

УДК 517.958:532.72

## Математичне моделювання дифузії у сильно пористому тілі за стохастичного розташування сферичних пор

Чернуха О. Ю.<sup>1,2</sup>, д.т.н., проф. каф. ОМПБілушак Ю. І.<sup>1,2</sup>, к.т.н., ст. вик. каф. ОМПЧучвара А. Є.<sup>1</sup>, к.т.н., н.с. ЦММ ІППММ ім. Я. С. Підстригача НАН України<sup>1</sup>Національний університет «Львівська політехніка»

(вул. С. Бандери, 12, м. Львів, 79013, Україна)

<sup>2</sup>Центр математичного моделювання

Інституту прикладних проблем ім. Я. С. Підстригача НАН України

(вул. Д. Дудаєва, 15, м. Львів, 79005, Україна)

Математичний опис фізичних процесів, які протікають у пористих тілах, базується на відповідних балансових рівняннях у середовищах, що розглядаються як двофазні і складаються зі скелету та порового простору, який, у свою чергу, складається з однозв'язних елементів певної превалюючої форми — куль, циліндрів, тощо. При цьому в реальних пористих середовищах розміри пор розподілені випадковим чином [1]. Крім цього скелет пористого середовища також може бути багатозв'язним — наприклад, являти собою різної щільності упаковки куль [2]. У роботі запропоновано підхід до математичного моделювання дифузії домішкової речовини у пористому шарі при співвимірних об'ємних частках скелету та порового простору за дії сталого джерела маси на поверхні.

Пористий шар, в якому мігрують частинки, моделюємо як двофазний випадково неоднорідний шар товщини  $z_0$  із великим числом включень — сферичних пор. Об'ємна частка жодної фази не є превалюючою, тобто не можна виділити базову фазу. Приймаємо рівномірний розподіл фаз в області тіла і вважаємо, що фізичні характеристики є сталими в межах кожної з фаз. Також вважаємо, що пори повністю знаходяться в області тіла. Процес масоперенесення домішки у такому тілі описується рівняннями дифузії для кожної фази  $k$ :

$$\rho_k \frac{\partial c_k(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = d_k \Delta c_k(\mathbf{r}, t), \quad \mathbf{r} \in (V^{(k)}), \quad t \in [0; \tau] \quad (\tau < \infty), \quad k = \overline{0, 1}, \quad (1)$$

де  $c_k(\mathbf{r}, t)$  — концентрація домішкової речовини у  $k$ -ій фазі,  $\rho_k$ ,  $d_k$  — густина і кінетичний коефіцієнт переносу мігруючої речовини у  $k$ -ій фазі,  $\mathbf{r} = (x, y, z)$  — радіус-вектор біжучої точки,  $t$  — час. Тут  $k = 0$  відповідає скелету тіла,  $k = 1$  — його пористій компоненті. Крайові умови мають вигляд

$$c_{sk}(\mathbf{r}, t)|_{t=0} = c_{pore}(\mathbf{r}, t)|_{t=0} = 0, \quad c_{sk}(\mathbf{r}, t)|_{z=0} = c_* \equiv const, \quad c_{sk}(\mathbf{r}, t)|_{z=z_0} = 0, \\ c_k(\mathbf{r}, t)|_{x, y \rightarrow \pm\infty} \leq K < \infty \quad (k = \overline{0, 1}), \quad (2)$$

Приймаємо умови неідеального контакту [3] для концентрації мігруючої речовини на границях скелет–пора

$$\begin{aligned} \varkappa_0 c_{sk}(\mathbf{r}, t)|_{\mathbf{r} \in \Gamma-0} &= \varkappa_1 c_{pore}(\mathbf{r}, t)|_{\mathbf{r} \in \Gamma+0}, \\ \rho_0 d_0 \nabla c_{sk}(\mathbf{r}, t)|_{\mathbf{r} \in \Gamma-0} &= \rho_1 d_1 \nabla c_{pore}(\mathbf{r}, t)|_{\mathbf{r} \in \Gamma+0} \end{aligned} \quad (3)$$

