

ВЫЧИСЛЕНИЕ ВЕРОЯТНОСТИ ПЕРКОЛЯЦИИ ТЕПЛА В МИКРОКОМПЗИТНЫХ МАТЕРИАЛАХ НА ОСНОВЕ УРАВНЕНИЙ ФПК

Плескачевский Ю.М., Чигарева Ю.А.

В теории переноса и проводимости вероятность перколяции понимается как вероятность того, что любая выделенная в среде область связана с остальной ее частью настолько сильно, что может участвовать в процессе проводимости [1,2].

Для вычисления вероятности перколяции в микрокомпозитных материалах используются решеточные модели и компьютерные эксперименты [1-3], в рамках которых получены результаты, согласующиеся с опытом. Модель эффективной среды, в частности метод самосогласованного поля [1-7], дает возможность получать численно-аналитические результаты, также хорошо согласующиеся с экспериментальными данными для концентраций наполнителей меньшей 0,5. В теории проводимости зависимость эффективных коэффициентов двухкомпонентных микрокомпозитных материалов, состоящих из идеального проводника и идеального изолятора вблизи порога перколяции описывается нелинейной зависимостью от концентрации c , а при $c < 0,5$ -линейной [1,2].

Перколяция в микрокомпозитных материалах может проявляться в разных процессах. Например, в процессе производства керметов уже на стадии прессования порошков из металлосодержащих и керамических гранул возможно образование макрокластеров. Образование макрокластера в твэле из урансодержащих гранул обуславливает неполное его выгорание, чрезмерный разогрев ведет к снижению теплопроводности и энергоэффективности процесса. Если в процессе работы возникают микротрещины, то их слияние может быть инициировано наличием кластеров из какого-либо компонента. Магистральная трещина также представляет собой кластер, пронизывающий объем твэла. Растрескивание твэла ведет к нестабильности процесса [8-10].

Порог перколяции, определяемый экспериментально на множестве идентичных твэлов представляет собой случайную величину, которая распределена на некотором интервале значений c – объемной концентрации ($0 \leq c \leq 1$). Вся информация о ней заключена в плотности вероятности, которая может быть определена на основе некоторой статистической модели. В частности, сингулярная плотность вероятностей, обычно используемая для микрокомпозитных материалов, соответствует модели, согласно которой в данной точке среды может находиться любой компонент смеси с вероятностью численно равной его объемной концентрации (модель смесей) [11]. Модели, учитывающие корреляцию между компонентами, могут быть, построены на основе марковских процессов [12-14]. Синтез микрокомпозитной среды и образование в процессе его кластеров включает в себя процессы агрегации и диффузии, которые макроскопически проявляются через случайный разброс значений эффективных коэффициентов переноса на множестве образцов при одних и тех же концентрациях.

Вероятность перколяции здесь понимается как вероятность достижения предельного значения проводимости или сопротивления микрокомпозитной среды, составленной из смеси идеального проводника (изолятора) и компонента с неидеальными свойствами.

1. Уравнения, описывающие изменения эффективных характеристик среды. Уравнение теплопроводности в стационарном случае для избранно неоднородной среды имеет вид

$$\nabla(\lambda(\vec{r}) \nabla T) = 0 \quad (1.1)$$

где $\lambda(\vec{r})$ – коэффициент теплопроводности, зависящий от пространственных координат $\vec{r} = (x_1, x_2, x_3)$ случайным образом, T – температура.

Теплопроводность эффективной среды [4,5] описывается уравнением

$$\nabla(\lambda_* \nabla \langle T \rangle) = 0 \quad (1.2)$$

где неизвестный эффективный коэффициент теплопроводности λ_* вычисляется путем осреднения некоторой случайной функции $g(\lambda, \lambda_*)$ с плотностью вероятности $\varphi(\lambda)$ и приравнивания полученного выражения некоторому числу, например нулю.

$$\int g(\lambda, \lambda_*) \varphi(\lambda) d\lambda = 0 \quad (1.3)$$

В частности для двухкомпонентной среды, для которой

$$\lambda = \begin{cases} \lambda_1 & \text{с вероятностью } C_1 \\ \lambda_2 & \text{с вероятностью } C_2, \quad C_1 + C_2 = 1 \end{cases} \quad (1.4)$$

имеем

$$\varphi(\lambda) = C_1 \delta(\lambda - \lambda_1) + C_2 \delta(\lambda - \lambda_2). \quad (1.5)$$

Подставляя (1.5) в (1.3), получим алгебраическое уравнение для определения λ_* как функции концентрации $C = C_2 = 1 - C_1$

$$(1 - C)g(\lambda_1, \lambda_*) + Cg(\lambda_2, \lambda_*) = 0. \quad (1.6)$$

На практике при синтезе микрокомпозитов всегда существует разброс значений $\lambda_*(c)$, поэтому перколяция, т.е. условие $\lambda_*(C_p) = 0$ может произойти при разных C_p . Формирование макрокластера, контактирующего с границами будем рассматривать как результат взаимодействия конвекции и диффузии, что макроскопически можно описать как хаотическое движение точки $M(\lambda_*, c)$ в плоскости где по оси абсцисс OC откладываются значения концентрации $0 \leq c \leq 1$, а по оси ординат λ_* откладываются значения эффективной теплопроводности $\lambda_2 \leq \lambda_* \leq \lambda_1$ ($\lambda_2 < \lambda_1$).

