

Є. Чапля

Професор, д-р фіз.-мат. наук,
Центр математичного моделювання
ІППММ ім. Я. С. Підстригача
НАН України, м. Львів Україна;
Університет Казимира Великого
у Бидгощі, м. Бидгощ, Польща

О. Чернуха

Ст. наук. співр., д-р техн. наук,
Центр математичного моделювання
ІППММ ім. Я. С. Підстригача
НАН України, м. Львів, Україна

В. Гончарук

Доцент, канд. фіз.-мат. наук,
Національний університет
«Львівська політехніка»,
м. Львів, Україна

УДК 517.958:539.3

ТЕРМОДИFUЗІЯ РОЗПАДНОЇ РЕЧОВИНИ В ШАРІ ЗА ДІЇ ДЖЕРЕЛ ТЕПЛА І МАСИ НА ПОВЕРХНІ

Досліджені взаємопов'язані теплові й дифузійні процеси, які супроводжуються розпадом мігруючої речовини типу хімічних реакцій, у шарі за дії теплових і масових джерел сталої потужності на поверхні тіла. Знайдено та проаналізовано вирази для концентрації розпадних частинок, температури, потоків маси і тепла, кількості речовини, що пройшла через довільну поверхню тіла.

термодифузія, розпад речовини, потік тепла, потік маси, інтегральне перетворення

У різних галузях науки і техніки, в процесах, що протікають у живій та неживій природі, важливу роль відіграє процес дифузії. Наприклад, дифузія впливає на протікання або визначає механізм та кінетику хімічних реакцій, а також багатьох фізико-хімічних процесів та явищ: конденсації, кристалізації, мембранних, розчинення, набухання, каталітичних, хроматографічних, люмінесцентних, сповільнення нейтронів в ядерних реакторах тощо. Процес дифузії є основою багатьох технічних операцій, зокрема, спікання порошків, хіміко-технічного оброблення металів (наприклад, азотування і цементування сталей), гомогенізації сплавів, металізації та зварювання матеріалів. Роль процесів дифузії істотно виросла у зв'язку з потребою у створенні матеріалів із заданими властивостями для галузей техніки, які бурхливо розвиваються в останні десятиліття (ядерної енергетики, космонавтики, радіаційних та плазмохімічних процесів тощо).

З іншого боку, якісний аналіз механізмів процесів тепломасопереносу, який пов'язаний зі знаходженням нестационарних полів потенціалів переносу (хімічних потенціалів, температури, тиску і т.п.), дає можливість

знаходити оптимальні рішення з конструювання та експлуатації будівель і споруд, оскільки теплотехнічні та міцнісні характеристики захисних частин будівель визначаються в основному нестационарними взаємозв'язаними процесами тепло- і вологопереносу, які протікають в середині контактного шару з оточуючим середовищем, а інтенсивність фізико-хімічних та фазових перетворень впливає на структуру примежового шару [7].

У результаті нерівномірного нагріву середовища під впливом градієнта температури відбувається перенесення компонентів системи. Такий процес називають термодифузією (в рідинах — ефектом Соре). Якщо між окремими частинами підтримується стала різниця температур, то внаслідок термодифузії в об'ємі суміші виникають градієнти концентрації компонент, що ініціює звичайну дифузію.

У свою чергу, дифузію в стаціонарному стані (за відсутності конвективного потоку речовини) зрівноважує термодифузія, і в системі виникає різниця концентрацій компонент. Таке явище, зокрема, є основою одного з методів розділення ізотопів [3], а також термодифузійного розділення нафтових фракцій [6] або отримання

чистих речовин та створення композицій з попередньо заданими властивостями у фармакології [6].

Мета статті — розглянути й дослідити крайову задачу взаємозв'язаних теплових і дифузійних процесів, що супроводжуються розпадом мігруючої речовини, в однорідному шарі за крайових умов I-го роду.

1. Система рівнянь термодифузії розпадної речовини. Розглянемо термодифузійну розпадних домішкових частинок в «однорідному» середовищі. Якщо знехтувати явним врахуванням конвективного перенесення домішкової речовини, то, використовуючи континуально-термодинамічний підхід [1, 8], вихідну систему рівнянь термодифузії можемо записати у вигляді:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\rho} \frac{d\rho}{d\tau} + \nabla \cdot \mathbf{v} &= 0, \\ \rho \frac{dc}{d\tau} &= \nabla \cdot (\rho D \nabla c + \rho D_t \nabla T) - \rho \lambda c, \\ \frac{\rho c_V}{T_0} \frac{dT}{d\tau} - \rho \tilde{d}_t \frac{dc}{d\tau} &= \nabla \cdot (\tilde{\kappa} \nabla T + \tilde{\kappa}_c \nabla c) + Q_n, \end{aligned} \quad (1)$$

де ρ — густина тіла; \mathbf{v} — швидкість його матеріальних точок; c — масова концентрація дифундуєної компоненти; T — абсолютна температура; D , D_t — коефіцієнти дифузії і термодифузії; λ — коефіцієнт інтенсивності розпаду мігруючої речовини; c_V — питома теплоємність при сталому об'ємі; T_0 — температура тіла у вихідному стані; \tilde{d}_t — коефіцієнт адіабатичної зв'язності процесів; $\tilde{\kappa}$, $\tilde{\kappa}_c$ — коефіцієнти теплопровідності; $Q_n = Q_n(\nabla T, \nabla c)$ — некомпенсоване тепло [2, 4]; τ — час; $d/d\tau = \partial/\partial\tau + \nabla \cdot \mathbf{v}$ — матеріальна похідна; ∇ — набла-оператор Гамільтона. Крапкою, як завжди, позначено скалярний добуток відповідних величин.

