УДК 517.958:532.72

Математичне моделювання гетеродифузійних процесів у шарі з випадковим прошарком

Олеся Власій[1], Ольга Чернуха[2]

[1] к. т. н., Прикарпатський національний університет ім. В. Стефаника МОН України, вул. Шевченка, 57, Івано-Франківськ, 76018, e-mail: olesyav@ukr.net
[2] д. т. н., професор, Центр математичного моделювання ІППММ ім. Я. С. Підстригача НАН України, вул. Дж. Дудаєва, 15, Львів, 79005, e-mail: cher@cmm.lviv.ua

Робота стосується математичного моделювання масопереносення домішкової речовини двома шляхами, що супроводжується процесами типу сорбції-десорбції, у двофазному шарі з випадково розташованим прошарком. Випадкову неоднорідність структури враховано в коефіцієнтах системи рівнянь гетеродифузії. Отримано систему інтегро-диференціальних рівнянь зі стохастичними ядрами, еквівалентну вихідній крайовій задачі. Методом послідовних наближень побудовано розв'язок у вигляді інтегральних рядів Неймана. Процедуру усереднення проведено за ансамблем конфігурацій фаз із рівномірною функцією розподілу.

Ключові слова: гетеродифузія, випадково неоднорідна структура, ряд Неймана, функція Гріна, усереднення за ансамблем конфігурації фаз.

Вступ. Одним із основних чинників, що спричиняють екологічну кризу [1], є забруднення ґрунтів внаслідок промислової (наприклад, радіоактивні відходи, промислові стічні води, промислові викиди в атмосферу), розвитку транспортної галузі (залишки змащувальних масел та інших нафтопродуктів, втрати хімічних речовин під час транспортування), сільськогосподарської (мінеральні добрива, біоциди, отрутохімікати, пестициди, а також стічні води та тверді залишки тваринницьких комплексів) і побутової діяльності людини (димові гази, побутові стічні води, екзогенні хімічні речовини, що використовуються в побуті) [2]. Поширення забруднень у довкіллі значною мірою визначається процесами дифузії, які належать до найбільш поширених нерівноважних процесів у природі. У зв'язку з цим дедалі більшої актуальності набувають дослідження процесів поширення домішкових речовин у стохастично неоднорідних дисперсних середовищах, якими, до прикладу, є ґрунти. Питання аналізу стану ґрунтів та оцінки захищеності ґрунтових вод у випадку попадання домішкових речовин тісно пов'язане із модельним уявленням про перерозподіл домішок у приповерхневих шарах Землі [3]. Практичний інтерес, зокрема, становить випадок зволоження приповерхневих шарів, коли пори середовища практично повністю насичені водою та домішкові частинки в рамках фізично малого елемента перебувають у фізично різних станах, що істотно впливає на перерозподіл домішкової речовини.

ISSN 1816-1545 Фізико-математичне моделювання та інформаційні технології
2014, вип. 20, 58-68

Рис. 1. Зразки ґрунтів із прошарком іншого типу

Внаслідок цього процес просторового перенесення техногенних домішок відбувається декількома шляхами та супроводжується локальними переходами з одного шляху дифузії на інший. Наявність у ґрунті шарів із різними фізико-хімічними властивостями (рис. 1), розташування яких окрім цього може мати стохастичний характер, призводить до значного ускладнення побудови адекватних математичних моделей поширення забруднюючих речовин у таких об'єктах.

Ця робота стосується математичного моделювання гетеродифузії домішкових частинок двома шляхами у смузі з випадково розташованим прошарком, фізико-хімічні характеристики якого є відомі та відмінні від основного матеріалу.

1. Об'єкт дослідження. Формулювання задачі

Розглянемо дисперсну двофазну шарувату смугу товщиною z_0, у якій шар однієї фази Ω_1 містить випадково розташований прошарок другої фази Ω_2 товщиною h (рис. 2). Приймаємо, що фази в тілі розташовані за рівномірним розподілом і об'ємна частка області Ω_1 є набагато більша за об'ємну частку Ω_2, тобто $h \ll z_0 - h$, де $h = z_2 - z_1$ — товщина області Ω_2. Надалі будемо вважати випадковою величиною координату верхньої межі прошарку $z = z_1$.

Нехай у цьому тілі домішкова речовина дифундує двома шляхами, переходячи з одного шляху міграції на інший. Вважаємо, що дифузійні властивості частинок домішки у різних фазах можуть суттєво відрізнятися.

