ВІСНИК НАЦІОНАЛЬНОГО УНІВЕРСИТЕТУ
"ЛЬВІВСЬКА ПОЛІТЕХНІКА"
"Фізико-математичні науки"
Вип.740 № 740, (2012) с. 65–78

JOURNAL OF NATIONAL UNIVERSITY
"LVIVSKA POLITECHNIKA"
"Physical & mathematical sciences"
Vol.740 No 740, (2012) 65–78

КОРЕЛЯЦІЙНА ФУНКЦІЯ ТА ДИСПЕРСІЯ ВИПАДКОВОГО ДИФУЗІЙНОГО ПОЛЯ КОНЦЕНТРАЦІЇ В ПІВПРОСТОРІ З ЕКСПОНЕНЦІАЛЬНИМ РОЗПОДІЛОМ ШАРУВАТИХ ВКЛЮЧЕНЬ

Є.Я. Чапля[a, b], О.Ю. Чернуха[a], Ю.І. Білущак[a]

[a] *Центр математичного моделювання ІППММ ім.Я.С.Підстригача НАН України*
вул. Дж. Дудаєва 15, 79005, Львів, Україна
[b] *Інститут механіки і прикладної інформатики Університету Казиміра Великого в Бидгощі*
вул. М. Коперніка 1, 85-064, Бидгощ, Польща

(Отримано 26 червня 2012 р.)

Досліджено процеси дифузії домішкової речовини у двофазному шаруватому півпросторі з урахуванням випадкового розташування підшарів. Контактна задача за допомогою теорії узагальнених функцій зведена до задачі масопереносу в усій області тіла. Сформульовано еквівалентне інтегродиференціальне рівняння, розв'язок якого побудований у вигляді інтегрального ряду Неймана. Усереднення отриманого розв'язку проведено за ансамблем конфігурацій фаз з експоненціальною функцією розподілу включень. Визначено дисперсію поля концентрації частинок та двоточкову функцію кореляції (автокореляції) поля для процесу дифузії в шаруватому півпросторі з експоненціальним розподілом включень.

Ключові слова: дифузія, випадково неоднорідна шарувата структура, експоненціальний розподіл, дисперсія поля, функція кореляції

2000 MSC: 35K20; 45R05; 60G60; 93A30

УДК: 517.958:532.72

Вступ

В основі низки технологій, зокрема, гомогенізації сплавів, металізації та зварювання матеріалів, спікання порошків, хіміко-термічної обробки металів (азотування і цементування сталей), лежать процеси дифузії. Все більшого значення набуває вивчення процесів дифузії із створенням наноструктур та композитних матеріалів із заданими властивостями.

Математичний опис цих процесів ґрунтується на відповідних задачах математичної фізики для конкретних фізичних систем. До того ж у разі дослідження шаруватих структур часто невідомі їх геометричні параметри [1, 2], проте достатньо повно встановлені дифузійні властивості окремих елементів та умови контакту між ними. У зв'язку з цим виникає необхідність оцінити вплив просторових реалізацій структури середовища [3] та умов міжфазного контакту на процес дифузії.

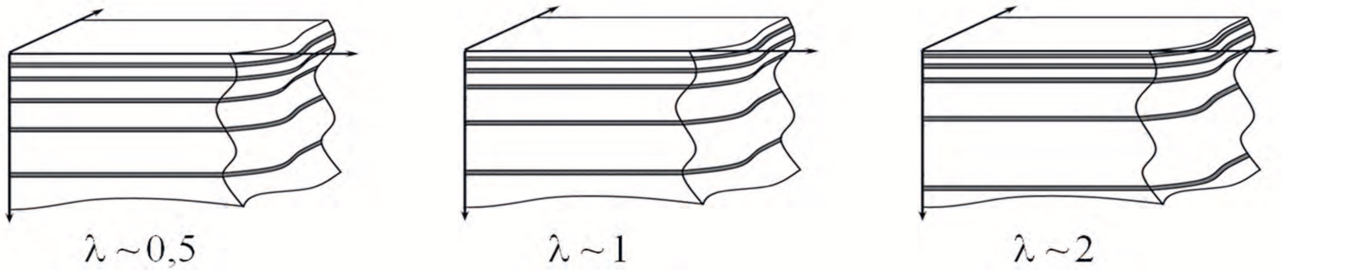
У роботі розв'язується контактно-крайова задача дифузії у двофазному випадково неоднорідному багатошаровому півпросторі з експоненціальним розподілом включень. Рівняння дифузії в контактуючих областях формулюються з використанням кінетичних коефіцієнтів переносу, що при зведенні задачі до еквівалентного інтегро-диференціального рівняння призводить до врахування похідної за часом в його операторі. Визначається дисперсія поля концентрації мігруючої речовини та двоточкова кореляційна функція.

Об'єкт дослідження та постановка задачі

Нехай домішкові частинки одного хімічного сорту мігрують у шаруватому півпросторі, який складається з підшарів двох типів (фаз). Вважаємо, що дифузійні властивості фаз можуть істотно відрізнятися. Приймаємо, що об'єм, який займає одна з фаз (матриця), є набагато більшим ніж об'єм іншої фази (включень). При цьому координати включень, а отже і підшарів матриці, є невідомими, тобто структура тіла є випадково неоднорідною. Нехай включення розташовані в області тіла за експоненціальним розподілом [4] (рис. 1). Густина експоненціального розподілу має вигляд

$$f(z) = \begin{cases} \lambda e^{-\lambda z}, & z \geq 0; \\ 0, & z < 0, \end{cases} \qquad (1)$$

де λ – масштабний параметр.



Можливі реалізації структур багатошарового тіла за різних значень масштабного параметра функції експоненціального розподілу включень

Зазначимо, що зі збільшенням масштабного параметра λ у при поверхневій області тіла включення ущільнюються (див. рисунок). А далі проміжок між включеннями збільшується, тобто зменшується ймовірність знаходження прошарку.

Процес міграції домішки в такому тілі описують рівняння дифузії, сформульовані для кожної фази зокрема. А саме:

$$\rho_j \frac{\partial c_j(z,t)}{\partial t} = d_j \frac{\partial^2 c_j(z,t)}{\partial z^2}, \quad z \in \Omega_j = \bigcup_{i=1}^{n_j} \Omega_{ij},$$

$$t \in [0, \bar{\tau}] \quad (\bar{\tau} < \infty), \quad j = 0, 1, \tag{2}$$

де $c_j(z,t)$ – концентрація домішкових частинок у фазі j; ρ_j – густина, d_j – кінетичний коефіцієнт переносу в області Ω_j, яку займає фаза j; n_j – кількість підшарів фази j, Ω_{ij} – i-та однозв'язна область фази j,$i = \overline{1, n_j}$, $j = 0,\ 1$; z – просторова координата, t – час.

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

$$c_0(z,t)|_{z=0} = c^* \equiv const, \quad c_0(z,t)|_{z\to\infty} = 0. \tag{3}$$

Також накладена нульова початкова умова:

$$c_0(z,t)|_{t=0} = c_1(z,t)|_{t=0} = 0. \tag{4}$$

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

$$k_0 c_0|_{z=z_l-0} = k_1 c_1|_{z=z_l+0},$$

$$\rho_0 d_0 \left.\frac{\partial c_0}{\partial z}\right|_{z=z_l-0} = \rho_1 d_1 \left.\frac{\partial c_1}{\partial z}\right|_{z=z_l+0}; \tag{5}$$

$$k_1 c_1|_{z=z_l+h_{l1}-0} = k_0 c_0|_{z=z_l+h_{l1}+0},$$

$$\rho_1 d_1 \left.\frac{\partial c_1}{\partial z}\right|_{z=z_l+h_{l1}-0} = \rho_0 d_0 \left.\frac{\partial c_0}{\partial z}\right|_{z=z_l+h_{l1}+0}, \tag{6}$$

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

Зазначимо, що за такої постановки задачі випадковими величинами є границі контакту прошарків $z = z_l$ та $z = z_l + h_{l1}$, тобто межі областей Ω_{i0} та Ω_{i1}, які є внутрішніми для тіла. Це, своєю чергою, призводить до стохастичності поля концентрації домішкової речовини, яка мігрує в тілі.

