МАТЕМАТИЧНІ МЕТОДИ В ХІМІЇ І БІОЛОГІЇ ISSN 2309-8899
Т. 2, № 1 (2014), С. 35-47

УДК 517.958:532.72

О.Ю. Чернуха[1], О.О. Власій[2]

# Математичне моделювання процесів ґетеродифузії у стохастично неоднорідному, двофазному, багатокомпонентному середовищі

*[1]Центр математичного моделювання Інституту прикладних проблем механіки і математики ім. Я.С. Підстригача НАНУ, вул. Дж. Дудаєва, 15, м. Львів, 79005, Україна*
*[2]Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника, вул. Шевченка, 57, м. Івано-Франківськ, 76018, Україна*

У роботі запропоновано математичну модель масопереносу домішкової речовини двома шляхами, що супроводжується процесами сорбції-десорбції, у двофазному шарі з випадково розташованим прошарком. Випадкова неоднорідність структури врахована в коефіцієнтах системи рівнянь ґетеродифузії. Отримано систему інтеґровано-диференціальних рівнянь зі стохастичними ядрами, еквівалентну вихідному крайовому завданню. Методом послідовних наближень побудовано розв'язок у вигляді інтеґральних рядів Неймана. Процедуру усереднення проведено за ансамблем конфіґурацій фаз із рівномірною функцією розподілу.
**Ключові слова**: ґетеродифузія, концентрація, випадково неоднорідне тіло, функція Ґріна, усереднення за ансамблем конфіґурації фаз.

O.Yu. Chernukha[1], O.O. Vlasiy[2]

# Mathematical Modeling Heterodifussion Processes in a Stochastic Nonhomogeneous, Two-Phase, Multicomponent Medium

*[1]Centre of Mathematical Modelling of Institute of Applied Problems of Mechanics and Mathematics named after Ya.S. Pidstryhach NASU, 15, Dudayeva Str., Lviv, 79005, Ukraine*
*[2]Vasyl Stefanyk Precarpathian National University, 57, Shevchenko Str., Ivano-Frankivsk, 76018, Ukraine*

In the paper the admixture mass transfer processes in a two-phase body with randomly located layer are studied. The mathematical model of mass transfer is proposed with allowing the processes of type sorption-desorption. Stochastic nonhomogeneity of structure is taken into account in coefficients of a system of partial differential equations of heterodifussion. It is obtained the system of integrodifferential equations with stochastic kernels equivalenting to the original boundary value problem. By the method of successive approximations an exact solution is constructed in the form of integtal Neumann series. Averaging the obtained solution is carried out over the ensemble of phase configurations with the uniform ditribution function.
**Key words**: heterodiffusion, concentration, randomly nongomogeneous body, Green function, averaging over the ensemble of phase configuration.

*Стаття поступила до редакції 22.09.2014; прийнята до друку 15.12.2014.*

## Вступ

**1. Активне втручання суспільства у хід природних процесів зумовлює** погіршення екологічного стану навколишнього середовища [1, 2]. Одним із основних чинників, що спричиняють екологічну кризу, є забруднення ґрунтів внаслідок промислової, сільськогосподарської та побутової діяльності людини [3]. Поширення забруднень у довкіллі значною мірою визначається процесами дифузії, які належать до найбільш поширених нерівноваґових процесів у природі. У зв'язку з цим дедалі більшої актуальності набувають дослідження процесів поширення домішкових речовин у стохастично неоднорідних дисперсних системах, якими, до прикладу, є ґрунти. Питання аналізу стану ґрунтів та оцінки захищеності ґрунтових вод у випадку попадання домішкових речовин тісно пов'язане із модельними уяленнями про перерозподіл домішок у приповерхневих шарах Землі [4]. Практичний інтерес, зокрема, становить випадок зволоження приповерхневих шарів, під час якого пори дисперсної системи практично повністю насичені водою і домішкові частинки, в рамках фізичномалого елементу перебувають у фізично різних станах, що істотно впливає на перерозподіл домішкової субстанції (рис. 1). У результаті цього процес просторового перенесення техноґенних домішок відбувається декількома шляхами і супроводжується локальними переходами з одного шляху дифузії на інший.

**2. Короткий огляд літературних джерел інформації,** присвяченій питанням ґетеродифузійних процесів, наведено у роботі [4], а загальні основи опису процесів ґетеродифузії можна знайти, наприклад, в моноґрафіях [5, 6].

**3. На практиці виникає потреба дослідження процесів ґетеродифузії** у багатофазних, багатокомпонентних тілах у випадку стохастичних співрозмірних включень елементів окремих фаз. Дана робота присвячена питанню математичного моделювання процесів ґетеродифузії домішкової речовини із урахуванням локальних переходів між різними станами домішкових частинок (процеси типу сорбції–десорбції) у двофазному багатокомпонентному середовищі з випадково розташованим прошарком з фізико-хімічними характеристиками, відмінними від відповідних параметрів матриці. При цьому прийнято припущення про локальну термодинамічну рівноваґу між другим і третім станами (рис. 1). Тоді система рівнянь ґетеродифузії (математична модель) буде складатися з двох взаємозв'язаних диференціальних рівнянь у частинних похідних [5]. Наявність у тілі випадкового прошарку призводить до стохастичних коефіцієнтів (як дифузійних, так і сорбційних) у системі рівнянь ґетеродифузії.

# I. Об'єкт дослідження. Постановка завдання

Розглянемо дисперсне, двофазне, шарувате тіло товщиною $z_0$, в якому шар однієї фази $\Omega_1$ містить випадково розташований прошарок другої фази $\Omega_2$ товщиною $h$ (рис. 2). Вважатимемо, що фази в тілі розташовані за рівномірним розподілом, а об'ємна частка ділянки $\Omega_1$ є набагато більшою за об'ємну частку $\Omega_2$, тобто $h \ll (z_0 - h)$, де $h = z_2 - z_1$ – товщина ділянки $\Omega_2$. Надалі будемо вважати випадковою величиною координату верхньої межі прошарку $z = z_1$.

Нехай в цьому тілі домішкова речовина дифундує двома шляхами, переходячи з одного шляху міґрації на інший. Вважатимемо, що дифузійні властивості частинок домішки у різних фазах можуть суттєво відрізнятися.

У випадку виконання локальної термодинамічної рівноваґи (між станами домішки на поверхні та в об'ємі скелету) концентрація домішок під час вертикальної ґетеродифузії визначається з системи взаємозв'язаних диференціальних рівнянь [7], коефіцієнти яких є випадковими функціями просторової координати z:

$$\rho(z)\frac{\partial c_1}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z}\left[d_1(z)\frac{\partial c_1}{\partial z} + d_3(z)\frac{\partial c_2}{\partial z}\right] - k_1(z)c_1 + k_2(z)c_2; \qquad (1)$$

$$\rho(z)\frac{\partial c_2}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z}\left[d_2(z)\frac{\partial c_2}{\partial z} + d_4(z)\frac{\partial c_1}{\partial z}\right] - k_2(z)c_2 + k_1(z)c_1, \qquad (2)$$

де $c_i = c_i(z,t)$, $i = 1, 2$ – випадкові концентрації домішки в станах, що відповідають швидкому (за $i = 1$) та повільному (за $i = 2$) шляхам переносу частинок;

$\rho(z)$ – випадкова густина середовища;

$d_i(z)$, $i = 1, 2$ – випадкові кінетичні коефіцієнти дифузії в *i*-ому стані;

$d_i(z)$, $i = 3, 4$ – випадкові коефіцієнти, що відповідають за перехресну дифузію частинок домішки на різних шляхах міґрації;

$k_i(z)$ – випадкові коефіцієнти інтенсивності переходу домішкових частинок зі швидкого шляху міґрації на повільний (за $i = 1$) і зворотного переходу (за $i = 2$).

