

Дифузія у тришаровій смузі з урахуванням стрибка функції концентрації домішкової речовини на внутрішніх поверхнях контакту

Богдан Гера¹, Євген Чапля², Ольга Чернуха³

¹ д. т. н., професор, Центр математичного моделювання ІППММ ім. Я. С. Підстригача НАН України, вул. Дж. Дудаєва, 15, Львів, Україна; 79005; Дніпропетровський національний університет залізничного транспорту імені академіка В. Лазаряна, Львівська філія, вул. І. Блажкевич, 12а, Львів, e-mail: gera@cmm.lviv.ua

² д. ф.-м. н., професор, Центр математичного моделювання ІППММ ім. Я. С. Підстригача НАН України, вул. Дж. Дудаєва, 15, Львів, 79005; Інститут механіки і прикладної інформатики Університету Казимира Великого в Бидгощі, вул. Ходкевича, Бидгощ, Польща, 85-064, e-mail: chaplia@cmm.lviv.ua

³ 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; Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника, вул. Шевченка, 57, Івано-Франківськ, Україна, 76025

Отримано розв'язок задачі дифузії домішкової речовини в смузі, що містить внутрішній шар з іншого матеріалу, дифузійні характеристики якого можуть суттєво відрізнятися від характеристик оточуючих його шарів. При формулюванні задачі дифузії приймається, що на межах контакту шарів концентрація домішкових частинок стрибкоподібно змінюється, а їх потік через ці межі неперервний. Власні функції розв'язання розв'язку в ряд також мають розриви першого роду. За отриманими розрахунковими формулами проведено обчислення функції концентрації домішкової речовини та проаналізовано одержані результати.

Ключові слова: дифузія домішкових частинок, шарувата структура, стрибок концентрації домішкових частинок.

Вступ. Математичне моделювання процесу дифузії домішок із використанням методів термодинаміки нерівноважних процесів і законів збереження [1, 2] дозволило отримати математичні формулювання задач дифузії у кусково-однорідних тілах або у тілах із різного роду включеннями [3-5]. Особливістю таких формулювань стали умови стрибка концентрації домішкових частинок на межах контакту. Ці умови виникають із неперервності хімічного потенціалу, що в лінійному наближенні його залежності від концентрації домішки в тілі призводить до стрибкоподібної зміни функції концентрації дифундуючої речовини у разі переходу від частини тіла з одними фізичними характеристиками до частини тіла з іншими характеристиками. При цьому потоки дифундуючої речовини однакові з різних сторін внутрішніх поверхонь.

Значні труднощі під час розв'язування задач дифузії у тілах із включеннями виникають у зв'язку зі складністю структури цих тіл, яку переважно не можна точно описати. Із певністю, зазвичай, можна судити лише про форму, об'ємну частку цих включень у тілі та їхні фізико-хімічні властивості. За незначної об'ємної частки включень, порівняно з об'ємною часткою основного матеріалу, є відомі

методи математичного опису, які частково враховують невизначеності структури тіла шляхом введення усереднених чи узагальнених характеристик тіла [6, 7]. Також були отримані наближені розв'язки задачі дифузії домішки у багатошаровому тілі, зокрема, під час проведення статистичного усереднення за ансамблем просторових конфігурацій фаз [4, 8-10]. Зазвичай, таке усереднення приводить до згладжування функції концентрації домішки в тілі, навіть усунення її стрибків на межі контакту [4].

У зв'язку з цим доцільно побудувати точний розв'язок без процедури усереднення для проведення порівняльного аналізу точних і наближених розв'язків задачі дифузії у кусково-неоднорідному тілі з умовами стрибка концентрації домішки на межах контакту його частин. Проте зробити це вдається лише в окремих випадках, зокрема, для тіл шаруватої чи періодичної [11] структури.

У цій роботі методом розділення змінних [12] отримано точний розв'язок задачі дифузії для смуги, яка містить внутрішній прошарок з іншого матеріалу. Товщина прошарку може бути співмірна з товщинами оточуючих його частин смуги. На поверхнях контакту приймаємо умови стрибка концентрації домішкових частинок.

1. Постановка задачі дифузії у тришаровій смугі

Розглянемо смугу товщини l , що містить внутрішній шар іншого матеріалу товщини $h = z_2 - z_1$ (рис. 1), у якому дифундує домішкова речовина. Позначимо через $\Omega_0 =]0, z_1[\cup]z_2, l[$ та $\Omega_1 =]z_1, z_2[$.

