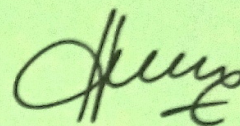


МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ “ЛЬВІВСЬКА ПОЛІТЕХНІКА”

ДАВИДОК
Анастасія Євгенівна



УДК 517.958:532.72

**МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ДИФУЗІЙНИХ ПОТОКІВ У
ДВОФАЗНИХ СТОХАСТИЧНО НЕОДНОРІДНИХ ШАРУВАТИХ
СТРУКТУРАХ**

01.05.02 – математичне моделювання та обчислювальні методи

АВТОРЕФЕРАТ
дисертації на здобуття наукового ступеня
кандидата технічних наук

Львів – 2016

Дисертацією є рукопис

Робота виконана в Інституті прикладних проблем механіки і математики ім. Я. С. Підстригача НАН України, м. Львів

Науковий керівник доктор технічних наук, професор
Чернуха Ольга Юріївна,
Центр математичного моделювання Інституту прикладних проблем механіки і математики ім. Я. С. Підстригача НАН України, м. Львів, завідувач відділом математичного моделювання нерівноважних процесів

Офіційні опоненти:

доктор технічних наук, професор
Гера Богдан Васильович,
Дніпропетровський національний університет залізничного транспорту ім. акад. В. Лазаряна, завідувач кафедри транспортних технологій

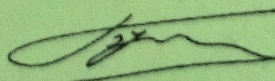
доктор технічних наук, старший науковий співробітник
Журавчак Любов Михайлівна,
Карпатське відділення Інституту геофізики ім. С. І. Субботіна НАН України, старший науковий співробітник відділу геоелектромагнітних методів

Захист відбудеться "10" березня 2016 року о 14⁰⁰ год. на засіданні спеціалізованої вченої ради Д 35.052.05 у Національному університеті "Львівська політехніка" (79013, м. Львів, вул. С. Бандери, 12).

З дисертацією можна ознайомитись у бібліотеці Національного університету "Львівська політехніка" (79013, м. Львів, вул. Професорська, 1).

Автореферат розісланий "3" лютого 2016 р.

Учений секретар спеціалізованої вченої ради,
доктор технічних наук, професор



Р. А. Бунь

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми. Широке використання у промисловості та будівництві композитних матеріалів, функціональні властивості яких істотно залежать від дифузійних процесів, що в них протікають, вимагає вивчення основних закономірностей масоперенесення, зокрема, з метою оцінки надійності, оптимальності і довговічності складних інженерних конструкцій. В існуючих промислових системах очистки питної води та забруднених стоків широко використовують багат шарові фільтри з різною пористістю шарів. Ефективність їх роботи істотно залежить як від пористості, так і геометричних параметрів структур. Оскільки при моделюванні фільтрів, геологічних об'єктів, шаруватих композитів, інженерних конструкцій, як багатозначних шаруватих систем, інформація про геометричні параметри внутрішньої структури може бути відсутньою, то виникає необхідність розгляду таких структур і процесів, що в них протікають, як випадкових.

Також при дослідженні процесів масоперенесення в пористих середовищах, вивченні характеристик дифузійних мембран, діагностиці матеріалів, визначенні структури росту металів чи тверднення сплавів, тощо, важливою характеристикою процесу, крім концентрації мігруючої речовини чи хімічного потенціалу, є дифузійний потік. При моделюванні потоків маси домішкової речовини у багатозначних тілах випадково неоднорідної структури виникають значні труднощі при проведенні процедури усереднення за ансамблем конфігурацій фаз, оскільки невідомими є функції кореляції градієнта стохастичного поля концентрації та випадкового коефіцієнта дифузії. Для вирішення цієї проблеми К.Бергінс, С.Крон, К.Сторсс, Т.Шуленберг, У.Мюллер пропонують для пористих тіл балансові рівняння складати для вже гомогенізованих середовищ, фізичні характеристики яких є усередненими величинами, що враховують відповідні коефіцієнти різних фаз. При цьому нехтується, зокрема, взаємодією між фазами і повинні виконуватись умови застосовності методів гомогенізації. Й.Келлер випадковий потік визначає за законом Дарсі, коефіцієнт фільтрації якого є випадковою функцією просторової координати, для побудови розв'язку використовує методи малих збурень та згладжування, і накладає умову нормального розподілу фаз у середовищі, тому визначає тільки двоточкову функцію коваріації.

Тому розробка нових підходів до математичного моделювання потоків у багатозначних, у тому числі випадково неоднорідних тілах, коли розміри областей окремих фаз є макроскопічними і випадковими, та побудова алгоритмів аналітико-числового дослідження характеристик процесів перенесення в об'єктах природного середовища відносяться до актуальних проблем математичного моделювання.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами. Робота виконана в рамках планів наукових досліджень Центру математичного моделювання Інституту прикладних проблем механіки і математики ім. Я.С.Підстригача НАН України, результати дисертаційної роботи отримані в рамках науково-дослідних тем: «Розробка методів математичного моделювання нелінійних нерівноважних процесів у багатозначних тілах періодичної та стохастичної структури і створення програмного забезпечення» (№ ДР 0111U009748), «Створення і дослідження математичних моделей процесів переносу у регулярних і нерегулярних дисперсних структурах, континуальних моделей наномеханіки і математичних методів обробки експериментальних даних» (№ ДР 0115U003566). У рамках виконання цих науково-дослідних робіт автором розроблено підхід до кількісного опису дифузійних потоків у стохастично неоднорідних шаруватих структурах, доведено теореми існування розв'язку і збіжності ряду Неймана для задач, в яких неоднорідність структури матеріалу врахо-

вана в коефіцієнтах рівняння. Проведено математичне моделювання потоків частинок у двофазних шаруватих структурах за ймовірнісних рівномірного та часткових випадків бета-розподілів фаз, а також стохастичних товщин включень. На цій основі розроблено пакет програм для розрахунку усереднених потоків домішкових частинок, що мігрують у двофазних стохастично неоднорідних шаруватих тілах.

Мета і задачі дослідження. Метою роботи є розроблення моделей і засобів математичного моделювання дифузійних потоків у двофазних стохастично неоднорідних шаруватих структурах за довільного ймовірнісного розподілу фаз та стохастичних товщин підшарів.

Для досягнення мети розв'язано такі задачі:

- розроблено підхід до математичного опису дифузійних потоків у випадково неоднорідних шаруватих тілах, який базується на формулюванні крайових задач безпосередньо для функції потоку – побудові рівняння дифузії з урахуванням неоднорідності структури у його коефіцієнтах, обґрунтуванні крайових умов на потік; отриманні еквівалентного інтегро-диференціального рівняння; побудові розв'язку у вигляді інтегрального ряду Неймана та його усереднення за ансамблем конфігурацій фаз;
- використовуючи розроблений підхід, досліджено закономірності розподілів дифузійних потоків в однорідній смузії та двофазних багатошарових тілах за рівномірного розподілу фаз та часткових випадків бета-розподілу включень, що відповідають структурам, в яких область найбільш ймовірного розташування включень зосереджена біля поверхні шару, де діє джерело маси, в околі іншої границі тіла і посередині смуги;
- сформульовано і доведено теореми існування розв'язку та абсолютної і рівномірної збіжності інтегральних рядів Неймана для крайових задач, сформульованих на дифузійний потік; отримано оцінку парного взаємовпливу шаруватих включень на усереднений дифузійний потік домішкової речовини;
- на основі розвиненого підходу побудовано та досліджено розв'язки крайових задач дифузії на потік маси у двофазній випадково неоднорідній смузії за нульової та ненульової сталої початкових концентрацій для випадків, коли товщина прошарку є випадковою величиною з ймовірнісними рівномірним або трикутним розподілами на деякому проміжку;
- побудовано розрахункові схеми та розроблено програмний комплекс для числового дослідження усереднених потоків маси у стохастично неоднорідних шаруватих тілах;
- визначено вплив похибок вхідних даних, методу та заокруглення на розв'язки крайових задач дифузії домішкової речовини в однорідній та випадково неоднорідній шаруватій смугах за рівномірного розподілу фаз в області тіла.

Об'єкт дослідження – процеси дифузії домішкової речовини в багатофазних тілах стохастично неоднорідної структури.

Предмет дослідження – математичні моделі процесів масоперенесення у випадково неоднорідних тілах за довільних ймовірнісних розподілів шаруватих включень.

Методи дослідження. В основу дослідження покладено уявлення, підходи і методи фізики твердого тіла, термодинаміки нерівноважних процесів, математичної фізики, зокрема, методу інтегральних перетворень, теорії узагальнених функцій, математичного аналізу, теорії ймовірностей та математичної статистики, диференціаль-

них та інтегральних рівнянь, теорії похибок, чисельних методів, у тому числі чисельного інтегрування методом трапецій.

Наукова новизна одержаних результатів полягає в наступному:

- вперше розроблено підхід до математичного опису дифузійних потоків у випадково неоднорідних шаруватих тілах, в рамках якого на основі рівняння балансу маси отримано рівняння дифузії для функції потоку та обґрунтовано крайові умови, побудовано нове інтегро-диференціальне рівняння з випадковим ядром, розв'язок якого отримано у вигляді ряду Неймана;
- вперше сформульовано і доведено теорему про абсолютну і рівномірну збіжність ряду Неймана, у вигляді якого знайдено розв'язки крайових задач, в яких неоднорідність структури матеріалу врахована в коефіцієнтах рівняння, що є випадковими стрибкоподібними функціями просторових координат, а також теорему існування розв'язку інтегро-диференціального рівняння, еквівалентного вихідній крайовій задачі;
- вперше отримано розрахункові формули, проведено числовий аналіз та встановлено закономірності усередненого дифузійного потоку частинок домішкової речовини у двофазній багатошаровій смузі за рівномірного розподілу фаз у тілі та часткових випадків бета-розподілів включень, а також у двофазній смузі з рівномірним розподілом включень випадкової товщини для нульової початкової умови на концентрацію або її ненульового сталого початкового розподілу;
- вперше проведено числовий аналіз ефекту парного взаємовпливу шаруватих включень на усереднений потік маси у шаруватому тілі з рівномірним розподілом фаз та структурі з областю найбільш ймовірного розташування включень в околі джерела маси;
- вперше встановлено залежність усередненого за ансамблем конфігурацій фаз потоку домішкових частинок від збурення вхідних параметрів задачі, здійснено аналіз похибок методу та заокруглення.

