

Є.Я.Чапля, д.ф.-м.н.; О.Ю.Чернуха, д.т.н.; В.Є.Гончарук, к.ф.-м.н.;
Ю.І.Білушак, Центр математичного моделювання ІППММ НАНУ,
Національний Університет “Львівська політехніка”, м.Львів, Університет
Казимира Великого в Бидгощі, Польща

МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ ДИФУЗІЇ ДОМІШКОВИХ ЧАСТИНОК У ПІВПРОСТОРІ З ЕКСПОНЕНЦІАЛЬНИМ РОЗПОДІЛОМ ВКЛЮЧЕНЬ

Abstract. Diffusion processes are investigated admixture in a half-space of nonhomogeneous material allowing for random disposition of a sublayers. A contact initial-boundary value problem is reduced to an initial-boundary value problem of mass transfer in the whole body by the theory of generalized functions. The equivalent integrodifferential equation is formulated. Its solution is obtained in the form of integral Neumann series. Averaging the obtained solution is carried out over the ensemble of phase configurations with the gamma-distribution function. The material characteristics influence on behaviour and values of the averaged field of admixture particle concentration is determined.

Key-words: diffusion, admixture, randomly nonhomogeneous stratified structure, exponential distribution, software.

Анотація. В роботі процеси дифузії домішкової речовини досліджуємо в півпросторі неоднорідного матеріалу з урахуванням випадкового розташування підшарів. Контактна задача з допомогою теорії узагальнених функцій зведена до задачі масопереносу в усій області тіла. Сформульовано еквівалентне інтегродиференціальне рівняння, розв'язок якого побудований у вигляді інтегрального ряду Неймана. Усереднення отриманого розв'язку проведено за ансамблем конфігурацій фаз з експоненціальною функцією розподілу включень. Визначено вплив характеристик матеріалу на поведінку і величину усередненого поля концентрації домішкових частинок.

Ключові слова: дифузія, домішкова речовина, випадково неоднорідна шарувата структура, експоненціальний розподіл, програмне забезпечення.

Вступ. Процес дифузії є основою багатьох технологічних операцій, зокрема, спікання порошків, хіміко-термічної обробки металів (азотування і цементування сталей), гомогенізації сплавів, металізації та зварювання матеріалів. Роль докладного вивчення процесів дифузії значно зросла із створенням матеріалів із заданими властивостями.

Природні та штучні матеріали, які широко використовують в інженерній практиці мають складну, зокрема багатофазну, структуру. Їхнє застосування вимагає оцінки розподілів температурних та дифузійних полів та їх поведінки у залежності від умов внутрішнього міжфазного контакту,

зовнішніх дій та можливих просторових реалізацій структури [1]. При цьому для таких середовищ, як правило, є невідомими дані про конкретне просторове розташування окремих фаз, проте достатньо інформації про їхній дольовий вміст та основні фізико-хімічні властивості [2, 3].

В даній роботі розв'язана контактнo-крайова задача дифузії у двофазному випадково неоднорідному багатшаровому півпросторі. При цьому рівняння дифузії в контактуючих областях сформульовані з використанням кінетичних коефіцієнтів переносу, що при зведенні задачі до еквівалентного інтегродиференціального рівняння призводить до врахування похідної за часом в його операторі.

Об'єкт дослідження. Постановка задачі. Нехай домішкові частинки мігрують у півпросторі, який складається з підшарів двох типів (фаз). При цьому конкретне розташування цих підшарів є невідомим. Однак відомий ймовірнісний розподіл фаз в області тіла, а саме, включення розташовуються за експоненціальним розподілом [4] (рис. 1). Вважаємо, що дифузійні властивості фаз, з яких складене тіло, можуть суттєво відрізнятися.

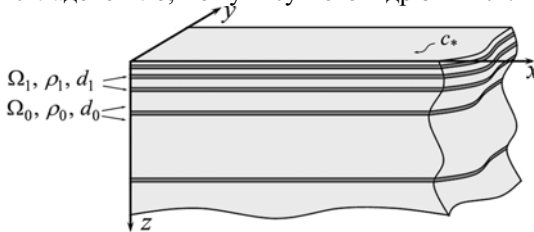


Рис. 1. Можлива реалізація структури багатшарового тіла з експоненціальним розподілом включень, в якому дифундують частинки

Концентрація домішкових частинок $c_j(z, t)$ в області Ω_j визначається з рівняння дифузії

$$\rho_j \frac{\partial c_j(z, t)}{\partial t} = d_j \frac{\partial^2 c_j(z, t)}{\partial z^2}, \quad z \in \Omega_j = \bigcup_{i=1}^{n_j} \Omega_{ij}, \quad t \in [0, \tau] \quad (\tau < \infty), \quad j = 0, 1, \quad (1)$$

де ρ_j – густина, d_j , – кінетичний коефіцієнт переносу в області Ω_j , n_j – кількість підшарів фази j , Ω_{ij} – i -та однозв'язна область фази j , $i = \overline{1, n_j}$, $j = 0, 1$.

