

## Стаціонарні потоки маси та розподіли усереднених концентрацій домішки в періодичних структурах за мішаних граничних умов

Вероніка Дмитрук

Національний університет «Львівська політехніка», вул. С. Бандери, 12, Львів, 79013; Центр математичного моделювання Інституту прикладних проблем механіки і математики ім. Я. С. Підстригача НАН України, вул. Д. Дудасєва, 15, Львів, 79005, e-mail: dmytruk15@gmail.com

*Процеси стаціонарної конвективної дифузії домішкової речовини досліджені у двофазному шарі періодичної структури, якщо конвективний механізм масоперенесення враховується в одній із фаз, а на поверхнях шару задані мішані умови. На основі побудованого точного аналітичного розв'язку контактної-крайової задачі конвективної дифузії знайдені та досліджені потоки домішки через довільну поверхню тіла, а також усереднену за шириною виділеного елемента тіла концентрацію. Показано, що врахування конвективного механізму переносу частинок призводить до зростання потоку маси в околі поверхні шару, де діє джерело маси в області конвективної дифузії, та біля іншої поверхні тіла в області дифузії частинок.*

**Ключові слова:** дифузія, конвекція, потоки маси, періодична структура, мішані граничні умови.

**Вступ.** Під час дослідження процесів масоперенесення в пористих середовищах, що складаються з монокристалів і каналів швидкого переміщення частинок, наприклад у ґрунтах, виникає необхідність розв'язання контактної-крайових задач процесів масоперенесення у кусково-однорідних системах, у тому числі просто-рówno регулярних [1-3]. Для розв'язування задач дифузії у таких середовищах було запропоновано метод, який базується на використанні інтегральних перетворень за просторовими змінними окремо в контактуючих областях [4, 5]. У працях [6, 7] цей метод узагальнено на випадок, якщо в підшарах одного з типів періодичної структури враховується як дифузійне, так і конвективне перенесення, а в інших — лише дифузійний механізм масоперенесення. При цьому задавалися граничні умови першого роду на концентрацію, яка набуває різних значень на «верхній» поверхні структурних елементів тіла.

У пропонованому дослідженні для двофазного шару регулярної структури вивчаються стаціонарні процеси дифузії з урахуванням конвективного механізму масоперенесення в одній із фаз за мішаних граничних умов. Записано вирази для концентрації мігруючої речовини, отримано співвідношення для дифузійних потоків через довільний переріз тіла, досліджено усереднену за шириною виділеного елемента тіла концентрацію та проведено їх числовий аналіз.

## 1. Об'єкт дослідження та формулювання задачі

Нехай тіло, яке займає область шару завтовшки  $x_0$ , складається з періодично розташованих областей двох типів. Поверхні, що обмежують ці області, перпендикулярні до поверхонь шару (рис. 1а) (вісь  $Ox$  перпендикулярна до поверхонь тіла,  $Oy$  — до бічних поверхонь областей). Приймаємо, що на верхній границі шару  $x = 0$  в областях одного типу  $\Omega_1$  концентрація домішкової дифундуючої речовини зберігає постійне значення, а на поверхні областей іншого типу  $\Omega_2$  підтримується постійне значення потоку цієї речовини. На нижній поверхні  $x = x_0$  в області  $\Omega_1$  домішка відсутня, а в області  $\Omega_2$  приймає певне значення, відоме та стале. При цьому області з коефіцієнтом дифузії  $D_1$  мають ширину  $2L$ , а з коефіцієнтом  $D_2$  —  $2l$ . В областях із коефіцієнтом дифузії  $D_1$  масоперенесення відбувається не тільки за дифузійним, а й конвективним механізмом із коефіцієнтом конвективного перенесення  $v$ , який вважаємо відомим і сталим. Така структура має сімейство площин симетрії ( $y = \pm n(L + l)$ ,  $n = 0, 1, 2, \dots$ ), які ділять навпіл сусідні контактуючі області. Тому можемо виділити елемент тіла, на вертикальних границях якого потоки в напрямку, паралельному до поверхонь шару (в напрямку осі  $Oy$ ), дорівнюють нулю (рис. 1б).

У стаціонарному випадку концентрації домішкової речовини  $c_1^\infty(x, y)$  в області  $\Omega_1 = ]0; x_0[ \times ]0; L[$  та  $c_2^\infty(x, y)$  в області  $\Omega_2 = ]0; x_0[ \times ]L; L + l[$  визначаються з рівнянь

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

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

Граничні умови мають вигляд

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

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

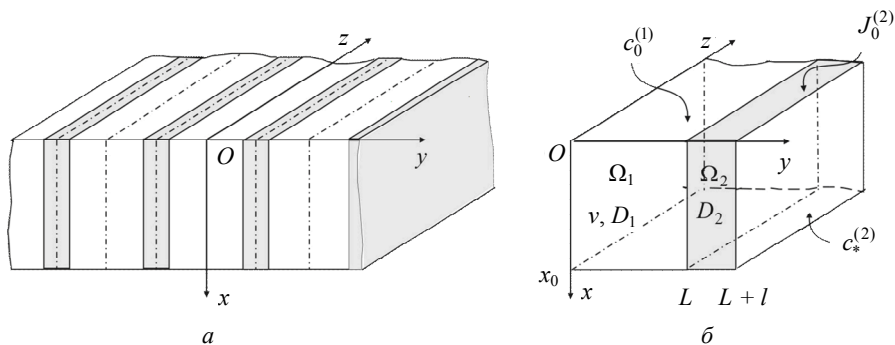


Рис. 1. Періодична структура тіла (а) та виділений елемент тіла такої структури (б)

