

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ СТАЦІОНАРНИХ ПРОЦЕСІВ КОНВЕКТИВНОЇ ДИФУЗІЇ В РЕГУЛЯРНИХ СТРУКТУРАХ ЗІ ЗМІШАНИМИ КРАЙОВИМИ УМОВАМИ

Досліджено стаціонарні процеси масоперенесення домішкової речовини у двофазних регулярних структурах з урахуванням періодичного характеру конвективних явищ за змішаних крайових умов. Для побудови точних аналітичних розв'язків контактних-крайових задач такого типу адаптовано метод, який базується на використанні різних інтегральних перетворень у різних контактуючих областях. З використанням неідеальних контактних умов встановлено зв'язок між цими інтегральними перетвореннями. Отримано аналітичний розв'язок задачі дифузії для двофазного шару регулярної структури з урахуванням в одній із фаз конвективного перенесення за сталої концентрації на поверхні та при підтримці постійного дифузійного потоку на границі іншої фази. Досліджено потоки маси через внутрішню міжфазну поверхню контакту і виконано числовий аналіз концентрації мігруючих частинок у структурних елементах тіла.

Інтерпретація експериментальних досліджень процесів масоперенесення в полікристалічних тілах і капілярно-пористих середовищах базується на розв'язках відповідних крайових задач математичної фізики, що враховують вплив внутрішньої структури [9, 15, 16, 18]. Зокрема, певний інтерес становлять точні розв'язки конкретних контактних-крайових задач процесів масоперенесення для кусково-однорідних систем, наприклад, просторово-регулярних. Таке середовище може складатися з областей з різними коефіцієнтами дифузії, наявністю або відсутністю конвективного перенесення частинок і між якими відбувається масообмін речовиною. Оскільки побудова точних розв'язків таких задач навіть для найпростіших геометричних областей пов'язана зі значним труднощами, то, як правило, застосовують наближені аналітичні [2, 6, 13, 14] або числові [4, 8, 10, 17] методи розв'язування.

У роботі [12] запропоновано, а в праці [11] розвинуто метод побудови точних розв'язків контактних-крайових задач дифузії в тілах регулярної структури на основі інтегральних перетворень за просторовими змінними окремо в контактуючих областях. Знайдено аналітичний розв'язок задачі дифузії для горизонтального шару, який є періодичною структурою, що утворена з двох фізично різних вертикальних підшарів. На цій основі досліджено граничні переходи, які відповідають наближенню поодинокого включення [13] і континуальної гетеродифузії [7].

У пропонованій роботі цей метод узагальнено на випадок, коли в підшарах одного з типів періодичної структури враховується конвективне перенесення і на зовнішніх границях підтримуються сталі значення концентрації, а на одній з границь областей іншого типу – постійний потік маси. Для усталеного режиму отримано аналітичні вирази для концентрації домішкової речовини та потоків маси через внутрішню поверхню контакту.

1. Об'єкт дослідження та постановка задачі. Розглянемо шар товщини x_0 , який складається з періодично розташованих областей двох типів. Поверхні, що обмежують ці області, перпендикулярні до поверхонь шару (рис. 1): вісь Ox перпендикулярна до поверхонь тіла, вісь Oy – до поверхонь складових областей). При цьому області з коефіцієнтом дифузії D_1 мають ширину $2L$, а з коефіцієнтом D_2 – ширину 2ℓ . Крім цього, в областях з коефіцієнтом дифузії D_1 масоперенесення відбувається не тільки за дифузійним, а й за конвективним механізмом з коефіцієнтом кон-

вективного перенесення v , який приймаємо відомим і сталим. Така структура має сім'ю площин симетрії ($y = \pm n(L + \ell)$, $n = 0, 1, 2, \dots$), які ділять навпіл сусідні контактуючі області. Тому можемо виділити елемент тіла, на вертикальних границях якого потоки в напрямку осі Oy дорівнюють нулеві (рис. 1).

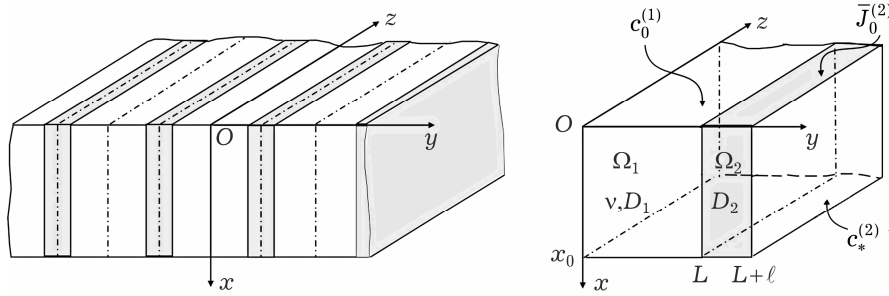


Рис. 1

У стаціонарному випадку концентрація $c_1^\infty(x, y)$ домішкової речовини в області $\Omega_1 = (0, x_0) \times (0, L)$ визначається з рівняння

$$D_1 \left[\frac{\partial^2 c_1^\infty}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c_1^\infty}{\partial y^2} \right] - v \frac{\partial c_1^\infty}{\partial x} = 0, \quad x, y \in \Omega_1. \quad (1)$$

В області $\Omega_2 = (0, x_0) \times (L, L + \ell)$ концентрація $c_2^\infty(x, y)$ частинок домішки задовольняє рівняння дифузії

$$D_2 \left[\frac{\partial^2 c_2^\infty}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c_2^\infty}{\partial y^2} \right] = 0, \quad x, y \in \Omega_2. \quad (2)$$

Приймаємо, що на поверхні шару $x = 0$ в області Ω_1 підтримується постійне значення концентрації $c_0^{(1)}$, а в області Ω_2 – постійний потік домішкової речовини $\bar{J}_0^{(2)}$:

$$c_1^\infty(x, y) \Big|_{x=0} = c_0^{(1)} \equiv \text{const}, \quad \frac{\partial c_2^\infty}{\partial x} \Big|_{x=0} = \frac{\bar{J}_0^{(2)}}{D_2} = J_0^{(2)} \equiv \text{const}. \quad (3)$$

На нижній поверхні $x = x_0$ в області Ω_1 концентрація дорівнює нулеві, а в області Ω_2 – приймає стале значення:

$$c_1^\infty(x, y) \Big|_{x=x_0} = 0, \quad c_2^\infty(x, y) \Big|_{x=x_0} = c_*^{(2)} \equiv \text{const}. \quad (4)$$

На бічних поверхнях $y = 0$, $y = L + \ell$ виділеного елемента горизонтальні складові потоку дорівнюють нулеві:

$$\frac{\partial c_1^\infty(x, y)}{\partial y} \Big|_{y=0} = 0, \quad \frac{\partial c_2^\infty(x, y)}{\partial y} \Big|_{y=L+\ell} = 0. \quad (5)$$

На границі $y = L$ контакту задаємо умови рівності хімічних потенціалів і горизонтальних складових масових потоків домішкової речовини [6]:

$$\mu_1^\infty(x, y) \Big|_{y=L} = \mu_2^\infty(x, y) \Big|_{y=L}, \quad \Lambda_1 \frac{\partial \mu_1^\infty(x, y)}{\partial y} \Big|_{y=L} = \Lambda_2 \frac{\partial \mu_2^\infty(x, y)}{\partial y} \Big|_{y=L}, \quad (6)$$

де $\mu_i(x, y)$ – хімічний потенціал в області Ω_i , Λ_i – кінетичні коефіцієнти $i = 1, 2$.

