



УДК 517.958:532.72

О.Ю. ЧЕРНУХА\*, В.Є. ГОНЧАРУК\*\*, Ю.І. БІЛУЩАК\*, А.Є. ДАВИДОК\*

## ПАКЕТ ПРОГРАМ “FLOWRAN” ДЛЯ ДОСЛІДЖЕННЯ ДИФУЗІЙНИХ ПОТОКІВ У ВИПАДКОВИХ ШАРУВАТИХ СТРУКТУРАХ

\*Центр математичного моделювання Інституту прикладних проблем механіки і математики ім. Я.С. Підстригача НАН України, Львів, Україна

\*\*Національний університет «Львівська політехніка», Львів, Україна

**Анотація.** Розроблено пакет програм “FlowRan”, який орієнтований на розв’язування крайових задач дифузії у двофазних випадково неоднорідних три- та багатошарових тілах для знаходження розподілів дифузійних потоків, усереднених за ансамблем реалізацій випадкової структури і стохастичною товщиною включень. Подано функціональні можливості пакета програм “FlowRan”. Описано його призначення та особливості застосування.

**Ключові слова:** дифузійний потік, випадково неоднорідна шарувата структура, усереднення за ансамблем конфігурацій, рівномірний розподіл, бета-розподіл, пакет програм “FlowRan”.

**Аннотация.** Разработан пакет программ “FlowRan”, ориентированный на решение краевых задач диффузии в двухфазных случайно неоднородных трех- и многослойных телах для нахождения распределений диффузионных потоков, усредненных по ансамблю реализаций случайной структуры и стохастической толщиной включений. Представлены функциональные возможности пакета программ “FlowRan”. Описаны его назначение и особенности применения.

**Ключевые слова:** диффузионный поток, случайно неоднородная слоистая структура, усредненная по ансамблю конфигураций, равномерное распределение, бета-распределение, пакет программ “FlowRan”.

**Abstract.** “FlowRan” software package is developed. It is oriented on solving boundary problems of diffusion in two-phase randomly nonhomogeneous three- and multilayered bodies for determination of distributions of the diffusion flows averaged over both the ensemble of realization of random structure and stochastic thickness of inclusions. The functional options of “FlowRan” software package are presented. Its destination and application features are described.

**Keywords:** diffusion flow, randomly nonhomogeneous structure, averaging over ensemble of configurations, equal distribution, beta-distribution, “FlowRan” software package.

### 1. Вступ

Під час дослідження процесів масоперенесення в пористих середовищах, складних геологічних структурах, композитних матеріалах, наноструктурах тощо важливою характеристикою процесу, разом із концентрацією мігруючої речовини та хімічним потенціалом, є дифузійний потік [1]. Крім того, у процесі моделювання потоків маси у багатофазних неоднорідних тілах потрібно враховувати вплив просторово випадково розташованих включень. Проте застосування процедури усереднення для визначення дифузійного потоку домішки може викликати значні труднощі, оскільки невідомими є функції кореляції градієнта стохастичного поля концентрації та випадкового коефіцієнта дифузії.

Такі задачі виникають в інженерній практиці при використанні природних та штучних матеріалів, які мають складну структуру. Їх застосування вимагає оцінки розподілів і поведінки температурних та дифузійних полів у залежності від умов внутрішнього міжфазного контакту, зовнішніх дій та можливих просторових реалізацій структури [2, 3]. При цьому для таких середовищ, як правило, є невідомими дані про конкретне просторове роз-

ташування окремих фаз, проте достатньо інформації про їхній дольовий вміст та основні фізико-хімічні властивості [4, 5].

Крім цього, в існуючих промислових системах очистки питної води та забруднених стоків широко використовують багатошарові фільтри з різною пористістю шарів [6]. Ефективність їх роботи істотно залежить як від пористості, так і їхніх геометричних параметрів. В інженерній практиці для розрахунку основних характеристик таких фільтрів, як правило, використовують комп'ютерне моделювання, розв'язуючи числовими методами нелінійні задачі фільтрації водних розчинів [7]. Разом з тим для ефективного якісного і кількісного аналізу впливу вказаних параметрів на довговічність та ефективність роботи фільтрів доцільно також отримати аналітичні розв'язки відповідних крайових задач. Оскільки при моделюванні фільтрів як багатофазних шаруватих систем координати розташування включень можуть бути невідомими, то виникає необхідність розгляду таких структур як випадково неоднорідних [8]. Крім того, в деяких випадках відсутня інформація про товщину окремих прошарків, а отже товщину включень також потрібно розглядати як випадкову величину.

Для математичного опису дифузійних, теплових і механічних процесів у багатофазних тілах часто застосовують методи «гомогенізації» неоднорідних структур [9, 10]. Такі методи ґрунтуються на припущеннях, що характерні відстані зміни фізичних параметрів значно більші за характерні розміри неоднорідностей у тілі, а також розташування неоднорідностей в тілі за рівномірним розподілом [11]. У праці [12] для врахування багатомасштабності деяких природних утворень під час опису стаціонарних процесів фільтрації у стохастично неоднорідному середовищі запропоновано ставити у відповідність крайовій задачі інтегро-диференціальне рівняння. Є.Я. Чапля та О.Ю. Чернуха [13] запропонували підхід до математичного опису процесів масоперенесення у випадково неоднорідних структурах, розміри неоднорідностей в яких можуть бути сумірними з розмірами тіла. Згідно з цим підходом крайову задачу масоперенесення зводять до еквівалентного інтегро-диференціального рівняння, а розв'язок знаходять у вигляді ряду Неймана, зручного для процедури усереднення за ансамблем конфігурацій фаз [13–15]. За розвиненим підходом запропонована методологія математичного опису потоків домішкової речовини у випадково неоднорідних шаруватих структурах [15, 16], відповідно до якого на основі рівняння балансу маси одержано рівняння дифузії для функції потоку, а крайові задачі запропоновано формулювати безпосередньо для потоку. За таким підходом отримано розрахункові формули для знаходження усереднених за ансамблем конфігурацій фаз дифузійних потоків у випадково неоднорідних шаруватих тілах для різних ймовірнісних розподілів включень у тілі [16, 17]. На цій основі розроблено пакет програм «FlowRan», функціональні можливості якого, призначення та застосування наведено у пропонованій роботі.

## **2. Функціональні можливості пакета програм «FlowRan»**

Програмний засіб «Пакет програм для розрахунку дифузійних потоків у двофазних тілах випадкової шаруватої структури (скорочено – пакет «FlowRan»)» призначений для кількісного і якісного аналізу дифузійних потоків мігруючої речовини у випадково неоднорідних шаруватих тілах з різними конфігураціями фаз; знаходження порівняльних розподілів потоків маси, усереднених за ансамблем конфігурацій фаз, за різних значень параметрів внутрішньої структури та фізичних характеристик середовища; кількісної оцінки парного взаємовпливу включень на усереднений потік маси; дослідження дифузійних потоків у випадкових шаруватих структурах зі стохастичними розмірами включень і представлення результатів як у графічній формі, так і у вигляді таблиць.

