## Є. Чапля

Професор, д-р фіз.-мат. наук, Центр математичного моделювання ІППММ ім. Я. С. Підстригача НАН України, м. Львів; Університет Казиміра 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

## В. Дмитрук

Інженер, Національний університет «Львівська політехніка», м. Львів

# УДК 517.958:532.72

# МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ СТАЦІОНАРНИХ ПРОЦЕСІВ ДИФУЗІЇ У ДВОФАЗНИХ ТІЛАХ РЕГУЛЯРНОЇ СТРУКТУРИ З УРАХУВАННЯМ КОНВЕКТИВНОГО ПЕРЕНОСУ В ОДНІЙ З ФАЗ

У статті для побудови точних аналітичних розв'язків контактно-крайових задач дифузії домішкової речовини у двофазних регулярних структурах з урахуванням конвективного механізму масопереносу в одній з фаз запропоновано метод, який базується на використанні інтегральних перетворень в окремих областях. З використанням контактних умов знайдений зв'язок між відповідними інтегральними перетвореннями. Отримано аналітичний розв'язок задачі дифузії для двофазного шару регулярної структури з врахуванням конвективного переносу в одній з фаз та досліджені потоки маси через внутрішню міжфазну поверхню контакту.

дифузія, конвекція, регулярна структура, інтегральне перетворення

У багатьох випадках виникає проблема описання і оцінювання впливу включень на процеси дифузії та фільтрації в реальних середовищах. Якщо розміри включень є достатньо малими і вони розподілені так, що знаходяться в кожному фізично малому елементі тіла, то основні макроскопічні параметри процесу переносу домішкових компонент, як правило, можна визначати на основі континуальних моделей гетеродифузії [1—3]. Це характерно, зокрема, для дрібнодисперсних полікристалічних тіл і пористих середовищ.

Інтерпретація експериментальних досліджень і визначення коефіцієнта дифузії в області включення, наприклад, межі зерна чи дислокації, або коефіцієнтів фільтраціїдифузії в капілярно-пористих структурах базується на розв'язках відповідних крайових задач математичної фізики. Оскільки побудова їхніх точних розв'язків навіть для найпростіших геометричних областей викликає значні труднощі, то, як правило, використовують наближенні аналітичні [4 — 7] або числові [8 — 9] розв'язки.

У праці [10] 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. Знайдено аналітичний розв'язок задачі дифузії для горизонтального шару, який є періодичною структурою, що утворена з двох фізично різних вертикальних підшарів. На цій основі досліджено граничні переходи, які відповідають наближенню поодинокого включення [4] та континуальної гетеродифузії [3].

У статті 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 й потоків маси, зокрема, через внутрішню поверхню контакту.

**1.** Об'єкт дослідження та постановка задачі. Розглянемо шар товщиною  $x_0$ , який складається з періодично розташованих областей двох типів. Поверхні, що обмежують ці області, перпендикулярні до поверхонь шару (рис. 1) (вісь Ox — перпендикулярна до поверхонь тіла, Oy — до поверхонь складових областей). При цьому області з коефіцієнтом дифузії  $D_1$  мають ширину 2L, а 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, 2, ...), які ділять навпіл сусідні контактуючі області. Тому можемо виділити елемент тіла, на вертикальних межах якого потоки в напрямку осі *Оу* дорівнюють нулю (рис. 2).

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

$$D_{\rm l}\left[\frac{\partial^2 c_{\rm l}^{\infty}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c_{\rm l}^{\infty}}{\partial y^2}\right] - v \frac{\partial c_{\rm l}^{\infty}}{\partial x} = 0, \quad x, y \in \Omega_{\rm l}, \qquad (1)$$

де *v* — швидкість конвективного перенесення, яка приймається відомою і сталою.

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

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



Рис. 1. Шар періодичної структури, в якому мігрує домішкова речовина



Рис. 2. Виділений елемент регулярної структури

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

$$c_{1}^{\infty}(x, y)\Big|_{x=0} = c_{0}^{(1)} \equiv \text{const} , \ c_{2}^{\infty}(x, y)\Big|_{x=0} = c_{0}^{(2)} \equiv \text{const} ,$$
$$c_{1}^{\infty}(x, y)\Big|_{x=x_{0}} = c_{2}^{\infty}(x, y)\Big|_{x=x_{0}} = 0 .$$
(3)

На бічних поверхнях виділеного елемента y = 0, y = L + l нулю дорівнюють горизонтальні складові потоку, тобто

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

На межі контакту y = L задаємо умови рівності хімічних потенціалів і горизонтальні складові масових потоків домішкової речовини [11]:

$$\mu_{1}^{\infty}(x, y)\Big|_{y=L} = \mu_{2}^{\infty}(x, y)\Big|_{y=L},$$

$$\Lambda_{1} \frac{\partial \mu_{1}^{\infty}(x, y)}{\partial y}\Big|_{y=L} = \Lambda_{2} \frac{\partial \mu_{2}^{\infty}(x, y)}{\partial y}\Big|_{y=L},$$
(5)

де  $\mu_i(x, y)$  — хімічний потенціал в області  $\Omega_i$ ,  $\Lambda_i$  — кінетичні коефіцієнти (*i* = 1; 2).