Приймаємо, що на границі тіла $z = 0$ підтримується постійне значення концентрації домішкової речовини c^* , а при $z \rightarrow \infty$ концентрація дорівнює нулю, тобто

$$c_0(z, t)|_{z=0} = c^* \equiv const, \quad c_0(z, t)|_{z \rightarrow \infty} = 0. \quad (2)$$

Також накладена нульова початкова умова:

$$c_0(z, t)|_{t=0} = c_1(z, t)|_{t=0} = 0. \quad (3)$$

На границях поділу областей $z = z_l$ і $z = z_l + h_{l1}$ (де h_{l1} – товщина включення Ω_{l1} , l – номер підшару, $l = \overline{1, n_1}$, n_1 – кількість включень) виконуються умови рівності хімічних потенціалів та дифузійних потоків частинок домішкової речовини. Якщо прийняти лінійну залежність хімічного потенціалу від концентрації, то отримуємо умови неідеального контакту для функції концентрації у вигляді [5]

$$k_0 c_0(z, t) \Big|_{z=z_l-0} = k_1 c_1(z, t) \Big|_{z=z_l+0}, \quad \rho_0 d_0 \frac{\partial c_0}{\partial z} \Big|_{z=z_l-0} = \rho_1 d_1 \frac{\partial c_1}{\partial z} \Big|_{z=z_l+0}; \quad (4)$$

$$k_1 c_1 \Big|_{z=z_l+h_{l1}-0} = k_0 c_0 \Big|_{z=z_l+h_{l1}+0}, \quad \rho_1 d_1 \frac{\partial c_1}{\partial z} \Big|_{z=z_l+h_{l1}-0} = \rho_0 d_0 \frac{\partial c_0}{\partial z} \Big|_{z=z_l+h_{l1}+0}, \quad (5)$$

де k_j – коефіцієнт концентраційної залежності хімічного потенціалу у фазі j [6], z_l – випадкова координата “верхньої” межі розташування області Ω_{l1} .

Значимо, що при такій постановці задачі випадковими величинами є границі контакту $z = z_l$ та $z = z_l + h_{l1}$, тобто межі областей Ω_0 та Ω_1 , які є внутрішніми для тіла. Це, в свою чергу, призводить до стохастичності поля концентрації домішкової речовини, яка мігрує в тілі.

Рівняння масоперенесення для усього тіла. Розв’язок сформульованої контактної крайової задачі (1)–(5) будемо шукати у вигляді інтегрального ряду Неймана [5], оскільки таке подання випадкових полів є зручним для проведення процедури усереднення за ансамблем конфігурацій фаз. Для цього введемо у розгляд випадкову функцію просторової координати $c(z, t)$, яка описує поле концентрації в усьому тілі:

$$c(z, t) = \begin{cases} c_j(z, t) - \text{розв'язок рівняння (1), } z \in \Omega_j; \\ \text{контактні умови (4), } z = z_l; \\ \text{контактні умови (5), } z = z_l + h_{l1}. \end{cases} \quad (6)$$

Знайдемо похідну функції (6), приймаючи до уваги, що функція $c(z, t)$ в області тіла має розриви I-го роду (перші вирази в умовах (4), (5)). Враховуючи формули диференціювання розривних функцій [7] для даного випадку маємо

$$\frac{\partial c}{\partial z} = \left\{ \frac{\partial c}{\partial z} \right\}_{z \in \Omega_{ij}} + \sum_{l=1}^{n_1} \left([c(z, t)]_{z=z_l} \delta(z - z_l) + [c(z, t)]_{z=z_l+h_{l1}} \delta(z - (z_l + h_{l1})) \right), \quad (7)$$

де $\{\dots\}_{z \in \Omega_{ij}}$ – області неперервності функції, Ω_{ij} – i -та однозв’язна область фази j , n_j – кількість однозв’язних областей у фазі. $[\dots]_{z=z_l}$ – стрибки функції першого роду в точці $z = z_l$, $\delta(z)$ – дельта-функція Дірака.

Другу похідну за змінною z від функції $c(z, t)$ знаходимо аналогічно до

(8), враховуючи, що $\partial c/\partial z$ теж має розриви I-го роду (другі вирази в умовах (4), (5)).

Коефіцієнти $\rho(z)$ і $d(z)$ означені у відкритих областях Ω_0 і Ω_1 :

$$\rho(z) = \sum_{i=1}^{n_1} \{\rho_0\}_{z \in \Omega_{i0}} + \sum_{i=1}^{n_1} \{\rho_1\}_{z \in \Omega_{i1}}, \quad d(z) = \sum_{i=1}^{n_1} \{d_0\}_{z \in \Omega_{i0}} + \sum_{i=1}^{n_1} \{d_1\}_{z \in \Omega_{i1}}.$$

При цьому на границях контакту $z = z_l$ і $z = z_l + h_{l1}$ відбувається стрибок цих коефіцієнтів $[\rho(z)]_{z=z_l} = -[\rho(z)]_{z=z_l+h_{l1}} = \rho_1 - \rho_0$, $[d(z)]_{z=z_l} = -[d(z)]_{z=z_l+h_{l1}} = d_1 - d_0$, $l = \overline{1, n_1}$.

