УДК 531.3

О МЕХАНИЗМАХ РЕЛАКСАЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ ТЕРМО-МАССОПЕРЕНОСА В ГЕТЕРОГЕННЫХ СРЕДАХ СО СТРУКТУРОЙ

М.Ю. Ковалевский [1,2], В.А. Кутовой [1], Л.В. Логвинова [2]
[1]Национальный научный центр «Харьковский физико-технический институт»
Украина, 61108, Харьков, Академическая, 1
e-mail: kutovoy@kipt.kharkov.ua
[2]Белгородский государственный национальный исследовательский университет
Россия, 308015, Белгород, Победы 85
e-mail: mikov51@mail.ru
Received 25 July, accepted 5 November 2012

Изучено взаимное влияние процессов термо- и массопереноса на геометрию неоднородной микроструктуры в конденсированной среде. Термодинамика таких состояний описывается, наряду со стандартными параметрами, дополнительными физическими величинами, которые задают форму и размер структурных элементов среды. Получены релаксационные нелинейные уравнения динамики и обсуждена их связь с феноменологической теорией сушки гетерогенных сред. Показано, что кинетические коэффициенты, связанные с внутренней структурой, описывают новые механизмы релаксации в среде.
КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: конденсированные среды, релаксационная динамика, кинетические коэффициенты, структура, сушка.

ON MECHANISMS OF RELAXATION PROCESSES OF HEAT AND MASS TRANSFER IN STRUCTURED HETEROGENEOUS MEDIA

M.Yu. Kovalevsky[1,2], V.A. Kutovoy[1], L.B. Logvinova[2]
National Science Center "Kharkov Institute of Physics and Technology"
1 Akademicheskaya str., Kharkov, 61108, Ukraine
Belgorod State University
85 Pobedy, Belgorod, 308015, Russia
There have been investigated the mutual effect of heat and mass transfer processes on the geometry of inhomogeneous microstructure in a condensed medium. The thermodynamics of such states is described along with the standard parameters, additional physical quantities, which set the form and dimension of extended structural elements of the medium. The nonlinear relaxation equations of dynamics have been obtained, and their relationship with phenomenological theory of drying heterogeneous media has been discussed. It was shown that kinetic coefficients, associated with internal structure describe relaxation mechanisms in the media.
KEY WORDS: condensed matter, relaxation dynamics, kinetic coefficients, structure, drying.

ПРО МЕХАНІЗМ РЕЛАКСАЦІЙНИХ ПРОЦЕСІВ ТЕРМО-МАСОПЕРЕНОСУ У ГЕТЕРОГЕННОМУ СЕРЕДОВИЩІ ЗІ СТРУКТУРОЮ

М.Ю. Ковалевський[1,2], В.О. Кутовий[1], Л.В. Логвінова[2]
[1]Національний науковий центр «Харківський фізико-технічний інститут»
Україна, 61108, Харків, Академічна, 1
[2]Білгородський державний національний дослідницький університет
Росія, 308015, Білгород, Перемоги 85
Вивчено взаємний вплив процесів термо- і масопереносу на геометрію неоднорідної мікроструктури в конденсованому середовищі. Термодинаміка таких станів описується, поряд зі стандартними параметрами, додатковими фізичними величинами, які задають форму і розмір структурних елементів середовища. Отримано релаксаційні нелінійні рівняння динаміки і обговорено їх зв'язок з феноменологічною теорією сушіння гетерогенних середовищ. Показано, що кінетичні коефіцієнти, пов'язані із внутрішньою структурою і описують нові механізми релаксації в середовищі.
КЛЮЧОВІ СЛОВА: конденсовані середовища, релаксаційна динаміка, кінетичні коефіцієнти, структура, сушіння.

Гетерогенные среды обладают различного рода микроструктурой, от которой зависит внутреннее состояние среды. Внешнее температурное или иное воздействие способствуют образованию и развитию различного рода микроструктур. Вследствие их подвижности, взаимодействия друг с другом и с другими несовершенствами среды, в материалах возникают линейные, плоские и объемные дефекты различной формы и размера. Наличие внутренней микроструктуры приводит к изменению локального состояния среды и процессов переноса в ней. Такого рода процессы в гетерогенных средах характеризуются, как конвективными, так и упругими степенями свободы. Трудности физического описания динамики таких сред обусловлены тем, что при тепло- массопереносе наличие внутренней микроструктуры существенно влияет на эти процессы. С другой стороны эти же процессы переноса влияют на структуру. Поэтому актуальным вопросом является построение такой физической модели описания динамических процессов среды, которая учитывала бы такое взаимное влияние.

