

МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ ДИФУЗІЇ У ДВОФАЗНІЙ СМУЗІ З ВИПАДКОВО РОЗМІЩЕНИМИ КУЛЬОВИМИ ВКЛЮЧЕННЯМИ, ЗОСЕРЕДЖЕНИМИ БІЛЯ ГРАНИЦЬ ТІЛА. II. КІЛЬКІСНИЙ АНАЛІЗ

Досліджено процес дифузії домішкової речовини у двофазних структурах із кульовими включеннями, зосередженими біля однієї з границь тіла. Одержано розрахункові формули для усередненого за ансамблем конфігурацій фаз поля концентрації для часткових випадків ймовірного бета-розподілу фаз. Проведено числовий аналіз функції концентрації домішкових частинок, що мігрують у двофазних структурах із кульовими включеннями, та встановлено основні закономірності таких процесів.

Ключові слова: дифузія, домішкова речовина, випадково неоднорідна структура, кульове включення, ймовірнісний бета-розподіл, ряд Неймана, усереднення за ансамблем конфігурацій фаз.

Вступ. Моделювання процесів дифузії та чисельний аналіз концентрації мігруючої речовини для різних значень параметрів структури дозволяє створювати композитні матеріали з наперед визначеними властивостями, прогнозувати пропускну здатність мембран, фільтрів тощо [7, 8–10].

У роботі [5] проведено кількісне дослідження масоперенесення домішкової речовини у структурі з кульовими включеннями, розміщеними за рівномірним законом розподілу. Водночас розміщення неоднорідностей необов'язково повинно підпорядковуватись рівномірному закону розподілу, зокрема, для вирішення деяких інженерних задач може накладатись умова зосередження включень різної форми у наперед визначеному місці структури. Тому у праці [6] побудовано математичну модель дифузії домішки у випадково неоднорідному тілі з кульовими включеннями, що найімовірніше знаходяться біля однієї з границь тіла – верхньої або нижньої. Для опису стохастичної структури використано часткові випадки функції щільності ймовірного бета-розподілу. Для вихідної контактної-крайової задачі одержано еквівалентне інтегро-диференціальне рівняння Вольтерра – Гаммерштейна, розв'язок якого знайдено за ітераційною процедурою у вигляді ряду Неймана. Після виконання процедури усереднення за ансамблем конфігурацій фаз отримано формули для обчислення концентрації домішкових частинок у двофазному тілі з кульовими включеннями.

У цій роботі одержано розрахункові формули усередненого поля концентрацій для конкретних типів початкових і граничних умов, тобто для відповідних виразів функцій Гріна та концентрації домішки в однорідному тілі, кількісно досліджено розв'язки та встановлено основні закономірності розподілів усередненої концентрації залежно від вхідних параметрів задачі.

1. Розрахункова формула усередненої концентрації. Розглядаємо випадок, коли у двофазному шарі товщини z_0 , що містить випадково розміщені кульові включення, які зосереджені біля однієї з границь тіла (див. рис. 2 та рис. 3 у [6]), відбувається дифузія домішкової речовини. Для опису такого типу стохастичного розміщення включень використано часткові випадки ймовірного бета-розподілу (див. формули (1), (2) у [6]), графіки функцій щільності [1] яких наведено на рис. 1 та рис. 2. Зазначимо, що зростання ступенів вільності α , β бета-розподілу приводить до ущільнення кульових включень біля верхньої (рис. 1) або нижньої (рис. 2) границь, а ймовірність розміщення включень в околі іншої границі відповідно зменшується. Відносно осей Ox та Oy кульові включення розміщені за рівномірним законом розподілу.

✉ davydoka@gmail.com

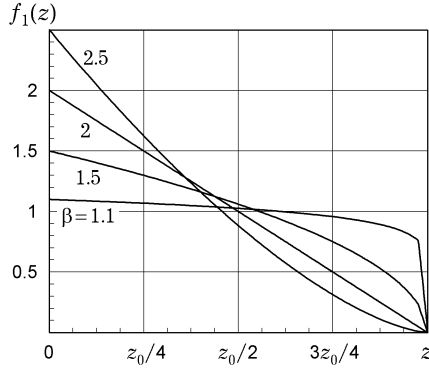


Рис. 1

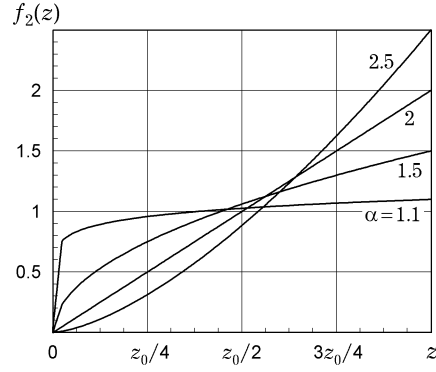


Рис. 2

У початковий момент $t = 0$ домішка в шарі відсутня, в подальшому при $t > 0$ на верхній границі $z = 0$ підтримується сталие значення її концентрації, а на нижній границі $z = z_0$ концентрація дорівнює нулеві. 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. Вважаємо також, що об'ємна частка матриці v_0 є більшою, ніж об'ємна частка включень v_1 , і виконуються умови неідеального контакту для функції концентрації на випадкових границях. У [6] одержано формули (43), (44) для усередненої за ансамблем конфігурацій фаз концентрації домішкової речовини.

