

**МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ КОНВЕКТИВНОЇ ДИФУЗІЇ І СОРБЦІЇ У ТРИШАРОВОМУ ПОРИСТОМУ ТІЛІ. І. МАСОПЕРЕНЕСЕННЯ ДОМІШКОВИХ ЧАСТИНОК З ПОРОВИМ РОЗЧИНОМ**

*Побудовано математичну модель конвективної дифузії домішкових частинок, яка супроводжується сорбційними процесами, у тілі, що складається з трьох контактуючих пористих шарів з різними фізико-хімічними характеристиками, за умов неідеального контакту концентрації на границях поділу. Аналітичний розв'язок контактної крайової задачі конвективної дифузії домішкової речовини у складеному шарі отримано за допомогою інтегральних перетворень за просторовою змінною, які застосовано у кожному з шарів окремо. Розв'язано систему інтегральних рівнянь для знаходження функцій концентрації мігруючих частинок на міжфазних границях. Одержано формули для обчислення концентрацій частинок домішкової речовини, сорбованих на скелеті тришарового пористого тіла.*

**Ключові слова:** конвективна дифузія, сорбція, тришарове пористе тіло, неідеальна умова контакту, інтегральне перетворення.

На сьогодні серед актуальних завдань важливе місце займає проблема очистки води до стану питної, а також очистка побутових і промислових каналізаційних стоків для вторинного використання. В існуючих промислових системах очистки питної води та забруднених стоків широко використовують багатошарові фільтри з різною пористістю шарів. Ефективність їхньої роботи істотно залежить від сорбційних властивостей окремих шарів, пористості, а також відповідних геометричних параметрів [6, 18]. Визначення оптимальних характеристик фільтрів, режимів і часу тривалості їхньої ефективної роботи базується насамперед на моделюванні процесів перенесення, які в них відбуваються [14, 15]. Точний розв'язок для такого класу задач неможливо знайти класичними методами математичної фізики. Крім цього, врахування одночасно дифузійної і конвективної складових значно ускладнює використання числових методів.

Пористі матеріали є різноманітними за своєю структурою: ґрунти, порошки, волокнисті матеріали, матеріали з внутрішніми порожнинами тощо [4]. Матеріали можуть бути пористими в своєму природному стані або, з огляду на технологічні особливості, можуть містити області суцільного матеріалу і порожнин. Тому середня густина пористого матеріалу є меншою, ніж густина матеріалу скелета, а питомий об'єм є більшим, ніж у випадку суцільного матеріалу. Характеристики поглинання енергії пористих матеріалів, наприклад пінопластів, пінополістиролів тощо, добре підходять для захисту від шкідливих імпульсних впливів [4].

Переважно багатofазні пористі матеріали або багатofазні композитні матеріали, які знайшли своє застосування у промисловості, медицині тощо, характеризуються тим, що мають складену структуру, тобто складаються з певних контактуючих або взаємодіючих макроелементів. При цьому кожний макроелемент таких матеріалів, конструкцій або об'єктів має свої фізико-хімічні властивості і свою мезо- або мікроструктуру (зокрема, у випадку пористих матеріалів або композитів). Такі особливості матеріалів повинні враховуватися на етапі побудови математичних моделей фізичних явищ чи процесів у таких структурах.

Ця стаття присвячена математичному опису конвективної дифузії домішкової речовини, що супроводжується сорбційними процесами, у тришарових пористих середовищах з урахуванням стрибків шуканих функцій та рівності дифузійних потоків на границях контакту структурних елементів

✉ [byixx13@gmail.com](mailto:byixx13@gmail.com)

тіла. Для побудови точних аналітичних розв'язків використовується метод інтегральних перетворень за просторовою змінною окремо в із кожній контактуючих областей.

**1. Об'єкт дослідження і постановка задачі.** Розглянемо шар безрозмірної товщини  $x_0$ , що складається з трьох плоскопаралельних пористих підшарів (областей  $\Omega_i$ ,  $i = 1, 2, 3$ ) з товщинами  $x_1$ ,  $x_2 - x_1$  та  $x_0 - x_2$  (рис. 1) з різними фізичними характеристиками. Систему декартових координат виберемо так, щоб вісь  $Ox$  була перпендикулярною до поверхні шару з початком на верхній границі шару і спрямованою вглиб тіла. Нехай на поверхні  $x = 0$  діє сталє джерело маси для домішкових частинок потужності  $c_0$ .

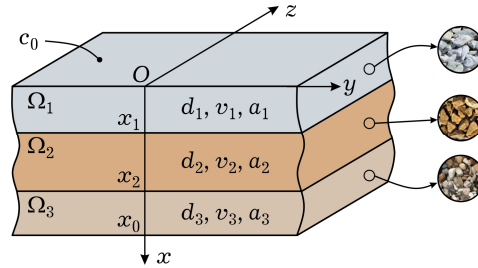


Рис. 1

Нехай розподіл неоднорідностей є близьким до рівномірного, і розміри включень (або пор) структурних елементів багатофазних композитів (або пористих матеріалів) є такими малими, щоб у кожній фізично малій області середовища знаходилося макроскопічне число включень. Частинки домішкової речовини, які знаходяться у включеннях (порах) і поза ними, характеризуються різними фізичними властивостями, зокрема рухливостями або коефіцієнтами дифузії. Вважаємо, що довільна область кожного шару складається зі скелета та водного розчину, який заповнює поровий простір. Водний розчин є двокомпонентним і складається з частинок води та домішки. Домішкові частинки знаходяться у двох станах – конвективно рухомому розчині і на поверхні скелета [1–3, 16].