На бічних поверхнях виділеного елемента  $y = 0, y = L + l$  умови такі

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

На межі  $y = L$  задаємо умови неідеального контакту для функції концентрації у вигляді [4, 8]

$$\eta_1 c_1^\infty(x, y) \Big|_{y=L} = \eta_2 c_2^\infty(x, y) \Big|_{y=L}, \quad D_1 \left. \frac{\partial c_1^\infty(x, y)}{\partial y} \right|_{y=L} = D_2 \left. \frac{\partial c_2^\infty(x, y)}{\partial y} \right|_{y=L}, \quad (6)$$

де  $\eta_1$  і  $\eta_2$  ( $\eta_1 \neq \eta_2$ ) — коефіцієнти концентраційної залежності хімічного потенціала частинок в областях  $\Omega_1$  і  $\Omega_2$  відповідно.

## 2. Побудова аналітичного розв'язку задачі

Розв'язок контактної-крайової задачі (1)-(6) будемо шукати з допомогою інтегральних перетворень за просторовими змінними окремо в контактуючих областях [6]. Для того, щоб застосувати перетворення Фур'є необхідно знати значення відповідних функцій або їхніх похідних на границях області перетворення [9]. Якщо  $y = 0$  і  $y = L + l$ , то граничні умови (5) визначають значення функцій  $\partial c_1^\infty / \partial y$  і  $\partial c_2^\infty / \partial y$  на границях областей  $\Omega_1$  та  $\Omega_2$ . На інших границях областей  $\Omega_1$  і  $\Omega_2$  (поверхнях контакту) величини  $\partial c_i^\infty / \partial y$  невідомі. Доозначимо їх, враховуючи другу контактну умову (6). Вона означає, що на границі контакту  $y = L$  масові потоки рівні між собою та дорівнюють деякій функції  $g^\infty(x)$ , тобто

$$D_1 \left. \frac{\partial c_1^\infty}{\partial y} \right|_{y=L} = D_2 \left. \frac{\partial c_2^\infty}{\partial y} \right|_{y=L} = g^\infty(x). \quad (7)$$

Тоді за змінною  $y$  можемо виконати скінченне інтегральне косинус-перетворення в області  $\Omega_1$  [9]:  $y \rightarrow y_k = k\pi/L$ ,  $c_1^\infty(x, y) \rightarrow \bar{c}_1^\infty(x, k)$ , та косинус-перетворення із зсувом в області  $\Omega_2$  [4]:  $y \rightarrow y_j = j\pi/l$ ,  $c_2^\infty(x, y) \rightarrow \bar{c}_2^\infty(x, j)$ . За змінною  $x$  в області  $\Omega_1$  було застосовано таке інтегральне перетворення [10]

$$\bar{c}_1^\infty(n, k) = \int_0^{x_0} \tilde{c}_1^\infty(x, k) e^{-\frac{\nu x}{2D_1}} \sin(x_n x) dx, \quad (8a)$$

$$\tilde{c}_1^\infty(x, k) = e^{\frac{\nu x}{2D_1}} \sum_{n=1}^{\infty} \bar{c}_1^\infty(n, k) \sin(x_n x), \quad (8б)$$

де  $x_n = n\pi/x_0$ , а в області  $\Omega_2$

$$\bar{c}_1^\infty(m, j) = \int_0^{x_0} \tilde{c}_2^\infty(x, j) \cos(x_m x) dx, \quad (9a)$$

$$\tilde{c}_1^\infty(x, j) = \frac{2}{x_0} \sum_{m=1}^{\infty} \bar{c}_2^\infty(m, j) \cos(x_m x), \quad (9b)$$

де  $x_m = (2m - 1)\pi / 2x_0$ .

У підсумку отримуємо розв'язок задачі (1)-(6) у зображеннях у вигляді

$$\bar{c}_1^\infty(n, k) = \frac{1}{v_D^2 + x_n^2 + y_k^2} \left[ D_1 a_k c_0^{(1)} x_n + (-1)^k \bar{g}_n^\infty \right] \quad \text{в області } \Omega_1; \quad (10)$$

$$\bar{c}_2^\infty(m, j) = - \frac{\bar{g}_m^\infty + D_2 a_j \left[ J_0^{(2)} + (-1)^m x_m c_*^{(2)} \right]}{D_2 (x_m^2 + y_j^2)} \quad \text{в області } \Omega_2. \quad (11)$$

Тут  $v_D = \frac{v}{2D_1}$ ,  $a_k = \begin{cases} L, & k = 0 \\ 0, & k = 1, 2, \dots \end{cases}$ ,  $a_j = \begin{cases} l, & j = 0 \\ 0, & j = 1, 2, \dots \end{cases}$ ; а також

$$\bar{g}_n^\infty = \int_0^{x_0} g^\infty(x) e^{-v_D x} \sin(x_n x) dx, \quad \bar{g}_m^\infty = \int_0^{x_0} g^\infty(x) \cos(x_m x) dx. \quad (12)$$

