

ІНСТИТУТ ПРИКЛАДНИХ ПРОБЛЕМ МЕХАНІКИ І МАТЕМАТИКИ
ІМ. ЯРОСЛАВА СТЕПАНОВИЧА ПІДСТРИГАЧА НАЦІОНАЛЬНОЇ
АКАДЕМІЇ НАУК УКРАЇНИ

Кваліфікаційна наукова
праця на правах рукопису

Білушак Юрій Ігорович

УДК 517.958:532.72

ДИСЕРТАЦІЯ

**МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ МАСОПЕРЕНОСЕННЯ
У СКЛАДНИХ ТІЛАХ З МІКРОСТРУКТУРОЮ**

01.05.02 – *математичне моделювання та обчислювальні методи*
технічні науки

Дисертація на здобуття наукового ступеня
доктора технічних наук

Дисертація містить результати власних
досліджень. Використання ідей,
результатів і текстів інших авторів
мають посилання на відповідне джерело

Науковий консультант:
Чернуха Ольга Юріївна,
доктор технічних наук, професор.



Львів - 2024

АНОТАЦІЯ

Білушак Ю.І. Математичне моделювання процесів масоперенесення у складних тілах з мікроструктурою. - Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора технічних наук за спеціальністю 01.05.02 – «Математичне моделювання та обчислювальні методи» (з технічних наук). – Інститут прикладних проблем механіки і математики ім.Я.С.Підстригача Національної академії наук України, 2024.

Дисертаційна робота присвячена вирішенню важливої науково-прикладної проблеми, що полягає у розвиненні підходів і методів математичного моделювання процесів масоперенесення в складних і складених тілах, що супроводжуються процесами сорбції-десорбції, каскадним розпадом або хімічними реакціями, за експериментальних даних на границі тіла.

Основний зміст дисертаційної роботи складається з семи розділів.

У розділі 1 проаналізовано узагальнені літературні джерела щодо каскадного радіоактивного розпаду та ланцюгових хімічних реакцій, каскадного механізму та його стадій хімічних реакцій, кінетичних закономірностей нерозгалужених ланцюгових реакцій, стосовно радіоактивних елементів в ґрунтах та хімічного забруднення ґрунтів, щодо очищення забруднення питних і стічних вод.

У розділі 2 в аксіоматизованому вигляді побудовано вихідні нелінійні співвідношення математичної моделі термомеханогетеродифузії у середовищі з пастками за каскадного розпаду домішкових частинок, які складаються з балансових рівнянь маси компонент і тіла в цілому, імпульсу, потенціальної, кінетичної, внутрішньої та повної енергії, ентропії, а також рівнянь стану та кінетичних співвідношень. Запропонований варіант лінеаризації рівнянь стану та кінетичних співвідношень та побудована ключова система рівнянь термомеханогетеродифузії у багатокомпонентному тілі з урахуванням каскадного розпаду частинок домішки у випадку вибору в якості розв'язуючих функцій температури, густини тіла, вектора переміщення точок континууму центрів мас та концентрації домішкових компонент,

у т.ч. тих, що утворилися в наслідок розпаду. Отримано часткові варіанти математичної моделі гетеродифузії у середовищі з пастками за каскадного розпаду мігруючих речовин за умов термодинамічної рівноваги щодо процесів переходу частинок між різними станами.

У розділі 3 на основі отриманих часткових модельних варіантів досліджуються процеси масоперенесення домішкових речовин у середовищах з мікроструктурою за каскадного розпаду домішкових компонент. Для конкретної схеми розпаду для моделей дифузії у середовищі з ефективними характеристиками, невзаємодіючих потоків та дифузії у середовищі з пастками сформульовані зв'язані крайові задачі каскадного типу, коли концентрація частинок на певному кроці розпаду є джерелом маси розпадної речовини на наступному кроці, яка теж дифундує, сорбується, десорбується і розпадається. Розв'язки крайових задач каскадного типу для зазначених математичних моделей побудовані за ітераційною процедурою з використанням функцій Гріна.

Розділ 4 присвячений дослідженню процесів масоперенесення домішкових речовин двома шляхами з урахуванням взаємних переходів частинок між станами та каскадного розпаду домішкових компонент. Розроблений аналітико-ітераційний метод побудови розв'язків крайових задач гетеродифузії каскадного типу. Знайдено та кількісно досліджено концентрації та потоки маси мігруючих компонент, а також визначено кількість відповідних речовин, що за певний проміжок часу пройшли через одиницю площі деякої поверхні, наприклад, через нижню границю шару.

У розділі 5 на основі загальної математичної моделі термомеханогетеродифузії розпадних мігруючих речовин у середовищі з пастками зроблені постановки відповідних крайових задач каскадного типу та за аналітико-ітераційним методом з використанням функцій Гріна побудовані розв'язки для концентрацій розпадних домішок на кожному з етапів розпаду на швидкому, повільному шляхах міграції, в пастках та для сумарних концентрацій. Означено матричну функцію Гріна задачі гетеродифузії у середовищі з пастками та встановлено її основні закономірності. На основі отриманих формул розроблений пакет програм GeterPas

для комп'ютерного моделювання процесів масоперенесення у тілі з пастками за каскадного розпаду домішкових речовин.

У розділі 6 розвинуто два підходи до математичного моделювання процесів перенесення в складних і складених, у тому числі пористих, тілах. Перший з них базується на фізично обґрунтованій математичній моделі у лінеаризованому варіанті, формулюванні на цій основі контактено-крайових задач з урахуванням умов неідеального контакту на концентрацію домішкової речовини, знаходженні точного аналітичного розв'язку сформульованої задачі за допомогою методу інтегральних перетворень окремо в різних фазах, комп'ютерному моделюванні отриманих розв'язків. Розроблено системний підхід до математичного опису процесів перенесення в багатофазних системах з мезо- або мікроструктурою за наявності експериментальних даних на одній з границь тіла, який застосовано до математичного опису процесів у тришарових фільтрах води (тришарове пористе тіло). Розвинуто метод чисельного подвійного інтегрування зі змінними верхніми межами і побудовано новий алгоритм методу розв'язання нелінійного функціонального рівняння на відрізьку невідомої довжини.

Розділ 7 присвячений побудові математичної моделі на основі балансових співвідношення маси компонент системи для кількісного опису процесів масоперенесення частинок забруднення з водним розчином через засипний фільтр води з урахуванням пом'якшення води за допомогою хімічної реакції. Тут за компоненти термодинамічної системи прийнято взаємодіючі дискретні сукупності матеріальних частинок, які утворюють основу тіла (скелет фільтра), водного розчину та домішкові частинки, які сорбуються, у двох виділених станах - у водному розчині та сорбовані на скелеті фільтра, сполуку одного з основних катіонів (яка спричинює надмірну твердість води), реагент, частинки нерозчинної речовини, які утворилися в наслідок хімічної реакції та молекули газу, які миттєво випаровуються.

Практичне значення отриманих результатів дисертаційного дослідження полягає у формулюванні основних співвідношень математичної моделі термомеханогетеродифузії за каскадного розпаду дифундуючих речовин у багатокомпонентному середовищі з пастками; отриманні часткових моделей

масоперенесення, які враховують каскадний розпад мігруючих частинок та особливості мікроструктури тіла; розробленні системного підходу до математичного опису процесів перенесення в складних і складених системах за наявності експериментальних даних на одній з границь тіла, за яким з використанням технічної умови існування часу насичення фільтра, тобто втрату його сорбційної здатності, встановлено параметри роботи фільтра, у розвиненні методу чисельного інтегрування подвійних інтегралів зі змінними верхніми межами і змінною областю інтегрування; у проектуванні архітектури та розробленні програмних комплексів для кількісного дослідження поширення домішкових речовин в тілах з мікроструктурою.

Ключові слова: математичне моделювання, складне та складене тіло (середовище складної та складеної структури), каскадний розпад, ключова лінеаризована система, гетеродифузія, метод чисельного інтегрування, програмне забезпечення, системний підхід, скінченне інтегральне перетворення, фізичний процес, програмний модуль, комп'ютерне моделювання, експлуатаційний параметр.

ABSTRACT

Bilushchak Yu.I. Mathematical modeling of mass transfer processes in complex bodies with a microstructure. - Qualifying scientific work on manuscript rights.

Thesis for a Doctoral degree in Technical Science, speciality 01.05.02 – "Mathematical modeling and computational methods" (from technical sciences).–
Pidstryhach Institute for Applied Problems of Mechanics and Mathematics of National Academy of Sciences of Ukraine, 2024.

The thesis is devoted to solving the important scientific and applied problem, which consists in the development of approaches and methods for mathematical modeling of mass transfer processes in complex and composite bodies accompanied by sorption-desorption processes, cascade decay or chemical reactions, under experimental data at the body boundary.

The main content of the thesis consists of seven chapters.

Chapter 1 analyzes generalized literature sources on cascade radioactive decay and chain chemical reactions, cascade mechanism and its stages of chemical reactions, kinetic regularities of unbranched chain reactions, regarding radioactive elements in soils and chemical contamination of soils, on the treatment of drinking and wastewater pollution.

In Chapter 2, the original nonlinear relationships of the mathematical model of thermomechanoheterodiffusion in a medium with traps accompanying the cascade decay of impurity particles are constructed in the axiomatized form. The full model consists of the balance equations of the mass of the components and the body as a whole, momentum, potential, kinetic, internal and total energy, entropy, and equations of state and kinetic relations. A variant of linearization of the equations of state and kinetic relations is proposed and the key system of equations for thermomechanoheterodiffusion in a multicomponent body is constructed taking into account the cascade decay of impurity particles in the case of choosing the temperature, body density, the vector of displacement of the points of the mass centers continuum and the concentration of impurity components, including those formed as a result of decay, as the solving functions. Partial variants of the mathematical model of heterodiffusion in a medium with traps under the cascade decay of

migrating substances under conditions of thermodynamic equilibrium with respect to the processes of intertransition of particles between different states are obtained.

In Chapter 3, on the basis of the obtained partial model variants, the processes of mass transfer of impurities in media with microstructure under the cascade decay of impurity components are investigated. For the specific scheme of decay, the coupled cascade-type initial-boundary value problems are formulated for the models of diffusion in a medium with effective characteristics, non-interacting flows, and diffusion in a medium with traps, when the concentration of particles at a certain decay step is the source of the mass of decaying matter at the next step, which also diffuses, sorbs, desorbs, and decays. The solutions of the cascade-type initial-boundary value problems for these mathematical models are constructed by an iterative procedure using Green's functions.

Chapter 4 is devoted to the investigation of the processes of mass transfer of impurities by two ways, taking into account the mutual transitions of particles between states and the cascade decay of impurity components. An analytical-iterative method for constructing the solutions to cascade-type heterodiffusion initial-boundary value problems is developed. The concentrations and mass fluxes of migrating components are found and quantitatively studied, as well as the amount of the corresponding substances that passed through a unit area of a certain surface, for example, through the lower boundary of the layer, is determined.

In Chapter 5, based on the general mathematical model of thermomechanoheterodiffusion of migrating decaying substances in a medium with traps, the corresponding cascade-type initial-boundary value problems are formulated and solutions for the concentrations of decaying impurities at each stage of decay on the fast and slow migration ways, in traps, and for total concentrations are constructed by the analytical-iterative method using Green's functions. The matrix Green's function of the problem of heterodiffusion in a medium with traps is defined and its main regularities are established. Based on the obtained formulas, the Geterpas software package is developed for simulation of mass transfer processes in a body with traps under the cascade decay of impurities.

In Chapter 6, two approaches to the mathematical modeling of transport processes in complex and composite, including porous, bodies are developed. The first of them is based on a physically justified mathematical model in a linearized version, formulating on this basis contact-initial-boundary value problems taking into account the conditions of non-ideal contact on the impurity concentration, finding an exact analytical solution of the formulated problem using the method of integral transformations separately in different phases, computer modeling of the obtained solutions. The systematic approach to the mathematical description of transfer processes in multiphase systems with meso- or microstructure in the presence of experimental data at one of the body boundaries is developed. This approach is applied to the mathematical description of processes in three-layered water filters (three-layered porous body). Here the method of numerical double integration with variable upper limits is developed and a new algorithm is constructed for solving a nonlinear functional equation on an interval of unknown length.

Chapter 7 is devoted to the construction of a mathematical model based on the balance mass equation for the system components to quantitatively describe the processes of mass transfer of pollution particles with an aqueous solution through a backfill water filter, taking into consideration the water softening by a chemical reaction. Here, the components of the thermodynamic system are the interacting discrete sets of material particles that form the basis of the body (filter skeleton), the aqueous solution, and the impurity particles that are sorbed, in two distinct states in the aqueous solution and sorbed on the filter skeleton, a compound of one of the main cations (which causes excessive water hardness), a reagent, particles of insoluble substance formed as a result of a chemical reaction, and gas molecules that instantly evaporate.

The practical importance of the results of the thesis research consists in formulation of the basic relationships of the mathematical model of thermomechanoheterodiffusion under the cascade decay of diffusing substances in a multicomponent medium with traps; partial mathematical models of mass transfer were obtained, which take into account the cascade decay of migrating particles and features of the body microstructure; in developing the systematic approach to the mathematical description of transfer processes in complex and composite systems in the presence of experimental data at one of the body

boundaries, according to which, using the technical condition of the existence of filter saturation time, i.e. the loss of its sorption capacity, the parameters of the filter operation were established, the numerical method for integration of double integrals with variable upper limits and variable region of integration was developed; architecture design and creation of program complexes for the quantitative investigation of the distribution of impurities in bodies with a microstructure were carried out.

Key words: mathematical modeling, complex and composite body (medium of complex and composite structure), cascade decay, key linearized system, heterodiffusion, numerical integration method, software, system approach, finite integral transformation, physical process, program modulus, simulation, operational parameter.

СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

Монографії

1. Чапля Є.Я., Чернуха О.Ю., Білуцак Ю.І. Математичне моделювання гетеродифузійних процесів при розпаді частинок. – Львів: Растр-7, 2018. – 240 с.
2. Математичне моделювання нерівноважних процесів у складних системах / Білуцак Ю.І., Гайвась Б.І. під заг. ред. Є.Я. Чаплі. – Львів: Растр-7, 2019. – 256 с.

Розділи колективних монографій

3. Bilushchak Y., Chernukha O., Chuchvara A. Approximation of boundary condition according to experimental data on the lower surface of the body during the simulation of the bulk water filter / Technical research and development: collective monograph.– Boston : Published Primedia eLaunch, 2021. – P. 64-79.
4. Chernukha O., Chuchvara A., Bilushchak Y. Simulation of admixture diffusion in a layer with randomly disposed spherical inclusions / Information Technology in Selected Areas of Management 2017. – Krakow: Wydawnictwa AGH, 2018. – P. 109-123.

Статті, опубліковані в журналах, які індексуються науково-метричними базами Scopus та Web of Science

5. Chernukha O.Y., Bilushchak Y.I., Chuchvara A.Y. On the error of the approximate calculation of double integrals with variable upper limits // Carpathian Mathematical Publications. – 2024. – 16, No 1. – P. 267-289. (Q1)
6. Chernukha O., Bilushchak Y. Mathematical Modeling of the Processes of Convective Diffusion and Sorption in a Three-Layer Porous Body. I. Mass Transfer of Impurity Particles with a Porous Solution // Journal of Mathematical Sciences. – 2024. – Vol. 279, No 2. – P. 247-259. (Q3)
7. Chernukha O., Bilushchak Y., Shakhovska N., Kulhánek R. A Numerical Method for Computing Double Integrals with Variable Upper Limits / Mathematics. – 2022. – Vol. 10 (1), 108. – 26 p. (Q1)
8. Chernukha O., Chuchvara A., Bilushchak Y., Pukach P., Kryvinska N. Mathematical modelling of diffusion flows in two-phase stratified bodies with randomly disposed layers of stochastically set thickness // Mathematics. – 2022. – Vol. 10 (19), 3650. – 25p. (Q1)
9. Chernukha O., Bilushchak Y. A mathematical model of two-way heterodiffusion processes with cascade decay of migrating particles // Journal of Mathematical Sciences. – 2021. – Vol. 253, No 1. – P. 156-167. (Q3)
10. Bilushchak Y., Chernukha O. Modeling of the processes of heterodiffusion in two ways for the cascade decay of admixture particles. I. Cascade-type initial-boundary-value problems // Journal of Mathematical Sciences. – 2021. – Vol. 254, No 1. – P. 142-155. (Q3)

11. *Bilushchak Y., Chernukha O.* Modeling of the Processes of Heterodiffusion in Two Ways for the Cascade Decay of Admixture Particles. II. Quantitative Analysis // *Journal of Mathematical Sciences.* – 2021. – Vol. 256, No 4. – P. 482-496. (Q3)

12. *Chernukha O., Bilushchak Y.* Mathematical modeling of the mean concentration field in random stratified structures with regard for the jumps of sought function on the interfaces // *Journal of Mathematical Sciences.* – 2019. – Vol. 240, – P. 70-84. (Q3)

Статті у наукових фахових виданнях

13. *Чернуха О.Ю., Білуцак Ю.І.* Математичне моделювання процесів конвективної дифузії і сорбції у тришаровому пористому тілі. II. Кількісний аналіз концентрації домішкових частинок на границях контакту фаз // *Мат. методи та фіз.-мех. поля.* 2022. – 65, № 1-2. – С. 229-240. (категорія А)

14. *Chernukha O., Bilushchak Y., Chuchvara A.* Mathematical modeling diffusion of admixture particles in a strip with randomly located spherical inclusions of different materials with commensurable volume fractions of phases // *Scientific Journal of TNTU.* – 2021. – Vol. 101, № 1. – P. 28-46.

15. *Chaplya Y., Chernukha O., Bilushchak Y.* Matrix Green's function of double-diffusivity problem and its applications to problems with inner point source // *Task Quarterly.* – 2019. – Vol. 23, No. 1. – P.75-99.

16. *Чернуха О. Ю., Білуцак Ю. І.* Про побудову інтегрального перетворення для оператора рівняння конвективної дифузії за мішаних граничних умов // *Фізико-математичне моделювання та інформаційні технології.* – 2020. – Вип. 30. – 85-102.

17. *Чернуха О., Гончарук В., Білуцак Ю., Давидок А.* Математичне моделювання та прогнозування поширення радіоактивних забруднень у приповерхневих шарах насиченого ґрунту // *Математичні машини і системи.* – 2017. – № 3. – С. 82-101.

18. *Чернуха О., Білуцак Ю.* Комп'ютерне моделювання дифузії домішкових речовин у середовищі з пастками за каскадного розпаду частинок // *Фізико-математичне моделювання та інформаційні технології.* – 2017. – Вип. 25. – С. 170-183.

19. *Чернуха О., Білуцак Ю., Гончарук В.* Математичне моделювання розподілу концентрації домішок у стохастичних шаруватих тілах за неідеальних умов контакту на міжфазних границях // *Вісник Кременчуцького національного університету ім.М.Остроградського* – 2017. – Вип. 3, Т. 104 – С.52-61.

20. *Чернуха О., Гончарук В., Білуцак Ю., Давидок А.* Пакет програм “FlowRan” для дослідження дифузійних потоків у випадкових шаруватих структурах // *Математичні машини і системи.* – 2016. – № 1. – С. 106-119.

21. *Chernukha O.Y., Bilushchak Yu. I.* Mathematical modeling of random concentration field and its second moments in a semispace with erlangian distribution of layered inclusions // *Task Quarterly.* – 2016. – Vol. 20, No. 3. – P.295-334.

22. Білуцак 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.
23. Гончарук В. Є., Білуцак Ю. І., Чапля Є. Я., Чернуха О. Ю. Математичне моделювання та прогнозування поширення забруднень у ґрунті // Комунальне господарство міст. Серія: Безпека життя і діяльності – наука, освіта, практика. – 2015. – Вип. 120 (1). – С 115-121.
24. Білуцак Ю.І., Чапля Є.Я., Чернуха О.Ю Про підсумовування асимптотичних доданків у розв'язках задач дифузії // Фізико-математичне моделювання та інформаційні технології. – 2014. – Вип. 19. – С. 11-20.
25. Білуцак Ю.І. Моделювання других моментів випадкового поля концентрації в півпросторі з експоненціальним розподілом шаруватих включень // Вісник Кременчуцького національного університету ім. М. Остроградського – 2014. – Вип. 6, Т. 89 –С.71-79.
26. Білуцак Ю. І., Гончарук В. Є., Чернуха О. Ю. Математична модель невзаємодіючих потоків для опису процесів масопереносу двома шляхами за каскадного розпаду частинок // Прикладні проблеми механіки і математики. – 2014. – Вип. 12. – С 137-145.

Матеріали у міжнародних конференціях, які індексуються у Scopus та Web of Science

27. Chernukha O., Bilushchak Y., Pakholok B. System approach to mathematical description of transport processes with chemical reaction in multiphase multicomponent body / 2020 IEEE 2nd International Conference on System Analysis & Intelligent Computing (SAIC). – Proceedings (2020). – P. 144-149.
28. Chernukha O., Bilushchak Y. Method of Construction of Finite Integral Transform for Operator of Parabolic Differential Equation under Mixed Boundary Conditions / 2020 IEEE 6th International Conference on Methods and Systems of Navigation and Motion Control (MSNMC). – Proceedings (2020). – P. 38-42.
29. Chernukha O., Chuchvara A., Bilushchak Y. The model of diffusion processes in a two-phase strip with randomly disposed spherical inclusions near the mass source on the body surface / Proceedings of IEEE 3rd International Conference on System Analysis and Intelligent Computing (SAIC 2022), Kyiv, 4-7 October, 2022. – pp. 1-6.
30. Chernukha O., Bilushchak Y., Chuchvara A. Model problem of thermodiffusion of admixture particles in aircraft materials / 2019 IEEE 5th International Conference Actual Problems of Unmanned Aerial Vehicles Developments, APUAVD 2019. – Proceedings (2019). – P. 290-294.

Матеріали міжнародних і національних конференцій

31. Білуцак Ю.І., Чернуха О.Ю., Чучвара А.Є. Дослідження алгоритму розв'язування нелінійних // Матеріали Міжнародної науково-практичної конференції "Інформаційні технології та комп'ютерне моделювання", Івано-Франківськ: п. Голіней О.М., 2024. –С.170-173.

32. *Чернуха О., Білуцак Ю., Білуцак Г.* Процеси перенесення в шарі за лінійної регресійної моделі на нижній границі // *Modeling, Control and Information Technologies: Proceedings of International Scientific and Practical Conference, Рівне.* – 9–11 листопада 2023. – С. 161–164.
33. *Chernukha O., Bilushchak Y., Chuchvara A.* Mathematical model of chemical purification of water in a mechanical filter / *Scientific debates and prospective orientations of scientific development: Collection of scientific papers «ΛΟΓΟΣ», materials from the III International Scientific and Practical Conference, Paris, 8 July, 2022.* – P. 192-203.
34. *Bilushchak Y., Chernukha O., Chuchvara A.* Method for numerical solving a nonlinear functional equation in an interval of unknown length // *Abstracts of IV International Scientific and Practical Conference Prospects And Achievements in Applied and Basic Sciences (Budapest, Hungary February 9 – 12, 2021).* – P. 501-506.
35. *Білуцак Ю., Чернуха О., Чучвара А.* Про побудову інтегрального перетворення оператора параболічного диференціального рівняння за мішаних граничних умов I і II роду / *Матеріали Міжнародної науково-практичної конференції "Інформаційні технології та комп'ютерне моделювання", Івано-Франківськ: п. Голіней О.М., 2021.* – С. 168-169.
36. *Білуцак Ю., Чернуха О., Чучвара А.* Апроксимація граничної умови на невідомому часовому інтервалі при моделюванні процесів конвективної дифузії у промислових фільтрах води / *Матеріали Міжнародної наукової конференції "Сучасні проблеми термомеханіки – 2021", Львів, 2021.* – С. 20-19.
37. *Чернуха О.Ю., Білуцак Ю.І.* Моделювання конвективної дифузії забруднень у двошарових фільтрах води за апроксимації граничної умови на невідомому часовому інтервалі // *Матеріали Міжнародної науково-практичної конференції "Інформаційні технології та комп'ютерне моделювання", Івано-Франківськ: п. Голіней О.М., 2020.* – С. 207-211.
38. *Chernukha O., Bilushchak Y.* Interpolation of Boundary Condition at Time-Interval of Unknown Length for the Problem of Convective Diffusion in a Three-Layered Water Filter // *Conference Modeling, Control and Information Technologies, 2019.* – P. 25-28.
39. *Chuchvara A., Bilushchak Y., Chernukha O.* Investigation of dispersion and correlation function of the probable beta-distribution // *MODERN SCIENTIFIC CHALLENGES AND TRENDS: a collection scientific works of the International scientific conference (20th April, 2019) – Warsaw: Sp. z o. o. "iScience", 2019.* – P. 115-119.
40. *Чернуха О.Ю., Білуцак Ю.І.* Процеси конвективної дифузії у тришаровому пористому тілі // *Математичні проблеми механіки неоднорідних структур: збірник наукових праць 10-ї Міжнародної наукової конференції / за заг. ред. Р.М. Кушніра і Г.С. Кіма // Львів: Інститут прикладних проблем механіки і математики ім. Я.С. Підстригача НАН України. – 2019. – Вип. 5. – С. 236-237.*
41. *Chernukha O., Bilushchak Y.,* Simulation of double-diffusivity processes with cascade decay of admixture particles / *International scientific and practical conference “Technical sciences: history, the*

present time, the future, EU experience” Wloclawek, Republic of Poland, September 27-28, 2019. P.56-61.

42. Білуцзяк Ю.І. Дослідження концентрації та потоків маси домішкових речовин за моделлю дифузії у тілі з пастками, що супроводжується ланцюговим розпадом / Міжнародна наукова конференція «Сучасні проблеми математичного моделювання, обчислювальних методів та інформаційних технологій», Рівне, 2018. – С. 32-34.

43. Чернуха О.Ю., Білуцзяк Ю.І. Числовий метод знаходження подвійного інтеграла зі змінними верхніми межами / Сучасні проблеми механіки та математики: збірник наукових праць у 3-х т. – Львів: Інститут прикладних проблем механіки і математики ім. Я.С. Підстригача НАН України. – 2018. – Т. 3. – С. 38-40.

44. Чернуха О., Білуцзяк Ю., Чапля Є. Функції Гріна задач дифузії двома шляхами / Матеріали Міжнародної науково-практичної конференції "Інформаційні технології та комп'ютерне моделювання", Івано-Франківськ: п. Голіней О.М., 2018. –С. 287-291.

45. Chaplya Ye., Chernukha O. Bilushchak Y. Mathematical Modeling and Simulation of Processes of Heterodiffusion with Cascade Decay of Particles / Матеріали Міжнародної науково-практичної конференції "Інформаційні технології та комп'ютерне моделювання", Івано-Франківськ: п. Голіней О.М., 2018. – С. 276-286.

46. Чернуха О., Білуцзяк Ю., Чучвара А. Програмний комплекс для моделювання дифузії у тілі з пастками за каскадного розпаду мігруючих частинок / Матеріали 20-ї міжнар. науково-технічної конф. САІТ «Системний аналіз та інформаційні технології», Київ: ННК «ІПСА» НУТУ «КПШ», 2018. - С. 98-99.

47. Чернуха О. Ю., Білуцзяк Ю. І., Пахолок Б. Б., Ментинський С. М. Архітектура пакету комп'ютерних програм GeterPas1 для кількісного дослідження процесів переносу за каскадних хімічних реакцій / Матеріали наукової конференції «Сучасні тенденції розвитку української науки», Переяслав-Хмельницький, 2018. – Вип. 4 (14). – С. 56-65.

48. Чапля Є., Чернуха О., Білуцзяк Ю. Континуальні моделі багатошвидкісних процесів масоперенесення розпадних речовин у тілах з мікроструктурою / Матріали міжнародної науково конференції “Мікро- та нанонеоднорідні матеріали: моделі та експеримент”; Львів: Растр-7, 2018. – С. 36-37.

49. Чапля Є., Чернуха О., Білуцзяк Ю. Аналітико-ітераційний метод розв'язування крайових задач гетеродифузії каскадного типу / Матеріали ХХІV всеукраїнської наукової конференції «Сучасні проблеми прикладної математики та інформатики», Львів: Вид-во Тараса Сороки, 2018. – С. 179-185.

50. Чапля Є.Я., Чернуха О.Ю., Білуцзяк Ю.І. Метод функцій Гріна для розв'язування крайових задач гетеродифузії двома шляхами / Матеріали V науково-технічної конференції «Обчислювальні методи і системи перетворення інформації» присв. пам'яті проф. Б.О.Попова, Львів: ФМІ НАНУ, 2018. – С. 119-125.

51. Чернуха О., Білуцак Ю., Чучвара А. Модель гетеродифузії двома шляхами при поверхневому забрудненні ґрунту за каскадного розпаду частинок / Матеріали V міжнародної науково-практичної конф. «Безпека життєдіяльності на транспорті та виробництві – освіта, наука, практика», Херсон: В-во Херсонської державної морської академії, 2018. – С. 283-287.
52. Білуцак Ю.І., Чернуха О.Ю., Чучвара А.Є. Математичний опис конвективної дифузії двокомпонентного розчину у багатошарових каркарсно-насіпних фільтрах води / Матеріали XVII міжнар. наук.-техн. конф. «Фізичні процеси та поля технічних та біологічних об'єктів», Кременчук: КрНУ, 2018. – С. 156-158.
53. Chernukha O., Bilushchak Y., Chuchvara A. Program package "FlowRan" for computing of diffusion flow in random stratified body / International scientific and practical conference "Prospects for the development of technical sciences in EU countries and Ukraine" Wloclawek, Republic of Poland, 21–22 december 2018). – P.33-38.
54. Гончарук В., Білуцак Ю., Чернуха О. Моделювання міграції забруднення у середовищі з пастками за каскадного розпаду частинок // Матеріали IV міжнародної науково-практичної конф. «Безпека життєдіяльності на транспорті та виробництві – освіта, наука, практика». – Херсон: В-во Херсонської державної морської академії, 2017. – С. 341-347.
55. Чернуха О., Гончарук В., Білуцак Ю., Чучвара А. Моделювання та прогнозування поширення радіоактивних забруднень у ґрунтах. // Міжнародна конференція "Проблеми зняття з експлуатації об'єктів ядерної енергетики та відновлення навколишнього середовища", м. Славутич, 25-27 квітня 2017. – С. 309-322.
56. П'янило Я., Чернуха О., Гончарук В., Білуцак Ю. Математичне моделювання та прогнозування поширення радіоактивних забруднень у приповерхневих шарах землі // Семінар «Сталий розвиток – погляд у майбутнє (Львів, 15 вересня 2017р.), Львів: Видавництво львівської політехніки, 2017. – С. 26.
57. Чернуха О., Білуцак Ю. Математичне та комп'ютерне моделювання процесів конвективної дифузії у двошарових засипних фільтрах води// Матеріали статей між. науково-практичної конф. «Інформаційні технології та компютерне моделювання». – Івано Франківськ: п.Голіней О.М. – 2017. – С.349-354.
58. Білуцак Ю., Математичне моделювання дифузії у середовищі з пастками за каскадного розпаду домішок // Матеріали статей між. науково-практичної конф. «Інформаційні технології та компютерне моделювання». – Івано Франківськ: п.Голіней О.М. – 2017. - С.342-348.
59. Чернуха О., Лянце Г., Білуцак Ю. Перенесення радіонуклідів ґрунтовими водами // Матеріали IV міжнар. науково-практичної конференції «Екологія і природокористування в системі оптимізації відносин природи і суспільства». м. Тернопіль, 27-28 квітня 2017 року. – Тернопіль: Крок, 2017. – С. 134-135.
60. Білуцак Ю.І., Гончарук В.Є., Чернуха О.Ю., Чучвара А.Є. Математичне моделювання дифузійних процесів у випадкових шаруватих структурах за явного врахування стрибків концентрації та її похідної на міжфазних границях // Матеріали 19-ї міжнар. науково-технічної

конф. SAIT «Системний аналіз та інформаційні технології» (Київ, 22-25 травня 2017р.), К.:ННК «ІПСА» НУТУ «КПІ», 2017, С. 38-39.

61. Чернуха О.Ю., Гончарук В.Є., Білуцзяк Ю.І., Давидок А.Є. Комп'ютерне моделювання роботи двошарового засипного фільтра води // Збірник наукових праць XV міжнародної науково-практичної конференції «Безпека життя і діяльності людини – освіта, наука, пастика». – Київ: «Темпо», 2016. – С. 312-316.

62. Білуцзяк Ю.І., Гончарук В.Є., Давидок А.Є., Чернуха О.Ю. Математичне та комп'ютерне моделювання двошарового засипного фільтра очистки води // Матеріали IV науково-технічної конференції «Обчислювальні методи і системи перетворення інформації» присв. пам'яті проф. Б.О.Попова. – Львів: ФМІ НАНУ, 2016. – С. 162-166.

63. Чернуха О., Білуцзяк Ю. Моделювання усередненого поля концентрації у випадкових шаруватих структурах з урахуванням стрибків шуканої функції на міжфазних границях // Міжнародна наукова конференція «Сучасні проблеми термомеханіки: збірник наукових праць» [Електронний ресурс]. – Львів: ІППММ ім. Я.С.Підстригача НАН України, 2016. – Режим доступу: www.iapmm.lviv.ua/MPT2016. – С. 135-136

64. Білуцзяк Ю.І., Гончарук В.Є., Чернуха О.Ю., Чучвара А.Є. Числові методи для комп'ютерного моделювання довговічності роботи двошарового фільтра води // Матеріали XV Міжнародної науково-технічної конференції «Фізичні процеси та поля технічних та біологічних об'єктів». – Кременчук: В-во КрНУ ім. М. Остроградського, 2016. – С. 118-120.

65. Bilushchak Yu. I., Chernukha O. Yu., Davydok A. Yu., Goncharuk V. Yu. Mathematical model for mass flow in a strip with randomly disposed sublayer of stochastic thickness // System analysis and information technologies: 18-th International conference SAIT 2016. Proceedings. – Kyiv: ESC “IASA” NTUU “KPI”, 2016. – P. 24-25.

66. Білуцзяк Ю. Комп'ютерне моделювання других моментів випадкового поля концентрації в півпросторі з ерлангівський розподілом шаруватих включень // Інформаційні технології та комп'ютерне моделювання: матеріали статей міжнародної науково-практичної конференції м. Івано-Франківськ, 2016. – С. 195-197.

67. Гончарук В. Є., Білуцзяк Ю. І., Чапля Є. Я., Чернуха О. Ю. Математичне моделювання міграції забруднень у ґрунті з кругового джерела на поверхні // Матеріали XVI Міжнародної науково-методичної конференції. “Безпека життя і діяльності людини – освіта, наука, практика”. – Харків; 2015. – С. 48-50.

68. Bilushchak Yu. I., Chernukha O. Yu., Gera B. V., Goncharuk V. Ye. Software for description of diffusion by two ways with cascade particle decay // System analysis and information technologies: 17-th International conference SAIT 2015. – Kyiv: ESC “IASA” NTUU “KPI”, 2015. – P. 23-24.

69. Чернуха О.Ю., Гончарук В.Є., Білуцзяк Ю.І. Процеси масоперенесення в багатокомпонентному середовищі за каскадного розпаду частинок // Матеріали науков-технічної конференції «Мікро- та нанонеоднорідні матеріали: моделі та експеримент» (INTERPOR'15). – Львів: В-во Львівської політехніки, 2015. – С. 79-80.

70. Білуцак Ю. І., Гончарук В. Є., Давидок А. Є., Чернуха О. Ю. Математичне моделювання взаємозв'язних теплових і дифузійних процесів з урахуванням розпаду домішки у двофазній стохастично неоднорідній багатошаровій смузі // Матеріали міжнародної наукової конференції «Сучасні проблеми математичного моделювання та обчислювальних методів». – Рівне: РВВ РДГУ, 2015. – С. 30.

71. Білуцак Ю. І., Гончарук В. Є., Давидок А. Є., Чернуха О. Ю. Пакет програм для розв'язування крайових задач дифузії у випадкових структурах // Збірник наукових праць XXI Всеукраїнської наукової конференції «Сучасні проблеми прикладної математики та інформатики». – Львів: ЛНУ ім. І. Франка, 2015. – С. 63-66.

72. Білуцак Ю. І., Гончарук В. Є., Чернуха О. Ю. Математичне моделювання процесів дифузії за каскадного розпаду мігруючих речовин // Матеріали 16-ї міжнар. науково-технічної конф. SAIT «Системний аналіз та інформаційні технології» (Київ, 26-30 травня 2014р.). – К.:ННК «ПСА» НТУУ «КПІ», 2014. – С. 57-58.

73. Чернуха О.Ю., Гончарук В.Є., Білуцак Ю.І. Комп'ютерне моделювання дифузійних процесів за каскадного розпаду мігруючих речовин // Матеріали III науково-технічної конференції «Обчислювальні методи і системи перетворення інформації» (Львів, 25-26 вересня, 2014р.), Львів: ФМІ НАНУ, 2014. – С. 59-62.

74. Білуцак Ю. Пакет програм для комп'ютерного моделювання дифузії домішок у випадково неоднорідній шаруватій структурі // Матеріали IX Міжнародної наукової конференції «Математичні проблеми механіки неоднорідних структур» (15-19 вересня 2014 р. Львів) ІППММ НАНУ, 2014. – С. 17-19.

75. Гончарук В.Є., Білуцак Ю.І., Чапля Є.Я., Чернуха О.Ю. Прогнозування поширення забруднення у ґрунті на основі математичних моделей гетеродифузії з урахуванням пасток та розпаду // 3-й Міжнародний конгрес «Захист навколишнього середовища. Енергоощадність збалансоване природокористування (Львів 17-19 вересня 2014 р) НУ ЛП, 2014. – С. 23.

76. Чернуха О.Ю., Гончарук В.Є., Білуцак Ю.І. Математичний опис процесів масопереносу двома шляхами з каскадним розпадом частинок за моделлю невзаємодіючих потоків // Тези доповідей XIII Міжнародної науково-технічної конференції «Фізичні процеси та поля технічних і біологічних об'єктів». – Кременчук: КрНУ ім. М. Остроградського, 2014. – С. 196-197.

Публікації, які додатково відображають результати дисертації

77. Білуцак Ю., Чернуха О., Чучвара А. Пакет програм «WodFil» для дослідження процесів очищення від забруднення у водному фільтрі // Свідоцтво про реєстрацію авторського права на твір № 118818 від 08.05.2023р.

78. Чернуха О.Ю., Чапля Є.Я., Гончарук В.Є., Білуцак Ю.І., Давидок А.Є. Пакет програм для розрахунку дифузійних потоків у двофазних тілах випадкової шаруватої структури («FlowRan») // Свідоцтво про реєстрацію авторського права на твір № 61858 від 28.09.2015р.

Зміст

Вступ	22
Розділ 1. Математичне моделювання процесів перенесення в складних та складених тілах. Огляд літератури	31
1.1. Аналіз фізико-механічних процесів, що супроводжуються каскадними (ланцюговими) реакціями	32
1.1.1. Каскадний радіоактивний розпад	32
1.1.2. Каскадні хімічні реакції	34
1.1.3. Каскадний механізм та його стадії хімічних реакцій	37
1.1.4. Кінетичні закономірності нерозгалужених ланцюгових реакцій	40
1.1.5. Радіоактивні елементи в ґрунтах	43
1.1.6. Хімічне забруднення ґрунтів	47
1.2. Аналіз процесів в складних та складених системах	50
1.3. Хімічні методи очищення забруднених вод	53
1.4. Висновки до Розділу 1	55
Розділ 2. Континуально-термодинамічна модель механотермогетеродифузії за каскадного розпаду домішкової речовини при локальній зміні стану частинок	57
2.1. Об'єкт дослідження. Конфігураційні та кінематичні характеристики	57
2.2. Балансові співвідношення	63
2.3. Гіпотеза локальної термодинамічної рівноваги. Рівняння Гіббса	70
2.4. Рівняння стану	72
2.5. Рівняння балансу питомої енергії	73
2.6. Кінетичні співвідношення	77
2.7. Лінійні рівняння стану	78
2.8. Лінійні кінетичні співвідношення	81
2.9. Повна система рівнянь моделі	83
2.10. Ключова система рівнянь гетеродифузії домішок за їх каскадного розпаду	86
2.11. Ефективні характеристики	95
2.12. Висновки до Розділу 2	101
Розділ 3. Крайові задачі моделей дифузії, невзаємодіючих потоків і дифузії в тілі з пастками за каскадного розпаду домішкових речовин	103
3.1. Математичні моделі гетеродифузії за каскадного розпаду домішкових частинок у безрозмірній формі	103
3.2. Математична модель дифузії за каскадного розпаду домішкових частинок у тілі з ефективними характеристиками	106
3.2.1. Концентрації розпадних речовин	106
3.2.2. Потоки маси розпадних домішкових речовин	112
3.2.3. Кількість розпадних речовин, що пройшли через нижню границю шару за час τ_*	114
3.2.4. Числовий аналіз концентрацій домішок у середовищі з ефективними характеристиками	115
3.3. Математична модель невзаємодіючих потоків	119
3.3.1. Концентрації розпадних частинок	119
3.3.2. Потоки розпадних частинок за моделлю невзаємодіючих потоків	122
3.3.3. Кількість розпадних речовин, що пройшли через нижню поверхню шару	124

3.3.4. Числовий аналіз дифузії двома шляхами за моделлю невзаємодіючих потоків	125
3.4. Математична модель ефективної дифузії розпадних речовин у середовищі з пастками	128
3.4.1. Концентрації розпадних мігруючих частинок	128
3.4.2. Потоки розпадних домішкових частинок через задану поверхню	137
3.4.3. Кількість розпадних речовин, що пройшли через нижню границю шару за заданий час	138
3.4.4. Схема модулів комплексу програм пакету GeterPas для моделі дифузії у тілі з пастками. Числовий аналіз	139
3.5. Висновки до Розділу 3	145
Розділ 4. Математична модель процесів гетеродифузії розпадних речовин двома шляхами	147
4.1. Крайова задача каскадного типу для знаходження концентрацій мігруючих компонент	147
4.1.1. Постановка крайових задач гетеродифузії каскадного типу	147
4.1.2. Побудова розв'язків крайових задач гетеродифузії каскадного типу	150
4.1.3. Функції Гріна крайових задач гетеродифузії двома шляхами	157
4.2. Потоки розпадних домішкових частинок через задану поверхню	165
4.3. Кількість розпадних речовин, що пройшли через нижню границю шару за час τ_*	168
4.4. Схема модулів комплексу програм пакету GeterPas для моделі гетеродифузії двома шляхами. Числовий аналіз	169
4.4.1. Архітектура комплексу модулів програм для моделі гетеродифузії	169
4.4.2. Числовий експеримент для встановлення закономірностей концентрації частинок на нульовому етапі розпаду	171
4.4.3. Числовий аналіз концентрацій домішкових частинок на першому кроці каскадного розпаду	175
4.4.4. Числовий аналіз концентрацій домішкової речовини на другому кроці каскадного розпаду	183
4.4.5. Числовий аналіз дифузійних потоків домішкових частинок на першому етапі розпаду	188
4.5 Висновки до Розділу 4	191
Розділ 5. Математична модель гетеродифузії двома шляхами у тілі з пастками за каскадного розпаду домішкових речовин	193
5.1. Крайова задача каскадного типу для знаходження концентрацій мігруючих компонент	193
5.2. Функції Гріна крайових задач гетеродифузії у тілі з пастками каскадного типу	206
5.3. Потоки домішкових компонент через заданий переріз тіла	216
5.4. Кількість розпадних речовин, що пройшла через нижню границю шару за час τ_*	222
5.5. Схема модулів комплексу програм пакету GeterPas для моделі гетеродифузії двома шляхами у тілі з пастками	223
5.6. Числовий експеримент для моделі гетеродифузії двома шляхами у тілі з пастками	228
5.6.1. Числовий експеримент для встановлення закономірностей концентрації частинок на нульовому етапі розпаду	228

5.6.2. Числовий експеримент для встановлення закономірностей концентрації частинок на першому етапі розпаду	232
5.6.3. Числовий експеримент щодо сумарної концентрації частинок на другому етапі розпаду	234
5.7 Висновки до Розділу 5	236
Розділ 6. Математичне моделювання процесів конвективної дифузії у тілах складної та складеної структури	238
6.1. Математична модель процесів перенесення домішкових речовин у середовищах складної та складеної структури	239
6.1.1. Об'єкт дослідження	239
6.1.2. Балансові рівняння моделі	240
6.1.3. Кінетичні рівняння та рівняння стану	242
6.1.4. Ключова система рівнянь моделі	243
6.1.5. Часткові варіанти математичної моделі	245
6.1.6. Безрозмірна форма різних модельних варіантів	246
6.1.7. Підхід до математичного опису процесів масоперенесення домішкових речовин у середовищах складної та складеної структури	248
6.2. Контактно-крайова задача вертикальної конвективної дифузії у тришаровому пористому тілі	249
6.2.1. Постановка контактної-крайової задачі конвективної дифузії	249
6.2.2. Знаходження аналітичних співвідношень для концентрацій домішкових частинок, що мігрують у розчині, у контактуючих пористих областях	251
6.2.3. Аналіз функцій $g_1(\tau)$ і $g_2(\tau)$	259
6.2.4. Порівняльний числовий аналіз функцій $g_1(\tau)$, $g_2(\tau)$ та встановлення закономірностей	260
6.2.5. Обчислення інтегральних складових розв'язків та кількісний аналіз концентрації частинок, які мігрують у поровому розчині	267
6.2.6. Концентрації домішкових частинок, сорбованих на скелеті, у макроелементах тришарового тіла	268
6.2.7. Чисельний метод знаходження подвійних інтегралів зі змінними верхніми межами	269
6.2.7.1. Побудова формули для знаходження подвійних інтегралів зі змінними верхніми межами	269
6.2.7.2. Накладання сітки для змінної області інтегрування	271
6.2.7.3. Формула для знаходження подвійного інтегралу зі змінними верхніми межами	273
6.2.7.4. Похибка чисельного інтегрування	276
6.2.7.5. Приклади використання чисельного інтегрування для подвійного інтегралу зі змінною внутрішньою верхньою межею інтегрування	278
6.2.8. Довговічність роботи промислових тришарових засипних фільтрів води	288
6.2.8.1. Чисельний метод розв'язування нелінійних функціональних рівнянь	288
6.2.8.2. Побудова та дослідження розв'язку рівняння	292

$$\sup_{x \in \Omega_j} c_2^{(j)}(x, \tau_*^{(j)}) = N_j$$

6.3. Системний підхід до математичного опису процесів перенесення домішкових речовин у тілах складної та складеної структури	293
6.3.1. Системний підхід до опису складних та складених систем за відомих експериментальних даних на одній з границь тіла	294
6.3.2. Задача конвективної дифузії домішки з урахуванням сорбційних процесів у тришаровому пористому тілі за наявності даних вимірювань концентрації на нижній поверхні тіла	301
6.3.3. Наближення функції $F(\tau, \tau_p)$ інтерполяційним та апроксимаційними поліномами	306
6.3.3.1. Наближення функції $F(\tau, \tau_p)$ інтерполяційним поліномом	306
6.3.3.2. Наближення функції $F(\tau, \tau_p)$ апроксимаційними поліномами	309
6.3.3.3. Наближення функції $F(\tau, \tau_p)$ екстраполяційними поліномами	312
6.3.4. Контактно-крайова задача конвективної дифузії домішки без урахування сорбційних процесів у тришаровому пористому тілі	314
6.3.5. Визначення оцінки часу виходу на стаціонарний режим	319
6.4. Висновки до Розділу 6	320
Розділ 7. Математична модель конвективної дифузії забрудненого розчину у фільтрі води з пом'якшенням жорсткої води за експериментальних даних на границі	323
7.1. Побудова математичної моделі	323
7.1.1. Безрозмірна форма	327
7.1.2. Постановка крайової задачі	328
7.1.2.1. Система рівнянь масоперенесення	328
7.1.2.2. Початкові та граничні умови	330
7.1.2.3. Модельний опис хімічної реакції пом'якшення води	331
7.2. Крайова задача конвективної дифузії у середовищі з пастками за експериментальних даних на нижній границі фільтра	333
7.3. Числовий аналіз концентрації частинок забруднення, які переносяться поровим розчином	338
7.4. Числовий аналіз концентрації частинок забруднення, які сорбовані на скелеті фільтра	344
7.5. Довговічність роботи промислових засипних фільтрів води	349
7.6 Висновки до Розділу 7	352
Висновки	354
Список використаних джерел	358
Додатки	378
Додаток А. Список публікацій здобувача за темою дисертації	379
Додаток Б. Свідоцтва про реєстрацію авторського права на комп'ютерні програми	387
Додаток В. Акти впроваджень	389

ВСТУП

Актуальність теми. Розвиток технологій, скорочення ресурсів, потреба заощадливого використання наявних можливостей призводить до необхідності розвинення нового інструментарію наукових досліджень для математичного опису складних і складених систем.

