

МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ ДИФУЗІЇ У ДВОФАЗНІЙ СМУЗІ З ВИПАДКОВО РОЗМІЩЕНИМИ КУЛЬОВИМИ ВКЛЮЧЕННЯМИ, ЗОСЕРЕДЖЕНИМИ БІЛЯ ГРАНИЦЬ ТІЛА. І. ПОБУДОВА МАТЕМАТИЧНОЇ МОДЕЛІ

Побудовано математичну модель дифузії домішкової речовини у двофазному тілі з кульовими включеннями, розміщеними біля границь тіла, за неідеальних умов контакту функції концентрації на міжфазних границях. З використанням рівняння нормалі до поверхні кульового включення отримано рівняння дифузії для тіла в цілому, записано умови контакту та одержано інтегро-диференціальне рівняння Вольтерра – Гаммерштейна з випадковим ядром. Розв'язок цього рівняння знайдено методом послідовних ітерацій у вигляді ряду Неймана. Проведено усереднення випадкового поля концентрації за часткових випадків бета-розподілу включень, що описують структуру з найбільш імовірним розміщенням включень біля границь тіла. Отримано розрахункові формули для обчислення концентрацій частинок домішкової речовини у двофазному тілі з кульовими включеннями.

Ключові слова: дифузія, домішкова речовина, випадково неоднорідна структура, кульове включення, ймовірнісний бета-розподіл, неідеальна умова контакту, інтегро-диференціальне рівняння Вольтерра – Гаммерштейна, ряд Неймана.

Структури, що містять кульові включення у вигляді пор, зерен чи гранул, часто використовують у різних галузях інженерії. Наприклад, композити з титановою матрицею, зміцнені магнієвими включеннями, є перспективними біомедичними матеріалами з огляду на їхню високу питому міцність та біосумісність [14]. Біметалеві композити, що характеризуються покращеною стійкістю до окислення, низькою щільністю, високою теплопровідністю, є незамінними матеріалами у машинобудуванні, аерокосмічній галузі тощо [8, 9, 15] (див. рис. 1). У сучасному будівництві широко використовують пористі матеріали: газосилкат, пінобетон, газобетон та ін. [18].

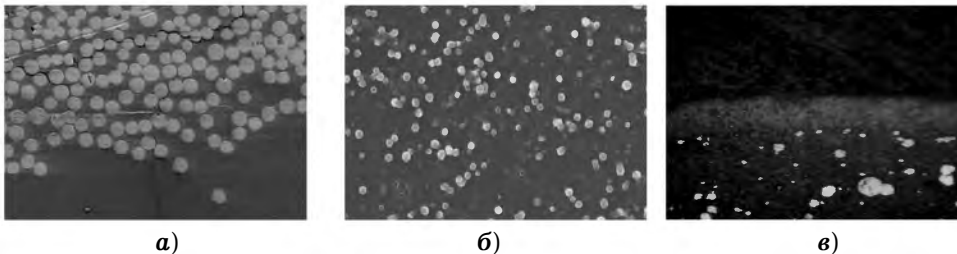


Рис. 1. Неоднорідні структури: а) – полімерний композит [13]; б) – мікрофотографія ліпідних наночастинок [15]; в) – композит мідь – алюміній [19].

Вивчення і прогнозування властивостей таких гетерогенних матеріалів шляхом виконання емпіричних досліджень чи прямих вимірювань достатньо часто є трудомістким і ресурсозатратним завданням. Тому для проведення математичного та комп'ютерного моделювання актуальною залишається проблема побудови відповідних математичних моделей, що достатньо повно описують і враховують внутрішню неоднорідну структуру середовищ та сукупність процесів, які у них протікають.

Існують різні підходи до моделювання фізичних процесів у неоднорідних структурах залежно від специфічних властивостей, які необхідно дослідити. Зручним у реалізації під час моделювання дифузії у різнотипних структурах є метод випадкового блукання, який, однак, вимагає наявності

✉ davydoka@gmail.com

інформації про поле швидкостей частинок [16, 20]. Цей метод, разом із методом решіток Больцмана, використано у праці [12] для опису масоперенесення у тілі зі структурними неоднорідностями, згенерованими на основі методів Монте-Карло та Джорді – Торі. Варто зазначити, що поряд із багатьма перевагами методу решіток Больцмана його реалізація вимагає значних обчислювальних потужностей, а використання на рухомих границях і для багатофазних чи багатокомпонентних моделей є ускладненим. У працях [6, 10, 11] запропоновано підхід до математичного опису процесів масоперенесення у багатофазних випадково неоднорідних середовищах, що базується на зведенні вихідної контактної-крайової задачі до інтегро-диференціального рівняння Вольтерра – Гаммерштейна та побудові розв’язку у вигляді інтегрального ряду Неймана з його подальшим усередненням за ансамблем конфігурацій фаз. При цьому явно враховується стрибок функції концентрації і рівність потоків на випадкових міжфазних границях. Зокрема, у роботі [7] розглянуто випадок рівномірного розподілу кульових включень в області тіла.

У цій роботі на основі описаного вище підходу досліджується міграція домішкової речовини у двофазному шарі з кульовими включеннями, зосередженими біля однієї з границь тіла, неоднорідна структура якого описується за допомогою часткового випадку ймовірного бета-розподілу залежно від віддалі розміщення включень до джерела маси.

1. Об’єкт дослідження і постановка задачі. Розглянемо міграцію домішкових частинок у стохастично неоднорідному шарі товщини z_0 , що містить кульові включення одного матеріалу. Координати розміщення кульових включень є невідомими. Проте відомо, що вони найімовірніше локалізуються біля однієї з границь тіла – верхньої (рис. 2) або нижньої (рис. 3).

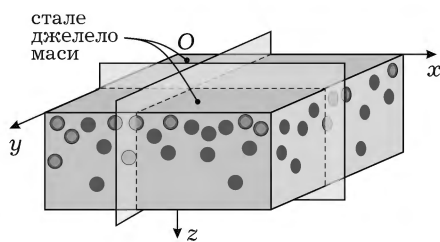


Рис. 2

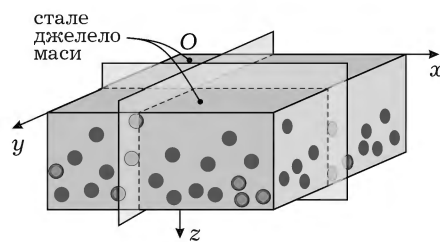


Рис. 3

Відносно осей Ox та Oy кульові включення розміщені за рівномірним законом розподілу, а стосовно осі Oz – за частковими випадками ймовірного бета-розподілу з такою функцією щільності [2]

– для типу структури, наведеної на рис. 2

$$f_1(z) = \begin{cases} (1 + \beta) \left(1 - \frac{z}{z_0}\right)^{\beta-1}, & z \in [0, z_0], \\ 0, & z \notin [0, z_0], \end{cases} \quad (1)$$

– для типу структури, наведеної на рис. 3:

$$f_2(z) = \begin{cases} \alpha \left(\frac{z}{z_0}\right)^{\alpha-1}, & z \in [0, z_0], \\ 0, & z \notin [0, z_0]. \end{cases} \quad (2)$$

Тут α, β – ступені вільності відповідних розподілів ($\alpha, \beta > 1$).

Вважаємо, що об’ємна частка матриці v_0 є набагато більшою, ніж об’ємна частка включень, тобто $v_0 \gg v_1$. Приймаємо, що густина тіла і коефіцієнт дифузії є сталими в об’ємі кожної з фаз, відповідно, ρ_0 і d_0 – для області матриці та ρ_1 і d_1 – для включень.