Практичне значення одержаних результатів. У роботі розроблено новий 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 ймовірнісних 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, встановлено основні закономірності поведінки усереднених потоків та проаналізовано вплив похибок різного типу на збурення усередненого потоку.

Одержані в роботі результати використані для:

- розрахунків усереднених дифузійних потоків атомів вуглецю та водню при їх міграції в шаруватій структурі $\alpha\text{Fe} - \text{Ni}$ (використано у Фізико-механічному інституті ім. Г.В.Карпенка НАН України);
- оцінки технологічного періоду продуктивного функціонування фільтра (впроваджено на об'єкті «Очисні споруди потужністю $Q_{\text{max}} = 10000,0 \text{ м}^3/\text{добу}$ очистки міських комунально-побутових стічних вод м. Приморськ Запорізької обл.» у підприємстві «Пріма-сервіс» ЛТД, м. Галич, Івано-Франківська обл.).

Частина результатів теоретичного і прикладного характеру використана при розробці спецкурсів «Математичне моделювання процесів дифузії в неоднорідних середовищах», «Математичні моделі фізичних процесів» та «Математичне моделювання дискретно-неперервних систем» для студентів Прикарпатського національно-

го університету імені Василя Стефаника, які навчаються за спеціальністю «Прикладна математика».

Особистий внесок здобувача. Всі теоретичні та прикладні результати, що складають зміст дисертаційної роботи, отримані автором самостійно. У роботах, опублікованих у співавторстві, здобувачеві належать: розвинення підходу до математичного опису дифузійних потоків у випадково неоднорідних шаруватих тілах [1, 8, 13]; обґрунтування крайових умов [16, 33]; побудова ряду Неймана для випадкового потоку маси [17, 18] та доведення теорем існування розв'язку та збіжності рядів Неймана [7, 15]; реалізація розвиненого підходу до опису стохастичних потоків у смузі з прошарком [3, 11, 14]; побудова розв'язку крайової задачі [31], комп'ютерне моделювання [25, 27] та встановлення закономірностей розподілів дифузійних потоків у багатошарових тілах за рівномірного розподілу фаз [5, 21, 26]; застосування розробленого підходу до опису потоків маси у структурах, в яких область найбільш ймовірного розташування включень зосереджена біля поверхні шару, де діє джерело маси [2, 22], в околі іншої границі тіла [12, 20] і посередині смуги [23, 24]; одержання розрахункових формул для усереднених дифузійних потоків за парного взаємовпливу шаруватих включень [28]; проведення процедур усереднення, реалізація числового експерименту та встановлення закономірностей поведінки усереднених потоків у шаруватій смузі з прошарками випадкової товщини з рівномірним [10] і трикутним [32] розподілами на заданому проміжку.

Апробація результатів дисертації. Основні результати дисертації доповідались й обговорювались на міжнародних та вітчизняних конференціях та симпозіумах: 14-17-й міжнародних науково-технічних конференціях “Системний аналіз та інформаційні технології” (м. Київ, 2012-2015); 12-му міжнародному симпозіумі українських інженерів-механіків у Львові (м. Львів, 2015); III-й науково-технічній міжнародній конференції “Комп'ютерное моделювання в наукоємких технологіях” (м. Харків, 2014); III-й та IV-й міжнародних науково-практичних конференціях “Системний аналіз. Інформатика. Управління” (м. Запоріжжя, 2012-2013); II-й та III-й науково-технічних конференціях “Обчислювальні методи і системи перетворення інформації”, присвяч. пам'яті проф. Б.О.Попова (м. Львів, 2012, 2014); міжнародній науковій конференції “Сучасні проблеми механіки і математики” (м. Львів, 2013); IX міжнародній науковій конференції “Математичні проблеми механіки неоднорідних структур” (м. Львів, 2014); 50 Konferencji Pionu Hutniczego (m. Kraków, Poland, 2013); конференціях молодих учених “Підстригачівські читання-2012”, “Підстригачівські читання-2014” та “Підстригачівські читання-2015”, (м. Львів, 2012, 2014-2015); XVIII-й всеукраїнській науковій конференції “Сучасні проблеми прикладної математики та інформатики” (м. Львів, 2012); XI, XII, XIII міжнародних науково-технічних конференціях “Фізичні процеси та поля технічних і біологічних об'єктів” (м. Кременчук, 2012-2014); всеукраїнській та міжнародній наукових конференціях “Сучасні проблеми математичного моделювання та обчислювальних методів” (м. Рівне, 2013, 2015).

У повному обсязі робота доповідалася на наукових семінарах Інституту прикладних проблем механіки і математики ім. Я.С.Підстригача НАН України та його Центру математичного моделювання, Львівського національного університету ім. І.Франка, Прикарпатського національного університету ім. В.Стефаника.

Публікації. За темою дисертації опубліковано 34 наукові праці, у тому числі: 12 статей, з них 2 у наукових виданнях, які входять до наукометричних баз, 10 статей у наукових фахових виданнях з технічних наук, 22 публікації в матеріалах міжнародних та національних конференцій, 7 праць опубліковано без співавторів.

Структура та обсяг роботи. Дисертація складається зі вступу, чотирьох розділів, висновків, списку використаних джерел із 224 найменувань на 19 сторінках, додатків на 20 сторінках. Обсяг роботи становить 198 сторінок, у тому числі основного тексту 148 сторінок.

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У вступі дано загальну характеристику роботи, обґрунтовано актуальність теми та необхідність проведення дослідження, сформульовано мету роботи та задачі дослідження, наукову новизну та практичне значення отриманих результатів.

У першому розділі викладено огляд та проведено аналіз літератури за темою дисертації, визначено місце досліджень, наведених у роботі, у розв'язанні наукового завдання математичного моделювання дифузійних потоків у двофазних шаруватих тілах за довільних ймовірнісних розподілів фаз та стохастичних товщин підшарів.

Із розвитком засобів комп'ютерної техніки та підвищенням рівня обчислювальних потужностей відкриваються широкі можливості для здійснення моделювання складних процесів. Важливе значення при цьому відіграє використання апарату математичного моделювання, в рамках якого на основі побудованої математичної моделі формуються відповідні крайові задачі, що розв'язуються аналітичними, числовими чи аналітико-числовими методами. Зокрема, математичні моделі процесів перенесення, зазвичай, будуються на основі інтегрального або диференціального представлення законів збереження маси, імпульсу, енергії, а також експериментально встановлених залежностей. Математичне та комп'ютерне моделювання на базі різних видів моделей для опису процесів тепло- та масоперенесення широко використовують у своїх працях М.С.Бахвалов, М.М.Беляєв, С.Бонеллі, В.М.Булавацький, Я.Й.Бурак, Б.І.Гайвась, Б.В.Гера, М.З.Згуровський, В.В.Калашніков, Е.М.Карташов, Л.А.Коздоба, П.П.Костробій, В.І.Лаврик, М.П.Ленюк, О.В.Ликов, Б.Я.Любов, В.І.Лялько, В.П.Ляшенко, О.С.Макаренко, В.П.Маслов, Т.І.Марчук, Я.М.Матвійчук, В.М.Ніколаєвський, Н.Д.Панкратова, А.А.Рядно, О.А.Самарський, Г.Т.Сулим, В.В.Скопечський, А.М.Тихонов, Д.В.Федасюк, С.Фретінг, Д.Фоурнієр та інші вчені.

Наявність внутрішніх неоднорідностей середовища, наприклад структурних дефектів, може суттєво впливати на процеси перенесення в тілі. Розвиненню підходів і методів до математичного опису процесів перенесення у багатофазних тілах неоднорідної або кусково-однорідної структури присвячені роботи А.Я.Бомби, Б.Вежби, А.П.Власюка, О.Р.Гачкевича, В.С.Дейнеки, Л.М.Журавчак, Г.С.Кіта, Д.А.Клюшина, Ю.М.Коляна, О.Л.Кузнєцова, Ю.А.Кухаренка, Р.М.Кушніра, В.І.Лаврика, І.І.Ляшка, Р.М.Мартиняка, В.В.Михаськіва, Я.С.Підстригача, В.С.Поповича, Я.Д.П'янила, Я.Г.Савули, В.Ф.Чекуріна та інших науковців.

У випадках, коли невідомою є точна геометрична конфігурація багатофазних тіл, виникає необхідність розгляду параметрів середовища як стохастичних величин, що призводить до випадкового характеру досліджуваних фізичних полів. Тоді, щоб встановити основні особливості досліджуваного явища, як правило, застосовують метод стохастичного усереднення. При цьому отримані статистичні характеристики можуть суттєво різнитись від реалізації структури середовища.

Для опису фізико-механічних процесів у багатофазних стохастично неоднорідних середовищах широко застосовують підхід гомогенізації неоднорідних структур. Цей підхід базується на припущеннях про малість розмірів неоднорідностей, їх макроскопічного числа та рівномірного розподілу в області тіла. За таких обмежень можна вводити середні за елементарними макрооб'ємами параметри та описувати

розглядувані фізичні процеси у середовищі, кожна точка якого містить у собі одночасно всі компоненти, пропорційно до їх об'ємної частки. Методи гомогенізації неоднорідних структур для вивчення фізичних процесів застосовують у своїх дослідженнях А.Галка, Й. ван Дьюїн, Й.Телега, С.Ландім, С.Олла, В.В.Жиков, Й.Левандовська, Д.Ліджба, С.Матисяк, Р.Мешковські та інші вчені.

