

Математичне моделювання дифузійних процесів у багатофазних тілах випадкової структури з використанням діаграм Фейнмана

Ольга Чернуха

к. ф.-м. н., с. н. с., Центр математичного моделювання ІППММ ім. Я. С. Підстригача НАН України, вул. Дж. Дудасва, 15, Львів, 79005, e-mail: cher@cmm.lviv.ua

У роботі запропоновано новий підхід до фізико-математичного моделювання процесів масоперенесення в багатофазних випадково неоднорідних тілах. Вихідна крайова задача сформульована на основі законів Фіка. Для дослідження усереднених дифузійних полів застосовано техніку діаграм Фейнмана. Отримано нелокальне рівняння дифузії для усередненої функції Гріна. Для дифузійних процесів запропоновано метод покращення збіжності нескінченних інтегральних рядів Неймана.

Ключові слова: багатофазне тіло, процеси масоперенесення, випадкове поле концентрації, усереднення за ансамблем конфігурацій фаз, діаграми Фейнмана.

Вступ. У практиці часто виникає необхідність досліджувати процеси масоперенесення в багатофазних багатокомпонентних середовищах, оскільки цими процесами визначається поширення забруднюючих речовин в оточуючому середовищі, надійність вузлів та елементів конструкцій, зокрема, з композитних матеріалів.

Для опису процесів у тілах із випадково неоднорідною структурою розвинені методи гомогенізації [1-3], в яких певним чином означають і використовують середні та ефективні параметри досліджуваних фізичних полів та середовища. За таких підходів приймається умова малості розмірів включень порівняно з характерними відстанями змін параметрів полів [1], що, як правило, забезпечує виконання умов теореми ергодичності процесів [4].

У роботі запропоновано подальший розвиток підходу [5] до моделювання дифузійних процесів у багатофазних стохастично неоднорідних тілах для випадків, коли розміри тіла та включень окремих фаз є співмірні. Вихідна математична модель масоперенесення записана з використанням законів Фіка. Фізичні властивості різних фаз враховуються в коефіцієнтах рівняння дифузії та граничних умовах. З використанням діаграмної (графічної) техніки отримано рівняння Дайсона для усередненого дифузійного поля домішкових частинок, породженого точковим джерелом, і відповідне нелокальне рівняння дифузії. Також запропоновано метод покращення збіжності інтегрального ряду Неймана задачі дифузії. Тут випадковими дифузійними полями називатимемо випадкові поля [6], що описують дифузійні процеси у стохастично неоднорідних середовищах.

1. Випадкове поле концентрації в багатофазному тілі

Нехай домішкова речовина мігрує в тілі, що складається з $N + 1$ випадково розташованих фаз, фізичні характеристики яких суттєво відрізняються. При цьому точна геометрична конфігурація структури тіла невідома. Приймаємо, що об'ємна частка v_0 однієї фази (матриці) значно більша від об'ємних часток v_j ($j = \overline{1, N}$) включень ($v_0 \gg v_j$, $j = \overline{1, N}$), а густина тіла $\rho(\vec{r})$ та кінетичний коефіцієнт дифузії $d(\vec{r})$ є постійними величинами в об'ємі кожної фази, де \vec{r} — радіус-вектор біжучої точки простору.

Дифузія домішкової речовини в такому тілі, виходячи з законів Фіка [7], описується рівнянням [8, 9]

$$L(\vec{r}, t)c(\vec{r}, t) \equiv \rho(\vec{r}) \frac{\partial c(\vec{r}, t)}{\partial t} - \vec{\nabla} [d(\vec{r}) \vec{\nabla} c(\vec{r}, t)] = 0. \quad (1)$$

Тут $c(\vec{r}, t)$ — випадкове поле концентрації домішкової речовини в тілі, $\vec{\nabla}$ — оператор Гамільтона.

Нехай задані крайові умови I-го роду на поле концентрації

$$c(\vec{r}, t)|_{t=0} = b_1(\vec{r}), \quad c(\vec{r}, t)|_{\vec{r} \in (\partial V)} = b_2(t), \quad (2)$$

де $b_1(\vec{r})$, $b_2(t)$ — відомі детерміновані функції; (∂V) — границя тіла з об'ємом V .

Уведемо в розгляд випадкову функцію $\eta_{ij}(\vec{r})$ типу одиничної сходинкової функції Гевісайда, яка визначає конфігурацію (розташування) фаз в області тіла і означена таким чином [10]

$$\eta_{ij}(\vec{r}) = \begin{cases} 1, & \vec{r} \in (V_i^{(j)}), \\ 0, & \vec{r} \notin (V_i^{(j)}), \end{cases} \quad \sum_{j=0}^N \sum_{i=1}^{n_j} \eta_{ij}(\vec{r}) = 1. \quad (3)$$

де $(V_i^{(j)})$ — i -та однозв'язна область (i -те включення) j -ої фази; i — номер включення ($i = \overline{1, n_j}$), n_j — кількість включень сорту j ($j = \overline{0; N}$). Тоді

$$d(\vec{r}) = \sum_{j=0}^N \sum_{i=1}^{n_j} d_j \eta_{ij}(\vec{r}), \quad \rho(\vec{r}) = \sum_{j=0}^N \sum_{i=1}^{n_j} \rho_j \eta_{ij}(\vec{r}). \quad (4)$$

Підставимо подання (4) в рівняння дифузії (1) та врахуємо, що

$$\sum_{j=0}^N \sum_{i=1}^{n_j} \vec{\nabla} (d_j \eta_{ij}(\vec{r})) = \sum_{j=0}^N \sum_{i=1}^{n_j} [d(\vec{r})]_{\Gamma_{ij}} \delta(\vec{r} - \vec{r}_{ij}^{\Gamma}), \quad (5)$$

де $[d(\vec{r})]_{\Gamma_{ij}}$ — вектор-функція стрибка кінетичного коефіцієнта на границі одно-
зв'язної області $(V_i^{(j)})$, Γ_{ij} — границя цієї області; \vec{r}_{ij}^Γ — радіус-вектор точок
границі Γ_{ij} . Тоді отримуємо

$$L(\vec{r}, t)c(\vec{r}, t) = \sum_{j=0}^N \sum_{i=1}^{n_j} \left[\rho_j \eta_{ij}(\vec{r}) \frac{\partial c}{\partial t} - d_j \eta_{ij}(\vec{r}) \Delta c - \frac{1}{2} [d(\vec{r})]_{\Gamma_{ij}} \delta(\vec{r} - \vec{r}_{ij}^\Gamma) \vec{\nabla} c \right] = 0. \quad (6)$$

До одержаного рівняння додаємо і віднімаємо невиняковий оператор ди-
фузії $L_0(\vec{r}, t)$ з коефіцієнтами базової фази

$$L_0(\vec{r}, t) = \rho_0 \frac{\partial}{\partial t} - d_0 \Delta. \quad (7)$$

Тоді, з урахуванням умови суцільності тіла (3), рівняння (6) набуде вигляду

$$L_0(\vec{r}, t)c(\vec{r}, t) = [L_0(\vec{r}, t) - L(\vec{r}, t)]c(\vec{r}, t). \quad (8)$$

