УДК 517.958:532.72

МОДЕЛЮВАННЯ ВИПАДКОВОГО ПОЛЯ КОНЦЕНТРАЦІЇ У ДВОФАЗНОМУ ШАРУВАТОМУ ПІВПРОСТОРІ З χ^2-РОЗПОДІЛОМ ВКЛЮЧЕНЬ

Білущак Ю.І., Чернуха О.Ю.

Центр математичного моделювання Інституту прикладних проблем механіки і математики ім.Я.С.Підстригача НАН України м. Львів, вул.Дж.Дудаєва 15, e-mail , bil@cmm.lviv.ua, cher@cmm.lviv.ua

Для запобігання поширення забруднення навколишнього середовища агресивними домішковими речовинами і мінімізації екологічного ризику катастрофічних ситуацій визначення дифузійних властивостей нових композитних матеріалів тощо, виникає необхідність досліджувати процеси дифузії домішкових речовин в гетерогенних тілах, зокрема, багатофазних середовищах випадкової структури, коли певні елементи фаз мають розміри, співвимірні з розмірами тіла. [1].

В даній роботі досліджено випадкове поле концентрації частинок домішкової речовини у двофазному шаруватому півпросторі з χ^2-розподілом.

Розглянута дифузія домішкових частинок у двофазному багатошаровому півпросторі, в якому розташування підшарів є невідомим. При цьому дифузійні властивості фаз можуть суттєво відрізнятися. Прийнято, що об'єм, який займає одна з фаз (матриця), є набагато більшим ніж інша (включення). Координати включень, а отже і підшарів матриці, невідомі, тобто структура тіла є випадково неоднорідною. Прийнято, що включення розташовані в області тіла за χ^2-розподілом (рис. 1).

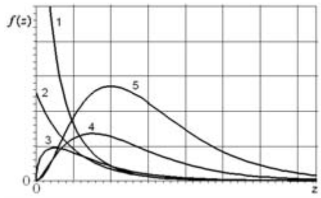

Рис. 1. Густина χ^2-розподілу для різних значень ступенів вільностей $n = 1; 2; 3; 5; 6$

Густина χ^2-розподілу зі ступенями вільності n в загальному випадку є

$$f(z)=\begin{cases}\dfrac{1}{\Gamma(n/2)}2^{-n/2}z^{n/2-1}e^{-z/2}, & z\ge 0;\\ 0, & z<0,\end{cases} \quad (1)$$

де $\Gamma(n/2)$ - Гама-функція; $n\in\mathrm{N}$.

Зауважимо, що при зміні параметра $n\in\overline{1,3}$ функція густини χ^2-розподілу (1) зменшується в приповерхневій області тіла (криві 1-3 на рис. 1). При зростанні ступеня вільності $n=4,\ 5,\ldots$ значення функції $f(z)$ збільшується на всьому проміжку, причому її максимум зростає і зсувається в глиб тіла. Це означає, що, якщо при $n=1$ і $n=2$ включення в основному розташовуються біля поверхні півпростору (рис. 2a), то з ростом n область найбільш імовірного знаходження включень зсувається вглиб тіла, та спостерігається ущільнення підшарів (рис. 2b). Причому об'єм цієї області збільшується.

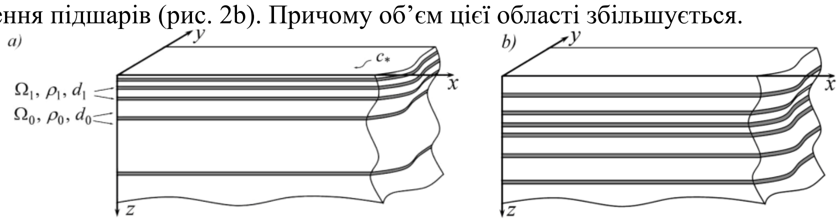

Рис. 2. Можливі реалізації структури багатошарового півпростору для χ^2 - розподілу включень при $n = 2$ (рис. а) і $n\ge 3$ (рис. b)

Процес дифузії домішкової речовини в таких тілах описується рівняннями дифузії, сформульованими для кожної з фаз Ω_j, $j=0,1$ [2]:

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

де $c_j(z,t)$ – випадкова концентрація домішкових частинок в області Ω_j; ρ_j, d_j – густина і кінетичний коефіцієнт переносу в Ω_j, n_j – кількість шарів фази j, Ω_{ij} – i-ий підшар фази j, $i=\overline{1,n_j}$, $j=0,1$.

В початковий момент домішкова речовина відсутня в тілі:

$$c_0(z,t)\big|_{t=0}=c_1(z,t)\big|_{t=0}=0, \quad (3)$$

а далі на границі півпростору підтримується її постійне значення

$$c_0(z,t)\big|_{z=0}=c_*\equiv const,\ c_0(z,t)\big|_{z\to\infty}=0. \quad (4)$$

На міжфазних границях накладено умови неідеального контакту для функції концентрації [1]:

$$k_0c_0(z,t)\big|_{z=z_l-0}=k_1c_1(z,t)\big|_{z=z_l+0},\ \rho_0d_0\partial c_0/\partial z\big|_{z=z_l-0}=\rho_1d_1\partial c_1/\partial z\big|_{z=z_l+0}; \quad (5)$$

$$k_1 c_1\big|_{z=z_l+h_{l1}-0} = k_0 c_0\big|_{z=z_l+h_{l1}+0}, \ \rho_1 d_1 \frac{\partial c_0}{\partial z}\bigg|_{z=z_l+h_{l1}-0} = \rho_0 d_0 \frac{\partial c_0}{\partial z}\bigg|_{z=z_l+h_{l1}+0}, \quad (6)$$

де k_j – коефіцієнт концентраційної залежності хімічного потенціалу у фазі j, h_{l1} – товщина включення Ω_{l1}, $l=\overline{1,n_l}$.