Побудова рівняння масоперенесення для тіла, загалом

Розв'язок сформульованої контактно-крайової задачі (2)–(6) будемо шукати у вигляді інтегрального ряду Неймана [7], оскільки таке подання випадкових полів є зручним для проведення процедури усереднення за ансамблем конфігурацій фаз. Для цього введемо у розгляд випадкову функцію просторової координати $c(z,t)$, яка описує поле концентрації в усьому тілі:

$$c(z,t) = \begin{cases} c_j(z,t) - \text{розв'язки рівнянь (2)}, & z \in \Omega_j; \\ \text{контактні умови (5)}, & z = z_l; \\ \text{контактні умови (6)}, & z = z_l + h_{l1}. \end{cases} \tag{7}$$

Знайдемо похідну за просторовою координатою від функції (7), беручи до уваги, що функція $c(z,t)$ в області тіла має розриви I-го роду (перші співвідношення умов (5), (6)). Враховуючи формули диференціювання розривних функцій [8], для цього випадку маємо

$$\frac{\partial c}{\partial z} = \left\{\frac{\partial c}{\partial z}\right\}_{z\in\Omega_{ij}} + \sum_{l=1}^{n_1} \left([c(z,t)]_{z=z_l}\, \delta(z - z_l) + \right.$$
$$\left. + [c(z,t)]_{z=z_l+h_{l1}}\, \delta(z - (z_l + h_{l1})) \right), \tag{8}$$

де $\{\ldots\}_{z\in\Omega_{ij}}$ – області неперервності функції, $[\ldots]_{z=z_l}$ – стрибок функції I-го роду в точці $z = z_l$, $\delta(z)$ – дельта-функція Дірака.

Знайдемо другу похідну за змінною z від функції $c(z,t)$. Оскільки $\partial c(z,t)/\partial z$ теж має розриви I-го роду (другі співвідношення умов (5), (6)), то для диференціювання функції (8) також використовуємо формули диференціювання розривних функцій [8]. Маємо

$$\frac{\partial^2 c}{\partial z^2} = \left\{\frac{\partial^2 c}{\partial z^2}\right\}_{z\in\Omega_{ij}} +$$

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

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

$$\left. + [c(z,t)]_{z=z_l+h_{l1}}\delta'\left(z-(z_l+h_{l1})\right)\right), \qquad (9)$$

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

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

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

$$d(z) = \sum_{i=1}^{n_1}\{d_0\}_{z\in\Omega_{i0}} + \sum_{i=1}^{n_1}\{d_1\}_{z\in\Omega_{i1}}. \qquad (10)$$

При цьому на границях контакту $z = z_l$ і $z = z_l + h_{l1}$ відбувається стрибок цих коефіцієнтів

$$[\rho(z)]_{z=z_l} = -[\rho(z)]_{z=z_l+h_{l1}} = \rho_1 - \rho_0,$$

$$[d(z)]_{z=z_l} = -[d(z)]_{z=z_l+h_{l1}} = d_1 - d_0, \quad l = \overline{1, n_1}.$$

З урахуванням співвідношень (9), (10) рівняння дифузії для тіла, загалом, запишемо у вигляді:

$$\rho(z)\frac{\partial c}{\partial t} = d(z)\left[\left\{\frac{\partial^2 c}{\partial z^2}\right\}_{z\in\Omega_{ij}} +\right.$$

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

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

$$\left.\left. + [c(z,t)]_{\ z=z_l+h_{l1}}\delta'\left(z-(z_l+h_{l1})\right)\right)\right]. \qquad (11)$$

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

Зведення крайової задачі дифузії до інтегродиференціального рівняння

Введемо в розгляд випадкову функцію просторової координати ("функцію структури") [9]

$$\eta_{ij}(z) = \begin{cases} 1, & z\in\Omega_{ij}; \\ 0, & z\notin\Omega_{ij}. \end{cases} \qquad (12)$$

Причому

$$\sum_{j,i}\eta_{ij}(z) = 1, \qquad (13)$$

тобто виконується умова суцільності тіла. У випадку, який розглядається (одновимірний за просторовою координатою, тобто шарувате тіло), функцію форми (12) можна подати як різницю двох випадкових функцій Хевісайда [10].

Коефіцієнти рівняння (11) запишемо через функцію (12)

$$\rho(z) = \sum_{j=0}^{1}\sum_{i=1}^{n_j}\rho_j\eta_{ij}(z), \quad d(z) = \sum_{j=0}^{1}\sum_{i=1}^{n_j}d_j\eta_{ij}(z) \quad (14)$$

і підставимо таке подання (14) в рівняння (11). Тоді з використанням умови (13) маємо

$$\sum_{j=0}^{1}\sum_{i=1}^{n_j}\rho_j\eta_{ij}(z)\left\{\frac{\partial c}{\partial t}\right\}_{z\in\Omega_{ij}} =$$

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

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

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

$$\left. + [c(z,t)]_{\ z=z_l+h_{l1}}\delta'\left(z-(z_l+h_{l1})\right)\right]. \qquad (15)$$

Якщо позначити оператор рівняння (15) через $L(z,t)$, тобто

$$L(z,t) \equiv \sum_{j=0}^{1}\sum_{i=1}^{n_j}\rho_j\eta_{ij}(z)\left\{\frac{\partial}{\partial t}\right\}_{z\in\Omega_{ij}} -$$

$$-\sum_{j=0}^{1}\sum_{i=1}^{n_j}\left[d_j\eta_{ij}(z)\left\{\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right\}_{z\in\Omega_{ij}} +\right.$$

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

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

$$\left.\left. + [\ ]_{\ z=z_l+h_{l1}}\delta'\left(z-(z_l+h_{l1})\right)\right)\right], \qquad (16)$$

тоді рівняння (15) можна подати у вигляді

$$L(z,t)c(z,t) = 0. \tag{17}$$

У рівнянні (17) додамо і віднімемо детермінований оператор дифузії $L_0(z,t) = \rho_0 \partial/\partial t - d_0 \partial^2/\partial z^2$, коефіцієнти якого є характеристиками матеріалу фази Ω_0. Тоді маємо

$$L_0(z,t)c(z,t) = L_s(z,t)c(z,t), \tag{18}$$

де $L_s(z,t) = L_0(z,t) - L(z,t)$ – оператор, який з використанням умови (13) можна подати так:

$$L_s(z,t) = (\rho_0 - \rho_1)\sum_i^{n_1} \eta_{i1}(z)\left\{\frac{\partial}{\partial t}\right\}_{z\in\Omega_{ij}} -$$

$$-(d_0 - d_1)\sum_i^{n_1} \eta_{i1}(z)\left\{\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right\}_{z\in\Omega_{ij}} -$$

$$-\sum_{j=0}^{1}\sum_i^{n_1} d_j \eta_{ij}(z)\left[\sum_l^{n_1}\left[\frac{\partial}{\partial z}\right]_{z=z_l}\delta(z-z_l) -\right.$$

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

$$\left.[\;]_{z=z_l+h_{l1}}\delta'(z-(z_l+h_{l1}))\right]. \tag{19}$$

Вважаємо праву частину рівняння (18) джерелом, тобто неоднорідність середовища розглядаємо як внутрішні джерела. Тоді розв'язок крайової задачі (18), (3), (4) можна подати у вигляді суми розв'язку однорідної крайової задачі і згортки функції Гріна з джерелом:

$$c(z,t) = c_0(z,t) +$$

$$+\int_0^t\int_0^\infty G(z,z',t,t')L_s(z',t')c(z',t')dz'dt', \tag{20}$$

де $c_0(z,t)$ – розв'язок однорідного рівняння дифузії з коефіцієнтами, які є характеристиками матриці Ω_0, за крайових умов (3), (4), тобто [11]

$$c_0(z,t) = c_* erfc\left\{z\sqrt{\rho_0/4d_0 t}\right\}; \tag{21}$$

$G(z,z',t,t')$– функція Гріна задачі (18), (3), (4). Функція Гріна є розв'язком відповідної крайової задачі з точковим джерелом і нульовими крайовими умовами:

$$\rho_0\frac{\partial G(z,z',t,t')}{\partial t} - d_0\frac{\partial^2 G(z,z',t,t')}{\partial z^2} = \delta(t-t')\delta(z-z'); \tag{22}$$

$$G(z,z',t,t')|_{z=0} = G(z,z',t,t')|_{z\to\infty} = 0,$$

$$G(z,z',t,t')|_{t=0} = 0. \tag{23}$$

Розв'язком задачі (22), (23) є функція [5]

$$G(z,z',t,t') = \frac{\theta(t-t')}{2\sqrt{\pi\rho_0 d_0(t-t')}}\times$$

$$\times\left(\exp\left(-\frac{(z-z')^2\rho_0}{4d_0(t-t')}\right) - \exp\left(-\frac{(z+z')^2\rho_0}{4d_0(t-t')}\right)\right). \tag{24}$$

Отже, ми побудували інтегродиференціальне рівняння (20), еквівалентне вихідній контактно-крайовій задачі. Рівняння (20) з випадковим ядром є рівнянням Вольтерра II-го роду за часовою змінною і Гаммерштейна за просторовою.

