

## Математичне моделювання дифузії розпадної речовини у регулярних структурах

Євген Чапля<sup>1</sup>, Ольга Чернуха<sup>2</sup>

<sup>1</sup> д. ф.-м. н., професор, Центр математичного моделювання ІППММ ім. Я. С. Підстригача НАН України, вул. Дж. Дудаєва, 15, Львів, 79005; Інститут механіки середовища і прикладної інформатики Університету Казимира Великого в Бидгощі, вул. Ходкевича, 30, Бидгощ, Польща, 85-064, e-mail: chaplia@cmm.lviv.ua

<sup>2</sup> д. т. н., с. н. с., Центр математичного моделювання ІППММ ім. Я. С. Підстригача НАН України, вул. Дж. Дудаєва, 15, Львів, 79005, e-mail: cher@cmm.lviv.ua

*У роботі знайдено точний розв'язок контактної-крайової задачі дифузії домішкової речовини, що розпадається, в тілі двофазної горизонтально-періодичної шаруватої структури. Досліджено закономірності розподілів концентрації залежно від значень коефіцієнта інтенсивності розпаду мігруючої речовини. Встановлено умови існування граничного переходу від контактної-крайових задач дифузії розпадної речовини до континуальних моделей гетеродифузії двома шляхами з урахуванням розпаду частинок. Визначені потоки маси домішкової розпадної речовини, що мігрує в горизонтально-регулярній структурі.*

**Ключові слова:** дифузія, потоки маси, регулярна структура, розпадна домішкова речовина.

**Вступ.** Під час розв'язування практичних задач певний інтерес представляють точні розв'язки конкретних контактної-крайових задач процесів перенесення для кусково-однорідних систем, зокрема, просторово регулярних [1]. Регулярні структури з різними коефіцієнтами дифузії моделюють процес перенесення домішкової речовини у полікристалах уздовж границь зерен [2, 3] або пористих середовищах, наприклад, ґрунтах, які складаються з моноблоків та областей швидкого переміщення частинок [4-6].

Зауважимо, що знаходження аналітичних розв'язків контактної-крайових задач на основі класичних методів математичної фізики викликає деякі труднощі. Тому в роботах [7, 8] запропоновано оригінальний метод побудови точних розв'язків крайових задач дифузії у тілах із регулярною структурою на основі застосування інтегральних перетворень. Точні аналітичні розв'язки такої задачі дають можливість дослідити межі застосовності відомих із літератури розв'язків задач для тіла з поодиноким включенням [2, 3], а також здійснити граничні переходи до континуальних моделей гетеродифузії [9] із метою оцінки відповідних коефіцієнтів дифузії. У даній роботі досліджуються процеси дифузії розпадної домішкової речовини в двофазному шарі горизонтально-періодичної шаруватої структури: побудовано точний розв'язок контактної-крайової задачі дифузії розпадних частинок, визначено потоки маси в контактуючих областях, проведено граничний перехід до моделі гетеродифузії частинок двома шляхами.

### 1. Об'єкт дослідження та постановка задачі

Нехай тіло, яке займає область шару товщини  $x_0$ , складається з періодично розташованих плоских областей двох типів. Поверхні, що обмежують ці області, перпендикулярні до поверхонь шару (рис. 1а) (вісь  $Ox$  перпендикулярна до поверхонь тіла,  $Oy$  — до поверхонь складників областей). Приймаємо, що на верхній границі шару  $x = 0$  концентрація дифундуючої розпадної речовини зберігає постійні значення, однакові для областей кожного типу, а на нижній  $x = x_0$  — домішкова речовина відсутня. При цьому області з коефіцієнтом дифузії  $D_1$  мають ширину  $2L$ , а з коефіцієнтом  $D_2$  —  $2l$ . 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).

За відсутності конвективного перенесення концентрація домішкової речовини  $c_1(x, y, t)$  в області  $\Omega_1 = [0; x_0] \times [0; L]$  визначається з рівняння

$$\frac{\partial c_1}{\partial t} = D_1 \left[ \frac{\partial^2 c_1}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c_1}{\partial y^2} \right] - \lambda c_1, \quad x, y \in \Omega_1. \quad (1)$$

В області  $\Omega_2 = [0; x_0] \times [L; L + l]$  концентрація домішки  $c_2(x, y, t)$  задовольняє рівняння

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

де  $\lambda$  — коефіцієнт інтенсивності розпаду домішкових частинок.

Приймаємо, що в початковий момент часу

$$c_1(x, y, t)|_{t=0} = c_2(x, y, t)|_{t=0} = 0. \quad (3)$$

Для  $t > 0$  на поверхні шару  $x = 0$  підтримуються постійні значення концентрацій, на поверхні  $x = x_0$  концентрації дорівнюють нулю

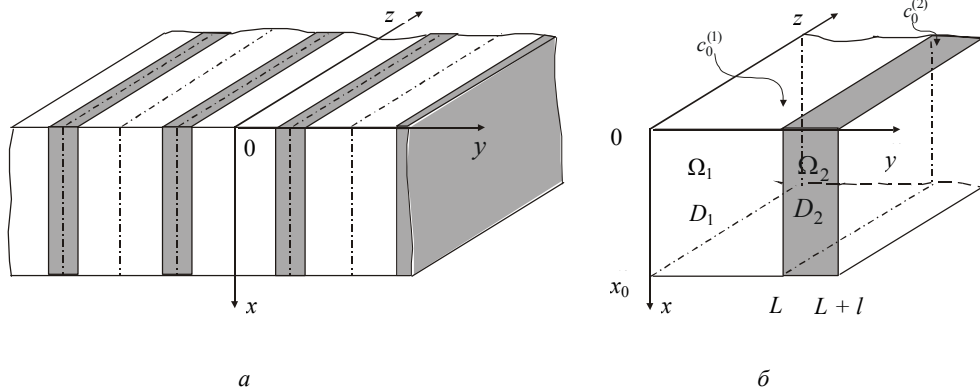


Рис. 1. Горизонтально-періодична структура тіла (а)  
 та виділений елемент тіла такої структури (б)

$$\begin{aligned} c_1(x, y, t)|_{x=0} &= c_0^{(1)} \equiv const, & c_2(x, y, t)|_{x=0} &= c_0^{(2)} \equiv const, \\ c_1(x, y, t)|_{x=x_0} &= c_2(x, y, t)|_{x=x_0} = 0, \end{aligned} \quad (4)$$