Рівняння балансу для порового розчину запишемо у вигляді [14]

$$\rho^{(i)} \frac{dc_j^{(i)}(\tau, \mathbf{r})}{d\tau} = -\nabla \cdot \mathbf{J}_j^{(i)} + \sigma_{mj}^{(i)}, \quad i = 1, 2, 3, \quad j = 0, 1, 2,$$

де  $\rho^{(i)}$  – сумарна густина розчину;  $c_j^{(i)}(\tau, \mathbf{r})$  – масова концентрація компоненти  $j$  в  $i$ -му структурному елементі;  $\mathbf{J}_j^{(i)}$  – дифузійний потік  $j$ -ї складової;  $\sigma_{mj}^{(i)}$  – потужність виробництва маси компоненти  $j$  в  $i$ -му елементі тіла ( $\sigma_{m0}^{(i)} = 0$ );  $d/d\tau = \partial/\partial\tau + \mathbf{v}^{(i)} \cdot \nabla$  – повна похідна за часом,  $\mathbf{v}^{(i)}$  – швидкість конвективного перенесення частинок в  $i$ -му елементі тіла. Водній компоненті розчину відповідає індекс  $j = 0$ , домішковій речовині у конвективно рухомому розчині – індекс  $j = 1$ , а у зв'язаному стані – індекс  $j = 2$ .

Дифузійний потік визначається градієнтами хімічних потенціалів, які лінійно залежать від концентрацій:

$$\mathbf{J}_j^{(i)} = -L^{(i)} \nabla c_j^{(i)}(\tau, \mathbf{r}), \quad i = 1, 2, 3, \quad j = 0, 1, 2,$$

де  $L^{(i)}$  – кінетичний коефіцієнт перенесення в  $i$ -му структурному елементі.

Потужність виробництва маси  $j$ -ї компоненти є пропорційною до локальної різниці хімічних потенціалів і, як наслідок, – різниці концентрацій  $c_j^{(i)}(\tau, \mathbf{r})$ . Якщо знехтувати зворотним переходом частинок домішки зі зв'язаного стану в розчин, то отримаємо  $\sigma_{m1}^{(i)} = -k^{(i)} c_1^{(i)}(\tau, \mathbf{r})$ ,  $\sigma_{m2}^{(i)} = 0$  ( $k^{(i)}$  – кі-

нетичний коефіцієнт процесу сорбції).

Концентрації  $c_j^{(i)}(\tau, \mathbf{r})$  та потоки  $\mathbf{J}_j^{(i)}$  ( $i = 1, 2, 3$ ,  $j = 0, 1, 2$ ) задовольняють умови нормування  $\sum_{i,j} c_j^{(i)}(\tau, \mathbf{r}) = 1$  і  $\sum_{i,j} \mathbf{J}_j^{(i)} = 0$ . Перенесення у зв'язаному стані відсутнє. Густина  $\rho^{(i)}$  і кінетичні коефіцієнти  $L^{(i)}$  та  $k^{(i)}$  вважаємо сталими. Тоді концентрації  $c_1^{(i)}(\tau, \mathbf{r})$  та  $c_2^{(i)}(\tau, \mathbf{r})$  визначаємо з рівнянь

$$\frac{\partial c_1^{(i)}(\tau, \mathbf{r})}{\partial \tau} = d_i \Delta c_1^{(i)}(\tau, \mathbf{r}) - \mathbf{v}^{(i)} \cdot \nabla c_1^{(i)}(\tau, \mathbf{r}) - a_i c_1^{(i)}(\tau, \mathbf{r}),$$

$$\frac{\partial c_2^{(i)}(\tau, \mathbf{r})}{\partial \tau} = a_i c_1^{(i)}(\tau, \mathbf{r}), \quad i = 1, 2, 3,$$

де  $d_i = L^{(i)}/\rho_0$  – коефіцієнт дифузії домішки;  $a_i = k^{(i)}/\rho_0$  – зведений кінетичний коефіцієнт процесу сорбції;  $\rho_0$  – стале значення густини розчину.

