УДК 517.958:532.72

Є. Я. Чапля, О. Ю. Чернуха, А. Є. Давидок

Математичне моделювання дифузійних потоків у випадково неоднорідній шаруватій смузі

(Представлено членом-кореспондентом НАН України Г. С. Кітом)

Для вивчення стохастичних дифузійних потоків домішкової речовини в тілах багатофазної випадково неоднорідної структури запропоновано підхід, за яким крайові задачі дифузії формулюються для функції потоку, а методи побудови розв'язку адаптуються для сформульованих задач. Розв'язано задачу і знайдено розрахункову формулу для усередненого за ансамблем реалізацій структури тіла дифузійного потоку у смузі з випадково розташованим прошарком.

При дослідженні процесів масоперенесення важливою проблемою є оцінка впливу просторово випадково розташованих включень. Використання класичних процедур усереднення за ансамблем конфігурацій включень має певні труднощі, оскільки, як правило, є невідомими функції кореляції градієнта стохастичного поля концентрації та випадкового коефіцієнта дифузії. Тому деякі автори [1, 2] пропонують, зокрема, для пористих тіл складати балансові рівняння для вже гомогенізованих середовищ, фізичні характеристики яких є усередненими величинами і враховують відмінності фаз (включень). У роботі [3] потік визначається законом Дарсі, коефіцієнт фільтрації якого є випадковою функцією просторової координати, а для побудови розв'язку задачі використано методи малих збурень і згладжування та накладено умову нормального розподілу фаз у середовищі, що не дає можливості визначити усереднений потік маси.

У даній роботі запропоновано підхід, за яким крайові задачі дифузії формулюємо безпосередньо для потоку, що дозволило шукане випадкове поле подати у вигляді ряду Неймана та провести процедуру усереднення за ансамблем конфігурацій фаз із заданою функцією розподілу.

Рівняння дифузії для потоків маси. В загальному випадку процес перерозподілу маси описується співвідношеннями [4]

$$\frac{\partial c(\vec{r},t)}{\partial t} = -\vec{\nabla}\cdot\vec{J}(\vec{r},t), \qquad \vec{J}(\vec{r},t) = -D(\vec{r})\vec{\nabla}c(\vec{r},t), \tag{1}$$

де $c(\vec{r},t)$ — концентрація частинок домішки; $\vec{J}(\vec{r},t)$ — потік маси; $\vec{\nabla}$ — набла-оператор Гамільтона, крапкою позначена операція скалярного добутку; $\vec{r}$ — радіус-вектор біжучої точки; t — час.

Якщо подіяти на перше з рівнянь (1) оператором $-\vec{\nabla}$ і використати друге, то

$$\frac{\partial \vec{J}(\vec{r},t)}{\partial t} = D(\vec{r})\vec{\nabla}\otimes\vec{\nabla}\cdot\vec{J}(\vec{r},t), \tag{2}$$

де $\vec{\nabla}\otimes\vec{\nabla} = \nabla_i\nabla_j\vec{i}^i\otimes\vec{i}^j$ $(i,j=1,2,3)$; $\otimes$ — тензорний добуток; $\nabla_1 = \partial/\partial x$, $\nabla_2 = \partial/\partial y$, $\nabla_3 = \partial/\partial z$; $\vec{i}^{\,i}$ — базисний вектор ($\vec{i}^{\,1} = \vec{i}$, $\vec{i}^{\,2} = \vec{j}$, $\vec{i}^{\,3} = \vec{k}$).

В одновимірному випадку рівняння (2) набуває вигляду

$$\frac{\partial J(z,t)}{\partial t} = D(z)\frac{\partial^2 J(z,t)}{\partial z^2}. \tag{3}$$

Вважаємо, що на потік $\vec{J}(\vec{r},t)$ накладені крайові умови I роду:

$$\vec{J}(\vec{r},t)|_{t=0} = J^* \equiv \text{const}; \qquad \vec{J}(\vec{r},t)|_{\vec{r}\in(\partial V)} = \vec{J}_*(t), \tag{4}$$

де функція $\vec{J}_*(t)$ є відомою детермінованою функцією; (∂V) — границя тіла.

