

Моделювання Дифузії Домішки у Багатокомпонентному Двофазному Випадково Неоднорідному Середовищі з Пастками

Ольга Чернуха

Відділ математичного моделювання
нерівноважних процесів
Центр математичного моделювання
Інституту прикладних проблем механіки і математики
ім. Я.С. Підстригача НАН України,
Кафедра обчислювальної математики та програмування
Національний університет «Львівська політехніка»
Львів, Україна
zaliznuchna6@gmail.com

Олеся Власій

кафедра інформатики
ДВНЗ «Прикарпатський національний університет імені
Василя Стефаника»
Івано-Франківськ, Україна
olesia_vlasii@comp-sc.if.ua

Modeling Admixture Diffusion in a Multicomponent Two-Phases Stochastically Nonhomogeneous Medium with Traps

O. Chernukha

Department of mathematical
modeling nonequilibrium processes
Centre of Mathematical Modeling of Pidstryhach Institute
for Applied Problems of Mechanics and Mathematics,
Ukrainian Academy of Sciences,
Lviv Polytechnic National University
Lviv, Ukraine
zaliznuchna6@gmail.com

O. Vlasii

dept. of Computer Science
Vasyl Stefanyk Precarpathian National University
Ivano-Frankovsk, Ukraine
olesia_vlasii@comp-sc.if.ua

Анотація—У статті запропоновано математичну модель дифузії домішкової речовини у багатокомпонентному двофазному середовищі з пастками з випадково розташованим прошарком з урахуванням процесів сорбції-десорбції. Введена природна безрозмірна форма. Із застосуванням інтегральних перетворень побудовано розв'язок крайової задачі для системи диференціальних рівнянь в частинних похідних з випадковими коефіцієнтами. Проведено усереднення аналітичного розв'язку за ансамблем конфігурацій фаз за умови рівномірного розподілу фаз. Отримано розрахункові формули для концентрацій домішкової речовини у двох фізичних станах і проведено чисельний аналіз математичної моделі.

Abstract—In the article the mathematical model of diffusion processes in multicomponent two phases stochastically non homogeneous medium with traps is proposed. The natural dimensionless form is introduced. The mathematical model is described in the form of the boundary value problem for the

system of partial differential equations with stochastic coefficients. The analytical solutions of the model problem are constructed by integral transformations. Averaging the obtained solutions is carried out over the ensemble of phase configurations with the uniform distribution function. The calculation formulas for admixture concentration are arrived and the numeric analysis of the described model is provided.

Ключові слова— математична модель; дифузія; багатокомпонентне двофазне середовище; випадковий прошарок; пастки; домішка

Keywords—mathematical model; diffusion; multicomponent two phases medium; stochastic sublayer; traps; admixture

I. ВСТУП

Дослідження впливу технологічних процесів в різноманітних сферах людської діяльності є актуальною науково-технічною проблемою. Однією із важливих

проблем сучасного українського довкілля є екологічний стан ґрунтів [10]. Проблема дослідження поширення забруднень у ґрунтах не втрачає своєї актуальності у зв'язку із необхідністю враховування різноманітних характеристик як середовища, так і мігруючих домішок у ньому, при побудові адекватних математичних моделей, а також рядом ускладнень, які виникають при дослідженні створених моделей. Важливе значення має вивчення характеру поширення шкідливих речовин в середовищі, геометричної конфігурації досліджуваних областей, фізичних характеристик середовища та їх взаємовпливу. Математичне моделювання з подальшим чисельним аналізом на основі комп'ютерного моделювання дозволяє розробляти засоби опису, вивчення та кількісної характеристики процесів та явищ різної природи, яких об'єднує негативний вплив на довкілля [11].

Важливий практичний інтерес становить випадок повністю зволжених приповерхневих шарів ґрунтів, коли пори середовища майже повністю заповнені водою (ґрунтовим розчином), а домішкові частинки в рамках довільно вибраної малої області перебувають у фізично різних станах, що істотно впливає на перерозподіл цієї речовини (рис. 1).

