ФІЗИКА І ХІМІЯ ТВЕРДОГО ТІЛА
Т. 15, № 4 (2014) С. 708-720

PHYSICS AND CHEMISTRY OF SOLID STATE
V. 15, № 4 (2014) P. 708-720

УДК 517.958:532.72

ISSN 1729-4428

А.Є. Давидок[1, 2], О.Ю. Чернуха[1], В.Є. Гончарук[1,3]

Комп'ютерне моделювання взаємозв'язних теплових і дифузійних процесів з урахуванням розпаду речовини у випадково неоднорідній шаруватій смузі

[1] *Центр математичного моделювання ІППММ ім. Я. С. Підстригача НАН України, вул. Дж.Дудаєва, 15, Львів, 79005, cher@cmm.lviv.ua;*
[2] *Інститут прикладних проблем механіки і математики ім. Я. С. Підстригача НАН України, вул. Наукова, 3-б, Львів, 79060, davydoka@gmail.com;*
[3] *Національний університет «Львівська політехніка», вул.С.Бандери, 12, Львів, 79013, vegoncharuk@mail.ru*

Досліджено процеси термодифузії розпадної домішки у стохастично неоднорідному тілі. Здійснено постановку контактно-крайової задачі з урахуванням ідеальних умов контакту для температури та неідеальних – для концентрації. Вихідну задачу зведено до еквівалентної системи інтегро-диференціальних рівнянь, розв'язок якої знайдено методом послідовних наближень у вигляді рядів Неймана. Отримано розрахункові формули для усереднених за ансамблем конфігурацій фаз полів температури і концентрації розпадної домішки за умови рівномірного розподілу фаз у тілі. Розроблено пакет програм, на основі якого досліджено залежність усереднених полів температури і концентрації від характеристик середовища. Показано, що час виходу на усталений режим для температури на п'ять порядків менший, ніж для концентрації.

Ключові слова: комп'ютерне моделювання, термодифузія, розпадна домішка, ряд Неймана, усереднення за ансамблем конфігурацій фаз, пакет програм.

Стаття поступила до редакції 25.04.2014; прийнята до друку 15.09.2014.

Вступ

Дослідження процесів тепломасоперенесення та визначення нестаціонарних полів температури, концентрації, тиску тощо, мають велике значення при знаходженні оптимальних конструктивних та експлуатаційних розв'язань для складних інженерних конструкцій. Нестаціонарні взаємозв'язані процеси тепло- і вологоперенесення часто є визначальними для міцнісних та теплотехнічних характеристик захисних частин будівель, а фізико-хімічні перетворення компонент можуть суттєво впливати на властивості конструктивних елементів, зокрема змінювати параметри приграничного шару [1, 2].

У результаті нерівномірного нагріву середовища (тіла) під впливом градієнта температури відбувається перенесення його компонент - термодифузія (в рідинах – ефект Соре) [2, 3]. При підтриманні постійної різниці температур між окремими частинами середовища внаслідок дифузії в області тіла виникають градієнти концентрації. В стаціонарному випадку (температура і концентрація в кожній точці простору, що займає тіло, не залежить від часу) цей градієнт зрівноважує різницю температур. Це явище є основою одного з методів розділення ізотопів [4], а також термодифузійного розділення нафтових фракцій або отримання чистих речовин та створення композицій з попередньо заданими властивостями у фармакології [5]. Зазначимо, що дифузію в сумішах може викликати не тільки градієнт концентрації, але й градієнт температури [6, 7]. Має місце і зворотній ефект − перенесення тепла внаслідок градієнта концентрації (ефект Дюфора).

При математичному моделюванні процесів тепломасоперенесення використовують як мікро- так і макропідходи [8, 9]. У першому випадку розглядають поведінку окремих частинок і враховують локальну будову середовища. У другому випадку математичний опис процесів тепломасоперенесення спирається на континуальні уявлення механіки суцільного середовища та методи термодинаміки нерівноважних процесів. Тоді без обмежень можна застосовувати існуючий апарат математичної фізики, зокрема, при формулюванні відповідних диференціальних рівнянь.

У роботі досліджуються термодифузійні процеси з урахуванням розпаду мігруючої речовини типу хімічних реакцій або радіоактивного розпаду у двофазній шаруватій смузі з використанням

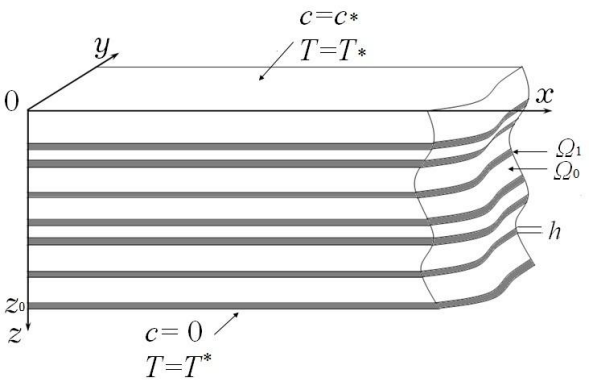

Рис.1 Двофазна смуга товщини z_0, в якій мігрує розпадна домішка.

математичної моделі, побудованої за континуально-термодинамічним підходом [10]. При цьому системи диференціальних рівнянь термодифузії розпадних частинок сформульовані на основі законів збереження і балансових співвідношень для маси, імпульсу та енергії для кожної з фаз, з яких складається тіло [11].

I. Постановка задачі

Розглянемо взаємозв’язані процеси теплопровідності і дифузії розпадної домішки у смузі товщини z_0, що складається з випадково розташованих підшарів двох типів – матриці і включень (рис. 1). Нехай фази в області тіла розташовані за рівномірним законом розподілу. Приймемо, що об’ємна частка матриці v_0 є набагато більшою за об’ємну частку включення v_1.

При нехтуванні конвективною складовою концентрація розпадної домішки $c^{(j)}(z,t)$ та температурне поле $T^{(j)}(z,t)$ ($j=0;1$) в області матриці Ω_0 визначається із системи рівнянь [11]

$$\frac{\partial c^{(0)}(z,t)}{\partial t} = D_0 \frac{\partial^2 c^{(0)}(z,t)}{\partial z^2} + D_T^{(0)} \frac{\partial^2 T^{(0)}(z,t)}{\partial z^2} - l\, c^{(0)}(z,t),\ \ z \in \Omega_0,\ t \in [0;\bar{t}\,], \tag{1,а}$$

$$\frac{\partial T^{(0)}(z,t)}{\partial t} = k_c^{(0)} \frac{\partial^2 c^{(0)}(z,t)}{\partial z^2} + k_0 \frac{\partial^2 T^{(0)}(z,t)}{\partial z^2},\ \ z \in \Omega_0,\ t \in [0;\bar{t}\,], \tag{1,б}$$

а в області включень Ω_1 — з аналогічних рівнянь з іншими коефіцієнтами

$$\frac{\partial c^{(1)}(z,t)}{\partial t} = D_1 \frac{\partial^2 c^{(1)}(z,t)}{\partial z^2} + D_T^{(1)} \frac{\partial^2 T^{(1)}(z,t)}{\partial z^2} - l\, c^{(1)}(z,t),\ \ z \in \Omega_1,\ t \in [0;\bar{t}\,], \tag{2,а}$$

$$\frac{\partial T^{(1)}(z,t)}{\partial t} = k_c^{(1)} \frac{\partial^2 c^{(1)}(z,t)}{\partial z^2} + k_1 \frac{\partial^2 T^{(1)}(z,t)}{\partial z^2},\ \ z \in \Omega_1,\ t \in [0;\bar{t}\,]. \tag{2,б}$$

Тут D_0, D_1 і k_0, k_1 — коефіцієнти дифузії і температуропровідності в областях Ω_0 та Ω_1; $D_T^{(0)}$, $D_T^{(1)}$ і $k_c^{(0)}$, $k_c^{(1)}$ — коефіцієнти взаємозв’язку полів температури і концентрації, l — коефіцієнт інтенсивності розпаду домішкових частинок.

Вважаємо, що на границях тіла підтримуються постійні значення концентрації домішкової речовини та температури:

$$c(z,t)\big|_{z=0} = c_* \equiv const, \qquad c(z,t)\big|_{z=z_0} = 0,$$

$$T(z,t)\big|_{z=0} = T_* \equiv const,\ \ T(z,t)\big|_{z=z_0} = T^* \equiv const. \tag{3}$$

Крім того, прийнято наступні початкові умови:

$$c(z,t)\big|_{t=0} = 0, \qquad T(z,t)\big|_{t=0} = T^*. \tag{4}$$

Припустимо, що на границях розділу областей $z = z_{i1}$ (межа матриця-включення) і $z = z_{i2}$ (межа включення-матриця) виконуються умови рівності хімічних потенціалів $m^{(j)}(z,t)$ та температурного поля [12]

$$m^{(0)}(z,t)\Big|_{z=z_{i1}-0} = m^{(1)}(z,t)\Big|_{z=z_{i1}+0},$$

$$m^{(1)}(z,t)\Big|_{z=z_{i2}-0} = m^{(0)}(z,t)\Big|_{z=z_{i2}+0}; \tag{5}$$

$$T^{(0)}(z,t)\Big|_{z=z_{i1}-0} = T^{(1)}(z,t)\Big|_{z=z_{i1}+0},$$

$$T^{(1)}(z,t)\Big|_{z=z_{i2}-0} = T^{(0)}(z,t)\Big|_{z=z_{i2}+0}. \tag{6,а}$$

Нехай мають місце лінійні рівняння стану для хімічних потенціалів $m^{(j)}$ [9]

$$m^{(j)} - m_0^{(j)} = d_T^{(j)} dT^{(j)} + d^{(j)} c^{(j)}, \qquad j = 0;1,$$

де $m_0^{(j)}$ — хімічні потенціали для чистої речовини (у вихідній конфігурації); $d_T^{(j)} = T_0^{(j)}\left(\partial m^{(j)} \big/ \partial T^{(j)}\right)_{(0)}$, $d^{(j)} = \left(\partial m^{(j)} \big/ \partial c^{(j)}\right)_{(0)}$ — матеріальні характеристики системи, $dT^{(j)} = T^{(j)} - T_0^{(j)}$. Враховуючи (6,а), умови контакту (5) для концентрацій набудуть вигляду

$$d^{(0)}c^{(0)}\Big|_{z_{i1}} = d^{(1)}c^{(1)}\Big|_{z_{i1}} + \left(d_T^{(1)} - d_T^{(0)}\right)T^{(1)}\Big|_{z_{i1}},\quad d^{(1)}c^{(1)}\Big|_{z_{i2}} = d^{(0)}c^{(0)}\Big|_{z_{i2}} + \left(d_T^{(0)} - d_T^{(1)}\right)T^{(0)}\Big|_{z_{i2}} \qquad (7,а)$$