Концентрація домішкової речовини $c_j(\mathbf{r}, t)$ однозв'язної області $(V^{(j)})$ фази j , $j = 0, 1$, визначається з рівняння [7]

$$\rho_j \frac{\partial c_j(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = d_j \left[\frac{\partial^2 c_j(\mathbf{r}, t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c_j(\mathbf{r}, t)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 c_j(\mathbf{r}, t)}{\partial z^2} \right], \quad (3)$$

де $\mathbf{r} = (x, y, z)$ – радіус-вектор біжучої точки, $\mathbf{r} \in (V^{(j)})$, $t \in [0, \tau]$, $\tau < \infty$.

Вважаємо, що в початковий момент часу домішка в тілі відсутня:

$$c_0(\mathbf{r}, t)|_{t=0} = c_1(\mathbf{r}, t)|_{t=0} = 0. \quad (4)$$

На верхній границі тіла $z = 0$ (рис. 2, рис. 3) підтримується постійне значення концентрації домішкової речовини $c_* \equiv \text{const}$, а на нижній границі $z = z_0$ вона дорівнює нулеві, тобто реалізуються граничні умови

$$c_0(\mathbf{r}, t)|_{z=0} = c_*, \quad c_0(\mathbf{r}, t)|_{z=z_0} = 0, \quad c_j(\mathbf{r}, t)|_{x, y \rightarrow \pm\infty} \leq K < \infty, \quad j = 0, 1. \quad (5)$$

На границях поділу областей $(V^{(0)})$ і $(V^{(1)})$ виконуються умови рівності хімічних потенціалів $\mu(\mathbf{r}, t)$ та дифузійних потоків частинок

– на границі матриця – включення:

$$\mu_0(\mathbf{r}, t)|_{\mathbf{r} \in \Gamma-0} = \mu_1(\mathbf{r}, t)|_{\mathbf{r} \in \Gamma+0},$$

$$\rho_0 d_0 \nabla \mu_0(\mathbf{r}, t)|_{\mathbf{r} \in \Gamma-0} = \rho_1 d_1 \nabla \mu_1(\mathbf{r}, t)|_{\mathbf{r} \in \Gamma+0}; \quad (6')$$

– на границі включення – матриця:

$$\mu_1(\mathbf{r}, t)|_{\mathbf{r} \in \Gamma-0} = \mu_0(\mathbf{r}, t)|_{\mathbf{r} \in \Gamma+0}$$

$$\rho_1 d_1 \nabla \mu_1(\mathbf{r}, t)|_{\mathbf{r} \in \Gamma-0} = \rho_0 d_0 \nabla \mu_0(\mathbf{r}, t)|_{\mathbf{r} \in \Gamma+0}. \quad (6'')$$

Тут $\mu_j(\mathbf{r}, t)$ – хімічний потенціал у фазі j , $j = 0, 1$; Γ – загальна границя контакту фаз, яка складається з границь контакту однозв'язних областей; ∇ – оператор Гамільтона.

Приймаємо лінійну залежність хімічного потенціалу від концентрації [3]:

$$\mu_j(\mathbf{r}, t) = \mu^0 - A(1 - \gamma_j(\mathbf{r})c(\mathbf{r}, t)), \quad (7)$$

де μ^0 – хімічний потенціал для чистої речовини у стані, який задано значенням абсолютної температури T і тиску P ; $A = RT/M$ – коефіцієнт, у якому R – універсальна газова стала і M – атомна маса; γ_j – коефіцієнти активності [3].

Підставивши вираз для хімічного потенціалу (7) в умови (6), для функції концентрації отримаємо умови неідеального контакту

– на границі матриця – включення:

$$k_0 c_0(\mathbf{r}, t)|_{\mathbf{r} \in \Gamma-0} = k_1 c_1(\mathbf{r}, t)|_{\mathbf{r} \in \Gamma+0}, \quad (8)$$

$$\rho_0 d_0 \nabla c_0(\mathbf{r}, t)|_{\mathbf{r} \in \Gamma-0} = \rho_1 d_1 \nabla c_1(\mathbf{r}, t)|_{\mathbf{r} \in \Gamma+0}; \quad (9)$$

– на границі включення – матриця:

$$k_1 c_1(\mathbf{r}, t)|_{\mathbf{r} \in \Gamma-0} = k_0 c_0(\mathbf{r}, t)|_{\mathbf{r} \in \Gamma+0}, \quad (10)$$

$$\rho_1 d_1 \nabla c_1(\mathbf{r}, t)|_{\mathbf{r} \in \Gamma-0} = \rho_0 d_0 \nabla c_0(\mathbf{r}, t)|_{\mathbf{r} \in \Gamma+0}, \quad (11)$$

де $k_j = A\gamma_j$, $j = 0, 1$, – кінетичні коефіцієнти, що визначають стрибки випадкової концентрації $c(\mathbf{r}, t)$ на випадкових границях контакту Γ .

Таким чином, сформульовано математичну модель дифузії домішкової речовини у двофазному тілі з кульовими включеннями, зосередженими біля границь тіла, за умов неідеального контакту функції концентрації.

2. Рівняння нормалі до кульового включення. Оскільки рівняння дифузії (3) записано для кожної області окремо, то з метою отримання рівняння масоперенесення для тіла в цілому знайдемо рівняння нормалі до кульового включення у деякій точці поверхні $\mathbf{r}_{\Gamma_{i1}}$ (рис. 4).

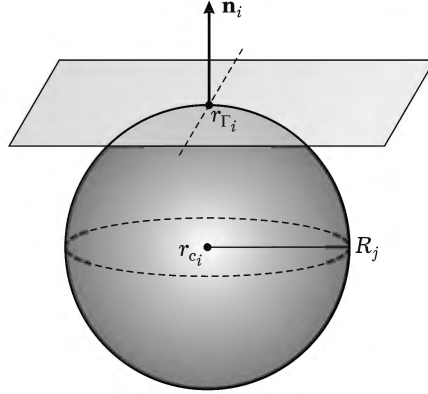


Рис. 4

Для цього запишемо рівняння кульової поверхні, яке в неявному вигляді задається як

$$F(x, y, z) \equiv (x - x_{c_i})^2 + (y - y_{c_i})^2 + (z - z_{c_i})^2 - R_j^2 = 0, \quad (12)$$

де $(x_{c_i}, y_{c_i}, z_{c_i}) = \mathbf{r}_{c_i}$ – центр i -го кульового включення, R_j – характерний радіус кульового включення j -ї фази (у розглядуваному випадку двофазного тіла маємо один характерний радіус включення R_1).

Рівняння нормалі в точці $\mathbf{r}_{\Gamma_{i1}} = (x_{\Gamma_{i1}}, y_{\Gamma_{i1}}, z_{\Gamma_{i1}})$ шукаємо у вигляді [21]

$$\frac{x - x_{\Gamma_{i1}}}{F'_x(\mathbf{r}_{\Gamma_{i1}})} = \frac{y - y_{\Gamma_{i1}}}{F'_y(\mathbf{r}_{\Gamma_{i1}})} = \frac{z - z_{\Gamma_{i1}}}{F'_z(\mathbf{r}_{\Gamma_{i1}})}, \quad (13)$$

де $F'_x(\mathbf{r}_{\Gamma_{i1}})$, $F'_y(\mathbf{r}_{\Gamma_{i1}})$, $F'_z(\mathbf{r}_{\Gamma_{i1}})$ – частинні похідні від функції F (12):

$$F'_x = 2(x - x_{c_i}), \quad F'_y = 2(y - y_{c_i}), \quad F'_z = 2(z - z_{c_i}).$$