Зауважимо, що інтегральні перетворення, обернені до (12), такі

$$g^\infty(x) = \frac{2}{x_0} e^{v_D x} \sum_{n=1}^{\infty} \bar{g}_n^\infty \sin(x_n x), \quad g^\infty(x) = \frac{2}{x_0} \sum_{m=1}^{\infty} \bar{g}_m^\infty \cos(x_m x). \quad (13)$$

У результаті застосування відповідних обернених інтегральних перетворень (8б) та (9б) функції концентрації домішкової речовини (10), (11) набудуть вигляду

$$c_1^\infty(x, y) = \frac{2}{x_0} e^{v_D x} \sum_{n=1}^{\infty} \sin(x_n x) \left( \frac{c_0^{(1)} x_n}{\Psi_n^2} + \frac{\bar{g}_n^\infty}{D_1} \tilde{R}_n(y) \right), \quad (14)$$

$$c_2^\infty(x, y) = \frac{2}{x_0} \sum_{m=1}^{\infty} \cos(x_m x) \left[ \frac{1}{x_m^2} \left( (-1)^{m+1} x_m c_*^{(2)} - J_0^{(2)} \right) - \frac{\bar{g}_m^\infty}{D_2 x_m} \tilde{P}_m(y) \right], \quad (15)$$

де  $\tilde{R}_n(y) = \frac{\cos(\Psi_n y)}{\Psi_n \sin(\Psi_n L)} + \left( \frac{1}{\Psi_n^2} - \frac{1}{\Psi_n^2 L} \right)$ ,  $\tilde{P}_m(y) = \frac{\cos[x_m(L+l-y)]}{\sin(x_m l)} - \frac{2}{lx_m}$ ,  $\Psi_n = \sqrt{v_D^2 + x_n^2}$ .

Зауважимо, що у виразах (14), (15) залишилися невідомими функції  $\bar{g}_n^\infty$  і  $\bar{g}_m^\infty$  відповідно. Знаходимо їх, врахувавши (7) та використавши першу контактну умову (6) стрибка функції концентрації на межі областей  $\Omega_1$  та  $\Omega_2$  і співвідношень (13). Застосуємо до першого співвідношення (13) інтегральне перетворення (9а).

Тоді отримаємо зв'язок між  $\bar{g}_n^\infty$  і  $\bar{g}_m^\infty$

$$\bar{g}_m^\infty = \frac{1}{x_0} \sum_{n=1}^{\infty} A_{n,m} \bar{g}_n^\infty, \quad (16)$$

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

З іншого боку, якщо розглянути друге співвідношення (13) і застосувати до нього інтегральне перетворення (8а), то отримаємо

$$\bar{g}_n^\infty = \frac{1}{x_0} \sum_{m=1}^{\infty} B_{n,m} \bar{g}_m^\infty, \quad (17)$$

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

Підставляємо вирази (14), (15) у першу умову (6) і одержуємо таке рівняння

$$\begin{aligned} \eta_1 e^{v_D x} \sum_{n=1}^{\infty} \sin(x_n x) \left\{ \frac{c_0^{(1)} x_n}{\psi_n^2} + \frac{\bar{g}_n^\infty}{D_1} \left[ \frac{\cos(\psi_n L)}{\psi_n} + \left(1 - \frac{1}{L}\right) \frac{1}{\psi_n^2} \right] \right\} = \\ = -\frac{\eta_2}{l} \sum_{m=1}^{\infty} \cos(x_m x) \left\{ \frac{l}{x_m^2} \left[ J_0^{(2)} + (-1)^m x_m c_*^{(2)} \right] - \frac{2\bar{g}_m^\infty}{D_2 x_m^2} + \frac{\bar{g}_m^\infty l}{D_2 x_m} \cos(x_m l) \right\}, \quad (18) \end{aligned}$$

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

Праву частину рівняння (18) подаємо у вигляді розвинення за  $\sin(x_n x)$  із множником  $e^{v_D x}$ , тобто використаємо перетворення (8б). Розв'язуючи отримане рівняння з урахуванням співвідношень (8а), (16), (17), знаходимо  $\bar{g}_n^\infty$

$$\bar{g}_n^\infty = \frac{1}{x_0} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{r_{n,m} - a_m B_{n,m}}{b_n - S_m}. \quad (19)$$

Тут

$$\begin{aligned} r_{n,m} = -\frac{2l}{x_m^2} \left[ J_0^{(2)} + (-1)^m x_m c_*^{(2)} \right] B_{n,m}, \quad a_m = \frac{1}{x_0} \sum_{n=1}^{\infty} a_n A_{n,m}, \quad a_n = \frac{\eta_1 c_0^{(1)}}{\eta_2 \psi_n^2}; \\ b_n = \frac{\eta_1}{\eta_2 D_1} \left[ \frac{\cos(\psi_n L)}{\psi_n} + \left(1 - \frac{1}{L}\right) \frac{1}{\psi_n^2} \right], \quad S_m = -\frac{2}{D_2 x_m} \left[ \frac{2}{x_m} + l \cos(x_m l) \right]. \end{aligned}$$