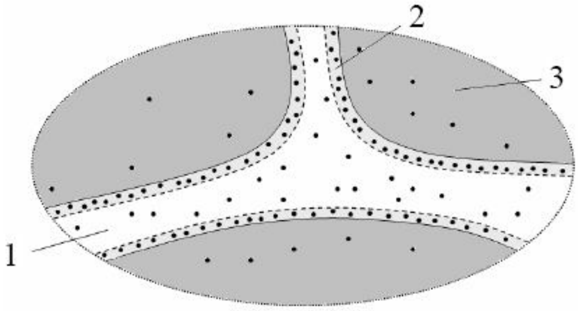


Рис. 1. Характерна структура фізичномалого елемента тіла: 1 – об'єм, що займає водний поровий розчин; 2 – адсорбовані на скелеті ґрунту шари води; 3 – скелет ґрунту. Крапками умовно позначено частинки домішкової речовини.

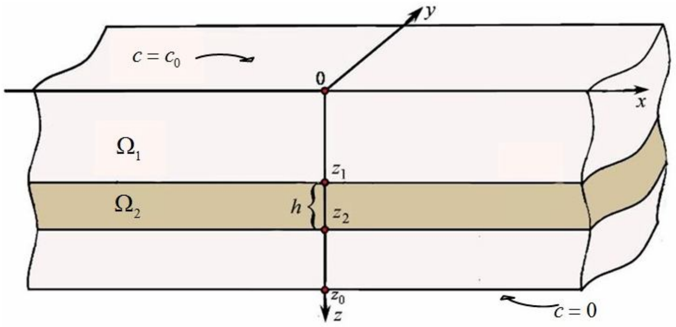


Рис. 2. Схематичне зображення приповерхневого шару ґрунту з випадковим прошарком.

Густину середовища, кінетичний коефіцієнт дифузії та коефіцієнти інтенсивності переходу вважатимемо сталими в об'ємі кожної з фаз.

Нехай в початковий момент часу в тілі відсутня домішкова речовина, тобто:

$$c_1(z,t)\big|_{t=0}=0,\ c_2(z,t)\big|_{t=0}=0. \tag{3}$$

На верхній межі тіла $z=0$ підтримується постійне значення $c_0$ сумарної концентрації домішкової речовини. Введемо параметр $\alpha$ $(0\le\alpha\le 1)$, який визначає частину домішкової речовини, що з поверхні тіла потрапила на швидкий шлях міграції, тоді будуть виконуватися умови:

$$c_1(z,t)\big|_{z=0}=\alpha c_0,\ c_2(z,t)\big|_{z=0}=(1-\alpha)c_0. \tag{4}$$

На нижній межі тіла концентрація рівна нулю, тоді:

$$c_1(z,t)\big|_{z=z_0}=0,\ c_2(z,t)\big|_{z=z_0}=0. \tag{5}$$

Введемо у розгляд випадкову функцію просторової координати $z$ («функцію структури») [7, 8]:

$$\eta_{ij}(z)=\begin{cases}1,\ z\in\Omega_{ij}\\ 0,\ z\notin\Omega_{ij},\end{cases} \tag{6}$$

де $\Omega_{ij}$ – $i$-тий шар $j$-тої фази.

Тоді $\bigcup\limits_{i=1}^{n_j}\Omega_{ij}=\Omega_j$, де $n_j$ – кількість шарів у відповідній фазі. У нашому випадку $n_1=2$, $n_2=1$.

Нехай виконується умова суцільності тіла, тобто:

$$\sum_{i,j}\eta_{ij}(z)=1. \tag{7}$$

За допомогою функції структури запишемо коефіцієнти системи рівнянь (1), (2):

$$d_k(z)=\sum_{j=1}^{2}\sum_{i=1}^{n_j}d_k^{(j)}\eta_{ij}(z),\ d_k^{(j)}\in\mathrm{R},\ j=1,2,\ k=\overline{1,4}; \tag{8}$$

$$\rho(z)=\sum_{j=1}^{2}\sum_{i=1}^{n_j}\rho^{(j)}\eta_{ij}(z),\ \rho^{(j)}\in\mathrm{R},\ j=1,2; \tag{9}$$

$$k_q(z)=\sum_{j=1}^{2}\sum_{i=1}^{n_j}k_q^{(j)}\eta_{ij}(z),\ k_q^{(j)}\in\mathrm{R},\ j=1,2,\ q=1,2. \tag{10}$$

Тоді в позначеннях (6) – (10) рівняння (1), (2) набувають вигляду:

$$\sum_{j=1}^{2}\sum_{i=1}^{n_j}\rho^{(j)}\eta_{ij}(z)\frac{\partial c_1}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial z}\left[\sum_{j=1}^{2}\sum_{i=1}^{n_j}d_1^{(j)}\eta_{ij}(z)\frac{\partial c_1}{\partial z}+\sum_{j=1}^{2}\sum_{i=1}^{n_j}d_3^{(j)}\eta_{ij}(z)\frac{\partial c_2}{\partial z}\right]- \\ -\sum_{j=1}^{2}\sum_{i=1}^{n_j}k_1^{(j)}\eta_{ij}(z)c_1+\sum_{j=1}^{2}\sum_{i=1}^{n_j}k_2^{(j)}\eta_{ij}(z)c_2, \tag{11}$$

$$\sum_{j=1}^{2}\sum_{i=1}^{n_j}\rho^{(j)}\eta_{ij}(z)\frac{\partial c_2}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial z}\left[\sum_{j=1}^{2}\sum_{i=1}^{n_j}d_2^{(j)}\eta_{ij}(z)\frac{\partial c_2}{\partial z}+\sum_{j=1}^{2}\sum_{i=1}^{n_j}d_4^{(j)}\eta_{ij}(z)\frac{\partial c_1}{\partial z}\right]- \\ -\sum_{j=1}^{2}\sum_{i=1}^{n_j}k_2^{(j)}\eta_{ij}(z)c_2+\sum_{j=1}^{2}\sum_{i=1}^{n_j}k_1^{(j)}\eta_{ij}(z)c_1. \tag{12}$$

Введемо: випадковий вектор

$$\mathbf{c}(z,t)=\begin{pmatrix} c_1(z,t) \\ c_2(z,t) \end{pmatrix} \tag{13}$$

та матриці

$$K^{(j)}=\begin{pmatrix} -k_1^{(j)} & k_2^{(j)} \\ k_1^{(j)} & -k_2^{(j)} \end{pmatrix}. \tag{14}$$