Приймемо лінійну залежність хімічного потенціалу від концентрації [12]:

$$\mu_1^{\infty}(x, y) = \mu^0 - A \Big( 1 - \gamma_1 c_1^{\infty}(x, y) \Big),$$
  
$$\mu_2^{\infty}(x, y) = \mu^0 - A \Big( 1 - \gamma_2 c_2^{\infty}(x, y) \Big),$$

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

Тоді зі співвідношень (5) отримаємо умови неідеального контакту для концентрації у вигляді:

$$\eta_{1}c_{1}^{\infty}(x,y)\Big|_{y=L} = \eta_{2}c_{2}^{\infty}(x,y)\Big|_{y=L},$$

$$D_{1}\frac{\partial c_{1}^{\infty}(x,y)}{\partial y}\Big|_{y=L} = D_{2}\frac{\partial c_{2}^{\infty}(x,y)}{\partial y}\Big|_{y=L},$$
(6)

де  $\eta_1$  і  $\eta_2$  ( $\eta_1 \neq \eta_2$ ,  $\eta_i = A\gamma_i$ ) — коефіцієнти концентраційної залежності хімічного потенціалу частинок в областях  $\Omega_1$  і  $\Omega_2$  відповідно.

При цьому коефіцієнти дифузії можуть бути записані через кінетичні коефіцієти та рівняння стану.

2. Методика розв'язування контактно-крайової задачі. Розв'язок контактно-крайової задачі дифузії (1) — (4), (6) будемо шукати з допомогою інтегральних перетворень за просторовими змінними.

Виконаємо інтегральні перетворення за змінною *у* окремо в областях  $\Omega_1$  і  $\Omega_2$ . Для того, щоб застосувати перетворення Фур'є потрібно знати величину відповідних функцій або їхніх похідних на межах області перетворення [13]. При *y* = 0 і *y* = *L* + *l* граничні умови (4) визначають значення функції  $\partial c_1^{\infty} / \partial y$  на межі області  $\Omega_1$ і  $\partial c_2^{\infty} / \partial y$  на межі  $\Omega_2$ . На інших межах областей  $\Omega_1$  і  $\Omega_2$  (поверхні контакту) величини  $\partial c_i^{\infty} / \partial y$  є невідомими. Доозначимо їх, враховуючи другу контактну умову (6). Вона означає, що на межі контакту *y* = *L* масові потоки рівні між собою і, в свою чергу, дорівнюють деякій функції  $g^{\infty}(x)$ , тобто

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

Тоді можемо виконати скінченні інтегральні созперетворення [13] в області  $\Omega_1: y \to y_k = k\pi/L$ ,  $c_1^{\infty}(x, y) \to \overline{c}_1^{\infty}(x, k)$  і в області  $\Omega_2: y \to y_j = j\pi/l$ ,  $c_2^{\infty}(x, y) \to \overline{c}_2^{\infty}(x, j)$ . У зображеннях контактно-крайова задача (1) — (4), (7) набуде вигляду:

$$D_{1} \frac{d^{2} \overline{c_{1}^{\infty}}(x)}{dx^{2}} - v \frac{d \overline{c_{1}^{\infty}}(x)}{dx} - D_{1} y_{k}^{2} \overline{c_{1}^{\infty}}(x) + (-1)^{k} g^{\infty}(x) = 0, (8)$$

$$D_{2} \frac{d^{2} \overline{c_{2}^{\infty}}(x)}{dx^{2}} - D_{2} y_{j}^{2} \overline{c_{2}^{\infty}}(x) - g^{\infty}(x) = 0, x \in ]0; x_{0}[; (9)$$

$$\overline{c_{1}^{\infty}}(x)\Big|_{x=0} = a_{k} c_{0}^{(1)}, \ \overline{c_{2}^{\infty}}(x)\Big|_{x=0} = a_{j} c_{0}^{(2)},$$

$$\overline{c_{1}^{\infty}}(x)\Big|_{x=x_{0}} = \overline{c_{2}^{\infty}}(x)\Big|_{x=x_{0}} = 0, \quad (10)$$