Исходя из вышесказанного положим, что плотность вероятностей $f(\lambda_*, c)$ случайной функции $g(\lambda_*, c)$ удовлетворяет уравнению сохранения [13-14].

$$\frac{\partial f(\lambda_*, c)}{\partial c} + \frac{\partial G(\lambda_*, c)}{\partial \lambda_*} = 0, \quad (1.7)$$

где $G(\lambda_*, c)$ в общем виде записывается в виде

$$G(\lambda_*, c) = A_1(\lambda_*, c) f(\lambda_*, c) - \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \lambda_*} [A_2(\lambda_*, c) f(\lambda_*, c)] \quad (1.8)$$

Выражения для коэффициентов $A_1(\lambda_*, c)$, $A_2(\lambda_*, c)$ зависят от выбора моделей кластеризации и диффузии, описывающих процессы, идущие при формировании композита, следствием чего является случайный разброс значений $\lambda_*(c)$.

Уравнения (1.7), (1.8) рассматриваются в области $\Lambda \times C$: $0 \leq C \leq 1$, $0 \leq \lambda_* < \lambda_1$. В качестве начального условия берется [12-14]

$$f(\lambda_*, 0) = \delta(\lambda_* - \lambda_1). \quad (1.9)$$

При возрастании c траектория точки $M(\lambda_*, c)$ совершает случайное блуждание в области $\Lambda \times C$. Концентрация C_p , при которой наступает перколяция, т.е. $\lambda_* = 0$, соответствует достижению точкой $M(\lambda_*, c)$ границы $\lambda_* = 0$ при $C = C_p$. В каждой точке области $\Lambda \times C$ условие $d\lambda_*/dc < 0$ является условием, что увеличение концентрации ведет к росту только одного перколяционного кластера причем

$|d\lambda_*/dc| a_c (a_c > 0)$. В случае, если $|d\lambda_*/dc| a_c$ функция $\lambda_*(c)$ убывает медленнее за счет роста кластеров более низкого иерархического уровня, чем основной. Если предположить, что движение точки $M(\lambda_*, c)$ в области $\Lambda \times C$ представляет собой броуновское блуждание, то перколяция соответствует достижению границы $\lambda_* = 0$ точкой $M(\lambda_*, c)$ которая начинает движение из точки границы ($c = 0, \lambda_* = \lambda_1$) и подвергается действию двух факторов, описываемых выражениями: $A_1(\lambda_*, c)f(\lambda_*, c)$ – характеризует систематический конвекционный поток вероятности, отображающей процесс формирования кластера и направленный вдоль оси λ_* , $\left(\frac{A_2}{2} \frac{\partial f(\lambda_*, c)}{\partial \lambda_*}\right)$ – характеризует диффузионный, поток который направлен от большей концентрации компонента изолятора к меньшей.

Таким образом $G(\lambda_*, c)$ характеризует полный поток плотности вероятности эффективного коэффициента $\lambda(c)$ через произвольное сечение λ_* .

Как известно, между уравнениями сохранения для плотности вероятности типа (1.7) и стохастическими дифференциальными уравнениями существует соответствие такое, что уравнению (1.7) можно поставить в соответствие стохастическое дифференциальное уравнение вида [12-14]

$$\frac{d\lambda_*}{dc} + \psi(\lambda_*) = v(c), \quad (1.10)$$

где $v(c)$ – нормальный белый шум, $\langle v \rangle = 0, \langle v(c)v(c_1) \rangle = N_0 \delta(c - c_1)$, $\psi(\lambda_*)$ – кусочно-линейная функция.

Функция $\lambda_*(c)$ в этом случае – марковская, а коэффициенты сноса и диффузии имеют соответственно вид [14]

$$A_1(\lambda_*) = -\psi(\lambda_*), \quad A_2(\lambda_*) = b = N_0/2. \quad (1.10)$$

С учетом (1.11) поток вероятности в плоскости $(\Lambda \times C)$ имеет вид

$$G(\lambda_*, c) = -\psi(\lambda_*)f(\lambda_*, c|\lambda_1, 0) - (N_0/4) \frac{\partial f(\lambda_*, c|\lambda_1, 0)}{\partial \lambda_*}. \quad (1.12)$$

Известно, что линейная зависимость $\lambda_*(c)$, даваемая самосогласованным решением [9] хорошо описывает зависимость эффективной теплопроводности от концентрации компонента изолятора c для $c \leq 0,5$ однако результаты моделирования вблизи концентрации C_p показывают, что здесь зависимость $\lambda_*(c)$ имеет нелинейный характер [1,2]. Реальные значения $\lambda_*(c)$ будут представлять собой разброс около этих линий.

Исходя из вышесказанного функцию $\psi(\lambda_*)$ зададим в виде

$$\psi(\lambda_*) = \begin{cases} k & \text{при } \lambda_k (\lambda_k \leq \lambda_1) \\ \frac{\psi_k}{\lambda_k} \lambda_* & \text{при } 0 \leq \lambda_* \leq \lambda_k \end{cases} \quad (1.13)$$

График функции $\psi(\lambda_*)$ представлен на рисунке 1.

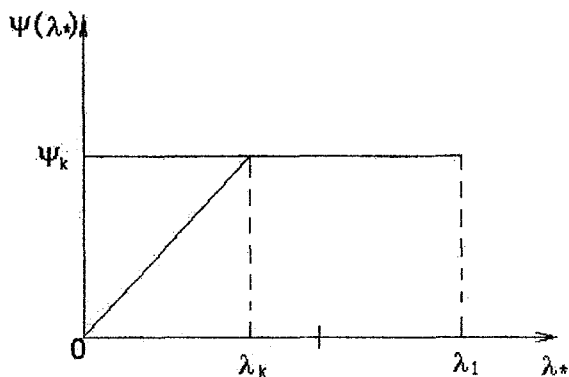


Рисунок 1

При $\lambda_* = \lambda_k$ процесс $\lambda_*(c)$ непрерывный, что выражается в непрерывности плотности вероятности перехода и потока вероятности.

