УДК 517.958: 532.72

Є. Я. Чапля[1,2], О. Ю. Чернуха[1], Ю. І. Білущак[1]

КОНТАКТНО-КРАЙОВА ЗАДАЧА ДИФУЗІЇ ДОМІШКОВИХ ЧАСТИНОК У ДВОФАЗНІЙ СТОХАСТИЧНО НЕОДНОРІДНІЙ ШАРУВАТІЙ СМУЗІ

Робота присвячена математичному моделюванню процесів дифузії домішкової речовини у двофазній шаруватій смузі випадково неоднорідної структури з урахуванням умов неідеального контакту концентрації на границях розділу фаз. Сформульовано еквівалентне інтегро-диференціальне рівняння, розв'язок якого побудовано у вигляді інтегрального ряду Неймана. Усереднення отриманого розв'язку проведено за ансамблем конфігурацій фаз з рівномірною функцією розподілу. Визначено вплив характеристик матеріалу на поведінку і величину усередненого поля концентрації домішкових частинок.

В інженерній практиці широко використовують природні та штучні матеріали, які мають складну, зокрема багатофазну, структуру. Їх застосування вимагає оцінки розподілів і поведінки температурних та дифузійних полів у залежності від умов внутрішнього міжфазного контакту, зовнішніх дій та можливих просторових реалізацій структури [15, 16]. При цьому для таких середовищ, як правило, є невідомими дані про конкретне просторове розташування окремих фаз, проте є достатньо інформації про їхні об'ємні частки та основні фізико-хімічні властивості [13, 18].

Поряд з методами гомогенізації неоднорідної структури тіла [10, 14, 17], які як малий параметр використовують відношення розмірів неоднорідностей до відстані істотної зміни досліджуваних полів (температури, концентрації), в останні роки розвинуто підходи, що опираються на апарат теорії узагальнених функцій та усереднення за ансамблем допустимих просторових реалізацій розташування фаз [11]. В останньому випадку при формулюванні рівняння переносу домішкової речовини для багатофазного тіла в цілому використовується рівняння дифузії, в якому коефіцієнт дифузії вважається випадковою функцією. Проте часто інформація про окремі фази містить дані про їх густину та кінетичні характеристики мігруючих частинок.

У цій роботі розв'язано контактно-крайову задачу дифузії у двофазній випадково неоднорідній багатошаровій смузі. При цьому рівняння дифузії в контактуючих областях сформульовано з використанням кінетичних коефіцієнтів дифузії, що при зведенні задачі до еквівалентного інтегро-диференціального рівняння призводить до врахування похідної за часом в його операторі.

1. Об'єкт дослідження. Постановка задачі. Нехай домішкові частинки мігрують у шарі товщини z_0, який складається з підшарів двох типів (фаз). При цьому розташування цих підшарів є невідомим. Одна з можливих реалізацій структури багатошарового тіла, в якому дифундує домішкова речовина, подана на рис. 1. Вважаємо, що дифузійні властивості фаз (області Ω_0 і Ω_1), з яких складене тіло, можуть суттєво відрізнятися. Приймаємо, що фази в тілі розташовані за рівномірним розподілом і об'ємна частка v_1 області Ω_1 є набагато меншою за об'ємну частку v_0 області Ω_0, тобто $v_1 \ll v_0$.

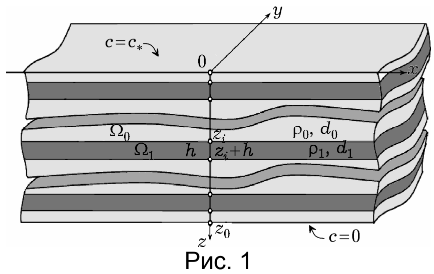

Рис. 1

Концентрація домішкових частинок $c_j(z,t)$ в області Ω_j визначається з рівняння дифузії

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

де ρ_j – густина області Ω_j; d_j – кінетичний коефіцієнт дифузії частинок в цій області; n_j – кількість підшарів фази j; Ω_{ij} – i-та однозв'язна область фази j, $i = 1,\ldots,n_j$, $j = 0,1$.

Приймаємо нульові початкові умови, а також, що на границі тіла $z = 0$ підтримується постійне значення концентрації домішкової речовини c_*, а на нижній границі $z = z_0$ – вона дорівнює нулеві:

$$c_0(z,t)\big|_{t=0} = c_1(z,t)\big|_{t=0} = 0, \quad c_0(z,t)\big|_{z=0} = c_* \equiv \text{const}, \quad c_0(z,t)\big|_{z=z_0} = 0. \tag{2}$$

На границях поділу областей $z = z_1$ і $z = z_2$ виконуються умови рівності хімічних потенціалів та дифузійних потоків частинок домішкової речовини. Якщо прийняти лінійну залежність хімічного потенціалу від концентрації, то отримуємо умови неідеального контакту у вигляді [12]

$$k_0 c_0(z,t)\big|_{z=z_i-0} = k_1 c_1(z,t)\big|_{z=z_i+0}, \quad d_0 \frac{\partial c_0}{\partial z}\bigg|_{z=z_i-0} = d_1 \frac{\partial c_1}{\partial z}\bigg|_{z=z_i+0}, \tag{3}$$

$$k_1 c_1\big|_{z=z_i+h_{i1}-0} = k_0 c_0\big|_{z=z_i+h_{i1}+0}, \quad d_1 \frac{\partial c_1}{\partial z}\bigg|_{z=z_i+h_{i1}-0} = d_0 \frac{\partial c_0}{\partial z}\bigg|_{z=z_i+h_{i1}+0}, \tag{4}$$

де k_j – коефіцієнт концентраційної залежності хімічного потенціалу в j-й фазі [11]; z_i – випадкова координата «верхньої» межі розташування області Ω_{i1} (рис. 1); h_{i1} – товщина підшару Ω_{i1}.

Зазначимо, що при такій постановці задачі випадковими величинами є границі контакту $z = z_i$ та $z = z_i + h_{i1}$, тобто межі областей Ω_0 та Ω_1, які є внутрішніми для тіла. Це, в свою чергу, призводить до стохастичності поля концентрації домішкової речовини, яка мігрує в тілі.