Надалі нехтуємо також адіабатичною зв'язністю процесів ($\tilde{d}_t = 0$), некомпенсованим теплом ($Q_n = 0$) та геометричною нелінійністю, що означає заміну матеріальних похідних у рівняннях дифузії і теплопровідності локальними, а також прийняття густини тіла сталою $\rho = \rho_0 = const$. Додатково приймемо незалежними від координат коефіцієнти в системі рівнянь (1). Тоді запишемо:

$$\frac{dc}{d\tau} = D\Delta c + D_t\Delta T - \lambda c; \quad \frac{dT}{d\tau} = \bar{\kappa}\Delta T + \bar{\kappa}_c\Delta c, \quad (2)$$

де $\bar{\kappa} = \tilde{\kappa}T_0/\rho_0c_V$ і $\bar{\kappa}_c = \tilde{\kappa}_cT_0/\rho_0c_V$ — коефіцієнти температуропровідності, Δ — оператор Лапласа.

Система рівнянь (2) допускає зведення до природної безрозмірної форми. Для цього введемо нові змінні:

$$t = \lambda\tau; \quad \xi^{(\alpha)} = (\lambda/D)^{1/2} x^{(\alpha)}, \quad \alpha = \overline{1,3}, \quad (3)$$

де $x^{(\alpha)}$ — декартові координати.

Тоді отримаємо:

$$\frac{dc}{dt} = \Delta_\xi c + d_t \Delta_\xi T - c; \quad \frac{dT}{dt} = \kappa \Delta_\xi T + \kappa_c \Delta_\xi c,$$

де $d_t = D_t/D$, $\kappa = \bar{\kappa}/D$, $\kappa_c = \bar{\kappa}_c/D$, Δ_ξ — оператор Лапласа у нових змінних.

Якщо обмежимося розглядом тільки вертикального переміщення домішкової речовини, то система рівнянь термодифузії набуде вигляду:

$$\begin{aligned} \frac{\partial c(\xi, t)}{\partial t} &= \frac{\partial^2 c(\xi, t)}{\partial \xi^2} + d_t \frac{\partial^2 T(\xi, t)}{\partial \xi^2} - \lambda c(\xi, t); \\ \frac{\partial T(\xi, t)}{\partial t} &= \kappa_c \frac{\partial^2 c(\xi, t)}{\partial \xi^2} + \kappa \frac{\partial^2 T(\xi, t)}{\partial \xi^2}, \end{aligned} \quad (4)$$

де прийнято $\xi \equiv \xi^{(1)}$, а також $\lambda \equiv 1$ (цей параметр введений для зручного порівняння шуканих функцій для розпадних і нерозпадних речовин).

Розглянемо однорідний шар, товщина якого в безрозмірних змінних є ξ_0 ($\xi_0 = (\lambda/D)^{1/2} z_0$). Вважаємо, що в нульовий момент часу $t = 0$ в розглянутому шарі домішкова речовина відсутня, а температура тіла є сталою і відповідає температурі зовнішнього середовища:

$$c(\xi, t)|_{t=0} = 0, \quad T(\xi, t)|_{t=0} = T^* \equiv const, \quad (5)$$

для $t > 0$ на верхній межі шару $\xi = 0$ діють сталі джерела маси і тепла, тобто задано значення концентрації домішки й температури:

$$c(\xi, t)|_{\xi=0} = c_* \equiv const, \quad T(\xi, t)|_{\xi=0} = T_* \equiv const. \quad (6)$$

На нижній межі шару $\xi = \xi_0$ домішкова речовина відсутня, а значення температури дорівнює температурі зовнішнього середовища:

$$c(\xi, t)|_{\xi=\xi_0} = 0, \quad T(\xi, t)|_{\xi=\xi_0} = T^* \equiv const. \quad (7)$$

Для побудови розв'язків задачі перейдемо до нових функцій, які задовольняють нульовим граничним умовам:

$$\begin{aligned} \bar{c}(\xi, t) &= c(\xi, t) - c_* \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0}\right), \\ \bar{T}(\xi, t) &= T(\xi, t) - T^* - (T_* - T^*) \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0}\right). \end{aligned} \quad (8)$$

Тоді вихідна задача (4) — (7) перепишеться у вигляді:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{c}}{\partial t} &= \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial \xi^2} + d_t \frac{\partial^2 \bar{T}}{\partial \xi^2} - \lambda \bar{c} - \lambda c_* \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0}\right), \\ \frac{\partial \bar{T}}{\partial t} &= \kappa_c \frac{\partial^2 \bar{c}}{\partial \xi^2} + \kappa \frac{\partial^2 \bar{T}}{\partial \xi^2} \end{aligned} \quad (9)$$

з нульовими граничними і такими початковими умовами:

$$\bar{c}|_{t=0} = -c_* \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0}\right), \quad \bar{T}|_{t=0} = -(T_* - T^*) \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0}\right). \quad (10)$$