Підставивши у співвідношення (43), (44) з [6] вирази для детермінованої функції Гріна [3, 4, 6]

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

і концентрації домішкової речовини в однорідному тілі [4, 6]

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

одержимо розрахункові формули для усередненого за ансамблем конфігурацій фаз поля концентрації

– у випадку структури з кульовими включеннями, зосередженими біля верхньої границі тіла ($z = 0$):

$$\langle c(\mathbf{r}, t) \rangle_{\text{conf}} \approx c_0(z, t) + (1 + \beta) \frac{4c_* v_1 \pi K_{d\rho}}{z_0^{\beta+1}} \sum_{\ell=1}^{\infty} \sin y_{\ell} z \sum_{k=0}^{\beta-1} F(\beta, k) R_1^{k-1} \times \\ \times \left[y_{\ell} B_k e^{-\frac{d_0}{\rho_0} y_{\ell}^2 t} + \sum_{n=1, n \neq \ell}^{\infty} B_k^{\ell n} \left(e^{-\frac{d_0}{\rho_0} y_n^2 t} - e^{-\frac{d_0}{\rho_0} y_{\ell}^2 t} \right) \right], \quad (1)$$

– у випадку структури з кульовими включеннями, зосередженими біля нижньої границі тіла ($z = z_0$):

$$\langle c(\mathbf{r}, t) \rangle_{\text{conf}} \approx c_0(z, t) + \alpha \frac{4c_* v_1 \pi K_{d\rho}}{z_0^{\alpha-1}} \sum_{\ell=1}^{\infty} \sin y_{\ell} z \sum_{k=0}^{\alpha-1} F(\alpha, k) R_1^{k-1} \times$$

$$\times \left[y_\ell A_k e^{-\frac{d_0}{\rho_0} y_\ell^2 t} + \sum_{n=1, n \neq \ell}^{\infty} A_k^{\ell n} \left(e^{-\frac{d_0}{\rho_0} y_n^2 t} - e^{-\frac{d_0}{\rho_0} y_\ell^2 t} \right) \right]. \quad (2)$$

Тут $\mathbf{r} = (x, y, z)$ – радіус-вектор біжучої точки; $y_k = k\pi/z_0$, $y_n = n\pi/z_0$; α , β – ступені вільності часткових випадків бета-розподілу, $\alpha, \beta > 1$; R_1 – характерний радіус кульового включення; $\theta(t)$ – одинична східчаста функція Гевісайда,

$$K_{dp} = \frac{d_0}{\rho_0} \left(\frac{d_1}{d_0} - \frac{\rho_1}{\rho_0} \right), \quad F(p, k) = \frac{(p-1)!(1+(-1)^k)}{(k+1)!(p-k-1)!(k+3)},$$

$$B_k^{\ell n} = \frac{(-1)^{\ell+n} y_n \rho_0}{d_0 (y_\ell^2 - y_n^2)} \left(\frac{I_{11} - I_{12}}{R_1^{k+3}} + I_{21} - I_{22} \right),$$

$$B_k = \frac{\tilde{I}_{11} + (-1)^{\ell+1} \tilde{I}_{12}}{R_1^{k+3}} + \tilde{I}_{21} + (-1)^{\ell+1} \tilde{I}_{22},$$

$$A_k^{\ell n} = \frac{y_n \rho_0}{d_0 (y_\ell^2 - y_n^2)} \left(\frac{I_{11} - I_{12}}{R_1^{k+3}} + I_{21} - I_{22} \right),$$

$$A_k = \frac{\tilde{I}_{11} - \tilde{I}_{12}}{R_1^{k+3}} + \tilde{I}_{21} - \tilde{I}_{22}.$$

Для включень, зосереджених біля верхньої границі тіла $z = 0$, коефіцієнти є такими:

$$I_{11} = I(R_1 - z_0, 2R_1 - z_0; k+3, y_{\ell n}^-), \quad I_{12} = I(R_1 - z_0, 2R_1 - z_0; k+3, y_{\ell n}^+),$$

$$I_{21} = I(2R_1 - z_0, 0; 0, y_{\ell n}^-), \quad I_{22} = I(2R_1 - z_0, 0; 0, y_{\ell n}^+),$$

$$\tilde{I}_{11} = I_0(R_1 - z_0, 2R_1 - z_0; k+3), \quad \tilde{I}_{12} = I(R_1 - z_0, 2R_1 - z_0; k+3, 2y_\ell),$$

$$\tilde{I}_{21} = I(2R_1 - z_0, 0; 0), \quad \tilde{I}_{22} = I(2R_1 - z_0, 0; 0, 2y_\ell),$$

$$I(z_1, z_2; b, c) = \int_{z_1}^{z_2} z^a (z-d)^b \cos cz \, dz, \quad I_0(z_1, z_2; b) \equiv \int_{z_1}^{z_2} (z')^a (z'-d)^b \, dz',$$

де $y_{\ell n}^\pm = y_\ell \pm y_n$, $a = \beta - k - 1$, $b = k + 3$, $d = R_1 - z_0$.

У випадку розміщення кульових включень біля нижньої границі $z = z_0$ ці коефіцієнти визначаються як

$$I_{11} = I(R_1, 2R_1; y_{\ell n}^-), \quad I_{12} = I(R_1, 2R_1; y_{\ell n}^+), \quad I_{21} = I(2R_1, z_0; y_{\ell n}^-),$$

$$I_{22} = I(2R_1, z_0; y_{\ell n}^+), \quad \tilde{I}_{11} = I_0(R_1, 2R_1), \quad \tilde{I}_{12} = I(R_1, 2R_1; 2y_\ell),$$

$$\tilde{I}_{21} = I_0(2R_1, z_0), \quad \tilde{I}_{22} = I(2R_1, z_0; 2y_\ell),$$

$$I(z_1, z_2; c) \equiv \int_{z_1}^{z_2} (z')^a (z' - R_1)^b \cos cz' \, dz', \quad I_0(z_1, z_2) \equiv \int_{z_1}^{z_2} (z')^a (z' - R_1)^b \, dz'.$$

Тут $a = \alpha - k - 1$, $b = k + 3$.

Формули (1) і (2) для усередненої концентрації домішки $\langle c(\mathbf{r}, t) \rangle_{\text{conf}}$ містять «однорідну частину» – концентрацію $c_0(z, t)$ частинок у тілі без вклю-

чень (матриці), і «неоднорідну» частину, яка описує вплив наявності сферичних включень у тілі. При цьому «неоднорідний» доданок є пропорційним до коефіцієнта K_{dp} , який залежить від відношення коефіцієнтів дифузії і густин матеріалів у включеннях і матриці.