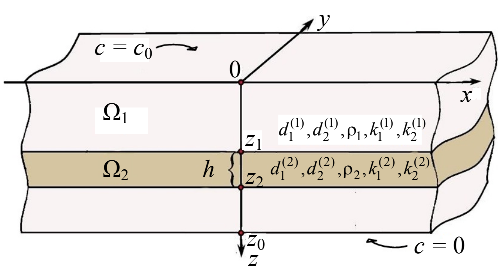

Рис. 2. Можлива реалізація структури тришарової смуги

Концентрація домішок за вертикальної гетеродифузії визначається з системи взаємозв'язаних диференціальних рівнянь [4], коефіцієнти яких є випадковими функціями просторової координати z:

$$\rho(z)\frac{\partial c_1}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial z}\left[d_1(z)\frac{\partial c_1}{\partial z}+d_3(z)\frac{\partial c_2}{\partial z}\right]-k_1(z)c_1+k_2(z)c_2,$$
$$\rho(z)\frac{\partial c_2}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial z}\left[d_2(z)\frac{\partial c_2}{\partial z}+d_4(z)\frac{\partial c_1}{\partial z}\right]-k_2(z)c_2+k_1(z)c_1, \qquad (1)$$

де $c_i=c_i(z,t)$ — випадкові концентрації домішки у станах, що відповідають швидкому (для $i=1$) та повільному ($i=2$) шляхам перенесення частинок; $\rho(z)$ — випадкова густина середовища; $d_i(z),\ i=1,2$ — випадкові кінетичні коефіцієнти дифузії в i-ому стані; $d_i(z),\ i=3,4$ — випадкові коефіцієнти, що відповідають за перехресну дифузію частинок домішки на різних шляхах міграції; $k_i(z)$ — випадкові коефіцієнти інтенсивності переходу домішкових частинок зі швидкого шляху міграції на повільний (для $i=1$) і зворотного переходу (для $i=2$).

Густину середовища, кінетичний коефіцієнт дифузії та коефіцієнти інтенсивності переходу вважаємо сталими в об'ємі кожної з фаз.

Нехай у початковий момент часу в тілі відсутня домішкова речовина, тобто

$$c_1(z,t)\big|_{t=0}=0, \qquad c_2(z,t)\big|_{t=0}=0\,. \qquad (2)$$

На верхній границі тіла $z=0$ підтримується постійне значення c_0 сумарної концентрації домішкової речовини. Введемо параметр $\alpha\ (0\le\alpha\le 1)$, який визначає частину домішкової речовини, що з поверхні тіла потрапила на швидкий шлях міграції, тоді виконуються умови

$$c_1(z,t)\big|_{z=0}=\alpha c_0, \qquad c_2(z,t)\big|_{z=0}=(1-\alpha)c_0\,. \qquad (3)$$

На нижній границі тіла концентрація рівна нулю, тоді

$$c_1(z,t)\big|_{z=z_0}=0, \qquad c_2(z,t)\big|_{z=z_0}=0\,. \qquad (4)$$

Введемо у розгляд випадкову функцію просторової координати z («функцію структури») [4, 5]

$$\eta_{ij}(z)=\begin{cases}1, & z\in\Omega_{ij},\\ 0, & z\notin\Omega_{ij},\end{cases} \qquad (5)$$

де Ω_{ij} — i-тий шар j-тої фази. Тоді $\bigcup_{i=1}^{n_j}\Omega_{ij}=\Omega_j$, де n_j — кількість шарів у відповідній фазі. У нашому випадку $n_1=2$, $n_2=1$.

Нехай виконується умова суцільності тіла, тобто

$$\sum_{i,j}\eta_{ij}(z)=1\,. \qquad (6)$$

За допомогою функції структури (5) запишемо коефіцієнти системи (1):

$$d_k(z) = \sum_{j=1}^{2}\sum_{i=1}^{n_j} d_k^{(j)} \eta_{ij}(z), \quad d_k^{(j)} \in \mathrm{R}, \quad j = 1,2, \quad k = \overline{1,4};$$

$$\rho(z) = \sum_{j=1}^{2}\sum_{i=1}^{n_j} \rho^{(j)} \eta_{ij}(z), \quad \rho^{(j)} \in \mathrm{R}, \quad j = 1,2;$$

$$k_q(z) = \sum_{j=1}^{2}\sum_{i=1}^{n_j} k_q^{(j)} \eta_{ij}(z), \quad k_q^{(j)} \in \mathrm{R}, \quad j = 1,2, \quad q = 1,2. \tag{7}$$

Тоді в позначеннях (5)-(7) рівняння (1) набувають вигляду

$$\sum_{j=1}^{2}\sum_{i=1}^{n_j} \rho^{(j)} \eta_{ij}(z) \frac{\partial c_1}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z}\left[\sum_{j=1}^{2}\sum_{i=1}^{n_j} d_1^{(j)} \eta_{ij}(z) \frac{\partial c_1}{\partial z} + \sum_{j=1}^{2}\sum_{i=1}^{n_j} d_3^{(j)} \eta_{ij}(z) \frac{\partial c_2}{\partial z}\right] -$$

$$- \sum_{j=1}^{2}\sum_{i=1}^{n_j} k_1^{(j)} \eta_{ij}(z) c_1 + \sum_{j=1}^{2}\sum_{i=1}^{n_j} k_2^{(j)} \eta_{ij}(z) c_2,$$

$$\sum_{j=1}^{2}\sum_{i=1}^{n_j} \rho^{(j)} \eta_{ij}(z) \frac{\partial c_2}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z}\left[\sum_{j=1}^{2}\sum_{i=1}^{n_j} d_2^{(j)} \eta_{ij}(z) \frac{\partial c_2}{\partial z} + \sum_{j=1}^{2}\sum_{i=1}^{n_j} d_4^{(j)} \eta_{ij}(z) \frac{\partial c_1}{\partial z}\right] -$$

$$- \sum_{j=1}^{2}\sum_{i=1}^{n_j} k_2^{(j)} \eta_{ij}(z) c_2 + \sum_{j=1}^{2}\sum_{i=1}^{n_j} k_1^{(j)} \eta_{ij}(z) c_1. \tag{8}$$

