

Моделювання процесів гетеродифузії двома шляхами за каскадного розпаду речовин

В.С. Гончарук
кафедра цивільної безпеки
Національний університет “Львівська політехніка”;
відділ математичного моделювання нерівноважних процесів
Центр математичного моделювання
Інституту прикладних проблем механіки і математики ім. Я.С.Підстригача НАН України
Львів, Україна
vegongcharuk@ukr.net

Modeling the processes of heterodiffusion by two ways under cascade decay of substances

V. Goncharuk
Department of Civil Security
Lviv Polytechnic National University;
Department mathematical modeling of nonequilibrium processes
Center of Mathematical Modeling, Pidstryhach Institute for Applied Problems of Mechanics and Mathematics,
Ukrainian Academy of Sciences
Lviv, Ukraine
vegongcharuk@ukr.net

Анотація—Робота присвячена математичному моделюванню процесів гетеродифузії домішок за їх каскадного розпаду в тілі з двома шляхами міграції. Для конкретної схеми розпаду сформульовані зв'язані крайові задачі гетеродифузії каскадного типу. Розв'язки крайових задач отримані за ітераційною процедурою з використанням функцій Гріна.

Abstract—The work is devoted to mathematical modeling the processes of heterodiffusion of admixture under its cascade decay in a body with two migration ways. For the specific scheme of decay, associated initial-boundary value problems of heterodiffusion of the cascade kind are formulated. Solutions of the associated problems are obtained by iterative procedure with using Green functions.

Ключові слова—математична модель; гетеродифузія; каскадний розпад; сорбція-десорбція; крайова задача; функція Гріна.

Keywords— mathematical model; heterodiffusion; cascade decay; sorption-desorption; initial-boundary value problem; Green function.

I. ВСТУП

Прогнозування поширення розпадних домішкових субстанцій у ґрунтах та оцінка захищеності ґрунтових

вод від поверхневих техногенних забруднень базується на певних модельних уявленнях про їх локальний і просторовий перерозподіл у приповерхневих шарах Землі [1]. Процес переносу частинок домішкових субстанцій є особливо інтенсивним у випадку зволжених приповерхневих шарів, коли пори середовища практично повністю насичені водою [2]. Тоді домішкові частинки знаходяться в різних фізичних станах, перебуваючи в області гравітаційно рухомого водного порового розчину, адсорбції і зв'язних зі скелетом шарів води та області самого скелету [3]. У цих станах частинки мають різну рухливість, характеризуються різними коефіцієнтами концентраційного розширення, тощо. У результаті процес просторового перенесення техногенних речовин відбувається декількома шляхами і супроводжується локальними переходами з одного шляху дифузії на інший (процеси типу сорбції-десорбції). Важливою особливістю процесів гетеродифузії техногенних субстанцій є їх натуральний розпад (деградація), який відбувається з однаковою інтенсивністю у кожному зі згаданих станів [4].

У роботі в рамках моделі гетеродифузійного масопереносу, побудованої на основі підходів і методів термодинаміки нерівноважних процесів з використанням, уявлень фізики твердого тіла та механіки суцільного се-

редовища, [5] сформульовано крайові задачі дифузії двома шляхами з урахуванням процесів сорбції-десорбції частинок за їх каскадного розпаду [6], коли розв'язок задачі на одному етапі є джерелом на наступному.

II. МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ГЕТЕРОДИFUZІЇ ДОМІШКОК ЗА КАСКАДНОГО РОЗПАДУ РЕЧОВИН

Нехай частинки одного хімічного сорту, які розпадаються, мігрують у тілі з двома шляхами міграції (дрібнодисперсне середовище, монокристали тощо) [7-10]. Причому речовини, які утворилися в наслідок розпаду, також можуть розпадатися. Як приклад такого