У випадку вертикальної конвективної дифузії системи рівнянь масоперенесення домішок у пористому структурному елементі тіла  $\Omega_i$  набувають вигляду [14]

$$\frac{\partial c_1^{(i)}(\tau, x)}{\partial \tau} = d_i \frac{\partial^2 c_1^{(i)}(\tau, x)}{\partial x^2} - v_i \frac{\partial c_1^{(i)}(\tau, x)}{\partial x} - a_i c_1^{(i)}(\tau, x), \quad (1')$$

$$\frac{\partial c_2^{(i)}(\tau, x)}{\partial \tau} = a_i c_1^{(i)}(\tau, x), \quad x \in \Omega_i, \quad i = 1, 2, 3. \quad (1'')$$

На поверхні тіла  $x = 0$  підтримується значення постійної концентрації домішки, тоді як на нижній границі тіла  $x = x_0$  концентрація є нульовою:

$$c_1^{(1)}(\tau, x)|_{x=0} = c_0 \equiv \text{const}, \quad c_1^{(3)}(\tau, x)|_{x=x_0} = 0. \quad (2)$$

Також приймаємо, що початкові умови є нульовими:

$$c_1^{(i)}(\tau, x)|_{\tau=0} = c_2^{(i)}(\tau, x)|_{\tau=0} = c_3^{(i)}(\tau, x)|_{\tau=0} = 0, \quad i = 1, 2, 3. \quad (3)$$

На границях контакту фаз  $x = x_i$ ,  $i = 1, 2$ , виконуються умови рівності хімічних потенціалів і сумарних масових потоків:

$$\lambda^{(i)} c_1^{(i)}(\tau, x)|_{x=x_i} = c_1^{(i+1)}(\tau, x)|_{x=x_i}, \quad (4)$$

$$\mathbf{J}_1^{(i)}(\tau, x)|_{x=x_i} = \mathbf{J}_1^{(i+1)}(\tau, x)|_{x=x_i}, \quad i = 1, 2, \quad (5)$$

де  $\lambda^{(i)} = \lambda_i/\lambda_{i+1}$ ,  $i = 1, 2$ , – відношення коефіцієнтів концентраційної залежності хімічних потенціалів.

Існування і єдиність розв'язків задач перенесення для параболічних систем з неоднорідними умовами спряження типу неідеального контакту в класі функцій  $L_2(\Omega)$ ,  $\Omega \in \mathbb{R}^3$ , доведено в роботах [7, 10, 13].

**2. Аналітичні співвідношення для концентрацій домішок, що мігрують у розчині, у контактуючих пористих областях.** Розв'язок контактної крайової задачі (1'), (2)–(5) будемо шукати за допомогою скінченних інтегральних перетворень за просторовою змінною окремо в кожній із контактуючих областей  $\Omega_i$ ,  $i = 1, 2, 3$ . Для того щоб застосувати інтегральне перетворення за змінною  $x$ , необхідно мати значення відповідних функцій або їхніх похідних на границях контактуючих областей [12, 19]. Тому на міжфазних границях  $x = x_i$ ,  $i = 1, 2$  (рис. 1) доозначимо шукані функції

$c_1^{(i)}(\tau, x)$  за допомогою контактних умов (4), вводячи деякі невідомі функції від часу:

$$\lambda^{(i)} c_1^{(i)}(\tau, x) \Big|_{x=x_i} = c_1^{(i+1)}(\tau, x) \Big|_{x=x_i} = g_i(\tau, x_i) \equiv g_i(\tau), \quad i = 1, 2. \quad (6)$$

Таким чином, на границях контакту  $x = x_i$  концентрації  $c_1^{(i)}(\tau, x)$  подаємо через функції  $g_1(\tau)$  і  $g_2(\tau)$ :

$$c_1^{(i)}(\tau, x) \Big|_{x=x_i} = \frac{1}{\lambda^{(i)}} g_i(\tau), \quad c_1^{(i+1)}(\tau, x) \Big|_{x=x_i} = g_i(\tau), \quad i = 1, 2. \quad (7)$$

Проінтегруємо рівняння (1''), яке пов'язує  $c_2^{(i)}(\tau, x)$  і  $c_1^{(i)}(\tau, x)$ . Враховуючи початкові умови (3), отримаємо

$$c_2^{(i)}(\tau, x) = a_i \int_0^\tau c_1^{(i)}(\tau', x) d\tau', \quad i = 1, 2, 3. \quad (8)$$

Тепер можемо виконати скінченні інтегральні перетворення окремо в кожній з областей  $\Omega_i$  [5]. Для знаходження розв'язку крайової задачі конвективної дифузії (1'), (2), (3), (7) в області  $\Omega_1 = [0, x_1]$  застосуємо таке інтегральне перетворення [8]:

$$\bar{c}_1(\tau, n) = \int_0^{x_1} c_1^{(1)}(\tau, x) \exp\left(\frac{-v_1 x}{2d_1}\right) \sin(y_n x) dx, \quad y_n = \frac{n\pi}{x_1}, \quad n = 1, 2, \dots, \quad (9)$$

де

$$c_1^{(1)}(\tau, x) = \frac{2}{x_1} \exp\left(\frac{v_1 x}{2d_1}\right) \sum_{n=1}^{\infty} \bar{c}_1(\tau, n) \sin(y_n x).$$

У зображеннях розв'язок задачі (1'), (2), (3), (7) має вигляд

$$\begin{aligned} \bar{c}_1(\tau, n) = e^{-\left(a_1 + y_n^2 d_1 + \frac{v_1^2}{4d_1}\right)\tau} \times \\ \times \int_0^\tau d_1 y_n e^{-\left(a_1 + y_n^2 d_1 + \frac{v_1^2}{4d_1}\right)\tau'} \left( c_0 + \frac{(-1)^{n+1}}{\lambda^{(1)}} e^{-\left(\frac{v_1 x}{2d_1}\right)} g_1(\tau') \right) d\tau'. \end{aligned} \quad (10)$$

