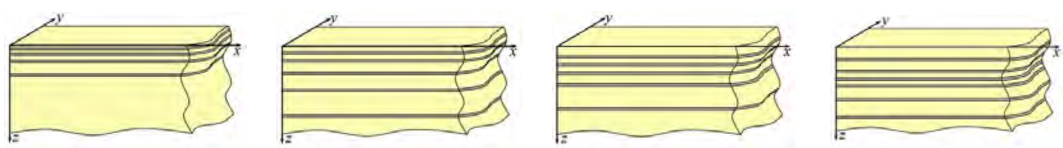
УДК 517.958:532.72

Математичне моделювання процесів дифузії домішки у шаруватому півпросторі з гама-розподілом включень

Білущак Ю. І., пров. інженер
Чернуха О. Ю., д.т.н., ст.н.с., зав. відділом

Центр математичного моделювання ІППММ ім. Я. С. Підстригача НАН України
(вул. Дж. Дудаєва, 15, м. Львів, 79005, Україна)

Процеси масоперенесення відіграють важливу роль у довкіллі, суттєво впливають на протікання багатьох фізико-хімічних процесів та явищ, зокрема можуть визначати механізм та кінетику хімічних реакцій. При потребі досліджувати процеси дифузії в багатофазних середовищах, коли певні елементи фаз мають розміри співмірні з розмірами тіла, виникає необхідність в розробці нових моделей і методів дослідження полів у випадкових структурах, зокрема, для різних розподілів фаз в області тіла [1]. В роботі стохастичні поля концентрації мігруючої речовини досліджуємо у двофазному шаруватому півпросторі, в якому включення розташовані за різними випадками гама-розподілу (рис. 1).



а *б* *в* *г*

Рис. 1. Можливі реалізації структури багатошарового півпростору для різних випадків гама-розподілу включень

Процес дифузії домішкової речовини у двофазному шаруватому півпросторі описується рівняннями дифузії, сформульованими для кожної з фаз:

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

де $c_j(z,t)$ - випадкова концентрація домішкових частинок в області Ω_j; ρ_j, d_j – густина і кінетичний коефіцієнт переносу в Ω_j; n_j – кількість шарів фази j; Ω_{ij} – i-та однозв'язна область фази j, $i = \overline{1, n_j}$, $j = 0,1$.

В початковий момент часу домішкова речовина була відсутня в тілі, а далі на границі півпростору підтримується її постійне значення

$$c_0(z,t)\big|_{t=0} = c_1(z,t)\big|_{t=0} = 0; \quad c_0(z,t)\big|_{z=0} = c_* \equiv const, \quad c_0(z,t)\big|_{z\to\infty} = 0. \tag{2}$$

На міжфазних границях накладено умови неідеального контакту для функції концентрації:

$$k_0 c_0(z,t)\big|_{z=z_l-0} = k_1 c_1(z,t)\big|_{z=z_l+0}, \; \rho_0 d_0 \partial c_0(z,t)/\partial z\big|_{z=z_l-0} = \rho_1 d_1 \partial c_1(z,t)/\partial z\big|_{z=z_l+0}; \tag{3}$$

$$k_1 c_1(z,t)\big|_{z=z_l+h_{l1}-0} = k_0 c_0(z,t)\big|_{z=z_l+h_{l1}+0},$$

$$\rho_1 d_1 \partial c_1(z,t)/\partial z_{z=z_l+h_{l1}-0} = \rho_0 d_0 \partial c_0(z,t)/\partial z\big|_{z=z_l+h_{l1}+0}. \tag{4}$$

де z_l – випадкова координата "верхньої" межі шару Ω_{l1}; h_{l1} – товщина включення Ω_{l1}, l – номер підшару, $l = \overline{1, n_1}$, n_1 – кількість включень.

