

УДК 655. 22

І.М.Павлюк, П.Л.Пашуля

**ЧИСЕЛЬНІ МЕТОДИ РОЗВ'ЯЗУВАННЯ ЗАДАЧ
МАСОПЕРЕНОСУ ПРИ ГЕТЕРОГЕННОМУ
ПРОЦЕСІ**

У поліграфічній технології при виготовленні друкарських форм високого, плоского і глибокого друку мають місце різні гетерогенні процеси, в результаті яких можливе утворення вторинних проміжних фазових структур, наприклад, хлориду міді, сполук цинку із захисною добавкою та ін. Проміжні структури можуть також утворюватись при проявленні (вимиванні) прихованого зображення фотополімерних форм і т. ін. Ці утворення певним чином впливають на процес, що потрібно враховувати.

З математичної точки зору подібні гетерогенні системи можуть розглядатись як системи з рухомою межею.

Модельне рівняння, яке описує вищезгадані процеси, має вигляд

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \delta(x, t) \frac{\partial C}{\partial x}, \quad (1)$$

де (x, t) — швидкість переміщення межі фаз [3].

Межевими і початковими умовами при цьому є:

$$C(X, 0) = C_0; \quad (2)$$

$$C(0, t) = C_1; \quad (3)$$

$$C(h(t), t) = C_s, \quad (4)$$

Для реакцій, що протікають у дифузійній області, $C_0 = C_1 = 0$.

Швидкість $\delta(X, t)$ апроксимувагимо лінійною і кореневою залежністю з відповідним знаком.

Сформульовану таким чином задачу розв'яжемо методом сіток.

Розглянемо область $G = [0, X] \cap [0, T]$ і побудуємо в ній сітку з постійним кроком λ за X та змінним у часі кроком t_j :

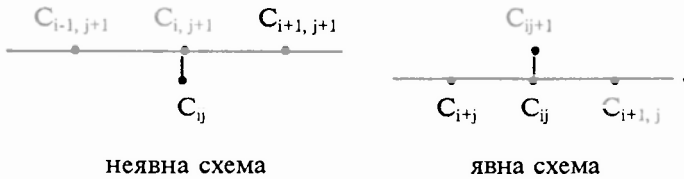
$$X_i = \lambda_i, t_j = t_{j_k}, i = 0, 1, 2, \dots, n; j = 0, 1, 2, \dots, n. \quad (5)$$

Будемо шукати наближені значення C_{ij} концентрації $C(X, t)$ у вузлах сітки і ламану, ланки якої є діагоналями вузлів сітки, що апроксимує криву $X = h(t)$. Виходячи з цих міркувань, крок за часом будемо брати залежним від j таким чином, щоб для кожного t_j кінець ланки ламаної, що апроксимує криву $X = h(t)$, попадав у вузол сітки з координатами $((N - n) / h / t_j)$. Тобто вимагатимемо, щоб за кожний крок у часі t_j кінець ламаної $X = h(t)$ переміщався по X на величину $h_n - h_{n-1} = -\lambda$ [1].

Поставлені умови здійснюють при неявній різницевій схемі вловлювання фазового фронту у вузлі сітки.

Для обчислення $\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$ застосуємо симетричну різни-

цеву формулу, а для $\frac{\partial C}{\partial x}, \frac{\partial C}{\partial t}$ — формулу чисельного диференціювання назад згідно зі схемою:



Рівняння (1) замінимо скінченно-різницеvim рівнянням

$$\frac{C_{i,j+1} - C_{i,j}}{k} = D \frac{C_{i+1,j} - 2C_{i,j+1} + C_{i-1,j+1}}{\lambda^2} - \delta_j \frac{C_{i,j+1} - C_{i,j}}{\lambda} \quad (6)$$

Застосована неявна схема при виконанні умов Куранта — Фрідріхса — Леві стійка, стабілізована і має порядок точності $O(\lambda^2 = k)$.

Запишемо різницеве рівняння (6) в іншому вигляді:

$$\frac{C_{i,j+1}}{k} + \delta_j \frac{C_{i,j+1}}{\lambda} - D \frac{C_{i+1,j} - 2C_{i,j+1} + C_{i-1,j+1}}{\lambda^2} = C_{i,j} \left(\frac{1}{k} + \frac{V_j}{\lambda} \right).$$

Звідси

$$C_{i,j} = \frac{k\lambda}{\lambda + k\delta_j} \left(\frac{\lambda + k\delta_j}{k\lambda} C_{i,j+1} - D \frac{C_{i+1,j+1} - 2C_{i,j+1} + C_{i-1,j+1}}{\lambda^2} \right) =$$

$$C_{i,j+1} = \frac{Dk}{\lambda(\lambda + k\delta_j)} C_{i+1,j+1} + 2 \frac{Dk}{\lambda(\lambda + k\delta_j)} C_{i,j+1} - \frac{Dk}{\lambda(\lambda + k\delta_j)} C_{i-1,j+1} \quad (7)$$

Позначимо в (7) $\frac{Dk}{\lambda(\lambda + k\delta_j)} = H_j$. (8)

