

Національна академія наук України
Інститут прикладних проблем механіки і математики
ім. Я. С. Підстригача НАН України

На правах рукопису

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

Дисертація на здобуття наукового ступеня
кандидата технічних наук

*Ідентичність
примірника
принципу
засвіджує*

46020

в. Чернуха

07. серпня 2016

Д 35.052.05

Науковий керівник:

Чернуха Ольга Юріївна,

доктор технічних наук, професор

Львів-2016

З М І С Т

ВСТУП	6
Розділ 1 МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ ПЕРЕНЕСЕННЯ В ТІЛАХ ШАРУВАТОЇ СТРУКТУРИ. ОГЛЯД ЛІТЕРАТУРИ	13
1.1 Типові багатофазні шаруваті структури та галузі їх застосування	13
1.2 Математичний опис дифузійних процесів	18
1.3 Математичне моделювання процесів перенесення у випадково неоднорідних тілах	23
1.4 Висновки до Розділу 1	32
Розділ 2 МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ВИПАДКОВИХ ДИFUZІЙНИХ ПОТОКІВ ДОМІШКИ У ДВОФАЗНОМУ БАГАТОШАРОВОМУ СТОХАСТИЧНО НЕОДНОРІДНОМУ ТІЛІ	34
2.1 Математична модель дифузійних потоків домішкових частинок у шаруватих тілах	34
2.1.1 Рівняння дифузії для функції потоку маси	34
2.1.2 Крайові умови першого роду в задачах на потік маси для шару	36
2.2 Математичне моделювання дифузійних потоків домішки у двофазній смузї з випадково розташованим прошарком	39
2.2.1 Об'єкт дослідження та постановка крайової задачі	39
2.2.2 Еквівалентне інтегро-диференціальне рівняння	41
2.2.3 Ряд Неймана	46
2.2.4 Комп'ютерне моделювання концентрації та потоку маси в однорідному шарі	47
2.2.5 Усереднення стохастичного дифузійного потоку за ансамблем конфігурацій фаз	50
2.2.6 Числовий аналіз усереднених дифузійних потоків	52
2.3 Моделювання дифузійних потоків у двофазній випадково	

неоднорідній багат шаровій смузї з рівномірним розподілом фаз	55
2.3.1 Постановка крайової задачі	55
2.3.2 Еквівалентне інтегро-диференціальне рівняння. Ряд Неймана	57
2.3.3 Усереднення потоку маси за ансамблем конфігурацій фаз	64
2.3.4 Числовий аналіз усереднених дифузійних потоків	66
2.4 Комп'ютерне моделювання потоків домішкової речовини у багат шарових матеріалах залізо – мідь та залізо – нікель	69
2.4.1 Комп'ютерне моделювання усередненого потоку водню в шаруватому матеріалі $Fe - Cu$	69
2.4.2 Комп'ютерне моделювання усередненого потоку вуглецю в шаруватому матеріалі $\alpha Fe - Ni$	71
2.4.3 Комп'ютерне моделювання усередненого потоку водню в шаруватому матеріалі $\alpha Fe - Ni$	73
2.5 Висновки до Розділу 2	74
Розділ 3 МОДЕЛЮВАННЯ ВИПАДКОВИХ ПОТОКІВ МАСИ У ДВОФАЗНОМУ ТІЛІ ЗА БЕТА-РОЗПОДІЛУ ШАРУВАТИХ ВКЛЮЧЕНЬ ТА ЗА ПАРНОГО ВЗАЄМОВПЛИВУ ШАРІВ	76
3.1 Математичне моделювання дифузійних потоків домішки у двофазній багат шаровій смузї з бета-розподілом включень	76
3.1.1 Дифузійний потік у смузї з найімовірнішим розташуванням включень біля нижньої поверхні	76
3.1.2 Комп'ютерне моделювання усереднених дифузійних потоків у смузї з ймовірним розташуванням включень біля нижньої межі	81
3.1.3 Дифузійний потік у смузї з найімовірнішим розташуванням включень біля верхньої поверхні	85
3.1.4 Комп'ютерне моделювання усереднених потоків у смузї з ймовірним розташуванням включень біля верхньої межі	88

3.1.5 Дифузійний потік у смузі з найімовірнішим розташуванням включень посередині тіла	92
3.1.6 Комп'ютерне моделювання усереднених потоків у смузі з ймовірним розташуванням включень посередині тіла	95
3.1.7 Порівняння усереднених потоків для різних модельних варіантів структури	99
3.2 Математичне моделювання дифузійних потоків у двофазній випадково неоднорідній шаруватій смузі з урахуванням парного взаємовпливу шарів	106
3.2.1 Дифузійний потік у двофазній смузі з рівномірним розподілом фаз за нульової початкової концентрації	106
3.2.2 Числовий аналіз усереднених дифузійних потоків у смузі з рівномірним розподілом фаз	109
3.2.3 Дифузійний потік у двофазній смузі з найімовірнішим розташуванням включень біля верхньої поверхні за ненульової початкової концентрації	112
3.2.4 Комп'ютерне моделювання усереднених дифузійних потоків у смузі з бета-розподілом фаз	115
3.3 Висновки до Розділу 3	119
Розділ 4 МОДЕЛЮВАННЯ ПОТОКІВ МАСИ У СТОХАСТИЧНО НЕОДНОРІДНІЙ СМУЗІ З ПРОШАРКАМИ ВИПАДКОВОЇ ТОВЩИНИ ТА ВПЛИВ ПОХИБКИ ВХІДНИХ ДАНИХ	121
4.1 Математичне моделювання дифузійних потоків у смузі зі стохастично розташованим прошарком випадкової товщини	121
4.1.1 Постановка крайової задачі	121
4.1.2 Усереднення дифузійного потоку за рівномірного розподілу товщини включення на заданому інтервалі	122
4.1.3 Числовий аналіз усереднених потоків у двофазній смузі за рівномірного розподілу товщини включення	125

4.1.4	Усереднення дифузійного потоку за трикутного розподілу товщини включення на заданому інтервалі	126
4.1.5	Числовий аналіз усереднених потоків у двофазній смузі за трикутного розподілу товщини включення	129
4.2	Дифузійний потік у двофазній багатошаровій смузі зі стохастично розташованими прошарками випадкової товщини	130
4.2.1	Комп'ютерне моделювання потоків маси у шаруватій смузі за рівномірного розподілу товщини включень	130
4.2.2	Комп'ютерне моделювання потоків маси у шаруватій смузі за трикутного розподілу товщини включень	134
4.2.3	Порівняльний аналіз розв'язків залежно від етапу проведення процедури усереднення за товщиною	137
4.3	Пакет програм для дослідження дифузійних потоків у двофазних тілах випадково неоднорідної структури	140
4.4	Залежність усередненого потоку маси у багатошаровому тілі від похибки вхідних даних	142
4.4.1	Похибка вхідних даних	143
4.4.2	Числовий експеримент для визначення впливу похибки вхідних даних на збурення дифузійних потоків	146
4.4.3	Комп'ютерне моделювання збурення потоків маси	149
4.4.4	Похибка методу обчислень усередненого потоку	152
4.5	Висновки до Розділу 4	154
	ВИСНОВКИ	157
	СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ	160
	ДОДАТКИ	179

ВСТУП

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 багатозафазних 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 багатозафазних 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 багатошарових, 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 дисертації отримані в рамках науково-дослідних тем: «Розробка методів математичного моделювання нелінійних нерівноважних процесів у багатофазних 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 врахована 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 стохас-

тично 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 інтегродиференціального 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 смужі 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 смужі 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 ви-

падково неоднорідній шаруватій смугах за рівномірного розподілу фаз в області тіла.

Об'єкт дослідження – процеси дифузії домішкової речовини в багатозафазних 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, диференціальних 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 багатозаровій смугі за рівномірного розподілу фаз у тілі та часткових випадків бета-розподілів включень, а також у двофазній смугі 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.

Практична цінність роботи. 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 багат шарову 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 $\alpha Fe - Ni$ (використано у Фізико-механічному інституті ім. Г. В. Карпенка НАН України);
- оцінки технологічного періоду продуктивного функціонування фільтра (впроваджено на об'єкті «Очисні споруди потужністю $Q_{max} - 10000,0 \text{ м}^3/\text{добу}$ 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, які навчаються за спеціальністю «Прикладна математика».

Достовірність отриманих результатів забезпечується строгими теоретичними викладками при отриманні рівняння дифузії для функції потоку маси в багатофазному середовищі на основі рівняння балансу маси, експериментально підтверджених законів Фіка, формулюванні фізично обґрунтованих крайових умов в задачах на потік, застосуванням положень хімічної термодинаміки для встановлення початкових умов на функцію концентрації домішкових частинок, використанням апробованих підходів та методів математичної фізики, інтегральних та диференціальних рівнянь, теорії узагальнених функцій, теорії ймовірностей та математичної статистики, математичного аналізу, чисельних методів та теорії похибок, а також узгодженням окремих результатів з відомими у літературі теоретичними та експериментальними даними.

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 [38, 47, 127]; обґрунтування крайових умов [34, 158]; побудова ряду Неймана для випадкового потоку маси [137, 138] та доведення теорем існування розв'язку та збіжності рядів Неймана [40, 136]; реалізація розвиненого підходу до опису стохастичних потоків у смузі з прошарком [133, 134, 161]; побудова розв'язку крайової задачі [10], комп'ютерне моделювання [126, 142] та встановлення закономірностей розподілів дифузійних потоків у багатошарових тілах за рівномірного розподілу фаз [130, 135, 139]; застосування розробленого підходу до опису потоків маси у структурах, в яких область найбільш ймовірного розташування включень зосереджена біля поверхні шару, де діє джерело маси [131, 140], в околі іншої границі тіла [39, 48] і посередині смуги [43, 132]; одержання розрахункових формул для усереднених дифузійних потоків за парного взаємовпливу шаруватих включень [41]; проведення процедур усереднення, реалізація числового експерименту та встановлення закономірностей поведінки усереднених потоків у шаруватій смузі з прошарками випадкової товщини з рівномірним [42] і трикутним [141] 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 “Систем-

ний 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 “Компьютерное моделирование в наукоемких технологиях” (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. Попова (м. Львів, 2012, 2014); міжнародній конференції “Сучасні проблеми механіки і математики” (м. Львів, 2013); IX міжнародній 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 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.

РОЗДІЛ 1

МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ ПЕРЕНЕСЕННЯ В ТІЛАХ ШАРУВАТОЇ СТРУКТУРИ. ОГЛЯД ЛІТЕРАТУРИ

1.1 Типові багатофазні шаруваті структури та галузі їх застосування

В останній час композитні матеріали набувають все більшого значення у хімічній промисловості, автомобілебудуванні, літакобудуванні, залізничному транспорті, електротехнічній промисловості, ядерній енергетиці, будівельній галузі, виробництві сільськогосподарської техніки, медицині тощо [3, 55, 150, 163, 189]. Комбінуючи об'ємний вміст компонентів, можна отримувати композити з необхідними значеннями міцності, модуля пружності, термо-, зносо- і корозостійкості, абразивної стійкості, а також створювати матеріали з необхідними магнітними, діелектричними, радіопоглинаючими та іншими спеціальними властивостями [21, 198]. Застосування композитів забезпечує новий якісний стрибок у збільшенні потужності двигунів, енергетичних і транспортних установок, зменшенні маси машин і приладів тощо [2, 53, 74].

Одним з найбільш розповсюджених класів композитних матеріалів є шаруваті композити (рис. 1.1) з основою із металічної матриці (*Al*, *Mg*, *Ni* та ін.) [21, 159, 206]. Використання полі- та біметалів дозволяє істотно скоротити витрату високолегованих сталей, дефіцитних і дорогих кольорових металів, наприклад, *Cu*, *Cr*, *Mo*. Вироби із шаруватих композитів виготовляються методами лиття, ливарного плакування, прокатки, зварювання та наплавлення [21].

Під час виробництва фільтрів та електричних ізолюючих шарів [224], зокрема, в літій-іонних технологіях, використовують металізацію поверхонь за допомогою Al_2O_3 (рис. 1.2). Шар Al_2O_3 використовується як бар'єрне покриття зі специфічними оптичними і пропускними властивостями.

При виготовленні ємностей для атомних електростанцій використовують біметали з основним шаром із низьколегованої сталі та плакуючим шаром із високолегованої аустенітної сталі (сталь 22К, сталь 08X18H10T) [57, 145]. Три-

шаровий композит сталі 60+ із включенням сталі 10+ широко застосовують у сільському господарстві для виготовлення плугів [55].

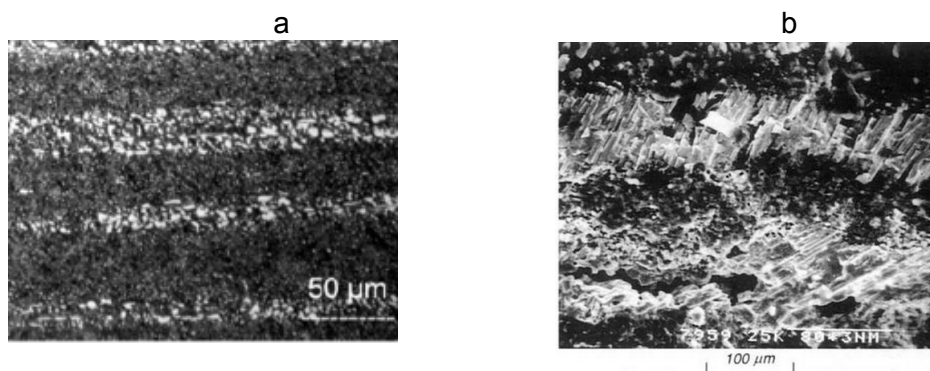


Рис. 1.1. Приклад булату із сорбійною матрицею та скупченням вторинного цементиту (а) [211] та композиту $BaZrO_3$ із включеннями $Y_9Ba_{36}Cu_{55}O_x$ (б) [189]

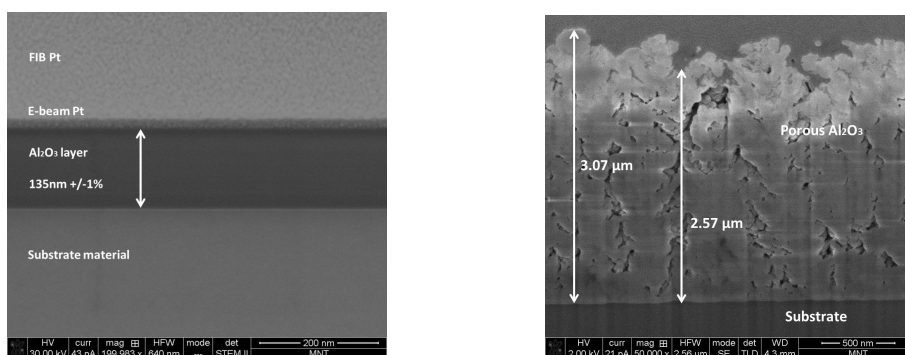


Рис. 1.2. Структури, металізовані Al_2O_3 за технологією Coldab USPLD [224]

За допомогою методів порошкової металургії або введенням порошку наповнювача в розплавлений метал отримують дисперсно зміцнені композити з ізотропними властивостями [30, 121]. Додавання до 10% наповнювача з тугоплавких оксидів, боридів тощо призводить до підвищення стійкості матриці до навантажень та збільшує термостійкість композиту. Наприклад, введення оксиду торію чи цирконію у хромонікелевий сплав збільшує максимальну температуру функціонування виробів з $1000^{\circ}C$ до $1200^{\circ}C$ [55].

В умовах функціонування за високих температур, наприклад, у камерах згоряння реактивних двигунів, також використовують системи композитів на основі титану чи суперсплавів із молібденовими чи вольфрамовими включеннями [20, 114]. Найбільшою міцністю ($\sigma=2.2$ Гпа за температури $1093^{\circ}C$) володіє композит $W-Re-Hf-C$, що у шість разів вище міцності із кобальтових чи нікелевих суперсплавів при тій самій температурі [20].

Розвиток методів електромембранних технологій, таких як електродіаліз та мембранний електроліз, зумовили створення полімерних композитів, що є

основою іонообмінних мембран (рис. 1.3,а). В якості іонообмінного матеріалу використовують полімери, зокрема, на основі стиролу з дивенилбензолом, із різноманітними функціональними групами [98], такими як $-COO$, $-PO_2$, $-PO_3$, $-AsO_3$, $-SeO_3$, $-NH_3$, $-RNH_2$, в якості наповнювача також може слугувати поліетилен або поліпропілен.



Рис. 1.3. Іонообмінні (а) [212] та композитні (б) [217] мембрани

З метою підвищення довговічності вузлів і деталей конструкцій, корозійної стійкості мембран (рис. 1.3,б), ємностей тощо застосовують полімерні покриття (табл. 1.1) [75, 217].

Таблиця. 1.1. Стійкість з'єднань полімер-метал [217]

Поєднані матеріали		Міцність, кН/м	
Полімер	Метал	Активована	Початкова
Ф-4	Сталь 25, 12Х18Н10Т, АМг6, МА2-1, ОТ-4, мідь	3.1-5.8	0.2-2.5
Ф-4МБ	12Х18Н10Т, Д-16, ОТ-4	4.0-4.7	1.2-2.0
ВМПЭ	АМг6, Д-16, АД-1, ОТ-4, мідь	1.6-4.8	0.4-1.6

В останні роки інтерес дослідників привертає сполука оксид графіту, яка має типову шарувату структуру і володіє унікальними пропусковими властивостями [193], що дає потенційну можливість застосовувати такий матеріал для розділення складних сумішей (рис. 1.4).

У сучасному будівництві незамінними компонентами є композитні матеріали такі як арматура зі склопластику, сендвіч-панелі, дерев'яно-шаруваті пластики, склотекстоліт (рис.1.5) [31, 115, 125].

У харчовій промисловості для виготовлення одноразових упаковок типу «тетра пак» для рідких харчових продуктів, обгорток тощо широко використо-

вують шаруваті алюмінійовані матеріали, для виготовлення яких алюмінієву фольгу запресовують на поліетиленову або паперову основу [97, 191]. Крім того, такі матеріали використовуються як теплоізолянти при будівництві котелень, теплотрас, гарячих трубопроводів в житлово-комунальному господарстві, в хімічній і нафтогазовій промисловості [21, 55].

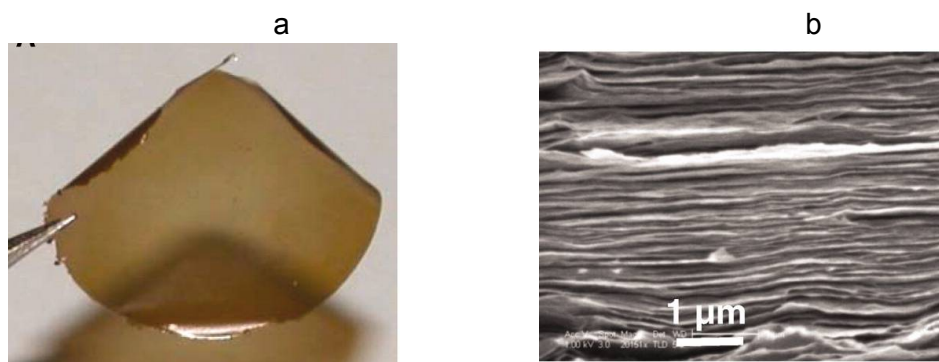


Рис. 1.4. Плівка оксиду графіту (а) та її поперечний переріз (b) [222]

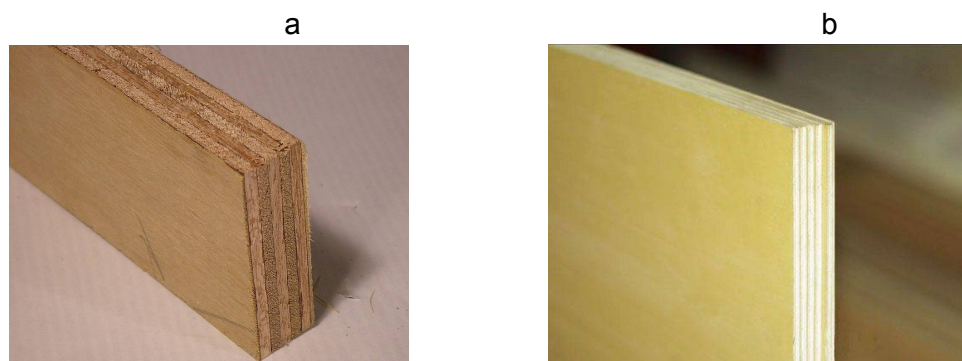


Рис. 1.5. Дерев'яно-шаруватий пластик (а) [213] та склотекстоліт (b) [214]

На сьогодні важливою проблемою залишається очищення води до стану питної, а також очищення побутових та промислових каналізаційних стоків для вторинного використання [29, 51, 146]. На стадії попередньої очищення води широко використовуються механічні фільтри, призначені для видалення нерозчинених часток розміром понад 5-50 мікрон (рис.1.6) [218]. Одним з різновидів таких фільтрів є насипні фільтри [146], що складаються із зернистих засипок різних фільтраційних властивостей (рис. 1.7). У таких конструкціях використовують: кварцовий пісок різних розмірів фракцій, гідроантрацит, алюмосилікат, сульфовугілля тощо. Неперемішуваність фільтруючих прошарків забезпечується значною різницею їх густин. Наприклад, густина кварцового піску становить 2.6 г/см^3 , гідроантрациту – 1.6 г/см^3 [210].

Широкого використання набули багат шарові фільтри, в яких величина зерен (гранул) фільтруючого матеріалу зменшується в напрямку руху стоків.

Проте, застосовують також фільтри, в яких легші і дрібніші часточки фільтруючого матеріалу знаходяться у верхніх шарах (рис. 1.7) [220].



Рис. 1.6. Механічні фільтри [219] та їх конструкційна схема [210]

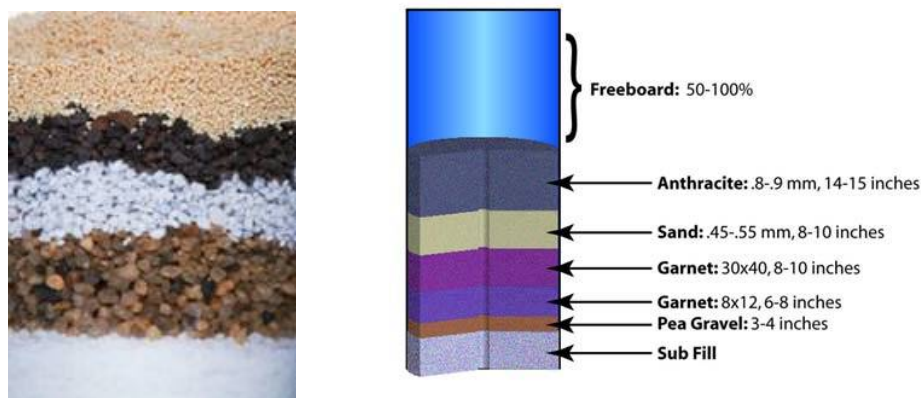


Рис. 1.7. Зернисті насипні багатофазні фільтри [220]

Для очищення води у промислових масштабах зазвичай застосовують каркасно-насипні фільтри (рис.1.8), які є різновидом багатошарових фільтрів, і слугують для доочищення стічних вод та затримання грубих, колоїдних та розчинених часток, зокрема, очистки від таких забруднювачів як нафтопродукти, мідь, залізо, цинк тощо [11].

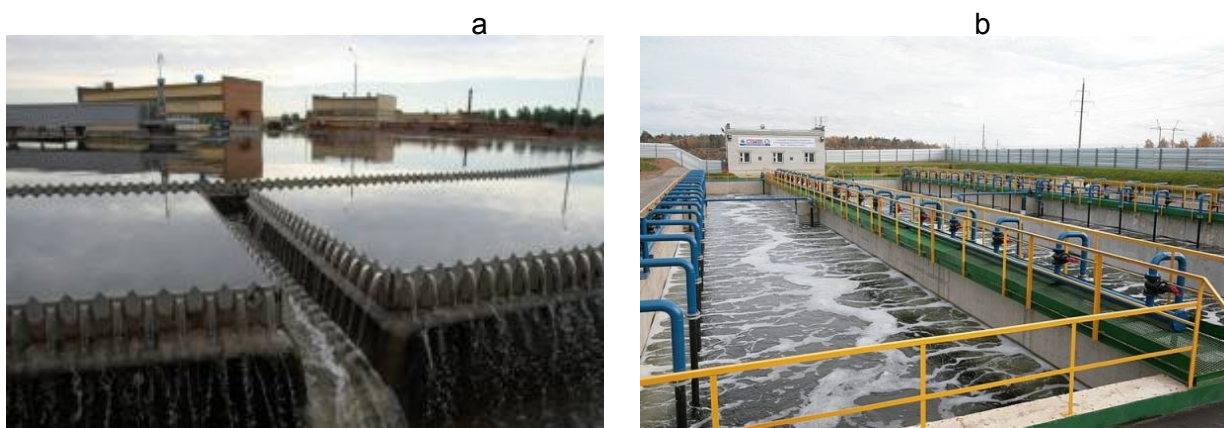


Рис.1.8. Системи промислової очистки питної води (а) [218] та стічних вод (b) з використанням каркасно-насипних фільтрів [215]

Одним з прикладів шаруватих багатофазних середовищ є геологічні об'єкти (рис. 1.9) [80], зокрема, структури родовищ корисних копалин, осадових, магматичних, метаморфічних порід: ліпідобластової (рис. 1.9,а), нематобластової та сланцеватої (рис. 1.9,б-с) [216] текстури тощо.

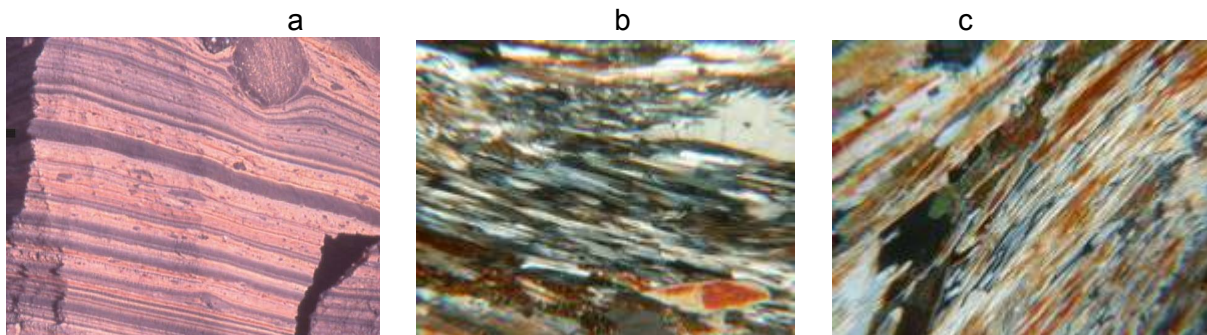


Рис. 1.9. Структура шаруватої гірської породи (а) [221], дистенового (б) та фібролітового (с) сланців [216]

Аналіз процесів, в тому числі і дифузійних, що протікають в складних геологічних структурах є важливим під час проведення інженерно-геологічних досліджень земельних ділянок, зокрема, для встановлення можливості проведення будівельних робіт.

Таким чином, галузі застосування шаруватих структур є дуже різноманітними. Зокрема, виготовлення деталей із композитів, що функціонують в умовах сильних навантажень, температурних режимів: обшивки, лонжеронів, панелей літаків [33]; лопаток компресорів і турбін в двигунах [35]; бурових інструментів у гірничовидобувній промисловості [55, 114]. В автомобілебудуванні застосовують композити для полегшення кузовів, ресор, рам, панелей кузовів тощо [53, 74]. Полімерні шаруваті структури знайшли своє використання у харчовій промисловості [97, 192], будівництві, медицині [163], приладобудуванні та виготовленні елементів комп'ютерної техніки [153, 195], і в багатьох інших сферах життєдіяльності людини.

1.2 Математичний опис дифузійних процесів

Оцінка часу та режимів ефективної роботи фільтрів, вивчення пропускних властивостей мембран, функціональних характеристик композитних шаруватих матеріалів, тощо базується на моделюванні процесів перенесення маси, які в них протікають.

Для вивчення процесів дифузії домішкової речовини у рідинах, газах, твердих тілах, що відбуваються за рахунок міграції молекул чи інших елементарних частинок, застосовують фізичний, термодинамічний, інформаційний, феноменологічний, стохастичний та інші підходи [106].

Відповідно до фізичного підходу процес дифузії розглядають як неперервну послідовність елементарних подій, що полягають у стрибкоподібних переміщеннях домішкових частинок з одного положення локальної рівноваги в інше за деякий невеликий проміжок часу. Зокрема, можуть реалізовуватись різні механізми дифузії: обмін місцями атомів, циклічне переміщення декількох атомів, вакансійний, міжвузельний механізми тощо [128]. Фізичний підхід застосовують при описі дифузійних процесів у рідинах і газах, процесів внутрішнього масоперенесення при адсорбції, дифузії низькомолекулярних речовин у полімерах, дифузійної проникності мембран та ін. На основі припущення про швидке встановлення теплової рівноваги частинки (молекули, атома, іону тощо) із середовищем у кожній проміжній позиції її розташування можна зробити висновки про статистичну незалежність переміщення частинок у просторі і стохастичну природу дифузійного процесу, що дає можливість застосовувати для його опису методи статистичної фізики [106].

При описі макроскопічних процесів переносу (дифузії, теплопровідності тощо) застосовують лінійні градієнтні закони [117]. Так у випадку процесу дифузії, величина потоку \vec{J} пропорційна градієнту його концентрації C [95]

$$\vec{J} = -D \text{grad} C, \quad (1.1)$$

де D – коефіцієнт дифузії ($\text{м}^2/\text{с}$).

Співвідношення (1.1) є першим законом Фіка [160] і є одним із центральних постулатів теорії дифузійно контрольованих реакцій [95].

Фізичний підхід застосовний у випадку відсутності великих макроскопічних градієнтів концентрації. Так при вивченні процесів масоперенесення у пластиках, колоїдних та деяких пористих тілах спостерігаються відхилення від законів Фіка, що мають характер ефекту насичення потоку перенесення [117]. Тоді необхідно проводити аналіз руху частинок на молекулярно-кінетичному рівні [95] із застосуванням нелінійних законів масоперенесення [117].

Термодинамічний підхід, на відміну від фізичного, не використовує жодних модельних уявлень щодо атомно-молекулярної структури речовини. Задачею такого підходу є встановлення зв'язків між спостережуваними макрочарактеристиками системи такими як тиск, температура, концентрація, хімічний потенціал, ентропія, об'єм тощо [107]. Тоді як такі параметри атомно-молекулярної структури речовини як розміри атомів чи молекул, їхня кількість, маса і т.п. у термодинамічному підході не розглядаються.

З рівняння швидкості зміни ентропії термодинаміки незворотних процесів можна отримати систему рівнянь для процесу тепломасоперенесення, зумовленого градієнтами хімічного потенціалу μ , температури T і тиску P [106]

$$\vec{J} = -\kappa_{11} \text{grad} \mu - \kappa_{12} \text{grad} T - \kappa_{13} \text{grad} P; \quad (1.2)$$

$$\vec{Q} = -\kappa_{21} \text{grad} \mu - \kappa_{22} \text{grad} T - \kappa_{23} \text{grad} P. \quad (1.3)$$

Тут $\kappa_{i,k}$ – кінетичні коефіцієнти,

\vec{Q} – потік тепла,

$$\text{grad} = \frac{\partial}{\partial x} \vec{i} + \frac{\partial}{\partial y} \vec{j} + \frac{\partial}{\partial z} \vec{k}.$$

Якщо прийняти, що процес перенесення відбувається за умов сталого тиску та температури, то із системи (1.2)-(1.3) отримаємо

$$\vec{J} = -\kappa_{11} \text{grad} \mu. \quad (1.4)$$

У загальному випадку хімічний потенціал можна представити як функцію концентрації речовини, температури і тиску, тобто $\mu = \mu(C, T, P)$ [107]. За умов сталого тиску і температури $P \equiv \text{const}$, $T \equiv \text{const}$, отримаємо [106]

$$\text{grad} \mu = \left(\frac{\partial \mu}{\partial C} \right)_{T, P} \text{grad} C. \quad (1.5)$$

Підставивши співвідношення (1.5) у вираз (1.4) отримаємо рівняння (1.1) [106], де коефіцієнт молекулярної дифузії можна подати у термінах термодинаміки незворотних процесів як $D = \kappa_{11} (\partial \mu / \partial C)_{T, P}$. Таким чином, лінійне рівняння дифузії (1.1) та термодинамічне рівняння (1.4) узгоджуються між собою.

Термодинамічний підхід володіє високим ступенем загальності, а також є достатньо простим у використанні для вирішення технічних задач термоме-

ханіки, теплотехніки, не потребуючи додаткової інформації щодо властивостей атомів, молекул [107]. Цей підхід також широко застосовують для опису внутрішнього тепломасоперенесення при сушінні [106].

Під час моделювання складних систем досить часто виникає проблема недостатньої кількості емпіричної інформації та теоретичних висновків про характер і механізм взаємозв'язків складових елементів системи. У таких випадках неможливо достатньо повно і точно здійснити математичний опис процесу з використанням рівнянь переносу із заданими граничними і початковими умовами, а отже виникає необхідність розробки методів побудови емпіричних рівнянь з використанням теорії подібності та аналізу розмірностей [117].

Застосування статистичних методів визначення станів системи спричинило розвиток інформаційного підходу до опису процесів перенесення [117, 118]. Як кількісну міру стану системи у цьому підході прийнято міру невпорядкованості системи – інформаційну ентропію S [106].

Відповідно до постулату Джейнса [118] для знаходження інформаційної ентропії використовують рівність

$$S = -\sum_{i=1}^k p_i \log_2 p_i, \quad (1.6)$$

де k – кількість вихідних станів системи,

p_i – імовірність i -го стану системи.

Застосовуючи співвідношення (1.6) відносно дифузійних процесів, маємо [106]

$$S = -\sum_{i=1}^k x_i \log_2 x_i.$$

Тут k – кількість компонент системи,

x_i – молярна частка i -го компоненту.

Для кількісного опису процесів перенесення маси на базі інформаційної ентропії використовують аналіз причинно-наслідкових зв'язків на основі методів «чорного ящика», діаграм стану тощо [117], а також феноменологічні моделі, що виходять з припущення щодо пропорційності швидкості створення невпорядкованості в елементарному об'ємі градієнту інформаційної ентропії в напрямку потоку речовини [106].

У феноменологічному підході залежно від специфіки явища перенесення для опису системи приймається лінійна градієнтна чи нелінійна одно- або багатопараметрична математична модель [106]. Феноменологічний (кінетичний) підхід застосовують для опису масообмінних процесів типу адсорбції, дистиляції, сушіння, а також для опису внутрішнього масоперенесення в капілярно-пористих матеріалах [76, 106].

Феноменологічна теорія перенесення в дисперсійних середовищах була запропонована Максвеллом для опису процесів електропровідності, а потім адаптована до задач теплопровідності і дифузії [7]. У такій моделі спочатку розглядаються збурення дифузійного потоку, викликані перешкодами заданої форми із розмірами, набагато меншими за товщину взірця, що розташовані у нескінченному однорідному середовищі, а потім відбувається підсумовування усіх можливих збурень, які викликані ансамблем тієї ж форми, розташованих у взірці скінченних розмірів [7]. Такий підхід є застосовним для опису нестационарних процесів дифузії в середовищах із включеннями простої геометричної форми: пластина, циліндр, куля тощо.

Масоперенесення у твердій фазі, викликане неоднорідністю концентрацій системи, в загальному випадку описують феноменологічним рівнянням масоперенесення, що у теорії сушіння має назву рівнянням дифузії вологи [106]

$$\vec{I} = -k \text{grad} C, \quad (1.7)$$

де \vec{I} – густина потоку маси відносно до перетину, фіксованому на твердій фазі (гранули, частинки тощо) або на одній із компонент,

k – коефіцієнт масопровідності.

Рівняння (1.7), на відміну від першого закону Фіка (1.1), окрім молекулярної дифузії описує також процеси масоперенесення у рідкій та газоподібній фазах, зокрема, капілярне масоперенесення.

У [117] для опису процесів перенесення маси запропоновано нелінійне феноменологічне рівняння, яке дозволяє поширити закони Фіка на високоінтенсивні нестационарні процеси дифузії

$$\vec{I} = -D \text{grad} C - \tau_{r,m} \frac{\partial \vec{I}}{\partial \tau}. \quad (1.8)$$

Тут $\tau_{r,m}$ – час релаксації (час вирівнювання параметра за об'ємом системи).

Підставивши $\tau_{r,m} = 0$ у рівняння (1.8), отримаємо співвідношення (1.1).

Практичні експерименти сушіння капілярно-пористого матеріалу – дигідрату гіпсу, сушіння целюлоїду від етилового спирту [106] показали, що для достатньої точності технічних розрахунків у рівнянні (1.8) можна прийняти $\tau_{r,m} = 0$, що підтверджує можливість застосування феноменологічного рівняння масопереносу (1.7) для опису процесів сушіння, адсорбції та екстрагування цільових компонент із твердих фаз.

У випадках, коли частинки твердої фази мають складну конфігурацію, що ускладнює застосування для опису таких систем диференціальних рівнянь тепло-, масопровідності чи дифузії, застосовують моделювання тепломасоперенесення з використанням теорії випадкових марківських процесів [52].

При описі процесів дифузії найчастіше використовують рівняння (1.1), що обумовлено його простотою, розвиненим математичним апаратом для розв'язування відповідних параболічних рівнянь, а також, як правило, достатньою збіжністю числових результатів [106]. За такого підходу враховуються фізико-хімічні властивості тіл в коефіцієнтах рівнянь, однак практично неможливо врахувати взаємозв'язки і взаємовпливи різної природи.

Для опису взаємозв'язних теплових, механічних та дифузійних процесів Я. Й. Бураком, Є. Я. Чаплею та їх учнями розроблено континуально-термодинамічний підхід, що враховує локальні зміни стану складових системи, а також приймається гіпотеза про визначення стану фізично малих підобластей системи із спряжених фізичних параметрів, що описують її у рівновазі [15, 16, 154]. У працях [14, 17] запропоновано локально-градієнтний підхід для вивчення процесів перенесення у локально неоднорідних системах, відповідно до якого визначається напружено-деформівний стан тіла.

1.3 Математичне моделювання процесів перенесення у випадково неоднорідних тілах

З розвитком засобів комп'ютерної техніки та підвищенням рівня обчислювальних потужностей відкриваються широкі можливості для моделювання

складних процесів з метою прогнозування їх розвитку, встановлення нових залежностей процесу від внутрішніх та зовнішніх впливів, економії ресурсів, у тому числі зменшення часу досліджень [25, 112]. Важливу роль при цьому відіграє використання апарату математичного моделювання, в рамках якого, на основі побудованої математичної моделі, формулюються відповідні крайові задачі, що розв'язуються аналітичними, числовими чи аналітико-числовими методами. Так при побудові математичних моделей процесів перенесення, зазвичай, використовують інтегральне або диференціальне представлення законів збереження маси, імпульсу, енергії та експериментально встановлені залежності.

Математичне та комп'ютерне моделювання на базі різних видів моделей для опису процесів тепло- та масоперенесення широко використовують у своїх працях М. С. Бахвалов, С. Бонеллі, Р. А. Бунь, Я. Й. Бурак, М. З. Згуровський, В. В. Калашніков, Е. М. Карташов, П. П. Костробій, В. І. Лаврик, О. В. Ликов, Б. Я. Любов, В. І. Лялько, В. П. Ляшенко, О. С. Макаренко, В. П. Маслов, Т. І. Марчук, Н. Д. Панкратова, А. А. Рядно, Д. В. Федасюк, С. Фретінг, Д. Фоурнієр та інші вчені [5, 64, 67, 71, 77, 81, 82, 86, 87, 120, 152, 154, 168, 186, 187, 190, 207, 208]. Крайові задачі переносу для тіл складної геометричної структури сформульовані і розв'язані у працях М. М. Беляєва, В. М. Булавацького, Б. І. Гайвась, Б. В. Гери, Г. С. Кіта, Л. А. Коздоби, Ю. М. Коляна, М. П. Ленюка, В. М. Ніколаєвського, В. С. Поповича, О. А. Самарського, А. М. Тихонова та інших науковців [8, 13, 23, 27, 56, 61, 73, 90, 94, 119, 155].

Наявність внутрішніх неоднорідностей середовища, наприклад, структурних дефектів, може суттєво впливати на процеси перенесення в тілі. Я. С. Підстригачем і Ю. М. Колянном започатковано, а їхніми учнями продовжено розвиток підходів і методів до математичного опису процесів перенесення у багатофазних тілах неоднорідної або кусково-однорідної структури, зокрема, для отримання єдиного в усій області визначення розв'язку крайових задач термомеханіки неоднорідних структур запропоновано метод узагальнених асиметричних одиничних S_{\pm} -функцій [100, 101]. Р. М. Кушніром розроблено метод [90], який полягає у постановці узагальненої задачі спряження для диференціальних

рівнянь в частинних похідних нестационарної задачі перенесення тепла та рівнянь пружної рівноваги у переміщеннях для однорідної області з продовженням шуканих і заданих функцій на всю кусково-однорідну область за допомогою узагальнених функцій. Враховуючи умови контакту на поверхнях поділу за рахунок конкретизації стрибків шуканих функції та їх похідних, для кусково-однорідних областей одержано частково-вироджені диференціальні рівняння з розривними коефіцієнтами, що дозволило побудувати уніфіковану математичну модель з власними напруженнями та дефектами, такими як тріщини, включення або дислокації. Разом з В. С. Поповичем запропоновано метод дослідження температурних полів і термонапруженого стану однорідних чи кусково-однорідних тіл з урахуванням теплових і механічних характеристик матеріалів, дії силових навантажень та теплообміну з оточуючим середовищем [178]. Вплив наявності тріщин на процеси теплоперенесення розглядають у своїх роботах Г. С. Кіт, Р. М. Мартиняк, В. В. Михаськів [56, 89] та інші вчені.

Моделюванню процесів теплопровідності, геоелектромагнетизму та лінійного деформування у кусково-однорідних та локально-неоднорідних середовищах складної форми присвячені роботи Л. М. Журавчак [50].

Я. Г. Савулою та його учнями розроблено методи опису нестационарних процесів теплоперенесення, адвекції-дифузії у середовищах з тонким покриттям та тонкими, в тому числі криволінійними, включенням [110]. З метою зниження вимірності математичної моделі неоднорідного середовища запропоновано застосовувати гетерогенний підхід, використовуючи припущення про лінійність шуканої функції в області тонких включень. Для опису процесів адвекції-дифузії Я. Г. Савула та його учні використовують метод скінчених елементів зі стандартними лінійними та квадратичними базисними функціями. При цьому для забезпечення стійкості розв'язків у випадках значної переваги коефіцієнтів адвекції над коефіцієнтами дифузії, застосовують апроксимації на основі функцій-бульбашок [109].

У дослідженнях О. Р. Гачкевича, В. С. Дейнеки, Я. Д. П'яниці, І. В. Сергієнка, Г. Т. Сулима, В. Ф. Чекуріна та інших вчених здійснюється розробка ма-

тематичних моделей для опису стаціонарної та нестаціонарної механічної поведінки тіл за впливу полів різної фізичної природи з використанням багатоконтинуумних уявлень для відображення структури середовища та розвинення необхідних аналітико-числових методів для їх розв'язання [96, 103, 111, 179]. Моделюванню процесів перенесення випромінювання в системах, які складаються з плоскопаралельних шарів різної прозорості, присвячені роботи О. Р. Гачкевича, Р. Ф. Терлецького та їх учнів [26]. Зокрема, розроблено методу розв'язання нелінійних крайових задач на основі методу скінченних елементів, особливістю якої є застосування лінеаризації варіаційних рівнянь на етапі побудови однокрокової рекурентної схеми інтегрування за часом.

Проблема макромоделювання неперервних лінійних і нелінійних динамічних систем із зосередженими сталими параметрами розв'язувалась в роботах Я. М. Матвійчука, зокрема, розглянуто методи регуляризації ідентифікаційних процедур [88].

Наукові праці А. Я. Бомби, В. М. Булавацького, А. П. Власюка, Д. А. Ключина, В. І. Лаврика, І. І. Ляшка, С. І. Ляшка, П. М. Мартинюка, В. В. Скопецького та їхніх учнів присвячені розвитку числових та числово-аналітичних методів розв'язання задач фільтрації у багатофазних, зокрема пористих, середовищах з урахуванням різних фізичних факторів (конвективного перенесення, суфозії, сорбції, теплових процесів тощо) на основі методів конформних та квазіконформних відображень, скінченних різниць, скінченних елементів, радіальних базисних функцій, біпараболічних моделей тощо [12, 13, 22, 71, 83, 84].

Моделювання процесів дифузії у багатокомпонентних середовищах на основі моделі Даркена з використанням методів скінченних та граничних елементів [166], а також «двошвидкісного» методу для знаходження відхилень хімічних потенціалів від рівноважних станів на границях фаз [205] здійснено у працях Б. Вєжби, М. Данілевського, Р. Філіпека, К. Шишкевича та інших.

У випадках, коли невідомою є точна геометрична конфігурація багатфазних тіл, виникає необхідність розгляду параметрів середовища як стохастичних величин, що призводить до випадкового характеру досліджуваних фізичних по-

лів [60, 196]. Тоді, щоб встановити основні особливості досліджуваного явища, як правило, застосовують метод стохастичного усереднення [5]. При цьому внаслідок згладжування окремих реалізацій отримані статистичні характеристики можуть суттєво різнитись від реалізації структури середовища.

Розглядаючи багатофазні середовища як структури з включеннями правильної геометричної форми, невпорядковане середовище можна замінити регулярною, в тому числі періодичною, структурою та шукати розв'язок для виділеного елемента з одним або декількома включеннями у вигляді спряження розв'язків для однорідних областей [5, 32, 183, 184]. Проте моделювання багатофазного випадкового середовища як регулярної структури виявляється ефективним тільки у випадку розподілу фаз близькому до рівномірного.

Для опису фізико-механічних процесів у багатофазних стохастично неоднорідних середовищах широко застосовують підхід гомогенізації неоднорідних структур [93, 94, 108, 122, 123, 148, 169, 172, 175, 194]. Цей підхід базується на припущеннях про малість розмірів неоднорідностей, їх макроскопічного числа та рівномірного розподілу в області тіла [124]. 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.

У рамках методів гомогенізації А. Галкою, Й. Телегою описуються процеси перенесення для мікроперіодичних структур, зокрема, у роботі [170] розглянуто квазілінійну задачу перенесення з періодичними коефіцієнтами та використано асимптотичну гомогенізацію (метод двовимірного асимптотичного подання) до локальної задачі мінімізації. Із застосуванням апроксимації Паде та методу Рітца отримано формули для ефективних коефіцієнтів дифузії.

У роботах [19, 122, 191] показано, що багатофазні тіла, такі як композити, дифузійні мембрани тощо, на відміну від сплавів та хімічних сполук з розмірами елементів порядку величини молекул та міжатомних відстаней, можна розглядати як структури з макроскопічною кількістю елементів, характерні розміри яких суттєво більші за молекулярні, проте нехтовно малі з розмірами тіла.

У дослідженнях С. Ландіма, С. Олла та їх співавторів запропоновано використовувати гомогенізацію середовища у задачах конвекції-дифузії для ергодичного, нестискуваного випадкового потоку із обмеженою матрицею і сталим значенням середнього зміщення [180]. У результаті одержано варіаційні формули, а також визначено верхню і нижню границі для ефективної дифузійності. А в роботі [169] розглядається гомогенізація для інерційних частинок, які рухаються у випадковому, змінному в часі полі швидкостей. Показано, що для великих масштабів та значень часів, поведінку частинок можна описати ефективним рівнянням дифузії для окремої змінної позиції, що досягається за рахунок формального розкладу для різних масштабних параметрів. Із використанням методів гомогенізації В. В. Жиков [209] вивчає дифузію у нестискуваному випадковому потоці, враховуючи густину розподілу броунівських частинок у стаціонарному потоці рідини для періодичного або майже періодичного соленоїдального поля. Враховуючи асимптотичну поведінку функції густини, для великих часів протікання процесу запропонована заміна конвективної складової вихідного рівняння усередненим рівнянням зі сталою матрицею.

Один з методів гомогенізації неоднорідної структури з використанням мікро-макро підходу розробив Д. Ліджба [183, 184]. У рамках підходу розглядається параметризована певним масштабним параметром (відповідно до розміру пор) множина функцій, водночас, за рахунок спрямування характерних розмірів включень до нуля, нехтується їхніми фізичними характеристиками. Такий підхід використаний С. Матисяком та Р. Мешковським для моделювання процесів дифузії в шаруватих тілах [188].

Вивченню процесів теплопровідності та механічних процесів у двофазних випадково неоднорідних композитних матеріалах, фізико-механічні властивості яких розглядаються як випадкові функції координат, присвячена монографія Л. П. Хорошуна та Н. С. Солтанова [124]. Авторами запропоновано метод умовних моментів, який дозволяє відмовитись від умови рівномірного розподілу неоднорідностей в тілі. За такого методу температура розглядається як скалярне поле, а теплові потоки і градієнти температур представлено у вигляді векторних

полів. Коефіцієнти рівняння та температурне поле подається у вигляді суми математичних сподівань та флуктуацій. Із використанням функції Гріна вихідну крайову задачу зводять до інтегрального рівняння, домноживши яке на умовну густину, проводиться процедура статистичного усереднення.

Опис процесів фільтрації у випадково неоднорідних середовищах на основі закону Дарсі проводять у своїх роботах О. Л. Кузнецов, Ю. А. Кухаренко та співавтори [69, 70]. Крайову задачу фільтрації запропоновано зводити до інтегро-диференціального рівняння, а розв'язок шукати у вигляді розкладу за збуреннями. Проте автори розглядають стаціонарний процес перенесення у безмежному середовищі, тоді як на практиці важливим є вплив границь тіл, особливо за умов дії джерел на їхніх поверхнях.

Розвиток статистичних методів в аналізі стохастичних систем знайшов своє відображення у працях В. І. Кляцкіна, С. М. Ритова, В. І. Татарського [59, 104, 105]. У праці [58] з використанням функціонального підходу розглядаються задачі дифузії домішки, зокрема, аналізується утворення кластерів з частинок (Лагранджеве представлення) та полів домішки (представлення Ейлера) у випадкових потоках. На основі ідей та методів статистичної томографії, аналізу одноточкових просторово-часових густин ймовірностей проводиться опис когерентних явищ, що мають місце практично в усіх реалізаціях процесу дифузії.

Характеризуючи динаміку поля як узагальнений процес дифузії та використовуючи теорію збурення, Л. Р. Арнаут [149] будує загальний розв'язок рівняння нестационарного випадкового акустичного та електромагнітного поля, приймаючи дифузійні поля як квазістаціонарні.

При дослідженні процесів масоперенесення в пористих середовищах, складних геологічних структурах, композитних матеріалах, наноструктурах тощо, важливою характеристикою процесу, крім концентрації мігруючої речовини чи хімічного потенціалу, є дифузійний потік. Математичне моделювання дифузійних потоків має широкий спектр інженерних застосувань: визначення структури росту кристалів, тверднення сплавів, прогнозування роботи реакторів, прогнозування забруднення атмосфери та ґрунтових вод, оцінка ефектив-

ності функціонування фільтрів, створення дифузійних мембран і наноматеріалів та в інших технологічних процесах.

Одним з перших вплив неоднорідності середовища на потік рідини у двофазних пористих тілах досліджував у своїх роботах Б. К'юпер [177]. Зокрема, автором запропонована двовимірна модель на основі скінченно-різницевого рівнянь, що розв'язуються методом ітерацій Ньютон-Рафсона. Дослідженню багатокомпонентних потоків на основі моделей, які описуються диференціальними рівняннями руху суміші газів, присвячені роботи В. Джовангілі, Я. Ванга, Е. Заторської, П. Мухи [171, 204, 223].

С. Павловським, Ф. Сістатом, Д. Креспо та іншими вченими вивчалось іонне масоперенесення через гетерогенні катіонно-аніонні мембрани, де для оцінки товщини приповерхневого дифузійного шару використовувались потенціалограми зон релаксації [197].

Наукові дослідження, проведені у праці [173], присвячені вивченню процесів перенесення в комп'ютерно згенерованому середовищі, заповненому випадково розташованими кулями. Для опису перенесення маси у ділянках порожнеч між кулями використано решітки Больцмана та методи випадкового блукання для відслідковування руху частинок, при цьому комп'ютерне моделювання періодичного та обмеженого ущільнення твердих непроникних кульок здійснено за алгоритмами на основі методів Монте-Карло та Джодрі-Торі.

Моделювання потоків пари через шаруваті керамічні мембрани із визначеними товщинами прошарків проводиться на основі рівняння балансу енергії із врахуванням ефекту Джоуля-Томсона та капілярної конденсації у праці [185]. Дослідженню потоків речовини через композитні мембрани також присвячені роботи А. Валі, Р. Бесанта, К. Сімонсона, Д. Лі, В. Шапошника та інших вчених [18, 144, 182, 202].

У роботі [199] розглянуто підхід до аналізу траєкторій та потоків малих частинок за випадкового характеру і/або рівномірної швидкості їх поширення. Для визначення коефіцієнтів дифузії запропоновано використовувати кореляцію позицій малих частинок або швидкостей їх руху.

Проблемі апроксимації дифузійного потоку домішкової речовини у твердій фазі з використанням числового методу ущільнення сіток для різницевих схем присвячені роботи Г. Шишкіна [147].

У дослідженнях А. Фанджанга та Г. Папаніколау [164] аналізується ефективна дифузійність домішки для двовимірного нестискуваного випадкового потоку з використанням варіаційних принципів та континуальної теорії перколяції (теорії просочування) для задач конвективної дифузії. Встановлено, що в межах малої дифузійності або великих чисел Пекле з домінуючою конвективною складовою спостерігається значне зростання ефективної дифузійності. К. Сато та Х. Нагашима [200] для опису ізотропного випадкового поля потоку застосовують метод проєкційного оператора. Таке застосування дозволяє без додаткових обмежень використовувати часову кореляційну функцію, а також провести кількісну оцінку нелінійної дифузії в околі початкових моментів часу.

У працях Й. ван Дьюїна, Й. Левандовської з використанням методів гомогенізації для опису мікромасштабних неоднорідностей проведено моделювання потоків у пористих середовищах з періодичною структурою [181, 203], зокрема, для знаходження розв'язку рівняння конвекції-дифузії в таких структурах застосовано метод гідродинаміки згладжених частинок (SPH-метод).

Проте під час моделювання дифузійних потоків у випадково неоднорідних структурах виникають значні труднощі при проведенні процедури усереднення за ансамблем конфігурацій фаз, оскільки у випадку застосування першого закону Фіка невідомою є функція кореляції градієнта випадкового поля концентрації домішкової речовини та стохастичного коефіцієнта дифузії, тобто $cor(\vec{\nabla}c(\vec{r}, t), D(\vec{r}))$, де $c(\vec{r}, t) = C(\vec{r}, t) - C_0$ – відхилення концентрації від деякого вихідного значення C_0 .

Автори К. Бергінс, С. Крон, К. Сторсс, Т. Шуленберг, У. Мюллер для вирішення цієї проблеми у випадку дифузії в пористих тілах пропонують скласти балансові рівняння для вже гомогенізованих середовищ з фізичними характеристиками, що є усередненими величинами і враховують відмінності між фазами, проте за такого підходу нехтується взаємодією між ними [151, 201].

Й. Келлер визначає випадковий потік за законом Дарсі, коефіцієнт фільтрації якого є випадковою функцією просторової координати [176]. Для побудови розв'язку задачі автор використовує методи малих збурень та згладжування (з відповідними обмеженнями), і накладає умову нормального розподілу фаз у середовищі, що не дає можливість визначити усереднений потік маси, тому визначається тільки двоточкова функція коварації.

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 [128, 143, 156]. 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. Білуцака [9, 157].

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.

1.4 Висновки до Розділу 1

Шаруваті багатофазні структури знайшли широке застосування в різних галузях народного господарства: використання композитних матеріалів у промисловості, машинобудуванні, енергетиці, будівництві; застосування різноманітних фільтрів у комунальному господарстві міст та на промислових об'єктах; створення полімерів, що використовуються у радіо- та електротехніці тощо. Проте досить часто інформація про внутрішню неоднорідну структуру таких об'єктів може бути відсутньою, що викликає необхідність розгляду її як ви-

падково неоднорідної. Водночас може бути невідомим не тільки розташування включень, але й їх характерні розміри. Для опису процесів перенесення у стохастично неоднорідних середовищах, як правило, застосовують методи гомонізації, які, однак, виявляються неефективними за умов, коли не виконуються обмеження на малість розмірів неоднорідностей, їх макроскопічного числа або рівномірного розподілу в області тіла. Крім того, в інженерній практиці важливе значення для опису процесів перенесення відіграє дифузійний потік частинок. Проте знаходження потоку маси у випадково неоднорідних тілах при виконанні процедури просторового усереднення за ансамблем конфігурацій фаз та використанні першого закону Фіка викликає значні труднощі, оскільки функції кореляції градієнта стохастичного поля концентрації і випадкового коефіцієнта дифузії є ненульовими і невідомим. Тому актуальною є розробка нового підходу до математичного опису дифузійних потоків у випадково неоднорідних тілах за довільного ймовірнісного розподілу фаз та стохастичних товщин підшарів, а також проведення оцінки взаємовпливу шаруватих включень та дослідження залежності усереднених дифузійних потоків від різних типів похибок.

РОЗДІЛ 2

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ВИПАДКОВИХ ДИФУЗІЙНИХ ПОТОКІВ ДОМІШКИ У ДВОФАЗНОМУ БАГАТОШАРОВОМУ СТОХАСТИЧО НЕОДНОРІДНОМУ ТІЛІ

Цей Розділ присвячений розвиненню оригінального підходу до математичного опису стохастичних потоків домішкової речовини у двофазних випадково неоднорідних шаруватих структурах, за яким рівняння дифузії будемо для функції потоку маси, і крайові задачі формуємо безпосередньо для потоку. При цьому необхідно обґрунтовано формулювати крайові умови, оскільки у випадку, коли значення потоку на «верхній» межі є значно більшим, ніж на «нижній», в обмежене тіло може поступити необмежена кількість домішки, що є певним протиріччям. Аналогічно, при підтриманні значно більшого потоку через «нижню» границю приходимо також до певних суперечностей. У зв'язку з цим запропоновано на одній поверхні тіла задавати значення потоку маси, а на іншій – концентрації і додатково визначати відповідну умову на потік. Розв'язки крайових задач із випадковими коефіцієнтами знаходимо у вигляді ряду Неймана, зручного для проведення процедури усереднення за ансамблем конфігурацій фаз. При цьому розвинення в ряд проводимо в околі розв'язків відповідних крайових задач для однорідного тіла і доводимо збіжність цього ряду.

2.1 Математична модель дифузійних потоків домішкових частинок у шаруватих тілах

2.1.1 Рівняння дифузії для функції потоку маси

Нехай у середовищі відбувається процес дифузії домішкової речовини. Рівняння балансу маси в загальному випадку має вигляд [160]

$$\frac{\partial c(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}(\vec{r}, t), \quad (2.1)$$

де $c(\vec{r}, t)$ – концентрація частинок домішки,

$\vec{J}(\vec{r}, t)$ – потік маси дифундуючої речовини,

$\vec{\nabla}$ – набла-оператор Гамільтона,

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

крапкою позначена операція скалярного добутку.

Подіємо зліва на рівняння (2.1) оператором $-\vec{\nabla}$ [129]:

$$\frac{\partial}{\partial t}(-\vec{\nabla}c(\vec{r},t)) = \vec{\nabla} \otimes \vec{\nabla} \cdot \vec{J}(\vec{r},t). \quad (2.2)$$

Тут « \otimes » – тензорний добуток, причому $\vec{\nabla} \otimes \vec{\nabla} = \nabla_i \nabla_j \vec{i}^i \otimes \vec{i}^j$ ($i, j = \overline{1,3}$),

∇_i – символ часткової похідної,

\vec{i}^i – базисний вектор (у випадку декартової системи координат: $\nabla_1 = \partial/\partial x$, $\nabla_2 = \partial/\partial y$, $\nabla_3 = \partial/\partial z$; $\vec{i}^1 = \vec{i}$, $\vec{i}^2 = \vec{j}$, $\vec{i}^3 = \vec{k}$).

Домножимо рівняння (2.2) на коефіцієнт дифузії $D(\vec{r})$, який приймаємо незалежним від часу, проте він може бути функцією просторових координат, у тому числі випадковою. Тоді маємо

$$\frac{\partial}{\partial t}(-D(\vec{r})\vec{\nabla}c(\vec{r},t)) = D(\vec{r})\vec{\nabla} \otimes \vec{\nabla} \cdot \vec{J}(\vec{r},t). \quad (2.3)$$

Враховуючи співвідношення між потоком маси та концентрацією частинок (перший закон Фіка) [160]

$$\vec{J}(\vec{r},t) = -D(\vec{r})\vec{\nabla}c(\vec{r},t), \quad (2.4)$$

рівняння (2.3) запишемо у вигляді

$$\frac{\partial \vec{J}(\vec{r},t)}{\partial t} = D(\vec{r})\vec{\nabla} \otimes \vec{\nabla} \cdot \vec{J}(\vec{r},t). \quad (2.5)$$

Отже, отримано рівняння дифузії домішкової речовини, подане через потоки маси. Зокрема, в одновимірному за просторовою координатою випадку рівняння (2.5) зведеться до наступного

$$\frac{\partial J(z,t)}{\partial t} = D(z) \frac{\partial^2 J(z,t)}{\partial z^2}. \quad (2.6)$$

Зазначимо, що оскільки на диференціальне рівняння (2.1) подіяли оператором $-\vec{\nabla}$, то його розв'язок можемо визначити з точністю до довільної функції f , яка задовольняє умову $\vec{\nabla}f = 0$. Крім того, рівняння (2.5) є справедливим для тіл як з детермінованою, так і з випадково неоднорідною багатофазною

структурою. Зокрема, рівняння (2.6) в одновимірному випадку описує випадкову функцію потоку в стохастично неоднорідному шаруватому середовищі [129].

2.1.2 Крайові умови першого роду в задачах на потік маси для шару

Нехай домішкова речовина дифундує у шарі товщини z_0 , що містить прошарки, розташування яких в області тіла є невідомими (рис. 2.1).

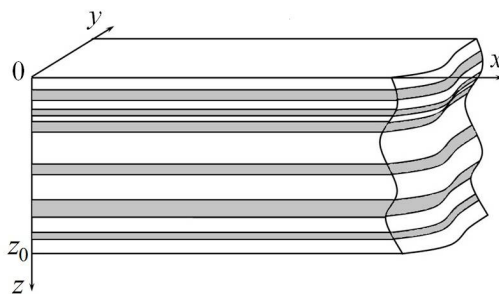


Рис. 2.1. Можлива реалізація випадково неоднорідної багатошарової смуги

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 частинок дорівнює нулю:

$$J(z, t)|_{t=0} = 0; \quad (2.7)$$

$$J(z, t)|_{z=0} = J_* \equiv const, \quad c(z, t)|_{z=z_0} = 0, \quad (2.8)$$

при цьому дифузійний потік на «нижній» межі є деякою функцією часу $F(t)$, яку необхідно визначити додатково:

$$J(z, t)|_{z=z_0} = F(t). \quad (2.9)$$

Дифузійний потік на границі $z = z_0$ – функцію $F(t)$ – будемо визначати з відповідної крайової задачі для концентрації мігруючої речовини.

Встановимо початкову умову на функцію концентрації домішкових частинок, еквівалентну початковій умові на потік цієї речовини (2.7).

Запишемо перший закон Фіка (2.4) для хімічного потенціалу $\mu(z, t)$ [92]

$$J(z, t) = -\tilde{L}(z) \frac{\partial \mu(z, t)}{\partial z}, \quad (2.10)$$

де $\tilde{L}(z)$ – кінетичний коефіцієнт переносу маси.

З урахуванням співвідношення (2.10) умову на потік (2.7) подамо так:

$$\left. \frac{\partial \mu(z, t)}{\partial z} \right|_{t=0} = 0,$$

звідки маємо

$$\mu(z, t)|_{t=0} = \mu_* \equiv \text{const}. \quad (2.11)$$

З достатньо загальних фізичних положень випливає, що зв'язок між хімічними потенціалами і концентраціями має логарифмічний характер [28, 92]

$$\mu(z, t) = \mu^0 + A \ln \gamma(z)c(z, t), \quad (2.12)$$

де μ^0 – хімічний потенціал для чистої речовини у стані, який заданий значенням абсолютної температури T і тиску P ;

$A = RT/M$ – коефіцієнт, в якому R – універсальна газова стала і M – атомна маса частинок домішкової речовини;

$\gamma(z)$ – коефіцієнт активності, який для двофазного тіла можна подати як

$$\gamma(z) = \begin{cases} \gamma_0, & z \in \Omega_0; \\ \gamma_1, & z \in \Omega_1, \end{cases} \quad (2.13)$$

тут Ω_j – область фази j ($j = \overline{0,1}$), $\sum_j \Omega_j = \Omega$,

де Ω – область всього тіла.

Якщо лінеаризувати співвідношення (2.12), то одержимо лінійну залежність хімічного потенціалу від концентрації у вигляді

$$\mu(z, t) = \mu^0 - A(1 - \gamma(z)c(z, t)). \quad (2.14)$$

З (2.14) знайдемо вираз для функції концентрації домішки

$$c(z, t) = \frac{1}{\gamma(z)} \left[1 + \frac{1}{A} (\mu(z, t) - \mu^0) \right].$$

Тоді в початковий момент часу для концентрації отримаємо

$$c(z, t)|_{t=0} = \frac{1}{\gamma(z)} \left[1 + \frac{1}{A} (\mu(z, t) - \mu^0)|_{t=0} \right],$$

зокрема, приймаючи умову (2.11), маємо:

$$c(z, t)|_{t=0} = \frac{1}{\gamma(z)} \left[1 + \frac{1}{A} (\mu_* - \mu^0) \right]. \quad (2.15)$$

Враховуючи подання (2.13), умову (2.15) записуємо у вигляді

$$c(z, t)|_{t=0} = \begin{cases} \left[1 + (\mu_* - \mu^0)/A \right] / \gamma_0, & z \in \Omega_0; \\ \left[1 + (\mu_* - \mu^0)/A \right] / \gamma_1, & z \in \Omega_1. \end{cases} \quad (2.16)$$

Позначимо $c_j^* = \left[1 + (\mu_* - \mu^0)/A \right] / \gamma_j$ ($j = \overline{0, 1}$). Тоді $c(z, t)|_{t=0} = \{c_j^* \equiv const, z \in \Omega_j\}$. Таким чином, ми отримали кусково-сталу функцію початкової концентрації, схематичне зображення якої наведено на рис. 2.2. Тут вздовж осі ординат відкладена функція $c(z, t)|_{t=0}$, вздовж осі абсцис – просторова координата z . Зауважимо, що на межах контакту областей Ω_j відбуваються стрибки концентрації домішки в початковий момент часу (рис. 2.2).