Ряд Неймана. Усереднення поля концентрації за ансамблем конфігурацій фаз

Розв'язок інтегродиференціального рівняння (20) шукаємо у вигляді ряду Неймана [7, 9], який будуємо ітеруванням співвідношення (20).

Оскільки рівняння (20) справедливе для всіх точок області $\{t\in[0;\bar\tau],\ z\in[0;\infty)\}$, то воно справджується і для $z = z'$, $t = t'$. Тоді

$$c(z',t') = c_0(z',t') +$$

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

Підставимо цей вираз у праву частину (20), отримаємо

$$c(z,t) = c_0(z,t) +$$

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

$$+\int_0^t\int_0^\infty G(z,z',t,t')L_s(z',t')\times$$

$$\times\int_0^{t'}\int_0^\infty G(z',z'',t',t'')L_s(z'',t'')c(z'',t'')dz''dt''dz'dt'. \tag{25}$$

Запишемо значення поля концентрації $c(z,t)$ у точці (z'',t'') і підставимо його у праву частину (25), тоді одержимо другу ітерацію. Повторюючи таку процедуру нескінченну кількість разів, отримаємо інтегральний ряд Неймана, а саме:

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

$$+ \int_0^t \int_0^\infty G(z,z',t,t')L_s(z',t') \times$$

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

$$+ \int_0^t \int_0^\infty G(z,z',t,t')L_s(z',t') \int_0^{t'} \int_0^\infty G(z',z'',t',t'') \times$$

$$\times L_s(z'',t'') \int_0^{t''} \int_0^\infty G(z'',z''',t'',t''')L_s(z''',t''') \times$$

$$\times c_0(z''',t''')dz'''dt'''dz''dt''dz'dt' + \ldots . \qquad (26)$$

Надалі для знаходженння середнього поля концентрації домішкової речовини обмежимося першими двома членами ряду Неймана.

Врахувавши вигляд оператора $L_s(z',t')$ (19) і неперервність функції концентрації $c_0(z,t)$ на всьому проміжку, отримаємо наближену формулу для випадкового поля концентрації домішкової речовини:

$$c(z,t) \approx c_0(z,t) +$$

$$+ \int_0^t \int_0^\infty G(z,z',t,t') \sum_{i=1}^{n_1} \left[(\rho_0 - \rho_1) \frac{\partial c_0(z',t')}{\partial t'} - \right.$$

$$\left. -(d_0 - d_1) \frac{\partial^2 c_0(z',t')}{\partial z'^2} \right] \eta_{i1}(z')dz'dt'. \qquad (27)$$

Усереднимо вираз (27) за ансамблем конфігурацій фаз з експоненціальною функцією розподілу включень (1).

Оскільки $c_0(z,t)$ є невипадковою функцією, то

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

Усереднимо другий доданок виразу (27). Врахуємо, що

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

$$= \begin{cases} 1, & z' - z_{i1} \in [0;\ h] \\ 0, & z' - z_{i1} \notin [0;\ h] \end{cases} =$$

$$= \eta_{i1}(z' - z_{i1}), \quad (i = \overline{1, n_1}) \qquad (28)$$

і в підінтегральному виразі співвідношення (27) від випадкових величин (координат границь контакту z_{i1}, $i = \overline{1, n_1}$) залежить тільки функція $\eta_{i1}(z')$, а також немає інших членів з індексом i, тоді всі множники та знак суми можемо винести за знак середнього:

$$\langle I \rangle_{conf} = \int_0^t \int_0^\infty G(z,z',t,t') \left[(\rho_0 - \rho_1) \frac{\partial c_0(z',t')}{\partial t'} - \right.$$

$$\left. -(d_0 - d_1) \frac{\partial^2 c_0(z',t')}{\partial z'^2} \right] \sum_{i=1}^{n_1} \int_{(V)} \eta_{i1}(z') \lambda e^{-\lambda z_{i1}} dz_{i1} dz' dt'. \qquad (29)$$

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

Враховуючи властивості функції $\eta_{i1}(z')$ (28) і використовуючи в інтегралі заміну змінних $z' - z_i = x$, можемо записати

$$\lambda \sum_{i=1}^{n_1} \int_{(V)} \eta_{i1}(z') e^{-\lambda z_{i1}} dz_{i1} =$$

$$= \lambda \sum_{i=1}^{n_1} \int_0^\infty \eta_{i1}(z' - z_i) e^{-\lambda z_{i1}} dz_{i1} =$$

$$= \lambda \sum_{i=1}^{n_1} \int_{z'-\infty}^{z'} \eta_{i1}(x) e^{-\lambda(z'-x)} dx =$$

$$= \lambda \sum_{i=1}^{n_1} \int_0^{z'} \eta_{i1}\,(x)\, e^{-\lambda\left(z'-x\right)} dx, \qquad (30)$$

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

1. $z' < h$, і інтеграл (30) набуває значення

$$\int_0^{z'} \eta_{i1}(x) e^{-\lambda(z'-x)} dx = \frac{1}{\lambda} \left(e^{-\lambda z'} - 1 \right);$$

2. $z' \geq h$, тоді отримаємо

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

У результаті інтеграл (30) знаходимо у формі

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

$$= \begin{cases} n_1(e^{-\lambda z'} - 1), & z' < h, \\ n_1(e^{-\lambda z'} - e^{-\lambda(z'-h)}), & z' \geq h. \end{cases}$$

Тоді усереднена функція (29) набуде вигляду

$$\langle I\rangle_{conf}=\int\limits_0^t\left[\int\limits_0^h G(z,z',t,t')\left[(\rho_0-\rho_1)\frac{\partial c_0(z',t')}{\partial t'}-\right.\right.$$

$$\left.-(d_0-d_1)\frac{\partial^2 c_0(z',t')}{\partial z'^2}\right](e^{-\lambda z'}-1)n_1dz'+$$

$$+\int\limits_h^\infty G(z,z',t,t')\left[(\rho_0-\rho_1)\frac{\partial c_0(z',t')}{\partial t'}-\right.$$

$$\left.\left.-(d_0-d_1)\frac{\partial^2 c_0(z',t')}{\partial z'^2}\right](e^{-\lambda z'}-e^{-\lambda(z'-h)})n_1dz'\right]dt'.$$

І як наслідок для усередненого поля концентрації домішкових частинок отримаємо

$$\langle c(z,t)\rangle_{conf}=c_0(z,t)+\int\limits_0^t\left[\int\limits_0^h G\left[(\rho_0-\rho_1)\frac{\partial c_0}{\partial t'}-\right.\right.$$

$$\left.-(d_0-d_1)\frac{\partial^2 c_0}{\partial z'^2}\right](e^{-\lambda z'}-1)n_1dz'+$$

$$+\int\limits_h^\infty G\left[(\rho_0-\rho_1)\frac{\partial c_0}{\partial t'}-\right.$$

$$\left.\left.-(d_0-d_1)\frac{\partial^2 c_0}{\partial z'^2}\right]\left(e^{-\lambda(z'-h)}-e^{-\lambda z'}\right)n_1dz'\right]dt'. \quad (31)$$

Отже, ми отримали формулу для знаходження усередненого за ансамблем конфігурацій фаз поля концентрації домішкової речовини у двофазному випадково неоднорідному багатошаровому півпросторі з експоненціальним розподілом включень в області тіла.