Одним з найбільш досліджуваних об'єктів протягом останніх десятиліть є ґрунт, який є ключовим елементом земних екосистем та часто універсальним адсорбентом. Ґрунти відображають рівень багаторічних природних перетворень і антропогенного впливу діяльності людини. При насиченні ґрунту хімічними елементами, він може стати джерелом вторинного забруднення продуктів харчування, кормів тварин, води водоймищ та атмосферного повітря. Ґрунти, як правило, не можуть швидко очищатися, і забруднюючі компоненти можуть в них зберігатися довгі роки. Погіршення якості ґрунтів, зниження їхньої біологічної цінності, здатності до самоочищення викликають ланцюгову реакцію, яка у випадку тривалого несприятливого впливу може привести до погіршення здоров'я населення. Сьогодні технологічні викиди від стаціонарних та рухомих джерел забруднення надходять в атмосферу і, випадаючи на земну поверхню, накопичуються у верхніх горизонтах ґрунту і в подальшому знову включаються у різні міграційні цикли.

Математичні моделі процесів перенесення компонент тіла широко використовують у різних галузях науки і техніки. На їх основі зокрема здійснюють моніторинг техногенних субстанцій в оточуючому нас довкіллі, прогнозують захищеність підземних вод від поверхневих забруднень, оцінюють надійність інженерних споруд для зберігання агресивних сполук тощо. Окреме застосування такі моделі знаходять в техніці при описі процесів корозії чи деградації матеріалів, прогнозуванні надійності і довговічності поверхневих покриттів.

При побудові таких математичних моделей певною проблемою є врахування впливу локальної структури середовища. У певній мірі умовно можна виділити два граничні випадки. У першому випадку в тілі є присутні включення, частка яких мала, проте їх розміри можуть бути співмірними з розмірами тіла. Як правило, властивості матеріалу включень добре відомі, проте невідоме їхнє розташування.

Фізичні властивості матеріалу включень істотно відрізняються від властивостей основного матеріалу (матриці). Для оцінки впливу таких включень на процес дифузії в літературі запропоновано спеціальні підходи.

У другому випадку приймається, що розподіл неоднорідностей є близьким до рівномірного і розміри „дефектів” структури є такі малі, що в кожній фізично малій області середовища, знаходиться їх макроскопічне число. Частинки домішкової субстанції, які знаходяться в області дефектів і поза ними, характеризуються суттєво різними фізичними властивостями. Це призводить до міграції частинок домішкової субстанції декількома шляхами, переходів з одного просторового положення в інше та у більшості випадків нетипових розподілів концентрації домішкової речовини та її потоків, які спостерігають експериментально.

При цьому для дослідження процесів масоперенесення в складних тілах з мікроструктурою, в яких може відбуватись каскадний розпад речовин, потрібне створення необхідних засобів та методів для їх математичного опису, зокрема у взаємозв'язку з процесами іншої фізичної природи. В таких системах необхідно враховувати, що речовини, які розпадаються утворюють нову речовину, яка також мігрує в тілі та може розпадатись.

Формулювання математичних моделей перенесення, контактено-крайових задач фільтрації вимагає накладання адекватних граничних і початкових умов, що коректно описують реальний процес, який відбувається в досліджуваних середовищах. Крім цього, у випадку наявності експериментальних даних на границі тіла потрібно отримати відповідну функціональну крайову умову.

Тому розвинення нових підходів до математичного моделювання процесів масоперенесення у складних та складених тілах, у тому числі з урахуванням каскадного розпаду мігруючих частинок, хімічних реакцій, сорбційних процесів для кількісної оцінки їхнього впливу на основні дифузійні характеристики утримуючих елементів інженерних конструкцій і сховищ техногенних забруднень, промислових засипних фільтрів води, поверхневих природних об'єктів, тощо; побудова розрахункових схем та проєктування архітектури програмних комплексів для встановлення закономірностей масоперенесення домішок в елементах такого типу об'єктів відносяться до актуальних проблем математичного моделювання.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами. Дисертаційне дослідження проведено в рамках науково-дослідних робіт Інституту прикладних проблем механіки і математики ім. Я.С.Підстригача Національної академії наук України, зокрема автор був відповідальним виконавцем наукової теми: «Створення і дослідження математичних моделей процесів переносу у регулярних і нерегулярних дисперсних структурах, континуальних моделей наномеханіки і математичних методів обробки експериментальних даних» (№ ДР 0115U003566, 2015-2017), виконавцем таких наукових тем: «Моделювання процесів масопереносу в складних мережевих структурах для визначення оптимальних параметрів керування динамічними режимами» (№ ДР 0115U001883, 2016-2018); «Математичне та комп'ютерне моделювання зв'язаних процесів різної фізичної природи в об'єктах складної внутрішньої структури і топології та створення програмного забезпечення» (ДР 0117U006866, 2018-2020); «Побудова і дослідження математичних моделей тепломасопереносу в технологічних і природних системах та створення відповідного програмного забезпечення» (№ ДР 0121U100456, 2021-2023); «Розвиток числових методів для нелінійних інтегральних рівнянь типу Гаммерштейна, багатопараметричних спектральних задач і одновимірних та багатовимірних крайових задач математичної фізики» (№ ДР 0119U100607, 2019-2023); «Обґрунтування та застосування обчислювальних методів для розв'язання класичних та прикладних задач» (№ ДР 0117U001850, 2017-2021) і «Математичне та комп'ютерне моделювання процесів масоперенесення в стохастично неоднорідних шаруватих структурах, застосованих у військових об'єктах» (№ ДР 0123U101691, 2023-2025).

Мета і завдання дослідження. Метою роботи є розроблення підходів та методів математичного моделювання процесів масоперенесення в складних і складених тілах з урахуванням каскадного розпаду мігруючих частинок, хімічних реакцій, сорбційних процесів для кількісної оцінки їхнього впливу на основні дифузійні характеристики утримуючих елементів інженерних конструкцій і сховищ техногенних забруднень, промислових засипних фільтрів води, поверхневих природних об'єктів, тощо; побудова розрахункових схем та проектування архітектури програмних комплексів для встановлення закономірностей масоперенесення домішок в елементах такого типу об'єктів.

Для досягнення даної мети розв'язано такі завдання:

- формулювання основних співвідношень математичної моделі термомехано-гетеродифузії за каскадного розпаду дифундуючих речовин у багатокомпонентному середовищі з пастками; аксіоматизація базових положень континуально-термодинамічного модельного опису процесів перенесення;

- отримання часткових математичних моделей масоперенесення з ефективними характеристиками, які враховують каскадний розпад мігруючих частинок та особливості мікроструктури тіла;

- на основі розвинених моделей формулювання нових постановок крайових задач каскадного типу, коли концентрація частинок на певному кроці розпаду є джерелом маси розпадної речовини на наступному кроці, яка теж дифундує, сорбується, десорбується і розпадається;

- побудова математичної моделі конвективної дифузії забруднення у тришаровому фільтрі води та моделі механічного очищення та хімічного пом'якшення води в умовах невизначеності;

- розроблення системного підходу до математичного опису процесів перенесення в складних і складених системах за наявності експериментальних даних на одній з границь тіла;

- розвинення методу чисельного інтегрування подвійних інтегралів зі змінними верхніми межами і змінною областю інтегрування на основі застосування кубатур у внутрішній області і здійснення триангуляційного розбиття вздовж змінної межі, визначення похибки інтегрування розкладом інтеграла в ряд Тейлора з використанням теореми Барроу;

- проєктування архітектури та розроблення програмних комплексів для кількісного дослідження поширення домішкових речовин в тілах з мікроструктурою, що моделюють захисні шари технічних конструкцій, сховищ агресивних домішок, промислові фільтри, тощо.

Об'єкт дослідження - процеси масоперенесення в складних і складених тілах з урахуванням каскадного розпаду мігруючих частинок, хімічних реакцій та сорбційних процесів.

Предмет дослідження – математичні моделі процесів масоперенесення у складних і складених тілах з мікроструктурою, що супроводжуються процесами

сорбції-десорбції, каскадним розпадом або хімічними реакціями та встановлення невідомої граничної умови за експериментальними даними.

Методи дослідження – підходи і методи термодинаміки нерівноважних процесів, механіки суцільного середовища та аналітичної хімії, математичної фізики, математичного аналізу, математичної статистики, системного аналізу, теорії алгоритмів, чисельні методи та об'єктно-орієнтоване проектування.

Наукова новизна отриманих результатів:

- вперше в аксіоматизованому вигляді побудована математична модель взаємозв'язаних теплових, механічних і гетеродифузійних процесів та отримано часткові варіанти моделі, які враховують каскадний розпад мігруючих речовин;

- вперше сформульовано новий тип крайових задач масоперенесення каскадного типу, коли концентрація частинок на певному кроці розпаду є джерелом маси розпадної речовини на наступному кроці; розвинено метод розв'язання крайових задач каскадного типу на основі функцій Гріна;

- вперше запропоновано системний підхід до опису складних та складених систем, який ґрунтується на синтезі класичного підходу математичного моделювання процесів різної фізичної природи для добреструктурованої частини системи та некласичного статистичного підходу до моделювання невідомої граничної умови на основі експериментальних даних;

- вперше розроблений чисельний метод знаходження подвійних інтегралів зі змінними верхніми межами та змінною областю інтегрування, який враховує змінність сітки інтегрування, застосування кубатур у підобласті з квадратних елементів і триангуляційне розбиття вздовж змінної межі; встановлення похибки обчислень розкладом інтеграла в ряд Тейлора.

- вперше побудовано математичну модель конвективної дифузії домішкових частинок у пористих складених тілах та модель механічного очищення засипним фільтром води із хімічним пом'якшенням води в умовах невизначеності;

- вперше отримано функціональні залежності концентрацій розпадних речовин, потоків маси та кількості речовини, що пройшла через шар, в складних та складених тілах від фізико-хімічних та геометричних характеристик середовища.

Практичне значення отриманих результатів. У роботі сформульовано основні співвідношення математичної моделі термомеханогетеродифузії за каскад-

ного розпаду дифундууючих речовин у багатокомпонентному середовищі з пастками; отримано часткові математичні моделі масоперенесення, які враховують каскадний розпад мігруючих частинок та особливості мікроструктури тіла; розроблено системний підхід до математичного опису процесів перенесення в складних і складених системах за наявності експериментальних даних на одній з границь тіла; розвинутий метод чисельного інтегрування подвійних інтегралів зі змінними верхніми межами і змінною областю інтегрування; проведено проєктування архітектури та розроблення програмних комплексів для кількісного дослідження поширення домішкових речовин в тілах з мікроструктурою.

На основі розроблених методів, підходів, моделей, алгоритмів та розрахунків створено програмні засоби для:

- розрахунку експлуатаційних параметрів каркасно-насіпних фільтрів води й часових параметрів роботи промислових фільтрів води (використано у КП «Харківводоканал»);

- більш ефективного видалення органічних сполук, вилучення кольорово-забарвлених частинок, а також речовин, які впливають на запах та каламутність водних розчинів (використано у ДП «Угерський спиртзавод»);

- дослідження процесів очищення від забруднення у водному фільтрі проведено комп'ютерні обчислення щодо пом'якшення води, а саме вилучення надлишків іонів кальцію (використано Випробувальною лабораторією Товариства з додатковою відповідальністю «Хмельницькзалізобетон»);

- оцінки процесів гетеродифузії техногенних речовин за їх натурального розпаду, а саме розпаду органічних азотовмісних сполук, пестицидів та радіоактивних речовин (використано Департаментом екології та природних ресурсів «Львівська обласна державна адміністрація»);

Також результати дисертаційної роботи впровадженні в навчальний процес при розробці курсу “Аналітичні та чисельні методи досліджень” для студентів Національного університету «Львівська політехніка» за спеціальністю 113 “Прикладна математика”.

Особистий внесок здобувача. Усі теоретичні та практичні результати, що складають зміст дисертаційної роботи, отримані автором самостійно. У роботах, опублікованих у співавторстві, здобувачеві належать: побудова математичної моделі

термомеханогетеродифузії за каскадного розпаду мігруючих частинок [1, 2, 45, 76], отримання часткових варіантів моделі за умов локальної термодинамічної рівноваги між станами [9, 18, 41, 51], розвинення методів розв'язування крайових задач каскадного типу [10, 22, 48, 49, 54], побудова розв'язків таких задач [11, 26, 55, 69], розробка програмного забезпечення [46, 68, 70, 75], їхній числовий аналіз [23, 56, 59, 72] та комп'ютерне моделювання [17, 47, 67, 73], означення та дослідження функцій Гріна задачі гетеродифузії [15, 44, 50]; системний підхід до математичного опису процесів перенесення в складних і складених системах за наявності експериментальних даних на одній з границь тіла [27, 32], інтерполяція [38], апроксимація [3, 36] і екстраполяція [30, 57] даних щодо граничної умови; формулювання крайових задач конвективної дифузії у тришаровому фільтрі [6, 21, 40], розробка методу розв'язування [16, 35, 64] та отримання розв'язків [53], створення математичного забезпечення [4, 61, 62] та встановлення закономірностей процесів конвективної дифузії у тришаровому тілі за неідеальних умов контакту [8, 13, 19]; чисельне інтегрування подвійного інтеграла зі змінними верхніми межами та змінною областю інтегрування [7], встановлення оцінок [5] та похибки обчислень [43]; алгоритм розв'язання нелінійного функціонального рівняння на відрізку невідомої довжини [31, 34], критерії визначення часу насичення фільтра [28] та визначення оцінки часу виходу концентрації домішки на нижній границі тришарового пористого тіла на стаціонарний режим [37]; побудова математичної моделі конвективної дифузії забрудненого розчину у фільтрі води з пом'якшенням жорсткої води за експериментальних даних на границі [33], отримання рівняння масоперенесення сполуки одного з основних катіонів і реагента, що вступають у хімічну реакцію для математичного опису пом'якшення жорсткої води [24], рівняння масоперенесення частинок нерозчинної речовини, що утворилися в наслідок хімічної реакції [12], числовий аналіз функцій концентрації забруднюючих частинок, які мігрують у водному розчині [29, 65], та концентрації частинок, сорбованих на скелеті фільтра [14], встановлення впливу коефіцієнта швидкості конвективного перенесення та товщини фільтра на концентрацію частинок забруднення, що мігрують з розчином [60], і концентрації сорбованої речовини [39], числові експерименти для визначення закономірностей роботи якісного і не дуже якісного фільтрів води [63, 71], розроблення програмних

модулів пакетів Wodfil [77] та FlowRan [20, 53, 78]. У всіх опублікованих у спів-авторстві працях автору належать постановки задач.

Апробація результатів дисертації. Основні результати дисертації доповідались й обговорювались на міжнародних конференціях: IX Міжнародній науковій конференції «Математичні проблеми механіки неоднорідних структур» (Львів, 2014); XIII, XV та XVII міжнародних науково-технічних конференціях «Фізичні процеси та поля технічних та біологічних об'єктів» (Кременчук, 2014, 2016, 2018); 16-й, 17-й, 18-й, 19-й та 20-й міжнародних науково-технічних конференціях SAIT «Системний аналіз та інформаційні технології» (Київ, 2014, 2015, 2016, 2017, 2018); III, IV та V науково-технічних конференціях «Обчислювальні методи і системи перетворення інформації» присв. пам'яті проф. Б.О.Попова (Львів, 2014, 2016, 2018); III Міжнародному конгресі «Захист навколишнього середовища. Енергоощадність збалансоване природокористування» (Львів, 2014); Міжнародних наукових конференціях «Мікро- та нанонеоднорідні матеріали: моделі та експеримент» (Львів, 2015, 2018); XVI Міжнародній науково-методичній конференції «Безпека життя і діяльності людини – освіта, наука, практика» (Харків; 2015); Міжнародній науковій конференції «Сучасні проблеми математичного моделювання та обчислювальних методів» (Рівне, 2015); XXI Всеукраїнській науковій конференції «Сучасні проблеми прикладної математики та інформатики» (Львів, 2015); Міжнародних наукових конференціях Сучасні проблеми термомеханіки (Львів, 2016, 2021); Міжнародній науково-практичній конференції "Інформаційні технології та комп'ютерне моделювання" (Івано-Франківськ, 2016, 2017, 2018, 2020, 2021, 2024); XV міжнародній науково-практичній конференції «Безпека життя і діяльності людини – освіта, наука, практика» (Київ, 2016); IV та V міжнародних науково-практичних конференціях «Безпека життєдіяльності на транспорті та виробництві – освіта, наука, практика» (Херсон, 2017, 2018); Міжнародній конференції "Проблеми зняття з експлуатації об'єктів ядерної енергетики та відновлення навколишнього середовища" (Славутич, 2017); Семінарі «Сталий розвиток – погляд у майбутнє» (Львів, 2017); IV міжнародній науково-практичній конференції «Екологія і природокористування в системі оптимізації відносин природи і суспільства» (Тернопіль, 2017); Міжнародній науковій конференції «Сучасні проблеми механіки та математики» (Львів, 2018); XXIV всеукраїнській науковій конференції «Сучасні проблеми прикладної математики та інформатики» (Львів, 2018); «Сучасні проблеми математичного моделювання,

обчислювальних методів та інформаційних технологій», (Рівне, 2018); Науковій конференції «Сучасні тенденції розвитку української науки» (Переяслав-Хмельницький, 2018); International scientific and practical conference “Prospects for the development of technical sciences in EU countries and Ukraine” (Wloclawek, Republic of Poland, 2018); 10-й Міжнародній науковій конференції Математичні проблеми механіки неоднорідних структур (Львів, 2019); International scientific and practical conference “Technical sciences: history, the present time, the future, EU experience”(Wloclawek, Republic of Poland, 2019); VI, IV International scientific and practical conference Modeling, Control and Information Technologies (Рівне, 2019, 2023); International scientific conference MODERN SCIENTIFIC CHALLENGES AND TRENDS: (Warsaw, Republic of Poland, 2019); IV International Scientific and Practical Conference Prospects And Achievements in Applied and Basic Sciences (Budapest, Hungary, 2021); International Scientific and Practical Conference (Paris, Republic of France, 2022).

В повному обсязі робота доповідалася на семінарі Інституту прикладних проблем механіки і математики ім.Я.С.Підстригача НАН України, на семінарі відділу числових методів математичної фізики Інституту прикладних проблем механіки і математики ім.Я.С.Підстригача НАН України, на семінарі кафедри обчислювальної математики та програмування НУ «Львівська політехніка», Тернопільському національному технічному університеті ім. Івана Пулюя.

Публікації. За темою дисертації опубліковано 78 наукових праць, у тому числі: 2 монографії, 2 розділи колективних монографій, 8 статей, що індексуються науково-метричними базами Scopus та Web of Science, 14 статей у фахових наукових періодичних виданнях України та закордоном, 4 матеріали доповідей на конференціях, що індексуються науково-метричною базою Scopus, 46 матеріалів представлено на міжнародних і національних конференціях, семінарі та конгресі, 2 авторські свідоцтва, 5 праць опубліковано без співавторів.

Структура та обсяг роботи. Дисертація складається з анотації, вступу, семи розділів, висновків, 3 додатків, списку використаних джерел із 280 найменувань, містить 132 рисунки, 31 таблицю. Повний обсяг дисертації складає 393 сторінок, основний зміст викладено на 305 сторінках.

РОЗДІЛ 1

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ ПЕРЕНЕСЕННЯ В СКЛАДНИХ ТА СКЛАДЕНИХ ТІЛАХ. ОГЛЯД ЛІТЕРАТУРИ

Одним із сучасних наукових методів дослідження композитних матеріалів та багатофазних структур, інженерних споруд, фізико-хімічних явищ та процесів, які протікають в елементах земних екосистем, є математичне моделювання, основи, якого закладені в роботах О.А.Самарського та Г.І.Марчука [211, 247]. При цьому дослідження поділяються на такі етапи: побудова математичних моделей, які з достатньою повнотою описують процеси, що розглядаються; постановка крайових задач математичної фізики; розробка методів знаходження і побудова розв'язків сформульованих задач; створення програмного забезпечення та аналіз отриманих результатів.

Розроблено різні підходи до формулювання математичних моделей. За феноменологічним підходом немає можливості адекватно враховувати взаємовпливи процесів різної фізичної і хімічної природи. Для вирішення цієї проблеми застосовуються підходи термодинаміки нерівноважних процесів, що розвинені в роботах С.П. де Гроота, В.А.Дея, П.Мазура, І.Пригожина, Л.Г.Сатторпа та інших [170, 171, 239]. Їхнє застосування до математичного моделювання твердих деформівних тіл наведено у працях О.О.Ільюшина, О.Д.Коваленка, В.Новацького, Я.С.Підстригача, Л.І.Седова та інших вчених [60, 258]. На цій же основі у роботах Я.Й.Бурака, О.Р.Гачкевича, В.Г.Карнаухова, І.Т.Селезова, Р.Ф.Терлецького, А.Ф.Улітка, Є.Я.Чаплі, В.Ф.Чекуріна та інших розвинуто теорію зв'язаних фізико-механічних полів у твердих деформівних системах [22, 24, 74, 79]. Моделі процесів у твердих розчинах, де враховуються локальні зміни стану складових компонент, побудовані в працях Е.С.Айфантіса, Я.Й.Бурака, В.В.Гафійчука, Дж.М.Хілла, Є.Я.Чаплі, О.Ю.Чернухи та інших [72, 73, 111].

Математичне моделювання процесів перенесення, зокрема фільтрації, у неоднорідних структурах знайшло свій розвиток в роботах А.Я.Бомби, В.М.Булавацького, А.П.Власюка, В.С.Дейнеки, Л.М.Журавчак, В.І.Лаврика, І.І.Ляшка, С.І.Ляшка, П.М.Мартинюка, Г.Є.Мистецького, М.Р.Петрика, Я.Г.Савули, А.П.Сафоника, І.В.Сергієнка, В.В.Скопецького та інших [27, 130, 132, 226, 228, 256].

Математичний опис процесів масоперенесення, фільтрації, конвективної дифузії забруднення такого як радіонукліди, нітрати, нітрити та інші небезпечні хімічні сполуки в ґрунті є вкрай актуальною проблемою, а їх математичному моделюванню наведено в дослідженнях таких вчених як Дж.Бер, Р.Біббі, В.А.Борзілов, П.Боссев, Ф.Дж.Гарбуйо, В.С.Дейнека, Г.Кірчнер, А.В.Конопльов, В.І.Лаврик, В.І.Лялько, І.І.Ляшко, С.І.Ляшко, Г.І.Марчук, І.В.Сергієнко, В.В.Скопецький, Л.Фодор, Ж.Фрід, Є.Я.Чапля,

А.Х.-Д.Ченг, А.-Д.Чітімус, В.М.Шестопалов, та багатьох інших [105, 119, 120, 133, 134, 176, 177, 211, 278].

Крайові задачі перенесення тепла і маси в складених тілах з різними типами контактних умов розглядалися багатьма вченими, зокрема, М.М.Беляєвим, Я.Й.Бураком, Б.В.Герою, Г.С.Кітом, Л.А.Коздобою, Р.М.Кушніром, А.В.Ликовим, Б.Я.Любовим, Я.С.Підстригачем, В.С.Поповичем, А.І.Райченком, А.А.Рядном [23, 209, 235].

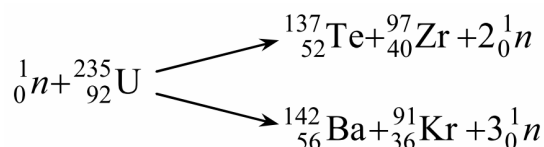
1.1. Аналіз фізико-механічних процесів, що супроводжуються каскадними (ланцюговими) реакціями

1.1.1. Каскадний радіоактивний розпад

Катастрофічні аварії на атомних станціях у Чорнобилі в 1986 р. та Фукусімі у 2011 р. поставили завдання всебічного вивчення поведінки та поширення техногенного забруднення, і в першу чергу радіонуклідів, в об'єктах природного середовища [260]. При цьому відповідні фізико-механічні процеси супроводжуються каскадними (ланцюговими) ядерними реакціями, які часто є послідовністю поодиноких ядерних реакцій для елементів, що з'явилася як продукти реакції на попередньому кроці [173, 191, 242].

Радіоактивний розпад речовини – це зміна складу нестабільних атомних ядер. Ядра спонтанно розпадаються на ядерні фрагменти та елементарні частинки (продукти розпаду). Частина елементів має хоча би один стабільний (не радіоактивний) ізотоп. У свою чергу радіоактивними є всі елементи з порядковим номером після 82 і нестабільні ізотопи легших елементів (від ^{12}C до ^{32}S) [117, 196]. Ядра, які виникають в наслідок радіоактивних перетворень, самі можуть виявитись радіоактивними, вони розпадаються зі швидкістю, яка характеризується їхньою сталою розпаду. Нові продукти розпаду, в свою чергу, можуть бути радіоактивними тощо. В результаті виникає цілий ряд (каскад) радіоактивних перетворень [197].

В загальному випадку ядро урану-235 можна розщепити багатьма способами. Зокрема два різні способи розщеплення ядра наведені нижче



Серед продуктів ділення урану-235 виявлено більше 200 різних ізотопів 35 хімічних елементів, причому більшість з цих ізотопів є радіоактивними і є небезпечними для людини та навколишнього середовища.

Як приклад (рис. 1.1) можна навести варіант ділення ядра урану-235.

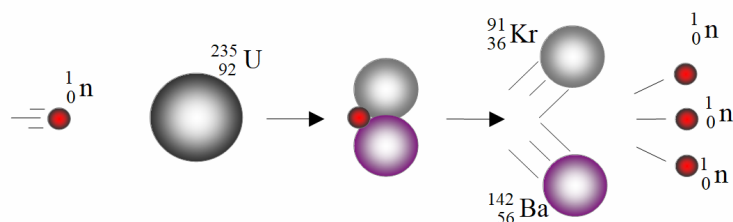


Рис. 1.1. Варіант ділення ядра урана-235

При діленні ядра урану утворюється 2-3 нових нейтрони, які у свою чергу можуть приймати участь у взаємодії з ядрами, викликаючи їхнє ділення, що призводить до ланцюгових реакцій (рис. 1.2) [195].

Ще одним прикладом ділення хімічних елементів можна навести схему отримання промислового плутонію. Для цього уран-238 опромінюють в ядерних реакторах, де він послідовно перетворюється в уран-239, далі непуній-239 і плутоній-239 [191]:

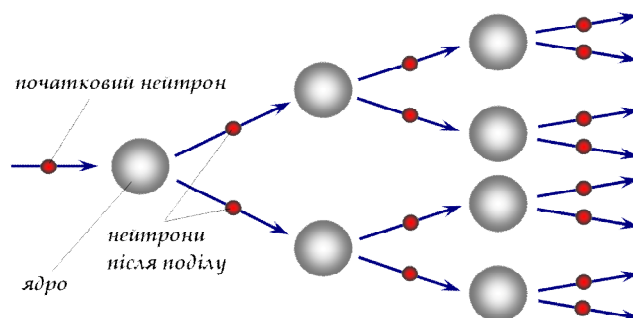
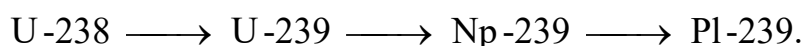
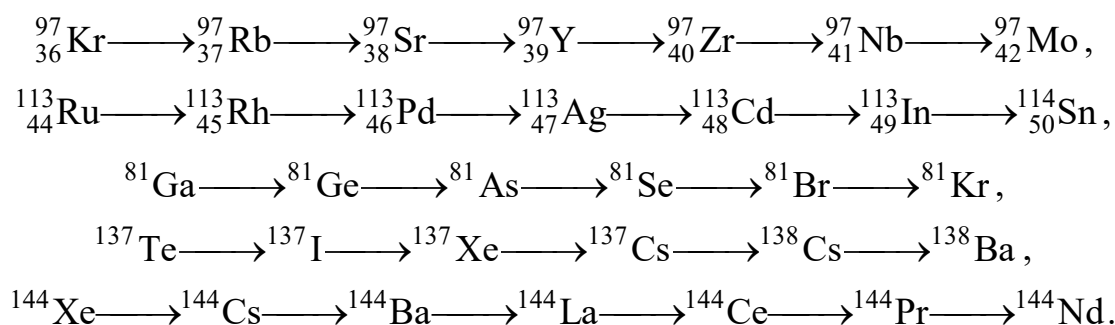


Рис. 1.2. Ланцюгова реакція ядерного ділення, в якій при кожному етапі ділення утворюються 2 нейтрони

У випадку інших радіонуклідів відомі, зокрема, такі схеми їхнього каскадного розпаду [184]:



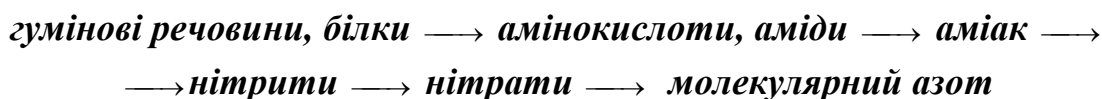
Радіоактивний розпад можливий, коли він є енергетично вигідним, тобто повинен супроводжуватися виділенням енергії. Умовою цього є перевищення маси M вихідного ядра суми мас m_i продуктів розпаду: $M > \sum m_i$. Ця умова є не обхідною, проте не завжди достатньою. Розпад може бути заборонений іншими законами збереження – закон збереження імпульсу, електричного заряду, баріонного заряду тощо [186].

Радіоактивний розпад характеризується часом життя радіоактивного ізотопу, типом випромінюваних частинок та їх енергіями. Основними типами радіоактивного розпаду є α -розпад (випромінювання атомним ядром α -частинки); β -розпад (випромінювання атомним ядром електрона та антинейтрино, позитрона і нейтрино, поглинання ядром атомного електрона з випромінюванням нейтрино); γ -розпад (випромінювання атомним ядром γ -квантів); спонтанне ділення (розпад атомного ядра на два уламки) [186].

У результаті розпаду радіоактивних речовин можуть виникати як більш, так і менш радіоактивні речовини. Так в результаті розпаду плутонію-241 з періодом піврозпаду 14.4 роки утворюється дуже токсичний америцій-241 з періодом піврозпаду 432.6 роки. В той же час результатом розпаду дуже шкідливого стронцію-90 з періодом піврозпаду 28.8 років є радіоактивний ітрій-90 з періодом піврозпаду 64 години.

1.1.2. Каскадні хімічні реакції

Каскадні перетворення достатньо поширені серед звичайних хімічних реакцій, часто деградації техногенних забруднень, де в якості частинок з невикористаними зв'язками виступають вільні атоми або радикали [208, 273, 275]. Поява в середовищі необхідної частинки викликає каскад відповідних реакцій, який продовжується до втрати частинки-носія реакції [2, 33, 43, 44, 52, 54, 56, 257]. За таким механізмом протікають реакції крекінга, горіння, полімеризації та низка інших. Наприклад, розпад органічних азотвмісних речовин у ґрунтах в загальному вигляді подається наступною схемою [257]:



Приклад розрахункової тривимірної моделі гумінової кислоти наведено на рис. 1.3 [57].

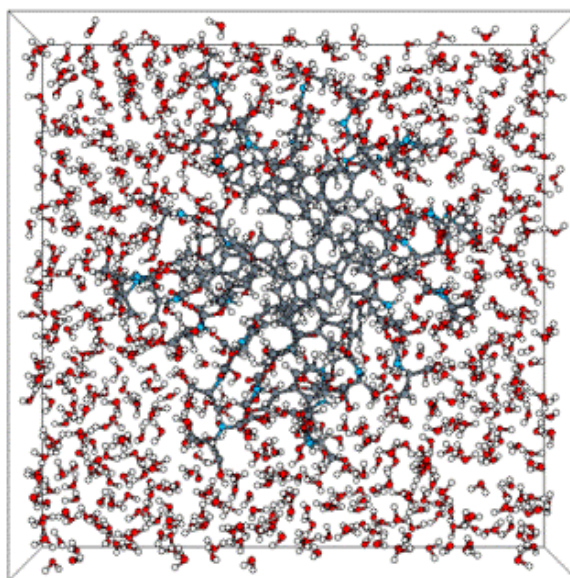
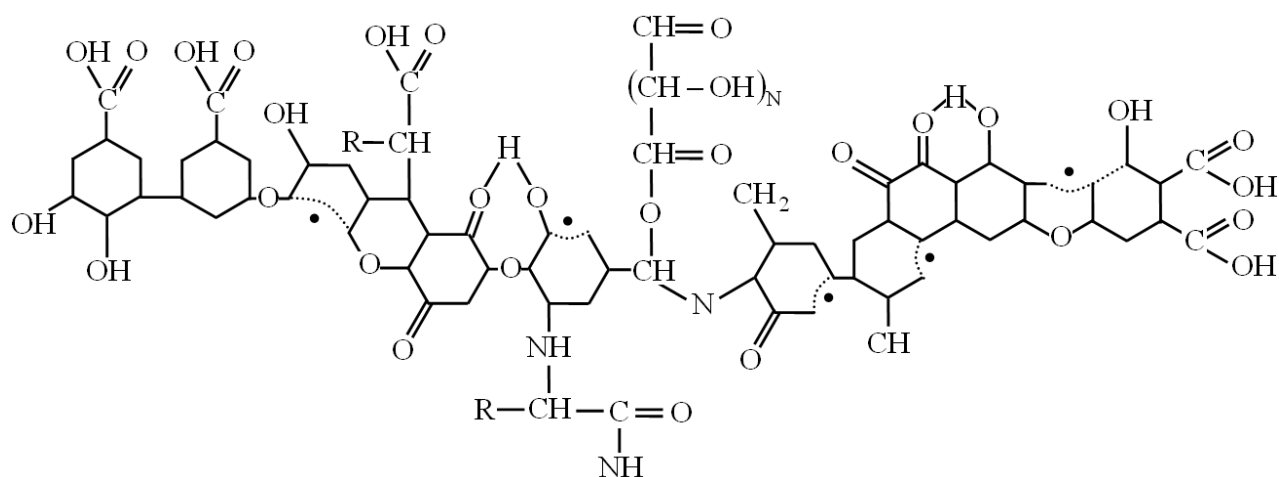
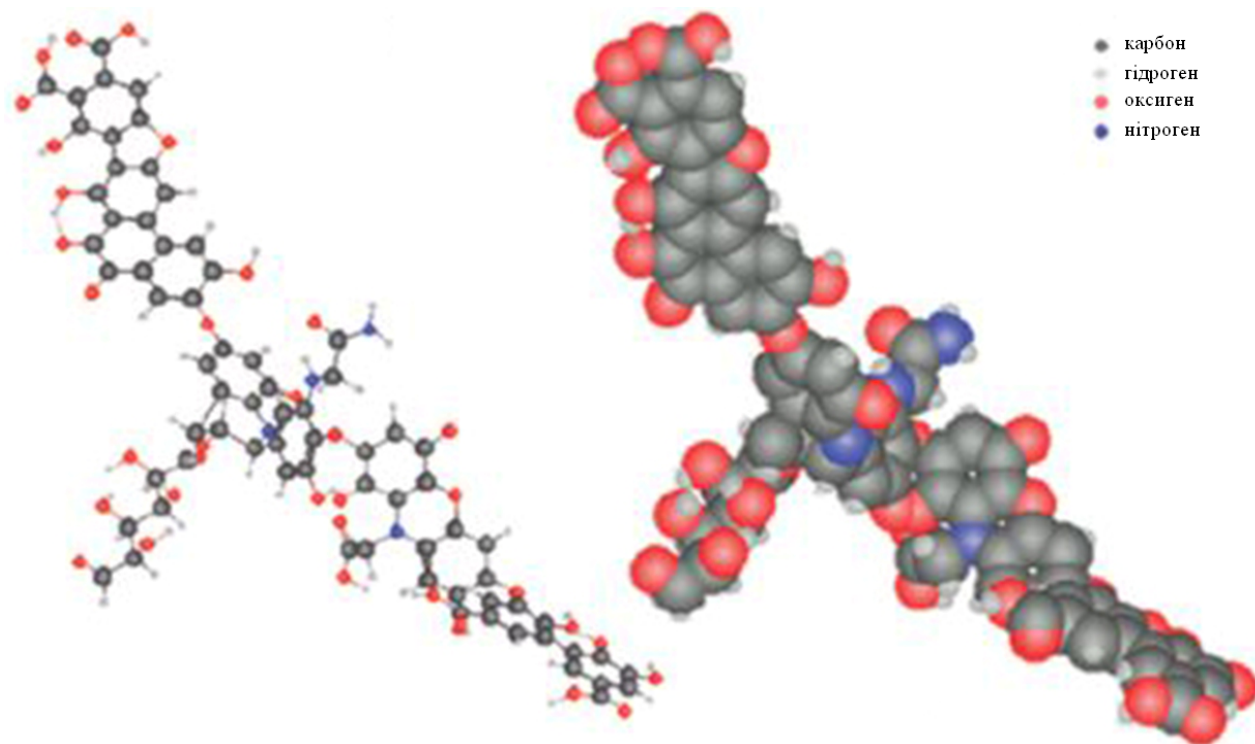
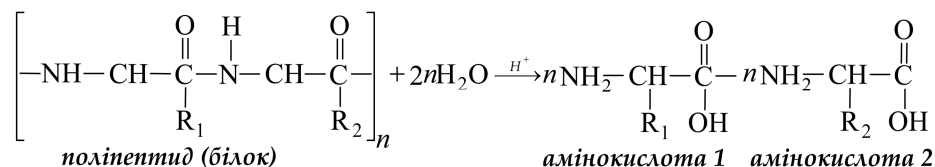


Рис. 1.3. Модель гумінової кислоти [57]

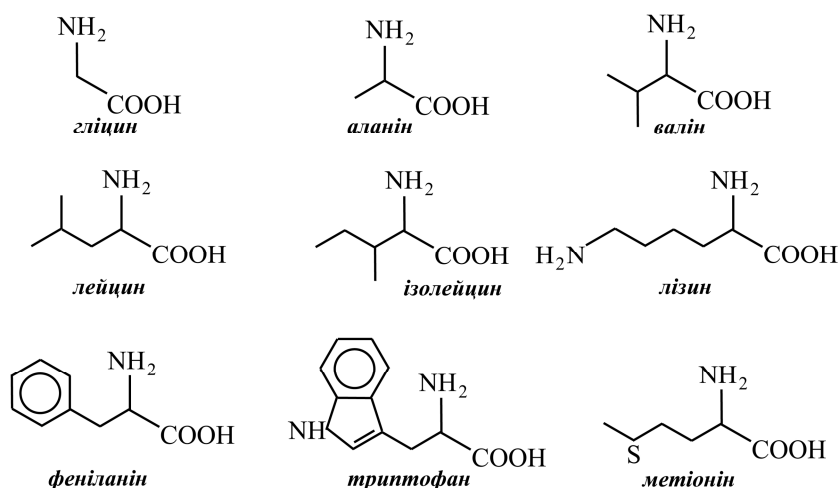
При цьому гіпотетична структура фрагменту гумінової кислоти $C_{308}H_{335}O_{90}N_5$ має вигляд [139, 172, 251]



Атомну формулу хімічної реакції перетворення білків на прикладі поліпептидів у амінокислоти можна записати наступним чином [36]

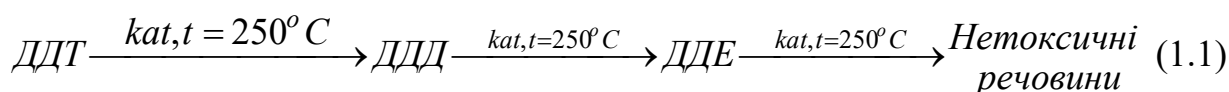


В складі будь-якої амінокислоти знаходяться аміно група NH_2 та карбоксильна група COON . Приклади амінокислот – структурних блоків білків схематично можна подати так [1]



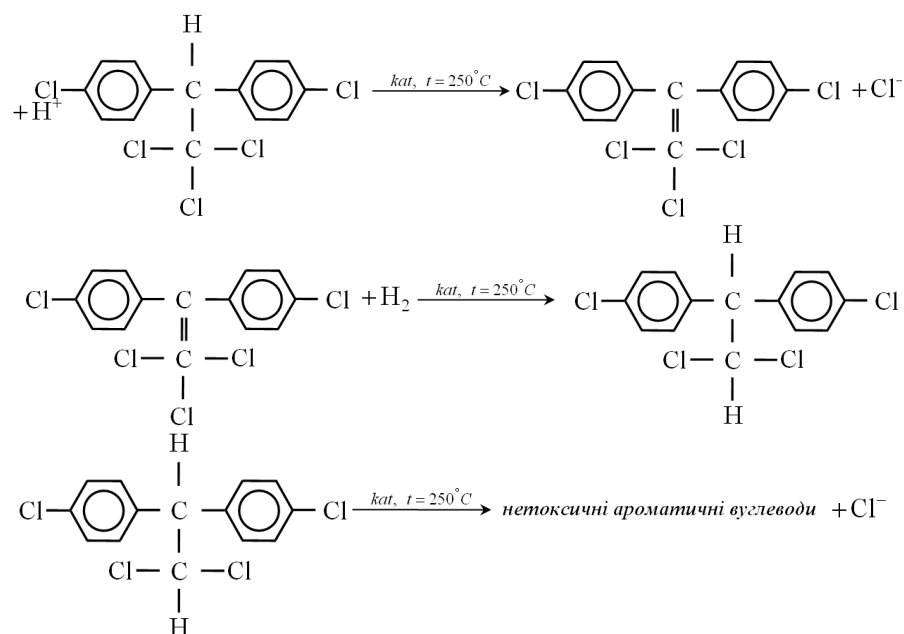
Нижче наведемо молекули та структурні формули аміака, нітрата, нітрита і молекулярного азоту [136]

Прикладом розпадних токсичних забруднень у природному середовищі можуть бути пестициди, гербіциди, інсектициди, а також радіонукліди. Так, наприклад, ДДТ розкладається з відщепленням HCl і утворенням речовини, що володіє менш вираженими інсектицидними властивостями – ДДЕ – дихлордифенілдіхлоретилену [106]. Схема термokatалітичного розпаду дихлордифенілтрихлорметилметану (ДДТ) є такою [214, 224]:



тут ДДД – дихлордифенілдіхлоретан, ДДЕ – дихлордифенілдіхлоретилен.