Тоді систему (11), (12) і крайові умови (3), (4) подамо у матричному вигляді:

$$\sum_{j=1}^{2}\sum_{i=1}^{n_j}\rho^{(j)}\eta_{ij}(z)\frac{\partial \mathbf{c}}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial z}\left[\sum_{j=1}^{2}\sum_{i=1}^{n_j}D^{(j)}\eta_{ij}(z)\frac{\partial \mathbf{c}}{\partial z}\right]+\sum_{j=1}^{2}\sum_{i=1}^{n_j}K^{(j)}\eta_{ij}(z)\mathbf{c}, \tag{15}$$

$$\mathbf{c}(z,t)\big|_{t=0}=\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix},\ \mathbf{c}(z,t)\big|_{z=0}=\begin{pmatrix} \alpha c_0 \\ (1-\alpha)c_0 \end{pmatrix},\ \mathbf{c}(z,t)\big|_{z=z_0}=\begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \tag{16}$$

Зазначимо, що функцію структури (8) можна подати як різницю випадкових одиничних східчастих функцій Хевісайда $\theta(z)$:

$$\eta_{11}(z)=\theta(z)-\theta(z-z_1), \tag{17}$$

$$\eta_{12}(z)=\theta(z-z_1)-\theta(z-z_2), \tag{18}$$

$$\eta_{21}(z)=\theta(z-z_2)-\theta(z-z_0). \tag{19}$$

Враховуючи правила обчислення узагальненої похідної [9], отримаємо:

$$\frac{\partial}{\partial z}\left[\sum_{j=1}^{2}\sum_{i=1}^{n_j}D^{(j)}\eta_{ij}(z)\right]=\left[D\right]_{z=z_1}\delta(z-z_1)+\left[D\right]_{z=z_2}\delta(z-z_2), \tag{20}$$

де $\delta\left(z-z_q\right)$ – функція Дірака з носієм в точці $z=z_q$;

$\left[D\right]_{z=z_q}$ – стрибок матричного коефіцієнта дифузії $D$ на випадковій межі прошарку $z=z_q$, тобто:

$$\left[D\right]_{z=z_q}=\begin{pmatrix} \left[d_1\right]_{z=z_q} & \left[d_3\right]_{z=z_q} \\ \left[d_4\right]_{z=z_q} & \left[d_2\right]_{z=z_q} \end{pmatrix},$$

де $\left[d_k\right]_{z=z_q}$, $q=1,2$ – стрибки кінетичних коефіцієнтів дифузії (за $k=1,2$) та стрибки коефіцієнтів перехресної дифузії (за $k=3,4$) на відповідній межі прошарку.

Враховуючи вигляд матриці $D$ та структуру тіла, отримаємо:

$$\left[D\right]_{z=z_1}=\begin{pmatrix} d_1^{(2)}-d_1^{(1)} & d_3^{(2)}-d_3^{(1)} \\ d_4^{(2)}-d_4^{(1)} & d_2^{(2)}-d_2^{(1)} \end{pmatrix},\left[D\right]_{z=z_2}=\begin{pmatrix} d_1^{(1)}-d_1^{(2)} & d_3^{(1)}-d_3^{(2)} \\ d_4^{(1)}-d_4^{(2)} & d_2^{(1)}-d_2^{(2)} \end{pmatrix}=-\left[D\right]_{z=z_1}. \tag{21}$$

Тоді:

$$\frac{\partial}{\partial z}\left[\sum_{j=1}^{2}\sum_{i=1}^{n_j}D^{(j)}\eta_{ij}(z)\right]=\left[D\right]_{z=z_1}\left(\delta(z-z_1)-\delta(z-z_2)\right). \tag{22}$$

Таким чином, будемо мати:

$$\frac{\partial}{\partial z}\left[\sum_{j=1}^{2}\sum_{i=1}^{n_j}D^{(j)}\eta_{ij}(z)\frac{\partial \mathbf{c}}{\partial z}\right]=\sum_{j=1}^{2}\sum_{i=1}^{n_j}D^{(j)}\eta_{ij}(z)\frac{\partial^2 \mathbf{c}}{\partial z^2}+\left[D\right]_{z=z_1}\left(\delta(z-z_1)-\delta(z-z_2)\right)\frac{\partial \mathbf{c}}{\partial z}. \tag{23}$$

Введемо у розгляд оператор $L_{ij}$, який кожну функцію $\mathbf{c}(z,t)$, $(z,t)\in[z;z_0]\times[0;\tau)$, $\tau<\infty$, де $z$ – випадкова координата; $t$ – часова координата, перетворює за наступним законом:

$$L_{ij}=\rho^{(j)}\eta_{ij}(z)\frac{\partial}{\partial t}-D^{(j)}\eta_{ij}(z)\frac{\partial^2}{\partial z^2}-\left[D(z)\right]_{z=z_1}\left(\delta\left(z-z_1\right)-\delta\left(z-z_2\right)\right)\frac{\partial}{\partial z}-K^{(j)}\eta_{ij}(z). \quad (24)$$

Тоді матричне рівняння (15) запишеться в операторному вигляді:

$$L\{\mathbf{c}(z,t)\}=\sum_{j=1}^{2}\sum_{i=1}^{n_j}L_{ij}\{\mathbf{c}(z,t)\}=0. \quad (25)$$

Додамо і віднімемо в отриманому рівнянні невипадковий оператор $L_0$ з характеристиками фази 1, який визначається формулою:

$$L_0=\rho^{(1)}\frac{\partial}{\partial t}-D^{(1)}\frac{\partial^2}{\partial z^2}-K^{(1)}. \quad (26)$$

Оскільки виконується умова (7) суцільності дисперсної системи, то рівняння (25) можна переписати у вигляді:

$$L_0\{\mathbf{c}(z,t)\}=(L_0-L)\{\mathbf{c}(z,t)\}. \quad (27)$$

Вважатимемо праву частину рівняння (27) джерелом, тобто неоднорідність дисперсної системи розглядатимемо як внутрішні джерела [7].

## II. Побудова розв’язку крайового завдання випадкової ґетеродифузії

Крайове завдання (27), (16) зведемо до еквівалентного інтеґровано-диференціального рівняння:

$$\mathbf{c}(z,t)=\mathbf{c}^{(0)}(z,t)+\int_0^t\int_0^{z_0}G(z,z',t,t')L_s\{\mathbf{c}(z',t')\}dz'dt', \quad (28)$$

де $\mathbf{c}^{(0)}(z,t)$ – розв’язок однорідної системи рівнянь $L_0\{\mathbf{c}(z,t)\}=0$, який задовольняє умови (16);

$$G(z,z',t,t')=\begin{pmatrix}G_1(z,z',t,t') & 0\\ 0 & G_2(z,z',t,t')\end{pmatrix}- \quad (29)$$

матрична функція Ґріна завдання (27), (16), тобто є розв’язком завдання:

$$L_0\{\mathbf{c}(z,t)\}=\delta(z-z')\delta(t-t')E_2 \quad (30)$$

з нульовими крайовими умовами, де $E_2$ – одиничний двовимірний вектор-стовпець; $L_s\{\mathbf{c}(z,t)\}=(L_0-L)\{\mathbf{c}(z,t)\}$.