Введемо випадкові вектор $\mathbf{c}(z,t) = \begin{pmatrix} c_1(z,t) \\ c_2(z,t) \end{pmatrix}$ і матриці $K^{(j)} = \begin{pmatrix} -k_1^{(j)} & k_2^{(j)} \\ k_1^{(j)} & -k_2^{(j)} \end{pmatrix}$.
Тоді систему рівнянь (8) і крайові умови (2)-(4) подамо у матричному вигляді:

$$\sum_{j=1}^{2}\sum_{i=1}^{n_j} \rho^{(j)} \eta_{ij}(z) \frac{\partial \mathbf{c}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z}\left[\sum_{j=1}^{2}\sum_{i=1}^{n_j} D^{(j)} \eta_{ij}(z) \frac{\partial \mathbf{c}}{\partial z}\right] + \sum_{j=1}^{2}\sum_{i=1}^{n_j} K^{(j)} \eta_{ij}(z) \mathbf{c}, \tag{9}$$

$$\mathbf{c}(z,t)\big|_{t=0} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{c}(z,t)\big|_{z=0} = \begin{pmatrix} \alpha c_0 \\ (1-\alpha) c_0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{c}(z,t)\big|_{z=z_0} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \tag{10}$$

Враховуючи правила обчислення узагальненої похідної [6], отримаємо:

$$\frac{\partial}{\partial z}\left[\sum_{j=1}^{2}\sum_{i=1}^{n_j} D^{(j)} \eta_{ij}(z)\right] = [D]_{z=z_1} \delta(z - z_1) + [D]_{z=z_2} \delta(z - z_2),$$

де $\delta(z - z_q)$ — функція Дірака з носієм у точці $z = z_q$, $[D]_{z=z_q}$ — стрибок матричного коефіцієнта дифузії D на випадковій границі прошарку $z = z_q$, тобто $[D]_{z=z_q} = \begin{pmatrix} [d_1]_{z=z_q} & [d_3]_{z=z_q} \\ [d_4]_{z=z_q} & [d_2]_{z=z_q} \end{pmatrix}$. Тут $[d_k]_{z=z_q}$, $q = 1, 2$ — стрибки кінетичних коефіцієнтів дифузії (якщо $k = 1,2$) та стрибки коефіцієнтів перехресної дифузії (якщо $k = 3,4$) на відповідній границі прошарку.

Враховуючи вигляд матриці D та структуру тіла, одержимо:

$$[D]_{z=z_1} = \begin{pmatrix} d_1^{(2)} - d_1^{(1)} & d_3^{(2)} - d_3^{(1)} \\ d_4^{(2)} - d_4^{(1)} & d_2^{(2)} - d_2^{(1)} \end{pmatrix},$$

$$[D]_{z=z_2} = \begin{pmatrix} d_1^{(1)} - d_1^{(2)} & d_3^{(1)} - d_3^{(2)} \\ d_4^{(1)} - d_4^{(2)} & d_2^{(1)} - d_2^{(2)} \end{pmatrix} = -[D]_{z=z_1}.$$

Тоді

$$\frac{\partial}{\partial z}\left[\sum_{j=1}^{2}\sum_{i=1}^{n_j} D^{(j)}\eta_{ij}(z)\right] = [D]_{z=z_1}\left(\delta(z-z_1) - \delta(z-z_2)\right).$$

Таким чином

$$\frac{\partial}{\partial z}\left[\sum_{j=1}^{2}\sum_{i=1}^{n_j} D^{(j)}\eta_{ij}(z)\frac{\partial \mathbf{c}}{\partial z}\right] = \sum_{j=1}^{2}\sum_{i=1}^{n_j} D^{(j)}\eta_{ij}(z)\frac{\partial^2 \mathbf{c}}{\partial z^2} + [D]_{z=z_1}\left(\delta(z-z_1) - \delta(z-z_2)\right)\frac{\partial \mathbf{c}}{\partial z}.$$

Введемо в розгляд оператор L_{ij}, який кожну функцію $\mathbf{c}(z,t)$, $(z,t) \in [z; z_0] \times [0; \tau)$, $\tau < \infty$, де z — випадкова координата, t — часова координата, перетворює за таким законом:

$$L_{ij} = \rho^{(j)}\eta_{ij}(z)\frac{\partial}{\partial t} - D^{(j)}\eta_{ij}(z)\frac{\partial^2}{\partial z^2} - [D]_{z=z_1}\left(\delta(z-z_1) - \delta(z-z_2)\right)\frac{\partial}{\partial z} - K^{(j)}\eta_{ij}(z).$$