Дифузія домішкових частинок в областях Ω_j описується рівняннями [3]

$$\rho_j \frac{\partial c(z, t)}{\partial t} = d_j \frac{\partial^2 c(z, t)}{\partial z^2}, \quad z \in \Omega_j, \quad j = 0, 1, \quad (1)$$

де $c(z, t)$ — концентрація домішки, ρ_j, d_j — густина та кінетичний коефіцієнт дифузії в Ω_j ($j = 0, 1$). На границі смуги $z = 0$ підтримується постійне значення концентрації c_* , а на границі $z = l$ домішкова речовина відсутня, тобто справджуються такі умови

$$c(0, t) = c_* \equiv \text{const}, \quad c(l, t) = 0. \quad (2)$$

На поверхнях $z = z_1, z = z_2$ маємо умови рівності хімічних потенціалів і потоку речовини, які приводять до таких умов на концентрацію [4]

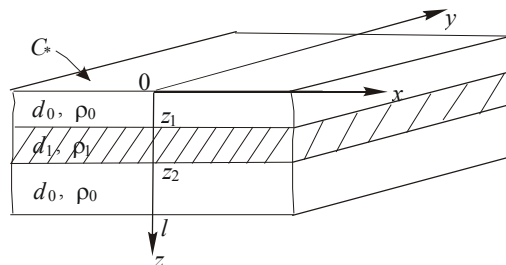


Рис. 1. Тришарова смуга

$$k_0 c(z, t)|_{z=z_1-0} = k_1 c(z, t)|_{z=z_1+0}, \quad k_1 c(z, t)|_{z=z_2-0} = k_0 c(z, t)|_{z=z_2+0}, \quad (3)$$

$$d_0 \frac{\partial c(z, t)}{\partial z} \Big|_{z=z_1-0} = d_1 \frac{\partial c(z, t)}{\partial z} \Big|_{z=z_1+0}, \quad d_1 \frac{\partial c(z, t)}{\partial z} \Big|_{z=z_2-0} = d_0 \frac{\partial c(z, t)}{\partial z} \Big|_{z=z_2+0}. \quad (4)$$

Тут через k_j позначено коефіцієнти концентраційної залежності хімічного потенціалу в областях Ω_j ($j = 0, 1$).

У початковий момент часу $t = 0$ домішки в смузі немає, тобто її концентрація дорівнює нулю

$$c(z, 0) = 0. \quad (5)$$

2. Побудова розв'язку сформульованої контактної крайової задачі

Розв'язок задачі (1)-(5) шукаємо методом розділення змінних [10]. Функцію концентрації домішки $c(z, t)$ подаємо у вигляді такого ряду

$$c(z, t) = Z_0(z) + \sum_{i=1}^{\infty} Z_i(z) \Theta_i(t), \quad z \in \Omega_j, \quad j = 0, 1. \quad (6)$$

Функція $Z_0(z)$ задовольняє умови

$$\frac{d^2 Z_0(z)}{dz^2} = 0, \quad z \in]0, z_1[\cup]z_1, z_2[\cup]z_2, l[, \quad (7)$$

$$Z_0(0) = c_*, \quad Z_0(l) = 0, \quad (8)$$

$$k_0 Z_0(z)|_{z=z_1-0} = k_1 Z_0(z)|_{z=z_1+0}, \quad k_1 Z_0(z)|_{z=z_2-0} = k_0 Z_0(z)|_{z=z_2+0}, \quad (9)$$

$$d_0 \frac{dZ_0(z)}{dz} \Big|_{z=z_1-0} = d_1 \frac{dZ_0(z)}{dz} \Big|_{z=z_1+0}, \quad d_1 \frac{dZ_0(z)}{dz} \Big|_{z=z_2-0} = d_0 \frac{dZ_0(z)}{dz} \Big|_{z=z_2+0}. \quad (10)$$

Розв'язуючи задачу (7)-(10), отримуємо

$$Z_0(z) = c_* \begin{cases} 1 + az, & 0 \leq z < z_1, \\ \frac{k_0}{k_1} (1 + az_1) + a \frac{d_0}{d_1} (z - z_1), & z_1 < z < z_2, \\ -a(l - z), & z_2 < z \leq l, \end{cases} \quad (11)$$

де $a = -[l + z_1 - z_2 + (z_2 - z_1)d_0 k_1 / k_0 d_1]^{-1}$.