І остаточно функції концентрації домішки (14), (15) набудуть вигляду

$$c_1^\infty(x, y) = e^{v_D x} \left\{ c_0^{(1)} \frac{\sin[v_D(x_0 - x)]}{\sin(v_D x_0)} + \frac{2}{x_0 D_1} \sum_{n=1}^{\infty} \sin(x_n x) \bar{g}_n^\infty \tilde{R}_n(y) \right\}, \quad (20)$$

$$c_2^\infty(x, y) = \frac{2}{x_0} \sum_{m=1}^{\infty} \cos(x_m x) \left\{ \frac{1}{x_m^2} [(-1)^{m+1} x_m c_*^{(2)} - J_0^{(2)}] - \frac{\bar{g}_m^\infty}{D_2 x_m} \tilde{P}_m(y) \right\}. \quad (21)$$

### 3. Потоки маси домішкової речовини

Отримання аналітичних розв'язків контактної-крайової задачі конвективної дифузії дає можливість знайти потоки маси домішкових частинок через довільні поверхні  $x = x_*$  і  $y = y_*$ . Ці потоки визначаються за формулами:

в області  $\Omega_1$

$$J_{*x}^{(1)}(y) = -D_1 \left. \frac{\partial c_1^\infty(x, y)}{\partial x} + v c_1^\infty(x, y) \right|_{x=x_*}, \quad J_{*y}^{(1)}(x) = -D_1 \left. \frac{\partial c_1^\infty(x, y)}{\partial y} \right|_{y=y_*}; \quad (22)$$

в області  $\Omega_2$

$$J_{*x}^{(2)}(y) = -D_2 \left. \frac{\partial c_2^\infty(x, y)}{\partial x} \right|_{x=x_*}, \quad J_{*y}^{(2)}(x) = -D_2 \left. \frac{\partial c_2^\infty(x, y)}{\partial y} \right|_{y=y_*}. \quad (23)$$

Підставляємо відповідні вирази (20), (21) для концентрацій  $c_i^\infty(x, y)$  у співвідношення (22), (23). В області  $\Omega_1$  одержимо потік домішкових частинок через поверхню  $x = x_*$

$$J_{*x}^{(1)}(y) \Big|_{x=x_*} = \frac{v c_0^{(1)}}{1 - e^{-v_D x_0}} + e^{v_D x_*} \frac{2}{x_0} \sum_{n=1}^{\infty} \tilde{g}_n^\infty \tilde{R}_n(y) [v_D \sin(x_n x_*) - x_n \cos(x_n x_*)], \quad (24)$$

зокрема, потік через «нижню» границю шару  $x = x_0$

$$J_{0x}^{(1)}(y) \Big|_{x=x_0} = \frac{v c_0^{(1)}}{1 - e^{-v_D x_0}} - \frac{2}{x_0} e^{v_D x_0} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n x_n \tilde{g}_n^\infty \tilde{R}_n(y); \quad (25)$$

потік домішкових частинок через поверхню  $y = y_*$

$$J_{*y}^{(1)}(x) \Big|_{y=y_*} = -\frac{2}{x_0} e^{v_D x_0} \sum_{n=1}^{\infty} \tilde{g}_n^\infty \frac{\text{sh}(\Psi_n y_*)}{\text{sh}(\Psi_n L)} \sin(x_n x). \quad (26)$$

В області  $\Omega_2$  маємо потік домішкової речовини через поверхню  $x = x_*$

$$J_{*x}^{(2)}(y) \Big|_{x=x_*} = -D_2 J_0^{(2)} - \frac{2}{l x_0} \sum_{m=1}^{\infty} \bar{g}_m^\infty \sin(x_m x_*) \left[ l \frac{\text{ch}[x_m(L + l - y)]}{\text{sh}(x_m l)} - \frac{2}{x_m} \right], \quad (27)$$

зокрема, потік через границю шару  $x = x_0$  одержимо, якщо в (27) підставимо  $x_0$

$$J_{0x}^{(2)}(y)\Big|_{x=x_0} = -D_2 J_0^{(2)} - \frac{2}{lx_0} \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^m \bar{g}_m^{\infty} \left[ l \frac{\text{ch}[x_m(L+l-y)]}{\text{sh}(x_m l)} - \frac{2}{x_m} \right]; \quad (28)$$

потік домішкових частинок через поверхню  $y = y_*$

$$J_{*y}^{(2)}(x)\Big|_{y=y_*} = -\frac{2}{x_0} \sum_{m=1}^{\infty} \bar{g}_m^{\infty} \frac{\text{sh}[x_m(L+l-y_*)]}{\text{sh}(x_m l)} \cos(x_m x). \quad (29)$$

Таким чином ми отримали вирази для потоків маси через довільний переріз тіла.