Тоді матричне рівняння (9) запишеться в операторному вигляді

$$L\{\mathbf{c}(z,t)\} = \sum_{j=1}^{2}\sum_{i=1}^{n_j} L_{ij}\{\mathbf{c}(z,t)\} = 0. \tag{11}$$

Додамо та віднімемо в отриманому рівнянні невипадковий оператор L_0 з характеристиками фази 1, який визначається формулою

$$L_0 = \rho^{(1)}\frac{\partial}{\partial t} - D^{(1)}\frac{\partial^2}{\partial z^2} - K^{(1)}.$$

Оскільки виконується умова (6) суцільності середовища, то рівняння (11) можна переписати у вигляді

$$L_0\{\mathbf{c}(z,t)\} = (L_0 - L)\{\mathbf{c}(z,t)\}. \tag{12}$$

Вважатимемо праву частину рівняння (12) джерелом, тобто неоднорідність середовища розглядатимемо як внутрішні джерела [7].

2. Система інтегро-диференціальних рівнянь, еквівалентна вихідній крайовій задачі

Для побудови розв'язку крайової задачі випадкової гетеродифузії. Крайову задачу (12), (2), (3) зведемо до еквівалентного інтегро-диференціального рівняння

$$\mathbf{c}(z,t)=\mathbf{c}^{(0)}(z,t)+\int_0^t\int_0^{z_0} G(z,z',t,t')L_s\left\{\mathbf{c}(z',t')\right\}dz'dt', \tag{13}$$

де $\mathbf{c}^{(0)}(z,t)$ — розв'язок однорідної системи рівнянь $L_0\{\mathbf{c}(z,t)\}=0$, який задовольняє умови (10); $G(z,z',t,t')=\begin{pmatrix} G_1(z,z',t,t') & 0 \\ 0 & G_2(z,z',t,t') \end{pmatrix}$ — матрична функція Гріна задачі (12), (10), тобто є розв'язком задачі $L_0\left\{G(z,z',t,t')\right\}=$ $=\delta(z-z')\delta(t-t')E_2$ з нульовими крайовими умовами, де E_2 — одиничний двовимірний вектор-стовпець, $L_s\{.\}=(L_0-L)\{.\}$.

Розв'язок інтегро-диференціального рівняння (13) із випадковим ядром шукаємо методом послідовних наближень [8]. У результаті отримаємо інтегральний матричний ряд Неймана

$$\begin{aligned}\mathbf{c}(z,t)&=\mathbf{c}^{(0)}(z,t)+\int_0^t\int_0^{z_0} G(z,z',t,t')L_s\left\{\mathbf{c}^{(0)}(z',t')\right\}dz'dt'+\\&+\int_0^t\int_0^{z_0} G(z,z',t,t')L_s\left\{\int_0^{t'}\int_0^{z_0} G(z',z'',t',t'')L_s\left\{\mathbf{c}(z'',t'')\right\}\mathbf{c}^{(0)}(z'',t'')dz''dt''\right\}dz'dt'+\\&+\int_0^t\int_0^{z_0} G(z,z',t,t')L_s\left\{\int_0^{t'}\int_0^{z_0} G(z',z'',t',t'')\times\right.\\&\left.\times L_s\left\{\int_0^{t''}\int_0^{z_0} G(z'',z''',t'',t''')L_s\left\{\mathbf{c}(z''',t''')\right\}dz'''dt'''\right\}dz''dt''\right\}dz'dt'+\ldots\end{aligned} \tag{14}$$

Перший член отриманого ряду — концентрація $\mathbf{c}^{(0)}(z,t)$ в однорідному середовищі з фізичними характеристиками $\rho^{(1)}$, $d_k^{(1)}$, $k_q^{(1)}$, $k=\overline{1,4}$, $q=1,2$. Другий доданок описує збурення концентраційного поля, що виникають внаслідок наявності у тілі прошарку з іншими фізичними характеристиками, причому з урахуванням ефектів границь цього прошарку.

В однорідному шарі розв'язок задачі гетеродифузії двома шляхами наведено у роботі [4], який у введених позначеннях можна записати у вигляді

$$c_j^{(0)}(z,t)=P_j^{\alpha}c_0\left(1-\frac{z}{z_0}\right)+(-1)^{j-1}Q_j^{\alpha}c_0\,\mathrm{sh}\left[\bar{\beta}(z_0-z)\right]+$$

$$+(-1)^j \frac{2c_0}{\pi}\sum_{n=1}^{\infty}\left(P_j' e^{s_1 t} - Q_j' e^{s_2 t}\right)\frac{\sin(y_n z)}{n(s_1 - s_2)}, \tag{15}$$

