

# Математичне та комп'ютерне моделювання поширення домішки двома шляхами у середовищі з випадковим прошарком

О. О. Власій  
кафедра інформатики  
ДВНЗ «Прикарпатський національний університет імені Василя Стефаника»  
Івано-Франківськ, Україна  
olesia.vlasii@pu.if.ua

## Mathematical and Computer Modeling Admixture Spread by Two Ways in a Medium with a Random Sublayer

O. Vlasii  
Department of Computer Science  
Vasyl Stefanyk Precarpathian National University  
Ivano-Frankivsk, Ukraine  
olesia.vlasii@pu.if.ua

**Анотація**—Запропоновано та досліджено математичну модель гетеродифузії домішкової речовини з врахуванням процесів сорбції-десорбції у двофазному тілі з випадково розташованим прошарком однієї з фаз. Отримано розрахункові формули для моделювання процесу поширення домішки, на основі яких здійснено комп'ютерне моделювання для встановлення впливу характеристик середовища на розподіли полів концентрації домішкової речовини.

**Abstract**—The mathematical model of heterodiffusion of the admixture in a two-phases body with randomly located layer taking into account sorption-desorption processes are proposed. Calculating formulas for the modeling the admixture spread are obtained. Based on the formulas computer modeling heterodiffusion process is used for the estimating an influence of physical characteristics of the body on the distributing concentration fields of the admixture.

**Ключові слова**—гетеродифузія; двофазне тіло з випадковим прошарком; поширення домішки; комп'ютерне моделювання

**Keywords**—heterodiffusion; two-phases body with randomly located sublayer; admixture spread; computer modeling.

### I. ВСТУП

В структурі реальних середовищ частинки домішки, як правило, локально знаходяться в різних фізичних станах, що зумовлює їх дифузію декількома шляхами, яка супроводжується переходами з одного шляху на інший. Такий процес масопереносу домішкових речовин називають гетеродифузією. Короткий огляд бібліографії, присвяченої питанням дослідження гетеродифузійних процесів, наведено у роботі [1]. Зазначені особливості дифузії характерні для полікристалічних тіл, дрібнозернистих систем різної фізичної природи, пористих насичених рідиною середовищ тощо. Окремий інтерес становить дослідження дифузійних процесів у пористих середовищах, якими, зокрема, є ґрунти, адже дифузією домішкових речовин значною мірою визначається поширення забруднень у навколишньому середовищі. Зауважимо, що у приповерхневих ґрунтових шарах процес просторового перенесення домішок відбувається декількома шляхами. Дослідження дифузійних процесів ускладнюється також у випадку стохастично неоднорідних багатофазних середовищ з суттєво різними фізико-хімічними характеристиками різних фаз [2].

В даній роботі на основі математичного та комп'ютерного моделювання досліджено процеси гетеродифузії домішкової речовини, яка дифундує двома

шляхами у двофазному багатокомпонентному дисперсному середовищі з випадково розташованим прошарком, фізико-хімічні характеристики якого відмінні від відповідних параметрів матриці. Математичну модель побудовано із урахуванням локальних переходів між різними станами домішкових частинок (процеси типу сорбції–десорбції) та за умови локальної термодинамічної рівноваги між двома станами домішки [3].

## II. МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ

Розглянемо дисперсну двофазну шарувату смугу товщиною  $z_0$ , в якій шар однієї фази  $\Omega_1$  містить випадково розташований прошарок іншої фази  $\Omega_2$  товщиною  $h$  (рис. 1). Приймаємо, що фази в тілі розташовані за рівномірним розподілом і об'ємна частка області  $\Omega_1$  є набагато більшою за об'ємну частку  $\Omega_2$ , тобто  $h \ll z_0 - h$ , де  $h = z_2 - z_1$  – товщина області  $\Omega_2$ . Надалі будемо вважати випадковою величиною координату верхньої межі прошарку  $z = z_1$ .

