

УДК 517.958:532.72

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ДИФУЗІЙНИХ ПОТОКІВ В ШАРІ

Є. Чапля^{***}, О. Чернуха^{*}, Н. Васьо^{*}

**Центр математичного моделювання Інституту прикладних проблем механіки і математики ім. Я. С. Підстригача НАН України, вул. Дж. Дудаєва, 15, Львів, 79005, e-mail: cher@ctm.lviv.ua*

***Інститут механіки середовища і прикладної інформатики Університету Казимира Великого в Бидгощі, вул. Ходкевича 30, Бидгощ, 85-064, Польща*

Досліджено процес масоперенесення домішкової речовини в шарі, на одній зовнішній поверхні якого заданий потік маси, а на іншій – концентрація дорівнює нулю. Враховуючи рівняння балансу маси, отримано рівняння дифузії домішкової речовини, яке записане для потоку мігруючих частинок. Сформульовано та обґрунтовано крайові умови для функції потоку маси. Побудовано розв'язки крайових задач дифузії, де шуканою функцією є концентрація домішки і потік маси за нульової та ненульової початкових умов на концентрацію, якщо відоме стале значення потоку на одній поверхні шару і немає концентрації частинок – на іншій. Проведено числовий аналіз характерних розподілів концентрації домішки та її дифузійного потоку. Виявлено наявність приповерхневого максимуму потоку для ненульових початкових розподілів концентрації, який з часом зменшується і зсувається вглиб тіла.

Ключові слова: дифузія, потоки маси, концентрація домішкової речовини.

1. ВСТУП

Під час математичного моделювання дифузійних процесів і дослідження потоків у стохастично неоднорідних структурах використовують процедури просторового усереднення [1-5]. У цьому разі виникають значні труднощі, оскільки функції кореляції градієнта випадкового поля концентрації та стохастичного коефіцієнта дифузії мігруючих частинок невідомі.

Враховуючи рівняння балансу маси, пропонуємо побудувати рівняння дифузії для функції потоку мігруючих частинок, а крайові задачі формулювати безпосередньо для потоку. Проте для цього потрібні додаткові дослідження, оскільки у випадку, коли значення потоку на “верхній” межі значно більше ніж на “нижній”, в обмежене тіло може надійти необмежена кількість дифундувальної речовини, що є певним парадоксом. В протилежному випадку, коли підтримується значно більший потік через “нижню” границю шару, також приходимо до певних протиріч. У зв'язку з цим як перший етап вивчаємо процес масоперенесення домішкової речовини в шарі для найпростіших випадків (однорідне тіло), коли на одній зовнішній поверхні заданий потік маси, а на іншій – концентрація дорівнює нулю. Надалі будемо досліджувати потоки маси мігруючих частинок для складних структур, зокрема випадково неоднорідних тіл, в околі побудованих розв'язків для однорідних тіл.

2. РІВНЯННЯ ДИФУЗІЇ, СФОРМУЛЬОВАНЕ ДЛЯ ПОТОКІВ МАСИ

Нехай в однорідному чи неоднорідному середовищі дифундує домішкова речовина. Рівняння балансу маси в загальному випадку набуває вигляду [6]

$$\frac{\partial c(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}(\vec{r}, t), \quad (1)$$

де $c(\vec{r}, t)$ – концентрація частинок домішки; $\vec{J}(\vec{r}, t)$ – потік маси; $\vec{\nabla}$ – набла- оператор Гамільтона; крапкою позначена операція скалярного добутку; \vec{r} – радіус- вектор біжучої точки; t – час.

Подіємо на рівняння (1) оператором $-\vec{\nabla}$

$$\frac{\partial}{\partial t} (-\vec{\nabla} c(\vec{r}, t)) = \vec{\nabla} \otimes \vec{\nabla} \cdot \vec{J}(\vec{r}, t). \quad (2)$$

Тут “ \otimes ” – тензорний добуток, причому $\vec{\nabla} \otimes \vec{\nabla} = \nabla_i \nabla_j \vec{i}^i \otimes \vec{i}^j$ ($i, j = 1, 2, 3$), де ∇_i – символ часткової похідної ($\nabla_1 = \partial/\partial x$, $\nabla_2 = \partial/\partial y$, $\nabla_3 = \partial/\partial z$), \vec{i}^i – базисний вектор ($\vec{i}^1 = \vec{i}$, $\vec{i}^2 = \vec{j}$, $\vec{i}^3 = \vec{k}$).

Домножимо рівняння (2) на коефіцієнт дифузії $D(\vec{r})$, який загалом є функцією просторових координат і не залежить від часу. Тоді одержуємо

$$\frac{\partial}{\partial t} (-D(\vec{r})\vec{\nabla} c(\vec{r}, t)) = D(\vec{r})\vec{\nabla} \otimes \vec{\nabla} \cdot \vec{J}(\vec{r}, t). \quad (3)$$

Приймаючи співвідношення між потоком маси та концентрацією частинок (перший закон Фіка)

$$\vec{J}(\vec{r}, t) = -D(\vec{r})\vec{\nabla} c(\vec{r}, t), \quad (4)$$

рівняння (3) запишемо у вигляді

$$\frac{\partial \vec{J}(\vec{r}, t)}{\partial t} = D(\vec{r})\vec{\nabla} \otimes \vec{\nabla} \cdot \vec{J}(\vec{r}, t). \quad (5)$$

Отже, отримано рівняння дифузії домішкової речовини, подане через потоки маси.