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

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

На границі розділу областей  $\Omega_1$  і  $\Omega_2$  задано умови неідеального масового контакту, які сформульовані для функцій концентрації [10]

$$\begin{aligned} k_1 c_1(x, y, t)|_{y=L} &= k_2 c_2(x, y, t)|_{y=L}, \\ \rho_1 D_1 \left. \frac{\partial c_1(x, y, t)}{\partial y} \right|_{y=L} &= \rho_2 D_2 \left. \frac{\partial c_2(x, y, t)}{\partial y} \right|_{y=L}, \end{aligned} \quad (6)$$

де  $k_1$  і  $k_2$  ( $k_1 \neq k_2$ ) — коефіцієнти концентраційної залежності хімічного потенціалу частинок в областях  $\Omega_1$  і  $\Omega_2$  відповідно,  $\rho_1$  і  $\rho_2$  — густини маси в областях  $\Omega_1$  і  $\Omega_2$ .

Зазначимо, що у випадку реалізації ненульових сталих граничних умов 1-го роду на поверхні тіла  $x = x_0$  замінами відповідно в областях  $\Omega_1$  і  $\Omega_2$  крайова задача зводиться до вигляду (1)-(6). При цьому дещо ускладниться контактна умова на шукані функції, але це не вплине на схему розв'язування задачі.

## 2. Побудова аналітичного розв'язку задачі

Розв'язок контактної крайової задачі дифузії (1)-(6) будемо шукати з допомогою інтегральних перетворень за просторовими змінними окремо в контактуючих областях [11]. Застосуємо до задачі (1)-(6) скінченне інтегральне  $\sin$ -перетворення Фур'є за змінною  $x$  ( $x \rightarrow x_n = n\pi/x_0$ ,  $n = 1, 2, \dots$ ;  $c_i(x, y, t) \rightarrow \bar{c}_i(n, y, t)$ ,  $i = 1, 2$ ) [12]. Тоді вихідна крайова задача в зображеннях набуде вигляду

$$\frac{\partial \bar{c}_1}{\partial t} = D_1 \frac{\partial^2 \bar{c}_1}{\partial y^2} - D_1 x_n^2 \bar{c}_1 + D_1 c_0^{(1)} x_n - \lambda \bar{c}_1, \quad y \in \bar{\Omega}_1 = ]0; L[; \quad (7)$$

$$\frac{\partial \bar{c}_2}{\partial t} = D_2 \frac{\partial^2 \bar{c}_2}{\partial y^2} - D_2 x_n^2 \bar{c}_2 + D_2 c_0^{(2)} x_n - \lambda \bar{c}_2, \quad y \in \bar{\Omega}_2 = ]L; L+l[; \quad (8)$$

$$\bar{c}_1|_{t=0} = \bar{c}_2|_{t=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial \bar{c}_1}{\partial y} \right|_{y=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial \bar{c}_2}{\partial y} \right|_{y=L+l} = 0; \quad (9)$$

$$k_1 \bar{c}_1|_{y=L} = k_2 \bar{c}_2|_{y=L}, \quad \rho_1 D_1 \left. \frac{\partial \bar{c}_1}{\partial y} \right|_{y=L} = \rho_2 D_2 \left. \frac{\partial \bar{c}_2}{\partial y} \right|_{y=L}. \quad (10)$$

Інтегральне перетворення за змінною  $y$  виконаємо окремо в областях  $\bar{\Omega}_1$  і  $\bar{\Omega}_2$ . Для того, щоб застосувати перетворення Фур'є необхідно знати величину відповідних функцій на границях області перетворення [12]. При  $y = 0$  й  $y = L + l$  гранична умова (9) визначає функції  $\partial \bar{c}_1 / \partial y$  на границі області  $\bar{\Omega}_1$  і  $\partial \bar{c}_2 / \partial y$  на границі  $\bar{\Omega}_2$ . На інших границях областей  $\bar{\Omega}_1$  і  $\bar{\Omega}_2$  (поверхні контакту) величини  $\partial \bar{c}_i / \partial y$  є невідомі. Дозначимо їх, враховуючи другу контактну умову (10). Вона означає, що на границі контакту  $y = L$  потоки маси рівні між собою та дорівнюють деякій функції часу  $g(t)$ , яку в подальшому потрібно знайти, тобто

$$\rho_1 D_1 \left. \frac{\partial \bar{c}_1}{\partial y} \right|_{y=L} = \rho_2 D_2 \left. \frac{\partial \bar{c}_2}{\partial y} \right|_{y=L} = g(n, L, t) \equiv g(t). \quad (11)$$

