

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ КОНВЕКТИВНОЇ ДИФУЗІЇ І СОРБЦІЇ У ТРИШАРОВОМУ ПОРИСТОМУ ТІЛІ. II. КІЛЬКІСНИЙ АНАЛІЗ КОНЦЕНТРАЦІЇ ДОМІШКОВИХ ЧАСТИНОК НА ГРАНИЦЯХ КОНТАКТУ ФАЗ

Проведено кількісний аналіз концентрації домішкової речовини, яка мігрує з розчином у тришаровому пористому тілі з урахуванням сорбційних процесів, на границях контакту макроелементів за умов неідеального масового контакту. Для знаходження шуканих функцій з контактних умов рівності дифузійних потоків отримано систему інтегральних рівнянь. На основі числового аналізу одержаних розв'язків показано, що зміна коефіцієнтів інтенсивності сорбції у другому і третьому контактуючих шарах, відносного коефіцієнта дифузії у другому шарі, коефіцієнтів швидкості конвективного перенесення в першому і другому шарах, а також коефіцієнтів концентраційної залежності хімічних потенціалів істотно впливають на поведінку і/або значення функцій концентрації домішкової речовини на границях контакту макроелементів, які складають пористий шар.

Ключові слова: конвективна дифузія, сорбція, тришарове пористе тіло, умови неідеального контакту, границя контакту.

Вступ. У першій частині роботи [5] побудовано математичну модель конвективної дифузії домішкових частинок, яка супроводжується сорбційними процесами, у тришаровому тілі, що складається з контактуючих пористих макроелементів, на границях контакту шарів функції концентрації домішкової речовини задовольняють неідеальні умови масового контакту. Аналітичні розв'язки відповідної контактної-крайової задачі з початковими та граничними умовами першого роду отримано за допомогою інтегральних перетворень за просторовою змінною окремо в кожній із контактуючих областей. Для цього з використанням умови стрибків функцій концентрації домішкової речовини на границях контакту шукані функції дозначено на міжфазних границях. Введені функції від часу $g_1(\tau)$ і $g_2(\tau)$ визначаються з умов рівності дифузійних потоків мігруючої речовини на границях контакту. В результаті отримано систему інтегральних рівнянь для знаходження функцій $g_1(\tau)$ і $g_2(\tau)$ і знайдено її розв'язки.

У цій роботі кількісно досліджуємо функції $g_1(\tau)$ і $g_2(\tau)$, які за означенням дорівнюють концентрації домішкових частинок у конвективно рухомому поровому розчині на верхній границі нижнього з контактуючих шарів.

1. Контактно-крайова задача конвективної дифузії у тришаровому тілі. Процес масоперенесення домішкових речовин у тришаровому пористому тілі з урахуванням процесу сорбції на скелет, описаний у статті [5], моделюється трьома системами диференціальних рівнянь (1) за крайових умов (2), (3) та умов масового контакту (4), (5) (див. [5]). Нагадаємо, що частинки домішкової речовини, які розміщені у включеннях (порах) і поза ними, характеризуються різними фізичними властивостями, зокрема коефіцієнтами дифузії. Довільна область кожного шару складається зі скелета та водного розчину. Розчин є двокомпонентним і складається з частинок води та домішки. Домішкові частинки перебувають у двох станах – конвективно рухомому розчині і на поверхні скелета тіла.

Сформульована контактна-крайова задача відносно концентрацій домішкових частинок розв'язувалася за допомогою скінченних інтегральних перетворень для оператора диференціального рівняння другого роду [2] за просторовою змінною у кожному макроелементі тіла. Оскільки на границях

[✉] byixx13@gmail.com

контакту, які розглядаються як «зовнішні» границі відповідного макроелемента, значення шуканих функцій або їх похідних є невідомими, то контактні умови стрибка функцій концентрації домішки використано для їхнього доозначення деякими функціями від часу $g_1(\tau)$ і $g_2(\tau)$ на міжфазних поверхнях $x = x_1$ та $x = x_2$ (див. формулу (6) зі статті [5]). Отримані після застосування обернених інтегральних перетворень вирази для концентрацій та їхніх похідних підставляємо в умови контакту на дифузійні потоки (15), (16) з [5] і записуємо систему інтегральних рівнянь, структуру яких можна подати так:

$$\begin{aligned} & \sum_{n=1}^{\infty} \int_0^{\tau} (f_{11}(\tau, \tau', x, n) + f_{12}(\tau, \tau', x, n)g_1(\tau')) d\tau' = \\ & = \sum_{m=1}^{\infty} \int_0^{\tau} (f_{13}(\tau, \tau', x, m)g_1(\tau') + f_{14}(\tau, \tau', x, m)g_2(\tau')) d\tau', \\ & \sum_{m=1}^{\infty} \int_0^{\tau} (f_{21}(\tau, \tau', x, m)g_1(\tau') + f_{22}(\tau, \tau', x, m)g_2(\tau')) d\tau' = \\ & = \sum_{k=1}^{\infty} \int_0^{\tau} f_{23}(\tau, \tau', x, k)g_2(\tau') d\tau'. \end{aligned} \quad (22)^1$$

Розв'язавши цю систему рівнянь, одержуємо аналітичні вирази (19) функцій від часу $g_1(\tau)$ і $g_2(\tau)$ [5]. Проведемо аналіз цих функцій.

2. Аналіз функцій $g_1(\tau)$ і $g_2(\tau)$. Фізичний сенс умов (7) [5] полягає в тому, що значення функцій концентрацій $c_1^{(i)}(\tau, x)$ на границях контакту $x = x_i$, $i = 1, 2$, подаємо деякими функціями від часу $g_1(\tau)$ і $g_2(\tau)$. Тоді можемо стверджувати, що функція $g_1(\tau)$ – значення функції концентрації $c_1^{(2)}(\tau, x)$ на верхній границі області Ω_2 (площина $x = x_1$) або значення функції концентрації $c_1^{(1)}(\tau, x)$, нормованої на коефіцієнт $\lambda^{(1)}$, на нижній границі області Ω_1 (площина $x = x_1$). Відповідно функція $g_2(\tau)$ – значення функції концентрації $c_1^{(3)}(\tau, x)$ на верхній границі області Ω_3 (площина $x = x_2$) або функції концентрації $c_1^{(2)}(\tau, x)$, нормованої на коефіцієнт $\lambda^{(2)}$, на нижній границі області Ω_2 (площина $x = x_2$). Тоді, враховуючи нульові початкові умови (3) [5] для функцій $c_1^{(i)}(\tau, x)$, отримуємо значення функцій $g_1(\tau)$ і $g_2(\tau)$ у початковий момент безрозмірного часу

$$g_1(\tau)|_{\tau=0} = 0, \quad g_2(\tau)|_{\tau=0} = 0.$$

Функції (19) містять ряди типу $\sum_s = \sum_{s=1}^{\infty} y_s^2 \exp(-p_s(\tau - \tau'))$, які в точці $\tau' = \tau$, що належить до області визначення, є розбіжними. Тому для знаходження границь $\lim_{\tau' \rightarrow \tau} g_i(\tau')$, $i = 1, 2$, поділимо чисельник і знаменник рівностей на відповідні ряди. Вираз для функції $g_1(\tau)$ із (19) поділимо на ряд \sum_n і врахуємо, що