Праву сторону рівняння (5) можна перетворити так:

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \otimes \vec{\nabla} \cdot \vec{J} &= \nabla_i \nabla_j \vec{i}^i \otimes \vec{i}^j \cdot J^\alpha \vec{i}_\alpha = \nabla_i \nabla_j \vec{i}^i J^\alpha \delta_\alpha^j = \nabla_i \nabla_j \vec{i}^i J^j = \vec{\nabla}(\nabla_j J^j) = \\ &= \left(\vec{i} \frac{\partial}{\partial x} + \vec{j} \frac{\partial}{\partial y} + \vec{k} \frac{\partial}{\partial z} \right) \left(\frac{\partial J^x}{\partial x} + \frac{\partial J^y}{\partial y} + \frac{\partial J^z}{\partial z} \right) = \vec{i} \left(\frac{\partial^2 J^x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 J^y}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 J^z}{\partial x \partial z} \right) + \\ &+ \vec{j} \left(\frac{\partial^2 J^x}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 J^y}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 J^z}{\partial y \partial z} \right) + \vec{k} \left(\frac{\partial^2 J^x}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 J^y}{\partial y \partial z} + \frac{\partial^2 J^z}{\partial z^2} \right), \end{aligned} \quad (6)$$

де δ_α^j – символ Кронекера.

Враховуючи подання (6), рівняння (5) можна записати у вигляді

$$\begin{aligned} \frac{\partial J^x}{\partial t} &= D(\vec{r}) \left(\frac{\partial^2 J^x}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 J^y}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 J^z}{\partial x \partial z} \right), \\ \frac{\partial J^y}{\partial t} &= D(\vec{r}) \left(\frac{\partial^2 J^x}{\partial x \partial y} + \frac{\partial^2 J^y}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 J^z}{\partial y \partial z} \right), \end{aligned}$$

$$\frac{\partial J^z}{\partial t} = D(\vec{r}) \left(\frac{\partial^2 J^x}{\partial x \partial z} + \frac{\partial^2 J^y}{\partial y \partial z} + \frac{\partial^2 J^z}{\partial z^2} \right).$$

В одновимірному за просторовою координатою випадку рівняння (5) зведемо до такого:

$$\frac{\partial J(z,t)}{\partial t} = D(z) \frac{\partial^2 J(z,t)}{\partial z^2}. \quad (7)$$

Зазначимо таке: оскільки ми поділяли на диференціальне рівняння оператором $-\vec{\nabla}$, то існує певна довільна функція f , яка задовольняє умову $\vec{\nabla} f = 0$. Також зауважимо, що рівняння (5) правильне для тіл з детермінованою та з випадковою неоднорідною структурою. Зокрема, рівняння (7) в одновимірному випадку описує випадкову функцію потоку в стохастично неоднорідному шаруватому середовищі.

Нехай на потік $\vec{J}(\vec{r}, t)$ накладено крайові умови першого роду

$$\vec{J}(\vec{r}, t) \Big|_{r=0} = J^* \equiv \text{const}; \quad \vec{J}(\vec{r}, t) \Big|_{\vec{r} \in (\partial V)} = \vec{J}_*(t), \quad (8)$$

де функція $\vec{J}_*(t)$ – відома детермінована (усереднена) функція часової змінної; (∂V) – границя тіла.

Розглянемо тіло, яке складається з $(N+1)$ твердої фази, в яких фізичні властивості мігруючих частинок можуть суттєво розрізнятися. Приймаємо, що об'ємна частка базової фази v_0 набагато більша за інші. Також вважатимемо відомим імовірнісний розподіл фаз у тілі. Тоді коефіцієнт дифузії $D(\vec{r})$ рівняння (5) є випадковою функцією просторових координат. Надалі вважатимемо, що він є сталим в області кожної фази.

Для побудови розв'язку крайової задачі (5), (8) введемо в розгляд випадкову функцію просторових координат типу одичинної сходиноквої функції Хевісайда [7] – випадкову “функцію структури”

$$\eta_{ij}(\vec{r}) = \begin{cases} 1, & \vec{r} \in (V_i^{(j)}), \\ 0, & \vec{r} \notin (V_i^{(j)}), \end{cases} \quad (9)$$

яка задовольняє умову суцільності тіла

$$\sum_{j=0}^N \sum_{i=1}^{n_j} \eta_{ij}(\vec{r}) = 1. \quad (10)$$

Тут $(V_i^{(j)})$ – i -та однозв'язна область j -ї фази; i – номер включення в рамках фази, $i = \overline{1, n_j}$; n_j – кількість включень сорту j , $j = \overline{0, N}$; $N+1$ – кількість фаз; $j=0$ відповідає матриці. Тобто

$$\bigcup_{i=1}^{n_j} V_i^{(j)} = V_j, \quad \bigcup_{j=0}^N V_j = V,$$

де V_j – об'єм, який займає фаза j , V – об'єм тіла.

Коефіцієнт дифузії можна подати через функцію $\eta_{ij}(\vec{r})$ (9) так:

$$D(\vec{r}) = \sum_{j=0}^N \sum_{i=1}^{n_j} D_j \eta_{ij}(\vec{r}). \quad (11)$$

Тут враховано припущення про сталість коефіцієнта дифузії в межах однієї фази.

Підставляємо подання (11) у рівняння (5). Тоді одержуємо

$$L(\vec{r}, t) \vec{J}(\vec{r}, t) = \frac{\partial \vec{J}(\vec{r}, t)}{\partial t} - \sum_{j=0}^N \sum_{i=1}^{n_j} D_j \eta_{ij}(\vec{r}) \vec{\nabla} \otimes \vec{\nabla} \cdot \vec{J}(\vec{r}, t) = 0. \quad (12)$$

Оскільки правильна умова (10), то рівняння (12) можна подати у вигляді

$$L(\vec{r}, t) \vec{J}(\vec{r}, t) = \sum_{j=0}^N \sum_{i=1}^{n_j} L_{ij}(\vec{r}, t) \vec{J}(\vec{r}, t) = 0, \quad (13)$$

де

$$L_{ij}(\vec{r}, t) = \eta_{ij}(\vec{r}) \left[\frac{\partial}{\partial t} - D_j \vec{\nabla} \otimes \vec{\nabla} \cdot \right].$$

Розв'язки крайових задач процесів масоперенесення в тілах випадково неоднорідної структури доцільно будувати у вигляді ряду Неймана, оскільки таке подання розв'язку зручне для проведення процедури усереднення за ансамблем конфігурації фаз.