та пора–скелет

$$\begin{aligned} \varkappa_1 c_{pore}(\mathbf{r}, t)|_{\mathbf{r} \in \Gamma-0} &= \varkappa_0 c_{sk}(\mathbf{r}, t)|_{\mathbf{r} \in \Gamma+0}, \\ \rho_1 d_1 \nabla c_{pore}(\mathbf{r}, t)|_{\mathbf{r} \in \Gamma-0} &= \rho_0 d_0 \nabla c_{sk}(\mathbf{r}, t)|_{\mathbf{r} \in \Gamma+0}, \end{aligned} \quad (4)$$

де  $\varkappa_k = A\gamma_k$  ( $k = \overline{0, 1}$ ),  $\gamma_k$  — коефіцієнт активності,  $\Gamma$  — границя розділу фаз.

Змоделюємо скелет тіла щільною упаковкою з куль  $m$  різних радіусів  $R_j$  ( $j = \overline{1, m}$ ), виділяємо  $N - m - 1$  характерних радіусів пор  $R_j$  ( $j = \overline{m+1, N}$ ) (рис. 1).

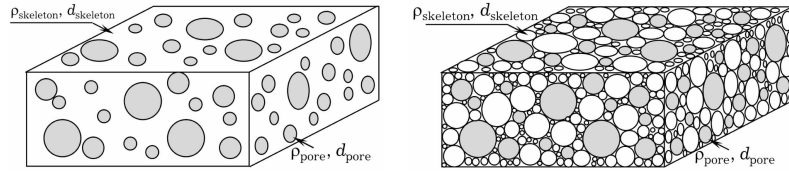


Рис. 1. Моделювання елемента пористого тіла щільною упаковкою куль

Вважаємо, що дві кулі пор не можуть перетинатись. Куля, що належить скелету, може контактувати з іншими кулями скелету і/або з кулями пор, причому різних радіусів. Розглядаємо кулі різних (проте характерних) розмірів як різні фази. Вважаємо, що для двофазного тіла індекси  $j = \overline{1, m}$  відповідають скелету середовища ( $k = 0$ ), індекси  $j = \overline{m+1, N}$  використано для позначення пористих включень ( $k = 1$ ). Нехай однозв'язну область  $(V_i^{(j)})$  займає  $i$ -а куля  $j$ -ої фази ( $j = \overline{1, N}$ ,  $i = \overline{1, n_j}$ ,  $n_j$  — число куль  $j$ -ої фази), тоді  $\bigcup_{i=1}^{n_j} V_i^{(j)} = V_j$ ;  $\bigcup_{j=1}^N V_j = V$ ,  $V$  — об'єм тіла. На границях куль, що моделюють скелет тіла і не контактують з кулями пор ( $j = \overline{1, m+1}$ ), стрибків концентрації та її похідної немає:

$$c_i(\mathbf{r}, t)|_{\mathbf{r} \in \Gamma-0} = c_{i+1}(\mathbf{r}, t)|_{\mathbf{r} \in \Gamma+0}, \quad \nabla c_i(\mathbf{r}, t)|_{\mathbf{r} \in \Gamma-0} = \nabla c_{i+1}(\mathbf{r}, t)|_{\mathbf{r} \in \Gamma+0}.$$

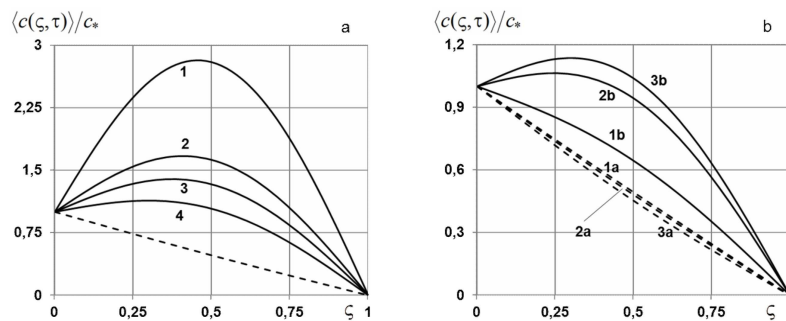
Аналогічно для куль, які відповідають порам ( $j = \overline{m+1, N}$ ) і контактують тільки між собою. Тоді умови (3), (4) можемо записати у загальному вигляді