¹ Для зручності викладу матеріалу продовжуємо нумерацію формул і рисунків, розпочаті в 1-й частині статті (див. [5]).

$$\lim_{\tau' \rightarrow \tau} \frac{\sum_m^+}{\sum_n} = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\lim_{\tau' \rightarrow \tau} y_m^2 \exp\left(-\left(a_2 + d_2 y_m^2 \frac{v_2^2}{4d_2}\right)(\tau - \tau')\right)}{\sum_n} = 0. \quad (23)$$

Тоді одержимо

$$\lim_{\tau' \rightarrow \tau} g_1(\tau') = \frac{A_{11}c_0}{A_{12}2d_2^2(x_2 - x_1)} \exp\left(\frac{v_1x_1}{2d_1}\right). \quad (24)$$

Якщо подати вираз для функції $g_2(\tau')$ у вигляді

$$g_2(\tau') = \frac{A_{11}c_0 \exp\left(\frac{v_1x_1}{2d_1}\right) \sum_n - g_1(\tau') A_{12}2d_2^2(x_1\lambda^{(1)} \sum_m^+ + (x_2 - x_1) \sum_n)}{A_{12} \sum_m^+},$$

тоді з урахуванням (23), (24) і границі $\lim_{\tau' \rightarrow \tau} \frac{\sum_n}{\sum_m^+} = \frac{x_2 - x_1}{x_1}$ отримаємо

$$\lim_{\tau' \rightarrow \tau} g_2(\tau') = \frac{A_{11}c_0}{A_{12}(x_2 - x_1)} \exp\left(\frac{v_1x_1}{2d_1}\right) \left[1 - x_1\lambda^{(1)} - \frac{(x_2 - x_1)^2}{x_1}\right]. \quad (25)$$

Зазначимо, що точка $\tau' = \tau$ є точкою виходу функцій $g_i(\tau')$ $i = 1, 2$, на стаціонарний режим, оскільки тоді вони стають незалежними від часу. Крім цього, згідно з формулою (24) концентрації домішкових частинок у поровому розчині на границі контакту $x = x_1$ залежать від потужності джерела маси c_0 , товщин контактуючих на цій границі пористих шарів x_1 , $x_2 - x_1$, та коефіцієнтів дифузії d_1 і d_2 (при цьому не залежать від товщини третього пористого шару $x_0 - x_2$ та коефіцієнта дифузії d_3). Щодо виразу (25) для функції $g_2(\tau')$, яка описує концентрацію частинок на границі контакту $x = x_2$ у стаціонарному режимі, виявилось, що вона також не залежить від характеристик третього пористого шару Ω_3 , проте залежить від товщин шарів Ω_1 і Ω_2 та коефіцієнтів дифузії саме у цих областях. Також зауважимо, що границя $\lim_{\tau' \rightarrow \tau} g_2(\tau')$ є прямо пропорційною до відношення $\lambda^{(1)}/\lambda^{(2)}$ кінетичних коефіцієнтів, які визначають величину стрибків функції концентрації на границях контакту фаз.

3. Порівняльний числовий аналіз функцій $g_1(\tau)$, $g_2(\tau)$ та встановлення закономірностей. Вихідні системи рівнянь (1) дозволяють звести їх до безрозмірної форми, оскільки містять коефіцієнти розмірності [1/сек] – коефіцієнти інтенсивності процесів сорбції. Використавши коефіцієнт дифузії та інтенсивності переходів між станами у першому структурному елементі (першій фазі), введемо нові змінні [4]

$$t = a_1\tau, \quad \xi = (a_1/d_1)x. \quad (26)$$

Тоді відносні параметри задачі набудуть вигляду $\bar{d}_i = d_i/d_1$, $\bar{a}_i = a_i/a_1$, $\bar{v}_i = v_i d_1/a_1$, $i = 1, 2, 3$, $\xi_i = (a_1/d_1)x_i$, $i = 0, 1, 2$. Зазначимо, що коефіцієнти дифузії та інтенсивності сорбції у різних фазах можуть бути і більшими, і меншими від тих, на які нормуємо (у першому структурному елементі).

Коефіцієнти системи рівнянь (22), яким підпорядковуються функції $g_1(t)$ і $g_2(t)$, а також вільні члени є настільки малими, що виходять за межі точності обчислень (для розглядуваних параметрів задачі їхній порядок є в

межах $10^{-10} \div 10^{-70}$). Тому для проведення порівняльного аналізу поведінки функцій $g_1(t)$ і $g_2(t)$ вигляду (19) використаємо теорему про властивості множення матриці на вектор [3, 7]. Відповідно обчислення проводимо для еквівалентної системи рівнянь [1, 6], яку отримуємо з вихідної системи (18)

домноженням на вектор $\begin{pmatrix} (\min B_{1j})^{-1} \\ (\min B_{2j})^{-1} \end{pmatrix}$, $j = 1, 2$, де B_{ij} – коефіцієнти рівнянь (18).

Числові розрахунки проводились у безрозмірних змінних (26). При цьому за базові приймали такі значення коефіцієнтів: $\bar{a}_1 = 1$, $\bar{a}_2 = 1.5$, $\bar{a}_3 = 2$, $\bar{d}_1 = 1$, $\bar{d}_2 = 0.5$, $\bar{d}_3 = 0.3$, $\bar{v}_1 = 0.4$, $\bar{v}_2 = 0.3$, $\bar{v}_3 = 0.2$, $\xi_0 = 10$, $\xi_1 = 3$, $\xi_2 = 7$, $c_0 = 1$, $\lambda^{(1)} = 1.5$, $\lambda^{(2)} = 1.7$.

На рис. 3 – рис. 13 проілюстровано характерну поведінку функцій концентрацій домішкової речовини $g_1(t)/c_0$ на верхній границі області Ω_2 і функцій концентрації частинок $g_2(t)/c_0$ на верхній границі області Ω_3 для різних значень параметрів задачі.