Тоді можемо зробити скінченне інтегральне cos-перетворення Фур'є задачі (7), (9), (11) в області  $\bar{\Omega}_1$  ( $y \rightarrow y_k; \bar{c}_1(n, y, t) \rightarrow \tilde{c}_1(n, k, t)$ ) та cos-перетворення Фур'є зі зсувом задачі (8), (9), (11) в області  $\bar{\Omega}_2$  ( $y \rightarrow y_m; \bar{c}_2(n, y, t) \rightarrow \tilde{c}_2(n, m, t)$ ) [11]. Після цих перетворень задача (7)-(10) у зображеннях набуде вигляду

$$\frac{d\tilde{c}_1}{dt} = -D_1 (x_n^2 + y_k^2 + \lambda) \tilde{c}_1 + D_1 a_k c_0^{(1)} x_n + \frac{(-1)^k}{\rho_1} g(t), \quad (12)$$

$$\frac{d\tilde{c}_2}{dt} = -D_2 (x_n^2 + y_m^2 + \lambda) \tilde{c}_2 + D_2 a_m c_0^{(2)} x_n - \frac{(-1)^m}{\rho_2} g(t), \quad (13)$$

$$\tilde{c}_1(t)|_{t=0} = 0, \quad \tilde{c}_2(t)|_{t=0} = 0, \quad (14)$$

де  $y_k = k\pi/L$ ,  $y_m = m\pi/l$ ,  $k, m = 0, 1, 2, \dots$ ;  $a_k = \begin{cases} L, & k = 0 \\ 0, & k = 1, 2, \dots \end{cases}$ ,  $a_m = \begin{cases} l, & m = 0 \\ 0, & m = 1, 2, \dots \end{cases}$ .

Розв'язками звичайних диференціальних рівнянь (12), (13) із початковими умовами (14) є функції [13]

$$\tilde{c}_1(t) = e^{-D_1(x_n^2 + y_k^2 + \lambda)t} \int_0^t \left[ D_1 a_k c_0^{(1)} x_n + \frac{(-1)^k}{\rho_1} g(t') \right] e^{D_1(x_n^2 + y_k^2 + \lambda)t'} dt', \quad (15)$$

$$\tilde{c}_2(t) = e^{-D_2(x_n^2 + y_m^2 + \lambda)t} \int_0^t \left[ D_2 a_m c_0^{(2)} x_n - \frac{(-1)^m}{\rho_2} g(t') \right] e^{D_2(x_n^2 + y_m^2 + \lambda)t'} dt'. \quad (16)$$

У виразах (15), (16) функція  $g(t)$  є невідома. Знайдемо її з першої контактної умови пропорційності концентрацій на границі розділу областей (10). Для цього виконаємо обернені інтегральні cos-перетворення отриманих розв'язків.

В області  $\bar{\Omega}_1$ , враховуючи значення коефіцієнта  $a_k$ , для функції  $\tilde{c}_1(n, k, t)$  маємо

$$\tilde{c}_1(n, 0, t) = e^{-D_1(x_n^2 + \lambda)t} \int_0^t \left\{ Lc_0^{(2)} x_n D_1 e^{D_1(x_n^2 + \lambda)t'} + \frac{g(t')}{\rho_1} e^{D_1(x_n^2 + \lambda)t'} \right\} dt',$$

$$\tilde{c}_1(n, k, t)|_{k \neq 0} = e^{-D_1(x_n^2 + y_k^2 + \lambda)t} \int_0^t \frac{(-1)^k}{\rho_1} g(t') e^{D_1(x_n^2 + y_k^2 + \lambda)t'} dt'$$

і за формулами оберненого cos-перетворення Фур'є [12] одержимо

$$\bar{c}_1(n, y, t) = \int_0^t \left[ \left[ D_1 c_0^{(1)} x_n + \frac{g(t')}{L\rho_1} \right] e^{-D_1(x_n^2 + \lambda)(t-t')} + \frac{2}{L\rho_1} g(t') \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \cos(y_k y) e^{-D_1(x_n^2 + y_k^2 + \lambda)(t-t')} \right] dt'. \quad (17)$$

В області  $\bar{\Omega}_2$ , враховуючи вигляд коефіцієнта  $a_m$ , маємо такі вирази для функції  $\tilde{c}_2(n, k, t)$

$$\tilde{c}_2(n, 0, t) = e^{-D_2(x_n^2 + \lambda)t} \int_0^t \left\{ l c_0^{(2)} x_n D_2 e^{D_2(x_n^2 + \lambda)t'} - \frac{g(t')}{\rho_2} e^{D_2(x_n^2 + \lambda)t'} \right\} dt',$$

$$\tilde{c}_2(n, m, t)|_{m \neq 0} = e^{-D_2(x_n^2 + y_m^2 + \lambda)t} \int_0^t \frac{(-1)^{m+1}}{\rho_2} g(t') e^{D_2(x_n^2 + y_m^2 + \lambda)t'} dt'.$$

Тоді оригінал cos-перетворення зі зсувом [11] функції  $\tilde{c}_2(n, k, t)$  одержимо у вигляді

$$\bar{c}_2(n, y, t) = \int_0^t \left\{ \left[ D_2 c_0^{(2)} x_n - \frac{g(t')}{l\rho_2} \right] e^{-D_2(x_n^2 + \lambda)(t-t')} - \frac{2}{l\rho_2} g(t') \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^m \cos[y_m (y - L)] e^{-D_2(x_n^2 + y_m^2 + \lambda)(t-t')} \right\} dt'. \quad (18)$$

