УДК 517.958:532.72

Є. Я. Чапля, О. Ю. Чернуха, В. А. Дмитрук

Математичне моделювання стаціонарних процесів конвективно-дифузійного масопереносу у бінарних періодичних структурах

(Представлено членом-кореспондентом НАН України Я. Й. Бураком)

Запропоновано метод побудови точних розв'язків контактно-крайової задачі дифузії домішкових речовин у двофазних тілах регулярної структури з урахуванням механізму конвективного масоперенесення в одній із фаз. Цей метод базується на застосуванні різного роду інтегральних перетворень окремо в контактуючих областях. На цій основі побудовано точний розв'язок задачі масопереносу в двофазному шарі періодичної структури, якщо в областях одного типу відбувається процес конвективної дифузії, а в областях другого типу — дифузії домішкової речовини.

При дослідженні процесів масопереносу домішкових речовин в об'єктах природного середовища у багатьох випадках виникає проблема оцінки впливу неоднорідної структури. Якщо розміри неоднорідностей є співмірні з розмірами тіла, то процеси дифузії, фільтрації, конвективної дифузії тощо вивчаються на основі розв'язків крайових задач математичної фізики. При цьому побудова їх точних розв'язків навіть для найпростіших геометричних областей викликає значні труднощі, тоді, як правило, використовуються наближені аналітичні [1–3] або числові [4, 5] розв'язки.

У роботах [6, 7] запропоновано метод побудови точних розв'язків контактно-крайових задач дифузії в тілах регулярної структури на основі інтегральних перетворень за просторовими змінними окремо в контактуючих областях. У даній роботі цей метод узагальнено на випадок, коли в підшарах одного з типів періодичної структури враховується конвективне перенесення. Для усталеного режиму отримано аналітичні вирази для концентрації домішкової речовини.

Постановка задачі. Нехай частинки домішкової речовини мігрують в шарі товщиною x_0, який складається з періодично розташованих областей двох типів. Поверхні, що обмежують ці області, перпендикулярні до поверхонь шару (вісь Ox перпендикулярна до поверхонь тіла, Oy — до поверхонь складових областей). При цьому області з коефіцієнтом дифузії D_1 мають ширину $2L$, а з коефіцієнтом D_2 — $2l$, крім того, в областях з коефіцієнтом дифузії D_1 масоперенос відбувається не тільки за дифузійним, а й за конвективним механізмом. Така структура має сімейство площин симетрії ($y = \pm n(L + l)$, $n = 0, 1, \dots$), які ділять навпіл сусідні контактуючі області. Тому можемо виділити елемент тіла, на вертикальних границях якого потоки в напрямку, паралельному поверхням шару (в напрямку осі Oy), дорівнюють нулю.

У стаціонарному випадку концентрація домішкової речовини $c_1^\infty(x, y)$ в області $\Omega_1 =]0; x_0[\times]0; L[$, в якій протікає процес конвективної дифузії, визначається з рівняння

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

де v — швидкість конвективного перенесення.

В області $\Omega_2 =]0; x_0[\times]L; L+l[$ концентрація частинок домішки $c_2^{\infty}(x,y)$ задовольняє рівняння дифузії

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

Приймаємо, що на поверхні шару $x=0$ підтримуються постійні значення концентрацій, а на поверхні $x=x_0$ концентрації дорівнюють нулю:

$$c_1^{\infty}|_{x=0}=c_0^{(1)}\equiv\text{const}, \qquad c_2^{\infty}|_{x=0}=c_0^{(2)}\equiv\text{const}, \qquad c_1^{\infty}|_{x=x_0}=c_2^{\infty}|_{x=x_0}=0. \tag{3}$$

На бічних поверхнях виділеного елемента $y=0$, $y=L+l$ нулю дорівнюють потоки, тобто

$$\left.\frac{\partial c_1^{\infty}(x,y)}{\partial y}\right|_{y=0}=0, \qquad \left.\frac{\partial c_2^{\infty}(x,y)}{\partial y}\right|_{y=L+l}=0. \tag{4}$$