На рис. 3 і рис. 4 наведено графіки функцій $g_1(t)/c_0$ і $g_2(t)/c_0$ для значень $\bar{a}_2 = 0.5, 0.8, 1, 1.2, 1.5, 1.7, 2$ коефіцієнтів інтенсивності сорбції в другому шарі Ω_2 (криві 1–7, рис. 3) і для значень $\bar{a}_3 = 0.5, 0.8, 1, 1.2, 1.5, 1.7, 2$ у третьому шарі Ω_3 (криві 1–7, рис. 4).

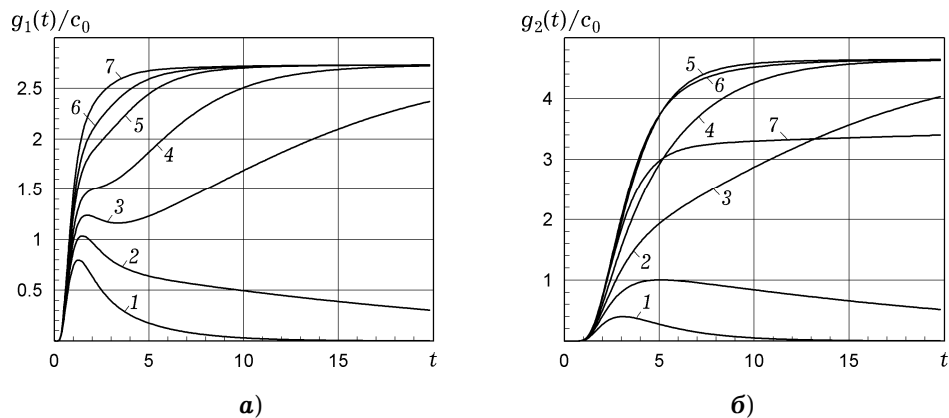


Рис. 3

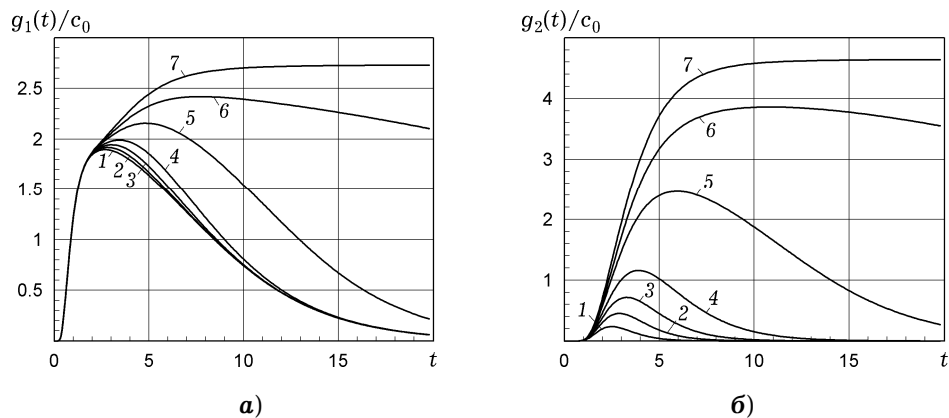


Рис. 4

Рис. 5 і рис. 6 демонструють залежність поведінки функцій $g_1(t)/c_0$ та $g_2(t)/c_0$ від відносного коефіцієнта дифузії: в області Ω_2 для значень $\bar{d}_2 = d_2/d_1 = 0.1, 0.3, 0.7, 1, 1.2, 1.5, 2$ (криві 1-7, рис. 5) і в області Ω_3 для значень $\bar{d}_3 = d_3/d_1 = 0.1, 0.3, 0.7, 1, 1.2, 1.5, 2$ (криві 1-7, рис. 6).

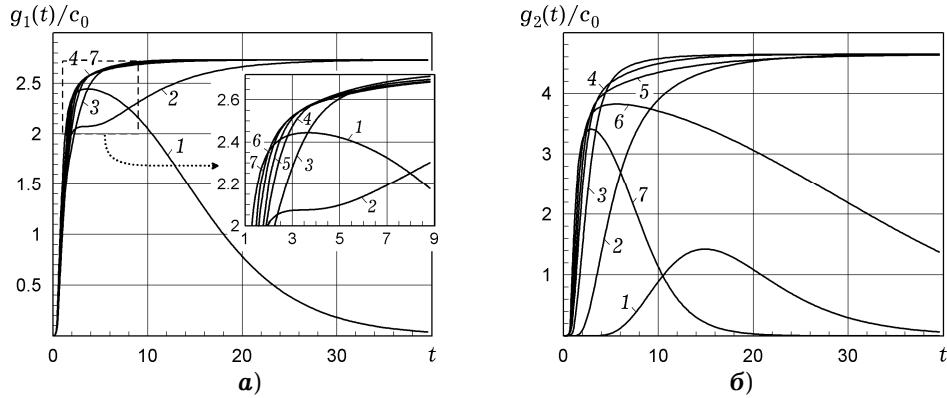


Рис. 5

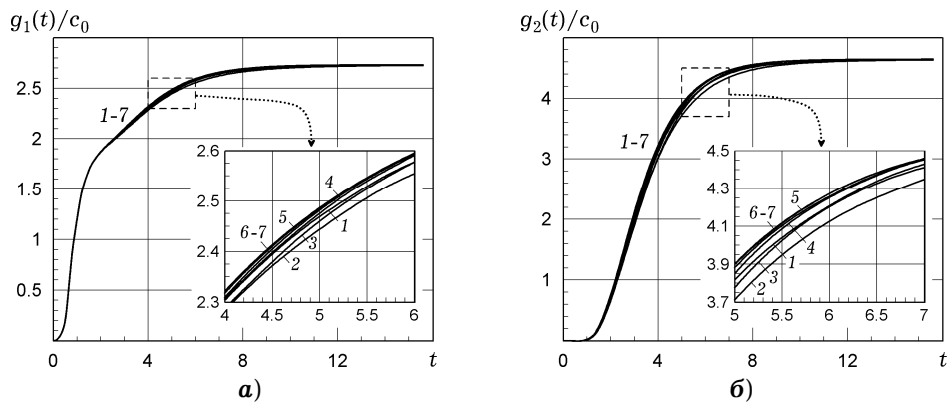


Рис. 6

На рис. 7 – рис. 9 проілюстровано поведінку функцій $g_1(t)/c_0$ на верхній границі області Ω_2 та функції $g_2(t)/c_0$ на верхній границі області Ω_3 для різних значень коефіцієнтів швидкості конвективного перенесення у всіх макроелементах тіла: $\bar{v}_1 = v_1 d_1/a_1 = 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.6, 1.0$ (криві 1-6, рис. 7), $\bar{v}_2 = v_2 d_1/a_1 = 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.6, 1.0$ (криві 1-6, рис. 8) та $\bar{v}_3 = v_3 d_1/a_1 = 0.1, 0.3, 0.5, 0.8, 1.0, 2.0$ (криві 1-6, рис. 9).