Зауважимо, що $\lim_{t \rightarrow \infty} c(z, t) = Z_0(z)$.

Власні функції $Z_i(z)$ ($i = 1, 2, \dots$), за якими розкладаємо шукану функцію $c(z, t)$, визначаємо з умов

$$\frac{d^2 Z_i(z)}{dz^2} = -\left(\frac{\pi}{z_0} \lambda_i\right)^2 Z_i(z), \quad z \in]0, z_1[\cup]z_1, z_2[\cup]z_2, l[, \quad (12)$$

$$\frac{d^2 Z_i(z)}{dz^2} = - \left(\frac{\pi}{z_0} \sqrt{\frac{\rho_1 d_0}{\rho_0 d_1}} \lambda_i \right)^2 Z_i(z), \quad z \in]z_1, z_2[, \quad (13)$$

$$Z_i(0) = 0, \quad Z_i(z_0) = 0, \quad (14)$$

$$k_0 Z_i(z)|_{z=z_1-0} = k_1 Z_i(z)|_{z=z_1+0}, \quad k_1 Z_i(z)|_{z=z_2-0} = k_0 Z_i(z)|_{z=z_2+0}, \quad (15)$$

$$d_0 \frac{dZ_i(z)}{dz} \Big|_{z=z_1-0} = d_1 \frac{dZ_i(z)}{dz} \Big|_{z=z_1+0}, \quad d_1 \frac{dZ_i(z)}{dz} \Big|_{z=z_2-0} = d_0 \frac{dZ_i(z)}{dz} \Big|_{z=z_2+0}. \quad (16)$$

Умови (15) описують розриви першого роду функцій $Z_i(z)$ для $z = z_1$ і $z = z_2$, які зумовлюють стрибкоподібну зміну функції (6).

Для визначення власних значень задачі (12)-(16), що забезпечують її ненульові розв'язки, отримано рівняння

$$F(\lambda) \equiv \cos\left(\lambda\pi\gamma\frac{h}{l}\right)\sin\left(\lambda\pi\frac{(l-h)}{l}\right) + \sin\left(\lambda\pi\gamma\frac{h}{l}\right) \times \\ \times \left[\frac{k_1}{k_0} \chi \cos\left(\lambda\pi\frac{z_1}{l}\right) \cos\left(\lambda\pi\frac{l-z_2}{l}\right) - \frac{k_0}{k_1} \chi^{-1} \sin\left(\lambda\pi\frac{z_1}{l}\right) \sin\left(\lambda\pi\frac{l-z_2}{l}\right) \right] = 0, \quad (17)$$

з якого знаходимо λ_i . Тут $\gamma = \sqrt{(\rho_1 d_0)/(\rho_0 d_1)}$, $\chi = \sqrt{(\rho_0 d_0)/(\rho_1 d_1)}$.

Згідно з методом розділення змінних, функції $\Theta_i(t)$ визначаємо з рівняння

$$\frac{d\Theta_i(t)}{dt} = - \left(\frac{\pi}{l} \sqrt{\frac{d_0}{\rho_0}} \lambda_i \right)^2 \Theta_i(t), \quad t \in]0, \infty[. \quad (18)$$

Звідси отримуємо, що

$$\Theta_i(t) = \sigma_i e^{-\left(\frac{\pi\lambda_i}{l}\right)^2 \frac{d_0}{\rho_0} t}, \quad (19)$$

де σ_i — довільна стала. Підставивши (19) у формулу (6), отримаємо подання функції концентрації у вигляді

$$c(z, t) = Z_0(z) + \sum_{i=1}^{\infty} \sigma_i e^{-\left(\frac{\pi\lambda_i}{l}\right)^2 \frac{d_0}{\rho_0} t} Z_i(z), \quad z \in \Omega_j, \quad j = 0, 1. \quad (20)$$

Зауважимо, що власні функції $Z_i(z)$ ($i = 1, 2, \dots$) є ортонормовані, тобто задовольняють умову

$$\frac{2}{l} \left(\rho_0 \int_0^{z_1} Z_i(z) Z_j(z) dz + \rho_1 \frac{k_1}{k_0} \int_{z_1}^{z_2} Z_i(z) Z_j(z) dz + \rho_0 \int_{z_2}^l Z_i(z) Z_j(z) dz \right) = \begin{cases} 0, & i \neq j, \\ 1, & i = j. \end{cases}$$

