

Функції Гріна задач дифузії двома шляхами

Ольга Чернуха, Юрій Білушак

Відділ математичного моделювання нерівноважних процесів

Центр математичного моделювання

Інституту прикладних проблем механіки і математики ім. Я.С. Підстригача НАН України

Львів, Україна

кафедра обчислювальної математики і програмування
Інституту прикладної математики та фундаментальних наук

Національний університет “Львівська політехніка”

zaliznuchna6@gmail.com, byixx13@gmail.com

Євген Чапля

Відділ математичного моделювання нерівноважних процесів

Центр математичного моделювання

Інституту прикладних проблем механіки і математики ім. Я.С. Підстригача НАН України

Львів, Україна

Інститут механіки і прикладної інформатики
Університет Казиміра Великого у Бидгощі,

м. Бидгощ, Польща

czapla@ukw.edu.pl

Green functions of problems of diffusion in two ways

Olha Chernukha, Yuri Bilushchak

Department of mathematical modeling of nonequilibrium processes

Centre of Mathematical Modelling of Y. S. Pidstryhach
Institute of Applied Problems of Mechanics and Mathematics of the National Academy of Sciences of Ukraine

Department of Computational Mathematics and Programming
Institute of Applied Mathematics and Fundamental Sciences
Lviv Polytechnic National University

Lviv, Ukraine

zaliznuchna6@gmail.com, byixx13@gmail.com

Yevgen Chaplya

Department of mathematical modeling of nonequilibrium processes

Centre of Mathematical Modelling of Y. S. Pidstryhach
Institute of Applied Problems of Mechanics and Mathematics of the National Academy of Sciences of Ukraine

Lviv, Ukraine

Institute of Mechanics and Applied Informatics
Kazimierz Wielki University in Bydgoszcz
Bydgoszcz, Poland

czapla@ukw.edu.pl

I. ВСТУП

Одним з класичних методів розв'язування краївих задач математичної фізики, які широко застосовуються на практиці, є метод функцій Гріна [1-3]. Отримання такого типу розв'язків краївих задач базується на третій формулі Гріна [4]. В свою чергу функції Гріна є розв'язками відповідних краївих задач з точковим джерелом та нульовими краївими умовами [5]. Тоді функції Гріна можуть мати самостійне значення, проте часто використовуються для побудови розв'язків неоднорідних задач математичної фізики. Функції Гріна представляють інтерес для знаходження розв'язків краївих задач переносу в тілах з мікроструктурою, особливо за наявності внутрішніх джерел. Крім цього у фізиці елементарних частинок, для опису хвильових процесів, тощо, функції Гріна використовуються як пропагатори в діаграмах Фейнмана [6, 7]. Також функції Гріна широко використовуються при застосуванні теорії розсіяння у фізиці твердого тіла (рентгенографія, розрахунки електронних спектрів металічних матеріалів) [2, 3].

Анотація—У роботі визначено матричну функцію Гріна задачі гетеродифузії двома шляхами. Отримано формули для елементів матриці та досліджено поведінку функцій Гріна. На цій основі знайдено розв'язки краївих задач гетеродифузії домішкової речовини за дії внутрішнього точкового джерела маси. Розглянуті випадки як детермінованих джерел, так і стохастичних за рівномірного та трикутного розподілів координат розташування джерела.

Abstract—In the work the matrix Green function of heterodiffusion problem in two ways is defined. Formulae for the elements of matrix are obtained and the behaviour of Green functions is investigated. On this basis the solutions of initial-boundary value problems under action of internal point source of mass are found. The cases of deterministic source are considered as well as stochastic ones under uniform and triangular distributions of coordinate of the mass source location.

Ключові слова—гетеродифузія; краївова задача; функція Гріна; точкове джерело маси; випадкова координата

Keywords—heterodiffusion; initial-boundary value problem; Green function; point mass source; random coordinate

Дана робота присвячена означенню, знаходженню і дослідженням функції Гріна задачі гетеродифузії в шарі двома шляхами міграції. На цій основі знайдені концентрації мігруючих частинок за наявності внутрішніх детермінованих і випадкових точкових джерел маси.

