

УДК 517.958:532.72

### МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ РОЗПОДІЛУ КОНЦЕНТРАЦІЇ ДОМІШОК У СТОХАСТИЧНИХ ШАРУВАТИХ ТІЛАХ ЗА НЕІДЕАЛЬНИХ УМОВ КОНТАКТУ НА МІЖФАЗНИХ ГРАНИЦЯХ

**О. Ю. Чернуха, Ю. І. Білушак, В. Є. Гончарук**

Центр математичного моделювання ІППММ ім. Я. С. Підстригача НАН України  
вул. Дж. Дудаєва 15, 79005, м. Львів, Україна. E-mail: cher@cmm.lviv.ua, byixx13@gmail.com.  
Національний університет «Львівська політехніка»  
вул. С. Бандери, 12, 79013, м. Львів, Україна. E-mail: vegoncharuk@ukr.net

Досліджено процеси дифузії домішок у двофазній шаруватій смугі випадково неоднорідної структури з урахуванням стрибків функції концентрації та її похідної на границях контакту фаз. Запропоновано нове представлення оператора рівняння масоперенесення для цілого тіла. Сформульовано еквівалентне інтегродиференціальне рівняння, розв'язок якого побудований у вигляді інтегрального ряду Неймана. Сформульовано і доведено теореми збіжності отриманого ряду Неймана та існування розв'язку інтегродиференціального рівняння. Усреднення поля концентрації проведено за ансамблем конфігурацій фаз з рівномірною функцією розподілу. Проведені числові експерименти та встановлено вплив параметрів середовища на розподіли концентрації домішкових частинок у стохастичних шаруватих структурах за неідеальних умов контакту.

**Ключові слова:** дифузія, випадково неоднорідна шарувата структура, неідеальна умова контакту, рівномірний розподіл.

### МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПЕРЕЛЕНИЯ КОНЦЕНТРАЦИИ ПРИМЕСЕЙ В СТОХАСТИЧЕСКИХ СЛОИСТЫХ ТЕЛАХ ПРИ НЕИДЕАЛЬНЫХ УСЛОВИЯХ КОНТАКТА НА МЕЖФАЗНЫХ ГРАНИЦАХ

**О. Ю. Чернуха, Ю. И. Билушак, В. Е. Гончарук**

Центр математического моделирования ИПММ им. Я. С. Подстригача НАН Украины  
ул. Дж. Дудаева 15, 79005, г. Львов, Украина. E-mail: cher@cmm.lviv.ua, byixx13@gmail.com.  
Национальный университет «Львовская политехника»  
ул. С. Бандеры, 12, 79013, г. Львов, Украина. E-mail: vegoncharuk@ukr.net

Исследованы процессы диффузии примесного вещества в двухфазной слоистой полосе случайно неоднородной структуры с учетом скачков функции концентрации и ее производной на границах контакта фаз. Предложено новое представление оператора уравнения массопереноса для всего тела. Сформулировано эквивалентное интегродифференциальное уравнение, решение которого построено в виде интегрального ряда Неймана. Сформулированы и доказаны теоремы сходимости полученного ряда Неймана и существования решения интегродифференциального уравнения. Усреднение поля концентрации проведено по ансамблю конфигураций фаз с равномерной функцией распределения. Проведены числовые эксперименты и установлено влияние параметров среды на распределения концентрации примесных частиц в стохастических слоистых структурах при неидеальных условиях контакта.

**Ключевые слова:** диффузия, случайно неоднородная слоистая структура, неидеальное условие контакта, равномерное распределение.

**АКТУАЛЬНІСТЬ РОБОТИ.** Широке використання у промисловості та будівництві композитних матеріалів, функціональні властивості яких істотно залежать від дифузійних процесів, вимагає вивчення їх основних закономірностей зокрема, з метою оцінки надійності, оптимальності і довговічності складних інженерних конструкцій [1–3]. Одним з найбільш розповсюджених класів композитних матеріалів є шаруваті композити з основою із металічної матриці (*Al, Mg, Ni* та ін.) [4, 5]. Використання полі- та біметалів дозволяє істотно скоротити витрату високолегованих сталей, дефіцитних і дорогих кольорових металів, наприклад, *Cu, Cr, Mo*. При цьому для таких середовищ, як правило, є невідомими дані про конкретне просторове розташування окремих фаз, проте достатньо інформації про їхній дольовий вміст та основні фізико-хімічні властивості [5, 6].

Шаруваті композитні матеріали все ширше використовуються в літако- та суднобудівництві, автотакторо- та приладобудівництві, гірничобудівній, нафтовій і металургійній галузях промисловості. Це пов'язано з тим, що шаруваті композити володіють широким спектром і унікальним поєднанням таких цінних властивостей, як висока міцність, корозійна

стійкість, електро- і теплопровідність, жаростійкість, зносостійкість і таке подібне. З бі- та поліметалів виготовляють листи, стрічки, дроти, фасонні профілі, тощо, тобто деталі та конструкції різноманітних конфігурацій. Використання шаруватих металевих композитів дозволяє не тільки підвищити надійність та довговічність ефективної роботи деталей, блоків і вузлів обладнання, але й суттєво знизити витрати високолегованих сталей, вартісних кольорових металів (нікель, хром, мідь, молибден, тощо), знизити енергоємність та металоємність, витрати на технічне обслуговування, виробництво запчастин та ремонт обладнання.

Застосування корозійностійких шаруватих композитів характеризується високою ефективністю – значно скорочується витрата легуючих елементів, знижується вартість машин механізмів, підвищується ресурс їхньої роботи. З таких матеріалів виготовляють деталі і конструкції для роботи в умовах низьких або високих температур та тисків, під впливом різних агресивних середовищ [7].

Полімерні композитні матеріали, зокрема на основі термопластів, алифатичних та ароматичних поліамідів, надвисокомолекулярного поліетилену, пен-

тапласту, поліфенілхімоксаміну або поліефірів, мають свої переваги – надійність і довговічність вузлів тертя, пожегобезпека, можливість захистити поверхні сталевих деталей, ефективна робота в широкому інтервалі температур (233 ÷ 663 K), тощо.

Для випадків, коли процеси, які протікають у випадково неоднорідних тілах, не є ергодичними або квазіергодичними, був розроблений підхід [8], за яким стохастичне поле концентрації шукається у вигляді ряду Неймана, оскільки таке подання випадкових полів є зручним для проведення процедури усереднення за ансамблем допустимих просторових реалізацій структури тіла [8]. При цьому природним чином скорочувались доданки, які безпосередньо описують величину стрибка випадкової функції концентрації на границях контакту.

В даній роботі запропоновано інше представлення випадкового оператора збуреного рівняння дифузії, що дало можливість явно врахувати величину стрибків шуканої функції та її похідної на міжфазних границях.

**МАТЕРІАЛ І РЕЗУЛЬТАТИ ДОСЛІДЖЕННЯ.** Нехай домішкові частинки мігрують у шарі товщиною  $z_0$ , який складається з підшарів двох типів (фаз). При цьому розташування цих підшарів є невідомим. Одна з можливих реалізацій структури багатшарового тіла, в якому дифундує домішкова речовина, подана на рис. 1. Вважаємо, що дифузійні властивості фаз (області  $\Omega_0$  і  $\Omega_1$ ), з яких складене тіло, можуть суттєво відрізнятися. Приймаємо, що фази в тілі розташовані за рівномірним розподілом і об'ємна частка  $v_1$  області  $\Omega_1$  є набагато меншою за об'ємну частку  $v_0$  області  $\Omega_0$ , тобто  $v_1 \ll v_0$ .

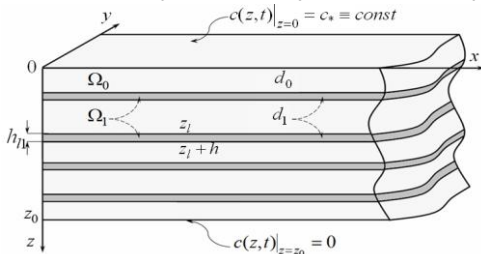


Рисунок 1 – Можлива реалізація структури тіла

Концентрація домішкових частинок  $c_j(z, t)$  в області  $\Omega_j$  визначається з рівняння дифузії [9]

$$\rho_j \frac{\partial c_j(z, t)}{\partial t} = d_j \frac{\partial^2 c_j(z, t)}{\partial z^2},$$

$$z \in \Omega_j = \bigcup_{i=1}^{n_j} \Omega_{ij}, \quad t \in [0, \tau] \quad (\tau < \infty), \quad j = 0, 1, \quad (1)$$

де  $\rho_j$  – густина області  $\Omega_j$ ;  $d_j$  – кінетичний коефіцієнт переносу в цій області,  $n_j$  – кількість підшарів фази  $j$ ,  $\Omega_{ij}$  –  $i$ -та однозв'язна область фази  $j$ ,  $i = \overline{1, n_j}$ ,  $j = 0, 1$ .