Умови контакту для потоків тепла і маси, враховуючи рівняння (1) і (2), можна подати у вигляді

$$\varkappa_{c1}^{(0)}\frac{\partial c^{(0)}}{\partial z}\Big|_{z_{i1}} = \varkappa_{c1}^{(1)}\frac{\partial c^{(1)}}{\partial z}\Big|_{z_{i1}} + \varkappa_{T1}\frac{\partial T^{(1)}}{\partial z}\Big|_{z_{i1}},\qquad \varkappa_{c2}^{(1)}\frac{\partial c^{(1)}}{\partial z}\Big|_{z_{i2}} = \varkappa_{c2}^{(0)}\frac{\partial c^{(0)}}{\partial z}\Big|_{z_{i2}} + \varkappa_{T2}\frac{\partial T^{(0)}}{\partial z}\Big|_{z_{i2}}; \qquad (7б)$$

$$\varkappa_{T1}^{(0)}\frac{\partial T^{(0)}}{\partial z}\Big|_{z_{i1}} = \varkappa_{T1}^{(1)}\frac{\partial T^{(1)}}{\partial z}\Big|_{z_{i1}} + \varkappa_{c1}\frac{\partial c^{(1)}}{\partial z}\Big|_{z_{i1}},\qquad \varkappa_{T2}^{(1)}\frac{\partial T^{(1)}}{\partial z}\Big|_{z_{i2}} = \varkappa_{T2}^{(0)}\frac{\partial T^{(0)}}{\partial z}\Big|_{z_{i2}} + \varkappa_{c2}\frac{\partial c^{(0)}}{\partial z}\Big|_{z_{i2}}, \qquad (6,б)$$

де $\varkappa_{c1}^{(0)} = \dfrac{D_0}{D_T^{(0)}} - \dfrac{k_c^{(0)}}{k_0}$, $\varkappa_{c1}^{(1)} = \dfrac{\rho_1}{\rho_0}\left(\dfrac{D_1}{D_T^{(0)}} - \dfrac{C_V^{(1)}\kappa_c^{(1)}}{C_V^{(0)}\kappa_0}\right)$, $\varkappa_{T1} = \dfrac{\rho_1}{\rho_0}\left(\dfrac{D_T^{(1)}}{D_T^{(0)}} - \dfrac{C_V^{(1)}\kappa_1}{C_V^{(0)}\kappa_0}\right)$, $\varkappa_{c2}^{(1)} = \dfrac{D_1}{D_T^{(1)}} - \dfrac{\kappa_c^{(1)}}{\kappa_1}$, $\varkappa_{c2}^{(0)} = \dfrac{\rho_0}{\rho_1}\left(\dfrac{D_0}{D_T^{(1)}} - \dfrac{C_V^{(0)}\kappa_c^{(0)}}{C_V^{(1)}\kappa_1}\right)$, $\varkappa_{T2} = \dfrac{\rho_0}{\rho_1}\left(\dfrac{D_T^{(0)}}{D_T^{(1)}} - \dfrac{C_V^{(0)}\kappa_0}{C_V^{(1)}\kappa_1}\right)$, $\varkappa_{T1}^{(0)} = \dfrac{D_T^{(0)}}{D_0} - \dfrac{\kappa_0}{\kappa_c^{(0)}}$, $\varkappa_{T2}^{(1)} = \dfrac{D_T^{(1)}}{D_1} - \dfrac{\kappa_1}{\kappa_c^{(1)}}$, $\varkappa_{T1}^{(1)} = \dfrac{\rho_1}{\rho_0}\left(\dfrac{D_T^{(1)}}{D_0} - \dfrac{C_V^{(1)}\kappa_1}{C_V^{(0)}\kappa_c^{(0)}}\right)$, $\varkappa_{c1} = \dfrac{\rho_1}{\rho_0}\left(\dfrac{D_1}{D_0} - \dfrac{C_V^{(1)}\kappa_c^{(1)}}{C_V^{(0)}\kappa_c^{(0)}}\right)$, $\varkappa_{T2}^{(0)} = \dfrac{\rho_0}{\rho_1}\left(\dfrac{D_T^{(0)}}{D_1} - \dfrac{C_V^{(0)}\kappa_0}{C_V^{(1)}\kappa_c^{(1)}}\right)$, $\varkappa_{c2} = \dfrac{\rho_0}{\rho_1}\left(\dfrac{D_0}{D_1} - \dfrac{C_V^{(0)}\kappa_c^{(0)}}{C_V^{(1)}\kappa_c^{(1)}}\right)$, ρ_j — густина фази j, $C_V^{(j)}$ — питома теплоємність при постійному об'ємі фази j ($j = 0; 1$).

II. Система інтегро-диференціальних рівнянь, еквівалентна крайовій задачі

Враховуючи стрибки функції концентрації та похідних від концентрації та температури на границях контакту $z = z_{i1}$ і $z = z_{i2}$, а також рівність температур на цих же поверхнях, систему рівнянь тепломасопереносу в цілому тілі, використовуючи апарат теорії узагальнених функцій, можна подати як [13, 14]

$$L_1(z,t)\left[c(z,t);T(z,t)\right] \equiv \frac{\partial c}{\partial t} - \sum_{j=0}^{1}\sum_{l=1}^{n_j} D_j h_{lj}(z)\left\{\frac{\partial^2 c}{\partial z^2}\right\} + l\,c -$$

$$- \sum_{j=0}^{1}\sum_{l=1}^{n_j} \bar{D}_T^{(j)} h_{lj}(z)\left\{\frac{\partial^2 T}{\partial z^2}\right\} - \sum_{i=1}^{n_1}\left(\left[\frac{\partial c}{\partial z}\right]_{z_{i1}} d\left(z - z_{i1}\right) - \left[\frac{\partial c}{\partial z}\right]_{z_{i2}} d\left(z - z_{i2}\right) -\right.$$

$$\left. - \left[\frac{\partial T}{\partial z}\right]_{z_{i1}} d\left(z - z_{i1}\right) - \left[\frac{\partial T}{\partial z}\right]_{z_{i2}} d\left(z - z_{i2}\right) - [c]_{z_{i1}} d'\left(z - z_{i1}\right) - [c]_{z_{i2}} d'\left(z - z_{i2}\right)\right) = 0, \qquad (8,а)$$

$$L_2(z,t)\left[c(z,t);T(z,t)\right] \equiv \frac{\partial T}{\partial t} - \sum_{j=0}^{1}\sum_{l=1}^{n_j} \bar{\kappa}_c^{(j)} \eta_{lj}(z)\left\{\frac{\partial^2 c}{\partial z^2}\right\} -$$

$$-\sum_{j=0}^{1}\sum_{l=1}^{n_j}\kappa_j\eta_{lj}(z)\left\{\frac{\partial^2 T}{\partial z^2}\right\}-\sum_{i=1}^{n_1}\left(\left[\frac{\partial c}{\partial z}\right]_{z_{i1}}\delta(z-z_{i1})-\left[\frac{\partial c}{\partial z}\right]_{z_{i2}}\delta(z-z_{i2})-\right.$$

$$\left.-\left[\frac{\partial T}{\partial z}\right]_{z_{i1}}\delta(z-z_{i1})-\left[\frac{\partial T}{\partial z}\right]_{z_{i2}}\delta(z-z_{i2})-[c]_{z_{i1}}\delta'(z-z_{i1})-[c]_{z_{i2}}\delta'(z-z_{i2})\right)=0, \qquad (8,б)$$

де $\{..\}$ — області неперервності функції, $[..]_{z_i}$ — стрибок функції в точці z_i, $h_{lj}(z)=\begin{cases}1, z\in\Omega_{lj},\\ 0, z\notin\Omega_{lj}\end{cases}$ — випадкова функція «структури» [8], Ω_{lj} — l-тий шар фази j, $\bigcup_{l=1}^{n_j}\Omega_{lj}=\Omega_j$; n_j — кількість шарів фази j.

В системі рівнянь (8) додамо і віднімемо детерміновані оператори

$$L_1^{(0)}(z,t)=\frac{\partial_c}{\partial t}-D_0\frac{\partial_c^2}{\partial z^2}-D_T^{(0)}\frac{\partial_T^2}{\partial z^2}+\lambda,$$

$$L_2^{(0)}(z,t)=\frac{\partial_T}{\partial t}-\kappa_c^{(0)}\frac{\partial_c^2}{\partial z^2}-\kappa_0\frac{\partial_T^2}{\partial z^2}.$$

Тоді позначивши $L_s^{(j)}(z)=L_j^{(0)}(z,t)-L_j(z,t)$ ($j=1;2$), отримаємо таку систему взаємозв'язаних диференціальних рівнянь

$$L_1^{(0)}(z,t)\left[c(z,t);T(z,t)\right]=L_s^{(1)}(z)\left[c(z,t);T(z,t)\right],$$

$$L_2^{(0)}(z,t)\left[c(z,t);T(z,t)\right]=L_s^{(2)}(z)\left[c(z,t);T(z,t)\right]. \qquad (9)$$

Трактуючи неоднорідність середовища як внутрішні джерела, крайову задачу (9), (3), (4) зводимо до еквівалентної системи інтегро-диференціальних рівнянь

$$c(z,t)=c_0(z,t)+\int_0^t\int_0^{z_0}G_1(z,z',t,t')L_s^{(1)}\left[c(z',t');T(z',t')\right]dz'dt',$$

$$T(z,t)=T_0(z,t)+\int_0^t\int_0^{z_0}G_2(z,z',t,t')L_s^{(2)}\left[c(z',t');T(z',t')\right]dz'dt', \qquad (10)$$