З використанням класичних хімічних формул схема (1.1) має вигляд



Зазначимо, що за одними даними період піврозпаду ДДТ у ґрунтах складає 12–16 років [214], а за іншими – 15–20 років [263].

1.1.3. Каскадний механізм та його стадії хімічних реакцій

Каскадні реакції відносяться до складних реакцій і можуть складатися з багатьох елементарних стадій. При цьому каскадні реакції завжди мають три стадії: зародження ланцюга (каскаду); продовження (розвиток) ланцюга; обрив ланцюга. Зародження ланцюга у тепловій реакції відбувається в результаті диссоціації молекул при нагріванні. У фотохімічних реакціях зародження ланцюга відбувається при поглинанні кванта світла. На стадії розвитку ланцюга утворюються молекули продуктів реакції і одночасно з'являється нова активна частинка, яка здатна продовжити ланцюг. На стадії обриву відбувається зникнення (деактивація) активної частинки.

М. Боденштейн запропонував принцип стаціонарної концентрації проміжних продуктів ланцюгових реакцій, за яким швидкість генерування активних частинок на стадії зародження дорівнює швидкості їх зникнення на стадії обриву [131]. Тобто, якби швидкість обриву була більшою швидкості зародження ланцюгів, кількість активних частинок зменшилася би до нуля, і реакція сама би зупинилася. У випадку превалювання швидкості зародження, кількість активних частинок зростала би з часом, що у певний момент призвело би до вибуху [28].

Найбільш енергомісткою стадією ланцюгового процесу є реакція ініціювання, тобто первинного утворення активних частинок. При цьому при радіаційно-хімічному або фото ініціюванні ланцюгова реакція може протікати при відносно низьких температурах, оскільки енергії активації реакцій продовження ланцюга зазвичай є невеликими. У випадку термічного ініціювання, тобто реакції гомолітичного розриву зв'язку необхідно підвищення температури на десятки або сотні градусів [269].

Основною ознакою ланцюгових реакцій є перевищення швидкості реакцій над швидкістю ініціювання. Їх відношення характеризує середню довжину ланцюга ν . Середній час розвитку ланцюга, тобто характерний час виходу реакції на стаціонарний режим, визначається як $\tau_{\text{ланцюга}} = \nu \tau_{\text{ланки}}$, де $\tau_{\text{ланки}}$ - час розвитку ланки ланцюга [47, 269]. Цей час дорівнює сумі характерних часів всіх реакцій циклу продовження ланцюга (ланки ланцюга). Час нестаціонарного протікання реакції зазвичай складає долі секунди, тобто набагато менше характерного часу реакції [269].

Каскадні реакції поділяються на аніонні, катіонні, радикальні, перициклічні, фотохімічні, каталіз перехідними металами, окислювальні та відновлювальні, а та-

кож ферментативні [139]. У такій градації за основу взятий механізм кожної стадії, на якій виникають нові зв'язки [28, 184].

Так, наприклад, початковою стадією аніонної каскадної реакції є атака аніона (карбаніон, алкоголят або алкоксид) або незарядженого нуклеофіла (амін, спирт) на електрофільний центр. Утворення хімічного зв'язку відбувається з виникненням нової аніонної функції, яка може піддаватися поодальшим перетворенням. Типові представники – це анелювання за Робінсоном, подвійна реакція Міхаеля, циклізація Пікте-Шпенглера, реакція Кневенагеля [174, 271, 278].

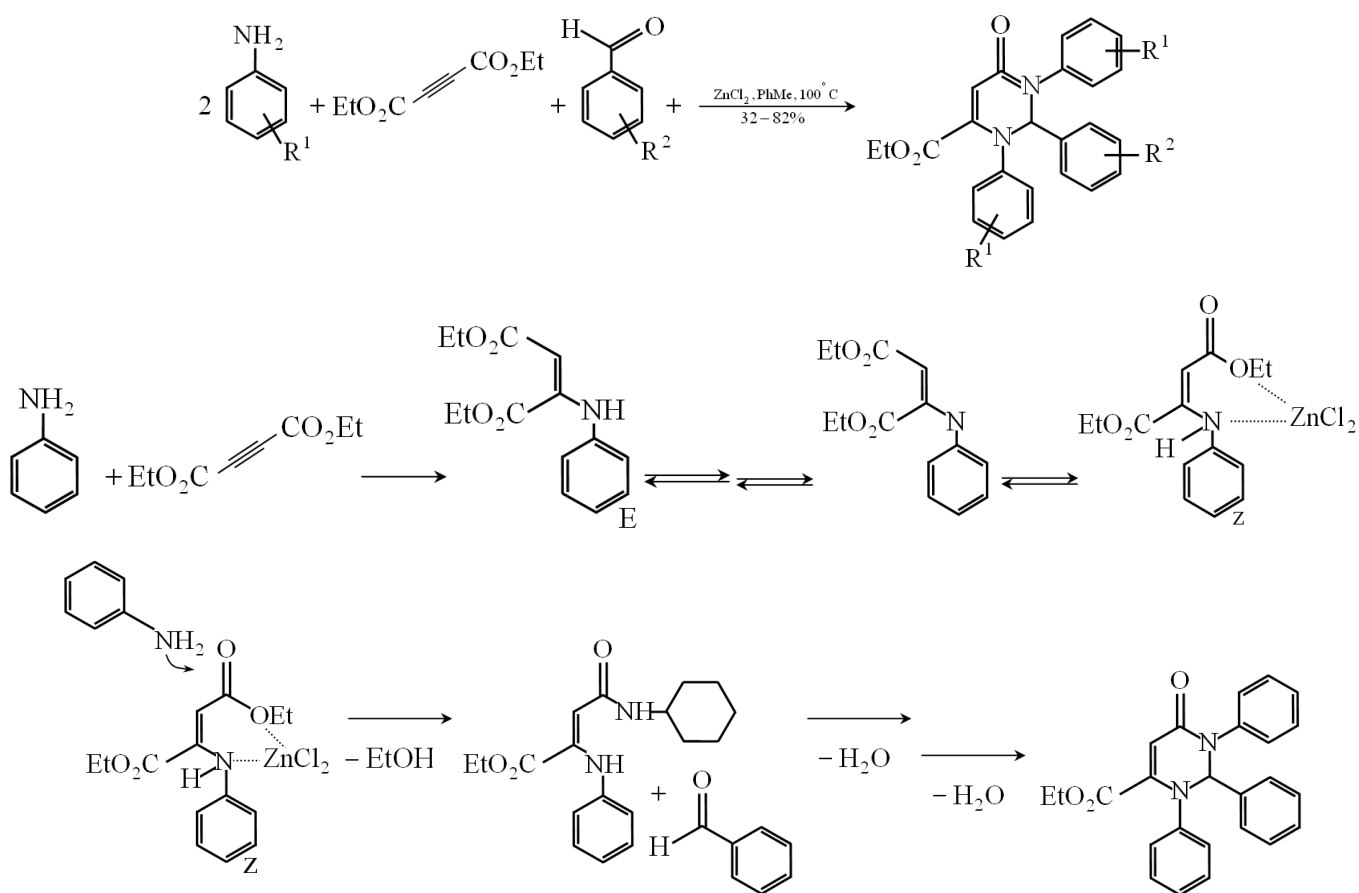
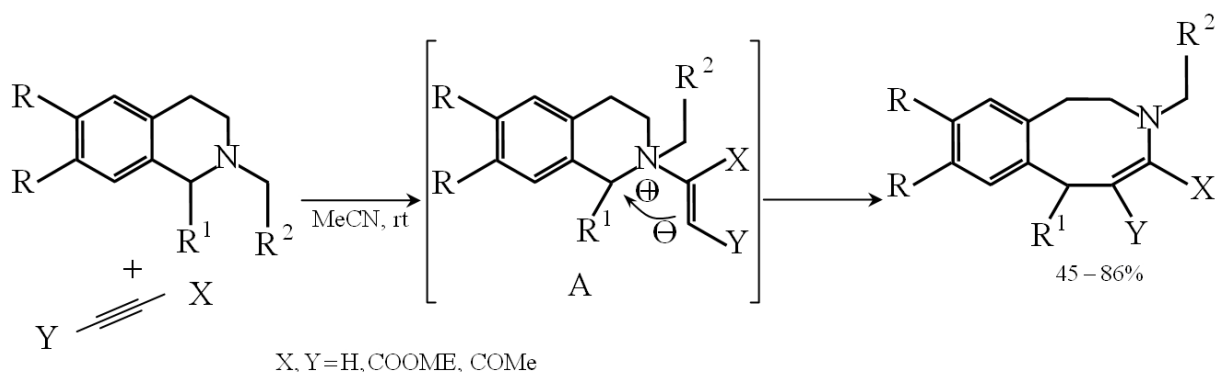


Схема синтезу (гетеро) анелюваних азочинів з відповідних тетрагідропіридинів та активованих алкінів має вигляд [271]



До типу катіонних каскадних реакцій відносять реакції, в яких на ініційованій стадії утворюються карбокатиони. Типовим прикладом є реакція алкена, циклоалкана або оксирана з протонною кислотою або кислотою Льюїса, відщеплення молекули води від спирту або молекули спирта від ацеталю, а також приєднання протону до карбонільних з'єднань [219, 243].

До радикального типу відносять реакції, в яких на ініційованій стадії утворюються радикали. Для радикальних процесів характерна толерантність до активних функціональних груп (наприклад, вільних гідроксильних та аміно-груп), а також складно ефірних та кетонних функцій. Як правило, вільнорадикальні доміно-процеси характеризуються послідовністю внутрішньо молекулярних стадій. Основна вимога для ефективного протікання реакції – швидкість кожної індивідуальної стадії повинна бути вищою ніж швидкість обриву ланцюга [252].

Зазначимо, що каскадні реакції використовуються у нафтопереробній галузі. Так, для переробки важких нафтових залишків і дистиляційної сировини використовують обладнання термічного крекінгу. На відміну від атмосферної та вакуумної перегонки, за яких нафтопродукти отримують фізичним розділенням нафти на відповідні фракції, котрі відрізняються за температурами кипіння, термічний крекінг є хімічним процесом, що відбувається під впливом високої температури і тиску. При термічному крекінгу одночасно протікають реакції розпаду, ущільнення і перегрупування.

В органічному синтезі широко розповсюджені реакції, які протікають за ланцюговим механізмом. Ланцюговий автокаталітичний характер цих реакцій пояснюється тим, що в їх ході здійснюється стала регенерація активних частинок процесу – вільних радикалів, концентрація яких визначає його швидкість.

Реакції полімеризації молекул ненасичених або циклічних мономерів зазвичай підпорядковуються законам ланцюгових процесів і називаються ланцюговою полімеризацією. У результаті ланцюгової полімеризації енергія, що вивільняється в результаті одного акту реакції, не розсіюється в оточуюче середовище, а передається іншій молекулі і збуджує новий акт реакції.

Іншим прикладом ланцюгового процесу є процес ланцюгової поліконденсації. Високомолекулярні продукти поліконденсації, які утворилися, можуть вступати в реакції з радикалами так само, як асфальтени. Продуктом реакції в основному є зшитий тривимірний полімер – карбоїди. Незшиті макромолекули речовини, що екстрагуються сірководнем з коксу – карбени. Різниця у кінетиці розкладу нафтових нативних асфальтенів і асфальтенів вторинного походження викликана різними механізмами обриву ланцюгів.

Каскадні реакції зустрічаються і у газозфазних системах [113]. До ланцюгових реакцій відносяться багато атмосферних та стратосферних процесів, наприклад, окислення метана та NO, утворення H_2SO_4 у хмарних каплях, які містять HSO_3^- (кислотні дощі), розклад озону під дією OH, HO_2 , NO, NO_2 , Cl, ClO. Зокрема, Cl і ClO утворюються з хладонів, і їх наявність вражається одним з основних факторів, які призводять до зменшення концентрації стратосферного озону.

Якщо на кожній стадії реакції утворюється лише одна частинка-носій, то така ланцюгова реакції є нерозгалуженою. При цьому нерозгалужена ланцюгова реакція не може призвести до значного енерговиділення.

1.1.4. Кінетичні закономірності нерозгалужених ланцюгових реакцій

У початковий момент часу концентрація носіїв ланцюга в реагуючій хімічній системі дорівнює нулю. При введенні ініціатора або при енергетичному впливі на систему починається утворення носіїв ланцюга зі швидкістю ініціювання w_i . Одночасно відбуваються реакції продовження ланцюга, які характеризуються відносно невеликими енергіями активації, і практично безактиваційним процесом обриву ланцюга на стінці або в об'ємі ємності. Якщо реакції на стінці є основним каналом ініціювання та обриву ланцюга, то швидкість ланцюгової реакції не залежить від відношення площі поверхні ємності S до його об'єму V , як і у тому випадку, якщо ініціювання та обрив ланцюга відбувається в об'ємі. В інших випадках швидкість ланцюгової реакції залежить від відношення S/V . Зазвичай одна з ланок-реакцій ланцюга характеризується більшою (у порівнянні з іншими ланками) енергією активації і є швидкість визначальною (лімітуюча стадія) [224, 241]. Її швидкість дорівнює швидкостям всіх інших реакцій циклу продовження ланцюга w_{pr} , проте концентрація радикалів, що беруть участь у лімітуючій стадії є найбільшою.

Участь носіїв ланцюга у циклі його продовження не впливає на їх концентрацію у системі, оскільки у циклі продовження ланцюга відбувається їх регенерація. Кількість носіїв ланцюга n в одиниці об'єму у кожний момент часу t в найпростішому випадку обриву на стінці можна подати звичайним диференціальним рівнянням

$$\frac{dn}{dt} = w_i - gn, \quad (1.2)$$

де g - так званий фактор обриву ланцюга, який дорівнює константі швидкості k_0 обриву ланцюга на стінці.

З рівняння (1.2) випливає:

$$n = (w_i/g)[1 - e^{-gt}] . \quad (1.3)$$

З отриманого співвідношення (1.3) випливає, що $n = 0$ при $t = 0$ і з часом n досягає значення w_i/k_0 (стаціонарний режим). Швидкість ланцюгової реакції w пропорційна n і зростає від $w = 0$ до значення, яке визначається виразом:

$$w = k_{pr}[A]w_i/k_0 , \quad (1.4)$$

де $[A]$ - концентрація реагенту, що піддається перетворенню за каскадним механізмом, k_{pr} - константа швидкості продовження ланцюга.

Як правило, розрізняють два режими протікання процесу: нестационарний, що відповідає зростанню швидкості w , і стаціонарний, за якого величини n і w мають сталі значення. Характерні значення константи швидкості обриву ланцюга k_0 - десятки c^{-1} , тому згідно з (1.3) період нестационарності зазвичай характеризується долями секунди. Якщо довжина ланцюга ν є малою, у виразі для швидкості реакції необхідно врахувати швидкість витрати реагентів на стадії ініціювання та швидкість можливого утворення продуктів на стадії обриву ланцюга. Проте, як правило, число ν складає $10 \div 10^3$, і швидкість ланцюгової реакції практично дорівнює швидкості кожній з реакцій продовження ланцюга, згідно з виразом (1.4).

При введенні інгібітору In виникає додатковий канал знищення носіїв ланцюга (константа швидкості k_{In}). Тоді швидкість ланцюгової реакції приймає значення \bar{w} :

$$\begin{aligned} \bar{w} &= k_{pr}[A]w_i/(k_0 + k_{In}[In]), \\ w/\bar{w} &= 1 + k_{In}[In]/k_0 , \end{aligned} \quad (1.5)$$

де $[In]$ - концентрація інгібітору.

Якщо швидкість k_{In} невелика, то для помітного уповільнення ланцюгової реакції необхідне додавання інгібітору в такій концентрації $[In]$, щоб значення $k_{In}[In]$ і k_0 були співвимірні. Витрата інгібітору буде відбуватися зі швидкістю, меншою ніж w_i , а оскільки початкова концентрація $[In]_0$ є суттєвою величиною, то її зменшення у процесі реакції може бути невеликим. Відповідно реакція буде протікати тривалий час зі швидкістю рівною або близькою до значення, яке визначається виразом (1.5), де $[In] \approx [In]_0$. Якщо ж константа швидкості k_{In} є настільки великою, що вже при малих $[In]$ справджується нерівність $k_{In}[In] \gg k_0$, тоді на протязі деякого часу (поки виконується ця нерівність) швидкість утворення продукту буде нехтовно малою у порівнянні зі швидкістю ланцюгової реакції w за відсутності інгібітору. По мірі витра-

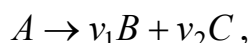
чання In , що протікає практично зі швидкістю ініціювання w_i , швидкість ланцюгової реакції у присутності інгібітору \bar{w} достатньо швидко досягне значення w .

Розрахунок швидкості ланцюгових реакцій у загальному випадку виконується з допомогою метода квазістаціонарних концентрацій [113]. Цей метод застосовний до частинок, концентрація яких через високу реакційну здатність є на багато порядків меншою ніж концентрація реагентів. Для кожного з носіїв ланцюга R^* складають диференціальне рівняння, яке прирівнює похідну $d[R^*]/dt$ до суми швидкостей усіх реакцій, в яких R^* утворюється і знищується.

Інший метод розрахунку швидкості використовують для ланцюгових реакцій з довжинами ланцюга $\nu \gg 10$, коли можна знехтувати можливим вкладом швидкостей ініціювання та обриву ланцюга у загальну швидкість реакції, тобто у тих випадках, коли загальна швидкість w дорівнює швидкості w_{pr} реакцій циклу продовження ланцюга (вини всі мають однакову швидкість) і $w_i = w_0$. Стаціонарну концентрації носіїв ланцюга, які приймають участь в реакціях обриву, визначають з кінетичного рівняння $w_i = w_0$ і потім розраховують w [113].

Щодо швидкості радіоактивного розпаду, то радіоактивний розпад є результатом внутрішньоядерних процесів і не пов'язаний із взаємодією між різними ядрами. Тому реакція радіоактивного розпаду описується кінетичним рівнянням першого порядку [212].

Для рівняння реакції першого порядку в загальному вигляді



де ν_i ($i = 1, 2$) – стехіометричні коефіцієнти відповідних речовин,

кінетичне рівняння згідно з основним постулатом хімічної кінетики [212] має вигляд

$$\frac{dx}{dt} = k(a - x), \quad (1.6)$$

де a - кількість молів речовини A у початковий момент часу, x - кількість молів речовини A , що перетворилася до моменту часу t , k - константа швидкості реакції першого порядку розмірності $[c^{-1}]$.

Розділюючи змінні у рівнянні (1.6) та інтегруючи в межах від 0 до x і від 0 до t , одержимо

$$\int_0^x \frac{d\xi}{a - \xi} = k \int_0^t dt.$$

Звідки знаходимо

$$\ln \frac{a}{a-x} = kt \quad \text{або} \quad k = \frac{1}{t} \ln \frac{a}{a-x}. \quad (1.7)$$

Оскільки формула (1.7) містить відношення кількостей (або концентрацій) a та $(a-x)$, значення k не зміниться, якщо це відношення замінити відношенням числа молекул або інших величин, пропорційних числу молей. Отже, формулу (1.7) можна записати у вигляді

$$k = \frac{1}{t} \ln \frac{a}{a-x} = \frac{1}{t} \ln \frac{N_0}{N} = \frac{1}{t} \ln \frac{c_0}{c}. \quad (1.8)$$

Тут c_0 , c - початкова і біжуча концентрації речовини A , N_0 , N - початкове і біжуче число молекул речовини A .

Потенціювання рівняння (1.8) призводить до експоненціальної залежності від часу кількостей речовини A , що прореагувала і не прореагувала:

$$x = a(1 - e^{-kt}), \quad a - x = e^{-kt}. \quad (1.9)$$

Ці дві криві мають точку перетину $x = a/2$. Час $\tau_{1/2}$, за який прореагує половина вихідної кількості речовини A , називається часом напівперетворення або часом піврозпаду речовини A у випадку реакцій першого порядку.

Якщо в рівнянні (1.9) покласти $t = \tau_{1/2}$ і $c = c_0/2$, то одержимо $\tau_{1/2} = \ln 2/k$. Звідки випливає, що в реакціях першого порядку час піврозпаду не залежить від кількості (концентрації) вихідної речовини.

1.1.5. Радіоактивні елементи в ґрунтах

Радіоактивність ґрунтів обумовлена вмістом у них радіонуклідів. При цьому розрізняють природну і штучну (техногенну) радіоактивності [203].

Природна радіоактивність викликана природними радіоактивними ізотопами, які завжди у тих чи інших кількостях знаходяться в ґрунтах та ґрунтоутворюючих породах. Значна частина природних первинних радіонуклідів представлена важкими елементами з порядковими номерами $Z > 82$. Вони утворюють 3 радіоактивні сімейства (табл. 1.1).

Таблиця 1.1. Природна радіоактивність деяких елементів

Назва сімейства	Родоначальник сімейства	Період напіврозпаду (роки)	Число радіоактивних ізотопів, що послідовно розпадаються	Кінцевий елемент (стабільний ізотоп свинцю)
Урана	^{238}U	$4.5 \cdot 10^9$	14	^{206}Pb
Актиноурана (актинія)	^{235}U (^{235}Ac)	$7.13 \cdot 10^8$	11	^{207}Pb
Торія	^{232}Th	$1.39 \cdot 10^{10}$	11	^{208}Pb

Природні радіонукліди розділяють на 3 групи. Перша група включає радіоактивні елементи, всі ізотопи яких теж є радіоактивними: уран (^{238}U , ^{235}U), торій (^{232}Th), радій (^{226}Ra) і радон (^{222}Rn , ^{220}Rn). До другої групи належать ізотопи «звичайних» елементів, які володіють радіоактивними властивостями: калій (^{40}K), рубідій (^{87}Rb), кальцій (^{48}Ca), цирконій (^{96}Zr) та інші. Третю групу складають радіоактивні ізотопи, які утворюються в атмосфері під дією космічних променів: тритій (^3H), берилій (^7Be , ^{10}Be) та вуглець (^{14}C).

Сумарний вміст природних радіоактивних ізотопів в основному залежить від ґрунтоутворюючих порід. При цьому ґрунти, що сформувалися на продуктах виітрювання кислих порід, містять більше радіоактивних ізотопів, ніж ті, що утворилися на основних та ультра основних породах, а важкі ґрунти їх містять більше ніж легкі (табл. 1.2, 1.3) [257].

Таблиця 1.2. Вміст важких металів в кислих та основних породах, мг/кг [176, 178]

Елемент	Середній граніт	Середній базальт	Елемент	Середній граніт	Середній базальт
Ti	2400	6700	Ni	4	150
Mn	400	1500	Sn	3	1
Sr	285	465	Co	2	48
Zr	140	110	Mo	2	1
V	40	250	As	1.5	2
Pb	30	5	Tl	1	0.1
Cr	10	200	Cd	0.2	0.2
Cu	10	100	Ag	0.04	0.1

Таблиця 1.3. Оцінка середнього вмісту (кларки) важких металів, мг/кг [176, 257]

Елемент	У гранітному шарі	У земній корі в цілому	
		за А.П. Виноградовим	за Тейлором
Hg	0.033	0.08	0.08
Se	0.14	0.05	0.05
Cd	0.16	0.13	0.2
Sb	0.2	0.5	0.2
Mo	1.3	1.1	1.5
Tl	1.8	1.0	0.43
As	1.9	1.7	1.8
Sn	2.7	2.5	2.0
Co	7.3	18	25
Pb	16	16	12.5
Cu	22	47	55
Ni	26	58	75
Zn	51	83	70
V	76	90	135
Sr	230	340	375
Cr	340	83	100
Mn	700	1000	950
Ti	3300	4500	5700

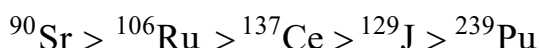
Граніти у порівнянні з базальтами збіднені більшістю важких металів. Виключення складають свинець, молібден, сурма і телур [257]. Різні автори наводять неоднакові оцінки середнього вмісту (кларків) тих самих елементів (табл. 1.3), що пояснюється наслідком різниці в об'ємі і складі вибірки.

Природні радіоактивні елементи розподіляються по профілю ґрунтів, як правило, рівномірно, проте у деяких випадках вони акумулюються в ілювіальних та глеєвих горизонтах. Природні радіоактивні елементи у ґрунтах та породах переважно присутні у міцнозв'язаній формі.

Штучна (техногенна) радіоактивність ґрунтів обумовлена надходженням у ґрунт радіоактивних ізотопів, які утворюються в результаті атомних і термоядерних вибухів; у вигляді відходів атомної промисловості або в результаті аварій на атомних підприємствах. Відомо більше 1000 видів штучних радіонуклідів (тоді як природних – більше 300). Найбільш небезпечними вважаються штучні радіонукліди ^{239}Pu , ^{137}Cs , ^{90}Sr , ^{131}I .

Основними джерелами випромінювання при ядерних вибухах і низки аварій є продукти ділення, наведена нейтронами активність, трансуранові елементи і тритій. При ядерних вибухах широко поширюється ^{89}Sr і ^{90}Sr , а при аваріях - ^{137}Cs . У перші місяці після ядерного вибуху основну небезпеку складають у суміші уламків ділення ізотопи ^{131}I , ^{140}Ba і ^{89}Sr , а в подальшому - ^{90}Sr і ^{137}Cs . Більшість радіонуклідів, які утворюються, є бета- та гама-випромінювачами (^{131}I , ^{137}Cs , ^{140}Ba тощо), інші випромінюють тільки бета- і альфа-частинки (^{144}Nd , ^{147}Sm).

Штучні радіонукліди закріплюються в основному (до 80-90%) у верхньому шарі ґрунту: на цілині – в шарі 0-10 см, на ріллі – в орному горизонті. Найбільшою сорбцією володіють ґрунти з високим вмістом гумусу, важким гранулометричним складом, багаті монтморилонітом і гідрослюдами, а також з непромивним типом водного режиму. За ступенем рухливості в ґрунтах радіонукліди утворюють ряд



При випадінні в невеликих кількостях більшість штучних радіонуклідів міцно сорбуються поглинаючим комплексом і майже не включаються у біологічний кругообіг. Виключення складають ^{65}Zn , ^{89}Sr і ^{90}Sr з найбільшою рухливістю в системі «ґрунт-рослина» [232, 234]. Наприклад, коефіцієнт накопичення ^{65}Zn при переході з води у ґрунт дорівнює 440 (мкКі/г сирової речовини)/(мкКі/мл води), цезію,

кобальту і церію – лише 0.19; 0.07 і 0.03 відповідно. З більшості типів ґрунтів поступлення ^{137}Cs в рослини, як правило є меншим або співвимірним до надходження ^{90}Sr . Проте у певних ґрунтово-кліматичних умовах перенесення ^{137}Cs в рослини може значно перевищувати перенесення ^{90}Sr , наприклад, у ґрунтах Україно-Білоруського Полісся. На легких за гранулометричним складом пісчаних ґрунтах накопичення ^{137}Cs рослинами у 40-50 разів більше, ніж ^{90}Sr .

До основних джерел надходження радіонуклідів в оточуюче середовище при спаленні вугілля на електростанціях відносять винос частинок вугілля з відкритих майданчиків вуглесховищ (вуглевиніс) і золовідвал. При згорянні більша частина мінеральної фракції вугілля плавиться і утворює зольний залишок, значна частка якого залишається у вигляді шлаку. Важкі частинки при цьому попадають в золу, однак найлегша частина золи («летюча зола») разом з потоком газу виноситься в трубу електростанції, забруднюючи навколишні райони у тому числі радіонуклідами.

Сумарний викид радіонуклідів на вугільних електростанціях складає в середньому біля $1.33 \cdot 10^{10}$ Бк на 1 ГВт·г. В табл. 1.4 наведені середньорічні викиди радіонуклідів ТЕС США з розрахунку на 1 ГВт·г. Основну частку вносять ізотопи радона, які сумарно складають $1.2 \cdot 10^{10}$ Бк на кожний ГВт·г електроенергії.

Таблиця 1.4. Середньорічні викиди радіонуклідів теплової станції

Радіонуклід	Бк/ГВт·г	Період піврозпаду
^{220}Rn	$4.07 \cdot 10^9$	55.6 с
^{222}Rn	$8.14 \cdot 10^9$	3.8 діб
^{238}U	$5.55 \cdot 10^7$	4.5 млрд. років
^{234}U	$5.55 \cdot 10^7$	245 тис. років
^{226}Ra	$4.44 \cdot 10^7$	1600 років
^{218}Po	$1.41 \cdot 10^8$	3 хв.
^{214}Pb	$1.41 \cdot 10^8$	27 хв.
^{214}Po	$1.41 \cdot 10^8$	0.00016 с
^{210}Pb	$1.41 \cdot 10^8$	22 роки
^{210}Po	$1.41 \cdot 10^8$	138 діб
^{216}Po	$8.88 \cdot 10^7$	0.15 с
^{212}Pb	$8.88 \cdot 10^7$	11 годин
^{40}K	$1.96 \cdot 10^8$	1.3 млрд. років

У продуктах згорання відбувається концентрація мікроелементів, в тому числі радіонуклідів [226, 228]. Ступінь такої концентрації залежить від багатьох факторів: первісна концентрація радіонуклідів у вугіллі, зольність, способи спалювання тощо. За

рахунок термохімічних процесів особливо інтенсивно накопичується в золі ізотоп ^{210}Pb , збільшуючи його концентрацію у 5-10 разів. Відомо, що свинець та його сполуки токсичні. Зокрема, потрапляючи в організм, свинець накопичується в кістках і викликає їх руйнування.

Тонкі фракції летючої золи збагачені різними шкідливими речовинами: крім радіонуклідів вони містять важкі метали та мікроелементи Co, V, Cu, Zn, Cr, Ni, Cd, As, Be.

До основних джерел забруднення радіацією, що впливають на значне забруднення біосфери відносять такі чинники, як [55, 227, 231]:

- видобуток і переробка радіоактивного мінеральної сировини;
- вугілля як джерело природної радіації;
- ядерна енергетика;
- теплові електростанції;
- полігони для випробування ядерної зброї;
- ядерні вибухи в мирних цілях;
- забруднення морів атомними кораблями;
- аварії штучних супутників землі і літаків;
- боєприпаси зі збідненим ураном;
- радіоактивні відходи;
- «космічне сміття».

У радіаційному відношенні теплові електростанції є шкідливіші ніж атомні, оскільки вугілля, торф і газ, які на них спалюються, містять природні радіонукліди сімейств урана і торія. Середні індивідуальні дози опромінення в районах розташування теплових електростанцій потужністю 1ГВ/рік складають від 6 до 60 мкЗв/рік, а від викидів АЕС – від 0.004 до 0.13 мкЗв/рік. При цьому найбільшу небезпеку становлять ТЕС, що працюють на вугіллі. Під час спалення вугілля більша частина урану, торію та продуктів їхнього розпаду виділяються з вихідної матриці вугілля і розподіляються між газовою і твердою фракціями. Майже 100% присутнього радону переходить у газову фазу і виходить разом з димовими газами.

1.1.6. Хімічне забруднення ґрунтів

Хімічне забруднення – це надходження в оточуюче середовище забруднювачів у вигляді хімічних речовин, які утворюються безпосередньо під час природно-антропогенних та антропогенних процесів (первинне забруднення) або утворення

шкідливих та небезпечних забруднювачів під час фізико-хімічних процесів у середовищі (вторинне забруднення) [229, 230, 250].

Джерела техногенно-хімічного забруднення поділяють умовно на 4 групи:

- технічні установки та прилади для викидів в оточуюче середовище газоподібних, рідких та твердих виробничих відходів;
- господарські об'єкти, що виробляють забруднюючі речовини або накопичують та зберігають відходи (полігони відходів);
- регіони, з якого надходять забруднюючі речовини (при трансграничному перенесенні);
- планетарне забруднення, забруднені атмосферні опади, побутові, промислові і сільськогосподарські стічні води.

За джерелами надходження в оточуюче середовище виділяють такі групи хімічних речовин: промислові, енергетичні, транспортні (наприклад, від автомобілів), сільськогосподарські, побутові та інші [253].

Для природних екосистем та людини найнебезпечнішим є антропогенне забруднення ґрунтів, особливо техногенного походження. До характерних забруднювачів відносяться пестициди, добрива, важкі метали та інші речовини промислового походження.

До основних джерел забруднення ґрунтів відносять наступні:

- Атмосферні опади у вигляді дощу, снігу тощо. Атмосферні опади, вимиваючи з атмосфери газоподібні забруднюючі речовини, призводять до зростання концентрації сірчаної, азотної та інших кислот в ґрунті, що супроводжується її закисленням та пониженням врожайності. Атмосферні аерозолі у рідкій та твердій фазах, які поступають в ґрунт з опадами, мають, як правило, складний хімічний склад і сприяють накопиченню у ґрунтах важких металів та різноманітних органічних речовин, включаючи небезпечні вуглеводні.
- Скидання твердих та рідких відходів промислового і побутового походження. Промислові та побутові відходи сприяють накопиченню у ґрунтах важких металів, вуглеводнів, включаючи небезпечні токсичні хлор-, фтор-, фосфоровмісні сполуки, які володіють канцерогенною дією.
- Використання пестицидів та добрив у сільськогосподарському виробництві. Масоване застосування добрив, інсектицидів та хімічних отрут для знищення шкідник-

ків призводить до потрапляння в ґрунт неприродних для нього токсичних сполук. Вапнування також є джерелом забруднення важкими металами (табл. 1.5) [223, 255].

Таблиця 1.5. Агротехнічні джерела забруднення ґрунтів важкими металами, мг/кг сухої речовини [255]

Елемент	Зрошення стічними водами	Фосфорні добрива	Вапно	Азотні добрива	Органіка	Пестициди
Cd	2-1500	0.1-170	0.04-0.1	0.05-8.5	0.3-0.8	-
Cu	50-3300	1-300	2-125	1-15	2-60	12-50
Cr	20-40600	66-245	10-15	3.2-19	5.2-55	-
Pb	50-3000	7-225	20-1250	2-27	6.6-15	60
Ni	16-5300	7-38	10-20	7-34	7.8-30	-
Zn	700-4900	50-1450	10-450	1-42	15-250	1.3-25

Важкі метали залежно від їх властивостей та властивостей ґрунтів мають різну тенденцію до перерозподілу та закріпленню у ґрунтовому профілі та ґрунтах в цілому. В табл. 16 наведені дані щодо вмісту деяких мікроелементів у ґрунтах [257].

Таблиця 1.6. Середній вміст мікроелементів в ґрунтах, мг/кг [257]

Ґрунти	Cu	Zn	Co	Mn	V	Cr	Mo	B	J
Середні дані для всіх типів ґрунтів	20	50	10	850	90	70	2	10	5
Підзолісті	13	40	6	920	60	50	1.4	8	1.9
Чорноземи	29	56	9.5	800	100	90	2.5	13	3
Каштанові	35	60	9	700	70	60	3.1	50	4

Важливим фактором, від якого залежать наслідки забруднення, є форма знаходження хімічної сполуки металу-забруднювача. В роботі [259] зазначено, що вільні іони металів є більш токсичними, ніж їхні недисоційовані солі або майже нерозчинні оксиди. Крім того, в якій формі метал надходить у ґрунт, потрібно враховувати його подальшу геохімічну поведінку. Наприклад, дія важких металів залежить від того, чи утворює даний елемент органічні чи неорганічні сполуки, оскільки утворення металом хелатних комплексів знижує його токсичність. Оксиди як практично нерозчинні сполуки важких металів чинять менш токсичну дію, ніж водорозчинні солі металів. Серед розчинних форм найменшу дію чинять нітрати, що, мабуть, пов'язано з деяким позитивним впливом на ґрунтову біоту нітрат-іонів як джерела мінерального живлення рослин. В загальному можна виділити наступний ряд токсичності форм хімічних сполук важких металів:

хлорид > сульфат > ацетат > нітрат > оксид.

Отже, для адекватного математичного опису фізичних, фізико-хімічних фізико-біологічних процесів тощо, прогнозування їх протікання, оптимального керування

тощо під час побудови математичних моделей таких процесів, зокрема процесів масо-перенесення, що супроводжуються хімічними або ядерними перетвореннями, враховувати структуру неоднорідного середовища, взаємозв'язок фізичних і хімічних процесів, структуру складних реакцій. Оскільки в природі існує велика група реакцій, які складаються з кількох етапів, в яких кожний елементарний етап зв'язаний з попередніми і без виконання якого подальша реакція неможлива. Це каскадні або ланцюгові реакції, хімічні перетворення та ядерні процеси, в яких поява проміжної активної частинки (вільного радикала, атома, збудженої молекули у хімічних перетвореннях, нейтрона в ядерних процесах) викликає каскад або ланцюг перетворень вихідних речовин [112, 268]. При цьому під дією зовнішніх умов і частинки вихідної субстанції, і отримані в результаті каскадних перетворень речовини на кожному етапі каскаду приймають участь у фізико-механічних процесах, що протікають у середовищі [142, 275].

1.2. Аналіз процесів в складних та складених системах

Подальший розвиток підходів і методів математичного опису взаємозв'язаних нерівноважних процесів різної фізичної природи в об'єктах складної конфігурації [222] спричинений необхідністю побудови ефективних методик і оцінок для прогнозування перерозподілу забруднень техногенного походження в об'єктах природного середовища [51, 200], оцінці якості питної води та покращення її очистки в промислових масштабах, встановленні впливу дифузії агресивних речовин при оцінці надійності та довговічності експлуатації елементів і вузлів макроконструкцій для запобігання руйнування відповідних матеріалів, тощо [116, 120, 170, 204]. Такі дослідження дозволяють отримувати достовірний прогноз процесів, які протікають в об'єктах навколишнього середовища, та вчасно вживати необхідні заходи для запобігання їх негативного розвитку.

На сьогодні серед актуальних завдань важливе місце займає проблема очистки води до стану питної, а також очистка побутових та промислових каналізаційних стоків для вторинного використання [222, 234]. Існують різні способи очищення води: механічні, фізичні, фізико-механічні, фізико-хімічні, хімічні, біологічні [144]. На стадії попередньої очистки води найбільш широко використовуються механічні фільтри, призначені для видалення нерозчинених часток розміром понад 5-50 мікрон. Одним з різновидів таких фільтрів є насипні фільтри (рис. 1.4) [25, 68], що складаються із зернистих засипок різних фільтраційних властивостей.

У таких конструкціях використовують: кварцовий пісок різних розмірів фракцій,

гідроантрацит, алюмосилікат, сульфовугілля, тощо (рис. 1.5). Неперемішуваність фільтруючих прошарків забезпечується значною різницею їх густин. Наприклад, густина кварцового піску становить 2.6 г/см^3 , гідроантрациту – 1.6 г/см^3 .

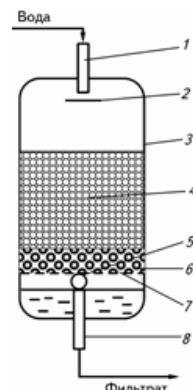


Рис. 1.4. Фільтр механічної очистки води: 1, 8 – патрубок; 2 – розподільник рідини; 3 – корпус; 4 – завантаження; 5 – центральний колектор; 6 – гравій; 7 – перфоровані промені [25, 68]



а



б



с

Рис. 1.5. Види засипок: кварцовий пісок (а), сульфовугілля (б), таблетована сіль (с) [41, 67, 107]

Широкого використання набули багатошарові фільтри, в яких величина зерен (гранул) фільтруючого матеріалу зменшується в напрямку руху стоків [148, 181]. Проте, заст.осовують також фільтри, в яких легші і дрібніші частки фільтруючого матеріалу знаходяться у верхніх шарах.

Для очищення води у промислових масштабах зазвичай застосовують каркасно-насіпні фільтри (рис. 1.6), які є різновидом багатошарових фільтрів, і слугують для доочищення стічних вод та затримання грубих, колоїдних та розчинених часток, зокрема очистки від таких забруднювачів як нафтопродукти, мідь, залізо, цинк тощо.

Загальний вигляд комплексу очисних споруд для очищення питної води в обласних центрах України наведений на рис. 1.7 [39].

В існуючих промислових системах очистки питної води та забруднених стоків широко використовуються багатошарові фільтри з різною пористістю шарів. Ефективність їхньої роботи істотно залежить від сорбційних властивостей окремих шарів, пористості, а також відповідних геометричних параметрів [80, 280].



Рис. 1.6. Системи промислової очистки питної води [38] (а) та стічних вод (b) [48] з використанням каркасно-насіпних фільтрів



Рис. 1.7. Загальний вигляд комплексу очисних споруд [51]

Визначення оптимальних характеристик фільтрів, режимів та часу їх ефективної роботи базується насамперед на моделюванні процесів перенесення, що в них відбуваються [79, 236]. Точний розв'язок для такого класу задач неможливо знайти класичними методами математичної фізики. Крім цього, врахування одночасно дифузійної та конвективної складових, викликає значні труднощі при використанні числових методів [215].

Для розрахунку фільтрів, як правило, використовують комп'ютерне моделювання, розв'язуючи числовими методами нелінійні задачі фільтрації питних або стічних вод. Разом з тим для аналізу впливу пористості [249], сорбційних властивостей та геометричних параметрів фільтру на довговічність його роботи доцільно отримати аналітичні розв'язки аналогічних задач у лінеаризованому варіанті опису процесів сорбції.

Крім цього, існують такі об'єкти, для яких на сьогодні, виходячи з фізичних міркувань, неможливо коректно накласти граничні умови, навіть в достатньо загальному вигляді. Це спричинено складністю та недостатністю проведення експери-

ментальних досліджень, і відповідно відсутній аналіз та необхідні узагальнення. Така проблема виникає, наприклад, при визначенні оптимальних режимів роботи промислових засипних фільтрів води, причому стосується як доочистки питної води, яка подається населенню, так і очистки стічних вод міст та агломерацій. На сьогоднішній день в науковій літературі не запропоновано фізично обґрунтованої граничної умови на нижній границі фільтра.