Розв’язок інтеґровано-диференціального рівняння (28) з випадковим ядром будемо шукати методом послідовних наближень [7]. Оскільки це рівняння справедливе для всіх точок $(z;t)$ ділянки $(0;z_0)\times(0;t)$, а точка $(z',t')$ береться з цієї ділянки, то можна записати:

$$\mathbf{c}(z',t')=\mathbf{c}^{(0)}(z',t')+\int_0^{t'}\int_0^{z_0}G(z',z'',t',t'')L_s\{\mathbf{c}(z'',t'')\}dz''dt''. \quad (31)$$

Підставивши отриманий вираз у праву частину (28), будемо мати:

$$\mathbf{c}(z,t)=\mathbf{c}^{(0)}(z,t)+\int_0^t\int_0^{z_0}G(z,z',t,t')L_s\left\{\mathbf{c}^{(0)}(z',t')\right\}dz'dt'+$$

$$+\int_0^t\int_0^{z_0}G(z,z',t,t')L_s\left\{\int_0^{t'}\int_0^{z_0}G(z',z'',t',t'')L_s\{\mathbf{c}(z'',t'')\}dz''dt''\right\}dz'dt'. \quad (32)$$

Аналоґічно, записавши значення концентрації $\mathbf{c}(z,t)$ у точці $(z'',t'')$ і підставивши її у праву частину останньої рівності, отримаємо другу ітерацію. Повторюючи цю процедуру нескінченну кількість разів, отримаємо інтеґральний ряд Неймана:

$$\mathbf{c}(z,t)=\mathbf{c}^{(0)}(z,t)+\int_0^t\int_0^{z_0}G(z,z',t,t')L_s\left\{\mathbf{c}^{(0)}(z',t')\right\}dz'dt'+$$

$$+\int_0^t\int_0^{z_0}G(z,z',t,t')L_s\left\{\int_0^{t'}\int_0^{z_0}G(z',z'',t',t'')L_s\left\{\mathbf{c}(z'',t'')\right\}\mathbf{c}^{(0)}(z'',t'')dz''dt''\right\}dz'dt'+$$

$$+\int_0^t\int_0^{z_0}G(z,z',t,t')L_s\left\{\int_0^{t'}\int_0^{z_0}G(z',z'',t',t'')\times\right.$$

$$\left.\times L_s\left\{\int_0^{t''}\int_0^{z_0}G(z'',z''',t'',t''')L_s\left\{\mathbf{c}(z''',t''')\right\}dz'''dt'''\right\}dz''dt''\right\}dz'dt'+\ldots \tag{33}$$

Перший член отриманого ряду – концентрація $\mathbf{c}^{(0)}(z,t)$ в однорідному середовищі з фізичними характеристиками $\rho^{(1)}, d_k^{(1)}, k_q^{(1)}$, $k=1,\ldots,4$, $q=1,2$. Другий доданок описує збурення концентраційного поля, що виникають за рахунок наявності у тілі прошарку з іншими фізичними характеристиками, причому із врахуванням ефектів меж цього прошарку.

Знайдемо спочатку розв'язок однорідного рівняння $L_0\{\mathbf{c}(z,t)\}=0$ з початковими (3) та граничними умовами (16). Оскільки $\rho^{(1)}, d_k^{(1)}, k=\overline{1,4}$ та $k_q^{(1)}, q=1,2$ – константи, то таке завдання буде еквівалентне системі рівнянь ґетеродифузії двома шляхами:

$$\begin{cases}\dfrac{\partial c_1(z,t)}{\partial t}=\bar d_1^{(1)}\dfrac{\partial^2 c_1(z,t)}{\partial z^2}+\bar d_3^{(1)}\dfrac{\partial^2 c_2(z,t)}{\partial z^2}-\bar k_1^{(1)}c_1(z,t)+\bar k_2^{(1)}c_2(z,t),\\[2ex] \dfrac{\partial c_2(z,t)}{\partial t}=\bar d_2^{(1)}\dfrac{\partial^2 c_2(z,t)}{\partial z^2}+\bar d_4^{(1)}\dfrac{\partial^2 c_2(z,t)}{\partial z^2}+\bar k_1^{(1)}c_1(z,t)-\bar k_2^{(1)}c_2(z,t)\end{cases} \tag{34}$$

з початковими умовами (3) та граничними умовами (5), (4), де $\bar d_k^{(1)}=d_k^{(1)}/\rho^{(1)}$, $k=\overline{1,4}$, $\bar k_q^{(1)}=k_q^{(1)}/\rho^{(1)}$, $q=1,2$.

Зведемо крайове завдання (34), (3) – (5) до завдання з нульовими граничними умовами за допомогою заміни [6]:

$$f_1(z,t)=c_1(z,t)-\alpha c_0\left(1-\frac{z}{z_0}\right);\ f_2(z,t)=c_2(z,t)-(1-\alpha)c_0\left(1-\frac{z}{z_0}\right). \tag{35}$$

Невідомі функції $f_1(z,t)$ та $f_2(z,t)$ задовольняють систему рівнянь:

$$\begin{cases}\dfrac{\partial f_1}{\partial t}=\bar d_1^{(1)}\dfrac{\partial^2 f_1}{\partial z^2}+\bar d_3^{(1)}\dfrac{\partial^2 f_2}{\partial z^2}-\bar k_1^{(1)}f_1+\bar k_2^{(1)}f_2-\alpha_1 c_0\left(1-\dfrac{z}{z_0}\right),\\[2ex] \dfrac{\partial f_2}{\partial t}=\bar d_2^{(1)}\dfrac{\partial^2 f_2}{\partial z^2}+\bar d_4^{(1)}\dfrac{\partial^2 f_1}{\partial z^2}+\bar k_1^{(1)}f_1-\bar k_2^{(1)}f_2+\alpha_1 c_0\left(1-\dfrac{z}{z_0}\right),\end{cases} \tag{36}$$

початкові умови:

$$f_1(z,t)\big|_{t=0}=-\alpha c_0\left(1-\frac{z}{z_0}\right),\ c_2(z,t)\big|_{t=0}=-(1-\alpha)c_0\left(1-\frac{z}{z_0}\right) \tag{37}$$

та нульові граничні умови:

$$f_1(z,t)\big|_{z=0}=0,\ f_2(z,t)\big|_{z=0}=0,\ f_1(z,t)\big|_{z=z_0}=0,\ f_2(z,t)\big|_{z=z_0}=0, \tag{38}$$

де $\alpha_1=\alpha k_1^{(1)}+k_2^{(1)}(1-\alpha)$.

Враховуючи умови (38), розв'язок завдання (36)-(38) шукатимемо у вигляді [6]:

$$f_k(z,t)=\sum_{n=1}^{\infty} f_k^{(n)}(n,t)\sin\frac{\pi n z}{z_0},\ k=1,2. \tag{39}$$

Використовуючи розклад:

$$1-\frac{z}{z_0}=\sum_{n=1}^{\infty}\frac{2}{\pi n}\sin\frac{\pi n z}{z_0}, \tag{40}$$

підставимо вирази (39), (40) у систему (36) (36) та умови (37), (38). Отримаємо систему звичайних диференціальних рівнянь відносно невідомих функцій $f_1^{(n)}=f_1^{(n)}(n,t)$, $f_2^{(n)}=f_2^{(n)}(n,t)$, $n=1,2,\ldots$:

$$\begin{cases}\dfrac{d}{dt}f_1^{(n)}=-\left(\bar{k}_1^{(1)}+\bar{d}_1^{(1)}\left(\dfrac{\pi n}{z_0}\right)^2\right)f_1^{(n)}+\left(\bar{k}_2^{(1)}-\left(\dfrac{\pi n}{z_0}\right)^2\bar{d}_3^{(1)}\right)f_2^{(n)}-\dfrac{2\alpha_1 c_0}{\pi n},\\[2ex] \dfrac{d}{dt}f_2^{(n)}=\left(\bar{k}_1^{(1)}-\bar{d}_4^{(1)}\left(\dfrac{\pi n}{z_0}\right)^2\right)f_1^{(n)}-\left(\bar{k}_2^{(1)}+\left(\dfrac{\pi n}{z_0}\right)^2\bar{d}_2^{(1)}\right)f_2^{(n)}+\dfrac{2\alpha_1 c_0}{\pi n}\end{cases} \tag{41}$$