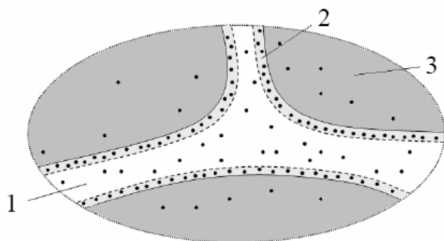


Рис. 10. Характерна структура фізично малого елемента тіла. Область 1 займає водний поровий розчин, 2 – адсорбовані на скелеті ґрунту шари води, 3 – скелет ґрунту. Крапками умовно позначено частинки домішкової речовини.

Внаслідок цього процес просторового перенесення забруднюючих домішок відбувається декількома шляхами та супроводжується локальними переходами з одного шляху міграції на інший (процесами типу сорбції-десорбції). Як правило, коефіцієнт дифузії в поровому розчині є на декілька порядків більшим, ніж в адсорбованих на скелеті шарах води. В свою чергу, коефіцієнт дифузії в адсорбованих шарах є на декілька порядків більшим, ніж в об'ємі скелету ґрунту. Часто коефіцієнт дифузії в елементах скелету є таким малим, що їх вважають пастками для домішки [16], [19].

У роботах [12]-[14] вивчалися математичні моделі міграції домішкових речовин у ґрунтах з урахуванням двох шляхів міграції частинок з різними коефіцієнтами дифузії – у водному поровому розчині та в адсорбованих на скелеті ґрунту шарах води.

У [15], [16] вивчалася проблема гетеродифузного поширення домішки у середовищах з пастками. Варто зауважити, що наявність неоднорідностей у ґрунтах, наприклад, випадково розташованих прошарків, призводить до необхідності постановки адекватних

математичних моделей. Проблеми поширення домішок у випадково неоднорідних середовищах вивчалися, наприклад, у роботах [17], [18].

Однак питання дослідження процесів дифузії у випадково неоднорідних середовищах з пастками залишається недослідженим. Тому метою даного дослідження є побудова математичної моделі дифузії у багатокомпонентному двофазному середовищі з випадково розташованим прошарком. Досліджена математична модель дифузії у випадково неоднорідному середовищі з пастками є практично важливим частковим випадком задачі, розглянутої у [18], який привертає увагу особливостями, що виникають в ході його вивчення.

II. МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ

A. Об'єкт дослідження. Постановка задачі

Вихідні співвідношення математичної моделі дифузії мігруючих частинок у багатокомпонентному двофазному середовищі з пастками сформульовані з використанням континуально-термодинамічного підходу механіки твердих розчинів. Кожній компоненті ставиться у відповідність континуум, з допомогою якого описуються кінематичні та деформаційні властивості компонент, а також формулюються балансові співвідношення, які відображають закони збереження маси, імпульсу, енергії та ентропії. З використанням концепції локальної термодинамічної рівноваги будуються рівняння стану та кінетичні рівняння. Вибравши в якості розв'язуючих функцій концентрації домішкових компонент, вектор переміщення, густину та температуру тіла, сформульовано ключову систему рівнянь, яка в подальшому лінеаризується [19].

Нехай домішкова речовина дифундує у двофазному середовищі з випадково розташованим прошарком, причому вважатимемо, що довільно вибрана мала область середовища складається з твердої фази, в об'єм якої можуть проникати домішкові частинки, та порового простору, в якому дифундує домішкова речовина, причому коефіцієнт дифузії домішки в об'ємі скелету настільки малий у порівнянні з коефіцієнтом дифузії у поровому просторі, що тверда фаза розглядається як пастка для домішкових частинок [17].