Зокрема, в точці $\mathbf{r}_{\Gamma_{i1}}$ маємо

$$\begin{aligned} F'_x(\mathbf{r}_{\Gamma_{i1}}) &= 2(x_{\Gamma_{i1}} - x_{c_i}), \\ F'_y(\mathbf{r}_{\Gamma_{i1}}) &= 2(y_{\Gamma_{i1}} - y_{c_i}), \\ F'_z(\mathbf{r}_{\Gamma_{i1}}) &= 2(z_{\Gamma_{i1}} - z_{c_i}). \end{aligned} \quad (14)$$

Підставляючи вирази (14) у формулу (13), одержимо канонічне рівняння нормалі в точці $\mathbf{r}_{\Gamma_{i1}}$ у вигляді

$$\frac{x - x_{\Gamma_{i1}}}{x_{\Gamma_{i1}} - x_{c_i}} = \frac{y - y_{\Gamma_{i1}}}{y_{\Gamma_{i1}} - y_{c_i}} = \frac{z - z_{\Gamma_{i1}}}{z_{\Gamma_{i1}} - z_{c_i}}. \quad (15)$$

Запишемо одиничний вектор нормалі \mathbf{n}_i до поверхні у точці $\mathbf{r}_{\Gamma_{il}}$, поділивши кожен складову вектора нормалі (15) на характерний радіус кульового включення R_1 :

$$\mathbf{n}_i = \frac{x - x_{\Gamma_{il}}}{R_1(x_{\Gamma_{il}} - x_{c_i})} \mathbf{i} + \frac{y - y_{\Gamma_{il}}}{R_1(y_{\Gamma_{il}} - y_{c_i})} \mathbf{j} + \frac{z - z_{\Gamma_{il}}}{R_1(z_{\Gamma_{il}} - z_{c_i})} \mathbf{k}. \quad (16)$$

Зазначимо, що стрибки концентрації (8), (10) та її градієнта (9), (11) є однаковими за величиною і відрізняються лише знаком.

Використовуючи подання (16), умови контакту матриця – включення (8), (9) подамо у вигляді

$$[c(\mathbf{r}, t)]_{\mathbf{r} \in \Gamma} = c_0(\mathbf{r}, t)|_{\mathbf{r} \in \Gamma^-} - c_1(\mathbf{r}, t)|_{\mathbf{r} \in \Gamma^+} = \left(1 - \frac{k_0}{k_1}\right) c_0(\mathbf{r}, t)|_{\mathbf{r} \in \Gamma^-} \cdot \mathbf{n}, \quad (17)$$

$$\begin{aligned} [\nabla c(\mathbf{r}, t)]_{\mathbf{r} \in \Gamma} &= \nabla c_0(\mathbf{r}, t)|_{\mathbf{r} \in \Gamma^-} - \nabla c_1(\mathbf{r}, t)|_{\mathbf{r} \in \Gamma^+} = \\ &= \left(1 - \frac{\rho_0 d_0}{\rho_1 d_1}\right) \nabla c_0(\mathbf{r}, t)|_{\mathbf{r} \in \Gamma^-} \cdot \mathbf{n}, \end{aligned} \quad (18)$$

а умови контакту включення – матриця (10), (11) – у вигляді

$$[c(\mathbf{r}, t)]_{\mathbf{r} \in \Gamma} = c_1(\mathbf{r}, t)|_{\mathbf{r} \in \Gamma^-} - c_0(\mathbf{r}, t)|_{\mathbf{r} \in \Gamma^+} = \left(\frac{k_1}{k_0} - 1\right) c_1(\mathbf{r}, t)|_{\mathbf{r} \in \Gamma^-} \cdot \mathbf{n}, \quad (19)$$

$$\begin{aligned} [\nabla c(\mathbf{r}, t)]_{\mathbf{r} \in \Gamma} &= \nabla c_1(\mathbf{r}, t)|_{\mathbf{r} \in \Gamma^-} - \nabla c_0(\mathbf{r}, t)|_{\mathbf{r} \in \Gamma^+} = \\ &= \left(\frac{\rho_1 d_1}{\rho_0 d_0} - 1\right) \nabla c_1(\mathbf{r}, t)|_{\mathbf{r} \in \Gamma^-} \cdot \mathbf{n}. \end{aligned} \quad (20)$$

Тут $[c(\mathbf{r}, t)]_{\mathbf{r} \in \Gamma}$ – стрибок функції $c(\mathbf{r}, t)$ на границях контакту Γ .

За такої постановки задачі границя Γ є випадковою величиною, тобто координати точок границі є випадковими величинами, що призводить до стохастичності поля концентрації домішкової речовини, яка мігрує в тілі.

3. Рівняння дифузії для усього тіла. Розв'язок контактної-крайової задачі дифузії (3)–(5), (17)–(20) шукаємо у вигляді інтегрального ряду Неймана, для цього побудуємо рівняння дифузії для тіла в цілому.

Введемо в розгляд випадкову функцію просторової координати $c(\mathbf{r}, t)$, яка описує концентрацію в усьому тілі:

$$c(\mathbf{r}, t) = c_j(\mathbf{r}, t) \quad \text{при} \quad \mathbf{r} \in (V^{(j)}), \quad j = 0, 1;$$

$$c(\mathbf{r}, t) \quad \text{– умови (17)–(20)} \quad \text{при} \quad \mathbf{r} \in \Gamma.$$

Знайдемо $\nabla c(\mathbf{r}, t)$, враховуючи, що функція $c(\mathbf{r}, t)$ має розриви 1-го роду (умови (17), (19)) на границях контакту областей Γ . Згідно з [1], маємо

$$\nabla c(\mathbf{r}, t) = \{\nabla c(\mathbf{r}, t)\} + [c(\mathbf{r}, t)]_{\Gamma} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\Gamma}), \quad (21)$$

де \mathbf{r}_{Γ} – радіус-вектор точок границі Γ ; $\{f\}$ – значення функції f в області неперервності; $[f]_{\Gamma}$ – стрибок функції на границі Γ ; $\delta(\cdot)$ – дельта-функція Дірака.

Зазначимо, що стрибок $[c(\mathbf{r}, t)]_{\Gamma}$ є, взагалі кажучи, векторною величиною і набуває різних значень для різних радіусів-векторів $\mathbf{r} \in \Gamma$.

Оскільки функція $\nabla c(\mathbf{r}, t)$ теж має розриви 1-го роду на границях поділу фаз (див. умови (18), (20)), то, аналогічно до (21), величину $\Delta c(\mathbf{r}, t)$ знаходимо як

$$\Delta c(\mathbf{r}, t) = \{\Delta c(\mathbf{r}, t)\} + [\nabla c(\mathbf{r}, t)]_{\Gamma} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\Gamma}) + [c(\mathbf{r}, t)]_{\Gamma} \nabla \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\Gamma}). \quad (22)$$

Коефіцієнти дифузії $d(\mathbf{r})$ і густини $\rho(\mathbf{r})$ означимо для відкритих областей як

$$d(\mathbf{r}) = \{d_0\}_{\mathbf{r} \in (V^{(0)}) \setminus \Gamma} + \{d_1\}_{\mathbf{r} \in (V^{(1)}) \setminus \Gamma},$$

$$\rho(\mathbf{r}) = \{\rho_0\}_{\mathbf{r} \in (V^{(0)}) \setminus \Gamma} + \{\rho_1\}_{\mathbf{r} \in (V^{(1)}) \setminus \Gamma}.$$

На границях контакту $\mathbf{r} \in \Gamma$ для $d(\mathbf{r})$ і $\rho(\mathbf{r})$ маємо стрибки:

$$[d(\mathbf{r})]_{\mathbf{r} \in \Gamma} = d_1 - d_0 \quad \text{на границі матриця - включення,}$$

$$[d(\mathbf{r})]_{\mathbf{r} \in \Gamma} = d_0 - d_1 \quad \text{на границі включення - матриця,}$$

$$[\rho(\mathbf{r})]_{\mathbf{r} \in \Gamma} = \rho_1 - \rho_0 \quad \text{на границі матриця - включення,}$$

$$[\rho(\mathbf{r})]_{\mathbf{r} \in \Gamma} = \rho_0 - \rho_1 \quad \text{на границі включення - матриця,}$$

які залежать від матеріальних характеристик фаз.