II. ФУНКЦІЇ ГРІНА ЗАДАЧ ДИФУЗІЇ ДВОМА ШЛЯХАМИ

Нехай вектор-функція $\mathbf{c}(z, t) = \begin{pmatrix} c_1(z, t) \\ c_2(z, t) \end{pmatrix}$ є такою, що її

елементи $c_i(z, t)$, $i = 1, 2$, є неперервними за змінними z , t в області $R = \{(z, t) : z \in [0; z_0], t \in \mathfrak{R}_+\}$; задовільняють умову Ліпшиця за змінною z в області R з константою l [8, 9].

Розглянемо лінійну крайову задачу для системи зв'язаних диференціальних рівнянь в часткових похідних другого порядку

$$\mathbf{L}[\mathbf{c}(z, t)] = \mathbf{F}(z, t), \quad (1)$$

де $\mathbf{L} = \begin{pmatrix} L_1^{c_1}(z, t) & L_1^{c_2}(z, t) \\ L_2^{c_1}(z, t) & L_2^{c_2}(z, t) \end{pmatrix}$ - матричний диференціальний опера-

тор, в якому $L_1^{c_1}(z, t) = \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + a_{11}$, $L_1^{c_2}(z, t) = -d_1 \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} - a_{12}$, $L_2^{c_1}(z, t) = -d_2 \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} - a_{21}$, $L_2^{c_2}(z, t) = \frac{\partial}{\partial \tau} - d \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + a_{22}$

(верхні індекси елементів матриці оператора вказують на яку функцію діє даний елемент матричного оператора);

$\mathbf{F}(z, t) = \begin{pmatrix} F_1(z, t) \\ F_2(z, t) \end{pmatrix}$ - вектор-функція джерел, де $F_i(z, t) \in L_2$

$$\vee F_i \in D(\mathfrak{R}^2) \vee F_i \in \langle \Omega, \sigma, P \rangle.$$

Нехай задані крайової умови

$$\mathbf{c}(z, t)|_{t=0} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad \mathbf{c}(z, t)|_{z=0} = \mathbf{c}_0 = \begin{pmatrix} c_0^{(1)} \\ c_0^{(2)} \end{pmatrix}; \quad \mathbf{c}(z, t)|_{z=z_0} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (2)$$

де $c_0^{(i)} \in L_2$.

Якщо $|\mathbf{c}(z, t) - \mathbf{c}_0(z, t)| \leq b$ для $\forall t \in \mathfrak{R}_+$, $z \in [0, z_0]$ (b - відома додатна константа), тоді існує єдиний класичний розв'язок задачі (1), (2) [4].

Означення: Функцією Гріна задачі (1), (2) називається матрична функція

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

яка визначена в чотиривимірній області $K = K_1 \times K_2 = \{(z, z'; t, t') | z, z' \in [0, z_0]; t, t' \in \mathfrak{R}_+ : t' < t\}$ і задовільняє такі умови:

1) в K матрична функція $\mathbf{G}(z, z'; t, t')$ є неперервною і має неперервні похідні за змінною t ;

2) для довільних $z' \in [0, z_0]$, $t' \in \mathfrak{R}_+$ має неперервні похідні першого і другого порядку за змінною z в кожному з інтервалів $[0, z']$ і $(z', z_0]$, причому похідна першого порядку $z = z'$ має стрибок, що дорівнює одиниці:

$$\frac{\partial}{\partial z} \mathbf{G}(z + 0, z'; t, t') - \frac{\partial}{\partial z} \mathbf{G}(z - 0, z'; t, t') = 1;$$

3) $\mathbf{G}(z, z'; t, t') = 0$ при $t \leq t'$;

4) в кожному з інтервалів $[0, z']$ і $(z', z_0]$ для $t' \leq t$ функція $\mathbf{G}(z, z'; t, t')$, як функція змінної z є розв'язком однорідного рівняння

$$\mathbf{L}[\mathbf{G}(z, z'; t, t')] = 0;$$

5) $\mathbf{G}(z, z'; t, t')$ як функція змінних z , t задовільняє нульові крайові умови типу (2).