З цією метою в рівнянні (12) додамо і віднімемо невідповідний оператор $L_0(\vec{r}, t)$ з коефіцієнтом дифузії матриці, який означений на всьому проміжку

$$L_0(\vec{r}, t) = \frac{\partial}{\partial t} - D_0 \vec{\nabla} \otimes \vec{\nabla} \cdot, \quad (14)$$

а при симетрії за змінними x та y (наприклад, для таких тіл як шар або півпростір) цей оператор набуде вигляду

$$L_0(\vec{r}, t) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ L_0(z, t) \end{pmatrix}.$$

Тоді рівняння (12) запишемо так:

$$L_0(\vec{r}, t) \vec{J}(\vec{r}, t) = [L_0(\vec{r}, t) - L(\vec{r}, t)] \vec{J}(\vec{r}, t), \quad (15)$$

або з урахуванням умови (10) подамо у вигляді

$$L_0(\vec{r}, t) \vec{J}(\vec{r}, t) = \sum_{j=0}^N \sum_{i=1}^{n_j} [L_0(\vec{r}, t) - L_{ij}(\vec{r}, t)] \vec{J}(\vec{r}, t). \quad (16)$$

Оператор у правій частині рівняння (15) позначимо так:

$$L_s(\vec{r}, t) \equiv L_0(\vec{r}, t) - L(\vec{r}, t) = \sum_{j=0}^N \sum_{i=1}^{n_j} (D_0 - D_j) \eta_{ij}(\vec{r}) \vec{\nabla} \otimes \vec{\nabla} \cdot = \sum_{j=0}^N \sum_{i=1}^{n_j} L_{0ij}(\vec{r}).$$

Зауважимо, що оператор $L_s(\vec{r}, t)$ не залежить від часу, тобто $L_s(\vec{r}, t) \equiv L_s(\vec{r})$.

Вважаємо праву частину рівняння (15) джерелом, тобто неоднорідність структури тіла трактуємо як внутрішні джерела. Тоді розв'язок крайової задачі (15), (8) можна подати у вигляді суми розв'язку однорідної крайової задачі та згортки функції Гріна з джерелом

$$\vec{J}(\vec{r}, t) = \vec{J}_0(\vec{r}, t) + \int_0^t \iiint_{(V)} G(\vec{r}, \vec{r}', t, t') L_s(\vec{r}') \vec{J}(\vec{r}', t') d\vec{r}' dt', \quad (17)$$

де $\vec{J}_0(\vec{r}, t)$ – розв’язок однорідної крайової задачі

$$L_0(\vec{r}, t) \vec{J}_0(\vec{r}, t) = \frac{\partial \vec{J}_0(\vec{r}, t)}{\partial t} - D_0 \vec{\nabla} \otimes \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_0(\vec{r}, t) = 0, \quad (18)$$

$$\vec{J}_0(\vec{r}, t) \Big|_{t=0} = J^*, \quad \vec{J}_0(\vec{r}, t) \Big|_{\vec{r} \in (\partial V)} = \vec{J}_*(t); \quad (19)$$

$G(\vec{r}, \vec{r}', t, t')$ – функція Гріна задачі (15), (8), тобто є розв’язком детермінованої крайової задачі з точковим джерелом

$$\frac{\partial G(\vec{r}, \vec{r}', t, t')}{\partial t} - D_0 \vec{\nabla} \otimes \vec{\nabla} \cdot G(\vec{r}, \vec{r}', t, t') = \delta(t - t') \delta(\vec{r} - \vec{r}'),$$

$$G(\vec{r}, \vec{r}', t, t') \Big|_{t=0} = 0, \quad G(\vec{r}, \vec{r}', t, t') \Big|_{\vec{r} \in (\partial V)} = 0.$$

Отже, ми отримали інтегродиференціальне рівняння для випадкових потоків маси, яке є рівнянням Вольтерра другого роду за часом і Гаммерштейна за просторовими змінними. Інтегродиференціальне рівняння (17) еквівалентне до вихідної крайової задачі (5), (8). Розв’язуємо його методом послідовних наближень. Тоді розв’язок отримаємо у вигляді інтегрального ряду Неймана

$$\begin{aligned} \vec{J}(\vec{r}, t) = & \vec{J}_0(\vec{r}, t) + \int_0^t \iiint_{(V)} G(\vec{r}, \vec{r}', t, t') L_s(\vec{r}') \vec{J}_0(\vec{r}', t') d\vec{r}' dt' + \\ & + \int_0^t \iiint_{(V)} G(\vec{r}, \vec{r}', t, t') L_s(\vec{r}') \int_0^{t'} \iiint_{(V)} G(\vec{r}', \vec{r}'', t', t'') L_s(\vec{r}'') \vec{J}_0(\vec{r}'', t'') d\vec{r}'' dt'' d\vec{r}' dt' + \dots \end{aligned} \quad (20)$$

Зазначимо, що в одновимірному випадку (для шаруватого тіла) ряд Неймана (20) абсолютно і рівномірно збіжний, якщо коефіцієнти дифузії обмежені $D_j \leq K < \infty$, $\forall j \in \{0, \dots, N\}$ і коефіцієнт дифузії матриці відмінний від нуля $D_0 \neq 0$. Теореми збіжності рядів Неймана, сформульовані і доведені у праці [8], застосовні і до ряду (20). Також справджується теорема існування розв’язку інтегродиференціального рівняння (17) для шару і півпростору.

Далі знайдемо розв’язки однорідної крайової задачі (18), (19) для шару.