Підставляючи у співвідношення (31) вирази для концентрації домішкової речовини в однорідному півпросторі (21) та функції Гріна (24), отримаємо розрахункову формулу у вигляді:

$$\langle c(z,t)\rangle/c_*=erfc\left(zd_\rho\Big/2\sqrt{t}\right)+Qn_1e^{-d_\rho^2z^2/4t}:$$

$$:2\sqrt{\pi t}\rho_0\times\left[(erf\left(a_-(z,t)\right)+erf\left(a_+(z,t)\right))\times\right.$$

$$\times\left(e^{\lambda h}-1\right)\left(\sqrt{\pi}\left(e^{u_+(z,t)}-e^{u_-(z,t)}\right)\Big/8-\right.$$

$$\left.-d_\rho\left(e^{z\lambda}-e^{-z\lambda}\right)e^{-\lambda^2d_\rho^2(t+1)}\Big/2\lambda\right)+$$

$$+t^{-1}\left(zd_\rho\int\limits_0^t\left(erf\left(A_-(t,t')\right)-erf\left(A_+(t,t')\right)\right)dt'+\right.$$

$$+\int\limits_0^t M_-(t,t')\,e^{b_-(t,t')}\left(erf\left(B_-(t,t')\right)-\right.$$

$$\left.-\,e^{\lambda h}erf\left(K(t,t')-B_-(t,t')\right)\right)dt'+$$

$$+\int\limits_0^t M_+(t,t')\,e^{b_+(t,t')}\left(erf\left(B_+(t,t')\right)-\right.$$

$$\left.\left.\left.-\,e^{\lambda h}erf\left(K(t,t')+B_+(t,t')\right)\right)dt'\right)\right], \quad (32)$$

де $Q=d_1\rho_0/d_0+\rho_1$;

$$a_\pm(z,t)=\lambda\sqrt{t}d_\rho^{-1}\Big/2\pm zd_\rho\Big/2\sqrt{t};$$

$$d_\rho^2=\rho_0/d_0;$$

$$u_\pm(z,t)=d_0\left(\lambda t\pm zd_\rho^2\right)^2\Big/4\rho_0t;$$

$$b_\pm(t,t')=d_\rho^{-2}\lambda^2t'\,(t-t')/t\pm z\lambda t'/t;$$

$$K(t,t')=hd_t^{-1}\sqrt{t/t'}\Big/2;$$

$$A_\pm(t,t')=K(t,t')\pm zd_t^{-1}\sqrt{t/t'}\Big/2;$$

$$d_t=\sqrt{d_0(t-t')/\rho_0};$$

$$M_\pm(t,t')=\sqrt{\rho_0/4d_0}\left(z/2\pm\lambda d_t^2\right);$$

$$B_\pm(t,t')=\left(zd_t^{-1}/2\pm\lambda d_t\right)\sqrt{t'/t}.$$

Зазначимо, що неоднорідна частина розв'язку (32) пропорційна кількості включень n_1.

Дисперсія випадкового поля концентрації та двоточкова функція кореляції

Визначимо дисперсію поля концентрації домішкової речовини у двофазному випадково неоднорідному шаруватому півпросторі.

За означенням [12] дисперсією випадкової величини називається математичне сподівання квадрата відхилення цієї величини від її математичного сподівання, тобто середнього значення. Дисперсія є центральним моментом другого порядку і є мірою відхилення значень випадкової величини від центра розподілу.

Для поля концентрації мігруючої речовини дисперсія поля σ_c^2 за означенням дорівнює

$$\sigma_c^2\left(z,t\right) = \left\langle c^2\left(z,t\right)\right\rangle - \left\langle c\left(z,t\right)\right\rangle^2 .$$

Для середнього від добутку полів концентрації має місце таке співвідношення [4]:

$$\left\langle c\left(z_1,t_1\right) c\left(z_2,t_2\right)\right\rangle =$$

$$= \left\langle c\left(z_1,t_1\right)\right\rangle \left\langle c\left(z_2,t_2\right)\right\rangle +$$

$$+\psi_c\left(z_1,t_1,z_2,t_2\right),$$

де $\psi_c(z_1,t_1,z_2,t_2)$ – функція кореляції поля концентрації $c(z,t)$ в точках (z_1,t_1) і (z_2,t_2) [9]. Звідси можемо визначити функцію кореляції поля $\psi_c\left(z,t,z,t\right)$ в точці (z,t):

$$\psi_c\left(z,t,z,t\right) = \left\langle c^2\left(z,t\right)\right\rangle - \left\langle c\left(z,t\right)\right\rangle \left\langle c\left(z,t\right)\right\rangle . \qquad (33)$$

Тоді середнє від квадрата поля можемо записати як суму добутків середніх та функції кореляції фаз:

$$\left\langle c^2\left(z,t\right) c\left(z,t\right)\right\rangle = \left\langle c\left(z,t\right) c\left(z,t\right)\right\rangle =$$

$$= \left\langle c\left(z,t\right)\right\rangle \left\langle c\left(z,t\right)\right\rangle +$$

$$+\psi_c\left(z,t,z,t\right).$$

Якщо ми визначимо функцію кореляції поля концентрації $\psi_c(z,t,z,t)$ точці (z,t), тоді знайдемо і дисперсію поля в тілі.

Підставимо у формулу (33) вираз для поля $c(z,t)$ у вигляді ряду Неймана (26) і обмежимося першими чотирма членами розкладу, тобто враховуємо не більше ніж парний взаємовплив підшарів, з яких складене тіло:

$$\left\langle c^2\left(z,t\right)\right\rangle \approx c_0^2(z,t) + 2c_0(z,t)\left\langle \int\limits_0^t \int\limits_0^\infty G(z,z',t,t')L_s(z',t')c_0(z',t')dz'dt' \right\rangle +$$

$$+2c_0(z,t)\left\langle \int\limits_0^t \int\limits_0^\infty G(z,z',t,t')L_s(z',t') \int\limits_0^{t'} \int\limits_0^\infty G(z',z'',t',t'')L_s(z'',t'')c_0(z'',t'')dz''dt''dz'dt' \right\rangle +$$

$$+\left\langle \int\limits_0^t \int\limits_0^\infty G(z,z',t,t')L_s(z',t')c_0(z',t')dz'dt' \int\limits_0^{t'} \int\limits_0^\infty G(z,z',t,t')L_s(z',t')c_0(z',t')dz'dt' \right\rangle .$$

Також з урахуванням подання поля концентрації у вигляді ряду Неймана запишемо формулу для квадрата від середнього поля концентрації домішкової речовини, а саме:

$$\left\langle c(z,t)\right\rangle^2 = \left\langle c_0(z,t) + \int\limits_0^t \int\limits_0^\infty G(z,z',t,t')L_s(z',t')c_0(z',t')dz'dt' + \right.$$

$$\left. + \int\limits_0^t \int\limits_0^\infty G(z,z',t,t')L_s(z',t') \int\limits_0^{t'} \int\limits_0^\infty G(z',z'',t',t'')L_s(z'',t'')c_0(z'',t'')dz''dt''dz'dt' + \ldots \right\rangle \times$$

$$\times \left\langle c_0(z,t) + \int\limits_0^t \int\limits_0^\infty G(z,z',t,t')L_s(z',t')c_0(z',t')dz'dt' + \right.$$

$$\left. + \int\limits_0^t \int\limits_0^\infty G(z,z',t,t')L_s(z',t') \int\limits_0^{t'} \int\limits_0^\infty G(z',z'',t',t'')L_s(z'',t'')c_0(z'',t'')dz''dt''dz'dt' + \ldots \right\rangle . \qquad (34)$$

Перемножимо два усереднені ряди, що входять у (34), і також враховуємо тільки парний взаємовплив підшарів, тоді отримаємо

$$\langle c(z,t)\rangle^2 \approx c_0^2(z,t) + 2c_0(z,t)\left\langle \int\limits_0^t\int\limits_0^\infty G(z,z',t,t')L_s(z',t')c_0(z',t')dz'dt'\right\rangle +$$

$$+2c_0(z,t)\left\langle \int\limits_0^t\int\limits_0^\infty G(z,z',t,t')L_s(z',t')\int\limits_0^{t'}\int\limits_0^\infty G(z',z'',t',t'')L_s(z'',t'')c_0(z'',t'')dz''dt''dz'dt'\right\rangle +$$

$$+\left\langle \int\limits_0^t\int\limits_0^\infty G(z,z',t,t')L_s(z',t')c_0(z',t')dz'dt'\right\rangle \left\langle \int\limits_0^t\int\limits_0^\infty G(z,z',t,t')L_s(z',t')c_0(z',t')dz'dt'\right\rangle .$$