Зазначимо, що в банановому просторі $\overline{C}^{(n,q)}(D^p)$ вектор-функцій $\mathbf{c}(z, t)$ з нормою

$$\|\mathbf{c}\|_{\overline{C}^{(\bar{n},2)}(D^p)} = \sum_{j=1}^2 \|c_j\|_{\overline{C}^{(n_j,2)}(D^p)},$$

де $D^p \equiv K' = \{(z, z'; t, t') | z, z' \in [0, z_0]; t, t' \in [0, T] : t' < t\}$, $\bar{n} = (n_1, n_2)$ і $n_1 = n_2 = 1$, для єдності розв'язку крайової задачі (1), (2) необхідно і достатньо, щоб фундаментальна система розв'язків не мала б розв'язків у цілих числах [9].

Для знаходження матричної функції Гріна $\mathbf{G}(z, z'; t, t')$ сформулюємо крайову задачу з точковим джерелом для елементів матриці

$$\begin{aligned} & \frac{\partial G_1(t, t'; z, z')}{\partial t} - d_0 \frac{\partial^2 G_1(t, t'; z, z')}{\partial z^2} - d_1 \frac{\partial^2 G_2(t, t'; z, z')}{\partial z^2} + \\ & + a_{11} G_1(t, t'; z, z') - a_{12} G_2(t, t'; z, z') = \delta(t - t') \delta(z - z'), \\ & \frac{\partial G_2(t, t'; z, z')}{\partial t} - d_2 \frac{\partial^2 G_1(t, t'; z, z')}{\partial z^2} - d \frac{\partial^2 G_1(t, t'; z, z')}{\partial z^2} - \\ & - a_{21} G_1(t, t'; z, z') + a_{22} G_2(t, t'; z, z') = \delta(t - t') \delta(z - z') \end{aligned} \quad (3)$$

за нульових крайових умов

$$\begin{aligned} G_1(t, t'; z, z')|_{t=0} &= G_2(t, t'; z, z')|_{t=0} = 0; \\ G_1(t, t'; z, z')|_{z=0} &= G_2(t, t'; z, z')|_{z=0} = 0, \\ G_1(t, t'; z, z')|_{z=z_0} &= G_2(t, t'; z, z')|_{z=z_0} = 0. \end{aligned} \quad (4)$$

Застосовуємо до крайової задачі (3), (4) інтегральні перетворення Лапласа за часовою змінною та скінченне sin -перетворення Фур'є за просторовою координатою, враховуючи відомі формулі перетворень від узагальнених функцій. Тоді маємо

$$\begin{aligned}
G_1(t, t'; z, z') &= \frac{2}{z_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin y_n z \sin y_n z'}{s_1 - s_2} \times \\
&\times \left[(s_1 + A_1) e^{s_1(t-t')} - (s_2 + A_1) e^{s_2(t-t')} \right]; \\
G_2(t, t'; z, z') &= \frac{2}{z_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin y_n z \sin y_n z'}{s_1 - s_2} \times \\
&\times \left[(s_1 + A_2) e^{s_1(t-t')} - (s_2 + A_2) e^{s_2(t-t')} \right]. \quad (5)
\end{aligned}$$

де $A_1 = y_n^2(d - d_1) + a_{22} + a_{12}$; $A_2 = y_n^2(d_0 - d_2) + a_{11} + a_{21}$; $s_{1,2} = -\eta_1/2 \pm \sqrt{(\eta_1/2)^2 - \eta_2}$; $\eta_1 = (d+1)y_n^2 + a_{22} + a_{11}$; $\eta_2 = (d - d_1d_2)y_n^4 + (a_{22} + a_{11}d_2 + d_1a_{21} + d_2a_{12})y_n^2 + a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}$.

Для того, щоб при $t \rightarrow \infty$ отримані ряди у співвідношеннях (5) були збіжними, повинні виконуватися умови $s_1 < 0$ та $s_2 < 0$ [10]. Враховуючи структуру виразів s_1 та s_2 і що $\eta_1 > 0$, одержимо $s_1 < 0$. Дослідивши умови, за яких s_2 набуває від'ємних значень, отримаємо обмеження [10]

$$d_1d < d_0d_2.$$

Числовий аналіз функцій Гріна проведено для базових значень: $d = 0.1$, $d_0 = 1$; $d_1 = d_2 = 0$, $a_{11} = 4$, $a_{12} = 1$, $a_{21} = -2.2$, $a_{22} = 2.6$. На рис.1-2 проілюстровано характерні поверхні, які утворюють функції Гріна, обчислені за формулами (5). На рис.1, 2. наведено функції $G_1(t, t'; z, z')$ та $G_2(t, t'; z, z')$ в точках $(z, t) = (5; 1.5)$ (рис.а), $(z, t) = (2; 4)$ (рис.б), $(z, t) = (0.8; 9)$ (рис.с) та $(z, t) = (12; 6)$ (рис.д). Вздовж осі абсцис відкладена просторова координата z' , вздовж осі ординат – часова t' , вздовж аплікати – значення функцій $G_i(t, t'; z, z')$.