Тоді з урахуванням виразу для другої похідної за змінною z , рівняння дифузії для тіла в цілому запишемо у вигляді:

$$\rho(z) \frac{\partial c}{\partial t} = d(z) \left[\left\{ \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \right\} + \sum_{l=1}^{n_1} \left(\left[\frac{\partial c}{\partial z} \right]_{z=z_l} \delta(z - z_l) + [c(z, t)]_{z=z_l} \delta'(z - z_l) \right) + \sum_{l=1}^{n_1} \left(\left[\frac{\partial c}{\partial z} \right]_{z=z_l+h_{l1}} \delta(z - (z_l + h_{l1})) + [c(z, t)]_{z=z_l+h_{l1}} \delta'(z - (z_l + h_{l1})) \right) \right]. \quad (8)$$

де $\delta'(z)$ – похідна від дельта-функції Дірака.

Зауважимо, що функції $\rho(z)$ і $d(z)$ є випадковими функціями просторової координати.

Інтегродиференціальне рівняння, еквівалентне вихідній крайовій задачі. Введемо в розгляд випадкову функцію просторової координати («функцію форми») [8]

$$\eta_{ij}(z) = \begin{cases} 1, & z \in \Omega_{ij}; \\ 0, & z \notin \Omega_{ij}, \end{cases} \quad \sum_{j,i} \eta_{ij}(z) = 1, \quad (9)$$

тобто виконується умова суцільності тіла. У випадку, який розглядається (одновимірний за просторовою координатою, тобто шарувате тіло), функцію форми (9) можна подати як різницю двох випадкових функцій Хевісайда [9].

Коефіцієнти рівняння (8) запишемо через функцію (9)

$$\rho(z) = \sum_j \sum_i \rho_j \eta_{ij}(z), \quad d(z) = \sum_j \sum_i d_j \eta_{ij}(z) \quad (10)$$

і підставимо таке подання (10) в рівняння (8). Тоді з використанням другої умови (9) маємо

$$\sum_{j=0}^1 \sum_{i=1}^{n_j} \rho_j \eta_{ij}(z) \left\{ \frac{\partial c}{\partial t} \right\} = \sum_{j=0}^1 \sum_{i=1}^{n_j} d_j \eta_{ij}(z) \left[\left\{ \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \right\} + \right.$$

$$+ \sum_{l=1}^{n_1} \left(\left[\frac{\partial c}{\partial z} \right]_{z=z_l} \delta(z-z_l) + [c(z,t)]_{z=z_l} \delta'(z-z_l) \right) + \\ + \sum_{l=1}^{n_1} \left(\left[\frac{\partial c}{\partial z} \right]_{z=z_l+h_{l1}} \delta(z-(z_l+h_{l1})) + [c(z,t)]_{z=z_l+h_{l1}} \delta'(z-(z_l+h_{l1})) \right) \Bigg]. \quad (11)$$

Якщо позначити оператор рівняння (11) через $L(z,t)$, тобто

$$L(z,t) \equiv \sum_{j,i} \rho_j \eta_{ij}(z) \left\{ \frac{\partial}{\partial t} \right\} - \sum_{j,i} \left[d_j \eta_{ij}(z) \left\{ \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right\} + \right. \\ \left. + \sum_{l=1}^{n_1} \left(\left[\frac{\partial}{\partial z} \right]_{z=z_l} \delta(z-z_l) + []_{z=z_l} \delta'(z-z_l) \right) + \right. \\ \left. + \sum_{l=1}^{n_1} \left(\left[\frac{\partial}{\partial z} \right]_{z=z_l+h_{l1}} \delta(z-(z_l+h_{l1})) + []_{z=z_l+h_{l1}} \delta'(z-(z_l+h_{l1})) \right) \right], \quad (12)$$

тоді рівняння (12) можна подати у вигляді

$$L(z,t)c(z,t) = 0. \quad (13)$$

У рівнянні (13) додамо і віднімемо детермінований оператор дифузії $L_0(z,t) = \rho_0 \partial/\partial t - d_0 \partial^2/\partial z^2$, коефіцієнти якого є характеристиками матеріалу фази Ω_0 . Тоді маємо

$$L_0(z,t)c(z,t) = L_s(z,t)c(z,t), \quad L_s(z,t) = L_0(z,t) - L(z,t). \quad (14)$$

З використанням умови суцільності тіла (9) оператор $L_s(z,t)$ можна подати так

$$L_s(z,t) = (\rho_0 - \rho_1) \sum_i^{n_1} \eta_{i1}(z) \left\{ \frac{\partial}{\partial t} \right\} - (d_0 - d_1) \sum_i^{n_1} \eta_{i1}(z) \left\{ \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right\} - \\ - \sum_{j=0}^1 \sum_i^{n_1} d_j \eta_{ij}(z) \left[\sum_l^{n_1} \left[\frac{\partial}{\partial z} \right]_{z=z_l} \delta(z-z_l) - []_{z=z_l} \delta'(z-z_l) + \right. \\ \left. + \sum_l^{n_1} \left[\frac{\partial}{\partial z} \right]_{z=z_l+h_{l1}} \delta(z-(z_l+h_{l1})) - []_{z=z_l+h_{l1}} \delta'(z-(z_l+h_{l1})) \right]. \quad (15)$$