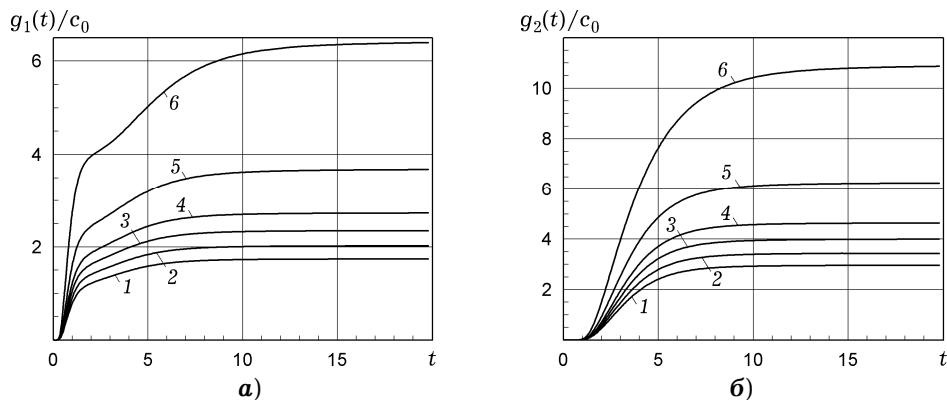


Рис. 7

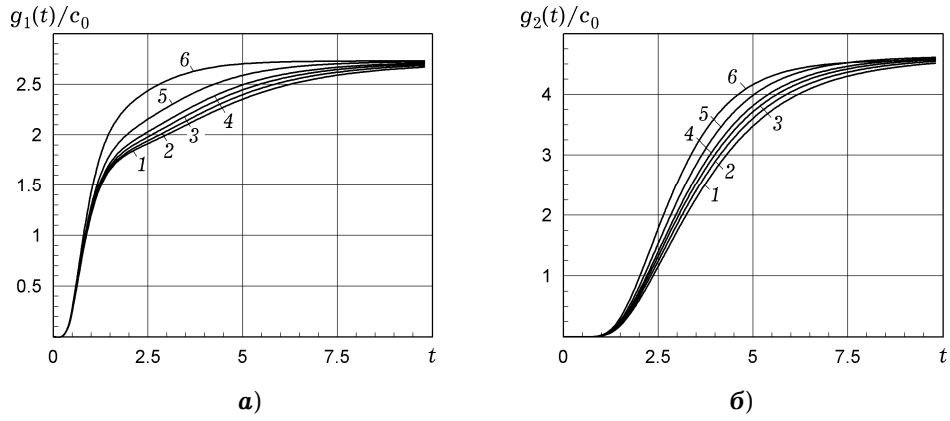


Рис. 8

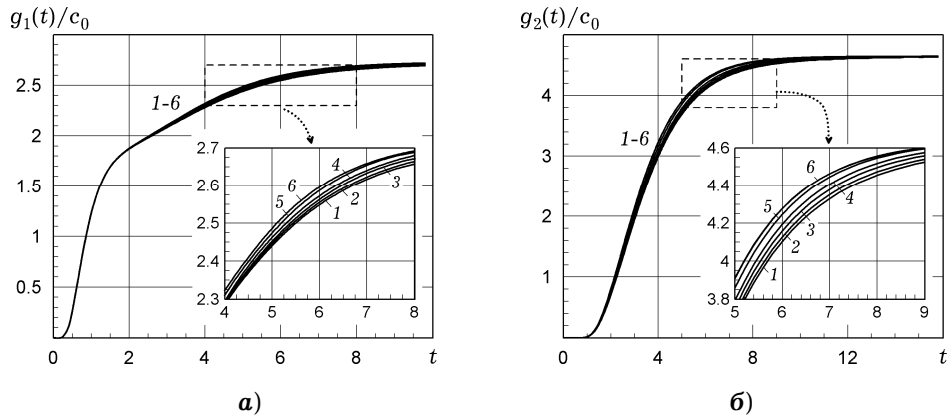


Рис. 9

Рис. 10 і рис. 11 демонструють поведінку функцій $g_1(t)/c_0$ і $g_2(t)/c_0$ для відношень коефіцієнтів концентраційної залежності хімічних потенціалів $\lambda^{(i)} = \lambda_i / \lambda_{i+1}$, $i = 1, 2$, на границях контакту, які визначають величину стрибків концентрації на відповідних поверхнях (див. (4) з [5]). На рис. 10 показано функції $g_1(t)/c_0$ і $g_2(t)/c_0$ для $\lambda^{(1)} = 0.2, 0.5, 1, 1.5, 1.7, 2, 2.2$ (криві 1-7), а на рис. 11 - для значень $\lambda^{(2)} = 0.2, 0.5, 1, 1.5, 1.7, 2, 2.2$ (криві 1-7).