2. Моделирование перколяции как процесса достижения границы области $\Lambda \times C$. Формирование структуры двухкомпонентного композита макроскопически отражается как случайное блуждание точки $M(\lambda_*, c)$ в области $\Lambda \times C$ при условии, что точка $M(\lambda_*, c)$ при $c = 0$ находится в точке $M_0(\lambda_1, 0)$. Граница $\lambda_* = 0$ является поглощающей, а граница $\lambda_* = \lambda_1$ при $c > 0$ является недостижимой. Перейдем к безразмерному коэффициенту теплопроводности $\mu_* = \lambda_* \lambda_1^{-1}$. Рассмотрим случайные события: событие A – точка M не достигает границы $\mu_* = 0$ при $0 < c < 1$, что соответствует уравниванию процессов формирования кластера за счет агрегации и одновременно его деструкции за счет диффузии, событие B – точка M достигает границы $\mu_* = 0$ при некотором $0 < c = C_p < 1$, что соответствует преобладанию механизма агрегатирования над диффузией т.е. образованию кластера, имеющему контакты с границами тела.

Обозначим вероятность события A через $P(A) = Q$, вероятность события B через $P(B) = 1 - Q$. Тогда в области $\mu \times c \setminus \mu_* = 1$ имеем $P + Q = 1$ ($0 < C < 1$). Введем плотность вероятностей

$$w(1, \mu_*, c) = q(1, \mu_*, c) + P(0, c)\delta(\mu_*), \quad (2.1)$$

где $q(1, \mu_*, c)$ связана с $Q(1, c)$ соотношением

$$Q(1, c) = \int_1^0 q(1, \mu_*, c) d\mu_*. \quad (2.2)$$

Очевидно, имеют место соотношения

$$P(1, c_i) > P(1, c_{i+1}), \quad P(0, c_i) < P(0, c_{i+1}). \quad (2.3)$$

$$\int_1^0 q(1, \mu_*, c_i) d\mu_* < \int_1^0 q(1, \mu_*, c_{i+1}) d\mu_*, \quad c_{i+1} > c_i. \quad (2.4)$$

Таким образом, $q(1, \mu_*, c)$ представляет собой плотность вероятности того, что точка $M(\mu_*, c)$ не достигнет границы $\mu_* = 0$. Эта функция не является нормированной, но удовлетворяет уравнению (1.1) с начальным условием $\delta(\mu_* - 1)$. Так как при δ – образных граничных условиях уравнение для одномерного распределения совпадает с уравнением для условной вероятности перехода, то вместо $q(1, \mu_*, c)$ можно рассматривать ненормированную плотность вероятности перехода $p(\mu_*, c|1, 0)$, которая удовлетворяет уравнению типа (1.1) с граничными условиями

$$p(1, c|1, 0) = \delta(c), \quad p(0, c|1, 0) = 0, \quad (2.5)$$

$$p(\mu_*, c|0, 0) = p(\mu_*, c|1, 0) = 0, \quad (2.6)$$

которые означают то, что плотности вероятности $p(\mu_*, c|1, 0)$, $p(\mu_*, c|0, 0)$ описывают реализации, не достигнувшие границ [13-14].

В дальнейшем будем использовать не только прямое уравнение ФПК (Фокера-Планка-Колмогорова), но и обратное, поэтому вместо начального условия $c = 0$ введем $c = c_0$, а вместо $\mu_*(0) = 1$ введем $\mu_*(C_0) = \mu_{*0}$. Это означает, что формирование композита начинается из состояния, когда в нем уже содержится теплоизолирующий компонент $\mu_* = 0$ с концентрацией $c = c_0$. Тогда

$$Q(\mu_{*0}, c) = Q(\mu_{*0}, c_0, c) = \int_{\mu_{*0}}^0 p(\mu_*, c|\mu_{*0}, c_0) d\mu_* \quad (2.7)$$

и функция $p(\mu_*, c|\mu_{*0}, c_0)$ удовлетворяет обратному уравнению ФПК вида

$$-\frac{\partial p}{\partial c_0} = A_1(\mu_{*0}, c_0) \frac{\partial p}{\partial \mu_{*0}} + \frac{A_2(\mu_{*0}, c_0)}{2} \frac{\partial^2 p}{\partial \mu_{*0}^2} \quad (2.8)$$

Аналогично [4] на основе уравнения (2.8) можно получить уравнения для $Q(\mu_{*0}, c)$, и $P(\mu_{*0}, c) = 1 - Q(\mu_{*0}, c)$ удовлетворяющих (1.7). Выпишем уравнения для $Q(\mu_{*0}, c)$, $P(\mu_{*0}, c)$ в явном виде

$$\begin{aligned} \frac{\partial Q}{\partial c} &= A_1(\mu_{*0}) \frac{\partial Q}{\partial \mu_{*0}} + \frac{1}{2} A_2(\mu_{*0}) \frac{\partial^2 Q}{\partial \mu_{*0}^2}, \\ \frac{\partial P}{\partial c} &= A_1(\mu_{*0}) \frac{\partial P}{\partial \mu_{*0}} + \frac{1}{2} A_2(\mu_{*0}) \frac{\partial^2 P}{\partial \mu_{*0}^2}. \end{aligned} \quad (2.9)$$