СТРУКТУРА СРЕДЫ И СОКРАЩЕННОЕ ОПИСАНИЕ НЕРАВНОВЕСНЫХ ПРОЦЕССОВ

В процессе сушки многих материалов, наряду с явлениями термо- и массопереноса, происходит изменение геометрических характеристик микроструктуры среды. Для описания таких неравновесных процессов обычно используется диффузионное приближение, при котором влияние структуры на процессы переноса не учитывается [1-5]. Это приводит к необходимости проведения соответствующей модификации теории. При этом в описании разнообразных процессов сушки необходимо также учитывать временную и пространственную эволюцию структурных элементов среды. Изменение конфигурации и геометрических размеров внутренней микроструктуры ведет к изменению макроскопических характеристик среды и процессов переноса.

Изменения микроструктуры в объеме всей среды, как правило, носят относительно медленный характер, поэтому их геометрические характеристики могут быть рассмотрены как дополнительные термодинамические параметры, которые макроскопически полно задают состояние конденсированных сред. Такими величинами в частности являются геометрические размеры микроструктурных элементов. К ним относятся векторы кристаллической решетки, размеры дефектов, оси анизотропии среды, угол между этими осями и другие параметры, характеризующие геометрию микроструктуры [6-10]. Эти параметры в общем случае могут иметь скалярный, векторный или тензорный характер.

Целью настоящего исследования является изучение взаимного влияния формы и размера неоднородной микроструктуры на релаксационные процессы термо- и массопереноса в реологической среде. Основой нашего рассмотрения является идеология сокращенного описания [11]. Динамическое поведение конденсированных сред со структурой рассмотрено на том этапе эволюции, когда внутренняя микроструктура сформировалась и система находится в локально-равновесном состоянии. Дальнейшая эволюция физической системы идет согласованным образом, так что процессы переноса и изменения структуры взаимосвязаны.

При построении динамических уравнений механики сплошных сред важную роль играют законы сохранения, тесно связанные со свойствами симметрии гамильтониана. Набор аддитивных интегралов движения среды состоит из гамильтониана, импульса и числа частиц $\gamma_a = H, P_k, N \equiv \int d^3x\zeta_a(\mathbf{x})$, ($a = 0, k, 4$; $k = 1,2,3$). Законы сохранения в дифференциальной форме имеют вид

$$\dot{\zeta}_a(\mathbf{x}) = -\nabla_k \zeta_{ak}(\mathbf{x}) \tag{1}$$

В правую сторону уравнения (1) входят величины $\zeta_{ak}(\mathbf{x}) \equiv q_k(\mathbf{x}), t_{ik}(\mathbf{x}), j_k(\mathbf{x})$, являющиеся плотностями потоков аддитивных интегралов движения: $\zeta_{0k}(\mathbf{x}) \equiv q_k(\mathbf{x})$ - плотность потока энергии, $\zeta_{ik}(\mathbf{x}) \equiv t_{ik}(\mathbf{x})$ - плотность потока импульса, $\zeta_{4k}(\mathbf{x}) \equiv j_k(\mathbf{x})$ - плотность потока числа частиц. Имеет место представление плотности потоков аддитивных интегралов движения в терминах скобок Пуассона от соответствующих плотностей $\zeta_a(\mathbf{x})$ [11]:

$$\zeta_{ak}(\mathbf{x}) = -\delta_{ak}\varepsilon(\mathbf{x}) + \int d^3x' x_k' \int_0^1 d\lambda \left\{\zeta_a(\mathbf{y}), \varepsilon(\mathbf{y}')\right\}, \qquad a \neq 0 .$$

$$\zeta_{0k}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2}\int d^3x' x_k' \int_0^1 d\lambda \left\{\varepsilon(\mathbf{y}), \varepsilon(\mathbf{y}')\right\}, . \tag{2}$$

$$. \ (\mathbf{y} \equiv \mathbf{x} + \lambda\mathbf{x}', \mathbf{y}' \equiv \mathbf{x} - (1-\lambda)\mathbf{x}') .$$

При получении соотношений (2) учтены свойства симметрии гамильтониана

$$\begin{aligned} &\{N, \varepsilon(\mathbf{x})\} = 0, && N \equiv \int d^3x n(\mathbf{x}), \ . \\ &\{P_i, \varepsilon(\mathbf{x})\} = \nabla_i \varepsilon(\mathbf{x}), && P_i \equiv \int d^3x \pi_i(\mathbf{x}), \ . \\ &\{L_i, \varepsilon(\mathbf{x})\} = \varepsilon_{ikl} x_k \nabla_l \varepsilon(\mathbf{x}), && L_i \equiv \varepsilon_{ikl} \int d^3x x_k \pi_l(\mathbf{x}), \end{aligned} \tag{3}$$

здесь L_i - орбитальный момент. Первое соотношение отражает свойство фазовой инвариантности гамильтониана, второе – трансляционную инвариантность и последнее соотношение описывает инвариантность гамильтониана относительно поворотов в конфигурационном пространстве.