3. РОЗПОДІЛИ КОНЦЕНТРАЦІЇ ТА ПОТОКУ ЧАСТИНОК У ШАРІ ЗА НУЛЬОВИХ ПОЧАТКОВИХ УМОВ НА КОНЦЕНТРАЦІЮ

Розглянемо дифузію домішкових частинок в однорідному шарі, товщина якого z_0 (вісь Oz спрямована перпендикулярно до поверхонь шару). Вважаємо, що в початковий момент часу в тілі немає домішкової речовини. На одній з границь шару $z = 0$ заданий постійний потік маси, а на іншій $z = z_0$ – концентрація дорівнює нулю. Щодо задачі для дифузійного потоку, то спочатку треба визначити граничну умову для функції потоку на границі $z = z_0$, якщо на цій границі відоме значення концентрації. Тому розглянемо крайову задачу дифузії, сформульовану для функції концентрації мігруючих частинок.

Нехай коефіцієнт дифузії домішкової речовини приймає сталі значення, тоді крайова задача, сформульована для функції концентрації, набуває вигляду

$$\frac{\partial C(z,t)}{\partial t} = D_0 \frac{\partial^2 C(z,t)}{\partial z^2}; \quad (21)$$

$$C(z,t)|_{t=0} = 0; \quad (22)$$

$$\left. \frac{\partial C(z,t)}{\partial z} \right|_{z=0} = -\frac{J_*}{D_0} \equiv \text{const}, \quad C(z,t)|_{z=z_0} = 0. \quad (23)$$

Крайову задачу (21)-(23) розв'язуємо за допомогою інтегральних перетворень. Застосуємо перетворення Лапласа за часом [9] і наступне інтегральне перетворення за просторовою змінною [10]

$$\tilde{C}(\xi_n, s) = \int_0^{z_0} \bar{C}(z, s) \cos(\xi_n z) dz, \quad \bar{C}(z, s) = \frac{2}{z_0} \sum_{n=1}^{\infty} \tilde{C}(\xi_n, s) \cos(\xi_n z), \quad (24)$$

де $\xi_n = \frac{\pi(2n-1)}{2z_0}$, s – параметр інтегрального перетворення Лапласа. У підсумку отримаємо рівняння

$$D_0 \left(\frac{J_*}{D_0 s} - \xi_n^2 \tilde{C}(\xi_n, s) \right) = s \tilde{C}(\xi_n, s),$$

звідки знаходимо

$$\tilde{C}(\xi_n, s) = \frac{J_*}{s(D_0 \xi_n^2 + s)}.$$

Після виконання обернених інтегральних перетворень розв'язок крайової задачі (21)-(23) одержимо у вигляді

$$C(z,t) = \frac{J_*}{D_0} \left(z_0 - z - \frac{2}{z_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-D_0 \xi_n^2 t} \cos(\xi_n z)}{\xi_n^2} \right).$$

Знайдемо вираз для потоку домішкових частинок за формулою (4). Тоді маємо

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

Зокрема, вираз для потоку маси через границю шару $z = z_0$ набуває вигляду

$$J_0(z,t)|_{z=z_0} = J_* \left(1 - \frac{2}{z_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\xi_n} (-1)^{n+1} e^{-D_0 \xi_n^2 t} \right). \quad (25)$$

Розглянемо тепер крайову задачу дифузії в шарі, сформульовану для функції потоку $J_0(z,t)$, якщо на границі шару $z = z_0$ концентрація частинок дорівнює нулю і, відповідно, для потоку виконується умова (25). На границі тіла $z = 0$ відоме сталє значення потоку J_* , а в початковий момент часу потік дорівнює нулю, тобто

$$\frac{\partial J_0(z,t)}{\partial t} = D_0 \frac{\partial^2 J_0(z,t)}{\partial z^2}; \quad (26)$$

$$J_0(z,t)|_{t=0} = 0; \quad (27)$$

$$J_0(z,t)|_{z=z_0} = J_*, \quad J_0(z,t)|_{z=0} = F(t), \quad (28)$$

$$\text{де } F(t) = J_* \left(1 - \frac{2}{z_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\xi_n} (-1)^{n+1} e^{-D_0 \xi_n^2 t} \right).$$

До задачі (26)-(28) застосуємо \sin -перетворення Фур'є [9] ($z \rightarrow y_k = \frac{k\pi}{z_0}$;

$J_0(z, t) \rightarrow \bar{J}_0(y_k, t)$). Тоді в зображеннях одержимо

$$\frac{d\bar{J}_0(y_k, t)}{dt} = -D_0 y_k^2 \bar{J}_0(y_k, t) - (-1)^k D_0 y_k F(t) + D_0 y_k J_*, \quad (29)$$

$$\bar{J}_0(y_k, t) \Big|_{t=0} = 0. \quad (30)$$

Розв'язок задачі (29)-(30) набув вигляду [11]

$$\frac{\bar{J}_0(y_k, t)}{J_*} = \left(1 - (-1)^k \right) \frac{1 - e^{-D_0 y_k^2 t}}{y_k} + (-1)^k y_k \frac{2}{z_0} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n+1} \frac{e^{-D_0 \xi_n^2 t} - e^{-D_0 y_k^2 t}}{\xi_n (y_k^2 - \xi_n^2)}. \quad (31)$$

Застосувавши до виразу (31) обернене \sin -перетворення, отримаємо

$$\begin{aligned} \frac{J_0(z, t)}{J_*} = & \frac{2}{z_0} \sum_{k=1}^{\infty} \left[\frac{1 - (-1)^k}{y_k} (1 - e^{-D_0 y_k^2 t}) + \right. \\ & \left. + (-1)^k y_k \frac{2}{z_0} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n+1} \frac{e^{-D_0 \xi_n^2 t} - e^{-D_0 y_k^2 t}}{\xi_n (y_k^2 - \xi_n^2)} \right] \sin(y_k z). \end{aligned} \quad (32)$$

Після підсумовування [12] вираз (32) зведеться до форми

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

Зазначимо, що вираз для дифузійного потоку маси, одержаний з крайової задачі на концентрацію, збігається з відповідним розв'язком крайової задачі, сформульованої для функції потоку маси.