Для ілюстрації на рис. 2 наведені характерні розподіли потоків маси через вертикальні перерізи тіла та нижню границю шару. Числові розрахунки проводилися в безрозмірних змінних  $\xi = (k_2/D_1)^{1/2} x$ ,  $\zeta = (k_2/D_1)^{1/2} y$  [4]. Прийнято такі значення параметрів задачі:  $\xi_0 = 10$ ;  $\Lambda = (k_2/D_1)^{1/2} L = 0,1$ ;  $\lambda = (k_2/D_1)^{1/2} l = 0,9$ ;  $d = D_2/D_1 = 0,01$ ,  $\eta_1/\eta_2 = 0,1$ ;  $J_0^{(2)} = -0,2$ ;  $c_*^{(2)} = 0,1$ . Розподіли потоків домішкових частинок  $J_{*\zeta}^{(1)}(\xi)$  через різні поверхні  $\zeta = \zeta_*$  в області  $\Omega_1$  обчислювалися за формулою (26), а  $J_{*\zeta}^{(2)}(\xi)$  в області  $\Omega_2$  — за формулою (29). Потоки маси через нижню границю шару пора-

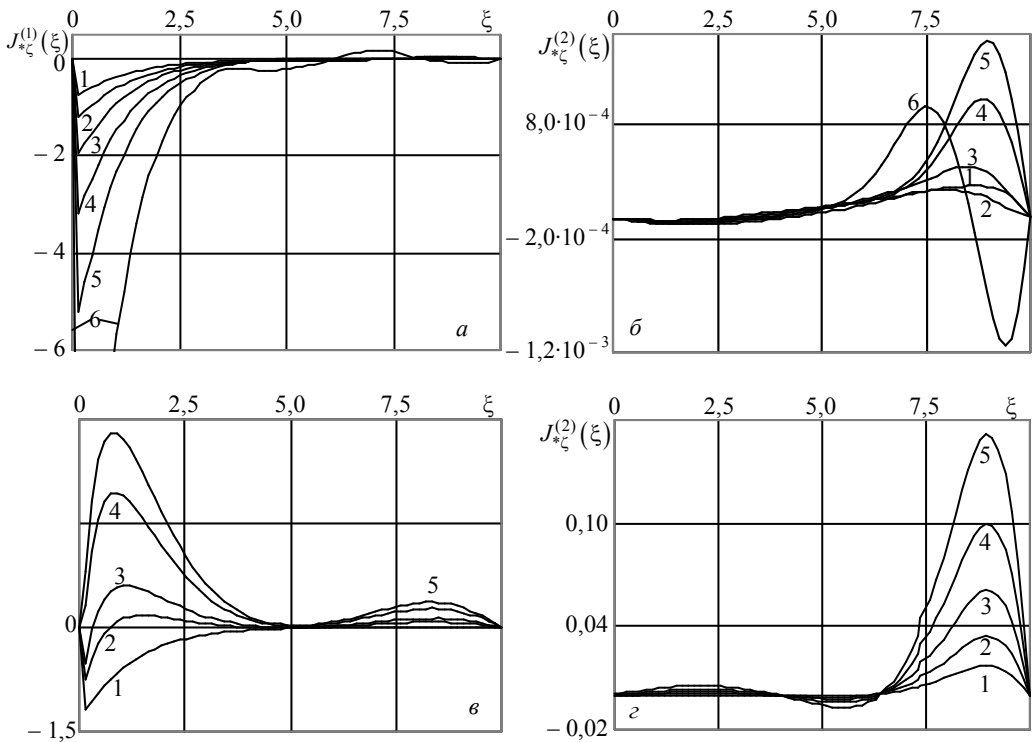


Рис. 2. Розподіли потоків домішкових частинок  $J_{*\zeta}^{(1)}(\xi)$  (а) і  $J_{*\zeta}^{(2)}(\xi)$  (б) залежно від швидкості конвективного перенесення, відношень коефіцієнтів концентраційної залежності хімічних потенціалів (в) та коефіцієнтів дифузії (г)

ховані за формулами (25) і (28). На рис. 2 показано залежність функції  $J_{*\zeta}^{(i)}(\xi)$  від різних значень швидкості конвективного переносу  $\hat{v} = (k_2 D_1)^{-1/2} v$  посередині області  $\Omega_1$  ( $\zeta = 0,05$ , рис. 2а) та посередині області  $\Omega_2$  ( $\zeta = 0,5$ , рис. 2б). Криві 1-6 відповідають значенням  $\hat{v} = 1,4; 1,5; 1,6; 1,8; 1,9; 2,0$ . На рис. 2в проілюстровано залежність функції  $J_{*\zeta}^{(i)}(\xi)$  від відношення  $\eta_1/\eta_2$  коефіцієнтів концентраційної залежності хімічних потенціалів і на рис. 2г — від коефіцієнта дифузії  $d$ .

Зазначимо, що наявність в одній з областей конвективного механізму перенесення маси суттєво впливає на поведінку та значення функції потоку домішки. Збільшення значення швидкості конвективного перенесення (рис. 2а) призводить до різкого зростання абсолютного значення функції потоку  $J_{*\zeta}^{(i)}(\xi)$  біля «верхньої» межі шару  $\xi = 0$ , де діє джерело маси, в області  $\Omega_1$ . У подальшому спостерігається таке ж стрімке зменшення та коливання у межах похибки на більшій частині ( $\xi \in [4; 10]$ , рис. 2а) досліджуваного перерізу тіла. Інтенсивність потоку маси в області  $\Omega_2$ , де не враховано конвективного складника, зростає біля «нижньої» границі тіла  $\xi = \xi_0$  (рис. 2б). Більшим значенням швидкості конвективного перенесення відповідають більші значення функції потоку як в області  $\Omega_1$ , так і в області  $\Omega_2$ , але збільшення коефіцієнта  $\hat{v}$  на порядок призводить до зростання  $J_{*\zeta}^{(i)}(\xi)$  на два порядки в області  $\Omega_1$  (рис. 2а) та в рази — в області  $\Omega_2$  (рис. 2б). Характери екстремумів також відрізняються — в області  $\Omega_1$  вони пікоподібної форми, а в області  $\Omega_2$  — більш згладжені.