Вивченню процесів теплопровідності та механічних процесів у двофазних випадково неоднорідних композитних матеріалах, фізико-механічні властивості яких розглядаються як випадкові функції координат, присвячені роботи Л.П.Хорошуна та Н.С.Солтанова. Розвиток статистичних методів в аналізі стохастичних систем знайшов своє відображення у працях В.І.Кляцкіна, С.М.Ритова, В.І.Татарського.

Дослідженням такої характеристики масоперенесення як дифузійний потік займалися вчені Р.Бесант, А.Валі, Я.Ванг, В.Джовангілі, Е.Заторська, Д.Креспо, Б.К'юпер, Д.Лі, Х.Нагашима, К.Сато, К.Сімонсон, В.Шапошник та інші.

У працях Є.Я.Чаплі та О.Ю.Чернухи запропоновано підхід до математичного опису процесів масоперенесення у випадково неоднорідних структурах, розміри неоднорідностей в яких можуть бути співвимірними 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 проведення процедури усереднення за ансамблем конфігурацій фаз. Узагальненню підходу до математичного опису процесів дифузії у випадково неоднорідних шаруватих тілах за врахування довільних розмірів включень окремих фаз та обґрунтуванню підходу до математичного опису дисперсії та функції кореляції поля концентрації у випадково неоднорідних шаруватих структурах присвячені роботи Ю.І.Білушчака. У той же час дослідження такої характеристики процесу як дифузійний потік у випадково неоднорідних тілах зі стохастичною товщиною підшарів та розмірами включень співвимірними з розмірами тіла, а також оцінка ефекту парного взаємовпливу шаруватих включень у літературі відсутні.

У другому розділі розроблено підхід до математичного опису випадкових дифузійних потоків у двофазних стохастично неоднорідних багатошарових тілах, за яким крайові задачі дифузії формулюємо безпосередньо для функції потоку маси, при цьому з метою уникнення протиріч (для запобігання ситуації, яка відповідає надходженню в обмежене тіло необмеженої кількості домішки, тощо), на одній з поверхонь шару задаємо граничні умови на потік, а на іншій – на концентрацію мігруючої речовини і методи побудови розв'язку адаптуємо для сформульованих задач.

Рівняння дифузії для функції потоку маси $\vec{J}(\vec{r}, t)$ отримано з рівняння балансу маси, дією на нього оператором Гамільтона з від'ємним знаком $-\vec{\nabla}$, домноженням зліва на коефіцієнт дифузії $D(\vec{r})$ і врахуванням першого закону Фіка

$$\frac{\partial \vec{J}(\vec{r}, t)}{\partial t} = D(\vec{r}) \vec{\nabla} \otimes \vec{\nabla} \cdot \vec{J}(\vec{r}, t), \quad (1)$$

де \vec{r} – радіус-вектор біжучої точки, t – час.

Значення дифузійного потоку через нижню границю шару знайдено з крайової задачі дифузії на концентрацію частинок за мішаних граничних умов. Використовуючи перший закон Фіка, записаний для хімічного потенціалу, та лінеаризоване співвідношення між хімічним потенціалом і концентрацією, встановлено початкову умову на функцію концентрації, еквівалентну початковій умові I роду на потік.

Розглянуто дифузію домішкової речовини у двофазній багатошаровій смугі товщини z_0 (рис. 1), яка містить n_0 підшарів матриці та n_1 підшарів включень.

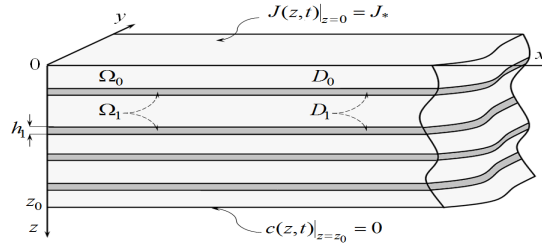


Рис. 1. Можлива реалізація двофазної багатошарової смуги

Координати розташування підшарів є невідомими, а коефіцієнти дифузії домішкової речовини є сталими у межах кожної з фаз (області Ω_0 і Ω_1). Прийнято рівномірний розподіл включень в області тіла, а також, що об'ємна частка матриці v_0 набагато перевищує об'ємну частку включення: $v_0 \gg v_1$.

Рівняння дифузії (1) для функції потоку $J(z,t)$ в одновимірному за просторовою координатою випадку зводиться до вигляду

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

де $D(z) = \begin{cases} D_0, & z \in \Omega_0; \\ D_1, & z \in \Omega_1, \end{cases}$ – коефіцієнт дифузії, Ω_j – область фази j ($j = 0;1$).

Прийнято наступні початкові і граничні умови

$$J(z,t)|_{t=0} = 0; \quad (3)$$

$$J(z,t)|_{z=0} = J_* \equiv const, \quad c(z,t)|_{z=z_0} = 0, \quad (4)$$

при цьому дифузійний потік на межі $z = z_0$ є деякою функцією часу $F(t)$, яка визначається додатково.

Використовуючи випадкову функцію просторової координати («функцію структури»), що задовольняє умову суцільності тіла:

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

коефіцієнт дифузії $D(z)$ можна подати у вигляді

$$D(z) = \sum_{i=1}^{n_0} D_0 \eta_{i0}(z) + \sum_{i=1}^{n_1} D_1 \eta_{i1}(z). \quad (5)$$

Тут Ω_{ij} – i -та однозв'язна область j -ої фази, $\Omega_j = \bigcup_{i=1}^{n_j} \Omega_{ij}$.

Підставляємо (5) у рівняння (2), тоді з урахуванням умови суцільності тіла, отримуємо

$$L_0(z,t)J(z,t) = L_s(z,t)J(z,t), \quad (6)$$

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

Розглядаючи неоднорідність середовища як внутрішні джерела, крайовій задачі (6), (3), (4) ставимо у відповідність еквівалентне інтегро-диференціальне рівняння

$$J(z,t) = J_0(z,t) + \int_0^t \int_0^{z_0} G(z,z',t,t') L_s(z') J(z',t') dz' dt', \quad (7)$$

де $J_0(z, t)$ – розв’язок однорідної крайової задачі, $G(z, z', t, t')$ – детермінована функція Гріна задачі (6), (3), (4).

У випадку нульової початкової концентрації домішки в тілі $c(z, t)|_{t=0} = 0$ маємо

$$J_0(z, t) = J_* \left(1 - \frac{2}{z_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\xi_n} e^{-D_0 \xi_n^2 t} \sin(\xi_n z) \right), \quad (8)$$

за умови $c(z, t)|_{t=0} = c_* \equiv \text{const}$ розв’язок однорідної крайової задачі є наступним

$$J_0(z, t) = J_* - \frac{2}{z_0} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-D_0 \xi_n^2 t} \left(\frac{J_*}{\xi_n} + (-1)^n c_* D_0 \right) \sin(\xi_n z), \quad (9)$$

функція Гріна має вигляд

$$G(z, z', t, t') = \frac{\theta(t-t')}{z_0} \sum_{k=1}^{\infty} e^{-D_0 y_k^2 (t-t')} [\cos(y_k(z-z')) - \cos(y_k(z+z'))]. \quad (10)$$

Тут $\xi_n = \pi(2n-1)/2z_0$, $y_k = k\pi/z_0$. Зі співвідношень (8), (9) одержуємо крайові умови для функції потоку на границі $z = z_0$: за нульової початкової концентрації

$$J_0(z, t)|_{z=z_0} \equiv F(t) = J_* \left(1 - \frac{2}{z_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{\xi_n} e^{-D_0 \xi_n^2 t} \right);$$

$$J_0(z, t)|_{z=z_0} \equiv F(t) = J_* - \frac{2}{z_0} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n+1} e^{-D_0 \xi_n^2 t} \left(\frac{J_*}{\xi_n} + (-1)^n c_* D_0 \right).$$

Розв’язок інтегро-диференціального рівняння (7) шукаємо методом послідовних наближень у вигляді ряду Неймана. За нульове наближення приймаємо розв’язок однорідної крайової задачі. Тоді отримуємо такі рекурентні співвідношення:

$$J^{(0)}(z, t) = J_0(z, t);$$

$$J^{(1)}(z, t) = J_0(z, t) + \int_0^t \int_0^{z_0} G(z, z', t, t') L_s(z') J^{(0)}(z', t') dz' dt';$$

...

$$J^{(n)}(z, t) = J_0(z, t) + \int_0^t \int_0^{z_0} G(z, z', t, t') L_s(z') J^{(n-1)}(z', t') dz' dt';$$

....

Загальний член побудованої послідовності функцій $J^{(0)}, J^{(1)}, \dots, J^{(n)}, \dots$ можна подати так $J^{(n)}(z, t) = J^{(n-1)}(z, t) + R_n(z, t)$, де $R_n(z, t)$ – різниця між n -м та $(n-1)$ -м членами послідовності.

Одержаній послідовності функцій ставимо у відповідність ряд:

$$J(z, t) \equiv J_0(z, t) + \sum_{n=1}^{\infty} R_n(z, t), \quad (11)$$

який є інтегральним рядом Неймана.

Твердження. Якщо коефіцієнти дифузії D_0, D_1 є обмеженими і $D_0 \neq 0$, то для функції Гріна $G(z, z', t, t')$ та дифузійного потоку в однорідному тілі $J_0(z, t)$ справджуються наступні умови

$$1) |G(z, z', t, t')| \leq K_1 < \infty, \quad \forall z, z' \in [0, z_0], \quad \forall t' \in [0, t], \quad \forall t \in [0, \bar{t}] \quad (\bar{t} < \infty);$$

$$2) |L_s(z)G(z, z', t, t')| \leq K_2 < \infty, \quad \forall z, z' \in [0, z_0], \quad \forall t' \in [0, t], \quad \forall t \in [0, \bar{t}];$$

$$3) |L_s(z)J_0(z, t)| \leq K_3 < \infty, \quad \forall z \in [0, z_0], \quad \forall t \in [0, \bar{t}].$$

Теорема 2.1. Якщо коефіцієнти дифузії в матриці і включеннях є обмеженими і коефіцієнт дифузії домішкової речовини у матриці є відмінним від нуля, то ряд Неймана (11) для задачі на потік є абсолютно і рівномірно збіжним.