В процессе эволюции реологической среды происходят как конвективные процессы переноса, так и процессы деформирования микроструктуры. Для учета таких движений используем понятия лагранжевых и эйлеровых координат. Эйлеровы координаты $x_k = x_k(\xi_l, t)$ задают положение частицы среды в текущий момент времени. Вектор смещения $u_k(\mathbf{x})$ связывает лагранжеву координату ξ_k, которая задает начальное положение частицы, с эйлеровой координатой x_k : $x_k \equiv \xi_k + u_k(\mathbf{x})$. Тензор дисторсии определим равенством

$$b_{ik}(\mathbf{x}) \equiv \nabla_k \xi_i(\mathbf{x}) = \delta_{ik} - \nabla_k u_i(\mathbf{x}). \tag{4}$$

Хорошо известно, что нетривиальные скобки Пуассона для плотности импульса, числа частиц, энтропии и тензора дисторсии имеют вид [12]

$$\{\pi_i(\mathbf{x}), \sigma(\mathbf{x}')\} = -\sigma(\mathbf{x})\nabla_i \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}'), \qquad \{\pi_i(\mathbf{x}), n(\mathbf{x}')\} = n(\mathbf{x})\nabla'_i \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}'),\ .$$

$$\{\pi_i(\mathbf{x}), \pi_j(\mathbf{x}')\} = \pi_j(\mathbf{x})\nabla'_i \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}') - \pi_i(\mathbf{x}')\nabla_j \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}') \qquad \{b_{ij}(\mathbf{x}), \pi_k(\mathbf{x}')\} = b_{ik}(\mathbf{x}')\nabla'_j \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}').\ . \tag{5}$$

Выписанные скобки Пуассона служат основой построения нелинейных уравнений макроскопической динамики классических сплошных сред. Различные особенности динамического описания жидкостей, кристаллов и жидких кристаллов, других сред с внутренней структурой в рамках гамильтонова подхода проявляются в разной зависимости плотности энергии от тензора дисторсии. Термодинамика таких состояний описывается наряду со стандартными параметрами плотностями аддитивных интегралов движения дополнительными физическими величинами $\varphi_\alpha(\mathbf{x}) \equiv \varphi_\alpha(b_{ik}(\mathbf{x}))$, которые задают форму и размер протяженных структурных элементов среды. Эти величины вводятся нами как определенные функции тензора дисторсии, по аналогии с рассмотренной ранее теорией жидких кристаллов [13,10]. Такой набор параметров позволяет учесть как процессы тепло- и массопереноса, так и динамику упругих свойств среды, обусловленную наличием внутренней микроструктуры.

Для параметров, связанных со структурой, в силу соотношения (5) справедлива скобка Пуассона

$$.\ \{\varphi_\alpha(\mathbf{x}), \pi_k(\mathbf{x}')\} = \frac{\partial \varphi_\alpha(\mathbf{x})}{\partial b_{ij}(\mathbf{x})} b_{ik}(\mathbf{x})\nabla'_j \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}') \tag{6}$$

Гамильтониан среды $H = \int dx \varepsilon(\sigma(\mathbf{x}), \pi_i(\mathbf{x}), \rho(\mathbf{x}), \varphi_\alpha(\mathbf{x})) = H\{\underline{\zeta}_a, \varphi_\alpha\}$ является функционалом набора макроскопических параметров $\underline{\zeta}_a(\mathbf{x}) = \{\sigma(\mathbf{x}), \pi_i(\mathbf{x}), n(\mathbf{x})\}$, к которым относятся плотность энтропии, плотность импульса, плотность массы $\rho(\mathbf{x}) = mn(\mathbf{x})$, ($m$ - масса частицы) а также структурные параметры среды $\varphi_\alpha(\mathbf{x}) \equiv \varphi_\alpha(b_{ik}(\mathbf{x}))$, которые являются некоторыми определенными функциями тензора дисторсии. В бесструктурных средах гамильтониан системы имеет галилеево-инвариантный вид и является функционалом только величин $\underline{\zeta}_a(\mathbf{x})$. Это значит, что его зависимость от плотности импульса имеет вид $H(\underline{\zeta}) = \int d^3x \pi^2(\mathbf{x})/2\rho(\mathbf{x}) + V(\rho(\mathbf{x}), \sigma(\mathbf{x}))$. Наличие какой-либо структуры среды в общем случае приводит к нарушению этого свойства гамильтониана. Поэтому, далее мы не будем предполагать свойства галилеевой инвариантности гамильтониана. Для рассматриваемой среды выпишем дифференциал плотности энергии и введем необходимые термодинамические величины