Розглянемо випадкову функцію $\eta_{ij}(\mathbf{r})$ - «функцію структури» [4]:

$$\eta_{ij}(\mathbf{r}) = \begin{cases} 1, & \mathbf{r} \in (V_i^{(j)}), \\ 0, & \mathbf{r} \notin (V_i^{(j)}), \end{cases} i$$

де $(V_i^{(j)})$ - i -та однозв'язна область фази j , $\bigcup_{i=1}^{m_j} (V_i^{(j)}) = (V^{(j)})$, m_j - кількість однозв'язних областей у фазі j . Для функції структури виконується умова суцільності тіла [4]

$$\sum_{i=1}^{m_0} \eta_{i0}(\mathbf{r}) + \sum_{i=1}^{m_1} \eta_{i1}(\mathbf{r}) = 1. \quad (23)$$

Тоді кінетичний коефіцієнт дифузії $d(\mathbf{r})$ та густину $\rho(\mathbf{r})$ можемо подати через функцію структури $\eta_{ij}(\mathbf{r})$ у такому вигляді:

$$d(\mathbf{r}) = \sum_j \sum_i d_j \eta_{ij}(\mathbf{r}), \quad \rho(\mathbf{r}) = \sum_j \sum_i \rho_j \eta_{ij}(\mathbf{r}). \quad (24)$$

Оскільки для тіла в цілому справджується рівняння балансу маси

$$\rho(\mathbf{r}) \frac{\partial c(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, t),$$

де $\mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = -d(\mathbf{r}) \cdot \nabla c(\mathbf{r}, t)$ - потік маси домішкової речовини, то рівняння дифузії для тіла в цілому запишеться як

$$\rho(\mathbf{r}) \frac{\partial c(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \nabla d(\mathbf{r}) \nabla c(\mathbf{r}, t) + d(\mathbf{r}) \Delta c(\mathbf{r}, t). \quad (25)$$

Коефіцієнт дифузії $d(\mathbf{r})$ є кусково-сталою функцією і на границях контакту має розриви 1-го роду, тому при дії на нього набла-оператора маємо

$$\nabla d(\mathbf{r}) = \{\nabla d(\mathbf{r})\}_{\mathbf{r} \in (V_i^{(j)})} + [d(\mathbf{r})]_{\mathbf{r} \in \Gamma} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\Gamma}). \quad (26)$$

Оскільки в розглядуваній задачі обмежуємось випадком сталих густин тіла і коефіцієнтів дифузії у межах кожної з фаз, формула (26) зводиться до такої:

$$\nabla d(\mathbf{r}) = [d(\mathbf{r})]_{\mathbf{r} \in \Gamma} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\Gamma}). \quad (27)$$

Використовуючи співвідношення (21), (22) та (27), рівняння масоперенесення (25) можемо подати у вигляді

$$\begin{aligned} \rho(\mathbf{r}) \frac{\partial c(\mathbf{r}, t)}{\partial t} &= \{d(\mathbf{r}) \Delta c(\mathbf{r}, t)\} + [d(\mathbf{r})]_{\Gamma} [\nabla c(\mathbf{r}, t)]_{\Gamma} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\Gamma}) + \\ &+ [d(\mathbf{r})]_{\Gamma} [c(\mathbf{r}, t)]_{\Gamma} \nabla \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\Gamma}) + [d(\mathbf{r})]_{\Gamma} [c(\mathbf{r}, t)]_{\Gamma} \delta^2(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\Gamma}). \end{aligned}$$

Тут враховано, що концентрація $c(\mathbf{r}, t)$ є неперервною функцією за часом разом із першою похідною. Також прийнято до уваги, що області неперервності кінетичного коефіцієнта переносу $d(\mathbf{r})$ і функції концентрації $c(\mathbf{r}, t)$ співпадають, тому $\{d(\mathbf{r})\} \{c(\mathbf{r}, t)\} = \{d(\mathbf{r})c(\mathbf{r}, t)\}$.

З огляду на умову суцільності тіла (23) та подання (24), рівняння дифузії для тіла в цілому можемо подати у вигляді

$$\begin{aligned} L(\mathbf{r}, t)c(\mathbf{r}, t) &= \sum_j \sum_{i=1}^{m_j} \rho_j \eta_{ij}(\mathbf{r}) \frac{\partial c(\mathbf{r}, t)}{\partial t} - \sum_j \sum_{i=1}^{m_j} d_j \eta_{ij}(\mathbf{r}) \Delta c(\mathbf{r}, t) - \\ &- \frac{1}{2} \sum_j \sum_{i=1}^{m_j} [d(\mathbf{r})]_{\Gamma_{ij}} [\nabla c(\mathbf{r}, t)]_{\Gamma_{ij}} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\Gamma_{ij}}) - \\ &- \frac{1}{2} \sum_j \sum_{i=1}^{m_j} [d(\mathbf{r})]_{\Gamma_{ij}} [c(\mathbf{r}, t)]_{\Gamma_{ij}} \nabla \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\Gamma_{ij}}) - \\ &- \frac{1}{2} \sum_j \sum_{i=1}^{m_j} [d(\mathbf{r})]_{\Gamma_{ij}} [c(\mathbf{r}, t)]_{\Gamma_{ij}} \delta^2(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\Gamma_{ij}}) = 0. \end{aligned} \quad (28)$$

Додамо і віднімемо в рівнянні (28) детермінований оператор $L_0(\mathbf{r}, t)$ з коефіцієнтами, які є характеристиками основної фази (матриці):

$$L_0(\mathbf{r}, t) = L_0(z, t) = \rho_0 \frac{\partial}{\partial t} - d_0 \frac{\partial^2}{\partial z^2}.$$

Тоді одержимо

$$L_0(\mathbf{r}, t)c(\mathbf{r}, t) = L_s(\mathbf{r})c(\mathbf{r}, t). \quad (29)$$

Тут

$$\begin{aligned} L_s(\mathbf{r}, t) \equiv L_0(\mathbf{r}, t) - L(\mathbf{r}, t) &= (\rho_0 - \rho_1) \sum_{i=1}^{m_1} \eta_{i1}(\mathbf{r}) \frac{\partial}{\partial t} - (d_0 - d_1) \sum_{i=1}^{m_1} \eta_{i1}(\mathbf{r}) \Delta + \\ &+ \sum_{i=1}^{m_1} [d(\mathbf{r})]_{\Gamma_{i1}} \left(1 - \frac{\rho_0 d_0}{\rho_1 d_1}\right) \nabla \dots \Big|_{\mathbf{r} \in \Gamma_{i1}-0} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\Gamma_{i1}}) \mathbf{n}_i + \\ &+ \sum_{i=1}^{m_1} [d(\mathbf{r})]_{\Gamma_{i1}} \left(1 - \frac{\rho_0 d_0}{\rho_1 d_1}\right) \nabla \dots \Big|_{\mathbf{r} \in \Gamma_{i1}-0} \nabla \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\Gamma_{i1}}) \mathbf{n}_i + \\ &+ \sum_{i=1}^{m_1} [d(\mathbf{r})]_{\Gamma_{i1}} \left(1 - \frac{\rho_0 d_0}{\rho_1 d_1}\right) \nabla \dots \Big|_{\mathbf{r} \in \Gamma_{i1}-0} \delta^2(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\Gamma_{i1}}) \mathbf{n}_i. \end{aligned} \quad (30)$$