Теорема 2.2. Ряд Неймана (11) для потоку є розв'язком інтегро-диференціального рівняння (7), а отже крайової задачі дифузії на потік (2)-(4).

Обмежившись двома першими членами ряду (11) проводимо усереднення випадкового дифузійного потоку за ансамблем конфігурацій фаз з рівномірною функцією розподілу. В результаті одержано формулу для усередненого потоку

$$\langle J(z, t) \rangle_{conf} = J_0(z, t) + (D_1 - D_0) \int_0^t \left[\frac{v_1}{h_1} \int_0^{h_1} z' G(z, z', t, t') \frac{\partial^2 J_0(z', t')}{\partial z'^2} dz' + v_1 \int_{h_1}^{z_0} G(z, z', t, t') \frac{\partial^2 J_0(z', t')}{\partial z'^2} dz' \right] dt', \quad (12)$$

де h_1 – характерна товщина включень.

Підставивши у (12) вирази для потоку в однорідному тілі (8) або (9) та функції Гріна (10), одержано відповідні розрахункові формули для усередненого потоку маси у двофазній багатошаровій смузі з рівномірним розподілом фаз.

Для розрахунку усереднених потоків домішки у шаруватих структурах розроблено програмний комплекс “FlowRan” у середовищі Delphi XE2 Starter Edition, модулі якого створено за допомогою GFortran, він функціонує на довільній стандартній конфігурації персонального комп'ютера з операційною системою Windows-98/2000/XP/... (використані програмні засоби є безкоштовними для академічного використання). Пакет програм “FlowRan” призначений для кількісного та якісного аналізу дифузійних потоків мігруючої речовини у випадково неоднорідних шаруватих тілах за різних значень параметрів внутрішньої структури та фізичних характеристик середовища. Проаналізовано дифузію водню у шаруватому композитному матеріалі залізо-мідь. Числові розрахунки проведено в безрозмірних змінних $\tau = D_0 t / z_0$, $\zeta = z / z_0$. На рис. 2. наведено розподіли усереднених потоків водню в різні моменти безрозмірного часу $\tau = 0.01; 0.03; 0.1; 0.5; 1$ (криві 1-5) для нульової (рис. 2,а) та ненульової сталої (рис. 2,б) початкових концентрацій H у композиті $Fe - Cu$. Прийнято такі значення параметрів: $v_{Cu} = 0.2$, $h_{Cu} = 0.01$, $c^*/J_* = 0.1$, суцільні лінії (криві b) описують функцію $\langle J_H(\zeta, \tau) \rangle / J_*$, криві а – функцію $J_{0H}(\zeta, \tau) / J_*$. Тут і надалі штриховими лініями позначено потоки в однорідному шарі з характеристиками матриці.

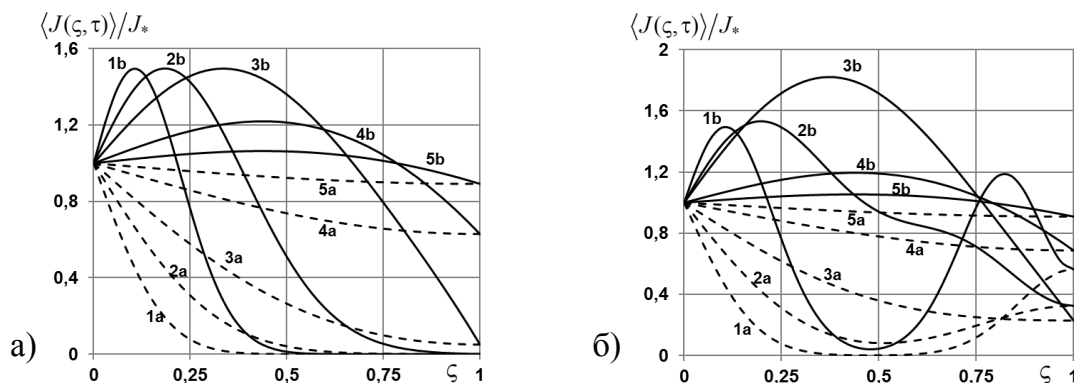


Рис. 2. Розподіли потоків водню у композиті $Fe - Cu$ у різні моменти безрозмірного часу

Зазначимо, що наявність в залізному шарі випадково розташованих прошарків міді призводить до зростання усереднених потоків водню.

Третій розділ присвячено математичному опису випадкових потоків маси у шаруватій смузі за різних випадків бета-розподілу включень на основі підходу, розвиненому в попередньому розділі. Розв'язок крайової задачі дифузії побудовано у вигляді ряду Неймана. Усереднення потоків проведено за ансамблем конфігурації фаз для трьох випадків бета-розподілу включень. Отримано розрахункові формули за нульової та ненульової сталої початкових концентрацій. Проведено порівняльний аналіз усереднених потоків для різних модельних варіантів шаруватих структур.

Функція густини бета-розподілу в загальному випадку має вигляд

$$f(z) = \begin{cases} \frac{\Gamma(\alpha + \beta)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)} \left(\frac{z}{z_0}\right)^{\alpha-1} \left(1 - \frac{z}{z_0}\right)^{\beta-1}, & z \in [0; z_0]; \\ 0, & z \notin [0; z_0], \end{cases} \quad (13)$$

де $\Gamma(x) = \int_0^{\infty} t^{x-1} e^{-t} dt$ – гама-функція, α, β – ступені вільності розподілу.

Розглянуто частковий випадок бета-розподілу (13) – розподіл $f_1(z)$, для якого $\alpha > 1, \beta = 1$. Густину функції розподілу $f_1(z)$ зі ступенем вільності $\alpha = 1.1; 1.5; 2; 2.5$ (криві 1-4) наведено на рис. 3. Цей розподіл відповідає структурам шаруватого тіла з ймовірним розташуванням включень біля нижньої поверхні тіла (рис. 4).

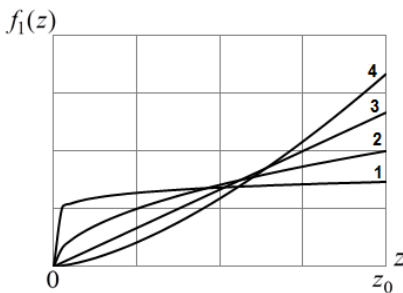


Рис. 3. Густина розподілу $f_1(z)$

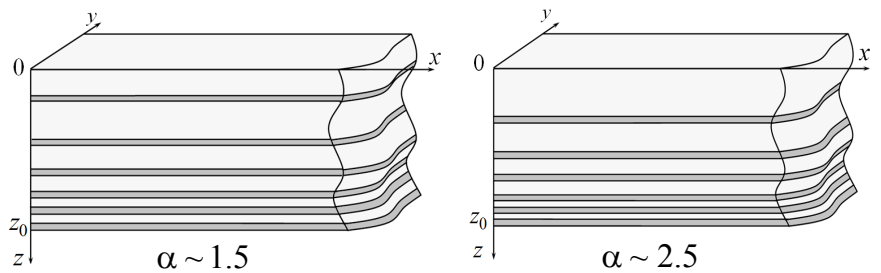


Рис. 4. Структури багат шарової смуги з $f_1(z)$ розподілом включень

На рис. 5 показано розподіли функції потоку залежно від ступеня вільності $\alpha = 1.5; 2.5; 3.5$ (криві 1-3, рис. 5,а) та відношення $c_*/J_* = 0.01; 0.1; 0.2; 0.3; 0.4$ (криві 1-5, рис. 5,б) за ненульової сталої початкової концентрації домішки для $\tau = 0.1, h_1 = 0.01; v_1 = 0.2$. Криві а побудовані для $D_1/D_0 = 0.01$, криві б – $D_1/D_0 = 10$.

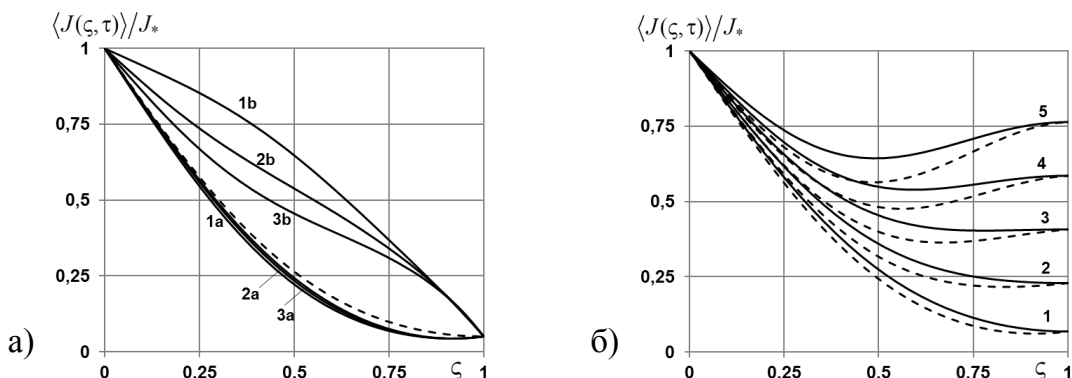


Рис. 5. Розподіли усереднених потоків для різних значень ступеня вільності α (а) та відношення c_*/J_* (б)

Якщо коефіцієнт дифузії домішкової речовини у включенні більший за коефіцієнт дифузії у матриці, то збільшення параметра α (ущільнення включень до ниж-

ньої поверхні) призводить до зменшення функції потоку та зміни її поведінки (криві b, рис. 5,а). Збільшення початкової концентрації c_* зумовлює збільшення потоку біля поверхні шару $\zeta = 1$, що може призвести до появи локального мінімуму в середині шару (криві 4 і 5, рис. 5,б).

Досліджено дифузію домішок у випадкових шаруватих структурах з областю найбільш ймовірного знаходження включень біля верхньої поверхні. Густина такого ймовірного розподілу $f_2(z)$ отримано з формули (13) при $\alpha = 1$, $\beta > 1$ (рис. 6). Рис. 7 ілюструє відповідні структури багат шарової смуги.