Тоді, виконавши відповідні підстановки, вираз (7) запишемо як

$$C_{i,j} = (1 + 2H_j) C_{i,j+1} - H_j C_{i+1,j+1} - H_j C_{i-1,j+1} \quad (9)$$

З граничних умов

$$C_{0,j+1} = C_0 ; C_{n,j+1} = C_s \quad (10)$$

Залежності (9) та (10) можна розглядати як систему рівнянь, розв'язання якої виконаємо методом прогонки [2]. Припустімо:

$$C_{i,j+1} = a_{i,j+1} (b_{i,j+1} + H_j C_{i+1,j+1}), \quad (11)$$

де $a_{i,j+1}$, $b_{i,j+1}$ — числа, зміст яких буде розкритий нижче:

$$C_{i-1,j+1} = a_{i-1,j+1} (b_{i-1,i+1} + H_j C_{i,j+1}). \quad (12)$$

Підстановка (12) в (9) приведе до наступного результ-

тату:

$$C_{i,j} = (1 + 2H_j)C_{i,j+1} - H_j C_{i+1,j-1} - H_j a_{i-1,j+1} b_{i-1,j+1} - H_j^2 C_{i,j+1} a_{i-1,j+1}, \quad (13)$$

$$C_{i,j+1} = \frac{1}{1 + 2H_j - H_j^2 a_{i-1,j+1}} (H_j a_{i-1,j+1} b_{i-1,j+1} + H_j C_{i+1,j+1} C_{i,j}). \quad (14)$$

Порівнявши за формою запису вирази (13) і (11), можна стверджувати, що

$$a_{i,j+1} = \frac{1}{1 + 2H_j - H_j^2 a_{i-1,j+1}}; \quad (15)$$

$$b_{i,j+1} = H_j a_{i-1,j+1} b_{i-1,j+1} + c_{i,j}, \quad (16)$$

$$i = 2, 3, \dots, n, \quad j = 0, 1, 2, \dots, n-1.$$

Для початку циклу обчислень потрібно використати межові і початкові значення концентрації субстанти масопереносу. Прийнемо в (9) та (11) $i = 1$.

$$C_{1,j} = (1 + 2H_j)C_{1,j+1} - H_j C_{2,j+1} - H_j C_{0,j+1}; \quad (17)$$

$$C_{1,j+1} = a_{1,j+1} (b_{1,j+1} + H_j C_{2,j+1}), \quad (18)$$

тобто

$$C_{1,j+1} = \frac{1}{1 + 2H_j} (C_{1,j} H_j C_{0,j+1} b_{1,j+1} + H_j C_{2,j+1}). \quad (19)$$

Як і раніше, порівняння за формою запису (17) і (19) дає наступне подання введених коефіцієнтів:

$$a_{1,j+1} = \frac{1}{1 + 2H_j}; \quad (20)$$

$$b_{1,j+1} = H_j c_{0,j+1} + c_{1,j} \quad (21)$$

Тепер на основі формул (20), (21) та (15), (16) можна виконати обчислення введених послідовностей чисел:

$$a_{1,j+1}, a_{2,j+1}, \dots, a_{n-1,j+1} \quad ; \quad b_{1,j+1}, b_{2,j+1}, \dots, b_{n-1,j+1}$$

Після цих обчислень, використавши (10) та (11), виконаємо “зворотний хід” — знайдемо значення шуканого розподілу концентрації:

$$\left. \begin{aligned} C_{n,j+1} &= C_3; \\ C_{n-1,j+1} &= (H_j C_{n,j+1} + b_{n-1,j+1}) a_{n-1,j+1}; \\ C_{n-2,j+1} &= (H_j C_{n-1,j+1} + b_{n-2,j+1}) a_{n-2,j+1}; \\ C_{1,j+1} &= (H_j C_{2,j+1} + b_{1,j+1}) a_{1,j+1}. \end{aligned} \right\}$$

З використанням описаного методу при розчиненні мікроцинку в азотній кислоті без домішок ПАР та з ними у нестационарному режимі досліди узгоджуються з розрахунками в межах 10 — 12 %. При цьому коефіцієнт дифузії катіонів цинку дорівнював $2,55 \cdot 10^{-5}$ см²/с при їх концентрації від $4,5 \cdot 10^{-2}$ до $9,1 \cdot 10^{-5}$ моль/см³; концентрація ПАР — від 0,5 до 5,0%. Температура розчинів становила 27 + 0,2°C.

Встановлено, що при травленні прогалин шириною 3 мм режим нестационарності процесу мав місце протягом 45 — 60 с.

Проте в процесах травлення форм глибокого друку, де присутня дифузія катіонів через желатиновий шар, ймовірно, що час режиму нестационарності є значно довшим.

Запропонований спосіб розрахунків може бути застосований у цих та подібних випадках.

1. Базалий Б.В., Дехтяров С.П. Классическая разрешимость нестационарной задачи Стефана с конвекцией// ДАН СССР. 1986. 287. № 1. С. 20—24.
2. Демидович Б.П., Марон И.А. Основы вычислительной математики. М., 1970.
3. Пасконов В.М., Полежаев В.Н., Чудов Л.А. Численное моделирование процессов тепло- и массообмена. М., 1984.

Стаття надійшла до редколегії 27.01.97