2. Рівняння масоперенесення для усього тіла. Розв'язок сформульованої контактно-крайової задачі (1)–(4) будемо шукати у вигляді інтегрального ряду Неймана [3, 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 концентрацію в усьому тілі:

$$c(z,t) = \begin{cases} c_j(z,t) - \text{розв'язок рівняння (1)}, & z \in \Omega_j,\ j = 0, 1, \\ \text{контактні умови (3)}, & z = z_i,\ \ i = 1,n_i, \\ \text{контактні умови (4)}, & z = z_i + h_{i1},\ \ i = 1,n_i. \end{cases} \tag{5}$$

Знайдемо похідну від функції (5), враховуючи, що функція $c(z,t)$ в області тіла має розриви I-го роду (перші з умов (3), (4)). Оскільки в загальному випадку [1]

$$f'(x) = \{f'(x)\} + \sum_{\ell} [\![f]\!]_{x_\ell} \delta(x - x_\ell), \tag{6}$$

де $\{f'(x)\}$ – кусково-неперервна функція, $[\![f]\!]_{x_\ell}$ – стрибок функції $f(x)$ у точці x_ℓ, $\delta(x)$ – дельта-функція Дірака, то для розглядуваної задачі маємо

$$\frac{\partial c}{\partial z} = \left\{\frac{\partial c}{\partial z}\right\} + \sum_{\ell=1}^{n_1} \left([\![c(z,t)]\!]_{z=z_\ell} \delta(z - z_\ell) + [\![c(z,t)]\!]_{z=z_\ell+h_{\ell 1}} \delta(z - (z_\ell + h_{\ell 1})) \right). \tag{7}$$

Знайдемо другу похідну за змінною z від функції $c(z,t)$. Оскільки $\partial c/\partial z$ теж має розриви I-го роду (другі з умов (3), (4)), то для диференціювання функції (7) також застосуємо формулу (6):

$$\frac{\partial^2 c}{\partial z^2} = \left\{\frac{\partial^2 c}{\partial z^2}\right\} + \sum_{\ell=1}^{n_1}\left(\left[\frac{\partial c}{\partial z}\right]_{z=z_\ell} \delta(z-z_\ell) + [c(z,t)]_{z=z_\ell}\delta'(z-z_\ell)\right) + \\ + \sum_{\ell=1}^{n_1}\left(\left[\frac{\partial c}{\partial z}\right]_{z=z_\ell+h_{\ell 1}} \delta(z-(z_\ell+h_{\ell 1})) + \right. \\ \left. + [c(z,t)]_{z=z_\ell+h_{\ell 1}}\delta'(z-(z_\ell+h_{\ell 1}))\right), \tag{8}$$

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

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

$$\rho(z) = \sum_{i=1}^{n_1}\{\rho_0\}_{z\in\Omega_{i0}} + \sum_{i=1}^{n_1}\{\rho_1\}_{z\in\Omega_{i1}}, \qquad d(z) = \sum_{i=1}^{n_1}\{d_0\}_{z\in\Omega_{i0}} + \sum_{i=1}^{n_1}\{d_1\}_{z\in\Omega_{i1}}.$$

При цьому на границях контакту $z = z_\ell$ і $z = z_\ell + h_{\ell 1}$ відбувається стрибок цих коефіцієнтів:

$$[\rho(z)]_{z=z_\ell} = -[\rho(z)]_{z=z_\ell+h_{\ell 1}} = \rho_1 - \rho_0,$$

$$[d(z)]_{z=z_\ell} = -[d(z)]_{z=z_\ell+h_{\ell 1}} = d_1 - d_0, \quad \ell = 1,\ldots,n_1.$$

Тоді з урахуванням співвідношення (8) рівняння дифузії для тіла в цілому запишемо у вигляді

$$\rho(z)\frac{\partial c}{\partial t} = d(z)\left[\left\{\frac{\partial^2 c}{\partial z^2}\right\} + \sum_{\ell=1}^{n_1}\left(\left[\frac{\partial c}{\partial z}\right]_{z=z_\ell}\delta(z-z_\ell) + [c(z,t)]_{z=z_\ell}\delta'(z-z_\ell)\right) + \right. \\ + \sum_{\ell=1}^{n_1}\left(\left[\frac{\partial c}{\partial z}\right]_{z=z_\ell+h_{\ell 1}}\delta(z-(z_\ell+h_{\ell 1})) + \right. \\ \left.\left. + [c(z,t)]_{z=z_\ell+h_{\ell 1}}\delta'(z-(z_\ell+h_{\ell 1}))\right)\right]. \tag{9}$$

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

3. Інтегро-диференціальне рівняння, еквівалентне вихідній крайовій задачі. Введемо в розгляд випадкову функцію просторової координати («функцію структури») [7]

$$\eta_{ij}(z) = \begin{cases} 1, & z\in\Omega_{ij}, \\ 0, & z\notin\Omega_{ij}, \end{cases} \qquad \sum_{j,i}\eta_{ij}(z) = 1. \tag{10}$$

Коефіцієнти рівняння (9) подамо через функцію $\eta_{ij}(z)$ (10):

$$\rho(z) = \sum_{j=0}^{1}\sum_{i=1}^{n_j}\rho_j\eta_{ij}(z), \qquad d(z) = \sum_{j=0}^{1}\sum_{i=1}^{n_j} d_j\eta_{ij}(z), \tag{11}$$

і підставимо таке подання (11) у рівняння (9). Тоді з використанням умови суцільності тіла рівняння (11) набуде вигляду

$$\sum_{j=0}^{1}\sum_{i=1}^{n_j}\rho_j\eta_{ij}(z)\left\{\frac{\partial c}{\partial t}\right\} = \sum_{j=0}^{1}\sum_{i=1}^{n_j} d_j\eta_{ij}(z)\left[\left\{\frac{\partial^2 c}{\partial z^2}\right\} + \sum_{\ell=1}^{n_1}\left(\left[\frac{\partial c}{\partial z}\right]_{z=z_\ell}\delta(z-z_\ell) + \right.\right. \\ \left. + [c(z,t)]_{z=z_\ell}\delta'(z-z_\ell)\right) + \sum_{\ell=1}^{n_1}\left(\left[\frac{\partial c}{\partial z}\right]_{z=z_\ell+h_{\ell 1}}\delta(z-(z_\ell+h_{\ell 1})) + \right. \\ \left.\left. + [c(z,t)]_{z=z_\ell+h_{\ell 1}}\delta'(z-(z_\ell+h_{\ell 1}))\right)\right]. \tag{12}$$