Також зауважимо, що в стаціонарному випадку $\lim_{t \rightarrow \infty} C(z, t) = \frac{J_*}{D_0} (z_0 - z)$

(лінійний розподіл) і $\lim_{t \rightarrow \infty} J_0(z, t) = J_*$ (стале значення). Числові обчислення для функцій концентрації та потоку домішкових частинок проводили у безрозмірних змінних [13] $\eta = z/z_0$, $\tau = D_0 t/z_0^2$. На рис. 1 зображено розподіли концентрації (рис. 1, а) та потоку (рис. 1, б) у шарі в різні моменти часу $\tau = 0,01; 0,05; 0,1; 0,5; 1$ (криві 1-5).

Зауважимо, що зі збільшенням часу концентрація та потік домішкової речовини в шарі збільшуються і виходять на стаціонарний режим. Чим ближче τ наближається до $\tau_{\text{стац}}$, тим ближче розподіли концентрації та потоку наближаються до лінійних.

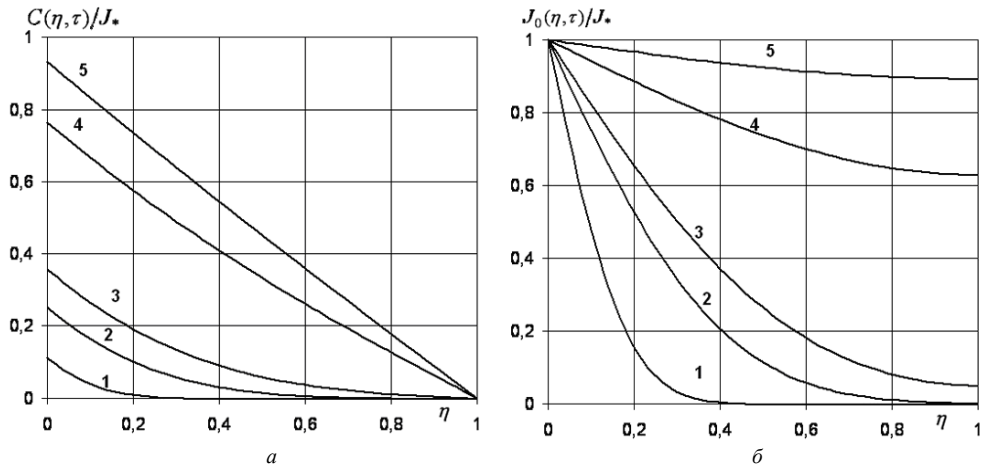


Рис. 1. Розподіли концентрації та потоку за нульової початкової умови

4. РОЗПОДІЛИ КОНЦЕНТРАЦІЇ ТА ПОТОКУ ЧАСТИНОК У ШАРІ ЗА НЕНУЛЬОВИХ ПОЧАТКОВИХ УМОВ НА КОНЦЕНТРАЦІЮ

Розглянемо тепер випадок, коли в початковий момент часу в шарі відомий сталий ненульовий розподіл концентрації, а потік маси дорівнює нулю. Тоді початкова умова для функції концентрації набуває вигляду

$$C(z, t)|_{t=0} = C_* \equiv \text{const}, \quad (33)$$

що приведе до зміни граничної умови для потоку частинок на границі шару $z = z_0$. У цьому разі умови для функції концентрації та для функції потоку залишаться такими ж самими, як і у попередньому випадку.

Крайову задачу дифузії (21), (23), (33), сформульовану для функції концентрації, також розв'язуємо застосовуючи інтегральні перетворення [9, 10]. Тоді в зображеннях отримаємо таке рівняння:

$$D_0 \left(\frac{J_*}{D_0 s} - \xi_n^2 \tilde{C}(\xi_n, s) \right) = \frac{C_*}{\xi_n} (-1)^n + \tilde{C}_s(\xi_n, s),$$

розв'язком якого є

$$\tilde{C}(\xi_n, s) = \frac{J_*}{s(D_0 \xi_n^2 + s)} - \frac{C_* (-1)^n}{\xi_n (D_0 \xi_n^2 + s)}.$$

Після виконання обернених інтегральних перетворень одержимо вираз для концентрації домішкової речовини

$$C(z, t) = \frac{J_*}{D} (z_0 - z) - \frac{2}{z_0} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-D_0 \xi_n^2 t} \left(\frac{J_*}{D_0 \xi_n^2} + \frac{C_* (-1)^n}{\xi_n} \right) \cos(\xi_n z).$$

Для цього випадку за формулою (4) знайдемо вираз для потоку домішкових частинок

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

Зокрема, вираз для потоку маси через границю шару $z = z_0$ набуває вигляду

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

Розглянемо тепер крайову задачу дифузії в шарі, сформульовану для функції потоку маси, тобто шукана функція задовольняє рівняння (26), нульову початкову умову (27) і такі умови на границях шару:

$$J_0(z, t)|_{z=0} = J_*, \quad (34)$$

$$J_0(z, t)|_{z=z_0} = F'(t), \quad (35)$$

$$\text{де } F'(t) = J_* - \frac{2}{z_0} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n+1} e^{-D_0 \xi_n^2 t} \left(\frac{J_*}{\xi_n} + D_0 C_* (-1)^n \right).$$