Розглянемо дисперсне шарувате двофазне середовище товщиною z_0 , в якому шар однієї фази Ω_1 містить випадково розташований прошарок другої фази Ω_2 товщиною h . Приймаємо, що фази в тілі розташовані за рівномірним розподілом і об'ємна частка області Ω_1 є набагато більшою за об'ємну частку Ω_2 , тобто $h \ll z_0 - h$. Координату верхньої межі прошарку вважатимемо випадковою величиною.

За ізотермічних умов, нехтуючи конвективними складовими масоперенесення та деформацією, для опису дифузії домішкових частинок отримано наступну систему диференціальних рівнянь:

$$\rho(z) \frac{\partial c_i(z,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[d_i(z) \frac{\partial c_i(z,t)}{\partial z} \right] -$$

$$-k_1(z)c_1(z,t) + k_2(z)c_2(z,t),$$

$$\rho(z) \frac{\partial c_2(z,t)}{\partial t} = k_1(z)c_1(z,t) - k_2(z)c_2(z,t), \quad (1)$$

де $c_i = c_i(z,t)$ – випадкові концентрації домішки в станах, що відповідають дифузії у поровому просторі (при $i=1$) та знаходженню частинок у пастках ($i=2$); $\rho(z)$ – випадкова густина середовища; $d_i(z)$ – випадковий кінетичний коефіцієнт дифузії; $k_i(z)$ – випадкові коефіцієнти інтенсивності сорбції (при $i=1$) і десорбції (при $i=2$).

Густину середовища, кінетичний коефіцієнт дифузії та коефіцієнти інтенсивності вважатимемо сталими в об'ємі кожної фази і надалі позначатимемо $\rho^{(j)}$ – густину середовища, $d_i^{(j)}$ – кінетичний коефіцієнт дифузії, $k_i^{(j)}$, $i=1,2$ – коефіцієнти сорбції/десорбції в j -тій фазі.

Нехай в початковий момент часу домішки не було, такому випадку відповідають наступні початкові умови:

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

Вважатимемо, що для часу $t > 0$ на верхній межі середовища діє стале джерело домішкової маси і частинки з поверхні можуть попадати лише у поровий простір, а на нижній межі підтримується нульове значення концентрації, тобто виконуються наступні граничні умови:

$$c_1(z,t)|_{z=0} = c_0, \quad c_1(z,t)|_{z=z_0} = 0. \quad (3)$$

Можлива конфігурація середовища зображена на рисунку 2.

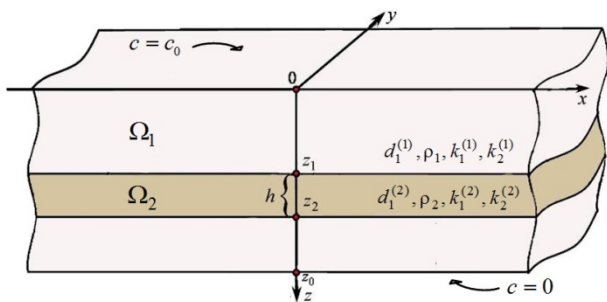


Рис. 11. Можлива реалізація двофазного середовища з випадково розташованим прошарком

В. Загальне рівняння дифузії для середовища в цілому

Перейдемо до безрозмірних змінних, які стискають часову вісь і розтягують вісь координат [19]:

$$\tau = \frac{k_2^{(1)}}{\rho^{(1)}} t, \quad \xi = \left(\frac{k_2^{(1)}}{d_1^{(1)}} \right)^{1/2} z.$$

