Комп’ютерне Моделювання Дифузійних Потоків Водню у Шаруватому Композиті Мідь-Залізо за Арксинус-Розподілу Включень

А.Є. Чучвара
Відділ математичного моделювання нерівноважних процесів
Центр математичного моделювання
Інституту прикладних проблем механіки і математики ім. Я.С. Підстригача НАН України
Львів, Україна
davydoka@gmail.com

Simulation of Hydrogen Diffusion Flow in a Layered Copper-iron Composite under Arcsine Distribution of Inclusions

A. Chuchvara
Department of mathematical modeling nonequilibrium processes
Centre of Mathematical Modeling of Pidstryhach Institute for Applied Problems of Mechanics and Mathematics,
The National Academy of Sciences of Ukraine
Lviv, Ukraine
davydoka@gmail.com

***Анотація*—Одержано формулу для усередненого потоку маси у двофазній випадково неоднорідній смузі з арксинус-розподілом шаруватих включень за ненульової сталої початкової концентрації домішки у тілі. На прикладі дифузії водню у шаруватому композиті мідь-залізо проведено комп’ютерне моделювання та встановлено залежність усередненого дифузійного потоку від характеристик середовища та параметрів структури. Показано, що збільшення товщини прошарків заліза у композиті збільшує потоки водню.**

***Abstract*—The formula for the averaged diffusion mass flow in a two-phase random nonhomogeneous strip with the arcsine distribution of layered inclusions is obtained under the condition of nonzero constant initial concentration of admixture in the body. As an example of hydrogen diffusion in a copper-iron composite simulation is carried out and dependence of the averaged diffusion flow on medium characteristics and structure parameters is established. It is shown that increase of the thickness of iron inclusions in the composite leads to increase of hydrogen flows.**

Ключові слова—комп’ютерне моделювання; дифузійний потік; випадково неоднорідна структура; арксинус-розподіл; композит мідь-залізо

Keywords—simulation; diffusion flow; random nonhomogeneous structure; arcsine distribution; copper-iron composite

I. Вступ

У сучасному автомобілебудуванні, металургійній та гірничовидобувній промисловості, сільському господарстві, приладобудуванні, медицині, будівельній галузі тощо одним із найбільш поширених класів композитних матеріалів є шаруваті композити з основою із металічної матриці (рис. 1) [1, 2].

a b

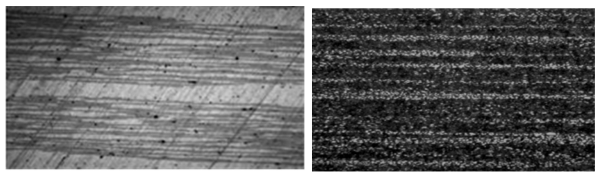

Рис. 1. Мікрофотографії шаруватого композиту мідь-залізо [3] (a) та булату із включеннями вторинного цементиту [4] (b)

Використання полі- та біметалів дозволяє істотно скоротити витрату високолегованих сталей, дефіцитних і дорогих кольорових металів. Комбінуючи об’ємний вміст компонентів, можна отримувати композити з необхідними значеннями міцності, модуля пружності, термо-, зносо- і корозостійкості, а також створювати матеріали з необхідними магнітними, діелектричними, радіопоглинаючими та іншими спеціальними властивостями.

За умов неповної інформації про геометричні параметри тіл зі складною внутрішньою структурою виникає необхідність опису фізичних процесів, які протікають у таких середовищах, випадковими функціями або полями. Тоді для встановлення основних закономірностей процесів дифузії використовують процедуру усереднення за ансамблем конфігурацій фаз. Однак при моделюванні такої характеристики процесу масоперенесення як дифузійний потік виконання процедури усереднення викликає значні труднощі, оскільки невідомою є функція кореляції градієнта випадкового поля концентрації домішкової речовини та стохастичного коефіцієнта дифузії. У працях [5, 6] для вирішення цієї проблеми запропоновано складати балансові рівняння для вже гомогенізованих середовищ з фізичними характеристиками, що є усередненими величинами і враховують відмінності між фазами, проте нехтується взаємодією між ними. Й. Келлер визначає випадковий потік за законом Дарсі, коефіцієнт фільтрації якого є випадковою функцією просторової координати і для побудови розв'язку задачі використовує методи малих збурень та згладжування з відповідними обмеженнями [7].