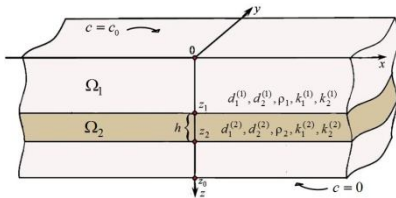


Рис. 1. Тіло з випадковим прошарком

Нехай в цьому тілі домішкова речовина дифундує двома шляхами, переходячи з одного шляху міграції на інший. Вважаємо, що дифузійні властивості частинок домішки у різних фазах можуть суттєво відрізнятися.

Концентрація домішок при вертикальній гетеродифузії визначається з системи взаємозв'язаних диференціальних рівнянь, коефіцієнти яких є випадковими функціями просторової координати  $z$ :

$$\rho(z) \frac{\partial c_1}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[ d_1(z) \frac{\partial c_1}{\partial z} + d_3(z) \frac{\partial c_2}{\partial z} \right] - k_1(z) c_1 + k_2(z) c_2,$$

$$\rho(z) \frac{\partial c_2}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[ d_2(z) \frac{\partial c_2}{\partial z} + d_4(z) \frac{\partial c_1}{\partial z} \right] - k_2(z) c_2 + k_1(z) c_1, \quad (1)$$

де  $c_i = c_i(z, t)$  – випадкові концентрації домішки в станах, що відповідають швидкому (при  $i=1$ ) та повільному ( $i=2$ ) шляхам перенесення частинок;  $\rho(z)$  – випадкова густина середовища;  $d_i(z)$ ,  $i=1, 2$  – випадкові кінетичні коефіцієнти дифузії в  $i$ -ому стані;  $d_i(z)$ ,  $i=3, 4$  – випадкові коефіцієнти, що відповідають за перехресну дифузію частинок домішки на різних шляхах міграції;  $k_i(z)$  – випадкові коефіцієнти інтенсивності переходу домішкових частинок зі швидкого шляху міграції на повільний (при  $i=1$ ) і зворотного переходу (при  $i=2$ ).

Нехай в початковий момент часу в тілі відсутня домішкова речовина, тобто

$$c_1(z, t)|_{t=0} = 0, \quad c_2(z, t)|_{t=0} = 0. \quad (2)$$

На верхній границі тіла  $z=0$  підтримується постійне значення  $c_0$  сумарної концентрації домішкової речовини. Введемо у розгляд параметр  $\alpha$  ( $0 \leq \alpha \leq 1$ ), який визначає частину домішкової речовини, що з поверхні тіла потрапила на швидкий шлях міграції, тоді виконуються умови

$$c_1(z, t)|_{z=0} = \alpha c_0, \quad c_2(z, t)|_{z=0} = (1 - \alpha) c_0. \quad (3)$$

На нижній границі тіла концентрація рівна нулю, тоді

$$c_1(z, t)|_{z=z_0} = 0, \quad c_2(z, t)|_{z=z_0} = 0. \quad (4)$$

Густина середовища, кінетичний коефіцієнт дифузії та коефіцієнти інтенсивності переходу вважаємо сталими в об'ємі кожної з фаз:

$$\rho(z) = \begin{cases} \rho^{(1)}, & z \in \Omega_{11} \cup \Omega_{21}, \quad i = \overline{1, 4}, \quad \rho^{(j)} = const, \quad j = 1, 2 \\ \rho^{(2)}, & z \in \Omega_{12} \end{cases}$$

$$d_i(z) = \begin{cases} d_i^{(1)}, & z \in \Omega_{11} \cup \Omega_{21}, \quad i = \overline{1, 4}, \quad d_i^{(j)} = const, \quad j = 1, 2 \\ d_i^{(2)}, & z \in \Omega_{12} \end{cases}$$

$$k_i(z) = \begin{cases} k_i^{(1)}, & z \in \Omega_{11} \cup \Omega_{21}, \quad i = 1, 2, \quad k_i^{(j)} = const, \quad j = 1, 2 \\ k_i^{(2)}, & z \in \Omega_{12} \end{cases}$$

## III. ПОБУДОВА РОЗВ'ЯЗКУ КРАЙОВОЇ ЗАДАЧІ

Шляхом введення матриць  $D^{(j)} = \begin{pmatrix} d_1^{(j)} & d_3^{(j)} \\ d_4^{(j)} & d_2^{(j)} \end{pmatrix}$ ,