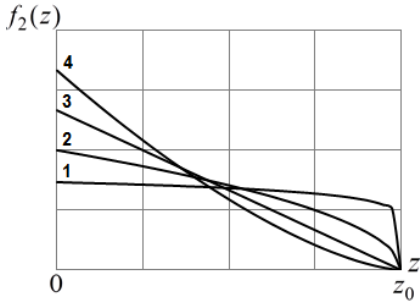


Рис. 6. Густина розподілу $f_2(z)$ для $\beta = 1.1; 1.5; 2; 2.5$ (криві 1-4)

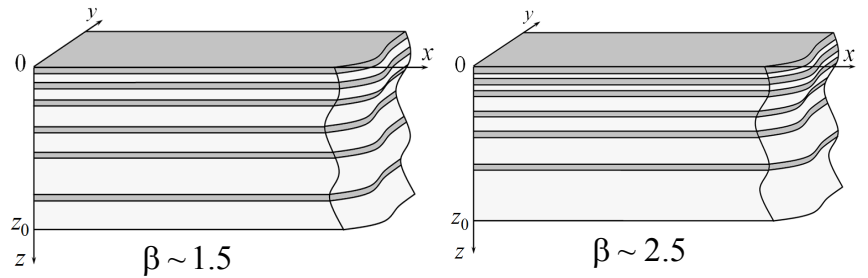


Рис. 7. Структури багат шарової смуги з $f_2(z)$ розподілом включень

На рис. 8 показано вплив об'ємної частки включень на значення усередненого потоку маси у структурах типу поданих на рис. 7, криві 1-3 відповідають значенням $v_1 = 0.05; 0.1; 0.2$ при $\tau = 0.1$; $h_1 = 0.01$; $\beta = 2.5$; $c_*/J_* = 0.1$. Криві a наведені для $D_1/D_0 = 0.01$, криві b – $D_1/D_0 = 10$.

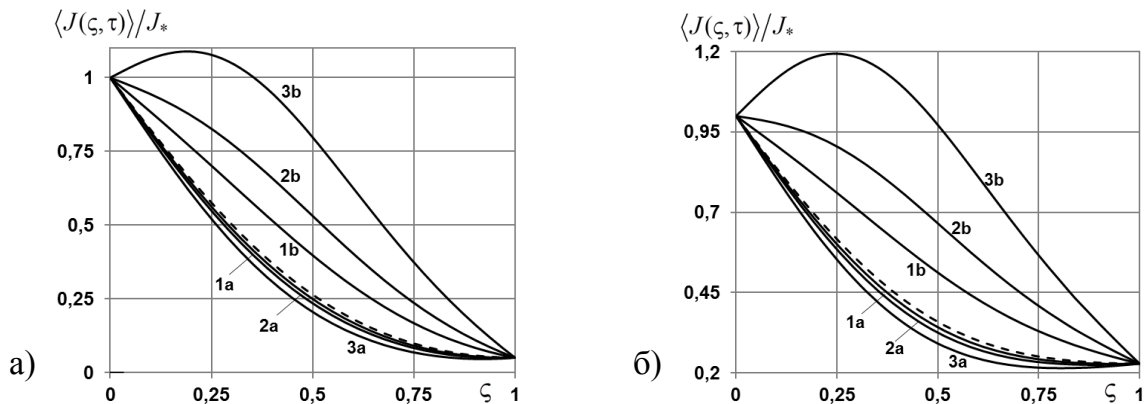


Рис. 8. Розподіли потоків маси у смугі для різних значень об'ємної частки включень v_1 за нульової (а) та ненульової (б) початкових концентрацій

Для значень коефіцієнтів дифузії у матриці більших, ніж у включенні, збільшення об'ємної частки включень викликає зменшення значення потоку маси, в протилежному випадку – зростання потоку як для нульової, так і ненульової початкових концентрацій (рис. 8). Крім того, для великих значень v_1 усереднений потік в середині шару може стати більшим за його значення на верхній межі шару (криві 3b, рис. 8). Тоді як зміна товщини прошарків h_1 практично не впливає на значення усередненого дифузійного потоку.

Досліджено також потоки мігруючих частинок для випадку $\alpha = \beta > 1$ у формулі (13) – розподілу $f_3(z)$ (рис. 9), що описує випадкову шарувату структуру з областю ймовірного розташування включень посередині тіла (рис. 10).

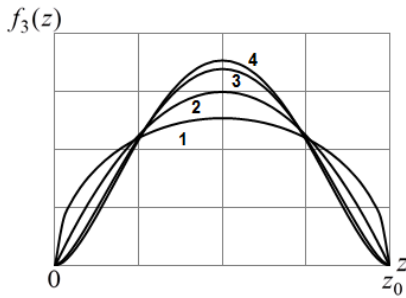


Рис. 9. Густина розподілу $f_3(z)$ для $\alpha = \beta = 1.5; 2; 2.5; 2.7$ (криві 1-4)

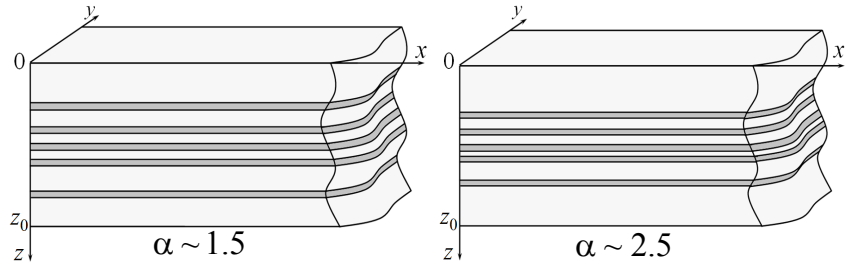


Рис. 10. Структури багат шарової смуги з $f_3(z)$ розподілом включень

На рис. 11 показано розподіли усереднених потоків залежно від ступеня вільності функції $f_3(z)$ $\alpha = 1,5; 2,5; 3,5$ (криві 1-3). Тут прийнято $\tau = 0.1$; $\nu_1 = 0.2$; $h_1 = 0.01$; $c_*/J_* = 0.1$, криві а наведено для $D_1/D_0 = 0.01$, криві б – $D_1/D_0 = 10$.

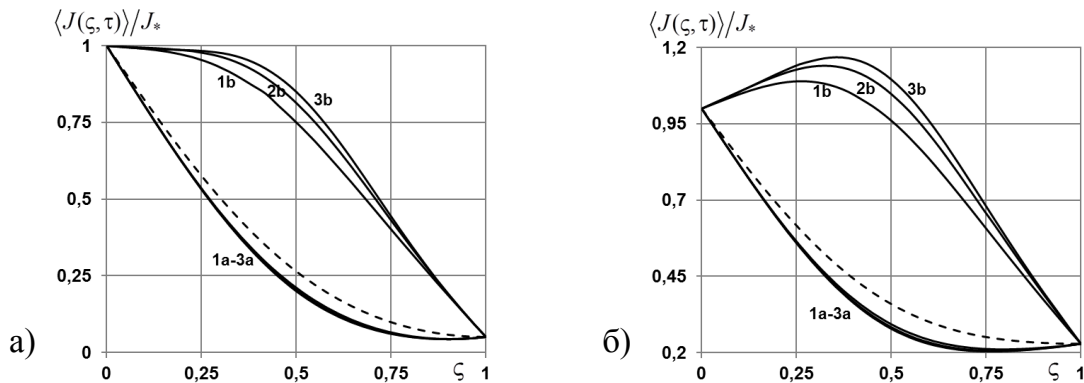


Рис. 11. Розподіли потоків маси у смугі для різних значень ступеня вільності α за нульової (а) та ненульової (б) початкових концентрацій

Ущільнення включень до середини тіла (збільшення α) для коефіцієнтів дифузії у включенні менших, ніж у матриці, практично не впливає на значення та поведінку потоку маси (криві а, рис. 11). Якщо ж коефіцієнт дифузії у включенні більший від коефіцієнта дифузії у матриці, то ущільнення включень призводить до зростання усередненого потоку як для нульової, так і для ненульової сталої початкових концентрацій (криві б, рис. 11), найбільше в середині тіла.

Здійснено порівняння усереднених потоків маси для різних модельних варіантів розташування включень. Встановлено, що у випадку, коли коефіцієнт дифузії домішки у включеннях приймає більші значення, ніж коефіцієнт дифузії у матриці, відмінність між потоками маси у різних структурах є суттєвою і, наприклад, може сягати до 70% у смугі з включеннями зосередженими біля верхньої поверхні та смугі з найімовірнішим розташуванням прошарків біля нижньої межі.

Визначено вплив третього доданка ряду Неймана, що описує ефект парного взаємовпливу шаруватих включень, на усереднений потік маси. Знайдено розрахункові формули для усередненого за ансамблем конфігурацій фаз дифузійного потоку у двофазній смугі з рівномірним розподілом фаз за нульової початкової концентрації та смугі з прошарками, зосередженими біля верхньої границі тіла, де діє джерело маси, за ненульової сталої початкової концентрації домішкових частинок.

Найбільший ефект від парного взаємовпливу прошарків для структур з рівномірним розподілом фаз спостерігається у випадку малих значень часів та великих значень характерної товщини прошарків, а для структур з ймовірним розташуванням включень біля верхньої поверхні тіла – у випадку великих значень об'ємної частки включення та їх значного ущільнення у приповерхневій області. Проте навіть для найбільших значень абсолютна величина третього доданка ряду Неймана є на

декілька порядків меншою від абсолютних значень першого і другого доданків. Тобто для даного класу задач ефектом парного взаємовпливу шарів на усереднений дифузійний потік можна нехтувати.

У четвертому розділі сформовано та досліджено математичну модель дифузії домішкових частинок у три- та багат шаровій смузі зі стохастично розташованими прошарками випадкової товщини з рівномірним або трикутним розподілами на заданому проміжку. Проаналізовано вплив різних типів похибок на розв'язки крайових задач дифузії сформульованих для функції потоку.

