Інститут прикладних проблем
механіки і математики
ім. Я.С. Підстригача НАН України
Рада молодих науковців і
спеціалістів

Конференція молодих учених
«ПІДСТРИГАЧІВСЬКІ
ЧИТАННЯ – 2010»
м. Львів
25-26 травня 2010 року

Секція: АКТУАЛЬНІ ЗАДАЧІ МЕХАНІКИ
http://www.iapmm.lviv.ua/chyt2010/materials/pc2010-01-BC-02.pdf

УДК 517.958:532.72

ПРОЦЕСИ ДИФУЗІЇ ДОМІШКИ У ВИПАДКОВО НЕОДНОРІДНІЙ ТРИШАРОВІЙ СМУЗІ

Білущак Ю.І., Чернуха О.Ю.

Центр математичного моделювання ІППММ ім. Я.С. Підстригача НАН України;
Національний університет «Львівська політехніка», cher@cmm.lviv.ua; byixx@mail.ru

При дослідженні процесів переносу в тілах випадкової структури зазвичай використовують методи гомогенізації, неоднорідної структури тіла [1]. При цьому приймається припущення, що характерні відстані, на яких відбуваються зміни фізичних параметрів, значно більші за характерні розміри неоднорідностейю Це дає можливість ввести середні за елементарними макрооб'ємами параметри та описати процеси в просторі, "точки" якого містять у собі одночасно дві компоненти пропорційно їх об'ємній частці [1]. Запропоновано підхід [2] до опису процесів переносу у випадково неоднорідних тілах для випадку, коли умови малості розмірів неоднорідностей не виконуються. Згідно цього підходу розв'язок крайових або контактно-крайових задач шукають у вигляді ряду Неймана, що дає можливість шукані поля усереднювати за ансамблем конфігурацій фаз. У даній роботі за цим підходом досліджено процеси дифузії домішкової речовини у смузі з випадково розташованим прошарком, коли на межах розділу фаз задані неідеальні умови контакту, які сформульовані для функції концентрації.

Нехай домішкові частинки мігрують у тришаровій смузі товщиною z_0, у якій розташування підшарів є невідомим. Вважаємо, що дифузійні властивості шарів (області Ω_0 і Ω_1, рис. 1), з яких складене тіло, можуть суттєво відрізнятися. Приймаємо, що фази в тілі розташовані за рівномірним розподілом і об'ємна частка області Ω_1 є набагато більшою за об'ємну частку Ω_0, тобто $h \ll z_0 - h$, де h – товщина області Ω_1 (рис. 1).

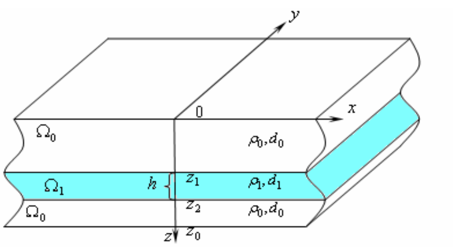

Рис. 1. Можлива реалізація структури тришарової смуги, в якій дифундує домішкова речовина

Концентрація домішкових частинок $c_0(z,t)$ в області Ω_0 визначається з рівняння дифузії

$$\rho_0 \frac{\partial c_0(z,t)}{\partial t} = d_0 \frac{\partial^2 c_0(z,t)}{\partial z^2}, \qquad z \in \Omega_0,\ t \in [0,\tau]\ (\tau < \infty), \tag{1}$$

а концентрація $c_1(z,t)$ в області Ω_1 – з аналогічного рівняння з іншим кінетичним коефіцієнтом дифузії

$$\rho_1 \frac{\partial c_1(z,t)}{\partial t} = d_1 \frac{\partial^2 c_1(z,t)}{\partial z^2}, \qquad z \in \Omega_1,\ t \in [0,\tau]\ (\tau < \infty), \tag{2}$$

де ρ_0, ρ_1 – густини областей Ω_0 і Ω_1; d_0, d_1 – кінетичні коефіцієнти дифузії в цих областях.