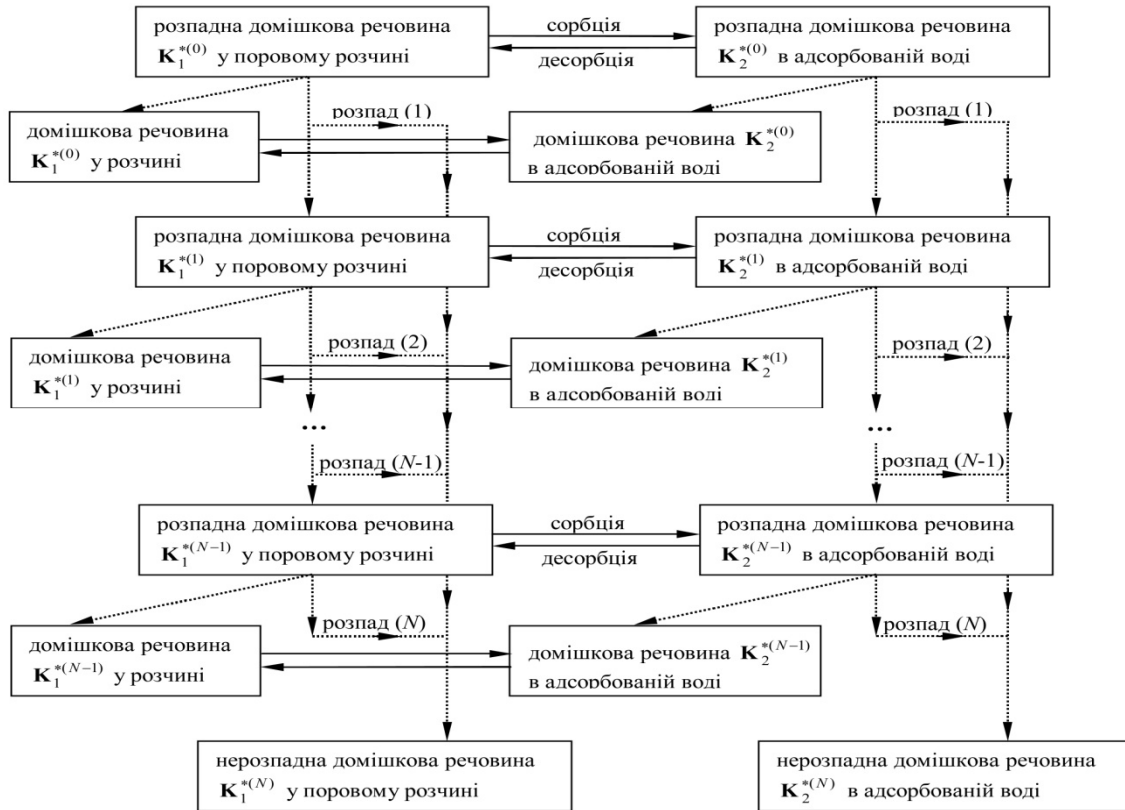
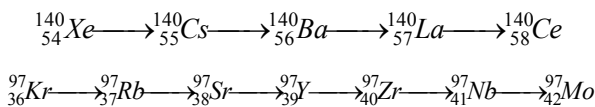


Рис. 1. Схема розпаду домішкової речовини та процесів переходу частинок між станами для моделі гетеродифузії двома шляхами

каскадного розпаду можна навести радіонукліди [11] з їх радіоактивним розпадом



або різного роду хімічні сполуки (пестициди, нітрати, нітрити тощо), які розпадаються внаслідок хімічних реакцій [11, 12].

Для випадку гетеродифузії двома шляхами схема каскадного розпаду мігруючих речовин $K_j^{(i)}$ подана на рис. 1, де частинки речовини $K_j^{(N)}$ є нерозпадною (тут i - номер етапу розпаду, j - шлях міграції).

Математична модель складається із взаємозв'язаних систем рівнянь гетеродифузії домішкової речовини двома шляхами з урахуванням процесів сорбції-десорбції [13]. За каскадного розпаду мігруючих частинок у безрозмірних змінних $\tau = \bar{k}_2^{(0)} t$; $\xi^{(\alpha)} = (\bar{k}_2^{(0)} / \bar{D}_1^{(0)})^{1/2} x^{(\alpha)}$, $\alpha = 1, 3$, де

t - час, $x^{(\alpha)}$ - просторові декартові координати, маємо такі системи рівнянь для $i = 0$

$$\frac{\partial c_1^{(0)}}{\partial \tau} = \Delta_{\xi} c_1^{(0)} + d_1^{(0)} \Delta_{\xi} c_2^{(0)} - a_{11}^{(0)} c_1^{(0)} + a_{12}^{(0)} c_2^{(0)},$$

$$\frac{\partial c_2^{(0)}}{\partial \tau} = d_2^{(0)} \Delta_{\xi} c_1^{(0)} + d \Delta_{\xi} c_2^{(0)} + a_{21}^{(0)} c_1^{(0)} - a_{22}^{(0)} c_2^{(0)}, \quad (1)$$