Зауважимо, що з параметрів задачі найбільше впливає на функцію потоку домішки (як якісно, так і кількісно) відношення коефіцієнтів концентраційної залежності хімічного потенціалу  $\eta_1/\eta_2$ , які визначають стрибок функції концентрації на межі контакту. Так, зі збільшенням значення відношення  $\eta_1/\eta_2$  результуюча потоку змінює свій напрямок одразу ж від поверхні, де діє джерело маси, причому для малих значень  $\eta_1/\eta_2$  (криві 1-3, рис. 2в) спостерігається стрімке зростання абсолютного значення потоку маси, досягнення свого екстремуму (для  $\xi \approx 1$ ), потім різке зменшення та перехід в область  $\Omega_2$ . Із подальшим зростанням значень  $\eta_1/\eta_2$  спостерігається поява другого локального максимуму функції  $J_{*\zeta}^{(i)}(\xi)$  в нижній частині області тіла (крива 5, рис. 2в). В області  $\Omega_2$  цей параметр впливає на потік тільки кількісно — більшим значенням  $\eta_1/\eta_2$  відповідають більші абсолютні значення  $J_{*\zeta}^{(2)}(\xi)$  (рис. 2г).

Під час дослідження впливу геометричних параметрів виділеного тіла на потік домішки встановлено, що зі збільшенням ширини області  $\Omega_1$  (параметр  $\Lambda$ ) і відповідним зменшенням ширини області  $\Omega_2$  (величина  $\lambda$ ), абсолютне значення потоку домішки через вертикальний переріз в області  $\Omega_1$  зменшується в рази та відбувається згладження функції  $J_{*\zeta}^{(1)}(\xi)$  в околі екстремальних значень.

#### 4. Усереднена концентрація домішки в періодичних бінарних структурах

Дослідимо усереднену за змінною  $y$  функцію сумарної концентрації домішкової речовини. Вона вводиться таким чином



$$\langle c^\infty(x) \rangle = \frac{1}{L+l} \int_0^L c_1^\infty(x, y) dy + \frac{1}{L+l} \int_L^{L+l} c_2^\infty(x, y) dy. \quad (30)$$

Підставивши вирази (20), (21) для концентрацій  $c_1^\infty$  в області  $\Omega_1$  і  $c_2^\infty$  в області  $\Omega_2$  у співвідношення (30), одержимо

$$\langle c^\infty(x) \rangle = \frac{1}{L+l} \left\{ \frac{2}{x_0} l \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{x_m^2} \left[ (-1)^{m+1} x_m c_*^{(2)} - J_0^{(2)} \right] \cos(x_m x) + e^{v_D x} c_0^{(1)} L \frac{\text{sh}[v_D(x_0 - x)]}{\text{sh}(v_D x_0)} + \frac{2e^{v_D x} L}{D_1 x_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\bar{g}_n^\infty}{\Psi_n^2} \sin(x_n x) + \frac{2}{D_2 x_0} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\bar{g}_m^\infty}{x_m^2} \cos(x_m x) \right\}. \quad (31)$$

Введемо параметр  $\alpha = l/L$  і спрямуємо  $l$  до 0 при  $\alpha \equiv \text{const}$ . Маємо

$$\lim_{l \rightarrow 0} \langle c^\alpha(x) \rangle = \frac{1}{1+\alpha} e^{v_D x} c_0^{(1)} \frac{\text{sh}[v_D(x_0 - x)]}{\text{sh}(v_D x_0)} + \frac{2e^{v_D x}}{(1+\alpha)D_1 x_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\Psi_n^2} \sin(x_n x) \lim_{l \rightarrow 0} \bar{g}_n^\alpha + \frac{2\alpha}{(1+\alpha)x_0} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\cos(x_m x)}{x_m^2} \left[ (-1)^{m+1} x_m c_*^{(2)} - J_0^{(2)} + \frac{l}{D_2} \lim_{l \rightarrow 0} \bar{g}_m^\alpha \right].$$

Враховуючи (19),

$$\bar{g}_n^\alpha = \frac{1}{x_0} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{r_{n,m} - a_m B_{n,m}}{b_n^\alpha - S_m}, \quad \bar{g}_m^\alpha = \frac{1}{x_0} \sum_{n=1}^{\infty} A_{n,m} \bar{g}_n^\alpha, \\ b_n^\alpha = \frac{\eta_1}{\eta_2 D_1} \left[ \frac{\text{cth}(l/\alpha \Psi_n)}{\Psi_n} + \left( 1 - \frac{\alpha}{l} \right) \frac{1}{\Psi_n^2} \right].$$