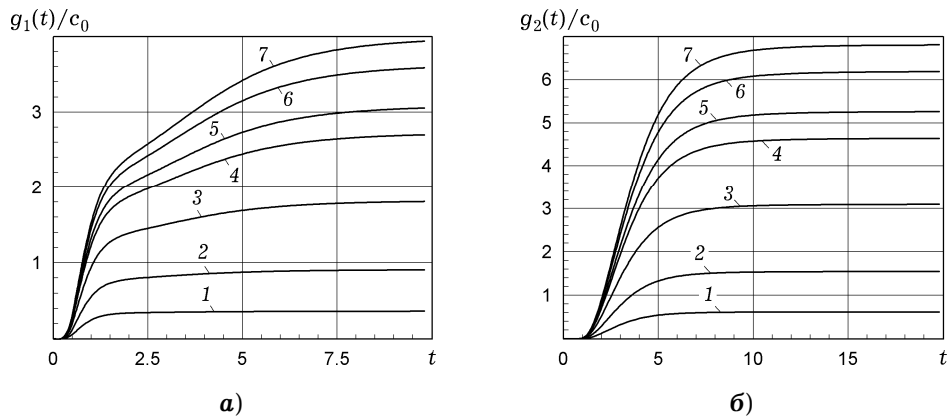


Рис. 10

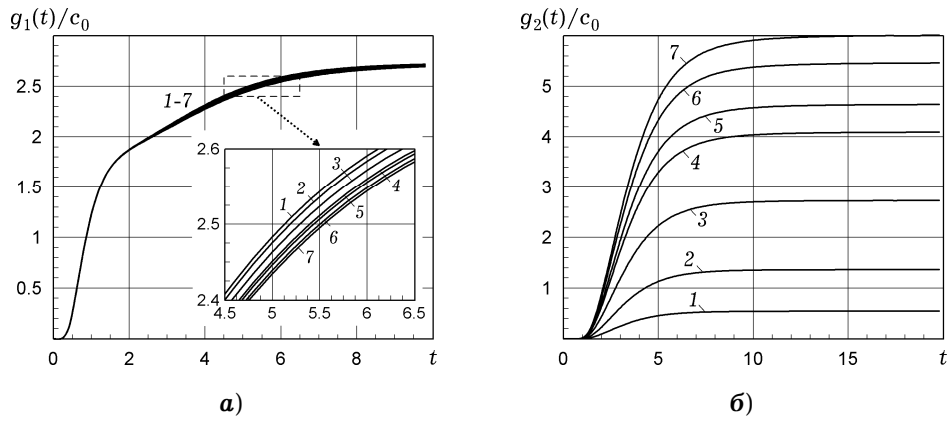


Рис. 11

На рис. 12 і рис. 13 проілюстровано, як зміна товщин прошарків макроелементів при незмінній товщині тришарового тіла впливає на функції $g_1(t)/c_0$ і $g_2(t)/c_0$ на границях контакту. На рис. 12 наведено графіки функцій $g_1(t)/c_0$ і $g_2(t)/c_0$ для значень товщини першого макроелемента $\xi_1 = 1.0, 2.0, 2.5, 3.0, 4.0, 5.0, 6.0$ (криві 1-7) при $\xi_2 = 7$. Рис. 13 демонструє поведінку функцій $g_1(t)/c_0$ і $g_2(t)/c_0$ при зсуві верхньої границі третього макроелемента Ω_3 до нижньої границі тіла: $\xi_2 = 4.0, 4.5, 5.0, 6.0, 7.0, 8.0, 9.0$ (криві 1-7) при $\xi_1 = 3$.

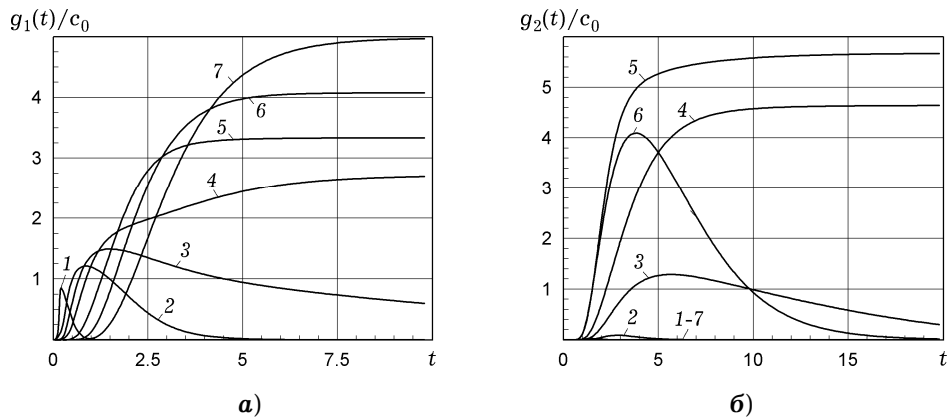


Рис. 12

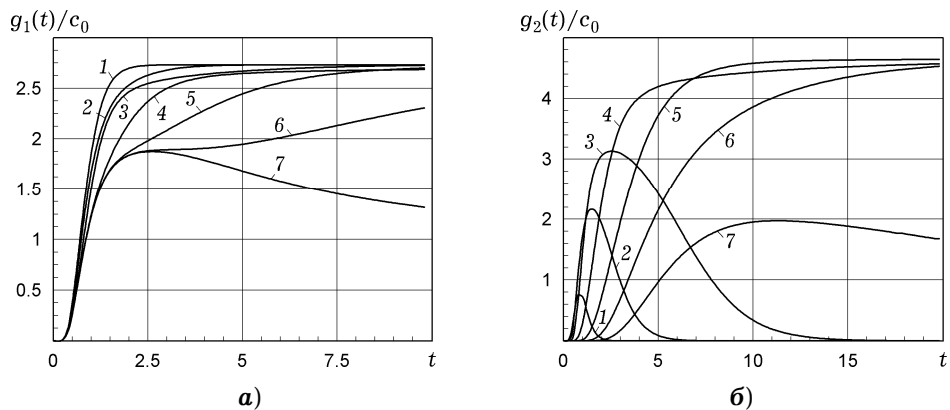


Рис. 13

Зазначимо, що для достатньо широкого діапазону значень параметрів задачі спостерігається наявність стаціонарного режиму для функцій $g_1(t)/c_0$ і $g_2(t)/c_0$. Причому значення $g_1(t)/c_0$ і $g_2(t)/c_0$ в усталеному режимі змінюються від нехтовно малих (див., наприклад, криві **1** на рис. 3), тобто коли на границі контакту домішкові частинки не накопичуються, до великих значень, які в декілька разів перевищують значення концентрації, що підтримується на верхній поверхні тіла $\xi_1 = 0$ (див., наприклад, криві **5–7** на рис. 3), що відповідає випадку значного накопичення домішкової речовини на границях контакту шарів.

У формулюванні задачі прийнято, що в початковий момент часу домішкова речовина відсутня в усьому тілі, у т.ч. на границях контакту. Далі в околі поверхонь $\xi = \xi_1$ та $\xi = \xi_2$ відбувається незначне зростання концентрації частинок, а потім функції $g_1(t)/c_0$ і $g_2(t)/c_0$ різко зростають до виходу на усталений режим (див., наприклад, криві **7** на рис. 4) або, досягнувши свого максимуму, спадають, доки не вийдуть на стаціонарне значення (див., наприклад, криві **5** на рис. 4). Зауважимо, що довжина часового інтервалу нульових або нехтовно малих значень $g_1(t)/c_0$ і $g_2(t)/c_0$ на початку процесу конвективної дифузії є тим більшою, чим далі від джерела маси знаходиться границя контакту (рис. 12, рис. 13).