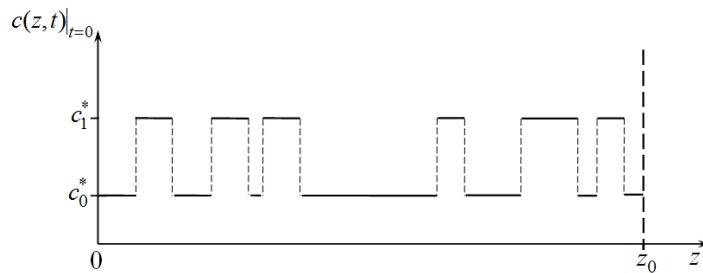


Рис. 2.2. Схематичний розподіл початкової концентрації у двофазному шаруватому тілі

Зазначимо, що величина $c(z, t)|_{t=0}$ може бути як випадковою, так і детермінованою залежно від стохастичності чи детермінованості області Ω . Надалі вважаємо, що розташування областей Ω_j є невідомим, тобто координати розташування підшарів є випадковими.

Якщо коефіцієнти активності в різних фазах є близькими, тобто можемо прийняти, що $\gamma_0 \approx \gamma_1 \equiv \gamma_*$, тоді $c_0^* \approx c_1^* \equiv c_*$ і умова (2.16) є наступною:

$$c(z, t)|_{t=0} = c_* \equiv const. \quad (2.17)$$

Надалі будемо розглядати початкову умову на функцію концентрації домішкової речовини у вигляді (2.17), причому виділяючи окремо випадок відсутності домішкової речовини у початковий момент часу в тілі:

$$c(z, t)|_{t=0} = 0. \quad (2.18)$$

Зауважимо, що у випадку дифузії в стохастично неоднорідних тілах початкова умова (2.16) є випадковою, і для побудови розв'язків крайових задач, в яких коефіцієнти диференціальних рівнянь та крайові умови є стохастичними, потрібно розробляти окрему теорію математичної фізики з використанням теорії випадкових полів.

2.2 Математичне моделювання дифузійних потоків домішки у двофазній смугі з випадково розташованим прошарком

2.2.1 Об'єкт дослідження та постановка крайової задачі

Розглянемо дифузію домішкових частинок у смугі з випадково розташованим прошарком. Вважаємо, що шар матеріалу основної (базової) фази з коефіцієнтом дифузії домішки D_0 містить прошарок, в якому коефіцієнт дифузії рівний D_1 (рис. 2.3). Припускаємо, що об'ємна частка базової фази v_0 набагато більша за об'ємну частку включення v_1 , що фази у тілі розташовані за рівномірним законом розподілу, а коефіцієнти дифузії є сталими у межах фаз.

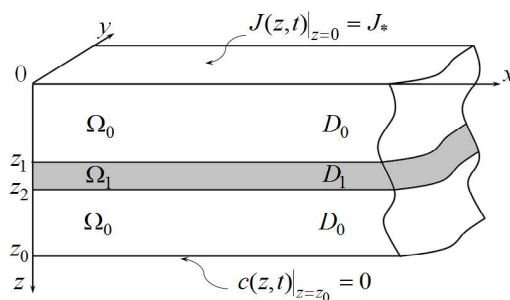


Рис. 2.3. Можлива реалізація структури двофазної смуги з випадково розташованим прошарком

Коефіцієнт дифузії у рівнянні (2.6) – випадкову функцію просторової координати – можна подати як

$$D(z) = \begin{cases} D_0, & z \in \Omega_0; \\ D_1, & z \in \Omega_1, \end{cases} \quad (2.19)$$

де $\Omega_0 =]0; z_1[\cup]z_2; z_0[$ – випадкова область, яку займає матриця,

$\Omega_1 =]z_1; z_2[$ – випадкова область включення,

z_1 і z_2 – випадкові координати меж включення (рис. 2.3).

Знайдемо розв'язок крайової задачі дифузії домішки у смузі з одним випадково розташованим прошарком (2.6)-(2.8) за нульової (2.18) та ненульової сталої (2.17) початкових концентрацій. Для цього введемо в розгляд випадкову функцію просторових координат типу одиничної сходиноквої функції Хевісайда [105] – випадкову «функцію структури»:

$$\eta_{ij}(z) = \begin{cases} 1, & z \in \Omega_{ij}; \\ 0, & z \notin \Omega_{ij}. \end{cases} \quad (2.20)$$

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 , для даної задачі $n_0 = 2, n_1 = 1$,

Ω_{ij} – i -та однозв'язна область j -ї фази.

Функція (2.20) задовольняє умову суцільності тіла [128]

$$\sum_{j,i} \eta_{ij}(z) = 1. \quad (2.21)$$

Коефіцієнт дифузії (2.19) подамо через «функцію структури» $\eta_{ij}(z)$ так

$$D(z) = \sum_{i=1}^2 D_0 \eta_{i0}(z) + D_1 \eta_1(z),$$

$$\text{де } \eta_{10}(z) = \begin{cases} 1, & z \in]0; z_1[; \\ 0, & z \notin]0; z_1[; \end{cases} \quad \eta_{20}(z) = \begin{cases} 1, & z \in]z_2; z_0[; \\ 0, & z \notin]z_2; z_0[; \end{cases}$$

$$\eta_1(z) = \begin{cases} 1, & z \in [z_1; z_2]; \\ 0, & z \notin [z_1; z_2]. \end{cases}$$

При цьому вибір номеру однозв'язної області матриці $i=1$ або $i=2$ є умовним, тобто можна їх позначити і навпаки.

Підставимо таке подання коефіцієнта дифузії у рівняння (2.6), маємо

$$\frac{\partial J(z, t)}{\partial t} - \left[\sum_{i=1}^2 D_0 \eta_{i0}(z) + D_1 \eta_1(z) \right] \frac{\partial^2 J(z, t)}{\partial z^2} = 0.$$

Введемо у розгляд наступні оператори

$$L(z, t) \equiv \frac{\partial}{\partial t} - \left[\sum_{i=1}^2 D_0 \eta_{i0}(z) + D_1 \eta_1(z) \right] \frac{\partial^2}{\partial z^2},$$

$$L_0(z, t) \equiv \frac{\partial}{\partial t} - D_0 \frac{\partial^2}{\partial z^2}. \quad (2.22)$$

З урахуванням умови суцільності тіла (2.21) рівняння (2.6) можна подати як

$$L_0(z, t)J(z, t) = [L_0(z, t) - L(z, t)]J(z, t). \quad (2.23)$$

Перепозначимо $L_s(z, t) \equiv L_0(z, t) - L(z, t)$, тобто

$$L_s(z, t) = (D_1 - D_0)\eta_1(z) \frac{\partial^2}{\partial z^2}. \quad (2.24)$$

Оскільки $L_s(z, t)$ не залежить від часу, то $L_s(z, t) \equiv L_s(z)$.

2.2.2 Еквівалентне інтегро-диференціальне рівняння

Розглядаючи неоднорідність структури тіла як внутрішні джерела, розв'язок крайової задачі (2.23), (2.7), (2.8) можна подати через суму розв'язку однорідної крайової задачі та згортки функції Гріна з джерелом:

$$J(z, t) = J_0(z, t) + \int_0^t \int_0^{z_0} G(z, z', t, t') L_s(z') J(z', t') dz' dt', \quad (2.25)$$

де $J_0(z, t)$ – розв'язок однорідної крайової задачі,

$G(z, z', t, t')$ – детермінована функція Гріна задачі (2.23), (2.7), (2.8).

Для знаходження потоку в однорідному шарі $J_0(z, t)$ спочатку потрібно визначити граничну умову для функції потоку на границі $z = z_0$, якщо на цій поверхні відоме значення концентрації.

Нехай коефіцієнт дифузії домішкової речовини приймає сталі значення, тоді крайова задача, сформульована для функції концентрації, має вигляд

$$\frac{\partial c(z, t)}{\partial t} = D_0 \frac{\partial^2 c(z, t)}{\partial z^2}; \quad (2.26)$$

$$c(z, t)|_{t=0} = 0; \quad \left. \frac{\partial c(z, t)}{\partial z} \right|_{z=0} = -\frac{J_*}{D_0} \equiv const, \quad c(z, t)|_{z=z_0} = 0. \quad (2.27)$$

Крайову задачу (2.26), (2.27) розв'язуємо за допомогою інтегральних перетворень Лапласа за часом [113] і наступного інтегрального перетворення за просторовою змінною [85]

$$\tilde{c}(\xi_n, s) = \int_0^{z_0} \bar{c}(z, s) \cos(\xi_n z) dz, \quad \bar{c}(z, s) = \frac{2}{z_0} \sum_{n=1}^{\infty} \tilde{c}(\xi_n, s) \cos(\xi_n z), \quad (2.28)$$

де s – параметр інтегрального перетворення Лапласа,

$$\xi_n = \pi(2n-1)/2z_0.$$

В результаті одержимо

$$c(z, t) = \frac{J_*}{D_0} \left(z_0 - z - \frac{2}{z_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-D_0 \xi_n^2 t} \cos(\xi_n z)}{\xi_n^2} \right). \quad (2.29)$$

За формулою (2.4) отримаємо вираз для потоку домішкових частинок

$$J_0(z, t) = J_* \left(1 - \frac{2}{z_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\xi_n} e^{-D_0 \xi_n^2 t} \sin(\xi_n z) \right). \quad (2.30)$$

Зокрема, вираз для потоку маси через границю шару $z = z_0$ (2.9) має вигляд

$$J_0(z, t)|_{z=z_0} = J_* \left(1 - \frac{2}{z_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\xi_n} (-1)^{n+1} e^{-D_0 \xi_n^2 t} \right). \quad (2.31)$$

Розглянемо тепер крайову задачу дифузії в шарі, сформульовану для функції потоку $J_0(z, t)$, якщо на границі шару $z = z_0$ концентрація частинок дорівнює нулю і, відповідно, для потоку виконується умова (2.31). На границі тіла $z = 0$ відоме стале значення потоку J_* , а в початковий момент часу потік дорівнює нулю, тобто

$$\frac{\partial J_0(z, t)}{\partial t} = D_0 \frac{\partial^2 J_0(z, t)}{\partial z^2}; \quad (2.32)$$

$$J_0(z, t)|_{t=0} = 0; \quad J_0(z, t)|_{z=0} = J_*, \quad J_0(z, t)|_{z=z_0} = F(t), \quad (2.33)$$

$$\text{де } F(t) = J_* \left(1 - \frac{2}{z_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\xi_n} (-1)^{n+1} e^{-D_0 \xi_n^2 t} \right).$$

До задачі (2.32), (2.33) застосуємо скінченне інтегральне sin-перетворення Фур'є [113] ($z \rightarrow y_k = \frac{k\pi}{z_0}$; $J_0(z, t) \rightarrow \bar{J}_0(y_k, t)$). Тоді одержимо

$$\frac{d\bar{J}_0(y_k, t)}{dt} = -D_0 y_k^2 \bar{J}_0(y_k, t) - (-1)^k D_0 y_k F(t) + D_0 y_k J_*, \quad (2.34)$$

$$\bar{J}_0(y_k, t)|_{t=0} = 0. \quad (2.35)$$

Розв'язок задачі (2.34), (2.35) має вигляд [54]

$$\frac{\bar{J}_0(y_k, t)}{J_*} = \left(1 - (-1)^k\right) \frac{1 - e^{-D_0 y_k^2 t}}{y_k} + (-1)^k y_k \frac{2}{z_0} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n+1} \frac{e^{-D_0 \xi_n^2 t} - e^{-D_0 y_k^2 t}}{\xi_n (y_k^2 - \xi_n^2)}. \quad (2.36)$$

Застосувавши до виразу (2.36) обернене sin-перетворення, отримаємо

$$\begin{aligned} \frac{J_0(z, t)}{J_*} = & \frac{2}{z_0} \sum_{k=1}^{\infty} \left[\frac{1 - (-1)^k}{y_k} \left(1 - e^{-D_0 y_k^2 t}\right) + \right. \\ & \left. + (-1)^k y_k \frac{2}{z_0} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n+1} \frac{e^{-D_0 \xi_n^2 t} - e^{-D_0 y_k^2 t}}{\xi_n (y_k^2 - \xi_n^2)} \right] \sin(y_k z). \end{aligned} \quad (2.37)$$

Після підсумовування [102] вираз (2.37) зведеться до форми

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

Зазначимо, що вираз для дифузійного потоку маси, одержаний з крайової задачі на концентрацію, співпадає з відповідним розв'язком крайової задачі, сформульованої для функції потоку маси.

Також зауважимо, що в стаціонарному випадку $\lim_{t \rightarrow \infty} c(z, t) = \frac{J_*}{D_0} (z_0 - z)$ (лінійний розподіл) і $\lim_{t \rightarrow \infty} J_0(z, t) = J_*$ (стале значення).

Розглянемо тепер випадок, коли в початковий момент часу в шарі відомий сталий ненульовий розподіл концентрації, а потік маси дорівнює нулю. Тоді початкова умова для функції концентрації має вигляд (2.17).

Крайову задачу дифузії (2.26), (2.27) з початковою умовою (2.17), сформульовану для функції концентрації, також розв'язуємо застосовуючи інтегральні перетворення Лапласа і (2.28) [85, 113]. Тоді отримаємо

$$c(z, t) = \frac{J_*}{D_0} (z_0 - z) - \frac{2}{z_0} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-D_0 \xi_n^2 t} \left(\frac{J_*}{D_0 \xi_n^2} + \frac{c_* (-1)^n}{\xi_n} \right) \cos(\xi_n z). \quad (2.38)$$

Для цього випадку за формулою (2.4) знайдемо вираз для потоку домішкових частинок

$$J_0(z, t) = J_* - \frac{2}{z_0} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-D_0 \xi_n^2 t} \left(\frac{J_*}{\xi_n} + D_0 c_* (-1)^n \right) \sin(\xi_n z). \quad (2.39)$$

Тоді вираз для потоку маси через границю шару $z = z_0$ (2.9) має вигляд

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

Якщо розглянемо крайову задачу дифузії в шарі, сформульовану для функції потоку маси, тобто шукана функція задовольняє рівняння (2.32) та крайові умови (2.33), де в якості функції $F(t)$ взято функцію

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

то отримаємо розв'язок крайової задачі (2.32), (2.33) у вигляді

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

Отже, і для цієї задачі вираз для потоку маси, одержаний з крайової задачі на концентрацію, співпадає з відповідним розв'язком крайової задачі, сформульованої для функції потоку маси.

В стаціонарному випадку для концентрації і потоків домішки відповідно маємо $\lim_{t \rightarrow \infty} c(z, t) = \frac{J_*}{D_0} (z_0 - z)$, $\lim_{t \rightarrow \infty} J_0(z, t) = J_*$. Зазначимо, що і концентрація і потік не залежать від значення концентрації в початковий момент часу.

На рис. 2.4 показана поведінка функцій $F(t)$ за нульової (рис. 2.4,а) і $\tilde{F}(t)$ за ненульової (рис. 2.4,б) концентрацій в початковий момент часу при різних значеннях $c_*/J_* = 0.1; 0.2; 0.3; 0.4; 0.5$ (криві 1-5, рис. 2.4,б) для безрозмірної часової змінної $\tau = D_0 t / z_0^2$ [77].

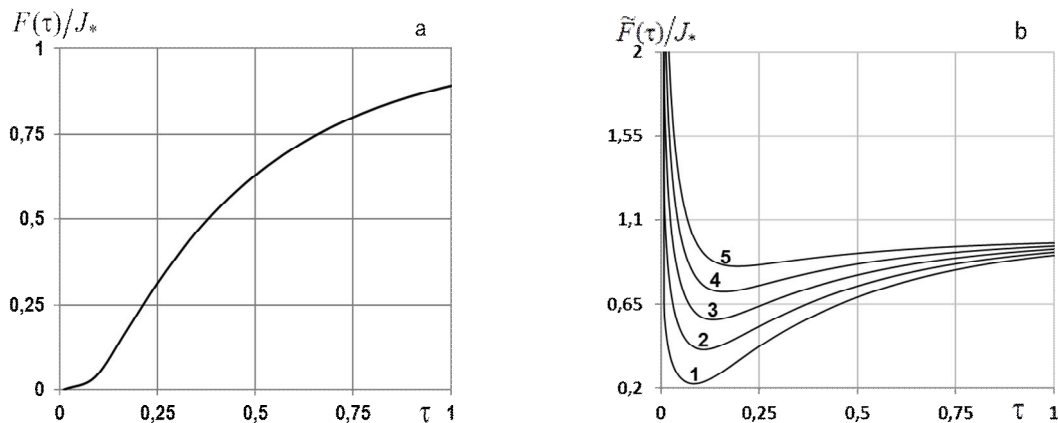


Рис. 2.4. Функція $F(\tau)/J_*$ для нульової (а) та $\tilde{F}(\tau)/J_*$ для ненульової початкової умови при різних значеннях відношення c_*/J_* (б)

Зазначимо, що за нульової початкової концентрації $F(t)$ є монотонно зростаючою функцією (рис. 2.4,а), а при деякій сталій ненульовій початковій концентрації функція $\tilde{F}(t)$ різко спадає і, досягаючи локальний мінімум, починає зростати. Крім того, чим більшим є значення відношення c_*/J_* , тим швидше функція $F(t)$ виходить на усталений режим (рис. 2.4,б).

Функція Гріна є розв'язком крайової задачі дифузії з точкового джерела за нульових початкових і граничних умов, тобто є розв'язком наступної крайової задачі:

$$\frac{\partial G(z, z', t, t')}{\partial t} - D_0 \frac{\partial^2 G(z, z', t, t')}{\partial z^2} = \delta(t - t') \delta(z - z'); \quad (2.40)$$

$$G(z, z', t, t')|_{t=0} = 0; \quad G(z, z', t, t')|_{z=0} = 0, \quad G(z, z', t, t')|_{z=z_0} = 0. \quad (2.41)$$

Застосовуючи до (2.40), (2.41) відповідні інтегральні перетворення та теорему запізнювання [116], функцію Гріна знайдемо у вигляді [128]

$$G(z, z', t, t') = \frac{\theta(t - t')}{z_0} \sum_{k=1}^{\infty} e^{-D_0 y_k^2 (t - t')} [\cos(y_k (z - z')) - \cos(y_k (z + z'))], \quad (2.42)$$

де $\theta(t - t')$ – одинична сходинова функція Хевісайда, $y_k = k\pi/z_0$.

Приклади поверхонь, які утворює функція Гріна (2.42), побудовані у безрозмірних змінних [77]

$$\zeta = z/z_0, \quad \tau = D_0 t/z_0^2, \quad (2.43)$$

наведені на рис. 2.5 в точках $(\zeta, \tau) = (0.0125; 0.125)$ (рис. 2.5,а), $(\zeta, \tau) = (0.6875; 0.625)$ (рис. 2.5,б), $(\zeta, \tau) = (0.6875; 1.375)$ (рис. 2.5,с) та $(\zeta, \tau) = (0.6875; 3.875)$ (рис. 2.5,д). Вздовж осі абсцис відкладена просторова координата ζ' , вздовж осі ординат – часова τ' .

Зазначимо, що для малих відхилень часу $\tau - \tau'$ характерний гострий пік функції Гріна (рис. 2.5,а), який з часом згладжується (рис. 2.5,б-д). Проте максимальних значень функція Гріна набуває для $\tau' \approx 13$, $\zeta' \approx 0.7$ (рис. 2.5,б).

Таким чином, вихідну крайову задачу дифузії зведено до еквівалентного інтегро- диференціального рівняння (2.25) з випадковим ядром, яке є рівнянням

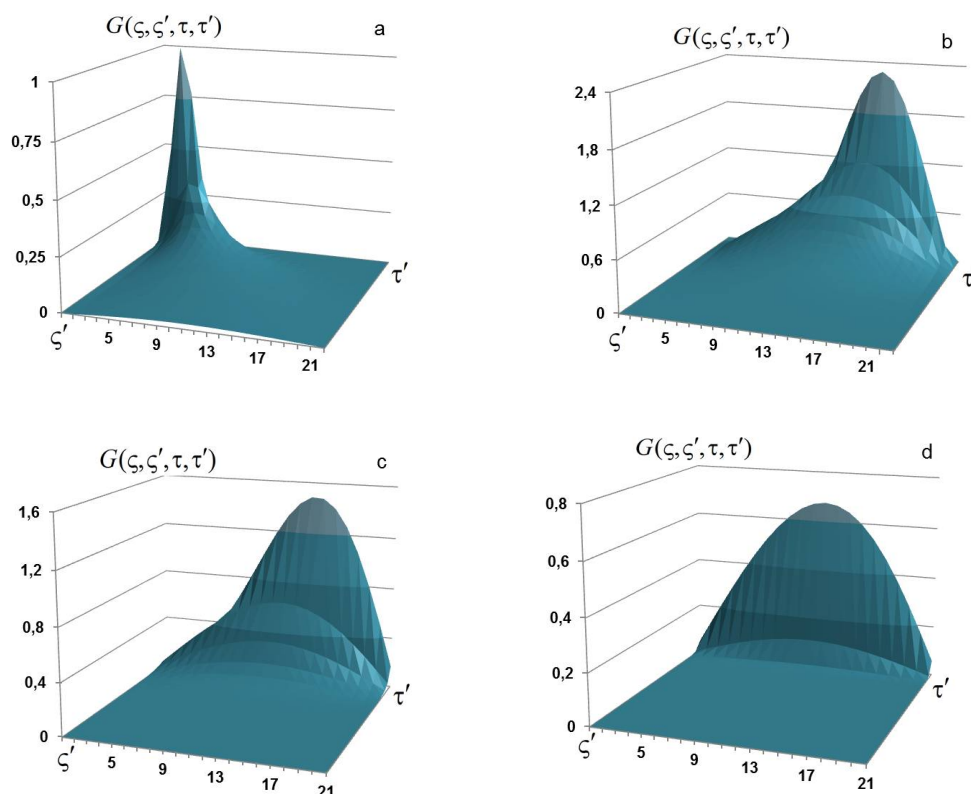


Рис. 2.5. Функція Гріна в точках $(\zeta, \tau)=(0.0125; 0.125)$ (a), $(\zeta, \tau)=(0.6875; 0.625)$ (b), $(\zeta, \tau)=(0.6875; 1.375)$ (c), $(\zeta, \tau)=(0.6875; 3.875)$ (d)

Вольтерра II-го роду за часом і Гаммерштейна за просторовою змінною [65] та містить дифузійний потік в однорідному шарі (2.30) або (2.39) і детерміновану функцію Гріна (2.42).

2.2.3 Ряд Неймана

Інтегро-диференціальне рівняння (2.25) розв'язуємо методом послідовних ітерацій [78, 104]. Щоб отримати першу ітерацію, запишемо значення функції потоку в точці (z', t') , оскільки рівняння (2.25) справедливе для всіх точок з області $\{t \in [0; \tau[, \tau < \infty; z \in [0; z_0]\}$, у тому числі і для $z = z', t = t'$. Таким чином

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

і підставивши цей вираз у праву частину рівняння (2.25), маємо:

$$J(z, t) = J_0(z, t) + \int_0^t \int_0^{z_0} G(z, z', t, t') L_s(z') \left[J_0(z', t') + \int_0^{t'} \int_0^{z_0} G(z', z'', t', t'') L_s(z'') \times \right.$$

$$\begin{aligned} & \times J_0(z'', t'') dz'' dt'' \Big] dz' dt' = J_0(z, t) + \int_0^t \int_0^{z_0} G(z, z', t, t') L_s(z') J_0(z', t') dz' dt' + \\ & + \int_0^t \int_0^{z_0} G(z, z', t, t') L_s(z') \left[\int_0^{t'} \int_0^{z_0} G(z', z'', t', t'') L_s(z'') J_0(z'', t'') dz'' dt'' \right] dz' dt'. \quad (2.44) \end{aligned}$$

Аналогічно для $z = z''$, $t = t''$ запишемо дифузійний потік $J(z'', t'')$ в точці (z'', t'') і підставляємо його у (2.44). Таким чином, одержимо другу ітерацію. Повторивши таку операцію нескінченну кількість разів, отримаємо нескінченний інтегральний ряд Неймана [78], а саме

$$\begin{aligned} J(z, t) = & J_0(z, t) + \int_0^t \int_0^{z_0} G(z, z', t, t') L_s(z') J_0(z', t') dz' dt' + \\ & + \int_0^t \int_0^{z_0} G(z, z', t, t') L_s(z') \left[\int_0^{t'} \int_0^{z_0} G(z', z'', t', t'') L_s(z'') J_0(z'', t'') dz'' dt'' \right] dz' dt' + \dots \quad (2.45) \end{aligned}$$

Зазначимо, що збіжність ряду (2.45) буде показана у п. 2.3.2 для більш загального випадку – багат шарового тіла.

2.2.4 Комп'ютерне моделювання концентрації та потоку маси в однорідному шарі

Дослідимо залежність концентрації дифундуючої речовини та дифузійного потоку в однорідному тілі від вхідних параметрів задачі за нульової та ненульової сталої початкових концентрацій [129]. Числові розрахунки для $c(\zeta, \tau)$ та $J(\zeta, \tau)$ проведено у безрозмірних змінних (2.43). На рис. 2.6 наведені розподіли концентрації (рис. 2.6,а) та потоку (рис. 2.6,б) за нульової початкової концентрації домішки у шарі, обчислені за формулами (2.29) та (2.30) відповідно, у різні моменти часу $\tau = 0.01; 0.05; 0.1; 0.5; 1$ (криві 1-5).

Зауважимо, що із збільшенням часу концентрація та потік домішкової речовини в шарі зростають, виходячи на стаціонарний режим. Причому, чим ближче τ наближається до $\tau_{стац}$, тим ближче розподіли концентрації та потоку наближаються до лінійних (рис. 2.6).

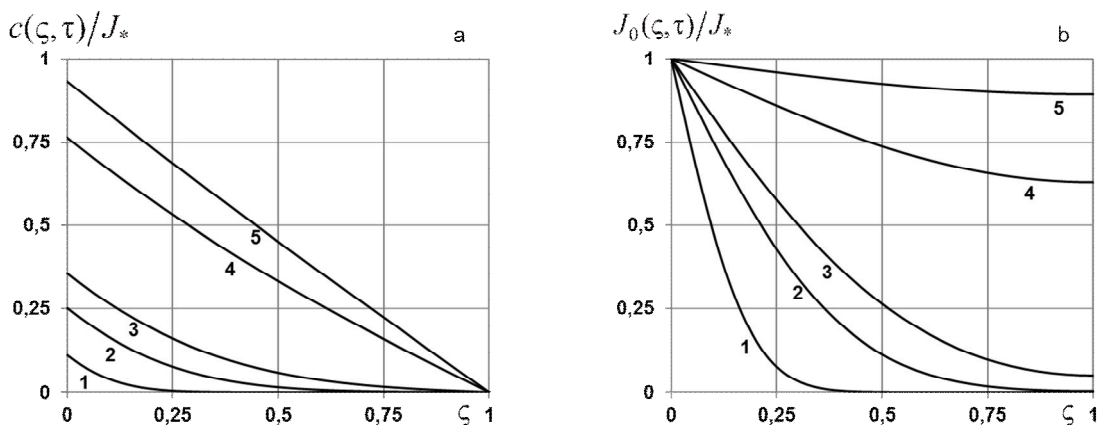


Рис. 2.6. Розподіли концентрації (а) та потоку (б) за нульової початкової умови в різні моменти часу

Рис. 2.7 ілюструє характерні розподіли $c(\zeta, \tau)$ за ненульової сталої початкової концентрації, обчислені за формулою (2.38), у різні моменти часу $\tau = 0.01$; 0.05 ; 0.1 ; 0.5 ; 1 (криві 1-5) при $c_*/J_* = 0.01$ (рис. 2.7,а) та $c_*/J_* = 1$ (рис. 2.7,б). Умова $c_*/J_* = 1$ означає, що розглядається випадок підтримання малих потоків домішки на границі шару J_* , оскільки з означення концентрації випливає, що $0 \leq J_* \leq 1$, а з означення концентрації домішкової речовини – $J_* \ll 1$.

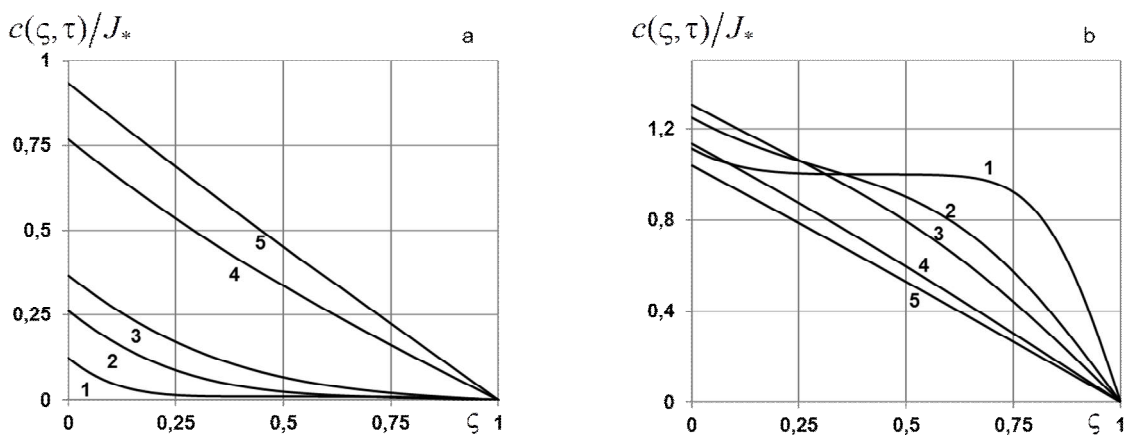


Рис. 2.7. Розподіли концентрації в шарі за ненульової початкової умови в різні моменти часу для $c_*/J_* = 0.01$ (а) та $c_*/J_* = 1$ (б)

На рис. 2.8 показані розподіли $c(\zeta, \tau)$ для різних значень відношення $c_*/J_* = 0.1$; 0.2 ; 0.3 ; 0.4 ; 0.5 (криві 1-5) в моменти часу $\tau = 0.01$ (рис. 2.8,а) та $\tau = 0.1$ (рис. 2.8,б). На рис. 2.9 та рис. 2.10 наведені розподіли дифузійних потоків в шарі. Рис. 2.9 демонструє залежність потоків маси від значення відношення $c_*/J_* = 0.1$; 0.2 ; 0.3 ; 0.4 ; 0.5 (криві 1-5) в моменти часу $\tau = 0.01$ (рис. 2.9,а) та $\tau = 0.1$ (рис. 2.9,б). На рис. 2.10 показано характерні розподіли потоків у різні

моменти часу $\tau = 0.01; 0.05; 0.1; 0.5; 1$ (криві 1-5) для $c_*/J_* = 0.1$ (рис. 2.10,а) і $c_*/J_* = 0.3$ (рис. 2.10,б).

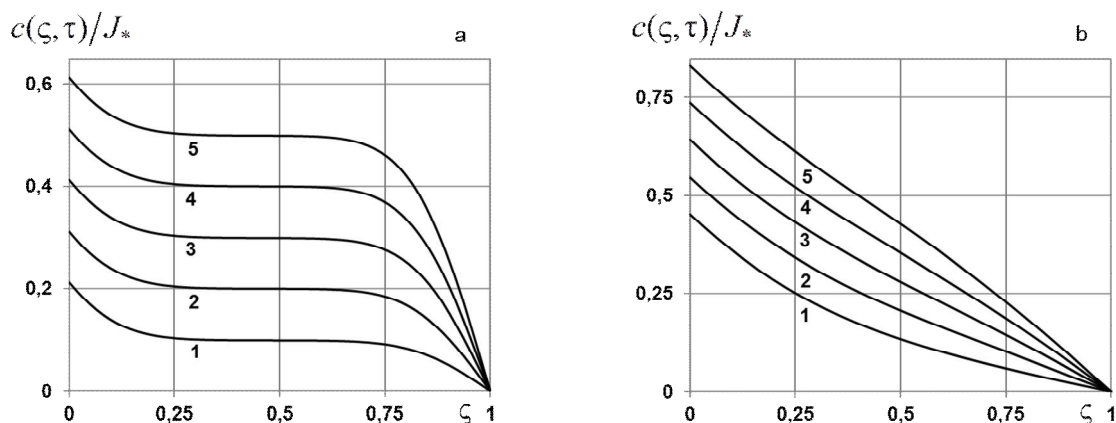


Рис. 2.8. Концентрація домішки в шарі для різних значень відношення c_*/J_* в моменти часу $\tau = 0.01$ (а) та $\tau = 0.1$ (б)

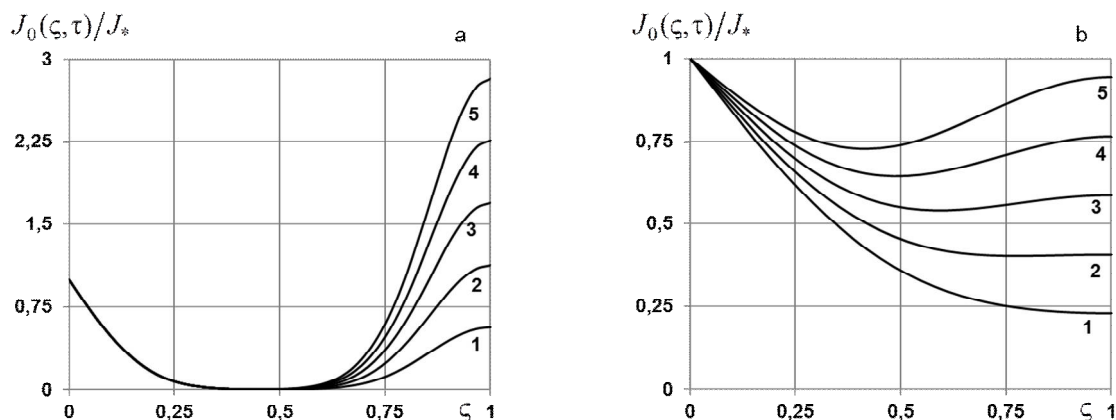


Рис. 2.9. Залежність потоків маси в шарі від значення відношення c_*/J_* в моменти часу $\tau = 0.01$ (а) та $\tau = 0.1$ (б)

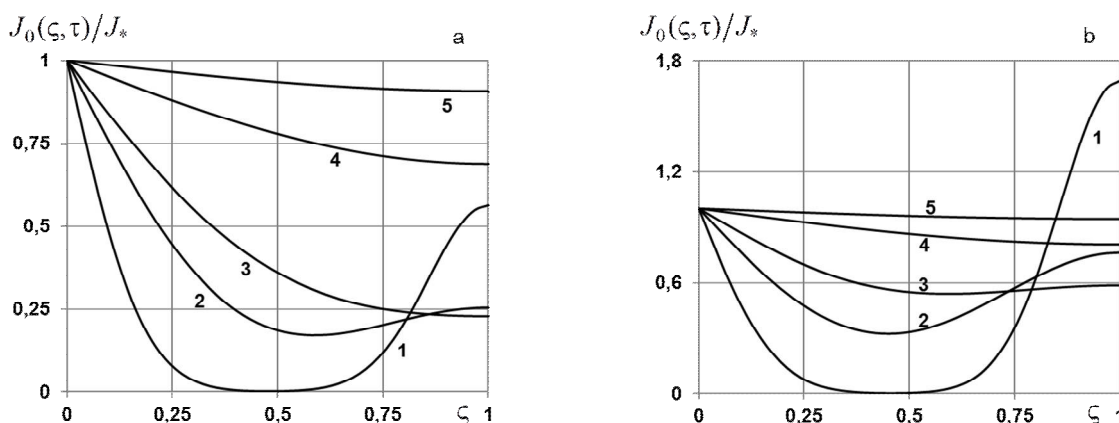


Рис. 2.10. Розподіли потоків маси в шарі в різні моменти часу для $c_*/J_* = 0.1$ (а) та $c_*/J_* = 0.3$ (б)

Зазначимо, що із зростанням часу протікання процесу для відношення $c_*/J_* = 0.01$ концентрація домішки в тілі зростає (рис. 2.7,а), доки не вийде на

усталений режим (крива 5, рис. 2.7,a). У випадку $c_*/J_*=1$ для малих часів, зокрема $\tau=0.01$, зберігається ділянка приблизно сталої концентрації $\zeta \in [0.15;0.65]$ (крива 1, рис. 2.7,b). Крім того, в приповерхневих областях ($\zeta = 0$), де діє джерело маси, спостерігається зростання концентрації при збільшенні часів в інтервалі $\tau \in]0;0.1]$ (криві 1-3, рис. 2.7,b), при подальшому збільшенні часу – концентрація зменшується (криві 4, 5, рис. 2.7,b).

Збільшення відношення c_*/J_* призводить до зростання концентрації домішки, а також дифузійного потоку в однорідній смузі (рис. 2.8 і 2.9), проте для малих часів, а саме для $\tau=0.01$, спостерігається наявність аналогічної ділянки сталої концентрації $\zeta \in [0.15;0.65]$ (рис. 2.8,a) та утворення максимуму (глобального) біля поверхні $\zeta = 1$ для дифузійного потоку (рис. 2.9,a).

Відзначимо, що збільшення часу протікання процесу призводить до збільшення потоку в однорідному тілі (рис. 2.10) до виходу на усталений режим (криві 5, рис. 2.10). Крім того, для малих часів максимум біля поверхні $\zeta = 1$ є тим більший, чим більше відношення c_*/J_* (криві 1, рис. 2.10), зокрема, збільшення відношення c_*/J_* з 0.1 до 0.3 призводить до зростання максимуму дифузійного потоку приблизно у три рази.

2.2.5 Усереднення стохастичного дифузійного потоку за ансамблем конфігурацій фаз

Усереднимо за ансамблем конфігурацій фаз з рівномірною функцією розподілу потік мігруючої речовини в шарі з випадково розташованим прошарком товщини h , причому $h = z_2 - z_1$ (рис. 2.3). При усередненні обмежимося двома першими членами ряду Неймана (2.45)

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

Прошарок у тілі розташований за рівномірним законом розподілу, а випадковою координатою, яка характеризує положення включення, є координата «верхньої» межі прошарку z_1 . Тоді

$$\langle J(z, t) \rangle_{conf} = \langle J_0(z, t) \rangle + \left\langle \int_0^t \int_0^{z_0} G(z, z', t, t') L_s(z') J_0(z', t') dz' dt' \right\rangle_{conf}. \quad (2.46)$$

Оскільки $J_0(z, t)$ є детермінованою функцією, а у підінтегральному виразі (2.46) від випадкової координати (межі прошарку z_1) залежить тільки функція $\eta_1(z')$ в операторі $L_s(z')$, то

$$\langle J_0(z, t) \rangle_{conf} = J_0(z, t), \quad (2.47)$$

$$\langle L_s(z') \rangle_{conf} = (D_1 - D_0) \langle \eta_1(z') \rangle_{conf} \frac{\partial^2}{\partial z'^2}, \quad (2.48)$$

зокрема, для рівномірного розподілу маємо

$$\langle \eta_1(z') \rangle_{conf} = \frac{1}{V} \int_{(V)} \eta_1(z') dz_1. \quad (2.49)$$

Враховуючи, що [128]

$$\eta_1(z') = \begin{cases} 1, & z' \in [z_1; z_1 + h] \\ 0, & z' \notin [z_1; z_1 + h] \end{cases} = \begin{cases} 1, & z' - z_1 \in [0; h] \\ 0, & z' - z_1 \notin [0; h] \end{cases} = \eta_1(z' - z_1),$$

та використовуючи в інтегралі (2.49) заміну змінних $z' - z_1 = x$, запишемо

$$\frac{1}{V} \int_{(V)} \eta_1(z') dz_1 = \frac{1}{V} \int_0^{z_0} \eta_1(z' - z_1) dz_1 = \frac{1}{V} \int_{z'-z_0}^{z'} \eta_1(x) dx = \frac{1}{V} \int_0^{z'} \eta_1(x) dx, \quad (2.50)$$

оскільки $\eta_1(x) = \begin{cases} 1, & x \in [0; h] \\ 0, & x \notin [0; h] \end{cases}$ Зауважимо, що змінна зовнішнього інтегрування

z' приймає значення від 0 до z_0 , тоді можливі такі два випадки:

$$1) \text{ якщо } z' \leq h, \text{ то } \frac{1}{V} \int_0^{z'} \eta_1(x) dx = \frac{1}{V} \int_0^{z'} dx = \frac{z'}{V} = \frac{z'}{V} \cdot \frac{h}{h} = \frac{v_1 z'}{h};$$

$$2) \text{ якщо } z' \geq h, \text{ то } \frac{1}{V} \int_0^{z'} \eta_1(x) dx = \frac{1}{V} \int_0^h dx = \frac{h}{V} = v_1.$$

$$\text{Таким чином, } \langle \eta_1(z') \rangle_{conf} = \begin{cases} \frac{v_1 z'}{h}, & z' \leq h; \\ v_1, & z' \geq h. \end{cases}$$

Підставимо отримані вирази у (2.46). Тоді маємо

$$\langle J(z, t) \rangle_{conf} = J_0(z, t) + (D_1 - D_0) \int_0^t \left[\frac{v_1}{h} \int_0^h z' G(z, z', t, t') \frac{\partial^2 J_0(z', t')}{\partial z'^2} dz' + \right.$$

$$+ v_1 \int_h^{z_0} G(z, z', t, t') \frac{\partial^2 J_0(z', t')}{\partial z'^2} dz' \Big] dt'. \quad (2.51)$$

Отже, ми одержали формулу для знаходження усередненого за ансамблем конфігурацій фаз дифузійного потоку домішки у смузі з прошарком за рівномірного розподілу фаз в області тіла.

Підставляючи у (2.51) функцію Гріна (2.42) та вираз (2.30) для потоку маси в однорідній смузі при нульовій початковій умові на функцію концентрації, отримаємо наступну розрахункову формулу:

$$\begin{aligned} \frac{1}{J_*} \langle J(z, t) \rangle_{conf} = & 1 - \frac{2}{z_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\xi_n} e^{-D_0 \xi_n^2 t} \sin(\xi_n z) + \\ & + \frac{2v_1(D_1 - D_0)}{D_0 z_0^2} \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\xi_n A_{kn}}{y_k^2 - \xi_n^2} \left[e^{-D_0 \xi_n^2 t} - e^{-D_0 y_k^2 t} \right] \sin(y_k z). \end{aligned} \quad (2.52)$$

$$\text{Тут } A_{kn} = \frac{\cos[(y_k - \xi_n)h]}{h(y_k - \xi_n)^2} - \frac{\cos[(y_k + \xi_n)h]}{h(y_k + \xi_n)^2} - \frac{4y_k \xi_n}{h(y_k^2 - \xi_n^2)^2} + (-1)^{k+n} \frac{2y_k}{y_k^2 - \xi_n^2}.$$

Для випадку, коли у початковий момент часу відомий сталий ненульовий розподіл концентрації у смузі, підставимо вираз (2.39) для $J_0(z, t)$ у співвідношення (2.51), тоді одержимо

$$\begin{aligned} \frac{1}{J_*} \langle J(z, t) \rangle_{conf} = & 1 - \frac{2}{z_0} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-D_0 \xi_n^2 t} \left(\frac{1}{\xi_n} + (-1)^n D_0 \frac{c_*}{J_*} \right) \sin(\xi_n z) + \\ & + \frac{2v_1(D_1 - D_0)}{D_0 z_0^2} \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\xi_n A_{kn}}{y_k^2 - \xi_n^2} \left(1 + (-1)^n D_0 \frac{c_*}{J_*} \xi_n \right) \left[e^{-D_0 \xi_n^2 t} - e^{-D_0 y_k^2 t} \right] \sin(y_k z). \end{aligned} \quad (2.53)$$

Таким чином, в залежності від початкової умови для концентрації, одержано розрахункові формули для усередненого за ансамблем конфігурацій фаз потоку домішкової речовини у смузі з випадково розташованим прошарком за рівномірного розподілу розташування прошарку в області тіла.

2.2.6 Числовий аналіз усереднених дифузійних потоків

На основі знайдених розрахункових формул (2.52) та (2.53) проведемо числовий аналіз усереднених дифузійних потоків. Числові розрахунки проведе-

но у безрозмірних змінних (2.43). В якості параметрів числового дослідження прийнято такі значення $\tau = 0.1$; $D_1 / D_0 = 0.01$; $h = 0.1$; $c_* / J_* = 0.1$. На рис. 2.11 наведені розподіли потоків маси у смузі за нульової початкової умови на концентрацію, обчислені за формулою (2.52), у різні моменти безрозмірного часу $\tau = 0.01$; 0.1; 0.5; 1; 1.5 (криві 1-5, рис. 2.11,a) та при різних значеннях товщини прошарку $h = 0.01$; 0.05; 0.1; 0.2 (криві 1-4, рис. 2.11,b). Криві 1a-4a (рис. 2.11,b) побудовані для відношення коефіцієнтів дифузії $D_1 / D_0 = 5$. Штриховою лінією позначено відповідні потоки в однорідному шарі з характеристиками матриці.

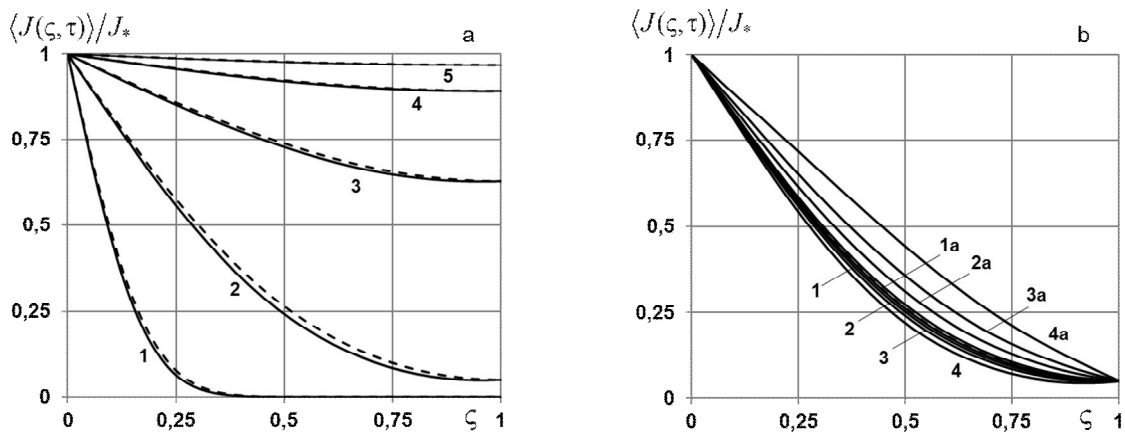


Рис. 2.11. Розподіли потоків маси у смузі за нульової початкової концентрації для різних часів (a) та при різних значеннях товщини прошарку (b)

Рис. 2.12 ілюструє розподіли потоків маси у випадку ненульової початкової умови на концентрацію домішкової речовини у різні моменти безрозмірного часу $\tau = 0.01$; 0.03; 0.05; 0.1; 0.5; 1 (криві 1-6, рис. 2.12,a) і при різних значеннях відношення початкової концентрації і потоку на «верхній» границі шару $c_* / J_* = 0.1$; 0.2; 0.3; 0.4; 0.5 (криві 1-5, рис. 2.12,b) для $D_1 / D_0 = 0.01$. На рис. 2.13 наведено потоки домішки для різних значень відношення коефіцієнтів дифузії $D_1 / D_0 = 0.01$; 0.5; 2; 3; 5 (криві 1-5, рис. 2.13,a) і товщини випадково розташованого прошарку $h = 0.01$; 0.05; 0.1; 0.2 (криві 1-4, рис. 2.13,b). Криві 1a-4a на рис. 2.13,b побудовані для значення відношення коефіцієнтів дифузії $D_1 / D_0 = 5$.

Зазначимо, що за нульової початкової концентрації частинок в шарі розподіли потоків завжди є монотонно спадними функціями (рис. 2.11), проте їхні значення з часом зростають в усій області тіла (рис. 2.11,a), доки не вийдуть на усталений режим ($\lim_{\tau \rightarrow \infty} J(\zeta, \tau) = J_*$ для $\forall \zeta \in [0;1]$). Причому, якщо коефіцієнт

дифузії у прошарку є меншим ніж у матриці, то потік в неоднорідному тілі є меншим ніж в однорідному. У протилежному випадку потік у смузі з прошарком є більшим, ніж в однорідному шарі (криві 1-4 і криві 1a-4a, рис. 2.11,b).

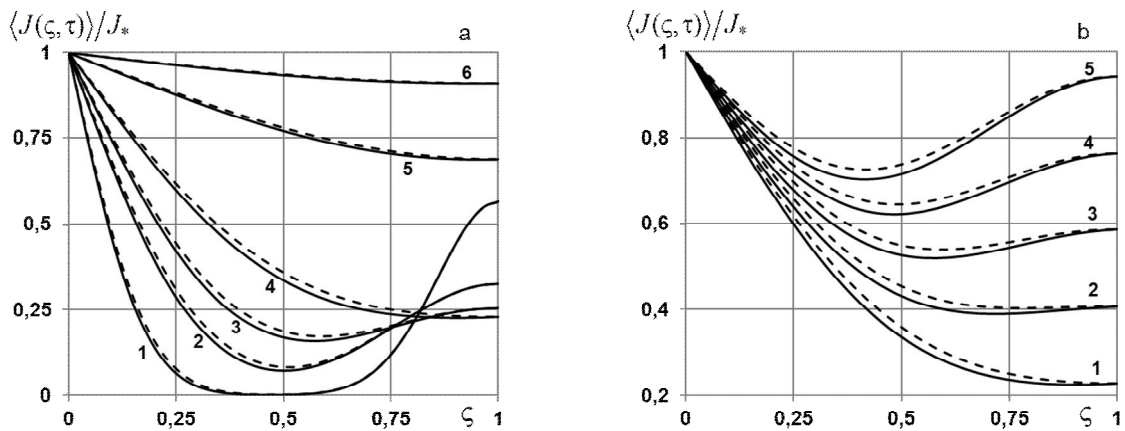


Рис. 2.12. Розподіли потоків маси за ненульової початкової концентрації в різні моменти часу (а) та при різних значеннях відношення c_*/J_* (б)

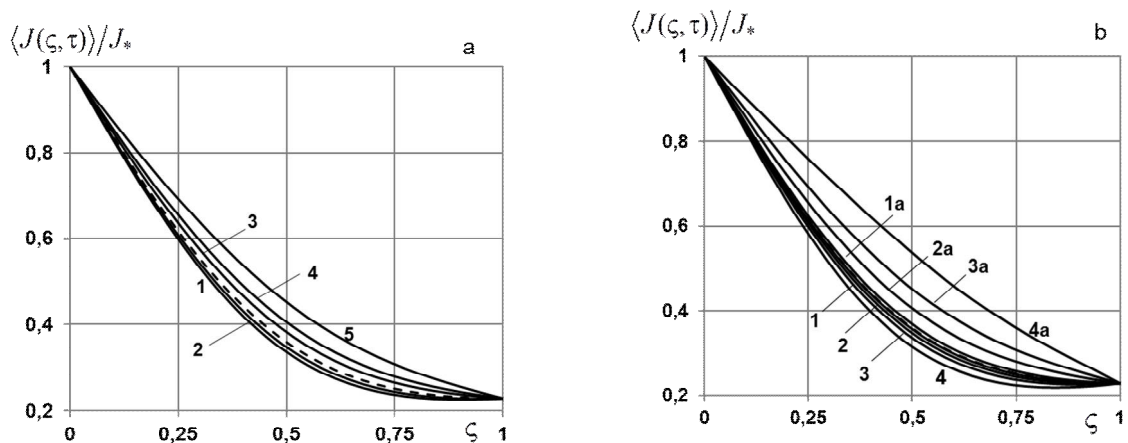


Рис. 2.13. Розподіли потоків маси у смузі за ненульової початкової концентрації при різних значеннях D_1/D_0 (а) та h (б)

Збільшення товщини прошарку для $D_1 < D_0$ веде до зменшення значень потоку маси, а для $D_1 > D_0$ потік у смузі з прошарком зростає і наближається до лінійного розподілу. Також зауважимо, що на границях шару потоки в однорідному і неоднорідному шарах співпадають.

У випадку ненульового сталого початкового розподілу концентрації домішки в шарі для малих часів поведінка функції потоку суттєво відрізняється від випадку нульової початкової концентрації. Потік від поверхні тіла $\zeta = 0$ спадає, в середині шару є нульовим (або близьким до нуля) і різко зростає біля границі $\zeta = 1$ (крива 1, рис. 2.12,a), що пояснюється необхідністю забезпечення

умови $c(\zeta, \tau)|_{\zeta=1} = 0$. З часом значення потоку в околі цієї поверхні зменшується, також зменшується інтервал нульових значень потоку в середині шару. Зауважимо, що значення початкової концентрації суттєво впливає і на поведінку і на значення функції потоку маси. Так, для малих відношень c_*/J_* для $D_1 < D_0$ потік як в однорідному шарі, так і у смузі з прошарком, є монотонно спадною функцією (криві 4-6, рис. 2.12,a і крива 1, рис. 2.12,b). Зі збільшенням початкової концентрації c_* потік біля поверхні шару $\zeta = 1$ зростає, що може призвести до появи локального мінімуму в середині шару (криві 4, 5, рис. 2.12,b).

Як і у випадку нульової початкової концентрації в тілі, для ненульового розподілу потік у смузі з прошарком є меншим, ніж в однорідному шарі для $D_1 < D_0$ і більшим за $J_0(\zeta, \tau)$ на всьому проміжку для $D_1 > D_0$ (рис. 2.13,a). У той же час значення товщини випадково розташованого прошарку впливає тільки на кількісні характеристики розподілів дифузійного потоку, не змінюючи поведінки функції $\langle J(\zeta, \tau) \rangle / J_*$ (рис. 2.13,b).

2.3 Моделювання дифузійних потоків у двофазній випадково неоднорідній багат шаровій смузі з рівномірним розподілом фаз

2.3.1 Постановка крайової задачі

Розглянемо випадок дифузії домішкової речовини у двофазній багат шаровій смузі, яка складається з n_0 підшарів фази $j = 0$ (матриця) та n_1 підшарів фази $j = 1$ (включення). Припускаємо, що об'ємна частка матриці v_0 набагато перевищує об'ємну частку включення: $v_0 \gg v_1$, а коефіцієнт дифузії домішки є сталим у межах кожної з фаз, тобто його можна подати у вигляді (2.19) з від-

повідними областями $\Omega_j = \bigcup_{i=1}^{n_j} \Omega_{ij}$ ($j = \overline{0,1}$, $i = \overline{1, n_j}$). Як і у попередньому випад-

ку, координати розташування підшарів є невідомими, при цьому приймаємо, що прошаки у тілі розташовані за рівномірним законом розподілу. Одна з можливих реалізацій двофазної багат шарової структури наведена на рис 2.14.

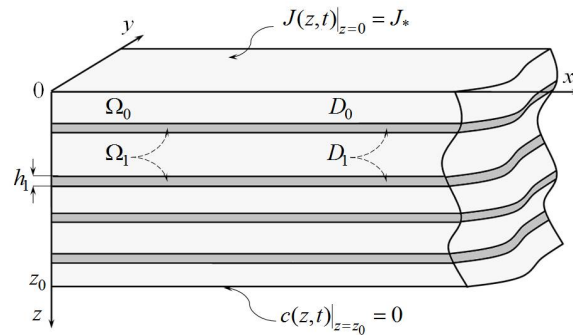


Рис. 2.14. Можлива реалізація двофазної багатошарової смуги з рівномірним розподілом фаз

Випадковий потік домішкової речовини $J(z,t)$ в багатошаровій смугі описується рівнянням (2.6). На поверхні тіла $z=0$ підтримується сталий дифузійний потік J_* , а на границі $z=z_0$ приймаємо, що концентрація є нульовою (рис. 2.14), тобто виконуються граничні умови (2.8). Розглянемо нульову початкову умову на потік домішки (2.7) за нульової (2.18) та ненульової сталої (2.17) початкових концентрацій.

Для побудови розв'язку крайової задачі (2.6)-(2.8) з випадковим коефіцієнтом дифузії подамо його через випадкову «функції структури» (2.20), де $i = \overline{1, n_j}$, $j = 0; 1$. Тоді коефіцієнт дифузії домішки $D(z)$ набуває вигляду

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

При цьому $\sum_{i=1}^{n_0} \eta_{i0}(z) + \sum_{i=1}^{n_1} \eta_{i1}(z) = 1$.

Підставивши таке подання коефіцієнта $D(z)$ у рівняння (2.6), одержимо:

$$\frac{\partial J(z,t)}{\partial t} - \left(\sum_{i=1}^{n_0} D_0 \eta_{i0}(z) + \sum_{i=1}^{n_1} D_1 \eta_{i1}(z) \right) \frac{\partial^2 J(z,t)}{\partial z^2} = 0. \quad (2.54)$$

В отриманому рівнянні додамо і віднімемо детермінований оператор $L_0(z,t)$ (2.22). Тоді, позначивши оператори рівняння (2.54)

$$L(z,t) \equiv \frac{\partial}{\partial t} - \left(\sum_{i=1}^{n_0} D_0 \eta_{i0}(z) + \sum_{i=1}^{n_1} D_1 \eta_{i1}(z) \right) \frac{\partial^2}{\partial z^2}, \quad L_0(z,t) \equiv \frac{\partial}{\partial t} - D_0 \frac{\partial^2}{\partial z^2}$$

та врахувавши умову суцільності тіла (2.21), одержимо

$$L_0(z, t)J(z, t) = L_s(z, t)J(z, t), \quad (2.55)$$

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

Розв'язок крайової задачі (2.55), (2.7), (2.8) шукатимемо у вигляді ряду Неймана.

2.3.2 Еквівалентне інтегро-диференціальне рівняння. Ряд Неймана

Розглядаючи праву частину рівняння (2.55) як джерело, розв'язок задачі (2.55), (2.7), (2.8) подамо через згортку функції Гріна з джерелом:

$$J(z, t) = J_0(z, t) + \int_0^t \int_0^{z_0} G(z, z', t, t') L_s(z') J(z', t') dz' dt', \quad (2.56)$$

де $J_0(z, t)$ – розв'язок однорідної крайової задачі, що задається співвідношенням (2.30) у випадку нульової початкової концентрації домішки в тілі та формулою (2.39) у випадку сталої ненульової початкової концентрації;

$G(z, z', t, t')$ – функція Гріна задачі (2.55), (2.7), (2.8), а саме вираз (2.42).

Розв'язок інтегро-диференціального рівняння (2.56) з випадковим ядром шукаємо методом послідовних наближень [65]. В якості нульового наближення $J^{(0)}(z, t)$ приймаємо розв'язок однорідної крайової задачі $J^{(0)}(z, t) = J_0(z, t)$. Тоді отримаємо наступні рекурентні співвідношення:

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

...

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

....

Оскільки функція $J_0(z, t)$ є неперервно диференційованою, то при дії на неї оператора $L_s(z)$ одержимо вираз

$$L_s(z)J_0(z, t) = (D_1 - D_0) \sum_{i=1}^{n_1} \eta_{i1}(z) \frac{\partial^2 J_0(z, t)}{\partial z^2}. \quad (2.57)$$

Загальний член побудованої послідовності функцій $J^{(0)}, J^{(1)}, \dots, J^{(n)}, \dots$

можна подати так

$$J^{(n)}(z, t) = J_0(z, t) + \int_0^t \int_0^{z_0} G(z, z', t, t') L_s(z') J_0(z', t') dz' dt' + \dots + \int_0^t \int_0^{z_0} G(z, z', t, t') L_s(z') \times \\ \times \left[\int_0^{t'} \int_0^{z_0} G(z', z'', t', t'') L_s(z'') \times \dots \times \int_0^{t^{(n-2)}} \int_0^{z_0} G(z^{(n-2)}, z^{(n-1)}, t^{(n-2)}, t^{(n-1)}) L_s(z^{(n-1)}) \times \right. \\ \left. \times J_0(z^{(n-1)}, t^{(n-1)}) dz^{(n-1)} dt^{(n-1)} \dots \right] dz' dt' + R_n(z, t),$$

де $R_n(z, t)$ – визначає різницю між n -м та $(n-1)$ -м членами цієї послідовності, тобто

$$R_n(z, t) = \int_0^t \int_0^{z_0} G(z, z', t, t') L_s(z') \int_0^{t'} \int_0^{z_0} G(z', z'', t', t'') L_s(z'') \dots \times \\ \times \int_0^{t^{(n-1)}} \int_0^{z_0} G(z^{(n-1)}, z^{(n)}, t^{(n-1)}, t^{(n)}) L_s(z^{(n)}) J_0(z^{(n)}, t^{(n)}) dz^{(n)} dt^{(n)} \dots dz' dt'.$$

Поставимо у відповідність побудованій послідовності функцій ряд:

$$J(z, t) \equiv J_0(z, t) + \sum_{n=1}^{\infty} R_n(z, t). \quad (2.58)$$

Зазначимо, що цей ряд є рядом Неймана [62, 65].

Твердження 2.1. 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) $|L_s(z)J_0(z, t)| \leq K_3 < \infty, \quad \forall z \in [0, z_0], \quad \forall t \in [0, \bar{t}]. \quad (2.59)$

Д о в е д е н н я 1. Спочатку покажемо виконання нерівності 1. Загальний член ряду (2.42) в області $[0, z_0] \cup [[0, \bar{t}] \cap \{t = t'\}]$ можна оцінити так

$$\left| e^{-D_0 y_k^2 (t-t')} \sin y_k z' \sin y_k z \right| \leq e^{-D_0 y_k^2 (t-t')}.$$

Ряд $\sum_{k=1}^{\infty} e^{-D_0 y_k^2 (t-t')}$ є абсолютно збіжним за ознакою Даламбера [68], тоді за

ознакою Вейерштраса ряд $\sum_{k=1}^{\infty} e^{-D_0 y_k^2 (t-t')} \sin y_k z' \sin y_k z$ є абсолютно і рівномірно

збіжним, а отже абсолютно і рівномірно збіжною є послідовність його часткових сум. Крім того, цей ряд є обмеженим, оскільки збіжна послідовність у метричному просторі є обмеженою [68]. Тобто функція $g(z, z', t, t') =$

$$= \sum_{k=1}^{\infty} e^{-D_0 y_k^2 (t-t')} [\cos(y_k (z - z')) - \cos(y_k (z + z'))] \text{ є обмеженою для } \forall z, z' \in [0, z_0],$$

$\forall t, t' \in [0, \bar{\tau}]$ крім точки $t = t'$. Оскільки $\theta(t - t') \leq 1$ для $\forall t, t'$ тоді функція $G(z, z', t, t')$ є також обмеженою для $\forall z, z' \in [0, z_0], \forall t, t' \in [0, \bar{\tau}]$ крім точки $t = t'$.

Покажемо обмеженість функції $g(z, z', t, t')$ у точці $t = t'$, для цього використаємо властивість, що неперервна функція є обмеженою на замкненому інтервалі [68], і покажемо, що функція $g(z, z', t, t')$ в області $[0, z_0] \cup \cup [[0, \bar{\tau}] \cap \{t = t'\}]$ є неперервною функцією своїх аргументів.

З означення неперервності функції в точці: для $\forall \varepsilon > 0, \exists \delta > 0$ таке, що з умови $\forall t : |t - t'| < \delta$ випливає $|g(z, z', t, t') - g(z, z', t', t')| < \varepsilon$.

Використаємо відомий ряд [102]

$$\sum_{k=1}^{\infty} \frac{k}{k^2 + a^2} \sin kx = \frac{\pi \operatorname{sh}(\pi - x)a}{2 \operatorname{sh} \pi a}.$$

Продиференціювавши це співвідношення за змінною x , одержимо

$$\sum_{k=1}^{\infty} \frac{k^2}{k^2 + a^2} \cos kx = -\frac{\pi a \operatorname{ch}(\pi - x)a}{2 \operatorname{sh} \pi a}. \quad (2.60)$$

Враховуючи (2.60) та наступну нерівність [116]

$$e^z < (1 - z)^{-1} \quad (z < 1), \quad (2.61)$$

маємо

$$\begin{aligned} |g(z, z', t, t') - g(z, z', t', t')| &< \frac{1}{z_0} \left| \sum_{k=1}^{\infty} \cos y_k (z - z') \left[\frac{1}{1 + D_0 y_k^2 \delta} - 1 \right] \right| + \\ &+ \frac{1}{z_0} \left| \sum_{k=1}^{\infty} \cos y_k (z + z') \left[\frac{1}{1 + D_0 y_k^2 \delta} - 1 \right] \right| = \frac{1}{z_0} \left| \sum_{k=1}^{\infty} \cos k \frac{\pi(z - z')}{z_0} \left[-\frac{k^2}{k^2 + z_0^2 / D_0 \pi^2 \delta} \right] \right| + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{1}{z_0} \left| \sum_{k=1}^{\infty} \cos k \frac{\pi(z+z')}{z_0} \left[-\frac{k^2}{k^2 + z_0^2/D_0\pi^2\delta} \right] \right| = \frac{1}{z_0} \left| \frac{\operatorname{ch}\left(\frac{z_0}{\sqrt{D_0\delta}} - \frac{(z+z')}{\sqrt{D_0\delta}}\right)}{2\sqrt{D_0\delta} \operatorname{sh}\left(\frac{z_0}{\sqrt{D_0\delta}}\right)} \right| + \\
& + \frac{1}{z_0} \left| \frac{\operatorname{ch}\left(\frac{z_0}{\sqrt{D_0\delta}} - \frac{(z+z')}{\sqrt{D_0\delta}}\right)}{2\sqrt{D_0\delta} \operatorname{sh}\left(\frac{z_0}{\sqrt{D_0\delta}}\right)} \right| \leq \frac{1}{\sqrt{D_0\delta}} \operatorname{ch}\left(\frac{z_0}{\sqrt{D_0\delta}}\right) \operatorname{cth}\left(\frac{z_0}{\sqrt{D_0\delta}}\right) = \varepsilon.
\end{aligned}$$

Отже для довільного заданого ε існує таке значення δ , що є розв'язком наступного рівняння

$$\frac{1}{\sqrt{D_0\delta}} \operatorname{ch}\left(\frac{z_0}{\sqrt{D_0\delta}}\right) \operatorname{cth}\left(\frac{z_0}{\sqrt{D_0\delta}}\right) = \varepsilon.$$

Тобто функція $g(z, z', t, t')$ є неперервною, а отже і обмеженою в точці $t = t'$.

Оскільки $G(z, z', t, t') \leq g(z, z', t, t')$, тоді існує така стала K_1 , що $|G(z, z', t, t')| \leq K_1$ для $\forall z, z' \in [0, z_0]$, $\forall t' \in [0, t]$, $\forall t \in [0, \bar{t}]$ ($\bar{t} < \infty$).