1.3. Хімічні методи очищення забруднених вод

У природному середовищі неможливо знайти абсолютно чисту (дистильовану або осмовану) воду. Для природних вод характерна наявність різноманітних груп хімічних речовин таких як [46, 66, 69, 279]

- основні іони ($Fe^{2+,3+}$, Cu^{2+} , Zn^{2+} , Pb^{2+} , Cd^{2+} , Ni^{2+}), аніони (гідрокарбонати HCO_3^- , сульфати SO_4^{2-} , хлориди Cl^-), катіони (кальцій Ca^{2+} , магній Mg^{2+} , калій K^+ , натрій Na^+);
- мікроелементи – всі метали, які не класифіковані як іони [279];
- органічні речовини – різноманітні органічні сполуки, які належать до органічних кислот, складних ефірів, гумусових речовин, азотовмісних сполук (білки, амінокислоти), тощо;
- біогенні речовини – сполуки азоту (NO_2^- , NO_3^- , NH_4^+), кремнію, заліза та фосфору (PO_4^{3-});
- розчинені гази – кисень, азот, сірководень, діоксид вуглецю, тощо;
- спеціальні забруднюючі речовини поверхнево-активні речовини, пестициди, феноли, нафтопродукти.

До якісних характеристик води також належать: твердість, лужність та окисненість, що зумовлені сукупністю кількох компонентів води. Важливим інтегральним показником якості води є її мінералізація, де понад 90 % мінералізації складають основні іони [233].

Перевищення допустимої кількості розчинених у воді речовин можуть призводити до корозії або накопичення осаду на елементах водопровідної системи, сприяти утворенню накипу на побутових приладах, що призводить до зменшення теплопровідності нагрівних елементів, а відтак до збільшення обсягів використання електроенергії [261, 264, 265, 274]. Споживання такої води відзначається не тільки

погіршенням смакових характеристик, але і несприятливим наслідкам для здоров'я, зокрема, розвитком хронічних захворювань [188, 244, 246]. Тому актуальною є проблема очищення води та покращення її якості, як з метою зменшення негативного впливу на здоров'я, так і зменшення непрямих економічних витрат.

Для очищення природних та забруднених вод до стану питної використовуються різні типи фільтрів: механічні, хімічні, фізико-хімічні, електричні, біологічні, тощо [46]. Кожен з цих типів фільтрів є ефективним для певного виду забруднення. Наприклад, такі домішки як органічні речовини, іони металів з низькими степенями окислення і бактерії можна ефективно знешкоджуються методами хімічної очистки води.

До хімічних методів очищення забруднених вод належить нейтралізація кислот і окиснення мінеральних сполук [190, 267]. В якості лугувальних речовин найчастіше використовують розчини каустичної соди $NaOH$ або харчової соди Na_2HCO_3 . Як окислювачі зазвичай застосовують розчини слабких органічних кислот, наприклад, лимонної чи оцтової кислоти або слабкий розчин мінеральної кислоти, наприклад, сірчаної.

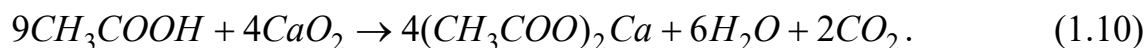
Механічні фільтри, робота яких базується на процесах сорбції, видаляють з води важкі метали, хлорорганічні речовини (хлороформ, чотирихлористий вуглець, бромдихлорметан та інші речовини), тощо [138, 266].

Врегулювання якості питної води на основі параметрів її хімічного складу може здійснюватися шляхом прийняття різного роду нормативних документів. Проте, наприклад, чинна Директива ЄС про якість питної води не містить прямих обмежень відносно твердості, тобто кількісних обмежень на наявність у воді розчинених солей кальцію та магнію [199]. Відтак ці параметри регулюються через законодавство або технічні рекомендації кожної окремої країни і можуть відрізнятися між собою. У табл. 1.7 наведено порівняння класифікації твердості води на прикладі Німеччини та України [69, 207].

Таблиця 1.7. Класифікація типів води за твердістю

Класифікація води	Німеччина	Україна
	Загальна твердість, ммоль/л	
Дуже м'яка	До 4	До 1,5
М'яка	4-8	1,5-4
Середньої твердості	8-12	4-8
Достатньо тверда	12-18	Відсутній такий тип
Тверда	18-30	8-12
Дуже тверда	Більше 30	Більше 12

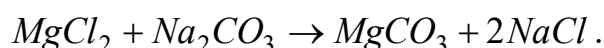
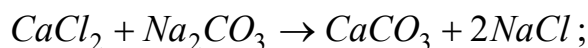
Для вилучення надлишків катіонів кальцію з води здійснюють хімічну реакцію оцтової кислоти з пероксидом кальцію, в результаті якої отримують ацетат кальцію, воду та оксид вуглецю [49]. Така реакція має вигляд



Інша хімічна реакція, яка призводить до пом'якшення води є такою [49]



Постійна жорсткість зумовлена наявністю у воді інших солей Кальцію та Магнію, зокрема хлоридів і сульфатів [49]. Її усувають дією кальцинованої соди:



Визначення оптимальних характеристик фільтрів, режимів та часу їх ефективної роботи базується насамперед на моделюванні процесів перенесення, що в них відбуваються [79, 98, 103]. Для розрахунку фільтрів, як правило, використовують комп'ютерне моделювання, розв'язуючи числовими методами нелінійні задачі фільтрації питних або стічних вод. Разом з тим для аналізу впливу пористості, сорбційних властивостей та геометричних параметрів фільтру на довговічність його роботи доцільно отримати аналітичні розв'язки аналогічних задач у лінеаризованому варіанті опису процесів сорбції. Зазначимо, що врахування одночасно дифузійної та конвективної складових, викликає значні труднощі при використанні числових методів.

1.4. Висновки до Розділу 1

Оскільки в практиці часто виникає необхідність досліджувати процеси дифузії в складних і складених системах, які супроводжуються каскадним розпадом домішкових компонент, процесами сорбції-десорбції, хімічними реакціями або наявністю пасток для мігруючих частинок, тому потрібно розвивати нові математичні моделі, які б враховували зазначені аспекти фізико-хімічних процесів.

Такі моделі процесів перенесення складових компонент тіла широко використовують у різних галузях науки і техніки. На їх основі зокрема здійснюють моніторинг техногенних субстанцій у довкіллі, прогнозують захищеність підземних вод від поверхневих забруднень, оцінюють надійність інженерних споруд для зберігання агресивних сполук тощо. Окреме застосування такі моделі знаходять в техніці при описі процесів корозії чи деградації матеріалів, прогнозуванні надійності і довговічності поверхневих покриттів.

При побудові таких математичних моделей певною проблемою є врахування впливу локальної структури середовища. Наприклад, у випадках, коли можна прийняти, що розподіл і розміри „дефектів” структури є такі малі, що в кожній

фізично малій області середовища, знаходиться їх макроскопічне число. Частинки домішкової субстанції, які знаходяться в області дефектів і поза ними, характеризуються суттєво різними фізичними властивостями. Це призводить до міграції частинок домішкової субстанції декількома шляхами, переходів з одного просторового положення в інше та у більшості випадків нетипових розподілів концентрації домішкової речовини та її потоків, які спостерігають експериментально.

При цьому для дослідження процесів масоперенесення в складних тілах з мікроструктурою може відбуватись каскадний розпад речовин, або такий процес може супроводжуватись незворотною хімічною реакцією. Тоді потрібно створювати необхідні засоби та методи для їх математичного опису, у тому числі у взаємозв'язку з процесами іншої фізичної природи.

При формулюванні крайових і контактних-крайових задач у складених тілах з мікроструктурою виникають проблеми коректного накладання крайових умов. Так при визначенні оптимальних режимів роботи промислових засипних фільтрів води на нижній границі фільтра, виходячи з фізичних міркувань, неможливо коректно накладати граничні умови, навіть в достатньо загальному вигляді. Причому така ситуація стосується як доочистки питної води, яка подається населенню, так і очистки стічних вод міст та агломерацій. Це спричинено складністю та недостатністю проведення експериментальних досліджень, і відповідно відсутній аналіз та необхідні узагальнення. На сьогоднішній день в науковій літературі не запропоновано фізично обґрунтованої граничної умови на нижній границі фільтра.

Отже актуальною є розвинення підходів та методів математичного моделювання процесів масоперенесення в складних та складених тілах, у тому числі з урахуванням каскадного розпаду мігруючих частинок, хімічних реакцій, сорбційних процесів для кількісної оцінки їхнього впливу на основні дифузійні характеристики утримуючих елементів інженерних конструкцій і сховищ техногенних забруднень, промислових засипних фільтрів води, поверхневих природних об'єктів, тощо; побудова розрахункових схем та проектування архітектури програмних комплексів для встановлення закономірностей масоперенесення домішок в елементах такого типу об'єктів.

РОЗДІЛ 2

КОНТИНУАЛЬНО-ТЕРМОДИНАМІЧНА МОДЕЛЬ МЕХАНОТЕРМОГЕТЕРОДИФУЗІЇ ЗА КАСКАДНОГО РОЗПАДУ ДОМІШКОВОЇ РЕЧОВИНИ ПРИ ЛОКАЛЬНІЙ ЗМІНІ СТАНУ ЧАСТИНОК

Дослідження процесів перенесення в складних тілах вимагає необхідні засоби та методи для їх математичного опису, у тому числі у взаємозв'язку з процесами іншої фізичної природи. У цьому розділі будуються вихідні співвідношення математичної моделі взаємозв'язаних теплових, механічних і гетеродифузійних процесів з урахуванням каскадного розпаду мігруючої речовини у середовищі з двома шляхами міграції та пастками на основі континуально-термодинамічного підходу [77, 131, 133, 134, 187]. Основні положення моделі викладаються у варіанті аксіоматизації, запропонованому в працях [79, 138]. Розглядаємо багатокомпонентні системи, в яких кожній компоненті ставимо у відповідність континуум, з допомогою якого описуємо кінематичні та деформаційні властивості компонент [64, 146]. Для конкретної схеми розпаду (каскадного розпаду) домішкової речовини формуємо балансові співвідношення, які відображають закони збереження маси, імпульсу та енергії [75]. Використовуючи концепцію локальної термодинамічної рівноваги будуємо рівняння стану та рівняння балансу ентропії, на основі якого записуємо кінетичні рівняння. Вибираючи в якості розв'язуючих функцій концентрації домішкових компонент, вектори переміщення точок континуумів центрів мас, густини та температури тіла, записуємо для них ключову систему рівнянь, яку в подальшому лінеаризуємо [100]. Часткові варіанти моделі отримуємо за умови локальної термодинамічної рівноваги між станами на кожному етапі каскадного розпаду мігруючих частинок.

2.1. Об'єкт дослідження. Конфігураційні та кінематичні характеристики

Будемо вважати, що мала довільно вибрана область складається з монокристалів мінералів різного типу, які утворюють деформівний пористий скелет. Пори частково або повністю заповнені водним розчином домішкових речовин, наявних у зоні аерації [102]. Деяка частина води під впливом приповерхневих електричних полів знаходиться в поляризованому зв'язаному стані [119, 189, 236]. У певній мірі умовно в ній виділяється міцнозв'язана складова безпосередньо біля поверхні монокристалів мінералів (для якої ряд авторів зауважують помітну зміну густини та

інших властивостей) та слабо адсорбований шар води, що шляхом нагрівання до температури кипіння перетвориться в пароподібний стан. Ця частина води, як правило, знаходиться у капілярно-зв'язаному або рухомому стані, а при наявності мережі крупних тріщин і пор – у гравітаційно-рухомому вигляді [118, 189].

Частинки домішкової речовини одного сорту у рамках виділеного фізично малого елемента тіла (рис. 2.1) можуть знаходитись в об'ємі і на поверхні скелету (у зв'язаних зі скелетом поляризованих долях води) чи бути в розчині (капілярно-зв'язаній і гравітаційно рухомій долях води). З фізичної точки зору локально вони перебувають у трьох різних станах [159, 194]. При цьому в наслідок радіоактивного розпаду, хімічних реакцій тощо вони розпадаються і утворюють частинки інших домішкових речовин, які також можуть розпадатися. Таким чином вважаємо, що кожен довільно вибраний фізично малий елемент тіла містить частинки води, твердого скелету ґрунту, розпадні домішкові частинки і частинки, які утворилися внаслідок розпаду, у вказаних вище станах [84]. Ці складові розглядаються як термодинамічні компоненти системи (ґрунту).

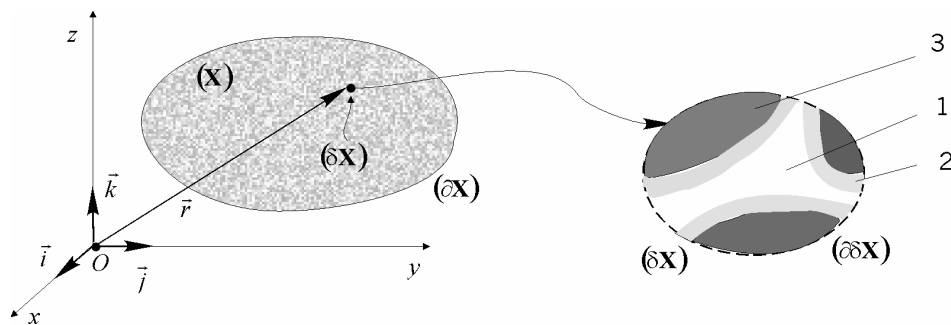


Рис. 2.1. Характерна структура фізично малого елемента тіла. Область 1 займає водний поровий розчин, область 2 – адсорбовані на скелеті ґрунту шари води, 3 – скелет ґрунту

Прийmemo, що тіло \mathbf{K}^* (дискретна сукупність матеріальних частинок) є багатокомпонентним розчином і утворене частинками домішкової речовини у поровому розчині $\mathbf{K}_1^{*(1)}$, поверхні $\mathbf{K}_2^{*(1)}$ та об'ємі скелету $\mathbf{K}_3^{*(1)}$, які можуть розпадатися, та частинками порового розчину $\mathbf{K}_4^{*(0)}$ і скелету $\mathbf{K}_5^{*(0)}$ [96]. При розпаді речовини $\mathbf{K}_j^{*(1)}$ в стані $j = \overline{1,3}$ утворюються частинки інших домішкових речовин $\mathbf{K}_j^{*(2)}$ і $\mathbf{K}_j^{*(N)}$, причому частинки $\mathbf{K}_j^{*(N)}$ вже не розпадаються (рис. 2.2). У свою чергу частинки домішки $\mathbf{K}_j^{*(2)}$ розпадаються і утворюють частинки речовини $\mathbf{K}_j^{*(3)}$ і нерозпадні (нешкідливі) речовини, які віднесемо до $\mathbf{K}_j^{*(N)}$, і т.п. доки на $(N-1)$ -у кроці не отримаємо тільки нерозпадні частинки домішкової речовини.

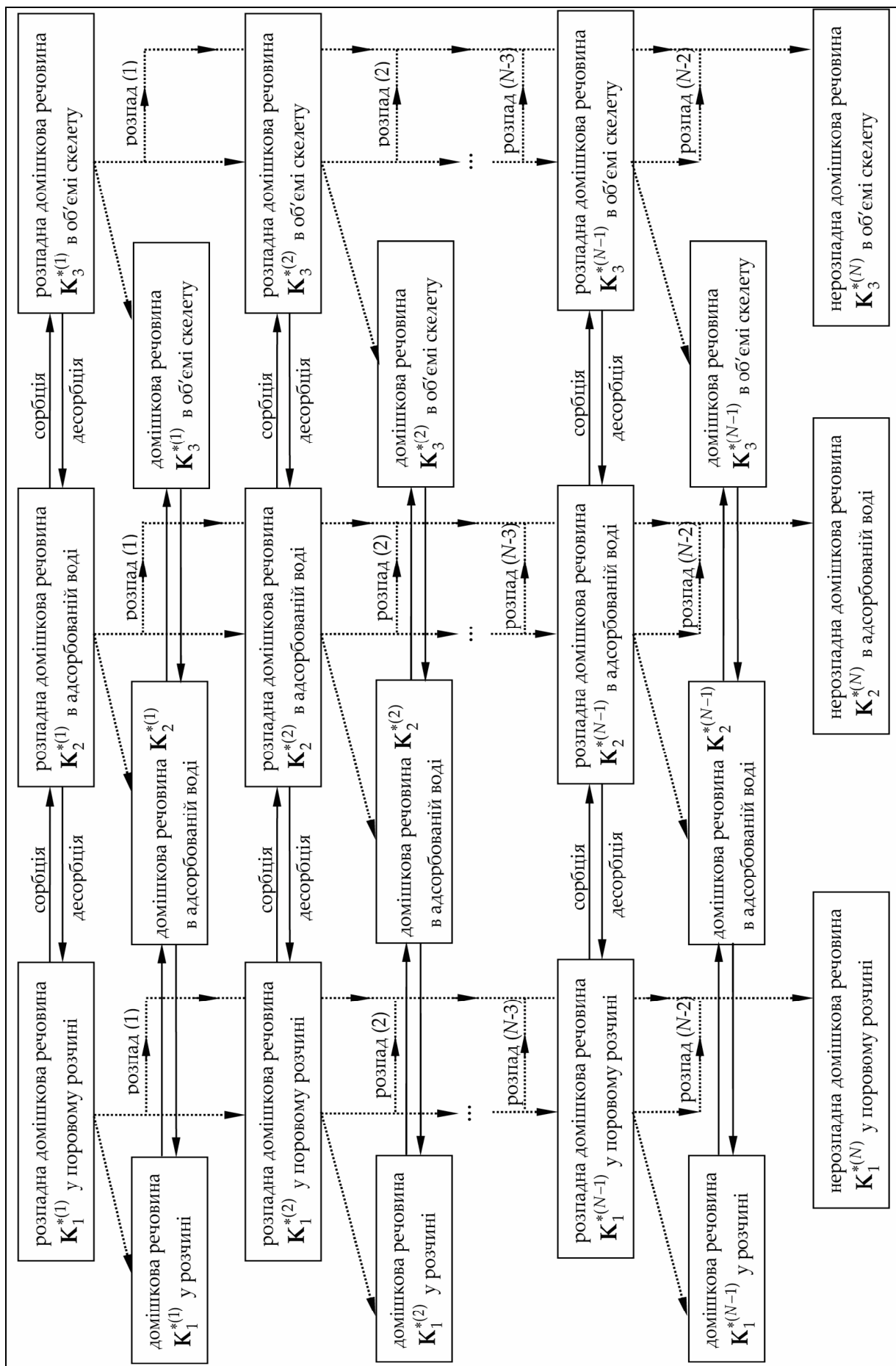


Рис. 2.2. Схема розпаду домішкових речовин і процесів сорбції-десорбції

Частинки домішкової речовини одного хімічного виду, перебуваючи у різних фазах, знаходяться в істотно різних фізичних станах, характеризуючись, зокрема, різною рухливістю (коефіцієнтами дифузії).

При макроскопічному описі тіло \mathbf{K}^* розглядається як термодинамічна система, яка вкладена в обмежену область евклідового простору \mathbf{x} , що віднесений до прямокутної декартової системи координат $\{x^\alpha\}$ [183, 258]. Кожній компоненті тіла (підсистемам частинок $\mathbf{K}_j^{*(0)}$, $j = 4; 5$, що утворюють скелет та поровий розчин, а також частинкам розпадної домішкової речовини в різних станах $\mathbf{K}_j^{*(1)}$ і частинкам, які утворилися в наслідок розпаду, $\mathbf{K}_j^{*(i)}$, ($j = \overline{1,3}$, $i = \overline{2, N}$) співставляються у відповідність континууми $\mathbf{K}_j^{(i)}$ ($i = \overline{0, N}$, $j = \overline{1,5}$) [3].

Вважаємо, що в умовах нестационарної взаємодії із зовнішнім середовищем, основними нерівноважними процесами, що протікають у тілі, є процеси деформації, теплопровідності і дифузії домішкової речовини у кожному із вище згаданих станів, що супроводжуються взаємними переходами між ними та розпадом частинок [19].

Приймається, що процеси деформації і теплопровідності описуються з використанням кінематичних характеристик континуумів $\mathbf{K}_j^{(i)}$ ($i = \overline{0, N}$, $j = \overline{1,5}$), а процеси дифузії розглядаються як відносний рух точок $K_j^{(i)}$ континуумів $\mathbf{K}_j^{(i)}$ ($i = \overline{0, N}$, $j = \overline{1,5}$) відносно континууму центрів мас \mathbf{K}_c .

Дискретна сукупність \mathbf{K}^* матеріальних частинок тіла в кожен момент часу t відображається в деяку область (\mathbf{X}) обмежену границею $(\partial\mathbf{X})$ скінченного об'єму V евклідового простору \mathbf{x} . При цьому дискретні сукупності $\mathbf{K}_j^{*(i)}$ матеріальних частинок компонент відображаються в області $(\mathbf{X}_j^{(i)})$, обмежені границями $(\partial\mathbf{X}_j^{(i)})$ і об'ємами $V_j^{(i)}$ ($i = \overline{0, N}$, $j = \overline{1,5}$), так, що

$$\cup (\mathbf{X}_j^{(i)}) \subset (\mathbf{X}) \subset \mathbf{X}.$$

Система координат $\{x^\alpha\}$ в евклідовому просторі вводиться відображенням

$$f : x \Leftrightarrow \{x^\alpha\}, \quad x \in (\mathbf{X}),$$

де $x^\alpha \in \mathbf{R}$ - дійсні числа (координати точки x), \mathbf{R} - однорідний одновимірний простір, $\alpha = \overline{1,3}$.

Прийmemo, що кожна область $(\mathbf{X}_j^{(i)})$ ($i = \overline{0, N}$, $j = \overline{1, 5}$) мисленно і довільним чином може бути розбита за точками цього простору на фізично малі частини (підобласті). При цьому в кожену підобласть завжди відображається матроскопічно велике число елементарних матеріальних частинок кожної компоненти тіла. Для цих матеріальних частинок визначимо питомі середні значення екстенсивних та значення інтенсивних макроскопічних термодинамічних параметрів і кінематичних характеристик, які припишемо в певний спосіб внутрішній конкретній точці цієї області. Виконуючи однопараметричні трансляції вказаного розбиття [71], отримаємо відповідні поля цих величин, тобто їхню залежність від координат точок простору.

У початковий момент часу $t = t_0$ (вихідній конфігурації) підмножинам $\mathbf{K}_j^{(i)} \cup \partial\mathbf{K}_j^{(i)}$ відповідає обмежена область $(\mathbf{X}_j^{(i)}(t_0)) \cup (\partial\mathbf{X}_j^{(i)}(t_0)) \subset \mathbf{X}$. Тобто вважаємо, що між матеріальними точками $K_j^{(i)} \in \mathbf{K}_j^{(i)}$ і точками простору для моменту часу $t = t_0$ є заданий взаємнооднозначний (бієктивний) зв'язок

$$f_t^c : K_j^{(i)} \Leftrightarrow x(t_0) \Leftrightarrow \vec{r}(t_0) \equiv \vec{r}_0,$$

де \vec{r}_0 - радіус-вектор точки $x_0 = x_0(t_0) \in (\mathbf{X}(t_0))$ області евклідового простору \mathbf{X} .

У довільний момент часу t , $t \neq t_0$ (актуальній конфігурації), підсистемам $\mathbf{K}_j^{(i)} \cup \partial\mathbf{K}_j^{(i)}$ відповідають змінні в часі геометричні конфігурації $(\mathbf{X}_j^{(i)}(t)) \cup (\partial\mathbf{X}_j^{(i)}(t))$. За умов бієктивності вказаних параметричних за часом відображень маємо

$$f_t^c : K_j^{(i)} \Leftrightarrow x_j^{(i)}(t) \Leftrightarrow \vec{r}(x_j^{(i)}(t)) \equiv \vec{r}_j^{(i)},$$

де $\vec{r}_j^{(i)}$ - радіус-вектори матеріальних точок $K_j^{(i)}$ в момент часу t .

Матеріальні точки $K_j^{(i)} \in \mathbf{K}_j^{(i)}$ цих континуумів наділяються властивостями вихідних дискретних сукупностей матеріальних частинок $\mathbf{K}_j^{*(i)}$. Ці величини розглядаються як середні значення параметрів для підсистем $\delta\mathbf{K}_{jn}^{*(i)} \subset \mathbf{K}_j^{*(i)}$, які відображаються в області $(\delta\mathbf{X}_{jn}^{(i)}) \in (\mathbf{X}_j^{(i)})$ при довільному мисленному розбитті. У випадку екстенсивних параметрів – це питомі величини [20].

Закони руху матеріальних точок континуумів $\mathbf{K}_j^{(i)}$ є задані, якщо відомі взаємнооднозначні залежності

$$\vec{r}_j^{(i)} = \vec{r}_j^{(i)}(x(t_0); t) \equiv \vec{r}_j^{(i)}(\vec{r}_0; t), \quad i = \overline{0, N}, \quad j = \overline{1, 5}. \quad (2.1)$$

При цьому як наслідок бієктивності цих залежностей мають місце також обернені зв'язки

$$\vec{r}_0 = \vec{r}_0(\vec{r}_j^{(j)}; t), \quad i = \overline{0, N}, \quad j = \overline{1, 5}. \quad (2.2)$$

Через диференціювання за часом залежностей (2.1) одержимо швидкості руху $\vec{v}_j^{(i)}$ матеріальних точок континуумів $\mathbf{K}_j^{(i)}$, а саме

$$\vec{v}_j^{(i)}(\vec{r}_0; t) = \frac{\partial \vec{r}_j^{(i)}(\vec{r}_0; t)}{\partial t} \equiv \vec{v}_j^{(i)}. \quad (2.3)$$

Якщо умова індивідуалізації матеріальних точок континуумів $\mathbf{K}_j^{(i)}$ задана так, що $\vec{r}_0 = \vec{r}_j^{(i)}(\vec{r}_0; 0)$, то з використанням зв'язків (2.2) швидкості $\vec{v}_j^{(i)}$ можемо подати у вигляді

$$\vec{v}_j^{(i)} = \vec{v}_j^{(i)}(\vec{r}, t), \quad i = \overline{0, N}, \quad j = \overline{1, 5}, \quad (2.4)$$

де \vec{r} - радіус-вектор фіксованої точки евклідового простору.

Відзначимо, що часто умову індивідуалізації записують у формі

$$x_0^\alpha \equiv \xi^\alpha \quad (\alpha = \overline{1, 3}),$$

де x_0^α - компоненти радіус-вектора \vec{r}_0 точок $K_j^{(i)} \in \mathbf{K}_j^{(i)}$ у початковий момент часу $t = t_0$, тобто $f : x(t_0) \Leftrightarrow \{x_0^\alpha\}$ і $\vec{r}_0 = \xi^\alpha \vec{i}_\alpha$, де \vec{i}_α - базисні вектори декартової системи координат ($\alpha = \overline{1, 3}$).

Представлення для швидкостей (2.4) вказує, що в кожній точці $x \in \mathbf{X}$ основної множини цього простору з радіус-вектором \vec{r} у даний момент часу t знаходяться певні матеріальні точки $K_j^{(i)}$ континуумів $\mathbf{K}_j^{(i)}$, які мають швидкості $\vec{v}_j^{(i)}$. При такій трактовці швидкості $\vec{v}_j^{(i)}$ можна розуміти як питомі просторові масові потоки імпульсу для матеріальних точок відповідних континуумів.

Нехай фізично мала частина термодинамічної системи $(\delta \mathbf{K}^*)$ містить $\delta N_j^{(i)}$ частинок компоненти ij . Тоді введемо в розгляд її повну масу δm як суму мас елементарних матеріальних частинок компонент, тобто

$$\delta m = \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N m_j^{(i)} \delta N_j^{(i)}, \quad (2.5)$$

де $m_j^{(i)}$ - дійсна невід'ємна величина – маса окремої елементарної матеріальної частинки компоненти ij .

Приймається, що при фіксованих значеннях інтенсивних параметрів об'єм δV області (δX) , в яку відображається така фізично мала макрочастина тіла, є пропорційним числу елементарних частинок, що її складають. Тоді шляхом граничного переходу

$$n_j^{(i)}(X, t) = \lim_{\delta V \rightarrow 0} \frac{\delta N_j^{(i)}}{\delta V} \quad (2.6)$$

можна означити функції густин частинок ij -компоненти $n_j^{(i)}(X, t)$ та їхню сумарну густину в точках області

$$n(X, t) = \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N n_j^{(i)}(X, t). \quad (2.7)$$

Об'ємні густини компонент мас $\rho_j^{(i)}(X, t)$ введемо за формулою

$$\rho_j^{(i)}(X, t) = \lim_{\delta V \rightarrow 0} \frac{\delta m_j^{(i)}}{\delta V}. \quad (2.8)$$

Тоді використовуючи співвідношення (2.5)-(2.8), для масових характеристик макрочастини системи одержуємо

$$\rho_j^{(i)}(X, t) = m_j^{(i)} n_j^{(i)}(X, t), \quad \rho(X, t) = \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \rho_j^{(i)}(X, t), \quad (2.9)$$

де $\rho(X, t)$ - сумарна густина маси.

Викладемо основні положення математичного моделювання, орієнтуючись на аксіоматичний підхід, запропонований в роботах [183, 258].

2.2. Балансові співвідношення

За вихідні співвідношення математичної моделі термомеханогетеродифузії домішкової речовини двома шляхами у середовищі з пастками з урахуванням каскадного розпаду мігруючих речовин приймемо закони збереження і балансові рівняння для маси, імпульсу та енергії, які сформулюємо для кожної з компонент та континууму центрів мас.

Теорема 2.1. Якщо зміна маси компоненти $m_j^{(i)}$ відбувається за рахунок масових потоків і внутрішніх джерел, то мають місце рівняння балансу маси компоненти ij у вигляді

$$\frac{\partial \rho_j^{(i)}}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot (\rho_j^{(i)} \vec{v}_j^{(i)}) + w_j^{(i)} \quad (i = \overline{0, N}, j = \overline{1, 5}), \quad (2.10)$$

де $\vec{\nabla}$ - набла-оператор Гамільтона; $w_j^{(i)}$ - інтенсивність джерела (або стоку) компоненти; крапкою позначений скалярний добуток.

Доведення. За точками ейлерового простору \mathbf{x} виберемо довільним чином область (\mathbf{X}) , що належить тілу. Масу компонент $m_j^{(i)}$, які знаходяться в цій області, запишемо у вигляді

$$m_j^{(i)} = \int_{(\mathbf{X})} \rho_j^{(i)} dV. \quad (2.11)$$

Зміна маси $m_j^{(i)}$ в часі може відбуватися за рахунок масових потоків через поверхню (Σ) області (\mathbf{X}) і виробництва маси $w_j^{(i)}$ i -ї компоненти в стані j . Тому

$$\frac{dm_j^{(i)}}{dt} = - \int_{(\Sigma)} \rho_j^{(i)} \vec{v}_j^{(i)} \cdot \vec{n} d\Sigma + \int_{(\mathbf{X})} w_j^{(i)} dV_j^{(i)},$$

де \vec{n} - нормаль до поверхні (Σ) (рис. 2.3).

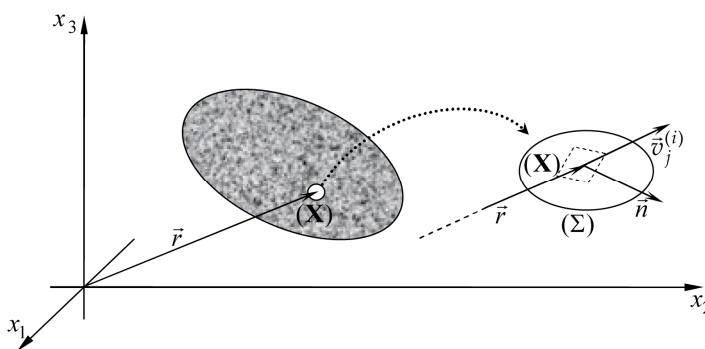


Рис. 2.3. Репрезентативна область середовища

З іншого боку із співвідношення (2.11) отримуємо

$$\frac{dm_j^{(i)}}{dt} = \int_{(\mathbf{X})} \frac{\partial \rho_j^{(i)}}{\partial t} dV.$$

Співставляючи записані вирази, маємо

$$\int_{(\mathbf{X})} \frac{\partial \rho_j^{(i)}}{\partial t} dV = - \int_{(\Sigma)} \rho_j^{(i)} \vec{v}_j^{(i)} \cdot \vec{n} d\Sigma + \int_{(\mathbf{X})} w_j^{(i)} dV.$$

Враховуючи теорему Остроградського-Гауса і довільність вибору області (X) , отримаємо закон збереження маси компонент у диференціальній (локальній) формі

$$\frac{\partial \rho_j^{(i)}}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot (\rho_j^{(i)} \vec{v}_j^{(i)}) + w_j^{(i)}.$$

Теорема доведена.

Зауваження 2.1. Оскільки ми прийняли, що джерелом (стоком) маси компоненти можуть бути процеси сорбції-десорбції частинок і розпад домішкової речовини, то потужність виробництва маси $w_j^{(i)}$ в загальному випадку можна подати у вигляді суми

$$w_j^{(i)} = \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^5 \omega_{jk}^{(i)} + \bar{w}_j^{(i)} \quad (i = \overline{0, N}, j = \overline{1, 5}), \quad (2.12)$$

де $\omega_{jk}^{(i)}$ - потужність виробництва маси компоненти i у стані j у зв'язку з її переходом з континууму $\mathbf{K}_k^{(i)}$; $\bar{w}_j^{(i)}$ - потужність виробництва маси компоненти ij за рахунок розпаду частинок компоненти $i-1$ ($i = \overline{2, N}, j = \overline{1, 3}$). Тоді

$$w_j^{(0)} = 0 \quad (\forall j), \quad \sum_{j=1}^3 \sum_{i=1}^N w_j^{(i)} = 0; \quad (2.12a)$$

у тому числі

$$\omega_{jj}^{(i)} = 0 \quad (\forall j), \quad \omega_{jk}^{(i)} = -\omega_{kj}^{(i)} \quad (\forall i, j, k), \quad \sum_{j=1}^5 \sum_{k=1}^5 \omega_{jk}^{(i)} = 0 \quad (\forall i). \quad (2.12b)$$

Зауваження 2.2. Балансове рівняння (2.10) можна подати у вигляді

$$\frac{\partial \rho_j^{(i)}}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_j^{(i)0} + w_j^{(i)} \quad (i = \overline{0, N}, j = \overline{1, 5}), \quad (2.13)$$

де $\vec{J}_j^{(i)0} = \rho_j^{(i)} \vec{v}_j^{(i)}$ - масовий потік частинок компоненти i у стані j .

Теорема 2.2. Якщо маса i -ї компоненти в стані j задовольняє балансове співвідношення (2.10), то мають місце рівняння балансу для концентрацій компонент:

$$\rho \frac{dC_j^{(i)}}{dt} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_j^{(i)} + w_j^{(i)}, \quad i = \overline{0, N}, j = \overline{1, 5}, \quad (2.14)$$

де $C_j^{(i)} = \rho_j^{(i)} / \rho$ - масові концентрації компонент, які задовольняють умову нормування

$$\sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N C_j^{(i)} = 1; \quad (2.15)$$

$\vec{J}_j^{(i)}$ - дифузійний потік компоненти ij .

Доведення. Нехай значення для густини тіла ρ , які вводяться другим співвідношенням (2.9), а для швидкості \vec{v} - наступним рівнянням

$$\vec{v} = \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \rho_j^{(i)} \vec{v}_j^{(i)} / \rho \quad (2.16)$$

приписуються точкам континууму \mathbf{K}_c . Просумуємо рівняння (2.10) або (2.13) за всіма індексами i, j :

$$\sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \frac{\partial \rho_j^{(i)}}{\partial t} = - \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \vec{\nabla} \cdot (\rho_j^{(i)} \vec{v}_j^{(i)}) + \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N w_j^{(i)}.$$

Використовуючи вирази (2.9), (2.12) та (2.16), отримаємо

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = - \vec{\nabla} \cdot \rho \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \frac{\rho_j^{(i)} \vec{v}_j^{(i)}}{\rho} = - \rho \vec{\nabla} \cdot \vec{v} - \vec{v} \cdot \vec{\nabla} \rho. \quad (2.17)$$

Враховуючи, що повна похідна за часом $\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla}$, співвідношення (2.17)

перепишемо у вигляді

$$\frac{d\rho}{dt} = - \rho \vec{\nabla} \cdot \vec{v}. \quad (2.18a)$$

Оскільки $\rho = 1/v$, де v - питомий об'єм, то формула (2.18a) еквівалентна

$$\frac{dv}{dt} = v \vec{\nabla} \cdot \vec{v}. \quad (2.18b)$$

Перепишемо рівняння балансу маси компоненти ij (2.13) через повну похідну за часом

$$\frac{d\rho_j^{(i)}}{dt} = \vec{v} \cdot \vec{\nabla} \rho_j^{(i)} - \vec{\nabla} \cdot (\rho_j^{(i)} \vec{v}) + w_j^{(i)} = \vec{\nabla} \cdot (\rho_j^{(i)} \vec{v}) - \vec{\nabla} \cdot (\rho_j^{(i)} \vec{v}) - \rho_j^{(i)} \vec{\nabla} \cdot \vec{v} + w_j^{(i)}$$

Враховуючи, що $\rho_j^{(i)} = C_j^{(i)} \rho$, одержимо

$$\frac{d\rho_j^{(i)}}{dt} + \rho_j^{(i)} \vec{\nabla} \cdot \vec{v} = \rho \frac{dC_j^{(i)}}{dt} + C_j^{(i)} \frac{d\rho}{dt} + C_j^{(i)} \rho \vec{\nabla} \cdot \vec{v} = \rho \frac{dC_j^{(i)}}{dt},$$

оскільки виконується співвідношення (2.18a). У результаті отримаємо рівняння балансу концентрації компоненти i у стані j

$$\rho \frac{dC_j^{(i)}}{dt} = -\vec{\nabla} \cdot \rho_j^{(i)} (\vec{v}_j^{(i)} - \vec{v}) + w_j^{(i)} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_j^{(i)} + w_j^{(i)}.$$

Величина $\vec{J}_j^{(i)} = \rho_j^{(i)} (\vec{v}_j^{(i)} - \vec{v})$ називається дифузійним потоком компоненти ij , введеним по відношенню до точок континууму \mathbf{K}_c .

Зазначимо, якщо використати умову нормування (2.15), то балансове рівняння (2.14) можна записати у вигляді

$$\rho \frac{dC_j^{(i)}}{dt} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_j^{(i)} + w_j^{(i)}, \quad i = \overline{0, N}, \quad j = \overline{1, 4},$$

$$C_5^{(0)} = 1 - \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N C_j^{(0)}.$$

Постулат 2.1. Рівняння балансу імпульсу для тіла в цілому (континууму \mathbf{K}_c) має вигляд

$$\rho \frac{d\vec{v}}{dt} = \vec{\nabla} \cdot \hat{\Pi} + \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \rho_j^{(i)} \vec{F}_j^{(i)}, \quad (2.19)$$

де $\hat{\Pi} = \Pi^{\alpha\beta} \vec{i}^\alpha \otimes \vec{i}^\beta$ - симетричний тензор напружень Коші [183, 254], $\vec{F}_j^{(i)}$ - масова потенціальна ($\vec{F}_j^{(i)} = -\vec{\nabla} \psi_j^{(i)}$) і консервативна ($\partial \psi_j^{(i)} / \partial t = 0$) сила, яка діє на i -ту компоненту у стані j , $\psi_j^{(i)}$ - потенціал сил (потенціальна енергія одиниці маси компоненти i у стані j), \otimes - тензорний добуток.

Лема 2.1. Якщо виконуються співвідношення балансу маси i -ої компоненти у стані j (2.10), то мають місце рівняння балансу для потенціальної енергії компоненти

$$\frac{\partial(\rho_j^{(i)} \psi_j^{(i)})}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho_j^{(i)} \psi_j^{(i)} \vec{v}_j^{(i)}) = -\rho_j^{(i)} \vec{v}_j^{(i)} \cdot \vec{F}_j^{(i)} + \psi_j^{(i)} w_j^{(i)} \quad (2.20)$$

та рівняння балансу потенціальної енергії Ψ для тіла в цілому

$$\rho \frac{d\Psi}{dt} = -\vec{\nabla} \cdot \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \psi_j^{(i)} \vec{J}_j^{(i)} - \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \rho_j^{(i)} \vec{F}_j^{(i)} \cdot \vec{v} - \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \vec{J}_j^{(i)} \cdot \vec{F}_j^{(i)} + \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \psi_j^{(i)} w_j^{(i)}. \quad (2.21)$$

Доведення. Домножимо закон збереження маси складових компонент (2.10) на скалярний потенціал $\psi_j^{(j)}$, віднесений до одиниці маси компоненти

$$\psi_j^{(i)} \frac{\partial \rho_j^{(i)}}{\partial t} = -\psi_j^{(i)} \vec{\nabla} \cdot (\rho_j^{(i)} \vec{v}_j^{(i)}) + \psi_j^{(i)} w_j^{(i)}$$

і врахуємо умову їх консервативності. Тоді знайдемо рівняння балансу потенціальної енергії компоненти

$$\frac{\partial (\rho_j^{(i)} \psi_j^{(i)})}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho_j^{(i)} \psi_j^{(i)} \vec{v}_j^{(i)}) = -\rho_j^{(i)} \vec{v}_j^{(i)} \cdot \vec{F}_j^{(i)} + \psi_j^{(i)} w_j^{(i)}.$$

Врахуємо, що

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \cdot (\rho_j^{(i)} \psi_j^{(i)} \vec{v}_j^{(i)}) &= \vec{\nabla} \cdot (\rho_j^{(i)} \psi_j^{(i)} \vec{v}_j^{(i)} - \rho_j^{(i)} \psi_j^{(i)} \vec{v} + \rho_j^{(i)} \psi_j^{(i)} \psi_j^{(i)} \vec{v}) = \\ &= -\vec{\nabla} \cdot [\psi_j^{(i)} \rho_j^{(i)} (\vec{v}_j^{(i)} - \vec{v}) + \psi_j^{(i)} \rho_j^{(i)} \vec{v}] = \vec{\nabla} \cdot (\psi_j^{(i)} \vec{J}_j^{(i)}) + \vec{\nabla} \cdot (\psi_j^{(i)} \rho_j^{(i)} \vec{v}). \end{aligned}$$

Підсумовуючи записане рівняння за індексами i та j , означуючи потенціальну енергію Ψ точок континууму \mathbf{K}_c формулою

$$\rho \Psi = \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \rho_j^{(i)} \psi_j^{(i)} \quad (2.22)$$

і оскільки $\vec{J}_j^{(i)0} = \vec{J}_j^{(i)} + \rho_j^{(i)} \vec{v}$, отримаємо

$$\begin{aligned} \frac{\partial (\rho \Psi)}{\partial t} &= -\vec{\nabla} \cdot \left(\sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \psi_j^{(i)} \vec{J}_j^{(i)} + \rho \Psi \vec{v} \right) - \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \rho_j^{(i)} \vec{F}_j^{(i)} \cdot \vec{v} - \\ &\quad - \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \vec{J}_j^{(i)} \cdot \vec{F}_j^{(i)} + \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \psi_j^{(i)} w_j^{(i)}. \end{aligned}$$

Враховуючи рівність (2.18a), одержимо рівняння балансу потенціальної енергії для тіла в цілому (2.21). Отже лема доведена.

Лема 2.2. Якщо виконуються співвідношення балансу імпульсу (2.19), то має місце рівняння балансу для кінетичної енергії

$$\rho \frac{d}{dt} \left(\frac{v^2}{2} \right) = \vec{\nabla} \cdot (\vec{v} \cdot \hat{\Pi}) - \hat{\Pi} : \vec{\nabla} \otimes \vec{v} + \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \rho_j^{(i)} \vec{F}_j^{(i)} \cdot \vec{v}. \quad (2.23)$$

Доведення. Домножимо скалярно рівняння балансу імпульсу (2.19) на вектор швидкості центру мас \vec{v} :

$$\rho \vec{v} \cdot \frac{d\vec{v}}{dt} = \vec{v} \cdot \vec{\nabla} \cdot \hat{\Pi} + \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \rho_j^{(i)} \vec{F}_j^{(i)} \cdot \vec{v}.$$

Використаємо тотожність

$$\vec{\nabla} \cdot (\hat{\Pi} \cdot \vec{v}) \equiv \vec{v} \cdot (\vec{\nabla} \cdot \hat{\Pi}) + \hat{\Pi} : \vec{\nabla} \otimes \vec{v},$$

де знак «:» означає подвійний внутрішній скалярний добуток (подвійну внутрішню згортку). Тоді отримуємо рівняння балансу кінетичної енергії (2.23). І лема доведена.