Якщо оператор рівняння (12) позначити через $L(z,t)$, тобто

$$L(z,t) \equiv \sum_{j,i} \rho_j \eta_{ij}(z) \left\{ \frac{\partial}{\partial t} \right\} - \sum_{j,i} \left[d_j \eta_{ij}(z) \left\{ \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right\} + \right.$$
$$+ \sum_{\ell=1}^{n_1} \left(\left[\frac{\partial}{\partial z} \right]_{z=z_\ell} \delta(z - z_\ell) + [\;]_{z=z_\ell} \delta'(z - z_\ell) \right) +$$
$$+ \sum_{\ell=1}^{n_1} \left(\left[\frac{\partial}{\partial z} \right]_{z=z_\ell + h_{\ell 1}} \delta(z - (z_\ell + h_{\ell 1})) + \right.$$
$$\left. \left. + [\;]_{z=z_\ell + h_{\ell 1}} \delta'(z - (z_\ell + h_{\ell 1})) \right) \right], \tag{13}$$

тоді рівняння (12) можна подати у вигляді

$$L(z,t) c(z,t) = 0 . \tag{14}$$

У рівнянні (14) додамо і віднімемо детермінований оператор дифузії $L_0(z,t) = \rho_0 \dfrac{\partial}{\partial t} - d_0 \dfrac{\partial^2}{\partial z^2}$, коефіцієнти якого є характеристиками матеріалу фази Ω_0. Отже, маємо

$$L_0(z,t) c(z,t) = L_s(z,t) c(z,t) , \tag{15}$$

де позначено $L_s(z,t) = L_0(z,t) - L(z,t)$.

Вважаємо праву частину рівняння (15) джерелом. Тоді розв'язок крайової задачі (15), (2) можна подати у вигляді:

$$c(z,t) = c_0(z,t) + \int_0^t \int_0^{z_0} G(z,z',t,t') L_s(z',t') c(z',t') \, dz' \, dt' , \tag{16}$$

де $c_0(z,t)$ − розв'язок однорідного рівняння з умовами (2), тобто [5]

$$c_0(z,t) = c_* \left(1 - \frac{z}{z_0} \right) - \frac{2}{z_0} \sum_{n=1}^{\infty} c_* e^{-d_0 y_n^2 t / \rho_0} \frac{\sin(y_n z)}{y_n} , \tag{17}$$

$y_n = n\pi / z_0$; $G(z,z',t,t')$ − функція Ґріна задачі (15), (2) [9]:

$$G(z,z',t,t') = \frac{2\theta(t-t')}{z_0 \rho_0} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-d_0 y_n^2 (t-t')/\rho_0} \sin(y_n z) \sin(y_n z') . \tag{18}$$

Таким чином побудували інтегро-диференціальне рівняння (16), еквівалентне вихідній контактно-крайовій задачі. Рівняння (16) з випадковим ядром є рівнянням Вольтерра ІІ-го роду за часовою змінною і Гаммерштейна за просторовою.

4. Ряд Неймана. Розв'язок інтегро-диференціального рівняння (16) шукаємо у вигляді ряду Неймана [7] методом послідовних наближень [3].

За нульове наближення $c^{(0)}(z,t)$ вибираємо розв'язок однорідної крайової задачі (17). Тоді отримаємо наступні рекурентні співвідношення:

$$c^{(0)}(z,t) = c_0(z,t) ,$$

$$c^{(1)}(z,t) = c_0(z,t) + \int_0^t \int_0^{z_0} G(z,z',t,t') L_s(z',t') c^{(0)}(z',t') \, dz' \, dt' ,$$

$$\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots ,$$

$$c^{(n)}(z,t) = c_0(z,t) + \int_0^t \int_0^{z_0} G(z,z',t,t') L_s(z',t') c^{(n-1)}(z',t') \, dz' \, dt' ,$$

$$\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots \tag{19}$$

Зауважимо, що, оскільки $c_0(z,t)$ є неперервно диференційованою функцією, дія на неї оператора $L_s(z,t)$ зведеться до виразу

$$L_s(z,t)c_0(z,t) = (\rho_0 - \rho_1)\sum_{i=1}^{n_1} \eta_{i1}(z)\left\{\frac{\partial c_0}{\partial t}\right\} + (d_0 - d_1)\sum_{i=1}^{n_1} \eta_{i1}(z)\left\{\frac{\partial^2 c_0}{\partial z^2}\right\}. \quad (20)$$

У побудованій послідовності функцій $c^{(0)}, c^{(1)}, \ldots, c^{(n)}, \ldots$ (19) загальний член можна подати так:

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

$$+ \int_0^t \int_0^{z_0} G(z,z',t,t')L_s(z',t')\int_0^{t'} \int_0^{z_0} G(z',z'',t',t'')L_s(z'',t'') \times \ldots \times$$

$$\times \int_0^{t^{(n-2)}} \int_0^{z_0} G\left(z^{(n-2)}, z^{(n-1)}, t^{(n-2)}, t^{(n-1)}\right) L_s\left(z^{(n-1)}, t^{(n-1)}\right) \times$$

$$\times c_0\left(z^{(n-1)}, t^{(n-1)}\right) dz^{(n-1)}\,dt^{(n-1)} \ldots dz'\,dt' + R_n(z,t),$$

де $R_n(z,t)$ − різниця між n-м та $(n-1)$-м членами послідовності:

$$R_n(z,t) = \int_0^t \int_0^{z_0} G(z,z',t,t')L_s(z',t')\int_0^{t'} \int_0^{z_0} G(z',z'',t',t'')L_s(z'',t'') \times \ldots \times$$

$$\times \int_0^{t^{(n-1)}} \int_0^{z_0} G\left(z^{(n-1)}, z^{(n)}, t^{(n-1)}, t^{(n)}\right) \times$$

$$\times L_s\left(z^{(n)}, t^{(n)}\right) c_0\left(z^{(n)}, t^{(n)}\right) dz^{(n)}\,dt^{(n)} \ldots dz'\,dt'.$$

Побудованій послідовності поставимо у відповідність такий ряд:

$$c(z,t) \equiv c_0(z,t) + \sum_{n=1}^{\infty} R_n(z,t), \quad (21)$$

який є інтегральним рядом Неймана.