У загальному випадку хімічний потенціал нелінійно (логарифмічно) залежить від концентрації [1]. Тут приймаємо лінійну залежність хімічного

потенціалу від концентрації у вигляді

$$\mu_i^\infty(x, y) = \mu^0 - A(1 - \gamma_i c_i^\infty(x, y)),$$

де μ^0 – хімічний потенціал для чистої речовини у стані, який заданий значеннями абсолютної температури T і тиску P , $A = RT/M$ – коефіцієнт, у якому R – універсальна газова стала і M – атомна вага; γ_i – коефіцієнти активності.

Тоді зі співвідношень (6) отримаємо умови неідеального контакту для концентрації

$$\begin{aligned} \eta_1 c_1^\infty(x, y) \Big|_{y=L} &= \eta_2 c_2^\infty(x, y) \Big|_{y=L}, \\ D_1 \frac{\partial c_1^\infty(x, y)}{\partial y} \Big|_{y=L} &= D_2 \frac{\partial c_2^\infty(x, y)}{\partial y} \Big|_{y=L}, \end{aligned} \quad (7)$$

де η_1 і η_2 ($\eta_1 \neq \eta_2$, $\eta_i = A\gamma_i$) – коефіцієнти концентраційної залежності хімічного потенціалу частинок в областях Ω_1 і Ω_2 відповідно.

3. Метод розв'язування сформульованої задачі. Розв'язок контактної крайової задачі масоперенесення (1)–(5), (7) будемо шукати за допомогою інтегральних перетворень в контактних областях.

Виконаємо інтегральні перетворення за змінною y окремо в областях Ω_1 і Ω_2 . Для того щоб застосувати перетворення Фур'є необхідно знати величину відповідних функцій або їхніх похідних на границях області перетворення [5]. При $y = 0$ і $y = L + \ell$ граничні умови (5) визначають значення функцій $\partial c_1^\infty / \partial y$ на границі області Ω_1 і $\partial c_2^\infty / \partial y$ на границі Ω_2 . На інших границях областей Ω_1 і Ω_2 (поверхні контакту) величини $\partial c_i^\infty / \partial y$ є невідомими. Доозначимо їх, враховуючи другу з контактних умов (7), яка означає, що на границі контакту $y = L$ масові потоки рівні між собою і, в свою чергу, дорівнюють деякій функції $g^\infty(x)$, тобто

$$D_1 \frac{\partial c_1^\infty}{\partial y} \Big|_{y=L} = D_2 \frac{\partial c_2^\infty}{\partial y} \Big|_{y=L} = g^\infty(x).$$

Звідси маємо

$$\frac{\partial c_1^\infty(x, y)}{\partial y} \Big|_{y=L} = \frac{1}{D_1} g^\infty(x), \quad \frac{\partial c_2^\infty(x, y)}{\partial y} \Big|_{y=L} = \frac{1}{D_2} g^\infty(x). \quad (8)$$

Тоді можемо виконати скінченні інтегральні cos-перетворення в областях Ω_i .

За змінною y в області Ω_1 застосуємо наступне перетворення [5]:

$$\tilde{c}_1^\infty(x, k) = \int_0^L c_1^\infty(x, y) \cos(y_k y) dy, \quad (9')$$

$$c_1^\infty(x, y) = \frac{1}{L} \tilde{c}_1^\infty(x, 0) + \frac{2}{L} \sum_{k=1}^{\infty} \tilde{c}_1^\infty(x, k) \cos(y_k y), \quad (9'')$$

де $y_k = k\pi/L$.

Спочатку знайдемо інтегральне перетворення від $\frac{\partial^2 c_1^\infty}{\partial y^2}$. З урахуванням умов (5), (8) на границі області Ω_1 маємо

$$\begin{aligned}
\int_0^L \frac{\partial^2 c_1^\infty(x, y)}{\partial y^2} \cos(y_k y) dy &= \\
&= \frac{\partial c_1^\infty(x, y)}{\partial y} \cos(y_k y) \Big|_0^L + y_k c_1^\infty(x, y) \sin(y_k y) \Big|_0^L - \\
&- y_k^2 \int_0^L c_1^\infty(x, y) \cos(y_k y) dy = \frac{(-1)^k}{D_1} g^\infty(x) - y_k^2 \tilde{c}_1^\infty(x, k).
\end{aligned}$$

Тоді в зображеннях крайова задача (1), (3)–(5) і (8) в області Ω_1 набуде вигляду

$$D_1 \frac{d^2 \tilde{c}_1^\infty(x)}{dx^2} - v \frac{d \tilde{c}_1^\infty(x)}{dx} - D_1 y_k^2 \tilde{c}_1^\infty(x) + (-1)^k g^\infty(x) = 0, \quad (10)$$

$$\tilde{c}_1^\infty(x) \Big|_{x=0} = a_k c_0^{(1)}, \quad \tilde{c}_1^\infty(x) \Big|_{x=x_0} = 0, \quad (11)$$

де $a_k = \begin{cases} L, & k = 0, \\ 0, & k = 1, 2, \dots \end{cases}$

До крайової задачі (10), (11) застосуємо таке інтегральне перетворення за змінною x [3]:

$$\bar{c}_1^\infty(n, k) = \int_0^{x_0} \tilde{c}_1^\infty(x, k) e^{-v_D x} \sin(x_n x) dx, \quad (12')$$

$$\tilde{c}_1^\infty(x, k) = e^{v_D x} \sum_{n=1}^{\infty} \bar{c}_1^\infty(n, k) \sin(x_n x), \quad (12'')$$

де $v_D = v/2D_1$, $x_n = n\pi/x_0$.

Для функції $g^\infty(x)$ відповідно маємо

$$\tilde{g}_n^\infty = \int_0^{x_0} g^\infty(x) e^{-v_D x} \sin(x_n x) dx, \quad (13')$$

$$g^\infty(x) = e^{v_D x} \sum_{n=1}^{\infty} \tilde{g}_n^\infty \sin(x_n x). \quad (13'')$$

Після застосування перетворення (12') з урахуванням (13') задача (10), (11) у зображеннях зводиться до алгебраїчного рівняння

$$-D_1(v_D^2 + x_n^2 + y_k^2) \bar{c}_1^\infty(n, k) + D_1 x_n a_k c_0^{(1)} + (-1)^k \tilde{g}_n^\infty = 0,$$

звідки визначимо $\bar{c}_1^\infty(n, k)$:

$$\bar{c}_1^\infty(n, k) = \frac{1}{v_D^2 + x_n^2 + y_k^2} [D_1 a_k c_0^{(1)} x_n + (-1)^k \tilde{g}_n^\infty]. \quad (14)$$

Зазначимо, що у виразі (14) залишається невідомим \tilde{g}_n^∞ .