На функцію концентрації накладено такі крайові та контактні умови

$$c_0(z,t)\big|_{t=0} = c_1(z,t)\big|_{t=0} = 0, \quad c_0(z,t)\big|_{z=0} = c^* \equiv const, \quad c(z,t)\big|_{z=z_0} = 0; \tag{3}$$

$$k_0 c_0(z,t)\big|_{z=z_1-0} = k_1 c_1(z,t)\big|_{z=z_1+0}, \quad \rho_0 D_0 \frac{\partial c_0}{\partial z}\bigg|_{z=z_1-0} = \rho_1 D_1 \frac{\partial c_1}{\partial z}\bigg|_{z=z_1+0}; \tag{4}$$

$$k_1 c_1(z,t)\big|_{z=z_2-0} = k_0 c_0(z,t)\big|_{z=z_2+0}, \quad \rho_1 D_1 \frac{\partial c_1}{\partial z}\bigg|_{z=z_2-0} = \rho_0 D_0 \frac{\partial c_0}{\partial z}\bigg|_{z=z_2+0}, \tag{5}$$

де k_0 і k_1 – коефіцієнти концентраційної залежності хімічного потенціалу частинок у відповідних фазах.

Введемо функцію $c(z,t)$, яка описує концентрацію в усьому тілі:

$$c(z,t) = \begin{cases} c_0(z,t) - \text{розв'язок рівняння (1)},\ z \in \Omega_0; \\ c_1(z,t) - \text{розв'язок рівняння (2)},\ z \in \Omega_1; \\ \text{контактні умови (4)},\ z = z_1; \\ \text{контактні умови (5)},\ z = z_2. \end{cases}, \tag{6}$$

Використовуючи апарат теорії узагальнених функцій перейдемо від контактної задачі (1), (2), (4), (5) до рівняння дифузії для тіла в цілому, сформульоване для введеної у розгляд функції $c(z,t)$ (6):

$$L(z,t)c(z,t) = 0, \tag{7}$$

де

$$L(z,t) = \sum_{ij} \rho_j \eta_{ij}(z) \frac{\partial}{\partial t} - \sum_{ij} d_j \eta_{ij}(z) \left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + \left[\frac{\partial}{\partial z} \right]_{z=z_1} \delta(z - z_1) +$$

$$+[\ ]_{z=z_1}\delta'(z-z_1)+\left[\frac{\partial}{\partial z}\right]_{z=z_2}\delta(z-z_2)+[\ ]_{z=z_2}\delta'(z-z_2).$$

У рівнянні (7) додаємо і віднімаємо детермінований оператор з коефіцієнтами, які є характеристиками фази Ω_0 $L_0=\rho_0\,\partial/\partial t-d_0\,\partial^2/\partial z^2$. Маємо

$$L_0(z,t)c(z,t)=[L_0(z,t)-L(z,t)]c(z,t)\equiv L_s(z,t)c(z,t). \tag{8}$$

Вважаємо праву частину рівняння (8) джерелом, тобто неоднорідність матеріалу тіла розглядаємо як внутрішні джерела. Тоді крайова задача (8), (3), еквівалентна такому інтегродиференціальному рівнянню:

$$c(z,t)=c_0(z,t)+\int_0^t\int_0^{z_0}G(z,z',t,t')L_s(z',t')c(z',t')dz'dt'. \tag{9}$$

Тут $c_0(z,t)$ – розв'язок неоднорідного рівняння (8) $L_0c_0=0$ з крайовими умовами (3), $G(z,z',t,t')$ - функція Гріна задачі (8), (3).

Розв'язок рівняння (9) побудований методом послідовних наближень, при цьому за нульове наближення вибраний розв'язок однорідної крайової задачі $c_0(z,t)$. В результаті отримано випадкове поле концентрації домішкової речовини $c(z,t)$ у вигляді інтегрального ряду Неймана.