Твердження. *Якщо густини* ρ_0, ρ_1 *і коефіцієнти дифузії* d_0, d_1 *є обмеженими і* $\rho_0 \neq 0$, $d_0 \neq 0$, *то для функції Ґріна* $G(z,z',t,t')$ *та поля концентрації* $c_0(z,t)$ *виконуються такі умови:*

1°) $\left|G(z,z',t,t')\right| \le K_1 < \infty \qquad \forall z,z' \in [0,z_0], \quad \forall t' \in [0,t], \quad \forall t \in [0,\tau]$;

2°) $\left|L_s(z,t)G(z,z',t,t')\right| \le K_2 < \infty \quad \forall z,z' \in [0,z_0], \quad \forall t' \in [0,t], \quad \forall t \in [0,\tau]$;

3°) $\left|L_s(z,t)c_0(z,t)\right| \le K_3 < \infty \quad \forall z \in [0,z_0], \quad \forall t \in [0,\tau]$. (22)

Д о в е д е н н я. ***1***°). Покажемо, що функція Ґріна є обмеженою. Для загального члена ряду (18) справджується оцінка

$$\left|e^{-d_0 y_n^2 (t-t')/\rho_0} \sin(y_n z')\sin(y_n z)\right| \le e^{-d_0 y_n^2 (t-t')/\rho_0} \quad (23)$$

в області $[0,z_0] \cup \left[[0,\tau] \cap \{t = t'\}\right]$.

Оскільки за ознакою Даламбера [4] мажорантний ряд $\sum_{n=1}^{\infty} e^{-d_0 y_n^2 (t-t')/\rho_0}$ є абсолютно збіжним, то за ознакою Вейєрштраса рівномірної збіжності ряду ряд (23) є абсолютно і рівномірно збіжним. Тоді послідовність його часткових сум також є абсолютно і рівномірно збіжною. Оскільки збіжна послідовність у метричному просторі є обмеженою, то ряд теж є обмеженим [4], і функція $G(z, z', t, t')$ обмежена для $\forall z, z' \in [0, z_0]$, $\forall t, t' \in [0, \tau]$ при $t \neq t'$.

Для того щоб показати обмеженість функції $G(z, z', t, t')$ у точці $t = t'$, скористаємося такою властивістю: неперервна функція є обмеженою на замкненому проміжку [4], і покажемо, що $G(z, z', t, t')$ є неперервною функцією своїх аргументів в області $[0, z_0] \bigcup \left[[0, \tau] \bigcap \{t = t'\}\right]$.

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

Оскільки виконуються такі умови [8]:

$$e^z < (1 - z)^{-1}, \quad z < 1, \qquad e^{-az} \le 1, \quad a, z \ge 0, \tag{24}$$

то, підсумовуючи відповідні вирази [6], маємо

$$\begin{aligned} &|G(z, z', t, t') - G(z, z', t', t')| < \\ &< \frac{1}{2z_0\rho_0}\left(\left|\sum_{n=1}^{\infty} \cos(y_n(z - z'))\left[\frac{1}{1 + y_n^2 \delta d_0/\rho_0} - 1\right]\right| + \right. \\ &\left. + \left|\sum_{n=1}^{\infty} \cos(y_n(z + z'))\left[\frac{1}{1 + y_n^2 \delta d_0/\rho_0} - 1\right]\right|\right) \le \\ &\le \frac{z_0}{2\sqrt{\delta d_0/\rho_0}} \operatorname{ch}^2\left(\frac{z_0}{2\sqrt{\delta d_0/\rho_0}}\right)\left(\operatorname{sh}\left(\frac{z_0}{2\sqrt{\delta d_0/\rho_0}}\right)\right)^{-1} = \varepsilon. \end{aligned}$$

Отже, для довільного наперед заданого ε існує δ, яке є розв'язком тригонометричного рівняння

$$\frac{z_0}{2\sqrt{\delta d_0/\rho_0}} \operatorname{ch}^2\left(\frac{z_0}{2\sqrt{\delta d_0/\rho_0}}\right)\left(\operatorname{sh}\left(\frac{z_0}{2\sqrt{\delta d_0/\rho_0}}\right)\right)^{-1} = \varepsilon.$$

Тому функція $G(z, z', t, t')$ є неперервною в точці $t = t'$, а отже, і обмеженою. Таким чином, функція Ґріна $G(z, z', t, t')$ є обмеженою в усій області визначення своїх аргументів, тобто існує таке K_1, що $|G(z, z', t, t')| \le K_1$.

2°). Покажемо спочатку, що функція $|L_s(z, t) G(z, z', t, t')|$ є обмеженою в усій області визначення, крім точки $t = t'$. З урахуванням виразу (18) одержимо

$$\begin{aligned} L_s(z, t)\, G(z, z', t, t') &= \left(\frac{\rho_1}{\rho_0^2} - \frac{d_1}{\rho_0}\right)\frac{2}{z_0}\sum_{i=1}^{n_1} \eta_{i1}(z) \sum_{n=1}^{\infty} y_n^2 e^{-d_0 y_n^2 (t - t')/\rho_0} \times \\ &\times \sin(y_n z) \sin(y_n z'). \end{aligned} \tag{25}$$

Оскільки виконуються нерівності

$$\left|\frac{\rho_1}{\rho_0^2} - \frac{d_1}{\rho_0}\right| \le d_m, \quad |\sin x| \le 1, \;\; d_m = \max\left\{\frac{\rho_1}{\rho_0^2}, \frac{d_1}{\rho_0}\right\}, \quad \left|\sum_{i=1}^{n_1} \eta_{i1}(x)\right| \le n_1 < \infty,$$