Пакет «FlowRan» забезпечує розрахунок потоків мігруючої речовини, усереднених за ансамблем конфігурацій фаз, у двофазній шаруватій смугі за рівномірного розподілу фаз в області тіла і ймовірною приповерхневою концентрацією включень біля однієї з меж

смуги, на якій діє джерело маси, або у протилежному випадку, а також для найбільш ймовірного розташування включень посередині тіла. Пакет програм «FlowRan» дозволяє розраховувати дифузійні потоки у двофазній смугі зі стохастично розташованими прошарками випадкової товщини за рівномірного або трикутного розподілу на заданому інтервалі, а також визначати кількісний і якісний ефект парного взаємовпливу включень на усереднені потоки маси. Пакет програм «FlowRan» передбачає можливість знаходження порівняльних розподілів усереднених дифузійних потоків залежно від різних значень фізичних характеристик та геометричних параметрів середовища, а також порівняння усереднених потоків з їх аналогами в однорідному тілі.

Крім того, передбачено можливість ознайомлення з детальними результатами розв'язування задачі. Користувач може переглянути таблицю, в якій для кожної точки знайдено значення дифузійного потоку в однорідному шарі і усередненого потоку маси при відповідному параметрі порівняння.

В одновимірному за просторовою координатою випадку (шарувате тіло) диференціальне рівняння на дифузійний потік, отримане на основі рівняння балансу маси дифундуючої речовини, має вигляд [15]

$$\frac{\partial J(z,t)}{\partial t} = D(z) \frac{\partial^2 J(z,t)}{\partial z^2}, \quad (1)$$

де  $J(z,t)$  – випадковий потік маси,  $D(z)$  – випадковий коефіцієнт дифузії.

Розглядаючи процес дифузії домішкової речовини у двофазній стохастично неоднорідній шаруватій смугі товщини  $z_0$ , приймаємо, що справджуються крайові умови першого роду на функцію потоку  $J(z,t)$ : у початковий момент часу відсутній дифузійний потік у тілі; на «верхній» поверхні шару  $z=0$  потік є сталий, а на «нижній» поверхні смуги  $z=z_0$  концентрація дорівнює нулю:

$$J(z,t)|_{t=0} = 0; \quad J(z,t)|_{z=0} = J_* \equiv const, \quad c(z,t)|_{z=z_0} = 0, \quad (2)$$

при цьому дифузійний потік на «нижній» межі дорівнює деякій функції часу  $F(t)$ , яка визначається додатково з відповідної крайової задачі для концентрації мігруючої речовини:  $J(z,t)|_{z=z_0} = F(t)$ .

Введемо в розгляд випадкову функцію просторових координат типу одиничної сходинкової функції Хевісайда [18] – випадкову «функцію структури»:

$$\eta_{ij}(z) = \begin{cases} 1, & z \in \Omega_{ij}; \\ 0, & z \notin \Omega_{ij}. \end{cases}$$

Тут  $j$  – номер фази ( $j=0;1$ ), зокрема,  $j=0$  відповідає матриці,  $i$  – номеру включення в рамках фази ( $i = \overline{1, n_j}$ ),  $n_j$  – кількість підшарів сорту  $j$ ,  $\Omega_{ij}$  –  $i$ -та однозв'язна область  $j$ -ї фази.

Тоді коефіцієнт дифузії можна подати як  $D(z) = \sum_{j=0}^1 \sum_{i=1}^{n_j} D_j \eta_{ij}(z)$ , де  $D_j$  – коефіцієнт дифузії частинок у  $j$ -ій фазі. Підставимо таке подання в (1), а також додамо і віднімемо в отриманому співвідношенні детермінований оператор  $L_0(z,t) \equiv \partial/\partial t - D_0 \partial^2/\partial z^2$ . Отримаємо рівняння дифузії, яке в операторному вигляді запишемо так:

$$L_0(z,t)J(z,t) = L_s(z,t)J(z,t), \quad (3)$$

де  $L_s(z, t) \equiv L_0(z, t) - L(z, t) = (D_1 - D_0) \sum_{i=1}^{n_1} \eta_{i1}(z) \partial^2 / \partial z^2$ .

Розглядаючи праву частину рівняння (3) як джерело, тобто випадкову неоднорідність структури трактуємо як внутрішні джерела, крайову задачу (1)–(2) зводимо до еквівалентного інтегро-диференціального рівняння:

$$J(z, t) = J_0(z, t) + \int_0^t \int_0^{z_0} G(z, z', t, t') L_s(z') J(z', t') dz' dt', \quad (4)$$

де  $J_0(z, t)$  – розв’язок однорідної крайової задачі,  $G(z, z', t, t')$  – детермінована функція Гріна.

Розв’язок рівняння (4) знаходимо у вигляді ряду Неймана, зручного для проведення процедури усереднення, зокрема, за ансамблем конфігурацій фаз [13, 15]:

$$J(z, t) = J_0(z, t) + \int_0^t \int_0^{z_0} G(z, z', t, t') L_s(z') J_0(z', t') dz' dt' + \\ + \int_0^t \int_0^{z_0} G(z, z', t, t') L_s(z') \left[ \int_0^{t'} \int_0^{z_0} G(z', z'', t', t'') L_s(z'') J_0(z'', t'') dz'' dt'' \right] dz' dt' + \dots \quad (5)$$

Зазначимо, що ряд Неймана є абсолютно і рівномірно збіжним, якщо коефіцієнти дифузії є обмеженими [18, 19]:  $D_j \leq K < \infty$ , ( $(j = 0; 1)$ ) і коефіцієнт дифузії матриці відмінний від нуля:  $D_0 \neq 0$ .

Процедури усереднення потоків маси проводимо для випадків нульової та ненульової сталої початкових концентрацій домішкової речовини.

$$\left\langle \left\langle J(z, t) \right\rangle_{conf} \right\rangle_h = J_0(z, t) + \left\langle \int_0^t \int_0^{z_0} G(z, z', t, t') \left\langle L_s(z') \right\rangle_{conf} J_0(z', t') dz' dt' \right\rangle_h,$$

де  $h$  – товщина включення, яка може бути детермінованою або випадковою величиною із заданою функцією розподілу на проміжку  $[h_{\min}; h_{\max}]$ ,  $0 < h_{\min} \leq h \leq h_{\max} < z_0$ .

Отримано розрахункові формули для знаходження усереднених за ансамблем конфігурацій фаз дифузійних потоків у випадково неоднорідних шаруватих тілах для різних імовірнісних розподілів включень у тілі, обчислені за двома та трьома доданками ряду (5).