Розглянемо крайову задачу (2)–(5), (8) в області Ω_2 . За змінною y в області Ω_2 застосуємо \cos -перетворення Фур'є із зсувом [12]

$$\tilde{c}_2^\infty(x, j) = \int_L^{L+\ell} \tilde{c}_2^\infty(x, y) \cos(y_j(y-L)) dy, \quad (15')$$

$$\tilde{c}_2^\infty(x, y) = \frac{1}{\ell} \tilde{c}_2^\infty(x, 0) + \frac{2}{\ell} \sum_{j=1}^{\infty} \tilde{c}_2^\infty(x, j) \cos(y_j(y-L)), \quad (15'')$$

де $y_j = j\pi/\ell$.

З урахуванням умов (5), (8) на бічних границях області Ω_2 маємо

$$\begin{aligned} \int_L^{L+\ell} \frac{\partial^2 c_2(x, y)}{\partial y^2} \cos(y_j(y-L)) dy &= \frac{\partial c_2(x, y)}{\partial y} \cos(y_j(y-L)) \Big|_L^{L+\ell} + \\ &+ y_j c_2(x, y) \sin(y_j(y-L)) \Big|_L^{L+\ell} - \\ &- y_j \int_L^{L+\ell} c_2(x, y) \cos(y_j(y-L)) dy = -\frac{g^\infty(x)}{D_2} - y_j^2 \tilde{c}_2(x, j). \end{aligned}$$

Тоді рівняння (2) у зображеннях зведеться до такої форми:

$$D_2 \frac{d^2 \tilde{c}_2^\infty(x)}{dx^2} - D_2 y_j^2 \tilde{c}_2^\infty(x) - g^\infty(x) = 0, \quad x \in (0, x_0), \quad (16)$$

з крайовими умовами

$$\frac{\partial \tilde{c}_2^\infty(x)}{\partial x} \Big|_{x=0} = a_j J_0^{(2)}, \quad \tilde{c}_2^\infty(x) \Big|_{x=x_0} = a_j c_*^{(2)}, \quad (17)$$

$$\text{де } a_j = \begin{cases} \ell, & j = 0 \\ 0, & j = 1, 2, \dots \end{cases}$$

За змінною x застосуємо таке скінченне інтегральне перетворення [3]:

$$\bar{c}_2^\infty(m, j) = \int_0^{x_0} \tilde{c}_2^\infty(x, j) \cos(x_m x) dx, \quad (18')$$

$$\tilde{c}_2^\infty(x, j) = \frac{2}{x_0} \sum_{m=1}^{\infty} \bar{c}_2^\infty(m, j) \cos(x_m x), \quad (18'')$$

де $x_m = (2m-1)\pi/2x_0$.

Зазначимо, що перетворення (18) для функції $g^\infty(x)$ мають вигляд

$$\tilde{g}_m^\infty = \int_0^{x_0} g^\infty(x) \cos(x_m x) dx, \quad (19')$$

$$g^\infty(x) = \frac{2}{x_0} \sum_{m=1}^{\infty} \tilde{g}_m^\infty \cos(x_m x). \quad (19'')$$

Тоді в зображеннях отримаємо алгебраїчне рівняння вигляду

$$D_2(x_m^2 + y_j^2) \bar{c}_2^\infty + D_2 a_j [J_0^{(2)} + (-1)^m x_m c_*^{(2)}] + \bar{g}_m^\infty = 0,$$

звідки знаходимо

$$\bar{c}_2^\infty(m, j) = -\frac{\bar{g}_m^\infty + D_2 a_j [J_0^{(2)} + (-1)^m x_m c_*^{(2)}]}{D_2(x_m^2 + y_j^2)}. \quad (20)$$

Зауважимо, що у виразі (20) залишається невідомою функція \tilde{g}_m^∞ .

Виконаємо обернені перетворення за змінною x . Враховуючи вирази для a_k і a_j , запишемо їх окремо для нульових і ненульових членів рядів за k і j :

$$\bar{c}_1^\infty(x, k) \Big|_{k=0} = \frac{2}{x_0} e^{v_D x} \sum_{n=1}^{\infty} \sin(x_n x) \left[\frac{D_1 x_n L c_0^{(1)} + \tilde{g}_n^\infty}{v_D^2 + x_n^2} \right],$$

$$\begin{aligned}\bar{c}_1^\infty(x, k)|_{k \neq 0} &= \frac{2}{x_0} e^{v_D x} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{v_D^2 + x_n^2 + y_k^2} \tilde{g}_n^\infty \sin(x_n x), \\ \bar{c}_2^\infty(x, j)|_{j=0} &= -\frac{2}{x_0} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\cos(x_m x)}{x_m^2} \left[\ell [J_0^{(2)} + (-1)^m x_m c_*^{(2)}] + \frac{\tilde{g}_m^\infty}{D_2} \right], \\ \bar{c}_1^\infty(x, j)|_{j \neq 0} &= -\frac{1}{D_2} \frac{2}{x_0} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{x_m^2 + y_j^2} \tilde{g}_m^\infty \cos(x_m x).\end{aligned}$$

Після застосування відповідних обернених перетворень (9''), (15'') за змінною y одержимо

$$c_1^\infty(x, y) = \frac{2}{x_0} e^{v_D x} \sum_{n=1}^{\infty} \sin(x_n x) \left[\frac{c_0^{(1)} x_n}{\psi_n^2} + \frac{\tilde{g}_n^\infty}{D_1} \tilde{R}_n(y) \right], \quad (21)$$

$$\begin{aligned}c_2^\infty(x, y) &= \frac{2}{x_0} \sum_{m=1}^{\infty} \cos(x_m x) \left[\frac{1}{x_m^2} [(-1)^{m+1} x_m c_*^{(2)} - J_0^{(2)}] - \right. \\ &\quad \left. - \frac{\bar{g}_m^\infty}{D_2 \ell x_m} \left(\frac{2}{x_m} + \ell \frac{\cosh[x_m(L + \ell - y)]}{\sinh(x_m \ell)} \right) \right], \quad (22)\end{aligned}$$

де

$$\tilde{R}_n(y) = \frac{\cosh(\psi_n y)}{\sinh(\psi_n L)} \frac{1}{\psi_n} + \left(1 - \frac{1}{L}\right) \frac{1}{\psi_n^2}, \quad \psi_n = \sqrt{v_D^2 + x_n^2}.$$

У виразах (21), (22) залишаються невідомими функції \tilde{g}_n^∞ і \tilde{g}_m^∞ .