Розв'язок крайової задачі (8), (2) шукатимемо у вигляді нескінченного
інтегрального ряду Неймана [10]. Вважаємо праву частину рівняння (8) джере-
лом, тобто неоднорідність середовища розглядаємо як внутрішні джерела для
процесу масоперенесення у випадково неоднорідному $(N + 1)$ -фазному тілі. Тоді
розв'язок неоднорідної крайової задачі (8), (2) можна подати у вигляді

$$c(\vec{r}, t) = c_0(\vec{r}, t) + \int_0^t \int_{0(V)} G(\vec{r}, \vec{r}', t, t') L_s(\vec{r}', t') c(\vec{r}', t') d\vec{r}' dt', \quad (9)$$

де $c_0(\vec{r}, t)$ — розв'язок такої однорідної крайової задачі

$$L_0(\vec{r}, t)c_0(\vec{r}, t) \equiv \rho_0 \frac{\partial c_0(\vec{r}, t)}{\partial t} - d_0 \Delta c_0(\vec{r}, t) = 0; \quad (10)$$

$$c_0(\vec{r}, t)|_{t=0} = b_1(\vec{r}), \quad c_0(\vec{r}, t)|_{\vec{r} \in (\partial V)} = b_2(t); \quad (11)$$

$$L_s(\vec{r}', t') \equiv L_0(\vec{r}', t') - L(\vec{r}', t'),$$

тобто

$$L_s(\vec{r}, t) = \sum_{j=1}^N (\rho_0 - \rho_j) \sum_{i=1}^{n_j} \eta_{ij}(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial t} - \sum_{j=1}^N (d_0 - d_j) \sum_{i=1}^{n_j} \eta_{ij}(\vec{r}) \Delta + \\ + \frac{1}{2} \sum_{j=0}^N \sum_{i=1}^{n_j} [d(\vec{r})]_{\Gamma_{ij}} \delta(\vec{r} - \vec{r}_{ij}^\Gamma) \vec{\nabla}; \quad (12)$$

$G(\vec{r}, \vec{r}', t, t')$ — функція Гріна задачі (8), (2), яка визначається як розв'язок такої
задачі [11]

$$\rho_0 \frac{\partial G(\vec{r}, \vec{r}', t, t')}{\partial t} - d_0 \Delta_{\vec{r}} G(\vec{r}, \vec{r}', t, t') = \delta(t - t') \delta(\vec{r} - \vec{r}'), \quad (13)$$

$$G(\vec{r}, \vec{r}', t, t') \Big|_{t=0} = 0, \quad G(\vec{r}, \vec{r}', t, t') \Big|_{\vec{r} \in (\partial V)} = 0. \quad (14)$$

Таким чином вихідна крайова задача зведена до еквівалентного їй інтегро-диференціального рівняння (9). Розв'язок цього рівняння будуємо ітеруванням (методом послідовних наближень). Оскільки рівняння (9) справедливе для всіх точок області $\{t \in [0; \tau[, \vec{r} \in (V)\}$, зокрема для $\vec{r} = \vec{r}'$ і $t = t'$, то, щоб отримати першу ітерацію, запишемо значення функції концентрації в точці (\vec{r}', t') . Отже маємо

$$c(\vec{r}', t') = c_0(\vec{r}', t') + \int_0^{t'} \int_{(V)} G(\vec{r}', \vec{r}'', t', t'') L_s(\vec{r}'', t'') c(\vec{r}'', t'') d\vec{r}'' dt''$$

і підставимо цей вираз у праву частину (9). Тоді одержимо

$$c(\vec{r}, t) = c_0(\vec{r}, t) + \int_0^t \int_{(V)} G(\vec{r}, \vec{r}', t, t') L_s(\vec{r}', t') c_0(\vec{r}', t') d\vec{r}' dt' + \\ + \int_0^t \int_{(V)} G(\vec{r}, \vec{r}', t, t') L_s(\vec{r}', t') \int_0^{t'} \int_{(V)} G(\vec{r}', \vec{r}'', t', t'') L_s(\vec{r}'', t'') c(\vec{r}'', t'') d\vec{r}'' dt'' d\vec{r}' dt'. \quad (15)$$

Записавши значення концентрації у точці (\vec{r}'', t'') і підставивши її у праву частину (15), одержимо другу ітерацію. Повторюючи таку операцію нескінченну кількість разів, отримаємо інтегральний ряд Неймана, а саме

$$c(\vec{r}, t) = c_0(\vec{r}, t) + \int_0^t \int_{(V)} G(\vec{r}, \vec{r}', t, t') L_s(\vec{r}', t') c_0(\vec{r}', t') d\vec{r}' dt' + \\ + \int_0^t \int_{(V)} G(\vec{r}, \vec{r}', t, t') L_s(\vec{r}', t') \int_0^{t'} \int_{(V)} G(\vec{r}', \vec{r}'', t', t'') L_s(\vec{r}'', t'') c_0(\vec{r}'', t'') d\vec{r}'' dt'' d\vec{r}' dt' + \\ + \int_0^t \int_{(V)} G(\vec{r}, \vec{r}', t, t') L_s(\vec{r}', t') \int_0^{t'} \int_{(V)} G(\vec{r}', \vec{r}'', t', t'') L_s(\vec{r}'', t'') \times \\ \times \int_0^{t''} \int_{(V)} G(\vec{r}'', \vec{r}''', t'', t''') L_s(\vec{r}''', t''') c_0(\vec{r}''', t''') d\vec{r}''' dt''' d\vec{r}'' dt'' d\vec{r}' dt' + \dots \quad (16)$$

Перший член ряду Неймана (16) — концентрація $c_0(\vec{r}, t)$ в однорідному середовищі з фізичними характеристиками ρ_0, d_0 . Другий доданок

$$c^{(1)}(\vec{r}, t) = \int_0^t \int_{0(V)} G(\vec{r}, \vec{r}', t, t') L_s(\vec{r}', t') c_0(\vec{r}', t') d\vec{r}' dt' \quad (17)$$

описує збурення концентраційного поля, що виникають внаслідок наявності у тілі включень. Тобто, враховуючи вигляд оператора $L_s(\vec{r}, t)$ (12), можемо стверджувати, що $c^{(1)}(\vec{r}, t)$ є сумою збурень поля концентрації, кожне з яких виникає, якщо в однорідне середовище помістити включення з характеристиками, відмінними від характеристик базової фази. До того ж враховуються й ефекти границь цього включення. Третій доданок у ряді (16) можна подати у формі, аналогічній (17), а саме

$$c^{(2)}(\vec{r}, t) = \int_0^t \int_{0(V)} G(\vec{r}, \vec{r}', t, t') L_s(\vec{r}', t') c^{(1)}(\vec{r}', t') d\vec{r}' dt'.$$

Він відповідає тим збуренням, які виникають внаслідок поміщення в середовище з параметрами матриці почергово двох включень, тобто $c^{(2)}(\vec{r}, t)$ описує ефекти парного взаємовпливу таких включень на поле концентрації. n -ий доданок ряду (16) можна подати так

$$c^{(n)}(\vec{r}, t) = \int_0^t \int_{0(V)} G(\vec{r}, \vec{r}', t, t') L_s(\vec{r}', t') c^{(n-1)}(\vec{r}', t') d\vec{r}' dt', \quad (18)$$

який є n -м рекурентним кроком методу послідовних наближень [12].