Подамо одноточкову функцію кореляції поля концентрації $\psi_c(z,t,z,t)$ з урахуванням представлення $c(z,t)$ у вигляді рядів Неймана. У результаті отримаємо

$$\psi_c(z,t,z,t) =$$

$$= \left\langle \left(\int\limits_0^t\int\limits_0^\infty G(z,z',t,t')L_s(z',t')c_0(z',t')dz'dt'\right)\left(\int\limits_0^t\int\limits_0^\infty G(z,z',t,t')L_s(z',t')c_0(z',t')dz'dt'\right)\right\rangle -$$

$$-\left\langle \int\limits_0^t\int\limits_0^\infty G(z,z',t,t')L_s(z',t')c_0(z',t')dz'dt'\right\rangle \left\langle \int\limits_0^t\int\limits_0^\infty G(z,z',t,t')L_s(z',t')c_0(z',t')dz'dt'\right\rangle . \qquad (35)$$

Врахуємо неперервність функції $c_0(z,t)$. Тоді дію на неї оператора $L_s(z,t)$ можна подати у вигляді

$$L_s(z,t)c_0(z,t) = \sum_{i=1}^{n_1}\eta_{i1}(z)\bar{L}_s(z,t)c_0(z,t), \qquad (36)$$

де $\bar{L}_s(z,t)c_0(z,t) = (\rho_0-\rho_1)\frac{\partial c_0(z,t)}{\partial t} -$

$$= (d_0-d_1)\frac{\partial^2 c_0(z,t)}{\partial z^2}.$$

Відповідно, співвідношення (35) можемо переписати у вигляді

$$\psi_c(z,t,z,t) =$$

$$= \left\langle \left(\int\limits_0^t\int\limits_0^\infty G(z,z',t,t')\sum_{i=1}^{n_1}\eta_{i1}(z')\bar{L}_s(z',t')c_0(z',t')dz'dt'\right)\times\right.$$

$$\left.\times\left(\int\limits_0^t\int\limits_0^\infty G(z,z',t,t')\sum_{i=1}^{n_1}\eta_{i1}(z')\bar{L}_s(z',t')c_0(z',t')dz'dt'\right)\right\rangle -$$

$$-\left\langle \int\limits_0^t\int\limits_0^\infty G(z,z',t,t')\sum_{i=1}^{n_1}\eta_{i1}(z')\bar{L}_s(z',t')c_0(z',t')dz'dt'\right\rangle \times$$

$$\left\langle \int\limits_0^t\int\limits_0^\infty G(z,z',t,t')\sum_{i=1}^{n_1}\eta_{i1}(z')\bar{L}_s(z',t')c_0(z',t')dz'dt'\right\rangle . \qquad (37)$$

Врахуємо, що функція Гріна $G(z,z',t,t')$, оператор $\bar{L}_s(z,t)$ і поле концентрації домішки в однорідному тілі $c_0(z,t)$ є детермінованими, а отже, є детермінованим вираз $\bar{L}_s(z,t)c_0(z,t)$; що усереднення проводимо за ансамблем конфігурацій фаз, тобто випадковою величиною є координата "верхньої" межі включень z_{i1}; що під інтегралами у формулі (37) немає інших членів з індексом i, а також, що добуток двох двократних інтегралів можна подати у вигляді одного чотирикратного інтеграла. Тоді співвідношення (37) можна подати у вигляді

$$\psi_c(z,t,z,t) =$$

$$= \int\limits_0^t\int\limits_0^\infty\int\limits_0^t\int\limits_0^\infty G(z,z',t,t')G(z,\bar{z}',t,\bar{t}')\bar{L}_s(z',t')c_0(z',t')\times$$

$$\times\bar{L}_s(\bar{z}',\bar{t}')c_0(\bar{z}',\bar{t}')\left\langle \sum_{i=1}^{n_1}\eta_{i1}(z')\sum_{k=1}^{n_1}\eta_{k1}(\bar{z}')\right\rangle d\bar{z}'d\bar{t}'dz'dt' -$$

$$-\left(\int\limits_0^t\int\limits_0^\infty G(z,z',t,t')\bar{L}_s(z',t')c_0(z',t')\times\right.$$

$$\left.\times\left\langle \sum_{i=1}^{n_1}\eta_{i1}(z')\right\rangle dz'dt'\right)\times$$

$$\left(\int\limits_0^t\int\limits_0^\infty G(z,\bar{z}',t,\bar{t}')\bar{L}_s(\bar{z}',\bar{t}')c_0(\bar{z}',\bar{t}')\times\right.$$

$$\times \left\langle \sum_{k=1}^{n_1} \eta_{k1}(\bar{z}') \right\rangle d\bar{z}'d\bar{t}' \Bigg) =$$

$$= \int_0^t \int_0^\infty \int_0^t \int_0^\infty G(z,z',t,t')G(z,\bar{z}',t,\bar{t}')\bar{L}_s(z',t')c_0(z',t') \times$$

$$\times \bar{L}_s(\bar{z}',\bar{t}')c_0(\bar{z}',\bar{t}') \left\langle \sum_{i=1}^{n_1} \eta_{i1}(z') \sum_{k=1}^{n_1} \eta_{k1}(\bar{z}') \right\rangle d\bar{z}'d\bar{t}'dz'dt' -$$

$$- \int_0^t \int_0^\infty \int_0^t \int_0^\infty G(z,z',t,t')G(z,\bar{z}',t,\bar{t}')\bar{L}_s(z',t')c_0(z',t') \times$$

$$\times \bar{L}_s(\bar{z}',\bar{t}')c_0(\bar{z}',\bar{t}') \left\langle \sum_{i=1}^{n_1} \eta_{i1}(z') \right\rangle \left\langle \sum_{k=1}^{n_1} \eta_{k1}(\bar{z}') \right\rangle d\bar{z}'d\bar{t}'dz'dt'.$$

Оскільки

$$\left\langle \sum_{i=1}^{n_1} \eta_{i1}(z') \sum_{k=1}^{n_1} \eta_{k1}(\bar{z}') \right\rangle = \sum_{i=1}^{n_1} \sum_{k=1}^{n_1} \langle \eta_{i1}(z')\eta_{k1}(\bar{z}') \rangle =$$

$$= \sum_{i=1}^{n_1} \sum_{k=1}^{n_1} (\langle \eta_{i1}(z') \rangle \langle \eta_{k1}(\bar{z}') \rangle + \psi_\eta(z',\bar{z}')), \qquad (38)$$

де $\psi_\eta(z',\bar{z}')$ - функція кореляції фаз, то

$$\psi_c(z,t,z,t) = \int_0^t \int_0^\infty \int_0^t \int_0^\infty G(z,z',t,t') \times$$

$$\times G(z,\bar{z}',t,\bar{t}')\bar{L}_s(z',t')c_0(z',t') \times$$

$$\times \bar{L}_s(\bar{z}',\bar{t}')c_0(\bar{z}',\bar{t}') \sum_{i=1}^{n_1} \sum_{k=1}^{n_1} \psi_\eta(z',\bar{z}')d\bar{z}'d\bar{t}'dz'dt'.$$

І остаточно одержимо

$$\psi_c(z,t,z,t) =$$

$$= \int_0^t \int_0^\infty \int_0^t \int_0^\infty G(z,z',t,t')G(z,\bar{z}',t,\bar{t}')\bar{L}_s(z',t')c_0(z',t') \times$$

$$\times \bar{L}_s(\bar{z}',\bar{t}')c_0(\bar{z}',\bar{t}')n_1^2 \psi_\eta(z',\bar{z}')d\bar{z}'d\bar{t}'dz'dt'. \qquad (39)$$

Отже, ми отримали вираз (39) для функції кореляції поля концентрації домішкової речовини в двофазному багатошаровому півпросторі в точці (z,t), який поданий через функцію кореляції фаз.