Якщо вирази (17) і (18) підставити в контактну умову (10), то для визначення функції  $g(t')$  і отримаємо таке інтегральне рівняння

$$\int_0^t \left\{ k_1 c_0^{(1)} x_n D_1 e^{-D_1(x_n^2 + \lambda)(t-t')} + k_1 \frac{g(t')}{\rho_1 L} \left[ e^{-D_1(x_n^2 + \lambda)(t-t')} + 2 \sum_{k=1}^{\infty} e^{-D_1(x_n^2 + y_k^2 + \lambda)(t-t')} \right] \right\} dt' =$$

$$= \int_0^t \left\{ k_2 c_0^{(2)} x_n D_2 e^{-D_2(x_n^2 + \lambda)(t-t')} - k_2 \frac{g(t')}{\rho_2 l} \left[ e^{-D_2(x_n^2 + \lambda)(t-t')} - 2 \sum_{m=1}^{\infty} e^{-D_2(x_n^2 + y_m^2 + \lambda)(t-t')} \right] \right\} dt'.$$

Звідси

$$g(t') = \frac{x_n \left[ k_2 c_0^{(2)} D_2 e^{-D_2(x_n^2 + \lambda)(t-t')} - k_1 c_0^{(1)} D_1 e^{-D_1(x_n^2 + \lambda)(t-t')} \right]}{\frac{k_1}{L\rho_1} e^{-D_1(x_n^2 + \lambda)(t-t')} + \frac{k_2}{l\rho_2} e^{-D_2(x_n^2 + \lambda)(t-t')} + 2S_n(t-t')}, \quad (19)$$

$$\text{де } S_n(t-t') = \sum_{j=1}^{\infty} \left[ \frac{k_1}{L\rho_1} e^{-D_1(x_n^2 + \lambda + (j\pi/L)^2)(t-t')} + \frac{(-1)^j k_2}{l\rho_2} e^{-D_2(x_n^2 + \lambda + (j\pi/l)^2)(t-t')} \right].$$

Після застосування оберненого інтегрального  $\sin$ -перетворення Фур'є до виразів (17) і (18) отримаємо точний аналітичний розв'язок контактної-крайової задачі (1)-(6)

$$c_1(x, y, t) = c_0^{(1)} \left( 1 - \frac{x}{x_0} \right) - \frac{2}{x_0} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-D_1(x_n^2 + \lambda)t} \sin(x_n x) \left\{ \frac{c_0^{(1)}}{x_n} D_1 - \frac{1}{\rho_1 L} \int_0^t g(t') e^{D_1(x_n^2 + \lambda)t'} dt' + \frac{2}{\rho_1 L} \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k e^{-D_1 y_k^2 t} \cos(y_k y) \int_0^t g(t') e^{D_1(x_n^2 + y_k^2 + \lambda)t'} dt' \right\}, \quad (20)$$

$$c_2(x, y, t) = c_0^{(2)} \left( 1 - \frac{x}{x_0} \right) - \frac{2}{x_0} \sum_{n=1}^{\infty} e^{-D_2(x_n^2 + \lambda)t} \sin(x_n x) \left\{ \frac{c_0^{(2)}}{x_n} D_2 - \frac{1}{\rho_2 l} \int_0^t g(t') e^{D_2(x_n^2 + \lambda)t'} dt' + \frac{2}{\rho_2 l} \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^m e^{-D_2 y_m^2 t} \cos(y_m y) \int_0^t g(t') e^{D_2(x_n^2 + y_m^2 + \lambda)t'} dt' \right\}, \quad (21)$$

де функція  $g(t')$  визначається формулою (19).

### 3. Граничний перехід до континуальних моделей. Безрозмірна форма

Якщо ми усереднимо функції концентрації  $c_1(x, y, t)$  та  $c_2(x, y, t)$  по ширині виділеного елемента  $[0; L + l]$

$$\bar{c}_i(x, t) = \frac{1}{L + l} \int_0^{L+l} c_i(x, y, t) dy, \quad i = 1, 2, \quad (22)$$

то такі усереднені функції повинні задовольняти рівняння

$$\frac{\partial \bar{c}_1}{\partial t} = D_1 \frac{\partial^2 \bar{c}_1}{\partial x^2} - \lambda \bar{c}_1 + \frac{D_1}{L + l} \frac{\partial c_1}{\partial y} \Big|_{y=L},$$

$$\frac{\partial \bar{c}_2}{\partial t} = D_2 \frac{\partial^2 \bar{c}_2}{\partial x^2} - \lambda \bar{c}_2 + \frac{D_2}{L + l} \frac{\partial c_2}{\partial y} \Big|_{y=L}.$$

Якщо потоки маси на границі контакту можна подати через хімічні потенціали так

$$\begin{aligned} \rho_1 D_1 \frac{\partial c_1}{\partial y} \Big|_{y=L} &= \theta_2 \Delta \mu_2 - \theta_1 \Delta \mu_1 \Big|_{y=L}, \\ \rho_2 D_2 \frac{\partial c_2}{\partial y} \Big|_{y=L} &= \theta_1 \Delta \mu_1 - \theta_2 \Delta \mu_2 \Big|_{y=L}, \end{aligned}$$

тут  $\theta_1, \theta_2$  ( $\theta_1 \neq \theta_2$ ) — сталі величини,  $\Delta \mu_i(x, y, t) = \mu_i(x, y, t) - \mu_i^0$ , де  $\mu_i^0$  — відлікові (рівноважні) значення хімічних потенціалів, то усереднені функції (22) задовольняють рівняння

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{c}_1}{\partial t} &= D_1 \frac{\partial^2 \bar{c}_1}{\partial x^2} - \lambda \bar{c}_1 + \frac{1}{\rho_1(L+l)} (\theta_2 \Delta \mu_2 - \theta_1 \Delta \mu_1) \Big|_{y=L}, \\ \frac{\partial \bar{c}_2}{\partial t} &= D_2 \frac{\partial^2 \bar{c}_2}{\partial x^2} - \lambda \bar{c}_2 - \frac{1}{\rho_2(L+l)} (\theta_2 \Delta \mu_2 - \theta_1 \Delta \mu_1) \Big|_{y=L}. \end{aligned} \quad (23)$$