для $i = \overline{1, N-1}$

$$\frac{\partial c_1^{(i)}}{\partial \tau} = d_0^{(i)} \Delta_{\xi} c_1^{(i)} + d_1^{(i)} \Delta_{\xi} c_2^{(i)} - a_{11}^{(i)} c_1^{(i)} + a_{12}^{(i)} c_2^{(i)} + a_{\lambda 1}^{(i-1)} c_1^{(i-1)},$$

$$\frac{\partial c_2^{(i)}}{\partial \tau} = d_2^{(i)} \Delta_{\xi} c_1^{(i)} + d^{e(i)} \Delta_{\xi} c_2^{(i)} + a_{21}^{(i)} c_1^{(i)} - a_{22}^{(i)} c_2^{(i)} + a_{\lambda 2}^{e(i-1)} c_2^{(i-1)}, \quad (2)$$

для $i = N$

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_1^{(N)}}{\partial \tau} &= d_0^{(N)} \Delta_{\xi} c_1^{(N)} + d_1^{e(N)} \Delta_{\xi} c_2^{e(N)} - a_{11}^{(N)} c_1^{(N)} + \\ &+ a_{12}^{e(N)} c_2^{e(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 1}^{(iN)} c_1^{(i)}, \\ \frac{\partial c_2^{e(N)}}{\partial \tau} &= d_2^{(N)} \Delta_{\xi} c_1^{(N)} + d^{(N)} \Delta_{\xi} c_2^{(N)} + a_{21}^{(N)} c_1^{(N)} - , \\ &a_{22}^{(N)} c_2^{(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 2}^{(iN)} c_2^{(i)}. \end{aligned} \quad (3)$$

де $c_j^{(i)}$ - концентрація частинок $\mathbf{K}_j^{(i)}$, $d_j^{(i)}$ - коефіцієнт дифузії речовини $\mathbf{K}_j^{(i)}$ ($i = \overline{0, N}$) на i -му кроці розпаду та j -му шляху дифузії, $j = \overline{1, 2}$, $a_{kl}^{(i)}$ ($k, l = 1, 2$) - коефіцієнти інтенсивності сорбованих процесів; $a_{\lambda j}^{(i-1)}$ - коефіцієнт інтенсивності розпаду речовини $\mathbf{K}_j^{(i-1)}$ ($i = \overline{1, N}$), $a_{\lambda 1}^{(iN)}$ - коефіцієнт, який визначає частку нерозпадної речовини, що утворилася внаслідок розпаду на i -му кроці $\mathbf{K}_j^{(i)}$ ($i = \overline{0, N-1}$).

Для одновимірною за просторовою координатою випадку (шару товщини ξ_0) накладено такі крайові умови

$$c_1^{(i)}(\xi, \tau) \Big|_{\tau=0} = 0, \quad c_2^{(i)}(\xi, \tau) \Big|_{\tau=0} = 0, \quad i = \overline{0, N} \quad (4)$$

$$c_1^{(0)}(\xi, \tau) \Big|_{\xi=0} = \alpha c_0, \quad c_2^{(0)}(\xi, \tau) \Big|_{\xi=0} = (1 - \alpha) c_0; \quad (5)$$

$$c_j^{(i)}(\xi, \tau) \Big|_{\xi=0} = 0, \quad i = \overline{1, N}, \quad c_j^{(i)}(\xi, \tau) \Big|_{\xi=\xi_0} = 0, \quad i = \overline{0, N}, \quad j = 1, 2. \quad (6)$$

Тут α ($0 \leq \alpha \leq 1$) - параметр, який визначає частину домішки, що з поверхні тіла потрапила на швидкий шлях дифузії (стан 1), тобто $d_1^{(0)} > d_2^{(0)}$.

Розв'язок крайової задачі (1), (4), (5) для $i = 0$, знайдений з допомогою інтегральних перетворень Лапласа за часом і \sin -перетворення Фур'є за просторовою координатою [14].

У загальному випадку для $i = 1, \dots, N-1$ [15] розв'язки крайових задач (2), (4), (6) подано через функції Гріна [16]

$$c_j^{(i)}(\xi, \tau) = a_{\lambda j}^{(i-1)} \int_0^{\tau} \int_0^{\xi_0} G_j^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') c_j^{(i-1)}(\xi', \tau') d\xi' d\tau', \quad j = \overline{1, 2}. \quad (7)$$

де $G_j^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')$ - функції Гріна задачі (2), (4), (6) для $i = 1, \dots, N-1$, тобто є розв'язком відповідної задачі гетеродифузії з точкового джерела на i -му кроці розпаду за нульових крайових умов.