В такому випадку областям $\Omega_1 = (0; z_1) \cup (z_2; z_0)$ і $\Omega_2 = [z_1; z_2]$ будуть відповідати наступні області

$$\bar{\Omega}_1 = (0; \xi_1) \cup (\xi_2; \xi_0) \quad \text{і} \quad \bar{\Omega}_2 = (\xi_1; \xi_2), \quad \text{де} \quad \xi_1 = \left(\frac{k_2^{(1)}}{d_1^{(1)}} \right)^{1/2} z_1,$$

$$\xi_2 = \left(\frac{k_2^{(1)}}{d_1^{(1)}} \right)^{1/2} z_2, \quad \xi_0 = \left(\frac{k_2^{(1)}}{d_1^{(1)}} \right)^{1/2} z_0. \quad \text{Товщина шару в нових}$$

$$\text{змінних буде } \bar{h} = \left(\frac{k_2^{(1)}}{d_1^{(1)}} \right)^{1/2} h.$$

В безрозмірних змінних задача (1)-(3) матиме наступний вигляд:

$$\bar{\rho}(\xi) \frac{\partial c_i(\xi, \tau)}{\partial \xi} = \frac{\partial}{\partial \xi} \left[\bar{d}_i(\xi) \frac{\partial c_i(\xi, \tau)}{\partial \xi} \right] -$$

$$- \bar{k}_1(\xi)c_1(\xi, \tau) + \bar{k}_2(\xi)c_2(\xi, \tau)$$

$$\bar{\rho}(\xi) \frac{\partial c_2(\xi, \tau)}{\partial \xi} = - \bar{k}_2(\xi)c_2(\xi, \tau) + \bar{k}_1(\xi)c_1(\xi, \tau), \quad (5)$$

$$c_1(\xi, \tau)|_{\tau=0} = 0, \quad c_2(\xi, \tau)|_{\tau=0} = 0, \quad (6)$$

$$c_1(\xi, \tau)|_{\xi=0} = c_0, \quad c_1(\xi, \tau)|_{\xi=\xi_0} = 0, \quad (7)$$

$$\text{де } \bar{\rho}(\xi) = \begin{cases} 1, & \xi \in \bar{\Omega}_1 \\ \frac{\rho^{(2)}}{\rho^{(1)}}, & \xi \in \bar{\Omega}_2 \end{cases}, \quad \bar{d}_i(\xi) = \begin{cases} d_i^{(2)}, & \xi \in \bar{\Omega}_1 \\ d_i^{(1)}, & \xi \in \bar{\Omega}_2 \end{cases},$$

$$\bar{k}_1(\xi) = \begin{cases} k_1^{(1)}, & \xi \in \bar{\Omega}_1 \\ k_1^{(2)}, & \xi \in \bar{\Omega}_2 \end{cases}, \quad \bar{k}_2(\xi) = \begin{cases} k_2^{(1)}, & \xi \in \bar{\Omega}_1 \\ k_2^{(2)}, & \xi \in \bar{\Omega}_2 \end{cases}$$

Таким чином, безрозмірні характеристики першої фази мають вигляд $\bar{\rho}^{(1)} = 1, \bar{d}_1^{(1)} = 1, \bar{k}_1^{(1)} = \frac{k_1^{(1)}}{k_2^{(1)}}, \bar{k}_2^{(1)} = 1$, а другої – $\bar{\rho}^{(2)} = \frac{\rho^{(2)}}{\rho^{(1)}}, \bar{d}_1^{(2)} = \frac{d_1^{(2)}}{d_1^{(1)}}, \bar{k}_i^{(2)} = \frac{k_i^{(2)}}{k_2^{(1)}}, i=1,2$.

Введемо “функцію структури” [19]

$$\eta_{ij}(\xi) = \begin{cases} 1, & \xi \in \bar{\Omega}_{ij}, \\ 0, & \xi \notin \bar{\Omega}_{ij}, \end{cases}$$

де $\bar{\Omega}_{ij}$ – i -тий шар j -тої фази.