В області  $\Omega_2 = [x_1, x_2]$  до задачі (1'), (3), (7) застосовуємо аналогічне інтегральне перетворення зі зсувом:

$$\bar{c}_2(\tau, m) = \int_{x_1}^{x_2} c_1^{(2)}(\tau, x) \exp\left(\frac{-v_2(x - x_1)}{2d_2}\right) \sin(y_m(x - x_1)) dx, \quad (11)$$

де

$$c_1^{(2)}(\tau, x) = \frac{2}{x_2 - x_1} \exp\left(\frac{v_2(x - x_1)}{2d_2}\right) \sum_{m=1}^{\infty} \bar{c}_2(\tau, m) \sin(y_m(x - x_1)),$$

$$y_m = \frac{m\pi}{x_2 - x_1}, \quad m = 1, 2, \dots$$

Після застосування інтегрального перетворення (11) і розв'язання крайової задачі в зображеннях отримаємо

$$\begin{aligned} \bar{c}_2(\tau, m) = e^{-\left(a_2 + y_m^2 d_2 + \frac{v_2^2}{4d_2}\right)\tau} \times \\ \times \int_0^\tau d_2 y_m e^{-\left(a_2 + y_m^2 d_2 + \frac{v_2^2}{4d_2}\right)\tau'} \left( g_1(\tau) + \frac{(-1)^{m+1}}{\lambda^{(2)}} g_2(\tau') \right) d\tau'. \end{aligned} \quad (12)$$

В області  $\Omega_3 = [x_2, x_0]$  маємо крайову задачу (1'), (2), (3), (7), до розв'язання якої застосуємо таке інтегральне перетворення з урахуванням зсуву початку координат:

$$\bar{c}_3(\tau, k) = \int_{x_2}^{x_0} c_1^{(3)}(\tau, x) \exp\left(\frac{-v_3(x - x_2)}{2d_3}\right) \sin(y_k(x - x_2)) dx, \quad (13)$$

де

$$c_1^{(3)}(\tau, x) = \frac{2}{x_0 - x_2} \exp\left(\frac{v_3(x - x_2)}{2d_3}\right) \sum_{k=1}^{\infty} \bar{c}_3(\tau, k) \sin(y_k(x - x_2)),$$

$$y_k = \frac{k\pi}{x_0 - x_2}, \quad k = 1, 2, \dots$$

Розв'язок крайової задачі в області  $\Omega_3$  у зображеннях має вигляд

$$\bar{c}_3(\tau, k) = e^{-\left(a_3 + y_k^2 d_3 + \frac{v_3^2}{4d_3}\right)\tau} \int_0^{\tau} d_3 y_k e^{\left(a_3 + y_k^2 d_3 + \frac{v_3^2}{4d_3}\right)\tau'} g_2(\tau') d\tau'. \quad (14)$$

Зауважимо, що розв'язки (10), (12) і (14) отримано для кожного макроелемента (шару) як окремого тіла. Вирази (10), (12) і (14) містять невідомі функції  $g_1(\tau')$  та  $g_2(\tau')$ . Визначатимемо їх із контактних умов (5) рівності потоків мас на обох границях поділу областей  $x_i$ ,  $i = 1, 2$ . При цьому нормаль завжди перпендикулярна до поверхні тіла і спрямована з його об'єму [9].

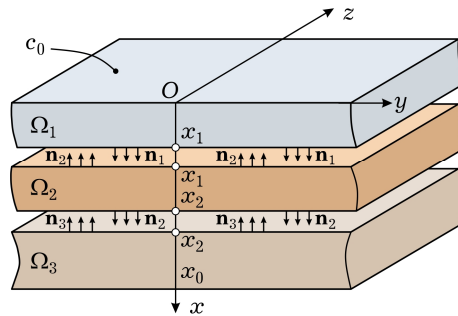


Рис. 2

Двостороння поверхня тіла  $\Phi$  характеризується такою властивістю: для будь-якої точки  $M \in \Phi$  і для довільного контуру, який проходить по поверхні  $\Phi$  і не перетинається з границею поверхні, вибраний у точці  $M$  напрямком нормалі, неперервно змінюючись при русі точки вздовж контуру, не змінює свого напрямку на протилежний при поверненні в точку  $M$  [11]. Враховуючи це, у випадку нашої задачі на границі контакту  $x = x_1$  зовнішня нормаль макроелемента  $\Omega_1$  спрямована у напрямку осі  $Ox$ , а зовнішня нормаль макроелемента  $\Omega_2$  – у протилежному напрямку (рис. 2). Аналогічну ситуацію маємо на границі контакту  $x = x_2$ : зовнішня нормаль макроелемента  $\Omega_2$  спрямована у напрямку осі  $Ox$ , а зовнішня нормаль макроелемента  $\Omega_3$  – у протилежному напрямку (рис. 2).