де $P_1^{\alpha} = \alpha - \frac{\alpha_1\beta_0^{(1)}}{\beta_2}$, $P_2^{\alpha} = 1 - \alpha + \frac{\alpha_1\beta_0^{(2)}}{\beta_2}$, $Q_j^{\alpha} = \frac{\alpha_1\beta_0^{(j)}}{\beta_2 \operatorname{sh}\left[\bar{\beta} z_0\right]}$, $P_j' = P_j s_1 + Q_j + \frac{R_j}{s_1}$, $Q_j' = P_j s_2 + Q_j + \frac{R_j}{s_2}$; $\beta_0^{(1)} = \bar{d}_2^{(1)} + \bar{d}_3^{(1)}$, $\beta_0^{(2)} = \bar{d}_1^{(1)} + \bar{d}_4^{(1)}$, $\bar{\beta} = \pi\sqrt{\beta_2}\Big/\left(z_0\sqrt{\beta_1}\right)$, $P_1 = \alpha$, $P_2 = \alpha - 1$, $Q_1 = \alpha_1 + \alpha a_n^{(2)} - (1-\alpha)a_n^{(3)}$, $Q_2 = \alpha_1 - (1-\alpha)a_n^{(1)} + \alpha a_n^{(4)}$, $R_1 = \alpha_1\left(a_n^{(2)} + a_n^{(3)}\right)$, $R_2 = \alpha_1\left(a_n^{(1)} + a_n^{(4)}\right)$, $\beta_1 = \left(\bar{d}_1^{(1)}\bar{d}_2^{(1)} - \bar{d}_3^{(1)}\bar{d}_4^{(1)}\right)\frac{\pi^2}{z_0^2}$, $y_n = \frac{n\pi}{z_0}$, $\beta_2 = \bar{k}_1^{(1)}\left(\bar{d}_2^{(1)} + \bar{d}_3^{(1)}\right) + \bar{k}_2^{(1)}\left(\bar{d}_1^{(1)} + \bar{d}_4^{(1)}\right)$; $a_n^{(1)} = \bar{k}_1^{(1)} + \bar{d}_1^{(1)} y_n^2$, $a_n^{(2)} = \bar{k}_2^{(1)} + \bar{d}_2^{(1)} y_n^2$, $a_n^{(3)} = -\bar{k}_2^{(1)} + \bar{d}_3^{(1)} y_n^2$, $a_n^{(4)} = -\bar{k}_1^{(1)} + \bar{d}_4^{(1)} y_n^2$, $\alpha_1 = \alpha k_1^{(1)} + k_2^{(1)}(1-\alpha)$, $\bar{d}_k^{(1)} = d_k^{(1)}\big/\rho^{(1)}$, $\bar{k}_q^{(1)} = k_q^{(1)}\big/\rho^{(1)}$, а також s_1, s_2 — дійсні корені рівняння $s^2 + \eta_1 s + \eta_2 = 0$.

Для того, щоб при $t \to \infty$ отриманий ряд був збіжний, повинні виконуватися умови $s_1 < 0$ та $s_2 < 0$. Враховуючи, що

$$s_{1,2} = \frac{1}{2}\left[-\left(a_n^{(1)} + a_n^{(2)}\right) \pm \sqrt{\left(a_n^{(1)} - a_n^{(2)}\right)^2 + 4a_n^{(3)}a_n^{(4)}}\right]$$

і той факт, що $a_n^{(1)} > 0$, $a_n^{(2)} > 0$, отримаємо $s_1 < 0$. Дослідивши умови, за яких корінь s_2 буде від'ємним, отримаємо таке обмеження на коефіцієнти

$$\bar{d}_3^{(1)}\bar{d}_4^{(1)} < \bar{d}_1^{(1)}\bar{d}_2^{(1)}.$$

Функції Гріна знаходимо у вигляді

$$G_j\left(z, z', t, t'\right) = \frac{2}{z_0}\sum_{n=1}^{\infty}\left[\left(s_1 + R_j'\right)e^{s_1(t-t')} - \left(s_2 + R_j'\right)e^{s_2(t-t')}\right]\frac{\sin(y_n z')\sin(y_n z)}{s_1 - s_2}, \tag{16}$$

де $R_1' = 2\bar{k}_2^{(1)} + \left(\bar{d}_2^{(1)} - \bar{d}_3^{(1)}\right)y_n^2$, $R_2' = 2\bar{k}_1^{(1)} + \left(\bar{d}_1^{(1)} - \bar{d}_4^{(1)}\right)y_n^2$.