Начальное условие для $P(\mu_{*0}, c)$ имеет вид

$$P(\mu_{*0}, 0) = 0. \quad (2.10)$$

Граничные условия запишем в виде

$$P(0, c) = 1, P(1, c) = 0. \quad (2.11)$$

Должно выполняться условие формирования идеального изолятора

$$\lim_{c \rightarrow 1} P(0, c) = 1.$$

Аналитическое решение уравнения для произвольных A_1 , A_2 пока найти не удастся, поэтому рассмотрим определение величины средней концентрации, при которой происходит перколяция. Концентрация изолятора, при которой происходит перколяция согласно теории эффективной среды равна $2/3$ [1,2]. Однако, в рассматриваемой модели перколяции на основе уравнения ФПК она является случайной величиной $C = C(0, \mu_{*0})$, плотность вероятностей $w(t)$ которой можно найти по формуле [13,14]

$$w(t) = \frac{\partial P(\mu_{*0}, c)}{\partial c} = -\frac{\partial Q(\mu_{*0}, c)}{\partial c}. \quad (2.12)$$

Тогда среднее значение концентрации при которой происходит перколяция, вычисляется по формуле

$$\langle c \rangle = \int_0^1 c \frac{\partial P(\mu_{*0}, c)}{\partial c} dc = -\int_0^1 c \frac{\partial Q(\mu_{*0}, c)}{\partial c} dc = \int_0^1 Q(\mu_{*0}, c) dc. \quad (2.13)$$

Формула (2.13) получена с помощью интегрирования по частям и условия $Q(\mu_{*0}, 1) = 0$.

Проинтегрировав первое уравнение для $Q(\mu_{0*}, c)$ (2.9) по c от 0 до 1, получим с учетом $Q(\mu_{0*}, c_0) = 1$, $Q(\mu_{0*}, 1) = 0$ уравнение для средней концентрации изолятора $\langle C \rangle$

$$\frac{1}{2} A_2(\mu_{0*}) \frac{d^2 \langle C \rangle}{d\mu_{0*}^2} + A_1(\mu_{0*}) \frac{d \langle C \rangle}{d\mu_{0*}} + 1 = 0. \quad (2.14)$$

$$\langle C \rangle = 0 \text{ при } \mu_{0*} = 1, \langle C \rangle = C_p \text{ при } \mu_{0*} = 0. \quad (2.15)$$

Вводя замену $\tau = d \langle C \rangle / d\mu_{0*}$ уравнение (2.14) преобразуем к уравнению первого порядка

$$\frac{1}{2} A_2(\mu) \frac{d\tau}{d\mu_{0*}} + A_1(\mu)\tau + 1 = 0. \quad (2.16)$$

решение которого запишем в виде

$$\tau = e^{-\psi(\mu_{0*})} \left(-2 \int_0^{\mu_{0*}} \frac{e^{\psi(\mu_{0*})}}{A_2(\mu_{0*})} d\mu_{0*} + C_1 \right) \quad \psi(\mu_{0*}) = 2 \int \frac{A_1(\mu_{0*})}{A_2(\mu_{0*})} d\mu_{0*}. \quad (2.17)$$

Интегрируя (2.17), получим

$$\langle c \rangle = \int_0^{\mu_{0*}} \left[-2 \int_0^{\mu_{0*}} \frac{e^{\psi(z_{0*})}}{A_2(z_{0*})} dz_{0*} \right] e^{-\psi(\mu_{0*})} d\mu_{0*} + c_1 \int_0^{\mu_{0*}} e^{-\psi(\mu_{0*})} d\mu_{0*} + C_2. \quad (2.18)$$

Постоянные интегрирования C_1, C_2 определяются из условий $\langle c \rangle = C_p$ при $\mu_{0*} = 0$, $\langle c \rangle = 0$ при $\mu_{0*} = 1$

$$C_1 = \frac{h + \int_0^1 \left[2 \int_0^{\mu_{0*}} \frac{e^{\psi^0(z_{0*})}}{A_2(z_{0*})} dz_{0*} \right] e^{-\psi(\mu_{0*})} d\mu_{0*} - C_p}{\int_0^1 e^{-\psi(\mu_{0*})} d\mu_{0*}}, \quad C_2 = C_p. \quad (2.19)$$

Выражение (2.18) с учетом (2.19) дает оценку для средней концентрации порога перколяции.

Оценим вероятность перколяции в случае учета влияния случайных факторов с помощью уравнения диффузии (1.7), (1.8) и стохастического дифференциального уравнения (1.10).

3. Вычисление вероятности перколяции в предельных случаях. Условная плотность вероятности $f(\mu_*, c | \mu_{*0}, c_0)$ удовлетворяют прямому и обратному уравнениям ФПК, в частности, прямое имеет вид [12-14]

$$\frac{\partial f}{\partial c} = \frac{\partial}{\partial \mu_*} \left[\frac{\gamma \mu_*}{c - c_p} \right] + \frac{N}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial \mu_*^2} = 0. \quad (3.1)$$

Начальное условие

$$f(\mu_* c_0 | \mu_{*0} c_0) = \delta(\mu_* - \mu_{*0}). \quad (3.2)$$

Граничные условия

$$f(\mu_{*0} c | \mu_{*0} c) = 0, \quad f(0, c | \mu_{*0} c_0) = \delta. \quad (3.3)$$

Непосредственное решение (3.1) осложняется зависимостью $A_1(\mu_*, c)$ от c , причем при приближении $c \rightarrow c_p$ скорость регулярного изменения (сноса) $A_1(\mu_*, c)$ стремится к бесконечности, что позволяет для $c \sim c_p$ пренебречь диффузионным

членом в (3.1) и получить, что вероятность f удовлетворяет уравнению типа переноса

$$\frac{\partial f}{\partial c} = \frac{\gamma \mu_*}{c - c_p} \frac{\partial f}{\partial \mu_*} + \frac{\gamma}{c - c_p} f. \quad (3.4)$$

Уравнение (3.4) описывает перенос плотности вероятности в области $\mu \times C$ с поглощением. Это предельный случай, когда пренебрегаем диффузией и учитываем только перенос.