Маючи розв'язки для кожного макроелемента тіла, «зшиємо» їх у єдину систему. Враховуючи незмінність напрямку потоку в кожному макроелементі, для коректного зшивання другі умови контакту трансформуються до такого вигляду:

– на першій границі контакту  $x = x_1$ :

$$d_1 \frac{\partial c_1^{(1)}}{\partial x} - v_1 c_1^{(1)} \Big|_{x=x_1-0} = d_2 \frac{\partial c_1^{(2)}}{\partial x} - v_2 c_1^{(2)} \Big|_{x=x_1+0}, \quad (15)$$

– на другій границі контакту  $x = x_2$ :

$$-d_2 \frac{\partial c_1^{(2)}}{\partial x} - v_2 c_1^{(2)} \Big|_{x=x_2-0} = d_3 \frac{\partial c_1^{(3)}}{\partial x} + v_3 c_1^{(3)} \Big|_{x=x_2+0}. \quad (16)$$

Після виконання обернених перетворень (9), (11) і (13) виразів (10), (12) і (14), підставимо вирази для концентрацій та їхніх похідних у точках  $x = x_1$  та  $x = x_2$  у співвідношення (15) і (16), відповідно. Тоді одержимо систему двох інтегральних рівнянь:

$$\begin{aligned} \frac{2d_1^2}{x_1} e^{\frac{v_1 x_1}{2d_1}} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n y_n^2 e^{-b_{n1}\tau} \int_0^{\tau} e^{b_{n1}\tau'} \left( c_0 + \frac{(-1)^{n+1}}{\lambda^{(1)}} e^{-\left(\frac{v_1 x}{2d_1}\right)} g_1(\tau') \right) d\tau' = \\ = \frac{2d_2^2}{x_2 - x_1} \sum_{m=1}^{\infty} y_m^2 e^{-b_{m2}\tau} \int_0^{\tau} e^{b_{m2}\tau'} \left( g_1(\tau') + \frac{(-1)^{m+1}}{\lambda^{(2)}} g_2(\tau') \right) d\tau', \\ \frac{2d_2^2}{x_2 - x_1} e^{\frac{v_2(x_2-x_1)}{2d_2}} \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^m y_m^2 e^{-b_{m2}\tau} \int_0^{\tau} e^{b_{m2}\tau'} \left( g_1(\tau') + \frac{(-1)^{m+1}}{\lambda^{(2)}} g_2(\tau') \right) d\tau' = \\ = \frac{2d_3^2}{x_0 - x_2} \sum_{k=1}^{\infty} y_k^2 e^{-b_{k3}\tau} \int_0^{\tau} e^{b_{k3}\tau'} g_2(\tau') d\tau', \end{aligned} \quad (17)$$

де

$$b_{n1} = a_1 + y_n^2 d_1 + \frac{v_1^2}{4d_1}, \quad b_{m2} = a_2 + y_m^2 d_2 + \frac{v_2^2}{4d_2}, \quad b_{k3} = a_3 + y_k^2 d_3 + \frac{v_3^2}{4d_3}.$$

Цю систему інтегральних рівнянь розв'язуємо відносно функцій  $g_1(\tau')$  та  $g_2(\tau')$ . Зауважимо, що система інтегральних рівнянь (17) у цьому випадку має неединий розв'язок, оскільки існує така функція  $F(t')$ , що  $\int_0^t F(t') dt' = 0$ . Проте розв'язок вихідної задачі є єдиним незалежно від способу розв'язання системи рівнянь (17), оскільки функція  $g_1(\tau')$  у виразах (10) і (12) та функція  $g_2(\tau')$  у виразах (12) і (14) фігурують тільки під знаком інтегралів за змінною  $\tau'$ .

Зазначимо, що всі інтеграли в (17) є означеними, причому в одних і тих самих межах  $[0, \tau]$ , де  $\tau$  – конкретний біжучий момент часу. Тому кожне з рівнянь можемо звести до одного інтеграла. Для того щоб означений інтеграл від неперіодичної функції дорівнював нулеві, достатньо, щоб підінтегральна функція дорівнювала нулеві. Тоді отримаємо систему рівнянь для визначення невідомих функцій  $g_1(\tau')$  та  $g_2(\tau')$ :

$$\begin{aligned} g_1(\tau') \left[ \frac{A_{11} d_1}{\lambda^{(1)}} \sum_{n=1}^{\infty} y_n^2 e^{-b_{n1}(\tau-\tau')} - A_{21} \sum_{m=1}^{\infty} y_m^2 e^{-b_{m2}(\tau-\tau')} \right] - \\ - g_2(\tau') \frac{A_{21}}{\lambda^{(2)}} \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^m y_m^2 e^{-b_{m2}(\tau-\tau')} = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= A_{11}d_1c_0e^{\frac{v_1x_1}{2d_1}} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n+1} y_n^2 e^{-b_{n1}(\tau-\tau')}, \\
g_1(\tau')A_{21}e^{\frac{v_2(x_2-x_1)}{2d_2}} \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^m y_m^2 e^{-b_{m2}(\tau-\tau')} - \\
&- g_2(\tau') \left[ \frac{A_{21}}{\lambda^{(2)}} e^{\frac{v_2(x_2-x_1)}{2d_2}} \sum_{m=1}^{\infty} y_m^2 e^{-b_{m2}(\tau-\tau')} + \right. \\
&\left. + A_{25} \sum_{k=1}^{\infty} y_k^2 e^{-b_{k3}(\tau-\tau')} \right] = 0, \tag{18}
\end{aligned}$$