Тобто ряд Неймана (16) — це розвинення поля концентрації за збуреннями, які виникають у системі через наявність включень з іншими, ніж у матриці, дифузійними характеристиками.

2. Середнє поле концентрації в багатофазному випадково неоднорідному тілі

Усреднимо випадкове поле концентрації (16) за ансамблем конфігурацій фаз із заданою функцією розподілу. Тоді отримаємо

$$\begin{aligned} \langle c(\vec{r}, t) \rangle &= c_0(\vec{r}, t) + \int_0^t \int_{0(V)} G(\vec{r}, \vec{r}', t, t') \langle L_s(\vec{r}', t') \rangle c_0(\vec{r}', t') d\vec{r}' dt' + \\ &+ \int_0^t \int_{0(V)} \int_0^{t'} \int_{0(V)} G(\vec{r}, \vec{r}', t, t') \langle L_s(\vec{r}', t') G(\vec{r}', \vec{r}'', t', t'') L_s(\vec{r}'', t'') \rangle c_0(\vec{r}'', t'') d\vec{r}'' dt'' d\vec{r}' dt' + \\ &+ \int_0^t \int_{0(V)} \int_0^{t'} \int_0^{t''} \int_{0(V)} \int_{0(V)} G(\vec{r}, \vec{r}', t, t') \langle L_s(\vec{r}', t') G(\vec{r}', \vec{r}'', t', t'') L_s(\vec{r}'', t'') \times \\ &\times G(\vec{r}'', \vec{r}''', t'', t''') L_s(\vec{r}''', t''') \rangle c_0(\vec{r}''', t''') d\vec{r}''' dt''' d\vec{r}'' dt'' d\vec{r}' dt' + \dots \end{aligned} \quad (19)$$

При цьому, враховуючи вигляд оператора L_s , необхідно визначити вирази на зразок $\langle \eta_{ij}(\vec{r}') \rangle$, $\langle \delta(\vec{r}' - \vec{r}_{ij}^\Gamma) \rangle$, $\langle \eta_{ij}(\vec{r}') \eta_{kl}(\vec{r}'') \rangle$, $\langle \delta(\vec{r}' - \vec{r}_{ij}^\Gamma) \delta(\vec{r}'' - \vec{r}_{kl}^\Gamma) \rangle$, $\langle \eta_{ij}(\vec{r}') \delta(\vec{r}'' - \vec{r}_{kl}^\Gamma) \rangle$ і т. д. Тобто для розрахунку усередненого поля концентрації потрібно знати моменти $\langle \eta_{ij}(\vec{r}') \dots \eta_{kl}(\vec{r}^{(n)}) \rangle$, $\langle \delta(\vec{r}' - \vec{r}_{ij}^\Gamma) \dots \delta(\vec{r}^{(n)} - \vec{r}_{kl}^\Gamma) \rangle$, $\langle \eta_{ij}(\vec{r}') \dots \delta(\vec{r}'' - \vec{r}_{kl}^\Gamma) \rangle$ будь-якого порядку. При довільній статистиці це складна задача, до того ж необхідно побудувати методи сумування усереднених рядів. Враховуючи характерні часи релаксації дифузійних процесів, у разі малої об'ємної частки включень, можна обмежитися "борнівським наближенням" [13], тобто враховувати лише два перші члени ряду Неймана.

У цьому випадку, відповідно до (12), (17), випадкове поле $c^{(1)}$ є лінійним функціоналом від флуктуацій $\tilde{d}(\vec{r}) = d(\vec{r}) - \langle d(\vec{r}) \rangle$, $\tilde{\rho}(\vec{r}) = \rho(\vec{r}) - \langle \rho(\vec{r}) \rangle$. Тому всі моменти поля $c^{(1)}$ лінійно визначаються через моменти $\tilde{d}(\vec{r})$, $\tilde{\rho}(\vec{r})$ того ж порядку.

Усереднене поле концентрації у борнівському наближенні є таким

$$\langle c(\vec{r}, t) \rangle = c_0(\vec{r}, t) + \int_0^t \int_{(V)} G(\vec{r}, \vec{r}', t, t') \langle L_s(\vec{r}', t') \rangle c_0(\vec{r}', t') d\vec{r}' dt'. \quad (20)$$

Кореляційна (автокореляційна) функція за означенням дорівнює

$$\Psi_c(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t) \equiv \langle c(\vec{r}_1, t) c(\vec{r}_2, t) \rangle - \langle c(\vec{r}_1, t) \rangle \langle c(\vec{r}_2, t) \rangle. \quad (21)$$

Якщо покладемо тут $\vec{r}_1 = \vec{r}_2 = \vec{r}$, то отримаємо дисперсію $D[c]$ випадкового поля (тобто середній квадрат флуктуації) в точці \vec{r}

$$D[c] \equiv \sigma_c^2(\vec{r}, t) \equiv \langle |\tilde{c}(\vec{r}_1, t)|^2 \rangle = \langle [c(\vec{r}, t) - \langle c(\vec{r}, t) \rangle]^2 \rangle. \quad (22)$$

Зазначимо, що (21) і вирази для вищих моментів поля $c(\vec{r}, t)$ дають повний статистичний розв'язок задачі.

3. Діаграмна техніка для усередненого дифузійного поля домішкових частинок

Якщо вихідну крайову задачу (1), (2) можна сформулювати у вигляді рівняння

$$L(\vec{r}, t) c(\vec{r}, t) \equiv \rho(\vec{r}) \frac{\partial c(\vec{r}, t)}{\partial t} - \vec{\nabla} [d(\vec{r}) \vec{\nabla} c(\vec{r}, t)] = f(\vec{r}, t), \quad (23)$$

з нульовими крайовими умовами, де $f(\vec{r}, t)$ — джерело (детермінована функція), тоді розв'язок такої задачі можна подати через функцію Гріна

$$c(\vec{r}, t) = \int_0^t \int_{0(V)} G(\vec{r}, \vec{r}', t, t') f(\vec{r}', t') d\vec{r}' dt', \quad (24)$$

де функція Гріна $G(\vec{r}, \vec{r}', t, t')$ (яка є випадковим полем) задовольняє крайову задачу з точковим джерелом

$$\rho(\vec{r}) \frac{\partial G(\vec{r}, \vec{r}', t, t')}{\partial t} - \vec{\nabla}_{\vec{r}} \left[d(\vec{r}) \vec{\nabla}_{\vec{r}} G(\vec{r}, \vec{r}', t, t') \right] = \delta(t - t') \delta(\vec{r} - \vec{r}'), \quad (25)$$

$$G(\vec{r}, \vec{r}', t, t') \Big|_{t=0} = G(\vec{r}, \vec{r}', t, t') \Big|_{\vec{r} \in (\partial V)} = 0. \quad (26)$$