4. Визначення \tilde{g}_n^∞ і \tilde{g}_m^∞ . Значення величин \tilde{g}_n^∞ і \tilde{g}_m^∞ шукатимемо з першої контактної умови (7) стрибка функції концентрації на границі поділу областей Ω_1 та Ω_2 . Підставивши вирази (21), (22) в умову (7), одержуємо таке рівняння:

$$\begin{aligned}\eta_1 e^{v_D x} \sum_{n=1}^{\infty} \sin(x_n x) \left\{ \frac{c_0^{(1)} x_n}{\psi_n^2} + \frac{\bar{g}_n^\infty}{D_1} \left(\frac{\coth(\psi_n L)}{\psi_n} + \left(1 - \frac{1}{L}\right) \frac{1}{\psi_n^2} \right) \right\} = \\ = -\frac{\eta_2}{\ell} \sum_{m=1}^{\infty} \cos(x_m x) \left\{ \frac{\ell}{x_m^2} [J_0^{(2)} + (-1)^m x_m c_*^{(2)}] + \right. \\ \left. + \frac{2\bar{g}_m^\infty}{D_2 x_m^2} + \frac{\bar{g}_m^\infty \ell}{D_2 x_m} \coth(x_m \ell) \right\}, \quad (23)\end{aligned}$$

$$\text{де } R_n = \coth(\psi_n L) \frac{1}{\psi_n} + \left(1 - \frac{1}{L}\right) \frac{1}{\psi_n^2}.$$

Для знаходження зв'язку між функціями \tilde{g}_n^∞ і \tilde{g}_m^∞ розглянемо співвідношення, обернене до (13'), тобто (13''):

$$g^\infty(x) = \frac{2}{x_0} e^{v_D x} \sum_{n=1}^{\infty} \tilde{g}_n^\infty \sin(x_n x).$$

Помноживши обидві частини цієї рівності на $\sin(x_m x)$ і проінтегрувавши за x від 0 до x_0 , тобто застосувавши скінченне інтегральне \sin -перетворення Фур'є (18') за змінною x , маємо

$$\int_0^{x_0} g^\infty(x) \cos(x_m x) dx = \int_0^{x_0} \frac{2}{x_0} e^{v_D x} \cos(x_m x) \sum_{n=1}^{\infty} \tilde{g}_n^\infty \sin(x_n x) dx.$$

Ліва частина цієї рівності є \tilde{g}_m^∞ . Тоді

$$\tilde{g}_m^\infty = \frac{2}{x_0} \sum_{n=1}^{\infty} \tilde{g}_n^\infty \int_0^{x_0} e^{v_D x} \cos(x_m x) \sin(x_n x) dx.$$

Після інтегрування отримаємо

$$\tilde{g}_m^\infty = \frac{1}{x_0} \sum_{n=1}^{\infty} A_{n,m} \tilde{g}_n^\infty, \quad (24)$$

де коефіцієнти $A_{n,m}$ визначаються таким чином:

$$A_{n,m} = \frac{x_n - x_m + (-1)^{n-m} e^{v_D x_0}}{v_D^2 + (x_n - x_m)^2} + \frac{x_n + x_m - (-1)^{n+m} e^{v_D x_0}}{v_D^2 + (x_n + x_m)^2}. \quad (25)$$

З іншого боку, якщо розглянемо рівність

$$g^\infty(x) = \frac{2}{x_0} \sum_{m=1}^{\infty} \tilde{g}_m^\infty \cos(x_m x)$$

і застосуємо до неї скінченне інтегральне перетворення (12'), то отримаємо

$$\int_0^{x_0} e^{-v_D x} g^\infty(x) \sin(x_n x) dx = \frac{2}{x_0} \int_0^{x_0} e^{-v_D x} \sin(x_n x) \sum_{m=1}^{\infty} \tilde{g}_m^\infty \cos(x_m x) dx.$$

Враховуючи, що за формулою (13') ліва частина цієї рівності є \tilde{g}_n^∞ , то одержимо

$$\tilde{g}_n^\infty = \frac{1}{x_0} \sum_{m=1}^{\infty} B_{n,m} \tilde{g}_m^\infty, \quad (26)$$

де

$$B_{n,m} = \frac{x_n - x_m - (-1)^{n-m} v_D e^{-v_D x_0}}{v_D^2 + (x_n - x_m)^2} + \frac{x_n + x_m + (-1)^{n+m} v_D e^{-v_D x_0}}{v_D^2 + (x_n + x_m)^2}. \quad (27)$$

Зауважимо, що з огляду на співвідношення (24) і (26) для знаходження розв'язку задачі необхідно визначити лише одну з функцій \tilde{g}_n^∞ і \tilde{g}_m^∞ .

Праву частину рівняння (23) подаємо у вигляді розвинення за $\sin(x_n x)$ з множником $e^{v_D x}$, тобто використаємо інтегральне перетворення (12''). Розв'язуючи отримане рівняння з урахуванням співвідношень (12'), (24), (26), знаходимо \tilde{g}_n^∞ :

$$\tilde{g}_n^\infty = \frac{1}{x_0} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{r_{n,m} - a_m B_{n,m}}{b_n - S_m}, \quad (28)$$

де

$$r_{n,m} = -\frac{2\ell}{x_m^2} [J_0^{(2)} + (-1)^m x_m c_*^{(2)}] B_{n,m}, \quad a_m = \frac{1}{x_0} \sum_{n=1}^{\infty} a_n A_{n,m},$$

$$a_n = \frac{\eta_1 c_0^{(1)}}{\eta_2 \psi_n^2}, \quad b_n = \frac{\eta_1}{\eta_2 D_1} \left[\frac{\coth(\psi_n L)}{\psi_n} + \left(1 - \frac{1}{L}\right) \frac{1}{\psi_n^2} \right],$$

$$S_m = -\frac{2}{D_2 x_m} \left[\frac{2}{x_m} + \ell \coth(x_m \ell) \right].$$

Остаточно функції концентрації домішкової речовини (21), (22) набудуть вигляду

$$c_1^\infty(x, y) = e^{v_D x} \left\{ c_0^{(1)} \frac{\sinh(v_D(x_0 - x))}{\sinh v_D x_0} + \frac{2}{x_0 D_1} \sum_{n=1}^{\infty} \sin(x_n x) \tilde{g}_n^\infty \tilde{R}_n(y) \right\}, \quad (29)$$

$$c_2^\infty(x, y) = c_*^{(2)} - J_0^{(2)} x_0 \left(1 - \frac{x}{x_0} \right) - \frac{2}{x_0} \sum_{m=1}^{\infty} \tilde{g}_m^\infty \left(\frac{\cosh[x_m(L + \ell - y)]}{\sinh(x_m \ell)} \right) \cos(x_m x). \quad (30)$$

Для знаходження \tilde{g}_m^∞ використовуємо співвідношення (24) разом з виразами (27) і (28).