де

$$A_{11} = \frac{2d_1}{x_1}, \quad A_{21} = \frac{2d_2^2}{\lambda^{(2)}(x_2 - x_1)}, \quad A_{25} = \frac{2d_3^2}{x_0 - x_2}.$$

Із системи рівнянь (18) отримаємо такі вирази для визначення функцій  $g_1(\tau')$  та  $g_2(\tau')$ :

$$\begin{aligned}
g_1(\tau') &= \frac{A_{11}c_0 \exp\left(\frac{v_1x_1}{2d_1}\right) \Sigma_n - g_2(\tau')A_{12} \Sigma_m^+}{A_{12}2d_2^2(x_1\lambda^{(1)} \Sigma_m^+ + (x_2 - x_1) \Sigma_n)}, \\
g_2(\tau') &= \left[ A_{21}e^{-\frac{v_2x_1}{2d_2}} \left( \Sigma_m^- - \frac{A_{22} \Sigma_m^+}{A_{23} \Sigma_m^+ + A_{24} \Sigma_n} \right) - \right. \\
&\left. - A_{25}e^{-\frac{v_2x_2}{2d_2}} \Sigma_k \right] \frac{A_{23} \Sigma_m^+ + A_{24} \Sigma_n}{A_{26}c_0 \Sigma_n \Sigma_m^+}, \tag{19}
\end{aligned}$$

де

$$\begin{aligned}
A_{12} &= \frac{1}{\lambda^{(2)}} \frac{2d_2}{x_2 - x_1}, \quad A_{22} = 2x_1\lambda^{(1)}, \quad A_{23} = 2d_2^2x_1\lambda^{(1)}, \\
A_{24} &= 2d_1^2(x_2 - x_1), \quad A_{26} = -4d_1d_2\lambda^{(1)}, \quad \Sigma_n^{\pm} = \sum_{n=1}^{\infty} (\pm 1)^n y_n^2 e^{-b_{n1}(\tau-\tau')}, \\
\Sigma_m^{\pm} &= \sum_{m=1}^{\infty} (\pm 1)^{m+1} y_m^2 e^{-b_{m2}(\tau-\tau')}, \quad \Sigma_k^{\pm} = \sum_{k=1}^{\infty} (\pm 1)^k y_k^2 e^{-b_{k3}(\tau-\tau')}.
\end{aligned}$$

Зазначимо, що якщо в одному з підшарів, наприклад першому, коефіцієнт конвективного перенесення є набагато більшим, ніж решта коефіцієнтів в інших підшарах, то для малих часів протікання процесу відбувається різке збільшення концентрації частинок на нижній границі цього матеріалу.

В результаті для функцій концентрації домішкової речовини, яка мігрує у поровому розчині, одержимо

– в області  $\Omega_1$ :

$$\begin{aligned}
c_1^{(1)}(\tau, x) &= e^{\frac{v_1x}{2d_1}} \left\{ c_0 \frac{\text{sh}(\omega(x_1 - x))}{\text{sh}(\omega x_1)} - \frac{2d_1}{x_1} \sum_{n=1}^{\infty} y_n \sin(y_n x) \times \right. \\
&\left. \times \left[ \frac{c_0 e^{-b_{n1}\tau}}{b_{n1}} + \frac{(-1)^n}{\lambda^{(1)}} e^{-\left(\frac{v_1x}{2d_1}\right)} e^{-b_{n1}\tau} \int_0^{\tau} e^{b_{n1}\tau'} g_1(\tau') d\tau' \right] \right\};
\end{aligned}$$

– в області  $\Omega_2$  :

$$c_1^{(2)}(\tau, x) = \frac{2d_2}{x_2 - x_1} e^{\frac{v_2(x-x_1)}{2d_2}} \sum_{m=1}^{\infty} y_m \sin(y_m(x - x_1)) \times \\ \times e^{-b_{m2}\tau} \int_0^{\tau} e^{b_{m2}\tau'} \left( g_1(\tau') + \frac{(-1)^{m+1}}{\lambda^{(2)}} g_2(\tau') \right) d\tau';$$

– в області  $\Omega_3$  :

$$c_1^{(3)}(\tau, x) = \frac{2d_3}{x_0 - x_2} e^{\frac{v_3(x-x_2)}{2d_3}} \sum_{k=1}^{\infty} y_k \sin(y_k(x - x_2)) \times \\ \times e^{-b_{k3}\tau} \int_0^{\tau} e^{b_{k3}\tau'} g_2(\tau') d\tau', \quad (20)$$

де

$$\omega = \sqrt{a_1/d_1 + v_1^2/4d_1^2},$$

а функції  $g_1(\tau')$  і  $g_2(\tau')$  визначаються за формулами (19).