Вважаємо праву частину рівняння (14) джерелом, тобто неоднорідність середовища розглядаємо як внутрішні джерела. Тоді розв'язок крайової задачі (14), (2), (3) можна подати у вигляді суми розв'язку однорідної крайової задачі і згортки функції Гріна з джерелом:

$$c(z,t) = c_0(z,t) + \int_0^t \int_0^\infty G(z,z',t,t') L_s(z',t') c(z',t') dz' dt', \quad (16)$$

де $c_0(z, t)$ – розв’язок однорідного рівняння дифузії з коефіцієнтами, які є характеристиками фази Ω_0 за крайових умов (2), (3), тобто [10]

$$c_0(z, t) = c_* \operatorname{erfc} \left\{ z \sqrt{\rho_0 / 4d_0 t} \right\}; \quad (17)$$

де $G(z, z', t, t')$ – функція Гріна задачі (14), (3), (4). Функція Гріна є розв’язком відповідної крайової задачі з точковим джерелом і нульовими крайовими умовами:

$$\rho_0 \frac{\partial G(z, z', t, t')}{\partial t} - d_0 \frac{\partial^2 G(z, z', t, t')}{\partial z^2} = \delta(t - t') \delta(z - z'); \quad (18)$$

$$G(z, z', t, t') \Big|_{z=0} = G(z, z', t, t') \Big|_{z \rightarrow \infty} = 0, \quad G(z, z', t, t') \Big|_{t=0} = 0. \quad (19)$$

Розв’язком крайової задачі (18), (19) є функція [6]

$$G(z, z', t, t') = \frac{\theta(t - t')}{2\sqrt{\pi\rho_0 d_0(t - t')}} \left(\exp \left(-\frac{|z - z'|^2 \rho_0}{4d_0(t - t')} \right) - \exp \left(-\frac{|z + z'|^2 \rho_0}{4d_0(t - t')} \right) \right). \quad (20)$$

Таким чином ми побудували інтегродиференціальне рівняння (16), еквівалентне вихідній контактній крайовій задачі. Рівняння (16) з випадковим ядром є рівнянням Вольтерра II-го роду за часовою змінною і Гаммерштейна за просторовою.

Ряд Неймана. Розв’язок інтегродиференціального рівняння (16) шукаємо у вигляді інтегрального ряду Неймана [5, 8]. Цей ряд будемо шляхом ітерування інтегрального рівняння (16). Щоб отримати першу ітерацію, запишемо значення поля концентрації в точці (z', t') . Оскільки рівняння (16) справедливе для всіх точок області $\{t \in [0; \tau], z \in [0; \infty)\}$, то воно справджується і для $z = z', t = t'$. Отже маємо

$$c(z', t') = c_0(z', t') + \int_0^{t'} \int_0^\infty G(z', z'', t', t'') L_s(z'', t'') c_0(z'', t'') dz'' dt''.$$

Підставимо цей вираз у праву частину (16), отримаємо

$$c(z, t) = c_0(z, t) + \int_0^t \int_0^\infty G(z, z', t, t') L_s(z', t') c_0(z', t') dz' dt' + \\ + \int_0^t \int_0^\infty G(z, z', t, t') L_s(z', t') \int_0^{t'} \int_0^\infty G(z', z'', t', t'') L_s(z'', t'') c(z'', t'') dz'' dt'' dz' dt'. \quad (21)$$

Запишемо значення поля концентрації $c(z, t)$ у точці (z'', t'') і підставимо його у праву частину (21), тоді одержимо другу ітерацію. Повторюючи таку операцію нескінченну кількість разів, отримаємо інтегральний ряд Неймана, а саме

$$\begin{aligned}
c(z, t) = & c_0(z, t) + \int_0^t \int_0^\infty G(z, z', t, t') L_s(z', t') c_0(z', t') dz' dt' + \\
& + \int_0^t \int_0^\infty G(z, z', t, t') L_s(z', t') \int_0^{t'} \int_0^\infty G(z', z'', t', t'') L_s(z'', t'') c_0(z'', t'') dz'' dt'' dz' dt' + \\
& + \int_0^t \int_0^\infty G(z, z', t, t') L_s(z', t') \int_0^{t'} \int_0^\infty G(z', z'', t', t'') L_s(z'', t'') \int_0^{t''} \int_0^\infty G(z'', z''', t'', t''') L_s(z''', t''') \times \\
& \times c_0(z''', t''') dz''' dt''' dz'' dt'' dz' dt' + \dots
\end{aligned} \quad (22)$$

Усреднення поля концентрації за ансамблем конфігурацій фаз. Для знаходження середнього поля концентрації домішкової речовини обмежимося першими двома членами ряду (22):

$$\begin{aligned}
c(z, t) \approx & c_0(z, t) + \int_0^t \int_0^\infty G(z, z', t, t') \sum_{i=1}^{n_1} \left[(\rho_0 - \rho_1) \frac{\partial c_0(z', t')}{\partial t'} - \right. \\
& \left. - (d_0 - d_1) \frac{\partial^2 c_0(z', t')}{\partial z'^2} \right] \eta_{i1}(z') dz' dt'.
\end{aligned} \quad (23)$$

Усреднюємо вираз (23) за ансамблем конфігурацій фаз з експоненціальною функцією розподілу включень [4] у тілі

$$f(z) = \begin{cases} \lambda e^{-\lambda z}, & z \geq 0; \\ 0, & z < 0, \end{cases}$$

де λ – масштабний параметр.