3. Усереднення полів концентрацій за ансамблем конфігурацій фаз. Числовий аналіз отриманих розв'язків

Для знаходження середніх полів концентрацій домішки в тілі з випадково розташованим прошарком виконаємо усереднення концентраційного поля за ансамблем конфігурацій фаз із рівномірною функцією розподілу [9]. Обмежимося двома першими членами матричного інтегрального ряду Неймана (14):

$$\mathbf{c}(z,t) \approx \mathbf{c}^{(0)}(z,t) + \int_0^t \int_0^{z_0} G(z,z',t,t') \Bigg(\left(\rho^{(1)} - \rho^{(2)}\right) \frac{\partial \mathbf{c}^{(0)}(z',t')}{\partial t'} -$$

$$- \left(\rho^{(1)} - \rho^{(2)}\right) \frac{\partial \mathbf{c}^{(0)}(z',t')}{\partial t'} \Bigg) \eta_{12}(z') dz'dt' -$$

$$- \int_0^t \int_0^{z_0} G\left(K^{(1)} - K^{(2)}\right) \mathbf{c}^{(0)}(z',t') \eta_{12}(z') dz'dt' -$$

$$- \int_0^t \int_0^{z_0} G\left[D(z)\right]_{z=z_1} \left\{ \delta(z'-z_1) - \delta(z'-(z_1+h)) \right\} \frac{\partial \mathbf{c}^{(0)}(z',t')}{\partial z'} dz'dt' . \qquad (17)$$

Концентрація в однорідному шарі $\mathbf{c}_0(z,t)$ є детермінова функція, тому $\langle \mathbf{c}_0(z,t) \rangle_{conf} = \mathbf{c}_0(z,t)$. Усереднимо другий і третій доданок виразу (17). Зауважимо, що

$$\eta_{12}(z') = \begin{cases} 1, \; z' \in [z_1;\, z_1+h] \\ 0, \; z' \notin [z_1;\, z_1+h] \end{cases} = \begin{cases} 1, \; z'-z_1 \in [0;\, h] \\ 0, \; z'-z_1 \notin [0;\, h] \end{cases} = \eta_h(z'-z_1),$$

де $\eta_h(x) = \begin{cases} 1, \; x \in [0;h] \\ 0, x \notin [0;h] \end{cases}$. Врахуємо парність функції Дірака, а також, що $G(z,z',t,t') = 0$ якщо $z' = 0$. Тоді для усереднених за ансамблем конфігурацій фаз полів концентрації домішки отримаємо формули

$$\langle \mathbf{c}(z,t) \rangle_{conf} = \mathbf{c}^{(0)}(z,t) +$$

$$+ \frac{\nu_2}{h} \int_0^t \int_0^h G \left\{ \left(\rho^{(1)} - \rho^{(2)}\right) \frac{\partial \mathbf{c}^{(0)}}{\partial t'} - \left(D^{(1)} - D^{(2)}\right) \frac{\partial^2 \mathbf{c}^{(0)}}{\partial z'^2} + \left(K^{(1)} - K^{(2)}\right) \mathbf{c}^{(0)} \right\} z'dz'dt' +$$

$$+ \nu_2 \int_0^t \int_h^{z_0-h} G \left\{ \left(\rho^{(1)} - \rho^{(2)}\right) \frac{\partial \mathbf{c}^{(0)}}{\partial t'} - \left(D^{(1)} - D^{(2)}\right) \frac{\partial^2 \mathbf{c}^{(0)}}{\partial z'^2} + \left(K^{(1)} - K^{(2)}\right) \mathbf{c}^{(0)} \right\} dz'dt' +$$

$$+ \frac{\nu_2}{h} \left[D(z)\right]_{z=z_1} \int_0^t \left[\lim_{\substack{X_1 \to 0+ \\ X_2 \to h+}} \int_{X_1}^{X_2} G \frac{\partial \mathbf{c}^{(0)}}{\partial z'} dz' - \frac{1}{2} \left[G \frac{\partial \mathbf{c}^{(0)}}{\partial z'} \right]_{z'=h} \right] dt', \qquad (18)$$

Таким чином, ми одержали формули (18) для знаходження усередненого за ансамблем конфігурацій фаз поля концентрації домішкової речовини у двофазному багатокомпонентному тілі з випадково розташованим прошарком за умови рівномірного розподілу фаз в області тіла.

Для знаходження розрахункових формул усереднених концентрацій домішкових частинок на швидкому та повільному шляхах міграції, а також сумарної концентрації, у формулу (18) підставляємо вирази для концентрації $\mathbf{c}^{(0)}$

в «однорідному» дисперсному шарі (15), функцій Гріна (16) і виконуємо відповідні процедури диференціювання й інтегрування.