Коефіцієнти σ_i у поданні функції $c(z, t)$ у вигляді ряду (20) отримаємо як коефіцієнти в розвиненні $-Z_0(z)$ у ряд за ортогональними функціями $Z_i(z)$ ($i = 1, 2, \dots$). Їх обчислення проведемо за формулами

$$\sigma_i = -\frac{2}{l} \left(\rho_0 \int_0^{z_1} Z_0(z) Z_i(z) dz + \rho_1 \frac{k_1}{k_0} \int_{z_1}^{z_2} Z_0(z) Z_i(z) dz + \rho_0 \int_{z_2}^l Z_0(z) Z_i(z) dz \right). \quad (21)$$

Таким чином отримано усі складники розвинення функції концентрації $c(z, t)$ у ряд. Якщо шар товщиною l є однорідний із характеристиками ρ, d_0 , то формула (20) співпадає з одержаним раніше [4] розв'язком задачі дифузії

$$c(z, t) = c_* \left(1 - \frac{z}{l} \right) - 2c_* \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n\pi} e^{-\left(\frac{n\pi}{l}\right)^2 \frac{d_0}{\rho_0} t} \sin\left(\frac{n\pi}{l} z\right). \quad (22)$$

3. Обчислення та дослідження розподілу концентрації

Обчислення концентрації проводимо за формулами (11)-(21). Для цього вибирали такі характеристики матеріалу та домішкової речовини [4]: $d_0 = 1,8 \cdot 10^{-11} \text{ м}^2/\text{с}$, $\rho_0 = 7,8 \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3$, $d_1 = 4,34 \cdot 10^{-10} \text{ м}^2/\text{с}$, $\rho_1 = 8,93 \cdot 10^3 \text{ кг/м}^3$, що відповідають дифузії водню в шарі заліза з прошарком міді.

Для побудови системи власних функцій $Z_i(z)$ ($i = 1, 2, \dots$) спочатку розв'язуємо рівняння (17) $F(\lambda) = 0$. Графік функції $y = F(\lambda)$ використовуємо для оцінювання значень λ_i ($i = 1, 2, \dots$), якщо $k_1/k_0 = 1,25$, $l = 0,025 \text{ м}$, $z_1 = 0,01 \text{ м}$, $z_2 = 0,015 \text{ м}$, має вигляд, наведений на рис. 2.

Зауважимо, що існують проміжки, в яких сусідні λ_i мають близькі значення. Кожному з цих λ_i відповідає своя функція $Z_i(z)$, отримана з розв'язку крайової задачі (12)-(16). Зазначимо, що ряд (20) є збіжний. Швидкість його збіжності можна оцінити за спаданням коефіцієнтів σ_i , значення яких для $i = \overline{1, 10}$ є такі: $-0,566$, $-0,256$, $-0,190$, $-0,128$, $-0,113$, $-0,085$, $-0,080$, $-0,064$, $-0,061$, $-0,051$.

На рис. 3а суцільні лінії ілюструють зміну концентрації дифундуючої домішки у шарі з включенням $z_1 = 0,01 \text{ м}$, $z_2 = 0,015 \text{ м}$ для моментів часу $t = 10^{10} \text{ с}$, $3 \cdot 10^{10} \text{ с}$, 10^{11} с (криві 1-3 відповідно). При цьому у формулі (20) враховували 100 доданків. Для порівняння штриховими лініями показані обчислені