$$\begin{aligned} \varkappa_l c_l(\mathbf{r}, t)|_{\mathbf{r} \in \Gamma_p-0} &= \varkappa_p c_p(\mathbf{r}, t)|_{\mathbf{r} \in \Gamma_p+0}, \quad \rho_l d_l \nabla c_l(\mathbf{r}, t)|_{\mathbf{r} \in \Gamma_p-0} = \rho_p d_p \nabla c_p(\mathbf{r}, t)|_{\mathbf{r} \in \Gamma_p+0}, \\ \varkappa_p c_p(\mathbf{r}, t)|_{\mathbf{r} \in \Gamma_p-0} &= \varkappa_l c_l(\mathbf{r}, t)|_{\mathbf{r} \in \Gamma_p+0}, \\ \rho_p d_p \nabla c_p(\mathbf{r}, t)|_{\mathbf{r} \in \Gamma_p-0} &= \rho_l d_l \nabla c_l(\mathbf{r}, t)|_{\mathbf{r} \in \Gamma_p+0}. \end{aligned} \quad (5)$$

Тут  $l = \overline{1, m}$ ,  $p = \overline{m + 1, N}$ ;  $\Gamma_p$  — границя пори радіуса  $R_p$ .

Контактно-крайову задачу (1), (3)–(5) розв’язуємо зведенням до еквівалентного інтегро-диференціального рівняння, розглядаючи випадкові неоднорідності структури як внутрішні джерела [3]. Розв’язок отриманого рівняння шукаємо ітеруванням у вигляді ряду Неймана, приймаючи за нульове наближення розв’язок однорідної задачі з усередненими характеристиками. Отриманий вираз усереднюємо за ансамблем конфігурацій фаз з рівномірною функцією розподілу.

Комп’ютерне моделювання дифузії домішкової речовини у пористому тілі за умови співвимірних об’ємних часток фаз виконувалось в безрозмірних змінних за одержаною розрахунковою формулою, в якій точність обчислення рядів становить  $10^{-7}$  і  $10^{-9}$ . На рис.2а наведено розподіли концентрації домішки у пористому тілі в момент безрозмірного часу  $\tau = 0.4$  залежно від кількості характерних радіусів пор  $N = 3; 4; 5; 6$  (криві 1-4), при цьому  $m = 2; 2; 3; 3$ . На рис.2b розподіли наведено залежно від співвідношень об’ємних часток фаз:  $v_{sk} = 0.4; v_{pore} = 0.6; v_{sk} = 0.5; v_{pore} = 0.5; v_{sk} = 0.6; v_{pore} = 0.4$ .



**Рис. 2.** Розподіли концентрації для різних значень параметра  $N$  (а) і різних співвідношень об’ємних часток фаз (б)

Встановлено, що чим більша кількість характерних радіусів пор  $N$ , тим менших значень набуває усереднена концентрація. Крім цього, чим більша пористість структури, тим меншим є значення усередненої концентрації (криві b, рис.2b), натомість концентрація домішки в однорідному середовищі з усередненими характеристиками є більшою (криві a, рис.2b).

- [1] *Bhattacharya R., Gupta V., Sposito G.* On the stochastic foundations of the theory of water flow through unsaturated soil, *Water Resoures.* – 1976. – 12 (3).– P. 503-512.
- [2] *Ковалев О. Б.* Моделирование случайной упаковки насыпного слоя полидисперсных сферических частиц, *Прикл. мех. и техн. физика.* 2014. – 55.– № 4. – С. 184-192.
- [3] *Чернуха О. Ю., Білушак Ю. І., Чучвара А. Є.* Моделювання дифузійних процесів у стохастично неоднорідних структурах. – Львів: Растр-7, 2016. – 262 с.