Оскільки  $\Delta \mu_i \Big|_{y=L} = k_i c_i \Big|_{y=L}$ , то систему рівнянь (23) можна записати у вигляді

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{c}_1}{\partial t} &= D_1 \frac{\partial^2 \bar{c}_1}{\partial x^2} - \lambda \bar{c}_1 + \frac{1}{\rho_1(L+l)} (k_2 \theta_2 c_2 - k_1 \theta_1 c_1) \Big|_{y=L}, \\ \frac{\partial \bar{c}_2}{\partial t} &= D_2 \frac{\partial^2 \bar{c}_2}{\partial x^2} - \lambda \bar{c}_2 - \frac{1}{\rho_2(L+l)} (k_2 \theta_2 c_2 - k_1 \theta_1 c_1) \Big|_{y=L}. \end{aligned}$$

Якщо виконується умова  $c_i(x, L, t)/(L+l) \approx \bar{c}_i(x, t)$ , то одержимо взаємозв'язану систему диференціальних рівнянь гетеродифузії двома шляхами розпадної домішки [9]

$$\begin{aligned} \rho_1 \frac{\partial \bar{c}_1}{\partial t} &= \rho_1 D_1 \frac{\partial^2 \bar{c}_1}{\partial x^2} - \rho_1 \lambda \bar{c}_1 - \bar{k}_1 \bar{c}_1 + \bar{k}_2 \bar{c}_2, \\ \rho_2 \frac{\partial \bar{c}_2}{\partial t} &= \rho_2 D_2 \frac{\partial^2 \bar{c}_2}{\partial x^2} - \rho_2 \lambda \bar{c}_2 + \bar{k}_1 \bar{c}_1 - \bar{k}_2 \bar{c}_2, \end{aligned} \quad (24)$$

де  $\bar{k}_i = \theta_i k_i$  ( $i = 1, 2$ ) — коефіцієнти інтенсивності переходу частинок домішки між різними шляхами дифузії.

Таким чином, за виконання умови рівності потоків домішкової речовини на границі контакту областей лінійним комбінаціям хімічних потенціалів на цій поверхні шляхом усереднення по товщині тіла отримаємо систему рівнянь гетеродифузії двома шляхами з урахуванням взаємопереходів розпадних частинок з одного шляху міграції на інший.

Введемо безрозмірні змінні [9]

$$\tau = \bar{k}_2 t, \quad \xi = (\bar{k}_2 / D_1)^{1/2} x, \quad \eta = (\bar{k}_2 / D_1)^{1/2} y. \quad (25)$$

Тоді контактнo-крайову задачу (1)-(6) можна подати у природній безрозмірній формі

$$\frac{\partial c_1}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 c_1}{\partial \xi^2} + \frac{\partial^2 c_1}{\partial \eta^2} - \tilde{\lambda} c_1, \quad \xi, \eta \in \omega_1 = [0; \xi_0] \times [0; \Lambda], \quad (26)$$

$$\frac{\partial c_2}{\partial \tau} = d \left[ \frac{\partial^2 c_2}{\partial \xi^2} + \frac{\partial^2 c_2}{\partial \eta^2} \right] - \tilde{\lambda} c_2, \quad \xi, \eta \in \omega_2 = [0; \xi_0] \times [\Lambda; \Lambda + \bar{\lambda}]; \quad (27)$$

$$\begin{aligned} c_1(\xi, \eta, \tau)|_{\tau=0} &= c_2(\xi, \eta, \tau)|_{\tau=0} = 0, \\ c_1(\xi, \eta, \tau)|_{\xi=0} &= c_0^{(1)}, \quad c_2(\xi, \eta, \tau)|_{\xi=0} = c_0^{(2)}, \\ c_1(\xi, \eta, \tau)|_{\xi=\xi_0} &= c_2(\xi, \eta, \tau)|_{\xi=\xi_0} = 0; \\ \frac{\partial c_1(\xi, \eta, \tau)}{\partial \eta} \Big|_{\eta=0} &= \frac{\partial c_2(\xi, \eta, \tau)}{\partial \eta} \Big|_{\eta=\Lambda + \bar{\lambda}} = 0; \end{aligned} \quad (28)$$

$$k_1 c_1 \Big|_{\eta=\Lambda} = k_2 c_2 \Big|_{\eta=\Lambda}, \quad \rho_1 \frac{\partial c_1}{\partial \eta} \Big|_{\eta=\Lambda} = \rho_2 d \frac{\partial c_2}{\partial \eta} \Big|_{\eta=\Lambda}. \quad (29)$$

Тут  $d = D_2/D_1$ ,  $\tilde{\lambda} = \lambda/\bar{k}_2$ ;  $\xi_0 = (\bar{k}_2/D_1)^{1/2} x_0$ ,  $\Lambda = (\bar{k}_2/D_1)^{1/2} L$ ,  $\bar{\lambda} = (\bar{k}_2/D_1)^{1/2} l$ .

Таким чином, запропонований граничний перехід від контактної-крайової задачі дифузії розпадної домішки у горизонтально-періодичних структурах до континуальних моделей гетеродифузії двома шляхами дозволяє не тільки знаходити розв'язки задач гетеродифузії, але й використовувати природну безрозмірну форму (25), яка не містить геометричні характеристики тіла чи його складників, для розв'язування задач дифузії в тілах періодичної структури.