### 3. Призначення пакета

На основі одержаних формул розроблено пакет програм для розрахунку дифузійних потоків у двофазних тілах випадкової шаруватої структури «FlowRan», призначений для кількісного і якісного аналізу потоків мігруючої речовини у випадково неоднорідних шаруватих тілах з різними конфігураціями фаз; знаходження порівняльних розподілів потоків маси, усереднених за ансамблем конфігурацій фаз, за різних значень параметрів внутрішньої структури та фізичних характеристик; кількісної оцінки парного взаємовпливу включень на усереднений потік маси; дослідження потоків у випадкових шаруватих структурах зі стохастичними розмірами включень і представлення результатів як у графічній формі, так і у вигляді таблиць. Цей пакет передбачає розв’язування крайових задач дифузії, сформульованих на потік маси, у тілі:

- з рівномірним розподілом фаз:
  - ✓ з одним прошарком:

- відомої товщини:
  - ◆ за нульової початкової концентрації;
  - ◆ за ненульової сталої початкової концентрації;
- стохастичної товщини:
  - ◆ з рівномірним розподілом за нульової початкової концентрації;
  - ◆ з рівномірним розподілом за ненульової сталої початкової концентрації;
  - ◆ з трикутним розподілом за нульової початкової концентрації;
  - ◆ з трикутним розподілом за ненульової початкової концентрації;
- ✓ у багат шаровій смузі:
  - з включеннями відомої товщини:
    - ◆ за нульової початкової концентрації:
      - без урахування парного взаємовпливу включень;
      - з урахуванням парного взаємовпливу включень;
    - ◆ за ненульової сталої початкової концентрації;
  - з включеннями стохастичної товщини:
    - ◆ з рівномірним розподілом за нульової початкової концентрації;
    - ◆ з рівномірним розподілом за ненульової сталої початкової концентрації;
    - ◆ з трикутним розподілом за нульової початкової концентрації;
    - ◆ з трикутним розподілом за ненульової початкової концентрації;
- з різними випадками бета-розподілу включень:
  - ✓ включення зосереджені біля верхньої границі:
    - за нульової початкової концентрації;
    - за ненульової сталої початкової концентрації:
      - ◆ без урахування парного взаємовпливу включень;
      - ◆ з урахуванням парного взаємовпливу включень;
  - ✓ включення зосереджені посередині тіла:
    - за нульової початкової концентрації;
    - за ненульової сталої початкової концентрації;
  - ✓ включення зосереджені біля нижньої границі:
    - за нульової початкової концентрації;
    - за ненульової сталої початкової концентрації.

#### 4. Запуск програми

Запуск розробленого пакета програм «FlowRan» на виконання здійснюється активізацією файлу  FlowRan.exe. Після цього відкриється головне вікно програми «FlowRan» (рис. 1).

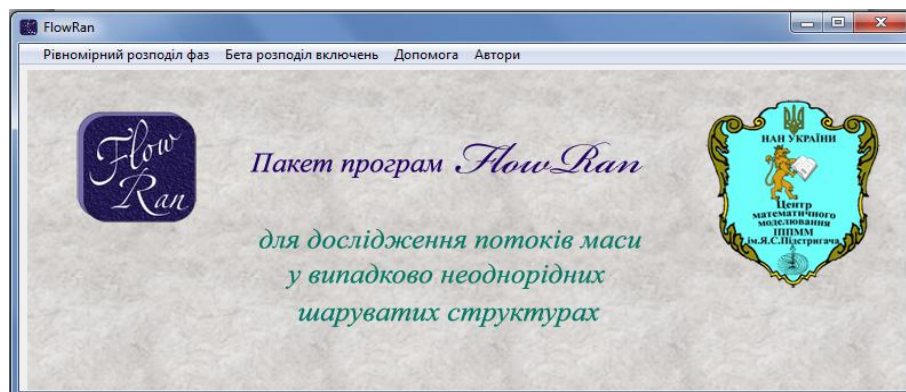


Рис. 1. Головне вікно програми «FlowRan»

## 5. Засоби вибору функціональних можливостей

Функціональні можливості пакета «FlowRan» реалізовані із застосуванням меню та клавіші доступу.

Головне вікно пакета програм призначене для вибору програми та отримання інформації щодо користування пакетом, а також інформації про авторів.

Стрічка меню головного вікна пакета складається з таких пунктів: «Рівномірний розподіл фаз», «Бета-розподіл включень», «Допомога», «Автори».

Пункт головного меню «Рівномірний розподіл фаз» призначений для вибору однієї з програм розрахунку потоків дифундуючої речовини у двофазних шаруватих середовищах з одним випадково розташованим прошарком або стохастично неоднорідному багатшаровому тілі за рівномірного розподілу фаз та складається з таких підпунктів (рис. 2): «Один прошарок»: «Характерна товщина включення», «Випадкова товщина включення»; «Багатшарове тіло»: «Характерна товщина включень», «Випадкова товщина включень».

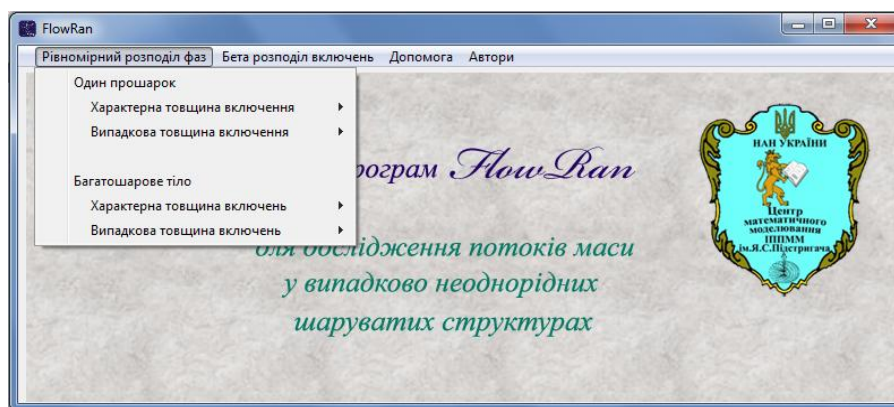


Рис. 2. Складові пункту «Рівномірний розподіл фаз» меню головного вікна пакета програм «FlowRan»

Підпункти «Один прошарок. Характерна товщина включення», «Багатшарове тіло. Характерна товщина включень» дають можливість вибрати розподіл концентрації домішкової речовини в початковий момент часу і містять такі підпункти (рис. 3): «Нульова початкова концентрація», «Ненульова стала концентрація».

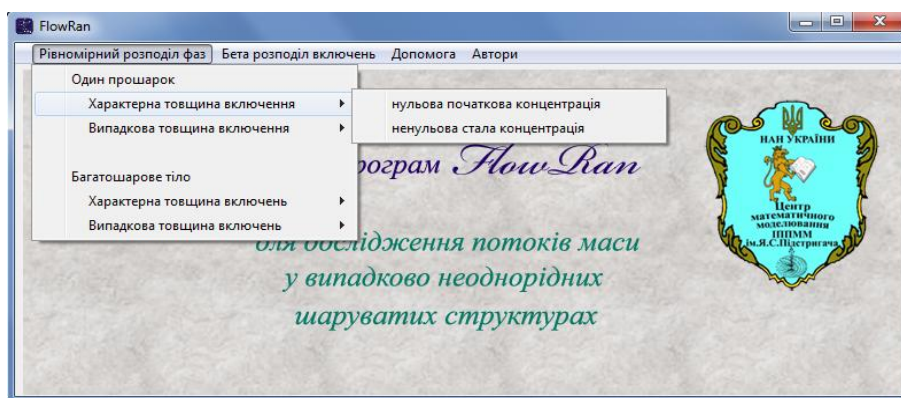


Рис. 3. Складові пункту «Один прошарок. Характерна товщина включення» випадаючого меню пакета програм «FlowRan»

Підпункт випадаючого меню «Нульова початкова концентрація» для пункту «Багатшарове тіло. Характерна товщина включень» дає можливість обрати задачу для розрахунку потоків домішкової речовини за двома або трьома доданками ряду Неймана, у вигляді



якого обчислюються потоки, і складається з підпунктів «Без урахування парного взаємовпливу включень», «З урахуванням парного взаємовпливу включень».