Додамо і віднімемо в рівнянні (25) детермінований оператор L_0 , коефіцієнти якого є або характеристиками базової фази, якщо $v_0 \gg v_j$ ($j = \overline{1, N}$), або усередненими за ансамблем реалізацій величинами $\langle \rho(\vec{r}) \rangle$, $\langle d(\vec{r}) \rangle$ (у разі рівномірного розподілу фаз в області тіла ці коефіцієнти співпадають із середніми за об'ємом тіла). Тоді, враховуючи формулу (9), для функції Гріна отримаємо інтегральне рівняння

$$G(\vec{r}, \vec{r}', t, t') = G_0(\vec{r}, \vec{r}', t, t') + \int_0^t \int_{0(V)} G_0(\vec{r}, \vec{r}_1, t, t_1) L_s(\vec{r}_1, t_1) G(\vec{r}_1, \vec{r}', t_1, t') d\vec{r}_1 dt_1, \quad (27)$$

де $G_0(\vec{r}, \vec{r}', t, t')$ — функція Гріна для однорідного середовища і є розв'язком задачі

$$\langle \rho(\vec{r}) \rangle \frac{\partial G_0(\vec{r}, \vec{r}', t, t')}{\partial t} - \vec{\nabla}_{\vec{r}} \left[\langle d(\vec{r}) \rangle \vec{\nabla}_{\vec{r}} G_0(\vec{r}, \vec{r}', t, t') \right] = \delta(t - t') \delta(\vec{r} - \vec{r}'), \quad (28)$$

$$G_0(\vec{r}, \vec{r}', t, t') \Big|_{t=0} = G_0(\vec{r}, \vec{r}', t, t') \Big|_{\vec{r} \in (\partial V)} = 0.$$

Підставляючи у формулі (16) $G_0(\vec{r}, \vec{r}', t, t')$ замість $c_0(\vec{r}, t)$, отримаємо ряд

$$\begin{aligned} G(\vec{r}, \vec{r}', t, t') &= G_0(\vec{r}, \vec{r}', t, t') + \int_0^t \int_{0(V)} G_0(\vec{r}, \vec{r}_1, t, t_1) L_s(\vec{r}_1, t_1) G_0(\vec{r}_1, \vec{r}', t_1, t') d\vec{r}_1 dt_1 + \\ &+ \int_0^t \int_{0(V)} G_0(\vec{r}, \vec{r}_1, t, t_1) L_s(\vec{r}_1, t_1) \int_0^{t_1} \int_{0(V)} G_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t_1, t_2) L_s(\vec{r}_2, t_2) \times \\ &\times G_0(\vec{r}_2, \vec{r}', t_2, t') d\vec{r}_2 dt_2 d\vec{r}_1 dt_1 + \dots \end{aligned} \quad (29)$$

Згідно з формулою (24) усереднене за ансамблем конфігурацій фаз поле концентрації $\langle c(\vec{r}, t) \rangle$ визначається через усереднену функцію Гріна $\langle G(\vec{r}, \vec{r}', t, t') \rangle$.

Ряд (29) можна подати у вигляді

$$\begin{aligned}
 G(\vec{r}, \vec{r}', t, t') &= G_0(\vec{r}, \vec{r}', t, t') + \int_0^t \int_{(V)} G_0(\vec{r}, \vec{r}_1, t, t_1) [L_1(\vec{r}_1, t_1) - L_2(\vec{r}_1)] \times \\
 &\times G_0(\vec{r}_1, \vec{r}', t_1, t') d\vec{r}_1 dt_1 + \int_0^t \int_{(V)} G_0(\vec{r}, \vec{r}_1, t, t_1) [L_1(\vec{r}_1, t_1) - L_2(\vec{r}_1)] \times \\
 &\times \int_0^{t_1} \int_{(V)} G_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t_1, t_2) [L_1(\vec{r}_2, t_2) - L_2(\vec{r}_2)] G_0(\vec{r}_2, \vec{r}', t_2, t') d\vec{r}_2 dt_2 d\vec{r}_1 dt_1 + \dots, \quad (30)
 \end{aligned}$$

де $L_1(\vec{r}, t) = [\langle \rho(\vec{r}) \rangle - \rho(\vec{r})] \frac{\partial}{\partial t} = \tilde{\rho}(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial t}$; $L_2(\vec{r}) = \vec{\nabla} [\langle d(\vec{r}) \rangle - d(\vec{r})] \vec{\nabla} = \vec{\nabla} [\tilde{d}(\vec{r}) \vec{\nabla}]$.

Якщо $|L_1(\vec{r}, t)G_0(\vec{r}, \vec{r}', t, t')| \ll |L_2(\vec{r})G_0(\vec{r}, \vec{r}', t, t')|$ (локальні зміни в часі є менш істотними ніж просторові), то дія оператора L_1 на функцію Гріна G_0 нехтовно мала порівняно з дією оператора L_2 на G_0 . Тоді ряд (30) набуває вигляду

$$\begin{aligned}
 G(\vec{r}, \vec{r}', t, t') &= G_0(\vec{r}, \vec{r}', t, t') + \int_0^t \int_{(V)} G_0(\vec{r}, \vec{r}_1, t, t_1) L_2(\vec{r}_1) G_0(\vec{r}_1, \vec{r}', t_1, t') d\vec{r}_1 dt_1 + \\
 &+ \int_0^t \int_{(V)} G_0(\vec{r}, \vec{r}_1, t, t_1) L_2(\vec{r}_1) \int_0^{t_1} \int_{(V)} G_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t_1, t_2) \times \\
 &\times L_2(\vec{r}_2) G_0(\vec{r}_2, \vec{r}', t_2, t') d\vec{r}_2 dt_2 d\vec{r}_1 dt_1 + \dots \quad (31)
 \end{aligned}$$

Щоб дослідити структуру цього ряду, введемо графічне зображення його елементів у вигляді діаграм Р. Фейнмана [14].

Співставимо функції $G_0(\vec{r}_i, \vec{r}_j, t_i, t_j)$ відрізок прямої лінії, кінцям якої припишемо координати (\vec{r}_i, t_i) та (\vec{r}_j, t_j)

$$G_0(\vec{r}_i, \vec{r}_j, t_i, t_j) \sim \overline{(\vec{r}_i, t_i) (\vec{r}_j, t_j)},$$

графічне зображення для оператора L_2 в точці (\vec{r}_i, t_i)

$$L_2(\vec{r}_i) = \vec{\nabla}_{\vec{r}_i} [\tilde{d}(\vec{r}_i) \vec{\nabla}_{\vec{r}_i}] \sim \begin{array}{c} \uparrow \\ (\vec{r}_i, t_i) \end{array}.$$

Позначимо функцію Гріна G наступним чином

$$G(\vec{r}, \vec{r}', t, t') \sim \sim \sim,$$

Точки (\vec{r}_i, t_i) , (\vec{r}_j, t_j) , в яких сходяться лінії, що зображають G_0 та L_2 , є вершинами діаграми. Прийmemo, що за координатами внутрішніх вершин відбу-

вається інтегрування. Кількість таких вершин у діаграмі визначає порядок діаграми.