Застосовуючи до задачі (26), (27), (34), (35) \sin -перетворення Фур'є, одержимо

$$\frac{d\bar{J}_0(y_k, t)}{dt} = D_0 \left[-y_k^2 \bar{J}_0(y_k, t) - (-1)^k y_k F'(t) + y_k J_* \right], \quad (36)$$

$$\bar{J}_0(y_k, t)|_{t=0} = 0. \quad (37)$$

Розв'язок задачі (36)-(37) отримаємо у вигляді

$$\begin{aligned} \frac{\bar{J}_0(y_k, t)}{J_*} &= \frac{1 - (-1)^k}{y_k} \left(1 - e^{-D_0 y_k^2 t} \right) + \\ &+ (-1)^k y_k \frac{2}{z_0} \sum_{n=1}^{\infty} \left[\frac{(-1)^{n+1}}{\xi_n} - \frac{D_0 C_*}{J_*} \right] \frac{e^{-D_0 \xi_n^2 t} - e^{-D_0 y_k^2 t}}{y_k^2 - \xi_n^2}. \end{aligned}$$

Після застосування оберненого \sin -перетворення Фур'є і підсумовування деяких доданків [12], остаточно отримаємо розв'язок задачі (26), (27), (34), (35) у вигляді

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

Отже, і для цієї задачі вираз для потоку маси, одержаний з крайової задачі на концентрацію, збігається з відповідним розв'язком крайової задачі, сформульованої для функції потоку маси.

У стаціонарному випадку для концентрації і потоків домішкової речовини, відповідно, одержуємо $\lim_{t \rightarrow \infty} C(z, t) = \frac{J_*}{D_0} (z_0 - z)$, $\lim_{t \rightarrow \infty} J_0(z, t) = J_*$. Зазначимо, що і концентрація, і потік не залежать від значення в початковий момент часу.

Числові обчислення як і в попередньому випадку, проводили у безрозмірних змінних η , τ . Рис. 2 ілюструє характерні розподіли концентрацій домішки в різні моменти часу $\tau = 0,01$; $0,05$; $0,1$; $0,5$; 1 (криві 1-5) при $C_*/J_* = 0,01$ (рис. 2, а) та $C_*/J_* = 1$ (рис. 2, б). На рис. 3 показані графіки функції $C(\eta, \tau)/J_*$ для різних значень відношення $C_*/J_* = 0,1$; $0,2$; $0,3$; $0,4$; $0,5$ (криві 1-5) в моменти часу $\tau = 0,01$ (рис. 3, а) та $\tau = 0,1$ (рис. 3, б).

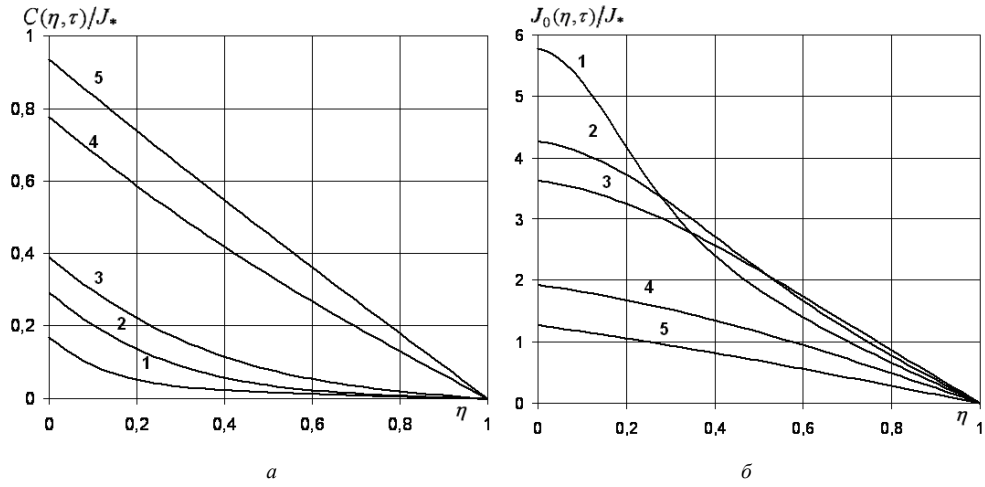


Рис. 2. Розподіли концентрації в шарі в різні моменти часу: а) для $C_*/J_* = 0,01$; б) для $C_*/J_* = 1$

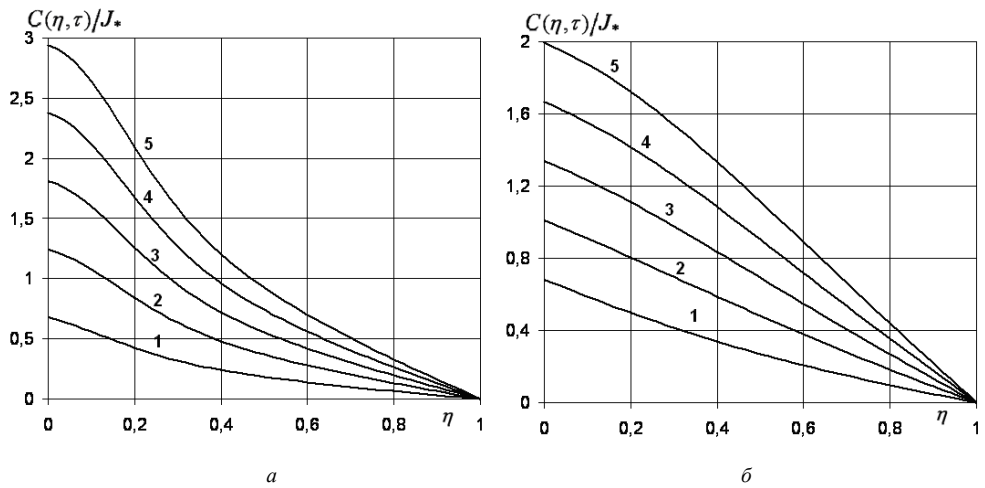


Рис. 3. Розподіли концентрації в шарі для різних значень відношення C_*/J_* в моменти часу: а) $\tau = 0,01$; б) $\tau = 0,1$

На рис. 4, 5 зображено розподіли дифузійних потоків маси в шарі. Рис. 4 демонструє характерні розподіли потоків у різні моменти часу $\tau = 0,001$; $0,002$; $0,01$; $0,2$; 1 (криві 1-5) для $C_*/J_* = 0,1$ (рис. 4, а) і $C_*/J_* = 0,5$ (рис. 4, б). На рис. 5 показано залежність потоків маси від значення відношення $C_*/J_* = 0,1$; $0,2$; $0,3$; $0,4$; $0,5$ (криві 1-5) в моменти часу $\tau = 0,001$ (рис. 5, а) та $\tau = 0,1$ (рис. 5, б).