Аналогічно можемо знайти функцію кореляції (автокореляції) поля концентрації домішкової речовини у шаруватому півпросторі у двох точках тіла (z_1,t_1) і (z_2,t_2):

$$\langle c(z_1,t_1)c(z_2,t_2) \rangle = \langle c(z_1,t_1) \rangle \langle c(z_2,t_2) \rangle +$$

$$+ \psi_c(z_1,t_1,z_2,t_2).$$

Звідси

$$\psi_c(z_1,t_1,z_2,t_2) = \langle c(z_1,t_1)c(z_2,t_2) \rangle -$$

$$- \langle c(z_1,t_1) \rangle \langle c(z_2,t_2) \rangle. \qquad (40)$$

Якщо у співвідношенні (40) поле концентрації в точках (z_1,t_1) і (z_2,t_2) подамо у вигляді ряду Неймана, обмежимось врахуванням парного взаємовпливу фаз, використаємо вираз (36) і (38), тоді отримаємо функцію кореляції поля концентрації в точках (z_1,t_1) і (z_2,t_2) для процесу дифузії домішкової речовини у двофазному випадково неоднорідному шаруватому півпросторі:

$$\psi_c(z,t,z,t) = n_1^2 \int_0^{t_1} \int_0^\infty \int_0^{t_2} \int_0^\infty G(z_1,z_1',t_1,t_1') \times$$

$$\times\ G(z_2,z_2',t_2,t_2')\bar{L}_s(z_1',t_1')c_0(z_1',t_1') \times$$

$$\times \bar{L}_s(z_2',t_2')c_0(z_2',t_2')n_1^2 \psi_\eta(z_1',z_2')dz_2'dt_2'dz_1'dt_1'. \qquad (41)$$

Отже, отримано формулу для двоточкової функції кореляції поля концентрації частинок для двофазного шаруватого півпростору у вигляді чотирикратного інтеграла, підінтегральна функція якого як множник містить функцію кореляції фаз і пропорційна квадрату кількості включень.

Розрахункові формули для дисперсії поля концентрації у півпросторі з експоненціальним розподілом включень та двоточкової функції кореляції

Ми прийняли, що включення в півпросторі розташовані за експоненціальним розподілом (1) (див. рисунок). Функція кореляції фаз для експоненціального розподілу має вигляд [9]

$$\psi_\eta(z,z_1) = \sigma_\eta^2 e^{-\frac{|z'-z_1'|}{l}}, \qquad (42)$$

де l – радіус кореляції фаз, $\sigma_\eta^2 = 1/\lambda^2$ – дисперсія для експоненціального розподілу включень.

Підставивши функцію кореляції (42) у співвідношення (39), отримаємо формулу для дисперсії поля концентрації домішки в півпросторі з експоненціальним розподілом включень:

$$\sigma_c^2(z,t) = n_1^2\sigma_\eta^2 \int_0^t \int_0^\infty \int_0^t \int_0^\infty G(z,z',t,t')G(z,\bar z',t,\bar t')\bar L_s(z',t')c_0(z',t')\times$$
$$\times \bar L_s(\bar z',\bar t')c_0(\bar z',\bar t')e^{-\frac{|z'-\bar z'|}{l}}d\bar z' d\bar t' dz' dt'. \tag{43}$$

Врахуємо вираз для функції Гріна в однорідному півпросторі (24) та вираз (36), маємо

$$\sigma_c^2(z,t) == \left(\frac{n_1\sigma_\eta Q c_*}{4\pi d_0}\right)^2 \int_0^t \int_0^\infty \int_0^t \int_0^\infty \frac{\theta(t-t')\theta(t-\bar t')}{\sqrt{(t-t')(t-\bar t')t'^3\bar t'^3}} \left(e^{-\frac{|z-z'|^2\tilde d}{t-t'}} - e^{-\frac{|z+z'|^2\tilde d}{t-t'}}\right)\times$$
$$\times\left(e^{-\frac{|z-\bar z'|^2\tilde d}{t-\bar t'}} - e^{-\frac{|z+\bar z'|^2\tilde d}{t-\bar t'}}\right) z'\bar z' e^{-\frac{\tilde d z'^2}{t'^2}} e^{-\frac{\tilde d\bar z'^2}{\bar t'^2}} e^{-\frac{|z'-\bar z'|}{l}} d\bar z' d\bar t' dz' dt', \tag{44}$$

де $\tilde d = d_0/4\rho_0$.

Якщо розписати модуль в останній експоненті підінтегральної функції (44), одержимо

$$\sigma_c^2(z,t) = \left(\frac{n_1\sigma_\eta Q c_*}{4\pi d_0}\right)^2 \int_0^t \int_0^t \frac{\theta(t-t')\theta(t-\bar t')}{\sqrt{(t-t')(t-\bar t')t'^3\bar t'^3}} \int_0^\infty z' e^{-\frac{\tilde d z'^2}{t'^2}}\times$$
$$\times\left(e^{-\frac{|z-z'|^2\tilde d}{(t-t')}} - e^{-\frac{|z+z'|^2\tilde d}{(t-t')}}\right)\left\{\int_0^{z'}\left(e^{-\frac{|z-\bar z'|^2\tilde d}{(t-\bar t')}} - e^{-\frac{|z+\bar z'|^2\tilde d}{(t-\bar t')}}\right)\bar z' e^{-\frac{\bar z'^2}{\bar t'^2}} e^{-\frac{z'-\bar z'}{l}} d\bar z' +\right.$$
$$\left.+\int_{z'}^\infty \left(e^{-\frac{|z-\bar z'|^2}{(t-\bar t')}} - e^{-\frac{|z+\bar z'|^2}{(t-\bar t')}}\right)\bar z' e^{-\frac{\tilde d\bar z'^2}{\bar t'^2}} e^{\frac{z'-\bar z'}{l}} d\bar z'\right\} dz' d\bar t' dt'$$

Після інтегрування остаточно отримаємо розрахункову формулу для розрахунку дисперсії поля концентрації домішки в півпросторі з експоненціальним розподілом включень

$$\sigma_c^2(z,t) = \left(\frac{n_1\sigma_\eta Q c_*}{4\pi d_0}\right)^2 \int_0^t \int_0^t \frac{\theta(t-t')\theta(t-\bar t')}{\sqrt{(t-t')(t-\bar t')t'^3\bar t'^3}} \left(\bar I_1 - \bar I_2 + \bar I_3 - \bar I_4\right) d\bar t' dt', \tag{45}$$

$$\bar I_k = I_k(z,t,z,t), \quad k = \overline{1,4},$$

$$I_i(z_1,t_1,z_2,t_2) = A_i(t_1,\bar t_1',t_2,t_2',z_2)\left[k_i\left\{M_1\left(b_i^-(t_1,t_1',t_2,t_2',z_1,z_2), q_i^-(t_1,t_1',z_1,z_2), b_i(t_2,\bar t_2',z_2)\right)-\right.\right.$$
$$\left.-M_1\left(b_i^+(t_1,t_1',t_2,t_2',z_1,z_2), q_i^+(t_1,t_1',z_1,z_2), b_i(t_2,\bar t_2',z_2)\right)\right\} + M_2\left(b_+(t_1,\bar t_1',z_1), b_i(t_2,\bar t_2',z_2)\right)-$$
$$-M_2\left(b_-(t_1,\bar t_1',z_1), b_i(t_2,\bar t_2',z_1)\right) + M_3\left(\phi_i^-(t_1,\bar t_1',t_2,\bar t_2',z_1,z_2), b_i(t_2,\bar t_2',z_2)\right)-$$
$$\left.- M_3\left(\phi_i^+(t_1,\bar t_1',t_2,\bar t_2',z_1,z_2), b_i(t_2,\bar t_2',z_2)\right)\right], \quad i = 1,2;$$

$$I_j(z_1,t_1,z_2,t_2) = A_j(t_1,\bar t_1',t_2,t_2',z_2)\left[k_j\left\{M_1\left(b_i^+(t_1,t_1',t_2,t_2',z_1,z_2), q_j^+(t_1,t_1',z_1,z_2), b_+(t_2,\bar t_2',z_2)\right)-\right.\right.$$
$$\left.-M_1\left(b_j^-(t_1,t_1',t_2,t_2',z_1,z_2), q_j^-(t_1,t_1',z_1,z_2), b_+(t_2,\bar t_2',z_2)\right)\right\}+$$
$$\left.+ M_3\left(\phi_j^+(t_1,\bar t_1',t_2,\bar t_2',z_1,z_2), b_-(t_2,\bar t_2',z_2)\right) - M_3\left(\phi_j^-(t_1,\bar t_1',t_2,\bar t_2',z_1,z_2), b_-(t_2,\bar t_2',z_2)\right)\right], \quad j = 3,4;$$