У праці [8] запропоновано підхід до математичного опису дифузійних потоків у випадково неоднорідних шаруватих тілах, який базується на отриманні рівняння дифузії для функції потоку, обгрунтуванні коректного формулювання початкових і граничних умов та знаходженні розв'язку крайової задачі у вигляді ряду Неймана, зручного для проведення процедури усереднення за ансамблем конфігурацій фаз. За таким підходом у даній роботі досліджено потоки домішкової речовини у двофазній випадково неоднорідній шаруватій смузі на прикладі дифузії водню у композитному матеріалі мідь-залізо (рис. 1а) за арксинус-розподілу залізних включень.

II. Математична модель

Нехай у двофазній смузі товщини z_0, яка складається з n_0 підшарів фази $j=0$ (матриця) та n_1 підшарів фази $j=1$ (включення), відбувається процес дифузії домішкової речовини. Припускаємо, що точні координати розташування включень є невідомими, але приймаємо, що прошаки у тілі найбільш ймовірно розташовані біля границь тіла (рис. 2). При цьому коефіцієнти дифузії вважаємо сталими в межах кожної з фаз і рівні відповідно D_0 для області матриці та D_1 для області включення.

Для опису випадково неоднорідної шаруватої структури типу поданої на рис.1а та рис. 2 використано ймовірнісний арксинус-розподіл, що є частковим випадком бета-розподілу з функцією густини вигляду [9]

$$f(z)=\begin{cases}\dfrac{\Gamma(2\alpha)}{\Gamma^2(\alpha)}\left(\dfrac{z_0}{z}\right)^{1-\alpha}\left(\dfrac{z_0}{z_0-z}\right)^{1-\alpha}, & z\in[0;z_0];\\ 0, & z\notin[0;z_0],\end{cases} \tag{1}$$

де $\Gamma(x)$ – гама-функція, α – ступінь вільності розподілу ($0<\alpha<1$).

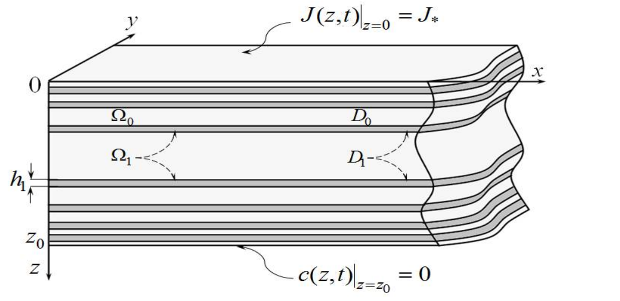

Рис. 2. Схематична реалізація двофазної багатошарової смуги з найбільш ймовірним розташуванням включень біля границь тіла

Рівняння дифузії для випадкової функції потоку $J(z,t)$ в одновимірному за просторовою координатою випадку має вигляд [10]

$$\frac{\partial J(z,t)}{\partial t}=D(z)\frac{\partial^2 J(z,t)}{\partial z^2}, \tag{2}$$

де $D(z)=\begin{cases}D_0,\ z\in\Omega_0;\\ D_1,\ z\in\Omega_1,\end{cases}$ – випадковий коефіцієнт дифузії, Ω_j – багатозв'язна область j-ої фази ($j=0;1$).

Прийнято, що у початковий момент часу відсутній дифузійний потік у тілі, на поверхні $z=0$ підтримується стале значення потоку $J_*\equiv const$, а на границі $z=z_0$ концентрація мігруючої речовини $c(z,t)$ рівна нулю, тобто задано наступні крайові умови:

$$J(z,t)|_{t=0}=0;\quad J(z,t)|_{z=0}=J_*,\quad c(z,t)|_{z=z_0}=0. \tag{3}$$

Крім того, прийнято, що в початковий момент часу концентрація домішки є сталою і рівна c_*. Гранична умова на межі $z=z_0$ задається для функції концентрації, оскільки визначення дифузійного потоку на цій границі потребує додаткових досліджень.

Приймаючи неоднорідність структури тіла як внутрішні джерела, вихідну задачу (2)-(3) зведено до еквівалентного інтегро-диференціального рівняння, що є сумою розв'язку однорідної крайової задачі $J_0(z,t)$ та згортки детермінованої функції Гріна $G(z,z',t,t')$ з джерелом

$$J(z,t)=J_0(z,t)+\int_0^t\int_0^{z_0}G(z,z',t,t')L_s(z')J(z',t')dz'dt'. \tag{4}$$

Тут $L_s(z)=\sum_{i=1}^{n_1}(D_1-D_0)\eta_{i1}(z)\dfrac{\partial^2}{\partial z^2}$, $\eta_{i1}(z)=\begin{cases}1,\ z\in\Omega_{i1};\\ 0,\ z\notin\Omega_{i1},\end{cases}$ – випадкова «функція структури», $\sum_{i=1}^{n_1}\Omega_{i1}=\Omega_1$.