Приймаємо нульові початкові умови, а також, що на границі тіла  $z=0$  підтримується постійне значення концентрації домішкової речовини  $c_*$ , а на поверхні  $z = z_0$  – вона дорівнює нулю, тобто

$$c_0(z, t)|_{t=0} = c_1(z, t)|_{t=0} = 0, \\ c_0(z, t)|_{z=0} = c_* \equiv const, \quad c_0(z, t)|_{z=z_0} = 0. \quad (2)$$

На границях поділу областей  $z = z_l$  і  $z = z_l + h_{l1}$  виконуються неідеальні контактні умови на функцію концентрації [9]:

$$k_0 c_0(z, t)|_{z=z_l-0} = k_1 c_1(z, t)|_{z=z_l+0}; \\ \rho_0 d_0 \frac{\partial c_0}{\partial z}|_{z=z_l-0} = \rho_1 d_1 \frac{\partial c_1}{\partial z}|_{z=z_l+0}; \quad (3)$$

$$k_1 c_1|_{z=z_l+h_{l1}-0} = k_0 c_0|_{z=z_l+h_{l1}+0}; \\ \rho_1 d_1 \frac{\partial c_1}{\partial z}|_{z=z_l+h_{l1}-0} = \rho_0 d_0 \frac{\partial c_0}{\partial z}|_{z=z_l+h_{l1}+0}, \quad (4)$$

де  $k_j$  – коефіцієнт концентраційної залежності хімічного потенціалу у фазі  $j$  [8],  $z_l$  – випадкова координата «верхньої» межі області  $\Omega_{l1}$  (рис. 1),  $h_{l1}$  – товщина підшару  $\Omega_{l1}$ .

Умови контакту (3)-(4) можна подати у вигляді  $[c(z, t)]_{z=z_l} = k_0 c_0(z, t)|_{z=z_l+0} - k_1 c_1(z, t)|_{z=z_l-0} =$

$$= \left(1 - \frac{k_0}{k_1}\right) c_0(z, t)|_{z=z_l-0}, \quad (5)$$

$$\left[\frac{\partial c(z, t)}{\partial z}\right]_{z=z_l} = \rho_0 d_0 \frac{\partial c_0}{\partial z}|_{z=z_l+0} - \rho_1 d_1 \frac{\partial c_1}{\partial z}|_{z=z_l-0} = \\ = \left(1 - \frac{\rho_0 d_0}{\rho_1 d_1}\right) \frac{\partial c_0}{\partial z}|_{z=z_l-0}, \quad (6)$$

$$[c(z, t)]_{z=z_l+h_{l1}} = k_0 c_0|_{z=z_l+h_{l1}+0} - k_1 c_1|_{z=z_l+h_{l1}-0} = \\ = \left(\frac{k_0}{k_1} - 1\right) c_0(z, t)|_{z=z_l+h_{l1}+0}, \quad (7)$$

$$\left[\frac{\partial c(z, t)}{\partial z}\right]_{z=z_l+h_{l1}} = \rho_1 d_1 \frac{\partial c_1}{\partial z}|_{z=z_l+h_{l1}-0} - \rho_0 d_0 \frac{\partial c_0}{\partial z}|_{z=z_l+h_{l1}+0} = \\ = \left(\frac{\rho_0 d_0}{\rho_1 d_1} - 1\right) \frac{\partial c_0}{\partial z}|_{z=z_l+h_{l1}-0}, \quad (8)$$

де  $[c(z, t)]_{z=z_l}$  – стрибок функції  $c(z, t)$  в точці  $z_l$ .

Зазначимо, що при такій постановці задачі випадковими величинами є границі контакту  $z = z_l$  та  $z = z_l + h_{l1}$ , тобто межі областей  $\Omega_0$  та  $\Omega_1$ , які є внутрішніми для тіла. Це, в свою чергу, призводить до стохастичності поля концентрації домішкової речовини, яка мігрує в тілі.

*Рівняння масоперенесення для усього тіла.* Розв'язок сформульованої контактної-крайової задачі (1), (2), (7)-(8) будемо шукати у вигляді ряду Неймана [10]. Для цього введемо у розгляд випадкову функцію просторової координати  $c(z, t)$ , яка описує концентрацію в усьому тілі:

$$c(z, t) = \begin{cases} c_j(z, t) - \text{розв'язок рівняння (1), } z \in \Omega_j, j = \overline{0, 1}; \\ \text{контактні умови (5), (6), } z = z_l; l = \overline{1, n_l}; \\ \text{контактні умови (7), (8), } z = z_l + h_{l1}; l = \overline{1, n_l}. \end{cases} \quad (9)$$

Підставимо випадкову концентрацію домішок  $c(z, t)$  у вигляді (9) в рівняння балансу маси (за нехтування конвективної складової)

$$\rho(z) \frac{\partial c(z,t)}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}(z,t), \quad (10)$$

де  $\vec{J}(z,t) = d(z)\vec{\nabla}c(z,t)$  - потік маси домішкової речовини. Тоді отримаємо

$$\begin{aligned} \rho(z) \frac{\partial c(z,t)}{\partial t} = & \left\{ d(z) \frac{\partial^2 c(z,t)}{\partial z^2} \right\}_{z \in \Omega_{ij}} + \\ & + 2 \sum_{l=1}^{n_1} \left( [d(z)]_{z=z_l} \left[ \frac{\partial c(z,t)}{\partial z} \right]_{z=z_l} \delta(z-z_l) + \right. \\ & \left. + [d(z)]_{z=z_l+h_{l1}} \left[ \frac{\partial c(z,t)}{\partial z} \right]_{z=z_l+h_{l1}} \delta(z-(z_l+h_{l1})) \right) + \\ & \sum_{l=1}^{n_1} \left( [d(z)]_{z=z_l} [c(z,t)]_{z=z_l} \delta'(z-z_l) + [d(z)]_{z=z_l+h_{l1}} \times \right. \\ & \left. \times [c(z,t)]_{z=z_l+h_{l1}} \delta'(z-(z_l+h_{l1})) \right), \quad (11) \end{aligned}$$

де  $\{z \in \Omega_{ij}\}$  - області неперервності функції,  $\delta(z)$  - дельта-функція Дірака,  $\delta'(z)$  - похідна від дельта-функції Дірака, і коефіцієнти  $\rho(z)$  і  $d(z)$  означені у відкритих областях  $\Omega_0$  і  $\Omega_1$ :

$$\rho(z) = \sum_{j,i} \left\{ \rho_j \right\}_{z \in \Omega_{ij}}, \quad d(z) = \sum_{j,i} \left\{ d_j \right\}_{z \in \Omega_{ij}}.$$

При цьому на границях контакту  $z = z_l$  і  $z = z_l + h_{l1}$  відбувається стрибок цих коефіцієнтів  $[\rho(z)]_{z=z_l} = -[\rho(z)]_{z=z_l+h_{l1}} = \rho_1 - \rho_0$ ,  $[d(z)]_{z=z_l} = -[d(z)]_{z=z_l+h_{l1}} = d_1 - d_0$ ,  $l = \overline{1, n_1}$ . Також в рівнянні (11) враховано, що  $c(z,t)$  є неперервною функцією за часовою змінною, і що області неперервності коефіцієнта  $d(z)$  і концентрації  $c(z,t)$ , а відповідно і її другої похідної, співпадають.

*Інтегро-диференціальне рівняння, еквівалентне вихідній крайовій задачі.* Введемо в розгляд випадкову функцію просторової координати («функцію структури») [10], яка задовольняє умову суцільності тіла:

$$\eta_{ij}(z) = \begin{cases} 1, & z \in \Omega_{ij}; \\ 0, & z \notin \Omega_{ij}, \end{cases} \quad \sum_{j,i} \eta_{ij}(z) = 1. \quad (12)$$

Коефіцієнти рівняння (11) подамо через функцію (12):

$$\rho(z) = \sum_{j=0}^1 \sum_{i=1}^{n_j} \rho_j \eta_{ij}(z), \quad d(z) = \sum_{j=0}^1 \sum_{i=1}^{n_j} d_j \eta_{ij}(z) \quad (13)$$

і підставимо подання (13) в рівняння (11). Тоді отримаємо рівняння дифузії в операторному вигляді

$$L(z,t)c(z,t) = 0; \quad (14)$$

$$\begin{aligned} L(z,t) \equiv & \sum_{j=0}^1 \sum_{i=1}^{n_j} \rho_j \eta_{ij}(z) \frac{\partial}{\partial t} - \sum_{j=0}^1 \sum_{i=1}^{n_j} d_j \eta_{ij}(z) \left\{ \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right\} - \\ & - 2(d_0 - d_1) \sum_{l=1}^{n_1} \left( \left[ \frac{\partial}{\partial z} \right]_{z=z_l} \delta(z-z_l) - \left[ \frac{\partial}{\partial z} \right]_{z=z_l+h_{l1}} \times \right. \\ & \times \delta(z-(z_l+h_{l1})) \left. \right) - (d_0 - d_1) \sum_{l=1}^{n_1} \left( \left[ \right]_{z=z_l} \delta'(z-z_l) - \right. \\ & \left. - \left[ \right]_{z=z_l+h_{l1}} \delta'(z-(z_l+h_{l1})) \right). \quad (15) \end{aligned}$$