Числові розрахунки проведені у природних безрозмірних змінних [8] $\xi = \left(k_2^{(1)} / d_1^{(1)}\right)^{1/2} x$, $\tau = k_2^{(1)} t / \rho_1$. Прийнято такі безрозмірні параметри числового дослідження: $d_1^{(1)} = 1$, $d_2^{(1)} = 0{,}1$, $d_1^{(2)} = 1{,}3$, $d_2^{(2)} = 0{,}2$, $d_3^{(j)} = d_4^{(j)} = 0$ ($j = 1;2$); $k_1^{(1)} = 10$, $k_2^{(1)} = 1$, $k_1^{(2)} = 5$, $k_2^{(2)} = 0{,}5$; $\rho_1 = 1$, $\rho_2 = 1{,}3$; $\xi_0 = \left(k_2^{(1)} / d_1^{(1)}\right)^{1/2} z_0 = 10$, $h = 0{,}1$, $\alpha = 0{,}5$, $\tau = 10$. На рис. 3 проілюстровано розподіли усереднених концентрацій домішки на швидкому $\langle c_1(\xi,\tau)\rangle / c_0$ (рис. 3*а*) та повільному $\langle c_2(\xi,\tau)\rangle / c_0$ (рис. 3*б*) шляхах міграції для різних значень товщини прошарку $h = 0{,}0001$; 0,001; 0,05; 0,1; 0,5 (криві 1-6). На рис. 4 показані характерні розподіли усередненої сумарної концентрації домішкових частинок $\langle c(\xi,\tau)\rangle / c_0 = \left(\langle c_1(\xi,\tau)\rangle + \langle c_2(\xi,\tau)\rangle\right) / c_0$ у різні моменти безрозмірного часу $\tau = 0{,}5$; 1; 5; 10 (криві 1-4, рис. 4*а*) та для різних значень коефіцієнта $\alpha = 0$; 0,25; 0,5; 0,75; 1 (криві 1-5, рис. 4*б*). Штрих-пунктирні лінії (криві а) позначають відповідні сумарні концентрації частинок для «однорідного» дисперсного шару з коефіцієнтами матриці.

Зазначимо, що для усередненої за ансамблем конфігурацій фаз сумарної концентрації домішкових частинок у шарі з прошарком, випадково розташованим за рівномірним розподілом, для процесу гетеродифузії, як і у випадку однофазного шару, характерна поява приповерхневого максимуму концентрації (рис. 4). З часом максимум $\langle c(\xi,\tau)\rangle$ зростає (рис. 4*а*), доки не вийде на усталений режим, причому таке збільшення усередненої концентрації спостерігається на всьому проміжку і є більш значний, ніж для «однорідного» шару. Вплив випадкового прошарку значно більший на усереднену концентрацію домішки на повільному шляху міграції (рис. 3*б*), ніж на швидкому (рис. 3*а*). Так, зростання безрозмірної товщини підшару на 2 порядки (від 10^{-3} до 10^{-1}) призводить до збільшення максимальних значень $\langle c_2(\xi,\tau)\rangle / c_0$ на 30 %.

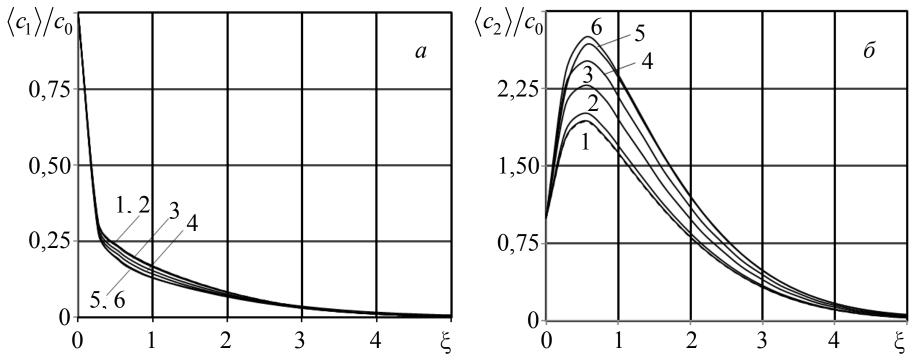

Рис. 3. Розподіли усереднених концентрацій частинок на швидкому (*а*) та повільному (*б*) шляхах міграції для різних товщин випадкового прошарку

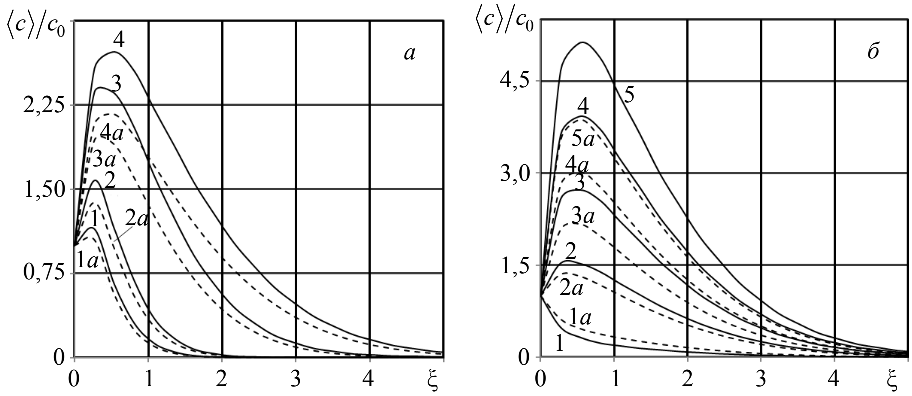

Рис. 4. Графіки усередненої сумарної концентрації частинок у різні моменти часу (*а*) та для різних значень коефіцієнта поверхневого розподілу між станами (*б*)

Висновки. Таким чином для кількісного опису процесів масоперенесення двома шляхами, що супроводжуються взаємними переходами частинок з одного шляху міграції на інший, і врахування різних фізичних властивостей фаз та ефектів міжфазних границь запропоновано математичну модель гетеродифузії двома шляхами на основі балансових співвідношень і законів збереження, сформульованих для цілого тіла. Тоді під час опису процесів перенесення у тілах багатофазної випадкової структури коефіцієнти рівнянь моделі є випадкові функції просторових координат. У рамках такої математичної моделі апріорі виконуються ідеальні умови контакту на функції концентрації на межах розділу фаз і враховуються стрибки першого роду всіх коефіцієнтів.