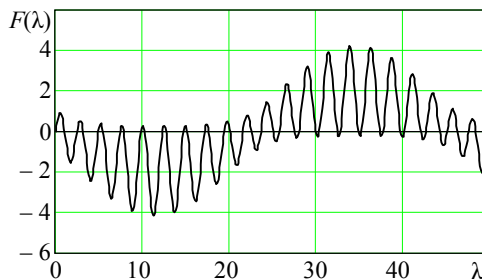


Рис. 2. Графік функції $y = F(\lambda)$

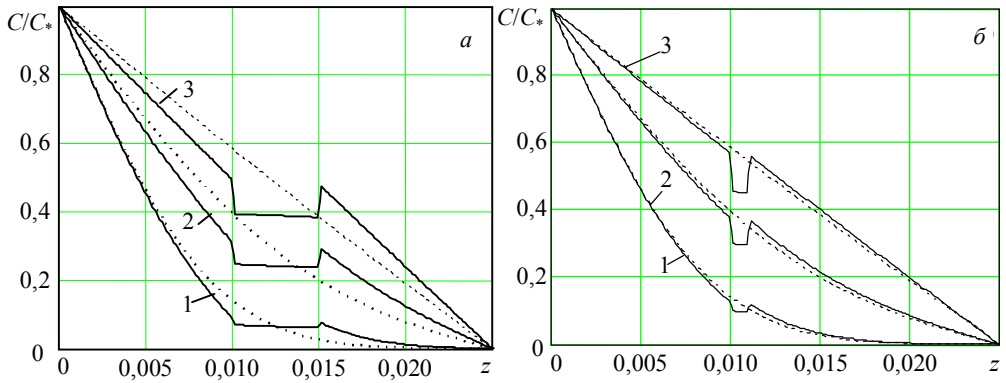


Рис. 3. Розподіл концентрації $c(z, t)$ у шарі в задані моменти часу t

за формулою (22) функції концентрації домішки в однорідній смузі. На рис. 3б проілюстровані аналогічні розподіли для тоншого включення, розташованого в межах $z_1 = 0,01$ м, $z_2 = 0,011$ м.

Під час переходу через границі $z = z_1$ і $z = z_2$ отримано стрибок концентрації домішки. Подальші дослідження підтвердили, що величина стрибка визначається значенням концентрації при підході до межі контакту та коефіцієнтами концентраційної залежності хімічного потенціалу k_0, k_1 . Показано (рис. 3), що зменшення товщини прошарку приводить до наближення функції концентрації в шаруватій смузі до функції концентрації в однорідній смузі. Відхилення суттєві лише у прошарку та в областях поблизу нього. Із плином часу стрибки функції концентрації зростають і у стаціонарному режимі досягають свого максимуму.

4. Потік домішкових частинок у тришаровій смузі

Отримання аналітичного розв'язку (20) дозволяє знайти також потік $J(z, t)$ дифундуючої речовини

$$J(z, t) = -d_j \frac{\partial c(z, t)}{\partial z}, \quad z \in \Omega_j, \quad j = 0, 1.$$

Потік $J(z, t)$ набуває однакових значень під час переходу через внутрішні поверхні розділу матеріалу $z = z_1$ і $z = z_2$, що забезпечується умовами (4).

На рис. 4 показані зміни потоку $J(z, t)$ в області смуги у моменти часу $t = 10^{10}$ с, $3 \cdot 10^{10}$ с, 10^{11} с (криві 1-3 відповідно) для тих же ж характеристик матеріалу, що й на рис. 3. Для порівняння штриховими лініями показані функції потоку в однорідній смузі.

Зазначимо, що зі збільшенням часу потік речовини в тілі стає рівномірніший. Для стаціонарного випадку $t \rightarrow \infty$ він стає постійний, не залежить від z .

Наявність прошарку з іншого матеріалу не є бар'єром для потоку домішки. Зменшення товщини прошарку призводить до розподілу потоку, близького до потоку домішки в однорідній смузі.

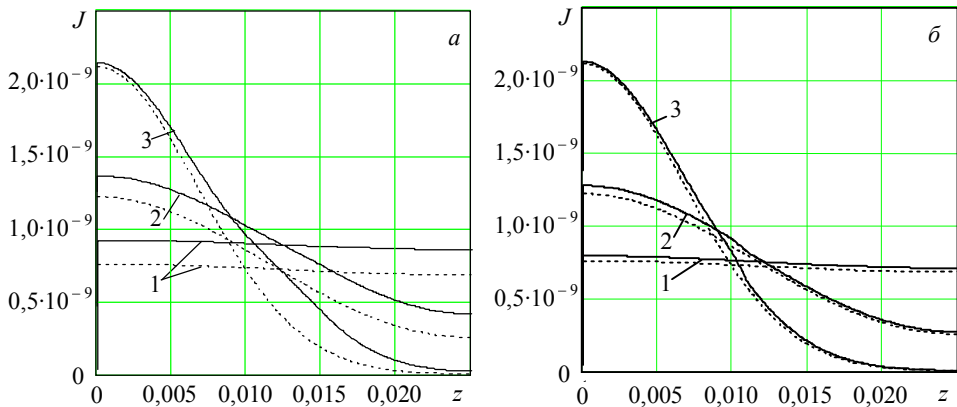


Рис. 4. Зміна потоку речовини в області шару

Висновки. Показано, що зі збільшенням концентрації домішкових частинок у смузі з включенням, зростають її стрибки на внутрішніх границях. За розташування внутрішнього шару з іншого матеріалу на середній поверхні смуги найбільші стрибки спостерігаються в стаціонарному випадку, тобто при $t \rightarrow \infty$. В однорідних підобластях функції концентрації домішки монотонні. Незважаючи на стрибок концентрації на межі контакту, зі зменшенням товщини внутрішнього шару функція концентрації прямує до концентрації домішкових частинок в однорідній смузі. Зміна розташування тонкого прошарку не спричиняє істотних збурень концентрації, порівняно з дифузією в однорідній смузі, за винятком самого прошарку.