У рівнянні (15) додамо і віднімемо детермінований оператор дифузії  $L_0(z,t) = \rho_0 \partial/\partial t - d_0 \partial^2/\partial z^2$ , коефіцієнти якого є характеристиками матеріалу фази  $\Omega_0$ . Отже маємо

$$L_0(z,t)c(z,t) = L_s(z,t)c(z,t), \quad (16)$$

де позначено  $L_s(z,t) = L_0(z,t) - L(z,t)$ , а саме

$$\begin{aligned} L_s(z,t) = & (\rho_0 - \rho_1) \sum_{i=1}^{n_1} \eta_{i1}(z) \frac{\partial}{\partial t} + (d_0 - d_1) \sum_{i=1}^{n_1} \eta_{i1}(z) \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \\ & + 2(d_0 - d_1) \sum_{l=1}^{n_1} \left( \left( 1 - \frac{\rho_0 d_0}{\rho_1 d_1} \right) \frac{\partial}{\partial z} \Big|_{z=z_l} \delta(z-z_l) - \right. \\ & \left. - \left( \frac{\rho_0 d_0}{\rho_1 d_1} - 1 \right) \frac{\partial}{\partial z} \Big|_{z=z_l+h_{l1}} \delta(z-(z_l+h_{l1})) \right) - \\ & - (d_0 - d_1) \sum_{l=1}^{n_1} \left( \left( 1 - \frac{k_0}{k_1} \right) \Big|_{z=z_l} \delta'(z-z_l) - \right. \\ & \left. - \left( \frac{k_0}{k_1} - 1 \right) \Big|_{z=z_l+h_{l1}} \delta'(z-(z_l+h_{l1})) \right). \quad (17) \end{aligned}$$

Вважаємо праву частину рівняння (16) джерелом. Тоді розв'язок задачі (16), (2) можна подати

$$c(z,t) = c_0(z,t) + \int_0^t \int_0^{z_0} G(z,z',t,t') L_s(z',t') c(z',t') dz' dt', \quad (18)$$

де  $c_0(z,t)$  - розв'язок однорідного рівняння з крайовими умовами (2), наведений А.Ликовим:

$$c_0(z,t) = c_* \left( 1 - z/z_0 \right) - \frac{2}{z_0} \sum_{n=1}^{\infty} c_* e^{-d_0 y_n^2 t / \rho_0} \sin(y_n z) / y_n, \quad (19)$$

де  $y_n = n\pi/z_0$ ;  $G(z,z',t,t')$  - функція Гріна задачі (16), (2), подана в праці А.Тихонова, А.Самарського

$$\begin{aligned} G(z,z',t,t') = & \frac{2\theta(t-t')}{z_0 \rho_0} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-d_0 y_n^2 (t-t') / \rho_0} \times \\ & \times \sin(y_n z) \sin(y_n z'). \quad (20) \end{aligned}$$

Таким чином ми побудували інтегро-диференціальне рівняння (18), еквівалентне вихідній контактній крайовій задачі. Рівняння (18) з випадковим ядром є рівнянням Вольтерра II-го роду за часовою змінною і Гаммерштейна за просторовою.

**РЯД НЕЙМАНА.** Розв'язок інтегро-диференціального рівняння (14) шукаємо у вигляді ряду Неймана [10] методом послідовних наближень.

За нульове наближення  $c^{(0)}(z,t)$  вибираємо розв'язок однорідної крайової задачі (15). Тоді отримаємо наступні рекурентні співвідношення:

$$\begin{aligned} c^{(0)}(z,t) & = c_0(z,t); \\ c^{(1)}(z,t) & = c_0(z,t) + \int_0^t \int_0^{z_0} G(z,z',t,t') \times \\ & \times L_s(z',t') c^{(0)}(z',t') dz' dt'; \\ & \dots \\ c^{(n)}(z,t) & = c_0(z,t) + \int_0^t \int_0^{z_0} G(z,z',t,t') \times \\ & \times L_s(z',t') c^{(n-1)}(z',t') dz' dt'; \\ & \dots \end{aligned} \quad (21)$$

У побудованій послідовності функцій  $c^{(0)}, c^{(1)}, \dots, c^{(n)}, \dots$  загальний член можна подати так

$$c^{(n)}(z, t) = c_0(z, t) + \int_0^t \int_0^{z_0} G(z, z', t, t') L_s(z', t') \times \\ \times c_0(z', t') dz' dt' + \dots + \int_0^t \int_0^{z_0} G(z, z', t, t') L_s(z', t') \times \\ \times \int_0^{t'} \int_0^{z_0} G(z', z'', t', t'') L_s(z'', t'') \times \dots \times \\ \times \int_0^{t^{(n-2)}} \int_0^{z_0} G(z^{(n-2)}, z^{(n-1)}, t^{(n-2)}, t^{(n-1)}) L_s(z^{(n-1)}, t^{(n-1)}) \times \\ \times c_0(z^{(n-1)}, t^{(n-1)}) dz^{(n-1)} dt^{(n-1)} \dots dz' dt' + R_n(z, t),$$

де  $R_n(z, t)$  – різниця між  $n$ -м та  $(n-1)$ -м членами послідовності, а саме

$$R_n(z, t) = \int_0^t \int_0^{z_0} G(z, z', t, t') L_s(z', t') \int_0^{t'} \int_0^{z_0} G(z', z'', t', t'') \times \\ \times L_s(z'', t'') \dots \times \int_0^{t^{(n-1)}} \int_0^{z_0} G(z^{(n-1)}, z^{(n)}, t^{(n-1)}, t^{(n)}) \times \\ \times L_s(z^{(n)}, t^{(n)}) c_0(z^{(n)}, t^{(n)}) dz^{(n)} dt^{(n)} \dots dz' dt'. \quad (22)$$

Побудованій послідовності ставимо у відповідність такий ряд (ряд Неймана):

$$c(z, t) \equiv c_0(z, t) + \sum_{n=1}^{\infty} R_n(z, t). \quad (23)$$

**Теорема 1.** Якщо густини  $\rho_0, \rho_1$  і коефіцієнти дифузії  $d_0, d_1$  є обмеженими і  $\rho_0 \neq 0, d_0 \neq 0$ , то інтегральний ряд Неймана (23) є абсолютно і рівномірно збіжним.

**Д о в е д е н н я.** Для того, щоб довести збіжність ряду (21), спочатку потрібно оцінити зверху член ряду  $R_n(z, t)$  (22). Для цього запишемо вирази  $L_s c_0$  і  $L_s G$ :

$$L_s c_0 = (\rho_0 - \rho_1) \sum_{i=1}^{n_1} \eta_{ij}(z) \frac{\partial c_0}{\partial t} + (d_0 - d_1) \sum_{i=1}^{n_1} \eta_{ij}(z) \times \\ \times \frac{\partial^2 c_0}{\partial z^2} + 2(d_0 - d_1) \sum_{l=1}^{n_1} \left( 1 - \frac{\rho_0 d_0}{\rho_1 d_1} \right) \left[ \frac{\partial c_0}{\partial z} \Big|_{z=z_l} \delta(z - z_l) + \right. \\ \left. + \frac{\partial c_0}{\partial z} \Big|_{z=z_l+h_l} \delta(z - (z_l + h_l)) \right] - (d_0 - d_1) \sum_{l=1}^{n_1} \left( 1 - \frac{k_0}{k_1} \right) \times \\ \times \left[ c_0 \Big|_{z=z_l} \delta'(z - z_l) + c_0 \Big|_{z=z_l+h_l} \delta'(z - (z_l + h_l)) \right]. \\ L_s G = (\rho_0 - \rho_1) \sum_{i=1}^{n_1} \eta_{ij}(z) \frac{\partial G}{\partial t} + (d_0 - d_1) \sum_{i=1}^{n_1} \eta_{ij}(z) \times \\ \times \frac{\partial^2 G}{\partial z^2} + 2(d_0 - d_1) \sum_{l=1}^{n_1} \left( 1 - \frac{\rho_0 d_0}{\rho_1 d_1} \right) \left[ \frac{\partial G}{\partial z} \Big|_{z=z_l} \delta(z - z_l) + \right. \\ \left. + \frac{\partial G}{\partial z} \Big|_{z=z_l+h_l} \delta(z - (z_l + h_l)) \right] - (d_0 - d_1) \sum_{l=1}^{n_1} \left( 1 - \frac{k_0}{k_1} \right) \times$$

$$\times \left[ G \Big|_{z=z_l} \delta'(z - z_l) + G \Big|_{z=z_l+h_l} \delta'(z - (z_l + h_l)) \right].$$

Розглянемо останній подвійний інтеграл у виразі  $R_n$  (22):

$$I_n(z^{(n-1)}, t^{(n-1)}) = \int_0^{t^{(n-1)}} \int_0^{z_0} G(z^{(n-1)}, z^{(n)}, t^{(n-1)}, t^{(n)}) \times \\ \times L_s(z^{(n)}, t^{(n)}) c_0(z^{(n)}, t^{(n)}) dz^{(n)} dt^{(n)}. \quad (24)$$

Якщо ми проаналізуємо функцію  $G$  (20), то виявимо, що від змінної  $z^{(n)}$ , за якою відбувається інтегрування в (24), залежить лише останній множник  $\sin(y_n z^{(n)})$ , всі інші множники в  $G$  можна винести за знак інтеграла по  $dz^{(n)}$ . Враховуючи оцінку  $|\sin x| \leq 1$  для  $\forall x$  і що справедлива нерівність  $0 \leq \theta(t-t') \leq 1$  для  $\forall t, t'$ , маємо

$$\left| I_n(z^{(n-1)}, t^{(n-1)}) \right| \leq \left| \frac{2}{z_0 \rho_0} \sum_{m=1}^{\infty} \sin(y_m z^{(n-1)}) \times \right. \\ \left. \times \int_0^{t^{(n-1)}} \int_0^{z_0} e^{-\frac{d_0}{\rho_0} y_m^2 (t^{(n-1)} - t^{(n)})} L_s c_0(z^{(n)}, t^{(n)}) dz^{(n)} dt^{(n)} \right|. \quad (25)$$