де $c_0(z,t)$, $T_0(z,t)$ — розв'язки однорідної задачі; $G_1(z,z',t,t')$, $G_2(z,z',t,t')$ — функції Гріна задачі (9), (3), (4). А саме:

$$c_0(z,t)=c_*\left(1-\frac{z}{z_0}\right)-\frac{c_*\lambda\kappa_0}{D_0\kappa_0-D_T^{(0)}\kappa_c^{(0)}}\left[1-\frac{z}{z_0}-\frac{sh\eta(z_0-z)}{sh\,\eta z_0}\right]-$$

$$-\frac{2}{z_0}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\sin y_n z}{y_n(s_1-s_2)}\left\{\left[c_*s_1+P_1+\frac{P_2}{s_1}\right]e^{s_1t}-\left[c_*s_2+P_1+\frac{P_2}{s_2}\right]e^{s_2t}\right\}, \qquad (11,а)$$

$$T_0(z,t)=T^*+\left(T_*-T^*\right)\left(1-\frac{z}{z_0}\right)+\frac{c_*\lambda\kappa_c^{(0)}}{D_0\kappa_0-D_T^{(0)}\kappa_c^{(0)}}\left[1-\frac{z}{z_0}-\frac{sh\eta(z_0-z)}{sh\,\eta z_0}\right]-$$

$$-\frac{2}{z_0}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\sin y_n z}{y_n(s_1-s_2)}\left\{\left[\left(T_*-T^*\right)s_1+P_1'-\frac{P_2'}{s_1}\right]e^{s_1t}-\left[\left(T_*-T^*\right)s_2+P_1'-\frac{P_2'}{s_2}\right]e^{s_2t}\right\}, \qquad (11,б)$$

$$G_1(z,z',t,t')=\theta(t-t')\sum_{n=1}^{\infty}\frac{2}{n\pi}\frac{\sin y_n z'}{s_1-s_2}\sin y_n z\left\{\left[s_1+A_1\right]e^{s_1(t-t')}-\left[s_2+A_1\right]e^{s_2(t-t')}\right\}, \qquad (12,а)$$

$$G_2(z,z',t,t')=\theta(t-t')\sum_{n=1}^{\infty}\frac{2}{n\pi}\frac{\sin y_n z'}{s_1-s_2}\sin y_n z\left\{\left[s_1+A_2\right]e^{s_1(t-t')}-\left[s_2+A_2\right]e^{s_2(t-t')}\right\}. \qquad (12,б)$$

Тут $y_n = \frac{n\pi}{z_0}$, $\eta = \sqrt{\lambda\kappa_0}\Big/\sqrt{D_0\kappa_0 - D_T^{(0)}\kappa_c^{(0)}}$;
$P_1 = \lambda c_* + \left[\kappa_0 c_* - D_T^{(0)}\left(T_* - T^*\right)\right]y_n^2$, $P_2 = c_*\lambda\kappa_0 y_n^2$,
$P_1' = \lambda\left(T_* - T^*\right) + \left[D_0\left(T_* - T^*\right) - \kappa_c^{(0)}c_*\right]y_n^2$,
$P_2' = c_*\lambda\kappa_c^{(0)}y_n^2$, $A_1 = \left[\kappa_0 - D_T^{(0)}\right]y_n^2$,
$A_2 = \left[D_0 - \kappa_c^{(0)}\right]y_n^2 + \quad + \lambda$; s_1, s_2 — розв'язки квадратного рівняння $s^2 + \zeta_1 s + \zeta_2 = 0$, тут
$\zeta_1 = \left(D_0 + \kappa_0\right)y_n^2 + \lambda$,
$\zeta_2 = \left[D_0\kappa_0 - D_T^{(0)}\kappa_c^{(0)}\right]y_n^4 + \lambda\kappa_0 y_n^2$.

Зазначимо, що для того, щоб ряди в (11) були збіжними, корені s_1 і s_2 повинні бути від'ємними, тобто

$$s_{1,2} = \frac{1}{2}\left\{-l - (D_0 + k_0)y_n^2 \pm \sqrt{l^2 + 2l(D_0 - k_0)y_n^2 + \left[(D_0 - k_0)^2 + 4D_T^{(0)}k_c^{(0)}\right]y_n^4}\right\} < 0$$

Звідки випливає умова на обмеження коефіцієнтів

$$D_0\kappa_0 > D_T^{(0)}\kappa_c^{(0)}. \qquad (13)$$

Умову (13) потрібно враховувати під час комп'ютерного моделювання процесу термодифузії розпадної домішки, особливо під час задання вхідних параметрів.

III. Усереднення за ансамблем конфігурацій фаз

Розв'язок системи інтегро-диференціальних рівнянь (10) знайдено методом послідовних наближень у вигляді рядів Неймана, перші два члена яких мають вигляд

$$c(z,t) \approx c_0 + \int_0^t\int_0^{z_0} G_1(z,z',t,t')\sum_{l=1}^{n_1}\eta_{l1}(z')\left\{\left(D_1 - D_0\right)\frac{\partial^2 c_0}{\partial z'^2} + \left(D_T^{(1)} - D_T^{(0)}\right)\frac{\partial^2 T_0}{\partial z'^2}\right\}dz'dt', \qquad (14,а)$$

$$T(z,t) \approx T_0 + \int_0^t\int_0^{z_0} G_2(z,z',t,t')\sum_{l=1}^{n_1}\eta_{l1}(z')\left\{\left(\kappa_c^{(1)} - \kappa_c^{(0)}\right)\frac{\partial^2 c_0}{\partial z'^2} + \left(\kappa_1 - \kappa_0\right)\frac{\partial^2 T_0}{\partial z'^2}\right\}dz'dt'. \qquad (14,б)$$

Усереднимо вирази (14) за ансамблем конфігурацій фаз з рівномірною функцією розподілу [14]. Враховуючи, що випадковою функцією є тільки функція «структури» $\eta_{l1}(z')$, отримаємо наступні вирази для визначення усереднених полів концентрації розпадної домішки та температури

$$\left\langle c(z,t)\right\rangle_{conf} \approx c_0 + \int_0^t\left[\frac{\nu_1}{h}\int_0^h z'G_1(z,z',t,t')\left\{\left(D_1 - D_0\right)\frac{\partial^2 c_0}{\partial z'^2} + \left(D_T^{(1)} - D_T^{(0)}\right)\frac{\partial^2 T_0}{\partial z'^2}\right\}dz' + \right.$$
$$\left. + \nu_1\int_h^{z_0} G_1(z,z',t,t')\left\{\left(D_1 - D_0\right)\frac{\partial^2 c_0}{\partial z'^2} + \left(D_T^{(1)} - D_T^{(0)}\right)\frac{\partial^2 T_0}{\partial z'^2}\right\}dz'\right]dt', \qquad (15,а)$$

$$\left\langle T(z,t)\right\rangle_{conf} \approx T_0 + \int_0^t\left[\frac{\nu_1}{h}\int_0^h z'G_2(z,z',t,t')\left\{\left(\kappa_c^{(1)} - \kappa_c^{(0)}\right)\frac{\partial^2 c_0}{\partial z'^2} + \left(\kappa_1 - \kappa_2\right)\frac{\partial^2 T_0}{\partial z'^2}\right\}dz' + \right.$$
$$\left. + \nu_1\int_h^{z_0} G_2(z,z',t,t')\left\{\left(\kappa_c^{(1)} - \kappa_c^{(0)}\right)\frac{\partial^2 c_0}{\partial z'^2} + \left(\kappa_1 - \kappa_0\right)\frac{\partial^2 T_0}{\partial z'^2}\right\}dz'\right]dt', \qquad (15,б)$$

де h — характерна (середня) товщина включень.

Підставивши вирази для функцій Гріна (12) та відповідних полів в однорідному тілі (11) у формули (15), отримаємо вирази для усереднених за ансамблем конфігурацій фаз полів концентрації розпадної домішкової речовини

$$\langle c(z,t)\rangle_{conf} = c_0(z,t) - \frac{2\nu_1}{hz_0}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\sin y_n z}{s_{1n}-s_{2n}}\left\{\frac{c_*\eta^4 D_k}{sh\,\eta z_0}\left[\frac{A_n^1}{h(\eta^2+y_n^2)}+hA_n^2\right]\left(\left(1+\frac{A_1}{s_{1n}}\right)\left[e^{s_{1n}t}-1\right]-\right.\right.$$

$$\left.-\left(1+\frac{A_1}{s_{2n}}\right)\left[e^{s_{2n}t}-1\right]\right)+\frac{y_nB_n^1+hB_n^2}{z_0(s_{1n}-s_{2n})}\left[Q_1(s_{1n}+A_1)te^{s_{1n}t}+Q_2(s_{2n}+A_1)te^{s_{2n}t}-\right.$$

$$\left.-\frac{e^{s_{1n}t}-e^{s_{2n}t}}{s_{1n}-s_{2n}}\left\{Q_1(s_{2n}+A_1)+Q_2(s_{1n}+A_1)\right\}\right]+\frac{1}{z_0}\sum_{\substack{k=1\\k\neq n}}^{\infty}\frac{y_k(R_{kn}^1+hR_{kn}^2)}{s_{1k}-s_{2k}}\left[Q_1\frac{s_{1n}+A_1}{s_{1k}-s_{1n}}\left(e^{s_{1k}t}-e^{s_{1n}t}\right)-\right.$$

$$\left.\left.-Q_2\frac{s_{1n}+A_1}{s_{2k}-s_{1n}}\left(e^{s_{2k}t}-e^{s_{1n}t}\right)-Q_1\frac{s_{2n}+A_1}{s_{1k}-s_{2n}}\left(e^{s_{1k}t}-e^{s_{2n}t}\right)+Q_2\frac{s_{2n}+A_1}{s_{2k}-s_{2n}}\left(e^{s_{2k}t}-e^{s_{2n}t}\right)\right]\right\} \qquad (16,\text{а})$$