5. Числовий аналіз потоку маси через внутрішню поверхню контакту. На рис. 2 – рис. 6 наведено характерні розподіли функції $g(\xi)$, яка описує потік маси через внутрішню поверхню контакту з протилежним знаком (в протилежному напрямку). Розрахунки $g(\xi)$ проводили за формулою (19б) з урахуванням співвідношень (24), (25), (28). При цьому введено безрозмірні змінні [7, 11] $\xi = (k/D_1)^{1/2} x$, $\zeta = (k/D_1)^{1/2} y$, де k – коефіцієнт, який має розмірність $[c^{-1}]$. Обчислення виконували з точністю $\varepsilon = 10^{-9}$. За базові прийнято такі значення параметрів задачі: $\xi_0 = (k/D_1)^{1/2} x_0 = 10$, $\Lambda = (k/D_1)^{1/2} L = 0.1$, $\lambda = (k/D_1)^{1/2} \ell = 0.9$, $d = D_2/D_1 = 0.01$, $\eta_1/\eta_2 = 10$, $J_0^{(2)}/c_0^{(1)} = 0.5$, $c_*^{(2)}/c_0^{(1)} = 0.1$.

На рис. 2 наведено розподіли функції $g(\xi)$ для малих (рис. 2а) і великих (рис. 2б) значень швидкості конвективного перенесення в області Ω_1 . Криві на рис. 2а відповідають значенням $\hat{v} = (k_2 D_1)^{-1/2} v = 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5$, а на рис. 2б – значенням $\hat{v} = 2, 2.1, 2.2, 2.3, 2.4$.

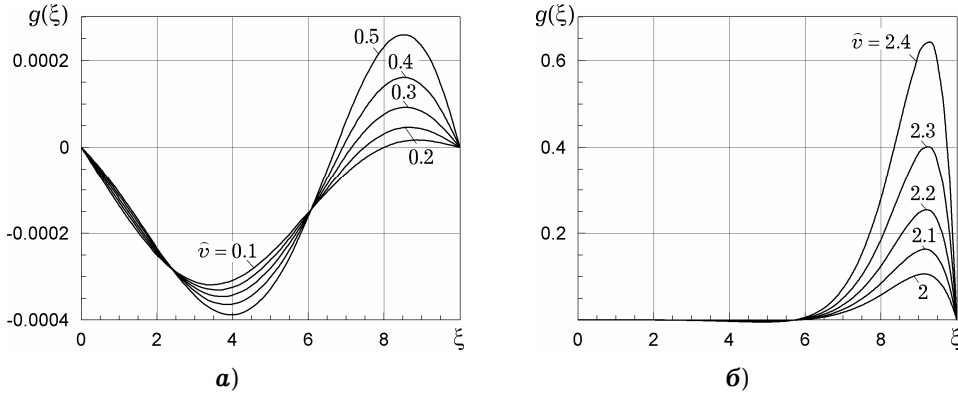


Рис. 2

Рис. 3 ілюструє залежність функції $g(\xi)$ від відношення η_1/η_2 коефіцієнтів концентраційної залежності хімічних потенціалів. Криві на рис. 3а відповідають значенням $\eta_1/\eta_2 = 0.1, 1, 1.5, 2, 2.3$ для швидкості конвективного перенесення $\hat{v} = 0.2$, а на рис. 3б – значенням $\eta_1/\eta_2 = 0.1, 0.7, 1, 1.5, 2$ для швидкості $\hat{v} = 2$.

На рис. 4 показано залежність функції $g(\xi)$ від відношення коефіцієнтів дифузії $d = D_2/D_1$ при значеннях $d = 0.01, 0.1, 0.4, 0.7, 1$ для різних швидкостей: для $\hat{v} = 0.2$ – на рис. 4а і для $\hat{v} = 2$ – на рис. 4б.

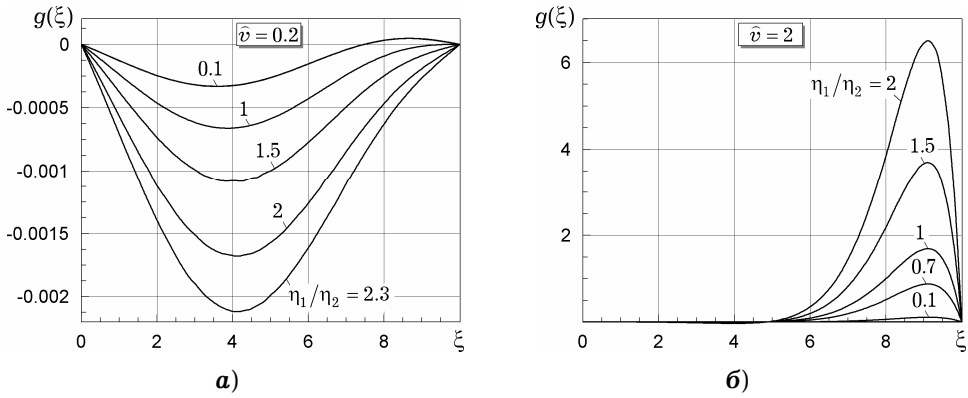


Рис. 3

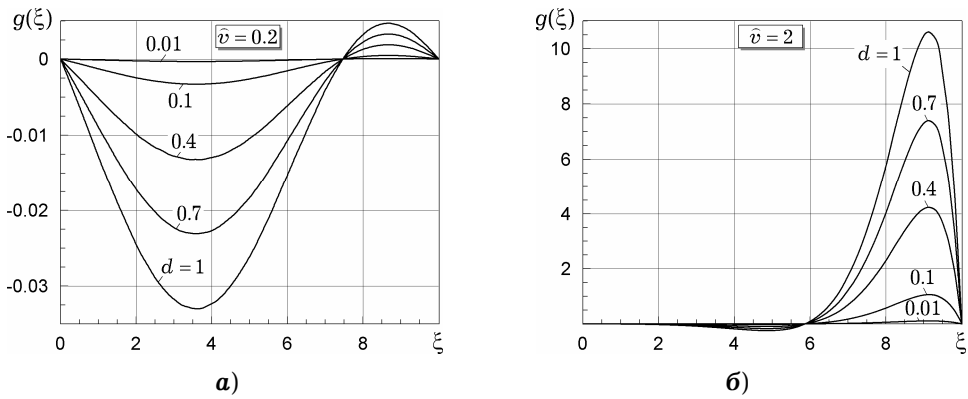


Рис. 4

Рис. 5 ілюструє залежність функції $g(\xi)$ від місця розташування поверхні контакту областей Ω_1 та Ω_2 для $\hat{v} = 0.2$ (рис. 5а) і $\hat{v} = 2$ (рис. 5б). Криві відповідають значенням $\Lambda = 0.1, 0.3, 0.5, 0.7, 0.9$ при $\Lambda + \lambda = 1$.