**3. Концентрація домішкової речовини, сорбованої на скелеті тіла.** Для знаходження концентрацій частинок домішкової субстанції, сорбованих на скелеті тришарового пористого тіла, підставимо вирази (20) для функцій концентрації домішки у розчині у відповідні співвідношення (8). Тоді маємо

– в області  $\Omega_1$  :

$$c_2^{(1)}(\tau, x) = a_1 e^{\frac{v_1 x}{2d_1}} \left\{ c_0 \frac{\text{sh}(\omega(x_1 - x))}{\text{sh}(\omega x_1)} \tau - \right. \\ \left. - \frac{2d_1}{x_1} \sum_{n=1}^{\infty} y_n \sin(y_n x) \left[ \frac{c_0}{b_{n1}^2} (1 - e^{-b_{n1}\tau}) + \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{(-1)^n}{\lambda^{(1)}} e^{-\left(\frac{v_1 x}{2d_1}\right)} \int_0^{\tau} \int_0^{\tau'} e^{-b_{n1}(\tau'-\tau'')} g_1(\tau'') d\tau'' d\tau' \right] \right\}; \quad (21)$$

– в області  $\Omega_2$  :

$$c_2^{(2)}(\tau, x) = \frac{2d_2 a_2}{x_2 - x_1} e^{\frac{v_2(x-x_1)}{2d_2}} \sum_{m=1}^{\infty} y_m \sin(y_m(x - x_1)) \times \\ \times \int_0^{\tau} \int_0^{\tau'} e^{-b_{m2}(\tau'-\tau'')} \left( g_1(\tau'') + \frac{(-1)^{m+1}}{\lambda^{(2)}} g_2(\tau'') \right) d\tau'' d\tau';$$

– в області  $\Omega_3$  :

$$c_2^{(3)}(\tau, x) = \frac{2d_3 a_3}{x_0 - x_2} e^{\frac{v_3(x-x_2)}{2d_3}} \sum_{k=1}^{\infty} y_k \sin(y_k(x - x_2)) \times \\ \times \int_0^{\tau} \int_0^{\tau'} e^{-b_{k3}(\tau'-\tau'')} g_2(\tau'') d\tau'' d\tau'.$$

Зауважимо, що у стаціонарному випадку при  $\tau \rightarrow \infty$  функція (21) концентрації сорбованої речовини в області  $\Omega_1$  прямує до нескінченності, що відповідає умовам безмежної сорбції частинок на скелет за дії сталого дже-



рела маси на поверхні тіла. Обмежена в часі сорбція на скелет математично описується врахуванням у математичній моделі нелінійної залежності хімічних потенціалів від відповідних концентрацій або додатковою умовою у постановці контактної-крайової задачі.

Отримані розв'язки для концентрацій сорбованих домішкових частинок містять інтегральні множники або складові. Такого типу подвійні інтеграли зі змінними верхніми межами мають змінну область інтегрування – трикутники, площа яких збільшується з ростом  $\tau$ . Для їхнього числового аналізу розроблено метод чисельного інтегрування зі змінною сіткою розбиття на основі квадратур у внутрішній області інтегрування та триангуляційного розбиття уздовж змінної межі  $\tau'' = \tau'$  [17]. Також зазначимо, що у розв'язках всі інтеграли містять функції  $g_1(\tau)$  і  $g_2(\tau)$  достатньо складного вигляду (19). Їхньому дослідженню присвячено другу частину роботи.

**Висновки.** Таким чином, побудовано математичну модель конвективної дифузії домішкових частинок, яка супроводжується сорбційними процесами, у тілі, що складається з трьох контактуючих пористих шарів за умов неідеального контакту на функцію концентрації. За допомогою інтегральних перетворень за просторовою змінною, виконаних окремо в кожній із контактуючих областей, отримано аналітичний розв'язок контактної-крайової задачі конвективної дифузії домішкової речовини у складеному шарі, кожен макроелемент якого є пористим матеріалом з фізико-механічними характеристиками, відмінними від характеристик інших макроелементів. Отримано та розв'язано систему інтегральних рівнянь для визначення функцій концентрації мігруючих частинок на міжфазних границях. Одержано формули для обчислення концентрацій частинок домішкової речовини, сорбованих на скелеті тришарового пористого тіла.

Запропоновану математичну модель та отримані аналітичні розв'язки можна застосувати для математичного опису процесів конвективної дифузії в умовах безмежної сорбції в тришаровому тілі, складеному з композитних матеріалів, розміри включень яких є значно меншими, ніж характерні розміри структурних макроелементів.