2. Аналіз коефіцієнта K_{dp} . Дослідимо вплив коефіцієнта K_{dp} на значення усередненої концентрації домішок. Зазначимо, що коефіцієнт K_{dp} може бути додатним або від'ємним залежно від величини усередненої концентрації. При цьому коефіцієнти дифузії d_0 , d_1 у різних фазах можуть відрізнятися на порядки, а густини ρ_0 , ρ_1 – в рази. Тоді у випадках значно більшого коефіцієнта дифузії у включеннях, ніж у матриці, відношення d_1/d_0 набуває великих значень, а відношення ρ_1/ρ_0 стає нехтовно малим незалежно від значень ρ_0 . У випадку, коли густина ρ_1 матеріалу у включеннях є значно більшою, ніж у матриці, відношення d_1/d_0 може стати нехтовно малим.

На рис. 3 для значень $d_0/\rho_0 < 1$ (рис. 3а), $d_0/\rho_0 = 1$ (рис. 3б) і $d_0/\rho_0 > 1$ (рис. 3в) наведено 3D-поверхні K_{dp} в просторі $O \frac{\rho_1}{\rho_0} \frac{d_1}{d_0} K_{dp}$. Тут по осі абсцис відкладено відношення коефіцієнтів ρ_1/ρ_0 , по осі ординат – відношення коефіцієнтів дифузії d_1/d_0 , а аплікатою є коефіцієнт K_{dp} як функція від відношень коефіцієнтів дифузії і густин у матриці та включеннях. При перерізі поверхні K_{dp} площиною $K_{dp} \left(\frac{\rho_1}{\rho_0}, \frac{d_1}{d_0} \right) = 0$ відбувається зміна знака (див. рис. 3). Щоб отримати залежність K_{dp} від відношення ρ_1/ρ_0 , зробимо перерізи поверхні K_{dp} паралельними площинами $d_1/d_0 = \text{const}$. На рис. 4 наведено проєкції таких перерізів поверхні K_{dp} на площину $O \frac{\rho_1}{\rho_0} K_{dp}$, де по осі абсцис відкладено відношення коефіцієнтів ρ_1/ρ_0 , а лінії 1–6 обчислено для значень $d_1/d_0 = 0.001, 0.5, 2, 5, 10, 20$.

Поверхня K_{dp} у просторі $O \frac{\rho_1}{\rho_0} \frac{d_1}{d_0} K_{dp}$ має вигляд нахиленої площини (рис. 3). При цьому меншим значенням відношення d_0/ρ_0 коефіцієнта дифузії до густини у матриці відповідає менший кут нахилу площини K_{dp} до площини $O \frac{\rho_1}{\rho_0} \frac{d_1}{d_0}$. Зазначимо також, що більшим значенням відношення коефіцієнтів дифузії d_1/d_0 або меншим значенням відношення густин ρ_1/ρ_0 відповідає більше значення коефіцієнта K_{dp} .

Зміна знака коефіцієнта K_{dp} відбувається уздовж прямої $\frac{d_1}{d_0} = \frac{\rho_1}{\rho_0}$ у площині $O \frac{\rho_1}{\rho_0} \frac{d_1}{d_0}$. При цьому $K_{dp} > 0$ при $\frac{d_1}{d_0} > \frac{\rho_1}{\rho_0}$, тобто за таких співвідношень коефіцієнтів і густин «неоднорідна» частина розв'язку збільшує значення усередненої концентрації домішки і функція $\langle c(\mathbf{r}, t) \rangle_{\text{conf}} > c_0(z, t)$ для $\forall x, y \in \mathbb{R} \wedge z \in [z, z_0]$. Відповідно при $\frac{d_1}{d_0} < \frac{\rho_1}{\rho_0}$ коефіцієнт $K_{dp} < 0$ і

$\langle c(\mathbf{r}, t) \rangle_{\text{conf}} < c_0(z, t)$. Тобто, чим більшим є відношення коефіцієнтів дифузії d_1/d_0 у включеннях і матриці, тим при менших значеннях відношення густин ρ_1/ρ_0 відбувається зміна знака $K_{d\rho}$. Також зазначимо, що за умови $d_1/d_0 < 1$ значення цього відношення практично не впливає на величину $K_{d\rho}$ (лінії 1, 2 для $d_1/d_0 = 0.001, 0.5$, рис. 4). Підкреслимо, що хоча відношення коефіцієнтів ρ_1/ρ_0 і d_1/d_0 є взаємно незалежними, але на зміну знака $K_{d\rho}$ вони впливають у комплексі.