Враховуючи, що стрибок $[d(\mathbf{r})]_{\mathbf{r} \in \Gamma}$ коефіцієнта дифузії має напрямок, його можна подати через вектор нормалі (16) як $[d(\mathbf{r})]_{\mathbf{r} \in \Gamma} = |d_0 - d_1| \mathbf{n}$. Відповідно оператор (30) подамо як

$$L_s(\mathbf{r}, t) = (\rho_0 - \rho_1) \sum_{i=1}^{m_1} \eta_{i1}(\mathbf{r}) \frac{\partial}{\partial t} - (d_0 - d_1) \sum_{i=1}^{m_1} \eta_{i1}(\mathbf{r}) \Delta +$$

$$\begin{aligned}
& + |d_0 - d_1| \sum_{i=1}^{m_1} \tilde{n}_i \left(1 - \frac{\rho_0 d_0}{\rho_1 d_1}\right) \nabla \dots \Big|_{\mathbf{r} \in \Gamma_{i1}-0} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\Gamma_{i1}}) + \\
& + |d_0 - d_1| \sum_{i=1}^{m_1} \tilde{n}_i \left(1 - \frac{\rho_0 d_0}{\rho_1 d_1}\right) \nabla \dots \Big|_{\mathbf{r} \in \Gamma_{i1}-0} \nabla \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\Gamma_{i1}}) + \\
& + |d_0 - d_1| \sum_{i=1}^{m_1} \tilde{n}_i \left(1 - \frac{\rho_0 d_0}{\rho_1 d_1}\right) \nabla \dots \Big|_{\mathbf{r} \in \Gamma_{i1}-0} \delta^2(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\Gamma_{i1}}). \quad (30')
\end{aligned}$$

Тут \tilde{n}_i – скалярний добуток векторів нормалі:

$$\begin{aligned}
\tilde{n}_i \equiv \mathbf{n}_i \cdot \mathbf{n}_i = & \left(\frac{x - x_{\Gamma_{i1}}}{R_1(x_{\Gamma_{i1}} - x_{c_i})} \right)^2 + \left(\frac{y - y_{\Gamma_{i1}}}{R_1(y_{\Gamma_{i1}} - y_{c_i})} \right)^2 + \\
& + \left(\frac{z - z_{\Gamma_{i1}}}{R_1(z_{\Gamma_{i1}} - z_{c_i})} \right)^2. \quad (31)
\end{aligned}$$

4. Еквівалентне інтегро-диференціальне рівняння. Праву частину рівняння (29) будемо вважати джерелом, тобто неоднорідність структури тіла трактуємо як внутрішні джерела. Тоді розв'язок задачі (29), (4), (5) подамо як суму розв'язку однорідної крайової задачі та згортки функції Гріна з джерелом. Одержимо еквівалентне вихідній контактній-крайовій задачі інтегро-диференціальне рівняння

$$c(\mathbf{r}, t) = c_0(\mathbf{r}, t) + \int_0^t \iiint_V G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t') L_s(\mathbf{r}', t') c(\mathbf{r}', t') d\mathbf{r}' dt', \quad (32)$$

де $c_0(\mathbf{r}, t)$ – розв'язок однорідної крайової задачі, який з урахуванням симетрії за змінними x та y має вигляд [7]

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

де $y_n = n\pi/z_0$.

Функція Гріна $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t')$ є розв'язком детермінованої крайової задачі з точковим джерелом і задається таким співвідношенням [7]:

$$\begin{aligned}
G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t') = & \frac{\pi \theta(t - t')}{2z_0 d_0 (t - t')} e^{-\frac{\rho_0}{4d_0} \frac{(x-x')^2 + (y-y')^2}{t-t'}} \times \\
& \times \sum_{k=1}^{\infty} e^{-\frac{d_0 y_k^2 (t-t')}{\rho_0}} \sin y_k z \sin y_k z'.
\end{aligned}$$

Тут $y_k = k\pi/z_0$, $\theta(t)$ – одинична східчаста функція Гевісайда.

Зазначимо, що інтегро-диференціальне рівняння (32) з випадковим ядром є рівнянням Вольтерра II-го роду за часовою змінною і рівнянням Гаммерштейна – за просторовою змінною.

Розв'язок інтегро-диференціального рівняння (32) шукаємо у вигляді нескінченного інтегрального ряду Неймана методом послідовних ітерацій. Для цього запишемо вираз для поля концентрації $c(\mathbf{r}, t)$ в точці (\mathbf{r}', t') :

$$c(\mathbf{r}', t') = c_0(z', t') + \int_0^{t'} \iiint_V G(\mathbf{r}', \mathbf{r}'', t', t'') L_s(\mathbf{r}'', t'') c(\mathbf{r}'', t'') d\mathbf{r}'' dt''$$

і підставимо його у рівняння (32):

$$\begin{aligned}
c(\mathbf{r}, t) = & c_0(z, t) + \int_0^t \iiint_V G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t') L_s(\mathbf{r}', t') c_0(z', t') d\mathbf{r}' dt' + \\
& + \int_0^t \iiint_V G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t') L_s(\mathbf{r}', t') \times \\
& \times \int_0^{t'} \iiint_V G(\mathbf{r}', \mathbf{r}'', t', t'') L_s(\mathbf{r}'', t'') c(\mathbf{r}'', t'') d\mathbf{r}'' dt'' d\mathbf{r}' dt'. \quad (33)
\end{aligned}$$

Тоді записуємо значення поля концентрації $c(\mathbf{r}, t)$ у точці (\mathbf{r}'', t'') і підставляємо отриману формулу в праву частину (33) і т. д. У результаті нескінченної кількості ітерацій одержуємо ряд Неймана:

$$\begin{aligned}
c(\mathbf{r}, t) = & c_0(z, t) + \int_0^t \iiint_V G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t') L_s(\mathbf{r}', t') c_0(z', t') d\mathbf{r}' dt' + \\
& + \int_0^t \iiint_V G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t') L_s(\mathbf{r}', t') \times \\
& \times \int_0^{t'} \iiint_V G(\mathbf{r}', \mathbf{r}'', t', t'') L_s(\mathbf{r}'', t'') c_0(z'', t'') d\mathbf{r}'' dt'' d\mathbf{r}' dt' + \\
& + \int_0^t \iiint_V G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t') L_s(\mathbf{r}', t') \int_0^{t'} \iiint_V G(\mathbf{r}', \mathbf{r}'', t', t'') L_s(\mathbf{r}'', t'') \times \\
& \times \int_0^{t''} \iiint_V G(\mathbf{r}'', \mathbf{r}''', t'', t''') L_s(\mathbf{r}''', t''') \times \\
& \times c_0(z''', t''') d\mathbf{r}''' dt''' d\mathbf{r}'' dt'' d\mathbf{r}' dt' + \dots \quad (34)
\end{aligned}$$

5. Усереднення за ансамблем конфігурацій фаз. Для знаходження усередненого поля концентрації домішкової речовини обмежимося двома першими членами ряду Неймана (34). Враховуючи вигляд оператора $L_s(\mathbf{r}, t)$ (30'), а також те, що функція $c_0(z, t)$ і її похідні не мають розривів, одержимо

$$\begin{aligned}
c(\mathbf{r}, t) \approx & c_0(z, t) + \int_0^t \iiint_V G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t') \times \\
& \times \left\{ \sum_{i=1}^{m_1} \left[(\rho_0 - \rho_1) \frac{\partial c_0(z', t')}{\partial t'} - (d_0 - d_1) \frac{\partial^2 c_0(z', t')}{\partial z'^2} \right] \eta_{i1}(\mathbf{r}') + \right. \\
& + |d_0 - d_1| \sum_{i=1}^{m_1} \tilde{n}_i \left(1 - \frac{\rho_0 d_0}{\rho_1 d_1} \right) \frac{\partial c_0(z', t')}{\partial z'} \Big|_{\mathbf{r}' \in \Gamma_{i1} - 0} \times \\
& \left. \times \left[\delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_{\Gamma_{i1}}) + \nabla \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_{\Gamma_{i1}}) + \delta^2(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_{\Gamma_{i1}}) \right] \right\} d\mathbf{r}' dt'. \quad (35)
\end{aligned}$$

Усереднимо вираз (35) за ансамблем конфігурацій фаз, вважаючи, що випадковою величиною є радіус-вектор \mathbf{r}_{i1} центра кулі. Врахуємо, що функція $c_0(z, t)$ не є випадковою функцією, тобто $\langle c_0(z, t) \rangle_{\text{conf}} = c_0(z, t)$.