Решение уравнения (3.4) в этом случае имеет вид

$$f = f_0 \cdot \exp \left[-\gamma \int_{c_0}^c \frac{ds}{c - c_p} \right] = f_0 \cdot \exp \left[-\gamma \cdot \ln |c - c_p| \right]_{c_0}^c = f_0 \left(\frac{c - c_p}{c_0 - c_p} \right)^{-\gamma}.$$

Вероятность вычисляется по формуле

$$P = f_0 \int_{c_0}^{c_p} \left(\frac{c_0 - c_p}{c - c_p} \right) dc = f_0 \frac{c_p - c_0}{1 - \gamma} \quad \text{при } \gamma < 1, \quad c_0 < c_p. \quad (3.5)$$

Вернемся к уравнению (3.1) и учтем диффузию.

Запишем прямое уравнение в виде

$$\frac{\partial f(\mu_*, c | \mu_{*0}, c_0)}{\partial c} = \frac{\partial}{\partial \mu_*} \left(\left[\frac{\gamma \mu_*}{c - c_p} \right] f(\mu_*, c | \mu_{*0}, c_0) \right) + \frac{N_0}{2} \frac{\partial^2}{\partial \mu_*^2} f(\mu_*, c | \mu_{*0}, c_0). \quad (3.6)$$

«Начальное» условие имеет вид

$$f(\mu_*, c_0 | \mu_{*0}, c_0) = \delta(\mu_* - \mu_{*0}). \quad (3.7)$$

Граничные условия

$$f(\mu_0, c_0 | \mu_{*0}, c_0) = 0, \quad f(\mu_*, c | v_*^0, c_0) = \delta(c_p - c). \quad (3.8)$$

Сделаем в (3.6) замену переменных [12-14]

$$s = \varphi(c), \quad \mu_*^1 = \psi(\mu_*, c), \quad (3.9)$$

где $\varphi(c)$ имеет вид

$$\varphi(c) = \frac{N}{2} \int_{c_0}^c \exp \left\{ -2\gamma \int_{c_0}^{c'} \frac{dc'}{c - c_p} \right\} dc' = \frac{N}{2} \int_{c_0}^c \exp \left\{ \ln |c - c_p|^{-2\gamma} \right\} dc',$$

а $\psi(\mu_*, c)$ вычисляется по формуле

$$\psi(\mu_*, c) = \mu_{*0} \exp \left[-\gamma \int_{c_0}^c \frac{dc'}{c - c_p} \right] = \mu_* \exp \left\{ \ln \left| \frac{c - c_p}{c_0 - c_p} \right|^{-\gamma} \right\}.$$

Окончательно имеем из (3.9)

$$\varphi(c) = \frac{N}{2} \left(\frac{c - c_p}{c_0 - c_p} \right)^{-2\gamma} = \frac{N}{2} \left(\frac{c_0 - c_p}{c - c_p} \right)^{2\gamma} = s. \quad (3.10)$$

$$\psi(\mu_*, c) = \mu_{*0} \left(\frac{c - c_p}{c_0 - c_p} \right)^{-\gamma} = \mu_{*0} \left(\frac{c_0 - c_p}{c - c_p} \right)^{\gamma} = \mu_*^1.$$

Запишем уравнение (3.6) в новых переменных вводя замену плотностей вероятностей [12-14]

$$f(\mu_*, c | \mu_{*0}, c_0) = f_1(\mu_*(c) | s_0, \mu_{*0}^1) | \psi, \mu_* |, \quad (3.11)$$

где учтено, что

$$s_0 = \varphi(c_0), \mu_{*0}^1 = \psi(\mu_{*0}, c_0). \quad (3.12)$$

Тогда получим

$$\frac{\partial f_1}{\partial s} = -\frac{\partial}{\partial \mu_*^1} \left[A_1(\mu_*^1, s) f_1(\mu_*^1, s | \mu_{*0}^1, s_0) \right] + \frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial \mu_*^1} \left[A_2(\mu_*^1, s) f_1(\mu_*^1, s | \mu_{*0}^1, s_0) \right]. \quad (3.13)$$

При «начальном» условии

$$f_1(\mu_*^1, s_0 | \mu_{*0}^1, s_0) = \delta(\mu_*^1 - \mu_{*0}^1). \quad (3.14)$$

а также граничных условиях, следующих из (5.8)

$$f_1(\mu_{*0}^1, s | \mu_{*0}^1, s_0) = 0, f_1(0_{*0}^1 | \mu_{*0}^1, s_0) = \delta(s_p - s). \quad (3.15)$$

Коэффициенты A_1, A_2 в уравнении (3.13) подбираются таким образом, чтобы уравнение (3.13) имело заданный вид. Рассмотрим сначала случай

$$A_1(\mu_*^1, s) = \frac{1}{\varphi'_{,c}} \left\{ \psi'_{,c} + A_1 \left[\varphi_{(s)}^{-1}, \psi^{-1}(s, \mu_*^1) \right] \psi'_{,\mu_*} \right\} = 0. \quad (3.16)$$

$$A_2(\mu_*^1, s) = \frac{1}{\varphi'_{,c}} \frac{N}{2} \cdot (\psi'_{,\mu_*}). \quad (3.17)$$

Выражая в (3.10) c, μ_* через s, μ_*^1 и подставляя в (3.16) получим, что условие $A_1(\mu_*^1, s) = c$ приводит к выражению

$$\gamma \left[1 - \left(\frac{c_p - c}{c_p - c_0} \right)^\gamma \right] = 0, \quad (3.18)$$