Далі врахуємо такі обмеження та нерівності:

$$\eta_{ij}(z) \leq 1 \text{ для } \forall z \in [0; z_0] \text{ тоді } \sum_{i=1}^{n_1} \eta_{in}(z) \leq n_1; \left| 1 - (-1)^k \right| \leq 2 \text{ для } \forall k \in N; \quad 0 \leq \left| e^{-x} - 1 \right| \leq 1 \text{ для } \forall x \geq 0; \\ e^{-x^2} \leq e^{-x} \text{ для } x \geq 0.$$

Використаємо відомі ряди [11]

$$\sum_{\substack{k=1 \\ k \neq n}}^{\infty} \frac{1}{k^2 - n^2} = \frac{3}{4n^2}, \quad \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^2} = \frac{\pi^2}{6},$$

$$\sum_{k=1}^{\infty} e^{-ka} \sin(kx) = -\frac{1}{2} \frac{\sin x}{\cos x - \text{cha}}.$$

В результаті після інтегрування ми отримаємо наступну оцінку  $I_n$  (25):

$$\left| I_n \right| \leq \frac{4c_*}{z_0^2} n_1 \left[ a_{dp} t^{(n-1)} + b_{dp} \right], \quad (26)$$

$$\text{де } a_{dp} = \frac{d_0}{\rho_0} \left| \rho_0 - \rho_1 \right| + \left| d_0 - d_1 \right| \left\{ 3 + \frac{\rho_0 d_0}{\rho_1 d_1} \right\};$$

$$b_{dp} = \frac{5}{6} \frac{\rho_0}{d_0} \left| d_0 - d_1 \right| \left| 1 - \frac{\rho_0 d_0}{\rho_1 d_1} \right| + \frac{1}{4} \left\{ \left| \rho_0 - \rho_1 \right| + \frac{\rho_0}{d_0} \left| d_0 - d_1 \right| \right\}.$$

Оцінимо передостанній інтеграл у виразі (22) для  $R_n$  з урахуванням  $|I_n|$ :

$$\left| I_{n-1} \right| \leq \int_0^{t^{(n-2)}} \int_0^{z_0} G(z^{(n-2)}, z^{(n-1)}, t^{(n-2)}, t^{(n-1)}) L_s(z^{(n-1)}, t^{(n-1)}) \times \\ \times \tilde{G}(z^{(n-1)}, t^{(n-1)}) I_n(t^{(n-1)}) dt^{(n-1)} dz^{(n-1)}, \quad (27)$$

де  $\tilde{G}$  - непроінтегровані множники функції  $G$ :

$$\tilde{G} = \frac{2}{z_0 \rho_0} \sum_{m=1}^{\infty} e^{-\frac{d_0}{\rho_0} y_m^2 t^{(n-1)}} \sin(y_m z^{(n-1)}). \quad (28)$$

У формулі (28) ми використали нерівність: якщо  $t^{(n)} \leq t^{(n-1)}$ , то  $e^{-a(t^{(n-1)} - t^{(n)})} L e^{-at^{(n)}}$ . Отже маємо

$$|I_{n-1}| \leq \tilde{G}(z^{(n-2)}, t^{(n-2)}) \int_0^{z_0} \int_0^{z_0} \sin(y_m z^{(n-2)}) L_s(z^{(n-1)}, t^{(n-1)}) \times \\ \times \left\{ \tilde{G}(z^{(n-1)}, t^{(n-1)}) \frac{4c_*}{z_0^2} n_1 [a_{dp} t^{(n-1)} + b_{dp}] \right\} dt^{(n-1)} dz^{(n-1)}.$$

Далі скористаємося відомою нерівністю  $x < \ln(1-x) < \frac{x}{1-x}$  ( $x < 1, x \neq 0$ ), а також рядами [11]

$$\sum_{k=1}^{\infty} k e^{-ka} \cos(kx) = -\frac{1}{2} \frac{(\cos x - \operatorname{ch} a) \cos x + \sin x \cos x}{(\cos x - \operatorname{ch} a)^2};$$

$$\sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k} x^k = \ln(1-x) \quad (-1 \leq x \leq 1); \quad \sum_{k=1}^{\infty} k x^k = \frac{x}{(1-x)^2}$$

( $|x| < 1$ );  $\sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^n} = \frac{(-1)^n}{(n-1)!} \Psi^{(n-1)}(1)$ , де  $\Psi^{(n)}(z)$  -  $n$ -а похідна від пси-функції,  $\Psi(z) = \Gamma'(z)/\Gamma(z)$  (зокрема  $\Psi^{(2)}(1) = 2!\zeta(3) = 2! \cdot 1.2$ ). У результаті одержимо оцінку

$$|I_{n-1}| \leq \left| \tilde{G}(z^{(n-2)}, t^{(n-2)}) \right| \frac{8c_* n_1}{z_0^3 \rho_0} \frac{2n_1 z_0}{\pi} \times \\ \times \left\{ K_1 t^{(n-2)} + K_2 + K_3 \right\}, \quad (29)$$

Де

$$K_1 = |a_{dp}| \left[ 2|\rho_0 - \rho_1| + \frac{\rho_0}{d_0} |d_0 - d_1| \right] + \\ + \frac{\pi^2}{2z_0} |b_{dp}| \left[ \frac{d_0}{\rho_0} |\rho_0 - \rho_1| + |d_0 - d_1| \right];$$

$$K_2 = 8 \frac{\rho_0}{d_0} \frac{z_0^3}{\pi^3} |a_{dp}| \left[ |\rho_0 - \rho_1| + \frac{\rho_0}{d_0} |d_0 - d_1| \right]; \quad (30)$$

$$K_3 = 2 \frac{\rho_0}{d_0} |d_0 - d_1| \left| 1 - \frac{\rho_0 d_0}{\rho_1 d_1} \right|. \quad (31)$$

Тепер, якщо ми розглянемо перед-передостанній інтеграл в  $R_n$  (22) за аналогією отримаємо

$$|I_{n-2}| \leq \int_0^{t^{(n-3)}} \int_0^{z_0} G(z^{(n-3)}, z^{(n-2)}, t^{(n-3)}, t^{(n-2)}) L_s(z^{(n-2)}, t^{(n-2)}) \times \\ \times \tilde{G}(z^{(n-2)}, t^{(n-2)}) |I_{n-1}(t^{(n-2)})| dt^{(n-2)} dz^{(n-2)}. \quad (32)$$

Зауважимо, що оцінки для  $|I_n|$  (26) і  $|I_{n-1}|$  (29) мають однакову структуру, відрізняючись лише коефіцієнтами (що пояснюється фігуруванням в  $|I_n|$  функції  $c_0$ , тоді як в  $|I_{n-1}|$  наявні тільки функція Гріна  $G$  та її частина  $\tilde{G}$ ).

Структура підінтегрального виразу (32) для  $|I_{n-2}|$  ідентична (27) для  $|I_{n-1}|$ . Тому, використовуючи всі міркування для  $|I_{n-1}|$  та знайдені оцінки, для  $|I_{n-2}|$  можемо записати

$$|I_{n-2}| \leq \left| \tilde{G}(z^{(n-3)}, t^{(n-3)}) \right| \frac{1}{2} \frac{8c_* n_1}{z_0^3 \rho_0} \left( \frac{2n_1 z_0}{\pi} \right)^2 \times \\ \times \left\{ \tilde{K}_1 t^{(n-3)} + \tilde{K}_2 + \tilde{K}_3 \right\}, \quad (33)$$

Таким чином, покроково інтегруючи  $R_n$  (22) і оцінюючи вираз аналогічно до  $|I_{n-1}|$  ми отримаємо такий самий вираз, але з іншими коефіцієнтами.

Знайдемо  $\tilde{K}_i$  ( $i = \overline{1,3}$ ) у формулі (33) за аналогією з  $K_i$ :  $\tilde{K}_i$  дорівнює  $K_i$ , де замість  $a_{dp}$  і  $b_{dp}$  фігурують  $K_1$  і  $K_2 + K_3$  відповідно. Із співставлення формул (30) і (31) випливає, що  $\tilde{K}_3 = K_3$ , і цей коефіцієнт завжди буде фігурувати як останній доданок в оцінці типу (33) у незмінному вигляді.