Підпункти «Один прошарок. Випадкова товщина включення» та «Багат шарове тіло. Випадкова товщина включень» забезпечують користувачеві можливість обрати тип розподілу для стохастичної товщини включень за двох випадків початкової умови на функцію концентрації домішки та складається з таких підпунктів (рис. 4): «Рівномірний розподіл при нульовій початковій концентрації», «Рівномірний розподіл при ненульовій сталій концентрації», «Трикутний розподіл при нульовій початковій концентрації», «Трикутний розподіл при ненульовій сталій концентрації».

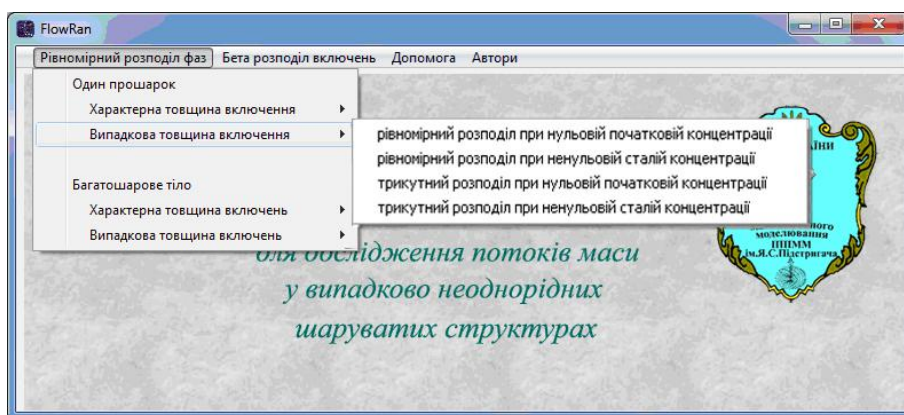


Рис. 4. Складові пункту «Один прошарок. Випадкова товщина включення» випадального меню пакета програм «FlowRan»

Пункт головного меню «Бета-розподіл включень» призначений для вибору однієї з програм розрахунку потоків мігруючої речовини у двофазних багат шарових тілах з областю найбільш імовірного розташування включень в околі однієї з поверхонь тіла або посередині смуги і складається з таких підпунктів (рис. 5): «Включення зосереджені біля верхньої границі», «Включення зосереджені посередині тіла», «Включення зосереджені біля нижньої границі».

Кожен з цих підпунктів дає можливість вибрати початкову умову на функцію концентрації домішкової речовини

«За нульової початкової концентрації», «За ненульової сталої концентрації», а пункт «Включення зосереджені біля верхньої границі тіла» – «за ненульової сталої концентрації» додатково містить можливість вибору обчислень потоку з урахуванням ефекту парного взаємовпливу чи без і містить такі підпункти (рис. 6): «Без урахування парного взаємовпливу включень», «З урахуванням парного взаємовпливу включень».

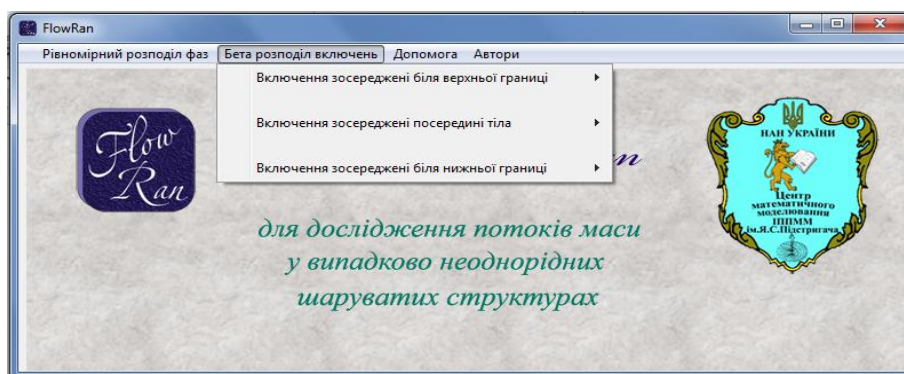


Рис. 5. Складові пункту «Бета-розподіл включень» меню головного вікна пакета програм «FlowRan»

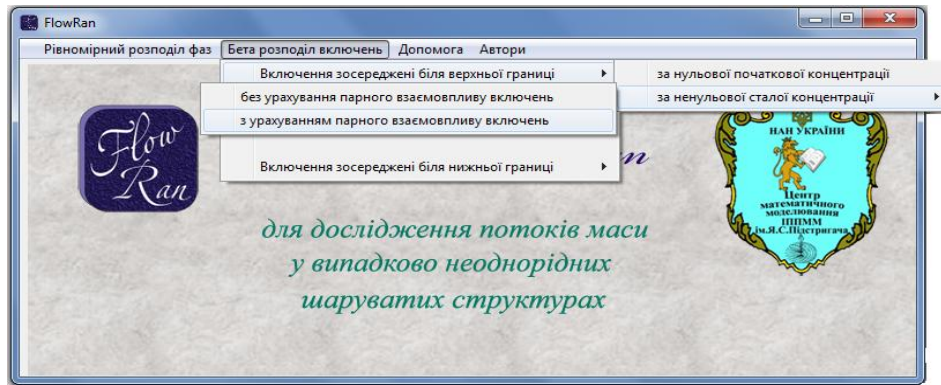


Рис. 6. Складові пункту «Включення зосереджені біля верхньої границі тіла» випадваючого меню пакета програм «FlowRan»

Пункт головного меню «Допомога» містить коротку інформацію про кожну задачу та підказки для користувача (рис. 7).

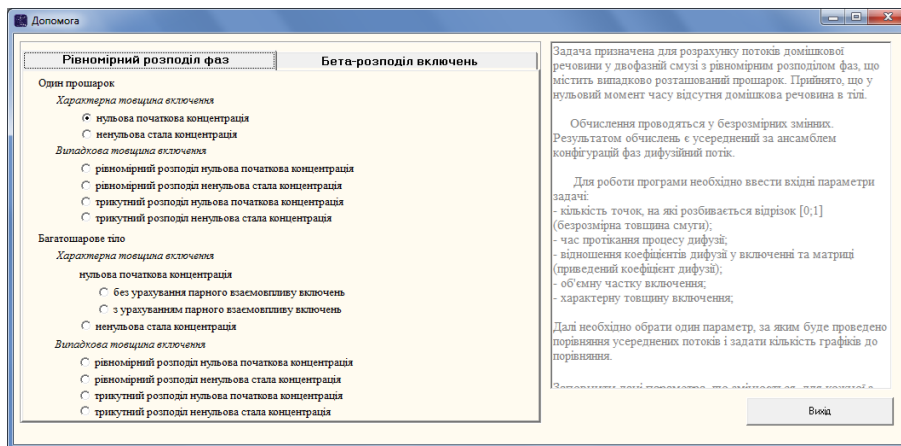


Рис. 7. Пункт головного меню «Допомога» пакета програм «FlowRan»

Для управління головним вікном пакета програм «FlowRan» у правому верхньому куті вікна містяться стандартні кнопки у вигляді піктограм «Згорнути», «Розгорнути», «Закрити».

