^{(i+1)}, \quad (22)$$

де приймаємо, що

$$\bar{w}_j^{(ik)} \quad (i, k = \overline{1,3}) \quad (23)$$

- скалярні масові потоки, які характеризують розпад частинок домішкової речовини, вважаємо відомими;

$$\bar{X}_j^{(i)} = \mu_j^{(i+1)} - \mu_j^{(i)} \quad (i = \overline{1,3}, j = \overline{1,3}) \quad (24)$$

- скалярні величини, спряжені до відповідних масових потоків  $\bar{w}_j^{(ik)}$ , які визначають супутнє тепловиділення в процесі розпаду.

Тоді з використанням позначень (16)-(18), (20)-(24) рівняння (14) перепишемо у вигляді

$$\begin{aligned}\rho \frac{ds}{dt} &= -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_s + \frac{1}{T} \left[ \vec{J}_Q \cdot \vec{X}_Q + \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^3 \vec{J}_j^{(i)} \cdot \vec{X}_j^{(i)} + \right. \\ &\quad \left. + \sum_{k=1}^2 \sum_{i=1}^3 \omega_k^{(i)} X_k^{(i)} + \sum_{i=1}^3 q^{(i)} \right]\end{aligned}$$

або

$$\rho \frac{ds}{dt} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_s + \frac{\sigma_s}{T},$$

де

$$\sigma_s^{(j)} = \vec{J}_Q \cdot \vec{X}_Q + \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^3 \vec{J}_j^{(i)} \cdot \vec{X}_j^{(i)} + \sum_{k=1}^2 \sum_{i=1}^3 \omega_k^{(i)} X_k^{(i)} + \sum_{j=1}^3 q_j \geq 0$$

- потужність виробництва ентропії,

$q_j = \sum_{i=1}^3 \bar{X}_j^{(i)} \bar{w}_j^{(ii+1)}$  - локальні тепловиділення при розпаді компонент.

## VII. КІНЕТИЧНІ СПІВВІДНОШЕННЯ

Ми маємо сукупність спряжених величин – термодинамічні сили і відповідні термодинамічні потоки:

$$\vec{X}_Q \div \vec{J}_Q, \quad \vec{X}_j^{(i)} \div \vec{J}_j^{(i)}, \quad X_k^{(i)} \div \omega_k^{(i)},$$

які у вихідному рівноважному стані приймають значення

$$\vec{X}_{Q0} \div \vec{J}_{Q0}, \quad \vec{X}_{j0}^{(i)} \div \vec{J}_{j0}^{(i)}, \quad X_{k0}^{(i)} \div \omega_{k0}^{(i)}.$$

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

I. Функціональні залежності

$$\begin{aligned}J_Q &= J_Q(X_Q, X_{j=1}^{(0)}, \dots, X_{j=5}^{(3)}, X_{k=1}^{(1)}, X_{k=1}^{(2)}, X_{k=1}^{(3)}, X_{k=2}^{(1)}, X_{k=2}^{(2)}, X_{k=2}^{(3)}) \\ J_j^{(i)} &= J_j^{(i)}(X_Q, X_{j=1}^{(0)}, \dots, X_{j=5}^{(3)}, X_{k=1}^{(1)}, X_{k=1}^{(2)}, X_{k=1}^{(3)}, X_{k=2}^{(1)}, X_{k=2}^{(2)}, X_{k=2}^{(3)}) \\ \omega_k^{(i)} &= \omega_k^{(i)}(X_Q, X_{j=1}^{(0)}, \dots, X_{j=5}^{(3)}, X_{k=1}^{(1)}, X_{k=1}^{(2)}, X_{k=1}^{(3)}, X_{k=2}^{(1)}, X_{k=2}^{(2)}, X_{k=2}^{(3)})\end{aligned} \quad (25)$$

Вирази (25) записані для скалярних компонент відповідних векторних потоків і сил.