Розв’язок однорідної крайової задачі за ненульової початкової концентрації має вигляд [8]

$$J_0(z,t)=J_*-\frac{2}{z_0}\sum_{n=1}^{\infty}e^{-D_0\xi_n^2 t}\left(\frac{J_*}{\xi_n}+(-1)^n c_* D_0\right)\sin(\xi_n z)\,. \quad (5)$$

Тут $\xi_n=\pi(2n-1)/2z_0$.

Функція Гріна є розв’язком однорідної крайової задачі з точковим джерелом [8]

$$G(z,z',t,t')=\frac{\theta(t-t')}{\pi}\sum_{k=1}^{\infty}e^{-D_0 y_k{}^2(t-t')}\times$$

$$\times\left[\cos\left(y_k(z-z')\right)-\cos\left(y_k(z+z')\right)\right], \quad (6)$$

де $y_k=k\pi/z_0$, $\theta(t-t')$ – одинична сходинкова функція Хевісайда.

Розв’язок рівняння (4) знайдено методом послідовних наближень у вигляді абсолютно і рівномірно збіжного ряду Неймана [11, 12]. Для виконання процедури усереднення за ансамблем конфігурацій фаз обмежимось двома першими членами цього ряду

$$J(z,t)\approx J_0(z,t)+\int_0^t\int_0^{z_0}G(z,z',t,t')L_s(z')J_0(z',t')dz'dt'\,.$$

Приймаючи, що включення мають характерну (середню) товщину h_1, знайдено формулу для дифузійного потоку, усередненого за ансамблем конфігурацій фаз із функцією розподілу включень $f(z)$ (1)

$$\langle J(z,t)\rangle=J_0(z,t)+\frac{(D_1-D_0)Bv_1}{h_1}\int_0^t\left[\int_0^{h_1}z'^{\alpha}z_0^{\alpha}\,{}_2\overline{F}_1\left(\frac{z'}{z_0}\right)\times\right.$$

$$\times G(z,z',t,t')\frac{\partial^2 J_0(z',t')}{\partial z'^2}dz'+\int_{h_1}^{z_0}z_0h_1^{\alpha}(z_0+h_1-z')^{\alpha-1}\times$$

$$\left.\times\overline{F}\left(\frac{h_1}{z_0+(z'-h_1)}\right)G(z,z',t,t')\frac{\partial^2 J_0(z',t')}{\partial z'^2}dz'\right]dt', \quad (7)$$

де $B=\Gamma(2\alpha)/\alpha\Gamma^2(\alpha)$, $\overline{F}(z)={}_2F_1(\alpha,1-\alpha;1+\alpha,z)$,

${}_2F_1(a,b;c;z)=\sum_{m=0}^{\infty}\frac{(a)_m(b)_m}{(c)_m}\frac{z^m}{m!}$ – гіпергеометрична функція, $(a)_m=a(a+1)\ldots(a+m-1)$, $(a)_0=1$.

Підставивши у (7) вирази для функції Гріна (5) та дифузійного потоку в однорідному тілі (6), отримаємо

$$\frac{\langle J(z,t)\rangle}{J_*}=1-\frac{2}{z_0}\sum_{n=1}^{\infty}e^{-D_0\xi_n^2 t}\left(\frac{1}{\xi_n}+(-1)^n\frac{D_0c_*}{J_*}\right)\sin(\xi_n z)+$$

$$+\frac{2(D_1-D_0)v_1B}{D_0z_0^{\alpha}h_1}\sum_{k=1}^{\infty}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\xi_n}{y_k^2-\xi_n^2}\left(e^{-D_0\xi_n^2t}-e^{-D_0y_k^2t}\right)\times$$

$$\times\left(1+(-1)^n\frac{D_0c_*}{J_*}\xi_n\right)\sin(y_kz)\left[z_0^{\alpha-1}\times\right.$$

$$\times\left(f^+(0,x_{kn}^-)-f^+(0,x_{kn}^+)+\sum_{m=1}^{\infty}\frac{\alpha(1-\alpha)\ldots(m-\alpha)}{(m+\alpha)m!z_0^m}\times\right.$$

$$\left.\times\left[f^+(m,x_{kn}^-)-f^+(m,x_{kn}^+)\right]\right)+h_1^{\alpha}\left(f^-(0,x_{kn}^-)-\right.$$

$$-f^-(0,x_{kn}^+)+\sum_{m=1}^{\infty}\frac{\alpha(1-\alpha)\ldots(m-\alpha)h_1^m}{(m+\alpha)m!}\times$$

$$\left.\left.\times\left[f^-(m,x_{kn}^-)-f^-(m,x_{kn}^+)\right]\right)\right], \quad (8)$$