Оскільки

$$g_n^0 = \lim_{l \rightarrow 0} \bar{g}_n^\alpha = \frac{D_1 D_2 \eta_1 \Psi_n^2}{x_0 l} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{r_{n,m} x_m^2}{D_2 \eta_1 x_m^2 - 2D_1 \eta_2 \Psi_n^2}, \\ g_m^0 = \lim_{l \rightarrow 0} \frac{1}{x_0} \sum_{n=1}^{\infty} A_{n,m} \frac{D_1 D_2 \eta_2 \Psi_n^2}{x_0 l} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{r_{n,m} x_m^2}{D_2 \eta_1 x_m^2 - 2D_1 \eta_2 \Psi_n^2},$$

то

$$\lim_{l \rightarrow 0} \langle c^\alpha(x) \rangle = \frac{1}{1+\alpha} e^{v_D x} c_0^{(1)} \frac{\text{sh}[v_D(x_0 - x)]}{\text{sh}(v_D x_0)} + \frac{2e^{v_D x}}{(1+\alpha)D_1 x_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{g_n^0}{\Psi_n^2} \sin(x_n x) + \frac{2\alpha}{(1+\alpha)x_0} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\cos(x_m x)}{x_m^2} \left[ (-1)^{m+1} x_m c_*^{(2)} - J_0^{(2)} + \frac{l}{D_2} g_m^0 \right].$$

### 5. Числовий аналіз розподілів усередненої концентрації

Ілюстрації розподілів концентрації домішкової речовини, усередненої за шириною виділеного елемента тіла, які обчислені за формулою (31), подані на рис. 3. На рис. 3а і 3б наведені розподіли усередненої концентрації для різних значень швидкості конвективного перенесення  $\hat{v}=0,1; 0,2; 0,3; 0,4; 0,5$  (рис. 3а — криві 1-5) і  $\hat{v}=2; 2,1; 2,2; 2,3; 2,4$  (рис. 3б — криві 1-5). На рис. 3в і 3г показано залежність функції  $\langle c^\infty(\xi) \rangle$  від різних значень безрозмірного коефіцієнта дифузії  $d$  та різних значень потоку домішки на поверхні області  $\Omega_2$ . Тут криві 1-5 відповідають  $d = 0,01; 0,03; 0,05; 0,07; 0,09$  (рис. 3а) і  $J_0^{(2)} = 0,1; 0,2; 0,3; 0,5; 0,9$  (рис. 3б).

Зазначимо, що для великих значень швидкості конвективного перенесення спостерігається стрімке зростання функції  $\langle c^\infty(\xi) \rangle$  біля «нижньої» поверхні тіла, причому зростання є тим більшим, чим більша швидкість конвективного перенесення (рис. 3б). Для малих значень  $\hat{v}$  можлива поява явно вираженого приповерхневого максимуму функції усередненої концентрації (рис. 3а). Такі параметри, як відношення коефіцієнтів дифузії та інтенсивність потоку домішки на поверхні області  $\Omega_2$ , значно впливають на усереднену концентрацію. Із зростанням коефіцієнта  $d$  та потоку  $J_0^{(2)}$  відбувається збільшення усередненої концентрації

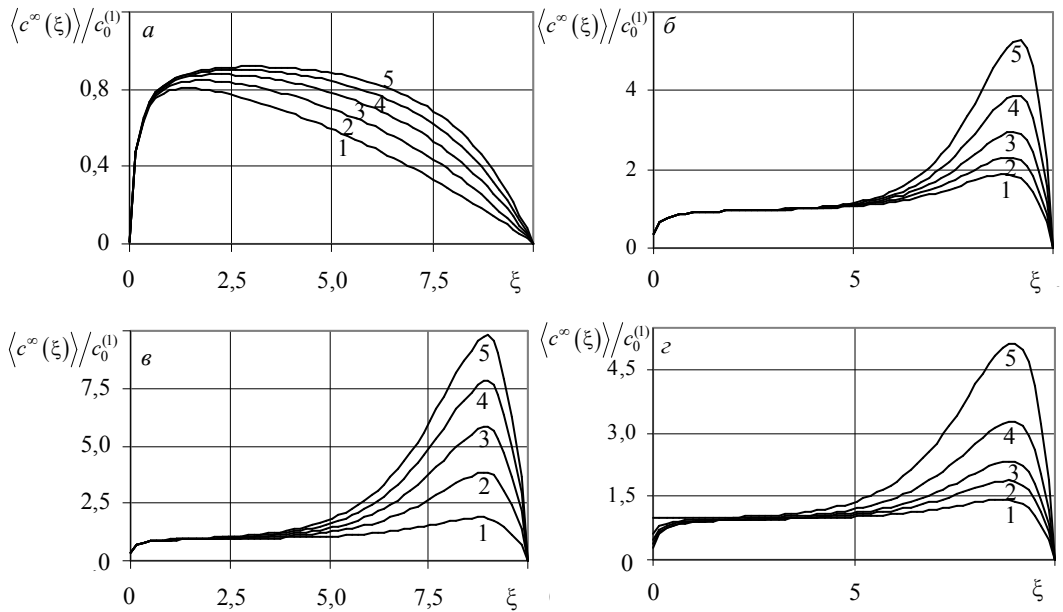


Рис. 3. Залежність усередненої концентрації від великих (а) і малих (б) значень швидкості конвективного перенесення та різних значень відношення коефіцієнтів дифузії (с) та потоку домішки на поверхні області  $\Omega_2$  (г)

мігруючих частинок на більшій частині проміжку  $\xi \in [3; 10]$  (рис. 3в та 3г). Проте, якщо для малих  $\hat{v}$  таке зменшення незначне, то для великих значень  $\hat{v}$  вплив цих коефіцієнтів на функцію суттєво підвищується.