та температури

$$\langle T(z,t)\rangle_{conf} = T_0(z,t) - \frac{2\nu_1}{hz_0}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\sin y_n z}{s_{1n}-s_{2n}}\left\{\frac{c_*\eta^4\overline{\kappa}}{sh\,\eta z_0}\left[\frac{A_n^1}{h(\eta^2+y_n^2)}+hA_n^2\right]\left(\left(1+\frac{A_2}{s_{1n}}\right)\left[e^{s_{1n}t}-1\right]-\right.\right.$$

$$\left.-\left(1+\frac{A_2}{s_{2n}}\right)\left[e^{s_{2n}t}-1\right]\right)+\frac{y_nB_n^1+hB_n^2}{z_0(s_{1n}-s_{2n})}\left[\overline{Q}_1(s_{1n}+A_2)te^{s_{1n}t}+\overline{Q}_2(s_{2n}+A_2)te^{s_{2n}t}-\right.$$

$$\left.-\frac{e^{s_{1n}t}-e^{s_{2n}t}}{s_{1n}-s_{2n}}\left\{\overline{Q}_1(s_{2n}+A_2)+\overline{Q}_2(s_{1n}+A_2)\right\}\right]+\frac{1}{z_0}\sum_{\substack{k=1\\k\neq n}}^{\infty}\frac{y_k(R_{kn}^1+hR_{kn}^2)}{s_{1k}-s_{2k}}\left[\overline{Q}_1\frac{s_{1n}+A_2}{s_{1k}-s_{1n}}\left(e^{s_{1k}t}-e^{s_{1n}t}\right)-\right.$$

$$\left.\left.-\overline{Q}_2\frac{s_{1n}+A_2}{s_{2k}-s_{1n}}\left(e^{s_{2k}t}-e^{s_{1n}t}\right)-\overline{Q}_1\frac{s_{2n}+A_2}{s_{1k}-s_{2n}}\left(e^{s_{1k}t}-e^{s_{2n}t}\right)+\overline{Q}_2\frac{s_{2n}+A_2}{s_{2k}-s_{2n}}\left(e^{s_{2k}t}-e^{s_{2n}t}\right)\right]\right\}, \qquad (16,\text{б})$$

де $\overline{\kappa}=\kappa_c^{(1)}-\kappa_c^{(0)}\kappa_1/\kappa_0$, $D_k=D_1-D_0-\frac{\kappa_c^{(0)}}{\kappa_0}(D_T^{(1)}-D_T^{(0)})$,

$$Q_1=(D_1-D_0)\left[c_*s_1+P_1+\frac{P_2}{s_1}\right]+\left(D_T^{(1)}-D_T^{(0)}\right)\left[(T_*-T^*)s_1+P_1'-\frac{P_2'}{s_1}\right],$$

$$Q_2=(D_1-D_0)\left[c_*s_2+P_1+\frac{P_2}{s_2}\right]+\left(D_T^{(1)}-D_T^{(0)}\right)\left[(T_*-T^*)s_2+\ +P_1'-\frac{P_2'}{s_2}\right],$$

$$\overline{Q}_1=\left(\kappa_c^{(1)}-\kappa_c^{(0)}\right)\left[c_*s_1+P_1+\frac{P_2}{s_1}\right]+\left(\kappa_1-\kappa_0\right)\left[(T_*-T^*)s_1+P_1'-\frac{P_2'}{s_1}\right],\ \overline{Q}_2=\left(\kappa_c^{(1)}-\kappa_c^{(0)}\right)\times$$

$$\times\left[c_*s_2+P_1+\frac{P_2}{s_2}\right]+\left(\kappa_1-\kappa_0\right)\left[(T_*-T^*)s_2+P_1'-\frac{P_2'}{s_2}\right],\ A_n^1=\frac{2\eta y_n ch\,\eta z_0}{\eta^2+y_n^2}+\sin y_nh\left\{\frac{y_n^2-\eta^2}{y_n^2+\eta^2}\times\right.$$

$$\left.\times sh\,\eta(z_0-h)-\eta h\,ch\,\eta(z_0-h)\right\}-y_n\cos y_nh\left\{h\,sh\,\eta(z_0-h)+\frac{2\eta}{\eta^2+y_n^2}ch\,\eta(z_0-h)\right\},$$

$$A_n^2=\frac{\eta\sin y_nh}{\eta^2+y_n^2}ch\,\eta(z_0-h)+\frac{y_n\cos y_nh}{\eta^2+y_n^2}sh\,\eta(z_0-h)\quad,\ B_n^1=h^2+\frac{1}{2y_n^2}-\frac{h}{y_n}\sin(2y_nh)\ -\frac{1}{2y_n^2}\cos(2y_nh),$$

$$B_n^2=y_n(z_0-h)+\frac{1}{2}\sin(2y_nh),$$

$$R_{kn}^1=\frac{1}{(y_k+y_n)^2}-\frac{1}{(y_k-y_n)^2}+\frac{\cos(y_k-y_n)h}{(y_k-y_n)^2}-\frac{\cos(y_k+y_n)h}{(y_k+y_n)^2}+h\frac{\sin(y_k-y_n)h}{y_k-y_n}-\ h\frac{\sin(y_k+y_n)h}{y_k+y_n},$$

$$R_{kn}^2=\frac{\sin(y_k+y_n)h}{y_k+y_n}-\frac{\sin(y_k-y_n)h}{y_k-y_n};\ s_{1n,2n}\equiv s_{1,2},\ s_{1k,2k}\ \text{— вирази}\ s_{1,2},\ \text{в яких}\ n\ \text{замінено на}\ k.$$

IV. Природна безрозмірна форма

Структура рівнянь (1)-(2) дозволяє введення природної безрозмірної форми [15]. Використання безрозмірних змінних

$$\tau = \lambda t, \quad \xi = \sqrt{\frac{\lambda}{D_0}}z, \tag{17}$$

де коефіцієнт переходу до нової часової змінної λ має розмірність $[c^{-1}]$, стискає часову вісь та розтягує просторову.

Введення таких змінних особливо важливе для математичного опису дифузійних процесів, які відносяться до повільних фізичних процесів. Часи їх протікання (в секундах) є великими в числовому вимірі, а характерні довжини при цьому вимірюються в метрах. Тоді використання змінних (17) нівелює цю проблему.

Зокрема, при комп'ютерних розрахунках перехід до змінних (17) дозволяє вирішити проблему малості коефіцієнтів дифузії. Для прикладу, значення коефіцієнта дифузії вуглецю в нітроцементованій сталі становить $(0,33 \div 1,45)\cdot 10^{-11}$ м^2/с [16].

Зазначимо, що системи диференціальних рівнянь (1)-(2) у безрозмірних змінних (17) набувають вигляду:

$$\frac{\partial c^{(0)}(\xi,\tau)}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 c^{(0)}(\xi,\tau)}{\partial \xi^2} + \overline{D}_T^{(0)} \frac{\partial^2 T^{(0)}(\xi,\tau)}{\partial \xi^2} - c^{(0)}(\xi,\tau),\ \xi \in \overline{\Omega}_0,\ \tau \in [0;\tilde{t}],$$

$$\frac{\partial T^{(0)}(\xi,\tau)}{\partial \tau} = \overline{\kappa}_c^{(0)} \frac{\partial^2 c^{(0)}(\xi,\tau)}{\partial \xi^2} + \overline{\kappa}_0 \frac{\partial^2 T^{(0)}(\xi,\tau)}{\partial \xi^2},\ \xi \in \overline{\Omega}_0,\ \tau \in [0;\tilde{t}],$$

$$\frac{\partial c^{(1)}(\xi,\tau)}{\partial \tau} = \overline{D}_1 \frac{\partial^2 c^{(1)}(\xi,\tau)}{\partial \xi^2} + \overline{D}_T^{(1)} \frac{\partial^2 T^{(1)}(\xi,\tau)}{\partial \xi^2} - c^{(1)}(\xi,\tau),\ \xi \in \overline{\Omega}_1,\ \tau \in [0;\tilde{t}],$$

$$\frac{\partial T^{(1)}(\xi,\tau)}{\partial \tau} = \overline{\kappa}_c^{(1)} \frac{\partial^2 c^{(1)}(\xi,\tau)}{\partial \xi^2} + \overline{\kappa}_1 \frac{\partial^2 T^{(1)}(\xi,\tau)}{\partial \xi^2},\ \xi \in \overline{\Omega}_1,\ \tau \in [0;\tilde{t}],$$

Крайові умови (3)-(4) зводяться до форми

$$c(\xi,\tau)\big|_{\xi=0} = c_*,\quad c(\xi,\tau)\big|_{\xi=\xi_0} = 0,\quad T(\xi,\tau)\big|_{\xi=0} = T_*,\quad T(\xi,\tau)\big|_{\xi=\xi_0} = T^*;\ c(\xi,\tau)\big|_{\tau=0} = 0,\ T(\xi,\tau)\big|_{\tau=0} = T^*,$$

а контактні умови (6б), (7) є наступними

$$d^{(0)}c^{(0)}\Big|_{\xi=\xi_{i1}} = d^{(1)}c^{(1)}\Big|_{\xi=\xi_{i1}} + \left(d_T^{(1)} - d_T^{(0)}\right)T^{(1)}\Big|_{\xi=\xi_{i1}},$$

$$d^{(1)}c^{(1)}\Big|_{\xi=\xi_{i2}} = d^{(0)}c^{(0)}\Big|_{\xi=\xi_{i2}} + \left(d_T^{(0)} - d_T^{(1)}\right)T^{(0)}\Big|_{\xi=\xi_{i2}};$$

$$\aleph_{c1}^{(0)} \frac{\partial c^{(0)}}{\partial \xi}\Big|_{\xi_{i1}} = \aleph_{c1}^{(1)} \frac{\partial c^{(1)}}{\partial \xi}\Big|_{\xi_{i1}} + \aleph_{T1} \frac{\partial T^{(1)}}{\partial \xi}\Big|_{\xi_{i1}},\quad \aleph_{c2}^{(1)} \frac{\partial c^{(1)}}{\partial \xi}\Big|_{\xi_{i2}} = \aleph_{c2}^{(0)} \frac{\partial c^{(0)}}{\partial \xi}\Big|_{\xi_{i2}} + \aleph_{T2} \frac{\partial T^{(0)}}{\partial \xi}\Big|_{\xi_{i2}};$$

$$\aleph_{T1}^{(0)} \frac{\partial T^{(0)}}{\partial \xi}\Big|_{\xi_{i1}} = \aleph_{T1}^{(1)} \frac{\partial T^{(1)}}{\partial \xi}\Big|_{\xi_{i1}} + \aleph_{c1} \frac{\partial c^{(1)}}{\partial \xi}\Big|_{\xi_{i1}},\quad \aleph_{T2}^{(1)} \frac{\partial T^{(1)}}{\partial \xi}\Big|_{\xi_{i2}} = \aleph_{T2}^{(0)} \frac{\partial T^{(0)}}{\partial \xi}\Big|_{\xi_{i2}} + \aleph_{c2} \frac{\partial c^{(0)}}{\partial \xi}\Big|_{\xi_{i2}}.$$

Тут $\overline{D}_1 = D_1 / D_0$, $\overline{D}_T^{(0)} = D_T^{(0)} / D_0$, $\overline{D}_T^{(1)} = D_T^{(1)} / D_0$, $\overline{\kappa}_0 = \kappa_0 / D_0$, $\overline{\kappa}_1 = \kappa_1 / D_0$, $\overline{\kappa}_c^{(0)} = \kappa_c^{(0)} / D_0$, $\overline{\kappa}_c^{(1)} = \kappa_c^{(1)} / D_0$, $\xi_0 = (D_0/\lambda)^{1/2} z_0$, $\xi_{ik} = (D_0/\lambda)^{1/2} z_{ik}$ ($k = 1; 2$).