$K^{(j)} = \begin{pmatrix} -k_1^{(j)} & k_2^{(j)} \\ k_1^{(j)} & -k_2^{(j)} \end{pmatrix}$ , вектора  $c(z, t) = \begin{pmatrix} c_1(z, t) \\ c_2(z, t) \end{pmatrix}$  та функції

структури  $\eta_{ij}(z) = \begin{cases} 1, & z \in \Omega_{ij}; \\ 0, & z \notin \Omega_{ij}, \end{cases}$  де  $\Omega_{ij}$  –  $i$ -тий шар  $j$ -тої фази вихідну задачу (1)-(4) зведено до матричної задачі.

Трактуючи неоднорідність структури середовища як внутрішні джерела, отримано систему інтегродиференціальних рівнянь, еквівалентну вихідній крайовій задачі (1)-(4). Розв'язок отриманої системи, який описує концентрації домішкової речовини на швидкому та повільному шляхах міграції, побудовано у вигляді інтегральних рядів Неймана з використанням методу послідовних наближень. Усреднення виразів для випадкових полів концентрацій домішки проведено за ансамблем конфігурацій фаз з рівномірною функцією

розподілу у припущенні превалюючої об'ємної частки матриці.

Для усередненої концентрації домішки отримано наступні аналітичні формули:

$$\begin{aligned} \langle c(z,t) \rangle_{conf} &= c^{(0)}(z,t) + \frac{v_2}{h} \int_0^t \int_0^h \mathbf{G}(\rho^{(1)} - \rho^{(2)}) \frac{\partial c^{(0)}}{\partial t'} z' dz' dt' - \\ &- \frac{v_2}{h} \int_0^t \int_0^h \mathbf{G} \left( (D^{(1)} - D^{(2)}) \frac{\partial^2 c^{(0)}}{\partial z'^2} + (K^{(1)} - K^{(2)}) c^{(0)} \right) z' dz' dt' + \\ &+ v_2 \int_0^t \int_h^{z_0-h} \mathbf{G} \left( (\rho^{(1)} - \rho^{(2)}) \frac{\partial c^{(0)}}{\partial t'} - (D^{(1)} - D^{(2)}) \frac{\partial^2 c^{(0)}}{\partial z'^2} \right) dz' dt' + \\ &+ v_2 \int_0^t \int_h^{z_0-h} \mathbf{G} (K^{(1)} - K^{(2)}) c^{(0)} dz' dt' - \\ &- \frac{v_2}{2h} [\mathbf{D}(z)]_{z=z_1} \int_0^t \lim_{\substack{X_1 \rightarrow 0+ \\ X_2 \rightarrow h+ X_1}} \int_{X_1}^{X_2} \mathbf{G} \frac{\partial c^{(0)}}{\partial z'} dz' - \frac{1}{2} \left[ \mathbf{G} \frac{\partial c^{(0)}}{\partial z'} \right]_{z'=h} dt', \end{aligned}$$

де  $c^{(0)}(z,t)$  – вектор концентрацій домішки в однорідному середовищі,  $v_2$  – об'ємна частка другої фази  $\Omega_2$ ,  $G$  – детермінована матрична функція Гріна відповідної матричної крайової задачі.