## 6. Програма розрахунку усередненого дифузійного потоку у шаруватій смузї з проша-рками випадкової товщини за рівномірного розподілу фаз

Роботу модулів пакета «FlowRan» розглянемо на прикладі задачі дифузії домішкової речовини у двофазній багатошаровій смузї з рівномірним розподілом фаз за трикутного розподілу товщини включень при ненульовій початковій концентрації.

При виборі пункту «Рівномірний розподіл фаз», «Багатошарове тіло. Випадкова товщина включень» підпункту «Трикутний розподіл при ненульовій концентрації» відкриється вікно «Потік у шаруватій смузї з проша-рками за трикутного розподілу товщини при ненульовій початковій концентрації. Рівномірний розподіл фаз» (рис. 8).

Це вікно складається з таких полів, які необхідно заповнити користувачеві (рис. 8): «Вхідні дані», «Вибір параметра для порівняння», а також містить поля «Таблиця», «Графіки»; клавіші «Очистити результат», «Таблиця», «Рисунок», «Вибір задачі», «Друк» та «Вихід». У нижньому лівому кутку вікна програми міститься поле, де виводяться повідомлення про помилки. Під полями «Таблиця», «Графіки» міститься схематичне зображення реалізації відповідної випадкової структури.



У поле «Вхідні дані» вносимо значення параметрів задачі (рис. 8), де  $N$  – кількість точок поділу проміжку,  $\tau$  – безрозмірний час,  $D_1/D_0$  – відношення коефіцієнтів дифузії у включенні і матриці,  $kilkist$  – кількість включень,  $C_*/J_*$  – відношення початкової концентрації домішки в тілі до потоку на верхній границі,  $h_1$  – мінімальне можливе значення товщини включення,  $h_2$  – максимальне можливе значення товщини включення.

*Зауваження 1.* Задання нефізичних вхідних даних, наприклад, від’ємних значень параметрів, значень  $h_1 \geq h_2$ ,  $h_2 \cdot kilkist > 1$ , призводить до отримання нефізичних результатів. При цьому програма не видає повідомлення про помилку. Тому перед початком обчислень користувачеві необхідно самостійно здійснювати перевірку значень вхідних параметрів.

*Зауваження 2.* Параметр  $N$  визначає розбиття проміжка  $[0;1]$  безрозмірної товщини шару  $\zeta$  на точки  $\zeta_i$  ( $i = 1, N$ ), в яких обчислюються значення дифузійного потоку за розрахунковими формулами, одержаними у п. 3.

*Зауваження 3.* Параметр  $C_*/J_*$  може набувати нульового значення, тоді результати роботи програми збігаються із числовими даними, отриманими для програми розрахунку усереднених потоків у такій самій структурі, але за нульової початкової концентрації.

*Зауваження 4.* У полі «Вхідні дані» розділювачем між цілою і дробовою частинами є крапка. При заданні параметрів  $N$  і  $kilkist$ , які є цілими числами, в кінці їх значень також потрібно поставити крапку.

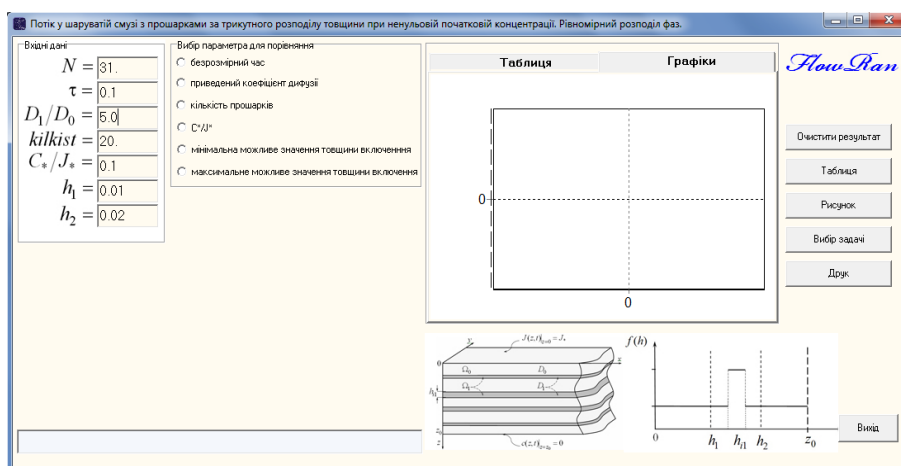


Рис. 8. Вікно програми «Потік у шаруватій смузї з прошарками за трикутного розподілу товщини при ненульовій початковій концентрації. Рівномірний розподіл фаз»

Після активізації одного з перемикачів «Вибір параметра для порівняння» (рис. 9) у вікні програми з’являється поле «Кількість графіків для порівняння», в якому вибирається кількість графіків, які будуть відображені на одному рисунку для проведення їхнього аналізу, зокрема, передбачена побудова від 1 до 12 графіків.

Після вибору кількості графіків з’являється поле «Значення порівняльного параметра» для проведення почергового розрахунку усередненого потоку домішкової речовини у двофазному шаруватому тілі (рис. 10). Тут суцільними лініями відмічено усереднений потік, а штриховими – відповідний потік в однорідному шарі з характеристиками базової фази. Це поле складається з комірок, в які вносяться значення параметра для порівняння, та клавіш «Крива 1», ..., «Крива 12» для проведення розрахунку та візуального представлення розв’язку задачі (рис. 11). Для коректного відображення кожної кривої потрібно двічі натиснути на клавішу «Крива  $i$ » ( $i = 1, 2, \dots$ ).

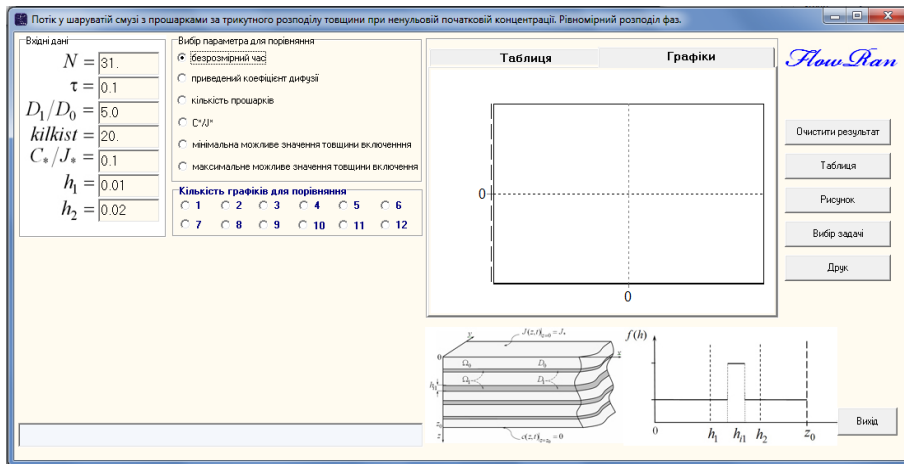


Рис. 9. Приклад заповнення поля «Вибір параметра для порівняння»