Зазначимо, що концентрація домішкових частинок для всіх значень параметрів та часу є спадною функцією. У цьому разі для малих значень C_*/J_* зі збільшенням часу концентрація збільшується до стаціонарного розподілу (рис. 2, а), а для великих значень цього відношення – спадає (рис. 2, б). Також зазначимо, що для малих

часових інтервалів характерні увігнуті криві для концентрації частинок (рис. 3, а), а зі збільшенням часу такі криві можуть стати опуклими (рис. 3, б).

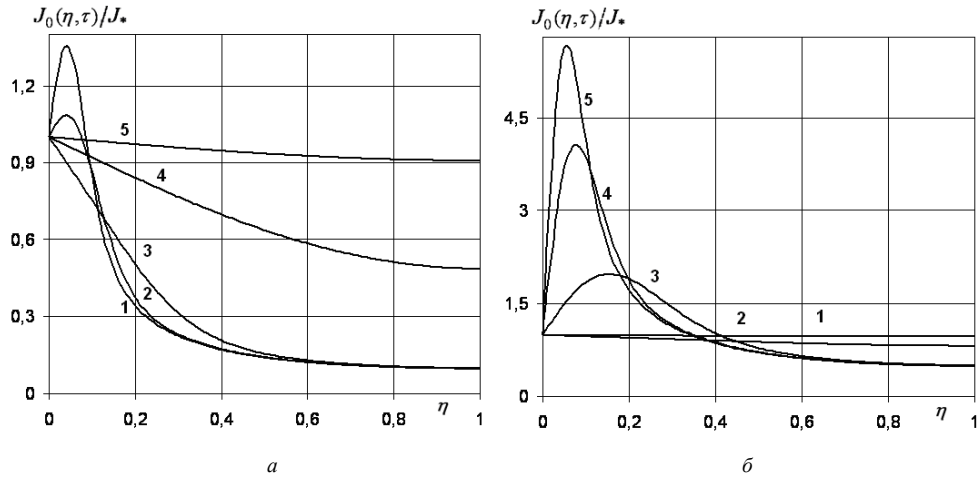


Рис. 4. Розподіли потоків маси в шарі в різні моменти часу: а) для $C_*/J_* = 0,1$; б) для $C_*/J_* = 0,5$

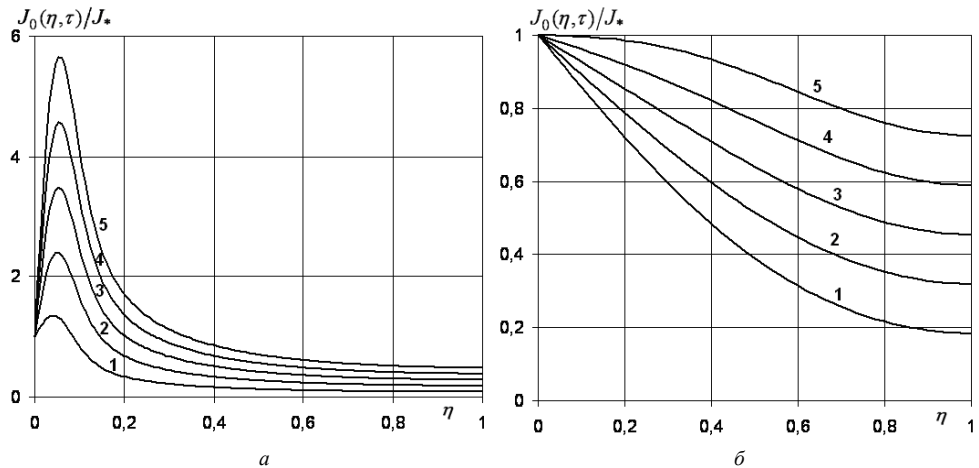


Рис. 5. Залежність потоків маси в шарі від значення відношення C_*/J_* в моменти часу: а) $\tau = 0,001$; б) $\tau = 0,1$

Для розподілів потоків маси характерний приповерхневий максимум (рис. 4, а, 5, а) для малих значень часу, який з ростом τ зменшується і зсувається вглиб тіла (рис. 4, б). Зазначимо, що чим меншим є початкове значення концентрації C_*/J_* , тим швидше зникає цей максимум функції потоку маси. Також зауважимо, що збільшення величини C_*/J_* призводить до зростання потоку домішкових частинок на всьому проміжку (рис. 5).

5. ВИСНОВКИ

Враховуючи рівняння балансу маси, отримано рівняння дифузії домішкової речовини, сформульоване для потоку мігруючих частинок з урахуванням незалежності коефіцієнта дифузії від часової змінної. Сформульовано та обґрунтовано крайові умови для функції потоку маси. Побудовано розв'язки крайових задач дифузії, де шуканою функцією є концентрація домішки та потік маси за нульової та ненульової початкових умов на концентрацію при відомому сталому значенні потоку на одній поверхні шару і відсутності концентрації частинок – на іншій. Проведений числовий аналіз характерних розподілів концентрації домішки та її дифузійного потоку. Зокрема, виявлено наявність приповерхневого максимуму потоку для ненульових початкових розподілів концентрації, який зі збільшенням часу зменшується і зсувається вглиб тіла. Водночас досліджено, що функція концентрації домішкової речовини завжди має спадний характер.