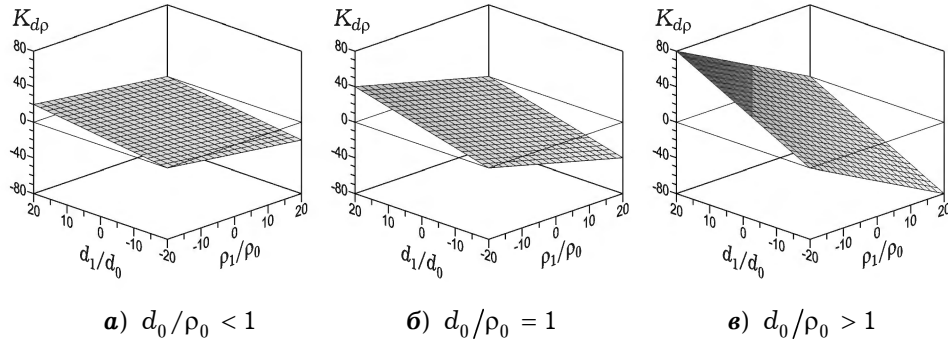


Рис. 3

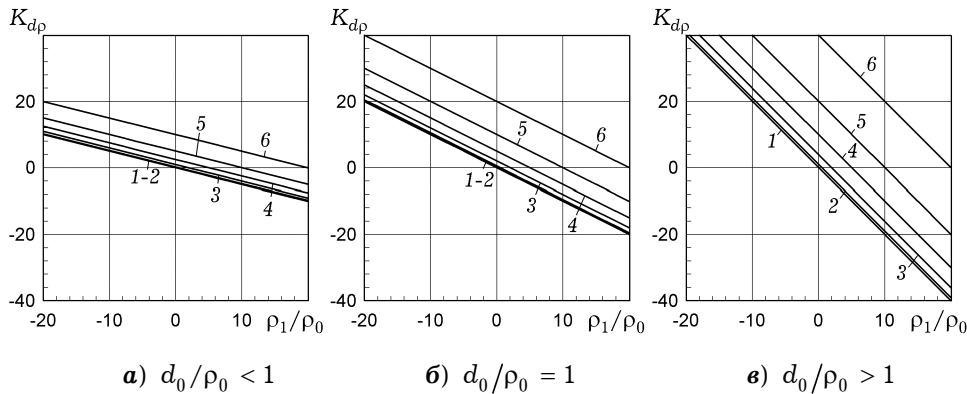


Рис. 4

3. Кількісне дослідження концентрації домішкової речовини у структурі з кульовими включеннями, зосередженими біля верхньої границі тіла. Дослідимо розподіл концентрації домішкової речовини у двофазному тілі з кульовими включеннями, зосередженими біля верхньої поверхні тіла $z = 0$, де діє джерело маси, на основі розрахункової формули (1). Обчислення виконаємо у безрозмірних змінних [2]

$$\zeta = z/z_0, \quad \tau = d_0 t / z_0^2. \quad (3)$$

За базові параметри вибираємо значення: $\tau = 0.4$, $d_1/d_0 = 0.01$, $d_1/d_0 = 5$, $v_1 = 0.1$, $R_1 = 0.001$, $\rho_1/\rho_0 = 1.3$, $\beta = 3$. Точність обчислення рядів у формулі (1) стосовно k становить 10^{-7} , а стосовно n – 10^{-9} .

На рис. 5 наведено розподіл по товщині шару концентрацій $\langle c(\zeta, t) \rangle / c_*$ і $c_0(\zeta, t) / c_*$ у моменти часу $\tau = 0.3, 0.4, 0.45, 0.5, 0.7$ (криві 1'/1''–5'/5'', рис. 5) у випадках, коли відношення коефіцієнтів дифузії $d_1/d_0 = 0.01$ (рис. 5а) та $d_1/d_0 = 5$ (рис. 5б). Функціям $\langle c(\zeta, t) \rangle / c_*$ відповідають криві 1'–5', а функціям $c_0(\zeta, t) / c_*$ – криві 1''–5'' (штрихові лінії).

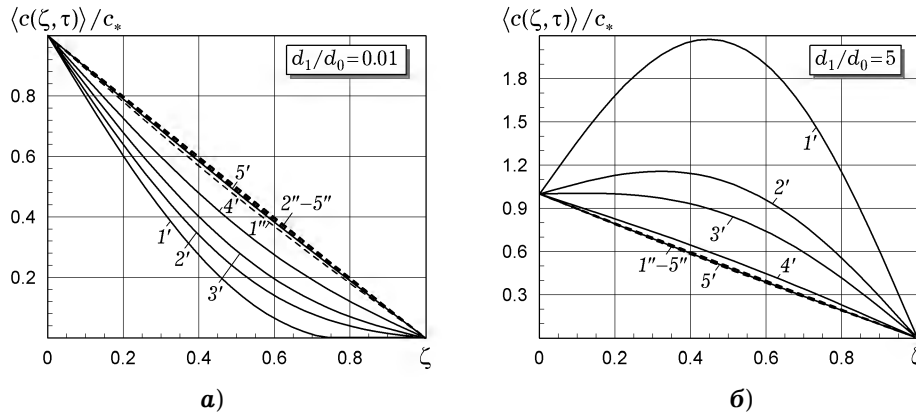


Рис. 5

Зазначимо, що для значень коефіцієнтів дифузії домішкової речовини у матриці, менших, ніж у включеннях ($d_1 < d_0$, рис. 5а), функції $\langle c(\zeta, t) \rangle / c_*$ (криві 1'–5', рис. 5а) і $c_0(\zeta, \tau) / c_*$ (криві 1''–5'', рис. 5а) є монотонно спадними. Для малих значень часу ($\tau \leq 0.3$) концентрація $\langle c(\zeta, t) \rangle / c_*$ в інтервалі $\zeta \in [0.75, 1]$ практично дорівнює нулеві (крива 1', рис. 5а). Зі збільшенням часу τ значення усередненої концентрації домішки $\langle c(\zeta, t) \rangle / c_*$ зростають.

У випадку, коли $d_1 > d_0$ (рис. 5б), функція $\langle c(\zeta, t) \rangle / c_*$ для малих значень часу τ протікання процесу дифузії характеризується наявністю глобального максимуму ближче до середини тіла (крива 1', рис. 5б), який зменшується зі збільшенням часу τ (криві 2'–5', рис. 5б). Усереднена концентрація в обох випадках відношень коефіцієнтів дифузії для $\tau > 0.65$ виходить на стаціонарний режим (криві 5'/5'', рис. 5). Зазначимо, що у випадку однорідного тіла збільшення часу протікання процесу дифузії від $\tau = 0.3$ до $\tau = 0.7$ приводить до зростання концентрації мігруючої речовини у тілі без включень до 12% (криві 1''–5'', рис. 5).

На рис. 6 – рис. 8 криві 1'–3' відповідають значенням $d_1/d_0 = 0.01$ відношення коефіцієнтів дифузії у матриці та у включеннях, криві 1''–3'' – відношенню $d_1/d_0 = 5$, а штрихові лінії відповідають функціям $c_0(\zeta, t) / c_*$.

Рис. 6 ілюструє поведінку усередненої концентрації домішки $\langle c(\zeta, t) \rangle / c_*$ для різних значень $v_1 = 0.1, 0.2, 0.25$ об'ємної частки кульових включень (криві 1'/1''–3'/3'', рис. 6а) та характерного радіуса включень $R_1 = 10^{-3}, 10^{-4}, 10^{-5}$ (криві 1'/1''–3'/3'', рис. 6б).