Поля концентрації та температури, а також функції Гріна в однорідному шарі у безрозмірних змінних (17) відповідно до (11), (12) перепишуться у вигляді

$$c_0(x,t) = c_*\left(1 - \frac{x}{x_0}\right) - \frac{c_* \bar{k}_0}{\bar{k}_0 - \bar{D}_T^{(0)} k_c^{(0)}}\left[1 - \frac{x}{x_0} - \frac{sh\bar{h}(x_0 - x)}{sh\bar{h}x_0}\right] -$$

$$- \frac{2}{\xi_0}\sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin \bar{y}_n \xi}{\bar{y}_n(\bar{s}_1 - \bar{s}_2)}\left\{\left[c_*\bar{s}_1 + \overline{P}_1 + \frac{\overline{P}_2}{\bar{s}_1}\right]e^{\bar{s}_1\tau} - \left[c_*\bar{s}_2 + \overline{P}_1 + \frac{\overline{P}_2}{\bar{s}_2}\right]e^{\bar{s}_2\tau}\right\}, \tag{18,a}$$

$$T_0(\xi,\tau) = T^* + \left(T_* - T^*\right)\left(1 - \frac{\xi}{\xi_0}\right) + \frac{c_* \overline{\kappa}_c^{(0)}}{\overline{\kappa}_0 - \overline{D}_T^{(0)}\overline{\kappa}_c^{(0)}}\left[1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{sh\overline{\eta}(\xi_0 - \xi)}{sh\,\overline{\eta}\xi_0}\right] -$$

$$-\frac{2}{\xi_0}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\sin\bar{y}_n\xi}{\bar{y}_n(\bar{s}_1-\bar{s}_2)}\left\{\left[\left(T_*-T^*\right)\bar{s}_1+\overline{P}_1'-\frac{\overline{P}_2'}{\bar{s}_1}\right]e^{\bar{s}_1\tau}-\left[\left(T_*-T^*\right)\bar{s}_2+\overline{P}_1'-\frac{\overline{P}_2'}{\bar{s}_2}\right]e^{\bar{s}_2\tau}\right\}; \qquad (18,б)$$

$$G_1(\xi,\xi',\tau,\tau')=\theta(\tau-\tau')\sum_{n=1}^{\infty}\frac{2}{n\pi}\frac{\sin\bar{y}_n\xi'}{\bar{s}_1-\bar{s}_2}\sin\bar{y}_n\xi\left\{\left[\bar{s}_1+\overline{A}_1\right]e^{\bar{s}_1(\tau-\tau')}-\left[\bar{s}_2+\overline{A}_1\right]e^{\bar{s}_2(\tau-\tau')}\right\},$$

$$G_2(\xi,\xi',\tau,\tau')=\theta(\tau-\tau')\sum_{n=1}^{\infty}\frac{2}{n\pi}\frac{\sin\bar{y}_n\xi'}{\bar{s}_1-\bar{s}_2}\sin\bar{y}_n\xi\left\{\left[\bar{s}_1+\overline{A}_2\right]e^{\bar{s}_1(\tau-\tau')}-\left[\bar{s}_2+\overline{A}_2\right]e^{\bar{s}_2(\tau-\tau')}\right\},$$

де $\bar{y}_n=\frac{n\pi}{\xi_0}$, $\bar{\eta}=\sqrt{\bar{\kappa}_0}\Big/\sqrt{\bar{\kappa}_0-\overline{D}_T^{(0)}\bar{\kappa}_c^{(0)}}$; $\overline{P}_1=c_*+\left[\bar{\kappa}_0c_*-\overline{D}_T^{(0)}\left(T_*-T^*\right)\right]\bar{y}_n^2$, $P_2=c_*\bar{\kappa}_0\bar{y}_n^2$,

$\overline{P}_1'=\left(T_*-T^*\right)+\left[\left(T_*-T^*\right)-\bar{\kappa}_c^{(0)}c_*\right]\bar{y}_n^2$, $\overline{P}_2'=c_*\bar{\kappa}_c^{(0)}\bar{y}_n^2$, $\overline{A}_1=\left[\bar{\kappa}_0-\overline{D}_T^{(0)}\right]\bar{y}_n^2$, $\overline{A}_2=\left[1-\bar{\kappa}_c^{(0)}\right]\bar{y}_n^2+1$;

$$\bar{s}_{1,2}=\frac{1}{2}\left\{-1-(1+\bar{\kappa}_0)\bar{y}_n^2\pm\sqrt{1+2(1-\bar{\kappa}_0)\bar{y}_n^2+\left[(1-\bar{\kappa}_0)^2+4\overline{D}_T^{(0)}\bar{\kappa}_c^{(0)}\right]\bar{y}_n^4}\right\}.$$

Розрахункові формули для усереднених за ансамблем конфігурацій фаз полів концентрації та температури (16) у змінних (17) будуть наступними

$$\left\langle c(\xi,\tau)\right\rangle_{conf}=c_0(\xi,\tau)-\frac{2\nu_1}{\bar{h}\xi_0}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\sin\bar{y}_n\xi}{\bar{s}_{1n}-\bar{s}_{2n}}\left\{\frac{c_*\bar{\eta}^4\overline{D}_k}{sh\,\bar{\eta}\xi_0}\left[\frac{\overline{A}_n^1}{\bar{h}(\bar{\eta}^2+\bar{y}_n^2)}+\bar{h}\overline{A}_n^2\right]\left[\left(1+\frac{\overline{A}_1}{\bar{s}_{1n}}\right)\left[e^{\bar{s}_{1n}\tau}-1\right]-\right.\right.$$

$$\left.-\left(1+\frac{\overline{A}_1}{\bar{s}_{2n}}\right)\left[e^{\bar{s}_{2n}\tau}-1\right]\right)+\frac{\bar{y}_n\overline{B}_n^1+\bar{h}\overline{B}_n^2}{\xi_0(\bar{s}_{1n}-\bar{s}_{2n})}\left[\tilde{Q}_1(\bar{s}_{1n}+\overline{A}_1)\tau e^{\bar{s}_{1n}\tau}+\tilde{Q}_2(\bar{s}_{2n}+\overline{A}_1)\tau e^{\bar{s}_{2n}\tau}-\right.$$

$$\left.\left.-\frac{e^{\bar{s}_{1n}\tau}-e^{\bar{s}_{2n}\tau}}{\bar{s}_{1n}-\bar{s}_{2n}}\left\{\tilde{Q}_1(\bar{s}_{2n}+\overline{A}_1)+\tilde{Q}_2(\bar{s}_{1n}+A_1)\right\}\right]+\frac{1}{\xi_0}\sum_{\substack{k=1\\k\neq n}}^{\infty}\frac{\bar{y}_k(\overline{R}_{kn}^1+\bar{h}\overline{R}_{kn}^2)}{\bar{s}_{1k}-\bar{s}_{2k}}\left[\tilde{Q}_1\frac{\bar{s}_{1n}+\overline{A}_1}{\bar{s}_{1k}-\bar{s}_{1n}}\left(e^{\bar{s}_{1k}\tau}-e^{\bar{s}_{1n}\tau}\right)-\right.\right.$$

$$\left.\left.-\tilde{Q}_2\frac{\bar{s}_{1n}+\overline{A}_1}{\bar{s}_{2k}-\bar{s}_{1n}}\left(e^{\bar{s}_{2k}\tau}-e^{\bar{s}_{1n}\tau}\right)-\tilde{Q}_1\frac{\bar{s}_{2n}+\overline{A}_1}{\bar{s}_{1k}-\bar{s}_{2n}}\left(e^{\bar{s}_{1k}\tau}-e^{\bar{s}_{2n}\tau}\right)+\tilde{Q}_2\frac{\bar{s}_{2n}+\overline{A}_1}{\bar{s}_{2k}-\bar{s}_{2n}}\left(e^{\bar{s}_{2k}\tau}-e^{\bar{s}_{2n}\tau}\right)\right]\right\}, \qquad (19,а)$$

$$\left\langle T(\xi,\tau)\right\rangle_{conf}=T_0(\xi,\tau)-\frac{2\nu_1}{\bar{h}\xi_0}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\sin\bar{y}_n\xi}{\bar{s}_{1n}-\bar{s}_{2n}}\left\{\frac{c_*\bar{\eta}^4\tilde{\kappa}}{sh\,\bar{\eta}\xi_0}\left[\frac{\overline{A}_n^1}{\bar{h}(\bar{\eta}^2+\bar{y}_n^2)}+\bar{h}\overline{A}_n^2\right]\left[\left(1+\frac{\overline{A}}{\bar{s}_{1n}}\right)\left[e^{\bar{s}_{1n}\tau}-1\right]-\right.\right.$$

$$\left.-\left(1+\frac{\overline{A}_2}{\bar{s}_{2n}}\right)\left[e^{\bar{s}_{2n}\tau}-1\right]\right)+\frac{\bar{y}_n\overline{B}_n^1+\bar{h}\overline{B}_n^2}{\xi_0(\bar{s}_{1n}-\bar{s}_{2n})}\left[\tilde{\tilde{Q}}_1(\bar{s}_{1n}+\overline{A}_2)\tau e^{\bar{s}_{1n}\tau}+\tilde{\tilde{Q}}_2(\bar{s}_{2n}+\overline{A}_2)\tau e^{\bar{s}_{2n}\tau}-\right.$$