Тоді ряд (31) у графічному вигляді буде таким

$$\sim = \text{---} + \frac{\text{---} \cdot \text{---}}{(\vec{r}_1, t_1)} + \frac{\text{---} \cdot \text{---} \cdot \text{---}}{(\vec{r}_1, t_1) (\vec{r}_2, t_2)} + \frac{\text{---} \cdot \text{---} \cdot \text{---} \cdot \text{---}}{(\vec{r}_1, t_1) (\vec{r}_2, t_2) (\vec{r}_3, t_3)} + \dots \quad (32)$$

Розглянемо тепер усереднену функцію Гріна. Позначимо

$$\langle G(\vec{r}, \vec{r}', t, t') \rangle \sim \overline{(\vec{r}, t) (\vec{r}', t')} .$$

Статистичні властивості визначаються кумулянтними (або кореляційними) функціями усіх порядків. Співставимо їм пунктирні лінії. Порядок кумулянтної функції $\psi_k(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_k)$ співпадає з порядком діаграми

$$\psi_k(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_k) \sim \begin{array}{c} \bullet \\ \diagdown \quad \diagup \\ \vec{r}_1 \quad \vec{r}_2 \quad \dots \quad \vec{r}_k \end{array} .$$

Тоді моменти від оператора L_2 , що містить флуктуації $\tilde{d}(\vec{r})$, набудуть вигляду

$$\langle L_2(\vec{r}_1) \rangle = \langle \vec{\nabla} [\tilde{d}(\vec{r}_1)] \vec{\nabla} \rangle \sim \begin{array}{c} \bullet \\ \vdots \\ \vec{r}_1 \end{array} ,$$

$$\langle L_2(\vec{r}_1) L_2(\vec{r}_2) \rangle = \psi_2(\vec{r}_1, \vec{r}_2) - \langle L_2(\vec{r}_1) \rangle \langle L_2(\vec{r}_2) \rangle \sim \begin{array}{c} \bullet \\ \diagdown \quad \diagup \\ \vec{r}_1 \quad \vec{r}_2 \end{array} - \begin{array}{c} \bullet \\ \vdots \\ \vec{r}_1 \end{array} \begin{array}{c} \bullet \\ \vdots \\ \vec{r}_2 \end{array} ,$$

$$\begin{aligned} \langle L_2(\vec{r}_1) L_2(\vec{r}_2) L_2(\vec{r}_3) \rangle &= \psi_3(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3) + \langle L_2(\vec{r}_1) \rangle \langle L_2(\vec{r}_2) L_2(\vec{r}_3) \rangle + \langle L_2(\vec{r}_2) \rangle \langle L_2(\vec{r}_1) L_2(\vec{r}_3) \rangle + \\ &+ \langle L_2(\vec{r}_1) L_2(\vec{r}_2) \rangle \langle L_2(\vec{r}_3) \rangle - 2 \langle L_2(\vec{r}_1) \rangle \langle L_2(\vec{r}_2) \rangle \langle L_2(\vec{r}_3) \rangle \sim \begin{array}{c} \bullet \\ \diagdown \quad \diagup \\ \vec{r}_1 \quad \vec{r}_2 \quad \vec{r}_3 \end{array} + \begin{array}{c} \bullet \\ \vdots \\ \vec{r}_1 \end{array} \begin{array}{c} \bullet \\ \diagdown \quad \diagup \\ \vec{r}_2 \quad \vec{r}_3 \end{array} + \begin{array}{c} \bullet \\ \diagdown \quad \diagup \\ \vec{r}_1 \quad \vec{r}_2 \quad \vec{r}_3 \end{array} + \\ &+ \begin{array}{c} \bullet \\ \diagdown \quad \diagup \\ \vec{r}_1 \quad \vec{r}_2 \quad \vec{r}_3 \end{array} + \begin{array}{c} \bullet \\ \vdots \\ \vec{r}_1 \end{array} \begin{array}{c} \bullet \\ \vdots \\ \vec{r}_2 \end{array} \begin{array}{c} \bullet \\ \vdots \\ \vec{r}_3 \end{array} + \begin{array}{c} \bullet \\ \vdots \\ \vec{r}_1 \end{array} \begin{array}{c} \bullet \\ \vdots \\ \vec{r}_2 \end{array} \begin{array}{c} \bullet \\ \vdots \\ \vec{r}_3 \end{array} \end{aligned}$$

і т. д.

Зауважимо, що, оскільки за координатами $\vec{r}_1, \vec{r}_2, \vec{r}_3$ внутрішніх вершин відбувається інтегрування, то аналітичний вираз, який зображається діаграмою, не залежить від координат внутрішніх вершин. У зв'язку з цим надалі ці координати на діаграмах не зазначаються. Тоді усереднений ряд (31) (або (32) в графічному зображенні) можна подати наступним чином

$$\begin{aligned} \text{---} &= \text{---} + \begin{array}{c} \bullet \\ \vdots \\ \text{---} \end{array} + \begin{array}{c} \bullet \quad \bullet \\ \vdots \quad \vdots \\ \text{---} \end{array} + \begin{array}{c} \bullet \\ \diagdown \quad \diagup \\ \text{---} \end{array} + \begin{array}{c} \bullet \quad \bullet \quad \bullet \\ \vdots \quad \vdots \quad \vdots \\ \text{---} \end{array} + \begin{array}{c} \bullet \\ \vdots \\ \text{---} \end{array} \begin{array}{c} \bullet \quad \bullet \\ \vdots \quad \vdots \\ \text{---} \end{array} + \begin{array}{c} \bullet \\ \vdots \\ \text{---} \end{array} \begin{array}{c} \bullet \\ \vdots \\ \text{---} \end{array} \begin{array}{c} \bullet \\ \vdots \\ \text{---} \end{array} + \\ &+ \begin{array}{c} \bullet \\ \diagdown \quad \diagup \\ \text{---} \end{array} + \begin{array}{c} \bullet \quad \bullet \\ \vdots \quad \vdots \\ \text{---} \end{array} + \begin{array}{c} \bullet \\ \diagdown \quad \diagup \\ \text{---} \end{array} + \begin{array}{c} \bullet \\ \vdots \\ \text{---} \end{array} \begin{array}{c} \bullet \quad \bullet \quad \bullet \\ \vdots \quad \vdots \quad \vdots \\ \text{---} \end{array} + \dots \quad (33) \end{aligned}$$

Зазначимо, що відповідність між діаграмами Фейнмана та аналітичними виразами є взаємно однозначною.