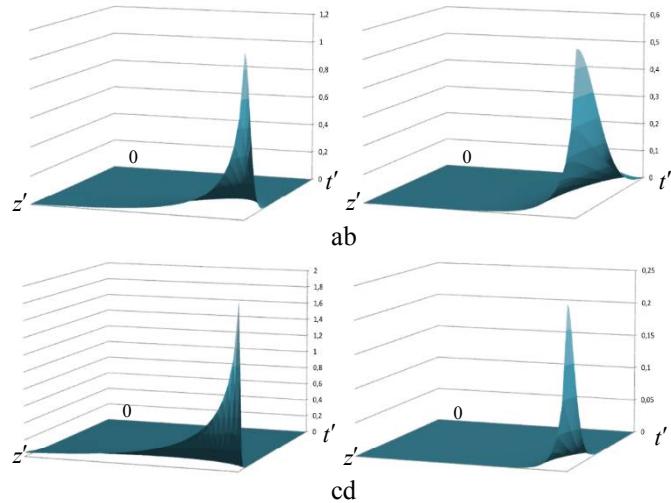


Рис.1. Поверхні функцій Гріна $G_1(t, t'; z, z')$

Поверхні, які утворюють функції Гріна (5), мають характерний гострий пік в околі точки $(z', t') = (z, t)$ (рис.1, 2).

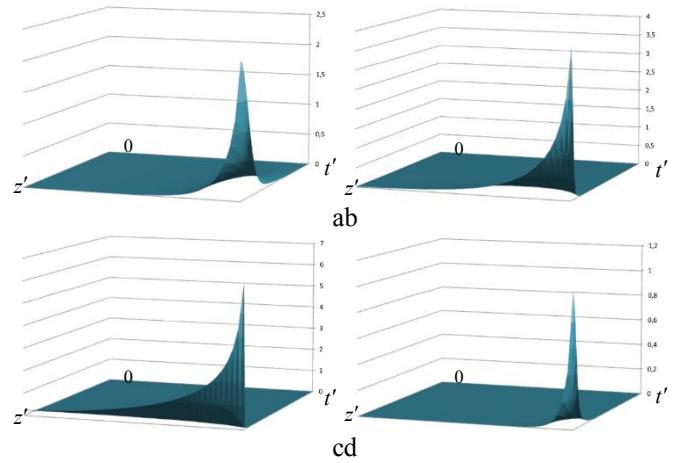


Рис.2. Поверхні функцій Гріна $G_2(t, t'; z, z')$

При цьому значення функції $G_2(t, t'; z, z')$ в рази більші ніж $G_1(t, t'; z, z')$ для тих самих значень коефіцієнтів задачі, наприклад, $\max_{z', t' \in K'} G_2 / \max_{z', t' \in K'} G_1 \Big|_{(z, t)=(2; 4)} = 3.2$ (рис.1b і 2b),

що пояснюється значно більшим коефіцієнтом сорбції a_{11} , ніж інші «сорбційні» коефіцієнти. Зауважимо, що для малих z і середніх часів t спостерігається найбільш пологе спадання функцій Гріна вздовж осі Ot' (рис.1c і 2c).

III. ЗАСТОСУВАННЯ ФУНКЦІЙ Гріна ДЛЯ РОЗВ'ЯЗУВАННЯ ЗАДАЧ ГЕТЕРОДИФУЗІЇ

A. Крайова задача гетеродифузії з точкового джерела за нульових крайових умов

Розглянемо деякі застосування отриманих функцій Гріна для знаходження розв'язків крайових задач гетеродифузії в шарі з двома шляхами міграції. Нехай домішка мігрує в шарі товщини z_0 з точкового джерела, яке розташовано у внутрішній області тіла в точці $z = z_*$. Нехай коефіцієнт α визначає частину домішкової речовини, яка з джерела маси потрапляє на швидкий шлях дифузії (вважаємо, що $d_0 > d > d_1 \geq d_2$). Розглянемо спочатку випадок нульових крайових умов. Тоді крайову задачу на елементи вектор-функції $\mathbf{c}(z, t)$, нормовані на коефіцієнт дифузії на швидкому шляху d_0 , можна сформулювати так