з початковими умовами:

$$f_1^{(n)}(n,t)\big|_{t=0}=-\frac{2\alpha c_0}{\pi n},\ f_2^{(n)}(n,t)\big|_{t=0}=-\frac{2(1-\alpha)c_0}{\pi n}. \tag{42}$$

До крайового завдання (41), (42) застосуємо перетворення Лапласа [10] за часовою змінною $t$, у результаті якого для визначення невідомих функцій-зображень $F_j^{(n)}=F_j^{(n)}(s)=L\left\{f_j^{(n)}(t)\right\}, j=1,2$, отримаємо систему алґебраїчних рівнянь:

$$\begin{cases}\left(s+\bar{k}_1^{(1)}+\bar{d}_1^{(1)}y_n^2\right)F_1^{(n)}-\left(\bar{k}_2^{(1)}-y_n^2\bar{d}_3^{(1)}\right)F_2^{(n)}=-\dfrac{2c_0}{\pi n}\left(\alpha+\dfrac{\alpha_1}{s}\right),\\[2ex] -\left(\bar{k}_1^{(1)}-\bar{d}_4^{(1)}y_n^2\right)F_1^{(n)}+\left(s+\bar{k}_2^{(1)}+y_n^2\bar{d}_2^{(1)}\right)F_2^{(n)}=\dfrac{2c_0}{\pi n}\left(-(1-\alpha)+\dfrac{\alpha_1}{s}\right),\end{cases} \tag{43}$$

де $y_n=\pi n/z_0$.

Введемо позначення:

$$a_n^{(1)}=\bar{k}_1^{(1)}+\bar{d}_1^{(1)}y_n^2,\ a_n^{(2)}=\bar{k}_2^{(1)}+\bar{d}_2^{(1)}y_n^2,\ a_n^{(3)}=-\bar{k}_2^{(1)}+\bar{d}_3^{(1)}y_n^2,\ a_n^{(4)}=-\bar{k}_1^{(1)}+\bar{d}_4^{(1)}y_n^2. \tag{44}$$

Основний визначальник системи (43) має структуру $\Delta=s^2+\eta_1 s+\eta_2$, де $\eta_1=a_n^{(1)}+a_n^{(2)}$, $\eta_2=a_n^{(1)}a_n^{(2)}-a_n^{(3)}a_n^{(4)}$.

Розглянемо дискримінант цього квадратного тричлена:

$$D=\eta_1^2-4\eta_2=\left(a_n^{(1)}-a_n^{(2)}\right)^2+4a_n^{(3)}a_n^{(4)}. \tag{45}$$

Оскільки

$$a_n^{(3)}=-\bar{k}_2^{(1)}+\bar{d}_3^{(1)}\left(\frac{\pi n}{z_0}\right)^2 \text{ і } a_n^{(4)}=-\bar{k}_1^{(1)}+\bar{d}_4^{(1)}\left(\frac{\pi n}{z_0}\right)^2,$$

то можна вважати, що за достатньо великих значень $n$ будуть справджуватися умови $a_n^{(3)}>0$ і $a_n^{(4)}>0$. А, отже, дискримінант (45) буде додатним, тому вірне представлення $\Delta=(s-s_1)(s-s_2)$, де $s_1,s_2$ – дійсні корені рівняння $s^2+\eta_1 s+\eta_2=0$. Зауважимо, що $s_1,s_2$ залежать від $n$, тому за необхідності будемо позначати ці корені $s_1^n,s_2^n$.

Таким чином, розв’язавши систему (43), отримаємо:

$$F_j^{(n)} = (-1)^j \frac{2c_0}{\pi n}\left(\frac{P_j s}{(s-s_1)(s-s_2)} + \frac{Q_j}{(s-s_1)(s-s_2)} + \frac{R_j}{s(s-s_1)(s-s_2)}\right), j = 1,2, \quad (46)$$

де $P_1 = \alpha$, $Q_1 = \alpha_1 + \alpha a_n^{(2)} - (1-\alpha)a_n^{(3)}$, $R_1 = \alpha_1\left(a_n^{(2)} + a_n^{(3)}\right)$, $P_2 = -(1-\alpha)$;

$Q_2 = \alpha_1 - (1-\alpha)a_n^{(1)} + \alpha a_n^{(4)}$, $R_2 = \alpha_1\left(a_n^{(1)} + a_n^{(4)}\right)$.

До отриманих виразів для $F_j^{(n)}(s)$, $j = 1,2$, застосуємо обернене перетворення Лапласа, внаслідок чого отримаємо формули для обчислення коефіцієнтів розкладу (39):

$$f_j^{(n)} = (-1)^j \frac{2c_0}{\pi n}\left[\left(P_j s_1 + Q_j + \frac{R_j}{s_1}\right)\frac{e^{s_1 t}}{s_1 - s_2} - \left(P_j s_2 + Q_j + \frac{R_j}{s_2}\right)\frac{e^{s_2 t}}{s_1 - s_2} + \frac{R_j}{s_1 s_2}\right], \quad (47)$$

де $j = 1,2$.

Отже,

$$f_j(z,t) = (-1)^j \sum_{n=1}^{\infty}\left[\left(P_j s_1 + Q_j + \frac{R_j}{s_1}\right)\frac{e^{s_1 t}}{s_1 - s_2} - \left(P_j s_2 + Q_j + \frac{R_j}{s_2}\right)\frac{e^{s_2 t}}{s_1 - s_2} + \frac{R_j}{s_1 s_2}\right]\frac{2c_0 \sin y_n z}{\pi n} \quad (48)$$

для $j = 1,2$.

Для того, щоб при $t \to \infty$ отриманий ряд був збіжний, повинні виконуватися умови $s_1 < 0$ та $s_2 < 0$. Враховуючи, що:

$$s_{1,2} = \frac{1}{2}\left(-\left(a_n^{(1)} + a_n^{(2)}\right) \pm \sqrt{\left(a_n^{(1)} - a_n^{(2)}\right)^2 + 4a_n^{(3)}a_n^{(4)}}\right) \quad (49)$$

і той факт, що $a_n^{(1)} > 0$, $a_n^{(2)} > 0$, отримаємо $s_1 < 0$. Дослідивши умови, за яких корінь $s_2$ буде від’ємним, отримаємо наступне обмеження на коефіцієнти:

$$\overline{d}_3^{(1)}\overline{d}_4^{(1)} < \overline{d}_1^{(1)}\overline{d}_2^{(1)}. \quad (50)$$