За умови суцільності середовища, тобто $\sum_{i,j} \eta_{ij}(\xi) = 1$, систему (5) можна записати в операторному вигляді:

$$\begin{aligned} L_1^0 \{c_1(\xi, \tau), c_2(\xi, \tau)\} &= L_1^s \{c_1(\xi, \tau), c_2(\xi, \tau)\}, \\ L_2^0 \{c_1(\xi, \tau), c_2(\xi, \tau)\} &= L_2^s \{c_1(\xi, \tau), c_2(\xi, \tau)\}, \end{aligned} \quad (8)$$

де $L_j^s \{c_1, c_2\} = (L_j^0 - L_j) \{c_1, c_2\}$, $j = 1, 2$, $c_i = c_i(\xi, \tau)$, $i = 1, 2$,

$$L_1^0 \{c_1, c_2\} = \rho^{-1} \frac{\partial c_1}{\partial \tau} - \bar{d}_1^{(1)} \frac{\partial^2 c_1}{\partial \xi^2} + \bar{k}_1^{(1)} c_1 - \bar{k}_2^{(1)} c_2,$$

$$L_2^0 \{c_1, c_2\} = \rho^{-1} \frac{\partial c_2}{\partial \tau} - \bar{k}_1^{(1)} c_1 + \bar{k}_2^{(1)} c_2,$$

$$\begin{aligned} L_1 \{c_1, c_2\} &= \sum_{j=1}^2 \sum_{i=1}^{n_j} \left[\rho^{-(j)} \frac{\partial c_1}{\partial \tau} - \bar{d}_1^{(j)} \frac{\partial^2 c_1}{\partial \xi^2} + \bar{k}_1^{(j)} c_1 - \bar{k}_2^{(j)} c_2 \right] \eta_{ij} - \\ &= \sum_{j=1}^2 \sum_{i=1}^{n_j} \left[\rho^{-(j)} \frac{\partial c_1}{\partial \tau} - \bar{d}_1^{(j)} \frac{\partial^2 c_1}{\partial \xi^2} + \bar{k}_1^{(j)} c_1 - \bar{k}_2^{(j)} c_2 \right] \eta_{ij}(\xi) - \\ &\quad - \left(\bar{d}_1^{(2)} - \bar{d}_1^{(1)} \right) (\delta(\xi - \xi_1) - \delta(\xi - \xi_2)) \frac{\partial c_1}{\partial \tau} \end{aligned}$$

$$L_2 \{c_1, c_2\} = \sum_{j=1}^2 \sum_{i=1}^{n_j} \left[\rho^{-(j)} \frac{\partial c_2}{\partial \tau} - c_1 \bar{k}_1^{(j)} + \bar{k}_2^{(j)} c_2 \right] \eta_{ij}(\xi);$$

$\delta(\xi - \xi_q)$ – функція Дірака з носієм в точці $\xi = \xi_q$.

Таким чином, вихідну задачу (1)-(3) зведено до задачі (8), (6)-(7), алгоритм побудови розв'язку якої подано нижче. Алгоритм побудови розв'язку

С. Випадок однорідного середовища

Розв'язок відповідної задачі для «однорідного» середовища (тобто за відсутності випадкового прошарку) шукаємо із застосуванням інтегральних перетворень Лапласа. Таким чином, знаходимо концентрації домішкової речовини на швидкому шляху міграції та в пастках за відсутності випадкового прошарку:

$$\begin{aligned} c_1^{(0)}(\xi, \tau) &= c_0 \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0} \right) - \\ &\quad - \frac{2c_0}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \left[\left(s_1 + \bar{k}_1^{(1)} + \bar{k}_2^{(1)} \right) e^{s_1 \tau} - \left(s_2 + \bar{k}_1^{(1)} + \bar{k}_2^{(1)} \right) e^{s_2 \tau} \right] \frac{\sin y_n \xi}{n(s_1 - s_2)}, \end{aligned} \quad (9)$$

$$c_2^{(0)}(\xi, \tau) = c_0 \frac{\bar{k}_1^{(1)}}{\bar{k}_2^{(1)}} \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0} \right) +$$

$$+ 2c_0 \bar{k}_1^{(1)} \bar{d}_1^{(1)} \xi_0 \sum_{n=1}^{\infty} \left[\frac{1}{s_1} e^{s_1 \tau} - \frac{1}{s_2} e^{s_2 \tau} \right] \frac{y_n \sin y_n \xi}{s_1 - s_2}, \quad (10)$$