Зазначимо, що

$$\eta_{i1}(\mathbf{r}') = \begin{cases} 1, & \mathbf{r}' \in (V_i^{(1)}), \\ 0, & \mathbf{r}' \notin (V_i^{(1)}), \end{cases} = \begin{cases} 1, & |\mathbf{r}' - \mathbf{r}_{i1}| \in [0, R_1], \\ 0, & |\mathbf{r}' - \mathbf{r}_{i1}| \notin [0, R_1], \end{cases} = \eta_{i1}(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}_{i1}|), \quad (36)$$

де R_1 – характерний (середній) радіус сферичного включення $(V_i^{(1)})$.

Від радіусів-векторів центрів включень залежить функція η_{i1} і коефіцієнт \tilde{n}_i (31). Тоді, враховуючи, що включення найбільш імовірно можуть бути локалізовані біля верхньої або нижньої границь тіла (тобто розміщені за ймовірнісними розподілами (1) або (2)), інтеграл у правій частині виразу (35) можемо подати у вигляді суми двох інтегралів:

$$\langle I \rangle_{\text{conf}} = I_1 + I_2,$$

де для відповідного розподілу $f_\ell(z)$, $\ell = 1, 2$, отримаємо

$$I_1 = \int_0^t \iiint_V G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t') \left[(\rho_0 - \rho_1) \frac{\partial c_0(z', t')}{\partial t'} - (d_0 - d_1) \frac{\partial^2 c_0(z', t')}{\partial z'^2} \right] \times \\ \times \sum_{i=1}^{m_1} \iiint_V \eta_{i1}(\mathbf{r}') f_\ell(\mathbf{r}_{i1}) d\mathbf{r}_{i1} d\mathbf{r}' dt', \quad (37)$$

$$I_2 = |d_0 - d_1| \int_0^t \iiint_V G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t') \left(1 - \frac{\rho_0 d_0}{\rho_1 d_1} \right) \sum_{i=1}^{m_1} \iiint_V \tilde{n}_i f_\ell(\mathbf{r}_{i1}) \frac{\partial c_0(z', t')}{\partial z'} \Big|_{\mathbf{r}' \in \Gamma_{i1} - 0} \times \\ \times \left[\delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_{\Gamma_{i1}}) + \nabla \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_{\Gamma_{i1}}) + \delta^2(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_{\Gamma_{i1}}) \right] d\mathbf{r}_{\Gamma_{i1}} d\mathbf{r}' dt'. \quad (38)$$

Зазначимо, що у (38) для зручності випадковою величиною прийнято точки границі випадково розміщеного кульового включення $\mathbf{r}_{\Gamma_{i1}}$. Таке подання не суперечить усередненню доданка (37), яке відбувається за радіусом-вектором центра включень, оскільки між радіусом-вектором центра кулі та точками його границі існує однозначний зв'язок і шляхом заміни під знаком інтеграла можна перейти від однієї величини до іншої.

Оскільки всі сферичні включення повністю містяться в області тіла $(V_i^{(1)})$, то, з огляду на (36), внутрішній інтеграл у (37) набуде вигляду

$$I_\eta = \frac{1}{\tilde{V}^2} \sum_{i=1}^{m_1} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{R_1}^{z_0 - R_1} \eta_{i1}(|r' - r_{i1}|) f_\ell(z_{i1}) dz_{i1} dy_{i1} dx_{i1},$$

де \tilde{V} – площа перерізу шару площиною Oxy .

Здійснимо перехід до сферичної системи координат. Для цього в інтегралі I_η зробимо заміну змінних $\tilde{x} = x' - x_{i1}$, $\tilde{y} = y' - y_{i1}$, $\tilde{z} = z' - z_{i1}$, щоб початок нової системи координат знаходився у центрі кулі $(V_i^{(1)})$. Тоді для включень, розміщених біля верхньої границі тіла, отримаємо

$$I_\eta = \frac{(1 + \beta) z_0^{1-\beta}}{\tilde{V}^2} \sum_{i=1}^{m_1} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{z' - (z_0 - R_1)}^{z' - R_1} \eta_{i1} \left(\sqrt{\tilde{x}^2 + \tilde{y}^2 + \tilde{z}^2} \right) \times \\ \times (z_0 - z' + \tilde{z})^{\beta-1} d\tilde{z} d\tilde{y} d\tilde{x}, \quad (39)$$

а для включень, зосереджених біля нижньої границі, –

$$I_{\eta} = \frac{\alpha z_0^{1-\alpha}}{\tilde{V}^2} \sum_{i=1}^{m_1} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{z'-(z_0-R_1)}^{z'-R_1} \eta_{i1} \left(\sqrt{\tilde{x}^2 + \tilde{y}^2 + \tilde{z}^2} \right) (z' - \tilde{z})^{\alpha-1} d\tilde{z} d\tilde{y} d\tilde{x}. \quad (40)$$

Враховуючи зв'язок між декартовою та сферичною системою координат $\tilde{x} = r \sin \theta \cos \varphi$, $\tilde{y} = r \sin \theta \sin \varphi$, $\tilde{z} = r \cos \theta$ (r , θ , φ – сферичні координати), а також якобіан переходу $J = \left| \frac{\partial(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z})}{\partial(r, \theta, \varphi)} \right| = r^2 \sin \theta$, для (39) одержимо

$$I_{\eta} = \frac{(1+\beta)z_0^{1-\beta}}{\tilde{V}^2} \sum_{i=1}^{m_1} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \sin \theta \int_{z'-(z_0-R_1)}^{z'-R_1} r^2 \eta_{i1}(r) (z_0 - z' + r \cos \theta)^{\beta-1} dr d\theta d\varphi,$$

а для співвідношення (40) отримаємо

$$I_{\eta} = \frac{\alpha z_0^{1-\alpha}}{\tilde{V}^2} \sum_{i=1}^{m_1} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \sin \theta \int_{z'-(z_0-R_1)}^{z'-R_1} r^2 \eta_{i1}(r) (z' - r \cos \theta)^{\alpha-1} dr d\theta d\varphi.$$

Оскільки змінна зовнішнього інтегрування z' приймає значення від 0 до z_0 , то можливі такі випадки:

1°. Якщо $z' < R_1$, тоді $I_{\eta} = 0$.

2°. Якщо $0 \leq z' - R_1 < R_1$, тобто $R_1 \leq z' < 2R_1$, тоді для розподілу з функцією щільності $f_1(z)$ маємо

$$I_{\eta} = \frac{(1+\beta)z_0^{1-\beta} m_1}{\tilde{V}^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \sin \theta \int_0^{z'-R_1} r^2 (z_0 - z' + r \cos \theta)^{\beta-1} dr d\theta d\varphi, \quad (41)$$

а для розподілу з функцією щільності $f_2(z)$ справджується таке співвідношення:

$$I_{\eta} = \frac{\alpha z_0^{1-\alpha} m_1}{\tilde{V}^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \sin \theta \int_0^{z'-R_1} r^2 (z' - r \cos \theta)^{\alpha-1} dr d\theta d\varphi. \quad (42)$$

Для ступенів вільності α , β , які є раціональними числами, вирази для I_{η} вимагають чисельного інтегрування.