то маємо

$$|L_s G| \le \frac{2 d_m n_1}{z_0} \sum_{n=1}^{\infty} y_n^2 e^{-d_0 y_n^2 (t - t')/\rho_0} \le \frac{2 d_m n_1 \pi^2}{z_0^3} \sum_{n=1}^{\infty} n^2 e^{-d_0 \pi^2 (t - t') n/\rho_0 z_0^2}.$$

Враховуючи, що

$$\sum_{k=1}^{\infty} k^2 x^k = \frac{x(x + 1)}{(1 - x)^3} = \frac{1 + x^{-1}}{(x^{-1} - 1)(x + x^{-1} - 2)},$$

отримуємо

$$|L_s G| \le \frac{2d_m n_1 \pi^2 (1+e^{\bar{d}(t-t')})}{z_0^3 (1-e^{\bar{d}(t-t')})(e^{\bar{d}(t-t')} + e^{-\bar{d}(t-t')} - 2)} \le \frac{2d_m n_1 \pi^2}{z_0^3} \frac{1+e^{-\bar{d}(t-t')}}{((1-e^{-\bar{d}(t-t')})^3}, \tag{26}$$

де $\bar{d} = \dfrac{d_0 \pi^2}{\rho_0 z_0^2}$. Оскільки $t - t' = \sigma > 0$ і $\dfrac{1+e^{-\bar{d}\sigma}}{(1-e^{-\bar{d}\sigma})^3} \le 1$, то

$$|L_s G| \le \frac{2d_m n_1 \pi^2}{z_0^3} \frac{1+e^{-\bar{d}\sigma}}{(1-e^{-\bar{d}\sigma})^3} \le \frac{2d_m n_1 \pi^2}{z_0^3} = K_2. \tag{27}$$

Для того щоб показати обмеженість функції $L_s(z,t)\,G(z,z',t,t')$ у точці $t' = t$, знову скористаємося обмеженістю неперервної функції на замкненому проміжку. Функція $L_s(z,t)\,G(z,z',t,t')$ буде 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, що

$$|L_s(z,t) G(z,z',t,t') - L_s(z,t) G(z,z',t,t)| < \varepsilon. \tag{28}$$

Оскільки виконуються умови (24), то зі співвідношення (25) маємо [6]

$$\begin{aligned} &|L_s(z,t) G(z,z',t,t') - L_s(z,t) G(z,z',t,t)| \le \\ &\le \frac{d_m n_1}{2} \left| \sum_{n=1}^{\infty} \cos y_n (z-z') \left[\frac{y_n}{1 + y_n^2 \delta d_0/\rho_0} - 1 \right] \right| + \\ &+ \frac{d_m n_1}{2} \left| \sum_{n=1}^{\infty} \cos y_n (z+z') \left[\frac{y_n}{1 + y_n^2 \delta d_0/\rho_0} - 1 \right] \right| \le \\ &\le \frac{d_m n_1}{4} \left\{ 2 + \frac{z_0}{(\delta d_0/\rho_0)^{3/2}} \left[1 + \right.\right. \\ &\left.\left. + \operatorname{ch}\left(\frac{2z_0}{\sqrt{\delta d_0/\rho_0}} \right) \left(\operatorname{ch}\left(\frac{z_0}{\sqrt{\delta d_0/\rho_0}} \right) \right)^{-1} \right] \right\} = \varepsilon. \end{aligned} \tag{29}$$

Таким чином, для довільного наперед заданого ε існує δ, яке визначається з тригонометричного рівняння (29). Тому за означенням неперервності функція $L_s(z,t) G(z,z',t,t')$ є неперервною в точці $t' = t$, а отже, і обмеженою.

3°). Покажемо тепер, що розв'язок однорідної крайової задачі є такий, що дія на нього оператора $L_s(z,t)$ дає обмежену в усьому тілі функцію. Враховуючи вирази (17) і (20), маємо

$$L_s c_0(z,t) = \frac{2c_*}{z_0} \left(d_1 - \frac{\rho_1}{\rho_0} d_0 \right) \sum_{i=1}^{n_1} \eta_{i1}(z) \sum_{n=1}^{\infty} y_n e^{-d_0 y_n^2 (t-t')/\rho_0} \sin(y_n z).$$

З урахуванням співвідношень

$$\left| \sum_{i=1}^{n_1} \eta_{i1}(x) \right| \le n_1 < \infty, \quad \left| d_1 - \frac{d_0 \rho_1}{\rho_0} \right| \le \rho_m, \quad \rho_m = \max\left\{ d_1, \frac{d_0 \rho_1}{\rho_0} \right\}, \quad |\sin x| \le 1$$

маємо

$$\begin{aligned} |L_s c_0(z,t)| &\le \rho_m \frac{2c_*}{z_0} n_1 \left| \sum_{n=1}^{\infty} y_n e^{-d_0 y_n^2 (t-t')/\rho_0} \sin(y_n z) \right| \le \rho_m \frac{2c_*}{z_0} n_1 \times \\ &\times \left| e^{-d_t} (1 - e^{-2d_t}) \sin \frac{n\pi}{z_0} \left(1 - 2e^{-d_t} \cos \frac{\pi z}{z_0} + e^{-2d_t} \right)^{-2} \right| \le \\ &\le \frac{2c_* \rho_m n_1}{z_0 (1 - (\operatorname{ch} d_t)^{-1} \cos(\pi z/z_0))^2} = \frac{2c_* \rho_m n_1}{z_0 \sigma^2} = K_3, \end{aligned}$$

де $\sigma = 1 - \dfrac{1}{\operatorname{ch} d_t} \cos \dfrac{\pi z}{z_0}$ при $z \neq 0$. Тут використано [6, 8]

$$\sum_{k=1}^{\infty} k r^k \sin kx = \frac{r(1-r^2)\sin x}{1 - 2r\cos x + r^2}, \qquad e^{-d_t n^2} \leq e^{-d_t n}, \qquad n \geq 1,$$

де $d_t = \dfrac{d_0 \pi^2 t}{\rho_0 z_0^2}$, $\left|\dfrac{\operatorname{sh} d_t}{\operatorname{ch} d_t}\right| \leq 1$, $\dfrac{1}{\operatorname{ch} d_t} \leq 1$. Якщо $z = 0$, то $L_s c_0 \big|_{z=0} = 0$. Отже, умова ***3***°) виконується для всієї області визначення.