Розв'язок задачі (9), (10) шукаємо з допомогою перетворення Лапласа за часом і \sin -перетворення Фур'є за просторовою змінною. З врахуванням (8) отримуємо:

$$c = c_* \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0} \right) - \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin y_n \xi}{y_n (s_1 - s_2)} \left\{ \left(c_* s_2 + R_1 + \frac{R_2}{s_2} \right) e^{s_2 t} - \left(c_* s_2 + R_1 + \frac{R_2}{s_2} \right) e^{s_1 t} \right\} - \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2}{n\pi} \frac{\sin y_n \xi}{s_1 s_2} R_2;$$

$$T(\xi, t) = T^* + (T_* - T^*) \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0} \right) - \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin y_n \xi}{y_n (s_1 - s_2)} \left\{ \left((T_* - T^*) s_1 + \bar{R}_1 - \frac{\bar{R}_2}{s_1} \right) e^{s_1 t} - \left((T_* - T^*) s_2 + \bar{R}_1 - \frac{\bar{R}_2}{s_2} \right) e^{s_2 t} \right\} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2}{n\pi} \frac{\sin y_n \xi}{s_1 s_2} \bar{R}_2. \quad (11)$$

Тут $R_1 = \lambda c_* + (\kappa c_* - d_T (T_* - T^*)) y_n^2$, $R_2 = c_* \lambda \kappa y_n^2$, $\bar{R}_1 = \lambda (T_* - T^*) + (T_* - T^* - \kappa c_*) y_n^2$, $\bar{R}_2 = c_* \lambda \kappa c_* y_n^2$; $\eta^2 = \lambda \kappa / (\kappa - d_T \kappa_c)$; $y_n = n\pi / \xi_0$; s_1, s_2 — розв'язки квадратного рівняння $s^2 + \eta_1 s + \eta_2 = 0$, де $\eta_1 = \lambda + (1 + \kappa) y_n^2$, $\eta_2 = (\kappa - d_T \kappa_c) y_n^4 + \lambda \kappa y_n^2$.

Для того, щоб ряди в (11) були збіжними, s_1 і s_2 повинні бути від'ємними для будь-яких «фізичних» значень коефіцієнтів задачі, тобто повинна виконуватись нерівність

$$\kappa > d_T \kappa_c. \quad (12)$$

У формулах (11) присутні доданки, що повільно збігаються, а саме ті, які визначають асимптотику розв'язку при $t \rightarrow \infty$. Після підсумовування [5] отримуємо:

$$c(\xi, t) = c_* \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0} \right) - \frac{c_* \lambda \kappa}{\kappa - d_T \kappa_c} \left[1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\text{sh}\eta(\xi_0 - \xi)}{\text{sh}\eta \xi_0} \right] - \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin y_n \xi}{y_n (s_1 - s_2)} \left\{ \left(c_* s_1 + R_1 + \frac{R_2}{s_1} \right) e^{s_1 t} - \left(c_* s_2 + R_1 + \frac{R_2}{s_2} \right) e^{s_2 t} \right\};$$

$$T = T^* + (T_* - T^*) \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0} \right) + \frac{c_* \lambda \kappa_c}{\kappa - d_T \kappa_c} \left[1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\text{sh}\eta(\xi_0 - \xi)}{\text{sh}\eta \xi_0} \right] - \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin y_n \xi}{y_n (s_1 - s_2)} \left\{ \left((T_* - T^*) s_1 + \bar{R}_1 - \frac{\bar{R}_2}{s_1} \right) e^{s_1 t} - \left((T_* - T^*) s_2 + \bar{R}_1 - \frac{\bar{R}_2}{s_2} \right) e^{s_2 t} \right\}. \quad (13)$$

Співвідношення (13) для нерозпадної речовини при підстановці значення $\lambda = 0$ набувають вигляду:

$$c(\xi, t)|_{\lambda=0} = c_* \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0} \right) - \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin y_n \xi}{y_n (\tilde{s}_1 - \tilde{s}_2)} \left\{ [c_* \tilde{s}_1 + R] e^{\tilde{s}_1 t} - [c_* \tilde{s}_2 + R] e^{\tilde{s}_2 t} \right\};$$

$$T(\xi, t)|_{\lambda=0} = T_* + (T_* - T^*) \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0} \right) + \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin y_n \xi}{y_n (\tilde{s}_1 - \tilde{s}_2)} \times \left\{ [(T_* - T^*) \tilde{s}_1 + \bar{R}] e^{\tilde{s}_1 t} - [(T_* - T^*) \tilde{s}_2 + \bar{R}] e^{\tilde{s}_2 t} \right\}; \quad (14)$$

де $R = [c_* \kappa - d_T (T_* - T^*)] y_n^2$; $\bar{R} = [T_* - T^* - c_* \kappa_c] y_n^2$;

$$\tilde{s}_{1,2} = s_{1,2}|_{\lambda=0} = \frac{1}{2} y_n^2 \left\{ -1 - \kappa \pm \sqrt{(1 - \kappa_0)^2 + 4 d_T \kappa_c} \right\}.$$

Для того, щоб ряди у виразах (14) були збіжними, також потрібним є виконання умови (12), що збігається, наприклад, з результатами праці [9].