$$\begin{aligned}
\frac{\partial c_1}{\partial t} - \frac{\partial^2 c_1}{\partial z^2} - d_1 \frac{\partial^2 c_2}{\partial z^2} + a_{11}c_1 - a_{12}c_2 &= \alpha \delta(z - z_*), \\
\frac{\partial c_2}{\partial t} - d_2 \frac{\partial^2 c_1}{\partial z^2} + d \frac{\partial^2 c_2}{\partial z^2} + a_{21}c_1 - a_{22}c_2 &= (1 - \alpha)\delta(z - z_*), \quad (6) \\
c_1(z, t) \Big|_{t=0} &= c_2(z, t) \Big|_{t=0} = 0, \quad (7) \\
c_1(z, t) \Big|_{z=0} &= 0, \quad c_2(z, t) \Big|_{z=0} = 0, \quad (8) \\
c_1(z, t) \Big|_{z=z_0} &= c_2(z, t) \Big|_{z=z_0} = 0. \quad (9)
\end{aligned}$$

де α ($0 \leq \alpha \leq 1$) – параметр, який визначає частку домішкової речовини, що з джерела маси потрапляє на швидкий шлях міграції (у водний поровий розчин).

У загальному випадку розв'язок задачі (6)-(9) з використанням функцій Гріна можна подати таким чином [4].

$$c_1(t, z) = \alpha \int_0^t \int_0^{z_0} G_1(t, t'; z, z') \delta(z - z_*) dz' dt';$$

$$c_2(t, z) = (1 - \alpha) \int_0^t \int_0^{z_0} G_2(t, t'; z, z') \delta(z - z_*) dz' dt'. \quad (10)$$

Враховуючи (5) і (10), після інтегрування отримаємо:

$$c_1(t, z) = \alpha \frac{2}{z_0} \sum_{n=1}^{\infty} \sin y_n z \sin y_n z_* \times$$

$$\times \left(\frac{A_1}{\eta_2} + \frac{1}{s_1 - s_2} \left[\left(1 + \frac{A_1}{s_1} \right) e^{s_1 t} - \left(1 + \frac{A_1}{s_2} \right) e^{s_2 t} \right] \right),$$

$$c_2(t, z) = (1 - \alpha) \frac{2}{z_0} \sum_{n=1}^{\infty} \sin y_n z \sin y_n z_* \times$$

$$\times \left(\frac{A_2}{\eta_2} + \frac{1}{s_1 - s_2} \left[\left(1 + \frac{A_2}{s_1} \right) e^{s_1 t} - \left(1 + \frac{A_2}{s_2} \right) e^{s_2 t} \right] \right). \quad (11)$$

Зазначимо, що функції (11) є монотонно зростаючими за часовою змінною (оскільки $s_1, s_2 < 0$), при цьому обмеженими відповідними виразами у стаціонарному режимі

$$\lim_{t \rightarrow \infty} c_1(t, z) = -\alpha \frac{2}{z_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin y_n z \sin y_n z_*}{\eta_2} A_1,$$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} c_2(t, z) = -(1 - \alpha) \frac{2}{z_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin y_n z \sin y_n z_*}{\eta_2} A_2. \quad (11a)$$

B. Задача гетеродифузії з точкового джерела та за підтримки сталого значення сумарної концентрації на поверхні шару

Розглянемо тепер аналогічну задачу гетеродифузії за підтримки сталого значення сумарної концентрації домішкової речовини на границі шару $z = 0$. Тоді крайова задача має вигляд (6), (7), (9) і

$$\tilde{c}_1(z, t) \Big|_{z=0} = \tilde{\alpha} c_0, \quad \tilde{c}_2(z, t) \Big|_{z=0} = (1 - \tilde{\alpha}) c_0, \quad (12)$$

де $\tilde{\alpha}$ ($0 \leq \tilde{\alpha} \leq 1$) – параметр, що визначає частку домішкової речовини, яка з поверхні тіла потрапила на швидкий шлях міграції; цей коефіцієнт може співпадати ($\tilde{\alpha} = \alpha$) або відрізнятися ($\tilde{\alpha} \neq \alpha$) від параметра, що визначає частину речовини, яка потрапляє на цей шлях з внутрішнього точкового джерела маси.