Ввівши функцію концентрації $c(z,t)$ для всього тіла, яка задовольняє рівняння (1) або контактні умови (3), (4) та використовуючи апарат теорії узагальнених функцій контактна задача (1), (3), (4) зведена до рівняння масопереносу у всьому тілі. Отриманій крайовій задачі поставлено у відповідність еквівалентне інтегродиференціальне рівняння, з випадковим ядром, яке розв'язано методом послідовних наближень. Розв'язок отримано у вигляді ряду Неймана, а саме

$$c(z,t) = c_0(z,t) + \int_0^t \int_0^\infty G(z,z',t,t') L_s(z',t') c_0(z',t') dz' dt' + \ldots, \tag{5}$$

де $c_0(z,t)$ – розв'язок однорідної крайової задачі, $G(z,z',t,t')$ – функція Гріна даної задачі,

$$L_s(z,t) \equiv \sum_{j,i} (\rho_0 - \rho_1) \eta_{ij}(z) \left\{ \frac{\partial}{\partial t} \right\} - \sum_{j,i} (d_0 - d_1) \eta_{ij}(z) \left\{ \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right\} + \sum_{j,i} \left[\sum_{l=1}^{n_1} \left(\left[\frac{\partial}{\partial z} \right]_{z=z_l} \delta(z - z_l) + \right.\right.$$

$$\left.\left. + [\ ]_{z=z_l} \delta'(z - z_l) \right) + \sum_{l=1}^{n_1} \left(\left[\frac{\partial}{\partial z} \right]_{z=z_l + h_{l1}} \delta(z - (z_l + h_{l1})) + [\ ]_{z=z_l+h_{l1}} \delta'(z - (z_l + h_{l1})) \right) \right].$$

Усереднення поля концентрації домішкової речовини (5) проведено за ансамблем конфігурацій фаз для різних типів гама-розподілу включень [2], густина якого в загальному випадку має вигляд

$$f(z) = \begin{cases} \lambda^\alpha z^{\alpha-1} e^{-\lambda z} / \Gamma(\alpha), & z \ge 0; \\ 0, & z < 0, \end{cases} \tag{6}$$

де λ – масштабний параметр, α – параметр форми.

Для визначення усередненого за ансамблем конфігурацій фаз поля концентрації домішкових частинок одержано формулу у вигляді:

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

$$\left. + \int_h^\infty G \left[(\rho_0 - \rho_1) \frac{\partial c_0}{\partial t'} - (d_0 - d_1) \frac{\partial^2 c_0}{\partial z'^2} \right] \frac{\lambda^\alpha}{\Gamma(\lambda)} \left(\gamma(\alpha, \lambda z') - \gamma(\alpha, \lambda(z' - h)) \right) n_1 dz' \right] dt', \tag{7}$$

де $\gamma(\alpha, \lambda z')$ – неповна гама-функція.

Підставивши у (7) відповідні вирази для концентрації домішки в однорідному півпросторі та функції Гріна, знайдено розрахункові формули для усередненого поля концентрації та створене відповідне програмне забезпечення.

Розглянуті наступні випадки розподілу (6): 1) $0 < \alpha < 1$ (рис. 1*а*); 2) $\alpha = 1$ – експоненціальний розподіл (рис. 1*б*); 3) $1 < \alpha < 2$ (рис. 1*в*); 4) $\alpha > 2$ (рис. 1*г*).

Показано, зокрема, що для експоненціального розподілу зі збільшенням масштабного параметра λ у при поверхневій області тіла включення ущільнюються. А далі проміжок між включеннями збільшується, тобто зменшується ймовірність знаходження прошарок. При цьому зі збільшенням λ усереднена концентрація спочатку зростає, а потім ущільнення прошарків в при поверхневій області призводить до зменшення концентрації домішки.

1. Чапля Є.Я., Чернуха О.Ю. Математичне моделювання дифузійних процесів у випадкових і регулярних структурах. – Київ: Наукова думка, 2009. – 302 с.
2. Королюк В.С., Портенко Н.И., Скороход А.В., Турбин А.Ф. Справочник по теории вероятности и математической статистике. – М.: Наука, 1985. – 640 с.