У стаціонарному випадку ($t \rightarrow \infty$) для термодифузії розпадної домішкової речовини маємо:

$$c^\infty(\xi) = c_* \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0} \right) - c_* \eta^2 \left[1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\text{sh}\eta(\xi_0 - \xi)}{\text{sh}\eta \xi_0} \right];$$

$$T^\infty(\xi) = T^* + (T_* - T^*) \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0} \right) + c_* \eta^2 \frac{\kappa_c}{\kappa} \left[1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\text{sh}\eta(\xi_0 - \xi)}{\text{sh}\eta \xi_0} \right]. \quad (15)$$

Для нерозпадної домішки вирази для концентрації і температури при $t \rightarrow \infty$ з (15) отримуємо:

$$c^\infty(\xi)|_{\lambda=0} = c_* \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0} \right);$$

$$T^\infty(\xi)|_{\lambda=0} = T_* + (T_* - T^*) \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0} \right). \quad (16)$$

Значимо, структура розв'язків задач термодифузії розпадних і нерозпадних частинок істотно відрізняється, причому як асимптотичні, так і нестационарні частини виразів (13) і (14). Для нерозпадної речовини асимптотика розв'язків (16) має лінійний характер. В той же час у формулах для розпадної речовини (15) фігурують доданки вигляду $S(\xi) = 1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\text{sh}\eta(\xi_0 - \xi)}{\text{sh}\eta \xi_0}$. Оскільки $S(\xi) \geq 0$,

$\forall \xi \in [\xi; \xi_0]$, то врахування процесу розпаду речовини типу хімічних реакцій або фазових перетворень зменшує концентрацію домішкової речовини і збільшує температуру в тілі. Також зазначимо, що асимптотика для функції концентрації не залежить від крайових умов на температуру, проте залежить від теплофізичних характеристик середовища. Водночас, стаціонарна частина розв'язку для температури залежить як від значення

концентрації домішки на поверхні, так і від дифузійних характеристик системи та коефіцієнта інтенсивності розпаду речовини.

2. Потоки тепла і маси розпадної домішкової речовини. В одновимірному за просторовою координатою випадку для потоків маси і тепла через поверхню $\xi = \xi_*$ маємо:

$$J_c^*(t) \Big|_{\xi=\xi_*} = - \left[\frac{\partial c(\xi, t)}{\partial \xi} + d_T \frac{\partial T(\xi, t)}{\partial \xi} \right]_{\xi=\xi_*};$$

$$J_Q^*(t) \Big|_{\xi=\xi_*} = - \left[\kappa \frac{\partial c(\xi, t)}{\partial \xi} + \kappa_c \frac{\partial T(\xi, t)}{\partial \xi} \right]_{\xi=\xi_*}. \quad (17)$$

Підставляємо вирази для концентрації і температури (13) у співвідношення (17). Тоді отримаємо:

$$J_c^* = \frac{1}{\xi_0} [c_*(1-\lambda) - d_T(T_* - T^*)] + c_* \lambda \eta^2 \frac{\text{ch}\eta(\xi_0 - \xi_*)}{\text{sh}\eta\xi_0} + \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\cos y_n \xi_*}{s_1 - s_2} \left\{ \left(A_1 s_1 + A_2 + \frac{A_3}{s_1} \right) e^{s_1 t} - \left(A_1 s_2 + A_2 + \frac{A_3}{s_2} \right) e^{s_2 t} \right\};$$

$$J_Q^* = \frac{1}{\xi_0} [\kappa(T_* - T^*) + \kappa_c c_*] + \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\cos y_n \xi_*}{s_1 - s_2} \times \left\{ \left(\bar{A}_1 s_1 + \bar{A}_2 + \frac{\bar{A}_3}{s_1} \right) e^{s_1 t} - \left(\bar{A}_1 s_2 + \bar{A}_2 + \frac{\bar{A}_3}{s_2} \right) e^{s_2 t} \right\}, \quad (18)$$

де $A_1 = c_* + d_T(T_* - T^*)$, $A_2 = R_1 + d_T \bar{R}_1$, $A_3 = R_2 - d_T \bar{R}_2$; $\bar{A}_1 = \kappa_c c_* + \kappa(T_* - T^*)$, $\bar{A}_2 = \kappa_c R_1 + \kappa \bar{R}_1$, $\bar{A}_3 = \kappa_c R_2 - \kappa \bar{R}_2$. Зокрема, можемо знайти потоки через поверхню шару $\xi = \xi_0$:

$$J_c^0 = \frac{1}{\xi_0} [c_*(1-\lambda) - d_T(T_* - T^*)] + \frac{c_* \lambda \eta^2}{\text{sh}\eta\xi_0} + \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{s_1 - s_2} \times \left\{ \left(A_1 s_1 + A_2 + \frac{A_3}{s_1} \right) e^{s_1 t} - \left(A_1 s_2 + A_2 + \frac{A_3}{s_2} \right) e^{s_2 t} \right\};$$

$$J_Q^0 = \frac{1}{\xi_0} [\kappa(T_* - T^*) + \kappa_c c_*] + \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{s_1 - s_2} \times \left\{ \left(\bar{A}_1 s_1 + \bar{A}_2 + \frac{\bar{A}_3}{s_1} \right) e^{s_1 t} - \left(\bar{A}_1 s_2 + \bar{A}_2 + \frac{\bar{A}_3}{s_2} \right) e^{s_2 t} \right\}. \quad (19)$$