Знайдемо

$$K_1^{(n-2)} \equiv \tilde{K}_1 = K_1 \left[ 2|\rho_0 - \rho_1| + \frac{\rho_0}{d_0} |d_0 - d_1| \right] + \\ + \frac{\pi^2}{2z_0} (K_2 + K_3) \left[ \frac{d_0}{\rho_0} |\rho_0 - \rho_1| + |d_0 - d_1| \right]; \\ K_2^{(n-2)} \equiv \tilde{K}_2 = 8 \frac{\rho_0}{d_0} \frac{z_0^3}{\pi^3} K_2 \left[ |\rho_0 - \rho_1| + \frac{\rho_0}{d_0} |d_0 - d_1| \right] = \\ = \left\{ 8 \frac{\rho_0}{d_0} \frac{z_0^3}{\pi^3} \left[ |\rho_0 - \rho_1| + \frac{\rho_0}{d_0} |d_0 - d_1| \right] \right\}^2 |a_{dp}|. \quad (34)$$

Зі співвідношення (34) можемо записати  $K_2^{(n-k)}$  для довільного  $(n-k)$ :

$$K_2^{(n-k)} = \left\{ 8 \frac{\rho_0}{d_0} \frac{z_0^3}{\pi^3} \left[ |\rho_0 - \rho_1| + \frac{\rho_0}{d_0} |d_0 - d_1| \right] \right\}^k |a_{dp}|.$$

Для останнього  $k = n-1$  отримаємо

$$K_2^{(1)} = \left\{ 8 \frac{\rho_0}{d_0} \frac{z_0^3}{\pi^3} \left[ |\rho_0 - \rho_1| + \frac{\rho_0}{d_0} |d_0 - d_1| \right] \right\}^{n-1} |a_{dp}|.$$

Встановимо закономірність для коефіцієнтів  $K_1^{(n-k)}$ , які визначаються рекурентно. Врахуємо, що  $|\rho_0 - \rho_1| \leq 2|\rho_0 - \rho_1|$ , тоді

$$\tilde{K}_1^{(n-2)} \leq K_1^{(n-2)} = \left[ 2|\rho_0 - \rho_1| + \frac{\rho_0}{d_0} |d_0 - d_1| \right] \times \\ \times \left\{ K_1 + \frac{\pi^2}{2z_0} (K_2 + K_3) \right\}.$$

На наступному кроці маємо

$$K_1^{(n-3)} = \left[ 2|\rho_0 - \rho_1| + \frac{\rho_0}{d_0} |d_0 - d_1| \right] \left\{ K_1^{(n-2)} + \right. \\ \left. + \frac{\pi^2}{2z_0} (K_2^{(n-2)} + K_3) \right\} = \left[ 2|\rho_0 - \rho_1| + \frac{\rho_0}{d_0} |d_0 - d_1| \right] \times \\ \times \left\{ \left[ 2|\rho_0 - \rho_1| + \frac{\rho_0}{d_0} |d_0 - d_1| \right] \left\{ K_1 + \frac{\pi^2}{2z_0} (K_2^{(n-2)} + K_3) \right\} + \right. \\ \left. + \frac{\pi^2}{2z_0} (K_2^{(n-2)} + K_3) \right\}.$$

У позначеннях

$$\begin{aligned} d_\rho &= |\rho_0 - \rho_1| + \frac{\rho_0}{d_0} |d_0 - d_1|, \\ d_{2\rho} &= 2|\rho_0 - \rho_1| + \frac{\rho_0}{d_0} |d_0 - d_1| \end{aligned} \quad (35)$$

запишемо  $K_2^{(i)}$ :

$$\begin{aligned} K_2 &\equiv K_2^{(n-1)} = 8 \frac{\rho_0}{d_0} \frac{z_0^3}{\pi^3} d_\rho |a_{d\rho}|, \\ K_2 &\equiv K_2^{(n-2)} = \left\{ 8 \frac{\rho_0}{d_0} \frac{z_0^3}{\pi^3} d_\rho \right\}^2 |a_{d\rho}|, \\ K_2^{(n-k)} &= \left\{ 8 \frac{\rho_0}{d_0} \frac{z_0^3}{\pi^3} d_\rho \right\}^k |a_{d\rho}| = 8 \frac{\rho_0}{d_0} \frac{z_0^3}{\pi^3} d_\rho K_2^{(n-k-1)}, \\ K_2^{(1)} &= \left\{ 8 \frac{\rho_0}{d_0} \frac{z_0^3}{\pi^3} d_\rho \right\}^{n-1} |a_{d\rho}|. \end{aligned}$$

Тепер запишемо  $K_1^{(i)}$  за позначень (35):

$$\begin{aligned} K_1 &\equiv K_1^{(n-1)} = d_{2\rho} \left[ |a_{d\rho}| + \frac{\pi^2}{2z_0} |b_{d\rho}| \right], \\ K_1^{(n-2)} &= d_{2\rho} \left[ K_1^{(n-1)} + \frac{\pi^2}{2z_0} (K_2^{(n-1)} + K_3) \right] = \\ &= d_{2\rho}^2 \left[ |a_{d\rho}| + \frac{\pi^2}{2z_0} |b_{d\rho}| \right] + \\ &+ d_{2\rho} \frac{\pi^2}{2z_0} 8 \frac{\rho_0}{d_0} \frac{z_0^3}{\pi^3} d_\rho |a_{d\rho}| + d_{2\rho} \frac{\pi^2}{2z_0} K_3, \\ K_1^{(n-3)} &= d_{2\rho}^3 K_1^{(n-1)} + d_{2\rho} \frac{\pi^2}{2z_0} \left\{ d_{2\rho} + \frac{8\rho_0}{d_0} \frac{z_0^3}{\pi^3} d_\rho \right\} K_2^{(n-1)} + \\ &+ d_{2\rho} \frac{\pi^2}{2z_0} (d_{2\rho} + 1) K_3. \end{aligned}$$

Обчислимо коефіцієнт на наступному кроці:

$$\begin{aligned} K_1^{(n-4)} &= d_{2\rho} \left[ K_1^{(n-3)} + \frac{\pi^2}{2z_0} (K_2^{(n-3)} + K_3) \right] = \\ &= d_{2\rho}^3 K_1^{(n-1)} + d_{2\rho} \frac{\pi^2}{2z_0} \left\{ d_{2\rho}^2 + d_{2\rho} \frac{8\rho_0}{d_0} \frac{z_0^3}{\pi^3} d_\rho + \right. \\ &\left. + \left( \frac{8\rho_0}{d_0} \frac{z_0^3}{\pi^3} d_\rho \right)^2 \right\} K_2^{(n-1)} + d_{2\rho} \frac{\pi^2}{2z_0} (d_{2\rho} (d_{2\rho} + 1) + 1) K_3. \end{aligned}$$

Тепер можемо записати для довільного кроку коефіцієнти при  $K_1$  і  $K_3$ :

$$d_{2\rho}^{k-1} K_1^{(n-1)} \quad \text{і} \quad d_{2\rho} \frac{\pi^2}{2z_0} \left[ 1 + \sum_{s=1}^{k-2} d_{2\rho}^s \right] K_3,$$

для  $K_2$  маємо

$$d_{2\rho} \frac{\pi^2}{2z_0} \left[ \sum_{s=0}^{k-2} d_{2\rho}^{k-s-2} \left( \frac{8\rho_0}{d_0} \frac{z_0^3}{\pi^3} d_\rho \right)^s \right] K_2.$$

Отже для визначення  $K_1^{(n-k)}$  одержимо вираз

$$\begin{aligned} K_1^{(n-k)} &= d_{2\rho}^{k-1} K_1^{(n-1)} + d_{2\rho} \frac{\pi^2}{2z_0} \left[ \sum_{s=0}^{k-2} d_{2\rho}^{k-s-2} \times \right. \\ &\left. \times \left( \frac{8\rho_0}{d_0} \frac{z_0^3}{\pi^3} d_\rho \right)^s \right] K_2 + d_{2\rho} \frac{\pi^2}{2z_0} \left[ 1 + \sum_{s=1}^{k-2} d_{2\rho}^s \right] K_3. \end{aligned} \quad (36)$$

На останньому кроці  $k = n - 1$  з формули (36) отримаємо вираз для коефіцієнта  $K_1^{(1)}$  у вигляді

$$\begin{aligned} K_1^{(1)} &= d_{2\rho}^{n-2} K_1 + d_{2\rho} \frac{\pi^2}{2z_0} \left\{ \sum_{s=0}^{n-3} d_{2\rho}^{n-s-3} \left( \frac{8\rho_0}{d_0} \frac{z_0^3}{\pi^3} d_\rho \right)^s \right\} K_2 + \\ &+ \left[ 1 + \sum_{s=1}^{k-2} d_{2\rho}^s \right] K_3 \end{aligned}$$

і оцінку для  $R_n$  - загального члена ряду Неймана:

$$|R_n| \leq \frac{1}{n!} \frac{8c_* n_1}{\rho_0 z_0^3} \left( \frac{2n_1 z_0}{\pi} \right)^n \{ K_1^{(1)} t + K_2^{(1)} + K_3 \}. \quad (37)$$

Оскільки за ознакою Даламбера мажорантний ряд з додатним загальним членом  $b \{ K_1^{(1)} t + K_2^{(1)} + K_3 \} (a)^n / n!$  (де  $a = 2n_1 z_0 / \pi$ ,  $b = 8c_* n_1 / \rho_0 z_0^3$ ) збігається при  $n \rightarrow \infty$  для довільних значень  $K_1^{(1)}$ ,  $K_2^{(1)}$ ,  $K_3$ ,  $t$ ,  $a$ ,  $b$ , то послідовність часткових сум ряду (23)  $\{c^{(n)}(z, t)\}$  за ознакою Вейерштраса є абсолютно і рівномірно збіжною при  $n \rightarrow \infty$ , тобто

$$\lim_{n \rightarrow \infty} c^{(n)}(z, t) = c(z, t).$$

Теорема 1 доведена.