#### 4. Числовий аналіз розподілів концентрації розпадних частинок у шарі горизонтально-регулярної структури

Розподіли концентрації домішкової розпадної речовини в шарі з горизонтально-регулярною структурою, обчислені за формулами (20) і (21), подані на рис. 2-5. Числові розрахунки проводилися в безрозмірних змінних  $\tau$ ,  $\xi$ ,  $\eta$ , які введені формулами (25). Прийнято такі значення коефіцієнтів задачі:  $\xi_0 = 10$ ;  $\Lambda = 1$ ,  $\bar{\lambda} = 0,1$ ,  $d = D_2/D_1 = 0,01$ ,  $\rho_2/\rho_1 = 1,5$ ,  $c_0^{(1)}/c_0^{(2)} = 0,1$ . На рис. 2 та 3 наведені розподіли концентрації нерозпадної ( $\tilde{\lambda} = 0$ ) та розпадної ( $\tilde{\lambda} = 10$ ) домішки вздовж осі  $O\xi$  у моменти часу  $\tau = 1; 5; 10; 20; 100$  (криві 1-5 відповідно) для  $\bar{k}_1/\bar{k}_2 = 10$ .

Рис. 4 ілюструє поведінку функції концентрації домішки, що розпадається, в момент часу  $\tau = 10$  для різних значень безрозмірного коефіцієнта інтенсивності розпаду мігруючої речовини  $\tilde{\lambda} = 2, 5, 10, 20$  (криві 1-4 відповідно). На рис. 5 показано розподіли концентрації розпадної домішки ( $\tilde{\lambda} = 10$ ) вздовж осі  $O\eta$ , тобто по ширині виділеного елемента тіла. Рис. 5а ілюструє розподіли концентрації для безрозмірних моментів часу  $\tau = 1, 5, 10$  (криві 1-3) на глибині  $\xi = 1$ . На рис. 5б розподіли концентрації наведені для значень відношення коефіцієнтів дифузії  $d = 0,1; 0,01$



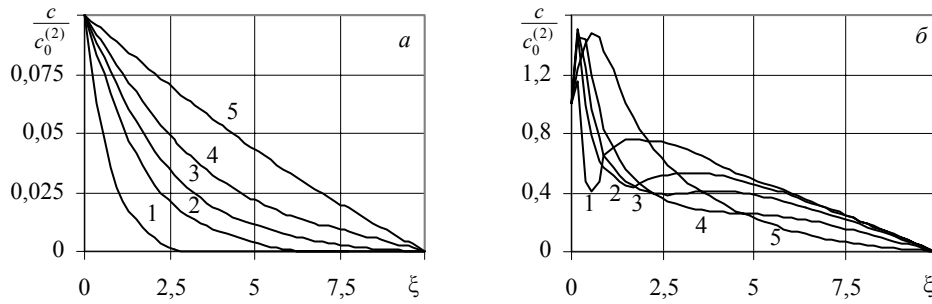


Рис. 2. Розподіли концентрації домішки за координатою  $\xi$  у різні моменти часу та  $\tilde{\lambda} = 0$ ,  $a$  — в області  $\Omega_1$ ,  $b$  — в області  $\Omega_2$

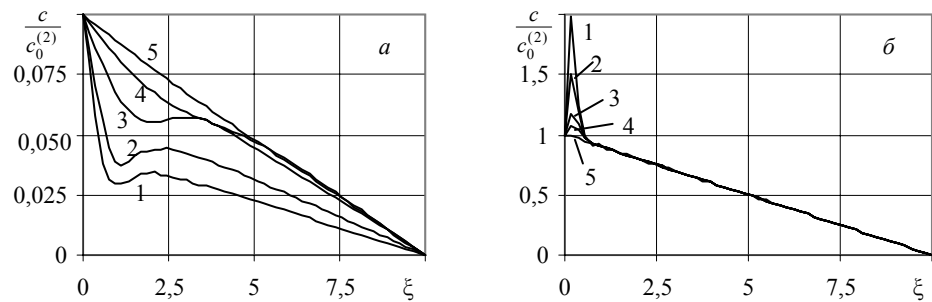


Рис. 3. Розподіли концентрації домішки за координатою  $\xi$  у різні моменти часу та  $\tilde{\lambda} = 10$ ,  $a$  — в області  $\Omega_1$ ,  $b$  — в області  $\Omega_2$

(криві 1, 2). Тут суцільні лінії відповідають функції  $c(\xi, \eta, \tau)/c_0^{(2)}$  у момент часу  $\tau = 1$  і  $d = 0,01$ .

Зазначимо, що поведінка функції концентрації по глибині тіла суттєво відрізняється для областей  $\Omega_1$  і  $\Omega_2$  (рис. 2а-4а та рис. 2б-4б) як для розпадної, так і нерозпадної дифундуючої речовини. Якщо для міграції частинок, що не розпадаються, у горизонтально-періодичних структурах характерні розподіли концентрації по глибині шару, подібні до розподілів в однорідному тілі для  $\Omega_1$  (рис. 2а) та в багатокомпонентних тілах для  $\Omega_2$  (рис. 2б), то врахування процесів розпаду речовини може привести до якісних змін поведінки функції концентрації в усіх структурних елементах тіла. Зокрема, зі збільшенням потужності джерел маси на поверхні й інтенсивності переходу частинок з  $\Omega_2$  в  $\Omega_1$  і зменшенням коефіцієнта дифузії в області  $\Omega_2$  з часом приповерхневий максимум в області  $\Omega_2$  зменшується (рис. 3б) аж до виходу на стаціонарний розподіл концентрації в однорідному середовищі. Водночас в області  $\Omega_1$  приповерхневий локальний мінімум (рис. 4а), характерний для розподілів концентрації розпадних домішок, із часом виходить на стаціонарний режим однорідного тіла (рис. 3а). Для інших співвідношень коефіцієнтів задачі спостерігається відповідне зменшення значень концентрації домішкової речовини залежно від величини коефіцієнта розпаду домішкових частинок.