откуда следует $\gamma = 0$. В этом случае стохастическое дифференциальное уравнение имеет вид

$$\frac{d\mu_*}{dc} = v(c), \langle v(c) \rangle = 0, \langle v(c) v(c') \rangle = \frac{N}{2} \delta(c - c'). \quad (3.19)$$

Уравнение ФПК в этом случае имеет канонический вид уравнения диффузии

$$\frac{\partial f(\mu_*, c | \mu_*^0, c_0)}{\partial c} = \frac{N}{2} \frac{\partial^2 f(\mu_*, c | \mu_*^0, c_0)}{\partial \mu_*^2}. \quad (3.20)$$

Решение которого записывается в виде

$$f(\mu_*, c | \mu_*^0, c_0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi(c - c_0)}} \exp \left\{ -\frac{(\mu_* - \mu_*^0)^2}{2(c - c_0)} \right\}, \quad v_* = \int \mu(c) dc. \quad (3.21)$$

Условная плотность перколяции находится по формуле

$$f(0, c_p | v^0, c_0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi(c_p - c_0)}} \exp \left\{ -\frac{(c_p - c_0)v_*^{02}}{2} \right\}. \quad (3.22)$$

Вероятность перколяции

$$P = \int_{c_0}^{c_p} \left[\frac{1}{\sqrt{2\pi(c - c_0)}} \int_{\mu_{*0}^0}^0 \exp \left\{ -\frac{(\mu_* - \mu_{*0}^0)^2}{2(c - c_0)} \right\} d\mu_* \right] dc. \quad (3.23)$$

Рассмотренные случаи соответствуют моделям, описывающим крайние случаи: для вычисления вероятности перколяции в отсутствие диффузии – формула (3.5), чистая диффузия в отсутствие переноса – формула (3.23). Истинная вероятность находится между вычисленными границами определяемых формулами (3.2), (3.23).

Рассмотрим модель, в которой учитываются перенос и диффузия. Положим в (3.17) $A_1(\mu_*^1, s) = a\mu_*$.

4. Вычисление вероятности перколяции методом отражений. Рассмотрим модель перколяции, для случайной функции $\mu_*(c)$, которая под действием регулярных факторов при росте c стремится к значению $\mu_*(C_p) = 0$, подвергаясь при этом влиянию случайных факторов. Таким образом, траектория $\mu_*(c)$ в плоскости $\mu \times c$ представляет собой броуновскую кривую, которая при $c = c_p$ может достигать значения нуль. Тогда можно наступление перколяции рассматривать, как выброс случайной функции $\mu_*(c)$ за нулевой уровень. Обозначим $P(\mu_{*0}, c)$ -вероятность достижения функцией $\mu_*(c)$ при концентрации равной C_p нулевого значения. Как и раньше, $Q(\mu_{*0}, c)$ - противоположное событие, причем

$$P(\mu_{*0}, c) = 1 - Q(\mu_{*0}, c) = 1 - \int_{\mu_{*0}}^0 q(\mu_{*0}, \mu_*, c) d\mu_*, \quad (4.1)$$

где плотность вероятностей $q(\mu_{*0}, \mu_*, c)$ ненормированная и удовлетворяет уравнению типа (ФПК).

Выполняя преобразование координат(3.9), получим уравнение

$$\frac{\partial q}{\partial s} = a \frac{\partial}{\partial \mu_*^1} (\mu_*^1 q) + \frac{a^2 N}{4} \frac{\partial^2 q}{\partial \mu_*^1}. \quad (4.2)$$

Начальное условие с учетом замены переменных имеет вид

$$q(\mu_{*0}^1, \mu_*^1, s_0) = \delta(\mu_*^1 - \mu_{*0}^1), \quad s_0 = \frac{N}{2}, \quad s_p = \infty. \quad (4.3)$$

Граничное условие при $\nu_* = 0$ переходит в условие $\mu_{*p}^1 = (c_p - c_0)^1$

$$q(\mu_{*0}^1, \mu_{*p}^1, s) = 0. \quad (4.4)$$

Решение уравнения (4.2) представляет собой нормальную плотность вероятности $W(\mu_{*0}^1, \mu_*^1, s)$, называемую фундаментальным решением уравнения (4.1) при условиях (4.2), (4.3) имеющим вид

$$W(\mu_{*0}^1, s) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_\mu(s)}} \exp\left\{-\frac{[\mu_*^1 - m_\mu(s)]^2}{2\sigma_\mu^2(s)}\right\}, \quad (4.5)$$

где математическое ожидание $m_\mu(s)$ и дисперсия $\sigma_\mu^2(s)$ записываются в виде

$$m_\mu(s) = \mu_{*0}^1 e^{-a\left(\frac{s-N}{2}\right)}, \quad \sigma_\mu^2(s) = \frac{Na}{4} \left(1 - e^{-2a\left(\frac{s-N}{2}\right)}\right). \quad (4.6)$$