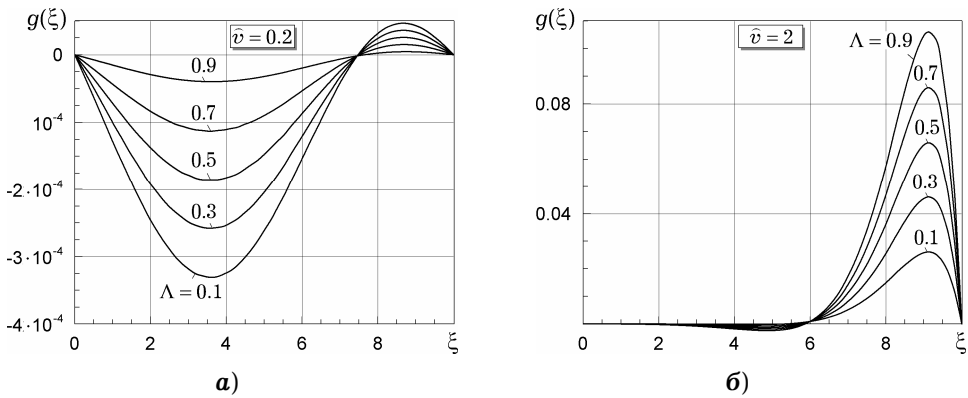


Рис. 5

Зазначимо, що наявність в одній з областей конвективного механізму перенесення домішкових частинок істотно впливає на поведінку і значення функції потоку через міжфазну границю. При цьому збільшення значення швидкості конвективного перенесення приводить до значного зменшення потоку маси через поверхню контакту на більшій частині цієї межі (для $\xi \in [0, 6]$ функція $g(\xi)$ приймає значення в межах похибки (рис. 2б), істотно зростаючи біля нижньої границі шару $\xi = \xi_0$). При малих значеннях параметра \hat{v} функція $g(\xi)$ на інтервалі $[0, \xi_0]$ змінює знак, тобто змінює на-

прям результиуюча потоку частинок через границю контакту. При цьому мінімальні і максимальні значення $g(\xi)$ є одного порядку (рис. 2а).

На рис. 6 показано вплив величини потоку маси $J_0^{(2)}$ на верхній границі області Ω_2 на поведінку функції $g(\xi)$ для $\hat{v} = 0.2$. Криві 1–5 на рис. 6а відповідають малим значенням: $J_0^{(2)} = 0.001, 0.003, 0.005, 0.0075, 0.01$, а на рис. 6б – великим значенням потоку маси: $J_0^{(2)} = 0.1, 0.2, 0.3, 0.5, 0.9$.

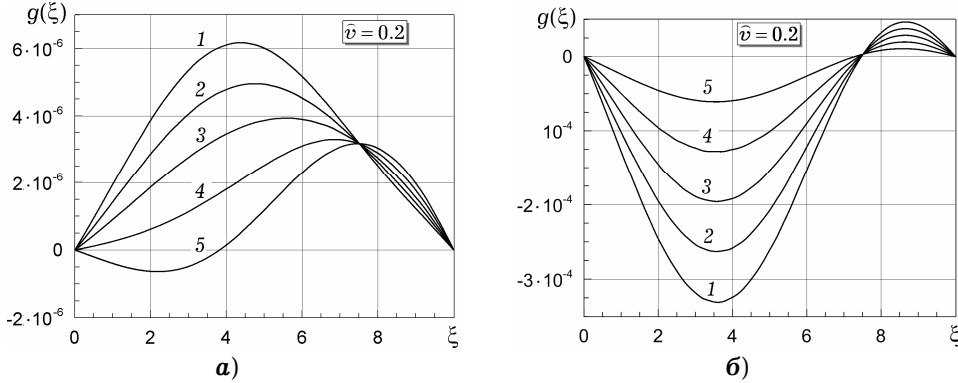


Рис. 6

Зауважимо також, що такі параметри задачі, як відношення коефіцієнтів концентраційної залежності хімічних потенціалів η_1/η_2 , які визначають стрибок концентрації на міжфазній границі, і відношення $d = D_2/D_1$ коефіцієнтів дифузії в контактуючих областях істотно впливають на значення функції $g(\xi)$, не змінюючи при цьому її поведінки (рис. 3, рис. 4). При цьому зі зростанням відношень як η_1/η_2 (рис. 3), так і D_2/D_1 (рис. 4) зростають абсолютні значення функції $g(\xi)$ на всьому проміжку.

При зсуві межі контакту від вертикальної границі виділеного елемента $\zeta = 0$ до поверхні $\zeta = L + l$ абсолютні значення функції $g(\xi)$ зростають на порядок для малих \hat{v} (рис. 5а) і в декілька разів – для великих \hat{v} (рис. 5б).

Величина потоку маси, яка підтримується на верхній границі області Ω_2 , значно впливає не тільки на кількісний, але й на якісний характер функції $g(\xi)$ (рис. 6). Так, наприклад, для малих швидкостей конвективного перенесення при малих $J_0^{(2)}$ функція $g(\xi)$ зростає від поверхні $\xi = 0$ і приймає тільки додатні значення (крива 1, рис. 6а). Зі збільшенням $J_0^{(2)}$ на порядок функція $g(\xi)$ спочатку спадає, досягаючи свого мінімуму при $\xi \approx 2.5$, а потім зростає, змінюючи свій знак в околі середини шару $\xi \approx \xi_0/2$ і досягаючи свого максимуму при $\xi \approx 7.5$ (крива 5, рис. 6а). Зі зростанням величини $J_0^{(2)}$ максимум функції $g(\xi)$ зменшується і зсувається до нижньої границі шару $\xi = \xi_0$ (рис. 6а).

6. Числовий аналіз розподілів концентрації домішки. На рис. 7 – рис. 9 показано характерні розподіли концентрації частинок у виділеному елементі шару двофазної періодичної структури. Рис. 7 ілюструє залежність функції концентрації $c_1^\infty(\xi, \zeta)/c_0^{(1)}$ за глибиною виділеного елемента всередині області Ω_1 від швидкості конвективного перенесення \hat{v} (рис. 7а) і від відношення коефіцієнтів концентраційної залежності хімічних потенціалів η_1/η_2 (рис. 7б). Криві на рис. 7а відповідають значенням $\hat{v} = 0.2, 0.4, 0.6, 0.9, 2, 2.4$. Криві на рис. 7б відповідають значенням $\eta_1/\eta_2 = 0.1, 0.2, 0.3$,

0.4, 0.5. Тут і надалі суцільними лініями позначено розподіли концентрації при швидкості $\hat{v} = 2$, штриховими лініями – при $\hat{v} = 0.2$.

