Комп'ютерне моделювання других моментів випадкового поля концентрації в півпросторі з ерлангівський розподілом шаруватих включень

Ю.І. Білущак
відділ математичного моделювання нерівноважних процесів
Центр математичного моделювання
Інституту прикладних проблем механіки і математики ім. Я.С.Підстригача НАН України
Львів, Україна
byixx13@gmail.com

Simulation of the second moments of random field of concentration in a semispace with erlangian disrtibution of layred inclusions

Y. Bilushchak
Department of mathematical modeling nonequilibrium processes
Centre of Mathematical Modeling of Pidstryhach Institute for Applied Problems of Mechanics and Mathematics, Ukrainian Academy of Sciences
Lviv, Ukraine
byixx13@gmail.com

***Анотація*—Робота присвячена математичному моделюванню процесів дифузії домішкової речовини у двофазному шаруватому півпросторі з урахуванням випадкового розташування підшарів та умов неідеального масового контакту на границях розділу фаз. Визначено дисперсію поля концентрації частинок та двоточкової функцію кореляції поля для процесу дифузії в шаруватому півпросторі з ерлангівським розподілом включень. Розроблено програмне забезпечення та визначений вплив характеристик середовища.**

***Abstract*—The work is devoted to mathematical modeling admixture difusion processes in a two-phase stratified semispace with allowance for random disposion of a sublayers and the condition of nonideal mass contact on interphases. Dispersion of the field of particle concentration is defined as well as a two-point function of field correlation for the diffusion process in the stratified semispace with exponential distribution of inclusions. Software is designed and influence of medium characteristics.**

Ключові слова*— *математичне моделювання дифузія, шарувата структура, ерлангівський розподіл, дисперсія поля, функція кореляції

Keywords*— *mathematical modeling, diffusion, stratified structure, erlangian distribution, field dispersion, correlation function

I. Вступ

Математичний опис процесів дифузії базується на балансових співвідношеннях та законах Фіка, на основі яких формулюються крайові задачі. При цьому для багатофазних тіл не завжди відомі точні геометричні параметри внутрішньої структури [1]. Якщо невідомо розташування фаз в середовищі, то процеси, які протікають у таких тілах, розглядаються як випадкові. Якщо розміри включень є малими в порівнянні з розмірами тіла, їх кількість макроскопічна і ймовірнісний розподіл включень близький до рівномірного, то для опису процесів переносу у випадкових структурах можна застосовувати різні методи гомогенізації [2]. Для випадку довільних розмірів включень, в тому числі і співвимірних з розмірами тіла, розроблений підхід, який базується на зведенні крайової задачі до інтегро-диференціального рівняння, розв'язок якого знаходиться у вигляді ряду Неймана та усередненні його за ансамблем конфігурацій фаз. При цьому у збуреному операторі дифузії, і відповідно в операторі ядра інтегрального рівняння, скорочується похідна за часом. Крім цього на практиці зазвичай знаходять лише перші статистичні характеристики поля, які пов'язані з одноточковими розподілами ймовірностей. Тому в роботі узагальнено підхід до математичного опису дифузії у випадково неоднорідних шаруватих тілах для довільних розмірів включень за неідеальних умов контакту на концентрацію, а також запропоновано метод визначення дисперсії поля концентрації мігруючої речовини та двоточкової функції кореляції (автокореляції) поля.

II. МОДЕЛЮВАННЯ ВИПАДКОВОГО ПОЛЯ КОНЦЕНТРАЦІЇ В ШАРУВАТОМУ ПІВПРОСТОРІ

Нехай домішкові частинки мігрують у багатошаровому півпросторі, в якому розташування підшарів є невідомим. Вважаємо, що дифузійні властивості шарів (області Ω_0 і Ω_1, рис. 1), можуть суттєво відрізнятися. Приймаємо, що розташування включень (рис. 1) порядковано ерлангівському розподілу $f(z)$ [3].

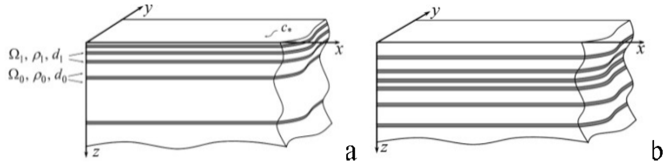

Рис. 1. Структура багатошарового півпростору для ерлангівського розподілу включень при ступенях вільності $n = 2$ (a) і $n > 2$ (b)

Процес дифузії домішки в таких тілах описується рівняннями дифузії, сформульованими для кожної з фаз:

$$\rho_j \frac{\partial c_j(z,t)}{\partial t} = d_j \frac{\partial^2 c_j(z,t)}{\partial z^2}, \; z \in \Omega_j = \bigcup_{i=1}^{n_j} \Omega_{ij}, \quad j = 0,1, \tag{1}$$

де $c_j(z,t)$ – випадкова концентрація; ρ_j – густина; d_j – кінетичний коефіцієнт переносу; n_j – кількість шарів фази j, Ω_{ij} – i-та однозв'язна область фази j, $i = \overline{1,n_j}$, $j = 0,1$.