2. Спочатку покажемо обмеженість функції $|L_s(z)G(z, z', t, t')|$ у всій області визначення, крім точки $t' = t$. З урахуванням виразу для функції Гріна (2.42) та оператора $L_s(z)$ одержимо

$$L_s(z)G(z, z', t, t') = (D_0 - D_1) \frac{2\theta(t-t')}{z_0} \sum_{i=1}^{n_1} \eta_{i1}(z) \sum_{k=1}^{\infty} y_k^2 e^{-D_0 y_k^2 (t-t')} \sin y_k z \sin y_k z'. \quad (2.62)$$

Врахуємо, що $0 \leq \theta(t-t') \leq 1$ для $\forall t, t'$, і $\theta(t-t') = 1$ для $\forall t, t' \in [0, \bar{t}] \cap \{t = t'\}$, та

$$\sum_{i=1}^{n_1} \eta_{i1}(x) \leq 1 \quad \text{для } \forall x \text{ з області визначення.} \quad (2.63)$$

Тоді для (2.62) одержимо

$$|L_s(z)G(z, z', t, t')| \leq |\bar{g}(z, z', t, t')| = (D_0 - D_1) \frac{2}{z_0} \sum_{k=1}^{\infty} y_k^2 e^{-D_0 y_k^2 (t-t')} \sin y_k z \sin y_k z'.$$

Оскільки виконуються наступні нерівності

$$|D_0 - D_1| \leq d_m, \quad |\sin x| \leq 1, \quad (2.64)$$

де $d_m = \max\{D_0; D_1\}$, а також враховуючи (2.63), маємо

$$|\bar{g}(z, z', t, t')| \leq \frac{2d_m}{z_0} \sum_{k=1}^{\infty} y_k^2 e^{-D_0 y_k^2 |t-t'|} \leq \frac{2d_m \pi^2}{z_0^3} \sum_{k=1}^{\infty} k^2 e^{-D_0 \pi^2 |t-t'| k / z_0^2}.$$

Враховуючи, що $\sum_{k=1}^{\infty} k^2 x^k = \frac{x(x+1)}{(1-x)^3}$ для $\forall x: |x| < 1$ [102] і $e^{-x} < 1$ для $\forall x > 0$,

а також $D_0 \pi^2 |t - t'| z_0^{-2} > 0$ для $\forall t, t' \in [0; \bar{t}] \cap \{t = t'\}$, отримаємо

$$|\bar{g}(z, z', t, t')| \leq \frac{2d_m \pi^2 e^{-\bar{d}(t-t')} (1 + e^{-\bar{d}|t-t'|})}{z_0^3 (1 - e^{-\bar{d}|t-t'|})^3} \leq \frac{2d_m \pi^2}{z_0^3} \frac{1 + e^{-\bar{d}|t-t'|}}{(1 - e^{-\bar{d}|t-t'|})^3}, \quad (2.65)$$

де $\bar{d} = D_0 \pi^2 / z_0^2$.

Оскільки справджується співвідношення $|t - t'| = \sigma > 0$, то для (2.65) маємо

$$|\bar{g}(z, z', t, t')| \leq \frac{2d_m \pi^2}{z_0^3} \frac{1 + e^{-\bar{d}\sigma}}{(1 - e^{-\bar{d}\sigma})^3} = K_2.$$

Щоб показати обмеженість функції $\bar{g}(z, z', t, t')$ у точці $t' = t$, скористаємося властивістю обмеженості неперервної функції на замкненому проміжку. За означенням функція $\bar{g}(z, z', t, t')$ є неперервною функцією за часовою змінною в точці $t' = t$, якщо для $\forall \varepsilon > 0 \exists \delta > 0$ таке, що з умови $\forall t': |t - t'| < \delta$ випливає нерівність $|\bar{g}(z, z', t, t') - \bar{g}(z, z', t, t)| < \varepsilon$.

Із співвідношення (2.60) отримаємо

$$\sum_{k=1}^{\infty} \frac{k^4}{k^2 + a^2} \cos kx = \frac{\pi a^3}{2} \frac{\operatorname{ch}(\pi - x)a}{\operatorname{sh} \pi a}. \quad (2.66)$$

Враховуючи (2.66) та нерівності (2.61), (2.64), маємо

$$\begin{aligned} |\bar{g}(z, z', t, t') - \bar{g}(z, z', t, t)| &< \frac{d_m}{z_0} \left| \sum_{k=1}^{\infty} y_k^2 \cos y_k (z - z') \left[\frac{1}{1 + D_0 y_k^2} - 1 \right] \right| + \\ &+ \frac{d_m}{z_0} \left| \sum_{k=1}^{\infty} y_k^2 \cos y_k (z + z') \left[\frac{1}{1 + D_0 y_k^2} - 1 \right] \right| \leq \frac{d_m}{2(\sqrt{D_0} \delta)^3} \operatorname{ch} \left(\frac{z_0}{\sqrt{D_0} \delta} \right) \operatorname{cth} \left(\frac{z_0}{\sqrt{D_0} \delta} \right) = \varepsilon. \end{aligned} \quad (2.67)$$

Тобто для довільного наперед заданого числа ε існує таке δ , яке визначається з рівняння (2.67). Тому за означенням функція $\bar{g}(z, z', t, t')$ є неперервною в точці $t' = t$, а відтак обмеженою. Тоді функція $L_s(z, t)G(z, z', t, t')$ є також обмеженою на будь-якому інтервалі з області визначення своїх аргументів.

3. Покажемо, що дія оператора $L_s(z)$ на розв'язок однорідної крайової задачі $J_0(z, t)$ дає обмежену в усій області визначення функцію. Враховуючи вирази (2.39) і (2.57), маємо

$$L_s(z)J_0(z, t) = (D_1 - D_0) \frac{2J_*}{z_0} \sum_{i=1}^{n_1} \eta_{i1}(z) \sum_{n=1}^{\infty} e^{-D_0 \xi_n^2 t} \left(\xi_n + \frac{(-1)^n c_* D_0 \xi_n^2}{J_*} \right) \sin \xi_n z.$$

Оскільки справджуються нерівності (2.63) та (2.64), то

$$\begin{aligned} |L_s(z)J_0(z, t)| &\leq \frac{2J_* d_m}{z_0} \left| \sum_{n=1}^{\infty} e^{-D_0 \xi_n^2 t} \left(\xi_n + \frac{(-1)^n c_* D_0 \xi_n^2}{J_*} \right) \sin \xi_n z \right| \leq \\ &\leq \frac{2J_* d_m}{z_0} \left(\left| \sum_{n=1}^{\infty} e^{-D_0 \xi_n^2 t} \xi_n \sin \xi_n z \right| + \left| \sum_{n=1}^{\infty} e^{-D_0 \xi_n^2 t} \frac{(-1)^n c_* D_0 \xi_n^2}{J_*} \sin \xi_n z \right| \right). \end{aligned}$$

Справедлива наступна рівність [102]

$$\sum_{k=0}^{\infty} \frac{2k+1}{(2k+1)^2 + a^2} \sin(2k+1)x = \frac{\pi}{4} \operatorname{ch}(\pi - 2x) a \operatorname{sech} \frac{a\pi}{2}.$$

Крім того, існує відома границя [116]

$$\lim_{|z| \rightarrow \infty} z^\alpha e^{-z} = 0 \quad \text{при } \alpha \equiv \text{const},$$

тоді за критерієм Коші ряд $\sum_{n=1}^{\infty} \xi_n^2 e^{-D_0 \xi_n^2 t}$ є абсолютно збіжним. За ознакою Вейерштрасса рівномірної збіжності ряду [68] абсолютно і рівномірно збіжним є ряд $\sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \xi_n^2 e^{-D_0 \xi_n^2 t} \sin \xi_n z$, а отже послідовність його часткових сум також є абсолютно і рівномірно збіжною. Збіжна послідовність є обмеженою у метричному просторі, тоді є обмеженим ряд $\sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \xi_n^2 e^{-D_0 \xi_n^2 t} \sin \xi_n z \leq U < \infty$. З

урахуванням (2.64) та рівності $\operatorname{ch}^2 t - \operatorname{sh}^2 t = 1$ [116], справедлива оцінка

$$\begin{aligned} |L_s(z)J_0(z, t)| &< \frac{2J_* d_m}{z_0} \left(\frac{z_0}{2D_0 t} \operatorname{sech} \frac{z_0}{\sqrt{D_0 t}} + \frac{c_* D_0}{J_*} \sum_{n=1}^{\infty} \left| (-1)^n \xi_n^2 e^{-D_0 \xi_n^2 t} \right| \right) \leq \\ &\leq \frac{2J_* d_m}{z_0} \left(\frac{z_0}{2D_0 t} \operatorname{sech} \frac{z_0}{\sqrt{D_0 t}} + \frac{c_* D_0}{J_*} \sum_{n=1}^{\infty} \xi_n^2 e^{-D_0 \xi_n^2 t} \right) \leq \end{aligned}$$

$$\leq \frac{2J_* d_m}{z_0} \left(\frac{z_0}{2D_0 t} \operatorname{sech} \frac{z_0}{\sqrt{D_0 t}} + \frac{c_* D_0 U}{J_*} \right) = K_3.$$

Отже Твердження 2.1 доведено.

Зауважимо, що оскільки умова нульової початкової концентрації є частковим випадком умови сталої ненульової початкової концентрації, то Твердження 2.1 справедливе і за відсутності в нульовий момент часу домішкової речовини у тілі.

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 (2.58) для задачі на потік є абсолютно і рівномірно збіжним.*

Д о в е д е н н я. Враховуючи співвідношення (2.59), можна отримати наступну оцінку загального члена ряду Неймана

$$|R_n| \leq K_1 K_2^{n-1} K_3 \frac{(z_0 t)^n}{n!}. \quad (2.68)$$

Для довільних значень K_1 , K_2 , K_3 , z_0 , t ряд із загальним членом $K_1 K_2^{n-1} K_3 (z_0 t)^n / n!$ збігається при $n \rightarrow \infty$. Тоді за ознакою Вейерштраса [68] при $n \rightarrow \infty$ буде абсолютно і рівномірно збігатись послідовність часткових сум $\{J^{(n)}(z, t)\}$ ряду Неймана (2.58). Тобто справджується рівність

$$\lim_{n \rightarrow \infty} J^{(n)}(z, t) = J(z, t).$$

Таким чином, Теорема 2.1 доведена.

Теорема 2.2. *Ряд Неймана для потоку $J(z, t) \equiv J_0(z, t) + \sum_{n=1}^{\infty} R_n(z, t)$ є розв'язком інтегро-диференціального рівняння (2.56), а отже крайової задачі дифузії на потік (2.6)-(2.8).*

Д о в е д е н н я. Підставимо ряд (2.58) у рівняння (2.56), одержимо

$$J_0(z, t) + \sum_{n=1}^{\infty} R_n(z, t) = J_0(z, t) + \int_0^t \int_0^{z_0} G(z, z', t, t') L_s(z') \left[J_0(z, t) + \sum_{n=1}^{\infty} R_n(z, t) \right] dz' dt'.$$

Використаємо означення функції $R_n(z, t)$

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

Отримана тотожність доводить, що ряд Неймана є розв'язком рівняння (2.56), а оскільки інтегро-диференціальне рівняння отримано шляхом тотожних перетворень з вихідної крайової задачі, то ряд Неймана є також розв'язком задачі (2.6)-(2.8). Теорему 2.2 доведено.

Враховуючи нерівність (2.68) та виконавши підсумовування в обидвох частинах цього співвідношення, отримаємо наступну оцінку для залишкових

членів ряду (2.58) $S_n = \sum_{k=n+1}^{\infty} R_k(z, t)$:

$$|S_n| \leq \frac{K_1 K_3}{K_2} \exp\{K_2 z_0 \bar{\tau}\} \left[1 - \frac{1}{n!} \Gamma(n+1, K_2 z_0 \bar{\tau}) \right],$$

де $\Gamma(n+1, K_2 z_0 \bar{\tau}) = \int_{K_2 z_0 \bar{\tau}}^{\infty} x^n e^{-x} dx$ – неповна гама-функція [116].

Зазначимо, що у дослідженнях [105] для збіжності рядів Неймана, які описують процеси у випадкових середовищах, накладалась умова обмеженості області розташування включень. Як впливає із Твердження і Теорема 2.1 для нестационарного випадку ця умова не є необхідною.

2.3.3 Усереднення потоку маси за ансамблем конфігурацій фаз

Для знаходження усередненого дифузійного потоку обмежимося двома першими членами ряду Неймана (2.58)

$$J(z, t) \approx J_0(z, t) + (D_1 - D_0) \int_0^t \int_0^{z_0} G(z, z', t, t') \sum_{i=1}^{n_1} \eta_{i1}(z') \frac{\partial J_0(z', t')}{\partial z'^2} dz' dt'. \quad (2.69)$$

Усереднимо співвідношення (2.69) за ансамблем конфігурацій фаз з рівномірним розподілом прошарків у тілі [63], приймаючи, що всі підшари фази

включень мають однакову характерну (середню) товщину h_1 (рис. 2.14), а випадковою координатою, яка характеризує положення включення, є координата «верхньої» межі прошарку z_{i1} ($i = \overline{1, n_1}$). Тоді, аналогічно до (2.48)

$$\langle L_s(z') \rangle_{conf} = (D_1 - D_0) \sum_{i=1}^{n_1} \langle \eta_{i1}(z') \rangle_{conf} \frac{\partial^2}{\partial z'^2}. \quad (2.70)$$

Врахуємо, що

$$\eta_{i1}(z') = \begin{cases} 1, & z' \in [z_{i1}; z_{i1} + h_1] \\ 0, & z' \notin [z_{i1}; z_{i1} + h_1] \end{cases} = \begin{cases} 1, & z' - z_{i1} \in [0; h_1] \\ 0, & z' - z_{i1} \notin [0; h_1] \end{cases} = \eta_{i1}(z' - z_{i1}). \quad (2.71)$$

Тоді

$$\sum_{i=1}^{n_1} \langle \eta_{i1}(z') \rangle = \sum_{i=1}^{n_1} \langle \eta_{i1}(z' - z_{i1}) \rangle = \sum_{i=1}^{n_1} \frac{1}{V} \int_0^{z_0 - h_1} \eta_{i1}(z' - z_{i1}) dz_{i1} = \sum_{i=1}^{n_1} \frac{1}{V} \int_0^{z'} \eta_{i1}(x) dx,$$

де $x = z' - z_{i1}$.

Оскільки для $z' \leq h_1$ маємо

$$\sum_{i=1}^{n_1} \frac{1}{V} \int_0^{z'} \eta_{i1}(x) dx = \frac{n_1}{V} \int_0^{z'} dx = \frac{z' n_1}{V} = \frac{z' n_1}{V} \cdot \frac{h_1}{h_1} = \frac{v_1 z'}{h_1},$$

а для $z' \geq h_1$

$$\sum_{i=1}^{n_1} \frac{1}{V} \int_0^{z'} \eta_{i1}(x) dx = \frac{n_1}{V} \int_0^{h_1} dx = \frac{h_1 n_1}{V} = v_1,$$

то остаточно отримаємо

$$\sum_{i=1}^{n_1} \langle \eta_{i1}(z') \rangle = \begin{cases} v_1 z' / h_1, & z' \leq h_1; \\ v_1, & z' \geq h_1. \end{cases} \quad (2.72)$$

Підставляючи співвідношення (2.47), (2.70) та (2.72) у (2.69), одержимо формулу для визначення потоку домішки у багат шаровій смузі, усередненого за ансамблем конфігурацій фаз з рівномірною функцією розподілу:

$$\begin{aligned} \langle J(z, t) \rangle_{conf} = & J_0(z, t) + (D_1 - D_0) \int_0^t \left[\frac{v_1}{h_1} \int_0^{h_1} z' G(z, z', t, t') \frac{\partial^2 J_0(z', t')}{\partial z'^2} dz' + \right. \\ & \left. + v_1 \int_{h_1}^{z_0} G(z, z', t, t') \frac{\partial^2 J_0(z', t')}{\partial z'^2} dz' \right] dt'. \end{aligned} \quad (2.73)$$

Якщо у співвідношення (2.73) підставити вирази для функції Гріна (2.42) та дифузійного потоку в однорідному шарі за нульової початкової концентрації (2.30), отримаємо:

$$\begin{aligned} \frac{1}{J_*} \langle J(z, t) \rangle_{conf} &= 1 - \frac{2}{z_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\xi_n} e^{-D_0 \xi_n^2 t} \sin(\xi_n z) + \\ &+ \frac{2\nu_1(D_1 - D_0)}{z_0^2 D_0} \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\xi_n \bar{A}_{kn}}{y_k^2 - \xi_n^2} \left[e^{-D_0 \xi_n^2 t} - e^{-D_0 y_k^2 t} \right] \sin(y_k z). \end{aligned} \quad (2.74)$$

У випадку ненульової сталої початкової концентрації домішки у формулу (2.73) підставляємо співвідношення (2.39). Тоді маємо

$$\begin{aligned} \frac{1}{J_*} \langle J(z, t) \rangle_{conf} &= 1 - \frac{2}{z_0} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-D_0 \xi_n^2 t} \left(\frac{1}{\xi_n} + (-1)^n D_0 \frac{c_*}{J_*} \right) \sin(\xi_n z) + \\ &+ \frac{2\nu_1(D_1 - D_0)}{z_0^2 D_0} \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\xi_n \bar{A}_{kn}}{y_k^2 - \xi_n^2} \left(1 + (-1)^n D_0 \frac{c_*}{J_*} \xi_n \right) \left(e^{-D_0 \xi_n^2 t} - e^{-D_0 y_k^2 t} \right) \sin(y_k z). \end{aligned} \quad (2.75)$$

$$\text{Тут } \bar{A}_{kn} = \frac{\cos[(y_k - \xi_n)h_1]}{h_1(y_k - \xi_n)^2} - \frac{\cos[(y_k + \xi_n)h_1]}{h_1(y_k + \xi_n)^2} - \frac{4y_k \xi_n}{h_1(y_k^2 - \xi_n^2)^2} + (-1)^{k+n} \frac{2y_k}{y_k^2 - \xi_n^2}.$$

Зауважимо, що у формулі (2.73) не враховано конкретний вигляд крайових умов, що дає можливість застосовувати її для різних типів початкових та граничних умов. Зазначимо, що кількісне оцінювання третього доданка ряду Неймана (2.58), що визначає парний взаємовплив шаруватих включень на дифузійний потік, а також обґрунтування використання тільки двох перших членів цього ряду для знаходження шуканої функції буде проведено у підрозділі 3.2.

2.3.4 Числовий аналіз усереднених дифузійних потоків

Числові розрахунки проведено у безрозмірних змінних (2.43) за формулами (2.74) і (2.75). В якості параметрів числового дослідження прийнято такі значення: $\tau = 0.1$; $\nu_1 = 0.2$; $h_1 = 0.01$; $c_*/J_* = 0.1$. На рис. 2.15, 2.16 криві а наведені для $D_1/D_0 = 0.01$, криві б – $D_1/D_0 = 2$. Штриховою лінією позначено відповідні потоки в однорідному шарі з характеристиками матриці.

На рис. 2.15 наведено розподіли потоків маси у смузі за нульової (рис. 2.15,a) та ненульової сталої (рис. 2.15,b) початкових умов на концентрацію в різні моменти часу $\tau = 0.01; 0.03; 0.1; 0.5; 1$ (криві 1-5). Рис. 2.16 ілюструє поведінку усередненого потоку маси за нульової (рис. 2.16,a) та ненульової (рис. 2.16,b) початкових концентрацій домішки для різних значень об'ємної частки включень $v_1 = 0.05; 0.1; 0.2$ (криві 1-3). На рис. 2.17,a зображено розподіли усередненого потоку за нульової початкової концентрації для різних значень відношення $D_1 / D_0 = 0.01; 0.5; 2; 5; 10; 15$ (криві 1-6), на рис. 2.17,b – за ненульової сталої початкової концентрації для різних значень відношення $c_* / J_* = 0.01; 0.1; 0.2; 0.3; 0.4$ (криві 1-5).

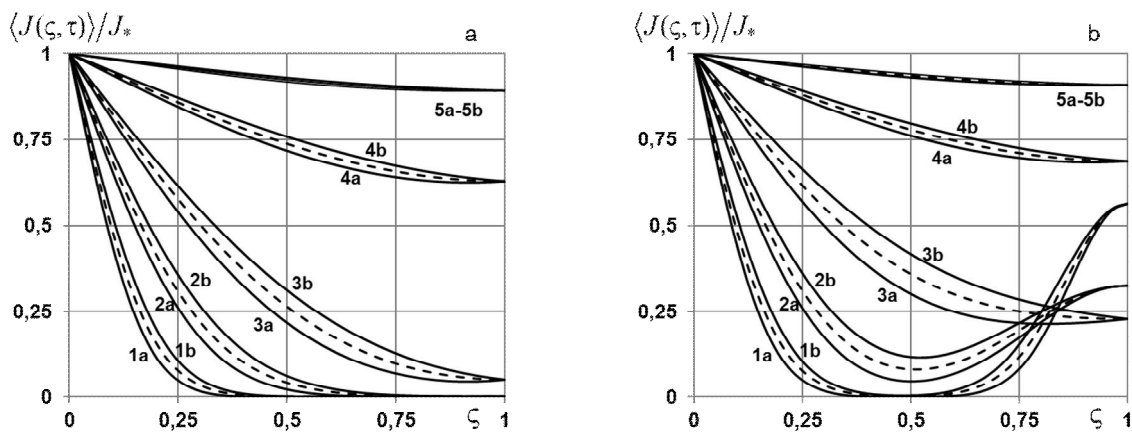


Рис. 2.15. Розподіли потоків маси у смузі в різні моменти часу за нульової (a) та ненульової (b) початкових концентрацій

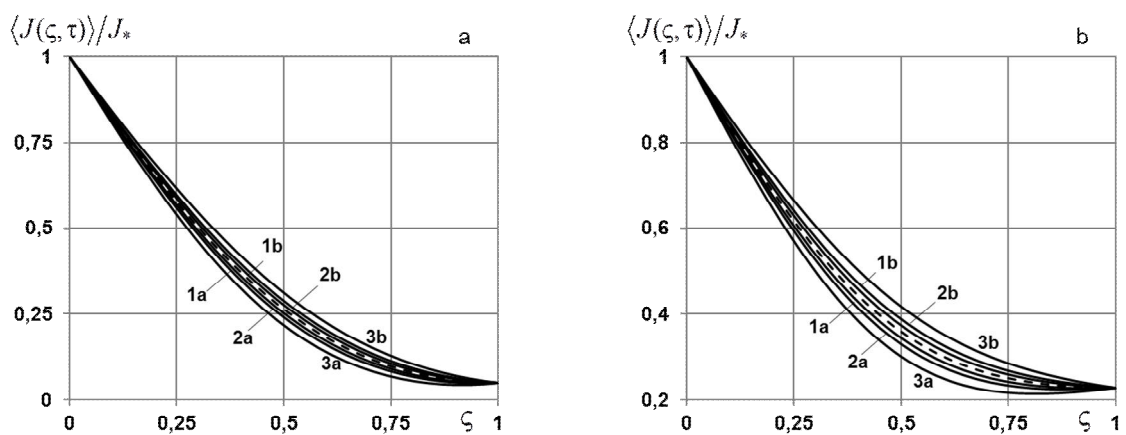


Рис. 2.16. Розподіли потоків маси у смузі за різних значень об'ємної частки включень за нульової (a) та ненульової (b) сталої початкових концентрацій

За нульової початкової концентрації частинок в шарі для $D_1 < D_0$ потоки завжди є монотонно спадними функціями (рис. 2.15,a), які з часом зростають в

усій області тіла доки не вийдуть на усталений режим. За ненульового сталого початкового розподілу концентрації домішкової речовини (рис. 2.15,b) поведінка усередненого потоку маси для малих часів суттєво відрізняється від випадку нульової початкової концентрації. Від межі $\zeta = 0$ дифузійний потік спадає, в середині шару є близьким до нуля, і стрімко зростає біля межі $\zeta = 1$ (криві 1a та 1b, рис. 2.15,b), що пояснюється необхідністю забезпечити умову рівності нулю концентрації домішки на границі $\zeta = 1$.

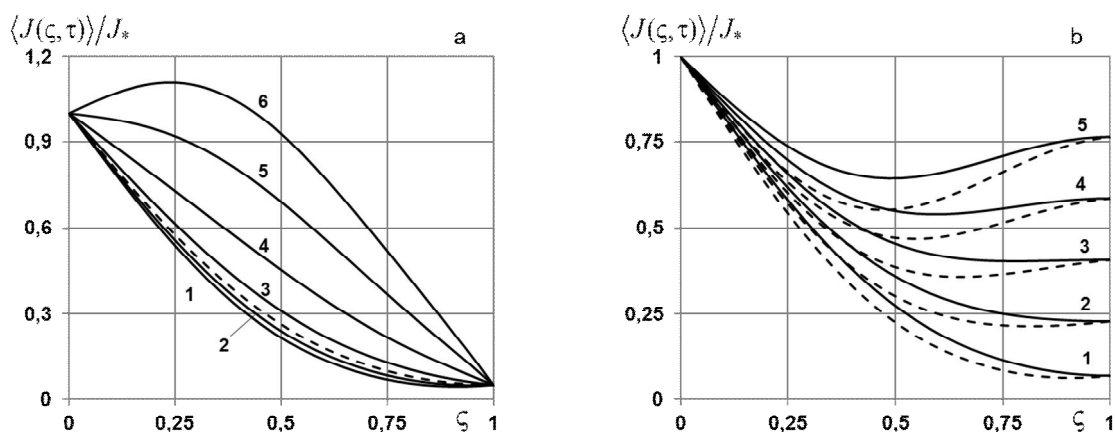


Рис. 2.17. Розподіли потоків маси у смузі за нульової початкової концентрації для різних значень відношень D_1/D_0 (a) та ненульової початкової концентрації для різних значень c_*/J_* (b)

Якщо коефіцієнт дифузії домішки у прошарку є меншим, ніж у матриці, то потік в неоднорідному тілі є завжди меншим, ніж в однорідному. У протилежному випадку потік у багат шаровій смузі є більшим, ніж в однорідному шарі (рис. 2.15). Крім того, потоки в однорідній та неоднорідній смугах на межах шару збігаються.

Зауважимо, що зі збільшенням об'ємної частки включень для $D_1 < D_0$ зменшуються значення потоку маси, а для $D_1 > D_0$ – збільшуються як для нульової, так і ненульової початкової концентрації (рис. 2.16). Зокрема, збільшення об'ємної частки включень з 0.1 до 0.2 призводить до зменшення усередненого дифузійного потоку в середині шару до 9% для $D_1 < D_0$ і збільшення до 9% – для $D_1 > D_0$. Збільшення відношення коефіцієнтів дифузії за нульової початкової концентрації домішки в тілі призводить до зростання усередненого дифузійного потоку (рис. 2.17,a), причому для великих значень цього відношення

спостерігається зростання потоку від поверхні, де діє джерело маси (крива 6, рис. 2.17,a). Залежність функції $\langle J(\zeta, \tau) \rangle / J_*$ за ненульової початкової концентрації від значень відношення D_1 / D_0 є подібною до випадку нульової початкової концентрації.

Наявність у тілі домішкових частинок у початковий момент часу суттєво впливає як на поведінку, так і на значення функції потоку домішкової речовини. Для малих відношень c_* / J_* потік домішки як в однорідному шарі, так і у багат шаровій смузі є монотонно спадною функцією для $D_1 < D_0$ (крива 1, рис. 2.17,b). Зі збільшенням початкової концентрації c_* потік біля поверхні шару $\zeta = 1$ зростає, що може призвести до появи локального мінімуму в середині шару (криві 4, 5, рис. 2.17,b). Зміна характерної товщини прошарків при сталому значенні об'ємної частки включень, тобто зміна кількості включень, як за нульової так і ненульової сталої початкових концентрацій практично не впливає на значення усередненого дифузійного потоку (різниця у 3 значимій цифрі).

2.4 Комп'ютерне моделювання потоків домішкової речовини у багат шарових матеріалах залізо – мідь та залізо – нікель

2.4.1 Комп'ютерне моделювання усередненого потоку водню в шаруватому матеріалі Fe – Cu

Розглянемо задачу дифузії водню у шаруватому композитному матеріалі Fe – Cu, де в якості базової фази приймаємо залізо. Відповідно до [72, 165] коефіцієнти дифузії водню є наступними: у залізі $D_{Fe} = 1.8 \cdot 10^{-11}$ м²/с, у міді $D_{Cu} = 4.34 \cdot 10^{-10}$ м²/с. Тоді отримаємо $D_1 / D_0 = D_{Cu} / D_{Fe} = 24.11$.

На рис. 2.18 показано поведінку усереднених дифузійних потоків водню в різні моменти безрозмірного часу $\tau = 0.01; 0.03; 0.1; 0.5; 1$ (криві 1-5) для нульової (рис. 2.18,a) та ненульової сталої (рис. 2.18,b) початкових концентрацій H у композиті Fe – Cu. Прийнято, що об'ємна частка міді у залізі становить $v_{Cu} = 0.2$, характерна товщина мідних прошарків складає $h_{Cu} = 0.01$, а відно-

шення початкової концентрації водню до його потоку на верхній межі рівне $c_*/J_* = 0.1$. Рис. 2.19 ілюструє розподіли усереднених потоків водню для різних значень об'ємної частки Cu у залізі $v_{Cu} = 0.01; 0.05; 0.1; 0.2$ (криві 1-4) за нульової початкової концентрації H (рис. 2.19,a) та різних значень відношення $c_*/J_* = 0.01; 0.1; 0.2; 0.3; 0.4$ (криві 1-5) за ненульової сталої розподілу водню в початковий момент часу (рис. 2.19,b) для $\tau = 0.1$. На рис. 2.18 та рис. 2.19,b криві а (штрихові лінії) відповідають потокам домішки в однорідному шарі заліза, криві б (суцільні лінії) – у тілі з мідними прошарками.

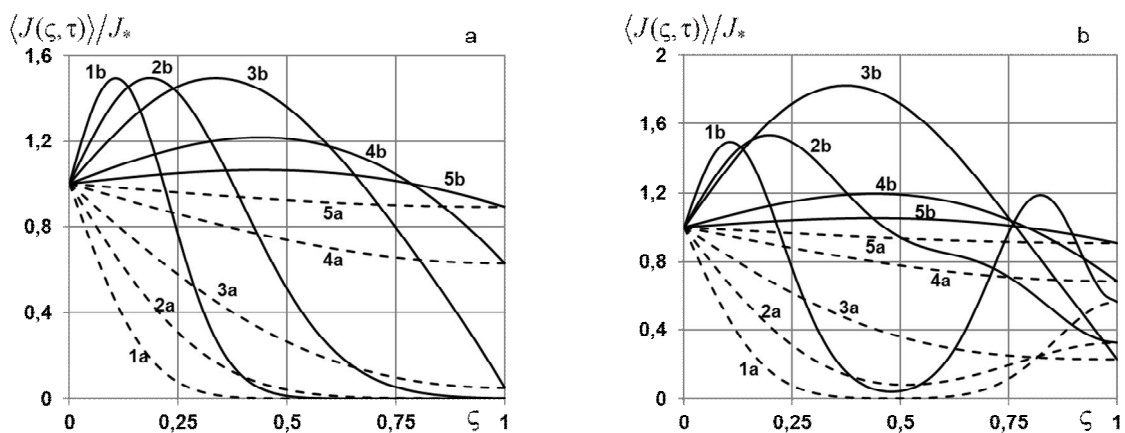


Рис. 2.18. Розподіли потоків водню у композиті $Fe - Cu$ за нульової (а) та сталої ненульової (б) початкових концентрацій для різних значень безрозмірного часу

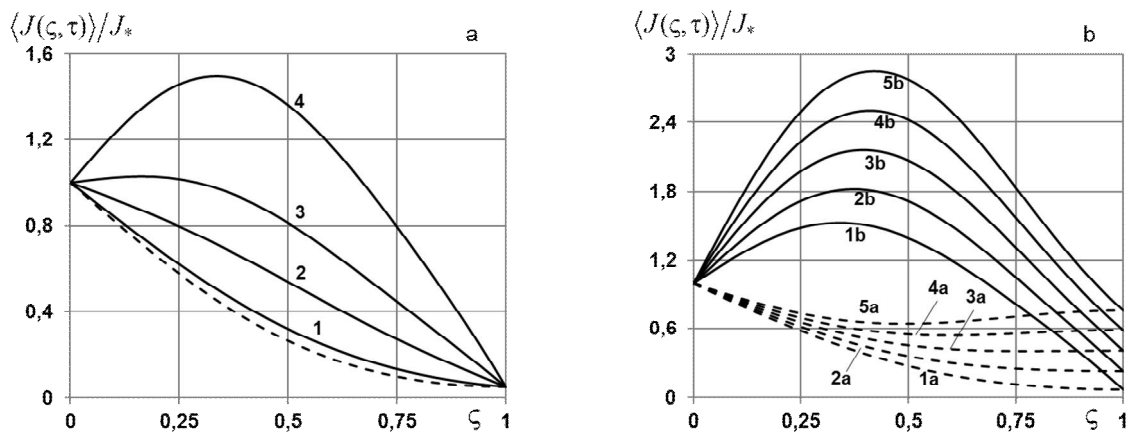


Рис. 2.19. Розподіли потоків водню у композиті за нульової початкової концентрації для різних значень об'ємної частки міді (а) та для різних значень c_*/J_* за ненульової сталої початкової концентрації (б)

Наявність в залізному шарі випадково розташованих прошарків міді призводить до зростання усереднених потоків водню (рис. 2.18 і 2.19). При цьому для малих часів протікання процесу дифузії характерна наявність приповерхне-

вих максимумів потоків у композиті $Fe - Cu$ в околі верхньої границі тіла за нульової початкової концентрації водню (рис. 2.18,a) та в околі верхньої і нижньої границь за ненульової сталої початкової концентрації (рис. 2.18,b). З часом максимум функції $\langle J(\zeta, \tau) \rangle / J_*$ в околі верхньої границі зсувається до середини шаруватої структури (криві 3b, рис. 2.18), а максимум в околі нижньої границі шару – зменшується (крива 2b, рис. 2.18,b). При цьому відмінності між потоками водню в однорідному шарі заліза і композиті залізо-мідь зменшується (криві 5b, рис. 2.18), і потоки H виходять на усталений режим.

Поведінка функції потоку при зростанні об'ємної частки Cu є однаковою для нульової та ненульової сталої початкових концентрацій водню. Так збільшення v_{Cu} призводить до зростання потоків водню у композиті $Fe - Cu$ (рис. 2.19,a). При цьому у випадку більше, ніж 8 мідних прошарків, значення $\langle J(\zeta, \tau) \rangle / J_*$ стає більшим від величини потоку на верхній границі тіла (криві 3, 4, рис. 2.19,a). Збільшення початкової концентрації водню призводить до зростання його усереднених потоків, найбільше в середині шару $Fe - Cu$ (криві b, рис. 2.19,b). Крім того, значення характерної товщини прошарків міді практично не впливає на значення усередненого потоку водню.

2.4.2 Комп'ютерне моделювання усередненого потоку вуглецю в шаруватому матеріалі $\alpha Fe - Ni$

У цьому пункті розглянемо дифузію атомів вуглецю у шаруватому композитному матеріалі α -залізо-нікель. Тут в якості базової фази також вважаємо залізо. Коефіцієнти дифузії вуглецю у залізі та нікелі прийнято такими [72, 167]: $D_{\alpha Fe} = 6.3 \cdot 10^{-7}$ м²/с, $D_{Ni} = 9 \cdot 10^{-6}$ м²/с. Тоді отримаємо $D_1/D_0 = D_{Ni}/D_{\alpha Fe} = 14.286$. Зазначимо, що наявність у композиті $\alpha Fe - Ni$ атомів вуглецю зміцнює його поверхню. На рис. 2.20 проілюстровано поведінку усереднених дифузійних потоків вуглецю в різні моменти безрозмірного часу $\tau = 0.01; 0.03; 0.1; 0.5; 1$ (криві 1-5) для нульової (рис. 2.20,a) та ненульової сталої (рис. 2.20,b) початкових концентрацій C у шаруватому матеріалі $\alpha Fe - Ni$.

Результати подані для 20 прошарків нікелю характерної товщини $h_{Ni} = 0.01$ ($v_{Ni} = 0.2$) та відношення початкової концентрації вуглецю до його потоку на верхній межі $c_*/J_* = 0.1$. На рис. 2.21 наведено характерні розподіли потоків C для різних значень об'ємної частки Ni у матеріалі αFe $v_{Ni} = 0.01; 0.05; 0.1; 0.2$ (криві 1-4) за нульової початкової концентрації вуглецю (рис. 2.21,а) та різних значень відношення $c_*/J_* = 0.01; 0.1; 0.2; 0.3; 0.4$ (криві 1-5) за ненульового сталого початкового розподілу C (рис. 2.21,б) для $\tau = 0.1$. Тут на рис. 2.20 та рис. 2.21,б криві а (штрихові лінії) побудовані для потоків вуглецю в однорідному шарі αFe , криві б (суцільні лінії) – в тілі з нікелевими прошарками.

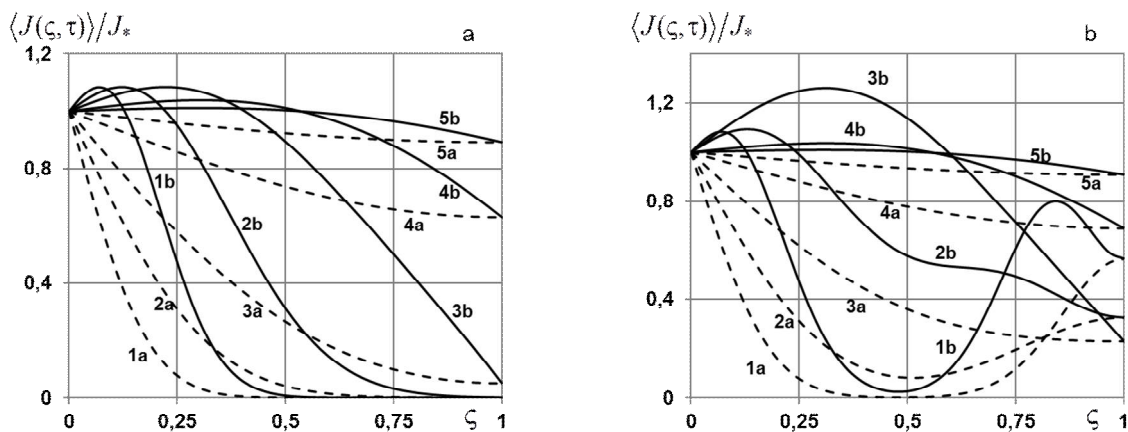


Рис. 2.20. Розподіли потоків вуглецю у композиті $\alpha Fe - Ni$ за нульової (а) та сталої ненульової (б) початкових концентрацій для різних значень безрозмірного часу

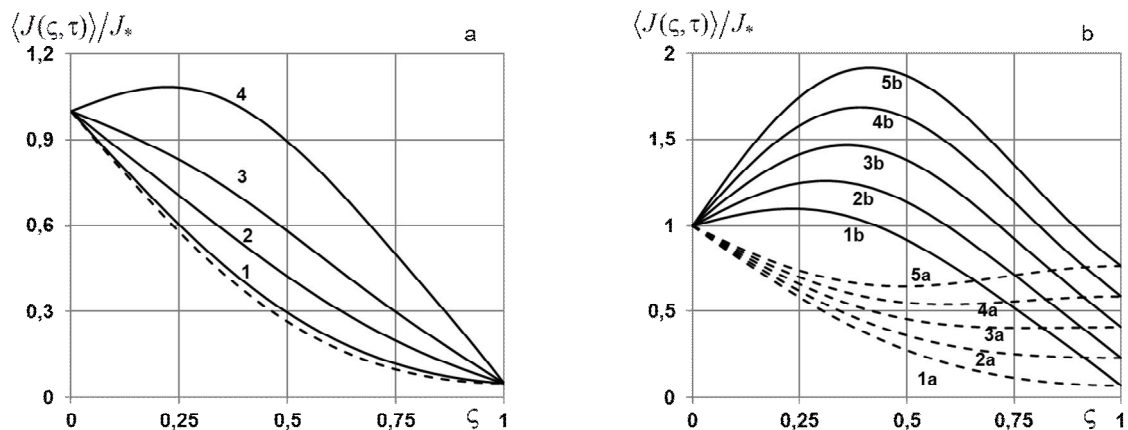


Рис. 2.21. Розподіли потоків вуглецю у композиті $\alpha Fe - Ni$ за нульової початкової концентрації для різних значень об'ємної частки нікелю (а) та для різних значень c_*/J_* за ненульової сталої початкової концентрації (б)

Зазначимо, що наявність прошарків нікелю у шарі αFe збільшує потік вуглецю (рис. 2.20 і 2.21). При цьому для малих значень безрозмірного часу

найбільша відмінність між потоками в однорідній та неоднорідній смугах спостерігається біля верхньої границі тіла для нульової початкової концентрації вуглецю (криві 1b, 2b, рис. 2.20,a) та в околі верхньої і нижньої поверхонь для ненульового сталого розподілу C в початковий момент часу (крива 1b, рис. 2.20,b). Зі збільшенням кількості прошарків нікелю усереднений потік вуглецю також зростає, і його значення може стати більшим від потоку на верхній межі композитної структури $\alpha Fe - Ni$ (крива 4, рис. 2.21,a). Чим більше значення початкової концентрації вуглецю, тим більша відмінність між потоками в однорідній та неоднорідній смугах (криві b, рис. 2.21,b).

2.4.3 Комп'ютерне моделювання усередненого потоку водню в шаруватому матеріалі $\alpha Fe - Ni$

Розглянемо задачу дифузії атомів водню у шаруватому композитному матеріалі α -залізо-нікель. Тут також в якості базової фази приймаємо залізо. Коефіцієнти дифузії водню у залізі та нікелі є наступними [72, 167]: $D_{\alpha Fe} = 6.42 \cdot 10^{-8} \text{ м}^2/\text{с}$, $D_{Ni} = 9.5 \cdot 10^{-7} \text{ м}^2/\text{с}$. Тоді $D_1/D_0 = D_{Ni}/D_{\alpha Fe} = 14.797$.

На рис. 2.22 показано поведінку усереднених дифузійних потоків водню в різні моменти безрозмірного часу $\tau = 0.01; 0.03; 0.1; 0.5; 1$ (криві 1-5) для нульової (рис. 2.22,a) та ненульової сталої (рис. 2.22,b) початкових концентрацій H у композиті $\alpha Fe - Ni$. Прийнято, що об'ємна частка нікелю у шарі αFe складає $v_{Ni} = 0.2$, характерна товщина нікелевих прошарків рівна $h_{Ni} = 0.01$, а відношення початкової концентрації водню до його потоку на верхній межі рівне $c_*/J_* = 0.1$. Криві а (штрихові лінії) відповідають потокам домішки в однорідному шарі αFe , криві б (суцільні лінії) – в тілі з нікелевими прошарками. Рис. 2.23 ілюструє розподіли усереднених потоків водню для різних значень об'ємної частки Ni у шарі αFe $v_{Ni} = 0.01; 0.05; 0.1; 0.2$ (криві 1-4) за нульової (рис. 2.23,a) та сталої ненульової (рис. 2.23,b) початкових концентрацій водню в момент часу $\tau = 0.1$.

Наявність у початковий момент часу атомів водню у структурі $\alpha Fe - Ni$ збільшує значення усередненого потоку (рис. 2.22 і 2.23). Крім того, чим більша

кількість прошарків нікелю у залізі, тим більше усереднений потік H відрізняється від потоку в залізному тілі (рис. 2.23). При цьому характерна товщина прошарків Ni майже не впливає на значення функції $\langle J(\zeta, \tau) \rangle / J_*$.

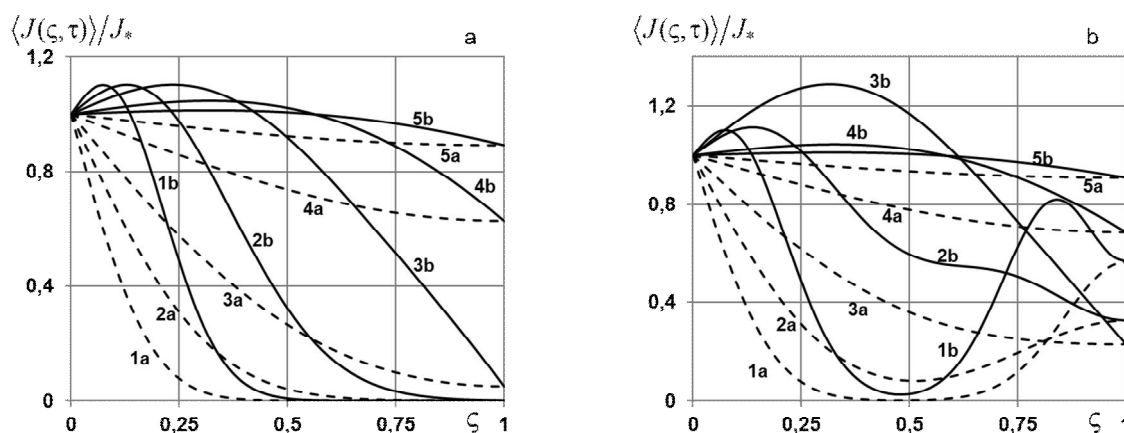


Рис. 2.22. Розподіли потоків водню у композиті $\alpha Fe - Ni$ за нульової (а) та сталої ненульової (б) початкових концентрацій для різних часів

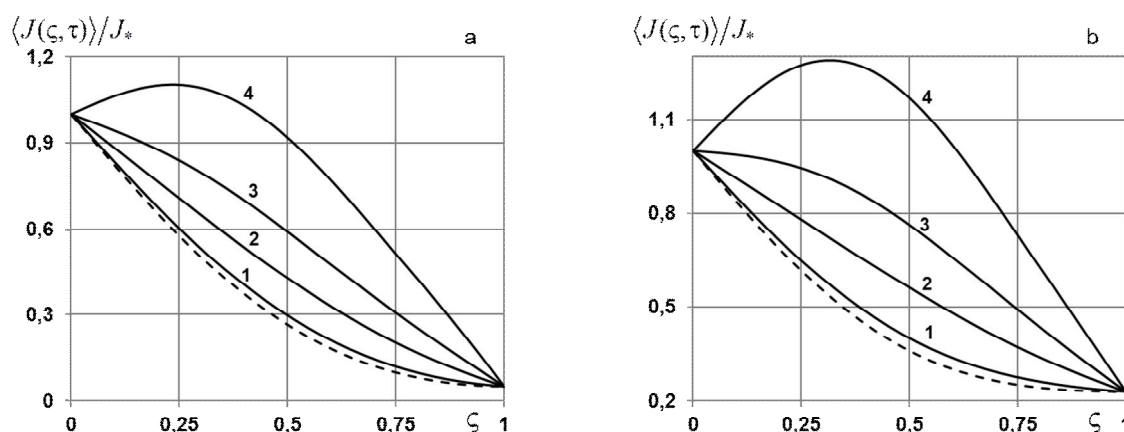


Рис. 2.23. Розподіли потоків водню у композиті $\alpha Fe - Ni$ за нульової (а) та сталої ненульової (б) початкових концентрацій для різних значень ν_{Ni}

Як і у випадку композиту $Fe - Cu$, збільшення початкової концентрації водню у шаруватому матеріалі $\alpha Fe - Ni$ призводить до зростання усереднених потоків C , найбільше в середині шару.

2.5 Висновки до Розділу 2

У цьому Розділі розроблено підхід до математичного опису випадкових потоків домішкової речовини у двофазних тілах стохастично неоднорідної шаруватої структури, за яким крайові задачі дифузії формулюємо безпосередньо для функції потоку маси, на одній з поверхонь шару задаємо граничні умови на потік, а на іншій – на концентрацію мігруючої речовини [34, 127, 136]. При цьо-

му методи побудови розв'язку адаптуємо для сформульованих задач. У рамках розвиненого підходу розв'язки крайових задач дифузії з випадковими коефіцієнтами побудовано у вигляді рядів Неймана. Сформульовано та доведено теорему про абсолютну і рівномірну збіжність ряду Неймана, причому вперше для моделей дифузійних процесів у стохастично неоднорідних тілах з урахуванням випадкової структури у коефіцієнтах крайової задачі [138]. Також доведено теорему існування розв'язку інтегро-диференціального рівняння, еквівалентного вихідній крайовій задачі. Знайдено оцінку суми залишкових членів ряду Неймана. Під час доведення теорем і твердження про обмеженість відповідних функцій не накладались умови на функцію густини розподілу фаз в області тіла, а отже ряд Неймана є збіжний для довільного стохастичного розподілу включень у шарі. Усереднення стохастичного потоку домішкової речовини проведено за ансамблем конфігурацій фаз для випадків, коли в початковий момент часу відсутня домішка в тілі або заданий її сталий ненульовий початковий розподіл. Знайдено розрахункові формули для усередненого потоку маси в шарі з випадково розташованим прошарком та багат шаровій смузі з рівномірним розподілом фаз [36, 38, 133, 134, 161, 162].

Розроблено програмні модулі для якісного і кількісного аналізу залежності усередненого дифузійного потоку від характеристик середовища: приведення коефіцієнта дифузії, об'ємної частки включень, характерної (середньої) товщини прошарків, тощо [130, 139, 142]. На цій основі проведено комп'ютерне моделювання усереднених потоків домішкової речовини в двофазній випадково неоднорідній смузі з рівномірним розподілом фаз [10]. Зокрема показано, що для коефіцієнтів дифузії домішкової речовини у включеннях більших, ніж у матриці, значення усереднених потоків у неоднорідній структурі завжди більші від значень потоків в однорідному тілі, а наявність у початковий момент часу домішкової речовини для малих часів дослідження зумовлює виникнення приповерхневого максимуму потоку в околі нижньої границі тіла. Одержані розрахункові формули застосовано для дослідження потоків водню та вуглецю у шаруватих матеріалах $Fe - Cu$ та $\alpha Fe - Ni$. Показано, що наявність у шарі заліза прошарків з міді або нікелю збільшує потоки відповідних частинок.

РОЗДІЛ 3

МОДЕЛЮВАННЯ ВИПАДКОВИХ ПОТОКІВ МАСИ У ДВОФАЗНОМУ ТІЛІ ЗА БЕТА-РОЗПОДІЛУ ШАРУВАТИХ ВКЛЮЧЕНЬ ТА ЗА ПАРНОГО ВЗАЄМОВПЛИВУ ШАРІВ

У попередньому розділі запропоновано підхід, відповідно до якого крайова задача дифузії формулюється безпосередньо для функції потоку маси, а її розв'язок будується у вигляді ряду Неймана, зручного для проведення процедури усереднення за ансамблем конфігурацій фаз. Такий підхід до математичного опису випадкових процесів у дво- та багатофазних тілах, на відміну від методів гомогенізації [24, 124, 169], не вимагає обмежень на ймовірнісний розподіл неоднорідностей в об'ємі тіла. У Розділі 3 за розвиненим підходом вивчаються процеси масоперенесення домішкових частинок у двофазній шаруватій смузі з бета-розподілом включень. Зокрема, розглядаються випадки шаруватих структур, в яких область найбільш ймовірного розташування включень знаходиться біля «верхньої» поверхні, де діє джерело маси, в околі «нижньої» поверхні та посередині тіла. При цьому досліджується вплив параметрів середовища на просторові розподіли усередненого потоку. Вивчається залежність усередненого потоку маси від ефекту парного взаємовпливу шаруватих включень.

3.1 Математичне моделювання дифузійних потоків домішки у двофазній багат шаруватій смузі з бета-розподілом включень

3.1.1 Дифузійний потік у смузі з найімовірнішим розташуванням включень біля нижньої поверхні

Нехай у двофазній багат шаруватій смузі товщини z_0 відбувається процес дифузії домішкової речовини. Як і в попередньому випадку, дифузійні властивості фаз можуть суттєво відрізнятись, а коефіцієнти дифузії домішки є сталими у межах кожної з фаз. Приймаємо, що об'єм, який займає фаза $j = 0$ (матриця), є набагато більшим, ніж об'єм іншої фази $j = 1$ (включення). При цьому координати включень, а отже, і під шарів матриці, є невідомими, тобто структура

тіла є випадково неоднорідною. Розглянемо варіанти розташування включень в області тіла за різними частковими випадками ймовірнісного β -розподілу.

Функція густини β -розподілу в загальному випадку має вигляд [63]

$$f(z) = \begin{cases} \frac{\Gamma(\alpha + \beta)}{\Gamma(\alpha)\Gamma(\beta)} \left(\frac{z}{z_0}\right)^{\alpha-1} \left(1 - \frac{z}{z_0}\right)^{\beta-1}, & z \in [0; z_0]; \\ 0, & z \notin [0; z_0], \end{cases} \quad (3.1)$$

де $\Gamma(x) = \int_0^{\infty} t^{x-1} e^{-t} dt$ – гама-функція [116],

α, β – ступені вільності розподілу.

Один з часткових випадків β -розподілу (3.1) отримаємо, якщо покладемо $\alpha > 1, \beta = 1$, тоді густина розподілу набуде вигляду [63]

$$f_1(z) = \begin{cases} \alpha \left(\frac{z}{z_0}\right)^{\alpha-1}, & z \in [0; z_0]; \\ 0, & z \notin [0; z_0]. \end{cases} \quad (3.2)$$

Тут враховано, що $\Gamma(z+1) = z\Gamma(z)$ [116].

Цей розподіл (рис. 3.1) відповідає структурі шаруватого тіла, в якій включення розташовані біля нижньої поверхні тіла, і з ймовірністю 1 на межі шару $z = 0$ знаходиться фаза $j = 0$, а на «нижній» поверхні $z = z_0$ розташоване включення, причому область найбільш ймовірного знаходження включень розташована в околі цієї поверхні (рис. 3.1 і 3.2).

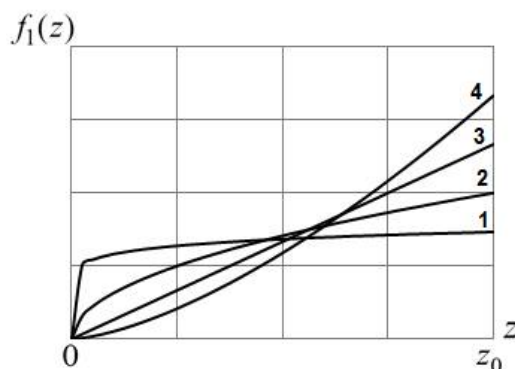


Рис. 3.1. Густина розподілу $f_1(z)$ для різних ступенів вільності α

На рис 3.1 показано залежність функції густини $f_1(z)$ від різних значень ступеня вільності $\alpha = 1.1; 1.5; 2; 2.5$ (криві 1-4). На рис. 3.2 наведено відповідні

таким розподілом структури багат шарові смуги. Зазначимо, що зі збільшенням параметра α ймовірність знаходження включень біля поверхні $z = 0$ спадає, а підшари фази $j = 1$ ущільнюються в околі поверхні $z = z_0$ (рис. 3.2).

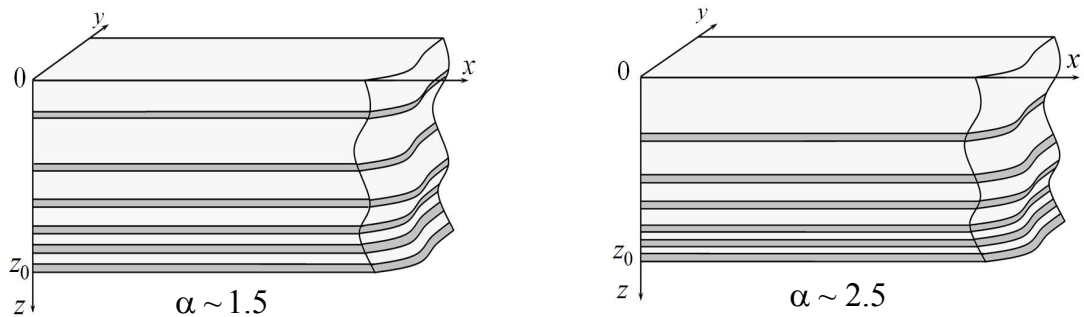


Рис. 3.2. Багат шарові структури з $f_1(z)$ розподілом включень

Для двофазної багат шарової смуги з внутрішньою структурою типу поданих на рис. 3.2 випадковий потік домішки $J(z,t)$ описується рівнянням дифузії (2.6). Приймаємо, що на «верхній» поверхні тіла задано стале значення потоку J_* , на «нижній» границі концентрація домішки рівна нулю, тобто задано граничні умови (2.8). Вважаємо, що у початковий момент часу відсутній дифузійний потік в тілі, тоді реалізується умова (2.7), що відповідає нульовій (2.18) та ненульовій сталій (2.17) початковим умовам на функцію концентрації.

Розв'язок сформульованої крайової задачі дифузії у двофазній багат шаровій смугі з областю найбільш ймовірного розташування включень біля нижньої поверхні смуги (2.6)-(2.8), як і у попередньому випадку, будемо шукати у вигляді ряду Неймана. Для цього вихідну задачу зводимо до еквівалентного інтегро-диференціального рівняння (2.56), яке є сумою розв'язку однорідної крайової задачі $J_0(z,t)$, що визначається одним із співвідношень (2.30) або (2.39), та згортки функції Гріна (2.42) з джерелом. Інтегро-диференціальне рівняння розв'язуємо методом послідовних наближень [65], в результаті одержуємо інтегральний ряд Неймана (2.58).

Проведемо процедуру усереднення за ансамблем конфігурацій фаз із функцією розподілу включень $f_1(z)$ (3.2), для чого обмежимося двома першими членами ряду (2.58) і врахуємо, що включення мають характерну (середню) товщину h_1 , а випадковою координатою, яка характеризує їх положення, є ко-

ордината «верхньої» межі прошарку z_{i1} ($i = \overline{1, n_1}$). Тоді усереднений потік у двофазній випадково неоднорідній шаруватій смузі знаходимо за формулою

$$\begin{aligned} \langle J(z, t) \rangle_{conf} = & J_0(z, t) + (D_1 - D_0) \int_0^t \int_0^{z_0} G(z, z', t, t') \frac{\partial J_0(z', t')}{\partial z'^2} \times \\ & \times \sum_{i=1}^{n_1} \int_0^{z_0 - h_1} \eta_{i1}(z') f_1(z_{i1}) dz_{i1} dz' dt'. \end{aligned} \quad (3.3)$$

Враховуючи властивості функції $\eta_{i1}(z')$ (2.71) і здійснюючи заміну змінних $z' - z_{i1} = x$, можемо записати

$$\sum_{i=1}^{n_1} \langle \eta_{i1}(z') \rangle = \sum_{i=1}^{n_1} \int_0^{z_0 - h_1} \eta_{i1}(z' - z_{i1}) f_1(z_{i1}) dz_{i1} = \sum_{i=1}^{n_1} \int_0^{z'} \eta_{i1}(x) f_1(z' - x) dx. \quad (3.4)$$

Підставимо у (3.4) функцію густини розподілу (3.2), тоді отримаємо:

$$\sum_{i=1}^{n_1} \langle \eta_{i1}(z') \rangle = \alpha (z_0)^{1-\alpha} \sum_{i=1}^{n_1} \int_0^{z'} \eta_{i1}(x) (z' - x)^{\alpha-1} dx.$$

Інтеграл в одержаній формулі залежить від значення змінної зовнішнього інтегрування z' у виразі (3.3). Тому

1) якщо $z' \leq h_1$, то

$$\sum_{i=1}^{n_1} \int_0^{z'} \eta_{i1}(x) (z' - x)^{\alpha-1} dx = \sum_{i=1}^{n_1} \int_0^{z'} (z' - x)^{\alpha-1} dx = \frac{n_1 (z')^\alpha}{\alpha};$$

2) якщо $z' \geq h_1$, то

$$\sum_{i=1}^{n_1} \int_0^{z'} \eta_{i1}(x) (z' - x)^{\alpha-1} dx = \sum_{i=1}^{n_1} \int_0^{h_1} (z' - x)^{\alpha-1} dx = \frac{n_1 \left((z')^\alpha - (z' - h_1)^\alpha \right)}{\alpha}.$$

Враховуючи, що $\nu_1 = n_1 h_1 / z_0$, для густини розподілу $f_1(z)$ остаточно маємо

$$\sum_{i=1}^{n_1} \langle \eta_{i1}(z') \rangle = \frac{\nu_1}{h_1 z_0^{\alpha-2}} \begin{cases} z'^\alpha, & z' \leq h_1; \\ z'^\alpha - (z' - h_1)^\alpha, & z' \geq h_1. \end{cases} \quad (3.5)$$

Підставивши (3.5) у співвідношення (3.3), одержимо формулу для знаходження потоку частинок домішки у двофазній шаруватій смузі з областю найбільш ймовірного розташування включень біля нижньої поверхні, усередненого за ансамблем конфігурацій фаз:

$$\begin{aligned} \langle J(z,t) \rangle = & J_0(z,t) + \frac{(D_1 - D_0)v_1}{z_0^{\alpha-2} h_1} \int_0^t \left[\int_0^{h_1} z'^{\alpha} G(z, z', t, t') \frac{\partial^2 J_0(z', t')}{\partial z'^2} dz' + \right. \\ & \left. + \int_{h_1}^{z_0} (z'^{\alpha} - (z' - h_1)^{\alpha}) G(z, z', t, t') \frac{\partial^2 J_0(z', t')}{\partial z'^2} dz' \right] dt'. \end{aligned} \quad (3.6)$$

Якщо у формулу (3.6) підставимо вирази для функції Гріна $G(z, z', t, t')$ (2.42) та потоку в однорідному тілі $J_0(z, t)$ (2.30), тоді отримуємо розрахункову формулу для усередненого за ансамблем конфігурацій фаз дифузійного потоку у двофазній смузї за нульової початкової концентрації домішки в тілі

$$\begin{aligned} \frac{\langle J(z,t) \rangle}{J_*} = & 1 - \frac{2}{z_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\xi_n} e^{-D_0 \xi_n^2 t} \sin(\xi_n z) + \frac{2(D_1 - D_0)v_1}{D_0 z_0^{\alpha} h_1} \times \\ & \times \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\xi_n}{y_k^2 - \xi_n^2} \left(e^{-D_0 \xi_n^2 t} - e^{-D_0 y_k^2 t} \right) A_{kn}^{(1)} \sin(y_k z), \end{aligned} \quad (3.7)$$

де $A_{kn}^{(1)} = f(0, x_{kn}^-) - f(0, x_{kn}^+) - f(h_1, x_{kn}^-) + f(h_1, x_{kn}^+)$, $x_{kn}^{\pm} = y_k \pm \xi_n$;

$$f(a, p) = \int_a^{z_0} (z - a)^{\alpha} \cos(pz) dz.$$

Якщо задано сталий ненульовий розподіл концентрації домішки в початковий момент часу, то у формулу (3.6) підставляємо вираз (2.39) для потоку в однорідному шарі $J_0(z, t)$. Тоді розрахункова формула для усередненого потоку маси за ненульової початкової концентрації набуде вигляду

$$\begin{aligned} \frac{\langle J(z,t) \rangle}{J_*} = & 1 - \frac{2}{z_0} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-D_0 \xi_n^2 t} \left(\frac{1}{\xi_n} + (-1)^n \frac{D_0 c^*}{J_*} \right) \sin(\xi_n z) + \\ & + \frac{2(D_1 - D_0)v_1}{D_0 z_0^{\alpha} h_1} \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\xi_n}{y_k^2 - \xi_n^2} \left(1 + (-1)^n \frac{D_0 c^*}{J_*} \xi_n \right) \left(e^{-D_0 \xi_n^2 t} - e^{-D_0 y_k^2 t} \right) \times \\ & \times (f(0, y_k - \xi_n) - f(0, y_k + \xi_n) - f(h_1, y_k - \xi_n) + f(h_1, y_k + \xi_n)) \sin(y_k z). \end{aligned} \quad (3.8)$$

Зазначимо, що формули (3.7) та (3.8) для розрахунку усереднених дифузійних потоків за нульової та ненульової початкових концентрацій містять інтегральні доданки і для числового аналізу вимагають застосування методів чисельного інтегрування. Тут застосовується метод трапецій [66].

3.1.2 Комп'ютерне моделювання усереднених дифузійних потоків у смузі з ймовірним розташуванням включень біля нижньої межі

На основі формул (3.7) та (3.8) було розроблено модулі пакета програм для розрахунку усереднених дифузійних потоків домішкової речовини у двофазній багатошаровій смузі з областю найбільш ймовірного розташування включень біля нижньої поверхні тіла. Числові розрахунки проведено у безрозмірних змінних (2.43). В якості параметрів числового дослідження прийнято такі значення: $\tau = 0.1$; $\nu_1 = 0.2$; $h_1 = 0.01$; $\alpha = 2.5$; $c_*/J_* = 0.1$.

На рис. 3.3 проілюстровано розподіли усереднених потоків маси в різні моменти безрозмірного часу $\tau = 0.01$; 0.03; 0.1; 0.5; 1 (криві 1-5). На рис. 3.4 показано розподіли потоків маси у смузі за різних значень відношення коефіцієнтів дифузії $D_1/D_0 = 0.01$; 0.5; 2; 5; 10; 15; 20 (криві 1-7). Рис. 3.5 ілюструє поведінку усередненого дифузійного потоку маси для різних значень об'ємної частки включень: $\nu_1 = 0.05$; 0.1; 0.2 (криві 1-3). Тут криві а наведені для $D_1/D_0 = 0.01$, криві б – $D_1/D_0 = 10$. На рис. 3.6 показано розподіли функції потоку залежно від ступеня вільності функції $f_1(\zeta)$ $\alpha = 1.5$; 2.5; 3.5 (криві 1-3, рис. 3.6,а) та від відношення $c_*/J_* = 0.01$; 0.1; 0.2; 0.3; 0.4 (криві 1-5, рис. 3.6,б) за ненульової сталої початкової концентрації домішки. Рис. 3.3,а-3.5,а відповідають випадку нульової початкової концентрації домішки в тілі, рис. 3.3,б-3.5,б – ненульової сталої початкової концентрації. На рис. 3.3, 3.6 криві а побудовані для $D_1/D_0 = 0.01$, криві б – $D_1/D_0 = 2$. Штриховою лінією позначено відповідні потоки в однорідному шарі з характеристиками матриці.

Зауважимо, що як і у випадку рівномірного розподілу включень у тілі, для $D_1 < D_0$ потоки домішки для нульової початкової концентрації є завжди монотонно спадними функціями (рис. 3.3,а). Для $D_1 > D_0$ за невеликих різниць коефіцієнтів дифузії функція $\langle J(\zeta, \tau) \rangle / J_*$ також є спадною на всьому проміжку, а за великої різниці між цими коефіцієнтами спостерігається зростання усередненого потоку від поверхні, де діє джерело маси (крива 7, рис. 3.4,б).