Таким чином, твердження доведено. ◊

Теорема 1. *При виконанні умов* (22) *твердження ряд* (21) *є абсолютно та рівномірно збіжним.*

Д о в е д е н н я. З урахуванням умов (22) для загального члена ряду Неймана одержимо оцінку

$$|R_n| \leq K_1 K_2^{n-1} K_3 \frac{(z_0 t)^n}{n!}. \tag{30}$$

Оскільки мажорантний ряд з додатним загальним членом $K_1 K_2^{n-1} K_3 \dfrac{(z_0 t)^n}{n!}$ збігається при $n \to \infty$ для довільних значень K_1, K_2, K_3, z_0, t, то послідовність часткових сум ряду (21) $\{c^{(n)}(z,t)\}$ за ознакою Вейєрштраса [4] є абсолютно і рівномірно збіжною при $n \to \infty$, тобто

$$\lim_{n\to\infty} c^{(n)}(z,t) = c(z,t).$$

Теорему 1 доведено. ◊

Теорема 2. *Функція* (21) *є розв'язком інтегро-диференціального рівняння* (16).

Д о в е д е н н я. Подіявши зліва оператором $G(z,z',t,t')L_s(z',t')$ на обидві частини співвідношення (21) та проінтегрувавши по всій області визначення $[0,z_0] \cup [0,t]$, одержимо

$$\begin{aligned}
&\int_0^t \int_0^{z_0} G(z,z',t,t') L_s(z',t') c(z',t')\, dz'\, dt' = \\
&\qquad = \int_0^t \int_0^{z_0} G(z,z',t,t') L_s(z',t') \Bigg[c_0(z',t') + \\
&\qquad + \int_0^{t'} \int_0^{z_0} G(z',z'',t',t'') L_s(z'',t'') c(z'',t'')\, dz''\, dt'' + \ldots \Bigg] dz'\, dt' = \\
&\qquad = c(z,t) - c_0(z,t),
\end{aligned}$$

що доводить теорему 2. ◊

Знайдемо оцінку для залишкових членів $S_n = \sum\limits_{k=n+1}^{\infty} R_k(z,t)$ ряду (21). Оскільки має місце нерівність (30), то підсумувавши праву і ліву частини співвідношення, отримаємо

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

де $\Gamma(n+1, K_2 z_0 \tau) = \int\limits_{K_2 z_0 \tau}^{\infty} x^n \exp\{-x\}\, dx$ – додаткова неповна ґамма-функція.

5. Усереднення поля концентрації за ансамблем конфігурацій фаз. Для знаходження середнього поля концентрації домішкової речовини обмежимося першими двома членами ряду (21):

$$c(z,t) \approx c_0(z,t) + \int_0^t \int_0^{z_0} G(z,z',t,t') \sum_{i=1}^{n_1} \left[(\rho_0 - \rho_1) \frac{\partial c_0(z',t')}{\partial t'} - \right.$$
$$\left. - (d_0 - d_1) \frac{\partial^2 c_0(z',t')}{\partial z'^2} \right] \eta_{i1}(z')\, dz'\, dt' . \tag{31}$$

Усереднюємо вираз (31) за ансамблем конфігурацій фаз з рівномірною функцією розподілу [2] у тілі. Оскільки $c_0(z,t)$ є невипадковою функцією, то $\langle c_0(z,t) \rangle_{\text{conf}} = c_0(z,t)$. Усереднимо другий доданок виразу (31).

Приймемо, що $h_{i1} = h \quad \forall i = 1, \ldots, n_1$, де h – характерна (середня) товщина прошарків. Оскільки

$$\eta_{i1}(z') = \begin{cases} 1, & z' \in [z_i, z_i + h], \\ 0, & z' \notin [z_i, z_i + h], \end{cases} = \begin{cases} 1, & z' - z_i \in [0,h], \\ 0, & z' - z_i \notin [0,h], \end{cases} = \eta_{i1}(z' - z_i) \tag{32}$$

і в підінтегральному виразі співвідношення (31) від випадкових величин (координат границь контакту z_i, $i = 1, \ldots, n_1$) залежить тільки функція $\eta_{i1}(z')$, а також нема інших членів з індексом i, то всі множники та знак суми можемо винести за знак середнього:

$$\langle I \rangle_{\text{conf}} = \int_0^t \int_0^{z_0} G(z,z',t,t') \left[(\rho_0 - \rho_1) \frac{\partial c_0(z',t')}{\partial t'} - \right.$$
$$\left. - (d_0 - d_1) \frac{\partial^2 c_0(z',t')}{\partial z'^2} \right] \frac{1}{V} \sum_{i=1}^{n_1} \int_{(V)} \eta_{i1}(z')\, dz_i \, dz'\, dt' . \tag{33}$$

Враховуючи властивості функції $\eta_{i1}(z')$ (32) і використовуючи у внутрішньому інтегралі виразу (33) заміну змінних $z' - z_i = x$, можемо записати

$$\frac{1}{V} \sum_{i=1}^{n_1} \int_{(V)} \eta_{i1}(z')\, dz_i = \frac{1}{V} \sum_{i=1}^{n_1} \int_{z'-z_0}^{z'} \eta_{i1}(x)\, dx = \frac{1}{V} \sum_{\ell=1}^{n_1} \int_0^{z'} \eta_{i1}(x)\, dx , \tag{34}$$

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 z_0, тоді можливі два випадки:

1) $\quad z' < h : \quad \int_0^{z'} \eta_{i1}(x)\, dx = z'$,

2) $\quad z' \ge h : \quad \int_0^{h} \eta_{i1}(x)\, dx = h$.