На поле $c(z,t)$ накладено такі крайові умови

$$c_0(z,t)\big|_{t=0} = c_1(z,t)\big|_{t=0} = 0, \tag{2}$$

$$c_0(z,t)\big|_{z=0} = c_* \equiv const, \; c_0(z,t)\big|_{z\to\infty} = 0. \tag{3}$$

На міжфазних границях умови неідеального контакту для функції концентрації мають вигляд [1]:

$$k_0 c_0(z,t)\big|_{z=z_l-0} = k_1 c_1(z,t)\big|_{z=z_l+0},$$

$$\rho_0 d_0 \partial c_0(z,t)/\partial z\big|_{z=z_l-0} = \rho_1 d_1 \partial c_1(z,t)/\partial z\big|_{z=z_l+0}; \tag{4}$$

$$k_1 c_1(z,t)\big|_{z=z_l+h_{l1}-0} = k_0 c_0(z,t)\big|_{z=z_l+h_{l1}+0},$$

$$\rho_1 d_1 \partial c_1/\partial z_{\,z=z_l+h_{l1}-0} = \rho_0 d_0 \partial c_0/\partial z\big|_{z=z_l+h_{l1}+0}, \tag{5}$$

де k_j – коефіцієнт концентраційної залежності хімічного потенціалу у фазі j, h_{l1} – товщина включення Ω_{l1}.

Зазначимо, що при такій постановці задачі (1)-(5) випадковими величинами є границі контакту $z = z_l$ та $z = z_l + h_{l1}$, тобто межі областей Ω_0 та Ω_1, які є внутрішніми для тіла. Це, в свою чергу, призводить до стохастичності поля концентрації домішки, яка мігрує в тілі.

З допомогою апарату теорії узагальнених функцій контактна задача (1)-(5) зведена до рівняння масопереносу у всій області тіла, оператор якого явно враховує стрибки концентрації та її похідних на границях контакту. Отриманій крайовій задачі поставлено у відповідність еквівалентне інтегро-диференціальне рівняння, розв'язок якого побудований у вигляді інтегрального ряду Неймана:

$$c(z,t) = c_0(z,t) + \int_0^t\!\!\int_0^\infty G(z,z',t,t') L_s(z',t') c_0(z',t') dz'dt' + \int_0^t\!\!\int_0^\infty G(z,z',t,t') \times$$

$$\times L_s(z',t') \int_0^{t'}\!\!\int_0^\infty G(z',z'',t',t'') L_s(z'',t'') c_0(z'',t'') dz''dt''dz'dt' \ldots, \tag{6}$$

де $c_0(z,t)$ – розв'язок однорідної задачі, $G(z,z',t,t')$ – функція Гріна,

$$L_s(z,t) = \rho_* \sum_i^{n_1} \eta_{i1}(z) \left\{ \frac{\partial}{\partial t} \right\}_{z\in\Omega_{ij}} - d_* \sum_i^{n_1} \eta_{i1}(z) \left\{ \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right\}_{z\in\Omega_{ij}} -$$

$$-\sum_{j=0}^{1} \sum_i^{n_1} d_j \eta_{ij}(z) \left[\sum_l^{n_1} [\partial/\partial z]_{z=z_l} \delta(z-z_l) - [\;]_{z=z_l} \delta'(z-z_l) + \right.$$

$$\left. + \sum_l^{n_1} [\partial/\partial z]_{z=z_l+h_{l1}} \delta(z-(z_l+h_{l1})) - [\;]_{z=z_l+h_{l1}} \delta'(z-(z_l+h_{l1})) \right],$$

де $\rho_* = \rho_0 - \rho_1$, $d_* = d_0 - d_1$, η_{ij} - функція структури.

Усереднення отриманого розв'язку проведено за ансамблем конфігурацій фаз з ерлангівською функцією розподілу.

Подання розв'язку у вигляді ряду Неймана (6) дозволяє знайти дисперсію поля концентрації для процесу дифузії в шаруватому півпросторі з ерлангівським розподілом фаз.