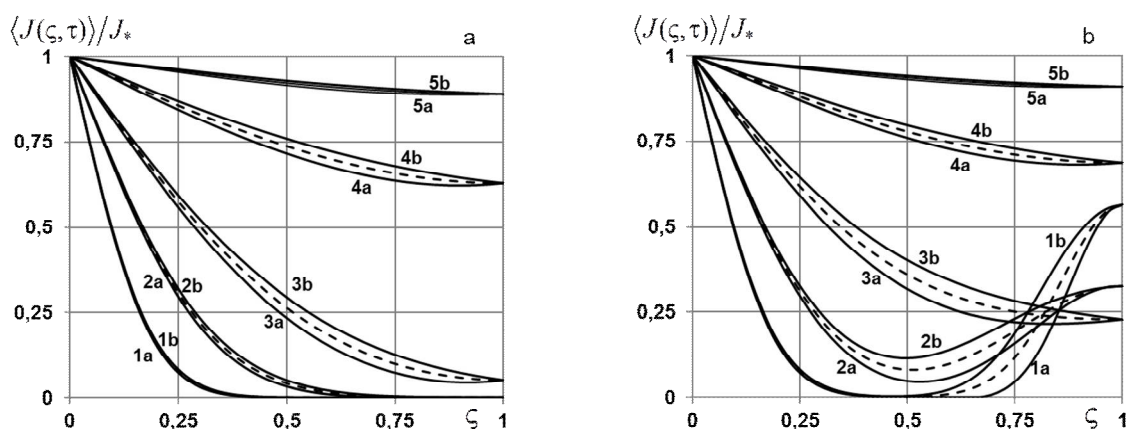


Рис. 3.3. Розподіли потоків маси у смузі в різні моменти часу за нульової (а) та ненульової (б) початкових концентрацій

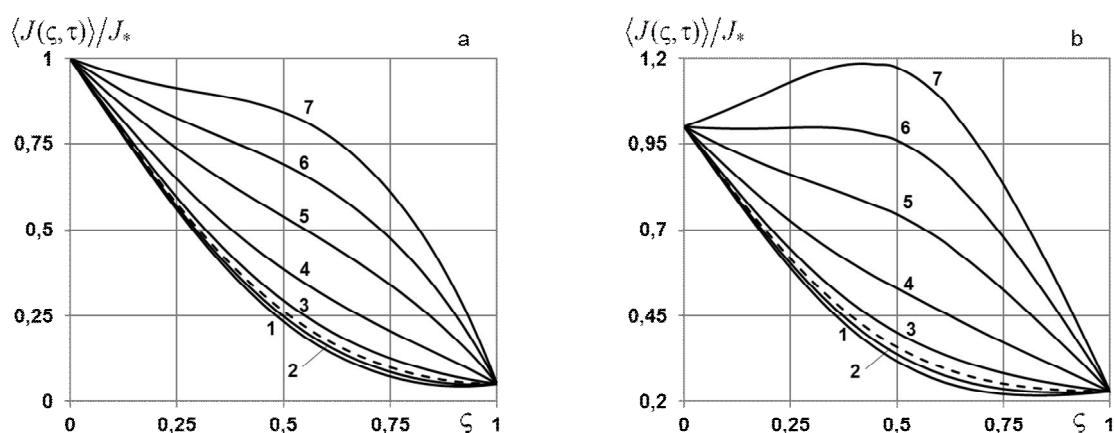


Рис. 3.4. Розподіли потоків маси у смузі для різних значень відношення D_1 / D_0 за нульової (а) та ненульової (б) початкових концентрацій

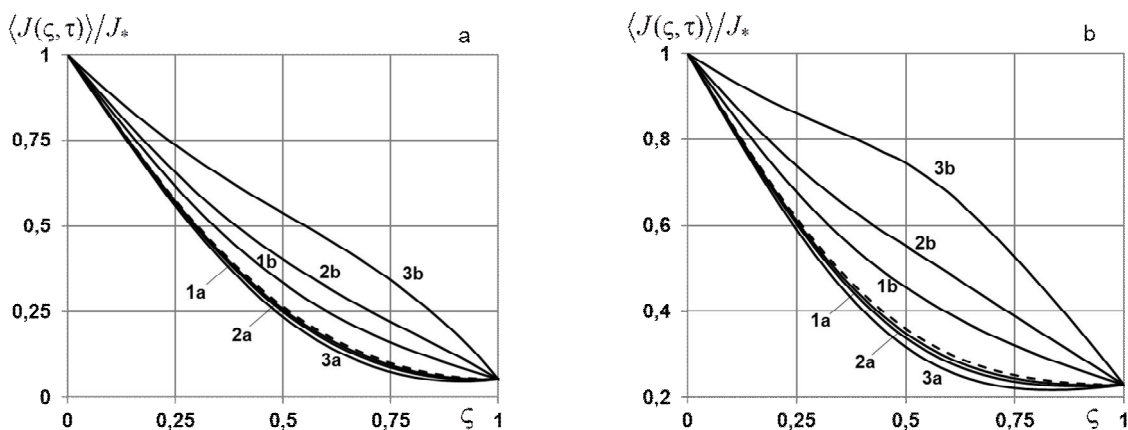


Рис. 3.5. Розподіли потоків маси у смузі для різних значень об'ємної частки вклучень v_1 за нульової (а) та ненульової (б) початкових концентрацій

За ненульової сталої початкової концентрації домішки дифузійний потік від межі $\zeta = 0$ спадає, в середині шару є близьким до нуля, і стрімко зростає біля межі $\zeta = 1$ (криві 1a та 1b, рис. 3.3,b). Причому усереднені потоки маси від границі тіла, де підтримується сталий потік, практично співпадають з потоком

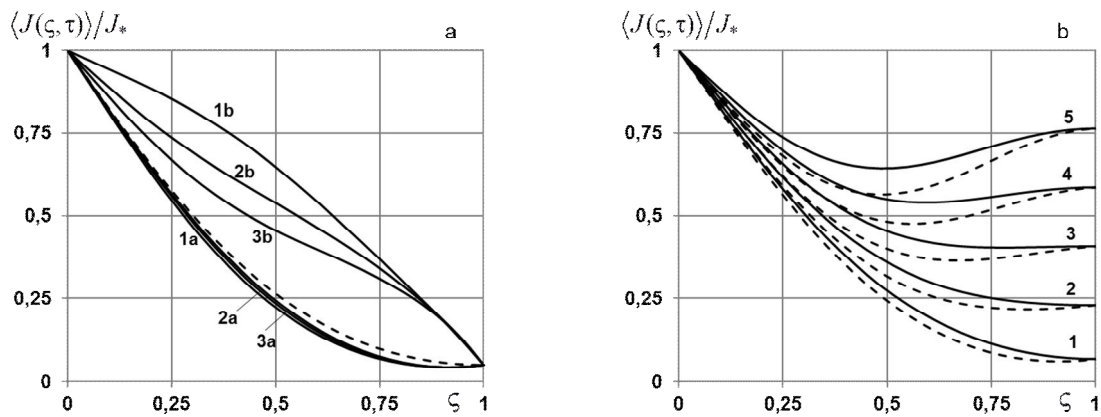


Рис. 3.6. Розподіли потоків маси у смузі для різних значень ступеня вільності α (a) та відношення c_*/J_* (b)

в однорідній смузі (криві 1, рис. 3.3,b), а від середини шару починають відрізнятися один від одного та від потоку у смузі без прошарків. З часом відмінності між потоками зростають на всьому проміжку (криві 2 і 3, рис. 3.3,b), так, зокрема, для $D_1/D_0 = 2$ різниця між усередненими потоками у неоднорідній смузі та потоками в однорідному шарі може сягати 60%. Потім відмінності між потоками зменшуються (крива 4 і 5, рис. 3.3,b), доки не вийдуть на усталений режим.

У випадку, коли коефіцієнт дифузії домішки у прошарках є більшим, ніж у матриці, потік в неоднорідному тілі є завжди більшим, ніж в однорідному (рис. 3.4). У протилежному випадку потік в багат шаровій смузі є меншим, ніж в однорідному шарі (криві 1, 2, рис. 3.4). При цьому зі зростанням коефіцієнта дифузії у включеннях по відношенню до коефіцієнта дифузії в матриці усереднений потік маси зростає на всьому проміжку (рис. 3.4), зокрема, за ненульової початкової концентрації значення потоку всередині шару можуть стати більшими за його значення на верхній межі шару (крива 7, рис. 3.4,b). Така ситуація пояснюється одночасним зростанням потоку через нижню межу смуги.

Зазначимо, що збільшення об'ємної частки включень для $D_1 < D_0$ веде до зменшення значень потоку маси, а для $D_1 > D_0$ – до збільшення величини потоку, особливо на проміжку $\zeta \in [0.3; 0.8]$ (рис. 3.5). Зауважимо, що зміна характерної товщини прошарків практично не впливає на поведінку усередненого потоку (різниця у 3 значимій цифрі). Якщо $D_1 < D_0$, то збільшення ступеня вільності α (ущільнення включень до нижньої поверхні) незначно впливає на значення усередненого потоку (криві а, рис. 3.6,a). Якщо ж коефіцієнт дифузії у вклю-

ченнях більший за коефіцієнт дифузії у матриці, то збільшення параметра α призводить до зміни поведінки функції потоку. Зокрема, при малих значеннях α функція потоку є опуклою вгору (крива 1b, рис. 3.6,a), із зростанням α величина усередненого потоку зменшується, і функція $\langle J(\zeta, \tau) \rangle / J_*$ стає увігнутою на інтервалі $\zeta \in [0; 0.6]$ (крива 3b, рис. 3.6,a). Зазначимо, що поведінка усередненого потоку маси для різних значень ступеня вільності α є однаковою як для нульової так і ненульової початкових концентрацій домішки у тілі.

Значення початкової концентрації впливає як на поведінку, так і на значення функції потоку. У випадку, коли коефіцієнт дифузії домішки у включеннях є меншим за коефіцієнт дифузії у матриці, для малих значень відношення c_*/J_* потік домішки як в однорідному шарі, так і у багатошаровій смугі, є монотонно спадним (крива 1, рис. 3.6,b). Збільшення початкової концентрації c_* призводить до збільшення потоку біля поверхні шару $\zeta=1$, що може призвести до появи локального мінімуму в середині шару (криві 4 і 5, рис. 3.6,b).

Крім того, розглянуто випадок дифузії водню у шаруватому матеріалі α -залізо-нікель. Тут в якості базової фази приймаємо залізо і вважаємо, що область найбільш ймовірного розташування прошарків нікелю міститься в околі нижньої границі тіла. Прийнято $D_1/D_0 = D_{Ni}/D_{\alpha Fe} = 14.797$ [72, 167], $v_{Ni} = 0.2$, $h_{Ni} = 0.01$, $c_*/J_* = 0.1$. На рис. 3.7 показано розподіли усереднених потоків водню в різні моменти безрозмірного часу $\tau = 0.01; 0.03; 0.1; 0.5$ (криві 1-4) для нульової (рис. 3.7,a) та ненульової сталої (рис. 3.7,b) початкових концентрацій H у композиті $\alpha Fe - Ni$.

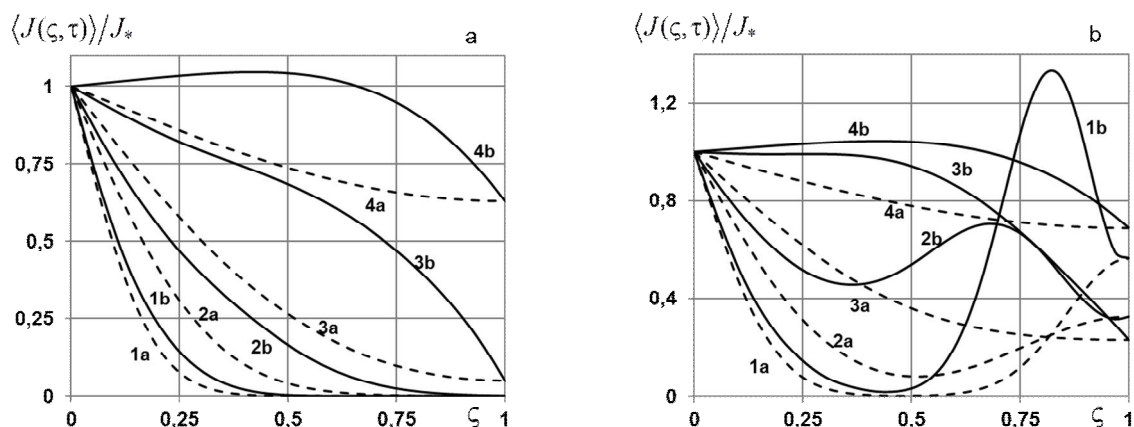


Рис. 3.7. Розподіли потоків водню у композиті $\alpha Fe - Ni$ для різних часів за нульової (a) та ненульової сталої (b) початкових концентрацій

Зазначимо, що для малих часів протікання процесу дифузії, як у випадку нульової так і ненульової сталої початкових концентрацій H , потоки в однорідному шарі α -заліза та у тілі з прошарками нікелю від межі поверхні $\zeta=0$ до середини смуги незначно відрізняються між собою (криві 1, рис. 3.7). Проте від середини тіла для випадку сталого ненульового початкового розподілу H усереднені потоки водню різко відрізняються від потоків в однорідному тілі і утворюють приповерхневий максимум в околі $\zeta=1$ (крива 1b, рис. 3.7). З часом цей максимум зменшується, і потоки водню виходять на стаціонарний режим.

3.1.3 Дифузійний потік у смузі з найімовірнішим розташуванням включень біля верхньої поверхні

Розглянемо ще один частковий випадок β -розподілу, який отримуємо, якщо у формулу (3.1) підставимо $\alpha = 1$, $\beta > 1$. Функція густини такого розподілу є наступною [63]

$$f_2(z) = \begin{cases} \beta \left(1 - \frac{z}{z_0}\right)^{\beta-1}, & z \in [0; z_0]; \\ 0, & z \notin [0; z_0] \end{cases} \quad (3.9)$$

Розподіл $f_2(z)$ є протилежним до розподілу $f_1(z)$ – на «верхній» поверхні з ймовірністю 1 розташований підшар включення, область найбільш ймовірного знаходження включень також зосереджена біля цієї поверхні, а на «нижній» межі апріорі розташована матриця (рис. 3.8 і 3.9).

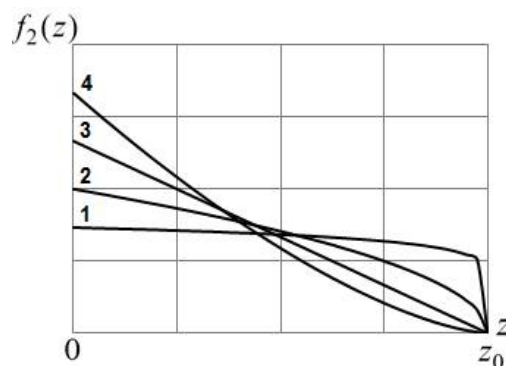


Рис. 3.8. Густина розподілу $f_2(z)$ для різних ступенів вільності β

Графіки густини розподілу $f_2(z)$ для різних ступенів вільності $\beta = 1.1; 1.5; 2; 2.5$ (криві 1-4) подано на рис. 3.8. На рис. 3.9 наведено відповідні харак-

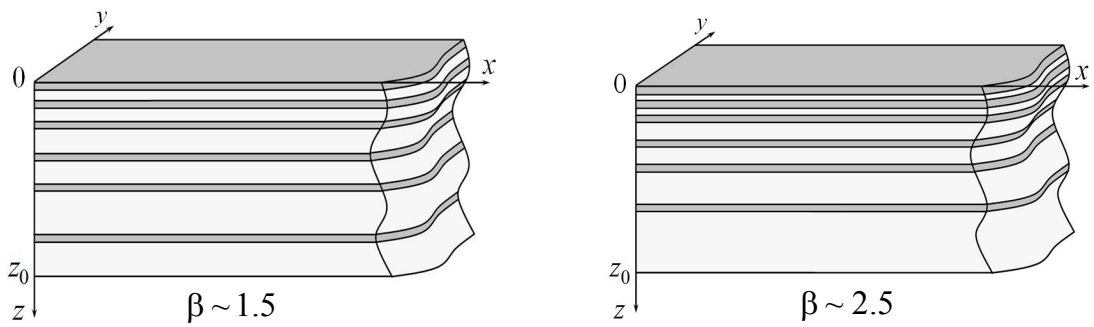


Рис. 3.9. Багатошарові структури з $f_2(z)$ розподілом включень

терні структури багатошарової смуги. Зазначимо, що у цьому випадку зростання значення ступеня вільності β призводить до ущільнення шаруватих включень до границі $z = 0$, у той же час ймовірність розташування включення в околі іншої границі шару зменшується.

Як і у попередніх випадках, випадковий дифузійний потік $J(z, t)$ в структурах типу поданих на рис. 3.9 описується рівнянням дифузії (2.6). Приймаємо, що справджуються крайові умови (2.7) і (2.8), і розглядаємо випадки нульової та ненульової сталої початкових концентрацій.

Розв'язок крайової задачі дифузії у багатошаровій смугі з областю найбільш ймовірного розташування включень біля верхньої поверхні смуги, де діє джерело маси, (2.6)-(2.8) подаємо у вигляді ряду Неймана (2.58). Обмежившись двома першими членами цього ряду, проведемо процедуру усереднення за ансамблем конфігурацій фаз із функцією розподілу включень $f_2(z)$ (3.9):

$$\begin{aligned} \langle J(z, t) \rangle_{conf} = & J_0(z, t) + (D_1 - D_0) \int_0^t \int_0^{z_0} G(z, z', t, t') \frac{\partial J_0(z', t')}{\partial z'^2} \times \\ & \times \sum_{i=1}^{n_1} \int_{(V)} \eta_{i1}(z') f_2(z_{i1}) dz_{i1} dz' dt'. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Відповідно до (3.4) маємо

$$\sum_{i=1}^{n_1} \langle \eta_{i1}(z') \rangle = \sum_{i=1}^{n_1} \int_0^{z'} \eta_{i1}(x) f_2(z' - x) dx = \beta \sum_{i=1}^{n_1} \int_0^{z'} \eta_{i1}(x) \left(1 - \frac{z' - x}{z_0}\right)^{\beta-1} dx.$$

Зокрема, можливі такі два випадки:

1) якщо $z' \leq h_1$, то

$$\sum_{i=1}^{n_1} \int_0^{z'} \eta_{i1}(x) \left(1 - \frac{z' - x}{z_0}\right)^{\beta-1} dx = \sum_{i=1}^{n_1} \int_0^{z'} \left(1 - \frac{z' - x}{z_0}\right)^{\beta-1} dx = \frac{v_1}{\beta h_1 z_0^{\beta-2}} \left[z_0^\beta - (z_0 - z')^\beta \right];$$

2) якщо $z' \geq h_1$, то

$$\sum_{i=1}^{n_1} \int_0^{h_1} \eta_{i1}(x) \left(1 - \frac{z' - x}{z_0}\right)^{\beta-1} dx = \frac{v_1}{\beta h_1 z_0^{\beta-2}} \left[(z_0 - z' + h_1)^\beta - (z_0 - z')^\beta \right].$$

Отже, для даного розподілу включень одержимо

$$\sum_{i=1}^{n_1} \langle \eta_{i1}(z') \rangle = \frac{v_1}{h_1 z_0^{\beta-2}} \begin{cases} z_0^\beta - (z_0 - z')^\beta, & z' \leq h_1; \\ (z_0 + h_1 - z')^\beta - (z_0 - z')^\beta, & z' \geq h_1. \end{cases} \quad (3.11)$$

Враховуючи вираз (3.11), усереднена функція (3.10) набуде вигляду

$$\begin{aligned} \langle J(z, t) \rangle = & J_0(z, t) + \frac{(D_1 - D_0)v_1}{z_0^{\beta-2} h_1} \int_0^t \int_0^{h_1} (z_0^\beta - (z_0 - z')^\beta) G(z, z', t, t') \frac{\partial^2 J_0(z', t')}{\partial z'^2} dz' + \\ & + \int_{h_1}^{z_0} ((z_0 + h_1 - z')^\beta - (z_0 - z')^\beta) G(z, z', t, t') \frac{\partial^2 J_0(z', t')}{\partial z'^2} dz' \Big] dt'. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Таким чином, одержано формулу для знаходження усередненого за ансамблем конфігурацій фаз дифузійного потоку домішкової речовини у двофазній випадково неоднорідній багатошаровій смузі з найбільш ймовірним розташуванням включень в околі верхньої межі.

Підставляючи у співвідношення (3.12) вирази для функції Гріна (2.42) та дифузійного потоку в однорідній смузі за нульової початкової концентрації (2.30), отримаємо таку розрахункову формулу

$$\begin{aligned} \frac{\langle J(z, t) \rangle}{J_*} = & 1 - \frac{2}{z_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\xi_n} e^{-D_0 \xi_n^2 t} \sin(\xi_n z) + \frac{2(D_1 - D_0)v_1}{D_0 z_0^\beta h_1} \times \\ & \times \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\xi_n}{y_k^2 - \xi_n^2} \left(e^{-D_0 \xi_n^2 t} - e^{-D_0 y_k^2 t} \right) (a_{kn} z_0^\beta + A_{kn}^{(2)}) \sin(y_k z), \end{aligned} \quad (3.13)$$

де $A_{kn}^{(2)} = \bar{f}(h_1, z_0 + h_1, x_{kn}^-) - \bar{f}(h_1, z_0 + h_1, x_{kn}^+) - \bar{f}(0, z_0, x_{kn}^-) + \bar{f}(0, z_0, x_{kn}^+)$,

$$\bar{f}(a, c, p) = \int_a^{z_0} (c - z)^\beta \cos(pz) dz,$$

$$a_{kn} = \sin(x_{kn}^- h_1) / x_{kn}^- - \sin(x_{kn}^+ h_1) / x_{kn}^+.$$

У випадку ненульової сталої початкової концентрації домішки у тілі розрахункова формула для усередненого дифузійного потоку є наступною

$$\begin{aligned}
\frac{\langle J(z,t) \rangle}{J_*} = & 1 - \frac{2}{z_0} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-D_0 \xi_n^2 t} \left(\frac{1}{\xi_n} + (-1)^n \frac{D_0 c_*}{J_*} \right) \sin(\xi_n z) + \\
& + \frac{2(D_1 - D_0) v_1}{D_0 z_0^\beta} \frac{1}{h_1} \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\xi_n}{y_k^2 - \xi_n^2} \left(1 + (-1)^n \frac{D_0 c_*}{J_*} \xi_n \right) \times \\
& \times \left(e^{-D_0 \xi_n^2 t} - e^{-D_0 y_k^2 t} \right) \sin(y_k z) \left(a_{kn} z_0^\beta + \bar{f}(h_1, z_0 + h_1, y_k - \xi_n) - \right. \\
& \left. - \bar{f}(h_1, z_0 + h_1, y_k + \xi_n) - \bar{f}(0, z_0, y_k - \xi_n) + \bar{f}(0, z_0, y_k + \xi_n) \right). \quad (3.14)
\end{aligned}$$

Інтегральні доданки у виразах (3.13) та (3.14) також обчислимо за допомогою методу трапецій [66].

Проведемо числовий аналіз отриманих розрахункових формул.

3.1.4 Комп'ютерне моделювання усереднених потоків у смузі з ймовірним розташуванням включень біля верхньої межі

На основі формул (3.13) та (3.14) були розроблені модулі пакета програм для кількісного та якісного аналізу усередненого дифузійного потоку в багат шаровій смузі з областю найбільш ймовірного розташування включень біля верхньої поверхні тіла, де діє джерело маси. Числові розрахунки проведено у безрозмірних змінних ζ і τ (2.43). В якості параметрів числового дослідження прийнято $\tau = 0.1$; $v_1 = 0.2$; $h_1 = 0.01$; $\beta = 2.5$; $c_*/J_* = 0.1$. На рис. 3.10 наведено розподіли потоків маси в різні моменти безрозмірного часу $\tau = 0.01$; 0.03; 0.1; 0.5; 1 (криві 1-5) за нульової (рис. 3.10,а) та ненульової сталої (рис. 3.10,б) початкових концентрацій.

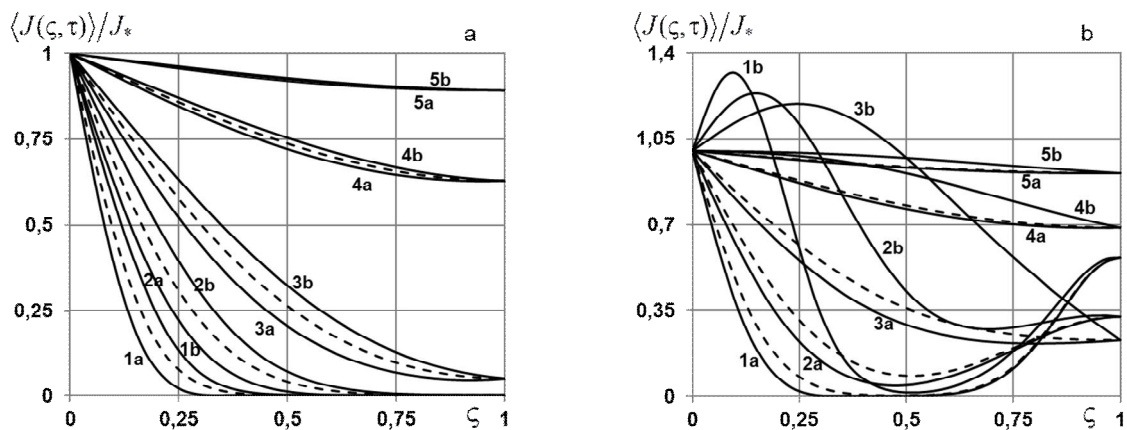


Рис. 3.10. Розподіли потоків маси у смузі в різні моменти часу за нульової (а) та ненульової (б) початкових концентрацій

На рис. 3.11 проілюстровано розподіли усереднених дифузійних потоків за різних значень відношення $D_1 / D_0 = 0.01; 0.5; 2; 5; 10; 15; 20$ (криві 1-7). На рис. 3.12 показано вплив об'ємної частки включень v_1 на значення усередненого потоку, криві 1-3 відповідають значенням $v_1 = 0.05; 0.1; 0.2$. Рис. 3.13 ілюструє залежність функції потоку від ступеня вільності розподілу $f_2(\zeta)$ $\beta = 1.5; 2.5; 3.5$ (криві 1-3, рис. 3.13,а) та від відношення $c_* / J_* = 0.01; 0.1; 0.2; 0.3; 0.4$ (криві 1-5, рис. 3.13,б). Графіки на рис. 3.10,а-3.12,а побудовано для випадку нульової початкової концентрації, рис. 3.10,б-3.12,б – ненульової сталої початкової концентрації. На рис. 3.10 криві а наведені для $D_1/D_0 = 0.01$, криві б – $D_1/D_0 = 2$, а на рис. 3.12, 3.13 для $D_1/D_0 = 0.01$ і $D_1/D_0 = 10$ відповідно. Штриховими лініями позначено потоки в однорідному шарі.

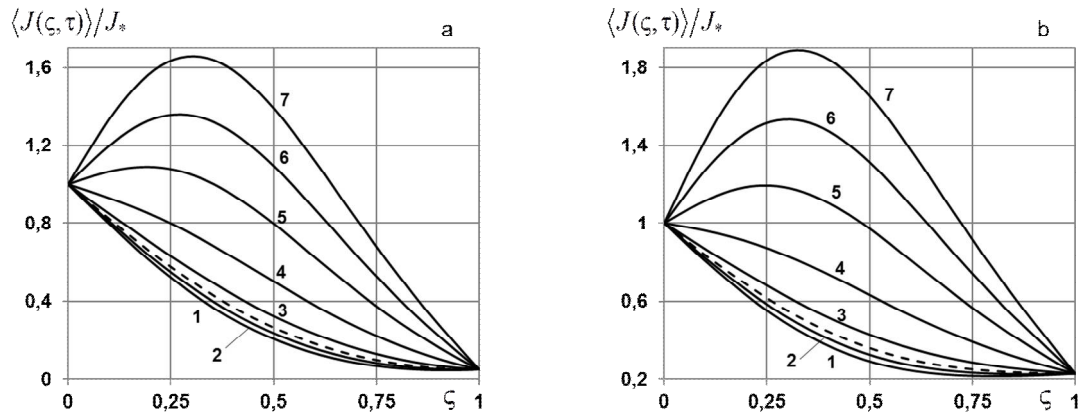


Рис. 3.11. Розподіли потоків маси у смузї для різних значень відношення D_1 / D_0 за нульової (а) та ненульової (б) початкових концентрацій

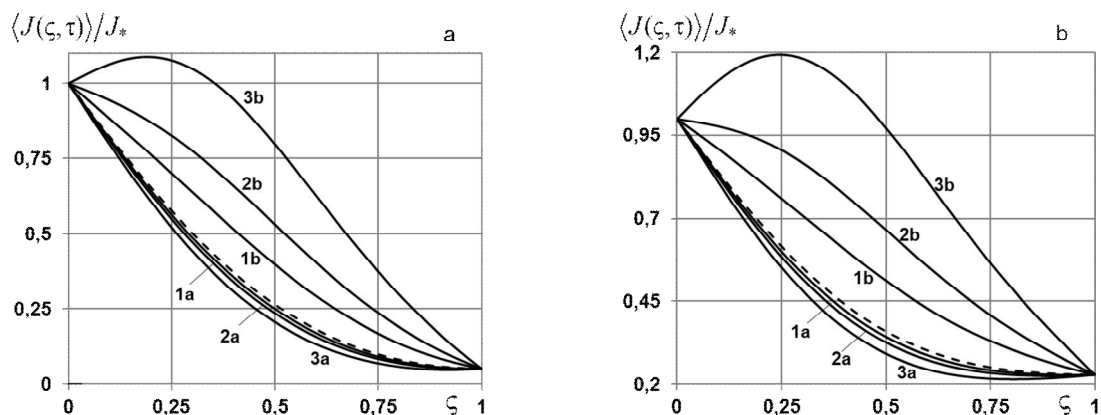


Рис. 3.12. Розподіли потоків маси у смузї для різних значень об'ємної частки включень v_1 за нульової (а) та ненульової (б) початкових концентрацій

Зазначимо, що для $D_1 < D_0$ і для $D_1 > D_0$ у випадку невеликих відхилень коефіцієнта дифузії у включеннях від коефіцієнта дифузії домішки у матриці

($D_1/D_0 \leq 5$), усереднені потоки домішки для нульової початкової концентрації є монотонно спадними функціями (криві 1-4, рис. 3.11,а). При цьому з часом значення потоку зростають в усій області тіла, поки не вийдуть на усталений режим (рис. 3.10,а). У випадку, коли включення сконцентровані біля джерела маси, спостерігається відхилення до 20% між усередненими потоками в неоднорідній смугі та однорідному шарі (криві 1а-3а та 1b-3b, рис. 3.10,а), на відміну від випадку, поданому на рис. 3.3,а, де відчутна різниця спостерігається для часів $\tau > 0.5$ (криві 3а, 4а та 3b, 4b, рис. 3.3,а).

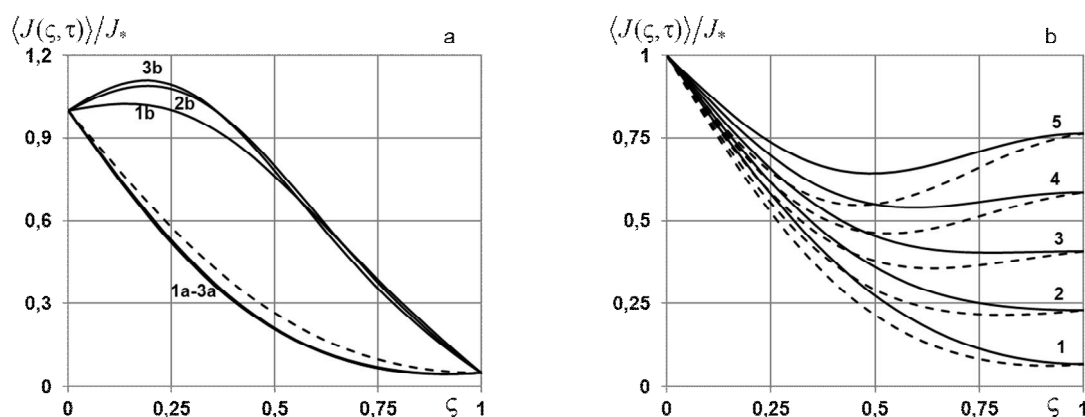


Рис. 3.13. Розподіли потоків маси у смугі для різних значень ступеня вільності β (а) та відношення c_*/J_* (б)

Наявність дифундуючої речовини в початковий момент часу суттєво впливає на розподіли потоків маси для малих часів протікання процесу дифузії. Так для $\tau = 0.01$ потік маси від межі $\zeta = 0$ спадає, в середині шару є близьким до нуля, і стрімко зростає біля межі $\zeta = 1$ (криві 1а та 1b на рис. 3.10,б). Причому біля верхньої межі потоки у однорідній та неоднорідній смугах суттєво відрізняються, і майже однакові для $\zeta > 0.45$ (криві 1, рис. 3.10,б). Із збільшенням τ відмінності між потоками спочатку зростають на всьому проміжку (криві 2 і 3, рис. 3.10,б), а потім зменшуються (криві 4 і 5, рис. 3.10,б) до виходу на стаціонарний режим. Збільшення приведенного коефіцієнта дифузії D_1/D_0 призводить до зростання усередненого потоку як за нульової, так і ненульової сталої початкових концентрацій (рис. 3.11). При цьому можливе утворення глобального максимуму всередині шару, який за ненульової початкової концентрації до 15% більший, ніж за нульової концентрації (криві 5-7, рис. 3.11).

Зауважимо, що для $D_1/D_0 < 1$ збільшення об'ємної частки включень викликає зменшення значення потоку маси, а для $D_1/D_0 > 1$ – зростання потоку як для нульової, так і ненульової початкових концентрацій (рис. 3.12). Крім того, для великих значень v_1 усереднений потік всередині шару може стати більшими за його значення на верхній межі шару (криві 3b, рис. 3.12). Зміна товщини прошарків h_1 як за нульової, так і ненульової початкових концентрацій практично не впливає на значення усередненого потоку.

Якщо коефіцієнт дифузії у включеннях менший за коефіцієнт дифузії у матриці, то збільшення ступеня вільності β (ущільнення включень до верхньої поверхні тіла) незначно впливає на значення усередненого потоку (криві а, рис. 3.13,а). У випадку $D_1 > D_0$ збільшення значення параметра β викликає зростання значення дифузійного потоку біля верхньої межі смуги, але не змінює його поведінку (криві b, рис. 3.13,а). Зазначимо, що поведінка усередненого дифузійного потоку для різних значень ступеня вільності β є однаковою як для нульової так і ненульової початкових концентрацій домішки у тілі. Зміна відношення c_*/J_* впливає як на поведінку, так і на значення функції потоку домішкової речовини. Збільшення початкової концентрації c_* для $D_1 < D_0$ призводить до збільшення потоку біля поверхні шару $\zeta = 1$, що може призвести до появи локального мінімуму в середині шару (криві 4 і 5, рис. 3.13,б).

Також розглянуто дифузцію атомів вуглецю у шаруватому матеріалі α -залізо-нікель, де в якості матеріалу базової фази вважаємо залізо, а область ймовірного розташування прошарків міді знаходиться біля верхньої границі. Тут $D_1/D_0 = D_{Ni}/D_{\alpha Fe} = 14.286$ [72, 167]. Приймаємо, що матеріал $\alpha Fe - Ni$ містить 20 нікелевих прошарків, товщини $h_{Ni} = 0.01$ ($v_{Ni} = 0.2$), а відношення початкової концентрації C до його потоку на верхній границі тіла становить $c_*/J_* = 0.1$.

На рис. 3.14 наведено розподіли усереднених потоків вуглецю в різні моменти часу $\tau = 0.01; 0.03; 0.1; 0.5$ (криві 1-4) для нульової (рис. 3.14,а) та ненульової сталі (рис. 3.14,б) початкових концентрацій вуглецю. Тут криві а (штри-

хові лінії) побудовані для потоків вуглецю в однорідному шарі αFe , криві b (суцільні лінії) – в тілі з нікелевими прошарками.

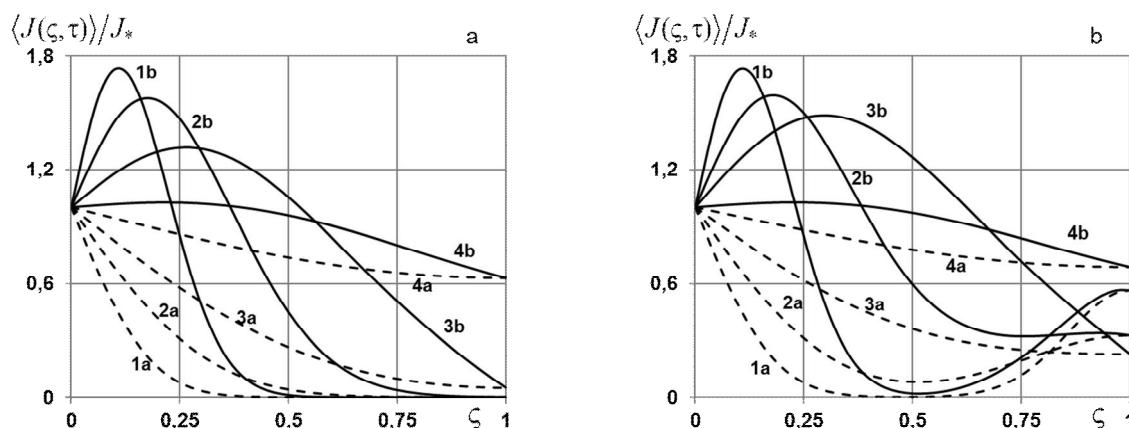


Рис. 3.14 Розподіли потоків вуглецю у композиті $\alpha Fe - Ni$ для різних часів за нульової (а) та ненульової сталого (б) початкових концентрацій

Показано, що наявність нікелевих прошарків збільшує усереднені потоки C у структурі $\alpha Fe - Ni$ (рис. 3.14). При цьому для малих часів протікання процесу дифузії потоки вуглецю біля верхньої поверхні тіла різко зростають і набувають значень до 80% більших, ніж потік C на границі $\zeta = 0$ (криві 1b-2b, рис. 3.14). У випадку сталого ненульового початкового розподілу атомів вуглецю в тілі, функція потоку для $\tau < 0.05$ набуває приповерхневого максимуму в околі нижньої границі тіла (крива 1b, рис. 3.14,b).

3.1.5 Дифузійний потік у смузі з найімовірнішим розташуванням включень посередині тіла

Ще одним частковим випадком β -розподілу є розподіл з функцією густини [63]

$$f_3(z) = \begin{cases} \frac{\Gamma(2\alpha)}{\Gamma^2(\alpha)} \left(\frac{z}{z_0}\right)^{\alpha-1} \left(1 - \frac{z}{z_0}\right)^{\alpha-1}, & z \in [0; z_0]; \\ 0, & z \notin [0; z_0], \end{cases} \quad (3.15)$$

який одержуємо з формули (3.1) для значень ступенів вільності $\alpha = \beta > 1$ [63].

Розподіл $f_3(z)$ описує випадкову шарувату структуру з областю ймовірного розташування включення посередині тіла (рис. 3.15 і 3.16), при цьому з ймовірністю 1 на границі шару $z = 0$ і на межі $z = z_0$ знаходиться матриця.

Зазначимо, що при $\alpha = \beta = 1$ розподіл (3.15) співпадає з рівномірним.

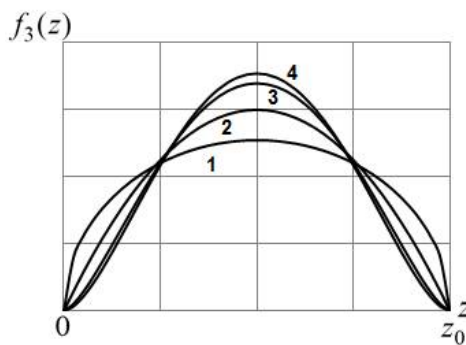


Рис. 3.15. Густина розподілу $f_3(z)$ для різних ступенів вільності α

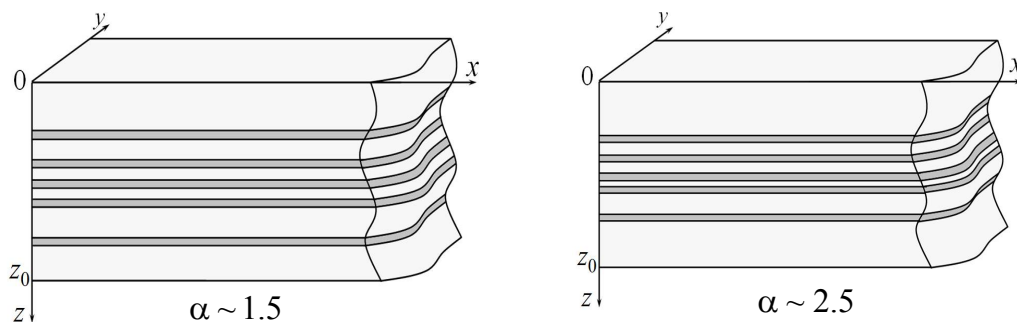


Рис. 3.16. Багатошарові структури з $f_3(z)$ розподілом включень

На рис. 3.15 проілюстровано характерні густини розподілу $f_3(z)$ за таких значень ступенів вільності: $\alpha = \beta = 1.5; 2; 2.5; 2.7$ (криві 1-4). На рис. 3.16 наведено характерні структури багатошарової смуги. Зауважимо, що збільшення параметра α призводить до ущільнення включень до середини тіла, при цьому область найбільш ймовірного розташування включень звужується (рис. 3.16).

Потік домішкової речовини через двофазну смугу з внутрішньою структурою типу поданих на рис. 3.16, як і в попередніх випадках, описується рівнянням дифузії (2.6). Приймаємо, що справджуються крайові умови на функцію потоку (2.7) і (2.8). Тут також розглянемо випадки нульової та ненульової сталої початкових концентрацій домішкової речовини.

Розв'язок крайової задачі дифузії (2.6)-(2.8) подаємо у вигляді ряду Неймана (2.58). Усереднимо перші два доданки цього ряду за ансамблем конфігурацій фаз із функцією розподілу включень $f_3(z)$ (3.15):

$$\begin{aligned} \langle J(z,t) \rangle_{conf} = & J_0(z,t) + (D_1 - D_0) \int_0^t \int_0^{z_0} G(z,z',t,t') \frac{\partial J_0(z',t')}{\partial z'^2} \times \\ & \times \sum_{i=1}^{n_1} \int_{(V)} \eta_{i1}(z') f_3(z_{i1}) dz_{i1} dz' dt'. \end{aligned} \quad (3.16)$$

Аналогічно до (3.4) маємо

$$\sum_{i=1}^{n_1} \langle \eta_{i1}(z') \rangle = \sum_{i=1}^{n_1} \int_0^{z'} \eta_{i1}(x) f_3(z' - x) dx = \frac{\Gamma(2\alpha)}{\Gamma^2(\alpha)} \sum_{i=1}^{n_1} \int_0^{z'} \eta_{i1}(x) \left[\left(\frac{z' - x}{z_0} \right) \left(1 - \frac{z' - x}{z_0} \right) \right]^{\alpha-1} dx.$$

Розглянемо такі два випадки

1) якщо $z' \leq h_1$, то

$$\sum_{i=1}^{n_1} \int_0^{z'} \eta_{i1}(x) \left[\left(\frac{z' - x}{z_0} \right) \left(1 - \frac{z' - x}{z_0} \right) \right]^{\alpha-1} dx = n_1 \int_0^{z'} \left[z_0(z' - x) - (z' - x)^2 \right]^{\alpha-1} dx;$$

2) якщо $z' \geq h_1$, то

$$\sum_{i=1}^{n_1} \int_0^{h_1} \eta_{i1}(x) \left[\left(\frac{z' - x}{z_0} \right) \left(1 - \frac{z' - x}{z_0} \right) \right]^{\alpha-1} dx = n_1 \int_0^{h_1} \left[z_0(z' - x) - (z' - x)^2 \right]^{\alpha-1} dx.$$

Обчисливши відповідні інтеграли [102], усереднена «функція структури» з розподілом $f_3(z)$ набуде вигляду

$$\sum_{i=1}^{n_1} \langle \eta_{i1}(z') \rangle = \frac{Bv_1}{h_1 z_0^{\alpha-2}} \begin{cases} z'^{\alpha} {}_2\bar{F}_1(z'/z_0), & z' \leq h_1 \\ z'^{\alpha} {}_2\bar{F}_1(z'/z_0) - (z' - h_1)^{\alpha} {}_2\bar{F}_1((z' - h_1)/z_0), & z' \geq h_1 \end{cases}, \quad (3.17)$$

де $B = \frac{\Gamma(2\alpha)}{\alpha \Gamma^2(\alpha)}$, ${}_2\bar{F}_1(z) = {}_2F_1(\alpha, 1 - \alpha; 1 + \alpha, z)$,

${}_2F_1(a, b; c; z) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(a)_m (b)_m}{(c)_m} \frac{z^m}{m!}$ – гіпергеометрична функція [102],

$(a)_m = a(a+1)\dots(a+m-1)$, $(a)_0 = 1$.

Підставимо вираз (3.17) у співвідношення (3.16), тоді отримаємо формулу для знаходження усередненого дифузійного потоку домішкових частинок у двофазній смузі з включеннями, зосередженими посередині тіла:

$$\begin{aligned} \langle J(z, t) \rangle = J_0(z, t) + \frac{(D_1 - D_0)Bv_1}{z_0^{\alpha-2} h_1} \int_0^t \int_0^{z_0} z'^{\alpha} {}_2\bar{F}_1\left(\frac{z'}{z_0}\right) G(z, z', t, t') \frac{\partial^2 J_0(z', t')}{\partial z'^2} dz' - \\ - \int_{h_1}^{z_0} (z' - h_1)^{\alpha} {}_2\bar{F}_1\left(\frac{z' - h_1}{z_0}\right) G(z, z', t, t') \frac{\partial^2 J_0(z', t')}{\partial z'^2} dz' \Big] dt'. \end{aligned} \quad (3.18)$$

Якщо у (3.18) підставити вирази для функції Гріна $G(z, z', t, t')$ (2.42) та дифузійного потоку в однорідному тілі $J_0(z, t)$ (2.30), то отримаємо розрахун-

кову формулу для усередненого за ансамблем конфігурацій фаз дифузійного потоку у двофазній смузі за нульової початкової концентрації домішки в тілі

$$\begin{aligned} \frac{\langle J(z,t) \rangle}{J_*} = & 1 - \frac{2}{z_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\xi_n} e^{-D_0 \xi_n^2 t} \sin(\xi_n z) + \frac{2(D_1 - D_0)v_1 B}{D_0 z_0^\beta h_1} \times \\ & \times \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\xi_n}{y_k^2 - \xi_n^2} \left(e^{-D_0 \xi_n^2 t} - e^{-D_0 y_k^2 t} \right) \bar{A}_{kn} \sin(y_k z), \end{aligned} \quad (3.19)$$

де $\bar{A}_{kn} = f(0,0,x_{kn}^-) - f(0,0,x_{kn}^+) - f(h_1,0,x_{kn}^-) + f(h_1,0,x_{kn}^+) +$
 $+ \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\alpha(1-\alpha)\dots(m-\alpha)}{z_0^m m!(m+\alpha)} [f(0,m,x_{kn}^-) - f(0,m,x_{kn}^+) - f(h_1,m,x_{kn}^-) + f(h_1,m,x_{kn}^+)],$
 $f(a,b,p) = \int_a^{z_0} (z-a)^{\alpha+b} \cos(pz) dz.$

Якщо задана ненульова початкова концентрація домішки у тілі, то для $J_0(z,t)$ використаємо формулу (2.39) і розрахункова формула для усередненого дифузійного потоку буде наступною

$$\begin{aligned} \frac{\langle J(z,t) \rangle}{J_*} = & 1 - \frac{2}{z_0} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-D_0 \xi_n^2 t} \left(\frac{1}{\xi_n} + (-1)^n \frac{D_0 c_*}{J_*} \right) \sin(\xi_n z) + \frac{2(D_1 - D_0)v_1 B}{D_0 z_0^\alpha h_1} \\ & \times \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\xi_n}{y_k^2 - \xi_n^2} \left(e^{-D_0 \xi_n^2 t} - e^{-D_0 y_k^2 t} \right) \left(1 + (-1)^n \frac{D_0 c_*}{J_*} \xi_n \right) \bar{A}_{kn} \sin(y_k z). \end{aligned} \quad (3.20)$$

Зазначимо, що інтегральні доданки у (3.19) та (3.20) обчислюватимемо методом трапецій [66].

3.1.6 Комп'ютерне моделювання усереднених потоків у смузі з ймовірним розташуванням включень посередині тіла

Проаналізуємо залежність усередненого дифузійного потоку у двофазній багат шаровій смузі з включеннями розташованими за розподілом $f_3(\zeta)$ від вхідних параметрів задачі за нульової та ненульової сталої початкових концентрацій. І в цьому випадку проводимо числові розрахунки у безрозмірних змінних (2.43) за формулами (3.19), (3.20). В якості параметрів числового дослідження прийнято такі значення: $\tau = 0.1$; $v_1 = 0.2$; $h_1 = 0.01$; $\alpha = 2.5$; $c_*/J_* = 0.1$. На рис. 3.17

показано поведінку усередненого дифузійного потоку в різні моменти безрозмірного часу $\tau = 0.01; 0.03; 0.1; 0.5; 1$ (криві 1-5). На рис. 3.18 наведено розподіли потоків маси у смузї за різних значень приведенного коефіцієнта дифузії $D_1/D_0 = 0.01; 0.5; 2; 5; 10; 15$ (криві 1-6). Рис. 3.19 ілюструє залежність функції дифузійного потоку від різних значень об'ємної частки включень: криві 1-3 відповідають $v_1 = 0.05; 0.1; 0.2$. На рис. 3.20 показано розподіли функції $\langle J(\zeta, \tau) \rangle / J_*$ залежно від ступеня вільності функції $f_3(\zeta)$ $\alpha = 1.5; 2.5; 3.5$ (криві 1-3). На рис. 3.17, 3.19 і 3.20 криві а наведені для $D_1/D_0 = 0.01$, криві b – $D_1/D_0 = 10$. Рис. 3.17,а-3.20,а відповідають випадку нульової початкової концентрації домішки в тілі, рис. 3.17,б-3.20,б – ненульової сталої початкової концентрації. Штриховою лінією позначено дифузійні потоки в однорідному шарі.

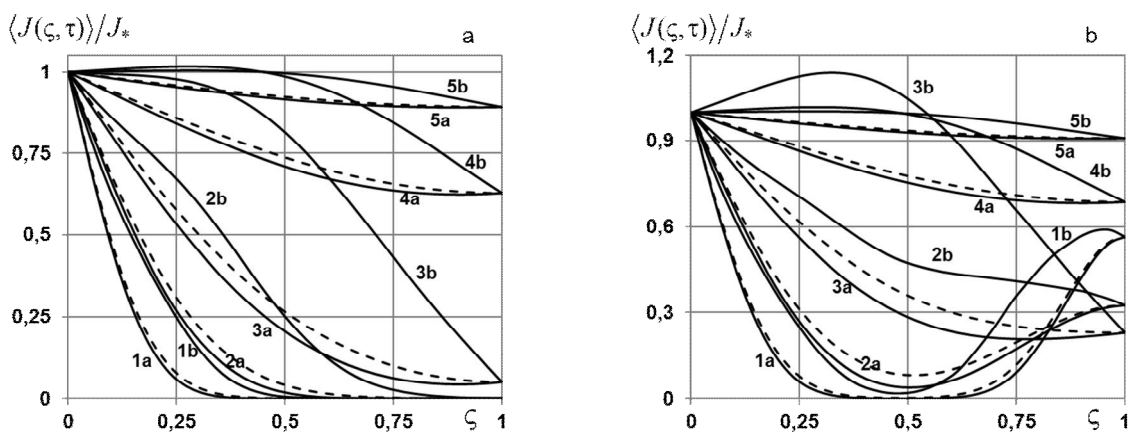


Рис. 3.17. Розподіли потоків маси у смузї в різні моменти часу за нульової (а) та ненульової (б) початкових концентрацій

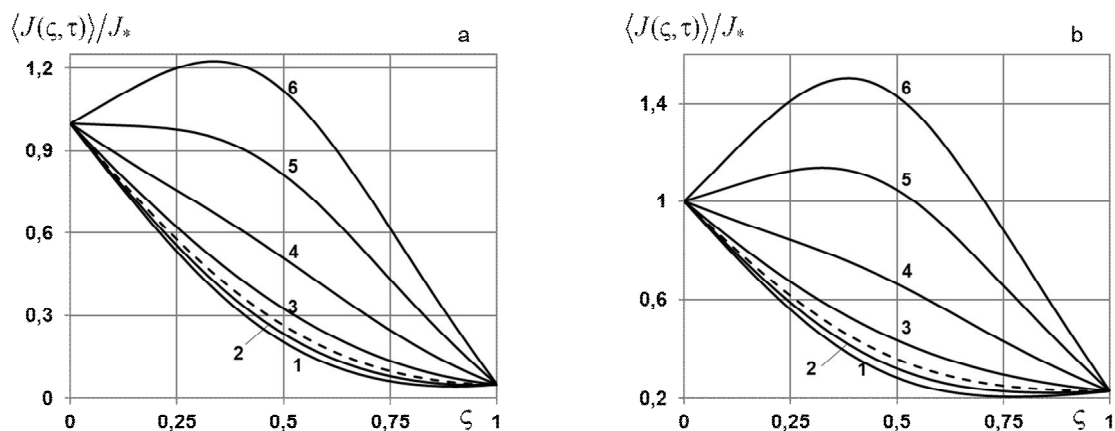


Рис. 3.18. Розподіли потоків маси у смузї для різних значень відношення D_1/D_0 за нульової (а) та ненульової (б) початкових концентрацій

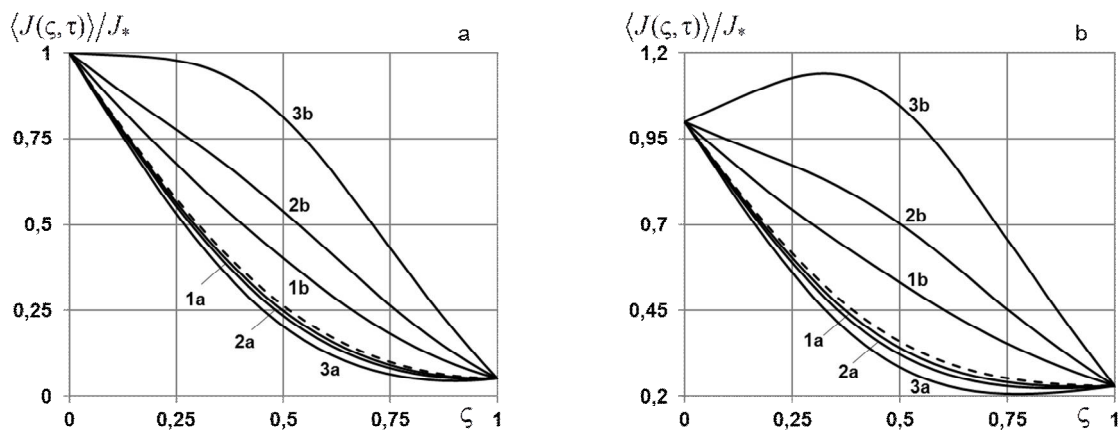


Рис. 3.19. Розподіли потоків маси у смузї для різних значень об'ємної частки включень v_1 за нульової (а) та ненульової (б) початкових концентрацій

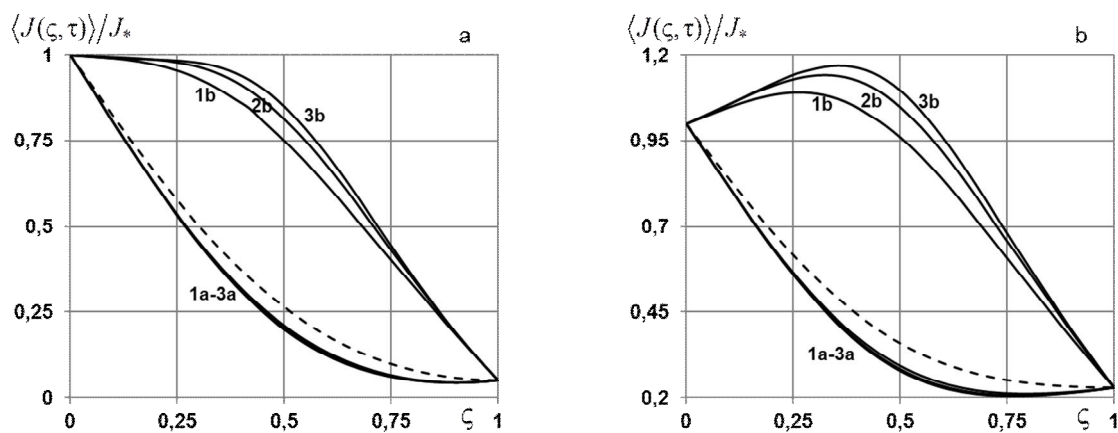


Рис. 3.20. Розподіли потоків маси у смузї для різних значень ступеня вільності α за нульової (а) та ненульової (б) початкових концентрацій

Для випадку $D_1 < D_0$ поведінка функції усередненого потоку є подібною до розподілів потоків у шаруватому тілі з ймовірним приповерхневим розташуванням включень. Зазначимо, що за нульової початкової концентрації домішкової речовини у випадку меншого коефіцієнта дифузії у включеннях, ніж у матриці, функція $\langle J(\zeta, \tau) \rangle / J_*$ завжди є монотонно спадною (криві а, рис. 3.17).

За ненульової сталої початкової концентрації для малих часів ($\tau < 0.02$) дифузійний потік від границі $\zeta = 0$ спадає, в середині шару є близьким до нуля, і стрімко зростає біля границі $\zeta = 1$ (криві 1, рис. 3.17,b). Із збільшенням часу протікання процесу дифузії, у випадку $D_1 > D_0$ усереднений потік суттєво зростає, перевищуючи значення, які підтримуються на границі $\zeta = 0$ (крива 3b, рис. 3.17,b). Далі функція потоку залишається опуклою вгору (криві 4b, 5b, рис. 3.17,b), і у подальшому її максимум зменшується та пропадає під час наближення до стаціонарного режиму. Зауважимо, що у цій задачі, на відміну від

попередніх випадків, числові розрахунки для кривих *b* проведені для $D_1/D_0=10$. Для значень $D_1/D_0=2$ одержимо значення усередненого потоку, які містяться між відповідними значеннями для структур з включеннями зосередженими біля однієї або іншої з поверхонь (рис. 3.3,b і 3.10,b).

При збільшенні приведенного коефіцієнта дифузії усереднений потік маси зростає на всьому проміжку (рис. 3.18). Поведінка функції $\langle J(\zeta, \tau) \rangle / J_*$ для нульової та ненульової початкових концентрацій є подібною (рис. 3.18,a і рис. 3.18,b). При цьому для ненульової початкової концентрації значення усередненого потоку є більшими, максимально відрізняючись на 24% для $D_1/D_0=15$, $\zeta = 0.38$ (криві *b*, рис. 3.18,a і рис. 3.18,b).

Збільшення об'ємної частки включень для $D_1/D_0 < 1$ викликає зменшення значення усередненого потоку маси, а для $D_1/D_0 > 1$ – зростання функції $\langle J(\zeta, \tau) \rangle / J_*$ (рис. 3.19), зокрема за ненульової початкової концентрації для великих значень v_1 усереднений потік може стати більшими за його значення на верхній межі шару (крива *3b*, рис. 3.19,b). Ущільнення включень до середини тіла для $D_1 < D_0$ практично не впливає на значення та поведінку потоку маси (криві *a*, рис. 3.20). Якщо ж коефіцієнт дифузії у включеннях 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 *b*, рис. 3.20), найбільше в середині тіла.

Зазначимо, що для розподілу $f_3(\zeta)$ залежність усередненого дифузійного потоку від значення відношення c_*/J_* є аналогічною як і для розподілів $f_1(\zeta)$ та $f_2(\zeta)$. Для малих значень відношення c_*/J_* потік домішки як в однорідному шарі, так і у багат шаровій смузі, є монотонно спадною функцією. Зі збільшенням початкової концентрації c_* потік біля поверхні шару $\zeta = 1$ зростає, та можливе утворення локального мінімуму в середині шару. І в цьому випадку зміна товщини прошарків h_1 практично не впливає на значення усередненого дифузійного потоку (зміна у 3 значимій цифрі).

На рис. 3.21 проілюстровано розподіли потоків водню у шаруватому композитному матеріалі $Fe - Cu$, в якому залізо вважаємо базовою фазою, а

область ймовірного розташування прошарків міді знаходиться посередині тіла. Прийнято коефіцієнти дифузії [72, 165] у залізі $D_{Fe} = 1.8 \cdot 10^{-11}$ м²/с, у міді $D_{Cu} = 4.34 \cdot 10^{-10}$ м²/с ($D_1/D_0 = D_{Cu}/D_{Fe} = 24.11$), $\tau = 0.1$, характерна товщина мідних прошарків $h_{Cu} = 0.01$.

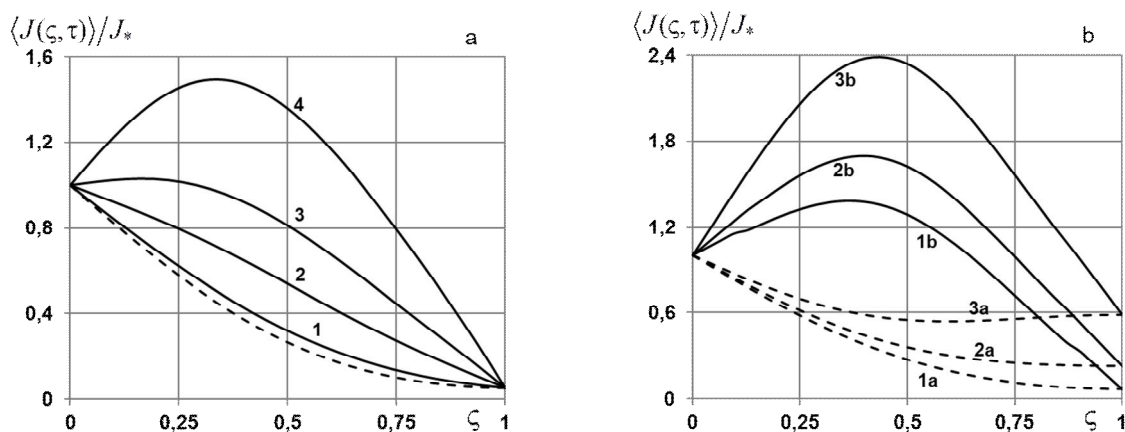


Рис. 3.21. Розподіли потоків водню композиті $Fe - Cu$ для різних значень об'ємної частки міді (а) та відношення c_*/J_* (б)

На рис. 3.21,а показано поведінку усереднених потоків водню за його нульової початкової концентрації для різних значень $v_{Cu} = 0.01; 0.05; 0.1; 0.2$ (криві 1-4), а на рис. 3.21,б при ненульовій сталій початковій концентрації H для $c_*/J_* = 0.01; 0.1; 0.3$ (криві 1-3). Тут криві а відповідають потокам у залізній смузі, криві б – потокам у структурі $Fe - Cu$.

Зазначимо, чим більше прошарків міді у фазі заліза, тим більше усереднені потоки водню відрізняються від потоків в однорідній смузі (рис. 3.21,а). При цьому максимальні відмінності між потоками досягаються посередині прошарку. Крім того, збільшення початкової концентрації H в тілі призводить до зростання потоків, також найбільше в середині смуги (рис. 3.21,б).

3.1.7 Порівняння усереднених потоків для різних модельних варіантів структури

Проведемо порівняння поведінки усереднених дифузійних потоків домішки у двофазних структурах для випадків рівномірного розподілу фаз в тілі (рис. 2.14) та часткових варіантів β -розподілу прошарків (3.2), (3.9) і (3.15), за

яких область найбільш ймовірного розташування включень міститься біля однієї з поверхонь (рис. 3.2 і рис. 3.9) або посередині тіла (рис. 3.16).

На рис. 3.22-3.26 наведено порівняльні зображення розподілів усереднених дифузійних потоків у смузі з рівномірним розподілом фаз (криві 1), обчислені за формулами (2.74) і (2.75), смугах з областю найбільш ймовірного розташування включень біля нижньої поверхні (криві 2) і біля верхньої границі (криві 3), розраховані за виразами (3.7), (3.8) і (3.13), (3.14) відповідно, та посередині тіла (криві 4), обчислені за формулами (3.19) і (3.20). В якості параметрів числового дослідження прийнято такі значення: $\tau = 0.1$; $\nu_1 = 0.2$; $h_1 = 0.01$; $\alpha = 2.5$; $\beta = 2.5$ та $c_*/J_* = 0.1$. Штрихові лінії відповідають дифузійному потоку в однорідному тілі з характеристиками матриці.