*Зауваження 1.* На збіжність ряду Неймана (23) не впливають значення коефіцієнтів  $k_0$  і  $k_1$ .

*Зауваження 2.* При доведенні теореми ми не використовували умову про наявність характерної товщини включень, тобто  $h_i \approx h$ . Проте необхідно знати (як вхідний параметр задачі) кількість включень  $n_1$  або, що включень у тілі є обмежене число, яке, наприклад, не перевищує  $N_1$ :  $n_1 \leq N_1 < \infty$ .

*Зауваження 3.* Зі співвідношення (37) випливає, що при  $t \rightarrow \infty$  ряд Неймана є розбіжним для введених достатньо слабких обмежень.

**Теорема 2.** Функція (23) є розв'язком інтегродиференціального рівняння (18).

**Доведення.** Подівавши зліва оператором  $G(z, z', t, t') L_s(z', t')$  на обидві частини співвідношення (21) та проінтегрувавши по всій області визначення  $[0; z_0] \cup [0, t]$ , одержимо

$$\begin{aligned} &\int_0^t \int_0^{z_0} G(z, z', t, t') L_s(z', t') c(z', t') dz' dt' = \\ &= \int_0^t \int_0^{z_0} G(z, z', t, t') L_s(z', t') [c_0(z', t') + \\ &+ \int_0^{t'} \int_0^{z_0} G(z', z'', t', t'') L_s(z'', t'') c(z'', t'') dz'' dt'' + \dots] dz' dt' = \\ &= c(z, t) - c_0(z, t), \end{aligned}$$

що доводить Теорему 2.

Усереднення поля концентрації за ансамблем конфігурацій фаз. Для знаходження середнього поля концентрації домішки обмежимося першими двома членами ряду (23):

$$\begin{aligned}
 c(z, t) \approx & c_0(z, t) + \int_0^t \int_0^{z_0} G(z, z', t, t') \sum_{i=1}^{n_1} [(\rho_0 - \rho_1) \times \\
 & \times \frac{\partial c_0(z', t')}{\partial t'} + (d_0 - d_1) \frac{\partial^2 c_0(z', t')}{\partial z'^2}] \eta_{i1}(z') + \\
 & + \int_0^t \int_0^{z_0} G(z, z', t, t') \sum_{i=1}^{n_1} \left[ 2(d_0 - d_1) \sum_{l=1}^{n_1} \left( \left( 1 - \frac{\rho_0 d_0}{\rho_1 d_1} \right) \times \right. \right. \\
 & \times \sum_{l=1}^{n_1} \left( \left( 1 - \frac{\rho_0 d_0}{\rho_1 d_1} \right) \frac{\partial c_0(z', t')}{\partial z'} \Big|_{z'=z'_i} \delta(z' - z'_i) - \right. \\
 & \left. \left. - \frac{\partial c_0(z', t')}{\partial z'} \Big|_{z'=z'_i} \delta(z' - z'_i) - \left( \frac{\rho_0 d_0}{\rho_1 d_1} - 1 \right) \times \right. \right. \\
 & \left. \left. \times \frac{\partial c_0(z', t')}{\partial z'} \Big|_{z=z_i+h_{11}} \delta(z' - (z'_i + h_{11})) \right) \right] + (d_0 - d_1) \times \\
 & \times \sum_{l=1}^{n_1} \left( \left( 1 - \frac{k_0}{k_1} \right) c_0(z', t') \Big|_{z'=z'_i} \delta'(z' - z'_i) - \left( \frac{k_0}{k_1} - 1 \right) \times \right. \\
 & \left. \times c_0(z', t') \Big|_{z'=z'_i+h_{11}} \delta'(z' - (z'_i + h_{11})) \right) \Big] dz' dt' \quad (38)
 \end{aligned}$$

Усереднюємо вираз (38) за ансамблем конфігурацій фаз з рівномірною функцією розподілу [12] у тілі. Враховуємо, що  $c_0(z, t)$  є не випадковою функцією. Усереднення другого доданку виразу (38) наведено в роботі [12].

Для того, щоб знайти усереднення інших доданків (38) візьмемо відповідні інтеграли від дельта функцій та їх похідних:

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{V} \sum_{l=1}^{n_1} \int_{(V)} \delta(z - z_l) dz_l &= \frac{1}{V} \sum_{l=1}^{n_1} \int_{(V)} \delta(z - (z_l + h_{11})) dz_l = \frac{v_1}{h}; \\
 \frac{1}{V} \sum_{l=1}^{n_1} \int_{(V)} \delta'(z - z_l) dz_l &= \frac{1}{V} \sum_{l=1}^{n_1} \int_{(V)} \delta'(z - (z_l + h_{11})) dz_l = -\frac{v_1}{h}.
 \end{aligned}$$

І як наслідок після усереднення виразу (25) для поля концентрації домішкових частинок отримаємо

$$\begin{aligned}
 \langle c(z, t) \rangle_{conf} &= c_0(z, t) + \int_0^t \int_0^h G(z, z', t, t') [(\rho_0 - \rho_1) \times \\
 & \times \frac{\partial c_0(z', t')}{\partial t'} - (d_0 - d_1) \frac{\partial^2 c_0(z', t')}{\partial z'^2}] \frac{v_1 z'}{h} dz' + \\
 & + \int_h^{z_0-h} G(z, z', t, t') \left[ (\rho_0 - \rho_1) \frac{\partial c_0(z', t')}{\partial t'} - (d_0 - d_1) \times \right. \\
 & \times \frac{\partial^2 c_0(z', t')}{\partial z'^2} \Big] v_1 dz' dt' + \frac{v_1}{h} \int_0^t \int_0^{z_0} G(z, z', t, t') \times \\
 & \times \sum_{i=1}^{n_1} \left[ 2(d_0 - d_1) \left( 1 - \frac{\rho_0 d_0}{\rho_1 d_1} \right) \sum_{l=1}^{n_1} \left( \frac{\partial c_0(z', t')}{\partial z} \Big|_{z'=z'_i} + \right. \right. \\
 & \left. \left. + \frac{\partial c_0(z', t')}{\partial z} \Big|_{z'=z'_i+h_{11}} \right) \right] + (d_0 - d_1) \left( 1 - \frac{k_0}{k_1} \right) \times
 \end{aligned}$$

$$\times \sum_{l=1}^{n_1} \left( c_0(z', t') \Big|_{z'=z'_i} + c_0(z', t') \Big|_{z'=z'_i+h_{11}} \right) dz' dt'. \quad (39)$$

Таким чином ми отримали формулу для знаходження усередненого за ансамблем конфігурацій фаз поля концентрації домішкової речовини у випадково неоднорідній багаточаровій смугі за рівномірного розподілу фаз у тілі та явного врахування стрибків функції та її похідної на границях контакту. Підставляючи у співвідношення (39) вирази для концентрації домішки в однорідному шарі (19) та функції Гріна (20), отримаємо розрахункову формулу для усередненого поля концентрації:

$$\begin{aligned}
 \frac{\langle c(z, t) \rangle}{c_*} \approx & 1 - \frac{z}{z_0} - \frac{2}{z_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{y_n} e^{-d_0 y_n^2 t / \rho_0} \sin(y_n z) + \\
 & + \frac{4v_1}{z_0^2} \sum_{n=1}^{\infty} \left[ \sin(y_n z) e^{-\frac{d_0 y_n^2 t}{\rho_0}} \left[ \frac{d_0 R_n t}{8\rho_0 y_n} \left( 1 - \frac{\rho_1}{\rho_0} \right) + \right. \right. \\
 & \left. \left. + \sum_{\substack{m=1 \\ m \neq n}}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} A_{mn} y_m \left( \frac{d_1}{d_0} - \frac{\rho_1}{\rho_0} \right) A_e \right] \right] + I_2(z, t); \quad (40)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 I_2(z, t) = & \frac{4v_1}{hz_0^2 \rho_0} K_d \left[ \sum_{m=1}^{\infty} \sin(y_m z) (A_m + A_r) - \right. \\
 & \left. \frac{2\rho_0}{d_0} \sum_{\substack{m=1 \\ m \neq n}}^{\infty} \sum_{n=1}^{\infty} A_e \sin(y_m z) B_{nm} \right]; \quad (41)
 \end{aligned}$$

де  $K_d = 2 - \frac{\rho_0 d_0}{\rho_1 d_1} - \frac{k_0}{k_1}$ ;  $R_n = 1 - 4h + 2h^2 y_n^2 +$

$+ 2(1 - 4hy_n) \sin(2y_n h) - \cos(2y_n h)$ ;

$A_{mn} = 2 \sin(hy_n) \sin(hy_m) / h +$

$+ \sin(h(y_n - y_m)) (2(y_n - y_m)^2 - 1) / (y_n - y_m) +$

$+ \sin(h(y_n + y_m)) (1 - 2(y_n + y_m)^2) / (y_n + y_m)$ ,

$y_n = n\pi / z_0$ ,  $y_m = m\pi / z_0$ ;

$A_m = \rho_0 \left( 1 - e^{-\frac{d_0 y_m^2 t}{\rho_0}} \right) \left( \frac{1}{y_m} (1 - \cos(y_m(z_0 - h)) -$

$-\cos(y_m h) + \cos(y_m z_0)) - \frac{1}{2} (\sin(y_m(z_0 - h)) + \sin(y_m h)) \right) / d_0 y_m^2$ ;

$A_e = \left( e^{-\frac{d_0 y_m^2 t}{\rho_0}} - e^{-\frac{d_0 y_n^2 t}{\rho_0}} \right) / (y_n^2 - y_m^2)$ ;  $A_r = e^{-\frac{d_0 y_m^2 t}{\rho_0}} \times$

$\times (\cos(2y_m z_0) - \cos(2y_m h) - \cos(2y_m(z_0 - h)) + 1) / 2y_m$ ;

$B_{nm} = -\cos((y_n - y_m)(z_0 - h)) / 2(y_n - y_m) +$

$+ \cos((y_n + y_m)(z_0 - h)) / 2(y_n + y_m) + y_n / (y_n^2 - y_m^2) +$

$+ \sin(y_m(z_0 - h)) \cos(y_n(z_0 - h)) - \cos((y_n - y_m)z_0) / 2(y_n - y_m) -$

$-\cos((y_n + y_m)z_0) / 2(y_n + y_m) + \cos((y_n - y_m)h) / 2(y_n - y_m) -$

$-\cos((y_n - y_m)h) / 2(y_n + y_m) + \sin(y_m h) \cos(y_n h)$ .