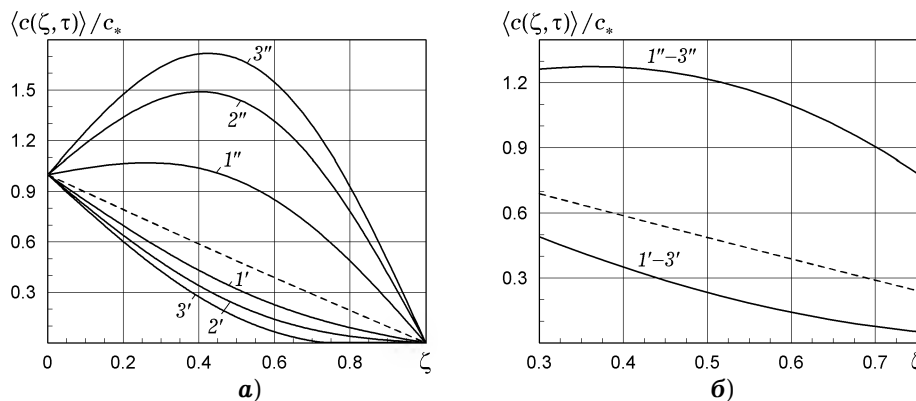


Рис. 6

Збільшення об'ємної частки включень v_1 у випадку $d_1/d_0 = 0.01$ зумовлює зменшення значення усередненої концентрації домішкової речовини у неоднорідній структурі (криві $1'-3'$, рис. 6а). Для випадку $d_1/d_0 = 5$ зі збільшенням v_1 спостерігаємо зростання усередненої концентрації, і значення $\langle c(\zeta, t) \rangle / c_*$ всередині тіла є більшими, ніж значення концентрації на верхній границі тіла $z = 0$ (криві $2''$ і $3''$, рис. 6а). Збільшення об'ємної частки v_1 у 2.5 рази (від $v_1 = 0.1$ до $v_1 = 0.25$) зменшує усереднену концентрацію більше ніж утричі (криві $1'$ та $3'$, рис. 6а) для $d_1/d_0 = 0.01$ та збільшує її майже вдвічі у випадку $d_1/d_0 = 5$ (криві $1''$ та $3''$, рис. 6а).

Незалежно від відношення коефіцієнтів d_1/d_0 дифузії у матриці і у включеннях зміна на декілька порядків характерних радіусів R_1 кульових включень практично не впливає на значення усередненої концентрації домішкової речовини у неоднорідному тілі – зміни у межах 1% (рис. 6б).

На рис. 7 наведено характерні розподіли концентрації домішкової речовини у тілі з кульовими включеннями для значень відношень $d_1/d_0 = 0.001, 0.01, 0.1, 1.5, 2, 5, 7$ (криві $1-7$, рис. 7а) та $\rho_1/\rho_0 = 0.5, 1.3, 1.5$ (криві $1'/1''-3'/3''$, рис. 7б).

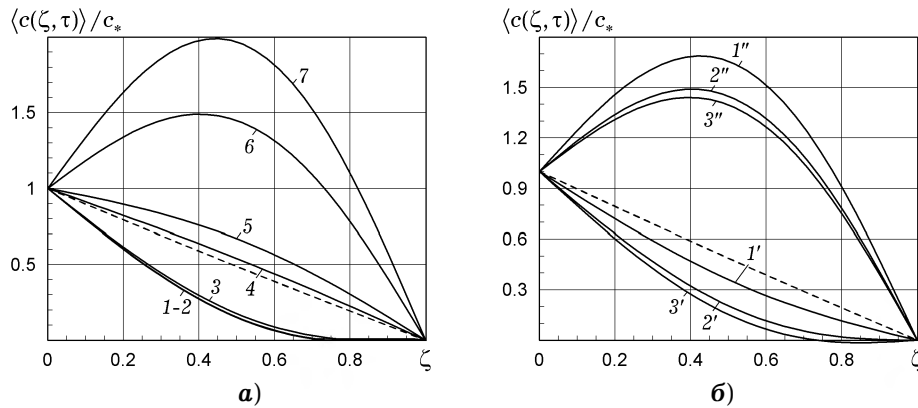


Рис. 7

Збільшення значення відношення d_1/d_0 коефіцієнтів дифузії зумовлює зростання усередненої концентрації домішки у тілі (рис. 7а). При цьому зростання відношення d_1/d_0 у випадках $d_0 > d_1$ змінює значення функції $\langle c(\zeta, t) \rangle / c_*$ приблизно на 20% (криві $1-3$, рис. 7а). У випадках $d_0 < d_1$ зміна відношення коефіцієнтів дифузії від $d_1/d_0 = 2$ до $d_1/d_0 = 5$ зумовлює збільшення усередненої концентрації для заданих параметрів задачі більше ніж удвічі (криві $5, 6$, рис. 7а).

Зі збільшенням відношення ρ_1/ρ_0 густини кульових включень до густини матеріалу матриці значення усередненої концентрації $\langle c(\zeta, t) \rangle / c_*$ мігруючої речовини зменшуються незалежно від відношень d_1/d_0 коефіцієнтів дифузії (рис. 7б).

На рис. 8 наведено розподіл по товщині шару усередненої концентрації домішкової речовини $\langle c(\zeta, t) \rangle / c_*$ для значень ступеня вільності бета-розподілу $\beta = 3, 5, 7$ (криві $1'/1''-3'/3''$, рис. 8) при значеннях відношення густин у матриці та включенні $\rho_1/\rho_0 = 1.3$ (рис. 8а) та $\rho_1/\rho_0 = 0.3$ (рис. 8б).