де $x_{kn}^{\pm}=y_k\pm\xi_n$, $f^+(a,p)=\int^{h_1}(z)^{\alpha+a}\cos(pz)dz$,

$$f^-(a,p)=\int_{h_1}^{z_0}(z_0+h_1-z')^{\alpha-(a+1)}\cos(pz)dz\,.$$

Вираз (8) є розрахунковою формулою для усередненого дифузійного потоку у двофазній смузі з найбільш ймовірним розташуванням включень біля границь тіла за умови ненульової початкової концентрації частинок домішки.

III. Потік водню в композиті купрум-ферум

Проаналізовано кількісну та якісну залежність усередненого дифузійного потоку у двофазній багатошаровій смузі з арксинус-розподілом включень на прикладі міграції водню у шаруватому композиті $Cu-Fe$ (рис. 1а), де в якості базової фази прийнято мідь. Оскільки дифузійні процеси належать до повільних фізичних процесів – часи їх протікання (в секундах) є великими в числовому вимірі, а характерні довжини при цьому вимірюються в метрах, – тому при комп’ютерному моделюванні здійснено перехід до безрозмірних змінних $\varsigma=z/z_0$, $\tau=D_0t/z_0^2$. Коефіцієнт дифузії водню у міді складає $D_{Cu}=4{,}34\cdot 10^{-10}$ м²/с, у залізі – $D_{Fe}=1{,}8\times 10^{-11}$ м²/с [13]. Прийнято, що характерна товщина прошарків заліза $h_{Fe}=0{,}01$, а об’ємна частка заліза у міді становить $v_{Fe}=0{,}2$, ступінь вільності арксинус-розподілу $\alpha=0{,}5$, а $c_*/J_*=0{,}1$.

На рис. 3 проілюстровано розподіли усереднених потоків водню $\langle J_H(\varsigma,\tau)\rangle/J_*$ у композиті мідь-залізо залежно від відношення початкової концентрації водню в тілі до його потоку на нижній границі в початковий момент часу $c_*/J_*=0{,}01$; 0,1; 0,2; 0,4 (криві 1-4) для $\tau=0{,}1$. На рис. 4 наведено залежність функції потоку від різних значень товщини прошарків заліза $h_{Fe}=$ 0,002; 0,005; 0,01; 0,1 (криві 1-4) в момент часу $\tau=0{,}1$. Штриховою лінією позначено відповідні потоки в однорідному шарі міді.

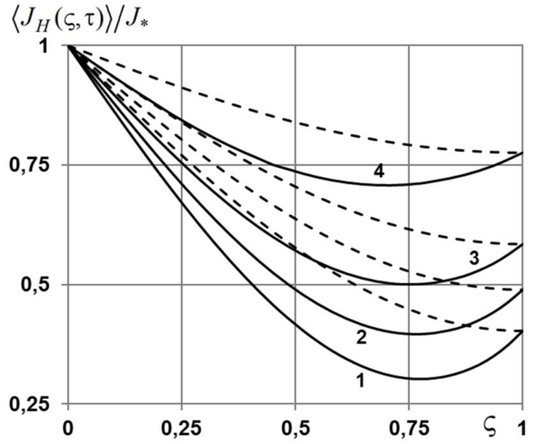

Рис. 3. Розподіли потоків водню в композиті $Cu - Fe$ для різних значень c_* / J_*

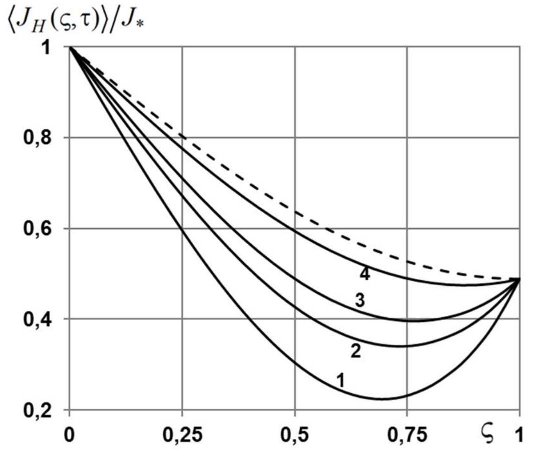

Рис. 4. Розподіли потоків водню в композиті $Cu - Fe$ для різних значень товщини залізних прошарків

Показано, що зі зростанням початкової концентрації водню у композиті c_* усереднені потоки H збільшуються в усьому тілі (рис. 3), при цьому чим більше значення відношення c_* / J_*, тим менше потоки у шаруватому композиті відрізняються від потоків у однорідному тілі. При збільшенні характерної товщини прошарків заліза усереднені потоки домішкової речовини в композиті збільшуються (рис. 4), тоді як зі зростанням об'ємної частки включень Fe за сталого значення h_{Fe} потоки водню зменшуються.