Якщо ступені вільності бета-розподілу $\alpha, \beta \in \mathbb{N}$, то для виразу (41) отримаємо

$$I_{\eta} = \frac{2\pi(1+\beta)z_0^{1-\beta} m_1}{\tilde{V}^2} \sum_{k=0}^{\beta-1} \frac{(\beta-1)!}{(k+1)!(\beta-k-1)!} \times \\ \times \frac{((-1)^k + 1)(z' - R_1)^{k+3} (z' - z_0)^{\beta-k-1}}{k+3},$$

а для (42) –

$$I_{\eta} = \frac{2\pi\alpha z_0^{1-\alpha} m_1}{\tilde{V}^2} \sum_{k=0}^{\alpha-1} \frac{(\alpha-1)!}{(k+1)!(\alpha-k-1)!} \times \\ \times \frac{((-1)^k + 1)(z' - R_1)^{k+3} (z')^{\alpha-k-1}}{k+3}.$$

3°. Якщо $z' - R_1 \geq R_1$, тобто $z' \geq 2R_1$, то для розподілу з функцією щільності $f_1(z)$ отримаємо

$$I_{\eta} = \frac{2\pi(1+\beta)z_0^{1-\beta}m_1}{\tilde{V}^2} \sum_{k=0}^{\beta-1} \frac{(\beta-1)!}{(k+1)!(\beta-k-1)!} \times \\ \times \frac{((-1)^k + 1)(z' - z_0)^{\beta-k-1} R_1^{k+3}}{k+3},$$

а для розподілу з функцією щільності $f_2(z)$ –

$$I_{\eta} = \frac{2\pi\alpha z_0^{1-\alpha}m_1}{\tilde{V}^2} \sum_{k=0}^{\alpha-1} \frac{(\alpha-1)!}{(k+1)!(\alpha-k-1)!} \frac{(1+(-1)^k)(z')^{\alpha-k-1} R_1^{k+3}}{k+3}.$$

Об'єм усього тіла можемо подати як $V = \tilde{V}^2 z_0$, тоді об'ємна частка

включень становить $v_1 = \frac{4}{3} \frac{m_1 \pi R_1^3}{\tilde{V}^2 z_0}$, і для інтеграла I_{η} одержимо

$$I_{\eta} = F_g \begin{cases} 0, & z' < R_1, \\ \left(\frac{z'}{R_1} - 1\right)^{k+3} R_1^k, & R_1 \leq z' < 2R_1, \\ R_1^k, & z' \geq 2R_1, \end{cases}$$

де для розподілу $f_1(z)$ маємо

$$F_g = \frac{3(1+\beta)v_1}{2z_0^{\beta-2}} \sum_{k=0}^{\beta-1} \frac{(1+(-1)^k)(z' - z_0)^{\beta-k-1}(\beta-1)!}{(k+1)!(\beta-k-1)!(k+3)},$$

а для розподілу $f_2(z)$ –

$$F_g = \frac{3\alpha v_1}{2z_0^{\alpha-2}} \sum_{k=0}^{\alpha-1} \frac{(1+(-1)^k)(z')^{\alpha-k-1}(\alpha-1)!}{(k+1)!(\alpha-k-1)!(k+3)}.$$

З огляду на властивості дельта-функції Дірака та її похідної [5, 17], внутрішній інтеграл у формулі (38) дорівнює нулеві. Отже, $I_2 = 0$, тобто I_2 не залежить від розподілу кульових включень в області тіла і, відповідно, не вносить вкладу в усереднену концентрацію домішкової речовини в тілі.

Таким чином, для усередненого за конфігурацій фаз поля концентрації домішки у двофазній смузі за умови наявності в тілі домінуючої фази одержимо такі формули

– у випадку зосередження кульових включень біля верхньої границі тіла:

$$\langle c(\mathbf{r}, t) \rangle_{\text{conf}} = c_0(z, t) + \\ + \frac{3(1+\beta)v_1}{2z_0^{\beta-2}} \int_0^{t+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_{k=0}^{\beta-1} \frac{(1+(-1)^k)(z' - z_0)^{\beta-k-1}(\beta-1)!}{(k+1)!(\beta-k-1)!(k+3)} \times \\ \times R_1^k \left(\int_{R_1}^{2R_1} \left(\frac{z'}{R_1} - 1 \right)^{k+3} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t') \left[(\rho_0 - \rho_1) \frac{\partial c_0(z', t')}{\partial t'} - \right. \right. \\ \left. \left. - (d_0 - d_1) \frac{\partial^2 c_0(z', t')}{\partial z'^2} \right] dz' + \int_{2R_1}^{z_0} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t') \times \right. \\ \left. \times \left[(\rho_0 - \rho_1) \frac{\partial c_0(z', t')}{\partial t'} - (d_0 - d_1) \frac{\partial^2 c_0(z', t')}{\partial z'^2} \right] dz' \right) dy' dx' dt',$$

(43)

– у випадку зосередження кульових включень біля нижньої границі тіла:

$$\begin{aligned}
 \langle c(\mathbf{r}, t) \rangle_{\text{conf}} = & c_0(z, t) + \frac{3\alpha v_1}{2z_0^{\alpha-2}} \int_0^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_{k=0}^{\alpha-1} \frac{(1+(-1)^k)(z')^{\alpha-k-1}(\alpha-1)!}{(k+1)!(\alpha-k-1)!(k+3)} \times \\
 & \times R_1^k \left(\int_{R_1}^{2R_1} \left(\frac{z'}{R_1} - 1 \right)^{k+3} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t') \left[(\rho_0 - \rho_1) \frac{\partial c_0(z', t')}{\partial t'} - \right. \right. \\
 & \left. \left. - (d_0 - d_1) \frac{\partial^2 c_0(z', t')}{\partial z'^2} \right] dz' + \int_{2R_1}^{z_0} G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t') \times \right. \\
 & \left. \times \left[(\rho_0 - \rho_1) \frac{\partial c_0(z', t')}{\partial t'} - (d_0 - d_1) \frac{\partial^2 c_0(z', t')}{\partial z'^2} \right] dz' \right) dy' dx' dt'.
 \end{aligned}
 \tag{44}$$

Зазначимо, що загальні формули (43) і (44) для знаходження усередненої концентрації домішки у тілі з кульовими включеннями, зосередженими біля границь тіла, не залежать від початкових та граничних умов, а отже, є застосовними для їхніх різних типів. При цьому зі змінами крайових умов змінюється функція Гріна $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t')$ і вираз для концентрації в однорідному тілі $c_0(z, t)$. Виведенню розрахункових формул для конкретних значень $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t')$ і $c_0(z, t)$, а також числовому дослідженню отриманих розв'язків присвячено другу частину роботи.

Висновки. Побудовано математичну модель дифузії домішкових частинок у двофазному тілі, що містить кульові включення, зосереджені біля однієї з границь тіла. З використанням апарату теорії узагальнених функцій отримано диференціальне рівняння масоперенесення для тіла в цілому, яке явно враховує стрибок шуканої функції та її похідної на випадкових границях контакту фаз. Для цього, зокрема, використано рівняння вектора нормалі до поверхні кульового включення. Приймаючи неоднорідність структури тіла за внутрішні джерела, отриманій крайовій задачі поставлено у відповідність еквівалентне інтегро-диференціальне рівняння Вольтерра – Гаммерштейна. Розв'язок цього рівняння знайдено у вигляді інтегрального ряду Неймана шляхом розкладу в околі розв'язку однорідної крайової задачі. Проведено процедуру усереднення за ансамблем конфігурацій фаз за умов рівномірного розподілу кульових включень за осями Ox та Oy і часткових випадків імовірного бета-розподілу включень вздовж осі Oz . Одержано загальні формули для усередненого за ансамблем конфігурацій фаз поля концентрації домішки у двофазній смузі з кульовими включеннями, розміщеними біля нижньої або верхньої границь тіла, за умови наявності у структурі домінуючої фази.