Враховуючи відомі вирази для розв'язків задач гетеродифузії двома шляхами за дії сталого джерела на поверхні тіла за формулою

$$\frac{1}{c_0} \mathbf{c}(t, z) = \mathbf{c}^{(0)}(t, z) + \mathbf{A} \int_0^t \int_0^{z_0} \mathbf{G}(z, z'; t, t') \delta(z - z_*) dz' dt',$$

де $\mathbf{c}^{(0)}(z, t) = \begin{pmatrix} c_1^{(0)}(z, t) \\ c_2^{(0)}(z, t) \end{pmatrix}$ – розв'язок однорідної задачі гетеродифузії за крайових умов (7), (9), (12), $\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \alpha \\ 1 - \alpha \end{pmatrix}$.

В результаті одержимо

$$\frac{\tilde{c}_1(t, z)}{c_0} = \left\{ \alpha - \frac{\tilde{b}_1}{ce} \right\} \left(1 - \frac{z}{z_0} \right) - B \left[\left(\tilde{a}_1 + \frac{\tilde{b}_1}{x_1} \right) \times \right.$$

$$\times \frac{\sin(\pi - y)x_1}{\sin \pi x_1} - \left(\tilde{a}_1 + \frac{\tilde{b}_1}{x_2} \right) \frac{\sin(\pi - y)x_2}{\sin \pi x_2} \left. \right] - \frac{2}{z_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin y_n z}{s_1 - s_2} \times$$

$$\times \left\{ \frac{1}{y_n} \left[\left(\alpha s_1 + p_1 + \frac{p_2}{s_1} \right) e^{s_1 t} - \left(\alpha s_2 + p_1 + \frac{p_2}{s_2} \right) e^{s_2 t} \right] + \alpha c_0 \times \right.$$

$$\times \sin y_n z_* \left. \left(\frac{A_1(s_1 - s_2)}{\eta_2} + \left[\left(1 + \frac{A_1}{s_1} \right) e^{s_1 t} - \left(1 + \frac{A_1}{s_2} \right) e^{s_2 t} \right] \right) \right\};$$

$$\frac{\tilde{c}_2(z, t)}{c_0} = \left\{ 1 - \alpha - \frac{\tilde{b}_2}{ce} \right\} \left(1 - \frac{z}{z_0} \right) - B \left[\left(\tilde{a}_2 + \frac{\tilde{b}_2}{x_1} \right) \times \right.$$

$$\times \frac{\sin(\pi - y)x_1}{\sin \pi x_1} - \left(\tilde{a}_2 + \frac{\tilde{b}_2}{x_2} \right) \frac{\sin(\pi - y)x_2}{\sin \pi x_2} \left. \right] - \frac{2}{z_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin y_n z}{s_1 - s_2} \times$$

$$\times \left\{ \frac{1}{y_n} \left[\left((1 - \alpha)s_1 + p'_1 + \frac{p'_2}{s_1} \right) e^{s_1 t} - \left((1 - \alpha)s_2 + p'_1 + \frac{p'_2}{s_2} \right) e^{s_2 t} \right] + \right.$$

$$\times (1 - \alpha)c_0 \sin y_n z_* \left. \left(\frac{A_2(s_1 - s_2)}{\eta_2} + \left[\left(1 + \frac{A_2}{s_1} \right) e^{s_1 t} - \left(1 + \frac{A_2}{s_2} \right) e^{s_2 t} \right] \right) \right\}.$$

$$\text{де } p_1 = (\alpha d - d_1(1 - \alpha)) y_n^2 + \alpha a_{22} + \alpha_1 + (1 - \alpha)a_{12}, \quad p_2 =$$

$$= (d_1 \alpha_2 + d \alpha_1) y_n^2 + \alpha_1 a_{22} - \alpha_2 a_{12}, \quad p'_1 = (1 - \alpha - \alpha d_2) y_n^2 + (1 - \alpha)a_{11} +$$