Відповідно до властивостей функції щільності бета-розподілу (рис. 1)

збільшення ступеня вільності розподілу β відповідає ущільненню кульових включень біля верхньої границі тіла $z = 0$, де діє джерело маси. Для випадку $d_1/d_0 = 0.01$ ущільнення кульових включень біля поверхні тіла приводить до збільшення усередненої концентрації домішки у неоднорідному тілі та наближенні функції $\langle c(\zeta, t) \rangle / c_*$ до концентрації домішкової речовини в однорідному тілі (криві $1'-3'$, рис. 8). У випадку $d_1/d_0 = 5$ при ущільненні кульових включень біля верхньої поверхні тіла (збільшенні β) усереднена концентрація мігруючої речовини зменшується (криві $1''-3''$, рис. 8). Така характерна поведінка спостерігається незалежно від відношення густин включень та матриці ρ_1/ρ_0 (рис. 8).

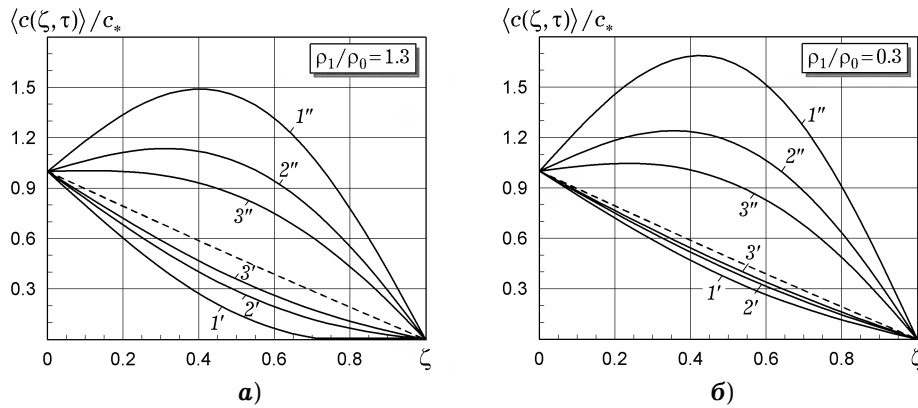


Рис. 8

4. Кількісне дослідження концентрації домішкової речовини у структурі з кульовими включеннями, зосередженими біля нижньої границі тіла. Використовуючи розрахункову формулу (2), проведемо кількісне дослідження розподілів усередненої концентрації домішки у двофазному тілі з кульовими включеннями, що найімовірніше розміщені біля нижньої границі тіла $z = z_0$. Як і у випадку розрахункової формули (1) для структури тіла з включеннями, зосередженими біля верхньої границі тіла $z = 0$, обчислення виконаємо у безрозмірних змінних (3), а за базові виберемо параметри: $\tau = 0.4$, $d_1/d_0 = 0.01$ та $d_1/d_0 = 5$, $v_1 = 0.1$, $R_1 = 0.001$, $\rho_1/\rho_0 = 1.3$, $\alpha = 3$.

Рис. 9 ілюструє розподіл по товщині шару усереднених концентрацій у двофазному тілі з кульовими включеннями, розміщеними біля нижньої границі $z = z_0$, у моменти часу $\tau = 0.3, 0.35, 0.4, 0.5, 0.7$ (криві $1'/1''-5'/5''$, рис. 9) для випадку відношення коефіцієнтів дифузії у матриці, більших, ніж у включеннях, $d_1/d_0 = 0.01$ (рис. 9а) та у протилежному випадку – при $d_1/d_0 = 5$ (рис. 9б). Концентрації $\langle c(\zeta, t) \rangle / c_*$ в тілі з кульовими включеннями відповідають криві $1'-5'$, а криві $1''-5''$ (штрихові лінії) – концентрації $c_0(\zeta, t)/c_*$ в однорідному тілі.

Як і у випадку кульових включень, зосереджених біля верхньої границі тіла $z = 0$, усереднена концентрація домішки в тілі для коефіцієнтів дифузії домішкової речовини у матриці, більших, ніж у включеннях, $d_1 > d_0$, є монотонно спадною функцією (криві $1'-5'$, рис. 9а), значення якої збільшуються зі збільшенням τ . У випадку $d_1/d_0 = 5$ збільшення часу протікання процесу дифузії зумовлює зменшення усередненої концентрації домішки в неоднорідній структурі (криві $1'-5'$, рис. 9б).

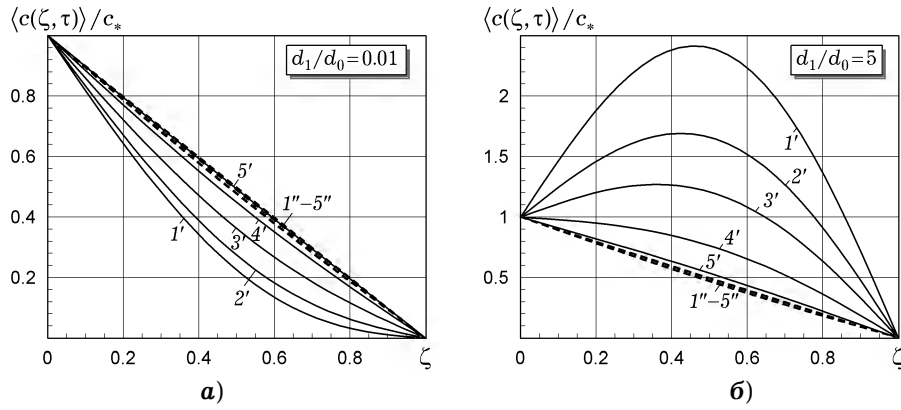


Рис. 9

На рис. 10 показано розподіли концентрації домішкової речовини для різних значень відношень коефіцієнтів дифузії $d_1/d_0 = 0.001, 0.01, 0.1, 1.5, 2, 5, 10$ (криві 1–7, рис. 10а) та густини $\rho_1/\rho_0 = 0.5, 1.3, 1.5$ (криві 1'/1''–3'/3'', рис. 10б). На рис. 10, 11 штрихові лінії відповідають значенням функції $c_0(\zeta, t)/c_*$. Крім того, на рис. 10б криві 1'–3' побудовано для співвідношень коефіцієнтів дифузії $d_1/d_0 = 0.01$, а криві 1''–3'' – для відношень $d_1/d_0 = 5$.