Якщо у співвідношеннях (18) покладемо $\lambda = 0$, то визначимо потоки тепла і маси через поверхню $\xi = \xi_*$ для нерозпадної величини:

$$J_c^* \Big|_{\lambda=0} = \frac{1}{\xi_0} [c_* - d_T(T_* - T^*)] +$$

$$+ \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\cos y_n \xi_*}{\tilde{s}_1 - \tilde{s}_2} \left\{ (A_1 \tilde{s}_1 + \tilde{A}_2) e^{\tilde{s}_1 t} - (A_1 \tilde{s}_2 + \tilde{A}_2) e^{\tilde{s}_2 t} \right\};$$

$$J_Q^* \Big|_{\lambda=0} = \frac{1}{\xi_0} [\kappa(T_* - T^*) + \kappa_c c_*] +$$

$$\frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\cos y_n \xi_*}{\tilde{s}_1 - \tilde{s}_2} \left\{ (\bar{A}_1 \tilde{s}_1 + \tilde{A}_2) e^{\tilde{s}_1 t} - (\bar{A}_1 \tilde{s}_2 + \tilde{A}_2) e^{\tilde{s}_2 t} \right\}, \quad (20)$$

Тут $\tilde{A}_2 = R + d_T \bar{R}$, $\bar{\tilde{A}}_2 = \kappa_c R + \kappa \bar{R}$.

Підставляючи $\xi_* = \xi_0$ у формулах (20), отримаємо потоки тепла і маси нерозпадних частинок через нижню поверхню шару:

$$J_c^0 \Big|_{\lambda=0} = \frac{1}{\xi_0} [c_* - d_T(T_* - T^*)] +$$

$$+ \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\tilde{s}_1 - \tilde{s}_2} \left\{ (A_1 \tilde{s}_1 + \tilde{A}_2) e^{\tilde{s}_1 t} - (A_1 \tilde{s}_2 + \tilde{A}_2) e^{\tilde{s}_2 t} \right\};$$

$$J_Q^0 \Big|_{\lambda=0} = \frac{1}{\xi_0} [\kappa(T_* - T^*) + \kappa_c c_*] +$$

$$+ \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\tilde{s}_1 - \tilde{s}_2} \left\{ (\bar{A}_1 \tilde{s}_1 + \tilde{A}_2) e^{\tilde{s}_1 t} - (\bar{A}_1 \tilde{s}_2 + \tilde{A}_2) e^{\tilde{s}_2 t} \right\}.$$

Запишемо вирази для потоків маси і тепла у стаціонарному випадку (при $t \rightarrow \infty$) для розпадної домішки через поверхню $\xi = \xi_*$:

$$J_c^{*\infty} = \frac{1}{\xi_0} [c_*(1-\lambda) - d_T(T_* - T^*)] + c_* \lambda \eta^2 \frac{\text{ch}\eta(\xi_0 - \xi_*)}{\text{sh}\eta\xi_0};$$

$$J_Q^{*\infty} = \frac{1}{\xi_0} [\kappa(T_* - T^*) + \kappa_c c_*],$$

через поверхню шару $\xi = \xi_0$:

$$J_c^{0\infty} = \frac{1}{\xi_0} [c_*(1-\lambda) - d_T(T_* - T^*)] + c_* \lambda \eta^2 \frac{1}{\text{sh}\eta\xi_0};$$

$$J_Q^{0\infty} = J_Q^{*\infty}.$$

Зазначимо, що потік тепла в стаціонарному випадку є сталим і однаковим для будь-якого перерізу шару. При цьому на його значення впливають тільки різниці температур, яка підтримується на його поверхнях, і потужність джерела маси. Причому, чим більша різниця температур на поверхнях тіла та інтенсивніша дія джерела маси, тим більше значення стаціонарного потоку тепла.

Ситуація з потоком маси розпадних частинок у стаціонарному режимі дещо інша. Збільшення інтенсивності джерела маси також веде до зростання величини стаціонарного потоку маси для всього тіла. Водночас, збільшення різниці температур на поверхнях шару може спричинити зменшення значення $J_c^{*\infty}$ для випадку $T_* > T^*$. Якщо $T_* < T^*$, то збільшення різниці температур

на межах шару приводить до зростання величини $J_c^{*\infty}$. Якщо $T_* = T^*$, то $J_c^{*\infty}$ не залежить від цього параметра.

Для дослідження впливу процесу розпаду мігруючої речовини на стаціонарний потік маси розглянемо потік через нижню межу шару $\xi = \xi_0$. Якщо розкласти функцію $\text{sh}\eta\xi_0$ в ряд, маємо

$$J_c^{0\infty} = \frac{1}{\xi_0} \left[c_* - d_T(T_* - T^*) + c_*\lambda \left(\frac{1}{1 + 3!(\eta\xi_0)^2 + \dots} - 1 \right) \right].$$

Оскільки $\left(\frac{1}{1 + 3!(\eta\xi_0)^2 + \dots} - 1 \right) \leq 0$, то розпад домішкової речовини призводить до зменшення значення стаціонарного потоку через межу $\xi = \xi_0$.