$$d\varepsilon = \frac{\partial \varepsilon}{\partial \underline{\zeta}_a} d\underline{\zeta}_a + \frac{\partial \varepsilon}{\partial \varphi_\alpha} d\varphi_\alpha \equiv T d\sigma + v_k d\pi_k + \mu dn + h_\alpha d\varphi_\alpha . \tag{7}$$

Здесь T - температура, v_k - макроскопическая скорость, μ - химический потенциал, связанные с термодинамическими силами $Y_a \equiv Y_0, Y_k, Y_4$ равенствами $T \equiv Y_0^{-1}$, $v_k \equiv -Y_k / Y_0$, $\mu \equiv -Y_4 / Y_0$. Внутреннее поле, связанное с микроструктурными термодинамическими параметрами φ_α, определяется соотношением $\partial\varepsilon / \partial\varphi_\alpha = h_\alpha$. Соотношение (7) представляет собой второе начало термодинамики конденсированной среды со структурой. Далее удобно это соотношение переписать в терминах плотности энтропии:

$$d\sigma = \frac{1}{T} d\varepsilon - \frac{v_k}{T} d\pi_k - \frac{\mu}{T} dn - \frac{1}{T}\frac{\partial \varepsilon}{\partial \varphi_\alpha} d\varphi_\alpha \equiv \frac{\partial \sigma}{\partial \zeta_a} d\zeta_a + \frac{\partial \sigma}{\partial \varphi_\alpha} d\varphi_\alpha . \tag{8}$$

Представление плотности потоков в виде скобок Пуассона от плотности аддитивных интегралов движения (2) позволяет найти выражения этих потоков в терминах плотности энергии. В этом случае мы получаем только ту часть плотности потоков $\zeta_{ak}^{(0)}$, которая описывает адиабатические процессы в среде. С этой целью обратимся к выражениям для этих потоков (2) и учтем скобки Пуассона (5),(6). Согласно сказанному, получим выражения для плотностей потоков аддитивных интегралов движения

$$\zeta_{0k}^{(0)} = \frac{\partial \varepsilon}{\partial \pi_k}\frac{\partial \varepsilon}{\partial \underline{\zeta}_a} \underline{\zeta}_a + \frac{\partial \varepsilon}{\partial \pi_i}\frac{\partial \varepsilon}{\partial \varphi_\alpha}\frac{\partial \varphi_\alpha}{\partial b_{lk}} b_{li}, \qquad \zeta_{4k}^{(0)} = n\frac{\partial \varepsilon}{\partial \pi_k}, \tag{9}$$

$$\zeta_{ik}^{(0)} = \pi_i \frac{\partial \varepsilon}{\partial \pi_k} + \delta_{ik}\left(-\varepsilon + \underline{\zeta}_a \frac{\partial \varepsilon}{\partial \underline{\zeta}_a}\right) + \frac{\partial \varepsilon}{\partial \varphi_\alpha}\frac{\partial \varphi_\alpha}{\partial b_{lk}} b_{li} .$$

Плотности потоков аддитивных интегралов движения ς_{ak} в (9) содержат слагаемое $\varsigma_{ak}^{(0)}$ в качестве главного приближения по пространственным градиентам: $\varsigma_{ak} = \varsigma_{ak}^{(0)} + \varsigma_{ak}^{(1)} + \ldots$. Слагаемые $\varsigma_{ak}^{(1)}$ описывают влияние диссипативных процессов и будут рассмотрены в следующем разделе. В соответствии с (9) нетрудно получить уравнения движения для всех параметров сокращенного описания, характеризующих эволюция среды в адиабатическом приближении

$$\dot{\zeta}_a = -\nabla_k \zeta_{ak}^{(0)} \equiv \dot{\zeta}_a^{(1)}, \qquad \dot{\varphi}_\alpha = -\frac{\partial \varphi_\alpha}{\partial b_{ij}} \nabla_j \left(v_k b_{ik} \right) \equiv \dot{\varphi}_\alpha^{(1)}. \tag{10}$$

Следствием этих уравнений является уравнение $\dot{\sigma} \approx \dot{\sigma}^{(1)} = -\nabla_k \left(\sigma v_k \right)$, которое отражает динамику плотности энтропии в адиабатическом приближении.