1. Бурак Я. И., Галапац Б. П., Чапля Е. Я. Деформация электропроводных тел с учетом гетеродиффузии заряженных примесных частиц // Физ.-хим. мех. материалов. – 1980. – **16**, № 5. – С. 8–14.  
The same: Burak Ya. I., Galapats B. P., Chaplya E. Ya. Deformation of electrically conducting solids taking into consideration heterodiffusion of charged impurity particles // Soviet Mater. Sci. – 1981. – **16**, No. 5. – P. 395–400.  
– <https://doi.org/10.1007/BF00724467>.
2. Бурак Я. И., Галапац Б. П., Чапля Е. Я. Исходные уравнения процесса деформации электропроводных твердых растворов с учетом различных путей диффузии примесных частиц // Мат. методы и физ.-мех. поля. – 1980. – Вып. 11. – С. 60–66.
3. Бурак Я. И., Чапля Е. Я., Чернуха О. Ю. Континуально-термодинамічні моделі механіки твердих розчинів. – Київ: Наук. думка, 2006. – 272 с.
4. Бутина Т. А., Дубровин В. М. О моделировании поведения пористых материалов в элементах многослойных конструкций при кратковременных нагрузках // Инж. журнал: наука и инновации. – 2013. – № 7 (19).  
– <https://doi.org/10.18698/2308-6033-2013-7-844>.
5. Диткин В. А., Прудников А. П. Интегральные преобразования и операционное исчисление. – Москва: Физматгиз, 1961. – 524 с.
6. Журба М. Основы процессов доочистки сточных вод фильтрованием // Тепло- и массообмен в капиллярнопористых телах. – Минск: Наука и техника, 1965. – С. 60–73.
7. Иванов В. К., Васин В. В., Танана В. П. Теория линейных некорректных задач и ее приложения. – Москва: Наука, 1978. – 206 с.
8. Мартыненко Н. А., Пустыльников Л. М. Конечные интегральные преобразования и их применение к исследованию систем с распределенными параметрами. – Москва: Наука, 1986. – 304 с.

9. *Направление нормали для поверхностей и оболочек.*  
– [http://support.ptc.com/help/creo/creo\\_pma/russian/index.html#page/simulate/simulate/modstr/idealizations/reference/dir\\_surfshell.html](http://support.ptc.com/help/creo/creo_pma/russian/index.html#page/simulate/simulate/modstr/idealizations/reference/dir_surfshell.html).
10. *Охріменко М. Г., Фартушний І. Д., Кулик А. Б.* Некоректно поставлені задачі та методи їх розв'язування. – Київ: Вид-во «Політехніка», 2016. – 225 с.
11. *Синюков Н. С., Матвеев Т. И.* Топология. – Киев: Вища шк., 1984. – 264 с.
12. *Снеддон И.* Преобразования Фурье. – Москва: Изд-во иностр. лит., 1955. – 667 с.  
Те саме: *Sneddon I.* Fourier transforms. – New York: McGraw-Hill, 1951. – 542 p.
13. *Тихонов А. Н., Арсенин В. Я.* Методы решения некорректных задач. – Москва: Наука, 1979. – 285 с.
14. *Чапля Е. Я., Чернуха О. Ю.* Математичне моделювання дифузійних процесів у випадкових і регулярних структурах. – Київ: Наук. думка, 2009. – 302 с.
15. *Чернов Б. С., Базлов М. Н., Жуков А. И.* Гидродинамические методы исследования скважин и пластов. – Москва: Гостоптехиздат, 1960. – 319 с.
16. *Aifantis E. C., Hill J. M.* On the theory of diffusion in media with double diffusivity. I. Basic mathematical results // *Quart. J. Mech. Appl. Math.* – 1980. – **33**, No. 1. – P. 1–21. – <https://doi.org/10.1093/qjmam/33.1.1>.
17. *Chernukha O., Bilushchak Yu., Pakholok B.* System approach to mathematical description of transport processes with chemical reaction in multiphase multicomponent body / *Proc. 2020 IEEE 2nd International Conference on System Analysis & Intelligent Computing (SAIC)*, 5–9 October 2020, Kyiv, Ukraine. – P. 144–149.  
– <https://doi.org/10.1109/SAIC51296.2020.9239181>.
18. *Chernukha O., Bilushchak Yu., Shakhovska N., Kulhanek R.* A numerical method for computing double integrals with variable upper limits // *Mathematics*. – 2022. – **10**, No. 1. – Article 108. – 26 p. – <https://doi.org/10.3390/math10010108>.
19. *Polyanin A. D., Manzhirov A. V.* Handbook of integral equations. – Boca Raton: CRC Press, 1998. – 796 p.

**MATHEMATICAL MODELING OF PROCESSES OF CONVECTIVE DIFFUSION AND SORPTION IN A THREE-LAYERED POROUS BODY.  
I. MASS TRANSFER OF IMPURITY PARTICLES WITH POROUS SOLUTION**

*The mathematical model of convective diffusion of impurity particles, which is accompanied by sorption processes, in a body consisting of three contacting porous layers with distinct physical-chemical characteristics under imperfect contact conditions for the concentration at the interfaces is constructed. The analytical solution of the contact initial-boundary value problem of convective diffusion of an impurity substance in a compound layer, is obtained by means of integral transformations in spatial variable applied separately in every of contacting layer. The system of integral equations for finding the functions of concentration of the migrating particles at the interfaces is obtained and solved. Formulas for calculating the concentrations of impurity particles sorbed on the skeleton of the three-layered porous body are obtained.*

**Key words:** *convective diffusion, sorption, three-layered porous body, imperfect contact condition, integral transformation.*

Ін-т прикл. проблем механіки і математики  
ім. Я. С. Підстригача НАН України, Львів

Одержано  
12.01.21