Отже, маємо

$$\frac{1}{V} \sum_{i=1}^{n_1} \int_0^{z'} \eta_{i1}(x)\, dx = \begin{cases} \dfrac{1}{V} n_1 z', & z' < h, \\ \dfrac{1}{V} n_1 h, & z' \ge h. \end{cases}$$

Розглянемо вираз $\dfrac{n_1}{V} = \dfrac{n_1 h}{Vh} = \dfrac{V_1}{Vh} = \dfrac{v_1}{h}$. Тоді

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

$$-(d_0-d_1)\frac{\partial^2 c_0(z',t')}{\partial z'^2}\Bigg]\frac{v_1 z'}{h}\,dz'+\int\limits_h^{z_0-h} G(z,z',t,t')\times$$

$$\times\Bigg[(\rho_0-\rho_1)\frac{\partial c_0(z',t')}{\partial t'}-(d_0-d_1)\frac{\partial^2 c_0(z',t')}{\partial z'^2}\Bigg]v_1\,dz'\Bigg]dt'.$$

Як наслідок після усереднення виразу (31) для поля концентрації домішкових частинок отримаємо

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

$$-(d_0-d_1)\frac{\partial^2 c_0(z',t')}{\partial z'^2}\Bigg]\frac{v_1 z'}{h}\,dz'+$$

$$+\int\limits_h^{z_0-h} G\Bigg[(\rho_0-\rho_1)\frac{\partial c_0(z',t')}{\partial t'}-$$

$$-(d_0-d_1)\frac{\partial^2 c_0(z',t')}{\partial z'^2}\Bigg]v_1\,dz'\Bigg]dt'. \qquad (35)$$

Таким чином, отримали формулу для знаходження усередненого за ансамблем конфігурацій фаз поля концентрації домішкової речовини у випадково неоднорідній багатошаровій смузі за рівномірного розподілу фаз у тілі. Підставляючи у співвідношення (35) вирази для концентрації домішки в однорідному шарі (17) та функції Ґріна (18), отримаємо розрахункову формулу для усередненого поля концентрації:

$$\frac{\langle c(z,t)\rangle}{c_*}\approx 1-\frac{z}{z_0}-\frac{2}{z_0}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{y_n}e^{-d_0 y_n^2 t/\rho_0}\sin(y_n z)+$$

$$+\frac{4v_1}{z_0^2}\sum_{n=1}^{\infty}\left[\sin(y_n z)e^{-d_0 y_n^2 t/\rho_0}\right]\Bigg[\frac{d_0 R_n t}{8\rho_0 y_n}\left(1-\frac{\rho_1}{\rho_0}\right)+$$

$$+\sum_{m=1,\,m\neq n}^{\infty}\frac{A_{mn}y_m}{y_n^2-y_m^2}\left(\frac{d_1}{d_0}-\frac{\rho_1}{\rho_0}\right)\left(e^{-d_0 y_m^2 t/\rho_0}-e^{-d_0 y_n^2 t/\rho_0}\right)\Bigg],$$

де

$$R_n=1-4h+2h^2y_n^2+2(1-4hy_n)\sin(2y_n h)-\cos(2y_n h),$$

$$A_{mn}=2\sin(hy_n)\sin(hy_m)\frac{1}{h}+\sin(h(y_n-y_m))\frac{2(y_n-y_m)^2-1}{y_n-y_m}+$$

$$+\sin(h(y_n+y_m))\frac{1-2(y_n+y_m)^2}{y_n+y_m},\qquad y_m=\frac{m\pi}{z_0}.$$

6. Числовий аналіз усередненого поля концентрації. Числові розрахунки проводили в безрозмірних змінних [5] $\tau=d_0t/z_0$, $\xi=z/z_0$. На рис. 2 і рис. 3 проілюстровано характерні розподіли усередненого за ансамблем конфігурацій фаз поля концентрації домішкової речовини для різних значень параметрів задачі і в різні моменти часу. При цьому за базові приймали наступні значення коефіцієнтів: $d_1/d_0=0.01$, $\rho_1/\rho_0=1.3$, $v_1=0.1$, $\bar{h}=$ $=h/z_0=0.1$. На рис. 2 (для $d_1/d_0=0.01$) наведено розподіли усередненої концентрації в різні моменти безрозмірного часу $\tau=0.025, 0.05, 0.1, 0.3, 0.6$. Рис. 3 демонструє поведінку усередненого поля концентрації в залежності від різних значень відношення кінетичних коефіцієнтів дифузії у включеннях та матриці $d_1/d_0=0.01, 10, 50, 100$ при $\bar{h}=h/z_0=0.005$, $v_1=0.2$ в момент часу $\tau=0.1$.

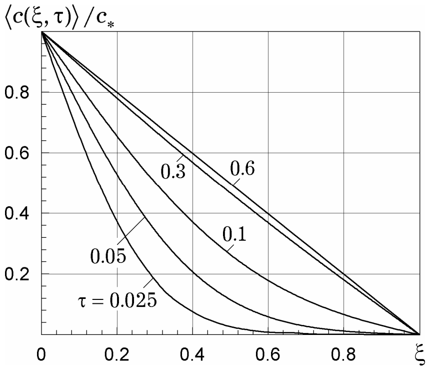

Рис. 2

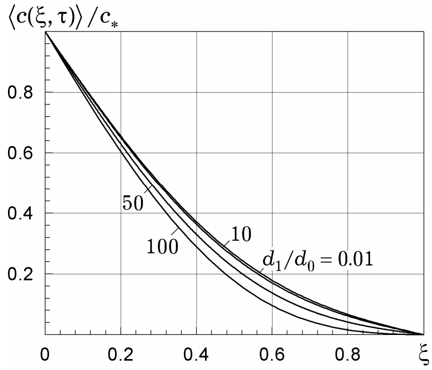

Рис. 3

Зазначимо, що наявність у тілі випадково розташованих прошарків з відмінними від матриці характеристиками впливає на поведінку поля концентрації домішкових частинок, якщо його кінетичний коефіцієнт дифузії є більшим, ніж в матриці (рис. 3). При цьому значення усередненої концентрації в багатошаровій смузі є меншим, ніж в однорідному шарі. У протилежному випадку, коли $d_1 < d_0$, різниця між значеннями концентрації домішкової речовини в однорідному і неоднорідному тілі є незначною, відмінність спостерігається у третій значущій цифрі.