Отримано розв'язки крайових задач дифузії для однорідного шару, що дає змогу будувати відповідні розв'язки для неоднорідних структур на підставі сформульованого рівняння дифузії для потоків маси.

ЛІТЕРАТУРА

1. *Chaplia Y.* Admixture diffusion in a two-phase random nonhomogeneous stratified layer / Y. Chaplia, O. Chernukha // *J. Theoret. and Appl. Mech.* – 2001. – Vol. 39, N 4. – P. 929–946.
2. *Galka A.*, Thermodiffusion in heterogeneous elastic solids and homogenization / A. Galka, J. J. Telega, R. Wojnar // *Arch. Mech.* – 1994. – Vol. 46, N 3. – P. 267–314.
3. *Chaplia Y.*, Three-dimensional diffusion in a multiphase body with randomly disposed inclusions of a spherical form / Y. Chaplia, O. Chernukha // *Int. J. Heat and Mass Trans.* – 2003. – Vol. 46. – P. 3323–3328.
4. *Matysiak S.J.* On homogenization of diffusion processes in microperiodic stratified bodies / S. J. Matysiak, R. Mieszkowski // *Int. J. Heat and Mass Trans.* – 1999. – Vol. 26. – P. 539–547.
5. *Chaplia Y.* Physical-mathematical modelling diffusion processes in bodies of random structure using generalized functions and Feynman diagrams / Y. Chaplia, O. Chernukha // *Int. J. Eng. Science* – 2005. – Vol. 43. – Issue 17–18. – P. 1337–1348.
6. *Crank J.* The mathematics of diffusion / J. Crank. – Oxford: Clarendon Press, 1956. – 575 p.
7. *Рытов С. М.* Введение в статистическую радиофизику. / С. М. Рытов, Ю. А. Кравцов., В. И. Татарский // Ч. II. Случайные поля. – М., 1978.
8. *Чапля С. Я.* Математичне моделювання дифузійних процесів у випадкових і регулярних структурах. / С. Я. Чапля, О. Ю. Чернуха. – К., 2009.
9. *Снеддон И.* Преобразования Фурье. / И. Снеддон. – М., 1955.
10. *Мартыненко Н. А.* Конечные интегральные преобразования и их применение к исследованию систем с распределенными параметрами. / Н. А. Мартыненко, Л. М. Пустыльников. – М., 1985.
11. *Камке Э.* Справочник по обыкновенным дифференциальным уравнениям. / Э. Камке. – М., 1985.
12. *Прудников А. П.* Интегралы и ряды. Элементарные функции. / А. П. Прудников, Ю. А. Брычков, О. И. Маричев. – М., 1981.
13. *Лыков А. В.* Теория теплопроводности. / А. В. Лыков. – М., 1978.

**МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИФФУЗИОННЫХ ПОТОКОВ
В СЛОЕ****Е. Чапля^{***}, О. Чернуха^{*}, Н. Васьо^{**}**

**Центр математического моделирования Института прикладных проблем
механики и математики имени Я. С. Подстригача НАН Украины,
ул. Дудаева, 15, Львов, 79005, e-mail: cher@cmm.lviv.ua*

***Институт механики среды и прикладной информатики Университета Казимира
Великого в Быдгоще, ул. Ходкевича 30, Быдгощ, 85-064, Польша*

Исследован процесс массопереноса примесного вещества в слое, где на одной внешней поверхности задан поток массы, а на другой – концентрация равна нулю. Исходя из уравнения баланса массы, получено уравнение диффузии примесного вещества, сформулированное для потока мигрирующих частиц. Сформулированы и обоснованы краевые условия для функции потока массы. Построены решения краевых задач диффузии, когда искомой функцией является концентрация примеси и поток массы для нулевого и ненулевого начальных условий на концентрацию при известном постоянном значении потока на одной поверхности слоя и отсутствии концентрации частиц – на другой. Проведен числовой анализ характерных распределений концентрации примеси и ее диффузионного потока. Установлено наличие приповерхностного максимума потока для ненулевых начальных распределений концентрации, который со временем уменьшается и сдвигается в глубину тела.

Ключевые слова: диффузия, поток массы, концентрация примесного вещества.

MATHEMATICAL MODELLING DIFFUSIVE FLUXES IN A LAYER**Y. Chaplya^{***}, O. Chernukha^{*}, N. Vaso^{*}**

**Centre of Mathematical Modelling of Pidstryhach Institute of Applied Problems of
Mechanics and Mathematics of Ukrainian NAS,*

Dudaev's str, 15, Lviv, 79005, e-mail: cher@cmm.lviv.ua

***Kazimierz Wielki Bydgoszcz University, Bydgoszcz, Poland*

Admixture mass transfer process is studied in a layer, where the mass flow is given on one external layer surface and admixture concentration equals zero on another. On the basis of the relationship of mass balance an equation of admixture diffusion formulated for migrating particle flux is obtained. Initial and boundary conditions on the function of mass flow are formulated and justified. Solutions of diffusion initial-boundary value problems are constructed when as a sought function is both the admixture concentration and mass flow under zero and non-zero initial conditions for the concentration at a known constant value of the flow on one layer surface and particle concentration miss on another. Numerical analysis is carried out for characteristic distributions of both the admixture concentration and its diffusive flow. Occurrence of a subsurface maximum of the flow is established for non-zero initial distributions of the concentration that decreases in time and moves in the body depth.

Key words: diffusion, mass flow, admixture concentration.

Стаття надійшла до редколегії 12.10.2010

Прийнята до друку 26.01.2011