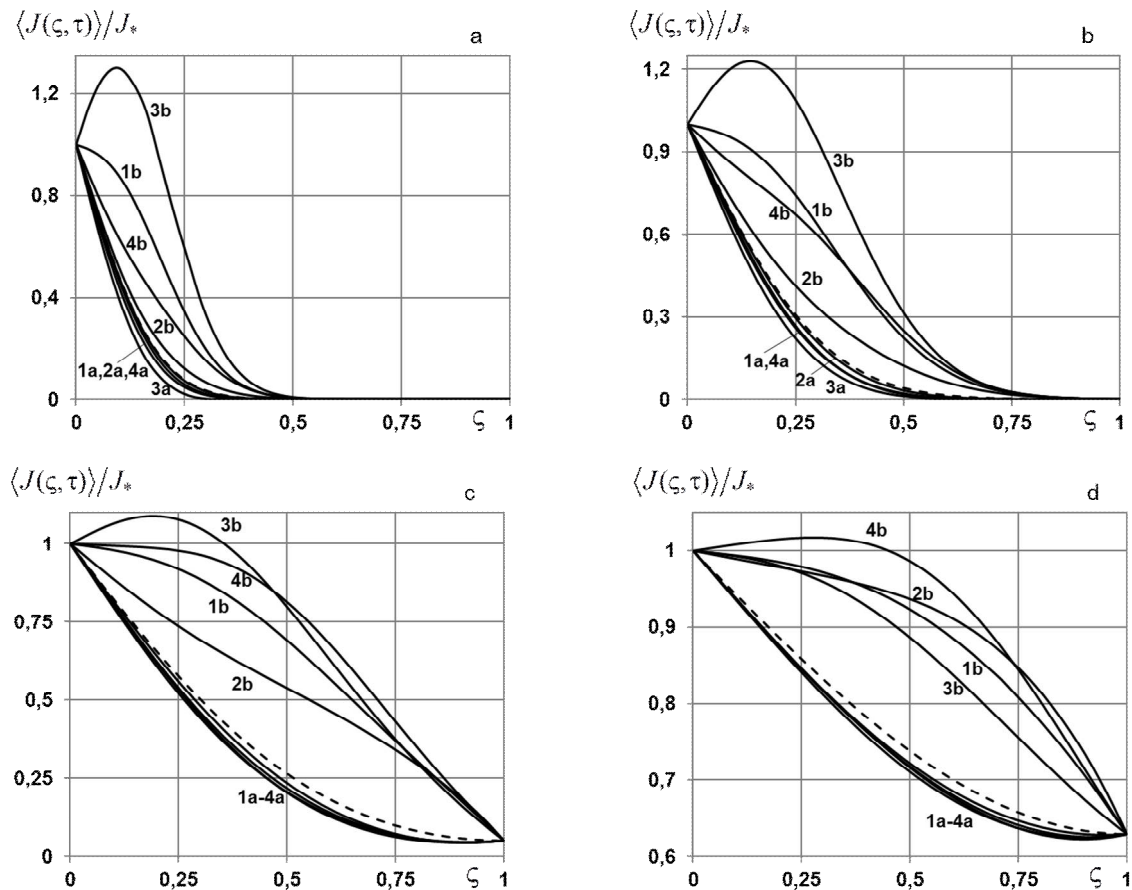


Рис. 3.22. Розподіли потоків маси за нульової початкової концентрації для різних модельних випадків при $\tau = 0.01$ (a), $\tau = 0.03$ (b), $\tau = 0.1$ (c) та $\tau = 0.5$ (d)

На рис. 3.22 наведені усереднені потоки маси за нульової початкової концентрації, а на рис. 3.23 – за ненульової сталої початкової концентрації в різні моменти безрозмірного часу $\tau = 0.01$ (рис. 3.23,а), $\tau = 0.03$ (рис. 3.23,б), $\tau = 0.1$

(рис. 3.23,с) та $\tau = 0.5$ (рис. 3.23,д) для $D_1/D_0 = 0.01$ (криві а) і $D_1/D_0 = 10$ (криві б). На рис. 3.24 представлено розподіли потоків маси за нульової (рис. 3.24,а) та ненульової сталої (рис. 3.24,б) початкових концентрацій для малої та великої об'ємних часток включень v_1 . Тут криві а (штрих-пунктирні лінії) описують відповідні розподіли для $v_1 = 0.05$, а криві б (суцільні лінії) – для $v_1 = 0.1$.

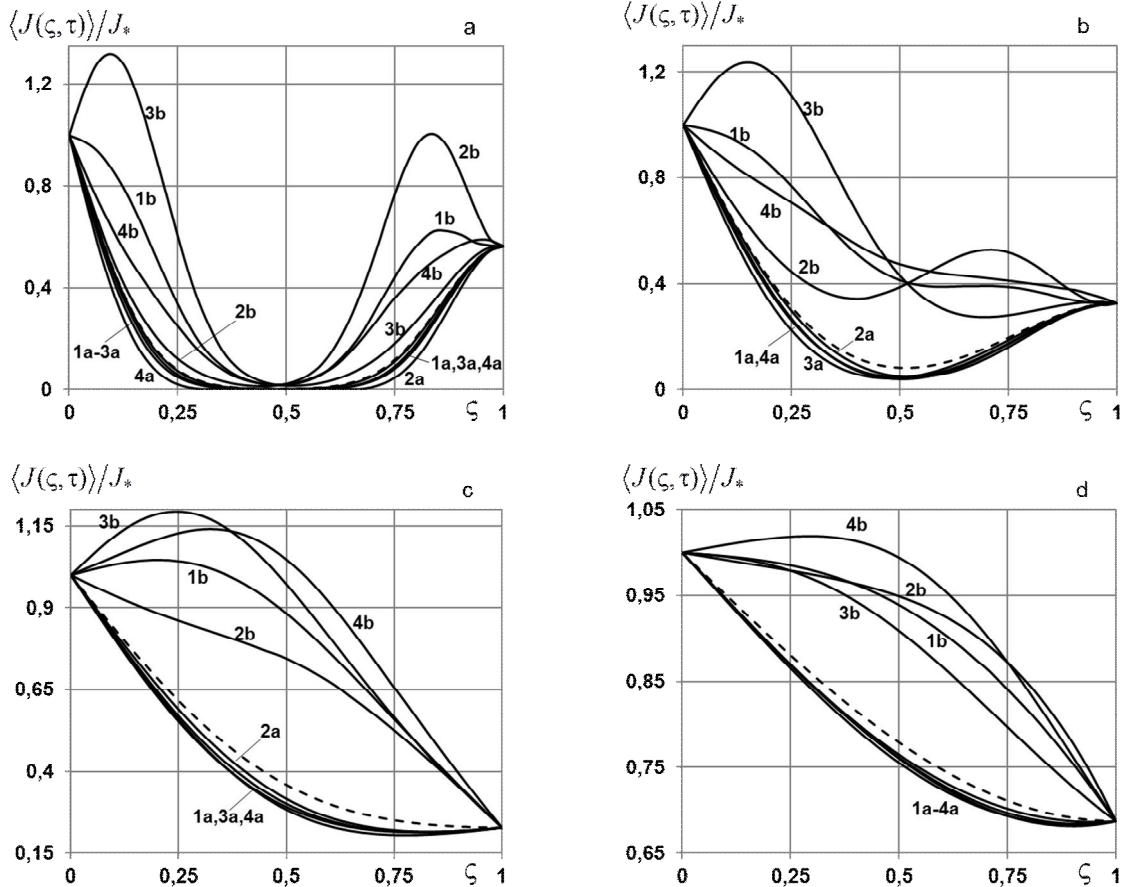


Рис. 3.23. Розподіли потоків маси за ненульової початкової концентрації для різних модельних випадків при $\tau = 0.01$ (а), $\tau = 0.03$ (б), $\tau = 0.1$ (с) та $\tau = 0.5$ (д)

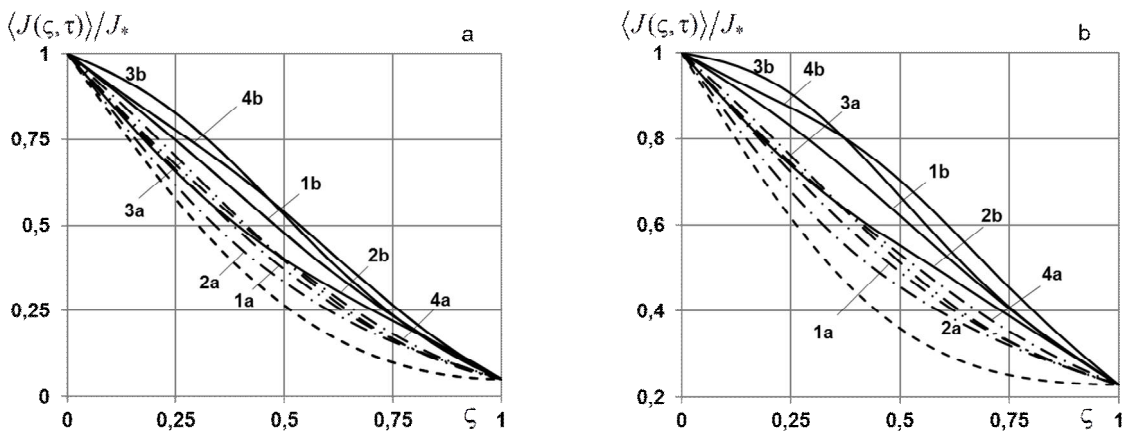


Рис. 3.24. Потоки маси за нульової (а) та ненульової (б) початкових концентрацій для різних модельних випадків в залежності від об'ємної частки включень v_1

Рис. 3.25 зображує порівняльні розподіли усереднених дифузійних потоків за нульової (рис. 3.25,a) та ненульової сталої (рис. 3.25,b) початкових концентрацій в залежності від відношення коефіцієнтів дифузії у включеннях та матриці. Зокрема, криві а (штрих-пунктирні лінії) розраховані для $D_1/D_0=5$, а криві b (суцільні лінії) – $D_1/D_0=15$. На рис. 3.26 проілюстровані порівняльні розподіли потоків домішкової речовини за ненульової сталої початкової концентрації в залежності від значень відношення c_*/J_* для $D_1/D_0=0.01$ (рис. 3.26,a) та $D_1/D_0=10$ (рис. 3.26,b). Тут криві а (штрих-пунктирні лінії) описують відповідні розподіли для $c_*/J_*=0.01$, а криві b (суцільні лінії) – для $c_*/J_*=0.4$, криві 5 (штрихові лінії) відповідають потокам в однорідному тілі.

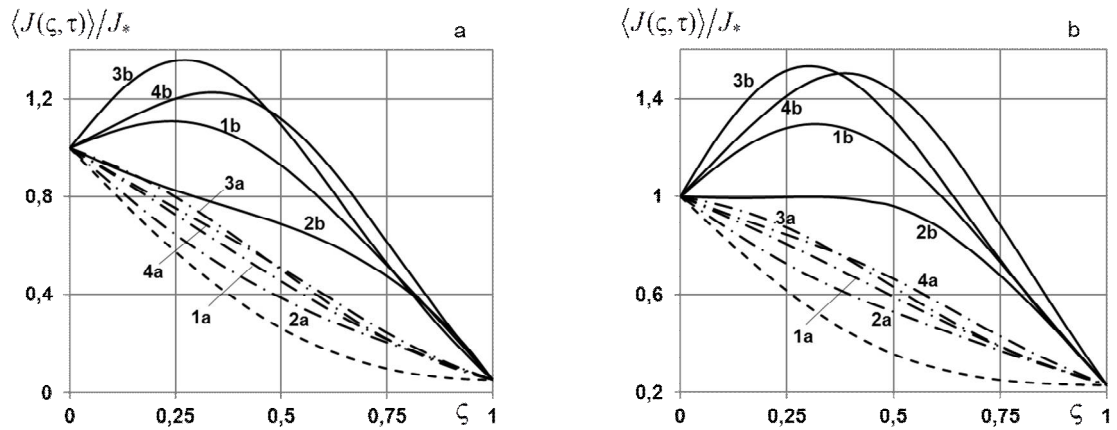


Рис. 3.25. Потоки маси за нульової (а) та ненульової (б) початкових концентрацій для різних модельних випадків в залежності від відношення D_1/D_0

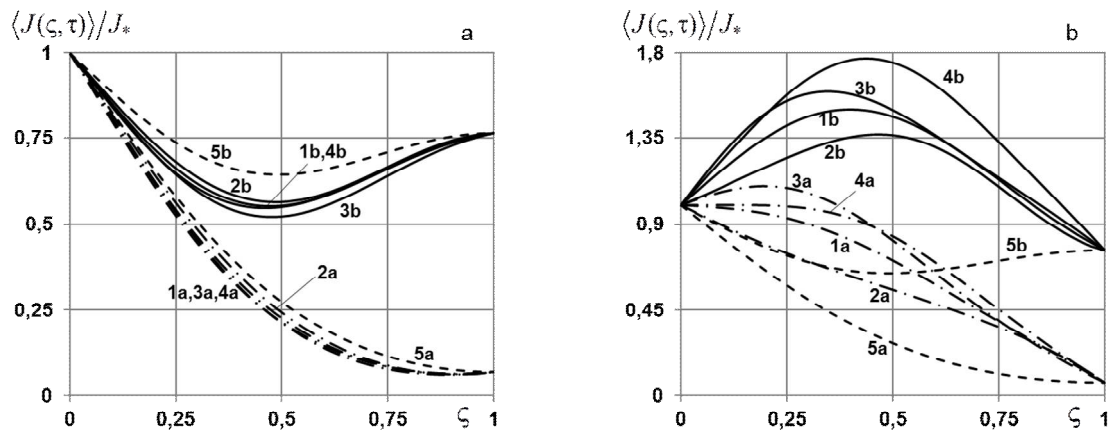


Рис. 3.26. Розподіли потоків маси за ненульової початкової концентрації для різних модельних випадків при $D_1/D_0=0.01$ (а) та $D_1/D_0=10$ (б) в залежності від відношення c_*/J_*

У випадку менших значень коефіцієнта дифузії у включеннях, ніж у матриці, для малих часів ($\tau < 0.1$) усереднений дифузійний потік за нульової початкової концентрації на проміжку $\zeta \in [0.1; 0.45]$ у структурі з прошарками розташованими біля верхньої поверхні тіла є до 70% меншим за потоки у трьох інших структурах (криві 3a, рис. 3.22,a і 3.22,b). Із збільшенням τ різниця між потоками зменшується (криві a, рис. 3.22,c), і для $\tau = 0.5$ усереднені потоки для різних випадків розташування включень практично співпадають (криві a, рис. 3.22,d). Якщо ж коефіцієнт дифузії домішки у включеннях є більшим, ніж коефіцієнт дифузії у матриці, для малих часів дифузійний потік у смузі з прошарками зосередженими біля верхньої поверхні тіла є найбільшим з розглянутих варіантів розподілів неоднорідностей і утворює приповерхневий максимум (криві 3b, рис. 3.22,a-3.22,c), тоді як для інших розподілів включень у тілі характерна спадна поведінка усереднених потоків (криві 1b, 2b, 4b, рис. 3.22,a-3.22,c). Проте з часом потік у смузі з областю найімовірнішого розташування включень біля межі $\zeta = 0$ зменшується і приймає найменші значення з трьох інших потоків (крива 3b, рис. 3.22,d), а найбільшим стає усереднений потік у смузі з прошарками розташованими посередині тіла (крива 4b, рис. 3.22,d). У випадку зосередження включень біля нижньої поверхні тіла функція $\langle J(\zeta, \tau) \rangle / J_*$ для $\tau < 0.1$ є опуклою вниз (криві 2b, рис. 3.22,a і 3.22,b), а для $\tau \geq 0.5$ стає опуклою вгору (крива 2b, рис. 3.22,d). З часом відмінності між потоками за різних модельних варіантів розташування включень зменшуються, доки не вийдуть на усталений режим, де значення дифузійних потоків співпадає.

Зауважимо, що за ненульової сталої початкової концентрації для $\tau < 0.03$ від границі $\zeta = 0$ потоки домішки спадають, крім потоків у структурі, в якій включення зосереджені біля верхньої поверхні тіла і коефіцієнт дифузії домішки у включеннях є більший, ніж у матриці. Тоді дифузійний потік різко зростає, а потім також починає спадати (крива 3b, рис. 3.23,a). Від середини смуги потоки домішкової речовини у всіх типах структур знову починають зростати (рис. 3.23,a), але біля межі $\zeta = 1$ при $D_1 / D_0 < 1$ для тіл з рівномірним розподі-

лом включень, з ймовірним розташуванням включень біля нижньої границі або посередині смуги потік знову починає спадати (криві 1b, 2b, 4b, рис. 3.23,a), тобто наявний локальний максимум функції $\langle J(\zeta, \tau) \rangle / J_*$ біля «нижньої» границі шару. У випадку $D_1 < D_0$ для $\tau = 0.01$ значення усереднених потоків у структурах з рівномірним розподілом включень та ймовірним приповерхневим їх розташуванням практично співпадають на проміжку $\zeta \in [0; 0.5]$ (криві 1a-3a, рис. 3.23,a). Значення потоку у смугі з найімовірнішим розташуванням включень посередині тіла є найменшим на цьому проміжку (крива 4a, рис. 3.23,a). Проте на проміжку $\zeta \in [0.5; 1]$ найменші значення набуває потік у смугі з ймовірним розташуванням включень біля нижньої поверхні тіла. Зазначимо, що у випадку $D_1 > D_0$ у структурах з приповерхневим розташуванням включень також спостерігається наявність максимумів дифузійних потоків біля поверхонь, де зосереджені включення (криві 2b та 3b, рис. 3.23,a). З часом ці приповерхневі максимуми зменшуються та зсуваються до середини тіла (криві 2b та 3b, рис. 3.23,b), а потім функції стають монотонно спадними (криві 2b та 3b, рис. 3.23,d). Крім того, дифузійний потік у смугі з рівномірним розподілом фаз для малих часів є більшим, ніж у смугі з прошарками зосередженими посередині тіла (криві 1b та 4b, рис. 3.23,a), але для $\tau \geq 0.1$ ситуація змінюється на протилежну – значення $\langle J(\zeta, \tau) \rangle / J_*$ для смуги з найімовірнішим розташуванням включень посередині тіла стає більшим за значення потоку у смугі з рівномірним розподілом прошарків (криві 1b та 4b, рис. 3.23,c). Із збільшенням τ відмінності між функціями $\langle J(\zeta, \tau) \rangle / J_*$ для різних структур зменшуються, і потоки виходять на стаціонарний режим.

Для випадку, коли коефіцієнт дифузії у прошарках більший, ніж у матриці, зміна об'ємної частки включень за нульової та ненульової сталої початкових концентрацій однаково впливає на поведінку усереднених потоків для усіх типів розглянутих структур (рис. 3.24), незначно відрізняючись у числових результатах. Усереднені потоки в шаруватих тілах, у випадку, коли коефіцієнт дифузії домішки у матриці менший за коефіцієнт дифузії у включеннях, є біль-

шими за потік в однорідному тілі, причому потік у смузі з прошарками, зосередженими біля нижньої поверхні, є найменшим з усіх розглянутих випадків (криві 2, рис. 3.24). Збільшення значення v_1 від 0.05 до 0.1 призводить до зростання функцій $\langle J(\zeta, \tau) \rangle / J_*$ на всьому проміжку (криві b, рис. 3.24), і різниця між потоком у смузі з включеннями розташованими біля нижньої межі і потоком у смузі із зосередженими включеннями біля верхньої границі збільшується до 35% (криві 2b і 3b, рис. 3.24).

Зазначимо, що для $D_1/D_0 \leq 5$ усереднені потоки є спадними функціями (криві a, рис. 3.25). Збільшення відношення D_1/D_0 призводить до зростання потоку, і його значення можуть перевищувати величину потоку на верхній границі. При цьому найбільші значення досягає потік у структурі з ймовірним розташуванням включень біля поверхні, де діє джерело маси (криві 3b, рис. 3.25). Для розглянутих значень вхідних параметрів задачі максимуми, які досягають потоки за нульової початкової концентрації, є до 19% меншими від максимумів за ненульової сталої початкової концентрації (криві 1b, 3b, 4b, рис. 3.25).

Якщо коефіцієнт дифузії домішки у матриці більший, ніж у включеннях, то збільшення значення початкової концентрації, віднесеної до потоку на «верхній» межі смуги, c_*/J_* призводить до утворення локального мінімуму в середині тіла для всіх розглянутих розподілів підшарів (криві b, рис. 3.26,a). Причому, чим менше значення c_*/J_* , тим менша відмінність між усередненими дифузійними потоками для різних типів шаруватих структур (рис. 3.26,a). У випадку, якщо коефіцієнт дифузії домішки у включеннях набуває більших значень, ніж коефіцієнт дифузії у матриці, збільшення відношення c_*/J_* викликає зростання усередненого потоку і утворення максимумів функцій $\langle J(\zeta, \tau) \rangle / J_*$ в середині двофазної смуги за всіх розглянутих варіантів розташування включень (криві b, рис. 3.26,b). При цьому найбільша різниця між значеннями потоків, зокрема, для структур з включеннями біля нижньої межі і посередині тіла, може становити до 30% (криві 2b та 4b, рис. 3.26,b).

3.2 Математичне моделювання дифузійних потоків у двофазній випадково неоднорідній шаруватій смузі з урахуванням парного взаємовпливу шарів

У попередніх випадках під час виконання процедури усереднення за ансамблем конфігурацій фаз при отриманні розрахункових формул ми обмежувались двома першими доданками ряду Неймана, у вигляді якого знаходилась шукана функція. Проте виникає питання щодо оцінки наступних членів цього ряду. У цьому підрозділі вивчаються випадкові дифузійні потоки у двофазній стохастично неоднорідній смузі за рівномірного розподілу фаз та смузі з областю найбільш ймовірного розташування включень біля верхньої границі тіла з урахуванням третього доданка ряду Неймана, що описує ефект парного взаємовпливу включень, на основі моделі, розробленої у попередньому розділі.

3.2.1 Дифузійний потік у двофазній смузі з рівномірним розподілом фаз за нульової початкової концентрації

Розглянемо процес дифузії домішкової речовини у смузі товщини z_0 , що містить n_0 підшарів фази матриці та n_1 підшарів фази включення (рис. 2.14). Вважаємо, що координати розташування підшарів кожної з фаз є невідомими, а фази у тілі розташовані за рівномірним законом розподілу. Коефіцієнти дифузії сталі в межах кожної з фаз. Приймаємо, що об'ємні частки фаз, з яких складене тіло, можуть бути як співвимірні, так і об'ємна частка матриці v_0 може значно перевищувати об'ємну частку включень v_1 .

Дифузійний потік у такій структурі описується, як і у попередньому випадку, рівнянням (2.6) за крайових умов (2.7), (2.8). Приймаємо, що у початковий момент часу відсутня домішкова речовина в тілі (2.18). Розв'язком заданої крайової задачі є інтегральний ряд Неймана (2.58).

Зазначимо, що перший член ряду Неймана $J_0(z, t)$ – дифузійний потік в однорідному середовищі з фізичними характеристиками базової фази, другий доданок є сумою збурень потоку, що виникають при вміщенні у тіло включення

з фізичними характеристиками, відмінними від характеристик матриці. Третій доданок ряду (2.58) відповідає збуренням, що виникають, якщо в середовище з коефіцієнтом дифузії матриці поміщати по чергово по два включення з іншими фізичними характеристиками, тобто описує ефекти парного взаємовпливу включень на потік маси і т.п. [128].

Для вивчення ефектів парного взаємовпливу підшарів, з яких складається тіло, обмежимося трьома першими членами ряду Неймана і проведемо процедуру усереднення за ансамблем конфігурацій фаз з рівномірною функцією розподілу. Приймаємо, що включення мають характерну товщину h_1 , а випадковою координатою, яка характеризує їх положення, є координата верхньої межі прошарку. Усереднений дифузійний потік у двофазній багатошаровій смузі з урахуванням парного взаємовпливу шарів знаходимо за формулою

$$\begin{aligned} \langle J(z, t) \rangle \approx \langle J_0(z, t) \rangle + \int_0^t \int_0^{z_0} G(z, z', t, t') \langle L_s(z') \rangle J_0(z', t') dz' dt' + \\ + \int_0^t \int_0^{z_0} G(z, z', t, t') \langle L_s(z') \rangle \int_0^{t'} \int_0^{z_0} G(z', z'', t', t'') L_s(z'') J_0(z'', t'') dz'' dt'' dz' dt'. \end{aligned} \quad (3.21)$$

При усередненні першого і другого доданків у (3.21) скористаємось співвідношеннями (2.47) та (2.70). Зазначимо, що

$$\langle L_s(z') G(z', z'', t', t'') L_s(z'') \rangle = (D_1 - D_0)^2 \sum_{i=1}^{n_1} \sum_{j=1}^{n_1} \langle \eta_{i1}(z') \eta_{j1}(z'') \rangle \frac{\partial^2 G(z', z'', t', t'')}{\partial z'^2} \frac{\partial^2}{\partial z''^2}.$$

Тут

$$\sum_{i=1}^{n_1} \sum_{j=1}^{n_1} \langle \eta_{i1}(z') \eta_{j1}(z'') \rangle = \sum_{i=1}^{n_1} \sum_{j=1}^{n_1} \langle \eta_{i1}(z') \rangle \langle \eta_{j1}(z'') \rangle + n_1^2 \psi_\eta(z', z''), \quad (3.22)$$

де $\langle \eta_{i1}(z') \rangle, \langle \eta_{j1}(z'') \rangle$ визначаються зі співвідношення (2.72),

$\psi_\eta(z', z'')$ – функція кореляції фаз, яка знаходиться з функції двовимірного спільного розподілу випадкових величин $w_2(z', z'')$ наступним чином [9]

$$\psi_\eta(z', z'') = \int_0^{z_0-h_1} \int_0^{z_0-h_1} z' z'' w_2(z', z'') dz'' dz'. \quad (3.23)$$

Зокрема, для рівномірного розподілу має вигляд [9]

$$\Psi_{\eta}(z', z'') = \int_0^{z_0-h_1} \int_0^{z_0-h_1} \frac{z' z''}{V^2} dz'' dz' = \frac{(z_0 - h_1)^4}{4V^2}.$$

Тут V – об'єм всього тіла.

Враховуючи у співвідношенні (3.21) знайдені вирази, та приймаючи, що $n_1^2 / V^2 = v_1^2 / h_1^2$, одержимо формулу для потоку маси у двофазній багатошаровій смузі з рівномірним розподілом фаз з урахуванням парного взаємовпливу шарів

$$\begin{aligned} \langle J(z, t) \rangle_{conf} = & J_0(z, t) + (D_1 - D_0)v_1 \int_0^t \left[\frac{1}{h_1} \int_0^{h_1} z' G(z, z', t, t') \frac{\partial^2 J_0(z', t')}{\partial z'^2} dz' + \right. \\ & \left. + \int_{h_1}^{z_0} G(z, z', t, t') \frac{\partial^2 J_0(z', t')}{\partial z'^2} dz' \right] dt' + (D_1 - D_0)^2 \int_0^t \left[\frac{v_1^2}{h_1^2} \int_0^{h_1} z' G(z, z', t, t') \times \right. \\ & \left. \times \int_0^{t'} \left(\int_0^{h_1} z'' \frac{\partial^2 G(z', z'', t', t'')}{\partial z'^2} \frac{\partial^2 J_0(z'', t'')}{\partial z''^2} dz'' + h_1 \int_{h_1}^{z_0} \frac{\partial^2 G(z', z'', t', t'')}{\partial z'^2} \frac{\partial^2 J_0(z'', t'')}{\partial z''^2} dz'' \right) dt'' dz' + \right. \\ & \left. + \int_{h_1}^{z_0} G(z, z', t, t') \int_0^{t'} \left(\frac{v_1^2}{h_1} \int_0^{h_1} z'' \frac{\partial^2 G(z', z'', t', t'')}{\partial z'^2} \frac{\partial^2 J_0(z'', t'')}{\partial z''^2} dz'' + \right. \right. \\ & \left. \left. + v_1^2 \int_{h_1}^{z_0} \frac{\partial^2 G(z', z'', t', t'')}{\partial z'^2} \frac{\partial^2 J_0(z'', t'')}{\partial z''^2} dz'' \right) dt'' dz' \right] dt' + (D_1 - D_0)^2 \frac{(z_0 - h_1)^4 v_1^2}{2h_1^2} \times \\ & \times \int_0^t \int_0^{z_0} \int_0^{t'} \int_0^{z_0} G(z, z', t, t') \frac{\partial^2 G(z', z'', t', t'')}{\partial z'^2} \frac{\partial^2 J_0(z'', t'')}{\partial z''^2} dz'' dt'' dz' dt'. \end{aligned} \quad (3.24)$$

Якщо у вираз (3.24) підставити співвідношення для функції Гріна (2.42) та дифузійного потоку домішки в однорідному шарі за нульової початкової умови на концентрацію частинок $J_0(z, t)$ (2.30), тоді отримаємо

$$\frac{1}{J_*} \langle J(z, t) \rangle = J_0(z, t) + J_1(z, t) + J_2(z, t), \quad (3.25)$$

$$\text{де } J_1(z, t) = \frac{2v_1(D_1 - D_0)}{z_0^2 D_0} \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} c_{nk} A_{kn} \left[e^{-D_0 y_k^2 t} - e^{-D_0 \xi_n^2 t} \right] \sin(y_k z);$$

$$J_2(z, t) = -\frac{2(D_1 - D_0)^2 v_1^2}{z_0 D_0 \pi^2} \sum_{k=1}^{\infty} \sin(y_k z) \left[\sum_{n=1}^{\infty} c_{nk} y_k^2 \left(t e^{-D_0 y_k^2 t} - \frac{e^{-D_0 y_k^2 t} - e^{-D_0 \xi_n^2 t}}{D_0 (\xi_n^2 - y_k^2)} \right) \right] \times$$

$$\times \left(A_{kn} \left[z_0 - \frac{h_1}{2} + \frac{1 - \cos(2y_k h_1)}{4h_1 y_k^2} \right] + \frac{(-1)^{k+n} \bar{c}_{nk} z_0 (z_0 - h_1)^4}{2h_1^2} \right) + \\ + \sum_{\substack{l=1 \\ l \neq k}}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} a_{kl} c_{nl} y_l^2 A_{ln} \left(\frac{e^{-D_0 y_k^2 t} - e^{-D_0 y_l^2 t}}{D_0 (y_l^2 - y_k^2)} - \frac{e^{-D_0 y_k^2 t} - e^{-D_0 \xi_n^2 t}}{D_0 (\xi_n^2 - y_k^2)} \right).$$

$$\text{Тут } c_{nk} = \frac{\xi_n}{\xi_n^2 - y_k^2}, \quad \bar{c}_{nk} = \frac{y_k}{y_k^2 - \xi_n^2};$$

$$a_{kn} = \frac{\cos[(y_k - \xi_n)h_1] - 1}{h_1 (y_k - \xi_n)^2} - \frac{\cos[(y_k + \xi_n)h_1] - 1}{h_1 (y_k + \xi_n)^2}, \quad A_{kn} = a_{kn} + (-1)^{k+n} \frac{2y_k}{y_k^2 - \xi_n^2};$$

$$c_{nl} = c_{nk}|_{k=l}, \quad a_{kl} = a_{kn}|_{\xi_n=y_l}, \quad A_{ln} = A_{kn}|_{l=n}.$$

Вираз (3.25) є розрахунковою формулою для усередненого за ансамблем конфігурацій фаз потоку домішкової речовини у шаруватій смузі за нульової початкової концентрації з урахуванням парного взаємовпливу шарів.

3.2.2 Числовий аналіз усереднених дифузійних потоків у смузі з рівномірним розподілом фаз

Дослідження впливу фізичних характеристик та геометричних параметрів випадкової структури тіла на усереднений дифузійний потік у двофазній смузі з рівномірним розподілом фаз, обчислений за двома першими доданками (3.25), проведено у підрозділі 2.3.4. Дослідимо кількісну та якісну поведінку третього доданка усередненого ряду Неймана $J_2(z, t)$, що описує ефект парного взаємовпливу шарів, з яких складається тіло.

Числові розрахунки проводились у безрозмірних змінних (2.43), а ряди у формулі (3.25) обчислювались з точністю 10^{-9} . В якості параметрів числового дослідження прийнято $\tau = 0.1$; $D_1/D_0 = 0.01$; $\nu_1 = 0.5$; $h_1 = 0.01$. У табл. 3.1 і табл. 3.2 наведено розрахункові дані для доданків $J_0(\zeta, \tau)$, $J_1(\zeta, \tau)$, $J_2(\zeta, \tau)$ усередненого потоку $\langle J(\zeta, \tau) \rangle / J_*$ на різних безрозмірних глибинах ζ для значень вхідних параметрів $D_1/D_0 = 0.01$; $\nu_1 = 0.5$; $h_1 = 0.01$ та $D_1/D_0 = 0.03$; $\nu_1 = 0.6$; $h_1 = 0.02$ відповідно. Розбиття інтервалу $\zeta \in [0, 1]$ проведено з кроком $\Delta\zeta \approx 0.08$.

Зазначимо, що величина доданка $J_2(\zeta, \tau)$ на 5-6 порядків менша абсолютних значень потоку в однорідному шарі $J_0(\zeta, \tau)$ і вкладу доданка $J_1(\zeta, \tau)$, який описує збурення потоку за рахунок наявності включень, для вхідних даних наведених у табл. 3.1 і табл. 3.2. Проте параметри задачі можуть змінюватись в широких межах, тому дослідимо їхній вплив на кількісну та якісну поведінку функції $J_2(\zeta, \tau)$.

Таблиця 3.1. Розрахункові дані складових усередненого потоку з урахуванням парного взаємовпливу шарів для $D_1 / D_0 = 0.01; \nu_1 = 0.5; h_1 = 0.01$

ζ	$J_0(\zeta, \tau)$	$J_1(\zeta, \tau)$	$J_2(\zeta, \tau)$
0.00	1.000000000	0.000000000	0.000000000
0.08	0.858041962	-0.034754605	0.000000169
0.16	0.720552246	-0.066244473	0.000000302
0.24	0.591587520	-0.091702432	0.000000411
0.32	0.474446379	-0.109248031	0.000000492
0.40	0.371438937	-0.118084326	0.000000537
0.48	0.283807606	-0.118471518	0.000000552
0.56	0.211779873	-0.111497657	0.000000530
0.64	0.154763808	-0.098710070	0.000000478
0.72	0.111612186	-0.081690682	0.000000399
0.80	0.080929228	-0.061659629	0.000000298
0.88	0.061364043	-0.039172510	0.000000184
0.96	0.051867796	-0.013954086	0.000000060
1.00	0.050694637	0.000000000	0.000000000

На рис. 3.27 показані розподіли доданка $J_2(\zeta, \tau)$ у різні моменти часу $\tau = 0.05; 0.08; 0.1; 0.15; 0.2; 0.3; 0.5$ (криві 1-7, рис. 3.27,а) та для різних значень відношення $D_1 / D_0 = 0.001; 0.01; 0.05; 0.1$ (криві 1-4, рис. 3.27,б). На рис. 3.28 проілюстровано залежність третього доданка усередненого ряду Неймана від об'ємної частки включень $\nu_1 = 0.2; 0.3; 0.4; 0.5; 0.6$ (криві 1-5, рис. 3.28,а) та їх характерної товщини $h_1 = 0.001; 0.01; 0.02; 0.03; 0.05$ (криві 1-5, рис. 3.28,б).

Таблиця 3.2. Розрахункові дані складових усередненого потоку з урахуванням парного взаємовпливу шарів для $D_1 / D_0 = 0.03$; $\nu_1 = 0.6$; $h_1 = 0.02$

ζ	$J_0(\zeta, \tau)$	$J_1(\zeta, \tau)$	$J_2(\zeta, \tau)$
0.00	1.000000000	0.000000000	0.000000000
0.08	0.858041962	-0.040839731	0.000001104
0.16	0.720552246	-0.077846162	0.000001843
0.24	0.591587520	-0.107764265	0.000002426
0.32	0.474446379	-0.128384146	0.000002822
0.40	0.371438937	-0.138769222	0.000002990
0.48	0.283807606	-0.139225159	0.000003005
0.56	0.211779873	-0.131030597	0.000002815
0.64	0.154763808	-0.116003797	0.000002475
0.72	0.111612186	-0.096003776	0.000002020
0.80	0.080929228	-0.072464198	0.000001476
0.88	0.061364043	-0.046037710	0.000000898
0.96	0.051867796	-0.016399998	0.000000278
1.00	0.050694637	0.000000000	0.000000000

Зазначимо, що зі зростанням часу протікання процесу та значень відношення D_1 / D_0 , відбувається зменшення величини третього доданка усередненого ряду Неймана (рис. 3.27). Протилежна ситуація спостерігається при зміні значень ν_1 та h_1 – збільшення вказаних параметрів викликає зростання величини $J_2(\zeta, \tau)$ (рис. 3.28).

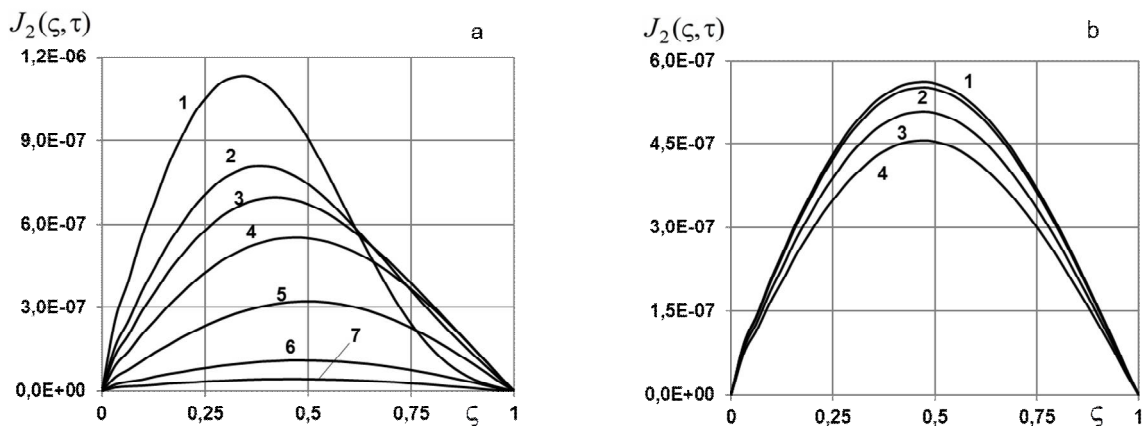


Рис. 3.27. Розподіли третього доданка ряду Неймана для різних значень часу (а) та для різних значень відношення D_1 / D_0 (б)

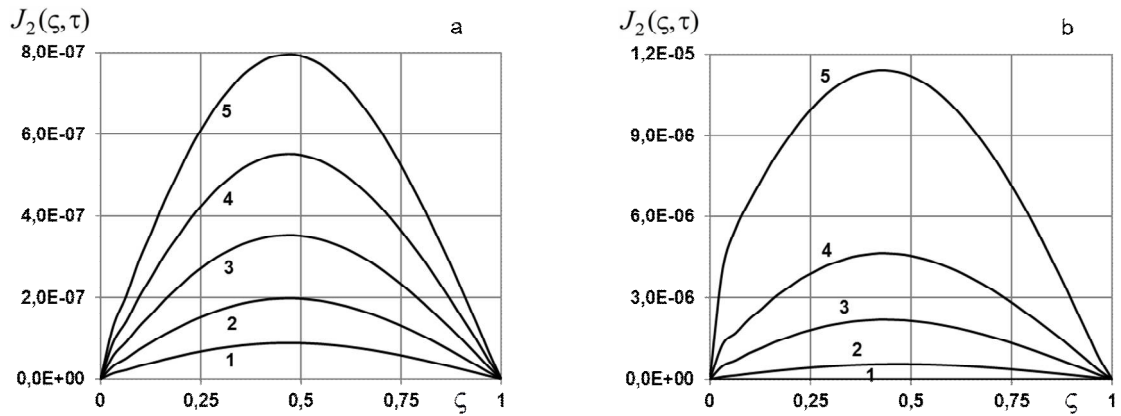


Рис. 3.28. Розподіли третього доданка ряду Неймана для різних значень об'ємної частки включень (а) та характерної товщини прошарків (b)

Крім того, ефект парного взаємовпливу шарів є найбільш значимим для малих значень часів (крива 1, рис. 3.27,а) та великих значень характерної товщини прошарків h_1 (крива 5, рис. 3.28,б).

Відзначимо, що максимальні значення, які досягає функція $J_2(\zeta, \tau)$, наприклад, для малих значень τ , великих ν_1 та h_1 , є на декілька порядків меншими, ніж абсолютні значення доданків $J_0(\zeta, \tau)$ та $J_1(\zeta, \tau)$. Оскільки кількісні дослідження проведені для широкого інтервалу параметрів задачі, то можна стверджувати, що ефектом парного взаємовпливу шарів на усереднений дифузійний потік у двофазній смузі з рівномірним розподілом фаз за нульової початкової концентрації можна нехтувати.

3.2.3 Дифузійний потік у двофазній смузі з найімовірнішим розташуванням включень біля верхньої поверхні за ненульової початкової концентрації

У попередньому підрозділі було розглянуто умову нульової початкової концентрації домішки в тілі, у той же час наявність дифундуючої речовини в нульовий момент часу збільшує значення потоку, що потребує дослідження ефекту парного взаємовпливу підшарів для цього випадку, так само як і при значній концентрації включень біля джерела маси.

Розглянемо випадок, коли координати розташування включень невідомі, а область найімовірнішого їх розташування зосереджена біля поверхні смуги

$z = 0$, де діє джерело маси (рис. 3.9). Така випадкова структура описується частковим випадком ймовірнісного β -розподілу включень $f_2(z)$ (3.9). В якості крайової задачі приймаємо задачу (2.6)-(2.8), і вважаємо, що у нульовий момент часу відомий сталий початковий розподіл концентрації частинок у тілі (2.17). Тоді розв'язок сформульованої задачі, як і у попередніх випадках, подаємо у вигляді ряду Неймана і проводимо процедуру усереднення за ансамблем конфігурацій фаз, обмежившись трьома першими членами цього ряду (3.21).

Тут при усередненні функції структури $\eta_{il}(z')$ скористаємось рівністю (3.11), а для знаходження усередненого добутку двох функцій структури – співвідношеннями (3.22) та (3.23), де для означення функції $w_2(z', z'')$ використано формулу густини ймовірнісного двовимірного β -розподілу [174]:

$$w_2(z', z'') = \frac{\Gamma(\beta_1 + \beta_2 + \beta_3)}{\Gamma(\beta_1)\Gamma(\beta_2)\Gamma(\beta_3)} \left(\frac{z'}{z_0}\right)^{\beta_1-1} \left(\frac{z''}{z_0}\right)^{\beta_2-1} \left(1 - \frac{z'}{z_0}\right)^{\beta_2 + \beta_3 - 1} \times \\ \times \left(1 - \frac{z''}{z_0}\right)^{\beta_1 + \beta_3 - 1} \left(1 - \frac{z'z''}{z_0^2}\right)^{-(\beta_1 + \beta_2 + \beta_3)}, \quad (3.26)$$

де $\Gamma(x)$ – гама-функція [116], $\beta_1, \beta_2, \beta_3 > 0$, $0 \leq z', z'' \leq z_0$.

На рис. 3.29 проілюстровані поверхні густини двовимірного розподілу $w_2(z', z'')$, пораховані за формулою (3.26) для ступенів вільності $\beta_1 = 1$; $\beta_2 = \beta_3 = 2.5$ (рис. 3.29,а) та $\beta_1 = \beta_2 = 1$; $\beta_3 = 2$ (рис. 3.29,б). Надалі приймаємо, що $\beta_1 = \beta_2 = 1$, $\beta_3 = \beta$.

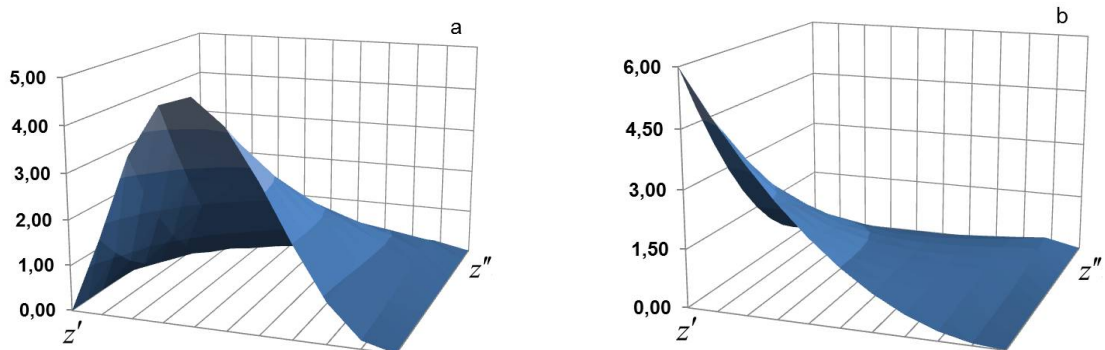


Рис. 3.29. Густина двовимірного β -розподілу

Підставляючи у співвідношення (3.21) вирази (3.11), (3.23) та використовуючи зв'язок $n_1^2 = (v_1 z_0)^2 / h_1^2$, одержимо формулу для визначення потоку маси

мігруючої речовини у двофазній багатошаровій смузі з ймовірним при поверхневим розташуванням включень, що враховує парний взаємовплив шарів:

$$\begin{aligned}
\langle J(z,t) \rangle_{conf} = & J_0(z,t) + \frac{(D_1 - D_0)v_1}{z_0^{\beta-2}h_1} \int_0^t \left[\int_0^{h_1} A_1(z') G(z,z',t,t') \frac{\partial^2 J_0(z',t')}{\partial z'^2} dz' + \right. \\
& \left. + \int_{h_1}^{z_0} A_2(z') G(z,z',t,t') \frac{\partial^2 J_0(z',t')}{\partial z'^2} dz' \right] dt' + (D_1 - D_0)^2 \left\{ \frac{v_1^2}{h_1^2 z_0^{2\beta-4}} \int_0^t \left[\int_0^{h_1} A_1(z') \times \right. \right. \\
& \times G(z,z',t,t') \int_0^{t'} \left(\int_0^{h_1} A_1(z'') \frac{\partial^2 G(z',z'',t',t'')}{\partial z'^2} \frac{\partial^2 J_0(z'',t'')}{\partial z''^2} dz'' + \int_{h_1}^{z_0} A_2(z'') \times \right. \\
& \times \frac{\partial^2 G(z',z'',t',t'')}{\partial z'^2} \frac{\partial^2 J_0(z'',t'')}{\partial z''^2} dz'' \Big) dt'' dz' + \int_{h_1}^{z_0} A_2(z') G(z,z',t,t') \int_0^{t'} \left(\int_0^{h_1} A_1(z'') \times \right. \\
& \times \frac{\partial^2 G(z',z'',t',t'')}{\partial z'^2} \frac{\partial^2 J_0(z'',t'')}{\partial z''^2} dz'' + \int_{h_1}^{z_0} A_2(z'') \frac{\partial^2 G(z',z'',t',t'')}{\partial z'^2} \frac{\partial^2 J_0(z'',t'')}{\partial z''^2} dz'' \Big) dt'' dz' \Big] dt' + \\
& \left. + \left(\frac{v_1 z_0}{h_1} \right)^2 \int_0^t \int_0^{z_0} \int_0^{t'} \int_0^{z_0} \Psi_\eta G(z,z',t,t') \frac{\partial^2 G(z',z'',t',t'')}{\partial z'^2} \frac{\partial^2 J_0(z'',t'')}{\partial z''^2} dz'' dt'' dz' dt' \right\}, \quad (3.27)
\end{aligned}$$

Тут $A_1(z) = z_0^\beta - (z_0 - z)^\beta$, $A_2(z) = (z_0 + h_1 - z)^\beta - (z_0 - z)^\beta$.

Підставимо у (3.27) вирази для функції Гріна (2.42) та потоку домішки в однорідному шарі (2.39). Тоді одержимо співвідношення (3.25), в якому

$$\begin{aligned}
J_0(z,t) = & 1 - \frac{2}{z_0} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-D_0 \xi_n^2 t} \left(\frac{1}{\xi_n} + (-1)^n \frac{D_0 c^*}{J_*} \right) \sin(\xi_n z); \\
J_1(z,t) = & -\frac{2(D_1 - D_0)v_1}{D_0 z_0^\beta} \frac{1}{h_1} \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} c_{nk} \left(1 + (-1)^n \frac{D_0 c^*}{J_*} \xi_n \right) \left(e^{-D_0 \xi_n^2 t} - e^{-D_0 y_k^2 t} \right) F_{kn} \sin(y_k z); \\
J_2(z,t) = & -\frac{2(D_1 - D_0)^2}{z_0^{2\beta-3} D_0 \pi^2} \left(\frac{v_1}{h_1} \right)^2 \left\{ \sum_{k=1}^{\infty} \sin(y_k z) \left[\sum_{n=1}^{\infty} c_{nk} y_k^2 \left(t e^{-D_0 y_k^2 t} - \frac{e^{-D_0 y_k^2 t} - e^{-D_0 \xi_n^2 t}}{D_0 (\xi_n^2 - y_k^2)} \right) \times \right. \right. \\
& \times \left(1 + (-1)^n \frac{D_0 c^*}{J_*} \xi_n \right) \left(F_{kn} \left[z_0^\beta \left(h_1 - \frac{\sin 2y_k h_1}{2y_k} \right) + B_f \right] + (-1)^{k+n} 2\Psi_\eta \bar{c}_{nk} z_0^{2\beta-1} \right) + \\
& \left. + \sum_{\substack{l=1 \\ l \neq k}}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} c_{nl} y_l^2 \left(\frac{e^{-D_0 y_k^2 t} - e^{-D_0 y_l^2 t}}{D_0 (y_l^2 - y_k^2)} - \frac{e^{-D_0 y_k^2 t} - e^{-D_0 \xi_n^2 t}}{D_0 (\xi_n^2 - y_k^2)} \right) \left(1 + (-1)^n \frac{D_0 c^*}{J_*} \xi_n \right) F_{ln} \tilde{F}_{kn} \right] \Big\}. \quad (3.28)
\end{aligned}$$

$$\text{Тут } \xi_n = \frac{\pi(2n-1)}{2z_0}, \quad y_k = \frac{k\pi}{z_0}, \quad x_{kn}^\pm = y_k \pm \xi_n; \quad c_{nk} = \frac{\xi_n}{\xi_n^2 - y_k^2}, \quad \bar{c}_{nk} = \frac{y_k}{y_k^2 - \xi_n^2};$$

$$F_{kn} = a_{kn} z_0^\beta + \bar{f}(h_1, z_0 + h_1, x_{kn}^-) - \bar{f}(h_1, z_0 + h_1, x_{kn}^+) - \bar{f}(0, z_0, x_{kn}^-) + \bar{f}(0, z_0, x_{kn}^+),$$

$$B_f = \bar{f}(0, z_0, 2y_k) - \bar{f}(0, z_0, 0) + \bar{f}(h_1, z_0 + h_1, 0) - \bar{f}(h_1, z_0 + h_1, 2y_k);$$

$$y_{kn}^\pm = y_k \pm y_l, \quad c_{nl} = c_{nk}|_{k=l}, \quad F_{ln} = F_{kn}|_{k=l}, \quad \tilde{F}_{kn} = F_{kn}|_{x_{kn}^\pm = y_{kn}^\pm};$$

$$\bar{f}(a, c, p) = \int_a^{z_0} (c-z)^\beta \cos(pz) dz; \quad a_{kn} = \sin(x_{kn}^- h_1) / x_{kn}^- - \sin(x_{kn}^+ h_1) / x_{kn}^+,$$

Формули (3.25), (3.28) є розрахунковими для усередненого за ансамблем конфігурацій фаз потоку у шаруватій смузі з ймовірним приповерхневим розташуванням включень, що враховує парний взаємовплив шарів.

3.2.4 Комп'ютерне моделювання усереднених дифузійних потоків у смузі з бета-розподілом фаз

У підрозділі 3.1.4 досліджено вплив параметрів випадкової структури тіла на усереднений дифузійний потік, обчислений за двома першими доданками (3.25). Проаналізуємо тут кількісну та якісну поведінку третього доданка усередненого ряду Неймана $J_2(z, t)$, що описує ефект парного взаємовпливу шарів. Числові розрахунки виконано за безрозмірних змінних (2.43), а ряди у формулах (3.28) обчислено з точністю 10^{-9} . В якості параметрів числового дослідження прийнято $\tau = 0.1$; $D_1 / D_0 = 0.01$; $\nu_1 = 0.5$; $h_1 = 0.01$; $c_* / J_* = 0.1$; $\beta = \beta_3 = 2$.

У табл. 3.3 та табл. 3.4 наведено розрахункові дані усередненого дифузійного потоку $\langle J(\zeta, \tau) \rangle / J_*$ для доданків $J_0(\zeta, \tau)$, $J_1(\zeta, \tau)$, $J_2(\zeta, \tau)$ на безрозмірних глибинах ζ при різних значеннях вхідних параметрів задачі. Розбиття інтервалу $\zeta \in [0; 1]$ виконано з кроком $\Delta\zeta \approx 0.07$.

Зазначимо, що для даних, наведених у табл. 3.3 і табл. 3.4, доданок $J_2(\zeta, \tau)$ на 1-2 порядки менший, ніж абсолютні значення потоку в однорідному шарі $J_0(\zeta, \tau)$ і доданок $J_1(\zeta, \tau)$, який описує збурення потоку, спричинені поодинокими включеннями. Проте оскільки параметри задачі можуть змінюватись у широких межах, вивчимо їхній вплив на значення функції $J_2(\zeta, \tau)$.

Таблиця 3.3. Розрахункові дані складових усередненого потоку в шарі з ймовірною приповерхневою концентрацією включень для $\tau=0.1$
 $D_1/D_0=0.01$; $\nu_1=0.5$; $h_1=0.01$; $c_*/J_*=0.1$; $\beta=2$

ζ	$J_0(\zeta, \tau)$	$J_1(\zeta, \tau)$	$J_2(\zeta, \tau)$
0.00	1.000000	0.000000	0.000000
0.07	0.883664	-0.052639	-0.001242
0.14	0.771040	-0.100103	-0.002252
0.21	0.665539	-0.138264	-0.002886
0.29	0.569996	-0.164528	-0.003117
0.36	0.486472	-0.177940	-0.003006
0.43	0.416128	-0.179045	-0.002671
0.50	0.359202	-0.169585	-0.002571
0.57	0.315087	-0.152060	-0.001821
0.64	0.282482	-0.129202	-0.001466
0.71	0.259625	-0.103509	-0.001177
0.79	0.244557	-0.076920	-0.000921
0.86	0.235392	-0.050627	-0.000653
0.93	0.230577	-0.025052	-0.000344
1.00	0.229091	0.000000	0.000000

На рис. 3.30 подані розподіли функції $|J_2(\zeta, \tau)|$ у моменти часу $\tau=0.1$; 0.15; 0.2; 0.3; (криві 1-4, рис. 3.30,а) та для різних значень відношення $D_1/D_0=0.001$; 0.01; 0.05; 0.1 (криві 1-4, рис. 3.30,б).

Рис. 3.31 ілюструє залежність абсолютного значення третього доданка усередненого ряду Неймана від об'ємної частки включень $\nu_1=0.2$; 0.3; 0.4; 0.5; 0.6 (криві 1-5, рис. 3.31,а) та від значень ступенів вільності β -розподілу $\beta = \beta_3=2$; 2.5; 3; 3.5 (криві 1-4, рис. 3.31,б). Збільшенню параметра β відповідає ущільнення прошарків в околі поверхні $z=0$. На рис. 3.32 побудовано розподіли функції $|J_2(\zeta, \tau)|$ для різних значень відношення $c_*/J_*=0.1$; 0.2; 0.4; 0.6 (криві 1-4, рис. 3.32,а) та товщини прошарків $h_1=0.001$; 0.01; 0.05 (криві 1-3, рис. 3.32,б).

Таблиця 3.4. Розрахункові дані складових усередненого потоку в шарі з ймовірною приповерхневою концентрацією включень для $\tau=0.2$; $D_1/D_0=0.03$; $\nu_1=0.6$; $h_1=0.02$; $c_*/J_*=0.3$; $\beta=3$

ζ	$J_0(\zeta, \tau)$	$J_1(\zeta, \tau)$	$J_2(\zeta, \tau)$
0.00	1.000000	0.000000	0.000000
0.07	0.883664	-0.052639	-0.001242
0.14	0.771040	-0.100103	-0.002252
0.21	0.665539	-0.138264	-0.002886
0.29	0.569996	-0.164528	-0.003117
0.36	0.486472	-0.177940	-0.003006
0.43	0.416128	-0.179045	-0.002671
0.50	0.359202	-0.169585	-0.002571
0.57	0.315087	-0.152060	-0.001821
0.64	0.282482	-0.129202	-0.001466
0.71	0.259625	-0.103509	-0.001177
0.79	0.244557	-0.076920	-0.000921
0.86	0.235392	-0.050627	-0.000653
0.93	0.230577	-0.025052	-0.000344
1.00	0.229091	0.000000	0.000000

Зазначимо, що зі зростанням часу протікання процесу та відношення D_1/D_0 третій доданок ряду Неймана зменшується (рис. 3.30). Протилежна ситуація спостерігається зі зміною значень параметрів ν_1 , h_1 , c_*/J_* , β : з їх збільшенням абсолютне значення $J_2(\zeta, \tau)$ зростає (рис. 3.31, рис. 3.32).

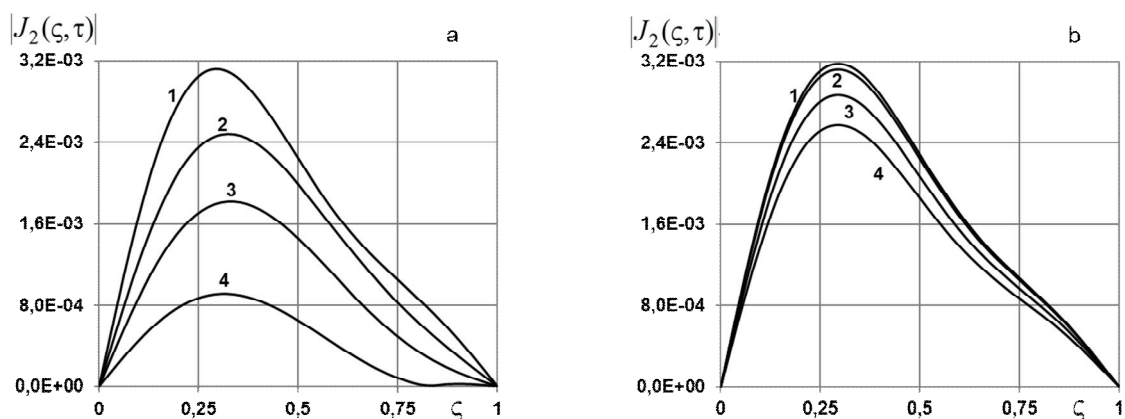


Рис. 3.30 Розподіли функції $|J_2(\zeta, \tau)|$ для різних моментів часу (а) та різних значень D_1/D_0 (б)

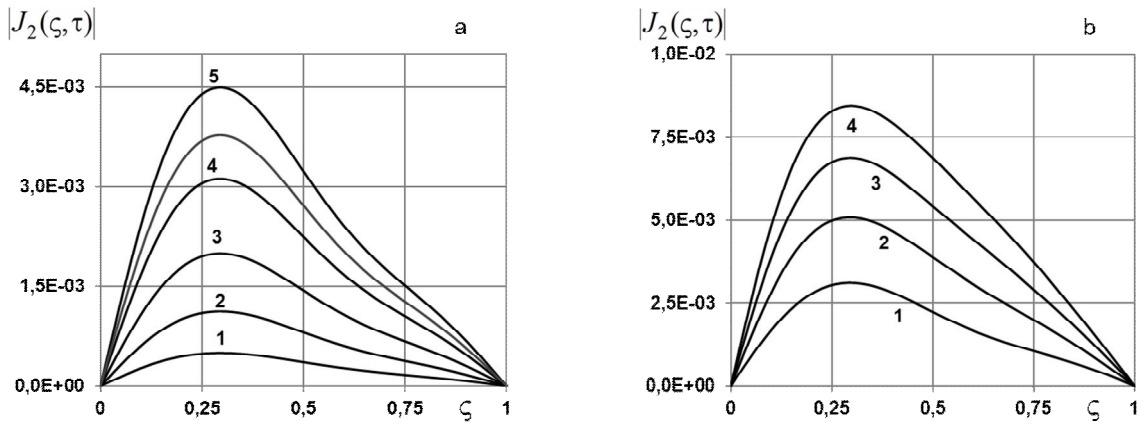


Рис. 3.31. Розподіли функції $|J_2(\zeta, \tau)|$ для різних значень об'ємної частки включення (а) та ступенів вільності β -розподілу (б)

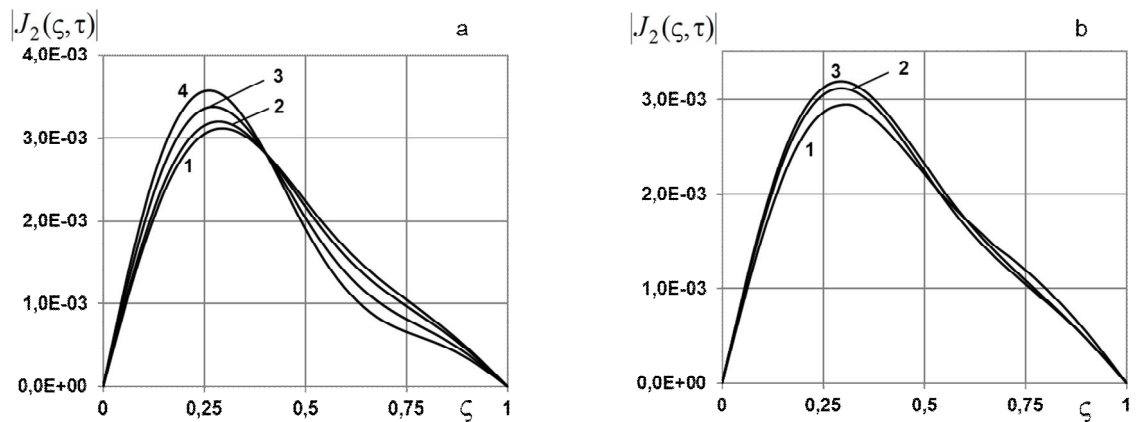


Рис. 3.32. Розподіли функції $|J_2(\zeta, \tau)|$ для різних значень відношення c_*/J_* (а) та для різних значень товщини включень (б)

Ефект парного взаємовпливу шарів є найвідчутнішим для великих значень об'ємної частки включень (крива 5, рис. 3.31,а) та великих значень ступенів вільності β -розподілу (крива 4, рис. 3.31,б), тобто значного ущільнення включень у приповерхневій області. Максимальні величини, які досягає функція $|J_2(\zeta, \tau)|$, наприклад, для малих значень D_1/D_0 , великих β та c_*/J_* , на два порядки менші, ніж абсолютні значення доданків $|J_0(\zeta, \tau)|$ та $|J_1(\zeta, \tau)|$.

Кількісні дослідження виконані для широкого інтервалу параметрів задачі, отже, можна стверджувати, що і для задачі дифузії у смузї з найімовірнішим розташуванням включень біля верхньої поверхні тіла за ненульової початкової концентрації ефектом парного взаємовпливу шарів можна знехтувати.

3.3 Висновки до Розділу 3

У Розділі 3 за розвиненим у попередньому розділі підходом досліджено потоки домішкової речовини у двофазній випадково неоднорідній смузі з різними випадками бета-розподілу фаз. Зокрема, розглянуто модельні варіанти випадкових структур, в яких область найбільш ймовірного розташування включень знаходиться біля верхньої поверхні [131, 140], де діє джерело маси, в околі нижньої поверхні [39, 48] та посередині тіла [43, 49, 132]. Розв'язки крайових задач дифузії побудовано у вигляді інтегрального ряду Неймана. Проведено процедуру усереднення за ансамблем конфігурацій фаз за часткових випадків бета-розподілу включень та знайдено розрахункові формули. Розроблено програмні модулі для якісного і кількісного аналізу залежності усередненого дифузійного потоку від характеристик середовища: приведенного коефіцієнта дифузії, об'ємної частки включень, характерної (середньої) товщини прошарків тощо. На цій основі проведено комп'ютерне моделювання усереднених потоків домішкової речовини в багатошаровій смузі для різних модельних варіантів випадкового розташування фаз в області тіла та зроблено їхній порівняльний аналіз. Зокрема показано, що якщо коефіцієнт дифузії домішки у включеннях менший, ніж у матриці, розташування включень у тілі практично не впливає на поведінку і, у більшості випадків, значення усереднених дифузійних потоків. А отже тільки при необхідності знаходження точних значень функції потоку маси для малих часів потрібно враховувати ймовірнісний розподіл шаруватих включень. Натомість 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 може сягати до 70% у смузі з включеннями зосередженими біля верхньої поверхні та смузі з найімовірнішим розташуванням прошарків біля нижньої межі. При цьому за малих часів у випадку більших значень коефіцієнта дифузії домішки у включеннях, ніж у матриці, для структур із включеннями розташованими біля «верхньої» границі тіла як за нульової, так і ненульової сталої початкових концентрацій характерна наявність приповерхневого максимуму в околі дії джерела маси, а для структур

з рівномірним розподілом фаз, включеннями зосередженими посередині тіла та біля «нижньої» межі у випадку ненульової початкової концентрації – біля іншої границі тіла. Якщо включення розташовані за одним з часткових випадків бета-розподілу, то для більшого коефіцієнта дифузії домішки у включеннях спостерігається локальний, який може бути і глобальним, максимум потоку в середині смуги. У той же час для випадку більшого коефіцієнта дифузії у матриці наявний глобальний мінімум усередненого потоку у середині смуги за великих значень сталої початкової концентрації для всіх розглянутих розподілів включень.

Одержано розрахункові формули для усередненого за ансамблем конфігурацій фаз випадкового потоку маси з урахуванням парного взаємовпливу шарів у смугі за рівномірного розподілу фаз та смугі з ймовірним розташуванням включень біля джерела маси за ненульової сталої концентрації мігруючих частинок [37, 41, 44-46]. Проаналізовано вплив параметрів задачі на величину третього доданка ряду Неймана. Показано, що найбільший ефект від парного взаємовпливу прошарків спостерігається у випадку малих часів протікання процесу дифузії, 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.

При постановці задач переносу у випадково неоднорідних тілах накладається умова превалюючої об'ємної частки однієї з фаз, оскільки розв'язок будується у вигляді розкладу в ряд в околі розв'язку однорідної крайової задачі з характеристиками цієї фази. Числовий аналіз третього члена ряду Неймана показав, що умова наявності в тілі превалюючої фази не є необхідною, тобто при дослідженні потоків у випадково неоднорідних шаруватих тілах врахування двох перших членів ряду Неймана є достатнім як для співвимірних об'ємних часток фаз, так і при наявності в структурі матриці.

РОЗДІЛ 4

МОДЕЛЮВАННЯ ПОТОКІВ МАСИ У СТОХАСТИЧНО НЕОДНОРІДНІЙ СМУЗІ З ПРОШАРКАМИ ВИПАДКОВОЇ ТОВЩИНИ ТА ВПЛИВ ПОХИБКИ ВХІДНИХ ДАНИХ

Під час моделювання процесів перенесення у багатофазних шаруватих системах, які розглядаються як випадково неоднорідні структури, окрім невідомих координат розташування включень, може бути відсутньою інформація і про товщини окремих прошарків, а отже товщину включень також потрібно розглядати як випадкову величину. Розділ 4 присвячений моделюванню випадкових потоків маси у смузі зі стохастично розташованими прошарками випадкової товщини з трикутним і рівномірним розподілами на заданому інтервалі на базі підходу, розвиненого у Розділі 2, а також дослідженню на основі числових експериментів впливу похибок на розв'язок крайової задачі дифузії для функції потоку домішкової речовини у двофазному випадково неоднорідному багатошаровому тілі, усередненого за ансамблем конфігурацій фаз з рівномірною функцією розподілу. Враховуючи отримані оцінки парного взаємовпливу шаруватих включень на потік маси у Розділі 3, у цьому розділі для побудови розв'язків і знаходження усереднених дифузійних потоків, а також дослідження впливу похибки вхідних даних використовуються два перші доданки ряду Неймана.