Постулат 2.2. Повна питома енергія e (з розрахунку на одиницю маси) задається виразом

$$e = \rho \left(u + \Psi + v^2/2 \right) \quad (2.24)$$

і задовольняє закон збереження

$$\frac{\partial e}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_e, \quad (2.25)$$

де u - питома внутрішня енергія з розрахунку на одиницю маси; \vec{J}_e - потік повної енергії, що має вигляд

$$\vec{J}_e = \rho \left(u + \Psi + v^2/2 \right) \vec{v} + \vec{J}_Q - \hat{\Pi} \cdot \vec{v} + \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \left(\psi_j^{(i)} + \mu_j^{\prime(i)} \right) \vec{J}_j^{(i)}. \quad (2.26)$$

Тут $\vec{J}_Q^{(j)}$ - потік енергії у формі тепла, $\mu_j^{\prime(i)}$ - хімічний потенціал компоненти i у стані j [218].

Теорема 2.3. Якщо повна енергія підпорядковується співвідношенням (2.24)-(2.26), тоді має місце рівняння балансу питомої внутрішньої енергії

$$\begin{aligned} \rho \frac{du}{dt} = & -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_Q - \vec{\nabla} \cdot \left(\sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \mu_j^{\prime(i)} \vec{J}_j^{(i)} \right) + \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \vec{J}_j^{(i)} \cdot \vec{F}_j^{(i)} + \\ & + \hat{\Pi} : (\vec{\nabla} \otimes \vec{v})^T + \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \psi_j^{(i)} w_j^{(i)}, \end{aligned} \quad (2.27)$$

де символ $(\dots)^T$ означає операцію транспонування.

Доведення. Підставимо в закон збереження повної енергії (2.25) її означення (2.24) і вираз для потоку (2.26). Тоді маємо

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\rho \vec{v}^2}{2} + \rho \Psi \right) = -\vec{\nabla} \cdot (\rho u \vec{v}) - \vec{\nabla} \cdot \rho \left(\frac{v^2}{2} + \Psi \right) \vec{v} - \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_Q +$$

$$+ \bar{\nabla} \cdot (\hat{\Pi} \cdot \bar{v}) - \bar{\nabla} \cdot \left(\sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N (\psi_j^{(i)} + \mu_j'^{(i)}) \bar{J}_j^{(i)} \right).$$

Враховуючи співвідношення (2.18a), перепишемо цю рівність у вигляді

$$\rho \frac{du}{dt} = -\rho \frac{d}{dt} \left(\frac{\bar{v}^2}{2} + \Psi \right) - \bar{\nabla} \cdot \bar{J}_Q + \bar{\nabla} \cdot (\hat{\Pi} \cdot \bar{v}) - \bar{\nabla} \cdot \left(\sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N (\psi_j^{(i)} + \mu_j'^{(i)}) \bar{J}_j^{(i)} \right).$$

Використаємо балансові співвідношення для потенціальної (2.20) та для кінетичної енергій (2.23), тоді отримаємо рівняння балансу внутрішньої енергії

$$\begin{aligned} \rho \frac{du}{dt} = & -\bar{\nabla} \cdot \bar{J}_Q - \bar{\nabla} \cdot \left(\sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \mu_j'^{(i)} \bar{J}_j^{(i)} \right) + \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \bar{J}_j^{(i)} \cdot \bar{F}_j^{(i)} + \\ & + \hat{\Pi} : (\bar{\nabla} \otimes \bar{v})^T + \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \psi_j^{(i)} w_j^{(i)}. \end{aligned}$$

І теорема доведена.

Значимо, що вираз $\hat{\Pi} : (\bar{\nabla} \otimes \bar{v})^T$ у компонентній формі набуває вигляду [183]

$$\frac{1}{\rho} \Pi^{\alpha\beta} \frac{d\varepsilon_{\alpha\beta}}{dt}, \text{ де } \varepsilon_{\alpha\beta} \text{ - компоненти тензора деформації.}$$

2.3. Гіпотеза локальної термодинамічної рівноваги. Рівняння Гіббса

При модельному описі неоднорідної багатокомпонентної термодинамічної системи \mathbf{K}^* , яка зовнішніми нестационарними діями виведена зі стану рівноваги або підтримується у нерівноважному стані, приймається принцип локальної термодинамічної рівноваги [133, 179, 180, 183, 239, 272]. Ця гіпотеза полягає в припущенні низки базових положень, а саме:

➤ Приймається, що для опису макроскопічного стану фізично малої макрочастини системи $(\delta\mathbf{K}^*)$ достатньо використати фізичні параметри, які характеризують її у рівноважному стані. Ці фізичні параметри відповідають осередненим (експериментально вимірювальним) значенням, встановленим за певним набором мікроскопічних характеристик частинок, що складають фізично малу макрочастину $(\delta\mathbf{K}^*)$.

➤ Властивості вихідної системи \mathbf{K}^* приймаються такими, що однорідні рівноважні (стаціонарні) термодинамічні стани довільної фізично малої макрочастини

$(\delta \mathbf{K}^*)$ і всієї системи збігаються за однакових зовнішніх умов. Тобто це означає, що не розглядаються ситуації, коли різні макрочастини $(\delta \mathbf{K}^*)$ системи \mathbf{K}^* необхідно описувати різним числом макроскопічних (термодинамічних) змінних.

> З урахуванням некомпенсованого тепла приймаються як визначальні всі основні співвідношення рівноважної термодинаміки. Нескомпенсоване тепло пов'язується з протіканням необоротних процесів і виникненням ентропії.

Ці положення узгоджуються з близькодіючим характером взаємодій між елементарними матеріальними частинками системи і застосовні, тоді як час релаксації дисипативних процесів, що «хаотизують» направлений (впорядкований) рух матеріальних частинок або перенесення імпульсу чи енергії у межах фізично малої макрочастини тіла $(\delta \mathbf{K}^*)$, значно менший ніж час, необхідний для суттєвої (експериментально вимірювальної) зміни параметрів, що характеризують ці макрочастини в цілому.

Нехай термодинамічний стан довільного макроскопічного елемента системи, який займає її малу підобласть, означений з допомогою таких спряжених макроскопічних параметрів як абсолютна температура T , питома ентропія s ; тензор напружень Коші у рівновазі $\hat{\Pi}$, тензор деформації $\hat{\varepsilon}$; хімічний потенціал $\mu_j^{(i)}$ і масова концентрація $C_j^{(i)}$ компоненти i у стані j :

$$T - s, \quad \bar{\Pi}^{\alpha\beta} - \varepsilon_{\alpha\beta}, \quad \mu_j^{(i)} - C_j^{(i)}, \quad (2.28)$$

де $s = S/m$, S - ентропія системи в цілому, що займає область (V) ; $v = V/m \equiv 1/\rho$; $\bar{\Pi}^{\alpha\beta}$ - контраваріантні компоненти тензора напружень Коші у рівновазі, $\varepsilon_{\alpha\beta}$ - коваріантні компоненти тензора деформації.

Виберемо за вихідний (початковий, природний) термодинамічний стан такий, що відповідає рівноважному стану необмеженої термодинамічної системи за відсутності зовнішніх дій. Цей стан відмітимо індексом 0:

$$T_0 - s_0, \quad \bar{\Pi}_0^{\alpha\beta} - \varepsilon_{\alpha\beta 0}, \quad \mu_{j0}^{(i)} - C_{j0}^{(i)}. \quad (2.29)$$

Питома внутрішня енергія термодинамічної системи є такою функцією стану $u = u(s, v, \{C_j^{(i)}\})$, яка задовольняє співвідношення

$$u = Ts + \frac{1}{\rho} \bar{\Pi}^{\alpha\beta} \varepsilon_{\alpha\beta} + \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \mu_j^{(i)} C_j^{(i)}, \quad (2.30)$$

за умови, що в той же час інфінітезимально малі зміни масової густини ентропії ds , питомого об'єму dv та масових концентрацій $dC_j^{(i)}$ задовольняють рівняння

$$du = Tds + \frac{1}{\rho} \Pi^{\alpha\beta} d\varepsilon_{\alpha\beta} + \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \mu_j'^{(i)} dC_j^{(i)} \quad (\text{рівняння Гіббса}). \quad (2.31)$$

Оскільки масові концентрації задовольняють умову нормування (2.15), то рівняння Гіббса (2.31) можна переписати у вигляді [1779]

$$du = Tds + \frac{1}{\rho} \Pi^{\alpha\beta} d\varepsilon_{\alpha\beta} + \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N \mu_j^{(i)} dc_j^{(i)}, \quad (2.32)$$

де $\mu_j^{(i)} = \mu_j'^{(i)} - \mu_5^{(0)}$ - відносний хімічний потенціал компоненти i у стані j .

Субстанціональна форма рівняння Гіббса [180] (2.32) буде

$$\rho \frac{du}{dt} = T\rho \frac{ds}{dt} + \Pi^{\alpha\beta} \frac{d\varepsilon_{\alpha\beta}}{dt} + \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N \mu_j^{(i)} \frac{dc_j^{(i)}}{dt}, \quad (2.33)$$

де d/dt - субстанціональна похідна.

Зазначимо, що рівняння (2.33) також можна отримати з рівняння балансу внутрішньої енергії (2.27), якщо спрямувати до нуля масові потоки $\vec{J}_j^{(i)}$, потік тепла \vec{J}_Q і величини $\omega_j^{(i)}$, тобто $\vec{J}_j^{(i)} \rightarrow 0$, $\vec{J}_Q \rightarrow 0$ і $\omega_j^{(i)} \rightarrow 0$. При цьому компоненти тензора напружень Коші $\Pi_{(i)j}^{\alpha\beta}$ прямують до своїх рівноважних значень $\bar{\Pi}_{(i)j}^{\alpha\beta}$, тобто $\Pi_{(i)j}^{\alpha\beta} \rightarrow \bar{\Pi}_{(i)j}^{\alpha\beta}$.

Диференціальні 1-форми (2.32) і (2.33) пов'язують дві масові густини термодинамічних екстенсивних величин – внутрішньої енергії u та ентропії s , кожна з яких може розглядатися як функція стану при довільному виборі незалежних параметрів, що задають стан.

2.4. Рівняння стану

При аналізі відкритих фізично малих областей термодинамічної системи в якості визначального термодинамічного потенціалу стану системи зазвичай використовують внутрішню енергію u , яка введена рівнянням (2.30).

Теорема 2.4. Якщо питома внутрішня енергія u є задана як функція змінних s , $\varepsilon_{\alpha\beta}$, $\{c_j^{(i)}\}$ (де $\{c_j^{(i)}\}$ - набір відхилень концентрацій $c_j^{(i)} = C_j^{(i)} - C_{j0}^{(i)}$ для $\forall i, j$) і підпорядковується співвідношенням (2.30), (2.31), то рівняння стану мають вигляд

$$T = \left(\frac{\partial u}{\partial s} \right)_{\varepsilon_{\alpha\beta}, c_j^{(i)}}, \quad \frac{1}{\rho} \bar{\Pi}^{\alpha\beta} = \left(\frac{\partial u}{\partial \varepsilon_{\alpha\beta}} \right)_{s, c_j^{(i)}}, \quad \mu_j^{(i)} = \left(\frac{\partial u}{\partial c_j^{(i)}} \right)_{T, \varepsilon_{\alpha\beta}, \{c_{l \neq j}^{(k \neq i)}\}}. \quad (2.34)$$

Доведення. Якщо внутрішня енергія системи u задана як функція питомої ентропії, компонент тензора деформації та нормованих концентрацій компонент, тобто

$$u = u\left(s, \varepsilon_{\alpha\beta}, \{c_j^{(i)}\}\right), \quad (2.35)$$

тоді вона є термодинамічним потенціалом по відношенню до спряжених змінних абсолютної температури T , компонент тензора напружень Коші $\hat{\Pi}$ та нормованих хімічних потенціалів компонент системи $\mu_j^{(i)}$. Тоді за означенням повного диференціалу з рівняння Гіббса (2.32) впливають наступні співвідношення

$$T = \left(\frac{\partial u}{\partial s} \right)_{\varepsilon_{\alpha\beta}, c_j^{(i)}}, \quad \frac{1}{\rho} \bar{\Pi}^{\alpha\beta} = \left(\frac{\partial u}{\partial \varepsilon_{\alpha\beta}} \right)_{s, c_j^{(i)}}, \quad \mu_j^{(i)} = \left(\frac{\partial u}{\partial c_j^{(i)}} \right)_{T, \varepsilon_{\alpha\beta}, \{c_{l \neq j}^{(k \neq i)}\}},$$

які називаються рівняннями стану.

Для вихідного стану співвідношення (2.34) можна записати у вигляді

$$T_0 = \left(\frac{\partial u}{\partial s} \right)_{\varepsilon_{\alpha\beta}, c_j^{(i)}}^{(0)}, \quad \frac{1}{\rho} \bar{\Pi}_0^{\alpha\beta} = \left(\frac{\partial u}{\partial \varepsilon_{\alpha\beta}} \right)_{s, c_j^{(i)}}^{(0)}, \quad \mu_{j0}^{(i)} = \left(\frac{\partial u}{\partial c_j^{(i)}} \right)_{T, \varepsilon_{\alpha\beta}, \{c_{l \neq j}^{(k \neq i)}\}}^{(0)}. \quad (2.36)$$

І теорема 2.4 доведена.

Зауважимо, що конкретна структура залежностей (2.35) за макроскопічним описом матеріальної системи може бути встановлена з використанням експериментальних даних або методами фізики твердого тіла.

2.5. Рівняння балансу питомої енергії

Теорема 2.5. Якщо в термодинамічній системі виконуються балансові співвідношення для концентрації компонент (2.14) та внутрішньої енергії, а також рівняння Гіббса у формі (2.32), то має місце рівняння балансу питомої ентропії

$$\rho \frac{ds}{dt} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_s + \frac{\sigma_s}{T}. \quad (2.37)$$

Доведення. Домножимо рівняння Гіббса (2.32) на величину ρ/dt :

$$\rho \frac{ds}{dt} = \frac{1}{T} \left(\rho \frac{du}{dt} + \Pi^{\alpha\beta} \frac{d\varepsilon_{\alpha\beta}}{dt} - \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N \mu_j^{(i)} \rho \frac{dc_j^{(i)}}{dt} \right).$$

Підставимо в отримане рівняння співвідношення (2.10), (2.186) і (2.27). Тоді отримаємо

$$\rho \frac{ds}{dt} = \frac{1}{T} \left[-\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_Q - \vec{\nabla} \cdot \left(\sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \mu_j^{(i)} \vec{J}_j^{(i)} \right) + \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \vec{J}_j^{(i)} \cdot \vec{F}_j^{(i)} + \hat{\Pi} : (\vec{\nabla} \otimes \vec{v})^T - \right. \\ \left. - \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \psi_j^{(i)} w_j^{(i)} - P v \vec{\nabla} \cdot \vec{v} + \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \mu_j^{(i)} \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_j^{(i)} - \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \mu_j^{(i)} w_j^{(i)} \right]. \quad (2.38)$$

Врахуємо, що

$$\frac{1}{T} \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_Q = \vec{\nabla} \cdot \frac{\vec{J}_Q}{T} - \vec{J}_Q \cdot \vec{\nabla} \frac{1}{T}, \quad \vec{\nabla} \frac{1}{T} = -\frac{1}{T^2} \vec{\nabla} T \quad \text{і} \\ \mu_j^{(i)} \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_j^{(i)} = \vec{\nabla} \cdot (\mu_j^{(i)} \vec{J}_j^{(i)}) - \vec{J}_j^{(i)} \cdot \vec{\nabla} \mu_j^{(i)}. \quad (2.39)$$

Тоді

$$\rho \frac{ds}{dt} = -\vec{\nabla} \cdot \frac{\vec{J}_Q}{T} + \vec{J}_Q \cdot \vec{\nabla} \frac{1}{T} + \frac{1}{T} \left[\sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \vec{J}_j^{(i)} \cdot (\vec{F}_j^{(i)} - \vec{\nabla} \mu_j^{(i)}) + \hat{\Pi} : (\vec{\nabla} \otimes \vec{v})^T + \right. \\ \left. + P v \vec{\nabla} \cdot \vec{v} - \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \psi_j^{(i)} w_j^{(i)} - \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \mu_j^{(i)} w_j^{(i)} \right].$$

Знехтуємо ефектами в'язкості і прийнемо $\hat{\Pi} = -P \hat{I}$ (де \hat{I} - одиничний тензор).

Тоді маємо

$$\rho \frac{ds}{dt} = -\vec{\nabla} \cdot \frac{\vec{J}_Q}{T} + \vec{J}_Q \cdot \vec{\nabla} \frac{1}{T} + \frac{1}{T} \left[\sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \vec{J}_j^{(i)} \cdot (\vec{F}_j^{(i)} - \vec{\nabla} \mu_j^{(i)}) - \right. \\ \left. - \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \psi_j^{(i)} w_j^{(i)} - \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \mu_j^{(i)} w_j^{(i)} \right]. \quad (2.40)$$

Позначимо

$$\vec{J}_s = \frac{\vec{J}_Q}{T} \quad (2.41)$$

- потік ентропії;

$$\vec{X}_Q = -\frac{1}{T} \vec{\nabla} T \quad (2.42)$$

- векторна термодинамічна сила, що обумовлює теплопровідність і є спряженою до потоку тепла \vec{J}_Q ;

$$\vec{X}_j^{(i)} = -\vec{\nabla}(\mu_j^{(i)} + \psi_j^{(i)}) \quad (2.43)$$

- векторні термодинамічні сили дифузії, спряжені до векторних потоків дифузії $\vec{J}_j^{(i)}$.

Розглянемо дві останні суми рівності (2.40). Оскільки $\psi_j^{(0)} = \psi_j^{(1)} = \dots = \psi_j^{(N)} = \psi$, то враховуючи умови (2.12а), яким задовольняють потужності виробництва маси $w_j^{(i)}$, отримаємо

$$\sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \psi_j^{(i)} w_j^{(i)} = \psi \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N w_j^{(i)} = 0.$$

Прийmemo до уваги тільки процеси переходу домішкових частинок між адсорбованими на скелеті шарами води і поровим розчином $\omega_{12}^{(i)}$ ($i = \overline{1, N}$) та поверхнею і об'ємом скелету $\omega_{23}^{(i)}$ ($i = \overline{1, N}$), тобто відмінними від нуля будуть потужності виробництва маси за рахунок процесів сорбції-десорбції $\omega_{12}^{(i)}$, $\omega_{21}^{(i)}$, $\omega_{23}^{(i)}$, $\omega_{32}^{(i)}$.

Крім цього потужності виробництва маси $\bar{w}_j^{(i)}$ для компонент $i = \overline{1, N}$ підпорядковуються умовам

$$\begin{aligned} \bar{w}_j^{(i)} &= \bar{w}_j^{(i-1)} + \bar{w}_j^{(i+1)} + \bar{w}_j^{(iN)}, \quad \bar{w}_j^{(11)} = 0, \\ \bar{w}_j^{(i+1i)} &= -\bar{w}_j^{(ii+1)} \quad (i = \overline{1, N}, j = \overline{1, 3}), \\ \bar{w}_j^{(ii \pm l)} &= 0 \text{ для } l \geq 2, \quad \bar{w}_j^{(ii)} = 0 \text{ для } \forall i; \quad \bar{w}_j^{(iN)} = -\bar{w}_j^{(Ni)}, \\ \bar{w}_j^{(N)} &= \sum_{i=1}^{N-1} \bar{w}_j^{(Ni)} = -\sum_{i=1}^{N-1} \bar{w}_j^{(iN)}; \quad \bar{w}_j^{(i)} = 0 \quad (j = 4; 5); \\ \bar{w}^{(i)} &= \bar{w}_1^{(i)} = \bar{w}_2^{(i)} = \bar{w}_3^{(i)} \quad (i = \overline{1, N}). \end{aligned}$$

Тоді маємо

$$\sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \mu_j^{(i)} w_j^{(i)} = \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \mu_j^{(i)} \left[\sum_{k=1}^5 \omega_{jk}^{(i)} + \bar{w}_j^{(i)} \right]. \quad (2.44)$$

Перший доданок правої частини (2.44) можна перетворити до вигляду

$$\sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \sum_{k=1}^5 \mu_j^{(i)} \omega_{jk}^{(i)} = \sum_{i=1}^N \left[-(\mu_2^{(i)} - \mu_1^{(i)}) \omega_{12}^{(i)} - (\mu_3^{(i)} - \mu_2^{(i)}) \omega_{23}^{(i)} \right].$$

Позначимо

$$\omega_1^{(i)} = \omega_{12}^{(i)}, \quad \omega_2^{(i)} = \omega_{23}^{(i)} \quad (i = \overline{1, N}) \quad (2.45)$$

- скалярні масові потоки, які визначають інтенсивність переходу домішкових частинок відповідно між поровим розчином і поверхнею скелету та між адсорбованою водою і об'ємом скелету;

$$X_1^{(i)} = \mu_2'^{(i)} - \mu_1'^{(i)}, \quad X_2^{(i)} = \mu_3'^{(i)} - \mu_2'^{(i)} \quad (i = \overline{1, N}) \quad (2.46)$$

- скалярні термодинамічні сили, спряжені до відповідних масових потоків $\omega_j^{(i)}$.

Другий доданок правої частини рівності (2.44) можемо подати так

$$\sum_{i=0}^N \mu_j'^{(i)} \bar{w}_j^{(i)} = - \sum_{i=1}^{N-1} (\mu_j'^{(i+1)} - \mu_j'^{(i)}) \bar{w}_j^{(i+1)} - \sum_{i=1}^{N-1} (\mu_j'^{(N)} - \mu_j'^{(i)}) \bar{w}_j^{(iN)}, \quad (2.47)$$

де приймаємо, що

$$\bar{w}_j^{(ik)}, \quad \bar{w}_j^{(iN)} \quad (i, k = \overline{1, N-1}) \quad (2.48)$$

- скалярні масові потоки, які характеризують розпад частинок домішкової речовини, вважаємо відомими;

$$\bar{X}_j^{(i)} = \mu_j'^{(i+1)} - \mu_j'^{(i)}, \quad \bar{X}_j^{(Ni)} = \mu_j'^{(N)} - \mu_j'^{(i)} \quad (i = \overline{1, N}, j = \overline{1, 3}) \quad (2.49)$$

- скалярні величини, спряжені до відповідних масових потоків $\bar{w}_j^{(ik)}$, $\bar{w}_j^{(iN)}$ відповідно, які визначають супутнє тепловиділення в процесі розпаду.

Тоді з використанням позначень (2.41)-(2.43), (2.45)-(2.49) рівняння (2.40) перепишемо у вигляді

$$\rho \frac{ds}{dt} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_s + \frac{1}{T} \left[\vec{J}_Q \cdot \vec{X}_Q + \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \vec{J}_j^{(i)} \cdot \vec{X}_j^{(i)} + \sum_{k=1}^2 \sum_{i=1}^N \omega_k^{(i)} X_k^{(i)} + \sum_{i=1}^N q^{(i)} \right]$$

або остаточно

$$\rho \frac{ds}{dt} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_s + \frac{\sigma_s}{T},$$

де $\sigma_s^{(j)} = \vec{J}_Q \cdot \vec{X}_Q + \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \vec{J}_j^{(i)} \cdot \vec{X}_j^{(i)} + \sum_{k=1}^2 \sum_{i=1}^N \omega_k^{(i)} X_k^{(i)} + \sum_{j=1}^3 q_j \geq 0$ - потужність вироб-

ництва ентропії, $q_j = \sum_{i=1}^{N-1} \bar{X}_j^{(i)} \bar{w}_j^{(i+1)} + \sum_{i=1}^{N-1} \bar{X}_j^{(Ni)} \bar{w}_j^{(iN)}$ - локальні тепловиділення при

розпаді компонент.

Отже, теорема доведена.

Зауважимо, що додатна означеність потужності виробництва ентропії є наслідком другого закону термодинаміки [171, 183].

2.6. Кінетичні співвідношення

Ми маємо сукупність спряжених величин – термодинамічні сили і відповідні термодинамічні потоки:

$$\vec{X}_Q \div \vec{J}_Q, \quad \vec{X}_j^{(i)} \div \vec{J}_j^{(i)}, \quad X_k^{(i)} \div \omega_k^{(i)}.$$

У вихідному стані сукупність спряжених термодинамічних потоків і сил приймає значення

$$\vec{X}_{Q0} \div \vec{J}_{Q0}, \quad \vec{X}_{j0}^{(i)} \div \vec{J}_{j0}^{(i)}, \quad X_{k0}^{(i)} \div \omega_{k0}^{(i)}.$$

Постулат 2.3. Термодинамічні потоки є функціями термодинамічних сил, структура функціональних залежностей яких задовольняє другий закон термодинаміки та умови взаємності Онзагера.

Тобто мають місце:

I. Функціональні залежності

$$\begin{aligned} J_Q &= J_Q(X_Q, X_{j=1}^{(0)}, \dots, X_{j=5}^{(N)}, X_{k=1}^{(1)}, \dots, X_{k=1}^{(N)}, X_{k=2}^{(1)}, \dots, X_{k=2}^{(N)}), \\ J_j^{(i)} &= J_j^{(i)}(\vec{X}_Q, X_{j=1}^{(0)}, \dots, X_{j=5}^{(N)}, X_{k=1}^{(1)}, \dots, X_{k=1}^{(N)}, X_{k=2}^{(1)}, \dots, X_{k=2}^{(N)}), \\ \omega_k^{(i)} &= \omega_k^{(i)}(X_Q, X_{j=1}^{(0)}, \dots, X_{j=5}^{(N)}, X_{k=1}^{(1)}, \dots, X_{k=1}^{(N)}, X_{k=2}^{(1)}, \dots, X_{k=2}^{(N)}). \end{aligned} \quad (2.50)$$

Вирази (2.50) записані для скалярних компонент відповідних векторних потоків і сил. Причому мається на увазі, що

$$X_Q = (X_1^Q, X_2^Q, X_3^Q), \quad J_Q = (J_1^Q, J_2^Q, J_3^Q);$$

$$X_j^{(i)} = (X_1^{(i)j}, X_2^{(i)j}, X_3^{(i)j}), \quad J_j^{(i)} = (J_1^{(i)j}, J_2^{(i)j}, J_3^{(i)j}), \quad i = \overline{0, N}, \quad j = \overline{0, 5},$$

де X_α^Q , J_α^Q , $X_\alpha^{(i)j}$, $X_\alpha^{(i)j}$ - відповідні декартові складові ($\alpha = \overline{1, 3}$).

II. Другий закон термодинаміки у вигляді

$$\sigma_s^{(j)} = \vec{J}_Q \cdot \vec{X}_Q + \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \vec{J}_j^{(i)} \cdot \vec{X}_j^{(i)} + \sum_{k=1}^2 \sum_{i=1}^N \omega_k^{(i)} X_k^{(i)} + \sum_{j=1}^3 q_j \geq 0. \quad (2.51)$$

III. Умови взаємності Онзагера [171, 183]

$$\frac{\partial \vec{J}_Q}{\partial \vec{X}_j^{(i)}} = \frac{\partial \vec{J}_j^{(i)}}{\partial \vec{X}_Q}, \quad \frac{\partial \vec{J}_Q}{\partial X_k^{(i)}} = \frac{\partial \omega_k^{(i)}}{\partial \vec{X}_Q}, \quad \frac{\partial \omega_k^{(i)}}{\partial \vec{X}_j^{(i)}} = \frac{\partial \vec{J}_j^{(i)}}{\partial X_k^{(i)}}. \quad (2.52)$$

Тут похідні означені формулами

$$\frac{\partial \vec{J}}{\partial \vec{X}} \equiv \overset{\alpha}{i} \otimes \frac{\partial \vec{J}}{\partial X_0^\alpha}, \quad \vec{X} \equiv \overset{\alpha}{i} X_0^\alpha,$$

де $\vec{i}_0^\alpha = g_0^{\alpha\beta} \vec{i}_\beta^0$ - контраваріантні базисні вектори, $g_0^{\alpha\beta}$ - контраваріантні компоненти

метричного тензора декартової системи координат.

Враховуючи вигляд функціональної залежності (2.51) виробництва ентропії від термодинамічних потоків і сил, можна ввести кінетичний потенціал [171, 235]

$$\Phi = \Phi\left(\vec{X}_Q, \{\vec{X}_j^{(i)}\}, \{X_k^{(i)}\}\right), \quad (2.53)$$

диференціал якого має вигляд

$$d\Phi = \vec{J}_Q \cdot d\vec{X}_Q + \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \vec{J}_j^{(i)} \cdot d\vec{X}_j^{(i)} + \sum_{k=1}^2 \sum_{i=1}^N \omega_k^{(i)} dX_k^{(i)}. \quad (2.54)$$

Співвідношення (2.53) і (2.54) дозволяють записати загальну форму кінетичних рівнянь у вигляді

$$\vec{J}_Q = \frac{\partial\Phi}{\partial\vec{X}_Q}, \quad \vec{J}_j^{(i)} = \frac{\partial\Phi}{\partial\vec{X}_j^{(i)}}, \quad \omega_k^{(i)} = \frac{\partial\Phi}{\partial X_k^{(i)}}. \quad (2.55)$$

Зауважимо, що у початковому рівноважному однорідному стані термодинамічні сили і потоки дорівнюють нулю, тобто

$$\vec{X}_{Q0} = \vec{X}_{j0}^{(i)} = X_{k0}^{(i)} = 0, \quad \vec{J}_{Q0} = \vec{J}_{j0}^{(i)} = \omega_{k0}^{(i)} = 0. \quad (2.56)$$

Відзначимо також, що залежність (2.53) може бути встановлена на основі експериментальних даних або визначена методами фізики твердого тіла.

Записані співвідношення складають повну систему рівнянь для знаходження введених у розгляд величин.

2.7. Лінійні рівняння стану

Введемо у розгляд нову термодинамічну функцію – вільну енергію Гельмгольца $f = u - Ts$, яка визначена в просторі температури T , коваріантних компонент тензора деформації $\{\varepsilon_{\alpha\beta}\}$ і концентрацій $\{c_j^{(i)}\}$, тобто

$$f = f\left(T, \{\varepsilon_{\alpha\beta}\}, \{c_j^{(i)}\}\right). \quad (2.57)$$

Рівняння Гіббса для вільної енергії f відповідно до (2.32)

$$df = -sdT + \frac{1}{\rho} \Pi^{\alpha\beta} d\varepsilon_{\alpha\beta} + \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N \mu_j^{(i)} dc_j^{(i)}. \quad (2.58)$$

Тому зі співвідношень (2.57) і (2.58) маємо наступну загальну форму рівнянь стану

$$s = \left(\frac{\partial f}{\partial T} \right)_{\varepsilon_{\alpha\beta}, c_j^{(i)}}, \quad \frac{1}{\rho} \bar{\Pi}^{\alpha\beta} = \left(\frac{\partial f}{\partial \varepsilon_{\alpha\beta}} \right)_{s, c_j^{(i)}}, \quad \mu_j^{(i)} = \left(\frac{\partial f}{\partial c_j^{(i)}} \right)_{T, \varepsilon_{\alpha\beta}, \{c_{l \neq j}^{(k \neq i)}\}}, \quad (2.59)$$

які для вихідного стану набувають значень

$$s_0 = \left(\frac{\partial f}{\partial T} \right)_{\varepsilon_{\alpha\beta}, c_j^{(i)}}^{(0)}, \quad \frac{1}{\rho} \bar{\Pi}_0^{\alpha\beta} = \left(\frac{\partial f}{\partial \varepsilon_{\alpha\beta}} \right)_{s, c_j^{(i)}}^{(0)}, \quad \mu_{j0}^{(i)} = \left(\frac{\partial f}{\partial c_j^{(i)}} \right)_{T, \varepsilon_{\alpha\beta}, \{c_{l \neq j}^{(k \neq i)}\}}^{(0)}.$$

Теорема 2.6. Якщо вільна енергія Гельмгольца є дійсною тричі диференційованою функцією температури, коваріантних компонент тензора деформації та концентрацій, то мають місце лінійні рівняння стану

$$\begin{aligned} s - s_0 &= T_0^{-1} c_V t + \sum_{\alpha, \beta} \alpha^{\alpha\beta} \varepsilon_{\alpha\beta} - \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N d_{ij}^{(i)} c_j^{(i)}, \\ \frac{\bar{\Pi}^{\alpha\beta}}{\rho} &= \alpha^{\alpha\beta} t + \sum_{\gamma, \delta} \beta^{\alpha\beta\gamma\delta} \varepsilon_{\gamma\delta} + \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N \gamma_j^{\alpha\beta(i)} c_j^{(i)}, \\ \mu_j^{(i)} - \mu_{j0}^{(i)} &= d_{ij}^{(i)} t + \sum_{\alpha, \beta} \gamma_j^{\alpha\beta(i)} \varepsilon_{\alpha\beta} + d_j^{(i)} c_j^{(i)}, \end{aligned} \quad (2.60)$$

де $t = T - T_0$ - відхилення абсолютної температури.

Доведення. Якщо вільна енергія Гельмгольца f є дійсною тричі диференційованою функцією змінних T , $\{\varepsilon_{\alpha\beta}\}$ і $\{C_j^{(i)}\}$ в околі вихідного стану, то у випадку малих відхилень цих змінних від значень у початковому стані

$$(T - T_0)/T_0 \ll 1, \quad \varepsilon_{\alpha\beta} \ll 1, \quad C_j^{(i)} - C_{j0}^{(i)} \ll 1$$

можемо розкласти її в ряд Тейлора до квадратичних членів включно. Тоді, враховуючи (2.59) і те, що $\bar{\Pi}_0^{\alpha\beta} = 0$, отримаємо

$$\begin{aligned} f &= f_0 - s_0 t + \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N \mu_{j0}^{(i)} c_j^{(i)} - \frac{1}{2} \left(\frac{\partial s}{\partial T} \right)_0 t^2 + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \delta} \left(\frac{\partial (\bar{\Pi}^{\alpha\beta} / \rho)}{\partial \varepsilon_{\gamma\delta}} \right)_0 \varepsilon_{\alpha\beta} \varepsilon_{\gamma\delta} + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N \left(\frac{\partial \mu_j^{(i)}}{\partial c_j^{(i)}} \right)_0 c_j^{(i)2} + \sum_{\alpha, \beta} \left(\frac{\partial (\bar{\Pi}^{\alpha\beta} / \rho)}{\partial T} \right)_0 t \varepsilon_{\alpha\beta} + \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N \left(\frac{\partial \mu_j^{(i)}}{\partial T} \right)_0 t c_j^{(i)} + \\ &+ \frac{1}{2} \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N \sum_{\alpha\beta} \left(\frac{\partial \mu_j^{(i)}}{\partial \varepsilon_{\alpha\beta}} \right)_0 \varepsilon_{\alpha\beta} c_j^{(i)}. \end{aligned} \quad (2.61)$$

Введемо матеріальні характеристики системи

$$c_V = T_0 \left(\frac{\partial s}{\partial T} \right)_0, \quad d_j^{(i)} = \left(\frac{\partial \mu_j^{(i)}}{\partial c_j^{(i)}} \right)_0, \quad d_{ij}^{(i)} = T_0 \left(\frac{\partial \mu_j^{(i)}}{\partial T} \right)_0,$$

$$\alpha^{\alpha\beta} = \left(\frac{\partial (\bar{\Pi}^{\alpha\beta} / \rho)}{\partial T} \right)_0, \quad \beta^{\alpha\beta\gamma\delta} = \left(\frac{\partial (\bar{\Pi}^{\alpha\beta} / \rho)}{\partial \varepsilon_{\gamma\delta}} \right)_0, \quad \gamma_j^{\alpha\beta(i)} = \left(\frac{\partial \mu_j^{(i)}}{\partial \varepsilon_{\alpha\beta}} \right)_0. \quad (2.62)$$

Підставляючи розклад вільної енергії Гельмгольца (2.61) у формули (2.59) і враховуючи введені матеріальні характеристики системи (2.62), знаходимо лінійні рівняння стану

$$s - s_0 = T_0^{-1} c_V t + \sum_{\alpha,\beta} \alpha^{\alpha\beta} \varepsilon_{\alpha\beta} - \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N d_{ij}^{(i)} c_j^{(i)},$$

$$\frac{\bar{\Pi}^{\alpha\beta}}{\rho} = \alpha^{\alpha\beta} t + \sum_{\gamma,\delta} \beta^{\alpha\beta\gamma\delta} \varepsilon_{\gamma\delta} + \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N \gamma_j^{\alpha\beta(i)} c_j^{(i)},$$

$$\mu_j^{(i)} - \mu_{j0}^{(i)} = d_{ij}^{(i)} t + \sum_{\alpha,\beta} \gamma_j^{\alpha\beta(i)} \varepsilon_{\alpha\beta} + d_j^{(i)} c_j^{(i)}.$$

І теорема доведена.

Для ізотропних систем лінійні рівняння стану можна привести до вигляду [22]

$$s - s_0 = T_0^{-1} c_V t + \alpha \frac{K}{\rho} \varepsilon - \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N d_{ij}^{(i)} c_j^{(i)},$$

$$\frac{\bar{\Pi}_{\alpha\beta}}{\rho} = \left[\left(K - \frac{2}{3} G \right) \varepsilon - K \left(\alpha t + \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N d_{sj}^{(i)} c_j^{(i)} \right) \right] \delta_{\alpha\beta} + 2G \varepsilon_{\alpha\beta},$$

$$\mu_j^{(i)} - \mu_{j0}^{(i)} = d_{ij}^{(i)} t - d_{sj}^{(i)} \frac{K}{\rho} \varepsilon + \bar{a}_{cj}^{(i)} c_j^{(i)}. \quad (2.60a)$$

Тут використано наступні позначення

$$K = \frac{1}{3} \left(\frac{\partial \Pi}{\partial \varepsilon} \right)_{T, \{c_j^{(i)}\}}$$

- модуль об'ємного стиску, де $\Pi = \Pi_{\alpha}^{\alpha}$ - перший інваріант тензора напружень;

$$\alpha = \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial T} \right)_{\{\Pi^{\alpha\beta}\}, \{c_j^{(i)}\}}$$

- температурний коефіцієнт об'ємного розширення матеріалу;

$$\bar{a}_{cj}^{(i)} = \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial c_j^{(i)}} \right)_{T, \{\Pi^{\alpha\beta}\}, \{c_{l \neq j}^{(k \neq i)}\}}$$

- концентраційні коефіцієнти об'ємного розширення матеріалу;

$$G = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \Pi^{\alpha\beta}}{\partial \varepsilon_{\alpha\beta}} \right)_{T, \{c_j^{(i)}\}, \{\alpha \neq \beta\}}$$

- модуль зсуву.

2.8. Лінійні кінетичні співвідношення

Теорема 2.7. Якщо для ізотропного тіла кінетичний потенціал Φ (2.53) є дійсною тричі диференційованою функцією термодинамічних сил, тоді мають місце лінійні кінетичні співвідношення

$$\begin{aligned} \bar{J}_Q &= L_{QQ} \bar{X}_Q + \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N L_{Qj}^{(i)} \bar{X}_j^{(i)}, \\ \bar{J}_j^{(i)} &= L_{jQ}^{(i)} \bar{X}_Q + \sum_{m=1}^4 \sum_{n=0}^N L_{jm}^{(in)} \bar{X}_m^{(n)}, \\ \omega_k^{(i)} &= \sum_{m=1}^2 \sum_{l=1}^N \lambda_{km}^{(il)} X_m^{(l)}. \end{aligned} \quad (2.63)$$

Доведення. Нехай функція $\Phi = \Phi(\bar{X}_Q, \{\bar{X}_j^{(i)}\}, \{X_k^{(i)}\})$ є дійсною тричі диференційованою, тоді в околі вихідного рівноважного стану можемо розкласти її в ряд Тейлора до другого порядку включно. Маємо

$$\begin{aligned} \Phi &= \Phi_0 + \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \bar{X}_Q} \right)_0 \cdot \bar{X}_Q + \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \bar{X}_j^{(i)}} \right)_0 \cdot \bar{X}_j^{(i)} + \sum_{k=1}^2 \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial \Phi}{\partial X_k^{(i)}} \right)_0 X_k^{(i)} + \\ &\frac{1}{2} \left[\left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \bar{X}_Q^2} \right)_0 : \bar{X}_Q \otimes \bar{X}_Q + 2 \sum_{m=1}^4 \sum_{n=0}^N \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \bar{X}_j^{(i)} \partial \bar{X}_m^{(n)}} \right)_0 : \bar{X}_j^{(i)} \otimes \bar{X}_m^{(n)} + \right. \\ &+ 2 \sum_{m=1}^2 \sum_{l=1}^N \sum_{k=1}^2 \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial X_k^{(i)} \partial X_m^{(l)}} \right)_0 X_k^{(i)} X_m^{(l)} + 2 \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \bar{X}_Q \partial \bar{X}_j^{(i)}} \right)_0 : \bar{X}_Q \otimes \bar{X}_j^{(i)} + \\ &\left. + 2 \sum_{k=1}^2 \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \bar{X}_Q \partial X_k^{(i)}} \right)_0 \cdot \bar{X}_Q X_k^{(i)} + 2 \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N \sum_{k=1}^2 \sum_{l=1}^N \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \bar{X}_j^{(i)} \partial X_k^{(l)}} \right)_0 \cdot \bar{X}_j^{(i)} X_k^{(l)} \right]. \end{aligned}$$

Зазначимо, що у початковому стані термодинамічні сили \bar{X}_{Q0} , $\bar{X}_{j0}^{(i)}$, $X_{k0}^{(i)} = 0$ для $\forall i, j, k$. Тоді, враховуючи співвідношення (2.55), (2.56), маємо

$$\begin{aligned} \Phi = & \Phi_0 + \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \bar{X}_Q^2} \right)_0 : \bar{X}_Q \otimes \bar{X}_Q + 2 \sum_{m=1}^4 \sum_{n=0}^N \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \bar{X}_j^{(i)} \partial \bar{X}_m^{(n)}} \right)_0 : \bar{X}_j^{(i)} \otimes \bar{X}_m^{(n)} + \right. \\ & + 2 \sum_{m=1}^2 \sum_{l=1}^N \sum_{k=1}^2 \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial X_k^{(i)} \partial X_m^{(l)}} \right)_0 X_k^{(i)} X_m^{(l)} + 2 \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \bar{X}_Q \partial \bar{X}_j^{(i)}} \right)_0 : \bar{X}_Q \otimes \bar{X}_j^{(i)} + \\ & \left. + 2 \sum_{k=1}^2 \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \bar{X}_Q \partial X_k^{(i)}} \right)_0 \cdot \bar{X}_Q X_k^{(i)} + 2 \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N \sum_{k=1}^2 \sum_{l=1}^N \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \bar{X}_j^{(i)} \partial X_k^{(l)}} \right)_0 \cdot \bar{X}_j^{(i)} X_k^{(l)} \right] \end{aligned}$$

В ізотропних системах явища, які описуються термодинамічними силами і потоками різного тензорного рангу, не впливають один на одного (принцип Кюрі для ізотропного тіла [171, 183, 239]).