Досліджено міграцію домішкових частинок у стохастично неоднорідній смузі з прошарками, товщину h яких прийнято випадковою величиною із заданою функцією розподілу на проміжку $[h_{\min}; h_{\max}]$, де $0 < h_{\min} < h_{\max} < z_0$. Розглянуто випадок рівномірного розподілу товщини та випадок трикутного розподілу h

$$f(h) = \begin{cases} \frac{2}{\Delta h} - \frac{2}{\Delta h^2} |h_{\min} + h_{\max} - 2h|, & h \in [h_{\min}; h_{\max}]; \\ 0, & h \notin [h_{\min}; h_{\max}], \end{cases} \quad (14)$$

де $\Delta h = h_{\max} - h_{\min}$.

На рис. 12 наведено залежність функції (14) від інтервалу ймовірних значень товщини прошарку $[0.01; 0.2]$, $[0.1; 0.2]$, $[0.1; 0.29]$, $[0.1; 0.35]$, $[0.1; 0.45]$ (криві 1-5).

На рис. 13 проілюстровано розподіли усередненого дифузійного потоку за ненульової сталої початкової концентрації для різних значень Δh за фіксованого значення h_{\min} при $\tau=0.1$; $n_1=10$; $c_*/J_*=0.1$; $D_1/D_0=0.01$ для кривих а та $D_1/D_0=5$ для кривих б. Криві 1 побудовано для проміжку $[0.01; 0.015]$, криві 2 – для $[0.01; 0.02]$, криві 3 – для $[0.01; 0.025]$.

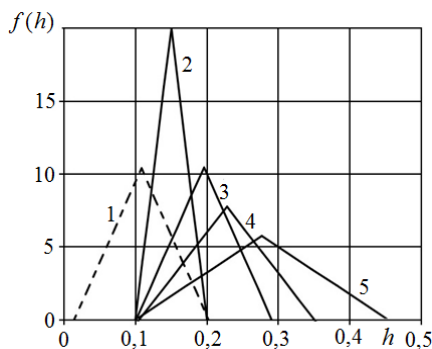


Рис. 12. Функція густини трикутного розподілу для різних значень h_{\max}

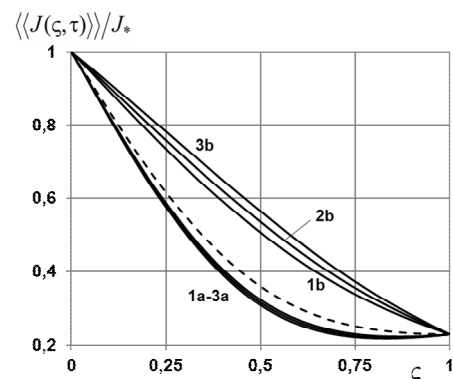


Рис. 13. Усереднені потоки маси для різних значень Δh та фіксованого значення h_{\min}

Зміна довжини інтервалу ймовірних значень товщини прошарків $[h_{\min}; h_{\max}]$ при фіксованому значенні одного з його кінців однаково впливає на значення функції $\langle\langle J(\zeta, \tau) \rangle\rangle / J_*$. Так у випадку коефіцієнтів дифузії у включенні більших, ніж у матриці, збільшення Δh за сталого h_{\min} призводить до зростання потоку (рис. 13). Збільшення кількості включень для $D_1 < D_0$ призводить до зменшення усередненого дифузійного потоку. Встановлено, чим більшою є кількість включень у тілі, тим меншою є різниця між значеннями усереднених потоків для рівномірного і трикутного розподілів товщини h .

Проаналізовано результати числових експериментів, одержаних у випадку, коли процедура усереднення за випадковою товщиною проводилась після побудови розв'язку крайової задачі і усереднення за ансамблем конфігурацій фаз, із даними отриманими, коли усереднення за випадковою товщиною проведено на першому

етапі побудови розв'язку у вигляді ряду Неймана. Показано, що одночасно для малих часів протікання процесу дифузії, великих значень об'ємної частки включень і значень коефіцієнтів дифузії домішки у матриці менших, ніж у включеннях, етап, на якому проводиться усереднення за випадковою товщиною включень, є суттєвим. Для інших значень параметрів задачі для знаходження усереднених потоків можна використовувати простішу математичну модель з відомою товщиною включень, попередньо усереднивши цей параметр із заданою функцією розподілу.

Досліджено вплив похибок вхідних даних на розв'язок крайової задачі для функції потоку маси у випадково неоднорідному багат шаровому тілі, усередненого за ансамблем конфігурацій фаз з рівномірним розподілом. Встановлено, що наявність відхилень у вимірах початкової концентрації і характерної товщини включень найбільше впливають на збурення потоку, а збурення приведенного коефіцієнта дифузії впливають на потік найменше. Проаналізовано збурення потоку залежно від точності обчислення рядів при збуренні одного з вхідних параметрів. Якщо точність підсумовування тригонометричних рядів у формулах збільшувати від 10^{-9} , то поведінка збурення усередненого потоку не змінюється. Крім того, при збільшенні точності обчислень до 10^{-15} накопичення обчислювальної похибки не спостерігалось.

ОСНОВНІ РЕЗУЛЬТАТИ РОБОТИ ТА ВИСНОВКИ

Дисертаційна робота є завершеним науковим дослідженням, у якому розв'язано наукове завдання математичного моделювання дифузійних потоків у двофазних випадково неоднорідних шаруватих структурах за довільного ймовірнісного розподілу фаз та стохастичних товщин підшарів. При цьому отримано такі основні результати та висновки:

1. Для математичного опису випадкових потоків домішкової речовини в тілах стохастичної структури розроблено новий підхід, відповідно до якого постановки крайових задач дифузії формулюються безпосередньо для функції потоку. На основі співвідношення балансу маси отримано нове диференціальне рівняння для функції дифузійного потоку домішкових частинок. Обґрунтовано граничні умови та встановлено початкову умову на функцію концентрації, еквівалентну початковій умові І-го роду на функцію дифузійного потоку. Одержаній крайовій задачі поставлено у відповідність еквівалентне інтегро-диференціальне рівняння з випадковим ядром, розв'язок якого побудований методом послідовних ітерацій у вигляді ряду Неймана.

2. Сформульовано і доведено теореми існування розв'язку інтегро-диференціального рівняння, еквівалентного крайовій задачі дифузії на потік, у двофазних шаруватих тілах, в якій неоднорідність середовища врахована у коефіцієнтах рівняння, та абсолютної і рівномірної збіжності ряду Неймана, у вигляді якого знайдено випадковий потік мігруючої речовини.

3. Отримано розрахункові формули і досліджено залежність усереднених потоків маси у двофазних шаруватих тілах від характеристик матеріалу і параметрів структури. Встановлено закономірності процесу дифузії домішкових частинок у шарі з випадково розташованим прошарком та багат шаровій смузі з рівномірним розподілом фаз, а також, коли область найімовірнішого розташування включень знаходиться біля поверхні шару, де діє джерело маси, в околі іншої межі тіла і посередині смуги за нульової та ненульової сталої початкових концентрацій домішкової речовини в тілі. Зокрема, показано, що у випадку, коли коефіцієнт дифузії частинок у включеннях приймає більші значення, ніж коефіцієнт дифузії у матриці, відмінність між потоками маси у різних структурах є суттєвою і може сягати до 70% у смузі з включеннями зосередженими біля верхньої поверхні та смузі з найімовірнішим розташуванням прошарків біля нижньої межі.

4. Встановлено оцінку третього доданка ряду Неймана, що описує парний взаємовплив підшарів тіла на усереднений дифузійний потік у двофазній шаруватій смузі з рівномірним розподілом фаз за нульової початкової концентрації та в структурі із областю найбільш ймовірного розташування включень в околі верхньої поверхні за ненульової сталої початкової концентрації. Проаналізовано вплив вхідних параметрів задач на величину третього доданка ряду Неймана. Показано, що найбільший ефект від парного взаємовпливу прошарків спостерігається у випадку малих часів протікання процесу, великих значень об'ємної частки включень та при ущільненні включень до верхньої поверхні тіла. Проте для такого класу задач значення третього доданка ряду Неймана в межах заданої точності є нехтовно малим.

5. Одержано розрахункові формули для усередненого потоку маси за нульової та ненульової сталої початкових концентрацій у тілі з рівномірним розподілом фаз для випадків, коли товщина прошарків є випадковою величиною з рівномірним або трикутним розподілом на заданому проміжку. Встановлено, що у випадку багат шарового тіла тип розподілу товщини включень практично не впливає на значення усередненого потоку маси (відмінності між значеннями до 1%), у той же час зі зменшенням кількості прошарків більш значимим стає характер розподілу товщини (різниця між значеннями від 3%). Проведено порівняльний аналіз потоків маси, усереднених за випадковою товщиною при формуванні математичної моделі і на останньому етапі дослідження. Показано, що одночасно для малих часів протікання процесу дифузії, великих значень об'ємної частки включень і значень коефіцієнтів дифузії домішки у матриці менших, ніж у включеннях, етап, на якому проводиться усереднення за стохастичною товщиною включень, є суттєвим.

6. Визначено вплив похибок вхідних даних, методу та заокруглення на усереднений дифузійний потік. Проведено ряд числових експериментів та показано, що наявність відхилень у вимірах початкової концентрації і характерної товщини включень найбільше впливають на збурення потоку, а збурення приведенного коефіцієнта дифузії впливають на потік маси найменше.

7. Побудовано розрахункові схеми та створено програмні модулі для розрахунку дифузійних потоків домішкової речовини в однорідній смузі та неоднорідних шаруватих тілах випадкової структури залежно від початкового розподілу частинок в області тіла, різних значень фізичних і геометричних характеристик структури, розподілу випадкових неоднорідностей у тілі та параметрів ймовірнісних розподілів стохастичних товщин включень. При цьому розглянуто практичні задачі, що моделюють потоки домішкових атомів водню і вуглецю у шаруватих структурах залізо-мідь та α -залізо-нікель.