$$\left.\left.-\frac{e^{\bar{s}_{1n}\tau}-e^{\bar{s}_{2n}\tau}}{\bar{s}_{1n}-\bar{s}_{2n}}\left\{\tilde{\tilde{Q}}_1(\bar{s}_{2n}+\overline{A}_2)+\tilde{\tilde{Q}}_2(\bar{s}_{1n}+A_2)\right\}\right]+\frac{1}{\xi_0}\sum_{\substack{k=1\\k\neq n}}^{\infty}\frac{\bar{y}_k(\overline{R}_{kn}^1+\bar{h}\overline{R}_{kn}^2)}{\bar{s}_{1k}-\bar{s}_{2k}}\left[\tilde{\tilde{Q}}_1\frac{\bar{s}_{1n}+\overline{A}_2}{\bar{s}_{1k}-\bar{s}_{1n}}\left(e^{\bar{s}_{1k}\tau}-e^{\bar{s}_{1n}\tau}\right)-\right.\right.$$

$$\left.\left.-\tilde{\tilde{Q}}_2\frac{\bar{s}_{1n}+\overline{A}_2}{\bar{s}_{2k}-\bar{s}_{1n}}\left(e^{\bar{s}_{2k}\tau}-e^{\bar{s}_{1n}\tau}\right)-\tilde{\tilde{Q}}_1\frac{\bar{s}_{2n}+\overline{A}_2}{\bar{s}_{1k}-\bar{s}_{2n}}\left(e^{\bar{s}_{1k}\tau}-e^{\bar{s}_{2n}\tau}\right)+\tilde{\tilde{Q}}_2\frac{\bar{s}_{2n}+\overline{A}_2}{\bar{s}_{2k}-\bar{s}_{2n}}\left(e^{\bar{s}_{2k}\tau}-e^{\bar{s}_{2n}\tau}\right)\right]\right\}. \qquad (19,б)$$

Тут $\tilde{\kappa}=\bar{\kappa}_c^{(1)}-\bar{\kappa}_c^{(0)}\bar{\kappa}_1/\bar{\kappa}_0$, $\overline{D}_k=\overline{D}_1-1-\frac{\bar{\kappa}_c^{(0)}}{\bar{\kappa}_0}(\overline{D}_T^{(1)}-\overline{D}_T^{(0)})$,

$$\overline{Q}_1=(\overline{D}_1-1)\left[c_*\bar{s}_1+\overline{P}_1+\frac{\overline{P}_2}{\bar{s}_1}\right]+\left(\overline{D}_T^{(1)}-\overline{D}_T^{(0)}\right)\left[(T_*-T^*)\bar{s}_1+\overline{P}_1'-\frac{\overline{P}_2'}{\bar{s}_1}\right],$$

$$\overline{Q}_2=(\overline{D}_1-1)\left[c_*\bar{s}_2+\overline{P}_1+\frac{\overline{P}_2}{\bar{s}_2}\right]+\left(\overline{D}_T^{(1)}-\overline{D}_T^{(0)}\right)\left[(T_*-T^*)\bar{s}_2+\ +\overline{P}_1'-\frac{\overline{P}_2'}{\bar{s}_2}\right],$$

$$\tilde{\tilde{Q}}_1=\left(\bar{\kappa}_c^{(1)}-\bar{\kappa}_c^{(0)}\right)\left[c_*\bar{s}_1+\overline{P}_1+\frac{\overline{P}_2}{\bar{s}_1}\right]+\left(\bar{\kappa}_1-\bar{\kappa}_0\right)\left[(T_*-T^*)\bar{s}_1+\overline{P}_1'-\frac{\overline{P}_2'}{\bar{s}_1}\right],$$

$$\tilde{\tilde{Q}}_2=\left(\bar{\kappa}_c^{(1)}-\bar{\kappa}_c^{(0)}\right)\left[c_*\bar{s}_2+\overline{P}_1+\frac{\overline{P}_2}{\bar{s}_2}\right]+\left(\bar{\kappa}_1-\bar{\kappa}_0\right)\left[(T_*-T^*)\bar{s}_2+\overline{P}_1'-\frac{\overline{P}_2'}{\bar{s}_2}\right],$$

$$\bar{A}_n^1 = \frac{2\bar{\eta}\,\bar{y}_n ch\bar{\eta}x_0}{\bar{\eta}^2+\bar{y}_n^2} + \sin\bar{y}_n\bar{h}\left\{\frac{\bar{y}_n^2-\bar{\eta}^2}{\bar{y}_n^2+\bar{\eta}^2} sh\bar{\eta}(x_0-\bar{h}) - \bar{\eta}\bar{h}\,ch\,\bar{\eta}(x_0-\bar{h})\right\} - \bar{y}_n\cos\bar{y}_n\bar{h}\left\{\bar{h}sh\bar{\eta}(x_0-\bar{h}) + \frac{2\bar{\eta}}{\bar{\eta}^2+\bar{y}_n^2}\times\right.$$

$$\left.\times\, ch\,\bar{\eta}(\xi_0-\bar{h})\right\},$$

$$\bar{A}_n^2 = \frac{\bar{\eta}\sin\bar{y}_n\bar{h}}{\bar{\eta}^2+\bar{y}_n^2} ch\,\bar{\eta}(\xi_0-\bar{h}) + \frac{\bar{y}_n\cos\bar{y}_n\bar{h}}{\bar{\eta}^2+\bar{y}_n^2} sh\,\bar{\eta}(\xi_0-\bar{h}),$$

$$\bar{B}_n^1 = \bar{h}^2 + \frac{1}{2\bar{y}_n^2} - \frac{\bar{h}}{\bar{y}_n}\sin(2\bar{y}_n\bar{h}) - \frac{1}{2\bar{y}_n^2}\cos(2\bar{y}_n\bar{h}), \quad \bar{B}_n^2 = \bar{y}_n(\xi_0-\bar{h}) + \frac{1}{2}\sin(2\bar{y}_n\bar{h}),$$

$$\bar{R}_{kn}^1 = \frac{1}{(\bar{y}_k+\bar{y}_n)^2} - \frac{1}{(\bar{y}_k-\bar{y}_n)^2} + \frac{\cos(\bar{y}_k-\bar{y}_n)\bar{h}}{(\bar{y}_k-\bar{y}_n)^2} - \frac{\cos(\bar{y}_k+\bar{y}_n)\bar{h}}{(\bar{y}_k+\bar{y}_n)^2} + \bar{h}\frac{\sin(\bar{y}_k-\bar{y}_n)\bar{h}}{\bar{y}_k-\bar{y}_n} - \bar{h}\frac{\sin(\bar{y}_k+\bar{y}_n)\bar{h}}{\bar{y}_k+\bar{y}_n},$$

$$\bar{R}_{kn}^2 = \frac{\sin(\bar{y}_k+\bar{y}_n)\bar{h}}{\bar{y}_k+\bar{y}_n} - \frac{\sin(\bar{y}_k-\bar{y}_n)\bar{h}}{\bar{y}_k-\bar{y}_n}; \qquad \bar{h} = (\lambda/D_0)^{1/2}h.$$

Зауважимо, що асимптотичні доданки розв'язків для задачі термодифузії розпадних частинок у двофазній шаруватій смузі співпадають з відповідними асимптотиками розв'язків задачі термодифузії в однорідному шарі.

V. Чисельний аналіз

На основі формул (18) та (19) було розроблено пакет програм для розрахунку полів температури та концентрації в однорідному шарі (тілі без прошарків), усереднених за ансамблем конфігурацій фаз у випадково неоднорідній смузі з рівномірним розподілом шаруватих включень. При цьому розглянуто випадки термодифузії нерозпадної речовини та врахування розпаду мігруючи частинок у кожному модулі пакету.

Для встановлення основних закономірностей процесу термодифузії розпадної речовини проведений порівняльний аналіз розподілів концентрації та температури при змінах коефіцієнтів моделі в широких межах. Під час розрахунку концентрації домішки за базові параметри прийнято наступні значення: $\xi_0 = 10$; $\tau = 1$; $c_* = 0{,}001$; $\bar{\kappa}_0 = 10^5$; $\bar{\kappa}_c^{(0)} = 100$; $\bar{\kappa}_1 = 2\cdot 10^5$; $\bar{\kappa}_c^{(1)} = 50$; $\nu_1 = 0{,}2$;

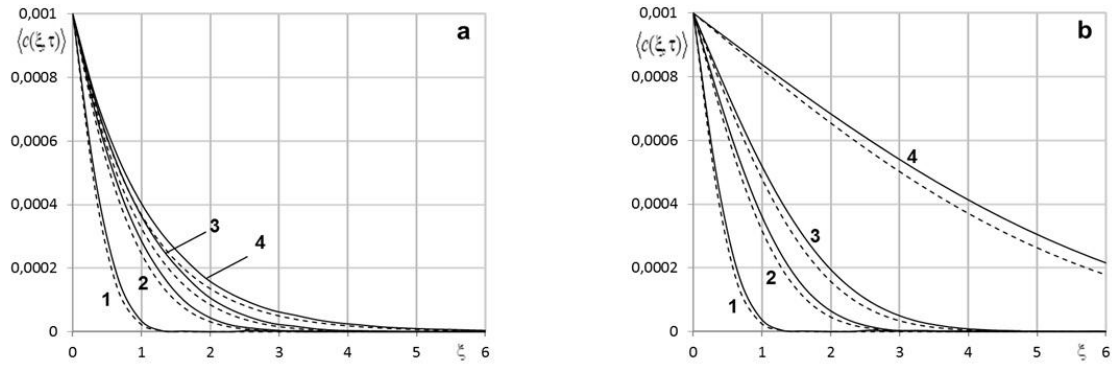

Рис. 2. Концентрація розпадної (a) та нерозпадної (b) домішки у різні моменти часу.

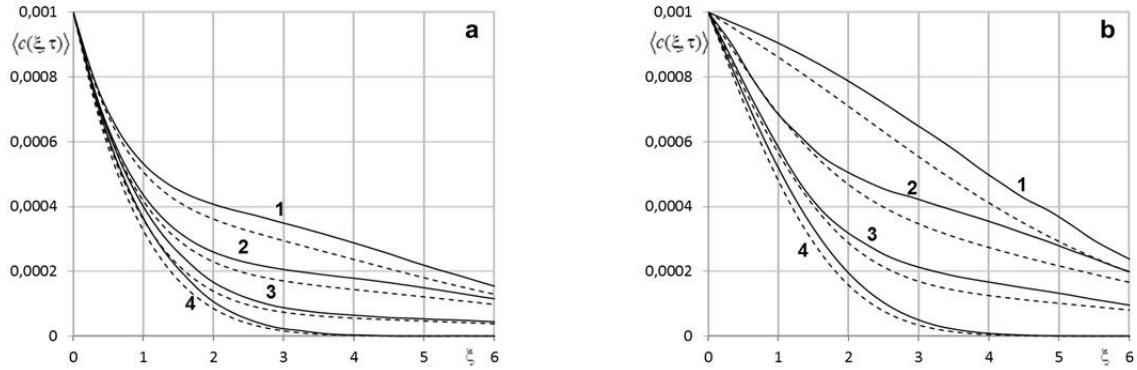

Рис. 3. Концентрація розпадної (a) та нерозпадної (b) домішки для різних значень $\bar{\kappa}_0$.