Застосуємо принцип Кюрі, тоді одержимо

$$\begin{aligned} \Phi = & \Phi_0 + \frac{1}{2} \left[\left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \bar{X}_Q^2} \right)_0 : \bar{X}_Q \otimes \bar{X}_Q + 2 \sum_{m=1}^4 \sum_{n=0}^N \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \bar{X}_j^{(i)} \partial \bar{X}_m^{(n)}} \right)_0 : \bar{X}_j^{(i)} \otimes \bar{X}_m^{(n)} + \right. \\ & \left. + 2 \sum_{m=1}^2 \sum_{l=1}^N \sum_{k=1}^2 \sum_{i=1}^N \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial X_k^{(i)} \partial X_m^{(l)}} \right)_0 X_k^{(i)} X_m^{(l)} + 2 \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \bar{X}_Q \partial \bar{X}_j^{(i)}} \right)_0 : \bar{X}_Q \otimes \bar{X}_j^{(i)} \right]. \quad (2.64) \end{aligned}$$

Під кінетичними матеріальними характеристиками (коефіцієнтами) надалі будемо розуміти характеристики об'єкта дослідження, які можна виразити через значення спряжених термодинамічних потоків і сил. Означимо їх наступним чином

$$\begin{aligned} L_{QQ} &= \left(\frac{\partial \bar{J}_Q}{\partial \bar{X}_Q} \right)_0, & L_{jm}^{(in)} &= \left(\frac{\partial \bar{J}_j^{(i)}}{\partial \bar{X}_m^{(n)}} \right)_0, \\ L_{Qj}^{(i)} &= \left(\frac{\partial \bar{J}_Q}{\partial \bar{X}_j^{(i)}} \right)_0 = \left(\frac{\partial \bar{J}_j^{(i)}}{\partial \bar{X}_Q} \right)_0, & \lambda_{km}^{(il)} &= \left(\frac{\partial \omega_k^{(i)}}{\partial X_m^{(l)}} \right)_0. \end{aligned}$$

Врахуємо у формулі (2.64) означення введених кінетичних матеріальних коефіцієнтів. Тоді розклад кінетичного потенціалу запишемо у вигляді

$$\Phi = \Phi_0 + \frac{1}{2} \left[L_{QQ} \bar{X}_Q^2 + 2 \sum_{m=1}^4 \sum_{n=0}^N \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N L_{jm}^{in} \bar{X}_j^{(i)} \cdot \bar{X}_m^{(n)} + \right.$$

$$+ 2 \left[\sum_{m=1}^2 \sum_{l=1}^N \sum_{k=1}^2 \sum_{i=1}^N \lambda_{km}^{(il)} X_k^{(i)} X_m^{(l)} + 2 \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N L_{Qj}^{(i)} \bar{X}_Q \cdot \bar{X}_j^{(i)} \right]. \quad (2.65)$$

Підставимо формулу (2.65) у співвідношення (2.55). Отримаємо лінійні кінетичні співвідношення

$$\vec{J}_Q = L_{QQ} \bar{X}_Q + \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N L_{Qj}^{(i)} \bar{X}_j^{(i)}, \quad \vec{J}_j^{(i)} = L_{jQ}^{(i)} \bar{X}_Q + \sum_{m=1}^4 \sum_{n=0}^N L_{jm}^{(in)} \bar{X}_m^{(n)},$$

$$\omega_k^{(i)} = \sum_{m=1}^2 \sum_{l=1}^N \lambda_{km}^{(il)} X_m^{(l)},$$

що і треба було довести.

Зауваження 2.3. Як наслідок умов взаємності Онзагера (2.52) коефіцієнти рівнянь (2.63) повинні задовольняти умови

$$\omega_k^{(i)} = \sum_{m=1}^2 \sum_{l=1}^N \lambda_{km}^{(il)} X_m^{(l)}, \quad (2.66)$$

Наслідком другого закону термодинаміки (2.51) є певні обмеження на коефіцієнти кінетичних рівнянь, зокрема

$$L_{QQ}, L_{jj}^{(ii)}, \lambda_{kk}^{(ii)} \geq 0, \quad L_{QQ} L_{jj}^{(ii)} - L_{Qj}^{(i)2} \geq 0,$$

$$L_{jj}^{(ii)} L_{mm}^{(nn)} \geq (L_{jm}^{(in)} + L_{mj}^{(ni)})^2 / 4, \quad \lambda_{kk}^{(ii)} \lambda_{mm}^{(ll)} \geq (\lambda_{km}^{(il)} + \lambda_{mk}^{(li)})^2 / 4. \quad (2.67)$$

Надалі будемо враховувати ці умови та обмеження.

2.9. Повна система рівнянь моделі

Повну систему рівнянь математичної моделі термомеханогетеродифузії домішкових речовин двома шляхами з пастками за каскадного розпаду мігруючих частинок складають: кінематичні співвідношення, рівняння стану, балансові співвідношення та кінетичні рівняння.

У попередніх підрозділах для визначення функцій T , s , $\bar{\Pi}$, ε , $\mu_j^{(i)}$, $C_j^{(i)}$, $w_j^{(i)}$, ρ , \vec{v} , \vec{J}_Q , \bar{X}_Q , $\vec{J}_j^{(i)}$, $\bar{X}_j^{(i)}$, $X_k^{(i)}$ ми отримали такі співвідношення:

балансові рівняння

$$\rho \frac{ds}{dt} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_s + \frac{\sigma_s}{T}, \quad (2.37)$$

$$\rho \frac{d\vec{v}}{dt} = -\vec{\nabla} \cdot \hat{\Pi} + \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \rho_j^{(i)} \vec{F}_j^{(i)}, \quad (2.19)$$

$$\rho \frac{d\Psi}{dt} = -\vec{\nabla} \cdot \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \psi_j^{(i)} \vec{J}_j^{(i)} - \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \rho_j^{(i)} \vec{F}_j^{(i)} \cdot \vec{v} - \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \vec{J}_j^{(i)} \cdot \vec{F}_j^{(i)} + \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \psi_j^{(i)} w_j^{(i)}, \quad (2.21)$$

$$\rho \frac{d}{dt} \left(\frac{v^2}{2} \right) = \vec{\nabla} \cdot (\vec{v} \cdot \hat{\Pi}) - \hat{\Pi} : \vec{\nabla} \otimes \vec{v} + \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \rho_j^{(i)} \vec{F}_j^{(i)} \cdot \vec{v}, \quad (2.23)$$

$$\begin{aligned} \rho \frac{du}{dt} = & -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_Q - \vec{\nabla} \cdot \left(\sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \mu_j^{(i)} \vec{J}_j^{(i)} \right) + \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \vec{J}_j^{(i)} \cdot \vec{F}_j^{(i)} + \\ & + \hat{\Pi} : (\vec{\nabla} \otimes \vec{v})^T + \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \psi_j^{(i)} w_j^{(i)}, \end{aligned} \quad (2.27)$$

$$\rho \frac{dC_1^{(0)}}{dt} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_1^{(0)} + \omega_1^{(0)} - \bar{w}_1^{(1)} - \bar{w}_1^{(N)},$$

$$\rho \frac{dC_1^{(i)}}{dt} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_1^{(i)} + \omega_1^{(i)} + \bar{w}_1^{(i-1)} - \bar{w}_1^{(i+1)} - \bar{w}_1^{(N)}, \quad i = \overline{1, N-1},$$

$$\rho \frac{dC_1^{(N)}}{dt} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_1^{(N)} + \omega_1^{(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} \bar{w}_1^{(i)};$$

$$\rho \frac{dC_2^{(0)}}{dt} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_2^{(0)} - \omega_1^{(0)} + \omega_2^{(0)} - \bar{w}_2^{(1)} - \bar{w}_2^{(N)},$$

$$\rho \frac{dC_2^{(i)}}{dt} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_2^{(i)} - \omega_1^{(i)} + \omega_2^{(i)} + \bar{w}_2^{(i-1)} - \bar{w}_2^{(i+1)} - \bar{w}_2^{(N)}, \quad i = \overline{1, N-1},$$

$$\rho \frac{dC_2^{(N)}}{dt} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_2^{(N)} - \omega_1^{(N)} + \omega_2^{(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} \bar{w}_2^{(i)};$$

$$\rho \frac{dC_3^{(0)}}{dt} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_3^{(0)} - \omega_2^{(0)} - \bar{w}_3^{(1)} - \bar{w}_3^{(N)},$$

$$\rho \frac{dC_3^{(i)}}{dt} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_3^{(i)} - \omega_2^{(i)} + \bar{w}_3^{(i-1)} - \bar{w}_3^{(i+1)} - \bar{w}_3^{(N)}, \quad i = \overline{1, N-1},$$

$$\rho \frac{dC_3^{(N)}}{dt} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_3^{(N)} - \omega_2^{(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} \bar{w}_3^{(i)};$$

$$\rho \frac{dC_l^{(0)}}{dt} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_l^{(0)}, \quad l = 4, 5; \quad (2.14)$$

рівняння Гіббса

$$\rho \frac{du}{dt} = T\rho \frac{ds}{dt} + \Pi^{\alpha\beta} \frac{d\varepsilon_{\alpha\beta}}{dt} + \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N \mu_j^{(i)} \frac{dc_j^{(i)}}{dt}; \quad (2.33)$$

рівняння стану

$$T = \left(\frac{\partial u}{\partial s} \right)_{\varepsilon_{\alpha\beta}, c_j^{(i)}}, \quad \frac{1}{2\rho} \bar{\Pi}^{\alpha\beta} = \left(\frac{\partial u}{\partial \varepsilon_{\alpha\beta}} \right)_{s, c_j^{(i)}}, \quad \mu_j^{(i)} = \left(\frac{\partial u}{\partial c_j^{(i)}} \right)_{T, \varepsilon_{\alpha\beta}, \{c_{l \neq j}^{(k \neq i)}\}},$$

або їх лінійний варіант для анізотропного тіла

$$\begin{aligned} s - s_0 &= T_0^{-1} c_V t + \sum_{\alpha, \beta} \alpha^{\alpha\beta} \varepsilon_{\alpha\beta} - \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N d_{ij}^{(i)} c_j^{(i)}, \\ \frac{\bar{\Pi}^{\alpha\beta}}{\rho} &= \alpha^{\alpha\beta} t + \sum_{\gamma, \delta} \beta^{\alpha\beta\gamma\delta} \varepsilon_{\gamma\delta} + \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N \gamma_j^{\alpha\beta(i)} c_j^{(i)}, \\ \mu_j^{(i)} - \mu_{j0}^{(i)} &= d_{ij}^{(i)} t + \sum_{\alpha, \beta} \gamma_j^{\alpha\beta(i)} \varepsilon_{\alpha\beta} + d_j^{(i)} c_j^{(i)}; \end{aligned} \quad (2.60)$$

зокрема, для ізотропного тіла

$$\begin{aligned} s - s_0 &= T_0^{-1} c_V t + \alpha \frac{K}{\rho} \varepsilon - \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N d_{ij}^{(i)} c_j^{(i)}, \\ \frac{\bar{\Pi}_{\alpha\beta}}{\rho} &= \left[\left(K - \frac{2}{3} G \right) \varepsilon - K \left(\alpha t + \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N d_{\sigma j}^{(i)} c_j^{(i)} \right) \right] \delta_{\alpha\beta} + 2G \varepsilon_{\alpha\beta}, \\ \mu_j^{(i)} - \mu_{j0}^{(i)} &= d_{ij}^{(i)} t - d_{\sigma j}^{(i)} \frac{K}{\rho} \varepsilon + \bar{a}_{cj}^{(i)} c_j^{(i)}; \end{aligned} \quad (2.60a)$$

кінетичні співвідношення

$$\bar{J}_Q = \frac{\partial \Phi}{\partial \bar{X}_Q}, \quad \bar{J}_j^{(i)} = \frac{\partial \Phi}{\partial \bar{X}_j^{(i)}}, \quad \omega_k^{(i)} = \frac{\partial \Phi}{\partial X_k^{(i)}}, \quad (2.55)$$

або їх лінійний варіант

$$\begin{aligned} \bar{J}_Q &= L_{QQ} \bar{X}_Q + \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N L_{Qj}^{(i)} \bar{X}_j^{(i)}, \\ \bar{J}_j^{(i)} &= L_{jQ}^{(i)} \bar{X}_Q + \sum_{m=1}^4 \sum_{n=0}^N L_{jm}^{(in)} \bar{X}_m^{(n)}, \\ \omega_k^{(i)} &= \sum_{m=1}^2 \sum_{l=1}^N \lambda_{km}^{(il)} X_m^{(l)}; \end{aligned} \quad (2.63)$$

термодинамічні сили

$$\bar{X}_Q = -\frac{1}{T} \bar{\nabla} T, \quad \bar{X}_j^{(i)} = -\bar{\nabla}(\mu_j^{(i)} + \psi_j^{(i)}), \quad (2.42)$$

$$X_1^{(i)} = \mu_2^{(i)} - \mu_1^{(i)}, \quad X_2^{(i)} = \mu_3^{(i)} - \mu_2^{(i)} \quad (i = \overline{1, N}); \quad (2.46)$$

співвідношення для локального тепловиділення при розпаді компонент

$$q_j = \sum_{i=1}^{N-1} \bar{X}_j^{(i)} \bar{w}_j^{(ii+1)} + \sum_{i=1}^{N-1} \bar{X}_j^{(Ni)} \bar{w}_j^{(iN)};$$

умови нормування

$$\sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N C_j^{(i)} = 1, \quad \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \bar{J}_j^{(i)} = 0, \quad \sum_k \omega_k^{(i)} = 0 \quad \text{для } \forall i; \quad (2.15)$$

інші співвідношення

$$\bar{J}_s = \bar{J}_Q / T, \quad (2.41)$$

$$\sigma_s^{(j)} = \bar{J}_Q \cdot \bar{X}_Q + \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \bar{J}_j^{(i)} \cdot \bar{X}_j^{(i)} + \sum_{k=1}^2 \sum_{i=1}^N \omega_k^{(i)} X_k^{(i)} + \sum_{j=1}^3 q_j$$

та умови

$$\omega_{jj}^{(i)} = 0 \quad (\forall j), \quad \omega_{jk}^{(i)} = -\omega_{kj}^{(i)} \quad (\forall i, j, k), \quad \sum_{j=1}^5 \sum_{k=1}^5 \omega_{jk}^{(i)} = 0 \quad (\forall i); \quad (2.126)$$

$$\bar{w}_j^{(i)} = \bar{w}_j^{(ii-1)} + \bar{w}_j^{(ii+1)} + \bar{w}_j^{(iN)}, \quad \bar{w}_j^{(11)} = 0,$$

$$\bar{w}_j^{(i+1i)} = -\bar{w}_j^{(ii+1)} \quad (i = \overline{1, N}, j = \overline{1, 3}),$$

$$\bar{w}_j^{(ii+l)} = 0 \quad \text{для } l \geq 2, \quad \bar{w}_j^{(ii)} = 0 \quad \text{для } \forall i; \quad \bar{w}_j^{(iN)} = -\bar{w}_j^{(Ni)},$$

$$\bar{w}_j^{(N)} = \sum_{i=1}^{N-1} \bar{w}_j^{(Ni)} = -\sum_{i=1}^{N-1} \bar{w}_j^{(iN)}; \quad \bar{w}_j^{(i)} = 0 \quad (j = 4; 5);$$

$$\bar{w}^{(i)} = \bar{w}_1^{(i)} = \bar{w}_2^{(i)} = \bar{w}_3^{(i)} \quad (i = \overline{1, N}).$$

Зауважимо, що при використанні співвідношень повної моделі мають виконуватись умови (2.66), (2.67).

2.10. Ключова система рівнянь гетеродифузії домішок за їх каскадного розпаду

Частина із записаних рівнянь є кінцевими співвідношеннями, зокрема, рівняння стану (2.60) і кінетичні рівняння (2.63), які дають можливість подати ряд функцій шуканого розв'язку, наприклад, s , $\mu_j^{(i)}$, $\bar{\Pi}^{\alpha\beta}$, $\omega_k^{(i)}$, $\bar{J}_j^{(i)}$, \bar{J}_Q , через спряжені, тобто T ,

$C_j^{(i)}$, $\varepsilon_{\alpha\beta}$, $X_k^{(i)}$, \bar{X}_Q , $\bar{X}_j^{(i)}$. Це дозволяє зменшити кількість шуканих функцій невідомого розв'язку. Вибір мінімальної кількості функцій, які називають розв'язуючими, необхідних для представлення повного розв'язку, неоднозначний і залежить від специфіки задачі та потреби максимального спрощення її математичної постановки. Виберемо надалі в якості розв'язуючих функцій t , ρ , u^β , $c_j^{(i)}$, де u^β - компоненти тензора переміщення $\vec{u} = \vec{r} - \vec{r}_0$ точок континууму \mathbf{K}_c ($\beta = \overline{1,3}$). Підкреслимо, що $\varepsilon_{\alpha\beta} = \frac{1}{2}(\partial u_\alpha / \partial x_\beta + \partial u_\beta / \partial x_\alpha)$.

Зупинимось детальніше на отриманні ключових рівнянь математичної моделі гетеродифузії розпадної речовини двома шляхами у середовищі з пастками.

Якщо у кінетичні рівняння для термодинамічних потоків (2.63) підставити вирази для термодинамічних сил (2.42), (2.43), (2.46), то отримаємо

$$\begin{aligned}\bar{J}_Q &= -\left(\frac{L_{QQ}}{T} \vec{\nabla} T + \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N L_{Qj}^{(i)} \vec{\nabla} \mu_j^{(i)}\right), \\ \bar{J}_j^{(i)} &= -\left(\frac{L_{jQ}^{(i)}}{T} \vec{\nabla} T + \sum_{m=1}^4 \sum_{n=0}^N L_{jm}^{(in)} \vec{\nabla} \mu_m^{(n)}\right), \\ \omega_k^{(i)} &= \sum_{l=0}^N \left[\lambda_{k1}^{(il)} (\mu_2^{(l)} - \mu_1^{(l)}) + \lambda_{k2}^{(il)} (\mu_3^{(l)} - \mu_2^{(l)}) \right].\end{aligned}$$

Хімічні потенціали виразимо через розв'язуючі функції за допомогою лінійних рівнянь стану (2.60). Прийнемо матеріальні характеристики (2.62) незалежними від координат, тоді знайдемо

$$\begin{aligned}\bar{J}_Q &= -\left[\left(\frac{L_{QQ}}{T} + \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N L_{Qj}^{(i)} d_{ij}^{(i)} \right) \vec{\nabla} T + \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N L_{Qj}^{(i)} d_{ij}^{(i)} \frac{K}{\rho} \vec{\nabla} \varepsilon + \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N L_{Qj}^{(i)} d_{ij}^{(i)} \vec{\nabla} c_j^{(i)} \right], \\ \bar{J}_j^{(i)} &= -\left[\left(\frac{L_{jQ}^{(i)}}{T} + \sum_{m=1}^4 \sum_{n=0}^N L_{jm}^{(in)} d_m^{(n)} \right) \vec{\nabla} T + \sum_{m=1}^4 \sum_{n=0}^N L_{jm}^{(in)} d_{sm}^{(n)} \frac{K}{\rho} \vec{\nabla} \varepsilon + \right. \\ &\quad \left. + \sum_{m=1}^4 \sum_{n=0}^N L_{jm}^{(in)} d_m^{(n)} \vec{\nabla} c_m^{(n)} \right], \\ \omega_k^{(i)} &= \sum_{l=0}^N \left[\bar{\lambda}_{kt}^{(il)} t + E_k^{(il)} + \bar{\lambda}_{k1}^{(il)} c_1^{(l)} + \bar{\lambda}_{k2}^{(il)} c_2^{(l)} + \bar{\lambda}_{k3}^{(il)} c_3^{(l)} + M_k^{(il)} \right],\end{aligned}\tag{2.68}$$

де $\bar{\lambda}_{kt}^{(il)} = -\lambda_{k1}^{(il)} d_{t1}^{(l)} + (\lambda_{k1}^{(il)} - \lambda_{k2}^{(il)}) d_{t2}^{(l)} + \lambda_{k2}^{(il)} d_{t3}^{(l)}$ - кінетичні коефіцієнти переходу частинок між станами, пов'язані зі змінами температури;

$$E_k^{(il)} = \sum_{\alpha,\beta} \left[\bar{\lambda}_{k\epsilon 1}^{\alpha\beta(il)} \epsilon_{\alpha\beta 1}^{(l)} + \bar{\lambda}_{k\epsilon 2}^{\alpha\beta(il)} \epsilon_{\alpha\beta 2}^{(l)} + \bar{\lambda}_{k\epsilon 3}^{\alpha\beta(il)} \epsilon_{\alpha\beta 3}^{(l)} \right]; \quad \bar{\lambda}_{k\epsilon 1}^{\alpha\beta(il)} = -\lambda_{k1}^{(il)} \gamma_1^{\alpha\beta(l)}, \quad \bar{\lambda}_{k\epsilon 2}^{\alpha\beta(il)} = (\lambda_{k1}^{(il)} - \lambda_{k2}^{(il)}) \gamma_2^{\alpha\beta(l)},$$

$\bar{\lambda}_{k\epsilon 3}^{\alpha\beta(il)} = \lambda_{k2}^{(il)} \gamma_3^{\alpha\beta(l)}$ - кінетичні коефіцієнти переходу частинок між станами, пов'язані зі

змінами напружень; $\bar{\lambda}_{k1}^{(il)} = -\lambda_{k1}^{(il)} d_1^{(l)}$, $\bar{\lambda}_{k2}^{(il)} = (\lambda_{k1}^{(il)} - \lambda_{k2}^{(il)}) d_2^{(l)}$, $\bar{\lambda}_{k3}^{(il)} = \lambda_{k2}^{(il)} d_3^{(l)}$ -

концентраційні коефіцієнти інтенсивності процесів переходу частинок з одного

шляху міграції на інший; $M_k^{(il)} = -\lambda_{k1}^{(il)} \mu_{10}^{(l)} + (\lambda_{k1}^{(il)} - \lambda_{k2}^{(il)}) \mu_{20}^{(l)} + \lambda_{k2}^{(il)} \mu_{30}^{(l)}$ - сталі моделі.

Зазначимо, що ми знехтували прискоренням вільного падіння $\vec{g} = -\vec{\nabla}\psi$.

Сума членів виразу (2.69) типу $\bar{\lambda}_{kt}^{(il)} t + E_k^{(il)} + \bar{\lambda}_{k1}^{(il)} c_1^{(l)} + \bar{\lambda}_{k2}^{(il)} c_2^{(l)} + \bar{\lambda}_{k3}^{(il)} c_3^{(l)} + M_k^{(il)}$ описує виробництво маси компонента термодинамічної системи. На початку ми припустили, що зміна маси домішки може відбуватись за рахунок переходів домішкових частинок між різними (трьома) станами і внаслідок розпаду частинок. Тобто $M_k^{(il)} \equiv 0$.

Враховуючи вираз для q_j у виробництві ентропії, прийнемо також, що в лінійному наближенні

$$\bar{w}_j^{(i)} = -\tilde{d}_{ij}^{(i)} t - \tilde{\gamma}_j^{(i)} \epsilon + \tilde{\lambda}_j^{(i-1)} c_j^{(i-1)} - \tilde{\lambda}_j^{(i+1)} c_j^{(i)} - \tilde{\lambda}_j^{(iN)} c_j^{(i)},$$

де $\tilde{d}_{ij}^{(i)}$, $\tilde{\gamma}_j^{(i)}$, $\tilde{\lambda}_j^{(i-1)}$, $\tilde{\lambda}_j^{(i+1)}$, $\tilde{\lambda}_j^{(iN)}$ - сталі, які визначають процес розпаду, $\epsilon = \sum \epsilon_{\alpha\alpha}$ - кульова частина тензора деформації.

Врахуємо, що $\frac{1}{T} \vec{\nabla} T = \vec{\nabla}(\ln(t + T_0)) = \vec{\nabla}[t + T_0 - 1 + \dots] \approx \vec{\nabla} t$. Якщо у співвідношення балансу концентрації компонент (2.14) підставимо вирази для термодинамічних потоків домішки з формул (2.68), то отримаємо рівняння гетеродифузії у вигляді для $i = 0$

$$\rho \frac{dc_1^{(0)}}{dt} = \vec{\nabla} \cdot \left[D_1^{t(0)} \vec{\nabla} t + D_1^{\epsilon(0)} \vec{\nabla} \epsilon + \sum_{m=1}^4 \sum_{n=0}^N D_{1m}^{(0n)} \vec{\nabla} c_m^{(n)} \right] + \lambda_{1t}^{(0)} t + E_1^{(0)} +$$

$$+ \sum_{l=0}^N \left[\bar{\lambda}_{11}^{(0l)} c_1^{(l)} + \bar{\lambda}_{12}^{(0l)} c_2^{(l)} + \bar{\lambda}_{13}^{(0l)} c_3^{(l)} \right] - \tilde{\lambda}_1^{(1)} c_1^{(0)} - \tilde{\lambda}_1^{(0N)} c_1^{(0)},$$

$$\begin{aligned}
\rho \frac{dc_2^{(0)}}{dt} &= -\vec{\nabla} \cdot \left[D_2^{t(0)} \vec{\nabla} t + D_2^{\varepsilon(0)} \vec{\nabla} \varepsilon + \sum_{m=1}^4 \sum_{n=0}^N D_{2m}^{(0n)} \vec{\nabla} c_m^{(n)} \right] + \lambda_{2t}^{(0)} t + E_2^{(0)} - \\
&- \sum_{l=0}^N \left[\bar{\lambda}_{11}^{(0l)} c_1^{(l)} + \bar{\lambda}_{12}^{(0l)} c_2^{(l)} + \bar{\lambda}_{13}^{(0l)} c_3^{(l)} \right] + \sum_{l=0}^N \left[\bar{\lambda}_{21}^{(0l)} c_1^{(l)} + \bar{\lambda}_{22}^{(0l)} c_2^{(l)} + \bar{\lambda}_{23}^{(0l)} c_3^{(l)} \right] - \tilde{\lambda}_2^{(1)} c_2^{(0)} - \tilde{\lambda}_2^{(0N)} c_2^{(0)}, \\
\rho \frac{dc_3^{(0)}}{dt} &= -\vec{\nabla} \cdot \left[D_3^{t(0)} \vec{\nabla} t + D_3^{\varepsilon(0)} \vec{\nabla} \varepsilon + \sum_{m=1}^4 \sum_{n=0}^N D_{3m}^{(0n)} \vec{\nabla} c_m^{(n)} \right] + \lambda_{3t}^{(0)} t + E_3^{(0)} - \\
&- \sum_{l=0}^N \left[\bar{\lambda}_{21}^{(0l)} c_1^{(l)} + \bar{\lambda}_{22}^{(0l)} c_2^{(l)} + \bar{\lambda}_{23}^{(0l)} c_3^{(l)} \right] + \sum_{l=0}^N \left[\bar{\lambda}_{31}^{(0l)} c_1^{(l)} + \bar{\lambda}_{32}^{(0l)} c_2^{(l)} + \bar{\lambda}_{33}^{(0l)} c_3^{(l)} \right] - \tilde{\lambda}_3^{(1)} c_3^{(0)} - \tilde{\lambda}_3^{(0N)} c_3^{(0)};
\end{aligned}$$

для $i = \overline{1, N-1}$

$$\begin{aligned}
\rho \frac{dc_1^{(i)}}{dt} &= \vec{\nabla} \cdot \left[D_1^{t(i)} \vec{\nabla} t + D_1^{\varepsilon(i)} \vec{\nabla} \varepsilon + \sum_{m=1}^4 \sum_{n=0}^N D_{1m}^{(in)} \vec{\nabla} c_m^{(n)} \right] + \lambda_{1t}^{(i)} t + E_1^{(i)} + \\
&+ \sum_{l=0}^N \left[\bar{\lambda}_{11}^{(il)} c_1^{(l)} + \bar{\lambda}_{12}^{(il)} c_2^{(l)} + \bar{\lambda}_{13}^{(il)} c_3^{(l)} \right] + \tilde{\lambda}_1^{(i-1)} c_1^{(i-1)} - \tilde{\lambda}_1^{(i+1)} c_1^{(i)} - \tilde{\lambda}_1^{(iN)} c_1^{(i)}, \\
\rho \frac{dc_2^{(i)}}{dt} &= -\vec{\nabla} \cdot \left[D_2^{t(i)} \vec{\nabla} t + D_2^{\varepsilon(i)} \vec{\nabla} \varepsilon + \sum_{m=1}^4 \sum_{n=0}^N D_{2m}^{(in)} \vec{\nabla} c_m^{(n)} \right] + \lambda_{2t}^{(i)} t + E_2^{(i)} - \\
&- \sum_{l=0}^N \left[\bar{\lambda}_{11}^{(il)} c_1^{(l)} + \bar{\lambda}_{12}^{(il)} c_2^{(l)} + \bar{\lambda}_{13}^{(il)} c_3^{(l)} \right] + \sum_{l=0}^N \left[\bar{\lambda}_{21}^{(il)} c_1^{(l)} + \bar{\lambda}_{22}^{(il)} c_2^{(l)} + \bar{\lambda}_{23}^{(il)} c_3^{(l)} \right] + \\
&\quad + \tilde{\lambda}_2^{(i-1)} c_2^{(i-1)} - \tilde{\lambda}_2^{(i+1)} c_2^{(i)} - \tilde{\lambda}_2^{(iN)} c_2^{(i)}, \\
\rho \frac{dc_3^{(i)}}{dt} &= -\vec{\nabla} \cdot \left[D_3^{t(i)} \vec{\nabla} t + D_3^{\varepsilon(i)} \vec{\nabla} \varepsilon + \sum_{m=1}^4 \sum_{n=0}^N D_{3m}^{(in)} \vec{\nabla} c_m^{(n)} \right] + \lambda_{3t}^{(i)} t + E_3^{(i)} - \\
&- \sum_{l=0}^N \left[\bar{\lambda}_{21}^{(il)} c_1^{(l)} + \bar{\lambda}_{22}^{(il)} c_2^{(l)} + \bar{\lambda}_{23}^{(il)} c_3^{(l)} \right] + \sum_{l=0}^N \left[\bar{\lambda}_{31}^{(il)} c_1^{(l)} + \bar{\lambda}_{32}^{(il)} c_2^{(l)} + \bar{\lambda}_{33}^{(il)} c_3^{(l)} \right] + \\
&\quad + \tilde{\lambda}_3^{(i-1)} c_3^{(i-1)} - \tilde{\lambda}_3^{(i+1)} c_3^{(i)} - \tilde{\lambda}_3^{(iN)} c_3^{(i)},
\end{aligned}$$

для $i = N$

$$\begin{aligned}
\rho \frac{dc_1^{(N)}}{dt} &= \vec{\nabla} \cdot \left[D_1^{t(N)} \vec{\nabla} t + D_1^{\varepsilon(N)} \vec{\nabla} \varepsilon + \sum_{m=1}^4 \sum_{n=0}^N D_{1m}^{(Nn)} \vec{\nabla} c_m^{(n)} \right] + \lambda_{1t}^{(N)} t + E_1^{(N)} + \\
&+ \sum_{l=0}^N \left[\bar{\lambda}_{11}^{(Nl)} c_1^{(l)} + \bar{\lambda}_{12}^{(Nl)} c_2^{(l)} + \bar{\lambda}_{13}^{(Nl)} c_3^{(l)} \right] + \sum_{i=0}^{N-1} \tilde{\lambda}_1^{(iN)} c_1^{(i)},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\rho \frac{dc_2^{(N)}}{dt} = & -\vec{\nabla} \cdot \left[D_2^{t(N)} \vec{\nabla} t + D_2^{\varepsilon(N)} \vec{\nabla} \varepsilon + \sum_{m=1}^4 \sum_{n=0}^N D_{2m}^{(Nn)} \vec{\nabla} c_m^{(n)} \right] + \lambda_{2t}^{(N)} t + E_2^{(N)} - \\
& - \sum_{l=0}^N \left[\bar{\lambda}_{11}^{(Nl)} c_1^{(l)} + \bar{\lambda}_{12}^{(Nl)} c_2^{(l)} + \bar{\lambda}_{13}^{(Nl)} c_3^{(l)} \right] + \\
& + \sum_{l=0}^N \left[\bar{\lambda}_{21}^{(Nl)} c_1^{(l)} + \bar{\lambda}_{22}^{(Nl)} c_2^{(l)} + \bar{\lambda}_{23}^{(Nl)} c_3^{(l)} \right] + \sum_{i=0}^{N-1} \tilde{\lambda}_2^{(iN)} c_2^{(i)}, \\
\rho \frac{dc_3^{(N)}}{dt} = & -\vec{\nabla} \cdot \left[D_3^{t(N)} \vec{\nabla} t + D_3^{\varepsilon(N)} \vec{\nabla} \varepsilon + \sum_{m=1}^4 \sum_{n=0}^N D_{3m}^{(Nn)} \vec{\nabla} c_m^{(n)} \right] + \lambda_{3t}^{(N)} t + E_3^{(N)} - \\
& - \sum_{l=0}^N \left[\bar{\lambda}_{21}^{(Nl)} c_1^{(l)} + \bar{\lambda}_{22}^{(Nl)} c_2^{(l)} + \bar{\lambda}_{23}^{(Nl)} c_3^{(l)} \right] + \\
& + \sum_{l=0}^N \left[\bar{\lambda}_{31}^{(Nl)} c_1^{(l)} + \bar{\lambda}_{32}^{(Nl)} c_2^{(l)} + \bar{\lambda}_{33}^{(Nl)} c_3^{(l)} \right] + \sum_{i=0}^{N-1} \tilde{\lambda}_3^{(iN)} c_3^{(i)}. \tag{2.69}
\end{aligned}$$

$$\text{Тут } D_j^{t(i)} = L_{jQ}^{(i)} + \sum_{m=1}^4 \sum_{n=0}^N L_{jm}^{(in)} d_m^{(n)}, \quad D_j^{\varepsilon(i)} = \sum_{m=1}^4 \sum_{n=0}^N L_{jm}^{(in)} d_{sm}^{(n)} \frac{K}{\rho}, \quad D_{jm}^{(in)} = L_{jm}^{(in)} d_m^{(n)} -$$

$$\text{кінетичні коефіцієнти дифузії; } \lambda_{kt}^{(i)} = \sum_{l=0}^N \bar{\lambda}_{kt}^{(il)} - \tilde{d}_{tk}^{(i)}, \quad E_k^{(i)} = \sum_{l=0}^N E_k^{(il)} - \tilde{\gamma}_k^{(i)} \varepsilon.$$

Аналогічним шляхом одержуємо рівняння дифузії частинок води

$$\rho \frac{dc_4^{(0)}}{dt} = -\vec{\nabla} \cdot \left[D_4^t \vec{\nabla} t + D_4^{\varepsilon} \vec{\nabla} \varepsilon + \sum_{m=1}^4 \sum_{n=0}^N D_{4m}^{(0n)} \vec{\nabla} c_m^{(n)} \right], \tag{2.70}$$

де D_4^t , D_4^{ε} , $D_{4m}^{(0n)}$ - коефіцієнти дифузії частинок води (записані через введені раніше коефіцієнти лінійних рівнянь стану і кінетичних співвідношень).

Зазначимо, що частинки скелету є відліковими, не змінюють свій стан та не розпадаються. Їхню концентрацію можна визначити з умови нормування (2.15). Також тут враховано, що хімічні реакції, які призвели до розпаду домішкових речовин є незворотними.

Прийmemo, що коефіцієнти рівнянь (2.69), (2.70) є незалежними від координат, і знехтуємо конвективною складовою: $d/dt \cong \partial/\partial t$. Врахуємо, що домішкова речовина одного хімічного сорту розпадається однаково у різних станах (рис. 2.2),

тобто $\tilde{\lambda}^{(i)} = \tilde{\lambda}_j^{(i)}$, $\tilde{\lambda}^{(i+1)} = \tilde{\lambda}_j^{(i+1)}$, $\tilde{\lambda}^{(iN)} = \tilde{\lambda}_j^{(iN)}$. Також врахуємо тільки процеси дифузії та сорбції-десорбції частинок одного хімічного виду. Тоді маємо *рівняння гетеродифузії*

для $i = 0$

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_1^{(0)}}{\partial t} &= D_1^{t(0)} \Delta t + D_1^{\varepsilon(0)} \Delta \varepsilon + \sum_{m=1}^3 \bar{D}_{1m}^{(0)} \Delta c_m^{(0)} - \bar{d}_{1t}^{(0)} t - \bar{\gamma}_{1\varepsilon}^{(0)} \varepsilon - \bar{k}_1^{(0)} c_1^{(0)} + \\ &\quad + \bar{k}_2^{(0)} c_2^{(0)} - \tilde{\lambda}_1^{(1)} c_1^{(0)} - \tilde{\lambda}_1^{(0N)} c_1^{(0)}, \\ \frac{\partial c_2^{(0)}}{\partial t} &= \bar{D}_2^{t(0)} \Delta t + \bar{D}_2^{\varepsilon(0)} \Delta \varepsilon + \sum_{m=1}^3 \bar{D}_{2m}^{(0)} \Delta c_m^{(0)} - \bar{d}_{2t}^{(0)} t - \bar{\gamma}_{2\varepsilon}^{(0)} \varepsilon + \bar{k}_1^{(0)} c_1^{(0)} - \\ &\quad - (\bar{k}_2^{(0)} + \bar{k}_3^{(0)}) c_2^{(0)} + \bar{k}_4^{(0)} c_3^{(0)} - \tilde{\lambda}_2^{(1)} c_2^{(0)} - \tilde{\lambda}_2^{(0N)} c_2^{(0)}, \\ \frac{\partial c_3^{(0)}}{\partial t} &= \bar{D}_3^{t(0)} \Delta t + \bar{D}_3^{\varepsilon(0)} \Delta \varepsilon + \sum_{m=1}^3 \bar{D}_{3m}^{(0)} \Delta c_m^{(0)} - \bar{d}_{3t}^{(0)} t - \bar{\gamma}_{3\varepsilon}^{(0)} \varepsilon + \bar{k}_3^{(0)} c_2^{(0)} - \\ &\quad - \bar{k}_4^{(0)} c_3^{(0)} - \tilde{\lambda}_3^{(1)} c_3^{(0)} - \tilde{\lambda}_3^{(0N)} c_3^{(0)}; \end{aligned}$$

для $i = \overline{1, N-1}$

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_1^{(i)}}{\partial t} &= D_1^{t(i)} \Delta t + D_1^{\varepsilon(i)} \Delta \varepsilon + \sum_{m=1}^3 \bar{D}_{1m}^{(i)} \Delta c_m^{(i)} - \bar{d}_{1t}^{(i)} t - \bar{\gamma}_{1\varepsilon}^{(i)} \varepsilon - \bar{k}_1^{(i)} c_1^{(i)} + \\ &\quad + \bar{k}_2^{(i)} c_2^{(i)} + \tilde{\lambda}_1^{(i-1)} c_1^{(i-1)} - \tilde{\lambda}_1^{(i+1)} c_1^{(i)} - \tilde{\lambda}_1^{(iN)} c_1^{(i)}, \\ \frac{\partial c_2^{(i)}}{\partial t} &= \bar{D}_2^{t(i)} \Delta t + \bar{D}_2^{\varepsilon(i)} \Delta \varepsilon + \sum_{m=1}^3 \bar{D}_{2m}^{(i)} \Delta c_m^{(i)} - \bar{d}_{2t}^{(i)} t - \bar{\gamma}_{2\varepsilon}^{(i)} \varepsilon + \bar{k}_1^{(i)} c_1^{(i)} - \\ &\quad - (\bar{k}_2^{(i)} + \bar{k}_3^{(i)}) c_2^{(i)} + \bar{k}_4^{(i)} c_3^{(i)} + \tilde{\lambda}_2^{(i-1)} c_2^{(i-1)} - \tilde{\lambda}_2^{(i+1)} c_2^{(i)} - \tilde{\lambda}_2^{(iN)} c_2^{(i)}, \\ \frac{\partial c_3^{(i)}}{\partial t} &= \bar{D}_3^{t(i)} \Delta t + \bar{D}_3^{\varepsilon(i)} \Delta \varepsilon + \sum_{m=1}^3 \bar{D}_{3m}^{(i)} \Delta c_m^{(i)} - \bar{d}_{3t}^{(i)} t - \bar{\gamma}_{3\varepsilon}^{(i)} \varepsilon + \bar{k}_3^{(i)} c_2^{(i)} - \\ &\quad - \bar{k}_4^{(i)} c_3^{(i)} + \tilde{\lambda}_3^{(i-1)} c_3^{(i-1)} - \tilde{\lambda}_3^{(i+1)} c_3^{(i)} - \tilde{\lambda}_3^{(iN)} c_3^{(i)}; \end{aligned}$$

для $i = N$

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_1^{(N)}}{\partial t} &= D_1^{t(N)} \Delta t + D_1^{\varepsilon(N)} \Delta \varepsilon + \sum_{m=1}^3 \bar{D}_{1m}^{(N)} \Delta c_m^{(N)} - \bar{d}_{1t}^{(N)} t - \bar{\gamma}_{1\varepsilon}^{(N)} \varepsilon - \bar{k}_1^{(N)} c_1^{(N)} + \bar{k}_2^{(N)} c_2^{(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} \tilde{\lambda}_1^{(iN)} c_1^{(i)}, \\ \frac{\partial c_2^{(N)}}{\partial t} &= \bar{D}_2^{t(N)} \Delta t + \bar{D}_2^{\varepsilon(N)} \Delta \varepsilon + \sum_{m=1}^3 \bar{D}_{2m}^{(N)} \Delta c_m^{(N)} - \bar{d}_{2t}^{(N)} t - \bar{\gamma}_{2\varepsilon}^{(N)} \varepsilon + \bar{k}_1^{(N)} c_1^{(N)} - \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\left(\bar{k}_2^{(N)} + \bar{k}_3^{(N)}\right)c_2^{(N)} + \bar{k}_4^{(N)}c_3^{(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} \tilde{\lambda}_2^{(iN)}c_2^{(i)}, \\
\frac{\partial c_3^{(N)}}{\partial t} &= \bar{D}_3^t \Delta t + \bar{D}_3^\varepsilon \Delta \varepsilon + \sum_{m=1}^3 \bar{D}_{3m}^{(N)} \Delta c_m^{(N)} - \bar{d}_{3t}^{(N)}t - \bar{\gamma}_{3\varepsilon}^{(N)}\varepsilon + \bar{k}_3^{(N)}c_2^{(N)} - \\
& - \bar{k}_4^{(N)}c_3^{(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} \tilde{\lambda}_3^{(iN)}c_3^{(i)}; \tag{2.71}
\end{aligned}$$

рівняння дифузії частинок води

$$\frac{dc_4^{(0)}}{dt} = \bar{D}_4^t \Delta t + \bar{D}_4^\varepsilon \Delta \varepsilon + \bar{D}_4^{(0)} \Delta c_4^{(0)}, \tag{2.72}$$

де $\bar{D}_j^{t(i)} = D_j^{t(i)} / \rho$, $\bar{D}_j^{\varepsilon(i)} = D_j^{\varepsilon(i)} / \rho$, $\bar{D}_{jm}^{(i)} = D_{jm}^{(ii)} / \rho$ ($j, m = \bar{1}, \bar{3}$, $i = \bar{0}, \bar{N}$), $\bar{D}_4^t = D_4^t / \rho$, $\bar{D}_4^\varepsilon = D_4^\varepsilon / \rho$, $\bar{D}_4^{(0)} = D_{44}^{(00)} / \rho$ - коефіцієнти дифузії; $\bar{k}_1^{(i)} = -\lambda_{12}^{(ii)} / \rho$, $\bar{k}_2^{(i)} = \lambda_{21}^{(ii)} / \rho$, $\bar{k}_3^{(i)} = \lambda_{23}^{(ii)} / \rho$, $\bar{k}_4^{(i)} = -\lambda_{32}^{(ii)} / \rho$ - коефіцієнти інтенсивності процесів переходу частинок між станами.

Рівняння теплопровідності отримуємо з рівняння балансу ентропії (2.37), підставляючи у нього вираз для густини ентропії з рівнянь стану (2.60) і потоку тепла з кінетичних рівнянь (2.63). Приймаючи матеріальні характеристики незалежними від часу, знайдемо

$$\frac{\rho c_V}{T_0} \frac{dT}{dt} + \rho \alpha \frac{d\varepsilon}{dt} - \rho \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N d_{ij}^{(i)} \frac{dc_j^{(i)}}{dt} = \vec{\nabla} \cdot \left[\kappa \vec{\nabla} T + \kappa_\varepsilon \vec{\nabla} \varepsilon + \sum_{m=1}^4 \sum_{n=0}^N \kappa_j^{(i)} \vec{\nabla} c_j^{(i)} \right] + Q_n, \tag{2.73}$$

де $\kappa = L_{QQ} / T$, $\kappa_\varepsilon = \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N L_{Qj}^{(i)} d_{\sigma j}^{(i)} \frac{K}{\rho T}$, $\kappa_j^{(i)} = L_{Qj}^{(i)} d_j^{(i)} / T$ - коефіцієнти

теплопровідності; $Q_n = \sigma_s (\vec{\nabla} T, \vec{\nabla} \varepsilon, \vec{\nabla} c_j^{(i)}) / T$ - некомпенсоване тепло [60, 218].