Приймаємо, що об'ємна частка базової фази v_0 набагато більша за інші (включень). Також вважатимемо відомим імовірнісний розподіл фаз в тілі. Для побудови розв'язку крайової задачі (2), (4) введемо випадкову функцію просторових координат типу одиничної функції Хевісайда [5] — випадкову "функцію структури":

$$\eta_{ij}(\vec{r}) = \begin{cases} 1, & \vec{r} \in (V_i^{(j)}), \\ 0, & \vec{r} \notin (V_i^{(j)}), \end{cases} \qquad \sum_{j=0}^{N}\sum_{i=1}^{n_j}\eta_{ij}(\vec{r}) = 1. \tag{5}$$

Тут $(V_i^{(j)})$ — i-та однозв'язна область j-ї фази; i — номер включення в рамках фази, $i = \overline{1, n_j}$; n_j — кількість включень сорту j; $j = \overline{0, N}$; $N+1$ — кількість фаз; $j = 0$ відповідає матриці. Тобто $\bigcup\limits_{i=1}^{n_j} V_i^{(j)} = V_j$, $\bigcup\limits_{j=0}^{N} V_j = V$, де V_j — об'єм, який займає фаза j; V — об'єм тіла.

Коефіцієнт дифузії можна записати через функцію $\eta_{ij}(\vec{r})$ (5) таким чином:

$$D(\vec{r}) = \sum_{j=0}^{N}\sum_{i=1}^{n_j} D_j\eta_{ij}(\vec{r}). \tag{6}$$

Тут коефіцієнт дифузії в межах однієї фази прийнято сталим.

Підставляємо подання (6) у рівняння (2). Тоді маємо

$$L(\vec{r},t)\vec{J}(\vec{r},t) \equiv \frac{\partial \vec{J}(\vec{r},t)}{\partial t} - \sum_{j=0}^{N}\sum_{i=1}^{n_j} D_j\eta_{ij}(\vec{r})\vec{\nabla}\otimes\vec{\nabla}\cdot\vec{J}(\vec{r},t) = 0. \tag{7}$$

Оскільки справедлива друга умова (5), то рівняння (7) можна подати у вигляді

$$L(\vec{r},t)\vec{J}(\vec{r},t) = \sum_{j=0}^{N}\sum_{i=1}^{n_j} L_{ij}(\vec{r},t)\vec{J}(\vec{r},t) = 0, \qquad L_{ij}(\vec{r},t) = \eta_{ij}(\vec{r})\left[\frac{\partial}{\partial t} - D_j\vec{\nabla}\otimes\vec{\nabla}\right].$$

Розв'язки крайових задач масоперенесення в тілах випадково неоднорідної структури доцільно будувати у вигляді ряду Неймана, оскільки таке подання розв'язку є зручним для подальшого усереднення за ансамблем конфігурації фаз.

З цією метою в рівнянні (7) додамо і віднімемо невипадковий оператор $L_0(\vec{r},t)$ з коефіцієнтом дифузії матриці, який означений на всьому проміжку

$$L_0(\vec{r},t) = \frac{\partial}{\partial t} - D_0\vec{\nabla}\otimes\vec{\nabla}, \tag{8}$$

а при симетрії за змінними x та y (наприклад, для таких тіл як шар або півпростір) даний оператор набуде вигляду

$$L_0(\vec{r},t)\vec{J}(\vec{r},t) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ L_0(z,t) \end{pmatrix}.$$

Тоді рівняння (7) запишемо так:

$$L_0(\vec{r},t)\vec{J}(\vec{r},t) = [L_0(\vec{r},t) - L(\vec{r},t)]\vec{J}(\vec{r},t) \tag{9}$$