$\overline{h}=0{,}01$; $\overline{D}_1=0{,}1$; $\overline{D}_T^{(0)}=0{,}001$ (для рис. 2-4) і $\overline{D}_T^{(0)}=10$ (для рис. 5); $\overline{D}_T^{(1)}=0{,}0002$; $T_*=290$ºK; $T^*=280$ºK. Суцільні лінії на рис. 2-4 відповідають концентрації домішкової речовини у неоднорідному тілі, а штрихові лінії – в однорідному, у той час як на рис. 5 суцільними лініями позначено концентрацію розпадної домішки ($\lambda=1$), а штриховими – нерозпадної ($\lambda=0$).

Зазначимо, що при розрахунках значень функцій $c_0(\xi,\tau)$, $\langle c(\xi,\tau)\rangle$, $T_0(\xi,\tau)$, $\langle T(\xi,\tau)\rangle$ обчислення рядів проводились з точністю 10^{-7} (при чому для формул (19) найкраща гладкість кривих досягалась, коли точність обчислень для сум по k і по n була однаковою). Проте при малих значеннях часів ($\tau\le 0{,}1$) для функції концентрації досягнення заданої точності викликало значне накопичення похибки, а тому точність було зменшено до $E_1=E_2=10^{-5}$, що не вплинуло на гладкість відповідних кривих. У той же час зменшення точності розрахунків для часів $\tau>0{,}1$ призводить до суттєвого розкиду даних, що означає недосягнення точності, необхідної для гладкості кривих.

На рис. 2,a проілюстровано залежність концентрації розпадної домішки у різні моменти безрозмірного часу $\tau=0{,}1$; 0,5; 1; 10 (криві 1-4). Для тих самих значень τ наведено концентрацію нерозпадної домішки (рис. 2b). Рис. 3 ілюструє залежність концентрації розпадної (рис. 2,a) та нерозпадної (рис. 2b) домішкової речовини від коефіцієнта температуропровідності матриці $\overline{\kappa}_0=10$; 20; 50; 10^5 (криві 1-4).

На рис. 4 показано залежність концентрації домішки від коефіцієнта взаємозв’язку полів температури $\overline{D}_T^{(0)}=0{,}001$; 2; 5; 10; 15; 20 (криві 1-6). На рис. 5 проілюстровано розподіл концентрації домішки для різних значень об’ємної частки включень $v_1=0{,}05$; 0,1; 0,2; 0,4 (криві 1-4, рис. a) та для різних значень характерної товщини включень $\overline{h}=0{,}01$; 0,02; 0,1 (криві 1-3, рис. b).

Зазначимо, що на концентрації домішки практично не впливають коефіцієнти взаємозв’язку полів концентрації $\overline{\kappa}_c^{(0)}$ (для різних значень змінюється тільки четверта значима цифра) та $\overline{\kappa}_c^{(1)}$ (не змінюється жодна значима цифра в рамках заданої точності), а також коефіцієнт температуропровідності у включенні $\overline{\kappa}_1$. Збільшення коефіцієнта $\overline{D}_T^{(1)}$ зменшує концентрацію як розпадної так і нерозпадної домішки.

Як у випадку домішки, що розпадається, так і у випадку нерозпадної домішки, її концентрація у неоднорідному тілі більша, ніж в однорідному. Врахування процесу розпаду домішки для малих

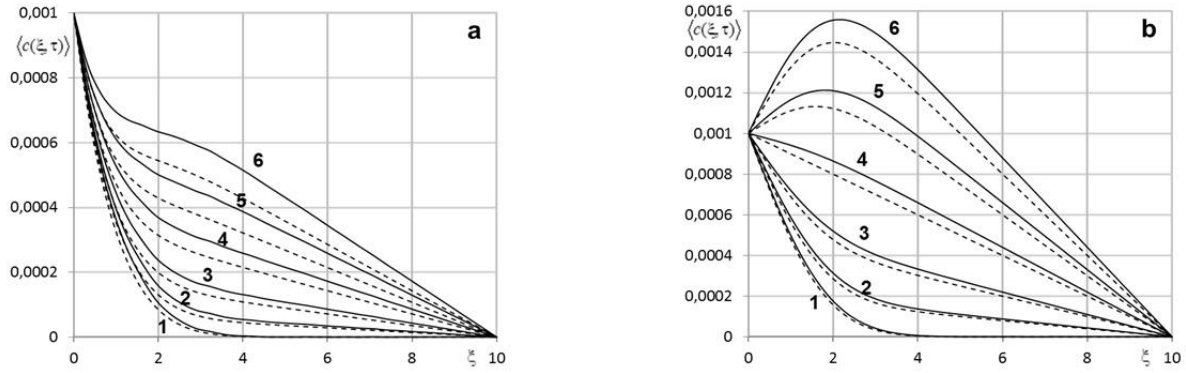

Рис. 4. Концентрація розпадної (a) та нерозпадної (b) домішки для різних значень $\overline{D}_T^{(0)}$

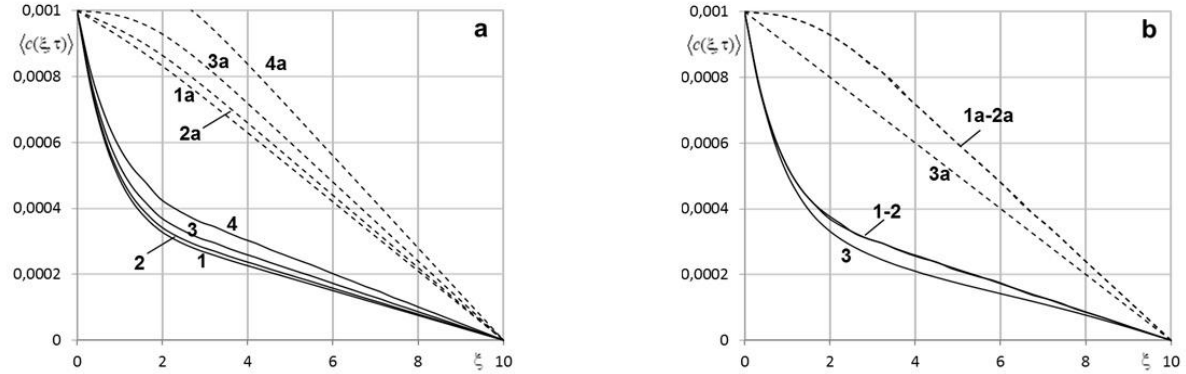

Рис. 5. Концентрація домішки для різних значень v_1 (a) та $\overline{h}$ (b).

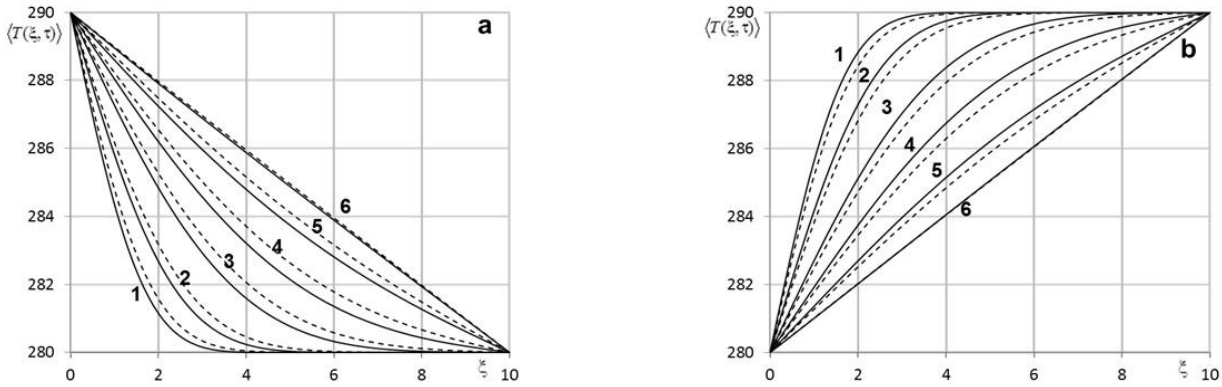

Рис. 6. Температура тіла в різні моменти часу при нагріванні (a) та охолодженні (b) поверхні $\xi = 0$.

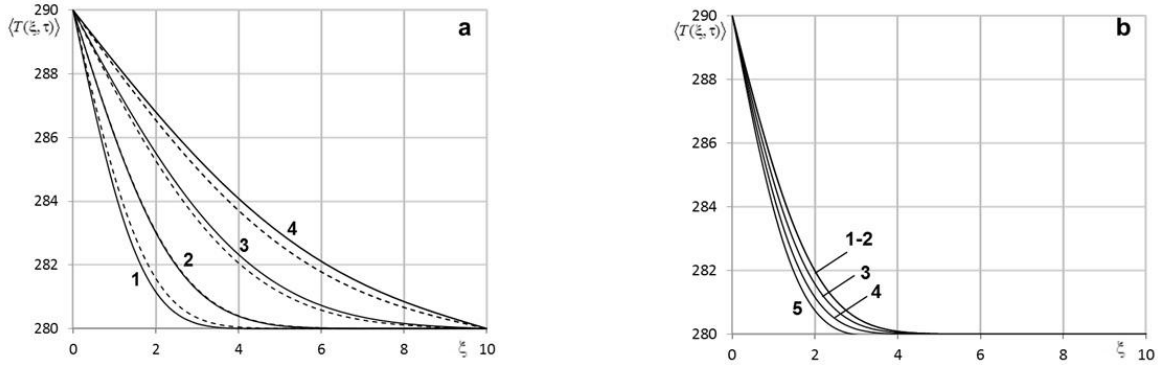

Рис. 7. Температура тіла для різних значень коефіцієнтів $\overline{\kappa}_0$ (a) та $\overline{\kappa}_1$ (b).