Відзначимо, що ліва сторона рівняння (2.73) відображає адіабатичну зв'язність процесів, тобто взаємозалежність шуканих функцій T , ε , $c_j^{(i)}$ для просторово однорідного стану, в якому $\vec{\nabla} T = \vec{\nabla} \varepsilon = \vec{\nabla} c_j^{(i)} = 0$ і $Q_n = 0$.

Якщо знехтувати адіабатичною зв'язністю процесів та прийняти $d/dt \cong \partial/\partial t$, то для сталих кінетичних коефіцієнтів рівняння теплопровідності набуде вигляду

$$\frac{\rho c_V}{T_0} \frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \Delta T + \kappa_\varepsilon \Delta \varepsilon + \sum_{m=1}^4 \sum_{n=0}^N \kappa_j^{(i)} \Delta c_j^{(i)} + Q_n. \tag{2.74}$$

До цих рівнянь ще слід додати рівняння нерозривності (2.18а), яке можна записати у вигляді

$$\frac{1}{\rho} \frac{d\rho}{dt} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{v}. \quad (2.75)$$

Якщо прийняти, що сумарна густина тіла є сталою, то $\vec{\nabla} \cdot \vec{v} = 0$.

Рівняння для визначення вектора переміщень \vec{u} отримуємо з рівняння балансу імпульсу (2.19), рівняння стану (2.60а) та залежності $\varepsilon_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} \right)$. У

результаті отримаємо

$$G\Delta\vec{u} + \left(K + \frac{G}{3} \right) \vec{\nabla} (\vec{\nabla} \cdot \vec{u}) - K\vec{\nabla} \left(\alpha t + \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N d_{\sigma j}^{(i)} c_j^{(i)} \right) + \vec{F} = \rho \frac{\partial^2 \vec{u}}{\partial t^2}. \quad (2.76)$$

У даній роботі це рівняння не аналізується.

Диференціальні рівняння (2.71), (2.72), (2.74)-(2.76) складають ключову систему рівнянь моделі механотермогетеродифузії розпадної речовини.

Результати фізико-хімічних досліджень [128, 177, 235, 276], аналітичних оцінок та числового моделювання [60] показали, що стани домішкових частинок в об'ємі скелету можна розглядати як пастки і покласти $\bar{D}_3^{t(i)} = \bar{D}_3^{\varepsilon(i)} = \bar{D}_{3m}^{(i)} = 0$ для $\forall i = \overline{0, N}$, $\forall m = \overline{1, 3}$. Вплив поля температури t та механічних процесів на процеси масоперенесення незначний, як несуттєвий і взаємозв'язок полів концентрацій $c_j^{(i)}$, незв'язаних процесами переходів частинок. Це означає, що можна покласти $\bar{D}_j^{t(i)} = \bar{D}_j^{\varepsilon(i)} = \bar{d}_{jt}^{(i)} = \bar{\gamma}_{je}^{(i)} = 0$ для $\forall i = \overline{0, N}$, $j = 1, 2$. Знехтуємо також впливом теплових і механічних процесів на масоперенесення частинок води: $\bar{D}_4^t = \bar{D}_4^{\varepsilon} = 0$. Тоді отримаємо ключову систему рівнянь моделі механотермогетеродифузії розпадної речовини двома шляхами у середовищі з пастками:

рівняння гетеродифузії

для $i = 0$

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_1^{(0)}}{\partial t} &= \bar{D}_{11}^{(0)} \Delta c_1^{(0)} + \bar{D}_{12}^{(0)} \Delta c_2^{(0)} - \bar{k}_1^{(0)} c_1^{(0)} + \\ &\quad \bar{k}_2^{(0)} c_2^{(0)} - \tilde{\lambda}_1^{(1)} c_1^{(0)} - \tilde{\lambda}_1^{(0N)} c_1^{(0)}, \end{aligned} \quad (2.77a)$$

$$\frac{\partial c_2^{(0)}}{\partial t} = \bar{D}_{21}^{(0)} \Delta c_1^{(0)} + \bar{D}_{22}^{(0)} \Delta c_2^{(0)} + \bar{k}_1^{(0)} c_1^{(0)} -$$

$$-\left(\bar{k}_2^{(0)} + \bar{k}_3^{(0)}\right)c_2^{(0)} + \bar{k}_4^{(0)}c_3^{(0)} - \tilde{\lambda}_2^{(1)}c_2^{(0)} - \tilde{\lambda}_2^{(0N)}c_2^{(0)}, \quad (2.77\text{б})$$

$$\frac{\partial c_3^{(0)}}{\partial t} = \bar{k}_3^{(0)}c_2^{(0)} - \bar{k}_4^{(0)}c_3^{(0)} - \tilde{\lambda}_3^{(1)}c_3^{(0)} - \tilde{\lambda}_3^{(0N)}c_3^{(0)}; \quad (2.77\text{в})$$

для $i = \overline{1, N-1}$

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_1^{(i)}}{\partial t} = & \bar{D}_{11}^{(i)}\Delta c_1^{(i)} + \bar{D}_{12}^{(i)}\Delta c_2^{(i)} - \bar{k}_1^{(i)}c_1^{(i)} + \\ & + \bar{k}_2^{(i)}c_2^{(i)} + \tilde{\lambda}_1^{(i-1)}c_1^{(i-1)} - \tilde{\lambda}_1^{(i+1)}c_1^{(i)} - \tilde{\lambda}_1^{(iN)}c_1^{(i)}, \end{aligned} \quad (2.78\text{а})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_2^{(i)}}{\partial t} = & \bar{D}_{21}^{(i)}\Delta c_1^{(i)} + \bar{D}_{22}^{(i)}\Delta c_2^{(i)} + \bar{k}_1^{(i)}c_1^{(i)} - \\ & - \left(\bar{k}_2^{(i)} + \bar{k}_3^{(i)}\right)c_2^{(i)} + \bar{k}_4^{(i)}c_3^{(i)} + \tilde{\lambda}_2^{(i-1)}c_2^{(i-1)} - \tilde{\lambda}_2^{(i+1)}c_2^{(i)} - \tilde{\lambda}_2^{(iN)}c_2^{(i)}, \end{aligned} \quad (2.78\text{б})$$

$$\frac{\partial c_3^{(i)}}{\partial t} = \bar{k}_3^{(i)}c_2^{(i)} - \bar{k}_4^{(i)}c_3^{(i)} + \tilde{\lambda}_3^{(i-1)}c_3^{(i-1)} - \tilde{\lambda}_3^{(i+1)}c_3^{(i)} - \tilde{\lambda}_3^{(iN)}c_3^{(i)}; \quad (2.78\text{в})$$

для $i = N$

$$\frac{\partial c_1^{(N)}}{\partial t} = \bar{D}_{11}^{(N)}\Delta c_1^{(N)} + \bar{D}_{12}^{(N)}\Delta c_2^{(N)} - \bar{k}_1^{(N)}c_1^{(N)} + \bar{k}_2^{(N)}c_2^{(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} \tilde{\lambda}_1^{(iN)}c_1^{(i)}, \quad (2.79\text{а})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_2^{(N)}}{\partial t} = & \bar{D}_{21}^{(N)}\Delta c_1^{(N)} + \bar{D}_{22}^{(N)}\Delta c_2^{(N)} + \bar{k}_1^{(N)}c_1^{(N)} - \\ & - \left(\bar{k}_2^{(N)} + \bar{k}_3^{(N)}\right)c_2^{(N)} + \bar{k}_4^{(N)}c_3^{(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} \tilde{\lambda}_2^{(iN)}c_2^{(i)}, \end{aligned} \quad (2.79\text{б})$$

$$\frac{\partial c_3^{(N)}}{\partial t} = \bar{k}_3^{(N)}c_2^{(N)} - \bar{k}_4^{(N)}c_3^{(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} \tilde{\lambda}_3^{(iN)}c_3^{(i)}; \quad (2.79\text{в})$$

рівняння дифузії частинок води

$$\frac{dc_4^{(0)}}{dt} = \vec{\nabla} \cdot \left(\bar{D}_4^{(0)} \vec{\nabla} c_4^{(0)} \right),$$

$$C_5^{(0)} = 1 - \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N C_j^{(i)};$$

рівняння теплопровідності

$$\rho \frac{c_V}{T_0} \frac{\partial T}{\partial t} = \vec{\nabla} \cdot \left(\kappa \vec{\nabla} T \right) + Q_n, \quad (2.80)$$

рівняння для визначення вектора переміщень

$$G\Delta\vec{u} + \left(K + \frac{G}{3}\right)\vec{\nabla}(\vec{\nabla} \cdot \vec{u}) - K\vec{\nabla}\left(\alpha t + \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N d_{\sigma j}^{(i)} c_j^{(i)}\right) + \vec{F} = \rho \frac{\partial^2 \vec{u}}{\partial t^2},$$

рівняння нерозривності

$$\frac{1}{\rho} \frac{d\rho}{dt} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{v}.$$

Таким чином ми отримали $N+1$ взаємозв'язаних систем диференціальних рівнянь гетеродифузії двома шляхами у середовищі з пастками; рівняння дифузії частинок води; рівняння нерозривності, які незалежні між собою і можуть бути розв'язані за відповідних крайових умов, та рівняння теплопровідності, яке розв'язується після знаходження відповідних величин з інших співвідношень, зокрема, концентрацій домішок у ґрунті [32]. Надалі обмежимося дослідженням гетеродифузного перенесення домішкових частинок у середовищі з пастками.

2.11. Ефективні характеристики

Перед тим як перейти до формулювання і розв'язання конкретних задач математичної фізики для спрощення аналізу розв'язків введемо ефективні характеристики досліджуваної системи. Фізичною основою введення таких характеристик є умова локальної термодинамічної рівноваги щодо процесів переходу частинок одного хімічного сорту між різними станами, яка зводиться до рівності хімічних потенціалів відповідних компонент системи, тобто

$$\mu_j^{(i)} = \dots = \mu_k^{(i)} \quad (\vec{\nabla} \mu_j^{(i)} = \dots = \vec{\nabla} \mu_k^{(i)} \neq 0)$$

для кожного $i = \overline{0, N}$, де індекси j та k приймають одне зі своїх значень $\overline{1, 3}$.

Теорема 2.8. Якщо виконується умова локальної термодинамічної рівноваги між другим ($j = 2$) та третім ($j = 3$) станами домішкової речовини, $\mu_2^{(i)} = \mu_3^{(i)}$ ($i = \overline{0, N}$), масоперенесення розпадних частинок підпорядковується взаємозв'язаним системам рівнянь гетеродифузії

для $i = 0$

$$\frac{\partial c_1^{(0)}}{\partial t} = \overline{D}_{11}^{(0)} \Delta c_1^{(0)} + \overline{D}_{12}^{e(0)} \Delta c_2^{e(0)} - \overline{k}_1^{(0)} c_1^{(0)} + \overline{k}_2^{e(0)} c_2^{e(0)} - \widetilde{\lambda}_1^{(1)} c_1^{(0)} - \widetilde{\lambda}_1^{(0N)} c_1^{(0)},$$

$$\frac{\partial c_2^{e(0)}}{\partial t} = \bar{D}_{21}^{(0)} \Delta c_1^{(0)} + \bar{D}_{22}^{e(0)} \Delta c_2^{e(0)} + \bar{k}_1^{(0)} c_1^{(0)} - \bar{k}_2^{e(0)} c_2^{e(0)} - \tilde{\lambda}_2^{e(1)} c_2^{e(0)} - \tilde{\lambda}_2^{e(0N)} c_2^{e(0)},$$

для $i = \overline{1, N-1}$

$$\frac{\partial c_1^{(i)}}{\partial t} = \bar{D}_{11}^{(i)} \Delta c_1^{(i)} + \bar{D}_{12}^{e(i)} \Delta c_2^{e(i)} - \bar{k}_1^{(i)} c_1^{(i)} + \bar{k}_2^{e(i)} c_2^{e(i)} + \tilde{\lambda}_1^{(i-1)} c_1^{(i-1)} - \tilde{\lambda}_1^{(i+1)} c_1^{(i)} - \tilde{\lambda}_1^{(iN)} c_1^{(i)},$$

$$\frac{\partial c_2^{e(i)}}{\partial t} = \bar{D}_{21}^{(i)} \Delta c_1^{(i)} + \bar{D}_{22}^{e(i)} \Delta c_2^{e(i)} + \bar{k}_1^{(i)} c_1^{(i)} - \bar{k}_2^{e(i)} c_2^{e(i)} + \tilde{\lambda}_2^{e(i-1)} c_2^{e(i-1)} - \tilde{\lambda}_2^{e(i+1)} c_2^{e(i)} - \tilde{\lambda}_2^{e(iN)} c_2^{e(i)},$$

для $i = N$

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_1^{(N)}}{\partial t} &= \bar{D}_{11}^{(N)} \Delta c_1^{(N)} + \bar{D}_{12}^{e(N)} \Delta c_2^{e(N)} - \bar{k}_1^{(N)} c_1^{(N)} + \bar{k}_2^{e(N)} c_2^{e(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} \tilde{\lambda}_1^{(iN)} c_1^{(i)}, \\ \frac{\partial c_2^{e(N)}}{\partial t} &= \bar{D}_{21}^{(N)} \Delta c_1^{(N)} + \bar{D}_{22}^{e(N)} \Delta c_2^{e(N)} + \bar{k}_1^{(N)} c_1^{(N)} - \bar{k}_2^{e(N)} c_2^{e(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} \tilde{\lambda}_2^{e(iN)} c_2^{e(i)}. \end{aligned} \quad (2.81)$$

Доведення. Якщо підставити у рівність хімічних потенціалів частинок домішкової речовини у другому та третьому станах відповідні лінійні рівняння стану (2.60), використати введені коефіцієнти та обмеження, то рівність $\mu_2^{(i)} = \mu_3^{(i)}$ еквівалентна формулі

$$\bar{k}_3^{(i)} c_2^{(i)} - \bar{k}_4^{(i)} c_3^{(i)} = 0 \quad \text{для } \forall i = \overline{0, N}. \quad (2.82)$$

Введемо в розгляд сумарну ефективну концентрацію $c_2^{e(i)} = c_2^{(i)} + c_3^{(i)}$. Тоді з умови (2.82) випливає

$$c_2^{e(i)} = \frac{\bar{k}_3^{(i)} + \bar{k}_4^{(i)}}{\bar{k}_4^{(i)}} c_2^{(i)} \quad \text{для } \forall i = \overline{0, N}. \quad (2.83)$$

Додамо рівняння (2.77б) і (2.77в), (2.78б) і (2.78в), (2.79б) і (2.79в). Враховуючи вираз (2.83), отримаємо

для $i = 0$

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_1^{(0)}}{\partial t} &= \bar{D}_{11}^{(0)} \Delta c_1^{(0)} + \frac{\bar{D}_{12}^{(0)} \bar{k}_4^{(0)}}{\bar{k}_3^{(0)} + \bar{k}_4^{(0)}} \Delta c_2^{e(0)} - \bar{k}_1^{(0)} c_1^{(0)} + \\ &\quad \frac{\bar{k}_2^{(0)} \bar{k}_4^{(0)}}{\bar{k}_3^{(0)} + \bar{k}_4^{(0)}} c_2^{e(0)} - \tilde{\lambda}_1^{(1)} c_1^{(0)} - \tilde{\lambda}_1^{(0N)} c_1^{(0)}, \\ \frac{\partial c_2^{e(0)}}{\partial t} &= \bar{D}_{21}^{(0)} \Delta c_1^{(0)} + \frac{\bar{D}_{12}^{(0)} \bar{k}_4^{(0)}}{\bar{k}_3^{(0)} + \bar{k}_4^{(0)}} \Delta c_2^{e(0)} + \bar{k}_1^{(0)} c_1^{(0)} - \end{aligned}$$

$$-\frac{\bar{k}_2^{(0)}\bar{k}_4^{(0)}}{\bar{k}_3^{(0)}+\bar{k}_4^{(0)}}c_2^{e(0)} - \frac{\tilde{\lambda}_2^{(1)}\bar{k}_4^{(0)}}{\bar{k}_3^{(0)}+\bar{k}_4^{(0)}}c_2^{e(0)} - \frac{\tilde{\lambda}_2^{(0N)}\bar{k}_4^{(0)}}{\bar{k}_3^{(0)}+\bar{k}_4^{(0)}}c_2^{e(0)},$$

для $i = \overline{1, N-1}$

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_1^{(i)}}{\partial t} &= \bar{D}_{11}^{(i)}\Delta c_1^{(i)} + \frac{\bar{D}_{12}^{(i)}\bar{k}_4^{(i)}}{\bar{k}_3^{(i)}+\bar{k}_4^{(i)}}\Delta c_2^{e(i)} - \bar{k}_1^{(i)}c_1^{(i)} + \\ &+ \frac{\bar{k}_2^{(i)}\bar{k}_4^{(i)}}{\bar{k}_3^{(i)}+\bar{k}_4^{(i)}}c_2^{e(i)} + \tilde{\lambda}_1^{(i-1)}c_1^{(i-1)} - \tilde{\lambda}_1^{(i+1)}c_1^{(i)} - \tilde{\lambda}_1^{(iN)}c_1^{(i)}, \\ \frac{\partial c_2^{e(i)}}{\partial t} &= \bar{D}_{21}^{(i)}\Delta c_1^{(i)} + \frac{\bar{D}_{22}^{(i)}\bar{k}_4^{(i)}}{\bar{k}_3^{(i)}+\bar{k}_4^{(i)}}\Delta c_2^{e(i)} + \bar{k}_1^{(i)}c_1^{(i)} - \\ &- \frac{\bar{k}_2^{(i)}\bar{k}_4^{(i)}}{\bar{k}_3^{(i)}+\bar{k}_4^{(i)}}c_2^{e(i)} + \frac{\tilde{\lambda}_2^{(i-1)}\bar{k}_4^{(i)}}{\bar{k}_3^{(i)}+\bar{k}_4^{(i)}}c_2^{e(i-1)} - \frac{\tilde{\lambda}_2^{(i+1)}\bar{k}_4^{(i)}}{\bar{k}_3^{(i)}+\bar{k}_4^{(i)}}c_2^{e(i)} - \frac{\tilde{\lambda}_2^{(iN)}\bar{k}_4^{(i)}}{\bar{k}_3^{(i)}+\bar{k}_4^{(i)}}c_2^{e(i)}, \end{aligned}$$

для $i = N$

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_1^{(N)}}{\partial t} &= \bar{D}_{11}^{(N)}\Delta c_1^{(N)} + \frac{\bar{D}_{12}^{(N)}\bar{k}_4^{(N)}}{\bar{k}_3^{(N)}+\bar{k}_4^{(N)}}\Delta c_2^{e(N)} - \bar{k}_1^{(N)}c_1^{(N)} + \\ &+ \frac{\bar{k}_2^{(N)}\bar{k}_4^{(N)}}{\bar{k}_3^{(N)}+\bar{k}_4^{(N)}}c_2^{e(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} \tilde{\lambda}_1^{(iN)}c_1^{(i)}, \\ \frac{\partial c_2^{e(N)}}{\partial t} &= \bar{D}_{21}^{(N)}\Delta c_1^{(N)} + \frac{\bar{D}_{22}^{(N)}\bar{k}_4^{(N)}}{\bar{k}_3^{(N)}+\bar{k}_4^{(N)}}\Delta c_2^{e(N)} + \bar{k}_1^{(N)}c_1^{(N)} - \\ &- \frac{\bar{k}_2^{(N)}\bar{k}_4^{(N)}}{\bar{k}_3^{(N)}+\bar{k}_4^{(N)}}c_2^{e(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} \frac{\tilde{\lambda}_2^{(iN)}\bar{k}_4^{(N)}}{\bar{k}_3^{(N)}+\bar{k}_4^{(N)}}c_2^{e(i)}. \end{aligned} \quad (2.84)$$

Позначимо

$$\begin{aligned} \bar{D}_{12}^{e(i)} &= \frac{\bar{D}_{12}^{(i)}\bar{k}_4^{(i)}}{\bar{k}_3^{(i)}+\bar{k}_4^{(i)}}, & \bar{D}_{22}^{e(i)} &= \frac{\bar{D}_{22}^{(i)}\bar{k}_4^{(i)}}{\bar{k}_3^{(i)}+\bar{k}_4^{(i)}}, & \bar{k}_2^{e(i)} &= \frac{\bar{D}_2^{(i)}\bar{k}_4^{(i)}}{\bar{k}_3^{(i)}+\bar{k}_4^{(i)}}, \\ \tilde{\lambda}_2^{e(i-1)} &= \frac{\tilde{\lambda}_2^{(i-1)}\bar{k}_4^{(i)}}{\bar{k}_3^{(i)}+\bar{k}_4^{(i)}}, & \tilde{\lambda}_2^{e(i+1)} &= \frac{\tilde{\lambda}_2^{(i+1)}\bar{k}_4^{(i)}}{\bar{k}_3^{(i)}+\bar{k}_4^{(i)}}, & \tilde{\lambda}_2^{e(iN)} &= \frac{\tilde{\lambda}_2^{(iN)}\bar{k}_4^{(i)}}{\bar{k}_3^{(i)}+\bar{k}_4^{(i)}}. \end{aligned} \quad (2.85)$$

Тоді з рівнянь (2.84) одержимо системи рівнянь гетеродифузії (2.81). І теорема доведена.

Теорема 2.9. Якщо виконується умова локальної термодинамічної рівноваги між першим ($j=1$) та другим ($j=2$) станами домішкової речовини, $\mu_1^{(i)} = \mu_2^{(i)}$ ($i = \overline{0, N}$), масоперенесення розпадних частинок підпорядковується взаємозв'язаним системам рівнянь дифузії у середовищі з пастками

для $i = 0$

$$\frac{\partial c_1^{e(0)}}{\partial t} = \bar{D}_{11}^{e(0)} \Delta c_1^{e(0)} - \bar{k}_1^{e(0)} c_1^{e(0)} + \bar{k}_4^{(0)} c_3^{(0)} - \tilde{\lambda}_1^{e(1)} c_1^{e(0)} - \tilde{\lambda}_1^{e(0N)} c_1^{e(0)},$$

$$\frac{\partial c_3^{(0)}}{\partial t} = \bar{k}_1^{e(0)} c_1^{e(0)} - \bar{k}_4^{(0)} c_3^{(0)} - \tilde{\lambda}_3^{(1)} c_3^{(0)} - \tilde{\lambda}_3^{(0N)} c_3^{(0)};$$

для $i = \overline{1, N-1}$

$$\frac{\partial c_1^{e(i)}}{\partial t} = \bar{D}_{11}^{e(i)} \Delta c_1^{e(i)} - \bar{k}_1^{e(i)} c_1^{e(i)} + \bar{k}_4^{(i)} c_3^{(i)} + \tilde{\lambda}_1^{e(i-1)} c_1^{e(i-1)} - \tilde{\lambda}_1^{e(i+1)} c_1^{e(i)} - \tilde{\lambda}_1^{e(iN)} c_1^{e(i)}$$

$$\frac{\partial c_3^{(i)}}{\partial t} = \bar{k}_1^{e(i)} c_1^{e(i)} - \bar{k}_4^{(i)} c_3^{(i)} + \tilde{\lambda}_3^{(i-1)} c_3^{(i-1)} - \tilde{\lambda}_3^{(i+1)} c_3^{(i)} - \tilde{\lambda}_3^{(iN)} c_3^{(i)};$$

для $i = N$

$$\frac{\partial c_1^{e(N)}}{\partial t} = \bar{D}_{11}^{e(N)} \Delta c_1^{e(N)} - \bar{k}_1^{e(N)} c_1^{e(N)} + \bar{k}_4^{(N)} c_3^{(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} \tilde{\lambda}_1^{e(iN)} c_1^{e(i)},$$

$$\frac{\partial c_3^{(N)}}{\partial t} = \bar{k}_1^{e(N)} c_1^{e(N)} - \bar{k}_4^{(N)} c_3^{(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} \tilde{\lambda}_3^{(iN)} c_3^{(i)}. \quad (2.86)$$

Доведення. Доводити теорему будемо тим же шляхом, що і попередню.

Рівність $\mu_1^{(i)} = \mu_2^{(i)}$ є еквівалентною формулі

$$\bar{k}_1^{(i)} c_1^{(i)} - \bar{k}_2^{(i)} c_2^{(i)} = 0 \quad \text{для } \forall i = \overline{0, N}. \quad (2.87)$$

Вводимо в розгляд сумарну ефективну концентрацію $c_1^{e(i)} = c_1^{(i)} + c_2^{(i)}$. Тоді з умови (2.87) випливає

$$c_1^{e(i)} = \frac{\bar{k}_1^{(i)} + \bar{k}_2^{(i)}}{\bar{k}_2^{(i)}} c_1^{(i)} \quad \text{для } \forall i = \overline{0, N}. \quad (2.88)$$

Додаємо рівняння (2.77а) і (2.77б), (2.78а) і (2.78б), (2.79а) і (2.79б) і враховуємо вираз (2.88), отримаємо

для $i = 0$

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_1^{e(0)}}{\partial t} &= \frac{\bar{k}_2^{(0)}(\bar{D}_{11}^{(0)} + \bar{D}_{21}^{(0)}) + \bar{k}_1^{(0)}(\bar{D}_{12}^{(0)} + \bar{D}_{22}^{(0)})}{\bar{k}_1^{(0)} + \bar{k}_2^{(0)}} \Delta c_1^{e(0)} - \frac{\bar{k}_1^{(0)}\bar{k}_3^{(0)}}{\bar{k}_1^{(0)} + \bar{k}_2^{(0)}} c_1^{e(0)} + \\ &+ \bar{k}_4^{(0)} c_3^{(0)} - \frac{\tilde{\lambda}_1^{(1)}\bar{k}_2^{(0)}}{\bar{k}_1^{(0)} + \bar{k}_2^{(0)}} c_1^{e(0)} - \frac{\tilde{\lambda}_1^{(0N)}\bar{k}_2^{(0)}}{\bar{k}_1^{(0)} + \bar{k}_2^{(0)}} c_1^{e(0)}, \\ \frac{\partial c_3^{(0)}}{\partial t} &= \frac{\bar{k}_1^{(0)}\bar{k}_3^{(0)}}{\bar{k}_1^{(0)} + \bar{k}_2^{(0)}} c_1^{e(0)} - \bar{k}_4^{(0)} c_3^{(0)} - \tilde{\lambda}_3^{(1)} c_3^{(0)} - \tilde{\lambda}_3^{(0N)} c_3^{(0)}; \end{aligned}$$

для $i = \overline{1, N-1}$

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_1^{e(i)}}{\partial t} &= \frac{\bar{k}_2^{(i)}(\bar{D}_{11}^{(i)} + \bar{D}_{21}^{(i)}) + \bar{k}_1^{(i)}(\bar{D}_{12}^{(i)} + \bar{D}_{22}^{(i)})}{\bar{k}_1^{(i)} + \bar{k}_2^{(i)}} \Delta c_1^{e(i)} - \frac{\bar{k}_1^{(i)}\bar{k}_3^{(i)}}{\bar{k}_1^{(i)} + \bar{k}_2^{(i)}} c_1^{e(i)} + \\ &+ \bar{k}_4^{(i)} c_3^{(i)} + \frac{\tilde{\lambda}_1^{(i-1)}\bar{k}_2^{(i)}}{\bar{k}_1^{(i)} + \bar{k}_2^{(i)}} c_1^{e(i-1)} - \frac{\tilde{\lambda}_1^{(i+1)}\bar{k}_2^{(i)}}{\bar{k}_1^{(i)} + \bar{k}_2^{(i)}} c_1^{e(i)} - \frac{\tilde{\lambda}_1^{(iN)}\bar{k}_2^{(i)}}{\bar{k}_1^{(i)} + \bar{k}_2^{(i)}} c_1^{e(i)}, \\ \frac{\partial c_3^{(i)}}{\partial t} &= \frac{\bar{k}_1^{(i)}\bar{k}_3^{(i)}}{\bar{k}_1^{(i)} + \bar{k}_2^{(i)}} c_1^{e(i)} - \bar{k}_4^{(i)} c_3^{(i)} + \tilde{\lambda}_3^{(i-1)} c_3^{(i-1)} - \tilde{\lambda}_3^{(i+1)} c_3^{(i)} - \tilde{\lambda}_3^{(iN)} c_3^{(i)}; \end{aligned}$$

для $i = N$

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_1^{e(N)}}{\partial t} &= \frac{\bar{k}_2^{(N)}(\bar{D}_{11}^{(N)} + \bar{D}_{21}^{(N)}) + \bar{k}_1^{(N)}(\bar{D}_{12}^{(N)} + \bar{D}_{22}^{(N)})}{\bar{k}_1^{(N)} + \bar{k}_2^{(N)}} \Delta c_1^{e(N)} - \\ &- \frac{\bar{k}_1^{(N)}\bar{k}_3^{(N)}}{\bar{k}_1^{(N)} + \bar{k}_2^{(N)}} c_1^{e(N)} + \bar{k}_4^{(N)} c_3^{(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} \frac{\tilde{\lambda}_1^{(iN)}\bar{k}_2^{(i)}}{\bar{k}_1^{(i)} + \bar{k}_2^{(i)}} c_1^{e(i)}, \\ \frac{\partial c_3^{(N)}}{\partial t} &= \frac{\bar{k}_1^{(N)}\bar{k}_3^{(N)}}{\bar{k}_1^{(N)} + \bar{k}_2^{(N)}} c_1^{e(N)} - \bar{k}_4^{(N)} c_3^{(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} \tilde{\lambda}_3^{(iN)} c_3^{(i)}. \end{aligned} \quad (2.89)$$

Позначимо

л

$$\begin{aligned} \bar{D}_{11}^{e(i)} &= \frac{\bar{k}_2^{(i)}(\bar{D}_{11}^{(i)} + \bar{D}_{21}^{(i)}) + \bar{k}_1^{(i)}(\bar{D}_{12}^{(i)} + \bar{D}_{22}^{(i)})}{\bar{k}_1^{(i)} + \bar{k}_2^{(i)}}, \quad \bar{k}_1^{e(i)} = \frac{\bar{k}_1^{(i)}\bar{k}_3^{(i)}}{\bar{k}_1^{(i)} + \bar{k}_2^{(i)}}, \\ \tilde{\lambda}_1^{e(i-1)} &= \frac{\tilde{\lambda}_1^{(i-1)}\bar{k}_2^{(i)}}{\bar{k}_1^{(i)} + \bar{k}_2^{(i)}}, \quad \tilde{\lambda}_1^{e(i+1)} = \frac{\tilde{\lambda}_1^{(i+1)}\bar{k}_2^{(i)}}{\bar{k}_1^{(i)} + \bar{k}_2^{(i)}}, \quad \tilde{\lambda}_1^{e(iN)} = \frac{\tilde{\lambda}_1^{(iN)}\bar{k}_2^{(i)}}{\bar{k}_1^{(i)} + \bar{k}_2^{(i)}} \quad \text{для } \forall i = \overline{0, N}. \end{aligned} \quad (2.90)$$

Підставимо введені ефективні коефіцієнти (2.90) у формули (2.89) і одержимо системи рівнянь дифузії у середовищі з пастками (2.86), що і треба було довести.

Теорема 2.10. Якщо виконується умова локальної термодинамічної рівноваги між усіма станами домішки, тобто $\mu_1^{(i)} = \mu_2^{(i)} = \mu_3^{(i)}$ ($i = \overline{0, N}$), то міграція розпадних домішкових частинок підпорядковується взаємозв'язаним рівнянням дифузії для $i = 0$

$$\frac{\partial c_{ef}^{(0)}}{\partial t} = \overline{D}_{ef}^{(0)} \Delta c_{ef}^{(0)} - \tilde{\lambda}_{ef}^{(1)} c_{ef}^{(0)} - \tilde{\lambda}_{ef}^{(0N)} c_{ef}^{(0)},$$

для $i = \overline{1, N-1}$

$$\frac{\partial c_{ef}^{(i)}}{\partial t} = \overline{D}_{ef}^{(i)} \Delta c_{ef}^{(i)} + \tilde{\lambda}_{ef}^{(i-1)} c_{ef}^{(i-1)} - \tilde{\lambda}_{ef}^{(i+1)} c_{ef}^{(i)} - \tilde{\lambda}_{ef}^{(iN)} c_{ef}^{(i)},$$

для $i = N$

$$\frac{\partial c_{ef}^{(N)}}{\partial t} = \overline{D}_{ef}^{(N)} \Delta c_{ef}^{(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} \tilde{\lambda}_{ef}^{(iN)} c_{ef}^{(i)}. \quad (2.91)$$

Доведення. Оскільки виконується рівність $\mu_2^{(i)} = \mu_3^{(i)}$, то справедлива Теорема 2.7 (можна виходити з рівності $\mu_1^{(i)} = \mu_2^{(i)}$ і Теорема 2.8). Тоді рівність $\mu_1^{(i)} = \mu_2^{(i)} = \mu_3^{(i)}$ є еквівалентною

$$\bar{k}_1^{(i)} c_1^{(i)} - \bar{k}_2^{e(i)} c_2^{e(i)} = 0 \quad \text{для } \forall i = \overline{0, N}. \quad (2.92)$$

Вводимо в розгляд сумарну ефективну концентрацію $c_{ef}^{(i)} = c_1^{(i)} + c_2^{e(i)} = c_1^{(i)} + c_2^{(i)} + c_3^{(i)}$. Додаючи для кожного $i = \overline{0, N}$ рівняння (2.81) і враховуючи (2.92), одержимо

для $i = 0$

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_{ef}^{(0)}}{\partial t} = & \frac{\bar{k}_2^{e(0)} (\overline{D}_{11}^{(0)} + \overline{D}_{21}^{e(0)}) + \bar{k}_1^{(0)} (\overline{D}_{12}^{(0)} + \overline{D}_{22}^{e(0)})}{\bar{k}_1^{(0)} + \bar{k}_2^{e(0)}} \Delta c_{ef}^{(0)} - \\ & - \frac{\tilde{\lambda}_1^{(1)} \bar{k}_2^{e(0)}}{\bar{k}_1^{(0)} + \bar{k}_2^{e(0)}} c_{ef}^{(0)} - \frac{\tilde{\lambda}_1^{(0N)} \bar{k}_2^{e(0)}}{\bar{k}_1^{(0)} + \bar{k}_2^{e(0)}} c_{ef}^{(0)}, \end{aligned}$$

для $i = \overline{1, N-1}$

$$\frac{\partial c_{ef}^{(i)}}{\partial t} = \frac{\bar{k}_2^{e(i)} (\overline{D}_{11}^{(i)} + \overline{D}_{21}^{e(i)}) + \bar{k}_1^{(i)} (\overline{D}_{12}^{(i)} + \overline{D}_{22}^{e(i)})}{\bar{k}_1^{(i)} + \bar{k}_2^{e(i)}} \Delta c_{ef}^{(i)} +$$

$$+ \frac{\tilde{\lambda}_1^{(i-1)} \bar{k}_2^{e(i)}}{\bar{k}_1^{(i)} + \bar{k}_2^{e(i)}} c_1^{(i-1)} - \frac{\tilde{\lambda}_1^{(i+1)} \bar{k}_2^{e(i)}}{\bar{k}_1^{(i)} + \bar{k}_2^{e(i)}} c_1^{(i)} - \frac{\tilde{\lambda}_1^{(iN)} \bar{k}_2^{e(i)}}{\bar{k}_1^{(i)} + \bar{k}_2^{e(i)}} c_1^{(i)},$$

для $i = N$

$$\frac{\partial c_{ef}^{(N)}}{\partial t} = \frac{\bar{k}_2^{e(N)} (\bar{D}_{11}^{(N)} + \bar{D}_{21}^{e(N)}) + \bar{k}_1^{(N)} (\bar{D}_{12}^{(N)} + \bar{D}_{22}^{e(N)})}{\bar{k}_1^{(N)} + \bar{k}_2^{e(N)}} \Delta c_{ef}^{(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} \frac{\tilde{\lambda}_1^{(iN)} \bar{k}_2^{e(N)}}{\bar{k}_1^{(N)} + \bar{k}_2^{e(N)}} c_{ef}^{(i)}$$

Позначимо

$$\bar{D}_{ef}^{(i)} = \frac{\bar{k}_2^{e(i)} (\bar{D}_{11}^{(i)} + \bar{D}_{21}^{e(i)}) + \bar{k}_1^{(i)} (\bar{D}_{12}^{(i)} + \bar{D}_{22}^{e(i)})}{\bar{k}_1^{(i)} + \bar{k}_2^{e(i)}},$$

$$\tilde{\lambda}_{ef}^{(i-1)} = \frac{\tilde{\lambda}_1^{(i-1)} \bar{k}_2^{e(i)}}{\bar{k}_1^{(i)} + \bar{k}_2^{e(i)}}, \quad \tilde{\lambda}_{ef}^{(i+1)} = \frac{\tilde{\lambda}_1^{(i+1)} \bar{k}_2^{e(i)}}{\bar{k}_1^{(i)} + \bar{k}_2^{e(i)}}, \quad \tilde{\lambda}_{ef}^{(iN)} = \frac{\tilde{\lambda}_1^{(iN)} \bar{k}_2^{e(i)}}{\bar{k}_1^{(i)} + \bar{k}_2^{e(i)}}. \quad (2.93)$$

Отже отримаємо рівняння (2.91). І теорема доведена.

Зауважимо, що система рівнянь, наведена в праці [61] є частковим випадком системи рівнянь (2.79), зокрема (2.81), без урахування розпаду мігруючої речовини, якщо однією з компонент, яка приймає участь у процесах переходу, вважати сам поровий розчин.

2.12. Висновки до Розділу 2

За континуально-термодинамічним підходом в аксіоматизованому вигляді побудовано математичну модель взаємозв'язаних теплових, механічних та гетеродифузійних процесів за каскадного розпаду домішкової речовини при локальній зміні стану частинок. Наведено геометричні уявлення, конфігураційні та кінематичні характеристики стосовно визначеного об'єкту досліджень, введено закони руху матеріальних точок континуумів та їхні швидкості руху. Сформульовано і доведено теорему щодо рівнянь балансу маси і сумарної маси компоненти. Сформульовано постулат про баланс імпульсу для компоненти в цілому та доведено леми про балансові співвідношення для потенціальної та кінетичної енергії. Встановлено умови та обмеження на потужності виробництва маси компоненти за рахунок процесів сорбції-десорбції та за рахунок розпаду частинок на попередньому етапі каскаду. Вираз для повної енергії постулюється, і на цій основі доводиться теорема

про рівняння балансу внутрішньої енергії фази. Прийнята гіпотеза локальної термодинамічної рівноваги та отримано рівняння Гіббса для даної термодинамічної системи шляхом граничного переходу до квазістатичних процесів у рівнянні балансу внутрішньої енергії. Доведена теорема про нелінійні рівняння стану, якщо внутрішня енергія фази є функцією змінних ентропії фази, тензора деформації і концентрацій компонент. Отримано рівняння балансу ентропії. Введено кінетичний потенціал та отримано нелінійні кінетичні співвідношення.

Отримано лінійні рівняння стану за умови, що вільна енергія Гіббса є тричі диференційованою функцією температури, коваріантних компонент тензора деформації та концентрацій, і лінійні кінетичні співвідношення за умови, що кінетичний потенціал є тричі диференційованою функцією термодинамічних сил. Побудовано ключову систему рівнянь термомеханодифузії у двофазному багатокомпонентному тілі у випадку вибору в якості розв'язуючих функцій температури фази, густини фази, вектора переміщення точок континууму фаз та концентрації домішкових розпадних компонент.

Отримано часткові варіанти математичної моделі механотермогетеродифузії у середовищі з пастками за каскадного розпаду мігруючих речовин за умов термодинамічної рівноваги щодо процесів переходу частинок між різними станами.

РОЗДІЛ 3

КРАЙОВІ ЗАДАЧІ МОДЕЛЕЙ ДИФУЗІЇ, НЕВЗАЄМОДІЮЧИХ ПОТОКІВ І ДИФУЗІЇ В ТІЛІ З ПАСТКАМИ ЗА КАСКАДНОГО РОЗПАДУ ДОМІШКОВИХ РЕЧОВИН

У розділі, що передує цьому розділу, побудовано за континуально-термодинамічним підходом в аксіоматизованому вигляді математичну модель взаємозв'язаних теплових, механічних та гетеродифузійних процесів за каскадного розпаду домішкової речовини при локальній зміні стану частинок. У цьому розділі на основі отриманих часткових модельних варіантів досліджуються процеси масоперенесення домішкових речовин у середовищах з мікроструктурою за каскадного розпаду домішкових компонент. Для конкретної схеми розпаду для моделей дифузії у середовищі з ефективними характеристиками, невзаємодіючих потоків та дифузії у середовищі з пастками сформульовані зв'язані крайові задачі каскадного типу, коли концентрація частинок на певному кроці розпаду є джерелом маси розпадної речовини на наступному кроці, яка теж дифундує, сорбується, десорбується і розпадається. Розв'язки крайових задач каскадного типу для зазначених математичних моделей побудовані за ітераційною процедурою з використанням функцій Гріна. Розроблено модулі програм, які увійшли до пакету GeterPas для кількісного аналізу концентрацій мігруючих домішкових компонент, потоків маси та кількості відповідної речовини, що пройшла через шар, на всіх етапах каскаду.