де 
$$y_k = k\pi/L$$
,  $a_k = \begin{cases} L, \ k = 0\\ 0, \ k = 1, 2, \dots; \end{cases}$ ;  $y_j = j\pi/l$ ,  
 $a_j = \begin{cases} l, \ j = 0\\ 0, \ j = 1, 2, \dots; \end{cases}$ 

За змінною x в області  $\Omega_1$  застосуємо такі перетворення [14]:

$$\widetilde{c}_{1}^{\infty}(n,k) = \int_{0}^{x_{0}} \overline{c}_{1}^{\infty}(x,k) e^{-\frac{vx}{2D_{1}}} \sin(x_{n}x) dx,$$
  
$$\overline{c}_{1}^{\infty}(x,k) = \frac{2}{x_{0}} e^{\frac{vx}{2D_{1}}} \sum_{n=1}^{\infty} \sin(x_{n}x) \widetilde{c}_{1}^{\infty}(n,k), \qquad (11)$$

де  $x_n = n\pi/x_0$ , а в області  $\Omega_2$  — sin-перетворення Фур'є:

$$\widetilde{c}_{2}^{\infty}(m,j) = \int_{0}^{x_{0}} \overline{c}_{2}^{\infty}(x,j) \sin(x_{m}x) dx,$$
  
$$\overline{c}_{2}^{\infty}(x,j) = \frac{2}{x_{0}} \sum_{m=1}^{\infty} \sin(x_{m}x) \widetilde{c}_{2}^{\infty}(m,j), \qquad (12)$$

де  $x_m = m\pi/x_0$ .

Тоді з (8) — (10) отримаємо такі алгебричні рівняння:

$$-D_1 \left( x_n^2 + y_k^2 \right) \widetilde{c}_1^{\infty} + D_1 x_n a_k c_0^{(1)} + (-1)^k \widetilde{g}_n^{\infty} = 0, \quad (13)$$

$$-D_2 \left( x_m^2 + y_j^2 \right) \widetilde{\varepsilon}_2^{\infty} + D_2 x_m a_j c_0^{(2)} - \widetilde{g}_m^{\infty} = 0.$$
 (14)

Звідси знаходимо:

де

$$\widetilde{c}_{1}^{\infty} = \frac{1}{\frac{v^{2}}{4D_{1}^{2}} + \left(x_{n}^{2} + y_{k}^{2}\right)} \left[D_{1}x_{n}a_{k}c_{0}^{(1)} + (-1)^{k}\widetilde{g}_{n}^{\infty}\right],$$
$$\widetilde{c}_{2}^{\infty} = \frac{1}{D_{2}\left(x_{m}^{2} + y_{j}^{2}\right)} \left[D_{2}x_{m}a_{j}c_{0}^{(2)} - \widetilde{g}_{m}^{\infty}\right].$$
(15)

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

$$\begin{split} \overline{c}_{1}^{\infty}(x,k)\Big|_{k=0} &= \frac{2}{x_{0}} e^{\frac{vx}{2D_{1}}} \sum_{n=1}^{\infty} \sin(x_{n}x) \left[ \frac{Lc_{0}^{(1)}}{x_{n}} + \frac{\widetilde{g}_{n}^{\infty}}{D_{1}x_{n}^{2}} \right], \\ \overline{c}_{1}^{\infty}(x,k)\Big|_{k\neq0} &= \frac{1}{D_{1}} \frac{2}{x_{0}} e^{\frac{vx}{2D_{1}}} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{k}}{x_{n}^{2} + y_{k}^{2}} \widetilde{g}_{n}^{\infty} \sin(x_{n}x), \\ \overline{c}_{2}^{\infty}(x,j)\Big|_{j=0} &= \frac{2}{x_{0}} \sum_{m=1}^{\infty} \sin(x_{m}x) \left[ \frac{lc_{0}^{(2)}}{x_{m}} - \frac{\widetilde{g}_{m}^{\infty}}{D_{2}x_{m}^{2}} \right], \\ \overline{c}_{1}^{\infty}(x,j)\Big|_{j\neq0} &= -\frac{1}{D_{2}} \frac{2}{x_{0}} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{x_{m}^{2} + y_{j}^{2}} \widetilde{g}_{m}^{\infty} \sin(x_{m}x), \\ \widetilde{g}_{n}^{\infty} &= \int_{0}^{x_{0}} g^{\infty}(x) e^{-\frac{vx}{2D_{1}}} \sin(x_{n}x) dx , \\ \widetilde{g}_{m}^{\infty} &= \int_{0}^{x_{0}} g^{\infty}(x) \sin(x_{m}x) dx . \end{split}$$
(16)