Деякі з діаграм, що входять у (33), містять фрагменти, які є діаграмами нижчого порядку. Наприклад, діаграма 6 містить діаграми 2 і 4. Цим можна скористатися для скорочення запису. До того ж суму ряду (33) можна виразити сумою деякої нескінченної підпоследовності цього ж ряду. Для цього класифікуємо діаграми, що входять у (33).

Діаграму назвемо слабко зв'язаною, якщо її можна розділити на дві окремі діаграми, розірвавши деяку одну лінію G_0 . У формулі (33) слабко зв'язаними є діаграми 3, 5, 6, 7. Решта діаграм є сильно зв'язаними (2, 4, 8, 9, 10). Діаграми, що отримуються внаслідок розриву ліній G_0 можуть виявитися сильно або слабко зв'язаними. Якщо серед «вторинних» діаграм є слабко зв'язані, то їх можна розбити на простіші діаграми. Продовжуючи цю процедуру, в результаті прийдемо до деякої кількості сильно зв'язаних діаграм. Кількість сильно зв'язаних діаграм, на які може бути розбита слабко зв'язана діаграма, є показником зв'язності вихідної діаграми. Так, у формулі (33) діаграми 3 та 6 мають показник зв'язності 2, а діаграма 5 — показник зв'язності 3. Для сильно зв'язаних діаграм приймемо показник зв'язності 1.

У ряді (33) відберемо всі сильно зв'язані діаграми. Оскільки кожна з діаграм починається і закінчується лінією G_0 , то суму всіх сильно зв'язаних діаграм можна подати у вигляді

$$\text{---} \circ \text{---} , \quad (34)$$

де введено позначення

$$\overline{G}^{(\text{сильно зв})}(\vec{r}, \vec{r}', t, t') \sim \text{---} \circ \text{---} = \text{---} \bullet + \text{---} \triangle + \text{---} \triangle \bullet + \text{---} \triangle \bullet \bullet + \text{---} \triangle \bullet \bullet \bullet + \dots \quad (35)$$

В аналітичній формі (35) має вигляд

$$\overline{G}^{(\text{сильно зв})}(\vec{r}, \vec{r}') = \int_0^t \int_0^{t_1} \int_0^{t_1} G_0(\vec{r}, \vec{r}_1, t, t_1) \Sigma(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t_1, t_2) G_0(\vec{r}_2, \vec{r}', t_2, t') d\vec{r}_2 dt_2 d\vec{r}_1 dt_1, \quad (36)$$

де

$$\begin{aligned} \Sigma(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t_1, t_2) &= \langle L_2(\vec{r}_1) \rangle + G_0(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t_1, t_2) \Psi_2(\vec{r}_1, \vec{r}_2) + \\ &+ \int_0^{t_1} \int_0^{t_1} G_0(\vec{r}_1, \vec{r}'_1, t_1, t'_1) \langle L_2(\vec{r}'_1) \rangle G_0(\vec{r}'_1, \vec{r}_2, t'_1, t_2) \Psi_2(\vec{r}_1, \vec{r}_2) d\vec{r}'_1 dt'_1 + \\ &+ \int_0^{t_1} \int_0^{t_1} G_0(\vec{r}_1, \vec{r}'_1, t_1, t'_1) G_0(\vec{r}'_1, \vec{r}_2, t'_1, t_2) \Psi_3(\vec{r}_1, \vec{r}'_1, \vec{r}_2) d\vec{r}'_1 dt'_1 + \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & + \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} \int_{0(V)} G_0(\vec{r}_1, \vec{r}'_1, t_1, t'_1) G_0(\vec{r}'_1, \vec{r}'_2, t'_1, t'_2) G_0(\vec{r}'_2, \vec{r}_2, t'_2, t_2) \times \\
 & \times \psi_2(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \psi_2(\vec{r}'_1, \vec{r}'_2) d\vec{r}'_1 dt'_1 d\vec{r}'_2 dt'_2 + \dots
 \end{aligned} \tag{37}$$

— ядро масового оператора.

Якщо розглянути суму всіх діаграм з показником зв'язності 2, то кожна з них має вигляд

$$\text{---} \circ_{\Sigma_1} \text{---} \circ_{\Sigma_2} \text{---}, \tag{38}$$

де \circ_{Σ_1} і \circ_{Σ_2} — будь-які діаграми, що належать правій частині (37).

Оскільки при побудові ряду (33) перебираються всі можливі способи парного з'єднання вершин, то сума всіх можливих складових на зразок (38) дорівнює

$$\text{---} \bullet \text{---} \bullet \text{---},$$

де \bullet — повна сума (37).

Аналогічно сума всіх діаграм із показником зв'язності 3 має вигляд

$$\text{---} \bullet \text{---} \bullet \text{---} \bullet \text{---}$$

і т. д. Таким чином, усереднену функцію Гріна можна подати у вигляді діаграмного ряду

$$\text{---} = \text{---} + \text{---} \bullet \text{---} + \text{---} \bullet \text{---} \bullet \text{---} + \text{---} \bullet \text{---} \bullet \text{---} \bullet \text{---} + \dots \tag{39}$$

Це подання відрізняється від вихідного діаграмного ряду (33) тільки перегрупуванням його членів.

Виділимо в рівнянні (39) елемент $\text{---} \bullet \text{---}$. Тоді

$$\text{---} = \text{---} + \text{---} \bullet \text{---} \times (\text{---} + \text{---} \bullet \text{---} + \text{---} \bullet \text{---} \bullet \text{---} + \dots). \tag{40}$$

Сумуючи в (40) вираз у дужках, з використанням (39) отримаємо рівняння Дайсона для усередненої функції Гріна у графічній

$$\text{---} = \text{---} + \text{---} \bullet \text{---} \tag{41a}$$

і відповідно аналітичній формі

$$\begin{aligned} \langle G(\vec{r}, \vec{r}', t, t') \rangle &= G_0(\vec{r}, \vec{r}', t, t') + \int_0^t \int_{(V)} \int_0^{t'} \int_{(V)} G_0(\vec{r}, \vec{r}_1, t, t_1) \Sigma(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t_1, t_2) \times \\ &\times \langle G(\vec{r}_2, \vec{r}', t_2, t') \rangle d\vec{r}_2 dt_2 d\vec{r}_1 dt_1. \end{aligned} \quad (41)$$

4. Усереднене поле точкового джерела у випадково неоднорідному тілі

Якщо застосувати до рівняння Дайсона (41) оператор $L_0(\vec{r}, t)$, який визначений формулою (7), то з урахуванням (28) отримаємо

$$\begin{aligned} \langle \rho(\vec{r}) \rangle \frac{\partial \langle G(\vec{r}, \vec{r}', t, t') \rangle}{\partial t} - \vec{\nabla}_{\vec{r}} \left[\langle d(\vec{r}) \rangle \vec{\nabla}_{\vec{r}} \langle G(\vec{r}, \vec{r}', t, t') \rangle \right] - \\ - \int_0^t \int_{(V)} \Sigma(\vec{r}, \vec{r}_1, t, t_1) \langle G(\vec{r}_1, \vec{r}', t_1, t') \rangle d\vec{r}_1 dt_1 = \delta(t - t') \delta(\vec{r} - \vec{r}'). \end{aligned} \quad (42)$$

Із порівняння (28) і (42) випливає, що на відміну від G_0 , функція $\langle G(\vec{r}, \vec{r}', t, t') \rangle$ задовольняє не диференціальне, а інтегродиференціальне рівняння. З фізичної точки зору це означає, що усереднене поле в деякій точці (\vec{r}, t) залежить і від неоднорідностей, які оточують цю точку.