Література

- [1] Де Гроот, С. П. Неравновесная термодинамика / С. П. Де Гроот, П. Мазур. — Москва: Мир, 1964. — 456 с.
- [2] Дьярмати, И. Неравновесная термодинамика / И. Дьярмати. — Москва: Мир, 1974. — 304 с.
- [3] Бурак, Я. Й. Континуально-термодинамічні моделі механіки твердих розчинів / Я. Й. Бурак, Є. Я. Чапля, О. Ю. Чернуха. — Київ: Наукова думка, 2006. — 272 с.
- [4] Чапля, Є. Я. Математичне моделювання дифузійних процесів у випадкових і регулярних структурах / Є. Я. Чапля, О. Ю. Чернуха. — Київ: Наукова думка, 2009. — 302 с.
- [5] Любов, Б. Я. Диффузионные процессы в неоднородных твердых телах / Б. Я. Любов. — Москва: Наука, 1981. — 295 с.
- [6] Lidzba, D. Homogenisation theories applied to porous media mechanics / D. Lidzba // J. Theor. and Appl. Mech. — 1998. — Vol. 36, No 3. — P. 657-679.
- [7] Matysiak, S. J. On homogenisation of diffusion processes in microperiodic stratified bodies / S. J. Matysiak, R. Mieszkowski // Int. J. Heat and Mass Trans. — 1999. — Vol. 26. — P. 539-547.
- [8] Чапля, Є. Я. Дифузія в шарі з випадково розташованими сферичними включеннями / Є. Я. Чапля, О. Ю. Чернуха // Доп. НАН України. — 2004. — № 5. — С. 74-80.
- [9] Чернуха, О. Ю. Про один підхід до побудови розв'язків крайових задач у багатофазних випадково-неоднорідних шаруватих тілах / О. Ю. Чернуха // Доп. НАН України. — 2001. — № 9. — С. 37-42.

- [10] Чапля, Є. Я. Дифузія домішки в тілі у смугі з випадково розташованим прошарком за неідеальних умов контакту / Є. Я. Чапля, О. Ю. Чернуха, Г. І. Мороз // Вісник Львівського ун-ту. Сер. Прикладна математика та інформатика. — 2004. — Вип. 9. — С. 182-192.
- [11] Чапля, Є. Я. Процеси дифузії в тілі з періодичною структурою / Є. Я. Чапля, О. Ю. Чернуха // Мат. методи і фіз. мех. поля. — 2002. — Т. 45, № 4. — С. 124-131.
- [12] Тихонов, А. Н. Уравнения математической физики / А. Н. Тихонов, А. А. Самарский. — Москва: Наука, 1972. — 735 с.

Diffusion in a three-layered strip with allowance for jump of admixture concentration function on internal contact surfaces

Bohdan Gera, Yevhen Chaplya, Olha Chernukha

A solution for the initial-boundary problem of the admixture diffusion in a strip containing an initial layer of a different material, which diffusive characteristics can differ substantially from the characteristics of a basic body part, is obtained. When formulating the diffusion problem it is assumed that the admixture concentration of particles changes in discrete steps at contact boundary of the layers and their flow through these surfaces is indiscrete. Proper function of expansion in series contains also discontinuities of the first kind. The admixture concentration is calculated by the obtained calculating formulae and the obtained results are analyzed.

Диффузия в трехслойной полосе с учетом скачка функции концентрации примеси на внутренних поверхностях контакта

Богдан Гера, Евгений Чапля, Ольга Чернуха

Получено решение задачи диффузии примеси в полосе, включающей внутренний слой из другого материала, диффузные характеристики которого могут существенно отличаться от характеристик внешних слоев. При формулировке задачи диффузии принимается, что на границах контакта слоев концентрация частиц примеси скачкообразно изменяется, а их поток через эти границы является непрерывен. Собственные функции разложения решения в ряд также имеют разрывы первого рода. Согласно полученным расчетным формулам проведены вычисления функции концентрации примеси и проанализированы полученные результаты.

Отримано 05.05.10