де $y_n = \frac{\pi}{n \xi_0}$, $s_{1,2}$ – корені рівняння $s^2 + \eta_1 s + \eta_2 = 0$, де $\eta_1 = \bar{k}_1^{(1)} + \bar{k}_2^{(1)} + \bar{d}_1^{(1)} y_n^2$, $\eta_2 = \bar{k}_2^{(1)} \bar{d}_1^{(1)} y_n^2$.

Для знаходження сумарної концентрації домішкової речовини потрібно додати $c_1^{(0)}(\xi, \tau)$ та $c_2^{(0)}(\xi, \tau)$.

Для ілюстрації дослідження впливу параметрів вихідної задачі на рисунку 3 показана залежність сумарної концентрації домішки в однорідному середовищі від коефіцієнта сорбції $k_1 = k_1^{(1)}$, коефіцієнт десорбції прийнятий рівним 1, товщина середовища в безрозмірних координатах рівна 10, безрозмірний час приймався рівним 10, початкова концентрація домішки рівна 1, а також $\rho^{(1)} = 1$, $d_1^{(1)} = 1$, $k_2^{(1)} = 1$.

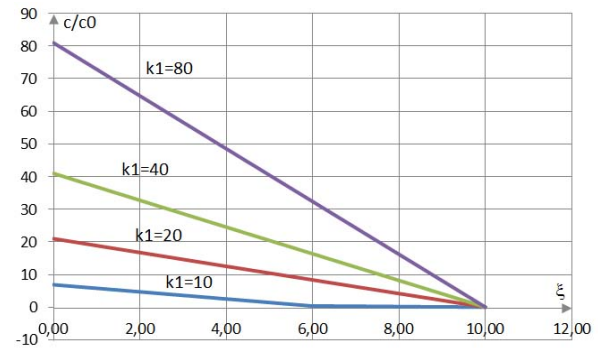


Рис. 12. Залежність сумарної концентрації домішки в однорідному середовищі від коефіцієнта сорбції k_1

Д. Функції Гріна

Розглядаючи праву частину рівнянь (8), (9) як джерело, тобто неоднорідність середовища вважаючи внутрішніми джерелами, задачу (8)-(9), (6)-(7) зводимо до еквівалентної системи інтегро-диференціальних рівнянь зі стохастичними ядрами. Розв'язок отриманої системи побудовано із застосуванням методу послідовних наближень та представлено рядом Неймана.

Отримано структуру функцій Гріна, які задовольняють відповідні рівняння для точкового джерела на швидкому шляху міграції (при $j=1$) і в пастках (при $j=2$) та нульові крайові умови

$$\begin{aligned} G_j(\xi, \xi', \tau, \tau') &= \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} \left[\left(s_1 + R_j' \right) e^{s_1(\tau - \tau')} - \left(s_2 + R_j' \right) e^{s_2(\tau - \tau')} \right] \times \\ &\quad \times \frac{\sin y_n \xi' \sin y_n \xi}{s_1 - s_2}, \end{aligned} \quad (11)$$

де $R_1' = 2\bar{k}_2^{(1)}$, $R_2' = 2\bar{k}_1^{(1)} + \bar{d}_1^{(1)} y_n^2$.