Зазначимо, що за представлення оператора рівняння дифузії у вигляді (17) у порівнянні з відомим раніше [12] виникає додатковий доданок  $I_2(z, t)$ , який пропорційний коефіцієнту  $K_d$ . Цей коефіцієнт залежить від

комбінації коефіцієнтів дифузії і концентраційної залежності хімічних потенціалів у різних фазах, які визначають величину стрибків похідної і самої функції концентрації на границях контакту. У свою чергу знак коефіцієнта  $K_d$  визначає, що врахування ефектів міжфазних границь призводить до збільшення або зменшення усередненої концентрації.

Числовий аналіз усередненого поля концентрації. Числові розрахунки проводились в безрозмірних змінних  $\tau = d_0 t / z_0$ ,  $\xi = z / z_0$ . На рис. 2 проілюстровано характерні розподіли усередненого за ансамблем конфігурацій фаз поля концентрації домішкової речовини, обчисленого за формулою (40), в різні моменти часу.

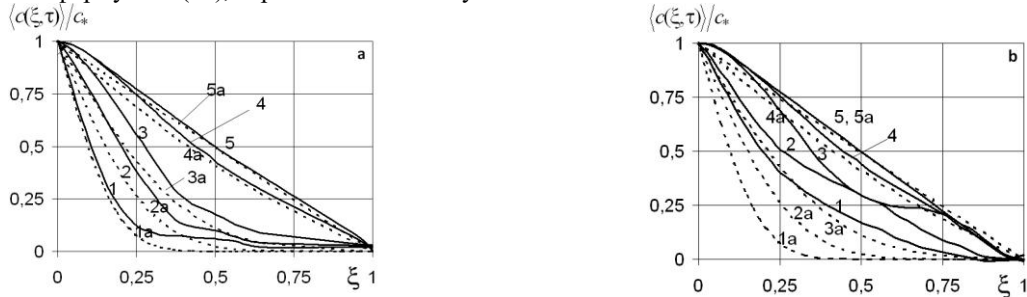


Рисунок 2 – Розподіли усередненої концентрації в різні моменти безрозмірного часу для  $d_1/d_0 = 10$  (рис. а) і  $d_1/d_0 = 50$  (рис. б)

Зазначимо, що за малої об'ємної частки включень  $v_1$  поведінка функції  $\langle c(\xi, \tau) \rangle / c_*$  є однаковою для різних представлень оператора  $L_s(z, t)$ , проте числові значення можуть суттєво відрізнятись. Найбільша відмінність між випадками з явним врахуванням стрибків шуканої функції та її похідної на границях контакту та без цього врахування спостерігається, коли відношення коефіцієнтів переносу у включенні та матриці є меншим одиниці і для середніх часів. Тоді як для випадків  $d_1/d_0 > 1$  відмінність між значеннями концентрації є досить малою, а саме спостерігається у 3-4 значимій цифрі. Для великих значень  $v_1$  врахування стрибків, функції концентрації призводить і до якісних змін, особливо для «середніх» часових інтервалів. При цьому функція  $\langle c(\xi, \tau) \rangle / c_*$  може втратити свою монотонність (крива 3, рис. 2b). Це

При цьому за базові приймалися наступні значення коефіцієнтів  $d_1/d_0 = 0,01$ ;  $\rho_1/\rho_0 = 1,3$ ;  $h = h/z_0 = 0,1$ ;  $v_1 = 0,4$ ;  $k_0 = 1$ ;  $1,4$ . На рис. 2 наведені розподіли усередненої концентрації в різні моменти безрозмірного часу  $\tau = 0,01$ ;  $0,025$ ;  $0,05$ ;  $0,2$ ;  $0,5$  (криві 1-5) для відношень коефіцієнтів дифузії  $d_1/d_0 = 10$  (рис. 2а) і  $d_1/d_0 = 50$  (рис. 2b) за явного врахування стрибків шуканої функції та її похідної на границях контакту, які відмічені суцільними лініями, та за іншого представлення оператора  $L_s(z, t)$  [12], які описують відповідні штрихові лінії.

пояснюється збільшенням числа границь контакту, і, відповідно, кількості стрибків функції концентрації домішки та її похідної.

На рис. 3, 4 наведено розподіли функції  $\langle I_2(\xi, \tau) \rangle$ , яка є різницею між розв'язком (40) та отриманим раніше [17]. На рис. 3 проілюстровано поведінку функції  $\langle I_2(\xi, \tau) \rangle$  (41) для різних значень коефіцієнта концентраційної залежності хімічного потенціалу  $k_1 = 1; 2; 5; 10; 50$  (криві 1–5), коли  $d_1/d_0 = 0,1$  (рис. 3а) та  $d_1/d_0 = 10$  (рис. 3b).

На рис. 4 показаний вплив об'ємної частки включень  $v_1 = 0,01; 0,03; 0,05; 0,1; 0,15; 0,2$  (криві 1–6) на функцію  $\langle I_2(\xi, \tau) \rangle$  для  $k_1 = 50$  (рис. 4а) і  $k_1 = 0,5$  (рис. 4b).

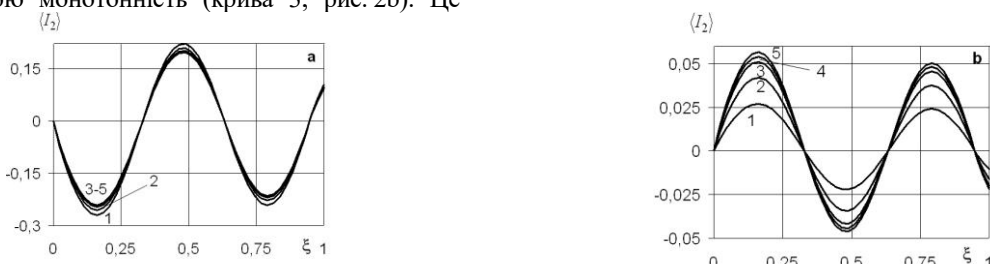


Рисунок 3 – Розподіл  $\langle I_2(\xi, \tau) \rangle$  для різних значень  $k_1$  коли  $d_1/d_0 = 0,1$  (рис. а) та  $d_1/d_0 = 10$  (рис. б)



Рисунок 4 – Розподіл  $\langle I_2(\xi, \tau) \rangle$  для різних значень об'ємної частки включень для  $k_1 = 50$  (рис. 4а) і  $k_1 = 0,5$  (рис. 4б)



Зазначимо, що функція  $\langle I_2(\xi, \tau) \rangle$  має три екстремуми, а саме - два локальні максимуми і один локальний мінімум для додатніх значень  $\langle I_2 \rangle$ . Тоді як для  $\langle I_2 \rangle < 0$  наявні два локальні мінімуми і один локальний максимум. Для приведеного коефіцієнта дифузії, меншого одиниці, зміна коефіцієнта  $k_1$  практично не впливає на величину  $\langle I_2 \rangle$  (рис. 3а). У випадку більших коефіцієнтів дифузії у включеннях зростання коефіцієнта  $k_1$  веде до зростання функції  $\langle I_2(\xi, \tau) \rangle$  на всьому проміжку (рис. 3б).

Зауважимо, що збільшення відношення коефіцієнтів дифузії призводить до зростання значень функції  $\langle I_2(\xi, \tau) \rangle$  та зміни її знаку починаючи від 1.1. Зі зростанням об'ємної частки включень на порядок абсолютні значення доданку усередненого поля концентрації, який виникає за рахунок явного врахування стрибків на міжфазних границях, зростають в рази (рис. 4).