Зі збільшенням значення відношення коефіцієнтів дифузії d_1/d_0 усереднена концентрація домішки у тілі також збільшується (рис. 10а). Проте для $d_0 > d_1$ зміна цього відношення на порядок (наприклад, від $d_1/d_0 = 0.001$ до $d_1/d_0 = 0.01$) зумовлює зміну значення концентрації $\langle c(\zeta, t) \rangle / c_*$ приблизно на 10% (криві 1, 2, рис. 10а), а для $d_0 < d_1$ зміна відношення коефіцієнтів дифузії d_1/d_0 на порядок (наприклад, від $d_1/d_0 = 1.5$ до $d_1/d_0 = 10$) зумовлює зміну значення усередненої концентрації у декілька разів (криві 4 і 7 на рис. 10а). Незалежно від відношення коефіцієнтів дифузії збільшення відношення ρ_1/ρ_0 зумовлює зменшення значення усередненої концентрації мігруючої речовини (рис. 10б).

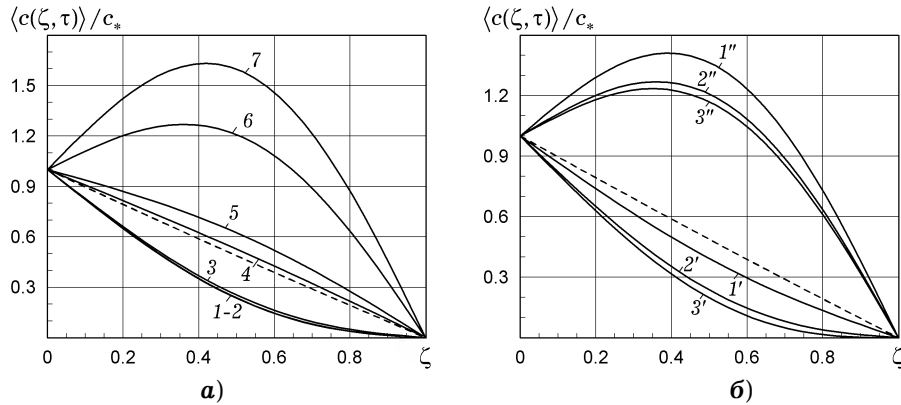


Рис. 10

Рис. 11 ілюструє поведінку функції $\langle c(\zeta, t) \rangle / c_*$ уздовж шару для різних значень об'ємної частки включень $v_1 = 0.1, 0.2, 0.3$ (криві 1'/1''–3'/3'', рис. 11а) і для різних значень ступенів вільності часткового випадку бета-розподілу $\alpha = 3, 5, 7$ (криві 1'/1''–3'/3'', рис. 11б). Тут криві 1'–3' та 1''–3'' побудовано для таких самих відношень коефіцієнтів дифузії ρ_1/ρ_0 , що й на рис. 10б.

Зазначимо, що збільшення параметра v_1 зумовлює зменшення усередненої концентрації (криві $1'-3'$, рис. 11а) для $d_0 > d_1$, зокрема, при $v_1 \geq 0.3$ концентрація домішкової речовини біля нижньої границі тіла, де зосереджені вclusions, наближається до нуля (крива $3'$, рис. 11а). У випадку $d_0 < d_1$ збільшення v_1 зумовлює збільшення усередненої концентрації домішки в тілі (криві $1''-3''$, рис. 11а). Як і у випадку структури з вclusions біля верхньої границі тіла, зміна характерних радіусів кульових вclusions практично не впливає на значення усередненої концентрації.

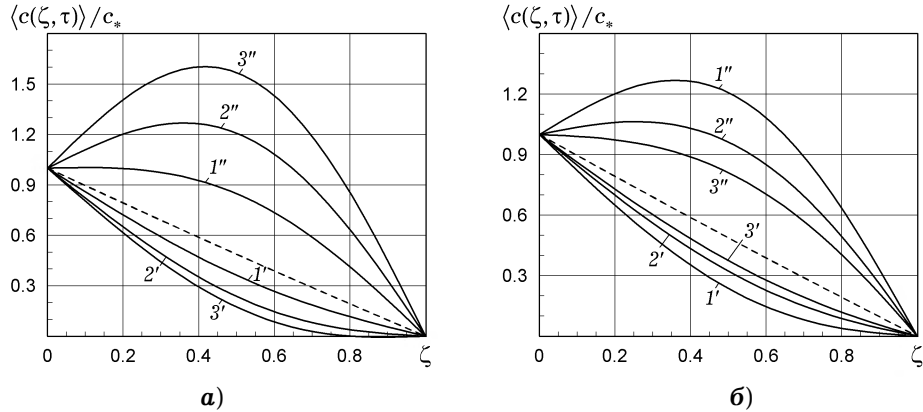


Рис. 11

Ущільнення кульових вclusions біля нижньої границі тіла, що відповідає зростанню параметра α (рис. 2), зумовлює зростання значень усередненої концентрації в тілі для випадків, коли коефіцієнт дифузії у матриці є більшим, ніж у вclusions, $d_1 > d_0$ (криві $1'-3'$, рис. 11б), та зменшення значень концентрації мігруючої речовини – у протилежному випадку, коли $d_0 < d_1$ (криві $1''-3''$, рис. 11б).

Таким чином, характерна поведінка усередненої концентрації домішки у тілі із вclusions, зосередженими біля нижньої границі тіла, є аналогічною до поведінки функції $\langle c(\zeta, t) \rangle / c_*$ у структурі із вclusions, що найімовірніше розміщені біля верхньої границі тіла.