НОВЫЕ МЕХАНИЗМЫ РЕЛАКСАЦИОННОЙ ДИНАМИКИ

Выпишем теперь уравнения динамики конденсированной среды со структурой с учетом диссипативных процессов

$$\dot{\zeta}_a = \dot{\zeta}_a^{(1)} + \dot{\zeta}_a^{(2)} + \ldots = -\nabla_k \left(\zeta_{ak}^{(0)} + \zeta_{ak}^{(1)} + \ldots \right), \qquad \dot{\varphi}_\alpha = \dot{\varphi}_\alpha^{(1)} + \dot{\varphi}_\alpha^{(2)} + \ldots, \tag{11}$$

здесь слагаемые $\dot{\zeta}_a^{(2)}$, $\dot{\varphi}_\alpha^{(2)}$ описывают вклад релаксации в уравнения динамики

$$\dot{\zeta}_a^{(2)} = -\nabla_k \zeta_{ak}^{(1)}, \qquad \dot{\varphi}_\alpha^{(2)}(\mathbf{x}) = -\frac{\partial \varphi_\alpha(\mathbf{x})}{\partial b_{ij}(\mathbf{x})} \nabla_j \left(v_k^{(1)}(\mathbf{x}) b_{ik}(\mathbf{x}) \right). \tag{12}$$

Следствием уравнений (11),(12) и термодинамического соотношения (8) является равенство

$$\dot{\sigma} = \frac{\partial \sigma}{\partial \zeta_a} \dot{\zeta}_a + \frac{\partial \sigma}{\partial \varphi_\alpha} \dot{\varphi}_\alpha = \dot{\sigma}^{(1)} + \dot{\sigma}^{(2)} + \ldots. \tag{13}$$

Слагаемое

$$\dot{\sigma}^{(2)} = -\nabla_k j_{\sigma k}^{(1)} + I. \tag{14}$$

показывает характер эволюции плотности энтропии физической системы при наличии релаксационных процессов. Здесь введены плотность диссипативного потока $j_{\sigma k}^{(1)}$ и производство энтропии I равенствами

$$j_{\sigma k}^{(1)} = Y_a \zeta_{ak}^{(1)} + \frac{\partial \sigma}{\partial \varphi_\alpha} \frac{\partial \varphi_\alpha}{\partial b_{ij}} v_k^{(1)} b_{ik}, \qquad I = \zeta_{ak}^{(1)} \nabla_k Y_a + v_k^{(1)} D_k.$$

Нетрудно видеть, что вектор D_k имеет вид

$$D_k = b_{ik} \nabla_j \left(\frac{\partial \sigma}{\partial \varphi_\alpha} \frac{\partial \varphi_\alpha}{\partial b_{ij}} \right).$$

Свойство положительности производства энтропии выполняется, если учесть, что диссипативные потоки $\zeta_{ak}^{(1)}$ и $v_k^{(1)}$ являются линейными функциями $\nabla_k Y_a$ и D_k, так чтобы производство энтропии приобрело вид квадратичной формы:

$$\zeta_{ak}^{(1)} = \nabla_l Y_b I_{ak,bl} + D_l I_{ak,l}, \qquad v_k^{(1)} = \nabla_l Y_b I_{k,bl} + D_l I_{k,l}, \tag{15}$$

здесь $I_{ak,bl}$, $I_{ak,l}$ и $I_{k,l}$ - обобщенные кинетические коэффициенты. Последние равенства приводят в виду производства энтропии

$$I = \left(\nabla_l Y_b I_{ak,bl} + D_k I_{ak,l} \right) \nabla_k Y_a + \left(\nabla_l Y_b I_{k,bl} + D_l I_{k,l} \right) D_k.$$

Для положительной определенности этой квадратичной формы требуем выполнения принципа Онсагера:

$$I_{ak,bl} = I_{bl,ak}, \qquad I_{ak,l} = I_{l,ak}, \qquad I_{k,l} = I_{l,k}.$$

Кинетические коэффициенты $I_{ak,bl}$ характеризуют процессы диффузии, самодиффузии, термодиффузии, теплопроводности и вязкости. Они описывают релаксацию среды за счет физических процессов, не связанных со структурой, а обусловленную законами сохранения. Кинетические коэффициенты $I_{ak,l}$ описывают влияние структуры на динамику термо- и массопереноса. Неоднородности термодинамических сил посредством кинетических коэффициентов $I_{ak,l}$ влияют на эволюцию структуры. Наконец, кинетический коэффициент $I_{k,l}$ описывает влияние структуры на саму себя. В общем случае, когда состояние среды неоднородное и не изотропное кинетические коэффициенты имеют тензорный характер. Система уравнений (11)-(15) описывает нелинейную конвективную динамику процессов тепло- и массопереноса с взаимным влиянием внутренней структуры. Если внутренняя структура отсутствует, то кинетические коэффициенты $I_{ak,l} = 0$, $I_{k,l} = 0$.