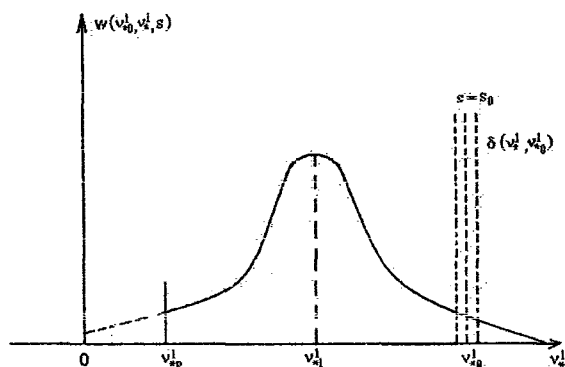


Рисунок 2

На рисунке 2 изображено, изменение $W(\mu_{*0}^1, \mu_{*p}^1, s)$, из которого видно, что на границе $\mu_{*0}^1 = (c_p - c_0)^\gamma$ плотность вероятности $W(\mu_{*0}^1, \mu_{*p}^1, s_1)$, не равна нулю. Чтобы получить решение $q(\mu_{*0}^1, \mu_{*1}^1, s)$ уравнения (4.1), удовлетворяющее условию (4.3) используется метод отражений [12-14], согласно которому решение уравнения (4.2) представляется в виде

$$q(\mu_{*0}^1, \mu_{*1}^1, s) = W(\mu_{*0}^1, \mu_{*1}^1, s) - KW(\mu_{*1}^1, \mu_{*0}^1, s), \quad (4.7)$$

где $\mu_{*1}^1 = -\mu_{*0}^1$, коэффициент K выбирается из условия чтобы ненормированная плотность $q(\mu_{*0}^1, \mu_{*p}^1, s)$ удовлетворяла в среднем условию (4.4), которое запишем в виде

$$\int_0^s \left[W(\mu_{*0}^1, \mu_{*p}^1, s) - KW(\mu_{*1}^1, \mu_{*p}^1, s) \right] ds = 0. \quad (4.8)$$

$$\frac{N}{2} \left(1 - \frac{c_0}{c_p} \right)^\gamma$$

Из (4.6) с учетом (4.4) получаем

$$K = \frac{\Psi_0}{\Psi_1}, \quad \Psi_i = \int_0^s \frac{1}{\sigma(s')^\gamma} \exp \left\{ -\frac{(\mu_{*p}^1 - \mu_{*i}^1 e^{-as})^2}{2\sigma^2(s')} \right\} ds' \quad i=0,1. \quad (4.9)$$

Подставляя (4.9) в (4.7), а затем в (4.1) с учетом (4.4), получим

$$P(\mu_{*0}^1, s) \approx \Phi \left(\frac{\mu_{*p}^1 - \mu_{*0}^1 e^{-\left(\frac{s-N}{2}\right)}}{\sigma(s)} \right) - K \Phi \left(\frac{\mu_{*p}^1 - \mu_{*1}^1 e^{-\left(\frac{s-N}{2}\right)}}{\sigma(s)} \right). \quad (4.10)$$

Значение μ_{*1}^1 выбирается как зеркальное отражение μ_{*0}^1 : $(\mu_{*1}^1 - 2\mu_{*p}^1 - \mu_{*0}^1)$. Функция Φ представляет собой интеграл вероятности.

$$\Phi(z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^z e^{-\frac{u^2}{2}} du, \quad (-\infty < z < \infty)$$

К старым переменным в (4.10) переход осуществляется по формулам

$$s = \frac{N}{2} R(c), \quad \mu_{*1}^1 = \mu_{*0}^1 R(c), \quad R(c) = \left(\frac{c_p - c_0}{c_p - c} \right)^\gamma. \quad (4.11)$$

$$\text{При } c \rightarrow 0, \quad R(c) \rightarrow 1 - \frac{c_0}{c_p}, \quad s \rightarrow \frac{N}{2} \left(1 - \frac{c_0}{c_p} \right), \quad \mu_{*1}^1 \rightarrow 1 - \frac{c_0}{c_p}.$$

$$\text{При } c \rightarrow 0, \quad R(c) \rightarrow 1 - \frac{c_0}{c_p}, \quad s \rightarrow \frac{N}{2} \left(1 - \frac{c_0}{c_p} \right), \quad \mu_{*0}^1 = \mu_{*0}^1.$$

$$\text{При } c \rightarrow c_p, \quad R(c) \rightarrow -\infty, \quad s \rightarrow \infty \quad \mu_{*p}^1 - (c_p - c_0)^\gamma.$$

Рассмотрим процесс синтеза микрокомпозитного материала при росте концентрации изолятора c . Например, вначале при $c = 0$ имеем однородный материал с $\mu_* = \mu_1 = 1$. Заменяя случайным образом гранулы теплопроводящего материала с μ_1 на $\mu_2 = 0$, получим случайную величину (индикаторную функцию)

$$\mu(\vec{r}) = \begin{cases} 0 & \text{с вероятностью } C \\ 1 & \text{с вероятностью } 1-C \end{cases}$$

Информационная энтропия S величины $\mu(\vec{r})$ равна [15]

$$S = c \ln c + (1-c) \ln(1-c). \quad (4.12)$$

Максимум функции $S(c)$ имеет место при $c = 1/2$, что соответствует случаю, когда неопределенность того, какой компонент считать матрицей, а какой наполнителем является наибольшей.

На рисунке 3 изображена зависимость $f(c, \mu_*)$ от c и μ_* , которая показывает что в точке $(0,5, 0,25)$ в плоскости $0c\mu_*$, где происходит смена линейной зависимости μ_* от c на нелинейную плотность вероятностей имеет минимум, т.е. дисперсия $\mu_*(c)$ максимальна. При дальнейшем росте концентрации происходит рост вероятности наступления перколяции (изоляции).