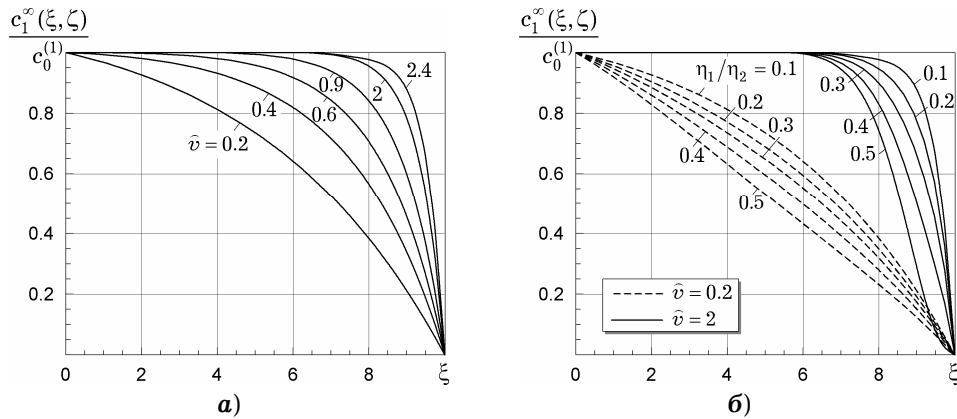


Рис. 7

Зазначимо, що зі зростанням швидкості конвективного перенесення збільшується абсолютне значення відносної концентрації $c_1^\infty(\xi, \zeta)/c_0^{(1)}$ в області Ω_1 на всьому проміжку. Причому, якщо для малих значень \hat{v} концентрація c_1^∞ спадає практично від поверхні $\xi = 0$, де діє стає джерело маси (крива 1, рис. 7а), то для великих значень швидкості конвективного перенесення концентрація c_1^∞ дорівнює значенню на поверхні $c_0^{(1)}$ у верхній частині тіла, і тільки потім відбувається істотне зменшення концентрації (крива 6, рис. 7а). Також зауважимо, що, чим меншим є відношення коефіцієнтів концентраційної залежності хімічних потенціалів, які визначають величину стрибка концентрації на границі контакту, тим більшою є концентрація домішки в області Ω_1 (рис. 7б).

На рис. 8 показано залежність функції $c_1^\infty(\xi, \zeta)/c_0^{(1)}$ від величини потоку $J_0^{(2)}$ на верхній поверхні шару області Ω_2 (рис. 8а) і від відношення коефіцієнтів дифузії d (рис. 8б). Криві на рис. 8а відповідають значенням $J_0^{(2)} = 0.5, 2.5, 5, 7, 10$, а на рис. 8б – значенням $d = 0.1, 0.3, 0.5, 0.7, 0.9$.

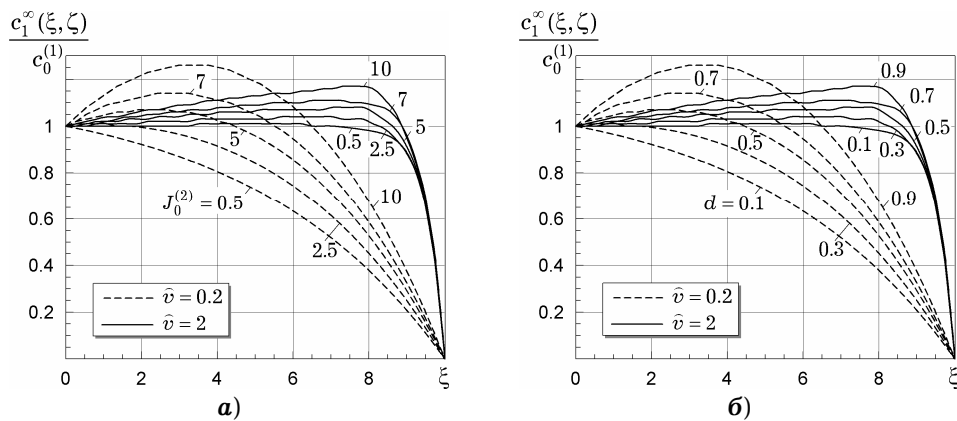


Рис. 8

На рис. 9 наведено розподіли функції $c_2^\infty(\xi, \zeta)/c_0^{(1)}$ залежно від величини потоку $J_0^{(2)}$ на верхній поверхні шару області Ω_2 всередині області Ω_2 (рис. 9а) і розподіл $c_i^\infty(\xi, \zeta)/c_0^{(1)}$ за шириною виділеного елемента при $J_0^{(2)} = 0.5, 1, 1.5, 2, 2.5$ (рис. 9б).

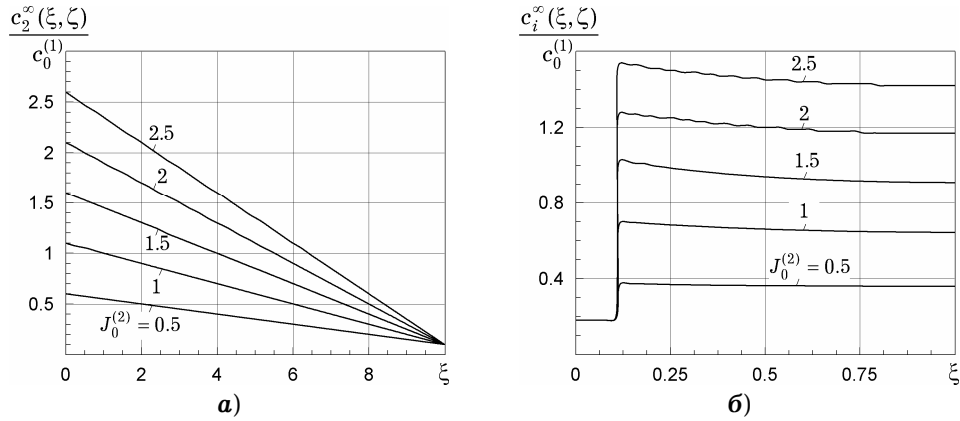


Рис. 9

Щодо впливу величини потоку, який підтримується на верхній границі області Ω_2 , на концентрацію в області Ω_1 , то, чим меншими є абсолютні значення потоку частинок $J_0^{(2)}$ на поверхні, тим менші значення спостерігаються для c_1^∞ (рис. 8а). Хоча, починаючи з деякого значення потоку $J_0^{(2)}$ ($\approx J_0^{(2)} < 0.4$), подальше зменшення величини потоку майже не впливає на значення c_1^∞ . Також зауважимо, що для великих значень потоку на верхній границі області Ω_2 спостерігається зростання концентрації в області Ω_1 , починаючи від поверхні $\xi = 0$ (див. штрихові криві при $J_0^{(2)} = 5, 7, 10$ на рис. 8а). Причому концентрація c_1^∞ може приймати значення, більші від $c_0^{(1)}$ (див. (3)) – заданого значення на поверхні в області Ω_1 (за рахунок переходу частинок з області Ω_2). Зазначимо, що зі збільшенням відношення d коефіцієнтів дифузії в області Ω_2 і Ω_1 функція c_1^∞ завжди зростає для малих швидкостей конвективного перенесення і на більшій частині відрізка $[0, \xi_0]$, тобто при $\xi \in [0, 7.5]$, а далі зі збільшенням d відбувається стрімке падіння функції концентрації до нуля (рис. 8б).

В області Ω_2 розподіл концентрації за товщиною тіла є близьким до лінійного (рис. 9). Вплив усіх фізичних і геометричних характеристик тіла на концентрацію c_2^∞ є незначним. Істотно впливають значення потоку домішкових частинок, заданого на поверхні області Ω_2 (рис. 9а), і значення концентрації домішки $c_*^{(2)}$ на нижній границі тіла.