Е. Усреднення розв'язку

Процедуру усереднення розв'язку за ансамблем конфігурацій фаз провимо у припущенні рівномірного розподілу фаз:

$$\begin{aligned} \langle c_1(\xi, \tau) \rangle_{conf} &\approx c_1^{(0)}(\xi, \tau) + \\ &+ \frac{v_2}{h} \int_0^{\xi} \int_0^{\bar{h}} G_1(\xi', \tau') \bar{L}_1 \{ c_1(\xi', \tau'), c_2(\xi', \tau') \} \xi' d\xi' d\tau' + \\ &+ v_2 \int_0^{\xi} \int_{\bar{h}}^{\xi_0 - \bar{h}} G_1(\xi', \tau') \bar{L}_1 \{ c_1(\xi', \tau'), c_2(\xi', \tau') \} d\xi' d\tau' + \\ &+ \frac{v_2}{h} \Delta \bar{d}_1 \int_0^{\tau} \left[-\frac{1}{2} \left[G_1(\xi', \tau') \frac{\partial c_1^{(0)}(\xi', \tau')}{\partial \xi'} \right]_{\xi' = \bar{h}} + I_h(\tau) \right] d\tau', \end{aligned} \quad (12)$$

$$\begin{aligned} \langle c_2(\xi, \tau) \rangle_{conf} &\approx c_2^{(0)}(\xi, \tau) + \frac{v_2}{h} \int_0^{\xi} \int_0^{\bar{h}} G_2(\xi', \tau') \bar{L}_2 \{ c_1(\xi', \tau'), c_2(\xi', \tau') \} \xi' d\xi' d\tau' + \\ &+ v_2 \int_0^{\xi} \int_{\bar{h}}^{\xi_0 - \bar{h}} G_2(\xi', \tau') \bar{L}_2 \{ c_1(\xi', \tau'), c_2(\xi', \tau') \} d\xi' d\tau', \end{aligned} \quad (13)$$

$$\text{де } \bar{L}_1 \{ c_1, c_2 \} = \Delta \bar{\rho} \frac{\partial c_1^{(0)}}{\partial \tau} - \Delta \bar{d}_1 \frac{\partial^2 c_1^{(0)}}{\partial \xi^2} + \Delta \bar{k}_1 c_1^{(0)} - \Delta \bar{k}_2 c_2^{(0)},$$

$$I_h(\tau) = \lim_{\substack{X_2 \rightarrow 0+ \\ X_2 \rightarrow h+ \\ X_1}} \int G_1(\xi', \tau') \frac{\partial c_1^{(0)}(\xi', \tau')}{\partial \xi'} d\xi',$$

$$\bar{L}_2 \{ c_1, c_2 \} = \Delta \bar{\rho} \frac{\partial c_j^{(0)}}{\partial \xi} - \Delta \bar{k}_1 c_1^{(0)} + \Delta \bar{k}_2 c_2^{(0)}, j = 1, 2,$$

$$\Delta \bar{\rho} = \bar{\rho}^{(1)} - \bar{\rho}^{(2)}, \Delta \bar{d}_i = \bar{d}_i^{(1)} - \bar{d}_i^{(2)}, \Delta \bar{k}_i = \bar{k}_i^{(1)} - \bar{k}_i^{(2)}, i = 1, 2,$$

v_2 – об'ємна частка включення.

Ф. Отримання розрахункових формул.

Для знаходження розрахункових формул усереднених концентрацій домішкових частинок на швидкому шляху міграції та в пастках, а також сумарної концентрації, в отримані формули (12), (13) підставляємо вирази (9), (10) для концентрації $c_j^{(0)}(\xi, \tau), j = 1, 2$ в «однорідному» середовищі, функції Гріна (11) і виконуємо відповідні процедури диференціювання та інтегрування. На основі розрахункових формул розроблено програмне забезпечення для комп'ютерного моделювання дифузійних процесів домішкових речовин як для випадку однорідного шару, так і за наявності в тілі випадково розташованого прошарку за рівномірного розподілу фаз.