Для нерозпадної речовини ($\lambda = 0$) потік маси в стаціонарному режимі зводиться до вигляду:

$$J_c^{*\infty} \Big|_{\lambda=0} = \frac{1}{\xi_0} [c_* - d_T(T_* - T^*)], \quad \forall \xi_* \in [0; \xi_0].$$

У той же час, стаціонарний потік тепла від процесу розпаду мігруючої речовини не залежить.

3. Кількість розпадної домішки, що пройшла через поверхню шару за певний проміжок часу. Отримання точних аналітичних розв'язків для температури та концентрації дало можливість встановити точні вирази для потоків тепла і маси, що, в свою чергу, дає можливість визначити кількість тепла і розпадної речовини, які пройшли через певну поверхню тіла за заданий проміжок часу. Оскільки такі аспекти процесу теплопровідності практично не використовуються, тому зупинимось тільки на дослідженні процесу масопереносу з урахуванням впливу градієнта температури і розпаду мігруючих частинок.

Кількість розпадної домішкової речовини, що пройшла через поверхню $\xi = \xi_*$ за час t_* , визначається за формулою

$$Q_* = \int_0^{t_*} J_c^*(t) dt. \quad (21)$$

Підставляючи вираз для потоку маси (18) у співвідношення (21), отримаємо

$$Q_* = \left\{ \frac{1}{\xi_0} [c_*(1-\lambda) - d_T(T_* - T^*)] + c_*\lambda\eta^2 \frac{\text{ch}\eta(\xi_0 - \xi_*)}{\text{sh}\eta\xi_0} \right\} t_* - \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\cos y_n \xi_*}{s_1 - s_2} \left\{ \frac{1}{s_1} \left(A_1 s_1 + A_2 + \frac{A_3}{s_1} \right) (1 - e^{s_1 t_*}) - \frac{1}{s_2} \left(A_1 s_2 + A_2 + \frac{A_3}{s_2} \right) (1 - e^{s_2 t_*}) \right\}.$$

Зокрема, через поверхню $\xi = \xi_0$ за час t_* пройшла така кількість розпадних частинок:

$$Q_*^0 = \left\{ \frac{1}{\xi_0} [c_*(1-\lambda) - d_T(T_* - T^*)] + \frac{c_*\lambda\eta^2}{\text{sh}\eta\xi_0} \right\} t_* - \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{s_1 - s_2} \left\{ \frac{1}{s_1} \left(A_1 s_1 + A_2 + \frac{A_3}{s_1} \right) (1 - e^{s_1 t_*}) - \frac{1}{s_2} \left(A_1 s_2 + A_2 + \frac{A_3}{s_2} \right) (1 - e^{s_2 t_*}) \right\}.$$

Для нерозпадної речовини ($\lambda = 0$) маємо

$$Q_*^0 \Big|_{\lambda=0} = \frac{1}{\xi_0} [c_* - d_T(T_* - T^*)] t_* - \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\cos y_n \xi_*}{\tilde{s}_1 - \tilde{s}_2} \times \left\{ \left(A_1 + \frac{\tilde{A}_2}{\tilde{s}_1} \right) (1 - e^{\tilde{s}_1 t_*}) - \left(A_1 + \frac{\tilde{A}_2}{\tilde{s}_2} \right) (1 - e^{\tilde{s}_2 t_*}) \right\},$$

Зокрема, через поверхню $\xi = \xi_0$

$$Q_*^0 \Big|_{\lambda=0} = \frac{1}{\xi_0} [c_* - d_T(T_* - T^*)] t_* - \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\tilde{s}_1 - \tilde{s}_2} \times \left\{ \left(A_1 + \frac{\tilde{A}_2}{\tilde{s}_1} \right) (1 - e^{\tilde{s}_1 t_*}) - \left(A_1 + \frac{\tilde{A}_2}{\tilde{s}_2} \right) (1 - e^{\tilde{s}_2 t_*}) \right\}.$$

Зазначимо, що асимптотичні доданки функцій кількості речовини, що пройшла через задану поверхню за час t_* , прямо пропорційні цьому часу.

4. Числовий аналіз розподілів температури і концентрації розпадних частинок. Для встановлення основних закономірностей термодифузії розпадної домішкової речовини в шарі, на межі якого діють сталі джерела тепла і маси, наведено залежності розподілів концентрації та температури від відповідних характеристик у широких межах. Розрахунки наведені у безрозмірних змінних (3). На рис. 1 і рис. 2 проілюстровані розподіли концентрації розпадних ($\lambda = 1$, суцільні лінії) і нерозпадних частинок ($\lambda = 0$, штрихові лінії, криві а). Тут по осі абсцис відкладено безрозмірну просторову змінну ξ , а по осі ординат — функцію $C(\xi, t)$ і прийнято $\xi_0 = 10$, $d_T = 10^{-3}$, $\kappa = 10^5$, $\kappa_c = 10^2$, $c_* = 10^{-3}$,