8. Практичне значення дисертаційної роботи полягає у наступному: побудовано розрахункові формули для усередненого потоку домішкових частинок, що мігрують у випадково неоднорідному шаруватому тілі з довільним розподілом фаз та стохастичною товщиною підшарів, створено програмне забезпечення та проведено розрахунки потоків водню та вуглецю у композитному матеріалі сталь 38ХНЗМФА-Ni (використано: Фізико-механічний інститут ім. Г.В.Карпенка НАН України); проведено оцінку технологічного періоду продуктивного функціонування фільтра (впроваджено на об'єкті «Очисні споруди потужністю $Q_{max} = 10000,0 \text{ м}^3/\text{добу}$ очистки міських комунально-побутових стічних вод м. Приморськ Запорізької обл.» у підприємстві «Пріма-сервіс» ЛТД, м. Галич, Івано-Франківська обл.); частина результатів теоретичного і прикладного характеру використана при розробці спецкурсів «Математичне моделювання процесів дифузії в неоднорідних середовищах», «Математичні моделі фізичних процесів» та «Математичне моделювання дискретно-неперервних систем» для студентів Прикарпатського національного університету імені Василя Стефаника за спеціальністю «Прикладна математика».

СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

1. 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.
2. 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.
3. Чернуха О. Дифузійний потік домішкової речовини у смузі з випадково розташованим прошарком / О. Чернуха, А. Давидок // Фізико-математичне моделювання та інформаційні технології. – 2012. – Вип. 15. – С. 116-126.
4. Давидок А. Моделювання стохастичних дифузійних потоків у двофазній багатошаровій смузі з ймовірним розташуванням включень у середині тіла / А. Давидок // Фізико-математичне моделювання та інформаційні технології. – 2013. – Вип. 17. – С. 55-64.
5. 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.
6. Давидок А. Моделювання випадкових потоків маси у двофазній шаруватій смузі за рівномірного розподілу фаз з урахуванням парного взаємовпливу шарів / А. Давидок // Фізико-математичне моделювання та інформаційні технології. – 2014. – Вип. 19. – С. 43-52.
7. Чернуха О. Ю. Математичне моделювання процесів термодифузії розпадної речовини у стохастично неоднорідній шаруватій смузі / О. Ю. Чернуха, В. Є. Гончарук, А. Є. Давидок // Математичні методи та фізико-механічні поля. – 2014. – Т. 57, № 3. – С. 143-154. (SCOPUS)
8. Давидок А. Є. Комп'ютерне моделювання взаємозв'язаних теплових і дифузійних процесів з урахуванням розпаду речовини у випадково неоднорідній шаруватій смузі / А. Є. Давидок, О. Ю. Чернуха, В. Є. Гончарук // Фізика і хімія твердого тіла. – 2014. – Т. 15, № 4. – С. 708-720. (Index Copernicus, Ulrich's Periodicals Directory, Directory of Research Journal Indexing)
9. Давидок А. Є. Моделювання і дослідження парного взаємовпливу шаруватих включень на потік маси у випадково неоднорідній смузі за бета-розподілу фаз / А. Є. Давидок // Прикладні проблеми механіки і математики. – 2014. – Вип. 12. – С. 146-153.
10. Давидок А. Моделювання випадкового дифузійного потоку маси у двофазній смузі зі стохастично розташованим прошарком випадкової товщини / А. Давидок, О. Чернуха // Фізико-математичне моделювання та інформаційні технології. – 2015. – Вип. 21. – С. 89-99.
11. Davydok A. Mathematical modeling diffusion flow in a strip with a randomly disposed sublayer in the case of nonzero initial concentration / A. Davydok, O. Chernukha // Zeszyty Studenckiego Towarzystwa Naukowego (Kraków). – 2012. – № 25. – P. 81-87.
12. Давидок А. Є. Моделювання потоків маси у двофазній шаруватій смузі з ймовірною приповерхневою неоднорідністю за нульової початкової умови / А. Є. Давидок, О. Ю. Чернуха // Волинський математичний вісник. Серія Прикладна математика. – 2013. – Вип. 10 (19). – С. 38-48.
13. Давидок А. Є. Моделювання потоків домішки у смузі з випадково розташованим прошарком за ненульової початкової концентрації / А. Є. Давидок, О. Ю. Чернуха // Матеріали 14-ї міжнародної науково-технічної конференції SAIT «Системний аналіз та інформаційні технології». – Київ : ННК «ІПСА» НТУУ «КПІ», 2012. – С. 50-51.
14. Чернуха О. Ю. Математичне моделювання потоків домішки у шарі з випадково розташованим прошарком / О. Ю. Чернуха, А. Є. Давидок // Матеріали III Міжнародної науково-практичної конференції «Системний аналіз. Інформатика. Управління (САІУ-2012)». – Запоріжжя : В-во Класичного приватного університету, 2012. – С. 295-296.

15. *Давидок А. Є.* Математичне моделювання потоків домішки у двофазній багат шаровій смузі з рівномірним розподілом фаз / *А. Є. Давидок, О. Ю. Чернуха* // Збірник праць II науково-технічної конференції «Обчислювальні методи і системи перетворення інформації». – Львів : ФМІ НАН України, 2012. – С. 66-69.
16. *Гончарук В. Є.* Математичне моделювання дифузійних потоків у випадково неоднорідних тілах за крайових умов першого роду / *В. Є. Гончарук, Є. Я. Чапля, А. Є. Давидок, О. Ю. Чернуха* // Матеріали XI Міжнародної науково-технічної конференції «Фізичні процеси та поля технічних і біологічних об'єктів». – Кременчук : В-во КрНУ ім. Михайла Остроградського, 2012. – С. 26-28.
17. *Чернуха О. Ю.* Моделювання дифузійних потоків у випадково-неоднорідній тришаровій смузі [Електронний ресурс] / *О. Ю. Чернуха, А. Є. Давидок* // Конференція молодих учених «Підстригачівські читання – 2012». – Режим доступу: <http://iapmm.lviv.ua/chyt2012/materials/52.pdf>.
18. *Чернуха О. Ю.* Моделювання випадкових дифузійних потоків у двофазній багат шаровій смузі / *О. Ю. Чернуха, А. Є. Давидок* // Матеріали XVIII Всеукраїнської наукової конференції «Сучасні проблеми прикладної математики та інформатики». – Львів : ЛНУ ім. І. Франка, 2012. – С. 155-156.
19. *Davydok A.* Modeling stochastic mass flows in a two-phase layered strip at uniform distribution of inclusions / *A. Davydok* // *Materialy 50 Konferencji Pionu Hutniczego*. – Kraków : Wydawnictwo Studenckiego Towarzystwa Naukowego, 2013. – Т. 1. – Р. 236.
20. *Давидок А. Є.* Математичне моделювання випадкових потоків маси у шаруватій смузі з ймовірним приповерхневим розташуванням включень / *А. Є. Давидок, О. Ю. Чернуха* // Матеріали всеукраїнської наукової конференції «Сучасні проблеми математичного моделювання та обчислювальних методів». – Рівне : Національний університет водного господарства та природокористування, Рівненський держ. гум. ун-т, 2013. – С. 62.
21. *Чапля Є. Я.* Математичне моделювання потоків домішкової речовини у двофазній випадково неоднорідній смузі / *Є. Я. Чапля, О. Ю. Чернуха, А. Є. Давидок, В. А. Дмитрук* // Матеріали IV міжнародної науково-практичної конференції «Системний аналіз. Інформатика. Управління (САГУ-2013)». – Запоріжжя : В-во Класичного приватного університету, 2013. – С. 266-268.
22. *Чапля Є. Я.* Моделювання потоків домішки у стохастично неоднорідному тілі з бета-розподілом шаруватих включень / *Є. Я. Чапля, О. Ю. Чернуха, А. Є. Давидок* // Матеріали 15-ї міжнародної науково-технічної конференції SAIT «Системний аналіз та інформаційні технології». – Київ : ННК «ІПСА» НТУУ «КПІ», 2013. – С. 212-213.
23. *Чапля Є.* Математичне моделювання потоків маси у випадково неоднорідному шаруватому тілі з бета-розподілом включень / *Є. Чапля, О. Чернуха, А. Давидок* // Матеріали міжнародної наукової конференції «Сучасні проблеми механіки і математики». – Львів : ППММ ім. Я.С. Підстригача НАНУ, 2013. – Т. 1. – С. 124-126.
24. *Давидок А. Є.* Моделювання випадкових дифузійних потоків у двофазній смузі з ймовірним розташуванням включень в середині тіла / *А. Є. Давидок, О. Ю. Чернуха, В. В. Пабирівський, Є. Я. Чапля* // Матеріали XII міжнародної науково-технічної конференції «Фізичні процеси та поля технічних та біологічних об'єктів». – Кременчук : В-во КрНУ ім. Михайла Остроградського, 2013. – С. 135-137.
25. *Чапля Є. Я.* Комп'ютерне моделювання випадкових дифузійних потоків в шаруватому тілі за ненульової початкової концентрації домішки / *Є. Я. Чапля, О. Ю. Чернуха, А. Є. Давидок* // Матеріали 16-ї Міжнародної науково-технічної конференції SAIT «Системний аналіз та інформаційні технології». – Київ : ННК «ІПСА» НТУУ «КПІ», 2014. – С. 171-172.
26. *Чернуха О. Ю.* Математичне моделювання процесів термодифузії розпадної речовини у двофазній шаруватій смузі за рівномірного розподілу фаз / *О. Ю. Чернуха, В. Є. Гончарук, А. Є. Давидок* // Праці III науково-технічної міжнародної конференції «Комп'ю-

терное моделирование в наукоемких технологиях». – Харків : ХНУ ім. В. Н. Каразіна, 2014. – С. 413-416.

