

МОДЕЛЮВАННЯ ДИФУЗІЇ ДОМІШКИ У СТОХАСТИЧНОМУ БАГАТОФАЗНОМУ ТІЛІ ЗА РІВНОМІРНОГО РОЗПОДІЛУ КУЛЬОВИХ ВКЛЮЧЕНЬ

Анастасія Чучвара

Інститут прикладних проблем механіки і математики ім. Я. С. Підстригача НАН
України, davydoka@gmail.com

Дослідження процесів перенесення маси у структурах зі складною внутрішньою будовою відіграє важливе значення під час промислового виробництва адсорбентів, каталізаторів, композиційних матеріалів, встановленні основних закономірностей поширення забруднюючих речовин в об'єктах навколишнього середовища, тощо. При цьому наявність у тілі випадково розташованих неоднорідностей різних форм та розмірів з характеристиками, відмінними від характеристик основного середовища, може суттєво впливати на хімічні та фізичні взаємодії, що відбуваються всередині тіла. Для дослідження неоднорідних, зокрема, пористих структур, широко використовують методи решіток Больцмана та випадкового блукання, проте при постановці крайових задач не накладають умову неідеального контакту на міжфазних границях, що є певним спрощенням відповідної математичної моделі.

У даній роботі, на основі підходу [1], що ґрунтується на побудові розв'язку у вигляді ряду Неймана, що є розв'язком інтегро-диференціального рівняння Вольтерра-Гаммерштейна, та його подальшого усереднення за ансамблем конфігурацій фаз, досліджено дифузію домішки у багатофазному випадково неоднорідному тілі з кульовими включеннями, за умови явного врахування стрибка функції концентрації та рівності потоків на випадкових міжфазних границях. Зокрема, розглянуто випадок, коли об'ємна частка включень є співвимірною з об'ємною часткою основної фази (скелету).

Нехай у стохастично неоднорідному шарі товщини z_0 , що складається з $N + 1$ різних за густиною фаз, відбувається міграція домішкових частинок. Прийнято, що у тілі випадковим чином розташовані кульові включення, зокрема, розглянуто рівномірний ймовірнісний закон їх розподілу. Серед включень однієї фази можна виділити один або декілька характерних радіусів включень, а радіуси куль різних фаз можуть бути як різними, так і співпадати, зокрема, для частини матеріалів.

**Конференція молодих учених «Підстригачівські читання – 2022»,
25–27 травня 2022 р., Львів**

Процес масоперенесення домішкової речовини у такому тілі описується рівняннями дифузії для кожної фази k ($k = 0, N$):

$$\rho_k \frac{\partial c_k(\vec{r}, t)}{\partial t} = d_k \left[\frac{\partial^2 c_k(\vec{r}, t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c_k(\vec{r}, t)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 c_k(\vec{r}, t)}{\partial z^2} \right], \quad \vec{r} \in (V^{(k)}), \quad t \in [0; \tau] \quad (1)$$

де $c_k(\vec{r}, t)$ – концентрація домішки у k -ій фазі; ρ_k і d_k – густина та кінетичний коефіцієнт переносу в k -й фазі; $\vec{r} = (x, y, z)$ – радіус-вектор біжучої точки; $V^{(k)}$ – об'єм фази k (багатозв'язної області); t – час.

Прийнято нульову початкову умову для функції концентрації, на верхній границі тіла підтримується постійне значення концентрації домішки, а на нижній границі вона рівна нулю. На границях розділу областей виконуються умови рівності хімічних потенціалів та дифузійних потоків частинок домішки, тобто наявні стрибки функції концентрації на міжфазних границях.

Скелет тіла змодельовано щільною упаковкою кулями різного радіуса. Вихідну контактну-крайову задачу зведено до рівняння масоперенесення для тіла в цілому. Отриманій крайовій задачі поставлено у відповідність еквівалентне інтегро-диференціальне рівняння Вольтерра-Гаммерштейна з випадковим ядром, розв'язок якого знайдено у вигляді ряду Неймана. Одержано розрахункову формулу для визначення усередненого за ансамблем конфігурацій фаз поля концентрації домішки у шарі з випадково розташованими кулями N різних фаз за умови рівномірного розподілу включень в області тіла та співвимірних об'ємних часток включень. Розроблено програмні модулі та проведено аналіз залежності концентрації мігруючої речовини від параметрів середовища. Показано, що у випадку моделювання скелета тіла кулями одного радіуса значення усередненої концентрації мігруючої речовини для різних модельних варіантів подання цього характерного радіуса співпадають.

1. Чапля Є.Я., Чернуха О.Ю. Фізико-математичне моделювання дифузійних процесів у випадкових і регулярних структурах. – Київ: Наукова думка, 2009. – 302 с.

**MODELING ADMIXTURE DIFFUSION IN A STOCHASTICALLY
MULTIPHASE BODY WITH UNIFORM DISTRIBUTION OF SPHERICAL
INCLUSIONS**

The process of admixture diffusion in a multiphase randomly nonhomogeneous body with spherical inclusions is investigated. The solution of the initial contact-boundary value problem is presented in the form of Neumann series. Calculation formula for averaged over the ensemble of phase configurations admixture concentration is obtained in the case of commensurable volume fractions of phases and uniform distribution of spherical inclusions.