СВЯЗЬ С ФЕНОМЕНОЛОГИЧЕСКОЙ ТЕОРИЕЙ СУШКИ РЕОЛОГИЧЕСКИХ СРЕД

Хорошо известно, что процессы сушки достаточно медленные [7] и оценки дают следующий порядок числа Рейнольдса $Re<Re_{кр}$ Поэтому далее мы пренебрегаем конвекционным макроскопическим переносом $\left(\nabla_k Y_i = 0, Y_k = 0\right)$ в уравнениях (11)-(15). Кроме того, используем принцип Кюри, согласно которому потоки могут быть связаны, если они имеют одинаковую тензорную размерность. В это случае $I_{ak,bl} = I_{b,a}\delta_{ik}$, $I_{ak,l} = I_a\delta_{kl}$, $I_{k,l} = \underline{I}\delta_{kl}$. В результате получена более простая система динамических релаксационных уравнений. Далее полагаем, что обобщенные кинетические коэффициенты постоянные: $I_{ab} - const$, $I_a - const$, $\underline{I} - const$. В результате получим систему релаксационных уравнений

$$\dot{\zeta}_\alpha = -\nabla_k\left(\zeta^{(1)}_{\alpha k}\right) = -I_{ab}\Delta Y_b - I_a\nabla_k D_k\,, \qquad \dot{\varphi}^{(2)}_\alpha = -\frac{\partial\varphi_\alpha}{\partial b_{ij}}\nabla_j\left(b_{ik}\left(I_a\nabla_k Y_a + \underline{I}D_k\right)\right). \tag{16}$$

Далее мы рассмотрим частный случай, когда внутреннее состояние микроструктуры описывается одним скалярным параметром $l(\mathbf{x})$, который характеризует размер дефекта в среде. Можно показать, что единственная нетривиальная скобка Пуассона этой величины с плотностью импульса имеет вид

$$\left\{\pi_i(\mathbf{x}), l(\mathbf{x}')\right\} = \frac{1}{3}l(\mathbf{x})\nabla_i\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}') + \frac{4}{3}\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\nabla_i l(\mathbf{x})\,. \tag{17}$$

Уравнение динамики в диссипативном приближении для размера структурного дефекта, а также плотностей энергии и массы среды приобретают вид

$$\dot{\zeta}_\alpha = -I_{ab}\Delta Y_b - I_a\nabla_k D_k\,, \qquad \dot{l} = -\left(I_a\nabla_k Y_a + \underline{I}D_k\right)\nabla_k l + \frac{1}{3}l\left(I_a\Delta Y_a + \underline{I}\nabla_k D_k\right), \tag{18}$$

где

$$D_k = -\frac{1}{3}\nabla_k\left(\frac{\partial\sigma}{\partial l}l\right) - \frac{\partial\sigma}{\partial l}\nabla_k l\,. \tag{19}$$

Давление связано с плотностью энергии соотношением

$$P \equiv -\varepsilon + \underline{\zeta}_a\frac{\partial\varepsilon}{\partial\underline{\zeta}_a} - \frac{1}{3}l\frac{\partial\varepsilon}{\partial l}\,. \tag{20}$$

Для сравнения уравнений (18) с уравнениями работы [7], линеаризуем уравнения (18) около состояния равновесия. При этом необходимо учесть, что равновесное значение размера дефекта определяется соотношением $\partial\varepsilon/\partial l\big|_{l_0} = 0$. В силу определения (20) вариация давления и размера дефекта связаны в линейном приближении соотношением $\delta P = -l_0\partial^2\varepsilon/\partial l^2\Big|_0\delta l/3$. В результате получим линеаризованные уравнения для отклонений величин $\delta\zeta_a$ и δP от их равновесных значений

$$\delta\dot{\zeta}_a = -I_{ab}\Delta\delta Y_b - I_a\Delta\delta P, \qquad \delta\dot{P} = -\frac{l_0^2}{9}I_a\frac{\partial^2\varepsilon}{\partial l^2}\bigg|_0\Delta\delta Y_a - \frac{l_0^2}{9}\underline{I}\frac{\partial^2\varepsilon}{\partial l^2}\bigg|_0\Delta\delta P. \tag{21}$$