Однак значення функції $\langle c(\zeta, t) \rangle / c_*$ для одних і тих же значень параметрів задачі у випадку структури з кульовими вclusions, розміщеними біля нижньої границі тіла, можуть бути більшими, ніж для структури, коли кульові вclusions зосереджені біля верхньої границі тіла, де діє джерело маси. Наприклад, для $\tau = 0.3$ у випадку $d_0 > d_1$ у структурі з вclusions, зосередженими біля нижньої границі тіла, значення усередненої концентрації є на 10% більшими, ніж для структури із вclusions, розміщеними біля верхньої границі (криві $1'$, рис. 9а та рис. 5а), а при $d_0 < d_1$ значення концентрації є приблизно на 20% більшими (криві $1'$, рис. 9б і рис. 5б). Тобто, чим більше значення відношення коефіцієнтів дифузії d_1/d_0 , тим більша відмінність між значеннями усередненої концентрації в неоднорідному тілі для двох типів структур із вclusions, що найбільш імовірно розміщені біля однієї з границь тіла. Проте для $d_1/d_0 > 5$ та $v_1 > 0.15$ ситуація змінюється на протилежну – усереднена концентрація у тілі з вclusions, зосередженими біля верхньої границі тіла, є більшою, ніж у структурі з вclusions, розміщеними ближче до нижньої межі (наприклад, криві 6, 7, рис. 7а і рис. 10а, а також криві 2'', 3'', рис. 6а та рис. 11а).

Висновки. На основі математичної моделі дифузії домішкових частинок у двофазному тілі з кульовими включеннями за умови наявності переважуючої фази досліджено поведінку та значення функції концентрації домішки для структур із найбільш імовірним розміщенням включень біля однієї з границь тіла. Отримано розрахункові формули для усереднених за ансамблем конфігурацій фаз полів концентрації для двох часткових випадків ймовірного бета-розподілу та функції Гріна і розв'язку однорідної крайової задачі за нульових крайових умов. Досліджено вплив коефіцієнта «неоднорідної» частини розрахункової формули на значення усередненої концентрації. Встановлено вплив вхідних параметрів задачі на поведінку і значення концентрації домішкових частинок для обох типів неоднорідних структур із кульовими включеннями. Показано, що ущільнення включень біля верхньої або нижньої поверхні шару за умови більшого значення коефіцієнта дифузії у матриці, ніж у кульових включеннях, викликає зростання усередненої концентрації мігруючої речовини в тілі.

1. *Королюк В. С., Портенко Н. И., Скороход А. В., Турбин А. Ф.* Справочник по теории вероятностей и математической статистике. – Москва: Наука, 1985. – 640 с.
2. *Лыков А. В.* Теория теплопроводности. – Москва: Высш. шк., 1967. – 599 с.
Te same: *Luikov A. V.* Analytical heat diffusion theory. – New York: Acad. Press, 2012. – 702 p.
3. *Рытов С. М., Кравцов Ю. А., Татарский В. И.* Введение в статистическую радиофизику. – Ч. II. Случайные поля. – Москва: Наука, 1978. – 464 с.
4. *Чернуха О. Ю., Білуцзяк Ю. І., Чучвара А. Є.* Моделювання дифузійних процесів у стохастично неоднорідних шаруватих структурах. – Львів: Растр-7, 2016. – 262 с.
5. *Чернуха О. Ю., Чучвара А. Є.* Моделювання потоків домішкової речовини у випадковій шаруватій смугі з ймовірним розміщенням включень біля границь тіла // *Мат. методи та фіз.-мех. поля.* – 2016. – **59**, № 4. – С. 97–107.
Te same: *Chernukha O. Yu., Chuchvara A. E.* Modeling of the flows of admixtures in a random layered strip with probable arrangement of inclusions near the boundaries of the body // *J. Math. Sci.* – 2019. – **238**, No. 2. – P. 116–128. – <https://doi.org/10.1007/s10958-019-04222-z>.
6. *Чернуха О. Ю., Чучвара А. Є.* Моделювання процесів дифузії у двофазній смугі з випадково розміщеними кульовими включеннями, зосередженими біля границь тіла. I. Побудова математичної моделі // *Мат. методи та фіз.-мех. поля.* – 2022. – **65**, № 3-4. – С. 232–246.
7. *Chen C., Chen L., Chen S., Yu Y., Weng D., Mahmood A., Wang G., Wang J.* Preparation of underwater superoleophobic membranes via TiO₂ electrostatic self-assembly for separation of stratified oil/water mixtures and emulsions // *J. Membr. Sci.* – 2020. – **602**. – Art. 117976. – <https://doi.org/10.1016/j.memsci.2020.117976>.
8. *Hanebuth M., Dittmeyer R., Mabande G. T. P., Schwieger W.* On the combination of different transport mechanisms for the simulation of steady-state mass transfer through composite systems using H₂/SF₆ permeation through stainless steel supported silicalite-1 membranes as a model system // *Catal. Today.* – 2005. – **104**, No. 2-4. – P. 352–359. – <https://doi.org/10.1016/j.cattod.2005.03.057>.
9. *Wang Y., Nie Y., Chen C., Zhao H., Zhao Y., Jia Y., Li J., Li Z.* Preparation and characterization of a thin-film composite membrane modified by MXene nanosheets // *Membranes.* – 2022. – **12**, No. 4. – Art. 368. – <https://doi.org/10.3390/membranes12040368>.
10. *Yunn-Tzu Y., Pochiraju K.* Three-dimensional simulation of moisture diffusion in polymer composite materials // *Polym.-Plastics Technol. Eng.* – 2003. – **42**, No. 5. – P. 737–756. – <https://doi.org/10.1081/PPT-120024993>.

**MODELING DIFFUSION PROCESSES IN A TWO-PHASE STRIP WITH RANDOMLY
DISTRIBUTED SPHERICAL INCLUSIONS LOCATED NEAR BOUNDARIES OF THE BODY.
II. QUANTITATIVE ANALYSIS**

The process of the diffusion of admixture in two-phase structures with spherical inclusions located near one of the boundaries of the body is studied. Calculation formulae for the field of concentration averaged over the ensemble of phase configurations for partial cases of the probable beta distribution are obtained. A numerical analysis of the functions of concentration of admixture particles migrating in two-phase structures with spherical inclusions is carried out, and the main regularities of such processes are established.

Key words: *diffusion, admixture, randomly inhomogeneous structure, spherical inclusion, probable beta-distribution, Neumann series, averaging over the ensemble of phase configurations.*

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

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

Одержано
27.11.22