Зазначимо, що зміна таких коефіцієнтів як коефіцієнти інтенсивності сорбції в другому і третьому контактуючих шарах, відносний коефіцієнт дифузії в області Ω_2 , коефіцієнти швидкості конвективного перенесення в першому і другому шарах, коефіцієнти концентраційної залежності хімічних потенціалів істотно впливає на поведінку і/або значення функцій $g_1(t)/c_0$ і $g_2(t)/c_0$. Зміна ж інших коефіцієнтів не спричиняє зміни значень досліджуваних функцій.

Коефіцієнт інтенсивності сорбції в області Ω_1 є фіксованим (на нього проведено нормування), а в областях Ω_2 і Ω_3 відповідні коефіцієнти можуть бути як більшими, рівними, так і меншими, ніж в області Ω_1 , тобто можливі випадки $\bar{a}_2 < 1$, $\bar{a}_2 = 1$, $\bar{a}_2 > 1$ і $\bar{a}_3 < 1$, $\bar{a}_3 = 1$, $\bar{a}_3 > 1$. При цьому, якщо сорбція у другому шарі є менш інтенсивною, ніж в першому, то функція $g_1(t)/c_0$ має максимум в околі точки $t = 1.5$ (криві **1, 2**, рис. 3а), причому більшим значенням коефіцієнта \bar{a}_2 відповідають більші значення максимуму функції концентрації на границі контакту $\xi = \xi_1$. Якщо $\bar{a}_2 = 1$, то $\max g_1(t)/c_0$ в околі точки $t = 1.5$ стає локальним і зі збільшенням \bar{a}_2 взагалі зникає (криві **3, 4–7**, рис. 3а). При цьому значення функції $g_1(t)/c_0$ в усталеному режимі є однаковими для всіх $\bar{a}_2 \geq 1$, і функція $g_1(t)/c_0$ швидше виходить на стаціонарний режим для більших значень коефіцієнта \bar{a}_2 , тобто при інтенсивнішому процесі сорбції у другому шарі (рис. 3а). Подібним чином інтенсивність сорбції в області Ω_2 впливає на поведінку функції концентрації $g_2(t)/c_0$ на другій границі контакту $\xi = \xi_2$ (рис. 3б). Проте, досягнувши можливих максимальних значень при $\bar{a}_2 = 1.5$, зі зростанням \bar{a}_2 починають зменшуватися значення $g_2(t)/c_0$ у стаціонарному режимі (криві **6, 7**, рис. 3б).

Збільшення коефіцієнта інтенсивності сорбції \bar{a}_3 у третьому шарі приводить до зростання значень функцій концентрацій на обох границях контакту (рис. 4). При цьому, якщо $\bar{a}_3 \leq \bar{a}_1$, то значення функції $g_1(t)/c_0$ мо-

жуть зрости максимально до 4 % (криві 1–3, рис. 4а). Для $\bar{a}_3 > \bar{a}_1$ зростання інтенсивності сорбції в області Ω_3 приводить до монотонно зростаючого характеру функції $g_1(t)/c_0$ і збільшення значень стаціонарного режиму цієї функції (криві 4–7, рис. 4а).

На другій границі контакту $\xi = \xi_2$ зміна коефіцієнта інтенсивності сорбції приводить до істотно більшого впливу на значення концентрації домішкової речовини (рис. 4б). Так, зростання коефіцієнта \bar{a}_3 у 1.5 рази приводить до збільшення вдвічі максимальних значень функції концентрації: $\max_{t>0} g_2(t) \Big|_{\bar{a}_3=0.8} / \max_{t>0} g_2(t) \Big|_{\bar{a}_3=0.5} \approx 2$. Зростання коефіцієнта \bar{a}_3 від 0.5 до

2 спричиняє зростання максимальних значень $g_2(t)/c_0$ на порядок. При цьому свого максимуму на границі $\xi = \xi_2$ функція концентрації досягає для більших часових інтервалів (рис. 4б). Зауважимо, що, як і для функції $g_1(t)/c_0$, зростання інтенсивності сорбції в області Ω_3 приводить до монотонного зростання функції $g_2(t)/c_0$ і збільшення значень стаціонарного режиму цієї функції (криві 5–7, рис. 4б).

Відносний коефіцієнт дифузії \bar{d}_2 в області Ω_2 найбільше впливає на функцію концентрації домішкових частинок на границі контакту $\xi = \xi_2$ (рис. 5б). При цьому для малих значень цього коефіцієнта ($\bar{d}_2 = 0.1$) спостерігаємо глобальний максимум розподілу, після чого відбувається істотне зменшення значень $g_2(t)/c_0$ (крива 1, рис. 5б). Відносно невеликі значення $g_2(t)/c_0 \Big|_{\bar{d}_2=0.1}$ пояснюються значним накопиченням частинок домішки в об'є-

мі другого шару. Зі збільшенням коефіцієнта \bar{d}_2 функція $g_2(t)/c_0$ монотонно зростає (криві 2–5, рис. 5б) і найшвидше виходить на усталений режим при $\bar{d}_2 = 0.7$ (крива 3, рис. 5б). Починаючи приблизно зі значень $\bar{d}_2 = 0.4$, функція $g_2(t)/c_0$ втрачає монотонність, і значення концентрації домішки на другій границі контакту істотно зменшується (криві 6, 7, рис. 5б).

На границі контакту $\xi = \xi_1$ значення коефіцієнта \bar{d}_2 істотно впливає на функцію концентрації тільки в малому діапазоні $\bar{d}_2 < 0.4$ (криві 1, 2, рис. 5а). Причому, чим меншими є значення \bar{d}_2 , тим більшого максимуму досягає функція $g_1(t)/c_0$ в околі точки $t = 1.5$. Зміна коефіцієнта \bar{d}_2 від $\bar{d}_2 = 0.7$ до $\bar{d}_2 = 2$ приводить до зміни значень до 18% функції $g_1(t)/c_0$ на проміжку $t \in [1.2, 6]$.

Зазначимо, що зміна коефіцієнта дифузії \bar{d}_3 в області Ω_3 не впливає на поведінку і значення функції концентрації домішкової речовини на першій границі контакту $\xi = \xi_1$ (рис. 6а). Зміна в широких межах коефіцієнта \bar{d}_3 не змінює поведінку функції концентрації на другій границі контакту $\xi = \xi_2$ (рис. 6б). А зміна коефіцієнта \bar{d}_2 від $\bar{d}_2 = 0.1$ до $\bar{d}_2 = 2$ змінює значення функції $g_2(t)/c_0$ до 5% на проміжку $t \in [3, 9]$.