4.1 Математичне моделювання дифузійних потоків у смузі зі стохастично розташованим прошарком випадкової товщини

4.1.1 Постановка крайової задачі

Розглянемо дифузію домішкової речовини у двофазній смузі товщини z_0 з випадково розташованим прошарком (рис. 4.1), тобто між шарами Ω_0 з коефіцієнтом дифузії домішкової речовини D_0 міститься прошарок Ω_1 з коефіцієнтом дифузії D_1 . Вважаємо що фази у тілі розташовані за рівномірним законом розподілу, а коефіцієнти дифузії є сталими у межах кожної з фаз і виконується умова $v_0 \gg v_1$, де v_j – об'ємна частка фази j ($j=0;1$). Крім того,

приймаємо, що товщина прошарку включення \tilde{h} є невідомою і вважатимемо її випадковою величиною на проміжку $[h_{\min}; h_{\max}]$, де $0 < h_{\min} < h_{\max} < z_0$ [63].

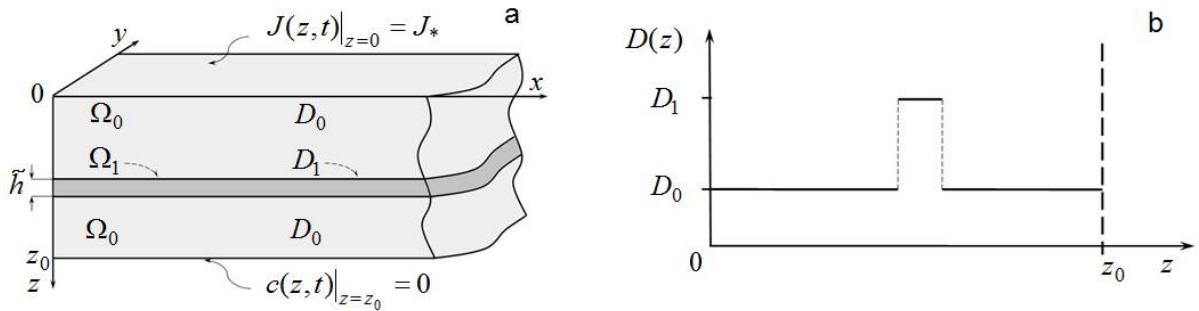


Рис. 4.1. Можлива реалізація смуги з прошарком випадкової товщини (а) та відповідний схематичний розподіл випадкового коефіцієнта дифузії (б)

Дифузійний потік домішкової речовини у такій структурі описуємо рівнянням (2.6), приймаючи, що у початковий момент часу потік мігруючої речовини в тілі рівний нулю (2.7), на верхній границі задане стале значення потоку, а на нижній – концентрація частинок рівна нулю (2.8).

Відповідно до розробленого підходу вихідній крайові задачі (2.6)-(2.8) ставимо у відповідність еквівалентне інтегро-диференціальне рівняння, розв'язок якого знаходимо у вигляді ряду Неймана (2.45).

4.1.2 Усереднення дифузійного потоку за рівномірного розподілу товщини включення на заданому інтервалі

Для описаної структури вихідна крайова задача (2.6)-(2.8) містить дві випадкові характеристики – координату розташування включення і товщину прошарку. Використовуючи розроблену у попередніх розділах методику, обмежившись двома першими членами ряду Неймана і приймаючи, що координатою, яка характеризує положення включення є координата верхньої межі прошарку z_1 , усереднимо дифузійний потік за ансамблем конфігурацій фаз, а потім проведемо усереднення за випадковою товщиною прошарку:

$$\left\langle \left\langle J(z,t) \right\rangle_{conf} \right\rangle_{\tilde{h}} = J_0(z,t) + \left\langle \int_0^t \int_0^{z_0} G(z,z',t,t') \left\langle \bar{L}_s(z') \right\rangle_{conf} J_0(z',t') dz' dt' \right\rangle_{\tilde{h}}. \quad (4.1)$$

Зокрема, у (4.1) використано, що $J_0(z, t)$ і $G(z, z', t, t')$ є детермінованими функціями, а від випадкової координати верхньої межі прошарку залежить тільки функція $\eta_1(z')$ в операторі $\bar{L}_s(z')$ (2.24).

Враховуючи (2.47), (2.48) а також приймаючи, що значення змінної інтегрування у (2.50) змінюються на відрізку $[0; z_0]$, для $z' \leq \tilde{h}$ отримаємо

$$\frac{1}{V} \int_0^{z'} \eta_1(x) dx = \frac{1}{V} \int_0^{z'} dx = \frac{z'}{V} = \frac{z'}{z_0}.$$

У випадку $z' \geq \tilde{h}$, одержимо рівність

$$\frac{1}{V} \int_0^{z'} \eta_1(x) dx = \frac{1}{V} \int_0^{\tilde{h}} dx = \frac{\tilde{h}}{V} = \frac{\tilde{h}}{z_0}.$$

Остаточно отримаємо

$$\langle \eta_1(z') \rangle_{conf} = \begin{cases} \frac{z'}{z_0}, & z' \leq \tilde{h}; \\ \frac{\tilde{h}}{z_0}, & z' \geq \tilde{h}. \end{cases} \quad (4.2)$$

Із врахуванням у (2.46) співвідношення (4.2), отримаємо

$$\begin{aligned} \langle \langle J(z, t) \rangle_{conf} \rangle_{\tilde{h}} &= J_0(z, t) + (D_1 - D_0) \left\langle \int_0^t \left[\frac{1}{z_0} \int_0^{\tilde{h}} z' G(z, z', t, t') \frac{\partial^2 J_0(z', t')}{\partial z'^2} dz' + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{\tilde{h}}{z_0} \int_{\tilde{h}}^{z_0} G(z, z', t, t') \frac{\partial^2 J_0(z', t')}{\partial z'^2} dz' \right] dt' \right\rangle_{\tilde{h}}. \end{aligned} \quad (4.3)$$

Вираз (4.3) є формулою для дифузійного потоку частинок, усередненого за ансамблем конфігурацій фаз та випадковою товщиною прошарку.

Розглянемо випадок, коли товщина включення \tilde{h} є стохастичною величиною з рівномірним розподілом на проміжку $[h_{\min}; h_{\max}]$. Функція густини розподілу \tilde{h} є $f(\tilde{h}) = 1/\Delta h$, де $\Delta h = h_{\max} - h_{\min}$.

Підставляючи у співвідношення (4.3) відповідні вирази для дифузійного потоку в однорідній смузі за нульової початкової концентрації (2.30) та функції Гріна (2.42), одержимо

$$\frac{1}{J_*} \langle \langle J(z, t) \rangle_{conf} \rangle_{\tilde{h}} = 1 - \frac{2}{z_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\xi_n} e^{-D_0 \xi_n^2 t} \sin(\xi_n z) +$$

$$+ \frac{2(D_1 - D_0)}{D_0 z_0^3} \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\xi_n}{y_k^2 - \xi_n^2} \langle A_{kn}(\tilde{h}) \rangle_{\tilde{h}} \left[e^{-D_0 \xi_n^2 t} - e^{-D_0 y_k^2 t} \right] \sin(y_k z). \quad (4.4)$$

Якщо у початковий момент часу відомий сталий ненульовий розподіл концентрації домішкової речовини, то у співвідношення (4.3) підставимо вираз $J_0(z, t)$, що задається формулою (2.39), тоді

$$\begin{aligned} \frac{1}{J_*} \langle \langle J(z, t) \rangle_{conf} \rangle_{\tilde{h}} &= 1 - \frac{2}{z_0} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-D_0 \xi_n^2 t} \left(\frac{1}{\xi_n} + (-1)^n D_0 \frac{c_*}{J_*} \right) \sin(\xi_n z) + \frac{2(D_1 - D_0)}{D_0 z_0^3} \times \\ &\times \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\xi_n}{y_k^2 - \xi_n^2} \langle A_{kn}(\tilde{h}) \rangle_{\tilde{h}} \left(1 + (-1)^n D_0 \xi_n \frac{c_*}{J_*} \right) \left[e^{-D_0 \xi_n^2 t} - e^{-D_0 y_k^2 t} \right] \sin(y_k z). \end{aligned} \quad (4.5)$$

$$\text{Тут } A_{kn}(\tilde{h}) = \frac{\cos(b_{kn}^- \tilde{h})}{(b_{kn}^-)^2} - \frac{\cos(b_{kn}^+ \tilde{h})}{(b_{kn}^+)^2} - \frac{4y_k \xi_n}{(y_k^2 - \xi_n^2)^2} + (-1)^{k+n} \frac{2y_k \tilde{h}}{y_k^2 - \xi_n^2}, \quad b_{kn}^{\pm} = y_k \pm \xi_n.$$

Враховуючи рівномірний розподіл випадкової величини \tilde{h} , маємо

$$\langle A_{kn}(\tilde{h}) \rangle_{\tilde{h}} = \frac{1}{\Delta h} \int_{h_{\min}}^{h_{\max}} A_{kn}(\tilde{h}) d\tilde{h}. \quad (4.6)$$

Проінтегрувавши вираз (4.6), отримаємо

$$\begin{aligned} A_{kn}^1 &= \frac{1}{\Delta h} \left[\frac{\sin(b_{kn}^- h_{\max}) - \sin(b_{kn}^- h_{\min})}{(b_{kn}^-)^3} - \frac{\sin(b_{kn}^+ h_{\max}) - \sin(b_{kn}^+ h_{\min})}{(b_{kn}^+)^3} - \right. \\ &\quad \left. - \frac{4y_k \xi_n \Delta h}{(y_k^2 - \xi_n^2)^2} + (-1)^{k+n} y_k \frac{h_{\max}^2 - h_{\min}^2}{y_k^2 - \xi_n^2} \right]. \end{aligned} \quad (4.7)$$

Підставивши співвідношення (4.7) у вирази (4.4) для нульової початкової концентрації одержимо

$$\begin{aligned} \frac{1}{J_*} \langle \langle J(z, t) \rangle_{conf} \rangle_{\tilde{h}} &= 1 - \frac{2}{z_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\xi_n} e^{-D_0 \xi_n^2 t} \sin(\xi_n z) + \\ &+ \frac{2(D_1 - D_0)}{D_0 z_0^3} \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\xi_n}{y_k^2 - \xi_n^2} A_{kn}^1 \left[e^{-D_0 \xi_n^2 t} - e^{-D_0 y_k^2 t} \right] \sin(y_k z). \end{aligned} \quad (4.8)$$

У випадку ненульової сталої початкової концентрації, підставимо (4.7) у рівність (4.5), тоді

$$\frac{1}{J_*} \langle \langle J(z, t) \rangle_{conf} \rangle_{\tilde{h}} = 1 - \frac{2}{z_0} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-D_0 \xi_n^2 t} \left(\frac{1}{\xi_n} + (-1)^n D_0 \frac{c_*}{J_*} \right) \sin(\xi_n z) + \frac{2(D_1 - D_0)}{D_0 z_0^3} \times$$

$$\times \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\xi_n}{y_k^2 - \xi_n^2} A_{kn}^1 \left(1 + (-1)^n D_0 \xi_n \frac{c_*}{J_*} \right) \left[e^{-D_0 \xi_n^2 t} - e^{-D_0 y_k^2 t} \right] \sin(y_k z) . \quad (4.9)$$

Таким чином, отримано розрахункові формули (4.8), (4.9) для потоків маси у смузі з прошарком, усереднених за ансамблем конфігурацій фаз та випадковою товщиною включення з рівномірним розподілом на заданому інтервалі, для двох випадків початкових умов на функцію концентрації.

4.1.3 Числовий аналіз усереднених потоків у двофазній смузі за рівномірного розподілу товщини включення

На основі отриманих розрахункових формул (4.7)-(4.9) проведемо числовий аналіз залежності усередненого потоку від фізичних та геометричних параметрів включення. Числові розрахунки проведено у безрозмірних змінних (2.43). Рис. 4.2 ілюструє розподіли усередненого дифузійного потоку за нульової (рис. 4.2,a) та ненульової сталої (рис. 4.2,b) початкових концентрацій для різних значень h_{\min} та h_{\max} для $\tau=0.1$. На рис. 4.2 криві 1, 2 побудовані для проміжків $[0.005;0.205]$, $[0.1;0.3]$ у випадку $D_1/D_0=0.01$, криві 3-6 відповідно для $[0.005;0.205]$, $[0.05;0.25]$, $[0.1;0.3]$, $[0.15;0.35]$ у випадку $D_1/D_0=5$. Криві а на рис. 4.2,b відповідають значенню $c_*/J_*=0.1$, криві b – $c_*/J_*=0.4$. Штрихові лінії позначають потоки в однорідній смузі з характеристиками матриці.

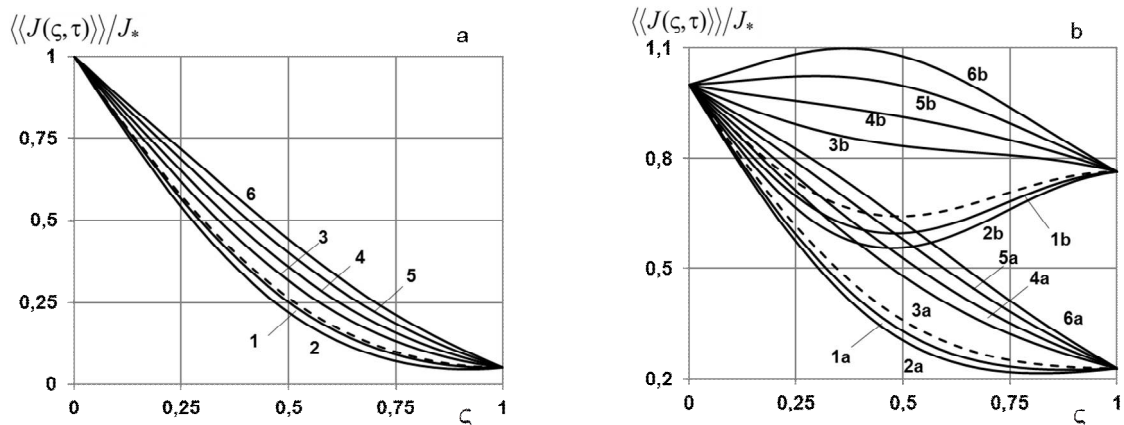


Рис. 4.2. Усереднені потоки маси за нульової (а) та ненульової сталої (b) концентрацій для рівномірного розподілу товщини включення на $[h_{\min}; h_{\max}]$

Зазначимо, що у випадку, коли коефіцієнт дифузії частинок у матриці більший, ніж у включенні, зміщення інтервалу ймовірних значень товщини

прошарку до 1 призводить до зменшення потоку (криві 1, 2, рис. 4.2). Якщо $D_1 > D_0$, то із зсувом проміжку $[h_{\min}; h_{\max}]$ до 1 потік маси збільшується (криві 3-6, рис. 4.2). Збільшення початкової концентрації c_* у випадку більших значень коефіцієнта дифузії частинок у матриці, ніж у включенні, може призвести до утворення локального мінімуму функції $\langle\langle J(\zeta, \tau) \rangle\rangle / J_*$ в середині смуги (криві 1b, 2b, рис. 4.2,b). Крім того, у випадку $D_1 / D_0 > 1$ і $c_* / J_* > 0.3$ збільшення h_{\min} та h_{\max} при сталій довжині проміжка Δh призводить до зміни поведінки потоку маси – функція стає опуклою вгору і $\langle\langle J(\zeta, \tau) \rangle\rangle / J_*$ може досягати значень, більших ніж значення потоку на границі $\zeta = 0$ (криві 5b, 6b, рис. 4.2,b).

Проведені обчислення показали, що зміна Δh за сталого значення h_{\min} або h_{\max} , впливають на поведінку усередненого потоку подібним чином, що і зміщення інтервалу ймовірних значень товщини прошарку $[h_{\min}; h_{\max}]$ вздовж осі $O\zeta$. Крім того, розширення (звуження) інтервалу $[h_{\min}; h_{\max}]$ в околі однієї і тієї ж точки координат практично не впливає на значення $\langle\langle J(\zeta, \tau) \rangle\rangle / J_*$ (змінюються 3-5 значимі цифри). Подібну поведінку функції потоку можна пояснити тим, що незалежно від значень h_{\min} та h_{\max} (незалежно від довжини інтервалу) середнє значення ймовірної товщини прошарку залишається незмінним.

4.1.4 Усереднення дифузійного потоку за трикутного розподілу товщини включення на заданому інтервалі

Розглянемо випадок, коли товщина включення \tilde{h} має трикутний розподіл на проміжку $[h_{\min}; h_{\max}]$.

Функція густини трикутного розподілу має вигляд [63]

$$f(\tilde{h}) = \begin{cases} \frac{2}{\Delta h} - \frac{2}{\Delta h^2} |h_{\min} + h_{\max} - 2\tilde{h}|, & \tilde{h} \in [h_{\min}; h_{\max}]; \\ 0, & \tilde{h} \notin [h_{\min}; h_{\max}]. \end{cases} \quad (4.10)$$

На рис. 4.3 наведено залежність функції $f(\tilde{h})$ від інтервалу ймовірних значень товщини $[h_{\min}; h_{\max}]$. Криві 1-5 на рис. 4.3,а відповідають проміжкам

[0.01;0.2], [0.1;0.2], [0.1;0.29], [0.1;0.35], [0.1;0.45]. Криві 1-4 на рис. 4.3,б побудовані для відрізків [0.04;0.4], [0.12;0.32], [0.17;0.27], [0.195;0.245].

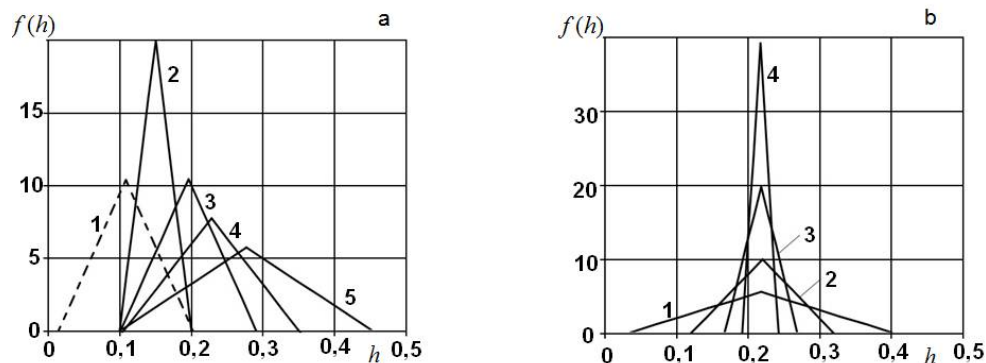


Рис. 4.3. Функція густини трикутного розподілу для різних значень h_{\max} (а) та різних значень Δh в околі однієї точки (б)

Зауважимо, що $\max f(\tilde{h})$ залежить тільки від довжини інтервалу можливих значень товщини включення і не залежить від координат проміжку на осі $O\tilde{h}$ (криві 1 та 3, рис. 4.3,а). Крім того, чим менший проміжок $[h_{\min}; h_{\max}]$, тим ймовірнішою є товщина прошарку $\Delta h/2$ (рис. 4.3,б).

Враховуючи функцію густини трикутного розподілу (4.10), при усередненні коефіцієнта $A_{kn}(\tilde{h})$ за випадковою товщиною прошарку маємо

$$\langle A_{kn}(\tilde{h}) \rangle_{\tilde{h}} = \int_{h_{\min}}^{h_{\max}} f(\tilde{h}) A_{kn}(\tilde{h}) d\tilde{h} = \int_{h_{\min}}^{h_c} \frac{4(\tilde{h} - h_{\min})}{\Delta h^2} A_{kn}(\tilde{h}) d\tilde{h} - \int_{h_c}^{h_{\max}} \frac{4(\tilde{h} - h_{\max})}{\Delta h^2} A_{kn}(\tilde{h}) d\tilde{h},$$

де $h_c = \Delta h/2$.

Як і у попередньому випадку, проінтегрувавши цей вираз і підставивши отриманий результат у (4.4) та (4.5) відповідно, одержимо розрахункові формули для потоків маси усереднених за ансамблем конфігурацій фаз за рівномірного розподілу та випадковою товщиною включення з трикутним розподілом за нульової початкової концентрації

$$\begin{aligned} \frac{1}{J_*} \langle \langle J(z, t) \rangle_{conf} \rangle_{\tilde{h}} &= 1 - \frac{2}{z_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\xi_n} e^{-D_0 \xi_n^2 t} \sin(\xi_n z) + \\ &+ \frac{2(D_1 - D_0)}{D_0 z_0^3} \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\xi_n}{y_k^2 - \xi_n^2} A_{kn}^2 \left[e^{-D_0 \xi_n^2 t} - e^{-D_0 y_k^2 t} \right] \sin(y_k z), \end{aligned} \quad (4.11)$$

за ненульової сталої початкової концентрації

$$\frac{1}{J_*} \langle \langle J(z, t) \rangle_{conf} \rangle_{\tilde{h}} = 1 - \frac{2}{z_0} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-D_0 \xi_n^2 t} \left(\frac{1}{\xi_n} + (-1)^n D_0 \frac{c_*}{J_*} \right) \sin(\xi_n z) + \frac{2(D_1 - D_0)}{D_0 z_0^3} \times$$

$$\times \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\xi_n}{y_k^2 - \xi_n^2} A_{kn}^2 \left(1 + (-1)^n D_0 \xi_n \frac{c^*}{J_*} \right) \left[e^{-D_0 \xi_n^2 t} - e^{-D_0 y_k^2 t} \right] \sin(y_k z), \quad (4.12)$$

де

$$A_{kn}^2 = \frac{4}{\Delta h^2} \left[\frac{1}{(b_{kn}^-)^4} \left(2 \cos(b_{kn}^- h_c) - \cos(b_{kn}^- h_{\min}) - \cos(b_{kn}^- h_{\max}) \right) - \frac{1}{(b_{kn}^+)^4} \times \right. \\ \times \left(2 \cos(b_{kn}^+ h_c) - \cos(b_{kn}^+ h_{\min}) - \cos(b_{kn}^+ h_{\max}) \right) + \frac{4 y_k \xi_n [h_{\min} h_{\max} - h_c^2]}{(y_k^2 - \xi_n^2)^2} + \\ \left. + (-1)^{k+n} \frac{y_k (h_{\max}^2 - h_{\min}^2) h_{\min}^3 + h_{\max}^3 - 2 h_c^3}{y_k^2 - \xi_n^2} \frac{1}{6} \right]. \quad (4.13)$$

Зазначимо, що коефіцієнт A_{kn}^1 (4.7) можна предсавити у вигляді

$$A_{kn}^1 = A_{kn}^{1s} + A_{kn}^{1z}(h_{\min}, h_{\max}),$$

$$\text{де } A_{kn}^{1s} = - \frac{4 y_k \xi_n}{(y_k^2 - \xi_n^2)^2};$$

$$A_{kn}^{1z}(h_{\min}, h_{\max}) = \frac{\sin(b_{kn}^- h_{\max}) - \sin(b_{kn}^- h_{\min})}{(b_{kn}^-)^3 \Delta h} - \frac{\sin(b_{kn}^+ h_{\max}) - \sin(b_{kn}^+ h_{\min})}{(b_{kn}^+)^3 \Delta h} - \\ - (-1)^{k+n} y_k \frac{h_{\max}^2 - h_{\min}^2}{\Delta h (y_k^2 - \xi_n^2)}.$$

Тобто у випадку рівномірного розподілу товщини прошарку у коефіцієнті A_{kn}^1 отримано доданок, який не залежить від жодного параметра, який характеризує товщину включення. Натомість у коефіцієнті A_{kn}^2 (4.13) розрахункової формули для усередненого потоку в неоднорідній смузі з прошарком, товщина якого має трикутний розподіл на проміжку $[h_{\min}; h_{\max}]$, доданок, що не залежить від жодного параметра, який характеризує товщину включення, не виокремлюється. Водночас A_{kn}^2 містить значення h_c – середнє значення інтервалу ймовірних значень товщини прошарку.

Наявність множників вигляду $1/(y_k \pm \xi_n)^3$ у розрахункових формулах для усередненого потоку за стохастичної товщини прошарків (4.8), (4.9), (4.11), (4.12) покращує збіжність рядів, у порівнянні з формулами (2.52), (2.53) для випадків, коли задана характерна товщина включення.

4.1.5 Числовий аналіз усереднених потоків у двофазній смузі за трикутного розподілу товщини включення

На основі розрахункових формул (4.11), (4.12) проаналізуємо залежність потоку маси у смузі з випадково розташованим прошарком, товщина якого має трикутний розподіл на проміжку $[h_{\min}; h_{\max}]$, від значень вхідних параметрів.

На рис. 4.4 показано залежність усередненого дифузійного потоку за нульової (рис. 4.4,a) та ненульової сталої (рис. 4.4,b) початкових концентрацій для різних проміжків $[h_{\min}; h_{\max}]$ у випадку трикутного розподілу товщини. Криві 1 і 2 на рис. 4.4 побудовані для інтервалів $[0.1; 0.15]$, $[0.1; 0.45]$ для $D_1 / D_0 = 0.01$, криві 3-5 наведено для $[0.1; 0.15]$, $[0.1; 0.25]$, $[0.1; 0.45]$ при $D_1 / D_0 = 5$. Криві а на рис. 4.4,b відповідають значенню $\tau = 0.01$, криві b – $\tau = 0.1$ для $c_* / J_* = 0.1$.

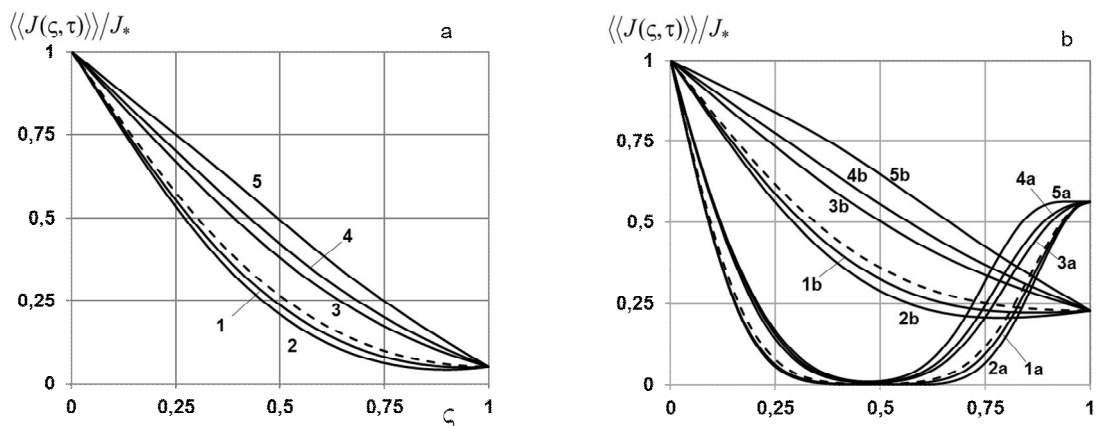


Рис. 4.4. Усереднені потоки маси за нульової (а) та ненульової сталої (b) концентрацій для трикутного розподілу товщини включення на $[h_{\min}; h_{\max}]$

Зауважимо, якщо коефіцієнт дифузії домішки у прошарку є меншим ніж у матриці, то збільшення Δh при сталому значенні h_{\min} викликає зменшення усередненого потоку (криві 1, 2, рис. 4.4). Якщо ж коефіцієнт дифузії у матриці менший, ніж у включенні, то потік у смузі із прошарком більший, ніж в однорідному тілі, і розширення проміжка $[h_{\min}; h_{\max}]$ за сталого значення h_{\min} збільшує усереднений дифузійний потік (криві 3-5, рис. 4.4). Із збільшенням Δh у випадку $D_1 / D_0 > 1$ функція $\langle\langle J(\zeta, \tau) \rangle\rangle / J_*$ стає опуклою вгору, причому для ненульової початкової концентрації така поведінка усередненого потоку спостерігається для менших значень Δh (крива 5b, рис. 4.4,b). За ненульової початкової

концентрації для $\tau < 0.1$ дифузійний потік від межі $\zeta = 0$ спадає, в середині шару є близьким до нуля, і стрімко зростає біля межі $\zeta = 1$ (криві а, рис. 4.4,b). Причому для різних значень Δh потоки маси від границі тіла, де підтримується сталий потік, практично співпадають з потоком в однорідній смузі, а від середини шару починають відрізнятися один від одного та від потоку у смузі без прошарків тим більше, чим більша різниця між h_{\min} та h_{\max} (криві а, рис. 4.4,b).

Як і у випадку рівномірного розподілу товщини включення, зміна h_{\min} за сталого значення h_{\max} або зміщення $[h_{\min}; h_{\max}]$ вздовж осі $O\zeta$, так само впливають на поведінку усередненого потоку, що і при зміні Δh за сталого значення h_{\min} . Аналогічно зміна інтервалу $[h_{\min}; h_{\max}]$ в околі однієї і тієї ж точки координат практично не змінює значення усередненого потоку. Зазначимо, що для розглянутих типів розподілів товщини різниця між значеннями усередненого потоку для одних і тих же значень вхідних параметрів становить до 10^{-2} .

4.2 Дифузійний потік у двофазній багат шаровій смузі зі стохастично розташованим прошарками випадкової товщини

4.2.1 Комп'ютерне моделювання потоків маси у шаруватій смузі за рівномірного розподілу товщини включень

Нехай у смузі товщини z_0 , яка містить n_0 підшарів матриці та n_1 підшарів включень стохастичної товщини, відбувається дифузія домішкової речовини. Координати розташування підшарів є невідомими, а коефіцієнти дифузії є сталими у межах кожної з фаз. Приймаємо, що фази в області тіла розташовані за рівномірним законом розподілу, а товщину включень вважаємо випадковою величиною із заданою функцією розподілу на проміжку $[h_{\min}; h_{\max}]$. Тут, як і у попередньому випадку, $0 < h_{\min} < h_{\max} < z_0$.

Розглядаємо крайову задачу на потік (2.6)-(2.8), розв'язок якої знаходимо у вигляді інтегрального ряду Неймана (2.58).

Як і у попередньому випадку, обмежимося двома першими доданками

ряду Неймана, і проведемо усереднення за ансамблем конфігурацій фаз та за випадковою товщиною включень. Тоді усереднений потік шукаємо у вигляді

$$\left\langle \left\langle J(z,t) \right\rangle_{conf} \right\rangle_{h_{i1}} = J_0(z,t) + \left\langle \int_0^t \int_0^{z_0} G(z,z',t,t') \left\langle L_s(z') \right\rangle_{conf} J_0(z',t') dz' dt' \right\rangle_{h_{i1}}, \quad (4.14)$$

де h_{i1} – товщина i -го включення ($i = \overline{1, n_1}$).

Враховуючи рівність (2.70), співвідношення (4.14) запишемо як

$$\left\langle \left\langle J(z,t) \right\rangle_{conf} \right\rangle_{h_{i1}} = J_0(z,t) + (D_1 - D_0) \left\langle \int_0^t \int_0^{z_0} G(z,z',t,t') \sum_{i=1}^{n_1} \left\langle \eta_{i1}(z') \right\rangle_{conf} \times \right. \\ \left. \times \frac{\partial^2 J_0(z',t')}{\partial z'^2} dz' dt' \right\rangle_{h_{i1}}. \quad (4.15)$$

Оскільки справджується співвідношення (2.72), для усередненої «функції структури» отримаємо

$$\left\langle \eta_{i1}(z') \right\rangle = \begin{cases} z' / z_0, & z' \leq h_{i1}; \\ h_{i1} / z_0, & z' \geq h_{i1}. \end{cases} \quad (4.16)$$

Підставляючи вираз (4.16) у формулу (4.15), маємо

$$\left\langle \left\langle J(z,t) \right\rangle_{conf} \right\rangle_{h_{i1}} = J_0(z,t) + \frac{(D_1 - D_0)}{z_0} \left\langle \sum_{i=1}^{n_1} \int_0^t \int_0^{h_{i1}} z' G(z,z',t,t') \frac{\partial^2 J_0(z',t')}{\partial z'^2} dz' + \right. \\ \left. + h_{i1} \int_{h_{i1}}^{z_0} G(z,z',t,t') \frac{\partial^2 J_0(z',t')}{\partial z'^2} dz' \right\rangle_{h_{i1}} dt'. \quad (4.17)$$

Приймаючи, що товщина включень h_{i1} є випадковою величиною з рівномірним розподілом на проміжку $[h_{\min}; h_{\max}]$, рівність (4.17) можна як

$$\left\langle \left\langle J(z,t) \right\rangle_{conf} \right\rangle_{h_{i1}} = J_0(z,t) + \frac{(D_1 - D_0)}{z_0} \sum_{i=1}^{n_1} \int_{h_{\min}}^{h_{\max}} \frac{1}{\Delta h} \int_0^t \int_0^{h_{i1}} z' G(z,z',t,t') \frac{\partial^2 J_0(z',t')}{\partial z'^2} dz' + \\ h_{i1} \int_{h_{i1}}^{z_0} G(z,z',t,t') \frac{\partial^2 J_0(z',t')}{\partial z'^2} dz' \right\rangle_{h_{i1}} dt' dh_{i1}. \quad (4.18)$$

Тут $\Delta h = h_{\max} - h_{\min}$.

Підставивши у співвідношення (4.18) вирази для функції Гріна (2.42),

потоків $J_0(z, t)$ за нульової початкової концентрації (2.30) та проінтегрувавши одержаний вираз, отримаємо

$$\begin{aligned} \frac{1}{J_*} \left\langle \left\langle J(z, t) \right\rangle_{conf} \right\rangle_{h_{il}} &= 1 - \frac{2}{z_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\xi_n} e^{-D_0 \xi_n^2 t} \sin(\xi_n z) + \\ &+ \frac{2(D_1 - D_0)n_1}{D_0 z_0^3} \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\xi_n}{y_k^2 - \xi_n^2} A_{kn}^1 \left[e^{-D_0 \xi_n^2 t} - e^{-D_0 y_k^2 t} \right] \sin(y_k z). \end{aligned} \quad (4.19)$$

У випадку ненульової сталої початкової концентрації домішки в тілі у вираз (4.18) підставимо співвідношення (2.39) для $J_0(z, t)$, обчисливши відповідні інтеграли, остаточно отримаємо

$$\begin{aligned} \frac{1}{J_*} \left\langle \left\langle J(z, t) \right\rangle_{conf} \right\rangle_{h_{il}} &= 1 - \frac{2}{z_0} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-D_0 \xi_n^2 t} \left(\frac{1}{\xi_n} + (-1)^n D_0 \frac{c_*}{J_*} \right) \sin(\xi_n z) + \frac{2(D_1 - D_0)n_1}{D_0 z_0^3} \times \\ &\times \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\xi_n}{y_k^2 - \xi_n^2} A_{kn}^1 \left(1 + (-1)^n D_0 \xi_n \frac{c_*}{J_*} \right) \left[e^{-D_0 \xi_n^2 t} - e^{-D_0 y_k^2 t} \right] \sin(y_k z). \end{aligned} \quad (4.20)$$

Тут коефіцієнт A_{kn}^1 задається рівністю (4.7).

Співвідношення (4.19), (4.20) є розрахунковими формулами для дифузійного потоку у двофазній багатошаровій смугі з рівномірним розподілом фаз та стохастичною товщиною прошарків за нульової та ненульової сталої початкових концентрацій відповідно. Зауважимо, що на відміну від смуги з одним прошарком стохастичної товщини, для багатошарової смуги неоднорідна частина виразів (4.19) та (4.20) пропорційна кількості включень n_1 .

За формулами (4.19) та (4.20) проведемо числові розрахунки усереднених потоків домішки у двофазній випадково неоднорідній смугі, що містить прошарки, товщина яких є рівномірно розподіленою випадковою величиною на $[h_{\min}; h_{\max}]$, у безрозмірних змінних (2.43), приймаючи за базові значення $\tau=0.1$; $c_*/J_*=0.1$; $D_1/D_0=0.01$ для кривих а та $D_1/D_0=5$ – для кривих б. На рис. 4.5 показано розподіли усередненого дифузійного потоку у багатошаровій смугі за нульової (рис. 4.5,а) та ненульової сталої (рис. 4.5,б) початкових концентрацій для різних значень h_{\max} за фіксованого значення h_{\min} для $n_1=20$. Криві 1 побудовані для проміжку $[0.01; 0.015]$, криві 2 – для $[0.01; 0.02]$, криві 3 – для $[0.01; 0.025]$. Штриховими лініями позначено потоки в однорідній смугі.

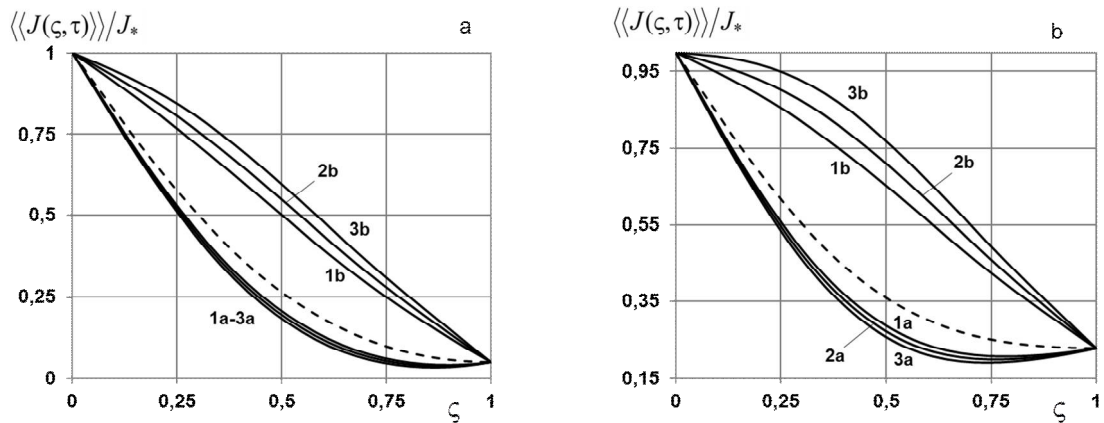


Рис. 4.5. Усереднені потоки маси за нульової (а) та ненульової сталої (b) початкових концентрацій за фіксованого значення h_{\min}

Рис. 4.6 ілюструє розподіли усередненого потоку за нульової (рис. 4.6,a) та ненульової (рис. 4.6,b) початкових концентрацій залежно від кількості включень, товщина яких має рівномірний розподіл на $[0.01; 0.02]$, криві 1-3 побудовані для $n_1 = 5; 10; 20$.

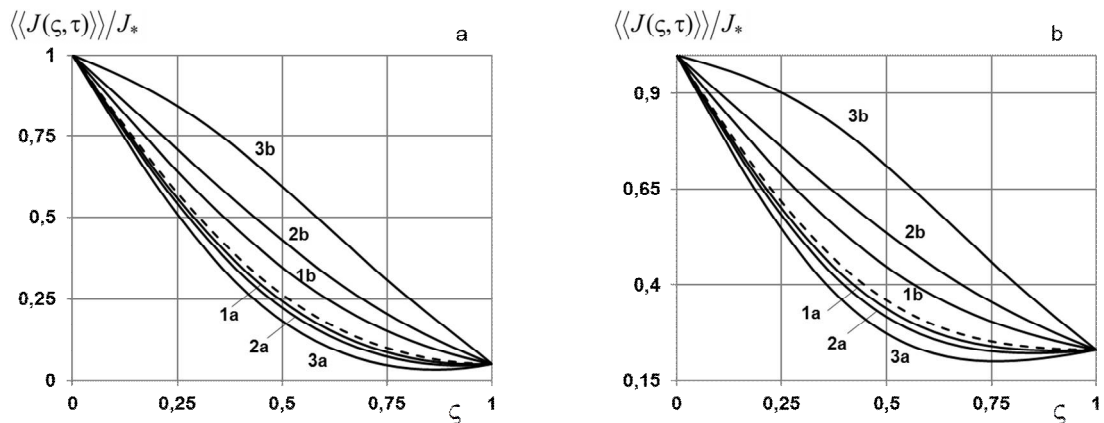


Рис. 4.6. Усереднені потоки маси за нульової (а) та ненульової сталої (b) початкових концентрацій для різної кількості включень n_1

Зазначимо, що 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. 4.5), при цьому у випадку ненульової початкової концентрації чим більше значення Δh , тим швидше функція потоку стає опуклою вгору (криві 2b, 3b, рис. 4.5,b). Якщо коефіцієнт дифузії частинок у матриці більший, ніж у включенні, відмінності між значеннями потоків сягають максимумно 12%, причому найбільше в середині смуги (криві а, рис. 4.5).

Збільшення кількості включень для $D_1 < D_0$ як за нульової так і ненульової сталої початкових концентрацій призводить до зменшення усередненого дифузійного потоку (криві а, рис. 4.6). У протилежному випадку, чим більша кількість включень міститься у тілі, тим більше $\langle\langle J(\zeta, \tau) \rangle\rangle / J_*$ відрізняється від потоку в однорідній структурі (криві б, рис. 4.6).

Як і у випадку одного прошарку стохастичної товщини, збільшення довжини проміжка $[h_{\min}; h_{\max}]$ в околі однієї точки практично не впливає на значення усередненого потоку (різниця у 5 значимій цифрі).

4.2.2 Комп'ютерне моделювання потоків маси у шаруватій смузі за трикутного розподілу товщини включень

Нехай товщина включень h_{i1} є випадковою величиною з функцією густини розподілу $f(z)$ (4.10), тобто має трикутний розподіл на проміжку $[h_{\min}; h_{\max}]$.

Усереднений дифузійний потік за двома першими доданками ряду Неймана шукаємо у вигляді (4.14). Врахувавши у співвідношенні (4.17) трикутний розподіл товщини включень, та підставивши відповідні вирази для функції Гріна і $J_0(z, t)$ за нульової початкової концентрації, отримаємо

$$\frac{1}{J_*} \langle\langle J(z, t) \rangle\rangle_{conf} \Big|_{h_{i1}} = 1 - \frac{2}{z_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\xi_n} e^{-D_0 \xi_n^2 t} \sin(\xi_n z) +$$

$$\frac{2(D_1 - D_0)}{D_0 z_0^2} \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\xi_n}{y_k^2 - \xi_n^2} \left[e^{-D_0 \xi_n^2 t} - e^{-D_0 y_k^2 t} \right] \sin(y_k z) \sum_{i=1}^{n_1} \int_{h_{\min}}^{h_{\max}} f(h_{i1}) \tilde{A}_{kn} dh_{i1}, \quad (4.21)$$

$$\text{де } \tilde{A}_{kn} = \frac{\cos(b_{kn}^- h_{i1})}{(b_{kn}^-)^2} - \frac{\cos(b_{kn}^+ h_{i1})}{(b_{kn}^+)^2} - \frac{4y_k \xi_n}{(y_k^2 - \xi_n^2)^2} + \frac{(-1)^{k+n} 2y_k h_{i1}}{y_k^2 - \xi_n^2}.$$

У випадку ненульової сталої початкової концентрації маємо

$$\frac{1}{J_*} \langle\langle J(z, t) \rangle\rangle_{conf} \Big|_{h_{i1}} = 1 - \frac{2}{z_0} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-D_0 \xi_n^2 t} \left(\frac{1}{\xi_n} + (-1)^n D_0 \frac{c_*}{J_*} \right) \sin(\xi_n z) + \frac{2(D_1 - D_0)}{D_0 z_0^2} \times$$

$$\times \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\xi_n}{y_k^2 - \xi_n^2} \left(1 + (-1)^n D_0 \xi_n \frac{c_*}{J_*} \right) \left[e^{-D_0 \xi_n^2 t} - e^{-D_0 y_k^2 t} \right] \sin(y_k z) \sum_{i=1}^{n_1} \int_{h_{\min}}^{h_{\max}} f(h_{i1}) \tilde{A}_{kn} dh_{i1}.$$

(4.22)

Проінтегрувавши відповідні вирази у співвідношеннях (4.21) та (4.22), остаточно одержимо розрахункові формули для усередненого потоку частинок у двофазній багат шаровій смузї з рівномірним розподілом фаз та трикутним розподілом товщини включень за нульової

$$\frac{1}{J_*} \left\langle \langle J(z, t) \rangle_{conf} \right\rangle_{h_{i1}} = 1 - \frac{2}{z_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\xi_n} e^{-D_0 \xi_n^2 t} \sin(\xi_n z) + \frac{2(D_1 - D_0)n_1}{D_0 z_0^3} \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\xi_n}{y_k^2 - \xi_n^2} A_{kn}^2 \left[e^{-D_0 \xi_n^2 t} - e^{-D_0 y_k^2 t} \right] \sin(y_k z); \quad (4.23)$$

та сталої ненульової початкових концентрацій домішки в тілі

$$\frac{1}{J_*} \left\langle \langle J(z, t) \rangle_{conf} \right\rangle_{h_{i1}} = 1 - \frac{2}{z_0} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-D_0 \xi_n^2 t} \left(\frac{1}{\xi_n} + (-1)^n D_0 \frac{C_*}{J_*} \right) \sin(\xi_n z) + \frac{2(D_1 - D_0)n_1}{D_0 z_0^3} \times \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\xi_n}{y_k^2 - \xi_n^2} A_{kn}^2 \left(1 + (-1)^n D_0 \xi_n \frac{C_*}{J_*} \right) \left[e^{-D_0 \xi_n^2 t} - e^{-D_0 y_k^2 t} \right] \sin(y_k z). \quad (4.24)$$

Тут коефіцієнт A_{kn}^2 обчислюється за формулою (4.13).

Зазначимо, що у випадку характерної (середньої) товщини включень неоднорідна частина усередненого дифузійного потоку у багат шаровому тілі, відповідно до співвідношень (2.74) та (2.75), є прямо пропорційною до значення об'ємної частки включень v_1 ($v_1 = n_1 h_1 / z_0$). У той же час у випадку стохастичної товщини шаруватих включень неоднорідна частина усередненого потоку прямо пропорційна величині n_1 / z_0 .

На основі формул (4.23) та (4.24) дослідимо залежність усереднених потоків від інтервалу ймовірних значень товщини включень та кількості прошарків. Як і у попередніх випадках, обчислення проводимо у безрозмірних змінних (2.43), а в якості параметрів числового дослідження приймаємо $\tau=0.1$; $c_*/J_*=0.1$; $D_1/D_0=0.01$ для кривих а, $D_1/D_0=5$ – для кривих б.

На рис. 4.7 проілюстровано розподіли усередненого дифузійного потоку за нульової (рис. 4.7,а) та ненульової сталої (рис. 4.7,б) початкових концентрацій для різних значень Δh за фіксованого значення h_{max} для $n_1=10$. Тут криві 1-3 побудовані для тих самих інтервалів ймовірної товщини включень, що і на рис. 4.5. Як і в попередньому випадку, штриховими лініями позначено потоки в

смугі без прошарків. На рис. 4.8 наведено характерні розподіли усереднених потоків частинок мігруючої речовини за нульової (рис. 4.8,a) та ненульової (рис. 4.8,b) початкових концентрацій для різних значень $n_1 = 10; 20; 30$ (криві 1-3) у випадку трикутного розподілу товщини включень на проміжку $[0.01; 0.015]$.

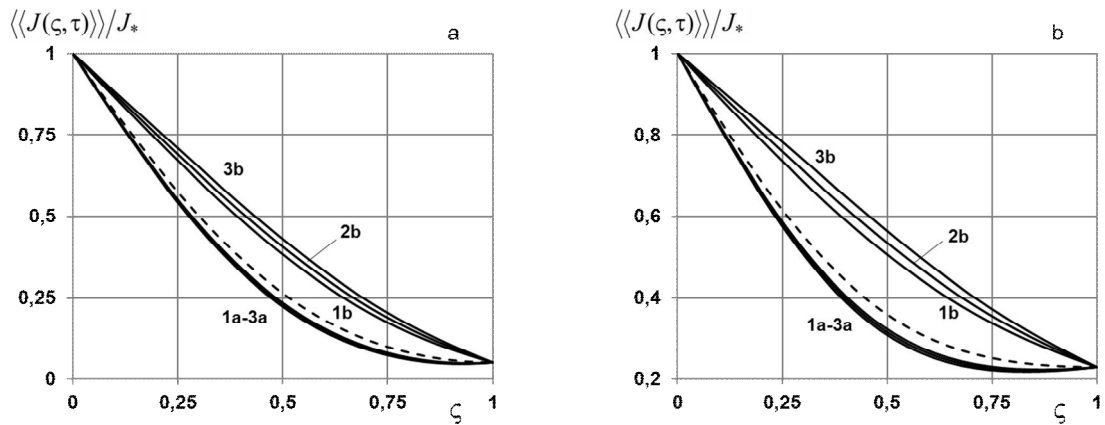


Рис. 4.7. Усереднені потоки маси за нульової (а) та ненульової сталої (b) початкових концентрацій за фіксованого значення h_{\min}

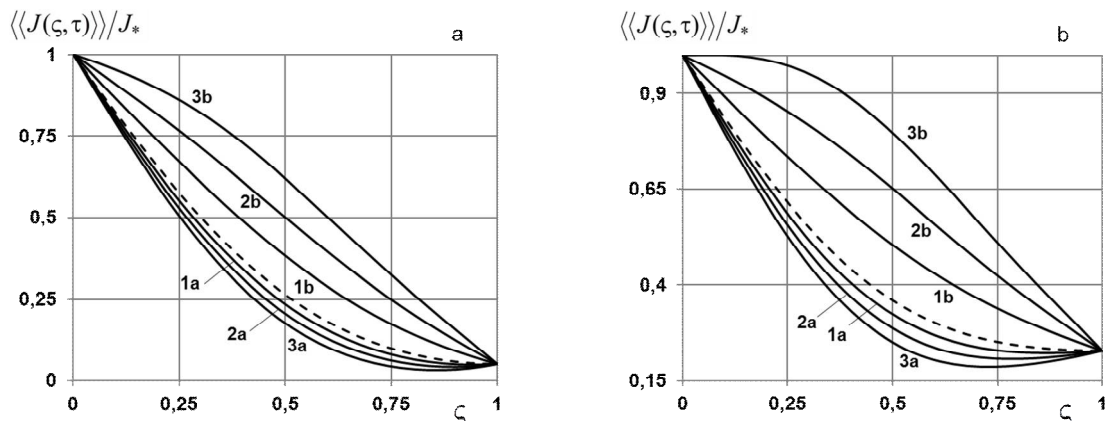


Рис. 4.8. Усереднені потоки маси за нульової (а) та ненульової сталої (b) початкових концентрацій для різної кількості включень n_1

Як і у випадку рівномірного розподілу товщини включень, збільшення довжини інтервалу ймовірних значень товщини прошарків при фіксованому значенні одного з його кінців для $D_1 > D_0$ призводить до зростання усередненого потоку (криві b, рис. 4.7). У випадку значень коефіцієнта дифузії матриці більших, ніж у включенні, зміна Δh практично не впливає на значення і поведінку функції дифузійного потоку, зокрема, максимальна різниця між значення сягає 5% в околі середини смуги (криві a, рис. 4.7). Збільшення кількості включень для цього випадку призводить до зменшення усередненого потоку як за нульової так і сталої ненульової початкових концентрацій (криві a, рис. 4.8).

Водночас, збільшення n_1 для $D_1 > D_0$ призводить до зростання потоку (криві b, рис. 4.8), причому для $n_1 > 20$ за вказаних значень параметрів числового дослідження функція $\langle\langle J(\zeta, \tau) \rangle\rangle / J_*$ стає опуклою вгору (криві 3b, рис. 4.8).

Як і у попередніх випадках, розширення або звуження інтервалу ймовірних значень товщини включень в околі однієї і тієї ж точки координат майже не впливає на значення $\langle\langle J(\zeta, \tau) \rangle\rangle / J_*$ (змінюються 5 значимі цифри). Крім того, значення усередненого дифузійного потоку в багатошаровій смузі для рівномірного і трикутного розподілів товщини включень для $\tau > 0.05$ практично співпадають (різниця у значеннях становить до 1%).

4.2.3 Порівняльний аналіз розв'язків залежно від етапу проведення процедури усереднення за товщиною

У попередніх випадках процедура усереднення дифузійного потоку за випадковою товщиною включення проводилась після побудови розв'язку крайової задачі у вигляді ряду Неймана і усереднення за ансамблем конфігурацій фаз, тобто на останньому етапі розв'язування задачі. Зазначимо, що якщо спочатку усереднити потік за випадковою товщиною, потім за ансамблем конфігурацій фаз, то отримуємо ті самі розрахункові формули, оскільки випадкові величини, за якими проводиться усереднення – координати включень та товщини включень, є незалежними.

Розглянемо випадок проведення процедури усереднення за випадковою товщиною на першому етапі, потім побудову розв'язку у вигляді ряду Неймана і усереднення за ансамблем конфігурацій фаз на прикладі задачі дифузії у двофазному багатошаровому тілі за ненульової сталої початкової концентрації і проаналізуємо результати числових експериментів.

Товщину прошарків, що є випадковою величиною на відрізку $[h_{\min}; h_{\max}]$, усереднюємо наступним чином

$$\langle h \rangle = \int_{h_{\min}}^{h_{\max}} h \tilde{f}(h) dh, \quad (4.25)$$

де $\tilde{f}(h)$ – функція густини ймовірнісного розподілу.

У випадку рівномірного розподілу товщини включення отримаємо

$$\langle h \rangle = \frac{h_{\max} + h_{\min}}{2}. \quad (4.26)$$

Якщо товщина шаруватих включень має трикутний розподіл на відріжку $[h_{\min}; h_{\max}]$, то, підставивши у співвідношення (4.25) вираз для функції густини розподілу (4.10), одержимо

$$\langle h \rangle = \frac{4\bar{h}}{\Delta h^2} [h_{\max}^2 - h_{\max} h_{\min} + h_{\min}^2 - \bar{h}^2]. \quad (4.27)$$

Тоді, для знаходження усередненого дифузійного потоку у двофазній випадково неоднорідній смузі з прошарками, що мають рівномірний розподіл товщини, за ненульової сталої початкової концентрації скористаємось співвідношенням (2.75), де в якості h_1 підставимо результати обчислень виразу (4.26) для конкретних значень h_{\min} , h_{\max} .

У табл. 4.1 наведено розрахункові дані для усередненого потоку $\langle \langle J \rangle_h \rangle_{conf}$, обчисленого за формулою (4.20), та потоку $\langle J(\langle h \rangle) \rangle_{conf}$, знайденого за формулою (2.75) для усередненої товщини $\langle h \rangle$. Розрахунки проводились у безрозмірних змінних (2.43). Розбиття інтервалу $\zeta \in [0;1]$ виконано з кроком $\Delta\zeta \approx 0.0323$.

У випадку трикутного розподілу товщини включень на проміжку $[h_{\min}; h_{\max}]$, у формулі (2.75) товщину h_1 шукаємо з виразу (4.27). Тоді одержимо наступні розрахункові дані для усередненого потоку $\langle \langle J \rangle_h \rangle_{conf}$, обчисленого за розрахунковою формулою (4.24), та потоку $\langle J(\langle h \rangle) \rangle_{conf}$ (табл. 4.2). Тут розбиття інтервалу $\zeta \in [0;1]$ також виконано з кроком $\Delta\zeta \approx 0.0323$.

Зазначимо, що відмінність між значеннями потоків усереднених спочатку за товщиною, а на останньому етапі розв'язання крайової задачі і за ансамблем конфігурацій фаз, та потоками усередненими і за ансамблем конфігурацій фаз і за випадковою товщиною на завершальному етапі розв'язання задачі, різняться

менше, ніж на 1%, проте для $\tau \leq 0.01$; $D_1/D_0 > 1$; $v_1 > 0.3$ різниця між потоками може досягатись вже у 2 значимій цифрі (табл. 4.1 та 4.2).

Таблиця 4.1. Розрахункові дані для усереднених потоків у двофазній багат шаровій смуззі за рівномірного розподілу товщини включень при ненульовій початковій концентрації

	$\tau = 0.01$; $D_1/D_0 = 5$; $c_*/J_* = 0.2$; $v_1 = 0.45$; $h_{\min} = 0.005$; $h_{\max} = 0.01$		$\tau = 0.1$; $D_1/D_0 = 0.01$; $c_*/J_* = 0.1$; $v_1 = 0.2$; $h_{\min} = 0.005$; $h_{\max} = 0.015$	
ζ	$\langle\langle J \rangle_h\rangle_{conf}$	$\langle J(\langle h \rangle)\rangle_{conf}$	$\langle\langle J \rangle_h\rangle_{conf}$	$\langle J(\langle h \rangle)\rangle_{conf}$
0	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000
0.0323	0.969299	0.978974	0.940184	0.940157
0.0968	0.861141	0.881994	0.822360	0.822281
0.1613	0.656076	0.680903	0.709846	0.709716
0.2258	0.412495	0.430423	0.605756	0.605582
0.2903	0.217320	0.218893	0.512427	0.512406
0.3548	0.096912	0.090091	0.431995	0.431972
0.4194	0.044126	0.033308	0.365259	0.365233
0.4839	0.042033	0.026401	0.312333	0.312308
0.5484	0.086542	0.071581	0.272581	0.272552
0.6129	0.216030	0.206562	0.244716	0.244688
0.6774	0.476667	0.475088	0.227028	0.227002
0.7419	0.845942	0.852242	0.217588	0.217565
0.8065	1.163142	1.186505	0.214630	0.214473
0.8710	1.274118	1.299927	0.216180	0.216072
0.9355	1.185859	1.205645	0.221207	0.221153
1	1.128379	1.128379	0.229091	0.229091

Отже, одночасно для малих часів протікання процесу дифузії, великих значень об'ємної частки включень і коефіцієнтів дифузії домішкової речовини у матриці менших, ніж у включенні, етап на якому проводиться усереднення за випадковою товщиною є суттєвим. Для інших значень параметрів задачі для

Таблиця 4.2. Розрахункові дані для усереднених потоків у двофазній багатошаровій смузі за трикутного розподілу товщини включень при ненульовій початковій концентрації

	$\tau = 0.01; D_1 / D_0 = 5;$ $c_* / J_* = 0.2; \nu_1 = 0.45;$ $h_{\min} = 0.005; h_{\max} = 0.01$		$\tau = 0.1; D_1 / D_0 = 0.01;$ $c_* / J_* = 0.1; \nu_1 = 0.2;$ $h_{\min} = 0.005; h_{\max} = 0.015$	
ζ	$\langle\langle J \rangle_h \rangle_{conf}$	$\langle J(\langle h \rangle) \rangle_{conf}$	$\langle\langle J \rangle_h \rangle_{conf}$	$\langle J(\langle h \rangle) \rangle_{conf}$
0	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000
0.0323	0.968300	0.978974	0.940184	0.940157
0.0968	0.861537	0.881994	0.822360	0.822281
0.1613	0.662167	0.680903	0.709846	0.709716
0.2258	0.419055	0.430423	0.605756	0.605582
0.2903	0.211705	0.218893	0.512618	0.512406
0.3548	0.088722	0.090091	0.431995	0.431972
0.4194	0.030927	0.033308	0.365259	0.365233
0.4839	0.024645	0.026401	0.312333	0.312308
0.5484	0.070131	0.071581	0.272581	0.272552
0.6129	0.206819	0.206562	0.244716	0.244688
0.6774	0.469015	0.475088	0.227232	0.227002
0.7419	0.837423	0.852242	0.217763	0.217565
0.8065	1.167348	1.186505	0.214630	0.214473
0.8710	1.274651	1.299927	0.216179	0.216072
0.9355	1.179412	1.205645	0.221207	0.221153
1	1.128379	1.128379	0.229091	0.229091

знаходження усереднених потоків можна використовувати простішу математичну модель з відомою товщиною включень, попередньо усереднивши цей параметр із заданою функцією розподілу.

4.3 Пакет програм для дослідження дифузійних потоків у двофазних тілах випадково неоднорідної структури

Для розрахунку усереднених потоків домішкової речовини у випадково неоднорідних шаруватих структурах розроблено програмний комплекс (пакет

програм) “FlowRan”, детальний опис якого наведено в Додатку А. Оболонка пакету програм “FlowRan” створена в середовищі Delphi XE2 Starter Edition, виконуючі модулі розроблені за допомогою GFortran. Пакет “FlowRan” функціонує на довільній стандартній конфігурації персонального комп’ютера з операційною системою Windows-98/2000/XP/.... [4, 99]. Використані програмні засоби є безкоштовними для академічного використання.

Пакет програм “FlowRan” розроблений на основі розрахункових формул для дифузійних потоків в одновимірному шарі за нульової (2.30) та ненульової сталої (2.39) початкових концентрацій; усереднених потоків у двофазних випадково неоднорідних три- (2.52), (2.53) та багат шарових тілах (2.74), (2.75) за рівномірного розподілу фаз; у двофазній смузі з ймовірним розташуванням включень біля нижньої границі тіла (3.7), (3.8), біля верхньої межі тіла, де діє джерело маси (3.13), (3.14), та для смуги з ймовірним розташуванням включень посередині тіла (3.19), (3.20); усереднених за ансамблем конфігурацій фаз і випадковою товщиною потоків маси у три- (4.8), (4.9), (4.11), (4.12) та багат шаровій (4.19), (4.20), (4.23), (4.24) смузі з прошарками стохастичної товщини; усереднених потоків за врахування парного взаємовпливу шаруватих включень за нульової (3.25) та сталої ненульової (3.28) початкових концентрацій. До пакету входять такі програмні модулі для обчислення потоків 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.

Кожний модуль програмного комплексу може бути використаний самостійно або як частина іншої системи. Пакет було використано для розрахунку потоків водню та вуглецю у шаруватих композитних матеріалах $Fe - Cu$ (рис. 2.18, 2.19, 3.21) та $\alpha Fe - Ni$ (рис. 2.20-2.23, 3.7, 3.14).

4.4 Залежність усередненого потоку маси у багат шаровому тілі від похибки вхідних даних

Важливою характеристикою результатів моделювання є похибка одержуваних результатів. У загальному випадку похибки, що виникають при розв'язу-

ванні задачі, можна поділити на такі типи [6]: похибка математичної моделі; неусувна похибка (зокрема, похибка вхідних даних); похибка методу; обчислювальна похибка.

При розв'язуванні прикладних задач, як правило, найбільший вклад у неточність кінцевого результату привносить похибка вхідних даних, пов'язана з обмеженою точністю вхідної інформації [79]. Крім того, ця похибка є визначальною при дослідженні стійкості розв'язку. Нестійкість розв'язку означає, що малі похибки значень вихідних параметрів можуть призводити до великих похибок одержуваних результатів [6].

У цьому пункті визначимо вплив похибок на значення функції потоку на основі розв'язку крайової задачі дифузії для функції потоку у двофазному випадково неоднорідному багат шаровому тілі, усередненого за ансамблем конфігурацій фаз з рівномірною функцією розподілу (2.75).

Запишемо співвідношення (2.75) для усередненого потоку маси у безрозмірних змінних (2.43)

$$\frac{\langle J(\zeta, \tau) \rangle_{conf}}{J_*} = \frac{J_0(\zeta, \tau)}{J_*} + 2\nu_1(d-1) \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\bar{\xi}_n \bar{A}_{kn}}{\bar{y}_k^2 - \bar{\xi}_n^2} \left(1 + (-1)^n \frac{c_*}{J_*} \bar{\xi}_n \right) \times \\ \times \left(e^{-\bar{\xi}_n^2 \tau} - e^{-\bar{y}_k^2 \tau} \right) \sin(\bar{y}_k \zeta), \quad (4.28)$$

де

$$J_0(\zeta, \tau) = J_* - 2 \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\bar{\xi}_n^2 \tau} \left(\frac{J_*}{\bar{\xi}_n} + (-1)^n c_* \right) \sin(\bar{\xi}_n \zeta), \quad (4.29)$$

$d = D_1/D_0$, $\bar{\xi}_n = \pi(2n-1)/2$, $\bar{y}_k = k\pi$; а в коефіцієнті \bar{A}_{kn} безрозмірна товщина включень визначається як $\bar{h}_1 = h_1/z_0$.

4.4.1 Похибка вхідних даних

Вхідні параметри для задачі (значення початкової концентрації домішки у тілі, об'ємної частки включень, коефіцієнтів дифузії тощо), можуть задаватись із деякою похибкою (збуренням).

Приймаємо, що вхідні параметри у формулах (4.28) і (4.29) задаються із деякою похибкою (збуренням)

$$\tilde{C}_* = C_* \pm \Delta C_*, \quad \tilde{v}_1 = v_1 \pm \Delta v_1, \quad \tilde{d} = d \pm \Delta d, \quad \tilde{h}_1 = \bar{h}_1 \pm \Delta h_1,$$

де ΔC_* ($C_* = c_*/J_*$), Δv_1 , Δd , Δh_1 – похибки відповідних вхідних параметрів. Зазначимо, що для коефіцієнтів дифузії у включеннях і матриці може бути відома похибка їх відношення Δd або похибки кожного з коефіцієнтів ΔD_1 і ΔD_0 .

Зазнавати збурення може як кожен з параметрів зокрема, так і дві, три або чотири характеристики одночасно.

За означенням збурений усереднений потік $\langle \tilde{J}(\zeta, \tau) \rangle$ визначатимемо як

$$\langle \tilde{J}(\zeta, \tau) \rangle = \langle J(\zeta, \tau) \rangle / J_* + \Delta \langle J \rangle,$$

а збурений потік в однорідному середовищі $\tilde{J}_0(\zeta, \tau)$ шукатимемо як

$$\tilde{J}_0(\zeta, \tau) = J_0(\zeta, \tau) / J_* + \Delta J_0.$$

Тут $\Delta \langle J \rangle$ і ΔJ_0 – збурення відповідно усередненого потоку та потоку в однорідному середовищі.

Розглянемо спочатку випадок, коли з похибкою задається тільки один вхідний параметр задачі.

Якщо початкова концентрація домішки в тілі C_* виміряна з похибкою ΔC_* , то із співвідношень (4.28) та (4.29) отримаємо вираз для збурення усередненого потоку

$$\Delta \langle J \rangle = \mp 2 \Delta C_* [\Sigma_1(\zeta, \tau) - v_1(d-1)\Sigma_2(\zeta, \tau; \bar{h}_1)], \quad (4.30)$$

а збурення потоку в однорідному середовищі набуде вигляду

$$\Delta J_0 = \mp 2 \Delta C_* \Sigma_1(\zeta, \tau), \quad (4.31)$$

де $\Sigma_1(\zeta, \tau) = \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n e^{-\xi_n^2 \tau} \sin(\xi_n \zeta)$; $\Sigma_2(\zeta, \tau; \bar{h}_1) = \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \xi_n S_{n,k}(\zeta, \tau; \bar{h}_1)$;

$$S_{n,k}(\zeta, \tau; \bar{h}_1) = \frac{\xi_n \bar{A}_{kn}(\bar{h}_1)}{y_k^2 - \xi_n^2} \left(e^{-\xi_n^2 \tau} - e^{-y_k^2 \tau} \right) \sin(y_k \zeta).$$

У випадку, коли збурення зазнає параметр d , маємо

$$\Delta \langle J \rangle = \pm 2 \Delta d v_1 [C_* \Sigma_2(\zeta, \tau; \bar{h}_1) + \Sigma_3(\zeta, \tau; \bar{h}_1)] \quad (4.32)$$

а для збурення коефіцієнта v_1 одержимо

$$\Delta \langle J \rangle = \pm 2 \Delta v_1 (d-1) [C_* \Sigma_2(\zeta, \tau; \bar{h}_1) + \Sigma_3(\zeta, \tau; \bar{h}_1)]. \quad (4.33)$$

Тут $\Sigma_3(\zeta, \tau; \bar{h}_1) = \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} S_{n,k}(\zeta, \tau; \bar{h}_1)$.