Застосовуючи методику, запропоновану в [5] для дослідження ряду виду (39), отримаємо наступні формули:

$$f_j(z,t) = (-1)^j \frac{\alpha_1 c_0 \beta_0^{(j)}}{\beta_2}\left[1 - \frac{z}{z_0} - \frac{sh\overline{\beta}(z_0 - z)}{sh\overline{\beta}z_0}\right] +$$

$$+ (-1)^j \frac{2c_0}{\pi}\sum_{n=1}^{\infty}\left(\left(P_j s_1 + Q_j + \frac{R_j}{s_1}\right)e^{s_1 t} - \left(P_j s_2 + Q_j + \frac{R_j}{s_2}\right)e^{s_2 t}\right)\frac{\sin y_n z}{n(s_1 - s_2)}. \quad (51)$$

де

$$\beta_0^{(1)} = \overline{d}_2^{(1)} + \overline{d}_3^{(1)}; \quad (52)$$

$$\beta_0^{(2)} = \overline{d}_1^{(1)} + \overline{d}_4^{(1)}; \quad (53)$$

$$\overline{\beta} = \frac{\pi}{z_0}\sqrt{\frac{\beta_2}{\beta_1}},\ \beta_1 = \left(\overline{d}_1^{(1)}\overline{d}_2^{(1)} - \overline{d}_3^{(1)}\overline{d}_4^{(1)}\right)\frac{\pi^2}{z_0^2}; \quad (54)$$

$$\beta_2 = \overline{k}_1^{(1)}\left(\overline{d}_2^{(1)} + \overline{d}_3^{(1)}\right) + \overline{k}_2^{(1)}\left(\overline{d}_1^{(1)} + \overline{d}_4^{(1)}\right). \quad (55)$$

Враховуючи застосовану заміну шуканих функцій, отримаємо формули для обчислення розв’язку:

$$\boldsymbol{c}^{(0)}(z,t) = \begin{pmatrix} c_1^{(0)}(z,t) \\ c_2^{(0)}(z,t) \end{pmatrix} \quad (56)$$

завдання (34), (3)-(5), тобто формули для визначення концентрації домішкової речовини на різних шляхах міграції у тілі з характеристиками $\rho^1, d_k^1, k_q^1$, $k=\overline{1,4}$, $q=1,2$.

Отже, концентрація домішки на швидкому ($j=1$) та повільному ($j=2$) шляхах міграції визначається за формулами:

$$c_j^{(0)}(z,t) = P_j^{\alpha} c_0\left(1-\frac{z}{z_0}\right) + (-1)^{j-1} Q_j^{\alpha} c_0 sh\bar{\beta}(z_0 - z) +$$

$$+(-1)^j \frac{2c_0}{\pi}\sum_{n=1}^{\infty}\left(P_j{}' e^{s_1 t} - Q_j{}' e^{s_2 t}\right)\frac{\sin y_n z}{n(s_1 - s_2)}, \tag{57}$$

де
$$P_1^{\alpha} = \alpha - \frac{\alpha_1 \beta_0^{(1)}}{\beta_2}; \tag{58}$$

$$P_2^{\alpha} = 1 - \alpha + \frac{\alpha_1 \beta_0^{(2)}}{\beta_2}; \tag{59}$$

$$Q_j^{\alpha} = \frac{\alpha_1 \beta_0^{(j)}}{\beta_2 sh\bar{\beta} z_0}; \tag{60}$$

$$P_j{}' = P_j s_1 + Q_j + \frac{R_j}{s_1}; \tag{61}$$

$$Q_j{}' = P_j s_2 + Q_j + \frac{R_j}{s_2}. \tag{62}$$

Використовуючи аналоґічну методику, побудуємо функції Ґріна:

$$G(z,z',t,t') = \begin{pmatrix} G_1(z,z',t,t') & 0 \\ 0 & G_2(z,z',t,t') \end{pmatrix}, \tag{63}$$

тобто знайдемо функції Ґріна у вигляді:

$$G_j(z,z',t,t') = \frac{2}{z_0}\sum_{n=1}^{\infty}\left[\left(s_1 + R_j{}'\right)e^{s_1(t-t')} - \left(s_2 + R_j{}'\right)e^{s_2(t-t')}\right]\frac{\sin y_n z' \sin y_n z}{s_1 - s_2}, \tag{64}$$

де
$$R_1{}' = 2\bar{k}_2^{(1)} + \left(\bar{d}_2^{(1)} - \bar{d}_3^{(1)}\right) y_n^2,\ R_2{}' = 2\bar{k}_1^{(1)} + \left(\bar{d}_1^{(1)} - \bar{d}_4^{(1)}\right) y_n^2. \tag{65}$$

## III. Усереднення полів концентрацій за ансамблем конфіґурацій фаз

Для знаходження середнього поля концентрації домішки в тілі з випадково розташованим прошарком здійснимо усереднення концентраційного поля за ансамблем конфіґурацій фаз. Розпишемо $L_s\{c(z,t)\} = (L_0 - L)\{c(z,t)\}$:

$$L_s = \left(\rho^{(1)} - \rho^{(2)}\right)\eta_{12}(z)\frac{\partial}{\partial t} - \left(D^{(1)} - D^{(2)}\right)\eta_{12}(z)\frac{\partial^2}{\partial z^2} -$$

$$-\left(K^{(1)} - K^{(2)}\right)\eta_{12}(z) - \left[D(z)\right]_{z=z_1}\left(\delta(z-z_1) - \delta(z-z_2)\right)\frac{\partial}{\partial z}. \tag{66}$$

Обмежимося двома першими членами ряду Неймана (33):

$$\mathbf{c}(z,t) \approx \mathbf{c}^{(0)}(z,t) + \int_0^t \int_0^{z_0} G(z,z',t,t') L_s\left\{\mathbf{c}^{(0)}(z',t')\right\} dz' dt'. \tag{67}$$

Тоді

$$\mathbf{c}(z,t) \approx \mathbf{c}^{(0)}(z,t) +$$
$$+\int_0^t\int_0^{z_0} G(z,z',t,t')\left(\left(\rho^{(1)}-\rho^{(2)}\right)\frac{\partial \mathbf{c}^{(0)}(z',t')}{\partial t'} - \left(D^{(1)}-D^{(2)}\right)\frac{\partial^2 \mathbf{c}^{(0)}(z',t')}{\partial z'^2}\right)\eta_{12}(z')dz'dt' -$$
$$-\int_0^t\int_0^{z_0} G(z,z',t,t')\left(K^{(1)}-K^{(2)}\right)\mathbf{c}^{(0)}(z',t')\eta_{12}(z')dz'dt' -$$
$$-\int_0^t\int_0^{z_0} G\left[D(z)\right]_{z=z_1}\left(\delta\left(z'-z_1\right)-\delta\left(z'-(z_1+h)\right)\right)\frac{\partial \mathbf{c}^{(0)}(z',t')}{\partial z'}dz'dt'. \tag{68}$$

Усереднимо отриманий вираз за ансамблем конфігурацій фаз з рівномірною функцією розподілу у тілі [11]. Концентрація в однорідному шарі $\mathbf{c}_0(z,t)$ є невипадковою функцією, тому $\left\langle \mathbf{c}_0(z,t)\right\rangle_{conf} = \mathbf{c}_0(z,t)$. Усереднимо другий і третій доданок виразу (68). Зауважимо, що:

$$\eta_{12}(z') = \begin{cases} 1, & z' \in \left[z_1;\, z_1+h\right] \\ 0, & z' \notin \left[z_1;\, z_1+h\right] \end{cases} = \begin{cases} 1, & z'-z_1 \in \left[0;\, h\right] \\ 0, & z'-z_1 \notin \left[0;\, h\right] \end{cases} = \eta_h(z'-z_1), \tag{69}$$