$$+ \alpha a_{21} + \alpha_2; \quad p_2 = (\alpha_2 + \alpha_1 d_2) y_n^2 + \alpha_2 a_{11} - \alpha_1 a_{21}; \quad y = \pi z / z_0;$$

$$B = 1 / \sqrt{d^2 - 4e^2}; \quad x_{1,2} = (-d/c \pm \sqrt{d^2/c^2 - 4e})/2;$$

$$b = \alpha \alpha_1 a_{22} - \alpha_2 a_{12}; \quad a = (d_1^{(0)} \alpha_2 + d^{(0)} \alpha_1) \pi^2 / z_0^2;$$

$$c = (d - d_1 d_2) \pi^4 / z_0^4; \quad d = (a_{22} + a_{11} d + d_1 a_{21} + d_2 a_{12}) \pi^2 / z_0^2;$$

$$e = a_{11} a_{22} - a_{12} a_{21}; \quad \tilde{a}_1 = (d_1 \alpha_2 + d \alpha_1) \pi^2 / z_0^2;$$

$$\tilde{a}_2 = (\alpha_2 + \alpha_1 d_2^{(0)}) \pi^2 / z_0^2; \quad \tilde{b}_1 = \alpha_1 a_{22} - \alpha_2 a_{12};$$

$$\tilde{b}_2 = \alpha_2 a_{11} - \alpha_1 a_{21}.$$

C. Крайові задачі гетеродифузії з випадкових точкових джерел

Розглянемо задачі гетеродифузії домішки двома шляхами в шарі при дії випадкових точкових джерел маси. Важаємо, що місце знаходження джерела маси є невідомим,

тобто величина z_* є випадковою. Нехай задано рівномірний розподіл випадкової величини на проміжку $(0; z_0)$. Тоді такий процес гетеродифузії описує система рівнянь (6). Розглянемо випадок нульових краївих умов (7)-(9).

Розв'язок такої задачі отримаємо усереднюючи вирази (11) по z_* з рівномірною функцією розподілу [11]. Тоді маємо

$$\begin{aligned}\bar{c}_1(z,t) &= \left\langle c_1(z,t) \right\rangle_{z_*} = \alpha \frac{2}{z_0^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin y_n z}{y_n} B_n \times \\ &\times \left(\frac{A_1}{\eta_2} + \frac{1}{s_1 - s_2} \left[\left(1 + \frac{A_1}{s_1} \right) e^{s_1 t} - \left(1 + \frac{A_1}{s_2} \right) e^{s_2 t} \right] \right); \\ \bar{c}_2(z,t) &= \left\langle c_2(z,t) \right\rangle_{z_*} = (1-\alpha) \frac{2}{z_0^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin y_n z}{y_n} B_n \times \\ &\times \left(\frac{A_2}{\eta_2} + \frac{1}{s_1 - s_2} \left[\left(1 + \frac{A_2}{s_1} \right) e^{s_1 t} - \left(1 + \frac{A_2}{s_2} \right) e^{s_2 t} \right] \right),\end{aligned}\quad (13)$$

де $B_n = 1 - (-1)^n$.

Нехай координата розташування точкового джерела маси z_* є випадковою величиною з трикутним розподілом на проміжку $(0; z_0)$. Функція густини трикутного розподілу має вигляд [11]

$$f(z_*) = \begin{cases} \frac{2}{z_0} - \frac{2|z_0 - 2z_*|}{z_0^2}, & z_* \in (0; z_0), \\ 0, & z_* \notin (0; z_0). \end{cases}\quad (14)$$

Розв'язок системи задачі гетеродифузії (6)-(9) усереднююмо на проміжку $(0; z_0)$ по z_* з функцією розподілу (14). У результаті отримаємо

$$\begin{aligned}\bar{c}_1(z,t) &= \left\langle c_1(z,t) \right\rangle_{z_*} = \alpha \frac{2}{z_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin y_n z}{y_n} B_n \times \\ &\times \left(\frac{A_1}{\eta_2} + \frac{1}{s_1 - s_2} \left[\left(1 + \frac{A_1}{s_1} \right) e^{s_1 t} - \left(1 + \frac{A_1}{s_2} \right) e^{s_2 t} \right] \right); \\ \bar{c}_2(z,t) &= \left\langle \bar{c}_2(z,t) \right\rangle_{z_*} = (1-\alpha) \frac{2}{z_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin y_n z}{y_n} B_n \times \\ &\times \left(\frac{A_2}{\eta_2} + \frac{1}{s_1 - s_2} \left[\left(1 + \frac{A_2}{s_1} \right) e^{s_1 t} - \left(1 + \frac{A_2}{s_2} \right) e^{s_2 t} \right] \right).\end{aligned}$$

Тут $B_n = 1 + 2(-1)^n$.