де

$$M_1(b,q_u^\pm,b_1) = \frac{e^{q_u^\pm}}{\sqrt\pi}\left(\frac{1}{\bar a^3}\sum_{n=0}^\infty \frac{(-1)^n e^{b_{a_1}^2}}{n!(2n+1)}\left\{\left(a_1^{-1}p^{2n+1}e^{-x^2}(2n+1)!!\Sigma_n+\right.\right.\right.$$

$$+\sqrt{\pi}(2n+1)!!2^{-n}erf(p)\big)+\left(a_1^{-1}+\bar{b}/\bar{a}\right)\sum_{k=0}^{n}\left(\begin{array}{c}2n+2\\2k\end{array}\right)\left(b_{a_1}\right)^{2n+2-2k}\times$$

$$\times\Big(p^{2k-1}e^{-p^2}(2k-1)!!\Sigma_{k1}+\sqrt{\pi}(2k-1)!!2^{-k}erf(p)\Big)+$$

$$+\left(a_1^{-1}+1\right)\sum_{k=0}^{n}\left(\begin{array}{c}2n+2\\2k+1\end{array}\right)\left(b_{a_1}^2\right)^{2n+1-k}p^{2k-1}e^{-x^2}\Sigma_{k2}\Bigg\},$$

$$M_2(b,b_1)=\left(k_i erf\left(b_1/2a\right)+2^{-1}e^{-\left(b_{a_1}\right)^2}\right)e^{-\frac{dz^2}{t-t'}}\left[\frac{e^{b_a^2}}{2a^2}\left(b_a\sqrt{\pi}\left\{erf\left(b_a\right)+1\right\}+e^{-b_a^2}\right)\right];$$

$$M_3(b,b_1)=\frac{1}{2}e^{-\bar{b}^2-\frac{z^2d}{t-t'}}\frac{e^{b_{a_2}^2}}{2a_2^2}\left(b_{a2}\left[\sqrt{\pi}erf\left(b_{a2}\right)+\sqrt{\pi}\right]+e^{-b_{a_2}^2}\right),$$

$$A_i(s,s',s,\bar{s}',u)=\frac{1}{a^2(s,\bar{s}')}\exp\left(-\frac{du^2}{s-\bar{s}'}+\frac{b_i^2(s,s',u)}{4a^2(s,s')}\right);$$

$$k_i(s,s')=\frac{b_i(s,s')\sqrt{\pi}}{4a}\quad i=(\overline{1,4});$$

$$b_{\pm}(s,s',u)=\frac{1}{l}\pm\frac{2ud}{s-s'};$$

$$b_{1,2}(s,s',u)=-\frac{1}{l}\pm\frac{2ud}{s-s'};$$

$$x=-(b_1a_1/\bar{a}+b/a_1)/2;$$

$$q_i^{\pm}(s,s'u,w)=-\frac{db_i^2(s,s',u)}{4}+\frac{b_i(s,s',u)}{2l}-\frac{d\left(2w\pm b_i(s,s',u)\right)}{2(s-s')};\quad i=(\overline{1,4});$$

$$\Sigma_n=\sum_{l=0}^{n}\frac{p^{-2l}}{(2n-2l-1)!!},\quad \Sigma_{k1}=\sum_{l=0}^{k-1}\frac{p^{-2l}}{2^l(2k-2l-1)!!},\quad \Sigma_{k2}=\sum_{l=0}^{k}\frac{k!}{2^l(k-l)!!p^{2l}};$$

$$a(s,s')=\sqrt{\frac{d}{s'^2}+\frac{d}{s-s'}};$$

$$a_1(t,t',t,\bar{t}')=\frac{a(t,t')}{a(t,\bar{t}')};$$

$$a_2(t,t',t,\bar{t}')=\sqrt{a^2(t,t')+a^2(t,\vec{t}')};$$

$$b_i^{\pm}(s,s',r,r',u,w)=\frac{d}{a}\left[\frac{1}{dl}-b_i(r,r',u)-\frac{2w\mp b_i(r,r',u)}{s-s'}\right],\quad i=1,2;$$

$$b_j^{\pm}(s,s',r,r',u,w)=\frac{d}{a}\left[\frac{1}{dl}-b_j(r,r',u)\pm\frac{2w\mp b_j(r,r',u)}{s-s'}\right],\quad j=3,4.$$

$$\phi_i^{\pm}(s,s',r,r',u,w)=\frac{1}{2a_2(s,s',r,r')}\left(\pm\frac{2wd}{s-s'}+\frac{1}{l}+b_i(r,r',u)\right),\quad i=1,2;$$

$$\phi_j^{\pm}(s,s',r,r',u,w)=\frac{1}{2a_2(s,s',r,r')}\left(\pm\frac{2zd}{s-s'}-\frac{1}{l}+b_j(r,r',u)\right),\quad j=3,4;$$

$$p=-\left(a_1\bar{b}+b_{a1}\right);\quad \bar{b}=b_1/(2\bar{a});\quad b_{a2}=b/(2a_1);\quad \bar{b}_1=b_1/(2a_1);\quad b_a=b/(2a);$$

$C_n^k=\left(\begin{array}{c}n\\k\end{array}\right)=\frac{(n)!}{(k)!(n-k)!}$ – біноміальні коефіцієнти.

Якщо підставимо функцію кореляції фаз (42) у співвідношення (41), тоді отримаємо формулу для дисперсії поля концентрації домішки в півпросторі з експоненціальним розподілом включень:

$$\psi_c\left(z_1,t_1,z_2,t_2\right)=\int\limits_0^{t_1}\int\limits_0^{\infty}\int\limits_0^{t_2}\int\limits_0^{\infty}G(z_1,z_1',t_1,t_1')G(z_2,z_2',t_2,t_2')\times$$

$$\times\bar{L}_s(z_1',t_1')c_0(z_1',t_1')\bar{L}_s(z_2',t_2')c_0(z_2',t_2')\times$$

$$\times n_1^2\sigma_\eta^2 e^{-\frac{|z_1'-z_2'|}{l}}dz_2'dt_2'dz_1'dt_1'. \tag{46}$$

Врахуємо вираз для функції Гріна в однорідному півпросторі (24) та вираз (36) у формулі (46), тоді після інтегрування одержимо формулу для двоточкової функції кореляції поля концентрації частинок у багатошаровому півпросторі з експоненціальним розподілом включень

$$\psi_c\left(z_1,t_1,z_2,t_2\right)=\left(\frac{n_1\sigma_\eta Qc_*}{4\pi d_0}\right)^2\int\limits_0^{t_1}\int\limits_0^{t_2}\frac{\theta(t_1-t_1')\theta(t_2-t_2')}{\sqrt{(t_1-t_1')(t_2-t_2'){t_1'}^3{t_2'}^3}}\int\limits_0^{\infty}z_1'e^{-\frac{\tilde{d}{z_1'}^2}{{t_1'}^2}}\times$$

$$\times\left(e^{-\frac{|z_1-z_1'|^2\tilde{d}}{t_1-t_1'}}-e^{-\frac{|z_1+z_1'|^2\tilde{d}}{t_1-t_1'}}\right)\left\{\int\limits_0^{z_1'}\left(e^{-\frac{|z_2-z_2'|^2\tilde{d}}{t_2-t_2'}}-e^{-\frac{|z_2+z_2'|^2\tilde{d}}{t_2-t_2'}}\right)z_2'e^{-\frac{d{z_2'}^2}{{t_2'}^2}}e^{-\frac{z_1'-z_2'}{l}}dz_2'+\right.$$

$$\left.+\int\limits_{z_1'}^{\infty}\left(e^{-\frac{|z_2-z_2'|^2\tilde{d}}{t_2-t_2'}}-e^{-\frac{|z_2+z_2'|^2\tilde{d}}{t_2-t_2'}}\right)z_2'e^{-\frac{d{z_2'}^2}{{t_2'}^2}}e^{\frac{z'-\bar{z}'}{l}}dz_2'\right\}dz_1'dt_2'dt_1'. \tag{47}$$

Після інтегрування в (47) отримаємо розрахункову формулу для двоточкової функції кореляції поля концентрації $\psi_c(z_1,t_1,z_2,t_2)$:

$$\psi_c\left(z_1,t_1,z_2,t_2\right)=\left(\frac{n_1\sigma_\eta Qc_*}{4\pi d_0}\right)^2\int\limits_0^{t_1}\int\limits_0^{t_2}\frac{\theta(t_1-t_1')\theta(t_2-t_2')}{\sqrt{(t_1-t_1')(t_2-t_2'){t_1'}^3{t_2'}^3}}\left(\tilde{I}_1-\tilde{I}_2+\tilde{I}_3-\tilde{I}_4\right)dt_2'dt_1', \tag{48}$$

де $\tilde{I}_k=I_k(z_1,t_1,z_2,t_2)$, $k=\overline{1,4}$.