Рівняння Дайсона (41) можна перетворити до вигляду, в якому замість функції Гріна незбуреного середовища G_0 буде фігурувати частково просумована нескінченна підпоследовність ряду для $\langle G \rangle$. Для цього запишемо рівняння Дайсона в операторному вигляді [15]. Уведемо лінійні оператори \hat{M} , \hat{M}_0 та $\hat{\Sigma}$ з ядрами $\langle G \rangle$, G_0 і Σ відповідно

$$\begin{aligned} (\hat{M}f)(\vec{r}, t) &\equiv \int_0^t \int_{(V)} \langle G(\vec{r}, \vec{r}', t, t') \rangle f(\vec{r}', t') d\vec{r}' dt', \\ (\hat{M}_0 f)(\vec{r}, t) &\equiv \int_0^t \int_{(V)} \langle G_0(\vec{r}, \vec{r}', t, t') \rangle f(\vec{r}', t') d\vec{r}' dt' \\ (\hat{\Sigma}f)(\vec{r}, t) &\equiv \int_0^t \int_{(V)} \langle \Sigma(\vec{r}, \vec{r}', t, t') \rangle f(\vec{r}', t') d\vec{r}' dt'. \end{aligned}$$

Запис $(\hat{M}f)(\vec{r}, t)$ означає, що функція f перетворюється оператором \hat{M} у функцію $(\hat{M}f)$, значення якої береться в точці (\vec{r}, t) .

Домножимо (41) на $f(\vec{r}', t')$ та проінтегруємо по \vec{r}', t' . Отримаємо рівність у такій операторній формі $\hat{M}f = \hat{M}_0 f + \hat{M}_0 \hat{\Sigma} \hat{M}f$. Оскільки ця рівність справджується для будь-якої функції f , то її можна записати як рівняння для оператора \hat{M}

$$\hat{M} = \hat{M}_0 + \hat{M}_0 \hat{\Sigma} \hat{M} = \hat{M}_0 (\hat{1} + \hat{\Sigma} \hat{M}). \quad (43)$$

Якщо функція Гріна $G(\vec{r}', \vec{r}'', t', t'')$ є симетричною (наприклад, для статистично однорідного середовища), тобто $G(\vec{r}', \vec{r}'', t', t'') = G(\vec{r}'', \vec{r}', t'', t')$, то симетричною є і усереднена функція Гріна $\langle G \rangle$. З цього випливає, що

$$\hat{M}^T = \hat{M}, \quad (44)$$

де \hat{M}^T — транспонований оператор. Аналогічно із симетрії функції G_0 випливає рівність

$$\hat{M}_0^T = \hat{M}_0. \quad (45)$$

У діаграмній інтерпретації рівність (44) означає, що кожна діаграма, яка входить у ряд для $\langle G \rangle$, є або симетричною відносно вертикальної осі, що проходить через центр діаграми, або, якщо вона не симетрична, то входить в $\langle G \rangle$ сумі з іншою діаграмою, яка отримується із вихідної несиметричної відображенням відносно вертикальної осі. Наприклад, у (33) входять симетричні діаграми 1-5, 8, 9 і пара несиметричних діаграм 6, 7.

Із симетрії $\langle G \rangle$ випливає, що $\Sigma(\vec{r}', \vec{r}'', t', t'') = \Sigma(\vec{r}'', \vec{r}', t'', t')$, оскільки діаграми для Σ мають той самий тип симетрії, що і для $\langle G \rangle$. Відповідно

$$\hat{\Sigma}^T = \hat{\Sigma}. \quad (46)$$

Застосуємо операцію транспонування до рівняння (43), враховуючи, що при транспонуванні добутку операторів їхній порядок змінюється на зворотній. Тоді, з урахуванням (44)-(46), отримаємо рівняння

$$\hat{M} = \hat{M}_0 + \hat{M} \hat{\Sigma} \hat{M}_0 = (\hat{1} + \hat{M} \hat{\Sigma}) \hat{M}_0. \quad (47)$$

Нехай відомо наближений розв'язок \hat{M}_1 рівняння (47), що відповідає наближеному виразу $\hat{\Sigma}_1$, тобто відомо розв'язок рівняння

$$\hat{M}_1 = (\hat{1} + \hat{M}_1 \hat{\Sigma}_1) \hat{M}_0. \quad (48)$$

Наприклад, за такий розв'язок можна вибрати наближення типу Бурре [10]. Домножимо операторне рівняння (43) зліва на оператор $(\hat{1} + \hat{M}_1 \hat{\Sigma}_1)$:

$$(\hat{1} + \hat{M}_1 \hat{\Sigma}_1) \hat{M} = (\hat{1} + \hat{M}_1 \hat{\Sigma}_1) \hat{M}_0 (\hat{1} + \hat{\Sigma} \hat{M}).$$

Враховуючи у правій частині цієї рівності формулу (47), одержимо

$$(\hat{1} + \hat{M}_1 \hat{\Sigma}_1) \hat{M} = \hat{M}_1 (\hat{1} + \hat{\Sigma} \hat{M}).$$

Перенесемо складову $\hat{M}_1 \hat{\Sigma}_1 \hat{M}$ у праву частину рівності і запишемо її у вигляді

$$\hat{M} = \hat{M}_1 + \hat{M}_1 (\hat{\Sigma} - \hat{\Sigma}_1) \hat{M}. \quad (49)$$

Рівняння (49) аналогічне рівнянню Дайсона (43). При цьому, якщо норма оператора $\hat{\Sigma} - \hat{\Sigma}_1$ менша від норми оператора $\hat{\Sigma}$, то ітераційний ряд рівняння (49) буде збігатися швидше, ніж вихідний [16].

Застосовуючи операторну рівність (49) до дельта-функції, отримаємо відповідне рівняння для ядер операторів \hat{M} , \hat{M}_1 , $\hat{\Sigma}$ і $\hat{\Sigma}_1$

$$\begin{aligned} \langle G(\vec{r}, \vec{r}', t, t') \rangle = & \langle G_1(\vec{r}, \vec{r}', t, t') \rangle + \int_0^t \int_{0(V)} \int_0^{t_1} \int_{0(V)} \langle G_1(\vec{r}, \vec{r}_1, t, t_1) \rangle [\Sigma(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t_1, t_2) - \\ & - \Sigma_1(\vec{r}_1, \vec{r}_2, t_1, t_2)] \langle G(\vec{r}_2, \vec{r}', t_2, t') \rangle d\vec{r}_2 dt_2 d\vec{r}_1 dt_1, \end{aligned} \quad (50)$$

де $\langle G_1 \rangle$ — відповідний наближений розв'язок.