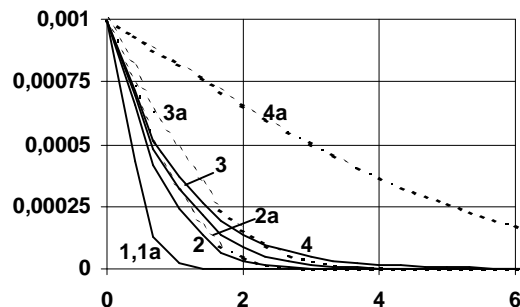


Рис. 1. Концентрація розпадної речовини в різні моменти часу

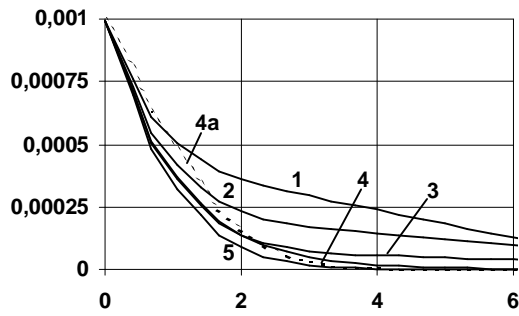


Рис. 2. Концентрація розпадної речовини для різних значень коефіцієнта теплопровідності

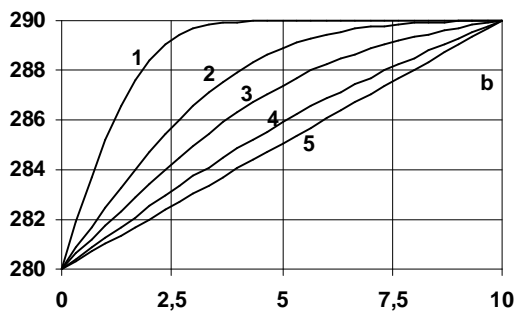
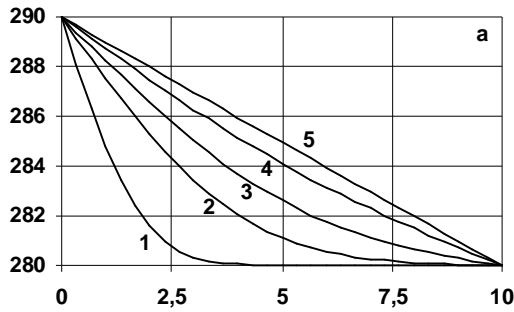


Рис. 3. Температура тіла в різні моменти часу при нагріванні (а) та охолодженні (б) поверхні

$T_* = 290^{\circ}K$, $T^* = 280^{\circ}K$. Рис. 1 ілюструє розподіли концентрації в різні моменти безрозмірного часу: $t = 0, 1; 0,5; 1; 10$ (криві 1—4 відповідно). На рис. 2 показані закономірності розподілів концентрації розпадних домішок у шарі для $\kappa = 10; 20; 50; 10^5; 10^6$ (криві 1—5) у момент часу $t = 1$.

На рис. 3 і рис. 4 наведені характерні розподіли температури при нагріванні (а) та охолодженні (б) поверхні шару $\xi = 0$. Тут також по осі абсцис відкладено безрозмірну просторову змінну ξ , а по осі ординат — температуру $T(\xi, t)$.

Рис. 3 ілюструють розподіли температури в різні моменти безрозмірного часу: $t = 10^{-5}; 5 \cdot 10^{-5}; 10^{-4}; 2 \cdot 10^{-4}; 5 \cdot 10^{-4}$ (криві 1—5). На рис. 4 показана залежність функції $T(\xi, t)$ від значень коефіцієнта теплопровідності: $\kappa = 10^4; 5 \cdot 10^4; 10^5; 5 \cdot 10^5; 10^6$ (криві 1—5) у момент часу $t = 10^{-5}$.

Зазначимо, що для функцій концентрації розпадної речовини і температури істотно відрізняється час виходу на ustalений режим (рис. 1, рис. 3): на п'ять порядків для безрозмірного часу t (3) для наведених значень

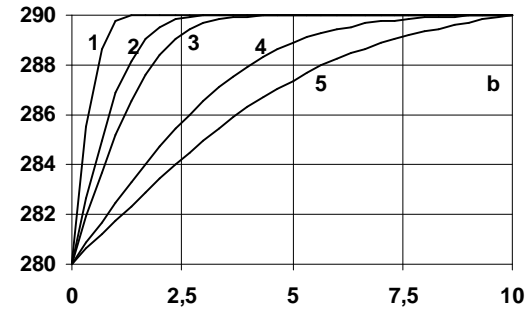
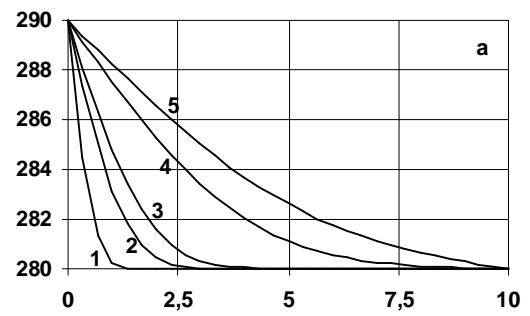


Рис. 4. Температура тіла для різних значень коефіцієнта теплопровідності при нагріванні (а) та охолодженні (б) поверхні

коефіцієнтів. Врахування процесу розпаду мігруючої речовини практично не впливає на функцію концентрації для малих часових інтервалів (криві 1 і 1а на рис. 1 збігаються), проте з часом істотно зменшує значення концентрації частинок у тілі та пришвидшує вихід на ustalений режим (крива 4 на рис. 1 відповідає стаціонарному режиму функції концентрації розпадної домішки, в той же час крива 4а для нерозпадної речовини ще не відповідає лінійному стаціонарному розподілу). Значення температури для розпадної і нерозпадної речовини різняться в четвертій значимій цифрі. Такий неістотний вплив пояснюється малою концентрацією домішкової речовини в тілі для нестационарних часів функції температури.