Зазначимо, що найбільший вплив на значення функцій концентрацій на границях контакту має коефіцієнт швидкості конвективного перенесення в першому шарі, а найменший – у третьому (рис. 7 – рис. 9). При цьому зміна значення \bar{v}_1 приводить до аналогічних змін у поведінці функцій

$g_1(t)/c_0$ і $g_2(t)/c_0$, включно з їхніми стаціонарними режимами. Так, зростання швидкості конвективного перенесення в першому шарі в 1.5 рази приводить до збільшення значень $g_1(t)/c_0$ на 35%: $g_1(t)|_{\bar{v}_1=0.6, t>1}/g_1(t)|_{\bar{v}_1=0.4, t>1} \approx \approx 1.35$, а значення $g_2(t)/c_0$ зростають на 30%: $g_2(t)|_{\bar{v}_1=0.6, t>1}/g_2(t)|_{\bar{v}_1=0.4, t>1} \approx \approx 1.3$ (криві 4, 5, рис. 7а,б). Зауважимо, що зміна величини швидкості конвективного перенесення в області Ω_1 не змінює поведінку функції концентрації на другій границі контакту (рис. 7б), проте на першій границі контакту втрачається рівномірність зростання функції $g_1(t)/c_0$ на проміжку $t \in [2.5, 5]$ для великих значень \bar{v}_1 (криві 5, 6, рис. 7а).

Зауважимо, що якщо для кожного значення \bar{v}_1 функції $g_1(t)/c_0$ і $g_2(t)/c_0$ виходять на свій стаціонарний режим (рис. 7), то незалежно від зміни значень коефіцієнта швидкості \bar{v}_2 конвективного перенесення у другому макроелементі значення у стаціонарному режимі як для $g_1(t)/c_0$, так і для $g_2(t)/c_0$ залишаються незмінними (рис. 8). Чим більшим є значення коефіцієнта \bar{v}_2 , тим більших значень набувають концентрації на границях контакту і тим швидше виходять на усталені режими. При цьому існують часові проміжки, коли різниця між значеннями функцій $g_1(t)/c_0$ і $g_2(t)/c_0$ для різних значень \bar{v}_2 зростає: $t \in (1, 7.5)$ для $g_1(t)/c_0$ і $t \in (2, 7.5)$ для $g_2(t)/c_0$, а максимальна відмінність становить 26% на границі $\xi = \xi_1$ і 31% на границі $\xi = \xi_2$.

Коефіцієнти концентраційної залежності хімічних потенціалів $\lambda^{(i)}$, які визначають на відповідних границях контакту $\xi = \xi_i$ величину стрибка функції концентрації домішкових частинок, можуть значно впливати на значення $g_1(t)/c_0$ і $g_2(t)/c_0$, проте не змінюють поведінку цих функцій (див. рис. 10, рис. 11). Зростання значень $\lambda^{(i)}$ приводить до накопичення домішкових частинок в околі границь контакту. Чим більших значень набувають коефіцієнти $\lambda^{(i)}$, тим пізніше функції $g_1(t)/c_0$ і $g_2(t)/c_0$ виходять на стаціонарний режим. Наприклад, при $\lambda^{(1)} = 0.2$ час виходу на усталений режим становить $t_s = 1.8$ для $g_1(t)/c_0$ (рис. 10а) і $t_s = 3.4$ для $g_2(t)/c_0$ (рис. 10б), а при $\lambda^{(1)} = 2.2$ – відповідно $t_s = 11.5$ і $t_s = 12.3$. Аналогічну ситуацію спостерігаємо і для функції $g_2(\tau)$ при зміні коефіцієнта $\lambda^{(2)}$: час виходу на стаціонарний режим становить $t_s = 7.2$ при $\lambda^{(2)} = 0.2$ і $t_s = 13.6$ – при $\lambda^{(2)} = 2.2$ (рис. 11б). При цьому зміна коефіцієнта $\lambda^{(2)}$ не впливає на значення функції $g_1(t)/c_0$ (рис. 11а). Також зауважимо, що різні значення коефіцієнтів $\lambda^{(i)}$ зумовлюють істотно різні значення функцій $g_1(t)/c_0$ і $g_2(t)/c_0$ в усталеному режимі. Так, збільшення коефіцієнта $\lambda^{(1)}$ на порядок (від 0.2 до 2.2) приводить до зростання на порядок стаціонарних значень $g_1(t)/c_0$: $g_1(t_s)|_{\lambda^{(1)}=2.2}/g_1(t_s)|_{\lambda^{(1)}=0.2} = 10.8$, і $g_2(t)/c_0$: $g_2(t_s)|_{\lambda^{(1)}=2.2}/g_2(t_s)|_{\lambda^{(1)}=0.2} = 11$ (рис. 10). Таке саме зростання значень функції $g_2(t)/c_0$ на порядок у стаціонарному режимі приводить до зростання на порядок коефіцієнта $\lambda^{(2)}$: $g_2(t_s)|_{\lambda^{(2)}=2.2}/g_2(t_s)|_{\lambda^{(2)}=0.2} = 10.99$ (рис. 11б).

Зауважимо, що значення величини товщини шарів, з яких складене тіло, істотно впливають як на поведінку, так і на значення функцій концентрацій мігруючої речовини на границях контакту цих макроелементів (рис. 12, рис. 13). За сталого значення товщини складеного тіла ($\xi_0 = 10$) і фіксованій границі контакту між другим і третім макроелементами збільшення товщини шару Ω_1 приводить до значного (на порядки) зростання значень функції $g_1(t)/c_0$ у стаціонарному режимі (рис. 12а).

Чим тоншим є перший шар, тим швидше починають більше відрізнятися від початкового стану (нуля) значення функції $g_1(t)/c_0$ (криві 1, 2 рис. 12а), причому інтервали росту функції є тим більшими, чим більшою є товщина першого шару тіла: $t \in (0, 0.2]$ для $\xi_1 = 0.1\xi_0$, $t \in (0, 1]$ для $\xi_1 = 0.2\xi_0$, і тим пологішим є спадання функції концентрації після досягнення свого максимуму, величина якого зростає зі збільшенням товщини області Ω_1 : $\max_{t>0} g_1(t) \Big|_{\xi_1=0.3\xi_0} / \max_{t>0} g_1(t) \Big|_{\xi_1=0.1\xi_0} = 1.74$. Подальше зростання товщини першого шару ($\xi_1 > 0.35\xi_0$) приводить до монотонного і рівномірного зростання функції $g_1(t)/c_0$ на першій границі контакту (рис. 12а).