III. ВИСНОВКИ

В роботі запропоновано математичну модель дифузії домішкової речовини у багатокомпонентному двофазному середовищі з пастками з випадково розташованим прошарком, що має істотно інші фізико-хімічні характеристики. Введено природну безрозмірну форму, яка не використовує ні розміри середовища чи його неоднорідностей, ні характеристик просторово-часових масштабів змін процесів дифузії. За умови рівномірного розподілу фаз проведено усереднення розв'язку поставленої задачі за ансамблем конфігурацій фаз та отримано аналітичні вирази для концентрацій домішки на швидкому шляху міграції, в пастках та їхньої суми. Отримано відповідні розрахункові формули, на основі яких розроблено програмне забезпечення та проведено комп'ютерне моделювання дифузійних процесів домішкової речовини, яка дифундує у двофазному випадково неоднорідному шаруватому середовищі з пастками.

ЛІТЕРАТУРА REFERENCES

- [10] Y. Dovbush Vid choho strazhdaie ukrainska pryroda: TOP-7 problem in "Velyka epoha", 2014, № 2. Available <http://www.epochtimes.com.ua/ukraine/society/vid-chogo-strazhdaie-ukrayinska-prirodap-7-problem-114174.html>
- [11] A. Oliynyk, A. Moroz Matematychnе modeliuвання protsesiv zabrudnennia hruntiv iak rezultat tehnologichnyh protsesiv in "Vostochno-Evropeiskiy zhurnalпередових технологій". 2015, 1(4), 4-9,- Available: http://nbuv.gov.ua/UJRN/Vejpte_2015_1%284%29_2
- [12] V. Goncharuk, Y. Bilushchak, Y. Chaplya, O. Chernukha Mathematical Modelling and Forecasting Spread of Contaminants in Soil in Komunalnoe hoziaistvo horodov, 2016, 120'1: 115-121.
- [13] O. Chernukha, V. Goncharuk, Y. Bilushchak, A. Chuchvara Matematychnе modeliuвання ta prohnozuvannya poshyrennia radioaktyvnyh zabrudnen u pryverhnevnyh sharah nasychenoho hruntu" in Matematychni mashyny i systemy, 2017, 3, pp. 82-101.
- [14] H. Shcherbata Application of finite element method for solving of one-dimensional heterodiffusion problems in "Phisico-matematychnе modeliuвання ta informatsiini tehnologii, 2010, Vyp. 1, pp. 206-215.
- [15] Y. Bilushchak Mathematical Modelling Diffussion in a Medium with Traps under Cascade Decay of Admixture in Iformation Technologies and Computer Modelling: International Scientific and Practical Conference ITCM-2017: Precarpath. Nation. Univ., Ivano-Frankivsk, 2017, pp. 336-341.
- [16] Y. Chaplya, O. Chernukha, V. Goncharuk, V. Pabyrivskii, Y. Bilushchak Modeliuвання procesiv statsionaroi heterodyfuzii rozpadnoi rechovyny u seredovyshchi z pastkamy in Modeliuвання ta informatsiini tehnologii, Kuiv, Instytut problem modeliuвання v enerhetyci im. H. Y. Puhova NAN, 2013, Vyp. 70, pp. 96-108.
- [17] O. Chernukha, Y. Bilushchak, V. Goncharuk Matematychnе modeliuвання rozpodilu concetratsii domishok u stohastychnykh sharuvatykh tilah za neidealnyh umov kontaktu na mizhfaznyh hranytsiah in "Visnyk Kremenchutskoho natsionalnoho universytetu imeni Myhaila Ostrogradskoho", 2017, Vyp. 3, T. 104, pp.52-61.
- [18] O. Vlasii Matematychnе modeliuвання heterodyfuziinyh procesiv u shari z vypadkovym in "Fizyko-matematychnе modeliuвання ta informatsiini tehnologii", 2014, Vyp. 20, pp. 58-68.
- [19] Y. Chaplya, O. Chernukha Matematychnе modeliuвання heterodyfuznoho masoperenosu, Lviv: SPOLOM, 2003, 128 p.