На міжфазній границі $y=L$ реалізуються такі умови неідеального контакту, що сформульовані для функції концентрації [8]:

$$\eta_1 c_1^{\infty}(x,y)|_{y=L}=\eta_2 c_2^{\infty}(x,y)|_{y=L}, \qquad D_1\left.\frac{\partial c_1^{\infty}(x,y)}{\partial y}\right|_{y=L}=D_2\left.\frac{\partial c_2^{\infty}(x,y)}{\partial y}\right|_{y=L}, \tag{5}$$

де η_1 і η_2 — коефіцієнти концентраційної залежності хімічного потенціалу частинок в областях Ω_1 і Ω_2 відповідно.

Метод розв'язування сформульованої задачі. Розв'язок контактно-крайової задачі дифузії (1)–(5) шукаємо за допомогою інтегральних перетворень [9, 10] окремо в контактуючих областях. Для того щоб застосувати інтегральні перетворення, необхідно знати величину відповідних функцій або їхніх похідних на границях області перетворення. Тому доозначимо величину потоків маси на поверхні $y=L$, використовуючи умову (5):

$$D_1\left.\frac{\partial c_1^{\infty}}{\partial y}\right|_{y=L}=D_2\left.\frac{\partial c_2^{\infty}}{\partial y}\right|_{y=L}=g^{\infty}(x). \tag{6}$$

Тоді можемо виконати скінченні інтегральні cos-перетворення [9] в області Ω_1: $y\to y_k = k\pi/L$, $c_1^{\infty}(x,y)\to\overline{c}_1^{\infty}(x,k)$ і в області Ω_2: $y\to y_j=j\pi/l$, $c_2^{\infty}(x,y)\to\overline{c}_2^{\infty}(x,j)$. У зображеннях контактно-крайова задача (1)–(5) набуде вигляду

$$D_1\frac{d^2\overline{c}_1^{\infty}(x)}{dx^2}-v\frac{d\overline{c}_1^{\infty}(x)}{dx}-D_1 y_k^2\overline{c}_1^{\infty}(x)+(-1)^k g^{\infty}(x)=0, \tag{7}$$

$$D_2\frac{d^2\overline{c}_2^{\infty}(x)}{dx^2}-D_2 y_j^2\overline{c}_2^{\infty}(x)-g^{\infty}(x)=0, \qquad x\in]0;x_0[, \tag{8}$$

$$\overline{c}_1^{\infty}(x)|_{x=0}=a_k c_0^{(1)}, \qquad \overline{c}_2^{\infty}(x)t|_{x=0}=a_j c_0^{(2)}, \qquad \overline{c}_1^{\infty}(x)|_{x=x_0}=\overline{c}_2^{\infty}(x)|_{x=x_0}=0, \tag{9}$$

де

$$a_k=\begin{cases} L, & k=0,\\ 0, & k=1,2,\ldots,\end{cases} \qquad a_j=\begin{cases} l, & j=0,\\ 0, & j=1,2,\ldots.\end{cases}$$

За змінною x в області Ω_1 застосуємо перетворення [10]

$$\widetilde{c}_1^{\infty}(n,k)=\int\limits_0^{x_0}\overline{c}_1^{\infty}(x)e^{-\frac{vx}{2D_1}}\sin(x_nx)\,dx,\qquad \overline{c}_1^{\infty}(x)=\frac{2}{x_0}e^{\frac{vx}{2D_1}}\sum_{n=1}^{\infty}\sin(x_nx)\widetilde{c}_1^{\infty}(n,k),\tag{10}$$

а в області Ω_2 — sin-перетворення Фур'є

$$\widetilde{c}_2^{\infty}(m,j)=\int\limits_0^{x_0}\overline{c}_2^{\infty}(x)\sin(x_mx)\,dx,\qquad \overline{c}_2^{\infty}(x)=\frac{2}{x_0}\sum_{m=1}^{\infty}\sin(x_mx)\widetilde{c}_2^{\infty}(m,j),\tag{11}$$