або з урахуванням умови (5) подамо у вигляді

$$L_0(\vec{r},t)\vec{J}(\vec{r},t) = \sum_{j=0}^{N}\sum_{i=1}^{n_j}[L_0(\vec{r},t) - L_{ij}(\vec{r},t)]\vec{J}(\vec{r},t). \tag{10}$$

Оператор у правій частині рівняння (10) позначимо

$$L_s(\vec{r},t)\vec{J}(\vec{r},t) \equiv \sum_{j=0}^{N}\sum_{i=1}^{n_j}(D_0 - D_j)\eta_{ij}(\vec{r})\vec{\nabla}\otimes\vec{\nabla} = \sum_{j=0}^{N}\sum_{i=1}^{n_j}L_{0ij}(\vec{r}).$$

Зауважимо, що оператор $L_s(\vec{r},t)$ не залежить від часу, тобто $L_s(\vec{r},t) \equiv L_s(\vec{r})$.

Вважаємо праву частину рівняння (10) джерелом, тобто неоднорідність структури трактуємо як внутрішні джерела. Тоді розв'язок крайової задачі (10), (4) можна подати як суму розв'язку однорідної крайової задачі та згортки функції Гріна з джерелом:

$$\vec{J}(\vec{r},t) = \vec{J}_0(\vec{r},t) + \int_0^t \iiint_{(V)} G(\vec{r},\vec{r}\,',t,t')L_s(\vec{r}\,')\vec{J}(\vec{r}\,',t')\,d\vec{r}\,'dt', \tag{11}$$

де $\vec{J}_0(\vec{r},t)$ — розв'язок однорідної крайової задачі

$$\begin{gathered} L_0(\vec{r},t)\vec{J}_0(\vec{r},t) = \frac{\partial\vec{J}_0(\vec{r},t)}{\partial t} - D_0\vec{\nabla}\otimes\vec{\nabla}\cdot\vec{J}_0(\vec{r},t) = 0, \\ \vec{J}_0(\vec{r},t)|_{t=0} = J^*; \qquad \vec{J}_0(\vec{r},t)|_{\vec{r}\in(\partial V)} = \vec{J}_*(t); \end{gathered} \tag{12}$$

$G(\vec{r},\vec{r}\,',t,t')$ — функція Гріна задачі (9), (4), тобто є розв'язком детермінованої крайової задачі з точковим джерелом:

$$\begin{gathered} \frac{\partial G(\vec{r},\vec{r}\,',t,t')}{\partial t} - D_0\vec{\nabla}\otimes\vec{\nabla}\cdot G(\vec{r},\vec{r}\,',t,t') = \delta(t-t')\delta(\vec{r}-\vec{r}\,'), \\ G(\vec{r},\vec{r}\,',t,t')|_{t=0} = 0, \qquad G(\vec{r},\vec{r}\,',t,t')|_{\vec{r}\in(\partial V)} = 0. \end{gathered}$$

Отже, ми отримали інтегро-диференціальне рівняння для випадкових потоків маси, яке є рівнянням Вольтерра II роду за часом і Гаммерштейна за просторовими змінними. Розв'язуємо його методом послідовних наближень. Тоді розв'язок отримаємо у вигляді інтегрального ряду Неймана:

$$\vec{J}(\vec{r},t) = \vec{J}_0(\vec{r},t) + \int\limits_0^t \iiint\limits_{(V)} G(\vec{r},\vec{r}\,',t,t')L_s(\vec{r}\,')\vec{J}_0(\vec{r}\,',t')\,d\vec{r}\,'dt' +$$
$$+\int\limits_0^t \iiint\limits_{(V)} G(\vec{r},\vec{r}\,',t,t')L_s(\vec{r}\,') \int\limits_0^{t} \iiint\limits_{(V)} G(\vec{r}\,',\vec{r}\,'',t',t'')L_s(\vec{r}\,'')\vec{J}_0(\vec{r}\,'',t'')\,d\vec{r}\,''dt''d\vec{r}\,'dt' + \cdots . \tag{13}$$

Зазначимо, що в одновимірному випадку (для шаруватого тіла) ряд Неймана (13) є абсолютно і рівномірно збіжним, якщо коефіцієнти дифузії є обмеженими $D_j \leqslant K < \infty$, $\forall\, j \in \{0,\ldots,N\}$ і коефіцієнт дифузії матриці відмінний від нуля $D_0 \neq 0$. Теореми збіжності рядів Неймана, сформульовані і доведені у роботі [6], застосовні і до ряду (13). Також справджується теорема існування розв'язку інтегро-диференціального рівняння (11) для шару і півпростору.