Збільшення товщини першого шару і одночасне зменшення товщини другого шару значно більше впливає на поведінку і значення функції $g_2(t)/c_0$ (рис. 12б). При цьому, якщо один з двох шарів є тонким, то значення функції $g_2(t)/c_0$ є малими: $g_2(t)/c_0 < 10^{-7}$ для $\xi_1 = 0.1\xi_0$, $\xi_2 - \xi_1 = 0.6\xi_0$ (крива 1, рис. 12б), $g_2(t)/c_0 < 10^{-4}$ для $\xi_1 = 0.6\xi_0$, $\xi_2 - \xi_1 = 0.1\xi_0$ (крива 7, рис. 12б). Зростання товщини другого шару до величини $\xi_2 - \xi_1 = 0.3\xi_0$ веде до зростання значень функції $g_2(t)/c_0$ (криві 1–5, рис. 12б). Подальше зростання товщини $\xi_2 - \xi_1$ приводить до значного зменшення концентрації домішки на границі контакту $\xi = \xi_2$, при цьому втрачається монотонність функції і формується її максимум (криві 6, 7, рис. 12б).

При фіксованій товщині першого шару зміна положення границі контакту між другим і третім шарами також значно впливає на поведінку функцій $g_1(t)/c_0$ і $g_2(t)/c_0$ (рис. 13). При цьому на початковому часовому інтервалі $t \in (0, 0.7)$ значення функції $g_1(t)/c_0$ залишаються тими самими для різних товщин шарів Ω_2 , Ω_3 (рис. 13а). Якщо границя контакту $\xi = \xi_2$ зсувається до границі тіла $\xi = \xi_0$, то значення функції концентрації на границі $\xi = \xi_1$ зменшується і $g_1(t)/c_0$ пізніше виходить на стаціонарний режим (наприклад, криві 1, 4, рис. 13а). Зазначимо, що для функції $g_2(t)/c_0$ характерним є одночасне зростання значень за малих товщин другого шару (криві 1–3, рис. 13б) і наявність максимуму цієї концентрації. При цьому при зростанні величини $\xi_2 - \xi_1$ від $0.1\xi_0$ до $0.2\xi_0$ максимум зростає в чотири рази: $\max_{t>0} g_2(t) \Big|_{\xi_2-\xi_1=0.2\xi_0} / \max_{t>0} g_2(t) \Big|_{\xi_2-\xi_1=0.1\xi_0} = 4.12$. Подальше зростання товщини шару і зменшення товщини третього шару приводить спочатку до зростання функції концентрації домішки на границі $\xi = \xi_2$, а потім до її поступового значного зменшення (криві 4–7, рис. 13б). Причому, чим ближчою є границя контакту $\xi = \xi_2$ до границі тіла, тим пізніше функція $g_2(t)/c_0$ виходить на усталений режим.

Зазначимо, що дослідження функцій $g_1(t)/c_0$ і $g_2(t)/c_0$ проводились за умов неідеального контакту функції концентрації домішкової речовини на границях поділу шарів, при цьому умови ідеального контакту можна досліджувати як частковий випадок при $\lambda^{(1)} = \lambda^{(2)} = 1$.

Висновки. У рамках математичної моделі конвективної дифузії домішкових частинок, яка супроводжується сорбційними процесами, у тілі, що складається з трьох контактуючих пористих шарів за неідеальних умов контакту на функцію концентрації, досліджено поведінку та значення функції концентрації домішки на границях контакту фаз. Для знаходження шуканих функцій із контактних умов рівності дифузійних потоків отримано систему інтегральних рівнянь. На основі одержаних розв'язків розроблено програмний засіб для комп'ютерного моделювання процесів конвективної дифузії з урахуванням сорбції домішки на скелет тіла і встановлено вплив вхідних даних на поведінку і значення концентрацій домішкових частинок на обох границях контакту пористих шарів.

Показано, що зміна коефіцієнтів інтенсивності сорбції в другому і третьому контактуючих шарах, відносний коефіцієнт дифузії у другій області, коефіцієнти швидкості конвективного перенесення в першому і другому шарах, а також коефіцієнти концентраційної залежності хімічних потенціалів значно впливають на поведінку і/або значення функцій концентрації домішкової речовини на границях контакту макроелементів, які складають пористий шар. Зміна інших коефіцієнтів не зумовлює зміни значень досліджуваних функцій.

1. Калужнін Л. А., Вишенський В. А., Шуб Ц. О. Лінійні простори. – Київ: Вища шк., 1971. – 344 с.
2. Мартыненко Н. А., Пустыльников Л. М. Конечные интегральные преобразования и их применение к исследованию систем с распределенными параметрами. – Москва: Наука, 1986. – 304 с.
3. Чарін В. С. Лінійна алгебра. – Київ: Техніка, 2004. – 416 с.
4. Чапля Є. Я., Чернуха О. Ю. Математичне моделювання дифузійних процесів у випадкових і регулярних структурах. – Київ: Наук. думка, 2009. – 302 с.
5. Чернуха О. Ю., Білуцак Ю. І. Математичне моделювання процесів конвективної дифузії та сорбції у тришаровому пористому тілі. І. Масоперенесення домішкових частинок з поровим розчином // *Мат. методи та фіз.-мех. поля.* – 2021. – **64**, № 4. – С. 107–116.
6. Poole D. Linear algebra: A modern introduction. – Monterey: Brooks/Cole Publ. Co., 2006. – 712 p.
7. Lay D. C. Linear algebra and its applications. – Reading: Addison-Wesley Publ. Co., 2005. – 576 p.

MATHEMATICAL MODELING OF THE PROCESSES OF CONVECTIVE DIFFUSION AND SORPTION IN A TREE-LAYERED POROUS BODY. II. QUANTITATIVE ANALYSIS OF CONCENTRATION OF IMPURITY PARTICLES AT CONTACT INTERFACES

Quantitative analysis of the concentration of impurity migrating with the solution in a three-layered porous body, taking into account the sorption processes, at the contact boundaries of macroelements under imperfect conditions of mass contact, is performed. The system of integral equations is obtained to find the required functions from the contact conditions of the equality of diffusion flows. Based on numerical analysis of the obtained solutions it is shown that the change of coefficients of intensity sorption in the second and third contacting layers, the relative diffusion coefficient in the second layer, coefficients of convective transfer velocity in the first and second layers, as well as the coefficients of concentration dependence of chemical potentials influence significantly on the behavior and/or values of the function of impurity concentrations at the contact boundaries of macroelements forming the porous layer.

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