Відповідно для вимірювання товщини включень з похибкою Δh_1 маємо

$$\Delta\langle J \rangle = \pm 2\nu_1(d-1) \left[C_* \Sigma_2(\zeta, \tau; \bar{h}_1 \pm \Delta h_1) + \Sigma_3(\zeta, \tau; \bar{h}_1 \pm \Delta h_1) \right]. \quad (4.34)$$

Зазначимо, що на збурення потоку в однорідному тілі впливає лише збурення початкової концентрації, віднесеної до значення сталого потоку на верхній границі шару. Відповідно до (4.30)-(4.33), збурення потоків $\Delta\langle J \rangle$ і ΔJ_0 є прямо пропорційними до відхилень ΔC_* , об'ємної частки включень $\Delta \nu_1$ та приведенного коефіцієнта дифузії Δd . У той же час за формулою (4.34) збурення характерної товщини Δh_1 нелінійно впливає на поведінку функції $\Delta\langle J \rangle$.

Зауважимо, що з означення відповідних параметрів отримуємо такі обмеження $|\Delta C_*|, |\Delta \nu_1|, |\Delta h_1| < 1$. Для того, щоб справджувалась умова $|\Delta d| < 1$, необхідно і достатньо виконання обмеження

$$\left| \frac{D_1 + \Delta D_1}{D_0 + \Delta D_0} - \frac{D_1}{D_0} \right| < 1.$$

Розглянемо випадки, коли два вхідних параметри змінюються одночасно. Враховуючи наведені обмеження на збурення вхідних параметрів, одержимо наступні вирази для збуреного потоку

при заданні із похибкою параметрів C_* та ν_1

$$\Delta\langle J \rangle = \mp 2\Delta C_* \left[\Sigma_1(\zeta, \tau) - \nu_1(d-1)\Sigma_2(\zeta, \tau; \bar{h}_1) \right] \pm 2\Delta \nu_1(d-1) \times \\ \times \left[C_* \Sigma_2(\zeta, \tau; \bar{h}_1) + \Sigma_3(\zeta, \tau; \bar{h}_1) \right];$$

при заданні із похибкою параметрів C_* та d

$$\Delta\langle J \rangle = \mp 2\Delta C_* \left[\Sigma_1(\zeta, \tau) - \nu_1(d-1)\Sigma_2(\zeta, \tau; \bar{h}_1) \right] \pm 2\Delta d \nu_1 \left[C_* \Sigma_2(\zeta, \tau; \bar{h}_1) + \right. \\ \left. + \Sigma_3(\zeta, \tau; \bar{h}_1) \right];$$

при заданні із похибкою параметрів C_* та \bar{h}_1

$$\Delta\langle J \rangle = \mp 2\Delta C_* \left[\Sigma_1(\zeta, \tau) - \nu_1(d-1)\Sigma_2(\zeta, \tau; \bar{h}_1) \right] \pm 2\nu_1(d-1) \left[C_* \Sigma_2(\zeta, \tau; \bar{h}_1 \pm \Delta h_1) + \right. \\ \left. + \Sigma_3(\zeta, \tau; \bar{h}_1 \pm \Delta h_1) \right],$$

і т.п. Тут знехтувано доданками з множниками вигляду $\Delta \nu_1 \Delta C_*$.

Зазначимо, що за умови малості добутку збурень вхідних параметрів результуюче збурення усередненого потоку є сумою збурень потоку, викликаних збуренням відповідного параметра (4.30)-(4.34). За вищенаведених обмежень на збурення вхідних параметрів умови малості добутків типу $\Delta v_1 \Delta C_* \Delta d$ і $\Delta v_1 \times \Delta C_* \Delta d \Delta \bar{h}_1$ виконуються завжди, а отже результуюче збурення усередненого потоку, якщо з похибкою задаються три або чотири параметри, отримуємо у вигляді суми збурень потоку за одним параметром.

4.4.2 Числовий експеримент для визначення впливу похибки вхідних даних на збурення дифузійних потоків

Для встановлення кількісного та якісного впливу похибок вхідних параметрів на усереднений потік проведемо числовий експеримент, де в якості базових параметрів прийнято такі значення: $\tau=0.1$; $C_*=0.1$; $v_1=0.2$; $\bar{h}_1=0.01$; $d_1=0.01$ або $d_1=2$, точність обчислення рядів $\varepsilon = 10^{-9}$.

У табл. 4.3 наведено розрахункові дані для збуреного усередненого потоку $\langle \tilde{J}(\zeta, \tau) \rangle$ похибкою вимірювання початкової концентрації C_* , віднесеної до сталого значення потоку J_* , який підтримується на границі шару $\zeta = 0$. Обчислення проведені за формулами (4.30) та (4.31) для відхилень $\Delta C_* = \pm 0.001$; ± 0.002 ; ± 0.003 на різних безрозмірних глибинах ζ . Тут сірим кольором замарковано значення потоків, для яких абсолютні значення збурення усередненого потоку є максимальними.

Розрахункові дані для функції $\langle \tilde{J}(\zeta, \tau) \rangle$, збуреної відхиленням d (4.31), на різних безрозмірних глибинах ζ подані в табл. 4.4 залежно від значень $\Delta d = \pm 0.001$; ± 0.002 ; ± 0.003 . Тут також сірим кольором замарковано значення потоків, що відповідають максимальним значенням $|\Delta \langle J \rangle|$.

Числові дані максимального відхилення значень потоку, збуреного похибкою вимірювання товщини включень, від величини усередненого дифузійного потоку для різної кількості включень наведено у табл. 4.5, при цьому усереднений потік обчислений для базових параметрів за $\bar{h}_1=0.005$.

Таблиця 4.3. Розрахункові дані для збуреного усередненого потоку похибкою ΔC_*

ζ	$\frac{J_0(\zeta, \tau)}{J_*}$	$\frac{\langle J(\zeta, \tau) \rangle}{J_*}$	$\langle \tilde{J}(\zeta, \tau) \rangle$					
			$\Delta C_* = 0.001$	$\Delta C_* = 0.002$	$\Delta C_* = 0.003$	$\Delta C_* = -0.001$	$\Delta C_* = -0.002$	$\Delta C_* = -0.003$
0	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000
0.0323	0.894818	0.940157	0.940160	0.940163	0.940167	0.940153	0.940150	0.940147
0.0968	0.792382	0.822281	0.822292	0.822302	0.822312	0.822271	0.822261	0.822250
0.1613	0.695255	0.709716	0.709734	0.709752	0.709770	0.709698	0.709680	0.709662
0.2258	0.605649	0.605582	0.605609	0.605636	0.605663	0.605555	0.605528	0.605501
0.2903	0.525291	0.512406	0.512444	0.512481	0.512519	0.512369	0.512331	0.512294
0.3548	0.455334	0.431972	0.432022	0.432071	0.432121	0.431922	0.431872	0.431822
0.4194	0.396312	0.365233	0.365297	0.365361	0.365425	0.365169	0.365105	0.365041
0.4839	0.348158	0.312308	0.312388	0.312467	0.312547	0.312228	0.312149	0.312069
0.5484	0.310267	0.272552	0.272649	0.272745	0.272842	0.272456	0.272359	0.272263
0.6129	0.281603	0.244688	0.244802	0.244915	0.245029	0.244574	0.244461	0.244347
0.6774	0.260844	0.227002	0.227132	0.227263	0.227393	0.226871	0.226741	0.226610
0.7419	0.246541	0.217565	0.217711	0.217858	0.218004	0.217419	0.217273	0.217127
0.8065	0.237287	0.214473	0.214633	0.214792	0.214952	0.214314	0.214154	0.213995
0.8710	0.231865	0.216072	0.216241	0.216411	0.216581	0.215902	0.215732	0.215562
0.9355	0.229389	0.221153	0.221329	0.221505	0.221681	0.220976	0.220800	0.220624
1	0.229091	0.229091	0.229269	0.229448	0.229626	0.228912	0.228734	0.228556

Зауважимо, що при збуренні вхідних даних значення збуреного потоку різняться від усередненого не більше ніж у 4 значимій цифрі, зокрема, для $\tau = 0.1$ відхилення $\langle \tilde{J}(\zeta, \tau) \rangle$ від значень функції $\langle J(\zeta, \tau) \rangle / J_*$ спостерігається у 4-6 значимих цифрах (табл. 4.3 і 4.4). У випадку відхилень параметра C_* , як для однорідного, так і неоднорідного тіла, максимальні збурення усередненого потоку спостерігаються біля нижньої межі шару $\zeta = 1$ (табл. 4.3). Причому значення $|\Delta \langle J \rangle|$ для неоднорідної смуги і $|\Delta J_0|$ для смуги без прошарків є практично однаковими, а саме відмінність наявна у 7 знаці після коми (табл. 4.3).

Таблиця 4.4. Розрахункові дані для збуреного усередненого потоку похибкою Δd

ζ	$\frac{\langle J(\zeta, \tau) \rangle}{J_*}$	$\langle \tilde{J}(\zeta, \tau) \rangle$					
		$\Delta d = 0.001$	$\Delta d = 0.002$	$\Delta d = 0.003$	$\Delta d = -0.001$	$\Delta d = -0.002$	$\Delta d = -0.003$
0	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000
0.0323	0.880767	0.880768	0.880769	0.880771	0.880765	0.880764	0.880762
0.0968	0.765128	0.765130	0.765133	0.765136	0.765125	0.765122	0.765119
0.1613	0.656421	0.656425	0.656429	0.656433	0.656417	0.656414	0.656410
0.2258	0.557494	0.557499	0.557504	0.557509	0.557489	0.557485	0.557480
0.2903	0.470517	0.470522	0.470528	0.470533	0.470511	0.470506	0.470500
0.3548	0.396864	0.396870	0.396875	0.396881	0.396858	0.396852	0.396846
0.4194	0.337067	0.337073	0.337079	0.337085	0.337061	0.337055	0.337049
0.4839	0.290851	0.290857	0.290863	0.290869	0.290845	0.290840	0.290834
0.5484	0.257233	0.257238	0.257243	0.257249	0.257227	0.257222	0.257217
0.6129	0.234691	0.234696	0.234700	0.234705	0.234686	0.234681	0.234677
0.6774	0.221375	0.221379	0.221383	0.221387	0.221371	0.221367	0.221363
0.7419	0.215338	0.215341	0.215344	0.215347	0.215335	0.215332	0.215329
0.8065	0.214774	0.214776	0.214779	0.214781	0.214772	0.214770	0.214767
0.8710	0.218231	0.218233	0.218234	0.218236	0.218230	0.218229	0.218227
0.9355	0.221153	0.221154	0.221154	0.221155	0.221152	0.221151	0.221150
1	0.229091	0.229091	0.229091	0.229091	0.229091	0.229091	0.229091

Якщо з похибкою задається одна з характеристик смуги: об'ємна частка включень, характерна товщина прошарків або приведений коефіцієнт дифузії, то максимальні відхилення збуреного усередненого потоку досягаються біля середини тіла. Так у випадку збурення параметра d , функція $\Delta \langle J \rangle$ набуває максимального значення у точці $\zeta = 0.4194$ (табл. 4.4).

Зазначимо, що чим більша кількість прошарків за їх сталої товщини, тобто зростає значення об'ємної частки включень, тим більше значень набуває збурений усереднений дифузійний потік (табл. 4.5).

Проведені обчислення для вказаних базових параметрів задачі показали,

Таблиця 4.5. Залежність максимального значення функції збурення потоку $\Delta\langle J \rangle$ від кількості включень

$\bar{h}_1=0.0051$	n_1	2	5	10	20	40	60
	$v_1 = n_1 \bar{h}_1$	0.0102	0.0255	0.0501	0.102	0.204	0.306
$\max \Delta\langle J \rangle$		0.00006	0.00015	0.00029	0.00059	0.00118	0.00177

що у випадку збурень третьої значимої цифри характеристик C_* або \bar{h}_1 на одиницю, змінюється 3-я значима цифра усередненого потоку. Зміна у третьому знаці після коми параметра v_1 відповідає зміні 4-ої значимої цифри усередненого потоку. Зміна у цьому ж знаці параметра d викликає збурення 5-ої значимої цифри усередненого потоку. При цьому, якщо зменшувати на порядок розряд, в якому відбувається збурення цих параметрів, то на порядок зменшується і розряд, у якому збурюється усереднений дифузійний потік. Також зазначимо, зі збільшенням часу протікання процесу τ при збуренні всіх параметрів задачі збільшується кількість точних значимих цифр, тобто зменшується вплив похибки вхідних даних на усереднений потік маси.

4.4.3 Комп'ютерне моделювання збурення потоків маси

Проаналізуємо залежність розв'язку крайової задачі (4.28) від похибки вимірювань вхідних даних. На рис. 4.9-4.11 наведені характерні розподіли збурень усередненого потоку при варіюванні похибок вхідних параметрів крайової задачі. Рис. 4.9 ілюструє збурення дифузійних потоків залежно від точності вимірювання початкової концентрації домішки в тілі. На рис. 4.9,а показані розподіли функції $\Delta\langle J \rangle$ для різних значень похибки ΔC_* у такі моменти безрозмірного часу: $\tau=0.03$ (криві а, суцільні лінії), $\tau=0.1$ (криві b, штрихові лінії), $\tau=0.5$ (криві с, штрих-пунктирні лінії). На рис. 4.9,б проілюстровано порівняльні розподіли збурень дифузійних потоків у шаруватій смuzі $\Delta\langle J \rangle$ (штрихові лінії) і в однорідному шарі ΔJ_0 (суцільні лінії) залежно від значень ΔC_* для $\tau=0.03$

(криві а) і $\tau=0.1$ (криві b). Тут криві 1^\pm побудовані для $C_* \pm \Delta C_* = 0.1 \pm 0.01$; криві 2^\pm – для $C_* \pm \Delta C_* = 0.1 \pm 0.02$; криві 3^\pm – для $C_* \pm \Delta C_* = 0.1 \pm 0.03$.

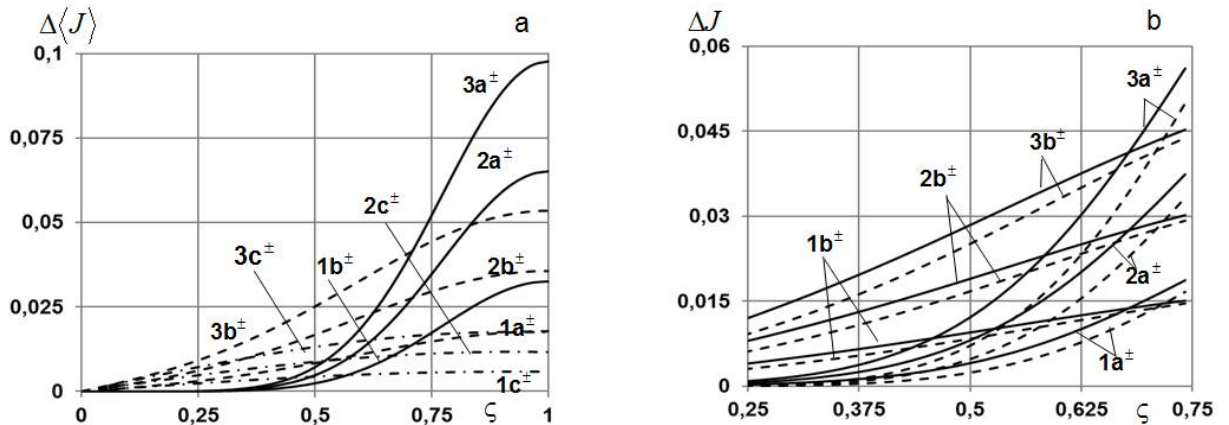


Рис. 4.9. Розподіли збурень усередненого потоку (а) та порівняльні розподіли потоків в однорідному та неоднорідному тілі (b) за похибки параметра C_*

На рис. 4.10 показано вплив точності вхідних значень приведенного коефіцієнта дифузії d (рис. 4.10,а) та характерної товщини включень \bar{h}_1 (рис. 4.10,б) на поведінку функції збурення потоку $\Delta\langle J \rangle$ для моментів часу $\tau=0.01$; 0.1; 0.5 (криві а-с, рис. 4.10,а) та $\tau=0.03$; 0.1; 0.5 (криві а-с, рис. 4.10,б). Тут криві 1^\pm - 3^\pm відповідають значенням похибки $\Delta = \pm 0.001$; ± 0.002 ; ± 0.003 .

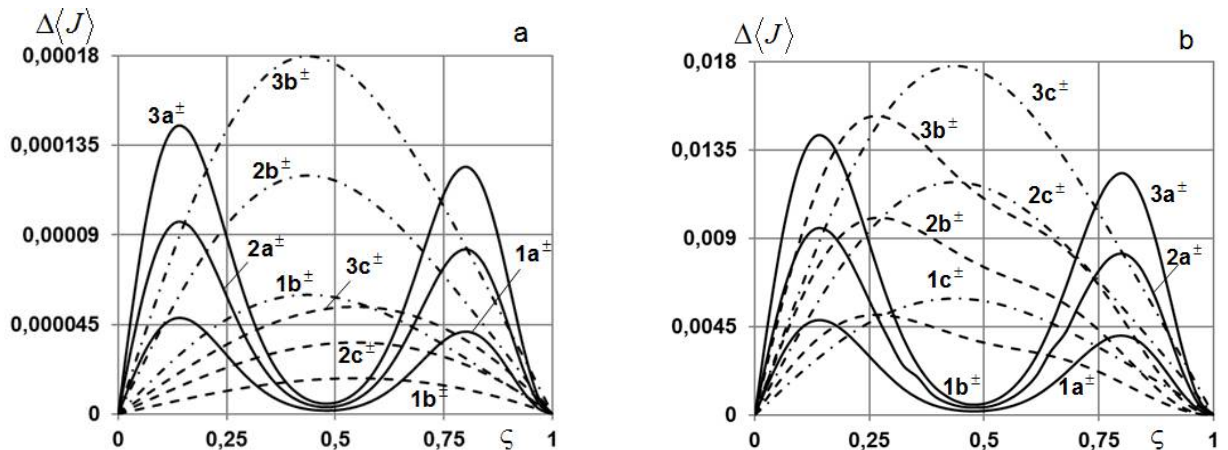


Рис. 4.10. Розподіли збурень усередненого потоку для похибки параметра d (а) та для похибки параметра h_1 (б)

На рис. 4.11 наведені розподіли збурення усередненого потоку залежно від похибки параметра v_1 для $\tau=0.01$ (рис. 4.11,а) і $\tau=0.03$ (рис. 4.11,б). Тут криві 1^\pm - 3^\pm відповідають відхиленням виміру об'ємної частки включень $\Delta v_1 = \pm 0.01$; ± 0.02 ; ± 0.03 . Зазначимо, що при збуренні параметрів v_1 і h_1 про-

водився перерахунок іншого коефіцієнта за формулами $v_1 \pm \Delta v_1 = n_1 h_1^{nep} / z_0$ або $h_1 \pm \Delta h_1 = v_1^{nep} z_0 / n_1$, оскільки повинна виконуватись умова: $n_1 \in \mathbf{N}$.

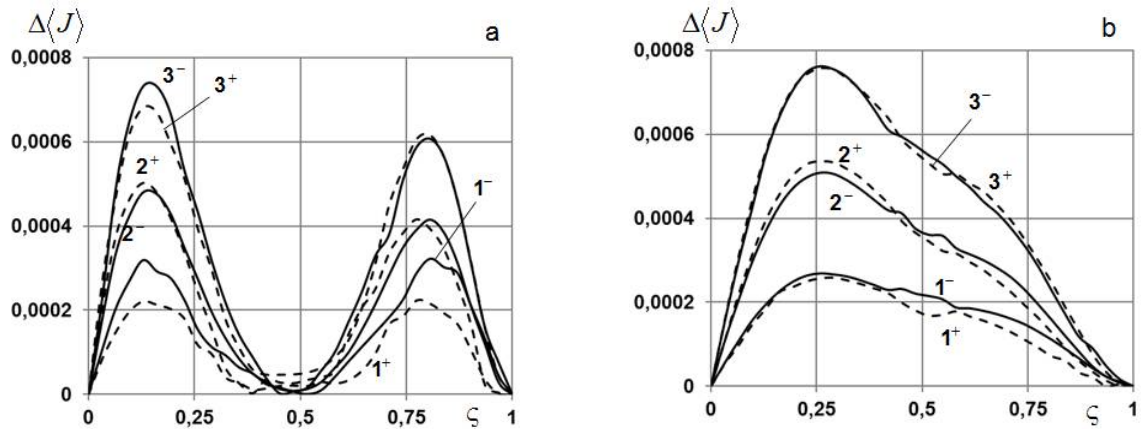


Рис. 4.11. Розподіли збурень усередненого потоку залежно від похибки параметра v_1 для $\tau = 0.01$ (a) і $\tau = 0.03$ (b)

У випадку, коли з похибкою задається значення концентрації домішкової речовини у початковий момент часу C_* , збурення усередненого потоку та потоку в однорідному тілі є монотонно зростаючими функціями (рис. 4.9) і досягають своїх максимальних значень біля нижньої межі прошарку $\zeta = 1$ (рис. 4.9,а, табл. 4.3). Крім того, збільшення вдвічі величини ΔC_* викликає збільшення збурення $\Delta\langle J \rangle$ до 50% (криві 1^\pm і 2^\pm , рис. 4.9,а). Чим менший час протікання процесу дифузії, тим більших збурень зазнає усереднений потік при зміні однієї і тієї ж значимої цифри C_* (криві а, рис. 4.9,а). Причому максимальні значення $\Delta\langle J \rangle$ для неоднорідної смуги і ΔJ_0 для смуги без прошарків є практично однаковими. Зазначимо, що найбільша різниця між збуренням потоків в однорідному та неоднорідному тілі досягається в середині смуги, зокрема, на відрізку $\zeta \in [0.25; 0.75]$ відхилення між $\Delta\langle J \rangle$ і ΔJ_0 можуть становити до 30% (рис. 4.9,б).

Похибки у вхідних даних для коефіцієнта дифузії d , об'ємної частки включень v_1 та товщини прошарків h_1 однаково впливають на поведінку збурення усередненого дифузійного потоку. Проте при зміні однієї і тієї ж значимої цифри у зазначених параметрах збурення потоку похибкою у значенні d є на порядок меншим, ніж похибкою в об'ємній частці включень, і на два поряд-

ки меншими, ніж при збуренні h_1 . У випадку збурення одного із параметрів d , v_1 або h_1 для малих часів τ спостерігається утворення двох максимумів функції $\Delta\langle J \rangle$ біля поверхонь смуги (рис. 4.11,а; криві а, рис. 4.10). Причому максимум цієї функції біля нижньої границі завжди є меншим, і його величина сягає 86% глобального максимуму біля верхньої поверхні шару (рис. 4.10). Із збільшенням часу протікання процесу максимум біля границі $\zeta = 1$ зменшується (рис. 4.11,б; криві б, рис. 4.10,б), значення функції $\Delta\langle J \rangle$ в середині тіла суттєво зростають, натомість максимум біля верхньої границі прошарку зсувається до середини смуги (криві б, рис. 4.10,а; криві с, рис. 4.10,б), у подальшому зі зростанням часу протікання процесу дифузії його значення поступово зменшуються (криві с, рис. 4.10,а). Зауважимо, що для випадку, коли коефіцієнт дифузії у включеннях більший, ніж в матриці, збурення вхідних параметрів впливають так само на збурення усередненого потоку, як і для випадку менших значень коефіцієнта дифузії мігруючих частинок у включеннях.

Зазначимо, що у формулах (4.30)-(4.34) для визначення функцій $\Delta\langle J \rangle$ і ΔJ_0 на величину збурення потоків практично не впливає знак відхилення початкової концентрації, приведенного коефіцієнта дифузії та товщини прошарків від їхніх істинних значень (рис. 4.9-4.10, табл. 4.3-4.4). Лише для зміни об'ємної частки включень для малих часів спостерігається різниця у значеннях функції $\Delta\langle J \rangle$ для $\tilde{v}_1 = v_1 + \Delta v_1$ і $\tilde{v}_1 = v_1 - \Delta v_1$, наприклад, ця різниця складає до 35% для $\tau=0.01$ і до 22% для $\tau=0.03$ (рис. 4.11).

4.4.4 Похибка методу обчислень усередненого потоку

На практиці суму нескінченного ряду шукають шляхом підсумовування перших n членів ряду у випадку досягнення напередвизначеної умови, наприклад, різниця між n та $n+1$ елементами стає меншою за задане число ε (похибка методу). Проте окрім похибки методу на загальну похибку обчислень впливає і похибка накопичення (похибка заокруглення), із кінцевою розрядністю

процесора при роботі з дійсними числами [1, 91]. При підсумовуванні ряду у процесі зростання кількості просумованих членів n , з одного боку, зменшується похибка методу, і водночас зростає похибка заокруглення. Тому при виконанні обчислень потрібно враховувати обидва фактори.

Дослідимо вплив похибки методу на величину збурення усередненого дифузійного потоку. Для цього збудуємо один з вхідних параметрів крайової задачі (2.6)-(2.8) зі зміною точності підсумовування тригонометричних рядів, у вигляді яких отримані розв'язки задач дифузії у випадково неоднорідній шаруватій смузі.

На рис. 4.12 наведено розподіли збурення усередненого потоку маси $\Delta\langle J \rangle$ за відхилень у вимірах початкової концентрації домішкових частинок у тілі (рис. 4.12,a) і приведенного коефіцієнта дифузії (рис. 4.12,b) для різних точностей обчислення суми рядів у формулах (4.30) і (4.32) для тих самих базових значень коефіцієнтів задачі. Криві а-с побудовані для $\varepsilon = 10^{-7}, 10^{-9}, 10^{-11}$ відповідно; криві $1^+ - 3^+$ – для значень похибки $\Delta C_*, \Delta d = 0.001; 0.002; 0.003$; криві $1^- - 3^-$ – для $\Delta C_*, \Delta d = -0.001; -0.002; -0.003$.

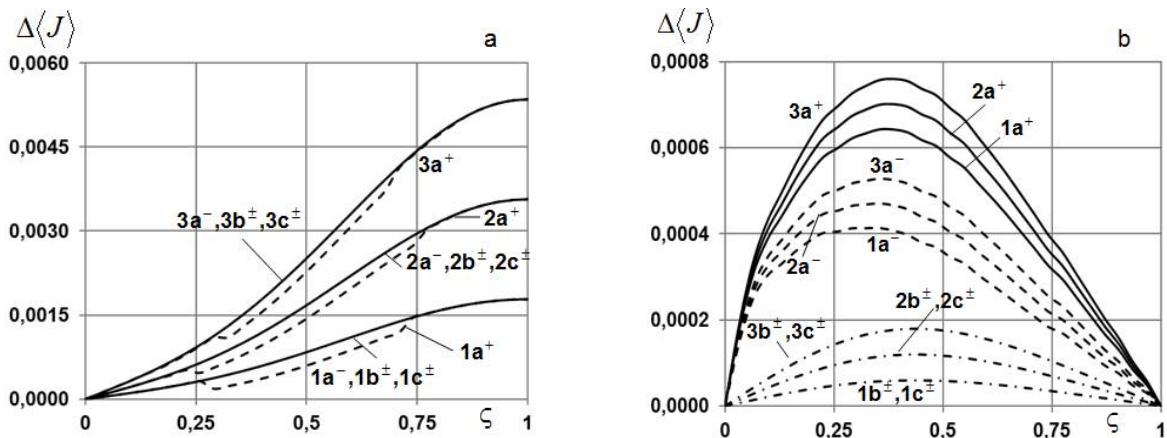


Рис. 4.12. Розподіли збурень усередненого потоку залежно для похибки параметра C_* (a) та d (b) залежно від точності підсумовування рядів

У випадку, коли показники вимірювання початкової концентрації є більшими за її фактичне значення, зменшення точності підсумовування рядів у розрахункових формулах призводить до зменшення збурень потоку на відріжку $\zeta \in [0.25; 0.75]$ до 10% (криві $1a^+ - 3a^+$, рис. 4.12,a). Зростання точності ε від

10^{-9} , а також у випадку менших значень збуреного параметра C_* , ніж його дійсна величина для точності 10^{-7} , практично не впливає на поведінку і значення збурення потоку (криві $1a^- - 3a^-$, $1b^\pm - 3b^\pm$, $1c^\pm - 3c^\pm$, рис. 4.12,а), а саме різниця між $\langle J(\zeta, \tau) \rangle / J_*$ і $\langle \tilde{J}(\zeta, \tau) \rangle / J_*$ спостерігається у 5-7-му знаках після коми.

Зменшення точності підсумовування рядів ε у випадку збурення параметра d призводить до значної різниці між розподілами, побудованими для значень $d + \Delta d$ і $d - \Delta d$ (криві $1a^+ - 3a^+$, $1a^- - 3a^-$, рис. 4.12,б). У цьому випадку функція $\Delta \langle J \rangle$ від границі $\zeta = 0$ різко зростає, причому майже однаково для всіх значень d , і набуває максимального значення в околі середини смуги (криві а, рис. 4.12,б). Якщо точність підсумовування тригонометричних рядів у розрахункових формулах збільшувати від 10^{-9} , то поведінка збурення усередненого потоку не змінюється (криві $1b^\pm - 3b^\pm$, $1c^\pm - 3c^\pm$, рис. 4.12,б), а відповідні значення $\Delta \langle J \rangle$ різняться не більше ніж у 5-й значимій цифрі. Зазначимо, що зміна точності обчислень за наявності похибок у вимірюваннях значень параметрів h_1 та v_1 практично однаково впливає на поведінку збурення усередненого потоку, що і похибка у значенні вимірювань d , проте значення $\Delta \langle J \rangle$ у випадку збурення характерної товщини прошарку та об'ємної частки включень на порядок більші, ніж для збурення приведенного коефіцієнта дифузії.

Проведені розрахунки функції $\Delta \langle J \rangle$ і ΔJ_0 для точності обчислення рядів $\varepsilon = 10^{-13}$ і $\varepsilon = 10^{-15}$ показали, що зменшення параметра ε практично не впливає на досліджувані функції: при збільшенні точності на 2 порядки відбуваються зміни максимально у 8 значимій цифрі величини $\Delta \langle J \rangle$. Зауважимо, що при зростанні ε до 10^{-15} накопичення похибки заокруглення не спостерігалось.

4.5 Висновки до Розділу 4

Таким чином, досліджено функції потоку маси у двофазних шаруватих смугах зі стохастично розташованим прошарками випадкової товщини [47,

158]. Процедури усереднення проведено за ансамблем конфігурацій фаз та за випадковою товщиною включення. Розглянуто випадки, коли товщина прошарку є випадковою величиною з рівномірним [42] або трикутним розподілами [141] на деякому проміжку. Одержано розрахункові формули для усередненого дифузійного потоку за нульової та ненульової сталої початкових концентрацій частинок. Встановлено залежність усередненого дифузійного потоку від геометричних параметрів [40, 137]. Показано, що врахування стохастичності товщини прошарку впливає (причому для багатьох значень параметрів – суттєво) на значення i /або поведінку усередненого потоку маси. Зокрема, у випадку більших значень коефіцієнта дифузії домішки у прошарку ніж у матриці зміщення інтервалу ймовірних значень товщини прошарку до 1 призводить до збільшення усередненого дифузійного потоку. Встановлено, що у випадку багатосферного 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. Встановлено, що одночасно для малих значень часів, великих значень об'ємної частки включень і коефіцієнтів дифузії мігруючих частинок у матриці менших, ніж у включеннях, є суттєвим етап проведення усереднення за випадковою товщиною включень.

Проаналізовано вплив різних типів похибок на розв'язки крайових задач дифузії домішкової речовини в однорідній та випадково неоднорідній шаруватій смугах, сформульованих для функції потоку [135]. Встановлено, що потік в однорідній смугі збурює тільки похибка вимірювання початкової концентрації мігруючої речовини, причому поведінка і значення функції збурення потоку в однорідному тілі практично не відрізняються від функції збурення усередненого потоку в неоднорідній смугі. За наявності відхилень вимірів початкової концентрації від її істинного значення максимальні значення збуреного

потоків досягаються в околі нижньої границі тіла. А збурення величини приведенного коефіцієнта дифузії, об'ємної частки включень або товщини прошарків призводить до опуклих вгору розподілів збурення потоків з максимальними значеннями біля середини смуги. Чим більший час протікання процесу дифузії, тим до менших збурень потоку призводить збурення вхідних параметрів задачі. Проведені числові експерименти виявили найбільшу чутливість усередненого потоку від збурень значень початкової концентрації і характерної товщини включень, у той же час відхилення приведенного коефіцієнта дифузії найменше впливають на функцію потоку маси [126]. Показано, що підсумовування рядів в одержаних розрахункових формулах для потоків маси як в однорідній так і у випадково неоднорідній структурах з точністю 10^{-9} є достатньою, при цьому не відбувається накопичення похибки заокруглення.

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 ймовірного 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 I-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 смугі 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, ко-

ли 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 смузії 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 ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Абдульманов Р. Р. Измерение физических величин: методическое пособие для студентов всех специальностей и форм обучения / Р. Р. Абдульманов, Л. И. Каганов. – Самара: СамГАПС, 2005. – 26 с.
2. Арзамасов Б. Научные основы материаловедения: Учебник для вузов / Б. Арзамасов, А. Крашенинников, Ж. Пастухова, А. Рахштад. – М.: Изд-во МГТУ им. Н. Э. Баумана, 1994. – 366 с.
3. Артемчук В. Обґрунтування використання та механічні властивості шаруватих металевих композицій / В. Артемчук, Ю. Михайленко, Н. Мухіна, О. Саблін, Р. Ганич // Вісник Дніпропетровського нац. ун-ту залізничного транспорту ім. акад. В. Лазаряна. – 2012. – Вип. 42. – С. 60-69.
4. Бартенъев О. В. Современный Фортран / О. В. Бартенъев. – М.: ДИАЛОГ-МИФИ, 2000. – 449 с.
5. Бахвалов Н. С. Осреднение процессов в периодических средах. Математические задачи механики композиционных материалов / Н. С. Бахвалов, Г. П. Панасенко. – М.: Наука, 1984. – 352 с.
6. Бахрушин В. Є. Математичні основи моделювання систем: Навчальний посібник для студентів / В. Є. Бахрушин. – Запоріжжя: Класичний приватний університет, 2009. – 224 с.
7. Бекман И. Н. Феноменологическая теория диффузии в гетерогенных средах и ее применение для описания процессов мембранного разделения / И. Н. Бекман, И. П. Романовский // Успехи химии. – 1988. – Т. LVII (57), №6. – С. 944-957.
8. Беляев Н. Математические методы теплопроводности / Н. Беляев, А.Рядно. – Киев: Выща школа, 1993. – 415 с.
9. Білушак Ю. Двоточкова функція кореляції та дисперсія випадкового дифузійного поля концентрації в смузї з рівномірним розподілом шаруватих включень / Ю. Білушак, Є. Чапля, О. Чернуха // Фізико-математичне моделювання та інформаційні технології. – 2012. – Вип. 16. – С. 7-22.
10. Білушак Ю. І. Математичне моделювання взаємозв'язних теплових і дифузійних процесів з урахуванням розпаду домішки у двофазній стохастично неоднорідній багат шаровій смузї / Ю. І. Білушак, В. Є. Гончарук, А. Є. Давидок, О. Ю. Чернуха // Матеріали міжнар. наук. конф. «Сучасні проблеми математичного моделювання та обчислювальних методів». – Рівне: РВВ РДГУ, 2015. – С. 30.

11. Бомба А. Комп'ютерне моделювання процесів очищення стічної води на каркасно-засипних фільтрах / А. Бомба, І. Присяжнюк, В. Сівак // Вісник Нац. університету водн. госп. та природокористування. – 2005. – Вип. 4 (32). – С. 164-169.
12. Бомба А. Математичне моделювання просторових сингулярно-збурених процесів типу фільтрація-конвекція-дифузія / А. Бомба, Ю. Климюк. – Рівне: Ассоль, 2014. – 273 с.
13. Булавацький В. М. Некласичні математичні моделі процесів тепло- та масопереносу / В. М. Булавацький, Ю. Г. Кривонос, В. В. Скопецький. – Київ: Наук. думка, 2005. – 283 с.
14. Бурак Я. Й. Визначальні співвідношення локально-градієнтної термомеханіки / Я. Й. Бурак // Доп. АН УРСР. Сер. А. – 1987. – № 12. – С. 35-39.
15. Бурак Я. И. Деформация электропроводных тел с учетом гетеродиффузии заряженных примесных частиц / Я. И. Бурак, Б. П. Галапац, Е. Я. Чапля // Физ.-хим. мех. материалов. – 1980. – № 5. – С. 8-14.
16. Бурак Я. Континуально-термодинамічні моделі механіки твердих розчинів / Я. Бурак, Є. Чапля, О. Чернуха. – Київ: Наук. думка, 2006. – 272 с.
17. Бурак Я. Й. Моделювання та дослідження механічних та концентраційних полів у приконтатних областях двокомпонентних кусково-однорідних систем / Я. Й. Бурак, О. Р. Грицина, Т. С. Нагірний // Физ.-хим. мех. материалов. – 1994. – № 1. – С. 78-88.
18. Буртная И. А. Процессы переноса в полимерных мембранах. Часть 4 / И. А. Буртная, О. О. Гачечиладзе // Восточно-Европейский журнал передовых технологий. – 2014. – № 2 (6). – С. 4-11.
19. Ванин Г. Микромеханика композитных материалов / Г. Ванин. – Киев: Наук. думка. – 1985. – 302 с.
20. Ван Флек Л. Теоретическое и прикладное материаловедение / Л. Ван Флек. – М.: Атомиздат, 1975. – 472 с.
21. Васильев В. Композиционные материалы / В. Васильев, В. Протасов, В. Болотин, Ю. Тарнопольский. – М.: Машиностроение, 1990. – 512 с.
22. Власюк А. Чисельне розв'язування задач консолідації та фільтраційного руйнування ґрунтів в умовах тепло-масопереносу методом радіальних базисних функцій / А. Власюк, П. Мартинюк. – Рівне: НУВГП, 2010. – 277 с.
23. Гайвась Б. Про напружений стан та стійкість пористої ортотропної пластини в процесі осушення / Б. Гайвась // Фізико-математичне моделювання та інформаційні технології. – 2006. – Вип. 4. – С. 12-24.

24. Гамбин Б. Стохастическая гомогенизация уравнений стационарной термоупругости / Б. Гамбин, Л. Назаренко, Е. Телега // Доповіді НАН України. – 2002. – № 10. – С. 37-44.
25. Гаращенко Ф. Сучасні методи та інформаційні технології математичного моделювання, аналізу і оптимізації складних систем / Ф. Гаращенко, М. Кириченко та інші. – Київ: ВПЦ “Київський університет”, 2006. – 200 с.
26. Гачкевич О. Р. Деякі проблеми математичного моделювання в термомеханіці тіл різної прозорості за теплового опромінення / О. Р. Гачкевич, Р. Ф. Терлецький, М. Б. Брухаль // Мат. методи і фіз.-мех. поля. – 2008. – Т. 51, №3. – С. 202-219.
27. Гера Б. Дифузія у тришаровій смузі з урахуванням стрибка функції концентрації домішкової речовини на внутрішніх поверхнях контакту / Б. Гера, Є. Чапля, О. Чернуха // Фізико-математичне моделювання та інформаційні технології. – 2010. – Вип. 12. – С. 61-68.
28. Гиббс Д. Термодинамика. Статистическая физика / Д. Гиббс. – М.: Наука, 1982. – 584 с.
29. Гимазутдинова Р. Усовершенствование системы очистки сточных вод от нефтепродуктов и взвешенных веществ / Р. Гимазутдинова // Сборник научных трудов SWorld по материалам междунар. науч.-прак. конф. – 2013. – V. 37, № 1. – С. 49-54.
30. Гладкий П. Плазменная наплавка хромоникелевых сплавов, легированных кремнием и бором / П. Гладкий, Е. Переплетчиков, И. Фрумин // Автоматическая сварка. – 1968. – № 9. – С. 58-62.
31. Голант Ш. Применение эффективных материалов при ремонте жилых и общественных помещений / Ш. Голант. – М.: Стройиздат, 1979. – 136 с.
32. Головчан В. Анизотропия физико-механических свойств композитных материалов / В. Головчан. – Киев: Наук. думка. – 1987. – 304 с.
33. Головченко Я. Проектирование агрегатов самолета из композитов / Я. Головченко // Збірник наук. праць Полтавського нац. техн. ун-ту ім. Ю. Кондратюка. – 2014. – № 2. – С. 245-251.
34. Гончарук В. Математичне моделювання дифузійних потоків у випадково неоднорідних тілах за крайових умов першого роду / В. Гончарук, Є. Чапля, А. Давидок, О. Чернуха // Матеріали XI Міжнар. наук.-техн. конф. «Фізичні процеси та поля технічних і біологічних об'єктів». – Кременчук: В-во КрНУ ім. М. Остроградського, 2012. – С. 26-28.

35. Гуменюк Н. С. Применение композитных материалов в судостроении / Н. С. Гуменюк, С. С. Грушин // Современные наукоемкие технологии. – 2013. – № 8 (1). – С. 116-117.
36. Давидок А. Дифузійні потоки у стохастично неоднорідній смузі з прошарком випадкової товщини за рівномірного розподілу [Електрон. ресурс] / А. Давидок // Конференція молодих учених «Підстригачівські читання – 2015». – Режим доступу: <http://iapmm.lviv.ua/chyt2015/theses/Davydok.pdf>
37. Давидок А. Є. Дослідження парного взаємовпливу шарів на усереднений дифузійний потік у двофазній шаруватій смузі [Електрон. ресурс] / А. Є. Давидок // Конференція молодих учених «Підстригачівські читання – 2014». – Режим доступу: <http://194.44.153.36:8080/chyt2014/theses/Davydok.pdf>
38. Давидок А. Є. Комп'ютерне моделювання взаємозв'язних 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.
39. Давидок А. Математичне моделювання випадкових потоків маси у шаруватій смузі з ймовірним приповерхневим розташуванням включень / А. Давидок, О. Чернуха // Матеріали всеукр. наук. конф. «Сучасні проблеми математичного моделювання та обчислювальних методів». – Рівне: Нац. унів. водн. госп. та природокор., Рівненський держ. гум. ун-т, 2013. – С. 62.
40. Давидок А. Математичне моделювання потоків домішки у двофазній багатошаровій смузі з рівномірним розподілом фаз / А. Давидок, О. Чернуха // Збірник праць II наук.-техн. конф. «Обчислювальні методи і системи перетворення інформації». – Львів: ФМІ НАН України, 2012. – С. 66-69.
41. Давидок А. Моделювання випадкових дифузійних потоків у двофазній багатошаровій смузі за ненульової початкової концентрації домішки з урахуванням парного взаємовпливу шарів / А. Давидок, Є. Чапля, О. Чернуха // Матеріали III наук.-техн. конф. «Обчислювальні методи і системи перетворення інформації». – Львів: ФМІ НАН України, 2014. – С. 63-66.
42. 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.
43. Давидок А. Моделювання випадкових дифузійних потоків у двофазній смузі з ймовірним розташуванням включень в середині тіла / А. Давидок, О. Чернуха, В. Пабіривський, Є. Чапля // Матеріали XII міжнар. наук.-

- технічн. конф. «Фізичні процеси та поля технічних та біологічних об'єктів». – Кременчук: В-во КрНУ ім. М. Остроградського, 2013. – С. 135-137.
44. 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.
45. Давидок А. Моделювання випадкових потоків маси у двофазній багатошаровій смузі з урахуванням парного взаємовпливу шарів за бета-розподілу включень / А. Давидок // Матеріали XIII Міжнар. наук.-техн. конф. «Фізичні процеси та поля технічних та біологічних об'єктів». – Кременчук: В-во КрНУ ім. М. Остроградського, 2014. – С. 135-137.
46. 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.
47. 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 міжнар. наук.-техн. конф. SAIT «Системний аналіз та інформаційні технології». – Київ: ННК «ІПСА» НТУУ «КПІ», 2012. – С. 50-51.
48. 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.
49. 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.
50. Журавчак Л. М. Нестационарне теплове поле в неоднорідних матеріалах з нелінійною поведінкою їх компонент / Л. М. Журавчак, Н.В. Забродська // Фіз.-хім.механіка матеріалів. – 2010. – № 1. – С. 33-41.
51. Журба М. Основы процессов доочистки сточных вод фильтрованием / М. Журба // Тепло- и массообмен в капиллярнопористых телах. – 1965. – № 1. – С. 60-73.

52. Зайцев В. Применение теории цепей Маркова к моделированию, расчету и оптимизации процессов тепломассопереноса в промышленных аппаратах / В. Зайцев, В. Мизонов, В. Волынский. – Иваново: ИГХТУ, 2008. – 284 с.
53. Затуловский С. Литые композиционные материалы на основе алюминиевого сплава для автомобилестроения / С. Затуловский, А. Косинская, А. Затуловский, Е. Миронова // Вестник Харьковского национального автомобильно-дорожного университета. – 2006. – № 33. – С. 151-154.
54. Камке Э. Справочник по обыкновенным дифференциальным уравнениям / Э. Камке. – М.: Наука, 1985. – 304 с.
55. Карпинос Д. Композиционные материалы. Справочник / Д. Карпинос. – Киев: Наук. думка, 1985. – 587 с.
56. Кит Г. С. Плоские задачи термоупругости для тел с трещинами / Г. С. Кит, М. Г. Кривцун. – Київ: Наук. думка, 1983. – 280 с.
57. Ключникова Н. Перспективность использования металло-композитов на предприятиях энергетического профиля / Н. Ключникова, Е. Лымарь, А. Юрьев // Вестник Белгородского государственного технологического университета им. В. Шухова. – 2004. – № 8. – С. 26.
58. Кляцкин В. Диффузия и кластеризация пассивной примеси в случайных гидродинамических потоках / В. Кляцкин. – М.: Физматлит, 2005. – 160 с.
59. Кляцкин В. Современные методы статистического описания динамических стохастических систем / В. Кляцкин // УФН. – 2009. – № 179. – С. 547-553.
60. Кляцкин В. Статистика и реальность в стохастических динамических системах / В. Кляцкин // Нелинейные волны. – 2004. – Нижний Новгород: ИПФ РАН, 2005. – С. 256-286.
61. Коздоба Л. Математическое моделирование тепловых режимов многослойных оболочек на стационарных и переходных режимах / Л. Коздоба, В. Буренко // Многосварные конструкции и трубы. – Киев: Наук. думка, 1984. – С. 136-144.
62. Корн Г., Корн Т. Справочник по математике для научных работников и инженеров / Г. Корн, Т. Корн. – М.: Наука, 1984. – 831 с.
63. Королюк В. Справочник по теории вероятности и математической статистике / В. Королюк, Н. Портенко, А. Скороход, А. Турбин. – М.: Наука, 1985. – 640 с.
64. Костробій П. П. Реакційно-дифузійні процеси в системах «метал-газ» / П. П. Костробій, М. В. Токарчук, Б. М. Маркович, В. В. Ігнатюк, Б. В. Гнатів. – Львів: НУ «ЛП», 2009. – 208 с.

65. Краснов М. Интегральные уравнения / М. Краснов. – М.: Наука, 1975. – 300 с.
66. Крылов В. Приближенное вычисление интегралов / В. Крылов. – М.: Наука, 1967. – 500 с.
67. Кудинов В. А. Аналитические решения задач теплопереноса и термоупругости для многослойных конструкций / В. А. Кудинов, Э. М. Карташов, В. В. Калашников. – М.: Высшая школа, 2005. – 430 с.
68. Кудрявцев Л. Курс математического анализа: В 2-х т. / Л. Кудрявцев. – М.: Высшая школа, 1981. – Т. 1. – 576 с.; Т. 2. – 584 с.
69. Кузнецов О. Эффективная сжимаемость пороупругих многомасштабных сред при высоких давлениях / О. Кузнецов, А. Каракин, Ю. Кузнецов, Ю. Кухаренко, П. Кухаренко // Физика Земли. – 2001. – № 7. – С. 26-31.
70. Кузнецов О. Фильтрация жидкости в многомасштабных пористых средах / О. Кузнецов, А. Каракин, Ю. Кузнецов, Ю. Кухаренко, П. Кухаренко // Геоинформатика. – 2001. – № 4. – С. 11-15.
71. Лаврик В. Конформные отображения физико-топологических моделей / В. Лаврик, В. Фильчакова, А. Яшин. – Киев: Наук. думка, 1990. – 373 с.
72. Лариков Л. Диффузия в металлах и сплавах. Структура и свойства металлов и сплавов / Л. Лариков, В. Исайчев. – Киев: Наук. думка, 1987. – 510 с.
73. Ленюк М. Скінченні гібридні інтегральні перетворення, породжені класичними диференціальними операторами математичної фізики. Т. 2 / М. Ленюк, М. Шинкарик. – Тернопіль: Економічна думка, 2012. – 308 с.
74. Леонов С. Полимерные материалы для изготовления полых однослойных деталей автомобиля / С. Леонов // Научни трудове на русенския университет. – 2013. – Т. 52, Серия 2 (88). – С. 88-92.
75. Липатов Ю. Вязкоупругие свойства межфазных слоев и закономерности их влияния на механические свойства полимерных композитных материалов / Ю. Липатов, В. Бабич // Механика композитных материалов. – 1987. – №1. – С. 17.
76. Лыков А. В. Терия сушки / А. В. Лыков. – М.: Энергия, 1968. – 471 с.
77. Лыков А. В. Теория теплопроводности / А. В. Лыков. – М.: Высшая школа, 1978. – 463 с.
78. Ловитт У. В. Линейные интегральные уравнения / У. В. Ловитт. – М.: Гос. изд-во технико-теор. лит., 1957. – 266 с.
79. Лопух Н. Вплив неусувної похибки на розрахунок газодинамічних параметрів руху газу в трубопроводі / Н. Лопух // Фізико-математичне моделювання та інформаційні технології. – 2010. – Вип. 11. – С. 97-104.

80. Лукієнко О. І. Структурна геологія / О. І. Лукієнко. – Київ: Видавництво ТОВ «КНТ», 2008. – 291 с.
81. Любов Б. Диффузионные процессы в неоднородных твердых телах / Б. Любов. – М.: Наука, 1981. – 295 с.
82. Лялько В. Методы расчета тепло- и массопереноса в земной коре. Алгоритмы и программы / В. Лялько. – Киев: Наук. думка, 1998. – 132 с.
83. Ляшко С. Моделирование и оптимизация подземного массопереноса / С. Ляшко, Д. Ключин, А. Тригуб. – Київ: Наук. думка, 1998. – 238 с.
84. Ляшко И. И. Численное решение задач тепло и массопереноса в пористых средах / И. И. Ляшко, Л. И. Демченко, Г. Е. Мистецкий. – Киев: Наук. думка, 1991. – 264 с.
85. Мартыненко Н. Конечные интегральные преобразования и их применение к исследованию систем с распределенными параметрами / Н. Мартыненко, Л. Пустыльников. – М.: Наука, 1985. – 304 с.
86. Марчук Г. И. Математическое моделирование в проблеме окружающей среды / Г. И. Марчук. – М.: Наука, 1982. – 319 с.
87. Маслов В. П. Математическое моделирование аварийного блока Чернобыльской АЭС / В. П. Маслов, В. П. Мясников, В. Г. Данилов. – М.: Наука, 1987. – 144 с.
88. Матвійчук Я. М. Математичне моделювання динамічних систем: теорія та практика / Я.М. Матвійчук. – Львів: ЛНУ ім. І. Франка, 2000. – 236 с.
89. Михаськів В. В. Розв'язування нестационарних задач для складеного тіла з тріщиною методом інтегральних рівнянь / В. В. Михаськів, І. Я. Жбадинський // Фіз.-хім. механіка матеріалів. – 2007. – 43, № 1. – С. 33-42.
90. Моделювання та оптимізація в термомеханіці електропровідних неоднорідних тіл / Під заг. ред. Я. Й. Бурака, Р. М. Кушніра. Т. 3: Термопружність термо-чутливих тіл / Р. М. Кушнір, В. С. Попович. – Львів: СПОЛОМ, 2009. – 409 с.
91. Момот А. І. Математичне моделювання: методичні вказівки до практичних робіт / А. І. Момот, О. Я. Оліх. – Київ: Видавничо-поліграфічний центр «Київський університет», 2011. – 72 с.
92. Мюнстер А. Химическая термодинамика / А. Мюнстер. – М.: Мир, 1971. – 295 с.
93. Нигматулин Р. Динамика многофазных сред: В 2-х т. / Р. Нигматулин – М.: Наука, 1987. – Т.1. – 464 с.; – Т.2. – 360 с.

94. Николаевский В. Механика пористых и трещиноватых сред / В. Николаевский. – М.: Недра, 1984. – 232 с.
95. Овчинников А. Кинетика диффузионно-контролируемых химических процессов / А. Овчинников, С. Тимашев, А. Белый. – М.: Химия, 1986. – 287 с.
96. Пастернак Я. Моделювання методами інтегральних рівнянь тонких армувальних елементів підземних споруд та тунелів / Я. Пастернак, Г. Сулим, Й. Лучко // Вісник Дніпропетровського нац. ун-ту залізничного транспорту ім. акад. В. Лазаряна. – 2010. – Вип. 32. – С. 85-90.
97. Пат. 2274553 Российская Федерация, В32В27/36 (2006.01), В32В27/32 (2006.01), В32В27/04 (2006.01), Слоистые материалы для упаковки пищевых продуктов / А. Янсен, В. Ценкер; заявитель и патентообладатель Х. Б. Фуллер лайсензинг энд фاینэнсинг инк. (US), заявл. 07.11.2001; опубл. 06.06.2002.
98. Пат. 2445324 Российская Федерация, C08J5/22 (2006.01), В32В27/12 (2006.01), В32В27/04 (2006.01), В01D67 (2006.01), В01D61/44 (2006.01), В01D61/42 (2006.01), Слоистая ионообменная мембрана, способ ее получения и устройство для осуществления этого способа / Я. Гадрова, Я. Кривчик, А. Чернин; заявитель и патентообладатель А. С. Мега, Прага (CZ), заявл. 10.10.2008; опубл. 20.03.2012.
99. Пашеку Х. Программирование в Borland Delphi 2006 для профессионалов / Х. Пашеку. – М.: Изд. дом «Вильямс», 2006. – 944 с.
100. Подстригач Я. С. Вибрані праці / Я. С. Подстригач – Київ: Наук. думка, 1995. – 459 с.
101. Подстригач Я.С. Термомеханика неоднородных структур / Я. С. Подстригач, Ю. М. Коляно // Воздействие концентрированных потоков энергии на материалы. – М.: Наука, 1985. – С. 36-42.
102. Прудников А. Интегралы и ряды. Элементарные функции / А. Прудников, Ю. Брычков, О. Маричев. – М.: Наука, 1981. – 798 с.
103. П'янило Я. Д. Проекційно-ітераційні методи розв'язування прямих та обернених задач переносу / Я. Д. П'янило. – Львів: Сплайн, 2011. – 248 с.
104. Рытов С. Введение в статистическую радиофизику, Ч. I. Случайные процессы / С. Рытов. – М.: Наука, 1976. – 494 с.
105. Рытов С. Введение в статистическую радиофизику. Ч. II. Случайные поля / С. Рытов, Ю. Кравцов, В. Татарский – М.: Наука, 1978, – 436 с.
106. Рудобашта С. Диффузия в химико-технологических процессах / С. Рудобашта, Э. Карташов. – М.: КолосС, 2009. – 478 с.

107. Румер Ю. Термодинамика, статистическая физика и кинетика / Ю. Румер, М. Рыбкин. – Новосибирск: Из-во Новосиб. ун-та, 2000. – 608 с.
108. Руцицкий Я. Элементы теории смеси / Я. Руцицкий – Киев: Наук. думка, 1991. – 160 с.
109. Савула Я. Числове дослідження задачі перенесення ліків у стінці судин / Я. Савула, Ю. Турчин // Фізико-математичне моделювання та інформаційні технології. – 2014. – Вип. 20. – С. 173-179.
110. Савула Я. Числовий аналіз різновимірних крайових задач адвекції-дифузії у середовищах із тонкими включеннями / Я. Савула, Т. Мандзак, В. Кухарський // Фізико-математичне моделювання та інформаційні технології. – 2008. – Вип. 8. – С. 149-156.
111. Сергиенко И. Модели и методы решения задач в неоднородных средах / И. Сергиенко, В. Дейнека. – Київ: Наук. думка, 2001. – 606 с.
112. Скопецкий В. В. Математичне моделювання динаміки розподілених просторово-часових процесів / В. В. Скопецкий, В. А. Стоян, В. Б. Зваридчук. – Київ: В-во «Сталь», 2008. – 316 с.
113. Снеддон И. Преобразования Фурье / И. Снеддон. – М.: Изд-во иностр. лит., 1955. – 667 с.
114. Сологуб М. Технологія конструкційних матеріалів / М. Сологуб, І. Рожнецький, О. Некоз. – Київ: Вища школа, 2002. – 374 с.
115. Соломатов В. Полимерные композиционные материалы в строительстве / В. Соломатов, А. Бобрышев. – М.: Стройиздат, 1998. – 312 с.
116. Справочник по специальным функциям / Под ред. М. Абрамовица и И. Стиган. – М.: Мир, 1979. – 830 с.
117. Таганов И. Н. Моделирование процессов массо- и энерготранспорта / И. Н. Таганов. – Л.: Химия, 1979. – 208 с.
118. Теория и расчет разделительных систем. Системно-информационный подход // Сб. научн. Статей. Вып. 66 / Под. ред. В.П. Майкова. – М.: МИХМ, 1975. – 128 с.
119. Тихонов А. Уравнения математической физики / А. Тихонов, А. Самарский. – М.: Наука, 1972. – 735 с.
120. Федасюк Д. Знаходження розв'язку нелінійної задачі теплопровідності з використанням випаровування для інтенсифікації тепловідведення / Д. Федасюк, Т. Муха // Вісник НУ «Львівська політехніка». Комп'ютерні системи проектування. Теорія і практика. – 2011. – № 711. – С. 38-47.

121. Финдайзен Б. Порошковая металлургия. Спеченные и композиционные материалы / Б. Финдайзен. – М.: Металлургия, 1983. – 520 с.
122. Хорошун Л. Математические модели и методы механики стохастических композитных материалов / Л. Хорошун // Прикл. механика. – 2000. – Т. 36, № 10. – С. 30-62.
123. Хорошун Л. Методы случайных функций в задачах о макроскопических свойствах микронеоднородных сред / Л. Хорошун // Прикл. механика. – 1978. – Т. 14, № 2. – С. 3-17.
124. Хорошун Л. Термоупругость двухкомпонентных смесей / Л. Хорошун, Н. Солтанов. – Киев: Наук. думка, 1984. – 112 с.
125. Хрулев В. Модифицированная древесина и ее применение / В. Хрулев. – Кемерово: Кемеровское кн. изд., 1988. – 120 с.
126. 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 Міжнар. наук.-техн. конф. SAIT «Системний аналіз та інформаційні технології». – Київ: ННК «ІПСА» НТУУ «КПІ», 2014. – С. 171-172.
127. 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.
128. Чапля Є. Математичне моделювання дифузійних процесів у випадкових і регулярних структурах / Є. Чапля, О. Чернуха. – Київ: Наук. думка, 2009. – 302 с.
129. Чапля Є. Математичне моделювання потоків в шарі / Є. Чапля, О. Чернуха, Н. Васьо // Вісник Львів. ун-ту: Серія прикл. матем. інформ. – 2010. – Вип. 15. – С. 103-115.
130. 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 міжнар. наук.-практ. конф. «Системний аналіз. Інформатика. Управління (САІУ-2013)». – Запоріжжя: В-во Класичного приватного університету, 2013. – С. 266-268.
131. 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 міжнар. наук.-техн. конф. SAIT «Системний аналіз та інформаційні технології». – Київ: ННК «ІПСА» НТУУ «КПІ», 2013. – С. 212-213.

132. Чапля Є. Математичне моделювання потоків маси у випадково неоднорідному шаруватому тілі з бета-розподілом включень / Є. Чапля, О. Чернуха, А. Давидок // Матеріали міжнар. наук. конф. «Сучасні проблеми механіки і математики». – Львів: ІППММ ім. Я.С. Підстригача НАНУ, Т. 1, 2013. – С. 124-126.
133. 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.
134. Чернуха О. Ю. Математичне моделювання потоків домішки у шарі з випадково розташованим прошарком / О. Ю. Чернуха, А. Є. Давидок // Матеріали III Міжнар. наук.-практ. конф. «Системний аналіз. Інформатика. Управління (САГУ-2012)». – Запоріжжя: В-во Класичного приватного університету, 2012. – С. 295-296.
135. 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 наук.-техн. міжнар. конф. «Комп'ютерне моделювання в наукоємких технологіях». – Харків: ХНУ ім. В. Н. Каразіна, 2014. – С. 413-416.
136. 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.
137. Чернуха О. Ю. Моделювання випадкових дифузійних потоків у двофазній багат шаровій смузі / О. Ю. Чернуха, А. Є. Давидок // Матеріали XVIII Всеукраїнської наук. конф. «Сучасні проблеми прикладної математики та інформатики». – Львів: ЛНУ ім. І. Франка, 2012. – С. 155-156.
138. Чернуха О. Ю. Моделювання дифузійних потоків у випадково-неоднорідній тришаровій смузі [Електрон. ресурс] / О. Ю. Чернуха, А. Є. Давидок // Конференція молодих учених «Підстригачівські читання – 2012». – Режим доступу: <http://iapmm.lviv.ua/chyt2012/materials/52.pdf>.
139. Чернуха О. Ю. Моделювання дифузійних потоків у двофазній багат шаровій випадково неоднорідній смузі за рівномірного розподілу фаз / О. Ю. Чернуха, А. Є. Давидок // Прикладні проблеми механіки і математики. – 2013. – Вип. 11. – С. 142-150.
140. 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.
141. Чернуха О. Моделювання потоків маси у випадково неоднорідній шаруватій смузї за трикутного розподілу товщини включень / О. Чернуха, В. Гончарук, А. Давидок // XII міжнар. симпозіум українських інженерів-механіків у Львові: Тези доповідей. – Львів: КІНПАТРИ ЛТД, 2015. – С. 46-47.
 142. Чернуха О. Моделювання процесів термодифузії з урахуванням розпаду частинок у випадково неоднорідній шаруватій смузї / О. Чернуха, В. Гончарук, А. Давидок // Матеріали ІХ Міжнар. наук. конф. «Математичні проблем механіки неоднорідних структур». – Львів: ІППММ ім. Я. С. Підстригача НАНУ, 2014. – С. 102-104.
 143. Чернуха О. Про один метод побудови розв'язку контактено-крайових задач дифузії при мішаних граничних умовах / О. Чернуха // Доповіді НАН України. – 2006. – № 1. – С. 82-87.
 144. Шапошник В. А. Мембранная электрохимия / В. А Шапошник // Соросовский образовательный журнал. – 1999. – № 2. – С. 71-77.
 145. Шатинский В. Защитные диффузионные покрытия / В. Шатинский, А. Нестеренко. – Киев: Наук. думка, 1988. – 315 с.
 146. Шевчук Е. Технология прямоточного фильтрования природных сточных вод через зернистые загрузки. / Е. Шевчук, А. Мамченко, В. Гончарук // Химия и технология воды. – 2005. – № 27 (4). – С. 369-384.
 147. Шишкин Г. И. Проблема аппроксимации диффузионного потока при численном моделировании процесса переноса примесей / Г. И. Шишкин // Математическое моделирование. – 1995. – Т. 7, № 7. – С. 61-80.
 148. Aifantis E. On the theory of diffusion in regions with multiple diffusivity / E. Aifantis // J. Appl. Phys. – 1979. – V. 50, № 3. – P. 1334-1338.
 149. Arnaut L. Nonstationary random acoustic and electromagnetic fields as wave diffusion processes / L. Arnaut // Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical. – 2007. – V. 40, № 27. – P. 7745-7753.
 150. Balzannikov M. The Use of Modified Composite Materials in Building Hydraulic Engineering Structures / M. Balzannikov, A. Mikhasek // Procedia Engineering. – 2014. – V. 91. – P. 183-187.
 151. Bergins C. Multiphase Flow in Porous Media with Phase Change. Part II: Analytical Solutions and Experimental Verification for Constant Pressure Stream Injection / C. Bergins, S. Crone, K. Strauss // Transport in Porous Media. – 2005. – V. 60. – P. 275-300.

152. Bonelli S. Approximate solution to the diffusion equation and its application to seepage-related problems / S. Bonelli // *Applied Mathematical Modelling*. – 2009. – V. 33. – P. 110-126.
153. Bukhanovsky V. Production technology, structure and properties of Cu–W layered composite condensed materials for electrical contacts / V. Bukhanovsky, N. Grechanyuk, R. Minakova, I. Mamuzich, V. Kharchenko, N. Rudnitsky // *International Journal of Refractory Metals and Hard Materials*. – 2011. – V. 29, Issue 5. – P. 573-581.
154. Burak Ya. Mathematical models of admixture migration in ground / Ya. Burak, Ye. Chaplia, O. Chernukha. – Львів, 1997. – 32 с. – (Препр./ НАН України, ЦММ ІППІММ; № 1-97).
155. Burak Ya. Thermodynamic models and investigation methods of heterophase multicomponent systems / Ya. Burak, Ye. Chaplia, B. Gera // XXXV Sympozjon «Modelowanie w mechanice». – Gliwice: Politechnika Slaska. – 1996. – P. 29-34.
156. Chaplia Y. Admixture diffusion in a two-phase random nonhomogeneous stratified layer / Y. Chaplia, O. Chernukha // *Journal of Theoretical and Applied Mechanics*. – 2001. – V. 39, № 4. – P. 929-946.
157. Chaplya Y. Contact initial boundary value problem of the diffusion of admixture particles in a two-phase stochastically inhomogeneous stratified strip / Y. Chaplya, O. Chernukha, Y. Bilushchak // *Journal of Mathematical Sciences*. – 2012. – V. 183, № 1. – P. 83-99.
158. 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.
159. Chaudhari G. Cold roll bonding of multi-layered bi-metal laminate composites / P. Chaudhari, V. Acoff // *Composites Science and Technology*. – 2009. – V. 69, Issue 10. – P. 1667-1675
160. Crank J. *The mathematics of diffusion* / J. Crank. – Oxford: Clarendon Press, 1956. – 575 p.
161. 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.