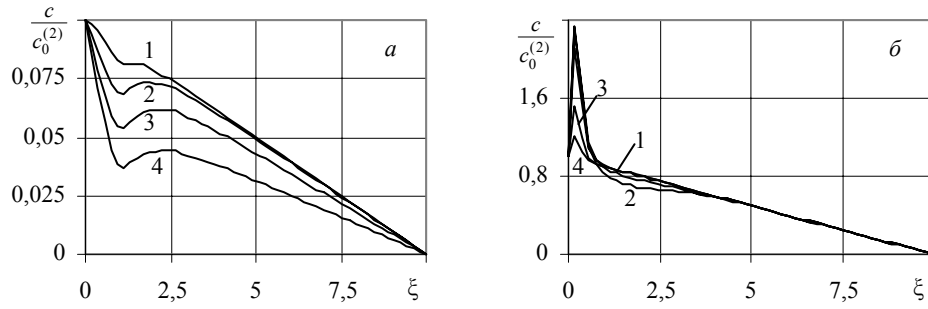


Рис. 4. Розподіли концентрації домішки для різних значень параметра  $\tilde{\lambda}$  при  $\tau = 10$ ,  $a$  — в області  $\Omega_1$ ,  $b$  — в області  $\Omega_2$

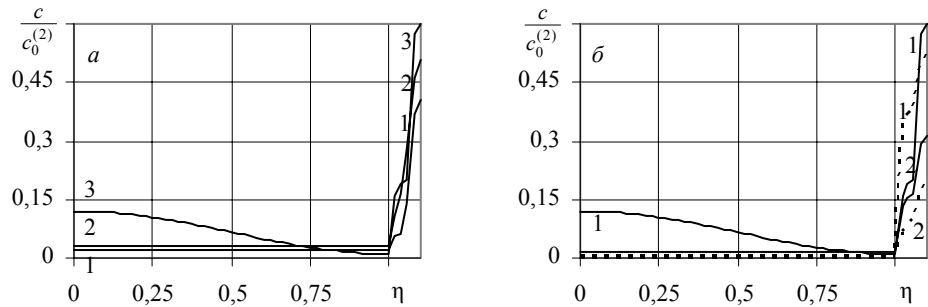


Рис. 5. Розподіли концентрації домішки по ширині виділеного елемента тіла,  $a$  — для різних моментів часу,  $b$  — для різних значень параметра  $d$

## 5. Потіки розпадних частинок у шарі горизонтально-регулярної структури

Отримані аналітичні вирази для концентрацій домішкової речовини, що розпадається, дають можливість знайти такі важливі характеристики процесу масоперенесення як потоки маси домішкових частинок через довільну поверхню шару  $x = x^*$ . Вони визначаються за формулами

$$J_*^{(i)}(t) = -D_i \left. \frac{\partial c_i(x, y, t)}{\partial x} \right|_{x=x^*}, \quad (x, y) \in \Omega_i, \quad i = 1, 2; \quad x^* \in [0; x_0]. \quad (30)$$

Підставляючи вирази для концентрацій домішкової речовини (20) і (21) у співвідношення (30), отримаємо формули для потоків маси через поверхню  $x = x^*$

$$J_*^{(1)}(t) = \frac{D_1}{x_0} \left[ c_0^{(1)} + 2 \sum_{n=1}^{\infty} e^{-D_1(x_n^2 + \lambda)t} \cos(x_n x^*) \left\{ c_0^{(1)} D_1 - \frac{x_n}{\rho_1 L} \int_0^t g(t') e^{D_1(x_n^2 + \lambda)t'} dt' + \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{2x_n}{\rho_1 L} \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k e^{-D_1 y_k^2 t} \cos(y_k y) \int_0^t g(t') e^{D_1(x_n^2 + y_k^2 + \lambda)t'} dt' \right\} \right], \quad (x^*, y) \in \Omega_1, \quad (31)$$

$$J_*^{(2)}(t) = \frac{D_2}{x_0} \left[ c_0^{(2)} + 2 \sum_{n=1}^{\infty} e^{-D_2(x_n^2 + \lambda)t} \cos(x_n x^*) \left\{ c_0^{(2)} D_2 - \frac{x_n}{\rho_2 l} \int_0^t g(t') e^{D_2(x_n^2 + \lambda)t'} dt' + \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{2x_n}{\rho_2 l} \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^m e^{-D_2 y_m^2 t} \cos(y_m y) \int_0^t g(t') e^{D_2(x_n^2 + y_m^2 + \lambda)t'} dt' \right\} \right], \quad (x^*, y) \in \Omega_2. \quad (32)$$

Зокрема, для потоків маси через границю шару  $x = x_0$  маємо

$$J_0^{(1)}(t) = \frac{D_1}{x_0} \left[ c_0^{(1)} + 2 \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n e^{-D_1(x_n^2 + \lambda)t} \left\{ c_0^{(1)} D_1 - \frac{x_n}{\rho_1 L} \int_0^t g(t') e^{D_1(x_n^2 + \lambda)t'} dt' + \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{2}{\rho_1 L} \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k e^{-D_1 y_k^2 t} \cos(y_k y) \int_0^t g(t') e^{D_1(x_n^2 + y_k^2 + \lambda)t'} dt' \right\} \right], \quad (x_0, y) \in \Omega_1, \\ J_0^{(2)}(t) = \frac{D_2}{x_0} \left[ c_0^{(2)} + 2 \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n e^{-D_2(x_n^2 + \lambda)t} \left\{ c_0^{(2)} D_2 - \frac{x_n}{\rho_2 l} \int_0^t g(t') e^{D_2(x_n^2 + \lambda)t'} dt' + \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{2}{\rho_2 l} \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^m e^{-D_2 y_m^2 t} \cos(y_m y) \int_0^t g(t') e^{D_2(x_n^2 + y_m^2 + \lambda)t'} dt' \right\} \right], \quad (x_0, y) \in \Omega_2.$$

Аналогічним чином можемо знайти потоки маси домішкових частинок через будь-яку вертикальну поверхню  $y = y^*$ .