Дисперсія поля за означенням дорівнює

$$\sigma_c^2(z,t) = \left\langle c^2(z,t) \right\rangle - \left\langle c(z,t) \right\rangle^2.$$

Для середнього від добутку полів концентрації має місце співвідношення [3]

$$\left\langle c(z_1,t_1) c(z_2,t_2) \right\rangle = \left\langle c(z_1,t_1) \right\rangle \left\langle c(z_2,t_2) \right\rangle + \psi_c(z_1,t_1,z_2,t_2),$$

де $\psi_c(z_1,t_1,z_2,t_2)$ - функція кореляції (автокореляції) поля концентрації $c(z,t)$ в точках (z_1,t_1) і (z_2,t_2) [4].

Звідси можемо визначити функцію кореляції поля $\psi_c(z,t,z,t)$ тобто дисперсії в точці (z,t):

$$\psi_c(z,t,z,t) = \left\langle c^2(z,t) \right\rangle - \left\langle c(z,t) \right\rangle \left\langle c(z,t) \right\rangle. \tag{7}$$

Тоді середнє від квадрату поля можемо записати як суму добутків середніх та відповідної функції кореляції:

$$\left\langle c^2(z,t) \right\rangle = \left\langle c(z,t) c(z,t) \right\rangle = \left\langle c(z,t) \right\rangle \left\langle c(z,t) \right\rangle + \psi_c(z,t,z,t).$$

Підставляємо у (7) вираз для поля $c(z,t)$ у вигляді ряду Неймана (6) і обмежуємося першими чотирма членами розкладу, тобто враховуємо не більше ніж парний взаємовплив підшарів, з яких складене тіло.

Врахуємо, що функція Гріна $G(z,z',t,t')$, оператор $\overline{L}_s(z,t)$ і поле концентрації домішки в однорідному тілі $c_0(z,t)$ є детермінованими, а отже є детермінованим вираз $\overline{L}_s(z,t) c_0(z,t)$; що усереднення проводимо за ансамблем конфігурацій фаз, тобто випадковою величиною є координата «верхньої» межі включень z_{i1}. Інтегральні вирази, що входять в дисперсію і функцію кореляції поля, дозволяють подати добуток двох двократних інтегралів у вигляді одного чотирикратного інтеграла.

Також, вважаючи подання поля концентрації у вигляді ряду Неймана, визначено функцію кореляції (авто кореляції) поля концентрації домішки у двофазному тілі у двох точках (z_1,t_1) і (z_2,t_2) [5]

$$\psi_c\left(z_1,t_1;z_2,t_2\right)=\left\langle c\left(z_1,t_1\right)c\left(z_2,t_2\right)\right\rangle-\left\langle c\left(z_1,t_1\right)\right\rangle\left\langle c\left(z_2,t_2\right)\right\rangle .$$

Тоді, оскільки

$$\left\langle \sum_{i-1}^{n_1}\eta_{i1}(z_1)\sum_{k-1}^{n_1}\eta_{k1}(z_2)\right\rangle=\sum_{i-1}^{n_1}\sum_{k-1}^{n_1}\left(\left\langle\eta_{i1}(z_1)\right\rangle\left\langle\eta_{k1}(z_2)\right\rangle+\psi_\eta(z_1,z_2)\right)$$

де $\psi_\eta(z_1,z_2)=\left((n\mu)^n/\Gamma(n)\right)^2(z'z_1')^{n+1}e^{-n\mu(z'+z_1')}$ - функція кореляції фаз ерлангівського розподілу, а n і μ – параметри цього розподілу, $\Gamma(n)$ - Гама функція, то отримаємо функцію кореляції поля концентрації в точках (z_1,t_1) і (z_2,t_2) для процесу дифузії домішкової речовини у двофазному випадково неоднорідному шаруватому тілі:

$$\psi_c(z_1,t_1;z_2',t_2)=n_1^2\int_0^{t_1}\int_0^{t_2}\iint_{(V)^2}G(z_1,z_1',t_1,t_1')G(z_1,z_2',t_2,t_2')\times$$

$$\times\overline{L}_s(z_1,t_1')c_0(z_1,t_1')\overline{L}_s(z_2,t_2')c_0(z_2,t_2')\psi_\eta(z_1,z_2)dz_1dt_2'dz_2dt_1'. \quad (8)$$

Тут $\overline{L}_s(\vec{r},t)=\rho_*\,\partial/\partial t-d_*\,\partial^2/\partial z^2$ - збурений оператор дифузії.

Таким чином ми отримали вираз (8) для функції кореляції поля концентрації домішкової речовини в двофазному багатошаровому тілі в точках (z_1,t_1) і (z_2,t_2), який поданий через функцію кореляції фаз.