Дифузійний потік у смузі з випадково розташованим прошарком. Розглянемо смугу товщиною z_0 з випадково розташованим прошарком. Тоді потік частинок описує рівняння (3). Вважаємо, що в початковий момент часу в тілі відсутній дифузійний потік, що означає $c(z,t)|_{t=0} = C_* \equiv \text{const}$. На границі шару $z = 0$ підтримується постійне значення потоку $J_* \equiv \text{const}$, а на поверхні $z = z_0$ концентрація домішкових частинок дорівнює нулю. Тоді дифузійний потік на цій поверхні дорівнює певній функції часу $F(t)$, яку шукатимемо з відповідної крайової задачі для концентрації.

Розв'язуючи крайову задачу на концентрацію та використовуючи перший закон Фіка, отримаємо значення потоку через границю $z = z_0$:

$$F(t) = J_* - \frac{2}{z_0}\sum_{n=1}^{\infty}(-1)^{n+1}e^{-D_0\xi_n^2 t}\left(\frac{J_*}{\xi_n} + (-1)^n C_* D_0\right), \qquad \xi_n = \frac{\pi(2n-1)}{2z_0}.$$

При проведенні процедури усереднення за ансамблем конфігурацій фаз обмежимося двома першими членами ряду Неймана (13)

$$J(z,t) \approx J_0(z,t) + \int\limits_0^t \int\limits_0^{z_0} G(z,z',t,t')L_s(z')J_0(z',t')\,dz'dt',$$

де $J_0(z,t)$ — розв'язок однорідної крайової задачі

$$J_0(z,t) = J_* - \frac{2}{z_0}\sum_{n=1}^{\infty} e^{-D_0\xi_n^2 t}\left(\frac{J_*}{\xi_n} + (-1)^n C_* D_0\right)\sin(\xi_n z); \tag{14}$$

$G(z,z',t,t')$ — функція Гріна

$$G(z,z',t,t') = \frac{\theta(t-t')}{\pi}\sum_{k=1}^{\infty} e^{-D_0 y_k^2 (t-t')}[\cos(y_k(z-z')) - \cos(y_k(z+z'))], \quad y_k = \frac{k\pi}{z_0}, \tag{15}$$

а оператор $L_s(z')$ зводиться до вигляду $L_s(z) = (D_1 - D_0)\eta_1(z)\partial^2/\partial z^2$.