Після застосування відповідних обернених перетворень за змінною у отримаємо

$$c_{1}^{\infty}(x,y) = \frac{2}{x_{0}} e^{\frac{yx}{2D_{1}}} \sum_{n=1}^{\infty} \sin(x_{n}x) \left\{ \frac{c_{0}^{(1)}}{x_{n}} + \frac{\widetilde{g}_{n}^{\infty}}{D_{1}x_{n}} \frac{\operatorname{ch}(x_{n}y)}{\operatorname{sh}(x_{n}L)} \right\}, (17)$$

$$c_{2}^{\infty}(x,y) = \frac{2}{x_{0}} \sum_{m=1}^{\infty} \sin(x_{m}x) \left\{ \frac{c_{0}^{(2)}}{x_{m}} - \frac{\widetilde{g}_{m}^{\infty}}{D_{2}x_{m}} \frac{\operatorname{ch}[x_{m}(L+l-y)]}{\operatorname{sh}(x_{m}l)} \right\}. (18)$$

У виразах (17), (18) залишаються невідомими функції  $\tilde{g}_n^{\infty}$  і  $\tilde{g}_m^{\infty}$  відповідно. Шукатимемо їх з першої контактної умови (6) стрибка функції концентрації на межі поділу областей  $\Omega_1$  та  $\Omega_2$ . Підставляємо вирази (17), (18) в умову (6) і отримуємо таке рівняння:

$$\eta_1 e^{\frac{vx}{2D_1}} \sum_{n=1}^{\infty} \sin(x_n x) \left\{ \frac{c_0^{(1)}}{x_n} + \frac{\widetilde{g}_n^{\infty}}{D_1 x_n} \operatorname{cth}(x_n L) \right\} =$$

$$= \eta_2 \sum_{m=1}^{\infty} \sin\left(x_m x\right) \left\{ \frac{c_0^{(2)}}{x_m} - \frac{\widetilde{g}_m^{\infty}}{D_2 x_m} \operatorname{cth}(x_m L) \right\}.$$
 (19)

Для знаходження зв'язку між функціями  $\tilde{g}_n^{\infty}$  і  $\tilde{g}_m^{\infty}$  розглянемо співвідношення, обернене до (16), тобто

$$g^{\infty}(x) = \frac{2}{x_0} e^{\frac{vx}{2D_1}} \sum_{n=1}^{\infty} \widetilde{g}_n^{\infty} \sin(x_n x) ,$$

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 (11) за змінною x. Маємо

$$\int_{0}^{x_{0}} g^{\infty}(x) \sin(x_{m}x) dx = \int_{0}^{x_{0}} \frac{2}{x_{0}} e^{\frac{vx}{2D_{1}}} \sin(x_{m}x) \sum_{n=1}^{\infty} \tilde{g}_{n}^{\infty} \sin(x_{n}x) dx$$

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

$$\widetilde{g}_m^{\infty} = \frac{2}{x_0} \sum_{n=1}^{\infty} \widetilde{g}_n^{\infty} \int_0^{x_0} e^{\frac{vx}{2D_1}} \sin(x_m x) \sin(x_n x) dx,$$

і після інтегрування отримаємо

$$\widetilde{g}_m^{\infty} = \frac{2}{x_0} \sum_{n=1}^{\infty} A_{n,m} \widetilde{g}_n^{\infty} , \qquad (20)$$

де коефіцієнти А<sub>тл</sub> визначаються так:

$$A_{n,m} = \frac{\nu \pi^2}{D_1 x_0^2} \frac{nm \left[ (-1)^{n+m} e^{\nu x_0/2D_1} - 1 \right]}{\left\{ \frac{\nu^2}{4D_1^2} + \frac{\pi^2}{x_0^2} (n-m)^2 \right\} \left\{ \frac{\nu^2}{4D_1^2} + \frac{\pi^2}{x_0^2} (n+m)^2 \right\}} .$$
(21)

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 (12), то отримаємо

$$\int_{0}^{x_{0}} g^{\infty}(x) e^{-\frac{vx}{2D_{1}}} \sin(x_{n}x) dx =$$
$$= \int_{0}^{x_{0}} \frac{2}{x_{0}} \sum_{m=1}^{\infty} \widetilde{g}_{m}^{\infty} \sin(x_{m}x) e^{-\frac{vx}{2D_{1}}} \sin(x_{n}x) dx =$$