II. Другий закон термодинаміки у вигляді

$$\sigma_s^{(j)} = \vec{J}_Q \cdot \vec{X}_Q + \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^3 \vec{J}_j^{(i)} \cdot \vec{X}_j^{(i)} + \sum_{k=1}^2 \sum_{i=1}^3 \omega_k^{(i)} X_k^{(i)} + \sum_{j=1}^3 q_j \geq 0 \quad (26)$$

III. Умови взаємності Онзагера [11, 13]

$$\frac{\partial \vec{J}_Q}{\partial \vec{X}_j^{(i)}} = \frac{\partial \vec{J}_j^{(i)}}{\partial \vec{X}_Q}, \quad \frac{\partial \vec{J}_Q}{\partial X_k^{(i)}} = \frac{\partial \omega_k^{(i)}}{\partial \vec{X}_Q}, \quad \frac{\partial \omega_k^{(i)}}{\partial \vec{X}_j^{(i)}} = \frac{\partial \vec{J}_j^{(i)}}{\partial X_k^{(i)}}. \quad (27)$$

Тут похідні означені формулами

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

де  $\overset{\alpha}{i} = g_0^{\alpha\beta} \overset{0}{i}_\beta$  - контраваріантні базисні вектори,  $g_0^{\alpha\beta}$  - контраваріантні компоненти метричного тензора декартової системи координат.

Враховуючи вигляд функціональної залежності (26) виробництва ентропії від термодинамічних потоків і сил, можна ввести кінетичний потенціал [11, 14]

$$\Phi = \Phi(\bar{X}_Q, \{\bar{X}_j^{(i)}\}, \{X_k^{(i)}\}), \quad (28)$$

диференціал якого набуває вигляду

$$d\Phi = \bar{J}_Q \cdot d\bar{X}_Q + \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^3 \bar{J}_j^{(i)} \cdot d\bar{X}_j^{(i)} + \sum_{k=1}^2 \sum_{i=1}^3 \omega_k^{(i)} dX_k^{(i)}. \quad (29)$$

Співвідношення (28) і (29) дозволяють записати загальну форму кінетичних рівнянь у вигляді

$$\bar{J}_Q = \frac{\partial \Phi}{\partial \bar{X}_Q}, \quad \bar{J}_j^{(i)} = \frac{\partial \Phi}{\partial \bar{X}_j^{(i)}}, \quad \omega_k^{(i)} = \frac{\partial \Phi}{\partial X_k^{(i)}}.$$

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

Значимо, що, якщо вільна енергія Гельмгольца  $f = u - Ts$ , яка визначена в просторі температури  $T$ , коваріантних компонент тензора деформації  $\{\varepsilon_{\alpha\beta}\}$  і концентрацій  $\{c_j^{(i)}\}$ , тобто  $f = f(T, \{\varepsilon_{\alpha\beta}\}, \{c_j^{(i)}\})$ , є дійсною тричі диференційованою функцією своїх змінних, то мають місце лінійні рівняння стану

$$s - s_0 = T_0^{-1} c_V t + \sum_{\alpha,\beta} \alpha^{\alpha\beta} \varepsilon_{\alpha\beta} - \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^3 d_{ij}^{(i)} c_j^{(i)},$$

$$\frac{\bar{\sigma}^{\alpha\beta}}{\rho} = \alpha^{\alpha\beta} t + \sum_{\gamma,\delta} \beta^{\alpha\beta\gamma\delta} \varepsilon_{\gamma\delta} + \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^3 \gamma_j^{\alpha\beta(i)} c_j^{(i)},$$

$$\mu_j^{(i)} - \mu_{j0}^{(i)} = d_{ij}^{(i)} t + \sum_{\alpha,\beta} \gamma_j^{\alpha\beta(i)} \varepsilon_{\alpha\beta} + d_j^{(i)} c_j^{(i)}.$$

де  $t = T - T_0$  - відхилення абсолютної температури,  $c_j^{(i)} = C_j^{(i)} - C_{j0}^{(i)}$  - відхилення концентрації.

Для ізотропного тіла кінетичний потенціал  $\Phi$  (28) є дійсною тричі диференційованою функцією термодинамічних сил. Застосовуючи принцип Кюри, одержимо лінійні кінетичні співвідношення:

$$\bar{J}_Q = L_{QQ} \bar{X}_Q + \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^3 L_{Qj}^{(i)} \bar{X}_j^{(i)},$$

$$\bar{J}_j^{(i)} = L_{jQ}^{(i)} \bar{X}_Q + \sum_{m=1}^4 \sum_{n=0}^3 L_{jm}^{(in)} \bar{X}_m^{(n)}, \quad \omega_k^{(i)} = \sum_{m=1}^2 \sum_{l=1}^3 \lambda_{km}^{(il)} X_m^{(l)}.$$

Як наслідок умов взаємності Онзагера (27) коефіцієнти рівнянь (39) повинні задовольняти умови

$$L_{Qj}^{(i)} = L_{jQ}^{(i)}, \quad L_{jm}^{(in)} = L_{mj}^{(ni)}, \quad \lambda_{km}^{(il)} = \lambda_{mk}^{(li)}.$$