27. *Чернуха О.* Моделювання процесів термодифузії з урахуванням розпаду частинок у випадково неоднорідній шаруватій смузі / *О. Чернуха, В. Гончарук, А. Давидок* // Матеріали ІХ Міжнародної наукової конф. «Математичні проблем механіки неоднорідних структур». – Львів : ІППММ ім. Я.С. Підстригача НАН України, 2014. – С. 102-104.
28. *Давидок А. Є.* Моделювання випадкових дифузійних потоків у двофазній багатошаровій смузі за ненульової початкової концентрації домішки з урахуванням парного взаємовпливу шарів / *А. Є. Давидок, Є. Я. Чапля, О. Ю. Чернуха* // Матеріали ІІІ науково-технічної конференції «Обчислювальні методи і системи перетворення інформації». – Львів : ФМІ НАН України, 2014. – С. 63-66.
29. *Давидок А. Є.* Моделювання випадкових потоків маси у двофазній багатошаровій смузі з урахуванням парного взаємовпливу шарів за бета-розподілу включень / *А. Є. Давидок* // Матеріали ХІІІ Міжнародної науково-технічної конференції «Фізичні процеси та поля технічних та біологічних об'єктів». – Кременчук : В-во КрНУ ім. Михайла Остроградського, 2014. – С. 135-137.
30. *Давидок А. Є.* Дослідження парного взаємовпливу шарів на усереднений дифузійний потік у двофазній шаруватій смузі [Електронний ресурс] / *А. Є. Давидок* // Конференція молодих учених «Підстригачівські читання – 2014». – Режим доступу: <http://194.44.153.36:8080/chyt2014/theses/Davydok.pdf>
31. *Білуцак Ю. І.* Математичне моделювання взаємозв'язних теплових і дифузійних процесів з урахуванням розпаду домішки у двофазній стохастично неоднорідній багатошаровій смузі / *Ю. І. Білуцак, В. Є. Гончарук, А. Є. Давидок, О. Ю. Чернуха* // Матеріали міжнародної наукової конференції «Сучасні проблеми математичного моделювання та обчислювальних методів». – Рівне : РВВ РДГУ, 2015. – С. 30.
32. *Чернуха О.* Моделювання потоків маси у випадково неоднорідній шаруватій смузі за трикутного розподілу товщини включень / *О. Чернуха, В. Гончарук, А. Давидок* // Дванадцятий міжнародний симпозіум українських інженерів-механіків у Львові: Тези доповідей. – Львів : КІНПАТРІ ЛТД, 2015. – С. 46-47.
33. *Chaplya Ye. Ya.* Diffusion equation for mass flux and problem of initial and boundary conditions / *Ye. Ya. Chaplya, O. Yu. Chernukha, A. Ye. Davydok, V. V. Pabyrivskiy* // System Analysis and Information Technologies: 17-th International Conference SAIT 2015. Proceedings. – Kyiv: ESC "IASA" NTUU "KPI", 2015. – P. 25-26.
34. *Давидок А.* Дифузійні потоки у стохастично неоднорідній смузі з прошарком випадкової товщини за рівномірного розподілу [Електронний ресурс] / *А. Давидок* // Конференція молодих учених «Підстригачівські читання – 2015». – Режим доступу: <http://iapmm.lviv.ua/chyt2015/theses/Davydok.pdf>.

АНОТАЦІЇ

Давидок А. Є. Математичне моделювання дифузійних потоків у двофазних стохастично неоднорідних шаруватих структурах. – *На правах рукопису.*

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата технічних наук за спеціальністю 01.05.02 – математичне моделювання та обчислювальні методи. – Національний університет «Львівська політехніка» МОН України, Львів, 2016.

Дисертація присвячена розробці нового підходу до математичного моделювання стохастичних потоків маси у двофазних тілах випадково неоднорідної шаруватої структури за довільних ймовірнісних розподілів фаз та стохастичних товщин включень.

В рамках підходу на основі рівняння балансу маси отримано нове диференціальне рівняння на потік, обґрунтовано крайові умови, розв'язок крайової задачі

знайдено у вигляді ряду Неймана, сформульовано і доведено теореми існування розв'язку крайової задачі, абсолютної та рівномірної збіжності ряду Неймана та проведено усереднення за ансамблем конфігурацій фаз. Досліджено міграцію домішкових частинок у шарі з випадково розташованими включеннями за рівномірного розподілу фаз та частковими випадками бета-розподілу включень для нульової і ненульової сталої початкових умов на функцію концентрації, а також у випадково неоднорідній смузї з прошарками стохастичної товщини. Здійснено оцінку ефекту парного взаємовпливу шаруватих включень та похибки вхідних даних на усереднені потоки маси. Розроблено відповідне програмне забезпечення.

Ключові слова: математичне моделювання, дифузія, стохастичний потік маси, ряд Неймана, випадкова шарувата структура, парний взаємовплив включень, пакет програм.

Давидок А. Е. Математическое моделирование диффузионных потоков в двухфазных стохастически неоднородных слоистых структурах. – *На правах рукописи.*

Диссертация на соискание ученой степени кандидата технических наук по специальности 01.05.02 – математическое моделирование и вычислительные методы. – Национальный университет “Львівська політехніка” МОН України, Львов, 2016.

Диссертация посвящена разработке нового подхода к математическому моделированию стохастических потоков массы в двухфазных телах случайно неоднородной слоистой структуры при произвольных вероятностных распределениях фаз и стохастических толщин включений.

В рамках разработанного подхода на основании уравнения баланса массы получено новое дифференциальное уравнение на функцию диффузионного потока, обоснованы краевые условия первого рода. Построено интегро-дифференциальное уравнение со случайным ядром, эквивалентное исходной краевой задаче, решение которого получено в виде интегрального ряда Неймана. Сформулированы и доказаны теорема существования решения интегро-дифференциального уравнения и теорема об абсолютной и равномерной сходимости ряда Неймана для моделей диффузионных процессов в стохастически неоднородных телах с учетом случайной структуры в коэффициентах краевой задачи. Усреднение стохастического потока примесного вещества проведено по ансамблю конфигураций фаз для случаев, когда в начальный момент времени примесь в теле отсутствует или задано ее постоянное ненулевое начальное распределение. Получены расчетные формулы для усредненного потока массы в слое со случайно расположенной прослойкой и в многослойной полосе с равномерным распределением фаз.

Рассмотрены различные варианты бета-распределения включений, описывающие случайные структуры, в которых область наиболее вероятного расположения включений находится около поверхности, где действует источник массы, в окрестности другой границы и посередине тела. Проведено компьютерное моделирование усредненных потоков для рассмотренных вариантов случайных структур и сделан их сравнительный анализ. Показано, что в случае больших коэффициентов диффузии примеси во включениях существует значительное отличие потоков массы в различных структурах, тогда как для случая больших коэффициентов в матрице расположение включений в области тела практически не влияет на поведение усредненных диффузионных потоков. Установлена зависимость усредненных потоков примесного вещества от эффекта парного взаимовлияния слоистых включе-

ний. Проанализировано влияние параметров задачи на величину третьего слагаемого ряда Неймана. Показано, что наибольший эффект от парного взаимовлияния прослоек наблюдается для малых времен протекания процесса диффузии и при больших значениях характерной толщины включений.

Используя разработанный подход исследованы функции потока массы в двухфазной трех- и многослойной полосах со стохастически расположенными прослойками случайной толщины. Рассмотрены случаи, когда толщина включений является случайной величиной с равномерным или треугольным распределением на заданном интервале. Проанализированы результаты числовых экспериментов для разных этапов проведения процедур усреднения. Показано, что только одновременно для малых временных интервалов протекания процесса диффузии, значительной объемной доли включений и значений коэффициентов диффузии примеси в матрице меньших, чем во включениях, этап решения задачи, на котором продится усреднение по случайной толщине включений является существенным.

На основании полученных расчетных формул разработан пакет программ, который использован для исследования потоков водорода и углерода в слоистых материалах железо-медь и альфа-железо-никель. Проанализировано влияние различных видов погрешностей на решения краевых задач диффузии примесного вещества в однородной и случайно неоднородной слоистой полосах, сформулированных для функции потока массы.

Ключевые слова: математическое моделирование, диффузия, стохастический поток массы, ряд Неймана, случайная слоистая структура, парное взаимовлияние включений, пакет программ.

Davydok A. Y. Mathematical modelling diffusion flows in two-phase stochastically nonhomogeneous stratified structures. – On the rights of a manuscript.

The thesis for a Technical Sciences Candidate's Degree on speciality 01.05.02 – mathematical modelling and computational methods. – Lviv Polytechnic National University of Ministry of Education and Science of Ukraine, Lviv, 2016.

The thesis is devoted to development of new approach to mathematical modelling stochastic mass flows in two-phase bodies of randomly nonhomogeneous stratified structure at arbitrary probable distributions of phases and stochastic thicknesses of inclusions.

Within the scope of the approach new differential equation for the flow was obtained, initial and boundary conditions were argued, the solution of the initial-boundary value problem was found in the terms of Neumann series, the theorems of both solution existence and absolutely and uniformly convergence of Neumann series were formulated and proved; averaging procedure was carried out over the ensemble of phase configurations. Admixture particle migration was studied in a layer with randomly disposed inclusions at uniform distribution of phases as well as partial cases of beta-distribution of inclusions for zero and non-zero constant initial conditions on the function of concentration and in a randomly nonhomogeneous strip with inclusions of stochastic thickness. Estimations of effect of both pair interaction of layered inclusions and an error of input data on the averaged mass flow were made. The corresponding software was designed.

Keywords: mathematical modelling, diffusion, stochastic mass flow, Neumann series, random stratified structure, pair interaction of sublayers, software.

Підписано до друку 29.12.2015 р.
Формат 60×84/16. Папір офсетний.
Друк цифровий. Умовн. друк. арк. 0,9.
Наклад 100 прим. Зам. № 05

ТзОВ «Растр-7»
79005, м. Львів, вул. Кн.Романа, 9/1
тел./факс: (032) 235-52-05
Свідоцтво суб'єкта видавничої справи:
ЛВ №22 від 19.11.2002 р.