Для знаходження середнього поля концентрації домішкових частинок обмежилися першими двома членами ряду Неймана. Одержаний вираз усереднений за ансамблем конфігурацій фаз із рівномірною функцією розподілу. Як наслідок отримано

$$\frac{\langle c(z,t)\rangle_{conf}}{c^*}\approx 1-\frac{z}{z_0}-\frac{2}{z_0}\sum_{n=1}^{\infty}\left\{e^{-R_0y_n^2t}\left[\frac{\sin(y_nz)}{y_n}+\frac{v_1d_\rho t}{2z_0y_n^2}\left(\frac{A_{1n}}{h}+A_{2n}\right)\right]+\right.$$

$$\left.+\frac{2v_1d_\rho}{z_0}\sin(y_nz)\sum_{\substack{m=1\\m\neq n}}^{\infty}\frac{y_m}{y_n^2-y_m^2}\left(e^{-R_0y_m^2t}-e^{-R_0y_n^2t}\right)\left(\frac{B_{1nm}}{h}+B_{2nm}\right)\right\}, \tag{10}$$

де $y_n=\frac{n\pi}{z_0}$, $y_m=\frac{m\pi}{z_0}$, $R_0=\frac{d_0}{\rho_0}$, $d_\rho=\frac{d_1}{d_0}-\frac{\rho_1}{\rho_0}$;

$$A_{1n}=\left(h^2y_n^2-hy_n\sin(2y_nh)-\frac{1}{2}\cos(2y_nh)+\frac{1}{2}\right);$$

$$A_{2n}=\left(-\frac{1}{4}\sin(2y_nz_0)+\frac{1}{2}z_0+\frac{1}{4}\sin(2y_nh)-\frac{1}{2}h\right);$$

$$B_{1nm}=\frac{(\cos(h(y_n-y_m))-1+h(y_n-y_m)\sin(h(y_n-y_m)))}{2(y_n-y_m)^2}-$$

$$+\frac{\left(\cos(h(y_n+y_m))-1+h(y_n+y_m)\sin(h(y_n+y_m))\right)}{2(y_n+y_m)^2};$$

$$B_{2nm}=\sin(-y_m z_0)\cos(y_n z_0)-\sin(y_m h)\cos(y_n h).$$

Для кількісного та якісного аналізу отриманої усередненої за ансамблем конфігурацій фаз функції концентрації (10) розроблене програмне забезпечення «Ro-conc» (рис. 2).

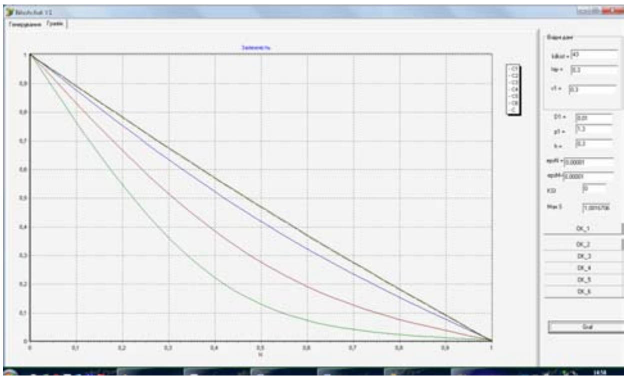

Рис. 2. Приклад реалізації програми Ro-conc в середовищі Delphi

Зазначимо, що обчислення проводились у безрозмірних змінних $\xi=z/z_0$, $\tau=d_0 t/z_0$.

1. *Хорошун Л.П., Солтанов Н.С.* Термоупругость двухкомпонентных смесей. – Киев: Наукова думка, 1984. – 112 с.
2. *Чапля Є.Я., Чернуха О.Ю.* Математичне моделювання дифузійних процесів у випадкових і регулярних структурах. – Київ: Наукова думка, 2009. – 302 с.

ADMIXTURE DIFFUSION PROCESSES IN A RANDOMLY NONHOMOGENEOUS THREE-LAYERED STRIP

The admixture diffusion processes are investigated in a stochastically nonhomogeneous three-layered stip. The nonideal contact conditions for the concentration field are formulated. A solution of the contact initial-boundary value problem is constructed in the form of Neumann series, reducing the contact problem to the integro-differential equation for the whole body. The obtained solution is averaged over the ensemble of phase configurations.