Эти уравнения совпадают с уравнениями, которые описывают процесс сушки материалов полученными в работе [7]. Первое уравнение в (21) отражает законы сохранения энергии и массы в дифференциальной форме. Второе уравнение в (21), феноменологически введенное в [7], позволяет учесть влияние еще одного управляющего параметра – давления на динамические процессы в среде. Наша интерпретация происхождения такого типа уравнения обусловлена наличием внутренней структуры в среде. Видим, что часть кинетических коэффициентов, связана с наличием дополнительных термодинамических параметров, учитывающих форму и размер протяженной структуры. Из вида уравнений следует, что явления теплопроводности, диффузии и конвекции могут происходить не только в силу неоднородностей плотностей аддитивных интегралов движения, но и благодаря неоднородностям структуры дефектов среды. Совпадение с работой [7] оказалось возможным, если внутреннюю структуру материала можно описать достаточно просто с помощью одного скалярного параметра. В ситуации, когда внутренняя структура более сложная, и она характеризуется несколькими величинами, необходимо использовать уравнения (11)-(15).

Система уравнений (18)-(21) описывает взаимное влияние термо- и массопереноса на изменение пространственной структуры дефектов. Найденный нами вид диссипативных потоков свидетельствует о существовании дополнительных кинетических коэффициентов, описывающих новые механизмы релаксации в среде, связанные с наличием внутренней структуры.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Хорошо известно, что при сушке материалов существенными являются три параметра управляющие этим процессом: температура, плотность массы диффундирующего вещества и давление. Последняя физическая величина особенно важна при использовании технологии вакуумной сушки. Появление второго уравнения в работе [7] было вызвано стремлением согласовать технологические возможности вакуумной сушки с хорошо известными представлениями термодинамики и механики сплошных сред. Вид этого уравнения полностью совпадает с видом первого уравнения в (21), которое отражает наличие двух законов сохранения. Давление не связано с каким-либо самостоятельным законом сохранения, что на первый взгляд противоречит стандартным представлениям механики сплошных сред. По нашему мнению появление такого независимого уравнения обусловлено исключительно наличием внутренней структуры вещества и ее влиянием на релаксационные процессы в среде. Система уравнений (21) представляет собой уравнения параболического типа математической физики, решения которых хорошо известны.

Аналитические решения уравнений, описывающих режимы работы сушильной установки, связывали с разработанной экспериментальной моделью термовакуумной сушки. На рис. 1. приведены данные убыли массы высушиваемого гидроксида циркония как функции времени. Начальное состояние гидроксида циркония является аморфным веществом и обладает различного рода дефектами структурного состояния, плотность и разновидность которых зависит от величины внешнего энергетического воздействия и внутреннего состояния среды. Термовакуумная обработка гидроксида циркония способствовала образованию и развитию дефектов, формированию новой объемной микро- и макроструктуры. В процессе термовакуумного воздействия на гидроксид циркония происходило накопление дефектов, приводящих как к изменению их геометрических характеристик в структуре, так и удалению влаге из вещества. При этом в процессе удаления влаги в исследуемом веществе происходит потеря однородности состояния аморфного вещества по объему и образование диоксида циркония.

Для различных продуктов сушки экспериментальные данные количества убыли массы оценивались по формуле $M_{\exp}(t) \equiv \int\limits_0^t d\tau \int\limits_V d^3x \dot{\rho}(\mathbf{x},\tau)$, где V - объем вышедшей влаги, могут иметь значительный разброс, обусловленный внутренней структурой продукта, характером его подготовки к сушке, начальным составом влаги, уровнем сухого остатка. Эти особенности в значительной степени учитываются уровнем интенсивности убывания влаги из продукта. Для оценки данных факторов и сопоставления их с предложенной математической моделью выбрана в качестве основной точки, где наблюдается максимальная скорость удаления влаги из гидроксида циркония. Этим условиям отвечает точка максимума скорости сушильного процесса (см. рис.1) и касательная к кривой $M_{\exp}(t)$, проведенная в точке максимального паровыделения (см. рис. 2), где угол определяется касательной и осью абсцисс.