Оскільки $c_0(z, t)$ є не випадковою функцією, то

$$\langle c_0(z, t) \rangle_{conf} = c_0(z, t)$$

Усреднюємо другий доданок виразу (26). Врахуємо, що

$$\eta_{i1}(z') = \begin{cases} 1, & z' \in [z_{i1}; z_{i1} + h] \\ 0, & z' \notin [z_{i1}; z_{i1} + h] \end{cases} = \begin{cases} 1, & z' - z_{i1} \in [0; h] \\ 0, & z' - z_{i1} \notin [0; h] \end{cases} = \eta_{i1}(z' - z_{i1}) \quad (i = \overline{1, 2}) \quad (24)$$

і в підінтегральному виразі співвідношення (23) від випадкових величин (координат границь контакту z_{i1} , $i = \overline{1, 2}$) залежить тільки функція $\eta_{i1}(z')$, а також немає інших членів з індексом i , тоді всі множники та знак суми можемо винести за знак середнього

$$\begin{aligned}
\langle I \rangle_{conf} = & \int_0^t \int_0^\infty G(z, z', t, t') \left[(\rho_0 - \rho_1) \frac{\partial c_0(z', t')}{\partial t'} - \right. \\
& \left. - (d_0 - d_1) \frac{\partial^2 c_0(z', t')}{\partial z'^2} \right] \sum_{i=1}^{n_1} \int_{(V)} \eta_{i1}(z') \lambda e^{-\lambda z_{i1}} dz_{i1} dz' dt'.
\end{aligned} \quad (25)$$

Значимо, що ми прийняли $h_{i1} = h$, $\forall i = \overline{1, n_1}$, h – характерна (середня) товщина прошарків.

Враховуючи властивості функції $\eta_{i1}(z')$ (24) і використовуючи в інтегралі заміну змінних $z' - z_i = x$, можемо записати

$$\begin{aligned} \lambda \sum_{i=1}^{n_1} \int \eta_{i1}(z') e^{-\lambda z_{i1}} dz_{i1} &= \lambda \sum_{i=1}^{n_1} \int_0^{\infty} \eta_{i1}(z' - z_i) e^{-\lambda z_{i1}} dz_{i1} = \\ &= \lambda \sum_{i=1}^{n_1} \int_{z' - \infty}^{z'} \eta_{i1}(x) (z' - x)^{\alpha-1} e^{-\lambda(z'-x)} dx = \lambda \sum_{i=1}^{n_1} \int_0^{z'} \eta_{i1}(x) (z' - x)^{\alpha-1} e^{-\lambda(z'-x)} dx \end{aligned} \quad (26)$$

оскільки $\eta_{i1}(x) = \begin{cases} 1, & x \in [0; h] \\ 0, & x \notin [0; h] \end{cases}$. Зауважимо, що змінна зовнішнього інтегрування z' приймає значення від 0 до ∞ , тоді можливі два випадки:

1. $z' < h$, і інтеграл (26) набуває значення

$$\int_0^{z'} \eta_{i1}(x) (z' - x)^{\alpha-1} e^{-\lambda(z'-x)} dx = \gamma(1, \lambda z');$$

2. $z' \geq h$, тоді отримаємо

$$\int_0^h \eta_{i1}(x) (z' - x)^{\alpha-1} e^{-\lambda(z'-x)} dx = \gamma(1, \lambda(z')) - \gamma(1, \lambda(z' - h)),$$

де $\gamma(\alpha, \lambda z') = \int_0^{\lambda z'} e^{-t} t^{\alpha-1} dt$ – неповна гама-функція [9].

Отже маємо

$$\lambda \sum_{i=1}^{n_1} \int \eta_{i1}(x) e^{-\lambda(z'-x)} dx = \begin{cases} \lambda n_1 \gamma(1, \lambda z'), & z' < h, \\ \lambda n_1 [\gamma(1, \lambda(z')) - \gamma(1, \lambda(z' - h))], & z' \geq h. \end{cases}$$

Тоді

$$\begin{aligned} \langle I \rangle_{conf} &= \int_0^t \int_0^h G(z, z', t, t') \left[(\rho_0 - \rho_1) \frac{\partial c_0(z', t')}{\partial t'} - (d_0 - d_1) \frac{\partial^2 c_0(z', t')}{\partial z'^2} \right] \lambda \gamma(1, \lambda z') n_1 dz' + \\ &+ \int_h^{\infty} G(z, z', t, t') \left[(\rho_0 - \rho_1) \frac{\partial c_0(z', t')}{\partial t'} - (d_0 - d_1) \frac{\partial^2 c_0(z', t')}{\partial z'^2} \right] \lambda \gamma(1, \lambda(z' - h)) n_1 dz' \Big] dt' \end{aligned}$$