Коефіцієнт теплопровідності κ майже не впливає на значення концентрації у при поверхневих областях (рис. 2). У середині шару значні зміни розподілів концентрації спостерігаються тільки для малих значень коефіцієнта теплопровідності (на порядок більші від коефіцієнта дифузії). Для температури значення коефіцієнта теплопровідності є істотними на всьому проміжку. Чим менший коефіцієнт κ , тим менше значення функції $T(\xi, t)$ і тим повільніше розподіл температури виходить на ustalений режим (рис. 4).

Зміна перехресних коефіцієнтів теплопровідності κ_c і термодифузії d_T приводить до змін у третій значимих цифрах для значень функцій концентрації розпадної домішки та температури.

Висновки. Досліджені процеси термодифузії розпадної домішки в шарі за дії джерел тепла і маси сталої потужності на поверхні тіла. Отримані вирази для концентрації частинок, які розпадаються, і температури, що дозволило знайти потоки тепла і маси, а також кількість речовини, яка пройшла через задану поверхню за певний проміжок часу.

Проведений якісний порівняльний аналіз для випадків термодифузії розпадної і нерозпадної речовини, в тому числі у стаціонарному режимі.

Числові дослідження пов'язаних процесів теплопровідності й дифузії з урахуванням розпаду частинок дозволили визначити вплив теплофізичних характеристик середовища на їхні розподіли. При цьому крайова задача сформульована для однорідного середовища. Це дає можливість, наприклад, будувати розв'язки аналогічних задач для неоднорідного середовища в околі отриманих у цій статті.

Робота виконана за часткової підтримки Державного фонду фундаментальних досліджень МОН України (Ф25/95-2009, ДР № 0108U006606).

Література

1. Бурак Я. Й., Чапля Є. Я., Чернуха О. Ю. Континуально-термодинамічні моделі механіки твердих розчинів. — К.: Наук. думка, 2006. — 272 с.
2. Мюнстер А. Химическая термодинамика. — М.: Мир, 1971. — 295 с.
3. Никитенков Н.Н., Чернов И.П., Тюрин Ю.И., Пучкарева Л.Н. Изотопные эффекты при техногенных воздействиях на поверхность твердых тел. Часть 2 // Изв. Томского политехнического университета. — 2004. — Т. 307, № 3. — С. 26-29.
4. Подстригач Я.С. Диффузионная теория деформации изотропной сплошной среды // Вопр. мех. реал. твердого тела. — 1964. — Вып. 2. — С. 77—99.
5. Прудников А.П., Брычков Ю.А., Маричев О.И. Интегралы и ряды. Элементарные функции. — М.: Наука, 1981. — 798 с.

6. Савиных Б.В., Гумеров Ф.М. Взаимная диффузия жидкостей в электрических полях // Химия и компьютерное моделирование. Буллеровские сообщения. — 2002. — №10. — С. 213—220.

7. Садыков Р.А. Расчет теплотехнических характеристик ограждающих конструкций с учетом термодиффузии и фильтрации влаги / Материалы Международной научно-технической конференции «Теоретические основы теплогазоснабжения и вентиляции», 23-25 ноября 2005. — М.: МГСУ, 2005. — С. 115—121.

8. Токарчук М., Чапля Є.Я., Чернуха О.Ю., Гончарук В.С. Математичні моделі міграції радіонуклідів у лавоподібних паливомістких матеріалах // Машинознавство. — 2006. — №2 (104). — С. 23—29.

9. Чапля Є.Я., Чернуха О.Ю. Термодифузія у смузі з випадково розташованим підшаром // Матер. 4-ї Українсько-польської конференції «Механіка середовища, методи комп'ютерних наук та моделювання». — Львів, 2004. — С. 115—128.

Отримана 30.03.09

E. Chaplia^{1,2}, *O. Chernuha*¹, *V. Honcharuk*³
Thermiodiffusion of decaying substance in a layer under action of heat and mass sources on a surface

¹Center of Mathematical Simulation of Pidstryhach Institute for Applied Problems of Mechanics and Mathematics of National Academy of Sciences of Ukraine, Lviv, Ukraine;

²University of Bydgoszcz, Bydgoszcz, Poland;

³National University Lvivska Politechnika, Lviv, Ukraine

In the paper coupled thermal and diffusive processes accompanied by decay of migrating substance of type chain chemical reactions are investigated in a layer under action of heat and mass sources by constant power on a body layer. Expressions for decaying particle concentration, temperature, mass and heat fluxes are found and analyzed as well as substance quantity passed through any body surface.

210101 0030

MULTISCALE EFFECTS IN FATIGUE METALS

5 July 2010 — 9 July 2010
Ecole Polytechnique, Palaiseau, France

Contact:

Chairperson: **Dr. Andrei Constantinescu**
CNRS Ecole Polytechnique
Laboratoire de Mécanique des Solides
91128 Palaiseau cedex, France
phone: +33 1 69 33 57 56
fax: +33 1 69 33 57 06

email: andrei.constantinescu@lms.polytechnique.fr

Co-Chairperson:

Dr. Pedro Donatella Portella

German Federal Institute for Material Research and Testing,
Berlin, Germany