УДК 519.6

ДИСКРЕТИЗАЦІЯ ЗАДАЧІ ДИФУЗІЇ РЕЧОВИНИ В НАНОПОРИСТОМУ СЕРЕДОВИЩІ

***Н.А. Вєщунова**, к.ф.-м.н.*
Інститут кібернетики імені В.М. Глушкова НАН України
nvieshchunova@ukr.net

Розглядається чисельне розв’язання диференціальної різномасштабної математичної задачі масопереносу в нанопористому середовищі.

Vieshchunova N.A. Numerical Solution of Masstransfer in Nanoporous Media. The solution of differencial mathematical masstransfer problem in nanoporous media is considered.

Ключові слова: МАСОПЕРЕНОС, НАНОПОРИСТІ СЕРЕДОВИЩА, МЕТОД СКІНЧЕННИХ ЕЛЕМЕНТІВ.

Keywords: MASS TRANSFER, POROUS MEDIAS, FEM.

В області $\Omega_T = \Omega \times (0,T)$, $\Omega = (0,L)$, розглядається процес дифузії речовини через пористу пластину товщини L, що складається з великої кількості сферичних пористих складових радіусу R ($0<R<<L<\infty$), який описується рівнянням [1]:

$$\varepsilon \frac{\partial c}{\partial t} = d_1 \varepsilon \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - 3(1-\varepsilon)\frac{d_2}{R}\left(\frac{\partial q}{\partial r}\right)\bigg|_{r=R}, \ (x,t) \in \Omega_T, \ r \in [0,R], \quad (1)$$

де ε – пористість, d_1, d_2 – коефіцієнти дифузії; $c(x,t)$ та $q(r,x,t)$ – концентрації речовини.

Дифузія речовини у сферичній складовій радіуса R із центром в точці $x \in \Omega$ пористого середовища описується рівнянням:

$$\frac{\partial q}{\partial t} = d_2 \left(\frac{\partial^2 q}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial q}{\partial r}\right), r \in (0,R), (x,t) \in \Omega_T. \quad (2)$$

Початкові умови:

$$c(x,0) = \phi_1(x), \ q(r,x,0) = \phi_2(r,x), \ x \in \Omega, \ r \in (0,R). \quad (3)$$

Крайові умови для концентрації $c(x,t)$:

$$c(L,t)=\varphi(t),\ \left.\frac{\partial c}{\partial x}\right|_{x=0}=0,\ t\in(0,T). \tag{4}$$

Крайові умови в т. $(x,t)\in\Omega_T$ для концентрації $q(r,x,t)$:

$$\frac{\partial q(0,x,t)}{\partial r}=0,\ q(R,x,t)=kc(x,t),\ t\in(0,T), k=const>0. \tag{5}$$

Питання побудови узагальненої задачі та наближеного узагальненого розв'язку задачі (1)–(5) розглянуті в [1]. Автором задача розв'язана чисельно за допомогою методу скінченних елементів (МСЕ) із використанням кусково-квадратичних функцій [2]. Області [0, L] та [0, R] розбиваються з кроком h_c та h_q, відповідно, на $n_1=L/h_c$ та $n_2=R/h_q$ елементарних відрізків, що дозволяє сформувати вектор із $N=N_c(N_r+1)$ вузлів ($N_c=2n_1+1,\ \ N_r=2n_2+1$), де кожній точці $x_i\in[0,L]$, $i=\overline{0,\ N_c-1}$, відповідає N_r точок $r_j\in[0,R]$, $j=\overline{0,N_r-1}$.

Розв'язок початково-крайової задачі (1)–(5) зводиться до розв'язання задачі Коші для системи звичайних диференційних рівнянь першого порядку [2]. Проведено чисельні експерименти, які показують ефективність розроблених алгоритмів (відносна похибка відхилення наближеного розв'язку від наперед відомого точного не перевищувала $5\cdot10^{-7}\%$).

Висновок Особливість задачі (1)–(5) полягає у складових рівняння (1) та умові (5), що потребувало нестандартного підходу при розбитті області дослідження, побудові матриць жорсткості і мас та вектора правих частин і врахуванні крайових умов [2].

Література

1. *Сергиенко И.В., Дейнека В.С.* Идентификация градиентными методами параметров задач диффузии вещества в нанопористой среде // Проблемы управления и информатики. – 2010. – №6. – С. 5–18.
2. *Дейнека В.С., Сергиенко И.В., Скопецкий В.В.* Модели и методы решения задач с условиями сопряжения. – Киев: Наук. думка, 1998. – 615 с.