Висновки. Для стаціонарного випадку отримано точний аналітичний розв'язок контактно-крайової задачі дифузії домішкової речовини у двофазному тілі регулярної структури з урахуванням конвективної складової в одній із фаз за змішаних крайових умов. Для цього доозначено потоки маси на поверхні контакту, що дало можливість застосувати інтегральні перетворення окремо в контактуючих областях з урахуванням різних видів операторних рівнянь і різних типів крайових умов. Уведена функція потоку домішкових частинок через міжфазну границю визначена з умови стрибка функції концентрації на границі контакту структурних елементів тіла. Проведений числовий аналіз потоку маси через границю контакту областей, з яких складене тіло, та визначено вплив параметрів задачі на поведінку функції потоку. Встановлено, що врахування конвективної складової міграції частинок істотно впливає на поведінку і значення функції потоку.

ку через міжфазну границю. Зі зростанням значення швидкості конвективного перенесення потік домішки через поверхню контакту різко зменшується. При цьому величина потоку, який підтримується на верхній границі області Ω_2 , також, як і \bar{v} , впливає і на кількісний, і на якісний характер функції $g(\xi)$. Визначено вплив параметрів матеріалу та структури на розподіли концентрацій у тілі. Зокрема, показано, що зміна потоку домішки, який підтримується на границі області тільки за дифузійним механізмом перенесення частинок, призводить до кількісних і якісних змін розподілів концентрації в області, де задіяні як дифузійний, так і конвективний механізми масоперенесення речовини.

У подальшому потребують дослідження потоки маси через довільну внутрішню поверхню тіла і нижню границю шару, де підтримуються задані значення концентрації частинок. Певний інтерес також становить вивчення граничних та усереднених випадків визначеної в роботі функції концентрації.

1. Гиббс Дж. В. Термодинамика. Статистическая механика. – Москва: Наука, 1982. – 584 с.
2. Кановский И. Я., Ткаченко И. В. Эффективный коэффициент диффузии в неоднородной среде // Укр. фіз. журн. – 1991. – **36**, № 3. – С. 432–434.
3. Мартыненко Н. А., Пустыльников Л. М. Конечные интегральные преобразования и их применение к исследованию систем с распределенными параметрами. – Москва: Наука, 1986. – 304 с.
4. Сергиенко И. В., Скопецкий В. В., Дейнека В. С. Математическое моделирование и исследование процессов в неоднородных средах. – Киев: Наук. думка, 1991. – 432 с.
5. Снеддон И. Преобразования Фурье. – Москва: Изд-во иностр. лит., 1955. – 668 с.
Те саме: *Sneddon I. Fourier transforms.* – New York: McGraw-Hill, 1951.
6. Ху С. Диффузия в кремнии и германии // В кн.: Атомная диффузия в полупроводниках / Под ред. Д. Шоу. – Москва: Мир, 1975. – С. 248–405.
7. Чапля Є. Я., Чернуха О. Ю. Фізико-математичне моделювання гетеродифузного масопереносу. – Львів: СПОЛОМ, 2003. – 128 с.
8. *Adbel-Gawad H. I. A model for a finite memory transport in the Fisher equation* // Appl. Math. Model. – 2008. – **32**, No. 9. – P. 1883–1893.
9. *Baytas A. C., Baytas A. F., Ingham D. B., Pop I. Double diffusive natural convection in an enclosure filled with a step type porous layer: Non-Darcy flow* // Int. J. Therm. Sci. – 2009. – **48**, No. 4. – P. 665–673.
10. *Bonelli S. Approximate solution to the diffusion equation and its application to seepage-related problems* // Appl. Math. Model. – 2009. – **33**, No. 1. – P. 110–126.
11. *Chaplya Ye., Chernukha O. Mathematical modeling diffusion of decaying particles in regular structures* // Rev. Adv. Mater. Sci. – 2010. – **23**, No. 1. – P. 21–31.
12. *Chernukha O. Admixture mass transfer in a body with horizontally periodical structure* // Int. J. Heat Mass Transfer. – 2005. – **48**, No. 11. – P. 2290–2298.
13. *Fisher J. C. Calculation of diffusion penetration curves for surface and grain boundary diffusion* // J. Appl. Phys. – 1951. – **22**, No. 1. – P. 74–77.
14. *Klinger L., Rabkin E. Diffusion along the grain boundaries in crystals with dislocations* // Interface Sci. – 1998. – **6**, No. 3. – P. 197–203.
15. *Konstantinidis D. A., Eleftheriadis I. E., Aifantis E. C. On the experimental validation of the double diffusivity model* // Scripta Mater. – 1998. – **38**, No. 4. – P. 573–580.
16. *Krishnamurti R. Double-diffusive transport in laboratory thermohaline staircases* // J. Fluid Mech. – 2003. – **483**. – P. 287–314.
17. *Savula Ya. H., Koukharskiy V. M., Chaplya Ye. Ya. Numerical analysis of advection diffusion in the continuum with thin canal* // Numer. Heat Transfer. A–Appl. – 1998. – **33**, No. 3. – P. 341–351.
18. *Soares J. S. Diffusion of a fluid through a spherical elastic solid undergoing large deformations* // Int. J. Eng. Sci. – 2009. – **47**, No. 1. – P. 50–63.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТАЦИОНАРНЫХ ПРОЦЕССОВ КОНВЕКТИВНОЙ ДИФфуЗИИ В РЕГУЛЯРНЫХ СТРУКТУРАХ ПРИ СМЕШАННЫХ ГРАНИЧНЫХ УСЛОВИЯХ

Исследованы стационарные процессы массопереноса примесного вещества в двухфазных регулярных структурах с учетом периодического характера конвективных явлений при смешанных граничных условиях. Для построения точных аналитических решений контактно-краевых задач такого типа адаптирован метод, базирующийся на использовании различных интегральных преобразований в различных контактирующих областях. Установлено соотношение между этими интегральными преобразованиями с учетом неидеальных контактных условий. Получено аналитическое решение задачи диффузии для двухфазного слоя регулярной структуры с учетом в одной из фаз конвективного переноса при постоянной концентрации на поверхности и при поддержке постоянного диффузионного потока на границе другой фазы. Исследованы потоки массы через внутреннюю междуфазную поверхность контакта и проведен числовой анализ концентрации мигрирующих частиц в структурных элементах тела.

MATHEMATICAL MODELING THE STEADY-STATE PROCESSES OF CONVECTIVE DIFFUSION IN REGULAR STRUCTURES UNDER MIXED BOUNDARY CONDITIONS

The steady-state processes of admixture mass transfer are studied in two-phase regular structures with allowance for a periodic character of convective phenomenon under mixed boundary conditions. For constructing exact analytical solutions of such kind of contact-boundary value problems the method based on applying different integral transformations in contacting domains is adapted. A relation between these integral transformations is found using the non-ideal contact conditions. The analytical solution of the diffusion problem for a two-phase layer of the regular structure with allowance for convective transport in one phase is obtained under keeping up constant concentration on the boundary of this phase and constant diffusive flow on the boundary of another phase. Mass flows through the inner contact surface are investigated and numerical analysis for migrating particle concentration in the structural body elements is carried out.

¹ Центр мат. моделювання
Ін-ту прикл. проблем механіки і математики
ім. Я. С. Підстригача НАН України, Львів,
² Нац. ун-т «Львівська політехніка», Львів

Одержано
14.04.12