Враховуючи, що за формулою (16) ліва частина цієї рівності є  $\tilde{g}_n^{\infty}$ , отримаємо:

$$\widetilde{g}_n^{\infty} = \frac{2}{x_0} \sum_{m=1}^{\infty} B_{n,m} \widetilde{g}_m^{\infty} , \qquad (22)$$

де

$$B_{n,m} \equiv -\frac{\nu\pi^2}{D_1 x_0^2} \frac{nm[(-1)^{n+m} e^{-\nu x_0/2D_1} - 1]}{\left\{\frac{\nu^2}{4D_1^2} + \frac{\pi^2}{x_0^2}(n-m)^2\right\} \left\{\frac{\nu^2}{4D_1^2} + \frac{\pi^2}{x_0^2}(n+m)^2\right\}}.$$
 (23)

Зазначимо також, що

$$B_{n,m} = -\frac{(-1)^{n+m}e^{-\nu x_0/2D_1} - 1}{(-1)^{n+m}e^{\nu x_0/2D_1} - 1}A_{n,m}$$

Зауважимо, що, зважаючи на співвідношення (20) і (22), для знаходження розв'язку задачі потрібно визначити лише одну з функцій  $\tilde{g}_n^{\infty}$  і  $\tilde{g}_m^{\infty}$ . Подамо перший доданок у правій частині (19) у вигляді

Подамо перший доданок у правій частині (19) у вигляді розвинення за *n*. Її другий доданок з урахуванням співвідношення (20) перетворимо до вигляду

$$\sum_{m=1}^{\infty} \sin(x_m x) \frac{\widetilde{g}_m^{\infty} \operatorname{cth}(x_m L)}{D_2 x_m} =$$
$$= \left(\frac{2}{x_0}\right)^2 e^{\frac{\nu x}{2D_1}} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} A_{n,m} B_{n,m} \frac{\widetilde{g}_n^{\infty} \operatorname{cth}(x_m L)}{D_2 x_m} \sin(x_n x).$$

Тоді рівняння (19) можна звести до форми

$$\eta_1 \frac{c_0^{(1)}}{x_n} + \frac{\eta_1 \tilde{g}_n^{\infty}}{D_1 x_n} \operatorname{cth}(x_n L) =$$
  
=  $\eta_2 c_0^{(2)} R_n - \frac{4}{x_0^2} \frac{\eta_2 \tilde{g}_n^{\infty}}{D_2} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{x_m} A_{n,m} B_{n,m} \operatorname{cth}(x_m L).$ 

Звідси знаходимо

$$\widetilde{g}_{n}^{\infty} = \frac{\eta_{2}c_{0}^{(2)}R_{n} - \eta_{1}\frac{c_{0}^{(1)}}{x_{n}}}{\frac{\alpha_{1}}{x_{n}}\operatorname{cth}(x_{n}L) + \frac{4}{x_{0}^{2}}\alpha_{2}\sum_{m=1}^{\infty}\frac{1}{x_{m}}A_{n,m}B_{n,m}\operatorname{cth}(x_{m}L)}, \quad (24)$$

де α<sub>i</sub> = η<sub>i</sub>/D<sub>i</sub>, i=1, 2; 
$$d_n^v = \frac{v^2}{4D_1^2} + x_n^2$$
,

$$R_n = \frac{x_0 x_n}{2d_n^{\nu}} \left\{ 1 + \frac{\nu}{x_0 D_1 d_n^{\nu}} \left[ (-1)^n e^{-\frac{\nu x_0}{2D_1}} - 1 \right] \right\}$$

Кінцево функції концентрації домішкової речовини (17), (18) набудуть вигляду:

$$c_{1}^{\infty}(x, y) = e^{\frac{y_{1}}{2D_{1}}} \times \left\{ c_{0}^{(1)} \left( 1 - \frac{x}{x_{0}} \right) + \frac{2}{x_{0}D_{1}} \sum_{n=1}^{\infty} \sin(x_{n}x) \frac{\tilde{g}_{n}^{\infty}}{x_{n}} \frac{\operatorname{ch}(x_{n}y)}{\operatorname{sh}(x_{n}L)} \right\}, \quad (25)$$
$$c_{2}^{\infty}(x, y) = c_{0}^{(2)} \left( 1 - \frac{x}{x_{0}} \right) -$$

$$-\frac{2}{x_0 D_2} \sum_{m=1}^{\infty} \sin(x_m x) \frac{\widetilde{g}_m^{\infty}}{x_m} \frac{\operatorname{ch}[x_m (L+l-y)]}{\operatorname{sh}(x_m l)}.$$
 (26)

Зазначимо, що для знаходження  $\tilde{g}_m^{\infty}$  використовуємо співвідношення (20) разом з виразом (24).