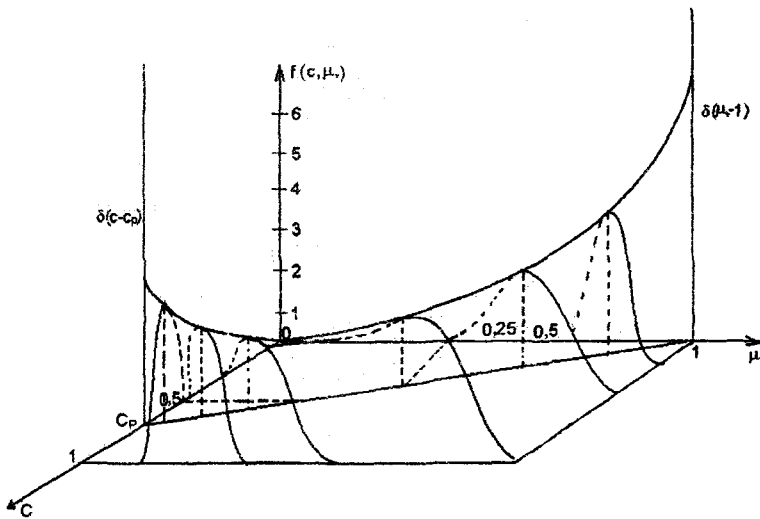


Рисунок 3

На рисунке 4 изображены зависимости вероятности перколяции в соответствии с моделью перколяции по связям [1,2] (кривая 1) и по марковской модели (кривая 2).

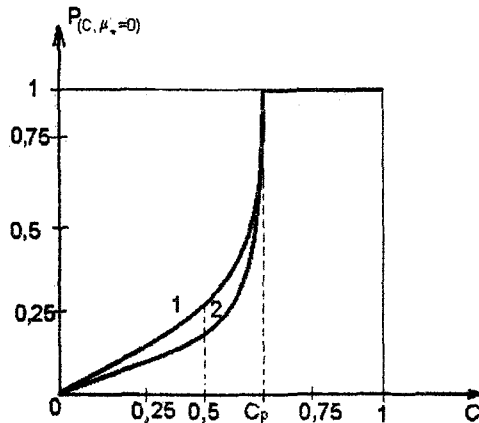


Рисунок 4

Выводы.

1. Вероятностное описание синтеза микрокомпозитного материала рассматриваемое как случайное изменение функции $\mu_*(c)$ в плоскости $0c\mu_*$ описывает процессы агрегатирования и диффузии компонентов, идущих на микроуровне.

2. Перколяция, рассматриваемая как на поступление случайного события может быть оценена как средняя концентрация при которой происходит достижение функцией $\mu_*(c)$ границы $\mu_* = 0$.

3. Плотность вероятности перколяции представляет собой решение уравнений ФПК и дает возможность определить вероятность достижения границы $\mu_* = 0$ функцией $\mu_*(c)$, как предельных случаях, так и для модели, позволяющей применить метод отражений.

4. Формирование микрокомпозита с локально изотропными свойствами может быть осуществлено по вероятностному критерию таким образом, что плотность вероятности перколяции достигает максимума при $C_p = 1$. Вычисление вероятности перколяции на основе модели эффективной сплошной среды и модели перколяции по связям дают практически совпадающие результаты.

ЛИТЕРАТУРА

1. Элиот, Р. Теория и свойства случайно неупорядоченных кристаллов и связанных с ними физических систем / Р. Элиот, Дж. Крамхоанс, П. Лис // Теория и свойства неупорядоченных материалов. – М., 1977. – С. 11–248.
2. Киркпатрик, С. Перколяция и проводимость / С. Киркпатрик // Теория и свойства неупорядоченных материалов. – М., 1977. – С. 249–294.
3. Briesmsister, J.F. MCNP – a general Monte-Carlo Code for neutron and p. hodon Transport. – Los Alamos. – LA – 7396 M.
4. Шермергор, Т.Д. Теория упругости микронеоднородных сред / Т.Д. Шермергор. – Минск: Наука, 1971. – 479 с.
5. Левин, В.М. Метод эффективного поля в механике композитных материалов / В.М. Левин, С.К. Канаун. – Петрозаводск, изд-во ПГУ, 1993. – 600 с.
6. Паньков, А.А. Стохастическая механика пьезокомпозитов / А.А. Паньков. – Пермь, изд-во ПГТУ, 2009. – 479 с.
7. Стохастическая и регулярная динамика неоднородных сред / А.В. Чигарев. – Минск, Технопринт, 2000. – 425 с.
8. Douglas E. Burkes, Daniel M. Wachs, James E Werner, Steven D. Hove An Overrien of Current and Past W – UO₂ Cermet Fuel Fabrication Technology Space Proc. Nuclear Conference 2007, Boston, Massachusetts, Jane 24-28, 2007. – P. 207–216.
9. Чернов, А.С. Сферическое ядерное топливо для высокотемпературных применений. Материал Международной конференции по технологиям высокотемпературных реакторов (РЕК 2008), Вашингтон США, 27 сентября-01 октября, 2008 / А.С. Чернов, Е.К. Дьяконов, С.Д. Курбаков.
10. Дьяконов, Е.К. Карбидные соединения урана-топливо для перспективных компактных ядерных реакторов. Proc. Int. conf. «Space Nuclear Conference» / Е.К. Дьяконов, В.Д. Бланк. – Boston, USA, 2007.
11. Дульнев, Т.Н. Теплопроводность смесей и композиционных материалов / Т.Н. Дульнев, Ю.П. Заричняк. – Л.: Энергия, 1974. – 264 с.
12. Ван Кампен, Н.Т. Стохастические процессы в физике и химии / Н.Т. Ван Кампен. – М.: Высшая школа, 1990. – 376 с.
13. Тихонов, В.И. Марковские процессы / В.И. Тихонов, М.А. Миронов. – М.: Советское радио, 1977.
14. Казаков, В.А. Введение в теорию марковских процессов и некоторые радиотехнические задачи В.А. Казаков. – М.: Советское радио, 1973. – 231 с.
15. Боровков, А.А. Курс теории вероятностей / А.А. Боровков. – М.: Наука, 1972.