**Висновки.** З використанням інтегральних перетворень за просторовими змінними отримано точний аналітичний розв'язок контактної-крайової задачі дифузії домішкової розпадної речовини в горизонтально-періодичних структурах. Знаходження аналітичних виразів для концентрації домішок дає можливість визначити потоки маси речовини через задану поверхню. Також точний розв'язок такого класу задач дифузії дозволяє знайти аналітичні вирази концентрацій для часткових, однак практично важливих, крайових задач.

Знайдено умови, за яких задачу дифузії частинок, що розпадаються, у тілі з горизонтально-періодичною структурою можна звести до задачі вертикальної (одновимірної) гетеродифузії двома шляхами. Це, зокрема, дало можливість ввести природну безрозмірну форму для задачі масоперенесення у горизонтально-регулярних тілах.

Зауважимо, що запропонований тут метод знаходження точного розв'язку контактної-крайових задач дифузії розпадної речовини не накладає умови на розміри контактуючих областей, тобто може бути застосований, як для тіл із співвимиірними розмірами контактуючих областей, так і у випадку, коли ширина однієї з областей є значно більша або менша за іншу.

Зазначимо, що зважаючи на вигляд рівнянь (1), (2), розв'язки задачі масоперенесення в горизонтально-періодичних структурах можна застосувати для вивчення процесів теплопровідності.

*Робота виконана за часткової підтримки Державного фонду фундаментальних досліджень МОН України (Ф25/95-2008, ДР № 0107U009406).*

## Література

- [1] *Нечаев Ю. С.* К вопросу об интерпретации некоторых аномалий гетеродиффузии в металлах // Изв. высш. уч. заведений. Черная металлургия. — 1979. — № 3. — С. 89-92.
- [2] *Любов Б. Я.* Диффузионные процессы в неоднородных твердых телах. — Москва: Наука, 1981. — 295 с.
- [3] *Fisher J. C.* Calculation of diffusion penetration curves for surface and grain boundary diffusion // J. Appl. Phys. — 1951. — Vol. 22. — P. 74-77.
- [4] *Прохоров В. М.* Миграция радиоактивных загрязнений в почвах. — Москва: Энергоатомиздат, 1981. — 106 с.
- [5] *Bear J., Verruijt A.* Modeling groundwater flow and pollution. — Dordrecht, Holland: Reidel Publishing Company, 1990. — 415 p.
- [6] *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. 36, No 3. — P. 657-679.
- [7] *Чапля Є. Я., Чернуха О. Ю.* Процеси дифузії в тілі з періодичною структурою // Мат. методи і фіз.-мех. поля. — 2002. — Т. 45, № 4. — С. 124-131.
- [8] *Chernukha O.* Admixture mass transfer in a body with horizontally periodical structure // International Journal of Heat and Mass Transfer. — 2005. — Vol. 48. — P. 2290-2298.
- [9] *Чапля Є. Я., Чернуха О. Ю.* Фізико-математичне моделювання гетеродифузного масопереносу. — Львів: СПОЛОМ, 2003. — 128 с.
- [10] *Райченко А. И.* Математическая теория диффузии в приложениях. — Киев: Наук. думка, 1981. — 396 с.
- [11] *Фізико-математичне моделювання складних систем / Під наук. ред Я. Бурака, Є. Чаплі.* — Львів: СПОЛОМ, 2004. — 264 с.
- [12] *Снеддон И.* Преобразования Фурье. — Москва: Изд-во иностр. лит-ры, 1955. — 667 с.
- [13] *Камке Э.* Справочник по обыкновенным дифференциальным уравнениям. — Москва: Наука, 1985. — 304 с.

## Mathematical modelling diffusion of decayable substance in regular structures

Yevhen Chaplya, Olha Chernukha

*In the paper an exact solution of the contact initial-boundary value problem is found for diffusion of decaying admixture particles in a body of two-phase periodical stratified structure. Regularities of concentration distributions are studied depending on values of the coefficient of intensity of migrating substance decay. Conditions are established for existence of passage to the limit from contact initial-boundary value problems of decaying substance diffusion to continual models of heterodiffusion by two ways allowing for decay process. Mass flows are defined for decaying admixture, which particles migrate in a horizontally regular structure.*

## Математическое моделирование диффузии распадающегося вещества в регулярных структурах

Евгений Чапля, Ольга Чернуха

*В работе найдено точное решение контактно-краевой задачи диффузии распадающегося примесного вещества в теле двухфазной периодической слоистой структуры. Исследовано закономерности распределений концентрации в зависимости от значений коэффициента интенсивности распада мигрирующего вещества. Определены условия существования предельного перехода от контактно-краевых задач диффузии распадающегося вещества к континуальным моделям гетеродиффузии двумя путями с учетом распада. Определены потоки массы распадающегося примесного вещества, мигрирующего в горизонтально-регулярной структуре.*

Отримано 05.06.08