І як наслідок після усереднення виразу (25) для поля концентрації домішкових частинок отримаємо

$$\langle c(z, t) \rangle_{conf} = c_0(z, t) + \int_0^t \int_0^h G \left[(\rho_0 - \rho_1) \frac{\partial c_0}{\partial t'} - (d_0 - d_1) \frac{\partial^2 c_0}{\partial z'^2} \right] (1 - e^{-\lambda z'}) n_1 dz' +$$

$$+ \int_h^{\infty} G \left[(\rho_0 - \rho_1) \frac{\partial c_0}{\partial t'} - (d_0 - d_1) \frac{\partial^2 c_0}{\partial z'^2} \right] \left(e^{-\lambda(z'-h)} - e^{-\lambda z'} \right) n_1 dz' \Big] dt'. \quad (27)$$

Таким чином ми отримали формулу для знаходження усередненого за ансамблем конфігурацій фаз поля концентрації домішкової речовини у випадково неоднорідній тришаровій смузі за рівномірного розподілу фаз у тілі. Підставляючи у співвідношення (27) вирази для концентрації домішкової речовини в однорідному шарі (17) та функції Гріна (20), отримаємо розрахункову формулу для усередненого поля концентрації:

$$\begin{aligned} \langle c(z,t) \rangle / c_* = & \operatorname{erfc}(zd_\rho / 2\sqrt{t}) + Qn_1 e^{-d_\rho^2 z^2 / 4t} / 2\sqrt{\pi} \rho_0 \left[(\operatorname{erf}(a_-(z,t)) + \operatorname{erf}(a_+(z,t))) \times \right. \\ & \times \left(e^{\lambda h} - 1 \right) \left(\sqrt{\pi} (e^{u_+(z,t)} - e^{u_-(z,t)}) / 8 - d_\rho (e^{z\lambda} - e^{-z\lambda}) e^{-\lambda^2 d_\rho^2 (t+1)} / 2\lambda \right) + \\ & + t^{-1} \left(zd_\rho \int_0^t (\operatorname{erf}(A_-(t,t')) - \operatorname{erf}(A_+(t,t'))) dt' + \right. \\ & + \int_0^t M_-(t,t') e^{b_-(t,t')} (\operatorname{erf}(B_-(t,t')) - e^{\lambda h} \operatorname{erf}(K(t,t') - B_-(t,t'))) dt' + \\ & \left. \left. + \int_0^t M_+(t,t') e^{b_+(t,t')} (\operatorname{erf}(B_+(t,t')) - e^{\lambda h} \operatorname{erf}(K(t,t') + B_+(t,t'))) dt' \right) \right], \quad (28) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{де } Q &= d_1 \rho_0 / d_0 + \rho_1; \quad a_\pm(z,t) = \lambda \sqrt{t} d_\rho^{-1} / 2 \pm zd_\rho / 2\sqrt{t}; \quad d_\rho^2 = \rho_0 / d_0; \\ u_\pm(z,t) &= d_0 (\lambda t \pm zd_\rho^2)^2 / 4\rho_0 t; \quad b_\pm(t,t') = d_\rho^{-2} \lambda^2 t'(t-t') / t \pm z\lambda t' / t; \\ K(t,t') &= h d_t^{-1} \sqrt{t/t'} / 2; \quad A_\pm(t,t') = K(t,t') \pm z d_t^{-1} \sqrt{t/t'} / 2; \quad d_t = \sqrt{d_0(t-t') / \rho_0}; \\ M_\pm(t,t') &= \sqrt{\rho_0 / 4d_0} (z/2 \pm \lambda d_t^2); \quad B_\pm(t,t') = (z d_t^{-1} / 2 \pm \lambda d_t) \sqrt{t/t'}. \end{aligned}$$

Зазначимо, що неоднорідна частина розв'язку (28) пропорційна кількості включень n_1 .

Числовий аналіз усередненого поля концентрації. Числові розрахунки проводились в безрозмірних змінних [10] $\tau = d_0 t / z_0$, $\xi = z / z_0$, $z_0 = 1\text{м}$. На рис. 2, 3, 5 проілюстровано характерні розподіли усередненого за ансамблем конфігурацій фаз поля концентрації домішкової речовини за експоненціального розподілу фаз для різних значень параметрів задачі і в різні моменти часу. При цьому за базові приймалися наступні значення коефіцієнтів: $d_1 / d_0 = 10$; $\rho_1 / \rho_0 = 1,1$; $n_1 = 50$; $\bar{h} = h / z_0 = 0,1$; $\tau = 2$; $\lambda = 2$. Криві а (штрихові лінії) позначають концентрацію домішки в однорідному півпросторі з характеристиками матриці. На рис. 2 наведені розподіли усередненої концентрації в різні моменти безрозмірного часу $\tau = 0,3; 0,5; 1; 2; 10$;

(криві 1–5) для $d_1/d_0 = 10$ (рис. а) і $\tau = 0,01; 0,3; 0,5; 2; 10$; (криві 1–5) для $d_1/d_0 = 0,1$ (рис. б). На рис. 3 показаний вплив на усереднену концентрацію характерної товщини прошарків для малих ($\tau = 0,5$, рис. а) і великих ($\tau = 0,5$, рис. б) часів при $h = 0,01; 0,05; 0,1; 0,2; 0,3$ (криві 1-5) коли $d_1/d_0 = 10$. На рис. 4 показаний вплив масштабного параметра функції експоненціального розподілу на розташування шаруватих включень в півпросторі. На рис. 5 показано вплив масштабного параметра, тобто ступеня вільності функції експоненціального розподілу $\lambda = 0,1; 0,75; 1; 5; 10$ (криві 1-5) для малих ($\tau = 0,5$, рис. а) і великих ($\tau = 0,5$, рис. б) часів.