#### IV. РЕЗУЛЬТАТИ КОМП'ЮТЕРНОГО МОДЕЛЮВАННЯ

Для комп'ютерного моделювання концентраційних полів домішкової речовини на різних шляхах міграції, а також сумарної концентрації домішки розроблено програмний комплекс з використанням Visual C++ 2010 Express, який є безкоштовним для некомерційного використання. Усі розрахунки проведено у природних безрозмірних змінних  $\xi = (k_2^{(1)}/d_1^{(1)})^{1/2} x$ ,  $\tau = k_2^{(1)}t/\rho_1$ . Розроблений комплекс дає можливість вивчати вплив фізико-хімічних характеристик кожної з фаз на перерозподіл домішки в середовищі шляхом варіювання вхідних даних. На рисунку 2 схематично зображено зміну сумарного концентраційного поля домішки  $c(\xi, \tau)$  в певний момент часу  $\tau = \tau_0 = 10$  за умови відсутності перехресної дифузії частинок домішки у випадку  $d_1^{(1)}(z) < d_1^{(2)}(z)$  при зростанні коефіцієнта  $d_1^{(2)}(\xi)$ . Інші параметри задачі прийнято наступними:  $\rho^{(2)}/\rho^{(1)} = 1.3$ ,  $k_1^{(1)} = k_1^{(2)} = 10$ ,  $k_2^{(1)} = k_2^{(2)} = 1$ ,  $\xi_0 = 10$ ,  $h = 0.5$ ,  $c_0 = 1$ .

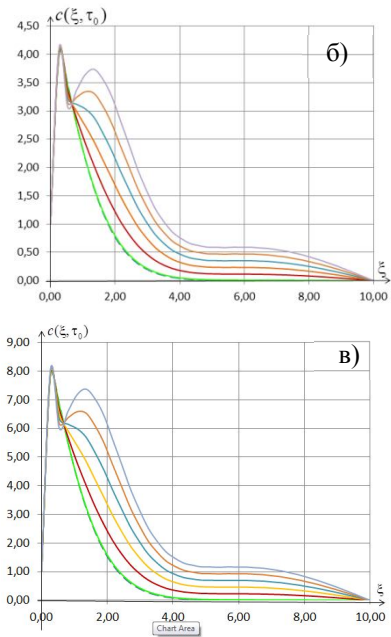
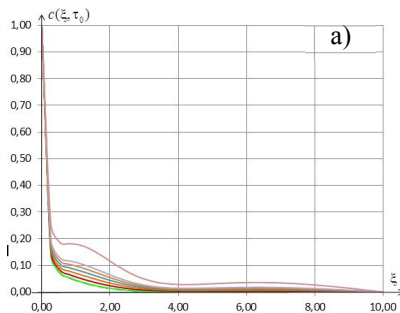


Рис. 2. Сумарне поле концентрації домішки при зростанні коефіцієнта  $d_1^{(2)}(z)$  у випадку  $d_1^{(2)}(z) < d_1^{(1)}(z)$  (а)  $\alpha = 0$ , б)  $\alpha = 0.5$ , в)  $\alpha = 1$ )

Отже, комп'ютерне моделювання показало, що: 1) наявність випадкового прошарку призвело до появи локального максимуму концентрації домішки при верхній границі другого шару першої фази, в той час як в однорідному середовищі наявний глобальний максимум при верхній границі шару; 2) зростання кінетичного коефіцієнта дифузії у прошарку призводить до затримання домішки у прошарку у випадку, коли вся домішка попала на повільний шлях міграції, та до накопичення домішки при верхніх границях фаз у випадку, коли домішка попала на швидкий шлях чи порівну розподілилася на обох шляхах.

#### ВИСНОВКИ

Дослідження процесів масопереносу домішки двома шляхами у пористому середовищі випадково неоднорідної структури має практичне значення при прогнозуванні поширення забруднень у ґрунтах. В роботі запропоновано та досліджено математичну модель гетеродифузії двома шляхами у середовищі з випадковим прошарком та отримано аналітичні вирази для концентраційних полів домішки на швидкому та повільному шляхах, а також сумарної концентрації, на основі якого здійснено комп'ютерне моделювання та проаналізовано вплив фізичних характеристик середовища на перерозподіл домішки.

#### ЛІТЕРАТУРА REFERENCES

- [1] В. Гончарук, Є. Чапля, О. Чернуха, Я. Оведик "Процеси гетеродифузії розпадної речовини двома шляхами у середовищі з пастками", *Фізико-математичне моделювання та інформаційні технології*, 2013, Вип. 18, С. 73-84.
- [2] Є. Чапля, О. Чернуха Математичне моделювання дифузійних процесів у випадкових і регулярних структурах, Київ: Наукова думка, 2009, 304 с.
- [3] Є. Чапля, О. Чернуха Фізико-математичне моделювання гетеродифузійного масопереносу, Львів: Сполом, 2003, 125 с.