Коефіцієнт кореляції поля концентрації K_c визначається так [9]:

$$K_c=\psi_c/\sigma_c^2.$$

Тоді з урахуванням співвідношень (45) та (48) отримаємо два випадки для коефіцієнта кореляції залежно від точки (z,t), для якої знайдена дисперсія поля концентрації:

1. $\sigma_c^2=\sigma_c^2(z_1,t_1)$

$$K_c^{(1)}=\frac{\int\limits_0^{t_1}\int\limits_0^{t_2}\frac{\theta(t_1-t_1')\theta(t_2-t_2')}{\sqrt{(t_1-t_1')(t_2-t_2'){t_1'}^3{t_2'}^3}}\left(\tilde{I}_1-\tilde{I}_2+\tilde{I}_3-\tilde{I}_4\right)d\bar{t}'dt'}{\int\limits_0^{t_1}\int\limits_0^{t_1}\frac{\theta(t-t')\theta(t-\bar{t}')}{\sqrt{(t-t')(t-\bar{t}')t'^3\bar{t}'^3}}\left(\bar{I}_1-\bar{I}_2+\bar{I}_3-\bar{I}_4\right)d\bar{t}'dt'},$$

2. $\sigma_c^2=\sigma_c^2(z_2,t_2)$

$$K_c^{(2)}=\frac{\int\limits_0^{t_1}\int\limits_0^{t_2}\frac{\theta(t_1-t_1')\theta(t_2-t_2')}{\sqrt{(t_1-t_1')(t_2-t_2'){t_1'}^3{t_2'}^3}}\left(\tilde{I}_1-\tilde{I}_2+\tilde{I}_3-\tilde{I}_4\right)d\bar{t}'dt'}{\int\limits_0^{t_2}\int\limits_0^{t_2}\frac{\theta(t-t')\theta(t-\bar{t}')}{\sqrt{(t-t')(t-\bar{t}')t'^3\bar{t}'^3}}\left(\bar{I}_1-\bar{I}_2+\bar{I}_3-\bar{I}_4\right)d\bar{t}'dt'}.$$

Зазначимо, що формули для дисперсії (43) та двоточкової функції кореляції поля концентрації (46), як і співвідношення для усереднених полів концентрації (31), є справедливими для довільних крайових умов.

Висновки

Отже, з використанням апарата теорії узагальнених функцій контактну задачу дифузії домішкової речовини в двофазному випадково неоднорідному шаруватому півпросторі зведено до рівняння масопереносу частинок у всьому тілі. Побудоване інтегро-диференціальне рівняння розв'язано шляхом ітерування. Розв'язок отриманий у вигляді ряду Неймана. Зауважимо, що за спрямування часової змінної до безмежності ряд Неймана стає розбіжним, і тому стаціонарний випадок потребує окремого розгляду.

Усереднення поля концентрації проведено за ансамблем конфігурацій фаз з експоненціальною функцією розподілу включень. Одержано в загальному випадку формулу для визначення усередненого поля концентрації в такому тілі та наведено розрахункові формули в часткових випадках. Отримано формулу для двоточкової функції кореляції поля концентрації частинок для двофазного шаруватого півпростора у вигляді чотирикратного інтеграла, підінтегральна функція якого як множник містить функцію кореляції фаз і пропорційна квадрату кількості включень. Знайдено співвідношення для дисперсії поля концентрації мігруючих частинок та відповідні коефіцієнти кореляції.

Література

[1] *Keller J.B.* Flow in random porous media // Transport in Porous Media. – 2001. – 43. – P. 395–406.

[2] *Zhu Y.*, *Fox P.J.* Smoothed particle hydrodynamics model for diffusion through porous media // Transport in Porous Media. – 2001. – 43. – P. 441–471.

[3] *Mikdam A.*, *Makardi A.*, *Ahzi S.*, *Garmestani H*, *Li D.S.*, *Remond Y.* Effective conductivity in isotropic heterogeneous media using a strong-contrast statistical continuum theory // J. Mech. and Phys. of Solids. – 2009. – 57. – P. 76–86.

[4] *Королюк В.С.*, *Портенко Н.И.*, *Скороход А.В.*, *Турбин А.Ф.* Справочник по теории вероятности и математической статистике. – М.: Наука, 1985. – 640 с.

[5] *Чапля Є.Я.*, *Чернуха О.Ю.* Математичне моделювання дифузійних процесів у випадкових і регулярних структурах. – К.: Наукова думка, 2009. – 302 с.

[6] *Мюнстер А.* Химическая термодинамика. – М.: Мир, 1971. – 295 с.

[7] *Краснов М.Л.* Интегральные уравнения. – М.: Наука, 1975. – 300 с.

[8] *Владимиров В.С.* Уравнения математической физики. – М.: Наука, 1976. – 527 с.

[9] *Рытов С.М.*, *Кравцов Ю.А.*, *Татарский В.И.* Введение в статистическую радиофизику. Ч. II Случайные поля. – М.: Наука, 1978. – 436 с.

[10] Справочник по специальным функциям / Под ред. М. *Абрамовица и И. Стиган.* – М.: Мир, 1979. – 830 с.

[11] *Лыков А.В.* Теория теплопроводности. – М.: Высшая школа, 1978. – 463 с.

[12] *Гихман И.И.*, *Скороход А.В.* Введение в теорию случайных процессов. – М.: Наука, 1977. – 568 с.

КОРРЕЛЯЦИОННАЯ ФУНКЦИЯ И ДИСПЕРСИЯ СЛУЧАЙНОГО ДИФФУЗИОННОГО ПОЛЯ КОНЦЕНТРАЦИИ В ПОЛУПРОСТРАНСТВЕ С ЭКСПОНЕНЦИАЛЬНЫМ РАСПРЕДЕЛЕНИЕМ СЛОИСТЫХ ВКЛЮЧЕНИЙ

Е.Я. Чапля[a,b], О.Ю. Чернуха[a], Ю.И. Билущак[a]

[a] *Центр математического моделирования ИППММ им. Я.С. Пидстрыгача НАН Украини, ул. Дж. Дудаева 15, 79005, г. Львов*

[b] *Институт механики и прикладной информатики Университета Казимира Великого в Быдгоще, ул. Коперника 1, 85-064, г. Быдгощ, Польша*

Исследованы процессы диффузии примесного вещества в двухфазном слоистом полупространстве с учетом случайного расположения слоев. Контактная задача с помощью теории обобщенных функций сведена к задаче массопереноса во всей области тела. Сформулировано эквивалентное интегродифференциальное уравнение, решение которого построено в виде интегрального ряда Неймана. Усреднение полученного решения проведено по ансамблю конфигураций фаз с экспоненциальной функцией распределения включений. Определены дисперсия поля концентрации частиц и двухточечная функция корреляции (автокорреляции) поля для процесса диффузии в слоистом полупространстве с экспоненциальным распределением включений.

Ключевые слова: диффузия, случайно неоднородная слоистая структура, экспоненциальное распределение, дисперсия поля, функция корреляции.

2000 MSC: 93A30; 35K20; 42A38; 45K05

УДК: 517.958:532.72

CORRELATION FUNCTION AND DISPERSION OF RANDOM DIFFUSION FIELD OF CONCENTRATION IN A SEMISPACE WITH EXPONENTIAL DISRTIBUTION OF LAYED INCLUSIONS

Y.Y. Chaplya[a, b], O.Y. Chernukha[a], Y.I. Bilushchak[a]

[a] *Centre of Mathematical Modelling of Y.Pidstryhach IAPMM Ukrainian National Academy of Sciences 15 Dudayev Str., 79005, Lviv, Ukraine*

[b] *Institute of Mechanics and Applied Computer Science of Kazimierz Wielki University in Bydgoshch 1 Kopernik Str., 85-064, Bydgoshcz, Poland*

In the paper process of admixture diffusion is studied in a two-phase stratified semispace allowing for random disposition of layers. By the theory of generalized functions the contact problem is reduced to the mass transfer problem in the whole body. An equivalent integro-differential equation is formulated and its solution is constructed in terms of integral Neumann series. Averaging the obtained solution is carried out over the ensemble of phase configurations with the exponential function of inclusion distribution. Dispersion of field of particle concentration is defined as well as a two-point function of field correlation (self-correlation) for the diffusion process in the stratified semispace with exponential distribution of inclusions.

Key words: diffusion, randomly inhomogeneous stratified structure, exponential distribution, field dispersion, correlation function

2000 MSC: 35K20; 45R05; 60G60; 93A30

УДК: 517.958:532.72