**3.** Числовий аналіз потоку маси через внутрішню поверхню контакту. Числові розрахунки проводились у безрозмірних змінних [3]  $\xi = (k/D_1)^{1/2} x$ ,  $\eta = (k/D_1)^{1/2} y$ , де k — коефіцієнт, який має розмірність  $[c^{-1}]$ . Обчислення виконувались з точністю  $\varepsilon = 10^{-9}$ .

На рис. 3 — рис. 6 наведені характерні розподіли потоку частинок домішки через поверхню контакту області  $\Omega_1$  і  $\Omega_2$ , обчислені за формулою (24), в залежності від різних значень параметрів задачі. Вздовж осі абсцис відкладена безрозмірна координата  $\xi$ , вздовж осі ординат — функція  $g(\xi)$ . При цьому прийняті такі значення параметрів задачі:  $\xi_0 = (k/D_1)^{1/2} x_0 = 10$ ,  $\Lambda = (k/D_1)^{1/2} L = 0.1$ ,  $\lambda = (k/D_1)^{1/2} l = 0.9$ ,  $D_2/D_1 = 0.01$ , v = 5,  $\eta_1/\eta_2 = 10$ ,  $c_0^{(1)}/c_0^{(2)} = 0.1$ .



Рис. 3. Залежність функції  $g(\xi)$  від швидкості конвективного переносу в області  $\Omega_1$  (криві 1 — 4 відповідають v = 5; 4; 3; 2)



Рис. 4. Залежність функції  $g(\xi)$  від відношення  $\eta_1/\eta_2$  (криві 1 — 7 відповідають  $\eta_1/\eta_2 = 0.1; 0.5; 2; 5; 10; 15; 100)$ 







Рис. 6. Залежність функції  $g(\xi)$  від різних значень відношення потужностей джерел маси для  $\eta_1/\eta_2 = 0,1$  (рис. 6а, криві 1-4 відповідають  $c_0^{(1)}/c_0^{(2)} = 0.05, 0.1, 0.5, 1.2)$  і  $\eta_1/\eta_2 = 2$  (рис. 6b, криві 1-5 відповідають  $c_0^{(1)}/c_0^{(2)} = 0.05, 0.1, 0.5, 1.2, 5$ )

Зазначимо, що врахування конвективної складової в одній з областей приводить до значного зменшення потоку маси через поверхню контакту на більшій частині цієї межі (для  $\xi \in [0;6]$  функція  $g(\xi)$  набуває значень у межах похибки, рис. 3 — рис. 6), істотно зростаючи біля «нижньої» межі шару  $\xi = \xi_0$ . Причому, чим більшою є швидкість конвективного переносу, тим ближче до межі  $\xi = \xi_0$  починається зростання потоку і тим більших значень досягає максимум  $g(\xi)$  (див. рис. 3).

Зауважимо також, що такі параметри задачі, як відношення коефіцієнтів концентраційної залежності хімічних потенціалів  $\eta_1/\eta_2$ , які визначають стрибок концентрації на межі контакту, і відношення потужностей джерел маси  $c_0^{(1)}/c_0^{(2)}$  на поверхні областей  $\Omega_1$  і  $\Omega_2$  не тільки істотно впливають на величину потоку, але їхня зміна може привести до зміни знака функції  $g(\xi)$ , тобто до зміни напряму сумарного потоку маси через поверхню контакту (рис. 4, рис. 6b).

Якщо  $c_0^{(2)} > c_0^{(1)}$ ,  $D_2 > D_1$  і  $\eta_2 > \eta_1$ , то  $g(\xi) < 0$  для  $\forall \xi \in [0; \xi_0]$ , тобто результуюча потоку спрямована з області  $\Omega_2$  в область  $\Omega_1$  (рис. 3, рис. 5). У протилежному випадку  $g(\xi) > 0$  для  $\forall \xi \in [0; \xi_0]$  і потік спрямований з  $\Omega_1$  в  $\Omega_2$  (рис. 6а).

також зауважимо, що при  $c_0^{(2)} > c_0^{(1)}$  на величину потоку істотно впливає товщина  $\lambda$  (l в розмірних змінних) області  $\Omega_2$  (див. рис. 5), хоч при  $c_0^{(2)} < c_0^{(1)}$  цей вклад є меншим. У той же час, товщина  $\Lambda$  області  $\Omega_1$  практично не впливає на значення функції  $g(\xi)$ .

