

УДК 517.958:532.72

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ДИФУЗІЇ ДОМІШКОВОЇ РЕЧОВИНИ У ДВОФАЗНІЙ ВИПАДКОВО НЕОДНОРІДНІЙ СМУЗІ ЗА РІВНОМІРНОГО РОЗПОДІЛУ КУЛЬОВИХ ВКЛЮЧЕНЬ

Анастасія Чучвара, Ольга Чернуха, Юрій Білушак

Центр математичного моделювання Інституту прикладних проблем механіки
і математики ім. Я.С. Підстригача НАН України, м. Львів

При оцінці властивостей композиційних матеріалів, визначенні оптимальних характеристик експлуатації складних інженерних конструкцій, прогнозуванні поширення забруднюючих речовини, тощо, важливу роль відіграє дослідження процесів перенесення, що відбуваються у структурах з внутрішніми неоднорідностями. Водночас точне розташування включень у тілі, зокрема, у вигляді пор чи зерен, може бути невідомим, що призводить до необхідності розгляду структури як випадково неоднорідної, а тому прямий опис процесів масоперенесення є неможливим.

Залежно від специфічних властивостей, які необхідно дослідити, існують різні підходи до моделювання фізичних процесів у неоднорідних структурах. Зокрема, в останні роки широкої популярності набули методи решіток Больцмана, випадкового блукання [1, 2], тощо. Зазначимо, що на практиці для структур з внутрішніми неоднорідностями є характерним стрибок концентрації домішки на границях контакту фаз, тоді як у згаданих методах умова неідеального контакту не накладається, що є певним спрощенням відповідної моделі. Ця робота присвячена дослідженню дифузії домішки у двофазній смузі з випадково розташованими кульовими включеннями за явного врахування величини стрибків шуканої функції та її похідної на міжфазних границях [3, 4].

Розглянуто дифузію домішки у шарі товщини z_0 , що містить кульові включення одного сорту. Координати розташування включень вважаємо невідомими, але прийнято, що вони розташовані за рівномірним законом розподілу, тобто використано модель двофазного випадково неоднорідного шару, який складається з матеріалу основної фази (матриці) та включень сферичної форми. Прийнято, що об'ємна частка матриці є набагато більшою, ніж об'ємна частка включення ($v_0 \gg v_1$), а коефіцієнти дифузії та густини є сталими в об'ємі кожної фази.

Концентрація домішки $c_j(\vec{r}, t)$ в області $(V^{(j)})$, $j = 0, 1$, визначається як

$$\rho_j \frac{\partial c_j(\vec{r}, t)}{\partial t} = d_j \left(\frac{\partial^2 c_j(\vec{r}, t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c_j(\vec{r}, t)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 c_j(\vec{r}, t)}{\partial z^2} \right), \quad \vec{r} \in (V^{(j)}), \quad t \in [0; \tau], \quad \tau < \infty,$$

де ρ_j – густина області ($V^{(j)}$); d_j – кінетичний коефіцієнт переносу в цій області, $j = 0, 1$.

У початковий момент часу домішкова речовина в тілі є відсутньою, на верхній границі тіла підтримується постійне значення концентрації домішкової речовини, а на нижній границі вона дорівнює нулю.

Вихідну крайову задачу зведено до рівняння дифузії, що описує концентрацію мігруючої домішки для тіла в цілому та явно враховує величину стрибків шуканої функції та її похідної на міжфазних границях. При цьому стрибок коефіцієнта дифузії на границях «матриця – включення» подано добутком абсолютної величини стрибка коефіцієнта на нормалі, побудований до поверхні кулі у деякій біжучій точці. Побудовано нове інтегро-диференціальне рівняння, еквівалентне вихідній контактній крайовій задачі дифузії. Його розв'язок знайдено методом ітерування у вигляді інтегрального ряду Неймана. Усереднення стохастичного поля концентрації домішки проведено за ансамблем конфігурацій фаз з рівномірною функцією розподілу кульових включень. Показано, що за явного врахування стрибка функції концентрації та її похідної у випадковому операторі збуреного рівняння дифузії, розрахункова формула для усередненої концентрації домішкової речовини, що мігрує у двофазному тілі з кульовими включеннями, містить додатковий доданок. Досліджено вплив цього доданка на значення усередненої концентрації домішки в тілі для різних значень вхідних параметрів задачі.

1. LaBolle E.M., Quastel J., Fogg E.G., Gravner J. Diffusion processes in composite porous media and their numerical integration by random walks: Generalized stochastic differential equations with discontinuous coefficients // Water Resources Research. – 2000. – **36**, No. 3. – P. 651–662.
2. Yong Y., Lou X., Li S., Yang C., Yin X. Direct simulation of the influence of the pore structure on the diffusion process in porous media // Computers & Mathematics with Applications. – 2014. – **67**, No. 2. – P. 412–423.
3. Чернуха О.Ю., Білуцак Ю.І., Чувара А.Є. Моделювання дифузійних процесів у стохастично неоднорідних структурах. – Львів: Растр-7, 2016. – 262 с.
4. Чернуха О., Білуцак Ю. Математичне моделювання усередненого поля концентрації у випадкових шаруватих структурах з урахуванням стрибків шуканої функції на міжфазних границях // Мат. методи та фіз.-мех. поля. – 2017. – **60**, № 1. – С. 62–74.

MATHEMATICAL MODELING ADMIXTURE DIFFUSION IN A TWO-PHASE RANDOMLY NONHOMOGENEOUS STRIP WITH A UNIFORM DISTRIBUTION OF SPHERICAL INCLUSIONS

The diffusion of admixture particles in a two-phase strip with randomly located spherical inclusions is investigated. A solution of the initial contact-boundary value problem is obtained in the form of Neumann series and the dependence of the averaged field of concentration on the medium characteristics is established.