**ВИСНОВКИ.** Побудована нова математична модель дифузії домішкових частинок у двофазних випадково неоднорідних шаруватих тілах, в рамках якої запропоновано нове представлення оператора рівняння дифузії для всього тіла, яке явно враховує стрибки функції концентрації та її похідної на границях контакту фаз. Побудовано інтегро-диференціальне рівняння, еквівалентне вихідній контактній задачі, яке розв'язано шляхом ітерування. Розв'язок отриманий у вигляді інтегрального ряду Неймана. Сформульовані і доведені теореми існування розв'язку та абсолютної і рівномірної збіжності отриманого інтегрального ряду Неймана. Усереднення поля концентрації проведено за ансамблем конфігурацій фаз з рівномірною функцією розподілу включень. Показано, що розрахункова формула для усередненої концентрації за явного врахування її стрибків на міжфазних границях містить додатковий доданок, який для малих об'ємних часток включень не змінює поведінку функції  $\langle c(z, t) \rangle_{conf}$ , проте може суттєво вплинути на її значення. Проведені числові експерименти виявили три екстремуми в поведінці нового доданку функції усередненої концентрації. Встановлено області значень параметрів задачі, за яких цей доданок є нехтовно малим.

## MATHEMATICAL MODELLING OF ADMIXTURE CONCENTRATION DISTRIBUTION IN STOCHASTIC STRATIFIED BODIES UNDER NONIDEAL CONTACT CONDITIONS ON INTERPHASES MEASURES

**O. Chernukha, Y. Bilushchak, V. Goncharuk**

Centre of Mathematical Modelling of Pidstryhach IAPMM of Ukrainian NAS

vul. Dudayeva, 15, 79005, Lviv, Ukraine. E-mail: cher@cmm.lviv.ua, byixx13@gmail.com.

Lviv Polytechnic National University Ministry of Education and Science of Ukraine

vul. Bandery, 12, 79013, Lviv, Ukraine. E-mail: vgoncharuk@ukr.net

**Purpose.** To investigate the processes of admixture diffusion in a two-phase stratified strip of randomly nonhomogeneous structure taking into account jump discontinuities of the function of concentration as well as its derivative on interphases. **Methodology.** We have applied mathematical modelling the diffusion processes in stochastic stratified bodies basing on the approach to mathematical description of mass transfer in randomly nonhomogeneous structures, in which sizes of nonhomogeneities can be commensurable with the body sizes. By this approach the random contact initial-boundary value problem of admixture mass transfer is reduced to the equivalent integro-differential equation, and its solution is obtained in the form of Neumann series that gives the opportunity to perform of procedure of averaging the concentration field over the ensemble of phase configurations. **Results.** We have obtained the calculating formula

## ЛІТЕРАТУРА

1. Loimer T., Uchytel P. Influence of the flow direction on the mass transport of vapors through membranes consisting of several layers // *Experimental Thermal and Fluid Science.* – 2015. – 67. – P. 2–5.
2. Mikdam A., Makardi A., Ahzi S., Garmestani H, Li D.S., Remond Y. Effective conductivity in isotropic heterogeneous media using a strong-contrast statistical continuum theory // *J. Mech. and Phys. of Solids.* – 2009. – 57. – P. 76–86.
3. Ngan A.H.W. Canonical ensemble for static elastic structures with random microstructures // *J. Mech. and Phys. of Solids.* – 2009. – 57. – P. 803–811.
4. Chaudhari G., Acoff V. Cold roll bonding of multi-layered bi-metal laminate composites // *Composites Science and Technology.* – 2009. – 69, Issue 10. – P. 1667-1675.
5. Yang Y., Wang D., Lin J., Khan D., Lin G., Ma J. Evolution of structure and fabrication of Cu/Fe multilayered composites by a repeated diffusion-rolling procedure // *Materials & Design.* – 2015. – 85. – P. 635–639.
6. Keller J.B. Flow in random porous media // *Transport in Porous Media.* – 2001. – 43. – P. 395–406.
7. Классификация композиционных материалов. -2014. - <http://metal-archive.ru/litye-materialy/94-klassifikaciya-kompozicionnyh-materialov.html> [technologicheskie-shemy-polucheniya-kompozitov.html](http://technologicheskie-shemy-polucheniya-kompozitov.html)
8. Чапля Є., Чернуха О. Математичне моделювання дифузійних процесів у випадкових і регулярних структурах. – Київ: Наук. думка, 2009. – 302 с.
9. Чернуха О., Білушак Ю., Чучвара А. Моделювання дифузійних процесів у стохастично неоднорідних шаруватих структурах. – Львів: Растр-7, 2016. – 262 с.
10. Рытов С., Кравцов Ю., Татарский В. Введение в статистическую радиофизику. Ч. II Случайные поля. – М.: Наука, 1988. – 436 с.
11. Прудников А.П., Брычков Ю.А., Маричев О.И. Интегралы и ряды. Элементарные функции. – М.: Наука, 1981. – 798 с.
12. Chaplya Y., Chernukha O., Bilushchak Y. Contact initial boundary-value problem of the diffusion of admixture particles in a two-phase stochastically inhomogeneous stratified strip // *J. of Mathematical Sciences.* – 2012. – 183, No 1. – P. 83–99.

for the admixture concentration field averaged over the ensemble of phase configurations with the function of uniform distribution. We have shown that the calculating formula for concentration at explicit accounting its jump discontinuities on interphases involves an additional term that does not change the behaviour of the concentration field under small volume fraction of inclusions but can greatly impact on its values. Numerical experiments have been carried out and we have established influence of the medium parameters on distributions of the concentration of admixture particles in stochastic stratified bodies under non-ideal contact conditions. We have brought to light three extremes in behavior of new summand of the averaged concentration. We have established the domain of the problem parameters in which this term is negligibly small. **Originality.** For the first time, in modelling and simulation of physical processes in multiphase randomly nonhomogeneous bodies we have proposed new presentation of the operator of diffusion equation for the whole body, which takes explicitly account of jump discontinuities of the sought function and its derivatives on random interphases. We have constructed new integro-differential equation with random kernel that is equivalent to the original problem. This equation has been solved by the method of iterations and its solution has been found in the form of Neumann series. We have formulated and proved the theorems of both convergence of the obtained series and existence of the solution of the integro-differential equation. The way to prove the first theorem is also new and original, basing on determining the regularities for the coefficients of majorizations provided recursively. **Practical value.** The results obtained in the study give the opportunity to investigate quantitatively concentration of admixture migrating in the two-phase body with randomly disposed layered inclusions under uniform distribution of the phases with explicit accounting jumps of the concentration and its derivative on interphases that is observed in experiments. On the basis on the obtained calculating formulae, the software has been created. The determined regularities can be used for creation of materials with desired properties, at many technological operations, including alloy homogenization, metallization and weld of materials, especially for optimization of work of composite materials in the conditions of aggressive external medium, large external loads and temperatures that leads to changes in structure of multiphase materials, formation of segments of the additional immiscibility of interphase damage and degradation of the functional properties of the material.

**Key words:** diffusion, randomly inhomogeneous stratified structure, nonideal contact condition, uniform distribution.

#### REFERENCES

- Loimer, T. and Uchytel, P. (2015), "Influence of the flow direction on the mass transport of vapors through membranes consisting of several layers", *Experimental Thermal and Fluid Science*, Vol. 67, pp. 2-5.
- Mikdam, A., Makardi, A., Ahzi, S., Garmestani, H, Li, D.S. and Remond, Y. (2009), "Effective conductivity in isotropic heterogeneous media using a strong-contrast statistical continuum theory", *J. Mech. and Phys. of Solids*, Vol. 57, pp. 76-86.
- Ngan, A.H.W. (2009), "Canonical ensemble for static elastic structures with random microstructures", *J. Mech. and Phys. of Solids*, Vol. 57, pp. 803-811.
- Chaudhari, G. and Acoff, V. (2009), "Cold roll bonding of multi-layered bi-metal laminate composites", *Composites Science and Technology*, Vol. 69, Iss. 10, pp. 1667-1675.
- Yang, Y., Wang, D., Lin, J., Khan, D., Lin, G. and Ma, J., (2005), "Evolution of structure and fabrication of Cu/Fe multilayered composites by a repeated diffusion-rolling procedure", *Materials & Design*, Vol. 26, pp. 635-639.
- Keller, J.B., (2001), "Flow in random porous media", *Transport in Porous Media*, Vol. 43, pp. 395-406.
- Classification of composite materials. -2014. -<http://metal-archive.ru/litye-materialy/94-klassifikaciya-kompozicionnyh-materialov.html#technologicheskie-shemy-polucheniya-kompozitov.html>
- Chaplya, Y.Y. and Chernukha, O.Y. (2009), "Mathematical modelling diffusive processes in random and regular structures", *Naukova Dumka*, Kiev, Ukraine.
- Chernukha, O., Bilushchak, Y. and Chuchvara A., (2016), "Modelling the diffusion processes in stochastically nonhomogeneous structures", *Rastr-7*, Lviv, Ukraine.
- Rytov, M., Kravtsov, Y. and Tatarskii, V., (1988), "Introduction to Statistical Radiophysics. Part II. Random Fields", *Nauka*, Moscow, Russia.
- Prudnikov, A.P., Brychkov, Y.A. and Marichev, O.I., (1981) "Integrals and Series, Vol. 1: Elementary Functions", *Nauka*, Moscow, Russia.
- Chaplya, Y., Chernukha, O. and Bilushchak, Y., (2012), "Contact initial boundary-value problem of the diffusion of admixture particles in a two-phase stochastically inhomogeneous stratified strip", *J. of Mathematical Sciences*, Vol. 183, Iss. 1. pp. 83-99.

Стаття надійшла 22.05.2017.