Також зауважимо, що чим більшим є відношення кінетичних коефіцієнтів дифузії d_1/d_0, тим меншою є концентрація домішкових частинок в шарі. Причому найбільша відмінність у розподілах функції $\langle c(z,t)\rangle / c_*$ спостерігається всередині шару. Зі зменшенням товщини випадкових прошарків усереднена концентрація домішки наближається до концентрації цієї ж речовини в однорідному шарі.

7. Висновки. Таким чином, для розв'язання контактно-крайової задачі дифузії домішкової речовини у випадково неоднорідному шаруватому тілі за допомогою апарату теорії узагальнених функцій контактну задачу дифузії в багатошаровій смузі зведено до рівняння масопереносу в усій області тіла. Причому оператор отриманого рівняння в явному вигляді містить стрибки поля концентрації та його похідних на границях контакту. Одержаній крайовій задачі поставлено у відповідність еквівалентне інтегро-диференціальне рівняння, розв'язок якого побудовано ітеруванням у вигляді ряду Неймана. Сформульовано і доведено теорему про абсолютну і рівномірну збіжність цього ряду. Також сформульовано і доведено теорему існування розв'язку інтегро-диференціального рівняння (16). Усереднення поля концентрації проведено за ансамблем конфігурацій фаз з рівномірною функцією розподілу.

Зазначимо, що отримані формули можна застосовувати для вивчення процесів теплопровідності у випадково неоднорідних багатошарових тілах, розглядаючи умови ідеального контакту як частковий випадок наведених у роботі.

1. *Владимиров В. С.* Уравнения математической физики. – Москва: Наука, 1976. – 527 с.
2. *Королюк В. С., Портенко Н. И., Скороход А. В., Турбин А. Ф.* Справочник по теории вероятностей и математической статистике. – Москва: Наука, 1985. – 640 с.
3. *Краснов М. Л.* Интегральные уравнения. – Москва: Наука, 1975. – 300 с.
4. *Кудрявцев Л. Д.* Курс математического анализа: В 2 т. – Москва: Высш. шк., 1981. – Т. 1. – 576 с.; Т. 2. – 584 с.
5. *Лыков А. В.* Теория теплопроводности. – Москва: Высш. шк., 1978. – 463 с.
6. *Прудников А. П., Брычков Ю. А., Маричев О. И.* Интегралы и ряды. Элементарные функции. – Москва: Наука, 1981. – 798 с.

7. *Рытов С. М., Кравцов Ю. А., Татарский В. И.* Введение в статистическую радиофизику. Ч. II. Случайные поля. – Москва: Наука, 1978. – 436 с.
8. *Справочник* по специальным функциям с формулами, графиками и математическими таблицами / Под. ред. М. Абрамовица, И. Стиган. – Москва: Наука, 1979. – 832 с.
9. *Тихонов А. Н., Самарский А. А.* Уравнения математической физики. – Москва: Наука, 1972. – 735 с.
10. *Хорошун Л. П., Солтанов Н. С.* Термоупругость двухкомпонентных смесей. – Киев: Наук. думка, 1984. – 112 с.
11. *Чапля Є. Я., Чернуха О. Ю.* Математичне моделювання дифузійних процесів у випадкових і регулярних структурах. – Київ: Наук. думка, 2009. – 302 с.
12. *Benitez J.* Principles and modern applications of mass transfer operations. – Hoboken: J. Wiley & Sons, 2009. – 549 p.
13. *Keller J. B.* Flow in random porous media // Transport in Porous Media. – 2001. – **43.** – P. 395–406.
14. *Lidzba D.* Homogenisation theories applied to porous media mechanics // J. Theor. and Appl. Mech. – 1998. – **36**, No. 3. – P. 657–679.
15. *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.
16. *Ngan A. H. W.* Canonical ensemble for static elastic structures with random microstructures // J. Mech. and Phys. of Solids. – 2009. – **57**. – P. 803–811.
17. *Van Duijn C. J., Eichel H., Helmig R., Pop I. S.* Effective equations for two-phase flow in porous media: the effect of trapping on the microscale // Transport in Porous Media. – 2007. – **69**. – P. 411–428.
18. *Zhu Y., Fox P. J.* Smoothed particle hydrodynamics model for diffusion through porous media // Transport in Porous Media. – 2001. – **43.** – P. 441–471.

КОНТАКТНО-КРАЕВАЯ ЗАДАЧА ДИФФУЗИИ ПРИМЕСНЫХ ЧАСТИЦ В ДВУХФАЗНОЙ СТОХАСТИЧЕСКИ НЕОДНОРОДНОЙ СЛОИСТОЙ ПОЛОСЕ

Работа посвящена математическому моделированию процессов диффузии примесного вещества в двухфазной слоистой полосе случайно неоднородной структуры с учетом условий неидеального контакта концентрации на границах раздела фаз. Сформулировано эквивалентное интегро-дифференциальное уравнение, решение которого построено в виде интегрального ряда Неймана. Усреднение полученного решения проведено по ансамблю конфигураций фаз с равномерной функцией распределения. Определено влияние характеристик материала на поведение и величину усредненного поля концентрации примесных частиц.

CONTACT INITIAL-BOUNDARY-VALUE PROBLEM OF ADMIXTURE PARTICLE DIFFUSION IN A TWO-PHASE STOCHASTICALLY NON-HOMOGENEOUS LAMINATED STRIP

The work is devoted to mathematical modeling of admixture diffusion processes in a two-phase laminated strip of randomly nonhomogeneous structure allowing for the condition of non-ideal mass contact on the interphases. An equivalent integro-differential equation is formulated. Its solution is constructed in the form of Neumann series. Averaging of the obtained solution is carried out over the ensemble of phase configurations with the function of uniform distribution. Influence of material characteristics on behavior and values of the averaged field of admixture particle concentration is established.

[1] Центр мат. моделювання
Ін-ту прикл. проблем механіки і математики
ім. Я. С. Підстригача НАН України, Львів,
[2] Ін-т механіки середовища і прикл. інформатики
Ун-ту Казиміра Великого в Бидгощі, Польща

Одержано
03.11.10