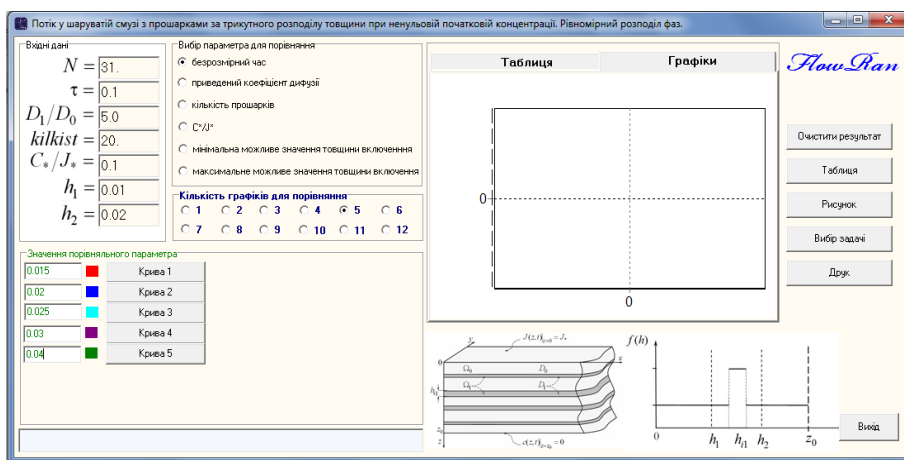


Рис. 10. Приклад заповнення полів «Кількість графіків для порівняння» та «Значення порівняльного параметра»

*Зауваження 5.* Кількість комірок, в які необхідно вносити значення параметра порівняння, і кнопок «Крива  $i$ », де «Крива  $i$ » ( $i = \overline{1, N}$ ,  $N$  – задана кількість графіків для порівняння,  $1 \leq N \leq 12$ ) відповідає кількості вибраних графіків у полі «Кількість графіків для порівняння».

Поле «Таблиця» призначене для чисельного аналізу усереднених дифузійних потоків для однорідного шару та багат шарового тіла (рис. 12), яка дозволяє бачити значення функцій  $J_0(\zeta, \tau)/J_*$ ,  $\langle J(\zeta, \tau) \rangle / J_*$  на різних безрозмірних глибинах  $\zeta$ .

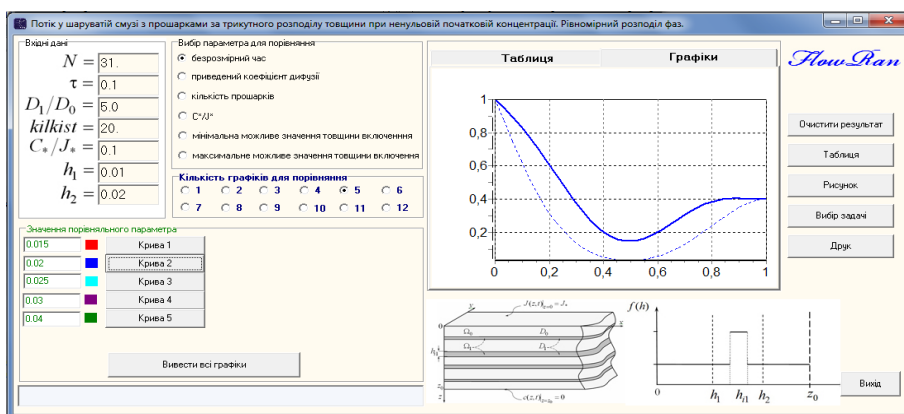


Рис. 11. Приклад побудови «Кривої 2»

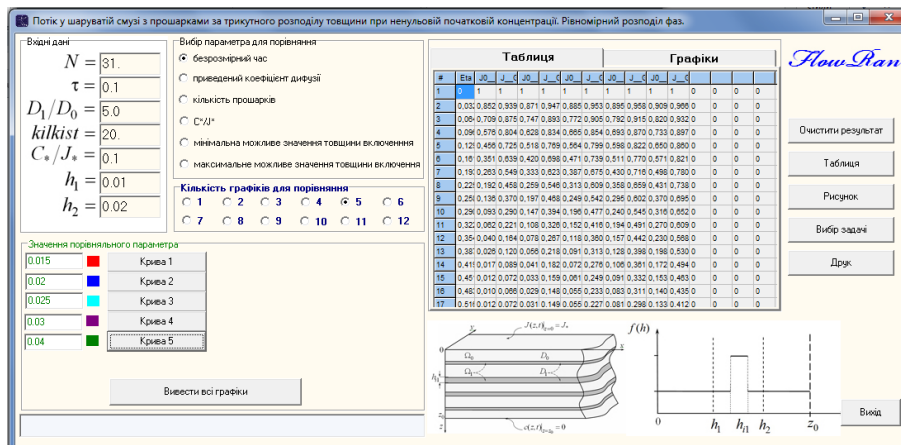


Рис. 12. Приклад поля «Таблиця» після проведення обчислень за п'ятьма значеннями безрозмірного часу

Поле «Графіки» призначене для візуалізації розподілів дифузійних потоків, де вздовж осі абсцис відкладена безрозмірна просторова змінна  $\zeta$ , а вздовж осі ординат – усереднений дифузійний потік, віднесений до його значення на поверхні тіла  $\zeta=0$ . Надалі в усіх формах суцільні лінії відповідають усередненим потокам у випадково неоднорідних структурах, а штрихові лінії – потокам в однорідній смузї з характеристиками базової фази.

Клавіша «Вивести всі графіки» призначена для виведення графіків, обчислених за всіма значеннями параметра порівняння, у полі «Графіки» у вигляді одного рисунка і можливості подальшого візуального аналізу усереднених дифузійних потоків в однорідному та багатошаровому тілі (рис. 13).

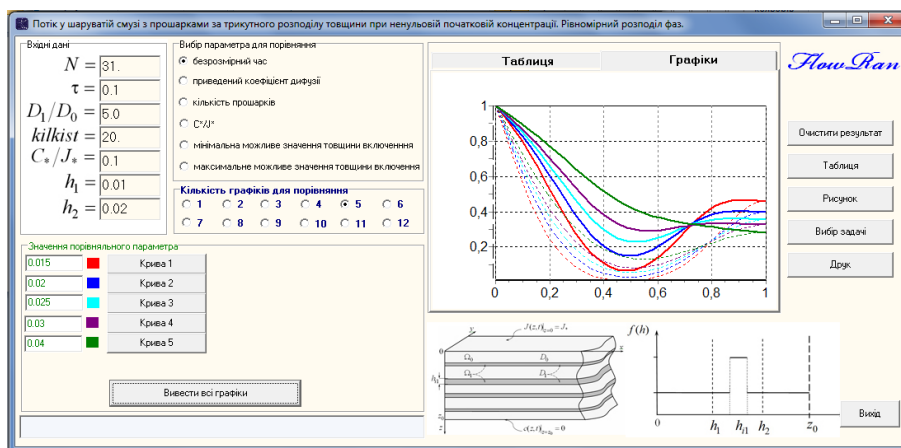


Рис. 13. Виведення всіх графіків у поле «Графіки»

**Зауваження 6.** У випадку, коли задача не порохвана хоча б при одному значенні параметра для порівняння, натиснення на клавішу «Вивести всі графіки» видасть повідомлення про помилку (рис. 14).