**Висновки.** Для стаціонарного випадку розглянуто контактну-крайову задачу конвективної дифузії домішкової речовини у двофазній регулярній структурі з урахуванням конвективного складника в одній із фаз за мішаних контактних умов. Точний аналітичний розв'язок задачі побудовано за допомогою інтегральних перетворень, спеціальних для кожної контактуючої області. Зв'язок між інтегральними перетвореннями знайдено з умови стрибка концентрації на межі контакту. Одержані вирази для потоків мігруючих частинок через довільну поверхню тіла, а також отримано формулу усередненої по ширині виділеного елемента тіла концентрації мігруючих частинок. Проведено числовий аналіз, який показав, що в області конвективної дифузії відбувається значне зростання потоку маси в околі поверхні шару, де діє джерело маси, і біля іншої поверхні тіла в області дифундування частинок.

Числовий аналіз розподілів потоків домішкових частинок через довільні перерізи тіла й усередненої концентрації в контактуючих елементах тіла є перспективою подальших досліджень.

## Література

- [1] Fisher, J. S. Calculation of diffusion penetration curves for surface and grain boundary diffusion / J. S. Fisher // J. Appl. Phys. — 1951. — Vol. 22. — P. 74-77.
- [2] Ху, С. Диффузия в кремнии и германии; в кн.: Атомная диффузия в полупроводниках; под ред. Д. Шоу / С. Ху. — Москва: Мир, 1975. — С. 248-405.
- [3] Сергиенко, И. В. Математическое моделирование и исследование процессов в неоднородных средах / И. В. Сергиенко, В. В. Скопецкий, В. С. Дейнека. — Киев: Наук. думка, 1991. — С. 432.
- [4] Чапля, С. Я. Математичне моделювання дифузійних процесів у випадкових і регулярних структурах / С. Я. Чапля, О. Ю. Чернуха. — Киев: Наук. думка, 2009. — 302 с.
- [5] Chaplya, Y. Mathematical Modelling Diffusion of Decaying Particles in Regular Structures / Y. Chaplya, O. Chernukha // Reviews on Advanced Materials Science. — 2010. — Vol. 23(1). — P. 21-31.
- [6] Чапля, С. Я. Математичне моделювання стаціонарних процесів дифузії у двофазних тілах регулярної структури з урахуванням конвективного переносу в одній з фаз / С. Я. Чапля, О. Ю. Чернуха, В. А. Дмитрук // Машинознавство. — 2010. — № 5. — С. 10-15.
- [7] Чернуха, О. Ю. Моделювання граничних випадків контактної-крайової задачі стаціонарної конвективної дифузії в періодичних структурах / О. Ю. Чернуха, В. С. Гончарук, В. А. Дмитрук // Моделювання та інформаційні технології. — 2010. — № 55. — С. 141-150.
- [8] Мюнстер, А. Химическая термодинамика / А. Мюнстер. — Москва: Мир, 1971. — 296 с.
- [9] Снеддон, И. Преобразование Фурье. — Москва: Изд-во иностр. литературы, 1955. — 667 с.
- [10] Мартыненко, Н. А. Конечные интегральные преобразования и их применение к исследованию систем с распространенными параметрами / Н. А. Мартыненко, Л. М. Пустыльников. — Москва: Наука, 1986. — 304 с.

Вероніка Дмитрук

Стационарні потоки маси та розподіли усереднених концентрацій домішки в періодичних ...

## **Mass flows in the steady-state regime and averaged concentration distributions in periodical structures under mixed conditions**

Veronika Dmytruk

*The processes of convective diffusion of admixture in the steady-state regime are investigated in a two-phase layer of periodical structure when convective mechanism is allowed for in one type of the phases and mixed boundary conditions are given on the layer surfaces. On the basis of constructed exact analytic solution of the contact-boundary value problem of convective diffusion there are obtained and investigated the admixture flows through any section of the body and the width-averaged concentration. It is shown that the allowance for the convective mechanism of mass transfer leads to increasing mass flow near the surface of the layer, where the mass source acts, in the region of convective diffusion and near another body surface in the domain of particle diffusion.*

## **Стационарные потоки массы и распределения усредненных концентраций примеси в периодических структурах при смешанных граничных условиях**

Вероника Дмитрук

*Процессы стационарной конвективной диффузии примеси изучены в двухфазном слое периодической структуры, если конвективный механизм массопереноса учитывается в одной из фаз, а на поверхностях слоя заданы граничные условия. На основании построенного точного аналитического решения контактно-краевой задачи конвективной диффузии найдены и исследованы потоки примеси через произвольную поверхность тела, а также усредненная по ширине выделенного элемента тела концентрация. Продемонстрировано, что учет конвективного механизма переноса частиц приводит к возрастанию потока массы в окрестностях поверхности слоя, где действует источник массы, в области конвективной диффузии примеси и возле другой поверхности тела в области диффузии частиц.*

Представлено професором Є. Чаплею

Отримано 05.09.11