Зазначимо, що у випадку статистично однорідного середовища рівняння (50) можна розв'язати за допомогою перетворення Фур'є.

Також зауважимо, що за необхідності наведену процедуру покращення збіжності ряду для $\langle G \rangle$ можна повторити. Наприклад, можна записати наближений вираз для $\Sigma - \Sigma_1 = \Sigma_2$ і знайти відповідний вираз для $\langle G_2 \rangle$.

Техніка діаграм Фейнмана і отримане нелокальне рівняння Дайсона для усередненої функції Гріна (41) наведені для випадку $|L_1 G_0| \ll |L_2 G_0|$. Аналогічним чином можна отримати рівняння Дайсона для $|L_1 G_0| \gg |L_2 G_0|$. Якщо ж не справджується жодна з умов малості, то потрібно додатково враховувати кореляцію цих двох полів, що призведе до іншого типу нелокального рівняння дифузії.

Висновки. Таким чином, у роботі розвинуто підхід до опису процесів дифузії в $(N+1)$ -фазному стохастично неоднорідному тілі, коли розміри певних елементів фаз співмірні з розмірами тіла. У рамках цього підходу вихідній крайовій задачі, в якій фізичні властивості фаз враховані в коефіцієнтах рівняння дифузії, поставлено у відповідність еквівалентне інтегродиференціальне рівняння. Розв'язок такого рівняння знайдено методом послідовних наближень у вигляді нескінченного інтегрального ряду Неймана та усереднено за ансамблем конфігурацій фаз. Аналогічним чином сформульовано інтегродиференціальне рівняння та записано його розв'язок у вигляді ряду Неймана для функції Гріна збуреного середовища.

Для дослідження усереднених дифузійних полів домішкових частинок використано техніку діаграм Фейнмана. Подання розв'язку задачі у вигляді

сукупності діаграм дозволило перетворювати ряд теорії збурень, використовуючи топологічні ознаки діаграм, які входять у розв'язок. Застосування такої техніки дає можливість виразити суму ряду Неймана через суму деякої нескінченної підпоследовності цього ж ряду.

Для усередненої функції Гріна одержано рівняння Дайсона, з якого отримано нелокальне інтегродиференціальне рівняння дифузії.

Зауважимо, що оскільки при знаходженні розв'язку вихідної крайової задачі, отриманні рівняння Дайсона та нелокального рівняння дифузії не використовувався конкретний вигляд розв'язку крайової задачі дифузії в однорідному тілі та відповідної незбуреної функції Гріна, наведені викладки справедливі і для інших типів граничних умов (з обмеженням їхньої детермінованості).

Також зазначимо, що для подальшого розвитку цього наукового напрямку доцільними є дослідження кореляції випадкових дифузійних полів, які породжуються точковими джерелами, отримання нелокального рівняння для функції когерентності, фізико-математичне моделювання процесів дифузії у випадково неоднорідних тілах у рамках теорії бінарних систем.

Література

- [1] *Хорошун Л. П., Солтанов Н. С.* Термоупругость двухкомпонентных смесей. — К.: Наук. думка, 1984. — 112 с.
- [2] *Гамбин Б., Назаренко Л. В., Телега Е.* Стохастическая гомогенизация уравнений стационарной термоупругости // Доп. НАН України. — 2002. — № 10. — С. 37-44.
- [3] *Lidzba D.* Homogenisation theories applied to porous media mechanics // J. Theor. and Appl. Mechanics. — 1998. — Т. 36, № 3. — Р. 657-679.
- [4] *Гихман И. И., Скороход А. В.* Введение в теорию случайных процессов. — М.: Наука, 1977. — 568 с.
- [5] *Чернуха О. Ю.* Про один підхід до побудови розв'язків крайових задач дифузії у багатофазних випадково-неоднорідних шаруватих тілах // Доп. НАН України. — 2001. — № 9. — С. 37-42.
- [6] *Справочник по теории вероятностей и математической статистике / Королюк В. С., Портенко Н. И. и др.* — М.: Наука, 1985. — 640 с.
- [7] *Crank J.* The mathematics of diffusion. — Oxford: Clarendon Press, 1956. — 575 p.
- [8] *Чернуха О. Ю.* Процеси дифузії в багатофазних випадково-неоднорідних волокнистих тілах // Доп. НАН України. — 2002. — № 3. — С. 74-79.
- [9] *Chaplia Y., Chermukha O.* Three-dimensional diffusion in a multiphase body with randomly disposed inclusions of a spherical form // International Journal of Heat and Mass Transfer. — 2003. — Vol. 46. — Р. 3323-3328.
- [10] *Рытов С. М., Крайцов Ю. А., Татарский В. И.* Введение в статистическую радиофизику // Ч. II. Случайные поля. — М.: Наука, 1978. — 436 с.
- [11] *Тихонов А. Н., Самарский А. А.* Уравнения математической физики. — М.: Наука, 1972. — 735 с.
- [12] *Краснов М.* Интегральные уравнения. — М.: Наука, 1975. — 303 с.
- [13] *Борн М., Вольф Э.* Основы оптики. — М.: Наука, 1970. — 426 с.
- [14] *Фейнман Р., Хиббс А.* Квантовая механика и интегралы по траекториям. — М.: Мир, 1968. — 454 с.

- [15] Налбандян О. Г., Татарский В. И. Сопоставление диаграммных и аналитических методов приближенного решения линейных стохастических уравнений // Изв. вузов: Радиофизика. — 1977. — Т. 20. — С. 549-557.
- [16] Колмогоров А. М., Фомін С. В. Элементы теории функций і функціонального аналізу. — К.: Вища шк., 1974. — 456 с.

Mathematical Modelling Diffusive Processes in Multiphase Bodies of Random Structure Using Feynman Diagrams

Olha Chernukha

In the paper new approach to physical-mathematical modelling mass transfer processes in multiphase randomly nonhomogeneous bodies is proposed. An initial-boundary value problem is formulated on the basis of Fick laws. The technique of Feynman diagrams is applied for investigating averaged diffusive fields. A nonlocal equation of diffusion for averaged Green function is obtained. A method for convergence acceleration of infinite integral Neumann series regarding diffusive processes is proposed.

Математическое моделирование диффузионных процессов в многофазных телах случайной структуры с использованием диаграмм Фейнмана

Ольга Чернуха

В работе предложен новый подход к физико-математическому моделированию процессов массопереноса в многофазных случайно неоднородных телах. Краевая задача сформулирована на основании законов Фика. Для исследования усредненных диффузионных полей применена техника диаграмм Фейнмана. Получено нелокальное уравнение диффузии для усредненной функции Грина. Для диффузионных процессов предложен метод улучшения сходимости бесконечных интегральных рядов Неймана.

Отримано 27.08.04