**4.** Потоки маси домішкової речовини. Отримання аналітичних розв'язків контактно-крайової задачі конвективної дифузії дає можливість знайти потоки маси домішкових частинок через поверхні  $x = x_*$  і  $y = y_*$ , які визначаються за формулами:

$$J_{*_{x}}^{(1)}(y) = -D_{1} \frac{\partial c_{1}^{\infty}(x, y)}{\partial x} + v c_{1}^{\infty}(x, y)\Big|_{x=x_{*}};$$

$$J_{*_{y}}^{(1)}(x) = -D_{1} \frac{\partial c_{1}^{\infty}(x, y)}{\partial y}\Big|_{y=y_{*}};$$
(27)

— в області Ω<sub>2</sub>

$$J_{*_{x}}^{(2)}(y) = -D_{2} \frac{\partial c_{2}^{\infty}(x, y)}{\partial x} \bigg|_{x=x_{*}};$$

$$J_{*_{y}}^{(2)}(x) = -D_{2} \frac{\partial c_{2}^{\infty}(x, y)}{\partial y} \bigg|_{y=y_{*}}.$$
(28)

Підставляємо відповідні вирази (25), (26) для концентрацій  $c_i^{\infty}(x, y)$  у співвідношення (27), (28). Тоді отримаємо:

— в області Ω<sub>1</sub>

$$J_{*_{x}}^{(1)}(y)\Big|_{x=x_{*}} = e^{\frac{vx_{*}}{2D_{1}}} \left\{ c_{0}^{(1)} \left[ \frac{D_{1}}{x_{0}} + \frac{v}{2} \left( 1 - \frac{x_{*}}{x_{0}} \right) \right] + \frac{1}{x_{0}} \sum_{n=1}^{\infty} \widetilde{g}_{n}^{\infty} \frac{\operatorname{ch}(x_{n}y)}{\operatorname{sh}(x_{n}L)} \left[ \frac{v}{D_{1}x_{n}} \operatorname{sin}(x_{n}x_{*}) - 2 \operatorname{cos}(x_{n}x_{*}) \right] \right\},$$

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

$$J_{0x}^{(1)}(y)\Big|_{x=x_0} = e^{\frac{vx_0}{2D_1}} \left\{ c_0^{(1)} \frac{D_1}{x_0} - \frac{2}{x_0} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \widetilde{g}_n^{\infty} \frac{\operatorname{ch}(x_n y)}{\operatorname{sh}(x_n L)} \right\},\,$$

потік домішкових частинок через поверхню  $y = y_*$ 

$$J_{*y}^{(1)}(x)\Big|_{y=y_*} = -\frac{2}{x_0} e^{\frac{yx_0}{2D_1}} \sum_{n=1}^{\infty} \tilde{g}_n^{\infty} \frac{\mathrm{sh}(x_n y_*)}{\mathrm{sh}(x_n L)} \sin(x_n x);$$

— в області Ω<sub>2</sub>

$$J_{*_{x}}^{(2)}(y)\Big|_{x=x_{*}} = \frac{c_{0}^{(2)}D_{2}}{x_{0}} + \frac{2}{x_{0}}\sum_{m=1}^{\infty}\widetilde{g}_{m}^{\infty}\frac{\mathrm{ch}[x_{m}(L+l-y)]}{\mathrm{sh}(x_{m}l)}\mathrm{cos}(x_{m}x_{*}),$$

зокрема, потік через межу шару  $x = x_0$ 

$$J_{0x}^{(2)}(y)\Big|_{x=x_0} = \frac{c_0^{(2)}D_2}{x_0} + \frac{2}{x_0}\sum_{m=1}^{\infty} (-1)^m \tilde{g}_m^{\infty} \frac{\operatorname{ch}[x_m(L+l-y)]}{\operatorname{sh}(x_m l)}$$

потік домішкових частинок через поверхню  $y = y_*$ 

$$J_{*y}^{(2)}(x)\Big|_{y=y_*} = -\frac{2}{x_0} \sum_{m=1}^{\infty} \widetilde{g}_m^{\infty} \frac{\mathrm{sh}[x_m(L+l-y_*)]}{\mathrm{sh}(x_m l)} \mathrm{sin}(x_m x) \, .$$

Таким чином, ми отримали вирази для потоків маси через будь-яку поверхню тіла.

Висновки. 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.

