УДК 517.958:532.72

МОДЕЛЮВАННЯ ДИФУЗІЙНИХ ПОТОКІВ У ВИПАДКОВО-НЕОДНОРІДНІЙ ТРИШАРОВІЙ СМУЗІ

Чернуха О.Ю., Давидок А.Є.

Центр математичного моделювання ІППММ ім. Я. С. Підстригача НАН України, вул. Дж. Дудаєва, 15, 79005, Львів, e-mail: cher@cmm.lviv.ua;
Прикарпатський національний університет ім.В.Стефаника, вул. Т. Шевченка, 57, 76025, Івано-Франківаськ, e-mail: davydoka@gmail.com

Під час дослідження потоків маси домішкової речовини у багатофазних тілах випадково неоднорідної структури процедура усереднення за ансамблем конфігурацій фаз може викликати значні труднощі, оскільки невідомими є функції кореляції градієнта стохастичного поля концентрації та випадкового коефіцієнта дифузії. Тому у роботі [1] запропоновано крайові задачі дифузії формулювати безпосередньо для потоку, що дозволяє шукане випадкове поле подати у вигляді ряду Неймана, зручного для проведення процедури усереднення за ансамблем конфігурацій фаз.

Застосовуючи такий підхід, у даній роботі розв’язано два випадки крайової задачі для смуги з випадково розташованим прошарком.

Відповідно до [1], в загальному випадку процес перерозподілу маси в тілі описується співвідношеннями

$$\frac{\partial c(\vec{r},t)}{\partial t} = -\vec{\nabla}\cdot\vec{J}(\vec{r},t)\,,\ \vec{J}(\vec{r},t) = -D(\vec{r})\vec{\nabla}c(\vec{r},t) \qquad (1)$$

де $c(\vec{r},t)$ – концентрація частинок домішки, $\vec{J}(\vec{r},t)$ – потік маси, $\vec{\nabla}$ – набла-оператор Гамільтона, крапкою позначена операція скалярного добутку, $\vec{r}$ – радіус-вектор біжучої точки, t – час.

Застосувавши до першого з рівнянь (1) оператор $-\vec{\nabla}$ і використавши друге, для потоку отримали наступну рівність

$$\frac{\partial\vec{J}(\vec{r},t)}{\partial t} = D(\vec{r})\left(\vec{\nabla}\otimes\vec{\nabla}\right)\cdot\vec{J}(\vec{r},t)\,, \qquad (2)$$

де $\vec{\nabla}\otimes\vec{\nabla} = \nabla_i\nabla_j\,\vec{i}^{\,i}\otimes\vec{i}^{\,j}$ ($i,j=1,2,3$), «$\otimes$»– тензорний добуток, $\nabla_1 = \partial/\partial x$, $\nabla_2 = \partial/\partial y, \nabla_3 = \partial/\partial z$, $\vec{i}^{\,i}$ – базисний вектор ($\vec{i}^{\,1} = \vec{i}$, $\vec{i}^{\,2} = \vec{j}$, $\vec{i}^{\,3} = \vec{k}$) .

В одновимірному випадку рівняння (2) набуває вигляду

$$\frac{\partial J(z,t)}{\partial t} = D(z)\frac{\partial^2 J(z,t)}{\partial z^2}\,. \qquad (3)$$

Розглянуто процес дифузії домішки у смузі товщиною z_0 з випадково розташованим прошарком, за умови, що об’ємна частка базової фази v_0 набагато більша за об’ємну частку включення v_1. Враховано, що випадковий коефіцієнт дифузії рівняння (3) є сталим у межах фаз:

$$D(z)=\begin{cases}D_0, & z\in\Omega_0;\\ D_1, & z\in\Omega_1,\end{cases} \qquad (4)$$

де $\Omega_0=\left]0;z_1\right[\cup\left]z_2;z_0\right[$ – область, яку займає матриця, а $\Omega_1=\left]z_1;z_2\right[$ – область включення, z_1 і z_2 – випадкові координати меж включення.

Прийнято, що в початковий момент часу в тілі відсутній дифузійний потік частинок і заданий розподіл концентрації в тілі. Зокрема, розглянуто два випадки – розподіл концентрації у смузі є нульовим, або ж відомий сталий ненульовий розподіл концентрації $C_*\equiv const$. На границі $z=0$ підтримується постійне значення потоку, а на границі шару $z=z_0$ концентрація домішкових частинок є нульовою. А саме

$$J(z,t)\big|_{t=0}=0\,;\quad J(z,t)\big|_{z=0}=J_*\equiv const\,,\quad J(z,t)\big|_{z=z_0}=F(t)\,. \qquad (5)$$

При цьому дифузійний потік на цій поверхні було додатково визначено, з відповідних крайових задач для концентрації та з використанням першого закону Фіка.

Введено до розгляду випадкову функцію просторової координати типу одиничної функції Хевісайда [2]:

$$\eta_{ij}(z)=\begin{cases}1, & z\in\Omega_{ij};\\ 0, & z\notin\Omega_{ij},\end{cases}\qquad \sum_{j=0}^{1}\sum_{i=1}^{n_j}\eta_{ij}(z)=1\,. \qquad (6)$$

Тут j – номер фази ($j=\overline{0,1}$), зокрема $j=0$ відповідає матриці, i – номер включення в рамках фази ($i=\overline{1,n_j}$, де n_j – кількість підшарів сорту j), Ω_{ij} – i-та однозв’язна область j-ї фази.