IV. Висновки

На основі підходу, відповідно до якого крайові задачі масоперенесення формулюються безпосередньо для функції дифузійного потоку, досліджено потоки домішкової речовини у двофазній випадково неоднорідній смузі з найімовірнішим розташуванням включень біля границь тіла. Побудовано інтегро-диференціальне рівняння, еквівалентне вихідній крайовій задачі. Його розв'язок знайдено методом послідовних наближень у вигляді абсолютно і рівномірно збіжного ряду Неймана. Проведено усереднення одержаного розв'язку за ансамблем конфігурацій фаз з функцією розподілу арксинуса за ненульової сталої концентрації частинок домішки в початковий момент часу.

Розглянуто модельний випадок міграції атомів водню у шаруватому композитному матеріалі мідь-залізо, з областями найбільш ймовірного розташування включень заліза біля границь тіла, та встановлено закономірності розподілів усередненого потоку домішкової речовини.

Одержана розрахункова формула для усередненого за ансамблем конфігурацій фаз дифузійного потоку за ненульової сталої початкової концентрації домішки в тілі може бути використана при моделюванні дифузійних процесів у двофазних тілах випадкової структури, розташування неоднорідностей яких можна описати за допомогою ймовірнісного арксинус-розподілу. Наприклад при комп'ютерній симуляції шаруватих покриттів з метою підбору оптимальних технологічних параметрів, прогнозування їх надійності, стійкості та інших властивостей.

Література References

[1] В. Копань, *Композиційні матеріали*, Київ, Унів. в-во «Пульсари», 2004.

[2] M. Balzannikov, A. Mikhasek, "The Use of Modified Composite Materials in Building Hydraulic Engineering Structures", *Procedia Engineering,* vol. 91, pp. 183-187, 2014.

[3] X. Sauvage, F. Wetscher, P. Pareige, "Mechanical alloying of Cu and Fe induced by severe plastic deformation of a Cu–Fe composit", *Acta Materialia*, vol. 53, no. 7, pp. 2127-2135, 2005.

[4] Д. Шевченко. (2011) *Дамаск из вторичных материалов* [Online]. Доступ: http://www.knives.com.ua

[5] C. Bergins, S. Crone, K. Strauss, "Multiphase Flow in Porous Media with Phase Change. Part II: Analytical Solutions and Experimental Verification for Constant Pressure Stream Injection", *Transport in Porous Media*, vol. 60, pp. 275-300, 2005.

[6] T. Shulenberg, U. Muller, "An improved model for two-phase flow through beds of coarse particles", *Int. J. Multiphase Flow,* vol. 13, no. 1, pp. 87–97, 1987.

[7] J. Keller, "Flow in random porous media", *Transport in Porous Media*, vol. 43, pp. 395-406, 2001.

[8] О. Ю. Чернуха, Ю. І. Білущак, А. Є. Чучвара, *Моделювання дифузійних процесів у стохастично неоднорідних шаруватих структурах*, Львів, Растр-7, 2016.

[9] В. С. Королюк, Н. И. Портенко, А. В. Скороход, А. Ф. Турбин, *Справочник по теории вероятности и математической статистике,* Москва, Наука, 1985.

[10] Y. Chaplya, O. Chernukha, A. Davydok, "Mathematical modeling of random diffusion flows in two-phase multilayered stochastically nonhomogeneous bodies", *Task Quarterly,* vol. 19, no. 3, pp. 297-320, 2015.

[11] С. Рытов, Ю. Кравцов, В. Татарский, *Введение в статистическую радиофизику. Ч. II. Случайные поля,* Москва, Наука, 1978.

[12] O. Yu. Chernukha, V. E. Goncharuk, A. E. Davydok, "Mathematical modeling of the processes of thermodiffusion of the decaying substance in a stochastically inhomogeneous layered strip", *J. Math. Sci.*, vol. 217, no. 3, pp. 312–329, 2016.

[13] Л. Лариков, В. Исачев, *Диффузия в металлах и сплавах. Структура и свойства металлов и сплавов,* Київ, Наук. думка, 1990.