162. Davydok A. Modeling stochastic mass flows in a two-phase layered strip at uniform distribution of inclusions / A. Davydok // *Materiały 50 Konferencji Pionu Hutniczego*. – Kraków, 2013. – T. 1. – P. 236.
163. Dumitrescu A. Advanced composite materials based on hydrogels and ferrites for potential biomedical applications / A. Dumitrescu, T. Slatineanu, A. Poiata, A. Iordan, C. Mihailescu, M. Palamaru // *Colloids and Surfaces A: Physico-chemical and Engineering Aspects*. – 2014. – V. 455. – P. 185-194.
164. Fannjiang A. Convection-enhanced diffusion for random flows / A. Fannjiang, G. Papanicolaou // *J. Statistical Physics*. – 1997. – V. 88 (5-6). – P. 1033-1076.
165. Felberbaum M. Effective hydrogen diffusion coefficient for solidifying aluminium alloys / M. Felberbaum, E. Landry-Desy, L. Weber, M. Rappaz // *Acta Materialia*. – 2011. – V. 59. – P. 2302-2308.
166. Filipek R. Diffusion Transport in Electrochemical Systems: A New Approach to Determining of the Membrane Potential at Steady State / R. Filipek, K. Szyszkiewicz, B. Bożek, M. Danielewski, A. Lewenstam // *Defect and Diffusion Forum*. – 2009. – V. 283-286. – P. 487-493.
167. Fisher J. Calculation of diffusion penetration curves for surface and grain boundary diffusion / J. Fisher // *J. Appl. Phys.* – 1951. – V. 22. – P. 74-77.
168. Fournier D. Lateral heat diffusion in layered structures: Theory and photo-thermal experiments / D. Fournier, C. Fretigny // *The European Physical Journal Special Topics*. – 2008. – V. 153, Issue 1. – P. 69-73.
169. Francfort G. Homogenization and linear thermoelasticity / G. Francfort // *SIAM Journal on Mathematical Analysis*. – 1983. – V. 14. – P. 696-708.
170. Gałka A. Nonlinear transport equation and macroscopic properties of micro-heterogeneous media / A. Gałka, J. J. Telega, S. Tokarzewski // *Archives of Mechanics*. – 1997. – V. 49 (2). – P. 293-319.
171. Giovangigli V. Multicomponent flow modeling / V. Giovangigli // *Science China Mathematics*. – 2012. – V. 55, Issue 2. – P. 285-308.
172. Heitjans P. Diffusion and ionic conduction in nanocrystalline ceramics / P. Heitjans, S. Indris // *J. Phys. Condensed Matter*. – 2003 – V. 15., № 30. – R1257.
173. Hlushkou V. Pore-scale dispersion in electrokinetic flow through a random sphere packing / V. Hlushkou, S. Khirevich, V. V. Apanasovich, U. Tallarek // *Analytical Chemistry*. – 2007. – V. 79. – P. 113-121.
174. Jacobs R. Bivariate Beta Distributions and Beyond / R. Jacobs, A. Bekker, S. Human // *Int. Statistical Inst.: Proc. 58th World Statistical Congress (Session CPS009)*. – Dublin, 2011. – P. 3984-3990.

175. Jothi S. Finite element microstructural homogenization techniques and intergranular, intragranular microstructural effects on effective diffusion coefficient of heterogeneous polycrystalline composite media / S. Jothi, T. Croft, S. Brown, E. de Souza Neto // *Composite Structures*. – 2014. – V. 108. – P. 555-564.
176. Keller J. Flow in random porous media / J. Keller // *Transport in Porous Media*. – 2001. – V. 43. – P. 395-406.
177. Kueper B. Two-phase flow in heterogeneous porous media 1. Model development / B. Kueper, E. Frind // *Water Resour. Res.* – 1991. – № 27. – P. 1049-1057.
178. Kushnir R. M. Analytic–Numerical Solution of Contact Problems of Thermoelasticity for Thermal Sensitive Bodies / R. M. Kushnir, V. S. Popovych, H. Yu. Harmatii // *Materials Science*. – 2001. – V. 37, № 6. – P. 893–901.
179. Kushnir R. M. Study of the Thermostressed state of a piecewise-homogeneous friction assembly / R. M. Kushnir, Ya. D. P'yanylo // *Journal of Mathematical Sciences*. – 2001. – V. 104, № 5. – P. 1515-1520.
180. Landim C. Convection-diffusion equation with space-time ergodic random flow / C. Landim, S. Olla, H. T. Yau // *Probability theory and related fields*. – 1998. – V. 112 (2). – P. 203-220.
181. Lewandowska J. Modeling of unsaturated water flow in double porosity soils by the homogenization approach / J. Lewandowska, A. Szymkiewicz, K. Burzynski, M. Vauclin // *Adv. Water Resour.* – 2004. – № 27 (3). – P. 321-345.
182. Li J. Sulfonated polyimide/s-MoS₂ composite membrane with High proton selectivity and good stability for vanadium redox flow battery / J. Li, Y. Zhang, S. Zhang, X. Huang // *J. Membrane Science*. – 2015. – V. 490. – P. 179-189.
183. Lidzba D. Homogenisation theories applied to porous media mechanics / D. Lidzba // *J. Theor. and Appl. Mech.* – 1998. – V. 36, № 3. – P. 657–679.
184. Lidzba D. Study of poroelasticity material coefficients as response of microstructure / D. Lidzba, J. F. Shao // *Mech. of Cohesive-Fractional Mat.* – 2000. – V. 5. – P. 149-171.
185. Loimer T. Influence of the flow direction on the mass transport of vapors through membranes consisting of several layers / T. Loimer, P. Uchytíl // *Experimental Thermal and Fluid Science*. – 2015. – V. 67. – P. 2-5.
186. Lyshenko V. Modeling the sintering of powder parts / V. Lyshenko, M. Zagirnyak, T. Grigorova, D. Miljavec // *Powder Metallurgy and Metal Ceramics*. – 2011. – V. 49. – P. 737-741.

187. Lyubinsky B. Software of geoinformation system for spatial inventory of greenhouse gas emissions / B. Lyubinsky, O. Danylo, R. Bun // *Econtechmod.* – 2015. – V. 4, № 1. – P. 69-78.
188. Matysiak S. On homogenization of diffusion processes in microperiodic stratified bodies / S. Matysiak, R. Mieszkowski // *Int. J. Heat and Mass Transfer.* – 1999. – V. 26. – P. 539-547.
189. Mileiko S. T. Handbook of Composites. V. 4 / S. T. Mileiko. – Amsterdam: NorthHolland, 1983. – 692 p.
190. Myslyvchenko O. M. Effect of nickel on the structure and phase composition of the VCrMnFeCoNi x high-entropy alloy / O. M. Myslyvchenko, O. S. Makarenko, M. O. Krapivka, A. I. Degula // *Journal of Superhard Materials.* – 2015. – V. 37 (3). – P. 182-188.
191. Ngan A. Canonical ensemble for static elastic structures with random microstructures / A. Ngan // *J. Mech. and Phys. of Solids.* – 2009. – V. 57. – P. 803-811.
192. Nikolaikina N. Technology of utilization of multilayered foodstuff packaging materials for producing polymer-filled composites / N. Nikolaikina, I. Skopin-tsev, A. Gonopolskii // *Chemical and Petroleum Engineering.* – 2010. – № 46 (3). – P. 178-182.
193. Niyogi S. Solution Properties of Graphite and Graphene / S. Niyogi, E. Bekyarova, M. Itkis, J. McWilliams, M. Hamon, R. Haddon // *J. Am. Chem. Soc.* – 2007. – № 7. – P. 49-54.
194. Oelschlanger K. Homogenization of diffusion processes in a divergence-free random field / K. Oelschlanger // *The Annals of Probability.* – 1988. – V. 16, № 3. – P. 1084-1126.
195. Pareige C. Kinetic study of phase transformation in a highly concentrated Fe–Cr alloy: Monte Carlo simulation versus experiments / C. Pareige, M. Roussel, S. Novy, V. Kuksenko, P. Olsson, C. Domain, P. Pareige // *Acta Materialia.* – 2011. – V. 59. – P. 2404-2411.
196. Pavliotis G. A. Homogenization for inertial particles in a random flow / G. A. Pavliotis, A. M. Stuart // *Communications in Mathematical Sciences.* – 2007. – V. 5 (3). – P. 507-531.
197. Pawlowski S. Mass transfer in reverse electrodialysis: Flow entrance effects and diffusion boundary layer thickness / S. Pawlowski, P. Sistat, J. G. Crespo, S. Velizarov // *J. Membrane Science.* – 2014. – V. 471. – P. 72-83.

198. Ponte Castaneda P. The effective mechanical properties of nonlinear isotropic composites / P. Ponte Castaneda // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. – 1991. – V. 39, Issue 1. – P. 45-71.
199. Qian H. Single particle tracking. Analysis of diffusion and flow in two-dimensional systems / H. Qian, M. P. Sheetz, E. L. Elson // *Biophysical journal*. – 1991. – V. 60 (4). – P. 910-921.
200. Sato K. Quantitative evaluation of nonlinear diffusion for isotropic random flow / K. Sato, H. Nagashima // *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*. – 2005. – V. 345 (1). – P. 17-34.
201. Shulenberg T. An improved model for two-phase flow through beds of coarse particles / T. Shulenberg, U. Muller // *Int. J. Multiphase Flow*. – 1987. – V. 13 (1). – P. 87-97.
202. Vali A. Numerical modeling of fluid flow and coupled heat and mass transfer in a counter-cross-flow parallel-plate liquid-to-air membrane energy exchanger / A. Vali, G. Ge, R. W. Besant, C. J. Simonson // *Int. Journal of Heat and Mass Transfer*. – 2015. – V. 89. – P. 1258-1276.
203. van Duijn C. J. Effective equations for two-phase flow in porous media: the effect of trapping on the microscale / C. J. van Duijn, H. Eichel, R. Helmig, I. S. Pop // *Transport in Porous Media*. – 2007. – № 69. – P. 411-428.
204. Wang J. G. Numerical modeling for the combined effects of two-phase flow, deformation, gas diffusion and CO₂ sorption on caprock sealing efficiency / J. G. Wang, Y. Peng // *Journal of Geochemical Exploration*. – 2014. – V. 144, Part A. – P. 154-167.
205. Wierzba B. Entropy production in Cu-Fe-Ni alloys – The bi-velocity method / B. Wierzba // *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*. – 2012. – V. 391, Issues 1-2. – P. 56-61.
206. Yang Y. Evolution of structure and fabrication of Cu/Fe multilayered composites by a repeated diffusion-rolling procedure / Y. Yang, D. Wang, J. Lin, D. Khan, G. Lin, J. Ma // *Materials & Design*. – 2015. – V. 85. – P. 635-639.
207. Zgurovsky M. Z. Sustainable development global simulation: Quality of life and Security of the World Population / M. Z. Zgurovsky, A. G. Gvishiani – Kyiv: Politekhnik, 2008. – 351 p.
208. Zgurovsky M. Z. System Analysis: Theory and Applications: Theory and Applications / M. Z. Zgurovsky, N. D. Pankratova. – Berlin: Springer Science & Business Media, 2007. – 447 p.

209. Zhikov V. V. Diffusion in an incompressible random flow / V. V. Zhikov // Functional Analysis and Its Applications. – 1997. – V. 31 (3). – P. 156-166.
210. Балаев И. С. Реконструкция химводоочистки в условиях финансового кризиса / И. С. Балаев, Г. Г. Кучма, О. Б. Яковенко, А. В. Ерофеев [Электрон. ресурс]. – Режим доступа: <http://netnado.ru/>
211. Булаты и булатные композиты [Электрон. ресурс]. – Режим доступа: <http://sarmik.livejournal.com/>
212. Ионообменные мембраны, анионитные, катионитные [Электрон. ресурс]. – Режим доступа: <http://kiev.all.biz/>
213. Композиты [Электрон. ресурс]. – Режим доступа: <https://uk.wikipedia.org/wiki/Композиты>
214. Композиционный слоистый пластик [Электрон. ресурс]. – Режим доступа: <http://promresursy.com/materialy/polimery/kompozitnye-materialy/>
215. Обладнання для очищення стічних вод [Электрон. ресурс]. – Режим доступа: <http://ontology.inhost.com.ua/>
216. Определение структурных особенностей метаморфических пород [Электрон. ресурс]. – Режим доступа: <http://geo.sfedu.ru/>
217. Слоистые композиты и покрытия на основе фторопласта-4 и сверхвысокомолекулярного полиэтилена [Электрон. ресурс]. – Режим доступа: <http://www.vstu.ru/razrabotka/kompozity-i-pokrytiya-na-osnove-.html>
218. Фильтрующие материалы при доочистке сточных вод [Электрон. ресурс]. – Режим доступа: <http://vodoochistka.com/>
219. Фильтры для очистки воды [Электрон. ресурс]. – Режим доступа: <http://www.akvafors.lv>
220. Advanced Wastewater Treatment Technologies [Электрон. ресурс]. – Режим доступа: <http://www.waterform.com.au/Products/10004/nextSand.aspx>
221. Ice-sheet dynamics and the glacial sedimentary record [Электрон. ресурс]. – Режим доступа: <http://www.snowballearth.org/>
222. Materials View [Электрон. ресурс]. – Режим доступа: <http://www.materialsviewschina.com/tag/carbon/>
223. Mucha P. B. Approximate solutions to model of two-component reactive flow / P. B. Mucha, M. Pokorný, E. Zatorska. – 2012. – [Электрон. ресурс]. – Режим доступа: <http://mmns.mimuw.edu.pl/preprints.html>.
224. Technology Advantages [Электрон. ресурс]. – Режим доступа: http://www.picodeon.com/?page_id=178


ДОДАТКИ

ДОДАТОК А

Програмний комплекс «FlowRan»

А.1 Призначення та інсталяція програми

Пакет програм «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.

Для інсталяції пакету програм «FlowRan» необхідно запустити файл FlowRan_Setup.exe та виконувати вказівки інсталятора. Програма-інсталятор створить ярлик  на робочому столі, в меню «Пуск», в меню «Програми», в меню «Автозагрузка», в меню «Швидкий запуск».

На рисунках А.1-А.2 зображено основні кроки процедури інсталяції пакету програм «FlowRan».

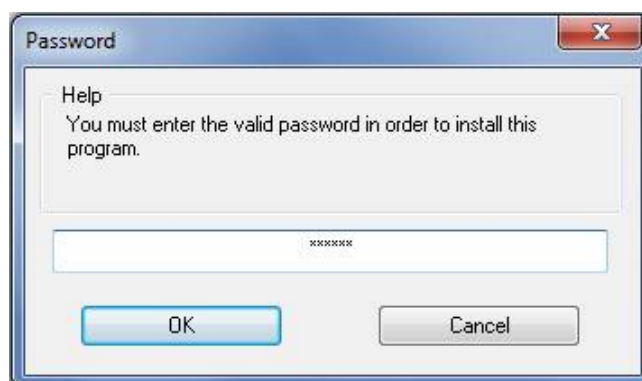


Рис. А.1. Ввід пароля для початку встановлення пакету програм «FlowRan»

Після закінчення процедури інсталяції пакету програм «FlowRan» з'явиться форма-повідомлення про вдалу інсталяцію пакету.

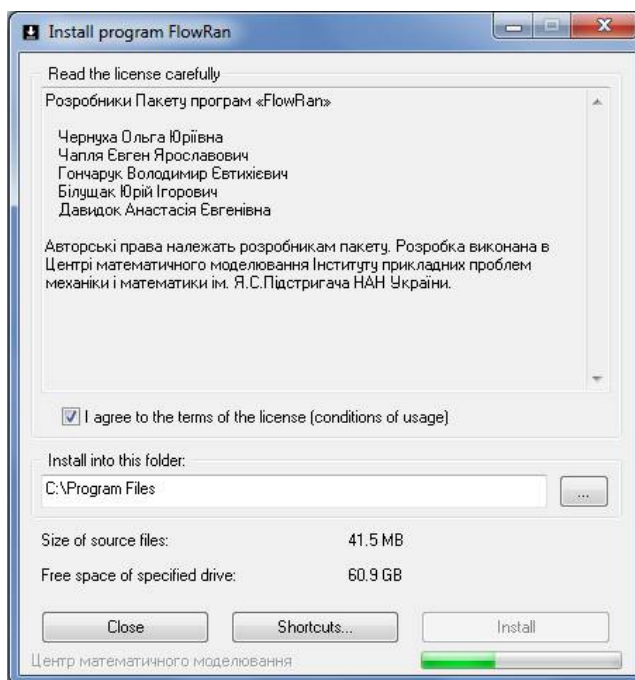


Рис. А.2. Процедура інсталяції пакету програм «FlowRan»

А.2. Головне вікно пакету «FlowRan»

Головне вікно пакету програм призначене для вибору програми та отримання інформації щодо користування пакетом (рис. А.3).

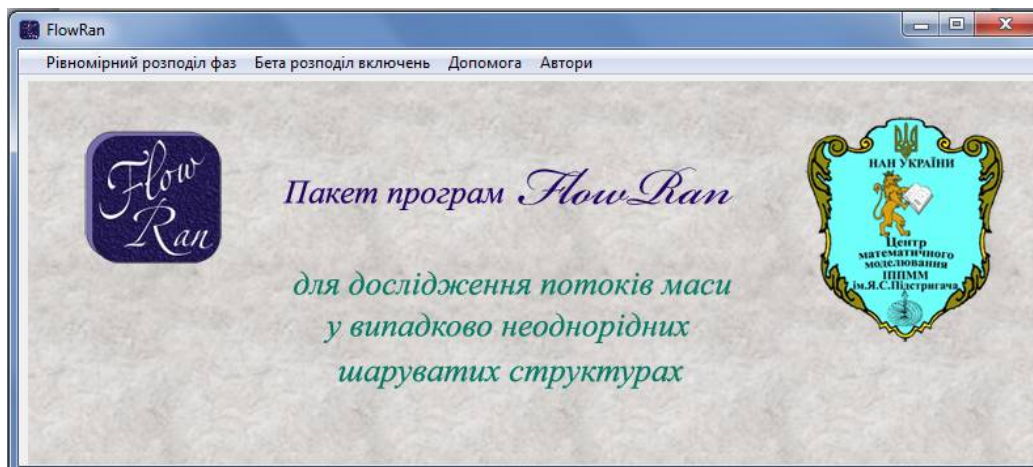


Рис. А.3. Головне вікно програми «FlowRan»

Стрічка меню головного вікна пакету 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 багат шаровому тілі за рівномірного розподілу фаз та складається з таких підпунктів (рис. А.4):

«Один прошарок»

«Характерна товщина включення»

«Випадкова товщина включення»

«Багат шарове тіло»

«Характерна товщина включень»

«Випадкова товщина включень».

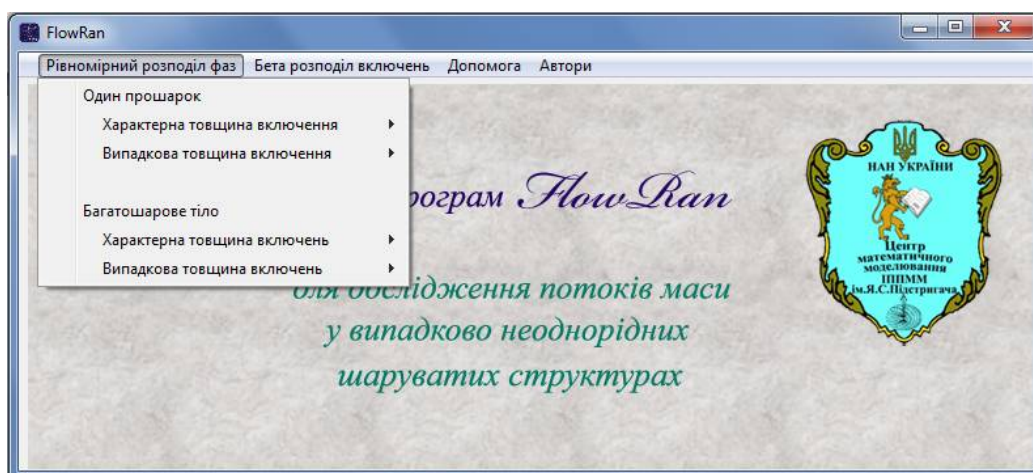


Рис. А.4. Складові пункту **«Рівномірний розподіл фаз»** меню головного вікна пакету програм «FlowRan»

Підпункти **«Один прошарок. Характерна товщина включення»**, **«Багат шарове тіло. Характерна товщина включень»** дають можливість вибрати розподіл концентрації домішкової речовини в початковий момент часу, і містять такі підпункти (рис. А.5)

«нульова початкова концентрація»

«ненульова стала концентрація».

Підпункт випадального меню **«нульова початкова концентрація»** для пункту **«Багат шарове 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».

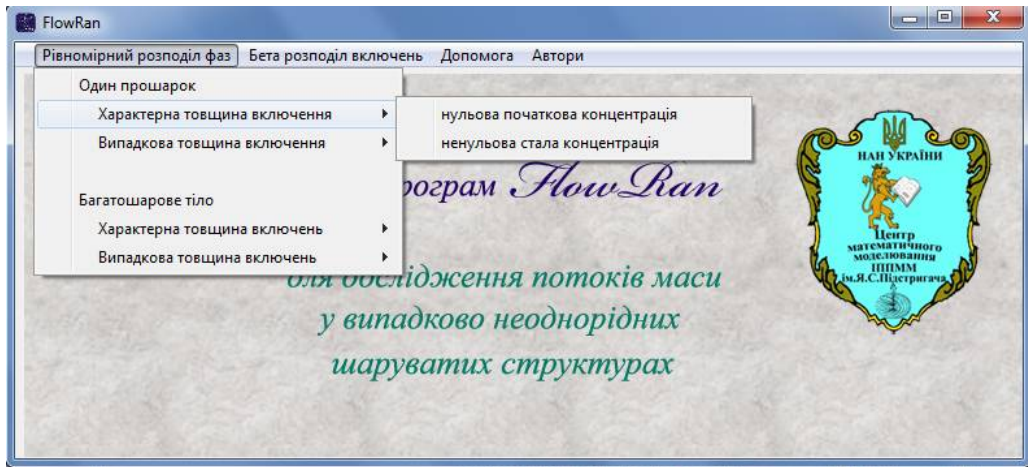


Рис. А.5. Складові пункту *«Один прошарок. Характерна товщина включення»* випадającego меню пакету програм «FlowRan»

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. А.6)

«рівномірний розподіл нульова початкова концентрація»
«рівномірний розподіл ненульова стала концентрація»
«трикутний розподіл нульова початкова концентрація»
«трикутний розподіл ненульова стала концентрація».

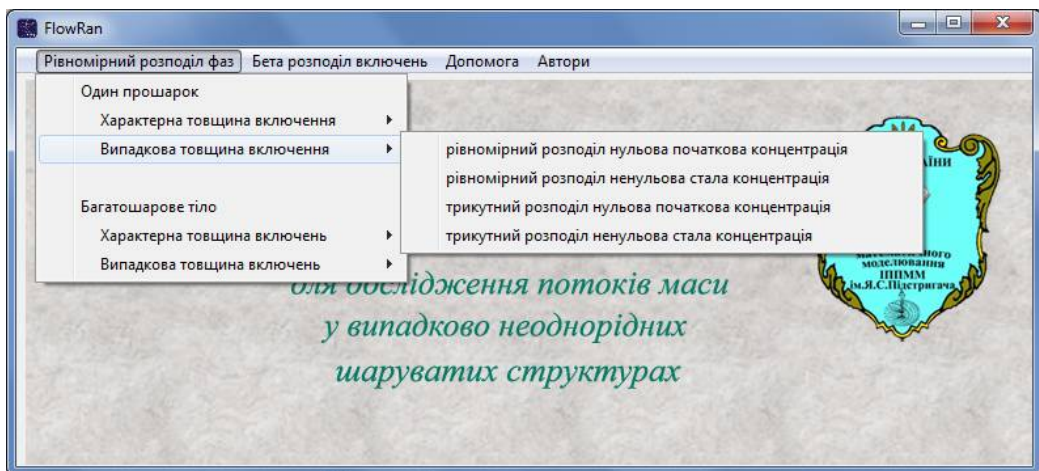


Рис. А.6. Складові пункту *«Один прошарок. Випадкова товщина включення»* випадającego меню пакету програм «FlowRan»

Пункт головного меню *«Бета розподіл включень»* призначений для ви-

бору однієї з програм розрахунку потоків мігруючої речовини у багатошарових тілах з областю ймовірного розташування включень в околі однієї з поверхонь тіла або посередині смуги і складається з таких підпунктів (рис. А.7):

«Включення зосереджені біля верхньої границі»

«Включення зосереджені посередині тіла»

«Включення зосереджені біля нижньої границі».

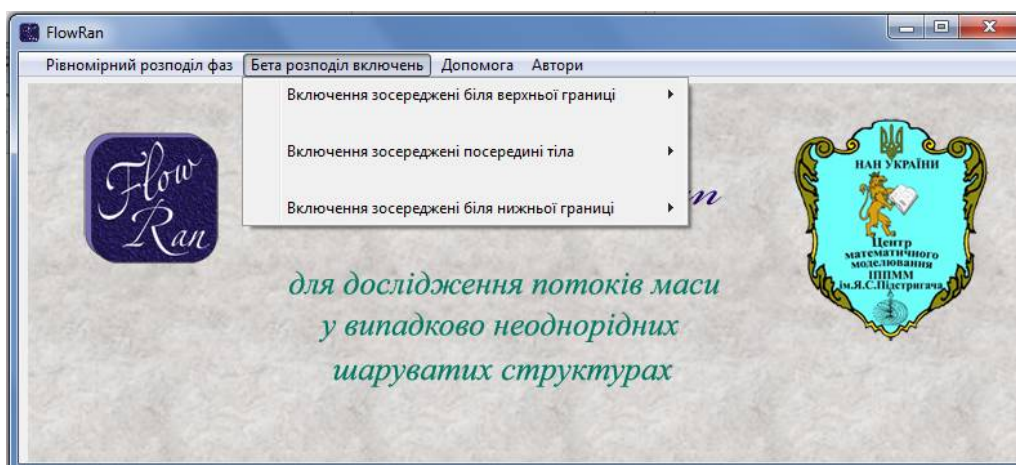


Рис. А.7. Складові пункту *«Бета розподіл включень»* меню головного вікна пакету програм «FlowRan»

Кожен з цих підпунктів дає можливість вибрати нульову або ненульову сталу початкові умови на функцію концентрації домішкової речовини, а пункт *«Включення зосереджені біля верхньої границі»*–*«за ненульової сталої концентрації»* додатково містить підпункти для вибору обчислень потоку з урахуванням ефекту парного взаємовпливу чи без (рис. А.8):

«без урахування парного взаємовпливу включень»

«з урахуванням парного взаємовпливу включень».

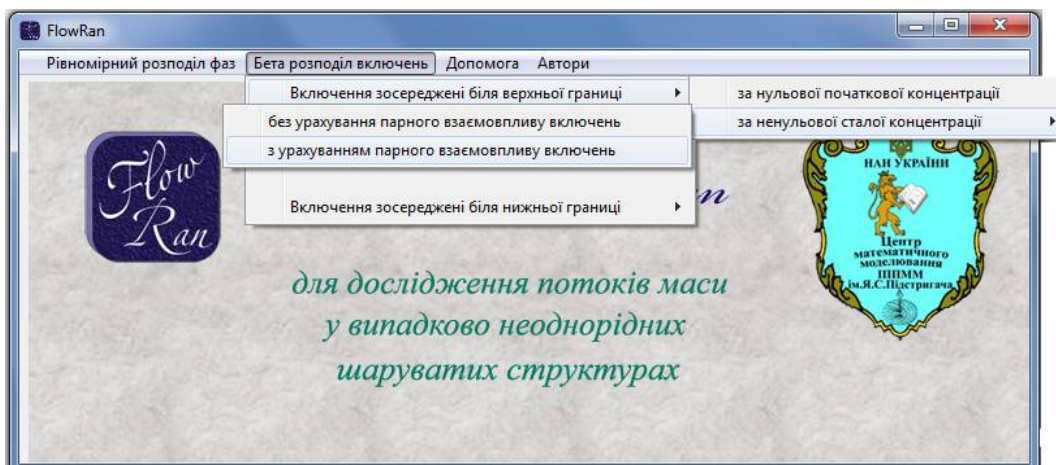


Рис. А.8. Складові пункту *«Включення зосереджені біля верхньої границі»* випадваючого меню пакету програм «FlowRan»

Пункт головного меню «*Допомога*» містить коротку інформацію про кожну із задач та підказки для користувача (рис. А.9).

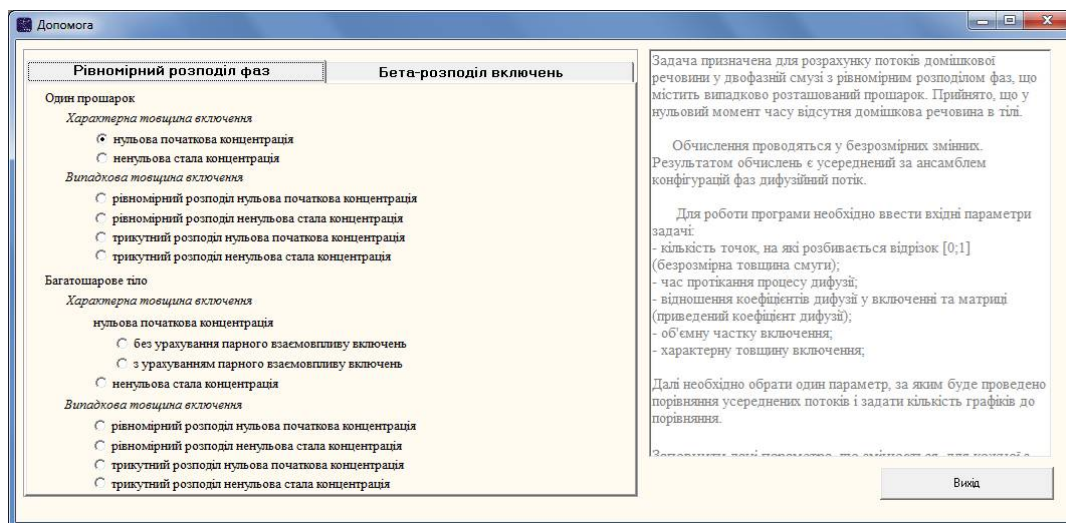


Рис. А.9. Пункт головного меню «*Допомога*» пакету програм «FlowRan»

Пункт головного меню «*Автори*» містить відомості про розробників пакету програм «FlowRan».

А.3 Програма розрахунку усередненого дифузійного потоку у шаруватій смугі з прошарками випадкової товщини за рівномірного розподілу фаз

Роботу модулів пакету «FlowRan» розглянемо на прикладі задачі дифузії домішки у багатшаровій смугі з рівномірним розподілом фаз за трикутного розподілу товщини включень при ненульовій початковій концентрації.

При виборі пункту «*Рівномірний розподіл фаз*», «*Багатшарове тіло. Випадкова товщина включень*», підпункту «*трикутний розподіл ненульова концентрація*» відкриється вікно «*Потік у шаруватій смугі з прошарками за трикутного розподілу товщини при ненульовій початковій концентрації. Рівномірний розподіл фаз*» (рис. А.10).

Це вікно складається з таких полів, які необхідно заповнити користувачеві (рис. А.10): «*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.

В поле «Вхідні дані» вносимо значення параметрів задачі (рис. А.10): N – кількість точок поділу проміжку; τ – 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.

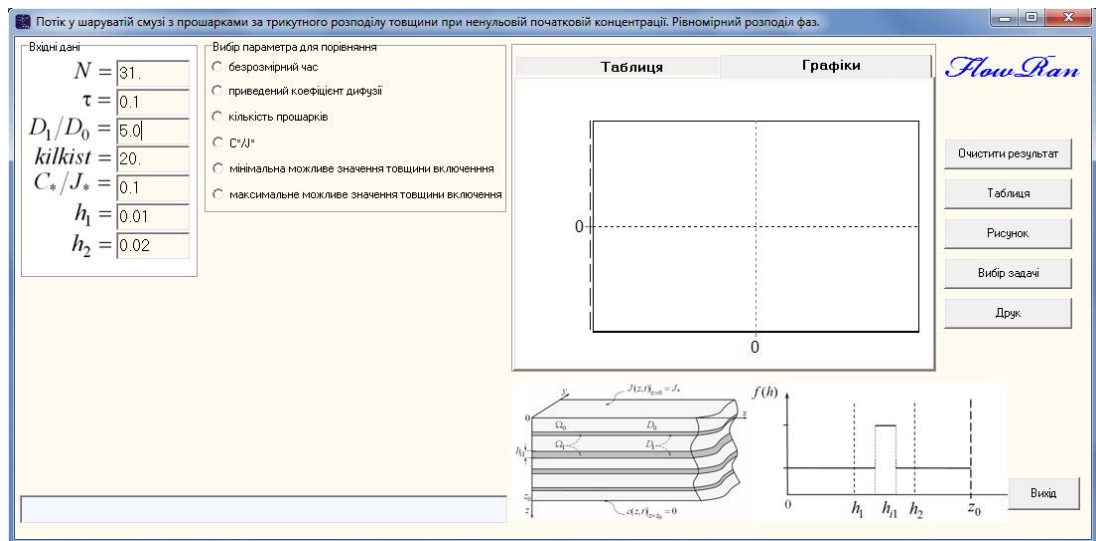


Рис. А.10. Вікно програми «Потік у шаруватій смужці з прошарками за трикутного розподілу товщини при ненульовій початковій концентрації. Рівномірний розподіл фаз»

Зауваження А.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 А.2: Параметр N визначає розбиття проміжка $[0;1]$ безрозмірної товщини шару ζ на точки ζ_i ($i=1, N$), в яких обчислюються значення дифузійного потоку за відповідними розрахунковими формулами.

Зауваження А.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.

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

Після вибору кількості графіків з'являється поле «**Значення порівняльного параметра**» для проведення почергового розрахунку усередненого потоку в двофазному шаруватому тілі (рис. А.11). Тут суцільними лініями відмічено усереднений потік, а штриховими – відповідний потік в однорідному шарі з характеристиками матриці. Це поле містить комірки, в які вносяться значення параметра для порівняння, та клавіші «**Крива 1**», ..., «**Крива 12**» для розрахунку та візуального представлення розв'язку задачі (рис. А.12). Для коректного відображення i -ї кривої потрібно двічі натиснути на клавішу «**Крива i** » ($i = 1, 2, \dots$).

Зауваження А.4: Кількість комірок, в які необхідно вносити значення параметра порівняння, і кнопок «**Крива i** », де «**Крива i** » ($i = \overline{1, k}$, k – задана кількість графіків для порівняння, $1 \leq k \leq 12$), відповідає кількості вибраних графіків в полі «**Кількість графіків для порівняння**».

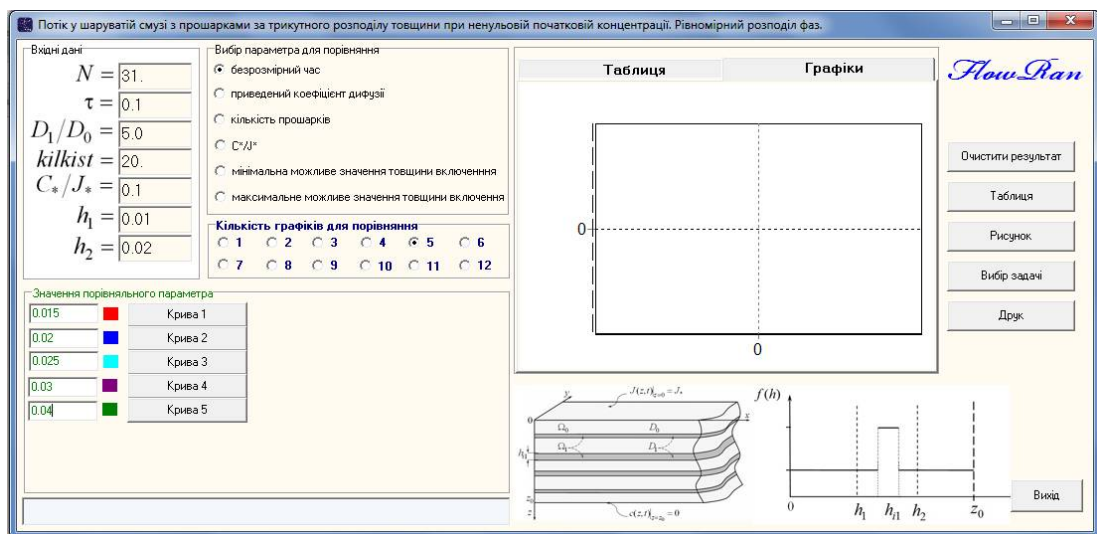


Рис. А.11. Приклад заповнення полів «**Кількість графіків для порівняння**» та «**Значення порівняльного параметра**»

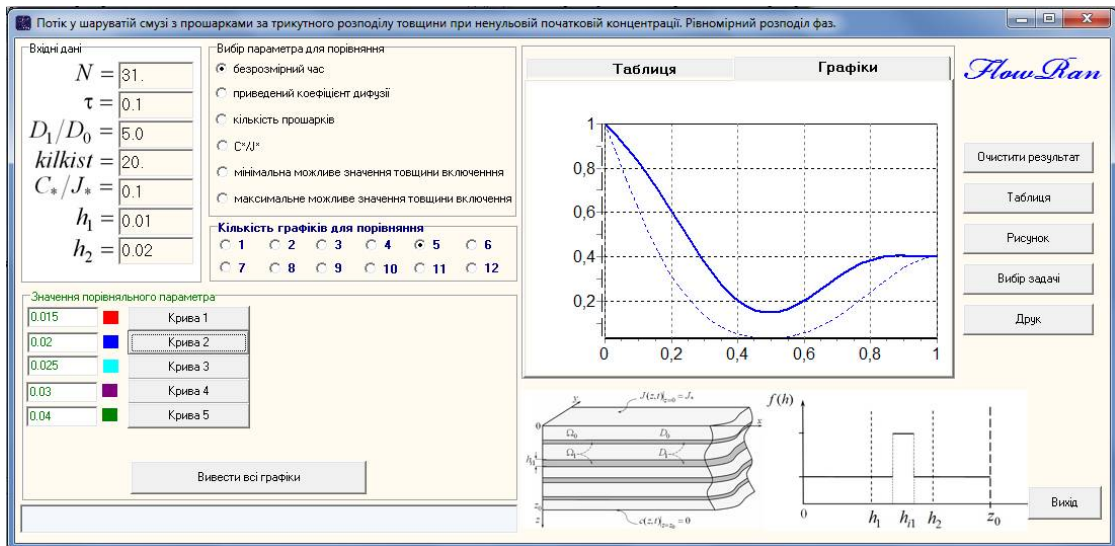


Рис. А.12. Приклад побудови «Кривої 2»

Поле «**Таблиця**» призначене для чисельного аналізу усереднених потоків маси для однорідного шару та багат шарового тіла (рис. А.13), яка візуалізує значення функцій $J_0(\zeta, \tau)/J_*$, $\langle J(\zeta, \tau) \rangle / J_*$ на різних безрозмірних глибинах ζ .

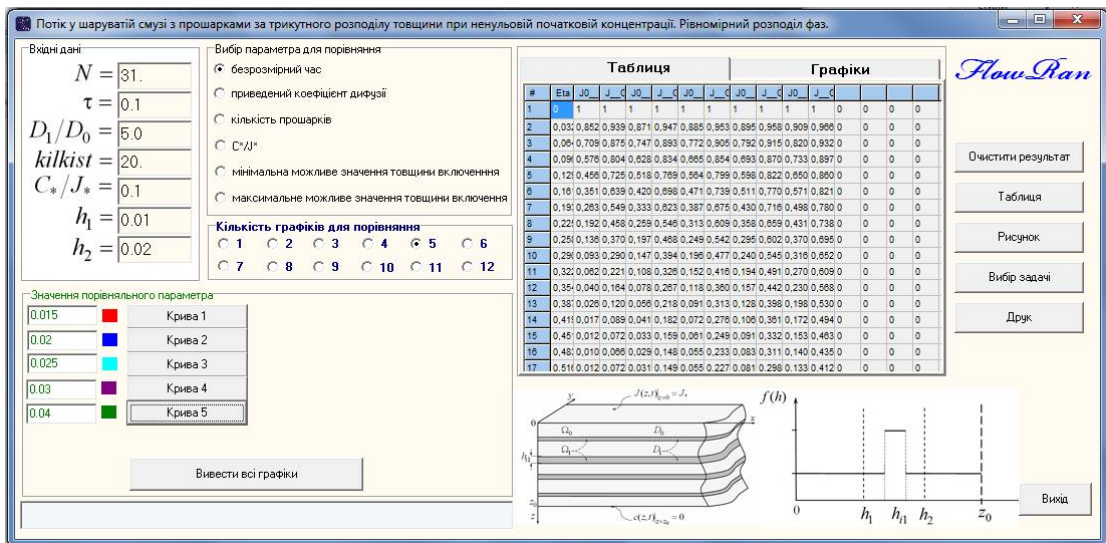


Рис. А.13. Приклад поля «Таблиця» після проведення обчислень за п'ятьма значеннями безрозмірного часу

Поле «**Графіки**» призначене для візуалізації розподілів дифузійних потоків, де вздовж осі абсцис відкладена безрозмірна просторова змінна ζ , 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 смузі 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 багат шаровому тілі (рис. А.14).

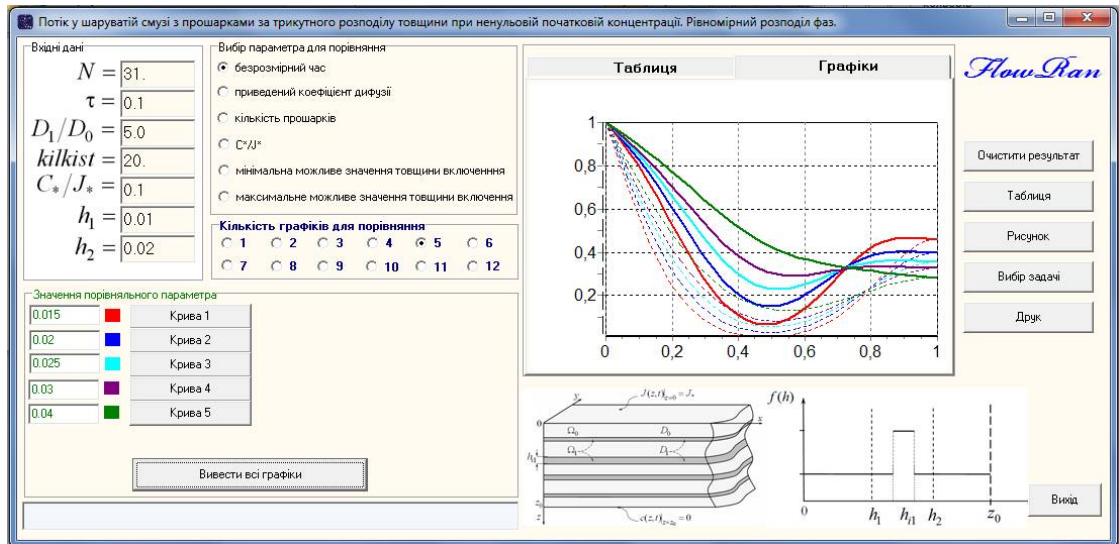


Рис. А.14. Виведення всіх графіків у поле «**Графіки**»

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 пакету програм «Flow-Ran» (рис. А.3), 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. А.15).

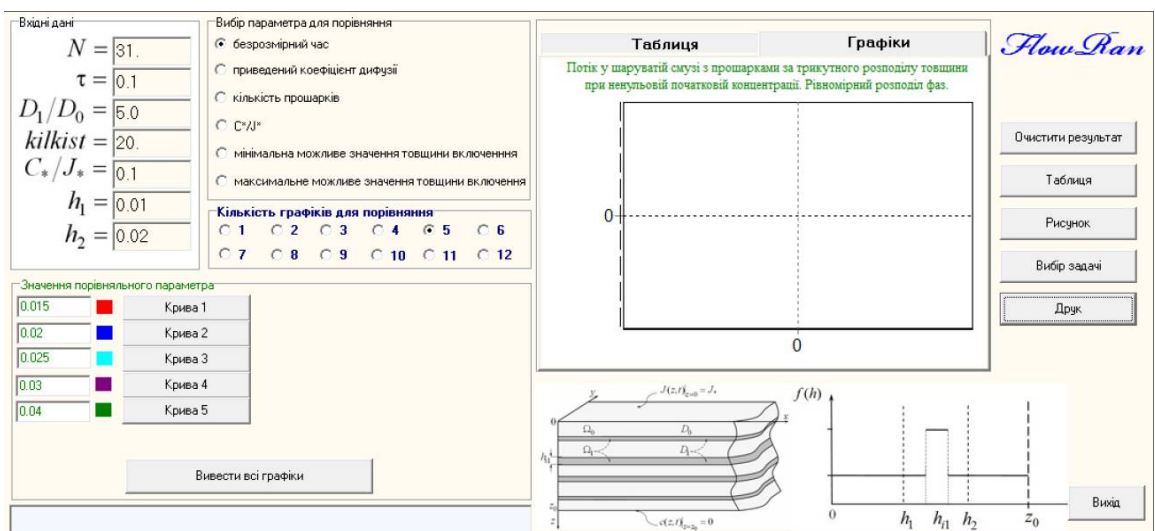


Рис. А.15. Приклад роздруку отриманих результатів клавішею «**Друк**»

Зауваження А.5: У випадку, коли задача не порахована хоча б при одному значенні параметра для порівняння, натиснення на клавішу **«Вивести всі графіки»** видасть повідомлення про помилку.

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»**.

Натиснувши на клавішу **«Вихід»**, користувач переходить у головне вікно пакету програм, де має можливість вибрати іншу задачу (рис. А.4).

А.4 Результати роботи модулів пакету програм для розрахунку усереднених потоків у структурах з рівномірним та бета-розподілами фаз

При виборі у головному меню пакету програм пункту із відповідною задачею відкриється безпосередньо робоче вікно модуля. Етапи виконання програм є аналогічні до програми **«Потік у шаруватій смузї з прошарками за трикутного розподілу товщини при ненульовій початковій концентрації. Рівномірний розподіл фаз»**, розглянутої у п. А.3, з єдиною відмінністю у вхідних даних, які необхідно задавати для кожної із задач.

Вхідними параметрами можуть бути: N – кількість точок поділу проміжку; τ – час; D_1/D_0 – відношення коефіцієнтів дифузії у включенні і матриці; h – характерна (середня) товщина включення; C_*/J_* – відношення початкової концентрації домішки в тілі до потоку на верхній границі (для задач зі сталою ненульовою концентрацією); v_1 – об'ємна частка включень (для багатошарових структур); h_1 та h_2 – мінімальне та максимальне можливі значення товщини включення (для задач із випадковою товщиною прошарків); $kilkist$ – кількість включень (для задач із випадковою товщиною прошарків).

Розглянемо приклади функціонування деяких програм.

Вибір у головному меню пакету програм пункту **«Рівномірний розподіл фаз»**, підпунктів **«Один прошарок. Випадкова товщина включення»**, **«рів-**

номірний розподіл ненульова стала концентрація» відкриває вікно програми *«Потік у смузі з прошарком за рівномірного розподілу товщини при ненульовій початковій концентрації. Рівномірний розподіл фаз»*.

На рис. А.16 показано результати роботи цієї програми для порівняння усереднених потоків за параметром – максимальне можливе значення товщини включення і задано 4 значення цього параметра.

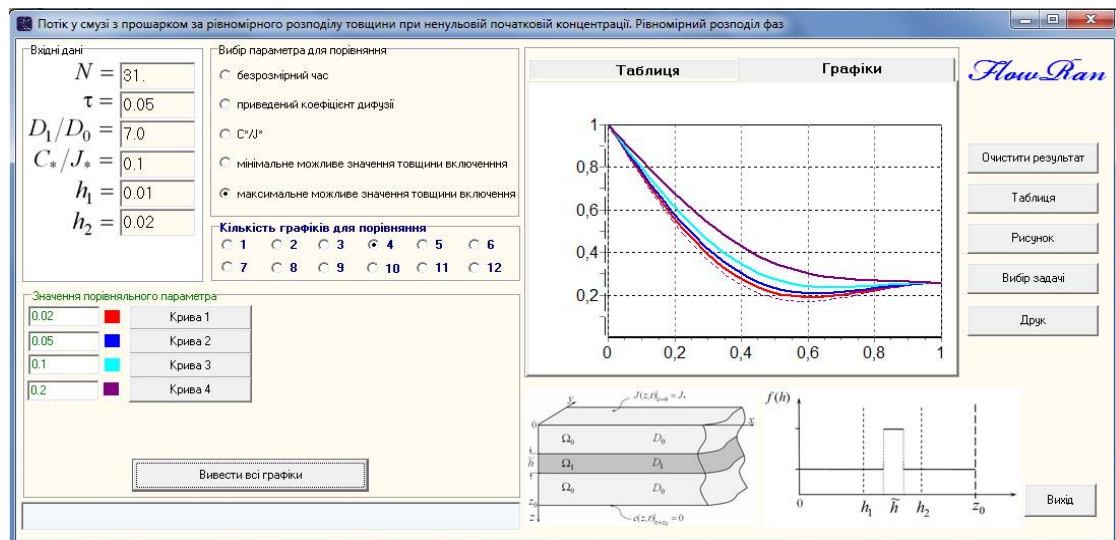


Рис. А.16. Приклад роботи програми *«Потік у смузі з прошарком за рівномірного розподілу товщини при ненульовій початковій концентрації. Рівномірний розподіл фаз»*

При виборі у головному меню пакету програм пункту *«Рівномірний розподіл фаз»*, підпунктів *«Багатошарове тіло. Характерна товщина включень»*, *«ненульова стала концентрація»* відкриється вікно програми *«Потік у шаруватій смузі з прошарками заданої товщини за ненульової початкової концентрації. Рівномірний розподіл фаз»*. Приклад роботи цієї програми наведено на рис. А.17, де в якості порівняльного параметра вибрано безрозмірний час та задано 6 значень цього параметра.

При виборі пункту головного меню *«Бета розподіл включень»*, *«Включення зосереджені біля верхньої границі»*, підпункту *«за нульової початкової концентрації»* відкриється вікно програми *«Потік у смузі з ймовірним розташуванням включень біля верхньої межі тіла за нульової початкової концентрації»*. На рис. А.18 показано приклад роботи програми для порівняння усереднених потоків за 5 значеннями параметра безрозмірний час.

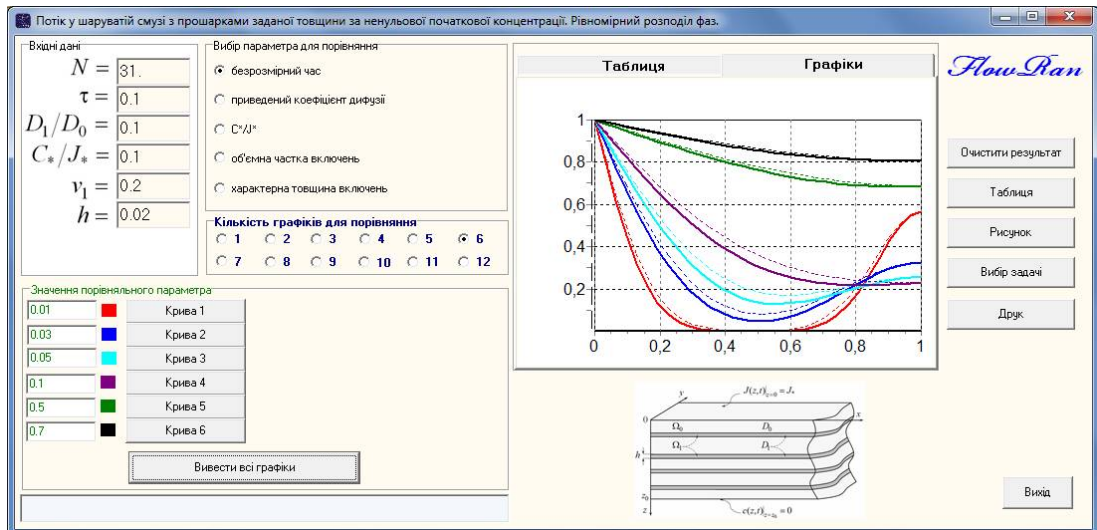


Рис. А.17. Приклад роботи програми «*Потік у шаруватій смузі з прошарками заданої товщини за ненульової початкової концентрації. Рівномірний розподіл фаз*»

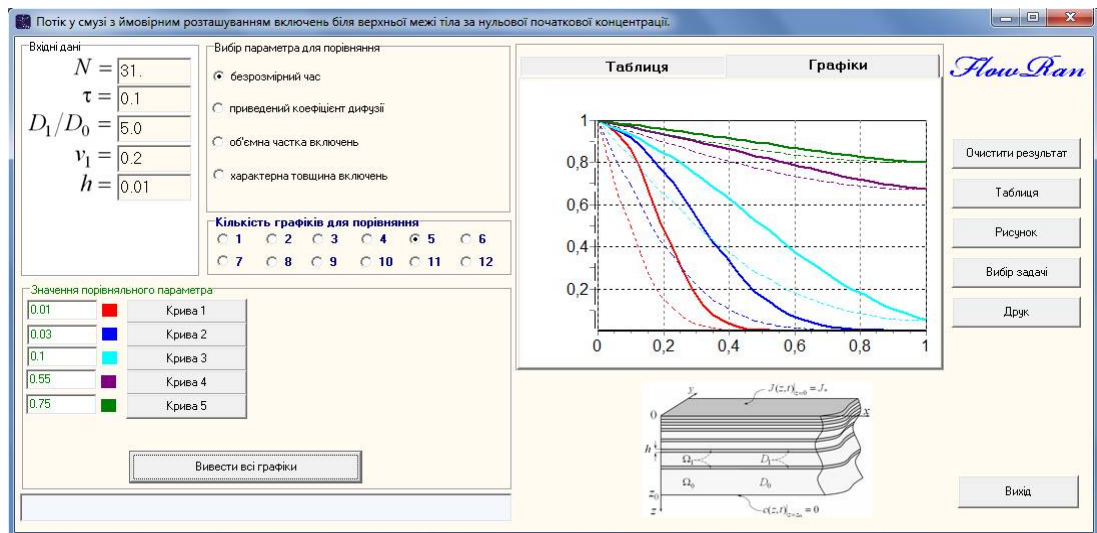


Рис. А.18. Приклад роботи програми «*Потік у смузі з ймовірним розташуванням включень біля верхньої межі тіла за нульової початкової концентрації*»

Зауваження 4.6. Час виконання програм із пункту «*Бета розподіл включень*» є більшим, ніж для програм із вкладки «*Рівномірний розподіл фаз*». Час обчислення потоку за одним значенням порівняльного параметра може сягати 30 секунд.

При виконанні розглянутих програм розрахунку усереднених потоків також справедливі зауваження А.1-А.5.

ДОДАТОК Б

**Акти про використання результатів
дисертаційної роботи**

“ЗАТВЕРДЖУЮ”

Директор Центру математичного моделювання
Інституту прикладних проблем механіки і
математики ім. Я.С.Підстригача НАН України



д.т.н. Я.Д.П'янило
2015 р.

АКТ ПРО ВИКОРИСТАННЯ

наукових результатів дисертаційної роботи Давидок Анастасії Євгенівни
в Центрі математичного моделювання Інституту прикладних проблем
механіки і математики ім. Я.С.Підстригача НАН України

Ми, що нижче підписалися, склали цей акт про те, що результати дисертаційної роботи Давидок А.Є. «Математичне моделювання дифузійних потоків у двофазних стохастично неоднорідних шаруватих структурах» використані в Центрі математичного моделювання ІППММ ім. Я.С.Підстригача НАН України під час виконання та звітування науково-дослідних робіт.

Давидок А.Є. розвинула підхід до математичного опису випадкових потоків домішкової речовини у двофазних тілах стохастично неоднорідної шаруватої структури, за яким крайові задачі дифузії формують безпосередньо для функції потоку маси. Рівняння дифузії для потоку мігруючих частинок отримала на основі рівняння балансу маси. Обґрунтувала крайові умови на потік, зокрема, для уникнення протиріч, наприклад, для запобігання випадку надходження в обмежене тіло необмеженої кількості речовини. Побудувала інтегро-диференціальне рівняння на функцію дифузійного потоку, еквівалентне вихідній крайовій задачі, розв'язок якого знайшла у вигляді інтегрального ряду Неймана. Сформулювала і довела теорему про абсолютну і рівномірну збіжність ряду Неймана, причому вперше для моделей дифузійних процесів у стохастично неоднорідних тілах, коли випадкова структура враховується у коефіцієнтах крайової задачі. Довела теорему існування розв'язку відповідного інтегро-диференціального рівняння. Провела усереднення стохастичного потоку домішкової речовини за ансамблем конфігурацій фаз для випадків, коли в початковий момент часу відсутня домішка в тілі або заданий її сталий ненульовий початковий розподіл. Знайшла розрахункові формули для усередненого потоку маси в шарі з випадково розташованим прошарком та багатошаровій смугі з рівномірним розподілом фаз, а також, коли область найімовірнішого розташування включень зосереджена біля поверхні шару, де діє джерело маси, в околі іншої межі тіла і посередині смуги. На цій основі створила програмне забезпечення і провела комп'ютерне моделювання усереднених дифузійних потоків у двофазних шаруватих тілах. Встановила, що на поведінку і значення усередненого дифузійного потоку найбільше впливає відношення коефіцієнтів дифузії домішки у включеннях і матриці, тоді як від характерної товщини прошарків усереднений потік практично не залежить. Показала, що незалежно від типу розподілу включень, якщо коефіцієнт дифузії домішки у включенні є більшим за коефіцієнт дифузії у основній фазі, дифузійний потік в неоднорідному

тілі завжди менший за потік в тілі без прошарків, і навпаки. (НДР «Розробка методів математичного моделювання нелінійних нерівноважних процесів у багатофазних тілах періодичної і стохастичної структури і створення програмного забезпечення», № ДР 0111U009748).


В рамках науково-дослідної роботи «Створення і дослідження математичних моделей процесів переносу у регулярних і нерегулярних дисперсних структурах, континуальних моделей наномеханіки і математичних методів обробки експериментальних даних» (№ ДР 0115U003566), Давидок А.Є. на основі розвинутого підходу дослідила випадкові дифузійні потоки у двофазній стохастично неоднорідній смузі з урахуванням парного взаємовпливу включень за рівномірного розподілу фаз і для одного з часткових випадків бета-розподілу включень, коли область найбільш ймовірного розташування підшарів знаходиться біля поверхні тіла, де діє джерело маси. Отримала відповідні розрахункові формули, розробила програмні модулі та провела числовий аналіз третього члена ряду Неймана, який описує парний взаємовплив підшарів. Встановила, що ефект парного взаємовпливу шарів є найвідчутнішим для великих значень об'ємної частки включень та значного ущільнення включень у приповерхневій області в околі дії джерела маси. Показала, що умова наявності в тілі превалюючої фази не є необхідною, тобто при дослідженні потоків у випадково неоднорідних шаруватих тілах врахування двох перших членів ряду Неймана є достатнім як для співвимірних об'ємних часток фаз, так і при наявності в структурі матриці. Також розв'язала крайові задачі масоперенесення домішкової речовини для функції потоку маси у двофазній смузі зі стохастично розташованим прошарком випадкової товщини та у багатошаровій смузі. Розв'язки знайдено у вигляді ряду Неймана, що дозволило провести процедури усереднення за ансамблем конфігурацій фаз та за випадковою товщиною включень. Розглянула випадки, коли товщина прошарків є випадковою величиною з рівномірним або трикутним розподілами на заданому проміжку. Одержала розрахункові формули для усередненого дифузійного потоку за нульової та ненульової сталої початкових концентрацій частинок. Встановила залежність усередненого дифузійного потоку від характеристик включення. Зокрема, показала, що у випадку більшого коефіцієнта дифузії домішки у прошарку ніж у матриці зміщення інтервалу ймовірних значень товщини прошарків до 1 призводить до збільшення усередненого дифузійного потоку, а розширення або звуження інтервалу ймовірних значень товщини включень в околі однієї і тієї ж точки координат майже не впливає на значення усередненого потоку.

Старший науковий співробітник,
д.ф.-м.н., ст.н.с.



Грицина О.Р.

Вчений секретар
к.т.н.



Лянце Г.Т.

“Затверджую”

Заступник директора з наукової роботи
Фізико-механічного інституту
ім. Г.В. Карпенка НАН України
доктор технічних наук, ст.н.с.

О.І. Балицький
2015 р.



АКТ ПРО ВИКОРИСТАННЯ

наукових результатів дисертаційної роботи Давидок Анастасії Євгенівни
у Фізико-механічному інституті ім. Г.В. Карпенка НАН України

Цей акт складений про те, що результати, отримані у дисертаційній роботі аспіранта Інституту прикладних проблем механіки і математики ім. Я.С. Підстригача НАН України А.Є. Давидок, пов'язані з математичним моделюванням процесів масоперенесення в біметалічних композитах за недостатньої інформації про геометричні параметри структури, що призводить до стохастичності досліджуваних полів. Отримано нове диференціальне рівняння на функцію потоку маси та обґрунтовано відповідні крайові умови. На основі розвинуеного підходу отримано розрахункові формули для усередненого потоку домішкової речовини, що мігрує в шаруватому тілі з рівномірним розподілом фаз, а також з найбільш ймовірним розташуванням включень в околі однієї з поверхонь тіла. Створено програмне забезпечення та проведені розрахунки усереднених дифузійних потоків атомів вуглецю та водню при їх міграції в шаруватій структурі $\alpha Fe - Ni$. Наявність атомів вуглецю зміцнює поверхню такого композиту, а атоми водню підвищують крихкість матеріалу, проте композит стає легшим. Ці результати використані для розрахунку розподілів потоків вуглецю і водню у композиції сталь 38ХНЗМФА–Ni при виконанні НДР № К-1-11/2013 «Оцінювання експлуатаційної довговічності воднево-охолоджувальних швидкохідних та тихохідних турбоагрегатів для Хмельницької АЕС на основі експериментально-розрахункових підходів механіки руйнування та натурних випробувань».

Зав. лабораторії водневої стійкості
конструкційних сплавів
д.т.н., проф.



О.І. Балицький

Старший науковий співробітник
к.т.н.



Л.М. Іваськевич

“ЗАТВЕРДЖУЮ”

Генеральний директор

ТОВ «Пріма-Сервіс» ЛТД

Т.І Євмененко

« 28 » січня 2015 р.

АКТ ПРО ВПРОВАДЖЕННЯ

наукових результатів дисертаційної роботи

Давидок Анастасії Євгенівни у ТОВ «Пріма-Сервіс» ЛТД

Ми, що нижче підписались, склали цей акт про те, що результати дисертаційної роботи аспіранта Інституту прикладних проблем механіки і математики ім. Я.С. Підстригача НАН України Давидок Анастасії Євгенівни на здобуття наукового ступеня кандидата технічних наук впроваджені ТОВ «Пріма-Сервіс» ЛТД (м. Галич, Івано-Франківська обл.) на об'єкті «Очисні споруди потужністю $Q_{\max} - 10000,0 \text{ м}^3/\text{добу}$ очистки міських комунально-побутових стічних вод, каналізаційних стоків від баз відпочинку на березі моря і довезених асенізаційним транспортом з не каналізованих територій м. Приморськ Запорізької обл.». Давидок А.Є. запропонувала математичну модель і розробила схему дослідження процесів масопереносу у випадкових шаруватих структурах. На цій основі розробила пакет програм для кількісної оцінки потоків забруднюючих речовин у шаруватих тілах. При цьому така вимірювальна величина, як поверхневий потік є вхідним параметром комп'ютерного моделювання.

Наукові результати, на цих спорудах, використані в сегменті способу очистки стоків в біологічних реакторах. Зокрема, виведено і встановлено алгоритм зв'язку між затратами на виробництво даних установок та ступенем їх сучасної технологічності в забезпеченні заданих показників і параметрів очищення вод. Розроблені Давидок А.Є. математична модель, метод побудови розв'язку, пакет програм, проведені розрахунки залежності технологічного періоду продуктивного функціонування біологічного реактора від швидкості потоків забруднюючих речовин, сумарного об'єму його відсіків денітрифікації, нітрифікації, сепарації та часових параметрів в цілому ефективної роботи реактора, підводять до необхідності перегляду відповідних стандартів з метою їх уточнення.

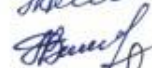
Генеральний директор

Начальник філії виробництва очисних споруд

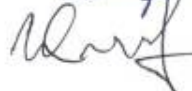
Головний інженер проектів



Т. Євмененко



Т. Лесів



—В.Петрик

Затверджую
Проректор з наукової роботи
ДВНЗ «Прикарпатський національний
університет імені Василя Стефаника»
д.ф.-м.н., проф.


А. В. Загороднюк
«18» травня 2015р.



АКТ ПРО ВИКОРИСТАННЯ

наукових результатів дисертаційної роботи
Давидок Анастасії Євгенівни
у навчальному процесі

Ми, що нижче підписались, склали цей акт про використання результатів наукових досліджень аспірантки Інституту прикладних проблем механіки і математики ім. Я. С. Підстригача НАН України А. Є. Давидок, які увійшли до дисертаційної роботи на здобуття наукового ступеня кандидата технічних наук, в навчальному процесі ДВНЗ «Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника».

Аспірантка А. Є. Давидок запропонувала підхід для математичного моделювання дифузійних потоків домішкової речовини в тілах багатофазної випадково неоднорідної структури, за яким крайові задачі дифузії формулюються для функції потоку, на одній з поверхонь шару задаються граничні умови на потік, а на іншій – на концентрацію мігруючої речовини. Вихідній крайовій задачі ставиться у відповідність еквівалентне інтегро-диференціальне рівняння, яке розв'язується методом ітерацій, а розв'язок отримується у вигляді ряду Неймана, що дає можливість проводити процедуру усереднення за ансамблем конфігурацій фаз, отримувати розрахункові формули для дифузійного потоку домішкової речовини за різних ймовірнісних розподілів включень (рівномірного, часткових випадків бета-розподілу, що відповідають структурі тіла, у якій область ймовірного розташування включень знаходиться біля границі шару, де діє джерело маси, в околі іншої поверхні або посередині тіла). Дані аспекти дисертаційної роботи А. Є. Давидок були використані при розробці спеціальних курсів «Математичне моделювання процесів дифузії в неоднорідних середовищах», «Математичні моделі фізичних процесів» та «Математичне моделювання дискретно-неперервних систем» для студентів, які навчаються за спеціальністю «Прикладна математика», а також при виконанні ними дипломних та магістерських робіт.

Декан факультету математики
та інформатики, д.ф.-м.н., проф.

 / В.М. Пилипів/

Доцент кафедри диференціальних рівнянь
і прикладної математики, к.ф.-м.н.

 /В.В. Мазуренко/

Доцент кафедри інформатики,
к.т.н.

 /О.О. Власій/