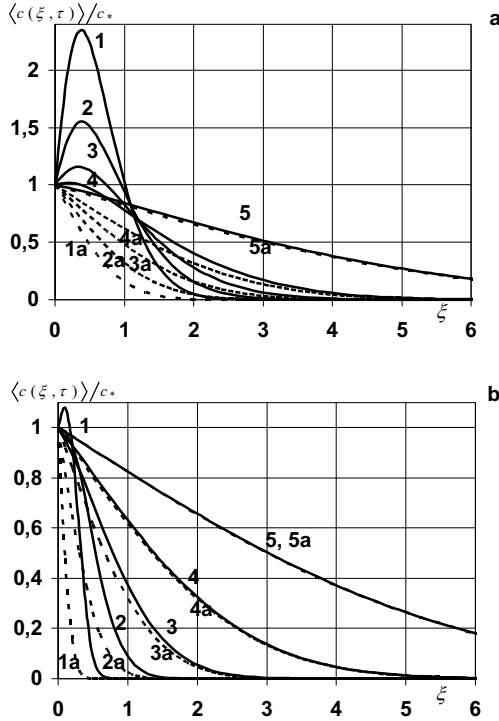


Рис. 2. Розподіли усередненої концентрації в різні моменти безрозмірного часу для $d_1/d_0 = 10$ (рис. а) та $d_1/d_0 = 0,1$ (рис. б)

Зазначимо, що для малих часів характерна поява приповехневого максимуму усередненої концентрації. Причому для випадку $d_1/d_0 > 1$ такий максимум в рази більший ніж для $d_1/d_0 < 1$. З часом цей максимум зменшується, зсувається в глиб і потім пропадає, причому спадання кривої стає більш пологим.

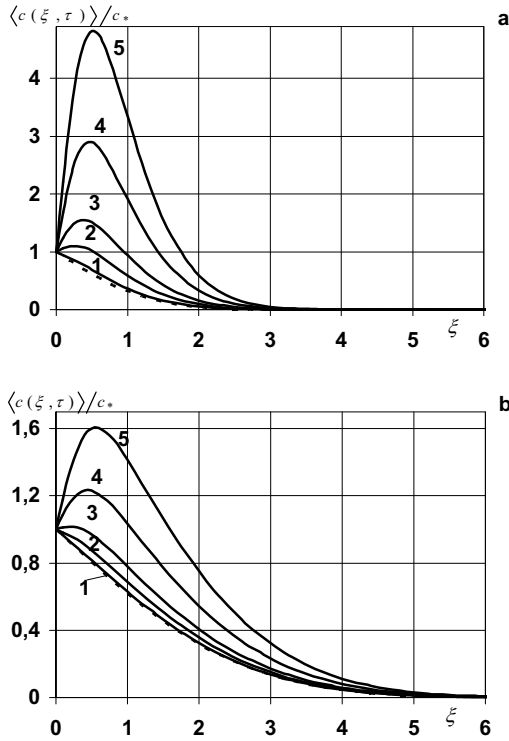


Рис. 3. Розподіли усередненої концентрації при різних значеннях характерної товщини прошарків для малих (рис.а) і великих (рис.б) часів при $d_1/d_0 = 10$

Зауважимо, що чим більша характерна товщина прошарків, тим більша концентрація домішкових частинок в шаруватому півпросторі (рис. 3а). Для випадку $d_1/d_0 < 1$ товщина прошарків значно менше впливає на функцію концентрації. При цьому для великих часів зміна товщини включень майже не впливає на поведінку і значення концентрації домішки.

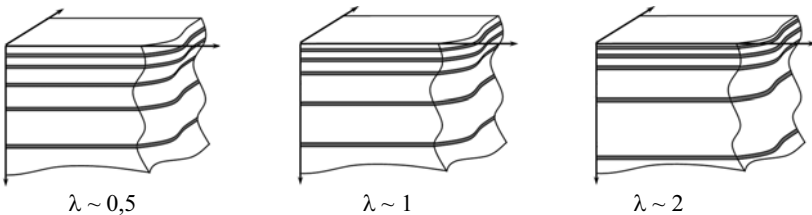


Рис. 4. Можливі реалізації структур багат шарового тіла при різних значеннях масштабного параметра функції експоненціального розподілу включень