Зазначимо, що концентрації домішок \bar{c}_i ($i = 1, 2$), а відповідно і сумарні концентрації, в шарі при дії випадково розташованого джерела маси з трикутним розподілом координати в області $(0; z_0)$ відрізняються від відповідних функцій, усереднених за рівномірним розподілом, на коефіцієнт $1/z_0$ і множник B_n , $n = 1, 2, \dots$. При цьому враховуючи, що

$1 - (-1)^n$ дорівнюють 0 при парному n , кількість обчислювальних процедур при числовому аналізі розв'язків (14) зменшується вдвічі. Крім цього усереднення розв'язків по величині z_* приводить до відмінних від (11a) асимптотичних виразів (концентрацій у стаціональному режимі).

Висновки

Таким чином, для системи рівнянь гетеродифузії двома шляхами, подану у матричному вигляді означенено матричну функцію Грінадля краївих умов першого роду. Отримано формули для елементів матриці Гріна та досліджено поведінку функцій Гріна. Зазначимо, що кількісне співвідношення між функціями Гріна у різних станах визначається співвідношеннями коефіцієнтів типу «сорбції-десорбції». При цьому на швидкість спадання функцій Гріна до значень в околі нуля суттєво впливають співвідношення коефіцієнтів дифузії на різних шляхах міграції та час протікання процесу гетеродифузії.

Отримані вирази для функцій Гріна застосовано для знаходження розв'язків краївих задач гетеродифузії домішкової речовини за дії внутрішнього точкового джерела маси. Розглянуті випадки як детермінованих джерел, так і стохастичних за рівномірного та трикутного розподілів координати розташування джерела. Встановлено, що усереднення функцій концентрацій за координатою розташування точкового джерела маси з рівномірним розподілом приводить до зменшення у два рази кількості обчислювальних процедур при числовому аналізі розв'язків задач гетеродифузії домішкових частинок.

ЛІТЕРАТУРА/REFERENCES

- [1] M. Stone, P. GoldbartMathematicsforPhysics,Alexandria-Florence-London: PIMANDER-CASAUBON, 2008, 919p.
- [2] A.D. Polyanin and V.F. ZaitsevHandbook of Exact Solutions for Ordinary Differential Equations (2nd edition), Chapman & Hall/CRC Press, Boca Raton, 2003, 802 p.
- [3] A.D. Polyanin, V.E. Nazaikinskii Handbook of Linear Partial Differential Equations for Engineers and Scientists, Second Edition, Chapman & Hall/CRC Press January 15, 2016, 1609 p.
- [4] А.Г. Свешников, А.Н. Боголюбов, В.В. Кравцов. Лекции по математической физике, Москва, Изд-во МГУ, 1993, 352 с.
- [5] L. EsgesThe Classical Electromagnetic Field, New York, Dover Publications, 1972, 448 p.
- [6] С.М. Рытов, Ю.А. Кравцов, В.И. Татарский. Введение в статистическую радиофизику. Ч. II Случайные поля, Москва, Наука, 1978, 436 с.
- [7] Р. Фейнман, А. Хиббс Квантовая механика и интегралы по траекториям, Москва, Мир, 1968, 454 с.
- [8] М.А. Неймарк Линейные дифференциальные операторы, Москва, Наука, 1969, 526 с.
- [9] Б.Й. Пташник, В.С. Ільків, І.Я. Кміть, В.М. Полішук Нелокальні країві задачі для рівнянь із частинними похідними, Київ, Наукова думка, 2002, 416 с.
- [10] О. Власій, О. Чернуха Математичне моделювання гетеродифузійних процесів у шарі з випадковим прошарком, Фізико-математичне моделювання та інформаційні технології, 2014, Вип. 20, С. 58-68.
- [11] В.С. Королюк, Н.И. Портенко, А.В. Скороход, А.Ф. Турбин Справочник по теории вероятности и математической статистике, Москва, Наука, 1985, 640 с.