Трактуючи неоднорідність структури середовища як внутрішні джерела, отримано систему інтегро-диференціальних рівнянь, еквівалентну вихідній крайовій задачі. Такі рівняння зі стохастичними ядрами є рівняння Гаммерштейна за просторовою змінною та рівняння Вольтерра за часовою. Розв’язок отримано послідовними наближеннями у вигляді інтегральних рядів Неймана. Усереднення отриманих виразів для випадкових полів концентрацій проведено за ансамблем конфігурацій фаз із рівномірною функцією розподілу у припущенні превалюючої об’ємної частки матриці. Отримано розрахункові формули та створено пакет програм для кількісного аналізу залежності полів концентрації домішки на швидкому і повільному шляхах міграції та їхньої суми від фізико-хімічних параметрів середовища, що дає змогу прогнозувати поширення домішок у тришаровому двофазному багатокомпонентному тілі з випадково розташованим прошарком.

У перспективі доцільно встановити умови збіжності отриманих у роботі рядів Неймана, показати існування розв’язку системи інтегро-диференціальних рівнянь, а також одержати та дослідити розрахункові формули для усереднених полів концентрації домішки за її гетеродифузного переносу двома шляхами у багатошаровому випадково неоднорідному тілі.

Література

[1] *Довбуш Є.* Від чого страждає українська природа: ТОП-7 проблем // Велика епоха. — 2014. — № 2. — http://www.epochtimes.com.ua/ukraine/society/vid-chogo-strazhdae-ukrayinska-priroda-top-7-problem-114174.html

[2] Екологічний стан ґрунтів України / *С. А. Балюк, В. В. Медведєв, Н. Н. Мірошниченко* та ін. // Український географічний журнал. — 2012. — № 2. — С. 38-42.

[3] *Бурак Я. Й., Чапля Є. Я.* Вихідні положення математичної моделі гетеродифузного переносу радіонуклідів у приповерхневих шарах Землі // Доповіді НАН України. — 1995. — № 10. — С. 34-37.

[4] *Чапля Є. Я., Чернуха О. Ю.* Фізико-математичне моделювання гетеродифузного масопереносу. — Львів: СПОЛОМ, 2003. — 125 с.

[5] *Рытов С. М., Кравцов Ю. А., Татарский В. И.* Введение в статистическую радиофизику. Ч. II. Случайные поля. — Москва: Наука, 1978. — 436 с.

[6] *Владимиров В. С.* Уравнения математической физики. — Москва: Наука, 1976. — 527 с.

[7] *Чапля Є. Я., Чернуха О. Ю.* Математичне моделювання дифузійних процесів у випадкових і регулярних структурах. — Київ: Наукова думка, 2009. — 302 с.

[8] *Краснов М. Л.* Интегральные уравнения. — Москва: Наука, 1975. — 303 с.

[9] Справочник по теории вероятности и математической статистике / *В. С. Королюк, Н. И. Портенко, А. В. Скороход, А. Ф. Турбин.* — Москва: Наука, 1985. — 640 с.

Mathematical modelling heterodiffusion processes in a strip with a random sublayer

Olesya Vlasiy, Olha Chernukha

The paper is devoted to mathematical modelling admixture mass transfer processes in two ways, which are accompanied by the processes of type sorption-desorption, in a two-phase body with a randomly disposed layer. Stochastic nonhomogeneity of the structure is taken into account in coefficients of the set of partial differential equations of heterodifussion. It is obtained the set of integrodifferential equations with stochastic kernels that is equivalent to the reference initial-boundary value problem. By the method of successive approximations, the solution is constructed in the form of Neumann integtal series. Averaging the obtained solution is carried out over the ensemble of phase configurations with the uniform distribution function.

Математическое моделирование гетеродиффузионных процессов в слое со случайной прослойкой

Олеся Власий, Ольга Чернуха

Работа посвящена математическому моделированию массопереноса примесного вещества двумя путями, который сопровождается процессами типа сорбции-десорбции, в двухфазном слое со случайно расположенной прослойкой. Случайная неоднородность структуры учтена в коэффициентах системы уравнений гетеродиффузии. Получена система интегро-дифференциальных уравнений со стохастическими ядрами, эквивалентная исходной краевой задаче. Методом последовательных приближений построено решение в виде интегральных рядов Неймана. Процедура усреднения проведена по ансамблю конфигураций фаз с равномерной функцией распределения.

Отримано 16.10.14