Розв'язок контактно-крайової задачі (2)-(6) шукаємо у вигляді ряду Неймана з використанням апарату теорії узагальнених функцій контактна задача зведена до рівняння масо перенесення в усьому тілі [2].

Розглянувши неоднорідність структури тіла як внутрішні джерела, отриманій контактно-крайовій задачі поставлено у відповідність еквівалентне інтегродиференціальне рівняння:

$$c(z,t) = c_0(z,t) + \int_0^t \int_{(V)} G(z,z',t,t') L_s(z',t') c(z',t') dz' dt', \quad (7)$$

тут $c_0(z,t)$ – розв'язок однорідного рівняння дифузії $L_0 c_0 = 0$, коефіцієнти якого є характеристиками домінуючої фази, (V) – область тіла з об'ємом V, $G(z,z',t,t')$ – функція Гріна.

Рівняння (7) розв'язувалось методом послідовних наближень, випадкове поле концентрації $c(z,t)$ побудовано у вигляді інтегрального ряду Неймана

$$c(z,t) = c_0(z,t) + \int_0^t \int_{(V)} G(z,z',t,t') L_s(z',t') c_0(z',t') dz' dt' + \ldots . \quad (8)$$

Показано, що ряд Неймана (8) є абсолютно і рівномірно збіжним для ρ_j, $d_j \le K_j < \infty$ і ρ_0, $d_0 \ne 0$.

Усереднення поля концентрації домішкової речовини проведено за ансамблем конфігурацій фаз з χ^2 -розподілом включень в області тіла.

Одержано розрахункову формулу для усередненого за ансамблем конфігурацій фаз поля концентрації домішкових частинок:

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

$$\left. + \int_h^\infty G\left[(\rho_0 - \rho_1)\frac{\partial c_0}{\partial t'} - (d_0 - d_1)\frac{\partial^2 c_0}{\partial z'^2} \right] \frac{(1/2)^{n/2}}{\Gamma(n/2)} \left(\gamma\left(\frac{n}{2}, \frac{z'}{2}\right) - \gamma\left(\frac{n}{2}, \frac{(z'-h)}{2}\right) \right) dz' \right] dt',$$

де $\gamma(\lambda, \alpha x) = \dfrac{1}{\alpha^{\lambda}} \int_0^x t^{\lambda-1} e^{-\alpha t} dt$ – неповна Гама-функція.

Числові розрахунки проводились в безрозмірних змінних $\tau = d_0 t / z_0$, $\xi = z / z_0$, $z_0 = 1$м. На рис. 3 проілюстровано розподіли усередненого за ансамблем конфігурацій фаз поля концентрації домішкової речовини у випадку χ^2-розподілу включень в залежності від різних значень ступеня вільності χ^2-розподілу $n = 1; 2; 3; 4; 6, 10$ (криві 1-6) в моменти часу $\tau = 2$ (рис.a), $\tau = 10$ (рис.b).

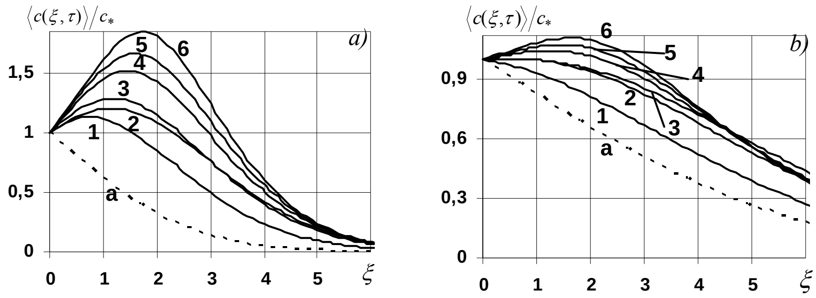

Рис. 3. Розподіли усередненої концентрації залежно від різних значень параметра n для $\tau = 2$ (рис.a) і $\tau = 10$ (рис.b)

Досліджено випадкові поля концентрації домішкової речовини, яка мігрує у двофазному багатошаровому півпросторі, включення якого розташовані за χ^2-розподілом.

Зі збільшенням параметра n, який визначає розташування включень в тілі, максимум усередненої концентрації домішки зростає і зсувається в глиб тіла, що пояснюється тим, що інтервал наймовірнішого знаходження шаруватих включень також зсувається вглиб тіла. При цьому чим більше n, тим більших значень досягає максимум концентрації. Проте для великих часів (близьких до усталеного режиму) ця різниця нівелюється.

1. *Чапля Є.Я., Чернуха О.Ю.* Математичне моделювання дифузійних процесів у випадкових і регулярних структурах. – Київ: Наукова думка, 2009. – 302 с.
2. *Чапля Є.Я., Чернуха О.Ю., Гончарук В.Є., Білущак Ю.І.* Моделювання процесів дифузії домішкових частинок у півпросторі з експонеціальним розподілом включень // Моделювання та інформаційні технології. – 2011. – Вип. 59. - С. 140-152.

MODELING A RANDOM CONCENTRATION FIELD IN A TWO-PHASE STRATIFIED SEMISPACE WITH χ^2-DISTRIBUTION OF INCLUSIONS

Admixture diffusion processes are studied in a two-phase semispace with randomly nonhomogeneous structure allowing for nonideal mass contact conditions on interphases. Layered inclusions are disposed over the χ^2*-distribution. Influence of material characteristics on behaviour of admixture averaged concentration is established.*