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. *Мюнстер А.* Химическая термодинамика. – Москва: Мир, 1971. – 295 с.
Те саме: *Münster A.* Chemische Thermodynamik. – Berlin: Verlag Chemie, 1969. – ix+261 S.
4. *Рытов С. М.* Введение в статистическую радиофизику. Ч. I. Случайные процессы. – Москва: Наука, 1976. – 494 с.
5. *Справочник по специальным функциям с формулами, графиками и математическими таблицами /* Под ред. М. Абрамовица, И. Стиган. – Москва: Наука, 1979. – 832 с.

- Te same: *Handbook of mathematical functions with formulas, graphs and mathematical tables* / Eds M. Abramowitz, I. A. Stegun. – New York: Dover Publ., 1972. – 1046 p.
6. Чапля Є. Я., Чернуха О. Ю. Математичне моделювання дифузійних процесів у випадкових і регулярних структурах. – Київ: Наук. думка, 2009. – 302 с.
 7. Чернуха О. Ю., Чучвара А. Є. Моделювання дифузії домішкової речовини у пористому тілі з випадковими сферичними порами при сумірних об'ємних частках фаз // *Мат. методи та фіз.-мех. поля.* – 2019. – **62**, № 1. – С. 150–161.
Te same: Chernukha O. Yu., Chuchvara A. E. Modeling of the diffusion of admixtures in a porous body with random spherical pores with comparable volume fractions of the phases // *J. Math. Sci.* – 2021. – **258**, No. 4. – P. 553–567. – <https://doi.org/10.1007/s10958-021-05566-1>.
 8. Angaru G. K. R., Choi Y.-L., Lingamdinne L. P., Choi J.-S., Kim D.-S., Koduru J. R., Yang J.-K., Chang Y.-Y. Facile synthesis of economical feasible fly ash-based zeolite-supported nano zerovalent iron and nickel bimetallic composite for the potential removal of heavy metals from industrial effluents // *Chemosphere.* – 2021. – **267**. – Art. 128889. – <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2020.128889>.
 9. Balaji T. E., Tanaya Das H., Maiyalagan T. Recent trends in bimetallic oxides and their composites as electrode materials for supercapacitor applications // *Chem-ElectroChem.* – 2021. – **8**, No. 10. – P. 1723–1746. – <https://doi.org/10.1002/celec.202100098>.
 10. Chaplia Y., Chernukha O. Three-dimensional diffusion in a multiphase body with randomly disposed inclusions of a spherical form // *Int. J. Heat Mass Transfer.* – 2003. – **46**, No. 17. – P. 3323–3328. – [https://doi.org/10.1016/S0017-9310\(03\)00123-6](https://doi.org/10.1016/S0017-9310(03)00123-6).
 11. Chernukha O., Chuchvara A., Bilushchak Y., Pukach P., Kryvinska N. Mathematical modelling of diffusion flows in two-phase stratified bodies with randomly disposed layers of stochastically set thickness // *Mathematics.* – 2022. – **10**, No. 19. – Art. 3650. – <https://doi.org/10.3390/math10193650>.
 12. Corwin E. I., Clusel M., Siemens A. O. N., Brujić J. Model for random packing of polydisperse frictionless spheres // *Soft Matter.* – 2010. – **6**, No. 13. – P. 2949–2959. – <https://doi.org/10.1039/C000984A>.
 13. Greenhalgh E. S. Failure analysis and fractography of polymer composites. – Cambridge: Woodhead Publ., 2009. – 595 p. – (Chapt. 2 – P. 23–106). – <https://doi.org/10.1533/9781845696818.23>.
 14. Jiang S., Huang L. J., An Q., Geng L., Wang X. J., Wang S. Study on titanium-magnesium composites with bicontinuous structure fabricated by powder metallurgy and ultrasonic infiltration // *J. Mech. Behav. Biomed. Mater.* – 2018. – **81**. – P. 10–15. – <https://doi.org/10.1016/j.jmbbm.2018.02.017>.
 15. Khan M. F. A., Rehman A. Ur., Howari H., Alhodaib A., Ullah F., Mustafa Z. Ul., Elaissari A., Ahmed N. Hydrogel containing solid lipid nanoparticles loaded with argan oil and simvastatin: Preparation, in vitro and ex vivo assessment // *Gels.* – 2022. – **8**, No. 5. – P. 277. – <https://doi.org/10.3390/gels8050277>.
 16. LaBolle E. M., Quastel J., Fogg G. E., Gravner J. Diffusion processes in composite porous media and their numerical integration by random walks: Generalized stochastic differential equations with discontinuous coefficients // *Water Resour. Res.* – 2000. – **36**, No. 3. – P. 651–662. – <https://doi.org/10.1029/1999WR900224>.
 17. Mikusiński J. On the square of the Dirac delta-distribution // *Bull. Acad. Pol. Ser. Sci. Math. Astron. Phys.* – 1966. – **43**. – P. 511–513.
 18. Song Yu., Lange D. Influence of fine inclusions on the morphology and mechanical performance of lightweight foam concrete // *Cement Concrete Compos.* – 2021. – **124**. – Art. 104264. – <https://doi.org/10.1016/j.cemconcomp.2021.104264>.
 19. Stratigaki M., Pabst W., Nečina V., Hajiček M., Gotsis A. D. Microstructure and mechanical properties study of slip-cast copper – alumina composites // *SN Appl. Sci.* – 2019. – **1**, No. 1. – Art. 40. – <https://doi.org/10.1007/s42452-018-0037-4>.
 20. Vamoş C., Suciu N., Vereecken H. Generalized random walk algorithm for the numerical modeling of complex diffusion processes // *J. Comput. Phys.* – 2003. – **186**, No. 2. – P. 527–544. – [https://doi.org/10.1016/S0021-9991\(03\)00073-1](https://doi.org/10.1016/S0021-9991(03)00073-1).
 21. Willmore T. J. An introduction to differential geometry. – New York: Dover Publ., 2013. – 334 p.

**MODELING DIFFUSION PROCESSES IN A TWO-PHASE STRIP WITH RANDOMLY DISTRIBUTED SPHERICAL INCLUSIONS LOCATED NEAR BOUNDARIES OF THE BODY.
I. CONSTRUCTION OF THE MATHEMATICAL MODEL**

The mathematical model of the diffusion of an admixtures in a two-phase body with spherical inclusions located near the boundaries of the body under imperfect contact conditions of the concentration at the interphase boundaries is constructed. Using the equation of the normal to the surface of a spherical inclusion the diffusion equation for the whole body is derived, the contact conditions are written and the Volterra – Hammerstein integro-differential equation the kernel of which is a random function is obtained. The solution of this equation is found by the method of successive iterations in the form of the Neumann series. Averaging of the random concentration field is carried out for particular cases of the beta-distribution of inclusions, which describe the structure with the most probable location of inclusions near the boundaries of the body. The calculation formulae for the concentration calculation of particles of the admixture substance in the two-phase body with spherical inclusions are obtained.

Key words: *diffusion, admixture substance, randomly inhomogeneous structure, spherical inclusion, stochastic beta-distribution, imperfect contact condition, Volterra – Hammerstein integro-differential equation, Neumann series.*

¹ Ін-т прикл. проблем механіки і математики
ім. Я. С. Підстригача НАН України, Львів,

Одержано
05.11.22

² Нац. ун-т «Львів. політехніка», Львів