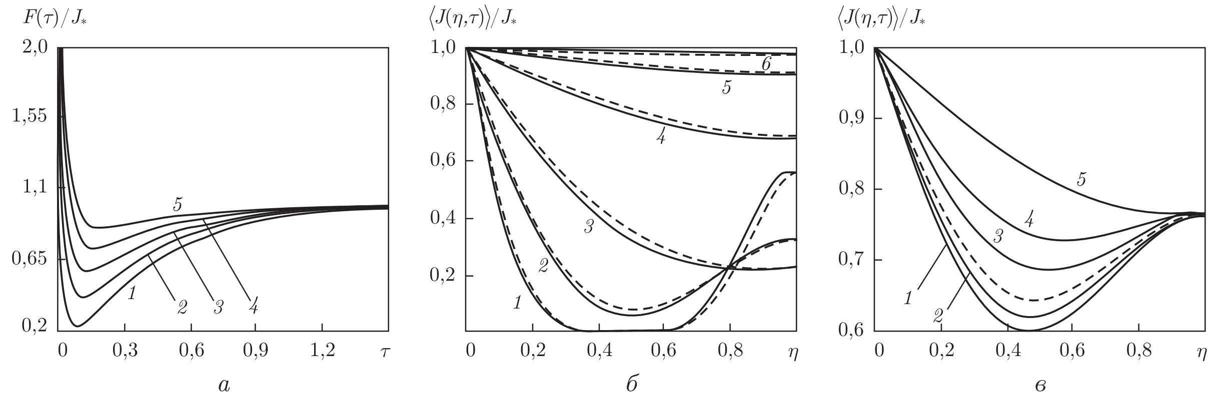

Рис. 1. Функція $F(\tau)/J_*$ (*а*) і потоки маси (*б*) в різні моменти безрозмірного часу та при різних значеннях відношення коефіцієнтів дифузії D_1/D_0 (*в*)

Після усереднення за ансамблем реалізацій структури тіла з рівномірною функцією розподілу одержимо вираз для потоку домішкових частинок

$$\langle J(z,t)\rangle_{\rm conf} = J_0(z,t) + (D_1 - D_0)\int\limits_0^t \left[\frac{v_1}{h}\int\limits_0^h z' G(z,z',t,t')\frac{\partial^2 J_0(z',t')}{\partial z'^2}dz' + \right.$$

$$\left. + v_1\int\limits_h^{z_0} G(z,z',t,t')\frac{\partial^2 J_0(z',t')}{\partial z'^2}dz'\right]dt', \qquad (16)$$

де h та v_1 — товщина та об'ємна частка включення.

Підставляючи у (16) функцію Гріна (15) та вираз (14) для потоку маси в однорідній смузі, отримаємо таку розрахункову формулу:

$$\frac{1}{J_*}\langle J(z,t)\rangle_{\rm conf} = 1 - \frac{2}{z_0}\sum_{n=1}^{\infty}(-1)^{n+1}e^{-D_0\xi_n^2 t}\left(\frac{1}{\xi_n} + (-1)^n D_0\frac{C_*}{J_*}\right)\sin(\xi_n z) +$$

$$+ \frac{2v_1}{z_0^2}\frac{(D_1 - D_0)}{D_0}\sum_{k=1}^{\infty}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\xi_n A_{kn}}{y_k^2 - \xi_n^2}\left(1 + (-1)^n D_0\frac{C_*}{J_*}\xi_n\right)\left(\frac{3}{2}e^{-D_0\xi_n^2 t} - e^{-D_0 y_k^2 t}\right)\times$$

$$\times\sin(y_k z). \qquad (17)$$

Тут

$$A_{kn} = \frac{\cos[(y_k - \xi_n)h]}{h(y_k - \xi_n)^2} - \frac{\cos[(y_k + \xi_n)h]}{h(y_k + \xi_n)^2} - \frac{4y_k\xi_n}{h(y_k^2 - \xi_n^2)^2} + (-1)^{k+n}\frac{2y_k}{y_k^2 - \xi_n^2}.$$

Числові розрахунки проведено у безрозмірних змінних [7]: $\eta = z/z_0$, $\tau = D_0 t/z_0^2$. Рис. 1, *а* демонтрує поведінку функції $F(t)$ при різних значеннях $C_*/J_* = 0{,}1$; 0,2; 0,3; 0,4; 0,5 (криві *1–5*). Рис. 1, *б* ілюструє залежності потоку маси (17) у різні моменти безрозмірного часу $\tau = 0{,}01$; 0,05; 0,1; 0,5; 1; 2,5 (криві *1–6*) для $D_1/D_0 = 0{,}01$, $h = 0{,}1$, $C_*/J_* = 0{,}1$. На рис. 1, *в* наведені розподіли потоків домішки для різних значень відношення коефіцієнтів дифузії $D_1/D_0 = 0{,}01$; 0,5; 2; 3; 5 (криві *1–5*). Штриховою лінією позначено відповідні потоки в однорідному шарі з характеристиками матриці.