У випадку шаруватого тіла з егрлангівським розподілом фаз отримані розрахункові формули дисперсії поля та двоточкової функції кореляції поля концентрації домішкової речовини. Характерні розподіли $\psi_c(z,t;z,t)$ наведені на рис. 2, рис. 3 та $\psi_c(z_1,t_1;z_2,t_2)$ на рис. 4, рис. 5.

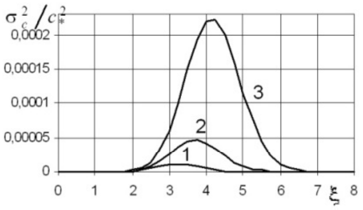

Рис. 2. Дисперсія поля концентрації в різні моменти безрозмірного часу τ = 0,3; 0.4; 0.5 (криві 1-3) при $\mu=0{,}5$, $n=10$

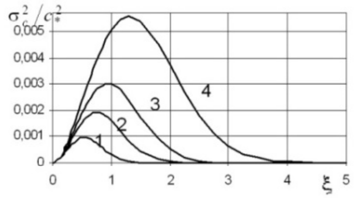

Рис. 3. Дисперсія поля концентрації в різні моменти безрозмірного часу τ = 0.2; 0,3; 0.4; 0.6 (криві 1-4) при $\mu=10$, $n=1$ (а)

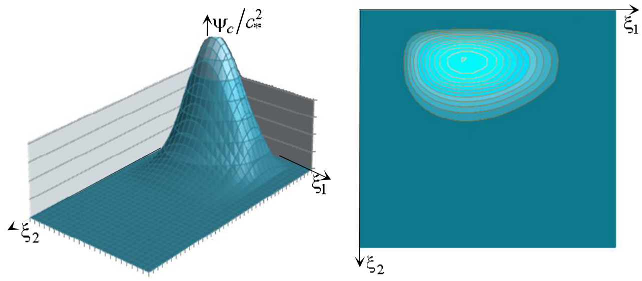

Рис. 4. Функція кореляції поля концентрації в момент часу τ_1 = 0.2; τ_2 = 0.5 при $\mu=0{,}5$, $n=10$

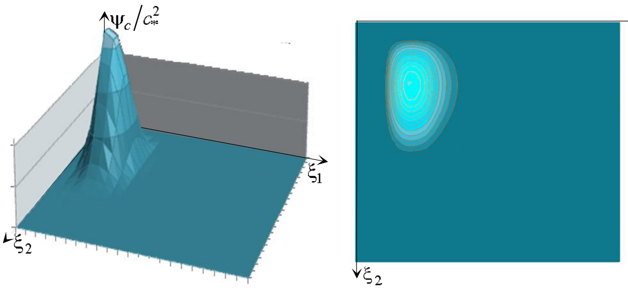

Рис. 5. Функція кореляції поля концентрації в момент часу τ_1 = 0.05; τ_2 = 0.01 при $\mu=10$, $n=1$

Від початку протікання процесу дифузії у випадковій шаруватій структурі, дисперсія поля концентрації починає зростати в околі поверхні, де діє джерело маси (рис. 2), а зі збільшенням μ цей максимум зсувається в глиб тіла (рис. 3). З ростом часової змінної функція кореляції різко зростає біля поверхні, де діє джерело маси. Рис. 4, 5. ілюструє появу максимуму функції $\psi_c(z_1,t_1;z_2,t_2)$.

Висновки

Таким чином узагальнено підхід до математичного опису дифузії у випадково неоднорідних шаруватих тілах для довільних розмірів включень за неідеальних умов контакту на концентрацію, а також запропоновано метод визначення дисперсії поля концентрації мігруючої речовини та двоточкової функції кореляції (автокореляції) поля.

Література References

[1] Є. Чапля, О. Чернуха, Математичне моделювання дифузійних процесів у випадкових і регулярних структурах. – Київ: Наукова думка, 2009. – 302 с.

[2] Л. Хорошун, Н. Солтанов, Термоупругость двухкомпонентных смесей. – Киев: Наукова думка, 1984. – 112 с.

[3] В. Королюк, Н. Портенко, А. Скороход, А. Турбин, Справочник по теории вероятности и математической статистике. – М.: Наука, 1985. – 640 с.

[4] С. Рытов, Ю. Кравцов, В. Татарский, Введение в статистическую радиофизику. Ч. II. Случайные поля - М.: Наука, 1978. - 436 с.

[5] Ю. Білущак, Моделювання других моментів випадкового поля концентрації в півпросторі з експоненціальним розподілом шаруватих включень // Вісник Кременчуцького національного університету ім. М. Остроградського – 2014. - Вип. 6, (89) – С. 71-79.