Використовуючи подання коефіцієнта дифузії (4) через функцію η_{ij} (6) та враховуючи умову суцільності тіла, рівняння (3) зводимо до форми

$$L_0(z,t)J(z,t)=L_s(z,t)J(z,t), \qquad (7)$$

де $L_0(z,t)=\partial/\partial t-D_0\partial^2/\partial z^2$, $L_s(z,t)\equiv L_s(z)=(D_1-D_0)\eta_1(z)\partial^2\big/\partial z^2$,

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

Розглядаючи неоднорідність структури тіла як внутрішні джерела, розв’язок крайової задачі (7), (5) подано у вигляді суми розв’язку однорідної крайової задачі $J_0(z,t)$ та згортки функції Гріна з джерелом $G(z,z',t,t')$:

$$J(z,t) = J_0(z,t) + \int_0^t \int_0^{z_0} G(z,z',t,t') L_s(z') J(z',t') dz'dt' . \qquad (8)$$

Зокрема, за нульового розподілу концентрації в початковий момент часу

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

а у випадку сталого ненульового розподілу концентрації у смузі

$$J_0(z,t) = J_* - \frac{2}{z_0} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-D_0 \xi_n^2 t} \left(J_* / \xi_n + (-1)^n C_* D_0 \right) \sin(\xi_n z) . \qquad (10)$$

Функція Гріна є однаковою для обидвох випадків і визначається рівністю:

$$G(z,z',t,t') = \frac{\theta(t-t')}{\pi} \sum_{k=1}^{\infty} e^{-D_0 y_k{}^2 (t-t')} \left[\cos\left(y_k (z-z')\right) - \cos\left(y_k (z+z')\right) \right], \qquad (11)$$

де $y_k = k\pi / z_0$.

Розв’язок рівняння (8) побудований ітеруванням у вигляді ряду Неймана. Обмежившись двома першими членами цього ряду та припускаючи, що фази у тілі розташовані за рівномірним законом розподілу, одержано усереднений за ансамблем реалізацій структури тіла вираз для потоку:

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

$$\left. + v_1 \int_h^{z_0} G(z,z',t,t') \frac{\partial^2 J_0(z',t')}{\partial z'^2} dz' \right] dt' , \qquad (12)$$

де h – товщина включення.

Підставляючи у (12) функцію Гріна (11) та вираз (9) для потоку маси в однорідній смузі, отримано розрахункову формулу

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

$$+ \frac{2 v_1}{z_0^2} \cdot \frac{(D_1 - D_0)}{D_0} \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\xi_n A_{kn}}{y_k^2 - \xi_n^2} \left[\frac{3}{2} e^{-D_0 \xi_n^2 t} - e^{-D_0 y_k^2 t} \right] \sin(y_k z) .$$

Якщо розв’язок однорідної задачі задається формулою (10), маємо

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

$$+\frac{2v_1}{z_0^2}\cdot\frac{(D_1-D_0)}{D_0}\sum_{k=1}^{\infty}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\xi_n\ A_{kn}}{y_k^2-\xi_n^2}\left(1+(-1)^n D_0\frac{C_*}{J_*}\xi_n\right)\left(\frac{3}{2}e^{-D_0\xi_n^2 t}-e^{-D_0 y_k^2 t}\right)\sin(y_k z)\,.$$

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

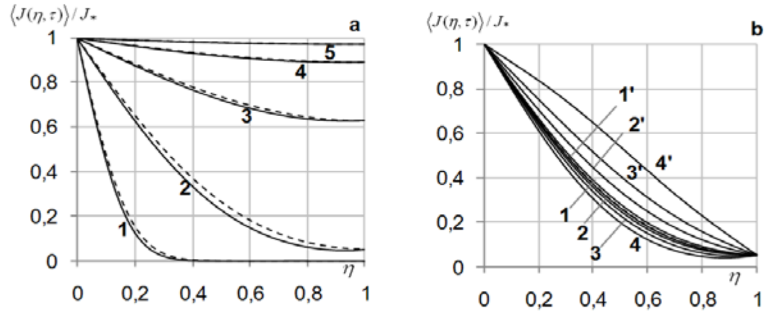

Рис. 1. Розподіли потоків маси у смузі в різні моменти безрозмірного часу для D_1 / D_0 *= 0,01 (рис. а) та при різних значеннях товщини прошарку h (рис. b)*

На основі знайдених формул, було проведено чисельні розрахунки і встановлено залежність поведінки та величини усередненого дифузійного потоку від характеристик матеріалу смуги за нульової (Рис.1) та ненульової сталої концентрації частинок домішки в початковий момент часу. Зокрема встановлено, що у випадку більшого коефіцієнта дифузії домішки у прошарку ніж у матриці дифузійний потік у тришаровій смузі майже завжди менший ніж в однорідному тілі.

1. *Чапля Є., Чернуха О., Васьо Н.* Математичне моделювання потоків в шарі // Вісник Львів. ун-ту: Серія прикл. матем. інформ. - 2011. – Вип.17. – С. 103-115.
2. *Рытов С.М., Кравцов Ю.А., Татарский В.И.* Введение в статистическую радиофизику Ч. II. Случайные поля. – М.: Наука, 1978. – 436 с.

MODELLING DIFFUSION FLOWS IN A RANDOMLY NONHOMOGENEOUS THREE-LAYERED STRIP

The paper is devoted to mathematical modeling diffusion flows in a strip with a randomly disposed sublayer. A diffusion equation is formulated for the flow function. Solution is constructed in terms of Neumann series and averaged of the ensemble of structure realizations.