де
$$\eta_h(x) = \begin{cases} 1, & x \in \left[0;h\right] \\ 0, & x \notin \left[0;h\right] \end{cases}. \tag{70}$$

Оскільки під інтеґралами від $z_1$ залежить тільки функція $\eta_{12}$, то всі множники можемо винести за знак середнього:

$$\left\langle I_1\right\rangle_{conf} = \int_0^t\int_0^{z_0} G\left(\left(\rho^{(1)}-\rho^{(2)}\right)\frac{\partial \mathbf{c}^{(0)}}{\partial t'} - \left(D^{(1)}-D^{(2)}\right)\frac{\partial^2 \mathbf{c}^{(0)}}{\partial z'^2}\right)\frac{1}{V}\int_{(V)}\eta_h(z'-z_1)dz_1dz'dt', \tag{71}$$

$$\left\langle I_2\right\rangle_{conf} = \int_0^t\int_0^{z_0} G\left(K^{(1)}-K^{(2)}\right)\mathbf{c}^{(0)}\frac{1}{V}\int_{(V)}\eta_h(z'-z_1)dz_1dz'dt'. \tag{72}$$

У внутрішньому інтеґралі за $dz_1$ зробимо заміну змінних $x = z'-z_1$, отримаємо:

$$\int_{(V)}\eta_h(z'-z_1)dz_1 = \int_0^{z'}\eta_h(z'-z_1)dz_1 = \int_0^{z'}\eta_h(x)dx. \tag{73}$$

Зауважимо, що $z'$ змінюється в межах від 0 до $z_0$. Враховуючи властивості функції $\eta_h$, розглянемо два випадки $z'<h$ та $z'\ge h$. Позначимо $V_j$ – об'єм $j$-тої фази , $v_j$ – об'ємну частку цієї фази, тоді $\frac{1}{V} = \frac{v_2}{h}$, будемо мати:

$$\frac{1}{V}\int_{(V)}\eta_h(z'-z_1)dz_1 = \begin{cases} \frac{z'}{V}, z'<h, \\ \frac{h}{V}, z'\ge h, \end{cases} = \begin{cases} \frac{v_2}{h}z', z'<h, \\ v_2, z'\ge h. \end{cases} \tag{74}$$

Оскільки $z'$ змінюється в межах від 0 до $z_0$, а змінна $z_1$ може змінюватися лише в межах від 0 до $z_0-h$, тоді отримаємо:

$$\left\langle I_1\right\rangle_{conf} = \int_0^t\int_0^h G\left(\left(\rho^{(1)}-\rho^{(2)}\right)\frac{\partial \mathbf{c}^{(0)}}{\partial t'} - \left(D^{(1)}-D^{(2)}\right)\frac{\partial^2 \mathbf{c}^{(0)}}{\partial z'^2}\right)\frac{v_2}{h}z'dz'dt' +$$
$$+\int_0^t\int_h^{z_0-h} G\left(\left(\rho^{(1)}-\rho^{(2)}\right)\frac{\partial \mathbf{c}^{(0)}}{\partial t'} - \left(D^{(1)}-D^{(2)}\right)\frac{\partial^2 \mathbf{c}^{(0)}}{\partial z'^2}\right)v_2dz'dt'; \tag{75}$$

$$\left\langle I_2\right\rangle_{conf}=\int_0^t\int_0^h G\left(K^{(1)}-K^{(2)}\right)\mathbf{c}^{(0)}\frac{\nu_2}{h}z'dz'dt'+\int_0^t\int_h^{z_0-h}G\left(K^{(1)}-K^{(2)}\right)\mathbf{c}^{(0)}\nu_2 dz'dt'. \quad (76)$$

Усереднимо третій інтеґрал у виразі (68):

$$\left\langle I_3\right\rangle_{conf}=\int_0^t\int_0^{z_0} G\left[D(z)\right]_{z=z_1}\frac{\partial\mathbf{c}^{(0)}}{\partial z'}\left[\frac{1}{V}\int_{(V)}\left[\delta\left(z'-z_1\right)-\delta\left(z'-(z_1+h)\right)\right]dz_1\right]dz'dt'. \quad (77)$$

Розглянемо перший інтеграл. Оскільки функція Дірака є парною, то:

$$\int_{(V)}\delta\left(z'-z_1\right)dz_1=\int_0^{z'}\delta\left(z'-z_1\right)dz_1=\int_0^{z'}\delta\left(z_1-z'\right)dz_1. \quad (78)$$

Враховуючи, що $z'\geq 0$, на основі властивостей функції Дірака [9] отримаємо:

$$\frac{1}{V}\int_{(V)}\delta\left(z'-z_1\right)dz_1=\frac{1}{V}\int_0^{z'}\delta\left(z_1-z'\right)dz_1=\begin{cases}\frac{1}{V}, z'>0,\\ \frac{1}{2V}, z'=0,\end{cases}=\begin{cases}\frac{\nu_2}{h}, z'>0,\\ \frac{\nu_2}{2h}, z'=0.\end{cases} \quad (79)$$

Аналоґічно для другого інтеґрала отримаємо:

$$\frac{1}{V}\int_{(V)}\delta\left(z'-(z_1+h)\right)dz_1=\frac{1}{V}\int_0^{z'}\delta\left(z_1-(z'-h)\right)dz_1=\begin{cases}\frac{\nu_2}{h}, z'-h>0,\\ \frac{\nu_2}{2h}, z'-h=0,\\ 0, z'-h<0.\end{cases} \quad (80)$$

Тоді:

$$J_1=\int_0^t\int_0^{z_0}G\left[D(z)\right]_{z=z_1}\frac{\partial\mathbf{c}^{(0)}}{\partial z'}\frac{1}{V}\int_{(V)}\delta\left(z'-z_1\right)dz_1dz'dt'=$$

$$=\left[D(z)\right]_{z=z_1}\int_0^t\left[\frac{\nu_2}{2h}\left[G\frac{\partial\mathbf{c}^{(0)}}{\partial z'}\right]_{z'=0}+\frac{\nu_2}{h}\lim_{X_1\to 0+}\int_{X_1}^{z_0-h}G\frac{\partial\mathbf{c}^{(0)}}{\partial z'}dz'\right]dt'; \quad (81)$$

$$J_2=\int_0^t\int_0^{z_0}G\left[D(z)\right]_{z=z_1}\frac{\partial\mathbf{c}^{(0)}}{\partial z'}\frac{1}{V}\int_{(V)}\delta\left(z'-(z_1+h)\right)dz_1dz'dt'=$$

$$=\left[D(z)\right]_{z=z_1}\int_0^t\left[\frac{\nu_2}{2h}\left[G\frac{\partial\mathbf{c}^{(0)}}{\partial z'}\right]_{z'=h}+\frac{\nu_2}{h}\lim_{X_2\to h+}\int_{X_2}^{z_0-h}G\frac{\partial\mathbf{c}^{(0)}}{\partial z'}dz'\right]dt'. \quad (82)$$