Відзначимо, що у випадку ненульового сталого початкового розподілу концентрації домішки в шарі для малих часів поведінка функції потоку значно відрізняється від випадку нульової початкової концентрації. Потік від поверхні тіла $z = 0$ спадає, в середині шару є близьким до нуля і знову зростає біля границі $z = z_0$ (крива *1* на рис. 1, *б*). З часом значення потоку в околі цієї поверхні зменшується. Зауважимо, що величина початкової концентрації істотно впливає на поведінку і значення функції потоку домішки. Так, для малих відношень C_*/J_* потік домішки як в однорідному шарі, так і у смузі з прошарком, є монотонно спадним. Зі збільшенням початкової концентрації C_* потік біля поверхні шару $z = z_0$ зростає, що може призвести до появи локального мінімуму в середині шару.

Таким чином, для дослідження дифузійних потоків речовини, яка мігрує в тілах багатофазної стохастично неоднорідної структури, запропоновано підхід, за яким крайові задачі дифузії формулюються безпосередньо для функції потоку. Таке рівняння дифузії отримано з рівняння балансу маси. Обгрунтовано крайові умови для функції потоку маси. Випадковий дифузійний потік у багатофазному тілі знайдений у вигляді ряду Неймана, що дає можливість усереднювати за ансамблем конфігурацій фаз. Отримано розрахункову формулу та проведено числовий аналіз для міграції домішки у смузі з випадково розташованим прошарком.

1. *Bergins C., Crone S., Strauss K.* Multiphase flow in porous media with phase change. Part II: Analytical solutions and experimental verification for constant pressure stream injection // Transport in Porous Media. – 2005. – **60**. – P. 275–300.
2. *Shulenberg T., Muller U.* An improved model for two-phase flow through beds of coarse particles // Int. J. Multiphase Flow. – 1987. – **13(1)**. – P. 87–97.
3. *Keller J. B.* Flow in random porous media // Transport in Porous Media. – 2001. – **43**. – P. 395–406.
4. *Crank J.* The mathematics of diffusion. – Oxford: Clarendon Press, 1956. – 575 p.
5. *Рытов С. М., Кравцов Ю. А., Татарский В. И.* Введение в статистическую радиофизику. Ч. II. Случайные поля. – Москва: Наука, 1978. – 436 с.
6. *Чапля Є. Я., Чернуха О. Ю.* Математичне моделювання дифузійних процесів у випадкових і регулярних структурах. – Київ: Наук. думка, 2009. – 302 с.
7. *Тихонов А. Н., Самарский А. А.* Уравнения математической физики. – Москва: Наука, 1972. – 735 с.

Центр математичного моделювання Інституту прикладних проблем механіки і математики ім. Я. С. Підстригача НАН України, Львів
Університет Казиміра Великого, Бидгощ, Польща
Прикарпатський національний університет ім. В. Стефаника, Івано-Франківськ

Надійшло до редакції 17.04.2012

Е. Я. Чапля, О. Ю. Чернуха, А. Е. Давидок

Математическое моделирование диффузионных потоков в случайно неоднородной слоистой полосе

Для изучения стохастических диффузионных потоков примесного вещества в телах многофазной случайно неоднородной структуры предложен подход, по которому краевые задачи диффузии формулируются для функции потока, а методы построения решения адаптируются для сформулированных задач. Решена задача и найдена расчетная формула для усредненного по ансамблю реализаций структуры тела диффузионного потока в полосе со случайно расположенной прослойкой.

Y. Y. Chaplya, O. Y. Chernukha, A. Y. Davydok

Mathematical modeling of diffusion flows in a randomly inhomogeneous stratified strip

For studying the stochastical diffusion flows of an admixture in bodies with multiphase randomly inhomogeneous structure, an approach, under which initial-boundary-value problems of diffusion are formulated for flow functions and methods of solution construction are adapted for the formulated problems, is proposed. The problem is solved, and the calculation formula is found for the diffusion flow averaged over the ensemble of realizations of body structures in a strip with a randomly disposed interlayer.