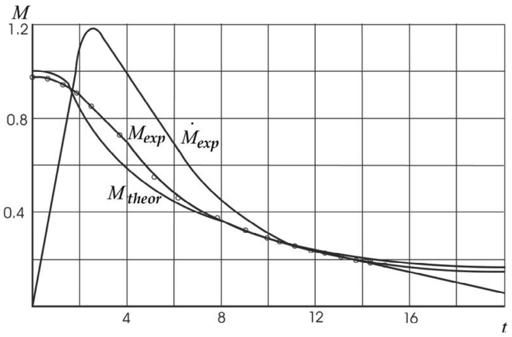

Рис. 1. Убывание массы гидроксида циркония $M_{\exp}(t)$ и $M_{theor}(t)$ и скорость сушильного процесса $\dot{M}_{\exp}(t)$

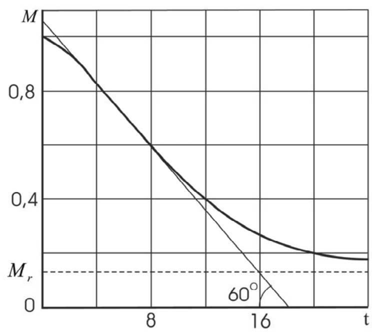

Рис. 2. Определение точки максимального паровыделения. M_r - масса сухого вещества

Результаты исследований могут найти свое применение при описании нелинейной пространственно-временной самоорганизации в гетерогенных средах, а также для более адекватного описания процесса сушки материалов, за счет использования нелинейных эффектов.

ВЫВОДЫ

В работе найдены диссипативные потоки и показана возможность существования дополнительных кинетических коэффициентов, которые описывают новые механизмы релаксации в среде, связанные с наличием внутренней структуры протяженных дефектов. Предложен механизм влияния формы и размера структуры дефектов на процессы массопереноса в конденсированной среде. В результате полученная нами система уравнений описывает взаимное влияние термо- и массопереноса на изменение пространственной структуры дефектов. Найденный вид реактивных и диссипативных потоков свидетельствует о наличии дополнительных кинетических коэффициентов, описывающих новые механизмы релаксации в среде, связанные с наличием внутренней структуры. Предложенные уравнения учитывают нелинейное влияние внутренней структуры на релаксационные динамические процессы и могут быть использованы при построении различных упрощенных моделей, описывающих вакуумную сушку реологических конденсированных сред.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Beris A.N., Edwards B.J. Thermodynamics of flowing systems with internal microstructure. - Oxford University Press, 1994. - 704 p.
2. Chaikin P.M., Lubensky T.C. Principles of condensed matter physics. - Cambridge University Press, 1995. - 699 p.
3. Slezov V.V., Kutovoy V.A., Nikolaychuk L.I. K teorii termovakuumnoy sushki // VANT. – 2003. - № 5. - S. 7-13.
4. Tarasevich Yu.Yu. Mekhanizmy i modeli degidratatsionnoy samoorganizatsii biologicheskikh zhidkostey // UFN – 2004. T. 174, № 7. - S. 779-790.
5. Svirezhev Yu.M. Nelineynye volny, dissipativnye struktury i katastrofy v ekologii. - M.: Nauka, 1987. - 368 s.
6. Daller J.S., Scriven L.E. Theory of Structured Continua. I. General Consideration of Angular Momentum and Polarization // Phys.Rev. A. – 1963. - Vol. 275. - P. 504-527.
7. Lykov A.V. Teplo i massoobmen v protsessakh sushki. - M.: Gosenergoizdat, 1956. - 464 s.
8. Nemtsov V.B. Neravnovesnaya statisticheskaya mekhanika sistem s orientatsionnym poryadkom. – Minsk: Tekhnologiya, 1997. - 277 s.
9. Tsimermanis L.-Kh.B. Sorbtsiya, strukturoobrazovanie, massoperenos (Termodinamika vlazhnogo tela). - M.: Aleks, 2006. - 232 s.
10. Kovalevskiy M.Yu., Matskevich V.T., Logvinova L.V. Issledovanie vliyaniya deformatsii molekul na dinamiku i spektry kollektivnykh vozbuzhdeniy v nematicheskikh zhidkikh kristallakh // EChAYa. - 2009. - T. 40. - Vyp. 3. - S. 704-753.
11. Akhiezer A.I., Peletminskiy S.V. Metody statisticheskoy fiziki. - M.: Nauka, 1977. - 377 s.
12. Dzyaloshinsky I.E., Volovick G.E. Poisson brackets in condensed matter physics // Ann. Phys. - 1980. - Vol. 125. - P. 67-97.
13. Isaev A.A., Kovalevskiy M.Yu., Peletminskiy S.V. Gamil'tonov podkhod v teorii kondensirovannykh sred so spontanno narushennoy simmetriey // EChAYa. - 1996. - T. 27. - Vyp. 2. - S. 431-492.