Отримання аналітичних розв'язків контактно-крайової задачі дало можливість встановити вирази для потоків маси домішкових частинок.

Проведено числовий аналіз потоку маси через межу контакту областей, з яких складене тіло, та визначено вплив параметрів задачі на поведінку потоку.

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

### Література

1. *Aifantis E.C.* Continuum basis for diffusion in regions with multiple diffusivity // J. Appl. Phys. — 1979. — Vol. 50, — №3. — P. 1334–1338.

2. Бурак Я.И., Галапац Б.П., Чапля Е.Я. Деформация электропроводных тел с учетом гетеродиффузии заряженных примесных частиц // Физ.-хим. мех. материалов. — 1980. — №5. — С. 8–14.

3. Чапля Є.Я., Чернуха О.Ю. Фізико-математичне моделювання гетеродифузного масопереносу. — Львів: СПОЛОМ, 2003. — 128 с.

4. Fisher J.S. Calculation of diffusion penetration curves for surface and grain boundary diffusion // J.Appl.Phys. — 1951. — Vol. 22. — P. 74–77.

5. Борисов В.Г., Голиков В.М. К теории метода радиографии для измерения параметров диффузии // Заводская лаборатория. — 1956. — №2. — С. 178–188.

6. *Ху С.* Диффузия в кремнии и германии / В кн.: Атомная диффузия в полупроводниках / Под ред. Шоу Д. — М.: Мир, 1975. — С. 248–405.

7. Кановский И.Я., Ткаченко И.В. Эффективный коэффициент диффузии в неоднородной среде // УФЖ. — 1991. — Т. 36. — №3. — С. 432–434.

8. *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. — Vol. 38. — №3. — Р. 657–679.

9. Сергиенко И.В., Скопецкий В.В., Дейнека В.С. Математическое моделирование и исследование

процессов в неоднородных средах. — К.: Наук. думка, 1991. — 432 с.

10. *Фізико-математичне* моделювання складних систем / Під ред. Я. Бурака, Є. Чаплі. — Львів: СПОЛОМ, 2004. — 264 с.

11. Чапля Є.Я., Чернуха О.Ю. Математичне моделювання дифузійних процесів у випадкових і регулярних структурах. — К.: Наук. думка, 2009. — С. 302.

12. *Гиббс Дж*. Термодинамика. Статистическая механика. — М.: Наука, 1982. — 584 с.

13. *Снеддон И*. Преобразования Фурье. — М.: Издво иностр. литературы, 1955. — 667 с.

14. *Мартыненко Н.А., Пустыльников Л.М.* Конечные интегральные преобразования и их применение к исследованию систем с распространенными параметрами. — М.: Наука, 1986. — 304 с.

#### E. Chaplia<sup>1</sup>, O. Chernuha<sup>1</sup>, V. Dmytruk<sup>2</sup>

Mathematical modelling stationary diffusion processes in two-phase bodies of regular structure allowing for convective transport in one of the phases

<sup>1</sup>Pidstryhach Institute for Applied Problems of Mechanics and Mathematics of National Academy of Sciences of Ukraine, Lviv; <sup>2</sup>National University "Lvivska Politechnika", Lviv

In the paper for construction of exact analytical solutions of contact boundary problems of admixture diffusion in two-phase regular structures with allowance for convective mechanism in one of the phases the method is proposed which is based on use of integral transformations in separated regions. By use of contact conditions a relation between corresponding integral transforms is found. An analytical solution is obtained for the problem of diffusion for a two-phase layer of regular structure with taking into account convective mass transfer in one of the phases as well as mass flows through the inner interphase contact surface.

# <sup>2</sup>í ôî ðì àö³ÿ

## EUROMECH Colloquium 511

# BIOMECHANICS OF HUMAN MOTION. NEW FRONTIERS OF MULTIBODY, TECHNIQUES FOR CLINICAL APPLICATIONS

Azores, Portugal, March 9-12 2011

http://www.dem.ist.utl.pt/euromech511

## **Colloquium Topics**

• Biomechanical modelling

• Multibody formulations for biomechanics

• Finite element analysis in human motion

• Kinematic and kinetic data acquisition

• Optimization in biomechanics of human motion

Musculoskeletal modelling

- Stability analysis
- Motor control
- · Contact mechanics in biomechanics

• Human dynamics and rehabilitation

## **Contact Us**

For any information regarding the conference please send a message to the Secretariat: Ms. Paula Jorge IDMEC Instituto Superior Técnico Av. Rovisco Pais 1 Portugal Fax: +351 21 841 7915 e-mail: euromech511(at)dem.ist.utl.pt