де $x_n=n\pi/x_0$, $x_m=m\pi/x_0$. Тоді задача (7)–(9) набуде вигляду

$$\left(-\frac{v^2}{4D_1^2}-D_1(x_n^2+y_k^2)\right)\widetilde{c}_1^{\infty}+D_1x_na_kc_0^{(1)}+(-1)^k\widetilde{g}_n^{\infty}=0,$$

$$-D_2(x_m^2+y_j^2)\widetilde{c}_2^{\infty}+D_2x_ma_jc_0^{(2)}-\widetilde{g}_m^{\infty}=0.$$

Звідси знаходимо

$$\widetilde{c}_1^{\infty}=\frac{D_1x_na_kc_0^{(1)}+(-1)^k\widetilde{g}_n^{\infty}}{v_D^2+(x_n^2+y_k^2)},\qquad \widetilde{c}_2^{\infty}=\frac{D_2x_ma_jc_0^{(2)}-\widetilde{g}_m^{\infty}}{D_2(x_m^2+y_j^2)},\tag{12}$$

де $v_D=v/2D_1$.

Після застосування відповідних обернених перетворень за змінними x та y одержимо

$$c_1^{\infty}(x,y)=\frac{2}{x_0}e^{v_Dx}\sum_{n=1}^{\infty}\sin(x_nx)\left[\frac{c_0^{(1)}x_n}{\psi_n^2}+\frac{\widetilde{g}_n^{\infty}}{D_1}\widetilde{R}_n(y)\right],\tag{13}$$

$$c_2^{\infty}(x,y)=\frac{2}{x_0}\sum_{m=1}^{\infty}\sin(x_mx)\left\{\frac{c_0^{(2)}}{x_m}-\frac{\widetilde{g}_m^{\infty}}{D_2x_m}\frac{\mathrm{ch}[x_m(L+l-y)]}{\mathrm{sh}(x_ml)}\right\},\tag{14}$$

$$\widetilde{g}_n^{\infty}=\int\limits_0^{x_0}g^{\infty}(x)e^{-v_Dx}\sin(x_nx)\,dx,\qquad \widetilde{g}_m^{\infty}=\int\limits_0^{x_0}g^{\infty}(x)\sin(x_mx)\,dx,\tag{15}$$

де

$$\widetilde{R}_n(y)=\frac{1}{\psi_n}\frac{\mathrm{ch}(\psi_ny)}{\mathrm{sh}(\psi_nL)}+\frac{1-(1/L)}{\psi_n^2},\qquad \psi_n=\sqrt{v_D^2+x_n^2}.$$

У виразах (13), (14) залишаються невідомими функції $\widetilde{g}_n^{\infty}$ і $\widetilde{g}_m^{\infty}$. Шукатимемо їх з першої контактної умови (5) стрибка функції концентрації на границі розділу областей Ω_1 та Ω_2. Спочатку підставимо вирази (13), (14) в умову (5) і одержимо таке рівняння:

$$\eta_1e^{v_Dx}\sum_{n=1}^{\infty}\sin(x_nx)\left\{\frac{c_0^{(1)}x_n}{\psi_n^2}+\frac{\widetilde{g}_n^{\infty}}{D_1}R_n\right\}=\eta_2\sum_{m=1}^{\infty}\sin(x_mx)\left\{\frac{c_0^{(2)}}{x_m}-\frac{\widetilde{g}_m^{\infty}}{D_2x_m}\mathrm{cth}(x_ml)\right\},\tag{16}$$

де

$$R_n=\frac{1}{\psi_n}\mathrm{cth}(\psi_nL)+\frac{1-(1/L)}{\psi_n^2}.$$

Для знаходження зв'язку між функціями $\widetilde{g}_n^\infty$ і $\widetilde{g}_m^\infty$ розглянемо співвідношення, обернене до (15), тобто

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

Домножимо обидві частини цієї рівності на $\sin(x_m x)$ і проінтегруємо за x від 0 до x_0, тобто застосуємо скінченне інтегральне перетворення Фур'є (10) за змінною x. Маємо