Для випадку $i = N$ (нерозпадної або нешкідливої домішки) [17] процес масоперенесення описується крайовою задачею (3), (4), (6). Її розв'язок також подано через відповідну функцію Гріна аналогічно до (7)

$$c_j^{(N)}(\xi, \tau) = \int_0^{\tau} \int_0^{\xi_0} G^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda j}^{(iN)} c_j^{(i)}(\xi', \tau') d\xi' d\tau', \quad (8)$$

де $G_j^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')$ - функції Гріна задачі (3), (4), (6) і задовольняють відповідні крайові задачі з точковим джерелом

ВИСНОВКИ

Отримання аналітичних розв'язків крайових задач гетеродифузії каскадного типу дозволяє не тільки проводити кількісний та якісний аналіз концентрацій розпадних домішок на швидкому і повільному шляхах міграції та їхньої суми, а й знайти їхні потоки маси, як і визначити кількість відповідних речовин, що за певний проміжок часу пройшли через одиницю площі деякої поверхні, наприклад, через нижню границю шару.

ЛІТЕРАТУРА REFERENCES

- [1] Бурак Я.Й., Чапля Є.Я. Вихідні положення математичної моделі гетеродифузійного переносу радіонуклідів у приповерхневих шарах Землі // Доповіді НАН України. - 1993. - №10. - С. 59-63.
- [2] Прохоров В.М. Миграция радиоактивных загрязнений в почвах. - М.: Энергоатомиздат, 1981. - 106 с.
- [3] Гончарук В. Моделирование миграции распавной речовин в тілах з каналами швидкого переміщення // Моделирование та інформаційні технології. - 2013. - Вып. 68. - С. 114-124.
- [4] Ступин Д.Ю. Загрязнение почв и новейшие технологии их восстановления. - М.; Краснодар: Лань, 2009. - 428 с.
- [5] Чапля Є.Я., Чернуха О.Ю. Кінетика переносу домішок при локальній зміні стану частинок (1. Модельні представлення, гетеродифузія двома шляхами). - Львів: 1993. - 44 с. - (Препр./ НАН України. Центр матем. Моделирования ИППММ; 3-93).
- [6] Гончарук В., Чапля Є., Чернуха О., Оведик Я. Процеси гетеродифузії распавной речовини двома шляхами у середовищі з пастками // Фізико-математичне моделювання та інформаційні технології. - 2013. - Вып. 18. - С. 73-84.
- [7] Бурак Я.И., Галапац Б.П., Чапля Е.Я. Деформация электропроводных тел с учетом гетеродиффузии заряженных примесных частиц // Физ.-хим. мех. материалов. - 1980. - №5. - С. 8-14.
- [8] Буряк Я.Й., Чапля Є.Я., Чернуха О.Ю. Континуально-термодинамічні моделі механіки твердих розчинів. - К.: Наукова думка, 2006. - 272 с.
- [9] Aifantis E.C. Continuum basis for diffusion in regions with multiple diffusivity // J. Appl. Phys. - 1979. - V.50. - №3. - P. 1334-1338.
- [10] Aifantis E.C., Hill J.M. On the theory of diffusion in media with double diffusivity. I. Basic mathematical results // [Q.J.] Mech. appl. Math. - 1980. - V.33. - Pt.1. - P. 1-21.
- [11] Колобашкин В.М., Рубцов П.М., Ружанский П.А., Сидоренко В.Д. "Радиационные характеристики облученного ядерного топлива", справочник. - М.: Энергоатомиздат, 1983. -384 с.
- [12] Мельников Н.Н. Пестициды. Химия, технология и применение. М.: Химия, 1987. - 712 с.
- [13] Чапля Є.Я., Чернуха О.Ю. Фізико-математичне моделювання гетеродифузійного масопереносу. - Львів: СПОЛЮМ, 2003. - 128 с.
- [14] Снеддон И. Преобразования Фурье. - М: Изд-во иностр. лит-ры, 1955. - 667 с.
- [15] Білушак Ю., Гончарук В., Чапля Є., Чернуха О. Математичне моделювання дифузії домішкових компонент за їх каскадного розпаду // Математичні машини і системи. - 2015. - № 1. - С. 146-155.
- [16] Тихонов А.Н., Самарский А.А. Уравнения математической физики. - М.: Наука, 1972. - 735 с.
- [17] Білушак Ю., Гончарук В., Чернуха О. Математична модель незасмодіючих потоків для опису процесів масопереносу двома шляхами за каскадного розпаду частинок // Прикладні проблеми механіки і математики. - 2014. - Вып. 12. - С. 137-145.