Для очищення полів «Графіки» та «Таблиця» і проведення розрахунків за новим параметром для порівняння чи для нових значень порівняльного параметра необхідно натиснути клавішу «Очистити результат».

Переміщення між полями «Графіки» та «Таблиця» можна здійснювати, безпосередньо натиснувши на вкладку відповідного поля, або ж за допомогою клавіш «Рисунок» і «Таблиця» вікна програми. Клавіша «Вибір задачі» повертає користувача у головне вікно пакета програм «FlowRan» (рис. 1), де можна вибрати іншу задачу для обчислення потоків

домішкової речовини. Для зручності користувача вікно програми також передбачає можливість роздрукувати отримані результати за допомогою клавіші «Друк» (рис. 15).

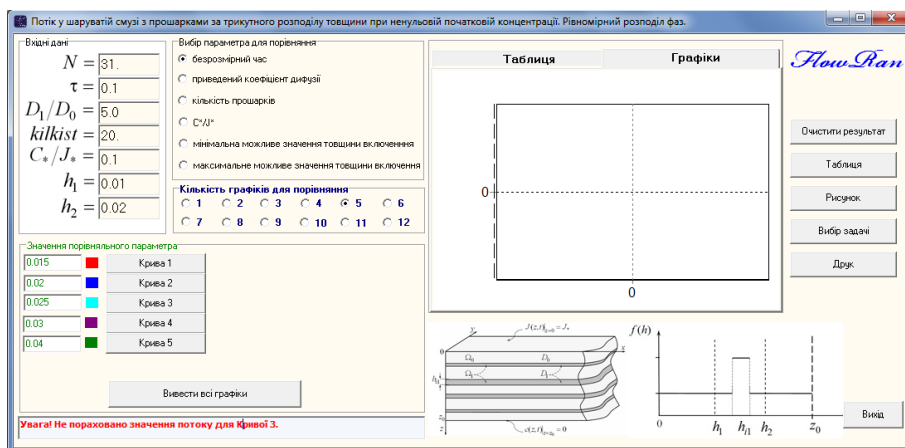


Рис. 14. Приклад виведення повідомлення про помилку

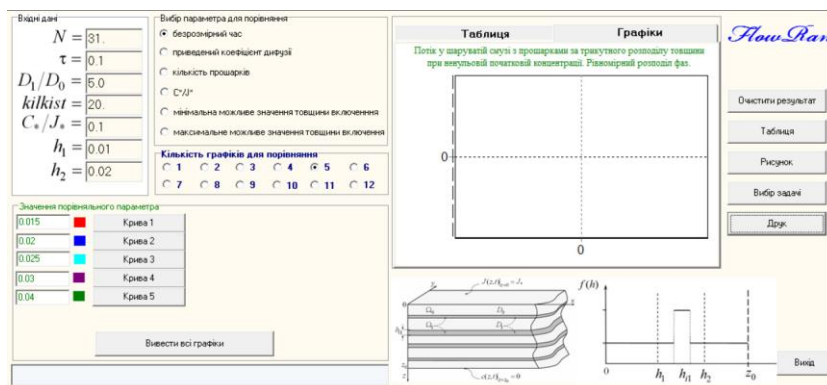


Рис. 15. Приклад роздруку отриманих результатів клавішею «Друк»

Натиснувши на клавішу «Вихід», користувач переходить у головне вікно пакета програм, де має можливість вибрати іншу задачу (рис. 1).

## 6. Розв'язування контрольного прикладу

Як тестовий приклад розглянута міграція атомів вуглецю в шаруватому композиті  $\alpha\text{Fe}-\text{Ni}$ , де приймаємо як базову фазу залізо. Значення коефіцієнтів дифузії вуглецю є [20]: у залізі  $D_{\alpha\text{Fe}} = 6,3 \cdot 10^{-7} \text{ м}^2/\text{с}$ , у нікелі  $D_{\text{Ni}} = 9 \cdot 10^{-6} \text{ м}^2/\text{с}$ . Тоді  $D_1/D_0 = D_{\text{Ni}}/D_{\alpha\text{Fe}} = 14,286$  (рис. 16).

Розв'язок задачі знаходження усереднених потоків вуглецю в шаруватій структурі  $\alpha\text{Fe}-\text{Ni}$  отриманий при припущенні, що фази в тілі розташовані за рівномірним розподілом, а в нульовий момент часу відомий сталий ненульовий розподіл атомів вуглецю  $C$  у композиті (рис. 17).

Пункт головного меню «Бета розподіл включень» призначений для вибору однієї з програм розрахунку потоків мігруючої речовини в багат шарових тілах з областю найбільш ймовірного розташування включень в околі однієї з поверхонь тіла або посередині смуги.

Розроблений пакет програм «FlowRan» дає можливість знаходити порівняльні розподіли дифузійних потоків, усереднених за ансамблем реалізацій стохастичної внутрішньої структури, залежно від різних значень характеристик тіла та геометричних параметрів

структури. Передбачено представлення результатів як у графічній формі, так і у вигляді таблиць.

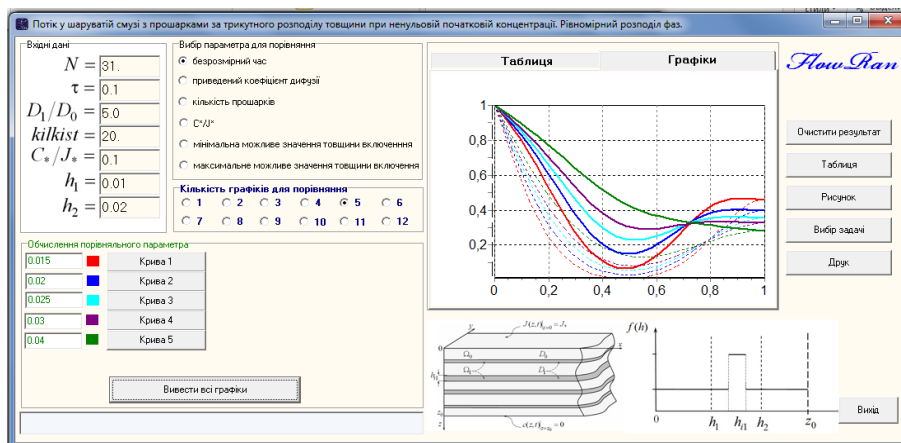


Рис. 16. Виведення всіх графіків у поле «Графіки»