Наслідком другого закону термодинаміки (26) є певні обмеження на коефіцієнти кінетичних рівнянь, зокрема

$$L_{QQ}, L_{jj}^{(ii)}, \lambda_{kk}^{(ii)} \geq 0, \quad L_{QQ} L_{jj}^{(ii)} - L_{Qj}^{(i)2} \geq 0,$$

$$L_{jj}^{(ii)} L_{mm}^{(nn)} \geq (L_{jm}^{(in)} + L_{mj}^{(ni)})^2 / 4, \quad \lambda_{kk}^{(ii)} \lambda_{mm}^{(ll)} \geq (\lambda_{km}^{(il)} + \lambda_{mk}^{(li)})^2 / 4.$$

Надалі необхідно враховувати ці умови та обмеження.

## VIII. ВИСНОВКИ

Побудована математична модель взаємозв'язаних теплових, механічних і дифузійних процесів з урахуванням розпаду мігруючої речовини у середовищі з двома шляхами міграції та пастками на основі континуально-термодинамічного підходу [6, 15, 16]. Розглянуто багатокомпонентні системи, в яких кожній компоненті системи поставлено у відповідність континуум, з допомогою якого описано кінематичні та деформаційні властивості компонент. Сформульовано балансові співвідношення, які відображають закони збереження маси, імпульсу та енергії. Використовуючи концепцію локальної термодинамічної рівноваги побудовано рівняння стану та рівняння балансу ентропії, на основі якого записано кінетичні рівняння.

## ЛІТЕРАТУРА REFERENCES

- [1] В. Г. Барьяхтар, В. В. Гончар, А. В. Жидков, А. А. Ключников, Радиационные повреждения в лавообразных топливосодержащих материалах объекта «Укрытие» – Чернобыль, 1998, 18 с. (Препр. / НАН Украины. МНТЦ «Укрытие»; 98-12).
- [2] В. А. Каспаров, С. И. Зварич, В. П. Процак, М. А. Журба, Кинетика растворения чернобыльских топливных частиц. I. Растворение топливных частиц в естественных условиях в почве // Радиохимия, 2000, 42, №6, С. 533-541.
- [3] І. Р. Юхновський, О. Є. Кобрин, В. В. Токаревський, М. В. Токарчук Проблеми взаємодії води з паливомісними масами в об'єкті «Укриття» ЧАЕС // Журнал фізичних досліджень, 1997, Т. 1, Число 2, С. 169-180.
- [4] Я. Бэр, Д. Заславски, С. Ирмей, Физико-математические основы фильтрации воды, М.: Мир, 1971, 451 с.
- [5] Дж. Фрид, Загрязнение подземных вод, М.: Недра, 1981, 304 с.
- [6] Я. Й. Бурак, Є. Я. Чапля, О. Ю. Чернуха, Континуально-термодинамічні моделі механіки твердих розчинів, К.: Наукова думка, 2006, 272 с.
- [7] Грунтоведение / Под ред. акад. Е.С.Сергеева, М.: Изд-во Московского ун-та, 1983, 389 с.
- [8] П. Я. Полубаринова-Кочина, Теория движения грунтовых вод.- М.: Недра, 1977, 664 с.
- [9] Л. И. Седов, Механика сплошной среды. В 2-х т, М.: Наука, 1976, Т.1, 526 с, Т.2, 576 с.
- [10] К. Труздел, Первоначальный курс рациональной механики сплошной среды, М.: Мир, 1975, 592 с.
- [11] И. Дьярмати Неравновесная термодинамика, М: Мир, 1974, 304с.
- [12] А. Мюнстер, Химическая термодинамика, М.: Мир, 1971, 295 с.
- [13] де С. П. Гроот, П. Мазур, Неравновесная термодинамика, М.: Мир, 1964, 456 с.
- [14] И. Пригожин, Введение в термодинамику необратимых процессов, М.: Изд-во иностр. литературы, 1960, 127 с.
- [15] Я. Бурак, Є. Чапля, О. Чернуха, Про вертикальну міграцію радіонуклідів у ґрунті // Доп. НАН України, 1995, №11, С. 34-37.
- [16] Я. Й. Бурак, Є. Я. Чапля, Континуальні моделі нелінійної термомеханіки бінарних систем // Фіз.-хім.мех.матеріалів, 1995, №4, С.7-15.