часових інтервалів практично не впливає на значення функції концентрації (криві 1,2, рис. 2), але з часом зменшує значення концентрації частинок в тілі і пришвидшує вихід функції на усталений режим (криві 3,4, рис. 2). Збільшення коефіцієнта температуропровідності матриці зменшує концентрацію розпадної та нерозпадної домішки як в однорідному тілі, так і в неоднорідному (рис. 3). При збільшенні коефіцієнта взаємозв'язку $\overline{D}_T^{(0)}$ спостерігається зростання концентрації частинок в тілі, причому для нерозпадної домішки для великих значень цього параметра виникають максимуми концентрації (криві 5-6, рис. 4b). При цьому накопичення домішкових частинок відбувається від поверхні, де діють джерела тепла і маси. Збільшення об'ємної частки включень, як і збільшення відносної товщини прошарків призводить до зростання концентрації як розпадної так і нерозпадної домішки (рис. 5).

Обчислення температури тіла проведемо для таких базових значень параметрів задачі: $\xi_0 = 10$; $\tau = 10^{-5}$; $c_* = 0{,}001$; $\overline{\kappa}_0 = 10^5$; $\overline{\kappa}_c^{(0)} = 100$; $\overline{\kappa}_1 = 2\cdot 10^5$; $\overline{\kappa}_c^{(1)} = 1000$; $\nu_1 = 0{,}2$; $\overline{h} = 0{,}01$; $\overline{D}_1 = 0{,}1$; $\overline{D}_T^{(0)} = 0{,}001$; $\overline{D}_T^{(1)} = 0{,}0002$; $T_* = 290$ºK; $T^* = 280$ºK. На рис. 6 і 7 штриховими лініями позначено температуру в однорідному тілі.

На рис. 6 наведено характерні розподіли температури при нагріванні (рис. a) та охолодженні (рис. b) поверхні $\xi = 0$ для різних часів $\tau = 10^{-5}$; $2\cdot 10^{-5}$; $5\cdot 10^{-5}$; 10^{-4}; $2\cdot 10^{-4}$; $5\cdot 10^{-4}$ (криві 1-6).

Рис. 7 показує залежність температури тіла від коефіцієнтів температуропровідності $\overline{\kappa}_0 = 10^5$; $1{,}5\cdot 10^5$; $5\cdot 10^5$; 10^6 (криві 1-4, рис. a) та $\overline{\kappa}_1 = 10$; 10^3; 10^5; $2\cdot 10^5$; $3\cdot 10^5$ (криві 1-5, рис. b).

Зауважимо, що для функції концентрації домішки і функції температури суттєво відрізняється час виходу на усталений режим як для однорідного так і для неоднорідного тіла (криві 4 на рис. 2a та криві 6 на рис. 6a): різниця складає 5 порядків для безрозмірного часу τ при зазначених параметрах.

Зауважимо, що на розподіл температури не впливають коефіцієнти $\overline{D}_1$, $\overline{D}_T^{(1)}$. При збільшенні об'ємної частки включень відбувається зменшення температури тіла, а значення характерної товщини включень практично не впливає на розподіли температури (спостерігається зміна 5 значимої цифри). Зменшення температури тіла відбувається також і при збільшенні коефіцієнта взаємозв'язку $\overline{\kappa}_c^{(1)}$. Зміни коефіцієнтів $\overline{\kappa}_c^{(0)}$ та $\overline{D}_T^{(0)}$ практично не впливають на характерний розподіл температури тіла (різниця у 5 та 8 значимих цифрах відповідно). На значення температури тіла також практично не впливає початкова концентрація домішки c_* – різниця у 5 значимій цифрі.

Врахування процесу розпаду мігруючих частинок як в однорідному так і в неоднорідному тілі майже не впливає на розподіл температури (змінюються 5-8

значимі цифри), що пояснюється різними швидкостями протікання процесів теплопровідності і дифузії.

Висновки

За допомогою апарату теорії узагальнених функцій контактно-крайова задача термодифузії розпадної речовини у двофазній випадко неоднорідній шаруватій смузі зведена до системи диференціальних рівнянь для тіла в цілому, яка явно враховує стрибки І-го роду випадкового поля концентрації, а також похідних від полів температури та концентрації на границях розділу фаз. Отриманій крайовій задачі поставлена у відповідність система інтегро-диференціальних рівнянь, яка розв’язана методом послідовних ітерацій. Випадкові поля температури і концентрації знайдені у вигляді рядів поставлена у відповідність система інтегро-диференціальних рівнянь, яка розв’язана методом послідовних ітерацій. Випадкові поля температури і концентрації знайдені у вигляді рядів Неймана. Усереднення стохастичних полів проведено за ансамблем конфігурацій фаз з рівномірної функцією розподілу підшарів. При цьому використане припущення про переважаючу об’ємну частку однієї з фаз (матриці).

На основі отриманих розрахункових формул розроблений пакет програм і проведений кількісний та якісний аналіз усереднених полів температури і концентрації мігруючих розпадних частинок залежно від параметрів структури та характеристик матеріалу. Зокрема, показано, що час виходу теплових полів на стаціонарний режим на п’ять порядків менший ніж для полів концентрації, що у подальшому може використовуватись для побудови спрощених моделей термодифузії.

Перспективними у даному напрямку є дослідження взаємозв’язаних теплових і дифузійних полів у багатофазних стохастично неоднорідних тілах за відсутності характерних розмірів включень або наявності базової фази.

Давидок А.Є. – аспірант Інституту прикладних проблем механіки і математики ім. Я. С. Підстригача НАН України; інженер Центру математичного моделювання ІППММ ім. Я. С. Підстригача НАН України;
Чернуха О.Ю. − д.т.н., с.н.с., завідувач відділом математичного моделювання нерівноважних процесів;
Гончарук В.Є. − к.ф.-м.н, с.н.с. Центру математичного моделювання ІППММ ім. Я. С. Підстригача НАН України, доцент кафедри безпеки життєдіяльності Інституту хімії та хімічних технологій Національного університету «Львівська політехніка».

[1] R.A. Sadыkov, Mezhdunarodnaya nauchno-tekhnycheskaya konferentsyya «Teoretycheskye osnovы teplohazosnabzhenyya y ventylyatsyy» (MHSU, Moskva, 2005), S. 115-121.
[2] M. Sorensen, W. Jacobsen, H. Jynsson, Phys. Rev. Lett. 77, 5067 (1996).
[3] D. Reith, F. Moller-Plathe, Journal of Chemical Physics 12(5), 2436 (2000).
[4] D.K. Belashchenko, Yavlenyya perenosa v zhydkykh metallakh y poluprovodnykakh (Atomyzdat, Moskva, 1970).
[5] B.V. Savynыkh, F.M. Humerov, Khymyya y komp'yuternoe modelyrovanye. Butlerovskye soobshchenyya 10, 213 (2002).
[6] A.V. Lыkov, Yu.A. Mykhaylov, Teoryya teplo- y massoperenosa, (Hosэnerhoyzdat, Moskva-Lenynhrad, 1963).
[7] L.-Z. Zhang, S.-M. Huang, International Journal of Heat and Mass Transfer 54(5-6), 1055 (2011).
[8] L.P. Khoroshun, Prykladnaya mekhanyka 14(2), 3 (1978).
[9] D Lidzba, J. Theor. and Appl. Mechanics 36(3), 657 (1998).
[10] Ya.Y. Buryak, Ye.Ya. Chaplya, O.Yu. Chernukha, Kontynual'no-termodynamichni modeli mekhaniky tverdykh rozchyniv (Naukova dumka, Kyyiv, 2006).
[11] Ye.Ya. Chaplya, O.Yu. Chernukha, V.Ye. Honcharuk, A.R. Tors'kyy, Protsesy perenosu rozpadnoyi rechovyny v heterohennykh seredovyshchakh (Yevrosvit, L'viv, 2010).
[12] A. Myunster, Khymycheskaya termodynamyka (Myr, Moskva, 1971).
[13] V.S. Vladymyrov, Uravnenyya matematycheskoy fyzyky (Nauka, Moskva, 1976).
[14] Ye.Ya. Chaplya, O.Yu. Chernukha, Matematychne modelyuvannya dyfuziynykh protsesiv u vypadkovykh i rehulyarnykh strukturakh (Naukova dumka, Kyyiv, 2009).
[15] Ye.Ya. Chaplya, O.Yu. Chernukha, Fizyko-matematychne modelyuvannya heterodyfuznoho maso perenosu (SPOLOM, L'viv, 2003).
[16] M. Semenova, Yu. Bakhracheva, S. Semenov, A. Elystartova, Yzvestyya Volhohradskoho hosudarstvennoho tekhnycheskoho unyversyteta 5(78), 148 (2011).

A. Y. Davydok[1, 2], O. Y. Chernukha[1], V. Y. Goncharuk[1,3]

Simulation of Coupled Thermal and Diffusion Processes Taking Into Account a Substance Decay in a Randomly Nonhomogeneous Stratified Strip

[1] Centre of Mathematical Modelling of Pidstryhach IAPMM of NAS of Ukraine, 15 Dudayev Str., Lviv, 79005, Ukraine, cher@cmm.lviv.ua;
[2] Pidstryhach Institute for Applied Problems of Mechanics and Mathematics of NAS of Ukraine, 3-b Naukova Str., Lviv, 79060, Ukraine, davydoka@gmail.com;
[3] Lviv Polytechnic National University, 12 Bandera Str., Lviv, 79013, Ukraine, vegoncharuk@mail.ru

Processes of thermodiffusion of decaying substance are investigated in a stochastically nonhomogeneous body. The statement of the contact initial-boundary value problem is made with taking into account the ideal contact conditions for temperature and non-ideal ones for concentration. The reference problem is reduced to an equivalent set of integral-differential equations. Its solution is found by the method of successive approximations in the form of Neumann series. The calculating formulae are obtained for the temperature and concentration fields averaged over the ensemble of phase configurations under the condition of the uniform distribution of phases in the body. A software package is developed and on the basis of which a dependence of averaged fields of temperature and concentration on the medium characteristics is investigated. It is shown that the time of the steady-state regime for the temperature is five orders less than for the concentration.

Key words: simulation, thermodiffusion, decaying substance, Neumann series, averaging over the ensemble of phase configurations, software package.