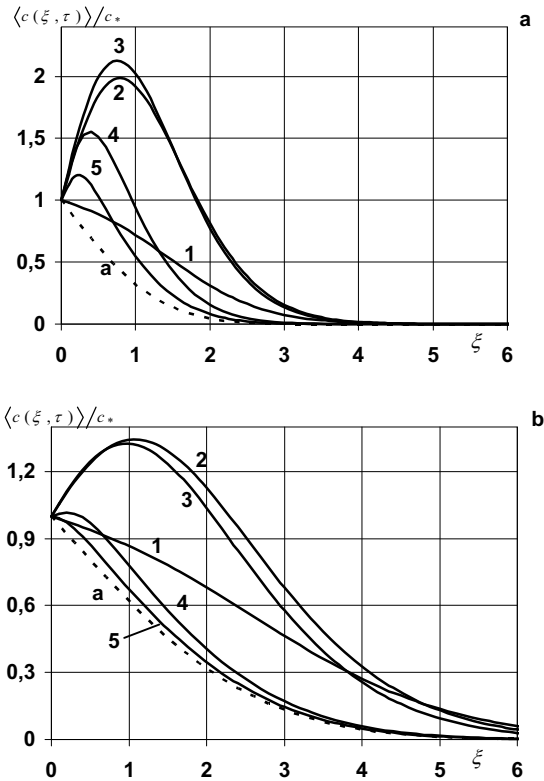


Рис. 5. Розподіли усередненої концентрації при різних значеннях масштабного параметра для малих (рис.а) і великих(рис.б) часів

Зі збільшенням масштабного параметра λ у приповерхневій області тіла включення ущільнюються (рис.4). А далі проміжок між включеннями збільшується, тобто зменшується ймовірність знаходження прошароку. При цьому зі збільшенням λ усереднена концентрація спочатку зростає (криві 1, 2, 3, 4), а потім ущільнення прошарків в приповерхневій області призводить до зменшення концентрації домішки. Для великих часів спостерігається така сама закономірність (рис.5b). Проте досягнення максимального значення від концентрації відбувається при менших значеннях значеннях λ (криві 1,2 3). Для безрозмірного часу 0,5 максимального значення концентрації досягає приблизно при $\lambda=1$. Тоді як для $\tau = 2$ максимальне значення концентрації спостерігається при $\lambda=0,75$.

Значимо, що збільшення кількості прошарків у багаточаровому півпросторі призводить до зростання концентрації домішки в усій області. При малій кількості прошарків усереднена концентрація майже не

відрізняється від концентрації у однорідному тілі.

Також зауважимо, чим більше відношення коефіцієнтів переносу, тобто, чим більший кінетичний коефіцієнт переносу в прошарках які сконцентровані біля поверхні півпросторі, тим більшого максимуму досягає усереднена концентрація в при поверхневій області. Причому зміна відношення коефіцієнтів переносу в інтервалі від 0 до 1 майже не впливає на розподіли концентрації в багат шаровому півпросторі .

Висновки. Таким чином для розв'язання контактної-крайової задачі дифузії домішкової речовини у випадково неоднорідному двофазному шаруватому тілі за допомогою апарату теорії узагальнених функцій контактну задачу дифузії в багат шаровому півпросторі зведено до рівняння маспереносу в усій області тіла. Причому оператор отриманого рівняння в явному вигляді містить стрибки поля концентрації та його похідних на границях контакту. Одержаній крайовій задачі поставлено у відповідність еквівалентне інтегродиференціальне рівняння, розв'язок якого побудований ітеруванням у вигляді ряду Неймана. Усереднення поля концентрації проведено за ансамблем конфігурацій фаз з експоненціальною функцією розподілу включень. Вивчено вплив характеристик середовища на закономірності розподілів усередненої концентрації. Зокрема, встановлено, що на відміну від рівномірного розподілу фаз в області тіла, за експоненціального розподілу включень концентрація мігруючої речовини завжди є більшою ніж в однорідному півпросторі.

Зазначимо, що отримані формули можуть застосовуватися для вивчення процесів теплопровідності у випадково неоднорідних багат шарових тілах, розглядаючи умови ідеального контакту як частковий випадок наведених у роботі.

1. *Mikdam A., Makardi A., Ahzi S., Garmestani H, Li D.S., Remond Y.* Effective conductivity in isotropic heterogeneous media using a strong-contrast statistical continuum theory // *J. Mech. and Phys. of Solids.* – 2009. – **57.** – P. 76–86.
2. *Keller J.B.* Flow in random porous media // *Transport in Porous Media.* – 2001. – **43.** – P. 395–406.
3. *Zhu Y., Fox P.J.* Smoothed particle hydrodynamics model for diffusion through porous media // *Transport in Porous Media.* – 2001. – **43.** – P. 441–471.
4. *Королюк В.С., Портенко Н.И., Скороход А.В., Турбин А.Ф.* Справочник по теории вероятности и математической статистике. – М.: Наука, 1985. – 640 с.
5. *Краснов М.Л.* Интегральные уравнения. – М.: Наука, 1975. – 300 с.
6. *Чапля Є.Я., Чернуха О.Ю.* Математичне моделювання дифузійних процесів у випадкових і регулярних структурах. – Київ: Наукова думка, 2009. – 302 с.
7. *Владимиров В.С.* Уравнения математической физики. – М.: Наука, 1976. – 527 с.
8. *Рытов С.М., Кравцов Ю.А., Татарский В.И.* Введение в статистическую радиофизику. Ч. II Случайные поля. – М.: Наука, 1978. – 436 с.
9. Справочник по специальным функциям / Под ред. М. Абрамовица и И. Стиган. – М.: Мир, 1979. – 830 с.
10. *Львов А.В.* Теория теплопроводности. – М.: Высшая школа, 1978. – 463 с.

Поступила 7.02.2011р.