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

Ліва частина цієї рівності є $\widetilde{g}_m^\infty$. Тоді після інтегрування отримаємо

$$\widetilde{g}_m^\infty = \frac{2}{x_0} \sum_{n=1}^{\infty} A_{n,m} \widetilde{g}_n^\infty, \tag{17}$$

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

$$A_{n,m} \equiv \frac{2 v_D \pi^2}{x_0^2} \frac{nm[(-1)^{n+m} e^{v_D x_0} - 1]}{\left\{v_D^2 + \dfrac{\pi^2}{x_0^2}(n-m)^2\right\}\left\{v_D^2 + \dfrac{\pi^2}{x_0^2}(n+m)^2\right\}}.$$

З іншого боку, якщо розглянемо рівність

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

і застосуємо до неї скінченне інтегральне sin-перетворення (11), отримаємо

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

Враховуючи, що за формулою (15) ліва частина цієї рівності є $\widetilde{g}_n^\infty$, одержимо

$$\widetilde{g}_n^\infty = \frac{2}{x_0} \sum_{m=1}^{\infty} B_{n,m} \widetilde{g}_m^\infty, \tag{18}$$

де

$$B_{n,m} \equiv -\frac{2 v_D \pi^2}{x_0^2} \frac{nm[(-1)^{n+m} e^{-v_D x_0} - 1]}{\left\{v_D^2 + \dfrac{\pi^2}{x_0^2}(n-m)^2\right\}\left\{v_D^2 + \dfrac{\pi^2}{x_0^2}(n+m)^2\right\}}.$$

Зазначимо також, що

$$B_{n,m} = -\frac{(-1)^{n+m} e^{-v_D x_0} - 1}{(-1)^{n+m} e^{v_D x_0} - 1} A_{n,m}.$$

Зауважимо, що, зважаючи на співвідношення (17) і (18), для знаходження розв'язку задачі необхідно визначити лише одну з функцій $\widetilde{g}_n^{\infty}$ і $\widetilde{g}_m^{\infty}$.

Подамо перший доданок у правій частині (16) у вигляді розвинення за n. Її другий доданок з урахуванням співвідношення (17) перетворимо до вигляду

$$\sum_{m=1}^{\infty}\sin(x_m x)\frac{\widetilde{g}_m^{\infty}\operatorname{cth}(x_m L)}{D_2 x_m}=\left(\frac{2}{x_0}\right)^2 e^{v_D x}\sum_{n=1}^{\infty}\sum_{m=1}^{\infty}A_{n,m}B_{n,m}\frac{\widetilde{g}_n^{\infty}\operatorname{cth}(x_m L)}{D_2 x_m}\sin(x_n x).$$

Тоді рівняння (16) можна звести до форми

$$\eta_1 e^{v_D x}\sum_{n=1}^{\infty}\sin(x_n x)\left\{\frac{c_0^{(1)}x_n}{\psi_n^2}+\frac{\widetilde{g}_n^{\infty}}{D_1}R_n\right\}=$$

$$=\eta_2\sum_{m=1}^{\infty}\frac{2}{x_0}e^{v_D x}\sum_{n=1}^{\infty}\sin(x_n x)\left\{\frac{c_0^{(2)}}{x_m}B_{n,m}-\frac{2}{x_0}\frac{\operatorname{cth}(x_m l)}{D_2 x_m}B_{n,m}A_{n,m}\widetilde{g}_n^{\infty}\right\}.$$

Звідси знаходимо

$$\widetilde{g}_n^{\infty}=\frac{D_1 D_2\left(\dfrac{2\eta_2}{x_0}c_0^{(2)}\displaystyle\sum_{m=1}^{\infty}\frac{1}{x_m}B_{n,m}-\eta_1\frac{c_0^{(1)}x_n}{\psi_n^2}\right)}{\eta_1 D_2 R_n+\eta_2 D_1\dfrac{4}{x_0^2}\displaystyle\sum_{m=1}^{\infty}\frac{\operatorname{cth}(x_m l)}{x_m}B_{n,m}A_{n,m}}. \tag{19}$$