Зауважимо, що $G(z,z',t,t')=0$ при $z'=0$, тоді:

$$\left\langle I_3\right\rangle_{conf}=-\frac{\nu_2}{2h}\left[D(z)\right]_{z=z_1}\int_0^t\left[G(z,z',t,t')\frac{\partial\mathbf{c}^{(0)}(z',t')}{\partial z'}\right]_{z'=h}dt'+$$

$$+\frac{\nu_2}{h}\left[D(z)\right]_{z=z_1}\int_0^t\left[\lim_{X_1\to 0+}\int_{X_1}^{z_0-h}G\frac{\partial\mathbf{c}^{(0)}}{\partial z'}dz'-\lim_{X_2\to h+}\int_{X_2}^{z_0-h}G\frac{\partial\mathbf{c}^{(0)}}{\partial z'}dz'\right]dt'. \quad (83)$$

Оскільки:

$$\lim_{X_1\to 0+}\int_{X_1}^{z_0-h} G\frac{\partial \mathbf{c}^{(0)}}{\partial z'}dz' = \lim_{\substack{X_1\to 0+\\ X_2\to h+}}\int_{X_1}^{X_2} G\frac{\partial \mathbf{c}^{(0)}}{\partial z'}dz' + \lim_{X_2\to h+}\int_{X_2}^{z_0-h} G\frac{\partial \mathbf{c}^{(0)}}{\partial z'}dz', \tag{84}$$

то:

$$\langle I_3\rangle_{conf} = -\frac{\nu_2}{2h}\left[D(z)\right]_{z=z_1}\int_0^t\left\{-\frac{1}{2}\left[G\frac{\partial \mathbf{c}^{(0)}}{\partial z'}\right]_{z'=h} + \lim_{\substack{X_1\to 0+\\ X_2\to h+}}\int_{X_1}^{X_2} G\frac{\mathbf{c}^{(0)}}{\partial z'}dz'\right\}dt'. \tag{85}$$

Отже, для усереднених за ансамблем конфіґурацій фаз полів концентрації домішки, будемо мати формули:

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{c}(z,t)\rangle_{conf} &= \mathbf{c}^{(0)}(z,t) + \\ &+\frac{\nu_2}{h}\int_0^t\int_0^h G\left(\left(\rho^{(1)}-\rho^{(2)}\right)\frac{\partial \mathbf{c}^{(0)}}{\partial t'} - \left(D^{(1)}-D^{(2)}\right)\frac{\partial^2 \mathbf{c}^{(0)}}{\partial z'^2} + \left(K^{(1)}-K^{(2)}\right)\mathbf{c}^{(0)}\right)z'dz'dt' + \\ &+\nu_2\int_0^t\int_h^{z_0-h} G\left(\left(\rho^{(1)}-\rho^{(2)}\right)\frac{\partial \mathbf{c}^{(0)}}{\partial t'} - \left(D^{(1)}-D^{(2)}\right)\frac{\partial^2 \mathbf{c}^{(0)}}{\partial z'^2} + \left(K^{(1)}-K^{(2)}\right)\mathbf{c}^{(0)}\right)dz'dt' + \\ &+\frac{\nu_2}{h}\left[D(z)\right]_{z=z_1}\int_0^t\left[\lim_{\substack{X_1\to 0+\\ X_2\to h+}}\int_{X_1}^{X_2} G\frac{\partial \mathbf{c}^{(0)}}{\partial z'}dz' - \frac{1}{2}\left[G\frac{\partial \mathbf{c}^{(0)}}{\partial z'}\right]_{z'=h}\right]dt'.\end{aligned} \tag{86}$$

Таким чином, одержано формули (86), (57), (64) для знаходження усередненого за ансамблем конфіґурацій фаз поля концентрації домішкової речовини у двофазному багатокомпонентному тілі з випадково розташованим прошарком за умови рівномірного розподілу фаз.

Для знаходження розрахункових формул усереднених концентрацій домішкових частинок на швидкому і повільному шляхах міґрації, а також сумарної концентрації, потрібно у формулу (86) підставити вирази для концентрації $\mathbf{c}^{(0)}$ в «однорідному» дисперсному шарі (57), функцій Гріна (64) і виконати відповідні процедури диференціювання та інтеґрування.

## Висновки

**1. Для кількісного опису процесів масоперенесення двома шляхами,** що супроводжуються взаємними переходами частинок з одного шляху міґрації на інший, і врахування різних фізичних властивостей фаз та ефектів міжфазних меж запропонована математична модель ґетеродифузії двома шляхами на основі балансових співвідношень та законів збереження, сформульованих для цілого тіла. Тоді, під час опису процесів переносу у тілах багатофазної випадкової структури коефіцієнти рівнянь моделі є випадковими функціями просторових координат. У рамках такої математичної моделі апріорі виконуються ідеальні умови контакту на функції концентрації на межах розділу фаз і враховуються стрибки першого роду всіх коефіцієнтів.

**2. Трактуючи неоднорідність структури середовища як внутрішні джерела,** отримано систему інтеґровано-диференціальних рівнянь, еквівалентну вихідному крайовому завданню. Такі рівняння зі стохастичними ядрами є рівняннями Гаммерштейна за просторовою змінною та рівняннями Вольтерра за часовою. Розв'язок отриманий послідовними наближеннями у вигляді інтеґральних рядів Неймана. Усереднення отриманих виразів для випадкових полів концентрацій проведено за ансамблем конфіґурацій фаз з рівномірною функцією розподілу у припущенні превалюючої об'ємної частки матриці.

**3. У перспективі доцільно встановити умови збіжності отриманих у роботі рядів Неймана,** показати існування розв'язку системи інтеґровано-диференціальних рівнянь, а також одержати та дослідити розрахункові формули для усереднених полів концентрації домішки за її ґетеродифузного переносу двома шляхами в шарі з випадковим включенням.

**Література**

1. Є. Довбуш, Від чого страждає українська природа: ТОП–7 проблем, Інтернет-видання «Велика епоха», 2 (2014).
2. П.Р. Параняк, Л.П. Васильцева, Х.І. Макух, Біологія тварин, 9 (1-2), 83 (2007).
3. С.А. Балюк. В.В. Мєдвєдєв, М.М. Мірошниченко [та ін.], Український географічний журнал, (2), 38 (2012).

4. В. Гончарук, Є. Чапля, О. Чернуха, Я. Оведик, Фіз.–мат. моделювання та інформац. технології, (18), 73 (2013).
5. Є. Чапля, О. Чернуха, Фізико–математичне моделювання гетеродифузного масопереносу (Сполом, Львів, 2003).
6. Є. Чапля, О. Чернуха, В. Гончарук, А. Торський, Процеси переносу розпадної речовини в гетерогенних середовищах (Євросвіт, Львів, 2009).
7. Є. Чапля, О. Чернуха, Математичне моделювання дифузійних процесів у випадкових і регулярних структурах (Наукова думка, Київ, 2009).
8. С. Рытов, Ю. Кравцов, В. Татарский, Введение в статистическую радиофизику. Ч. II. Случайные поля (Наука, Москва, 1978).
9. В. Владимиров, Уравнения математической физики (Наука, Москва, 1976).
10. Г. Корн, Т. Корн, Справочник по математике для научных работников и инженеров (Наука, Москва, 1984).
11. В. Королюк, Н. Портенко, А. Скороход, А. Турбин, Справочник по теории вероятности и математической статистике (Наука, Москва, 1985).

***Чернуха Ольга Юріївна*** – доктор технічних наук, старший науковий співробітник.
***Власій Олеся Орестівна*** – кандидат технічних наук, доцент кафедри інформатики.