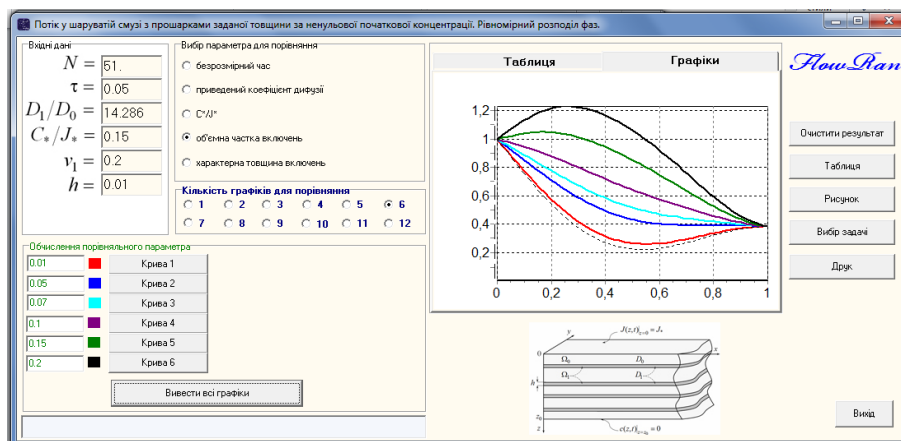


Рис. 17. Вигляд вікна програми з усіма побудованими графіками

## 7. Висновки

Розроблено підхід до математичного опису випадкових дифузійних потоків домішкової речовини у стохастично неоднорідних шаруватих тілах, що дає можливість чисельно досліджувати усереднені потоки маси через двофазну багатошарову смугу за різних імовірнісних випадків розташування включень та стохастичних товщин підшарів. На основі одержаних розрахункових формул створено пакет програм для комп'ютерного моделювання дифузійних потоків у випадково неоднорідних структурах, визначення основних закономірностей поведінки усереднених потоків та аналізу впливу похибок різного типу на збурення усередненого потоку.

Пакет програм розвинутий на основі побудови оригінальним авторським методом розв'язків нового рівняння дифузії на функцію потоку за фізично обґрунтованих крайових умов у двофазних тілах випадкової шаруватої структури і за стохастичних розмірів включень, обґрунтованих і апробованих авторами розробки. Функція дифузійного потоку отримана у вигляді збіжного інтегрального ряду Неймана для моделей, у яких неоднорідність структури врахована у коефіцієнтах рівняння.

Отримано розрахункові формули усереднених дифузійних потоків для структур з рівномірним розподілом фаз та з найімовірнішим розташуванням включень в околі однієї смуги або посередині тіла. На цій основі розроблено комплекс програм "FlowRan", модулі якого забезпечують розрахунок та представлення у вигляді, зручному для користувача ро-



зподілів дифузійних потоків, усереднених за ансамблем реалізацій структури і випадковою товщиною включень для різних імовірнісних розподілів, а також оцінки парного взаємовпливу включень.

## СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Benitez J. Principles and modern applications of mass transfer operations / Benitez J. – New Jersey: J. Wiley & Sons, 2009. – 549 p.
2. Effective conductivity in isotropic heterogeneous media using a strong-contrast statistical continuum theory / A. Mikdam, A. Makardi, S. Ahzi [et al.] // J. Mech. and Phys. of Solids. – 2009. – Vol. 57. – P. 76 – 86.
3. Ngan A.H.W. Canonical ensemble for static elastic structures with random microstructures / A.H.W. Ngan // J. Mech. and Phys. of Solids. – 2009. – Vol. 57. – P. 803 – 811.
4. Keller J.B. Flow in random porous media / J.B. Keller // Transport in Porous Media. – 2001. – Vol. 43. – P. 395 – 406.
5. Zhu Y. Smoothed particle hydrodynamics model for diffusion through porous media / Y. Zhu, P.J. Fox // Transport in Porous Media. – 2001. – Vol. 43. – P. 441 – 471.
6. Журба М.Г. Основы процессов доочистки сточных вод фильтрованием / М.Г. Журба // Тепло и массообмен в капиллярно-пористых телах. – Минск: Наука и техника, 1965. – С. 60 – 73.
7. Бомба А.Я. Комп'ютерне моделювання процесів очищення стічної води на каркасно-засипних фільтрах / А.Я. Бомба, І.М. Присяжнюк, В.М. Сівак // Вісник Нац. ун-ту водного господарства та природокористування. – 2005. – Вип. 4 (32). – С. 164 – 169.
8. Ganapathysubramanian B. Modeling multiscale diffusion processes in random heterogeneous media / B. Ganapathysubramanian, N. Zabaras // Computer Methods in Appl. Mech. and Engineering. – 2008. – Vol. 197. – P. 3560 – 3573.
9. Гамбин Б. Стохастическая гомогенизация уравнений стационарной термоупругости / Б. Гамбин, Л. Назаренко, Е. Телега // Доповіді НАН України. – 2002. – № 10. – С. 37 – 44.
10. Galka A. Thermodiffusion in heterogeneous elastic solids and homogenization / A. Galka, J.J. Telega, R. Wojnar // Arch. Mech. – 1994. – Vol. 46, N 3. – P. 267 – 314.
11. Хорошун Л.П. Термоупругость двухкомпонентных смесей / Л.П. Хорошун, Н.С. Солтанов. – К.: Наукова думка, 1984. – 112 с.
12. Фильтрация жидкостей в многомасштабных пористых средах / О.Л. Кузнецов, А.В. Каракин, Ю.А. Кухаренко [и др.] // Геоинформатика. – 2001. – № 4. – С. 11 – 15.
13. Чапля Є.Я. Математичне моделювання дифузійних процесів у випадкових і регулярних структурах / Є.Я. Чапля, О.Ю. Чернуха. – К.: Наукова думка, 2009. – 302 с.
14. Чапля Є. Математичне моделювання потоків у шарі / Є. Чапля, О. Чернуха, Н. Васьо // Вісник Львів. ун-ту. – (Серія «Прикл. матем. інформ.»). – 2010. – Вип. 15. – С. 103 – 115.
15. Чапля Є.Я. Математичне моделювання дифузійних потоків у випадково неоднорідній шаруватій смузі / Є.Я. Чапля, О.Ю. Чернуха, А.Є. Давидок // Доповіді НАН України. – 2012. – № 11. – С. 40 – 46.
16. Чернуха О.Ю. Моделювання дифузійних потоків у двофазній багатошаровій випадково неоднорідній смузі за рівномірного розподілу фаз / О.Ю. Чернуха, А.Є. Давидок // Прикладні проблеми механіки і математики. – 2013. – Вип. 11. – С. 142 – 150.
17. Чернуха О.Ю. Моделювання дифузійного потоку у смузі з ймовірним приповерхневим розташуванням шаруватих включень / О.Ю. Чернуха, В.Є. Гончарук, А.Є. Давидок // Моделювання та інформаційні технології. – 2012. – Вип. 65. – С. 145 – 156.
18. Рытов С. Введение в статистическую радиофизику. Ч. II: Случайные поля / Рытов С., Кравцов Ю., Татарский В. – М.: Наука, 1978. – 436 с.
19. Корн Г. Справочник по математике для научных работников и инженеров / Г. Корн, Т. Корн. – М.: Наука, 1984. – 831 с.
20. Лариков Л.И. Диффузия в металлах и сплавах. Структура и свойства металлов и сплавов / Л.И. Лариков, В.И. Исайчев. – К.: Наукова думка, 1990. – 374 с.

*Стаття надійшла до редакції 17.09.2015*