І остаточно функції концентрації домішкової речовини (14), (15) набудуть вигляду

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

$$c_2^{\infty}(x,y)=c_0^{(2)}\left(1-\frac{x}{x_0}\right)-\frac{2}{x_0 D_2}\sum_{m=1}^{\infty}\sin(x_m x)\widetilde{g}_m^{\infty}\frac{\operatorname{ch}[x_m(L+l-y)]}{x_m\operatorname{sh}(x_m l)}.$$

Відзначимо, що для знаходження $\widetilde{g}_m^{\infty}$ використовуємо співвідношення (17) разом з виразом (19).

Таким чином, для стаціонарного випадку отримано точний аналітичний розв'язок контактно-крайової задачі дифузії домішкової речовини у двофазній регулярній структурі з урахуванням конвективної складової в одній з фаз. Для цього був запропонований метод побудови розв'язків у таких тілах, який базується на використанні окремих інтегральних перетворень у різних областях. Знайдено зв'язок між відповідними інтегральними перетвореннями за допомогою контактних умов, сформульованих для функції концентрації.

Зауважимо, зважаючи на вигляд рівнянь (1), (2), що розв'язки задачі масоперенесення в регулярних структурах можна застосовувати для вивчення процесів теплопровідності, розглядаючи ідеальні умови контакту як окремий випадок щодо наведеного в роботі.

1. *Fisher J. S.* Calculation of diffusion penetration curves for surface and grain boundary diffusion // J. Appl. Phys. – 1951. – **22**. – P. 74–77.
2. *Ху С.* Диффузия в кремнии и германии // Атомная диффузия в полупроводниках / Под ред. Д. Шоу. – Москва: Мир, 1975. – С. 248–405.

3. *Кановский И. Я., Ткаченко И. В.* Эффективный коэффициент диффузии в неоднородной среде // Укр. физ. журн. – 1991. – **36**, № 3. – С. 432–434.
4. *Savula Y. H., Koukharskiy V. M., Chaplia Y. Y.* Numerical analysis of advection diffusion in the continuum with thin canal // Numerical Heat Transfer. Part A. – 1998. – **38**, No 3. – P. 657–679.
5. *Сергиенко И. В., Скопецкий В. В., Дейнека В. С.* Математическое моделирование и исследование процессов в неоднородных средах. – Киев: Наук. думка, 1991. – 432 с.
6. *Чернуха О. Ю.* Про один метод побудови розв'язку контактно-крайових задач дифузії при мішаних граничних умовах // Доп. НАН України. – 2006. – № 1. – С. 82–87.
7. *Чапля Є. Я., Чернуха О. Ю.* Математичне моделювання дифузійних процесів у випадкових і регулярних структурах. – Киев: Наук. думка, 2009. – 302 с.
8. *Гиббс Дж.* Термодинамика. Статистическая механика. – Москва: Наука, 1982. – 584 с.
9. *Снеддон И.* Преобразования Фурье. – Москва: Изд-во иностр. лит., 1955. – 667 с.
10. *Мартыненко Н. А., Пустыльников Л. М.* Конечные интегральные преобразования и их применение к исследованию систем с распределенными параметрами. – Москва: Наука, 1986. – 304 с.

Центр математичного моделювання Інституту прикладних проблем механіки і математики ім. Я. С. Підстригача НАН України, Львів

Надійшло до редакції 25.10.2010

Y. Y. Chaplya, O. Y. Chernukha, V. A. Dmytruk

Mathematical modeling of stationary processes of convective-diffusive mass transfer in binary periodic structures

A method for constructing the analytical solutions of a contact-boundary value problem of admixture diffusion in two-phase bodies of a periodic structure with allowance for the convective mass transfer mechanism in one of the phases is proposed. The method is based on the usage of different integral transformations in the contacting regions separately. On this basis, an exact solution for the problem of mass transfer in a two-phase layer of a periodic structure is constructed for the case where there is a process of convective diffusion in the regions of one kind, and a process of admixture diffusion runs in those of another one.