3.1. Математичні моделі гетеродифузії за каскадного розпаду домішкових частинок у безрозмірній формі

Розглянемо спочатку гетеродифузію розпадних домішкових частинок у середовищі з пастками на одному зі шляхів міграції. Будемо виходити з систем диференціальних рівнянь (2.77)-(2.79), отриманих для опису такого типу процесів переносу домішки у попередньому розділі. Приведемо системи рівнянь (2.77)-(2.79) до безрозмірного вигляду. З цією метою введемо нові змінні [72]

$$t = \bar{k}_2^{(0)} \tau; \quad \xi^{(\alpha)} = \left(\bar{k}_2^{(0)} / \bar{D}_{11}^{(0)} \right)^{1/2} x^{(\alpha)}, \quad \alpha = \bar{1}, \bar{3}. \quad (3.1)$$

Тоді отримаємо

для $i = 0$

$$\begin{aligned}\frac{\partial c_1^{(0)}}{\partial \tau} &= \Delta_\xi c_1^{(0)} + d_1^{(0)} \Delta_\xi c_2^{(0)} - a_{11}^{(0)} c_1^{(0)} + a_{12}^{(0)} c_2^{(0)}, \\ \frac{\partial c_2^{(0)}}{\partial \tau} &= d_2^{(0)} \Delta_\xi c_1^{(0)} + d^{(0)} \Delta_\xi c_2^{(0)} + a_{21}^{(0)} c_1^{(0)} - a_{22}^{(0)} c_2^{(0)} + a_{23}^{(0)} c_3^{(0)}, \\ \frac{\partial c_3^{(0)}}{\partial \tau} &= a_{32}^{(0)} c_2^{(0)} - a_{33}^{(0)} c_3^{(0)};\end{aligned}\tag{3.2a}$$

для $i = \overline{1, N-1}$

$$\begin{aligned}\frac{\partial c_1^{(i)}}{\partial \tau} &= d_0^{(i)} \Delta_\xi c_1^{(i)} + d_1^{(i)} \Delta_\xi c_2^{(i)} - a_{11}^{(i)} c_1^{(i)} + a_{12}^{(i)} c_2^{(i)} + a_{\lambda 1}^{(i-1)} c_1^{(i-1)}, \\ \frac{\partial c_2^{(i)}}{\partial \tau} &= d_2^{(i)} \Delta_\xi c_1^{(i)} + d^{(i)} \Delta_\xi c_2^{(i)} + a_{21}^{(i)} c_1^{(i)} - a_{22}^{(i)} c_2^{(i)} + a_{23}^{(i)} c_3^{(i)} + a_{\lambda 2}^{(i-1)} c_2^{(i-1)}, \\ \frac{\partial c_3^{(i)}}{\partial \tau} &= a_{32}^{(i)} c_2^{(i)} - a_{33}^{(i)} c_3^{(i)} + a_{\lambda 3}^{(i-1)} c_3^{(i-1)};\end{aligned}\tag{3.2б}$$

для $i = N$

$$\begin{aligned}\frac{\partial c_1^{(N)}}{\partial \tau} &= d_0^{(N)} \Delta_\xi c_1^{(N)} + d_1^{(N)} \Delta_\xi c_2^{(N)} - a_{11}^{(N)} c_1^{(N)} + a_{12}^{(N)} c_2^{(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 1}^{(iN)} c_1^{(i)}, \\ \frac{\partial c_2^{(N)}}{\partial \tau} &= d_2^{(N)} \Delta_\xi c_1^{(N)} + d^{(N)} \Delta_\xi c_2^{(N)} + a_{21}^{(N)} c_1^{(N)} - \\ &\quad - a_{22}^{(N)} c_2^{(N)} + a_{23}^{(N)} c_3^{(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 2}^{(iN)} c_2^{(i)}, \\ \frac{\partial c_3^{(N)}}{\partial \tau} &= a_{32}^{(N)} c_2^{(N)} - a_{33}^{(N)} c_3^{(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 3}^{(iN)} c_3^{(i)},\end{aligned}\tag{3.2в}$$

де $\Delta_\xi = \vec{\nabla}_\xi \cdot \vec{\nabla}_\xi$, $\vec{\nabla}_\xi = \vec{i}^{(\alpha)} \partial / \partial \xi^{(\alpha)}$; $d_0^{(i)} = \overline{D}_{11}^{(i)} / \overline{D}_{11}^{(0)}$, $d_1^{(i)} = \overline{D}_{12}^{(i)} / \overline{D}_{11}^{(0)}$, $d_2^{(i)} = \overline{D}_{21}^{(i)} / \overline{D}_{11}^{(0)}$,
 $d^{(i)} = \overline{D}_{22}^{(i)} / \overline{D}_{11}^{(0)}$, $i = \overline{0, N}$; $a_{11}^{(i)} = \left(\overline{k}_1^{(i)} + \widetilde{\lambda}_1^{(i+1)} + \widetilde{\lambda}_1^{(iN)} \right) / \overline{k}_2^{(0)}$, $a_{22}^{(i)} = \left(\overline{k}_2^{(i)} + \overline{k}_3^{(i)} + \widetilde{\lambda}_2^{(i+1)} + \widetilde{\lambda}_2^{(iN)} \right) / \overline{k}_2^{(0)}$,
 $a_{33}^{(i)} = \left(\overline{k}_4^{(i)} + \widetilde{\lambda}_3^{(i+1)} + \widetilde{\lambda}_3^{(iN)} \right) / \overline{k}_2^{(0)}$, $a_{12}^{(i)} = \overline{k}_2^{(i)} / \overline{k}_2^{(0)}$, $a_{21}^{(i)} = \overline{k}_1^{(i)} / \overline{k}_2^{(0)}$, $a_{23}^{(i)} = \overline{k}_4^{(i)} / \overline{k}_2^{(0)}$,
 $a_{32}^{(i)} = \overline{k}_3^{(i)} / \overline{k}_2^{(0)}$, $i = \overline{0, N}$; $a_{\lambda j}^{(i-1)} = \widetilde{\lambda}_j^{(i-1)} / \overline{k}_2^{(0)}$, $i = \overline{1, N}$, $j = \overline{1, 3}$.

Взаємозв'язані системи рівнянь гетеродифузії домішкової речовини двома шляхами з урахуванням каскадного розпаду мігруючих частинок (2.81) та введених ефективних коефіцієнтів (2.85) у безрозмірних змінних (3.1) набудуть вигляду

для $i = 0$

$$\begin{aligned}\frac{\partial c_1^{(0)}}{\partial \tau} &= \Delta_\xi c_1^{(0)} + d_1^{e(0)} \Delta_\xi c_2^{e(0)} - a_{11}^{(0)} c_1^{(0)} + a_{12}^{e(0)} c_2^{e(0)}, \\ \frac{\partial c_2^{e(0)}}{\partial \tau} &= d_2^{(0)} \Delta_\xi c_1^{(0)} + d^{e(0)} \Delta_\xi c_2^{e(0)} + a_{21}^{(0)} c_1^{(0)} - a_{22}^{e(0)} c_2^{e(0)},\end{aligned}\quad (3.3a)$$

для $i = \overline{1, N-1}$

$$\begin{aligned}\frac{\partial c_1^{(i)}}{\partial \tau} &= d_0^{(i)} \Delta_\xi c_1^{(i)} + d_1^{e(i)} \Delta_\xi c_2^{e(i)} - a_{11}^{(i)} c_1^{(i)} + a_{12}^{e(i)} c_2^{e(i)} + a_{\lambda 1}^{(i-1)} c_1^{(i-1)}, \\ \frac{\partial c_2^{e(i)}}{\partial \tau} &= d_2^{(i)} \Delta_\xi c_1^{(i)} + d^{e(i)} \Delta_\xi c_2^{e(i)} + a_{21}^{(i)} c_1^{(i)} - a_{22}^{e(i)} c_2^{e(i)} + a_{\lambda 2}^{e(i-1)} c_2^{e(i-1)};\end{aligned}\quad (3.3б)$$

для $i = N$

$$\begin{aligned}\frac{\partial c_1^{(N)}}{\partial \tau} &= d_0^{(N)} \Delta_\xi c_1^{(N)} + d_1^{e(N)} \Delta_\xi c_2^{e(N)} - a_{11}^{(N)} c_1^{(N)} + a_{12}^{e(N)} c_2^{e(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 1}^{(iN)} c_1^{(i)}, \\ \frac{\partial c_2^{e(N)}}{\partial \tau} &= d_2^{(N)} \Delta_\xi c_1^{(N)} + d^{e(N)} \Delta_\xi c_2^{e(N)} + a_{21}^{(N)} c_1^{(N)} - a_{22}^{e(N)} c_2^{e(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 2}^{e(iN)} c_2^{e(i)},\end{aligned}\quad (3.3в)$$

де $d_1^{e(i)} = \bar{D}_{12}^{e(i)} / \bar{D}_{11}^{(0)}$, $d^{e(i)} = \bar{D}_{22}^{e(i)} / \bar{D}_{11}^{(0)}$, $i = \overline{0, N}$; $a_{12}^{e(i)} = \bar{k}_2^{e(i)} / \bar{k}_2^{(0)}$, $a_{22}^{e(i)} = \left(\bar{k}_2^{e(i)} + \tilde{\lambda}_2^{e(i+1)} + \tilde{\lambda}_2^{e(iN)} \right) / \bar{k}_2^{(0)}$,
 $i = \overline{0, N}$; $a_{\lambda 2}^{e(i-1)} = \tilde{\lambda}_2^{e(i-1)} / \bar{k}_2^{(0)}$, $i = \overline{1, N}$.

Системи рівнянь ефективної дифузії у середовищі з пастками [10, 85] (2.86) з урахуванням отриманих ефективних коефіцієнтів (2.90) у безрозмірних змінних (3.1) зведемо до вигляду

для $i = 0$

$$\begin{aligned}\frac{\partial c_1^{e(0)}}{\partial \tau} &= d_0^{e(0)} \Delta_\xi c_1^{e(0)} - a_{11}^{e(0)} c_1^{e(0)} + a_{23}^{(0)} c_3^{(0)}, \\ \frac{\partial c_3^{(0)}}{\partial \tau} &= a_{31}^{e(0)} c_1^{e(0)} - a_{33}^{(0)} c_3^{(0)};\end{aligned}\quad (3.4a)$$

для $i = \overline{1, N-1}$

$$\begin{aligned}\frac{\partial c_1^{e(i)}}{\partial \tau} &= d_0^{e(i)} \Delta_\xi c_1^{e(i)} - a_{11}^{e(i)} c_1^{e(i)} + a_{23}^{(i)} c_3^{(i)} + a_{\lambda 1}^{e(i-1)} c_1^{e(i-1)}, \\ \frac{\partial c_3^{(i)}}{\partial \tau} &= a_{31}^{e(i)} c_1^{e(i)} - a_{33}^{(i)} c_3^{(i)} + a_{\lambda 3}^{(i-1)} c_3^{(i-1)};\end{aligned}\quad (3.4б)$$

для $i = N$

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_1^{e(N)}}{\partial \tau} &= d_0^{e(N)} \Delta_\xi c_1^{e(N)} - a_{11}^{e(N)} c_1^{e(N)} + a_{23}^{(N)} c_3^{(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 1}^{e(iN)} c_1^{e(i)}, \\ \frac{\partial c_3^{(N)}}{\partial \tau} &= a_{31}^{e(N)} c_1^{e(N)} - a_{33}^{(N)} c_3^{(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 3}^{(iN)} c_3^{(i)}. \end{aligned} \quad (3.4\text{в})$$

де $d_0^{e(i)} = \overline{D}_{11}^{e(i)} / \overline{D}_{11}^{(0)}$, $a_{11}^{e(i)} = \left(\overline{k}_1^{e(i)} + \widetilde{\lambda}_1^{e(i+1)} + \widetilde{\lambda}_1^{e(iN)} \right) / \overline{k}_2^{(0)}$, $a_{31}^{e(i)} = \overline{k}_1^{e(i)} / \overline{k}_2^{(0)}$, $a_{\lambda 1}^{e(i-1)} = \widetilde{\lambda}_j^{e(i-1)} / \overline{k}_2^{(0)}$,
 $a_{\lambda 1}^{e(iN)} = \widetilde{\lambda}_1^{e(iN)} / \overline{k}_2^{(0)}$, $i = \overline{0, N}$.

Рівняння дифузії у середовищі з ефективними характеристиками (2.91) з одержаними ефективними коефіцієнтами (2.93), враховуючи каскадний розпад мігруючих частинок, в безрозмірних змінних (3.1) набувають вигляду

для $i = 0$

$$\frac{\partial c_{ef}^{(0)}}{\partial \tau} = d_{ef}^{(0)} \Delta_\xi c_{ef}^{(0)} - a_{ef}^{(0)} c_{ef}^{(0)}, \quad (3.5\text{а})$$

для $i = \overline{1, N-1}$

$$\frac{\partial c_{ef}^{(i)}}{\partial \tau} = d_{ef}^{(i)} \Delta_\xi c_{ef}^{(i)} + a_{\lambda e}^{(i-1)} c_{ef}^{(i-1)} - a_{ef}^{(i)} c_{ef}^{(i)}, \quad (3.5\text{б})$$

для $i = N$

$$\frac{\partial c_{ef}^{(N)}}{\partial \tau} = d_{ef}^{(N)} \Delta_\xi c_{ef}^{(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda e}^{(iN)} c_{ef}^{(i)}. \quad (3.5\text{в})$$

Тут $d_{ef}^{(i)} = \overline{D}_{ef}^{(i)} / \overline{D}_{11}^{(0)}$, $a_{ef}^{(i)} = \left(\widetilde{\lambda}_{ef}^{(i+1)} + \widetilde{\lambda}_{ef}^{(iN)} \right) / \overline{k}_2^{(0)}$, $a_{\lambda e}^{(i-1)} = \widetilde{\lambda}_{ef}^{(i-1)} / \overline{k}_2^{(0)}$, $a_{\lambda e}^{(iN)} = \widetilde{\lambda}_{ef}^{(iN)} / \overline{k}_2^{(0)}$,
 $i = \overline{0, N}$.

Зазначимо, що безрозмірні змінні (3.1) стискають часову вісь і розтягують просторові. При цьому не залежать від геометричних розмірів тіла або характерних розмірів структурних неоднорідностей.

3.2. Математична модель дифузії за каскадного розпаду домішкових частинок у тілі з ефективними характеристиками

3.2.1. Концентрації розпадних речовин

Розглянемо дифузію розпадної домішкової речовини в шарі безрозмірної товщини ξ_0 (рис. 3.1) за крайових умов I-го роду. Вважаємо, що у нульовий момент

часу у тілі відсутня домішкова речовина [115]. В подальшому (для часів $\tau > 0$) на «верхній» поверхні шару діє стале джерело маси для речовини $\mathbf{K}^{*(1)}$, а на нижній границі – концентрація частинок дорівнює нулю.

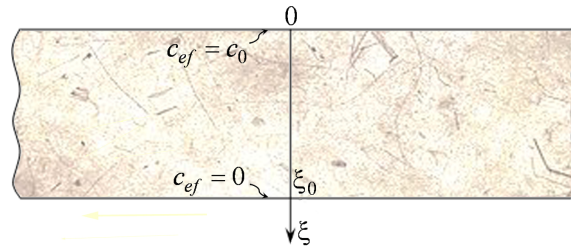


Рис. 3.1. Шар товщини ξ_0 , в якому мігрує домішкова речовина

Для одновимірного за просторовою координатою випадку рівняння (3.5) зводяться до наступного вигляду

для $i = 0$

$$\frac{\partial c_{ef}^{(0)}}{\partial \tau} = d_{ef}^{(0)} \frac{\partial^2 c_{ef}^{(0)}}{\partial \xi^2} - a_{ef}^{(0)} c_{ef}^{(0)}, \quad (3.6a)$$

для $i = \overline{1, N-1}$

$$\frac{\partial c_{ef}^{(i)}}{\partial \tau} = d_{ef}^{(i)} \frac{\partial^2 c_{ef}^{(i)}}{\partial \xi^2} + a_{\lambda e}^{(i-1)} c_{ef}^{(i-1)} - a_{ef}^{(i)} c_{ef}^{(i)}, \quad (3.6b)$$

для $i = N$

$$\frac{\partial c_{ef}^{(N)}}{\partial \tau} = d_{ef}^{(N)} \frac{\partial^2 c_{ef}^{(N)}}{\partial \xi^2} + \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda e}^{(iN)} c_{ef}^{(i)} \quad (3.6v)$$

за нульових початкових

$$c_{ef}^{(i)}(\xi, \tau) \Big|_{\tau=0} = 0, \quad i = \overline{0; N} \quad (3.7)$$

і таких граничних умов

$$c_{ef}^{(0)}(\xi, \tau) \Big|_{\xi=0} = c_0 \equiv const, \quad c_{ef}^{(0)}(\xi, \tau) \Big|_{\xi=\xi_0} = 0; \quad (3.8a)$$

$$c_{ef}^{(i)}(\xi, \tau) \Big|_{\xi=0} = 0, \quad c_{ef}^{(i)}(\xi, \tau) \Big|_{\xi=\xi_0} = 0, \quad i = \overline{1; N}. \quad (3.8b)$$

Зазначимо, що така постановка крайової задачі (3.6)-(3.8) може використовуватись не тільки як частковий випадок моделі гетеродифузії з пастками за умов локальної термодинамічної рівноваги щодо процесу масообміну між трьома різними станами домішкових частинок, але й розглядатись як окрема задача дифузії з урахуванням каскадного розпаду мігруючої речовини. Тоді схема розпаду частинок спрощується, що показано на рис. 3.2.

Розв'язок крайової задачі (3.6а), (3.7), (3.8а) для $i = 0$ знайдений з допомогою інтегральних перетворень Лапласа за часом і \sin -перетворення Фур'є за просторовою координатою [262]. В результаті маємо

$$\frac{1}{c_0} c_{ef}^{(0)}(\xi, \tau) = 1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \left[1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\text{sh } \eta(\xi_0 - \xi)}{\text{sh } \eta \xi_0} \right] - \frac{2}{\xi_0} \sum_{k=1}^{\infty} y_k^2 \frac{\sin y_k \xi}{y_k^2 + \eta^2} e^{-(d_{ef}^{(0)} y_k^2 + a_{ef}^{(0)}) \tau}, \quad (3.9)$$

де $\eta = \sqrt{a_{ef}^{(0)} / d_{ef}^{(0)}}$, $y_k = k\pi / \xi_0$.

В стаціонарному випадку при $\tau \rightarrow \infty$ формула для концентрації розпадної домішки запишеться так

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{c_0} c_{ef}^{(0)}(\xi, \tau) = 1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \left[1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\text{sh } \eta(\xi_0 - \xi)}{\text{sh } \eta \xi_0} \right].$$

Зазначимо, що врахування розпаду дифундууючої речовини призводить до появи нелінійного доданку $\text{sh } \eta(\xi_0 - \xi) / \text{sh } \eta \xi_0$ в асимптотиці функції концентрації [251]. При цьому, якщо покласти $a_{ef}^{(0)} = 0$ (нерозпадна речовина), то одержимо відомий вираз [72, 145].

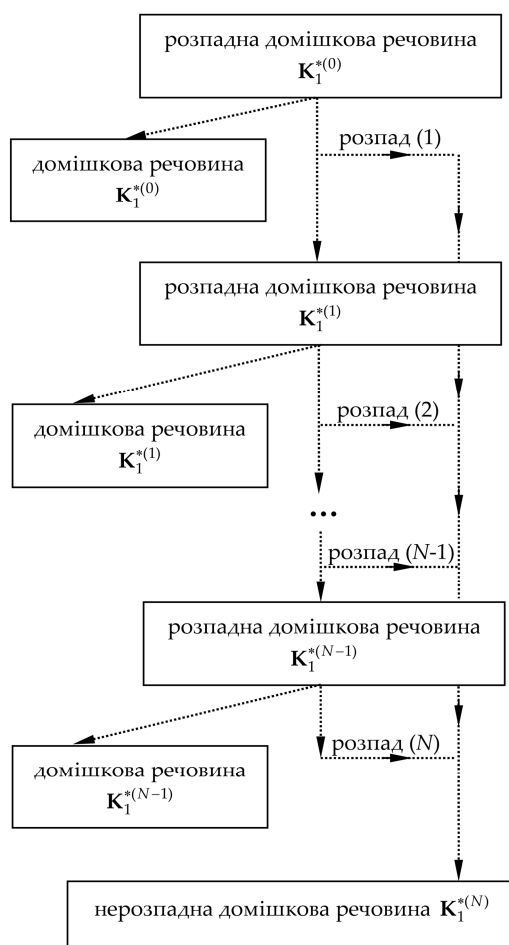


Рис. 3.2. Схема розпаду домішкової речовини, яка дифундує в середовищі з ефективними характеристиками

Знайдемо розв'язок крайової задачі дифузії (3.6б), (3.7), (3.8б) для $i=1$.

Запишемо вираз для концентрації $c_{ef}^{(1)}(\xi, \tau)$ у вигляді розкладу в ряд Фур'є:

$$c_{ef}^{(1)}(\xi, \tau) = \sum_{k=1}^{\infty} \tilde{f}_k(k, \tau) \sin y_k \xi. \quad (3.10)$$

Оскільки рівняння (3.6б) містить функцію $c_{ef}^{(0)}(\xi, \tau)$, запишемо її розклад в ряд по $\sin y_k \xi$:

$$c_{ef}^{(0)}(\xi, \tau) = 2c_0 \sum_{k=1}^{\infty} \sin y_k \xi \left[\frac{1}{k\pi} - \frac{a_{ef}^{(0)}}{k\pi(d_{ef}^{(0)} y_k^2 + a_{ef}^{(0)})} - \frac{y_k^2 e^{-(d_{ef}^{(0)} y_k^2 + a_{ef}^{(0)})\tau}}{y_k^2 + \eta^2} \right]$$

і підставимо в рівняння дифузії (3.6б). Тоді отримаємо

$$\frac{d\tilde{f}_k}{d\tau} = -(d_{ef}^{(1)} y_k^2 + a_{ef}^{(1)}) \tilde{f}_k + 2c_0 a_{\lambda e}^{(0)} \left[\frac{1}{k\pi} - \frac{a_{ef}^{(0)}}{k\pi(d_{ef}^{(0)} y_k^2 + a_{ef}^{(0)})} - \frac{y_k^2 e^{-(d_{ef}^{(0)} y_k^2 + a_{ef}^{(0)})\tau}}{y_k^2 + \eta^2} \right],$$

$$\tilde{f}_k(\tau) \Big|_{\tau=0} = 0.$$

До отриманої задачі застосуємо інтегральне перетворення Лапласа $\bar{f}_k(s) = L[\tilde{f}_k(\tau)]$, де s - параметр перетворення Лапласа [262]. Тоді в зображеннях одержимо алгебраїчне рівняння

$$(s + d_{ef}^{(1)} y_k^2 + a_{ef}^{(1)}) \bar{f}_k = 2c_0 a_{\lambda e}^{(0)} \left\{ \left[\frac{1}{k\pi} - \frac{a_{ef}^{(0)}}{k\pi(d_{ef}^{(0)} y_k^2 + a_{ef}^{(0)})} \right] \frac{1}{s} - \frac{y_k^2}{(y_k^2 + \eta^2)(s + d_{ef}^{(0)} y_k^2 + a_{ef}^{(0)})} \right\}.$$

Звідси знаходимо

$$\bar{f}_k = \frac{2c_0 a_{\lambda e}^{(0)}}{s + d_{ef}^{(1)} y_k^2 + a_{ef}^{(1)}} \left\{ \left[\frac{1}{k\pi} - \frac{a_{ef}^{(0)}}{k\pi(d_{ef}^{(0)} y_k^2 + a_{ef}^{(0)})} \right] \frac{1}{s} - \frac{y_k^2}{(y_k^2 + \eta^2)(s + d_{ef}^{(0)} y_k^2 + a_{ef}^{(0)})} \right\}. \quad (3.11)$$

Знайдемо обернене перетворення Лапласа виразу (3.11). Використовуючи відомі формули [109]

$$L^{-1} \left[\frac{1}{s(s+a)} \right] = \frac{1}{a} \{ e^{-a\tau} - 1 \}, \quad L^{-1} \left[\frac{1}{(s+a)(s+b)} \right] = \frac{1}{b-a} \{ e^{-a\tau} - e^{-b\tau} \}, \quad (3.12)$$

одержимо

$$\tilde{f}_k = 2c_0 a_{\lambda e}^{(0)} \left\{ \frac{1}{k\pi} \left[1 - \frac{a_{ef}^{(0)}}{d_{ef}^{(0)} y_k^2 + a_{ef}^{(0)}} \right] \frac{e^{-(d_{ef}^{(1)} y_k^2 + a_{ef}^{(1)})\tau} - 1}{d_{ef}^{(1)} y_k^2 + a_{ef}^{(1)}} - \frac{y_k^2}{y_k^2 + \eta^2} \frac{e^{-(d_{ef}^{(0)} y_k^2 + a_{ef}^{(0)})\tau} - e^{-(d_{ef}^{(1)} y_k^2 + a_{ef}^{(1)})\tau}}{(d_{ef}^{(0)} - d_{ef}^{(1)}) y_k^2 + a_{ef}^{(0)} - a_{ef}^{(1)}} \right\}.$$

За формулою (3.10) знайдемо концентрацію $c_{ef}^{(1)}(\xi, \tau)$:

$$c_{ef}^{(1)}(\xi, \tau) = 2c_0 a_{\lambda e}^{(0)} \sum_{k=1}^{\infty} \sin y_k \xi \left\{ \frac{1}{k\pi} \left[1 - \frac{a_{ef}^{(0)}}{d_{ef}^{(0)} y_k^2 + a_{ef}^{(0)}} \right] \frac{e^{-(d_{ef}^{(1)} y_k^2 + a_{ef}^{(1)})\tau} - 1}{d_{ef}^{(1)} y_k^2 + a_{ef}^{(1)}} - \frac{y_k^2}{y_k^2 + \eta^2} \frac{e^{-(d_{ef}^{(1)} y_k^2 + a_{ef}^{(1)})\tau} - e^{-(d_{ef}^{(0)} y_k^2 + a_{ef}^{(0)})\tau}}{(d_{ef}^{(0)} - d_{ef}^{(1)}) y_k^2 + a_{ef}^{(0)} - a_{ef}^{(1)}} \right\}.$$

Підсумуємо асимптотичні доданки отриманої формули

$$S = \sum_{k=1}^{\infty} \sin y_k \xi \frac{1}{k\pi} \left[1 - \frac{a_{ef}^{(0)}}{d_{ef}^{(0)} y_k^2 + a_{ef}^{(0)}} \right] \frac{1}{d_{ef}^{(1)} y_k^2 + a_{ef}^{(1)}}. \quad (3.13)$$

Суму першого з них знайдемо, використавши відому формулу [240]

$$S_1 = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k\pi} \frac{\sin y_k \xi}{d_{ef}^{(1)} y_k^2 + a_{ef}^{(1)}} = \frac{a_{ef}^{(1)}}{2d_{ef}^{(1)}} \left[1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\text{sh } \eta_1 (\xi_0 - \xi)}{\text{sh } \eta_1 \xi_0} \right],$$

де $\eta_1 = \sqrt{a_{ef}^{(1)} / d_{ef}^{(1)}}$.

У другому доданку (3.13)

$$S_2 = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k\pi} \frac{a_{ef}^{(0)} \sin y_k \xi}{(d_{ef}^{(1)} y_k^2 + a_{ef}^{(1)}) (d_{ef}^{(0)} y_k^2 + a_{ef}^{(0)})},$$

розкладемо вираз типу $\frac{1}{(k^2 + \bar{\eta}_1^2)(k^2 + \bar{\eta}^2)}$ на прості дроби:

$$\frac{1}{(k^2 + \bar{\eta}_1^2)(k^2 + \bar{\eta}^2)} = \frac{Ak+B}{k^2 + \bar{\eta}_1^2} + \frac{Ck+D}{k^2 + \bar{\eta}^2} = \frac{(A+C)k^3 + (B+D)k^2 + (A\bar{\eta}^2 + C\bar{\eta}_1^2)k + B\bar{\eta}^2 + D\bar{\eta}_1^2}{(k^2 + \bar{\eta}_1^2)(k^2 + \bar{\eta}^2)}.$$

Звідси маємо $A+C=0$; $B+D=0$; $A\bar{\eta}^2 + C\bar{\eta}_1^2=0$; $B\bar{\eta}^2 + D\bar{\eta}_1^2=1$.

Тоді знаходимо

$$A=C=0; \quad B = \frac{1}{\bar{\eta}^2 - \bar{\eta}_1^2}; \quad D = \frac{-1}{\bar{\eta}^2 - \bar{\eta}_1^2}.$$

Вираз для S_2 запишемо у вигляді

$$S_2 = \frac{a_{ef}^{(0)}}{d_{ef}^{(0)} d_{ef}^{(1)} (\bar{\eta}^2 - \bar{\eta}_1^2)} \left\{ \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\sin y_k \xi}{k(k^2 + \bar{\eta}_1^2)} - \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\sin y_k \xi}{k(k^2 + \bar{\eta}^2)} \right\},$$

де $\bar{\eta} = \frac{\xi_0}{\pi} \eta$, $\bar{\eta}_1 = \frac{\xi_0}{\pi} \eta_1$.

Використовуючи відомі формули для сумування рядів [240], маємо

$$S_2 = \frac{a_{ef}^{(0)}}{2d_{ef}^{(0)}d_{ef}^{(1)}(\eta^2 - \eta_1^2)} \left\{ \frac{\text{sh } \eta(\xi_0 - \xi)}{\text{sh } \eta\xi_0} - \frac{\text{sh } \eta_1(\xi_0 - \xi)}{\text{sh } \eta_1\xi_0} \right\}.$$

І остаточно отримаємо вираз для концентрації частинок для етапу $i = 1$

$$\begin{aligned} \frac{1}{c_0} c_{ef}^{(1)}(\xi, \tau) = & a_{ef}^{(1)} \left[\frac{a_{ef}^{(0)}}{2d_{ef}^{(0)}d_{ef}^{(1)}(\eta^2 - \eta_1^2)} \left\{ \frac{\text{sh } \eta(\xi_0 - \xi)}{\text{sh } \eta\xi_0} - \frac{\text{sh } \eta_1(\xi_0 - \xi)}{\text{sh } \eta_1\xi_0} \right\} - \right. \\ & - \eta_1^2 \left\{ 1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\text{sh } \eta_1(\xi_0 - \xi)}{\text{sh } \eta_1\xi_0} \right\} + \frac{2}{\xi_0} \sum_{k=1}^{\infty} \sin y_k \xi \left\{ \left(1 - \frac{a_{ef}^{(0)}}{b_k^{(0)}} \right) \frac{1 - e^{-b_k^{(1)}\tau}}{y_k b_k^{(1)}} - \right. \\ & \left. \left. - \frac{y_k^2}{y_k^2 + \eta^2} \frac{e^{-b_k^{(1)}\tau} - e^{-b_k^{(0)}\tau}}{b_k^{(0)} - b_k^{(1)}} \right\} \right], \end{aligned} \quad (3.14)$$

де $b_k^{(0)} = d_{ef}^{(0)} y_k^2 + a_{ef}^{(0)}$, $b_k^{(1)} = d_{ef}^{(1)} y_k^2 + a_{ef}^{(1)}$.

В стаціонарному режимі вираз для концентрації частинок (3.14) зведеться до наступного

$$\begin{aligned} \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{c_0} c_{ef}^{(1)}(\xi, \tau) = & \frac{a_{ef}^{(0)} a_{ef}^{(1)}}{2d_{ef}^{(0)}d_{ef}^{(1)}(\eta^2 - \eta_1^2)} \left\{ \frac{\text{sh } \eta(\xi_0 - \xi)}{\text{sh } \eta\xi_0} - \frac{\text{sh } \eta_1(\xi_0 - \xi)}{\text{sh } \eta_1\xi_0} \right\} - \\ & - a_{ef}^{(1)} \eta_1^2 \left\{ 1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\text{sh } \eta_1(\xi_0 - \xi)}{\text{sh } \eta_1\xi_0} \right\}. \end{aligned} \quad (3.14a)$$

У загальному випадку для $i = 2, \dots, N-1$ розв'язок крайової задачі (3.6б), (3.7), (3.8б) подамо через функцію Гріна [270]

$$c_{ef}^{(i)}(\xi, \tau) = a_{\lambda e}^{(i)} \int_0^{\tau} \int_0^{\xi_0} G^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') c_{ef}^{(i-1)}(\xi', \tau') d\xi' d\tau', \quad (3.15)$$

де $G^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')$ - функція Гріна задачі (3.6б), (3.7), (3.8б) для $i = 2, \dots, N-1$, тобто є розв'язком відповідної задачі дифузії з точкового джерела на i -му кроці розпаду за нульових крайових умов, а саме

$$\frac{\partial G^{(i)}}{\partial \tau} - d_{ef}^{(i)} \frac{\partial^2 G^{(i)}}{\partial \xi^2} + a_{ef}^{(i)} G^{(i)} = \delta(\tau - \tau') (\xi - \xi'); \quad (3.16)$$

$$G^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') \Big|_{\tau=0} = G^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') \Big|_{\xi=0} = G^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') \Big|_{\xi=\xi_0} = 0, \quad i = \overline{2, N-1}. \quad (3.17)$$

Тут $\delta(x)$ - дельта-функція Дірака [198].

Для знаходження розв'язку задачі (3.16), (3.17) застосовуємо перетворення Лапласа за часом і скінченне інтегральне \sin -перетворення Фур'є за просторовою координатою [262]. Тоді отримуємо формулу для визначення функції Гріна на i -му кроці розпаду ($i = 2, \dots, N-1$):

$$G^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') = \theta(\tau - \tau') \sum_{n=1}^{\infty} \sin(y_n \xi) \sin(y_n \xi') e^{-\left(d_{ef}^{(i)} y_n^2 + a_{ef}^{(i)}\right)(\tau - \tau')}. \quad (3.19)$$

Тут $\theta(\tau - \tau')$ - одинична сходинова функція Хевісайда [198], $y_n = n\pi/\xi_0$.

Отже, знайшовши функцію Гріна за формулою (3.19) і визначивши концентрацію розпадних домішкових частинок на кроці $i-1$, за співвідношенням (3.15) ми знайдемо концентрацію розпадної речовини на i -му етапі.

Для випадку $i = N$ (нерозпадні або нешкідливі домішки) процес масоперенесення описується крайовою задачею (3.6в), (3.7), (3.8б). Її розв'язок також подамо через відповідну функцію Гріна аналогічно до (3.15)

$$c_{ef}^{(N)}(\xi, \tau) = \int_0^{\tau} \int_0^{\xi_0} G^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda e}^{(iN)} c_{ef}^{(i)}(\xi', \tau') d\xi' d\tau', \quad (3.20)$$

де $G^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')$ - функція Гріна задачі (3.6в), (3.7), (3.8б) і задовольняє відповідну крайову задачу з точковим джерелом

$$\frac{\partial G^{(N)}}{\partial \tau} - d_{ef}^{(N)} \frac{\partial^2 G^{(N)}}{\partial \xi^2} = \delta(\tau - \tau') (\xi - \xi'); \quad (3.21)$$

$$G^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') \Big|_{\tau=0} = G^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') \Big|_{\xi=0} = G^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') \Big|_{\xi=\xi_0} = 0. \quad (3.22)$$

Розв'язок крайової задачі (3.21), (3.22) має вигляд

$$G^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') = \theta(\tau - \tau') \sum_{n=1}^{\infty} \sin(y_n \xi) \sin(y_n \xi') e^{-d_{ef}^{(N)} y_n^2 (\tau - \tau')}. \quad (3.23)$$

Тоді, послідовно визначивши концентрації $c_{ef}^{(0)}(\xi, \tau)$, $c_{ef}^{(1)}(\xi, \tau)$, ..., $c_{ef}^{(N-1)}(\xi, \tau)$, за формулою (3.20) з урахуванням виразу (3.23) знайдемо концентрацію нерозпадних або нешкідливих домішкових частинок у тілі.

3.2.2. Поток маси розпадних домішкових речовин

В одновимірному за просторовою координатою випадку потоки маси частинок, що розпадаються, через переріз тіла $\xi = \xi_*$ знайдемо за формулою

$$J_{*e}^{(i)}(\tau) = -d_{ef}^{(i)} \frac{\partial c_{ef}^{(i)}(\xi, \tau)}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_*}, \quad i = \overline{0; N}. \quad (3.24)$$

Підставляємо вирази для концентрацій $c_{ef}^{(i)}(\xi, \tau)$ (3.9), (3.14), (3.15), (3.20) у співвідношення (3.24). Тоді отримаємо

для $i = 0$

$$\frac{1}{c_0 d_{ef}^{(0)}} J_{*e}^{(0)}(\tau) = \frac{1}{\xi_0} + \eta^2 \left[\frac{1}{\xi_0} - \eta \frac{\text{ch } \eta(\xi_0 - \xi_*)}{\text{sh } \eta \xi_0} \right] + \frac{2}{\xi_0} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\cos y_k \xi_*}{y_k^2 + \eta^2} y_k^2 e^{-b_k^{(0)} \tau}; \quad (3.25a)$$

для $i = 1$

$$\begin{aligned} \frac{1}{c_0 d_{ef}^{(1)} a_{ef}^{(1)}} J_{*e}^{(1)}(\tau) &= \frac{a_{ef}^{(0)}}{d_{ef}^{(0)} d_{ef}^{(1)} (\eta^2 - \eta_1^2)} \left[\eta \frac{\text{ch } \eta(\xi_0 - \xi_*)}{\text{sh } \eta \xi_0} - \eta_1 \frac{\text{ch } \eta_1(\xi_0 - \xi_*)}{\text{sh } \eta_1 \xi_0} \right] - \\ &- \eta_1^2 \left[\frac{1}{\xi_0} - \eta_1 \frac{\text{ch } \eta_1(\xi_0 - \xi_*)}{\text{sh } \eta_1 \xi_0} \right] + \frac{2}{\xi_0} \sum_{k=1}^{\infty} \cos y_k \xi_* \left[\left(1 + \frac{a_{ef}^{(0)}}{b_k^{(0)}} \right) \frac{1 - e^{-b_k^{(1)} \tau}}{b_k^{(1)}} + \right. \\ &\left. + \frac{1}{b_k^{(0)} - b_k^{(1)}} \frac{y_k^2}{y_k^2 + \eta^2} \left(e^{-b_k^{(1)} \tau} - e^{-b_k^{(0)} \tau} \right) \right]; \end{aligned} \quad (3.25b)$$

для $i = 2, \dots, N-1$

$$J_{*e}^{(i)}(\tau) = -a_{ef}^{(i)} d_{ef}^{(i)} \int_0^{\tau} \int_0^{\xi_0} \frac{\partial G^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_*} c_{ef}^{(i-1)}(\xi', \tau') d\xi' d\tau', \quad (3.25b)$$

$$\frac{\partial G^{(i)}}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_*} = \theta(\tau - \tau') \sum_{n=1}^{\infty} y_n \cos(y_n \xi_*) \sin(y_n \xi') e^{-(d_{ef}^{(i)} y_n^2 + a_{ef}^{(i)}) (\tau - \tau')};$$

для $i = N$

$$J_{*e}^{(N)}(\tau) = -d_{ef}^{(N)} \int_0^{\tau} \int_0^{\xi_0} \frac{\partial G^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_*} \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda e}^{(iN)} c_{ef}^{(i)}(\xi', \tau') d\xi' d\tau', \quad (3.25\Gamma)$$

$$\frac{\partial G^{(N)}}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_*} = \theta(\tau - \tau') \sum_{n=1}^{\infty} y_n \cos(y_n \xi_*) \sin(y_n \xi') e^{-d_{ef}^{(N)} y_n^2 (\tau - \tau')}.$$

Запишемо також вирази для потоків розпадних речовин через нижню границю шару $\xi = \xi_0$ як частковий випадок формул (3.25):

для $i = 0$

$$\frac{J_{0e}^{(0)}(\tau)}{c_0 d_{ef}^{(0)}} = \frac{1}{\xi_0} + \eta^2 \left[\frac{1}{\xi_0} - \frac{\eta}{\text{sh } \eta \xi_0} \right] + \frac{2}{\xi_0} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k y_k^2}{y_k^2 + \eta^2} e^{-b_k^{(0)} \tau}; \quad (3.26a)$$

для $i = 1$

$$\frac{J_{0e}^{(1)}(\tau)}{c_0 d_{ef}^{(1)} a_{ef}^{(1)}} = \frac{a_{ef}^{(0)}}{d_{ef}^{(0)} d_{ef}^{(1)} (\eta^2 - \eta_1^2)} \left\{ \left[\frac{\eta}{\text{sh } \eta \xi_0} - \frac{\eta_1}{\text{sh } \eta_1 \xi_0} \right] - \eta_1^2 \left[\frac{1}{\xi_0} - \frac{\eta_1}{\text{sh } \eta_1 \xi_0} \right] + \right. \\ \left. + \frac{2}{\xi_0} \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \left[\left(1 + \frac{a_{ef}^{(0)}}{b_k^{(0)}} \right) \frac{1 - e^{-b_k^{(1)} \tau}}{b_k^{(1)}} + \frac{1}{b_k^{(0)} - b_k^{(1)}} \frac{y_k^2}{y_k^2 + \eta^2} \left(e^{-b_k^{(1)} \tau} - e^{-b_k^{(0)} \tau} \right) \right] \right\}; \quad (3.26б)$$

для $i = 2, \dots, N-1$ справджується формула (3.25в), в якій

$$\left. \frac{\partial G^{(i)}}{\partial \xi} \right|_{\xi=\xi_0} = \theta(\tau - \tau') \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n y_n \sin(y_n \xi') e^{-(d_{ef}^{(i)} y_n^2 + a_{ef}^{(i)}) (\tau - \tau')}; \quad (3.26в)$$

для $i = N$ справджується формула (3.25г), в якій

$$\left. \frac{\partial G^{(N)}}{\partial \xi} \right|_{\xi=\xi_0} = \theta(\tau - \tau') \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n y_n \sin(y_n \xi') e^{-d_{ef}^{(N)} y_n^2 (\tau - \tau')}. \quad (3.26г)$$

3.2.3. Кількість розпадних речовин, що пройшли через нижню границю шару за час τ_*

Певний інтерес представляють величини

$$Q_{0e}^{(i)} = \int_0^{\tau_*} J_{0e}^{(i)}(\tau) d\tau, \quad i = \overline{0, N}, \quad (3.27)$$

які визначають кількість розпадної домішкової речовини, що за час τ_* пройшла через одиницю площі поверхні $\xi = \xi_0$. Підставляючи вирази для потоків (3.26) у формули (3.27), відповідно отримаємо

для $i = 0$

$$\frac{Q_{0e}^{(0)}}{c_0 d_{ef}^{(0)}} = \left(\frac{1}{\xi_0} + \eta^2 \left[\frac{1}{\xi_0} - \frac{\eta}{\text{sh } \eta \xi_0} \right] \right) \tau_* + \frac{2}{\xi_0} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k y_k^2}{(y_k^2 + \eta^2) b_k^{(0)}} \left[1 - e^{-b_k^{(0)} \tau_*} \right]; \quad (3.28а)$$

для $i = 1$

$$\frac{Q_{0e}^{(1)}}{c_0 d_{ef}^{(1)} a_{ef}^{(1)}} = \frac{a_{ef}^{(0)}}{d_{ef}^{(0)} d_{ef}^{(1)} (\eta^2 - \eta_1^2)} \left\{ \left[\frac{\eta}{\text{sh } \eta \xi_0} - \frac{\eta_1}{\text{sh } \eta_1 \xi_0} \right] \tau_* - \eta_1^2 \left[\frac{1}{\xi_0} - \frac{\eta_1}{\text{sh } \eta_1 \xi_0} \right] \tau_* + \right. \\ \left. + \frac{2}{\xi_0} \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \left[\left(1 + \frac{a_{ef}^{(0)}}{b_k^{(0)}} \right) \frac{b_k^{(1)} \tau_* - 1 + e^{-b_k^{(1)} \tau_*}}{b_k^{(1)2}} + \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{1}{b_k^{(0)} b_k^{(1)}} \frac{y_k^2}{y_k^2 + \eta^2} \left(1 + \frac{b_k^{(1)} e^{-b_k^{(0)} \tau_*} - b_k^{(0)} e^{-b_k^{(1)} \tau_*}}{b_k^{(0)} - b_k^{(1)}} \right) \right] \right\}; \quad (3.28б)$$

для $i = 2, \dots, N - 1$

$$Q_{0e}^{(i)} = -a_{ef}^{(i)} d_{ef}^{(i)} \int_0^{\tau^*} \left(\int_0^{\tau} \int_0^{\xi_0} \frac{\partial G^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_0} c_{ef}^{(i-1)}(\xi', \tau') d\xi' d\tau' \right) d\tau, \quad (3.28B)$$

для $i = N$

$$Q_{0e}^{(N)}(\tau) = -d_{ef}^{(N)} \int_0^{\tau^*} \left(\int_0^{\tau} \int_0^{\xi_0} \frac{\partial G^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_0} \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda e}^{(iN)} c_{ef}^{(i)}(\xi', \tau') d\xi' d\tau' \right) d\tau. \quad (3.28G)$$

3.2.4. Числовий аналіз концентрацій домішок у середовищі з ефективними характеристиками

На основі формул (3.9), (3.15), (3.20), а також розв'язків крайових задач (3.16), (3.17) і (3.21), (3.22), тобто співвідношень (3.19) і (3.23), розроблений програмний комплекс для комп'ютерного моделювання процесів дифузії за каскадного розпаду мігруючих частинок [78, 91].

Зазначимо, що підінтегральні функції (3.15) і (3.20) не мають стрибків та нескінченностей, і інтегрування відбувається по обмеженій області. Приклади поверхонь, які утворює функція Гріна (3.19) на кроці $i=1$, наведені на рис. 3.3 в точках $(\xi, \tau) = (0.125; 0.125)$ (рис. а), $(\xi, \tau) = (1.375; 5.375)$ (рис. б), $(\xi, \tau) = (2.375; 9.875)$ (рис. с) при таких значеннях параметрів задачі $d^{(1)} = 0.3$, $a^{(1)} = 0.2$, $a_{\lambda e} = 0.8$, $\xi_0 = 10$. Вздовж осі абсцис відкладена просторова координата ξ' , вздовж осі ординат – часова τ' . Підінтегральна функція (3.15) має подібні до функції Гріна (3.19) розподіли, незначно відрізняючись характером спадання.

На рис. 3.4-3.8 наведено характерні розподіли концентрацій домішкової речовини за товщиною та поверхні $c^{(1)}(\xi, \tau)/c_0$ на площині $O\xi\tau$. За базові параметри прийнято $a^{(1)} = 0.2$, $a_{\lambda}^{(0)} = 0.8$, $\xi_0 = 10$, при цьому $d^{(0)} \equiv 1$, $a^{(0)} \equiv 1$.

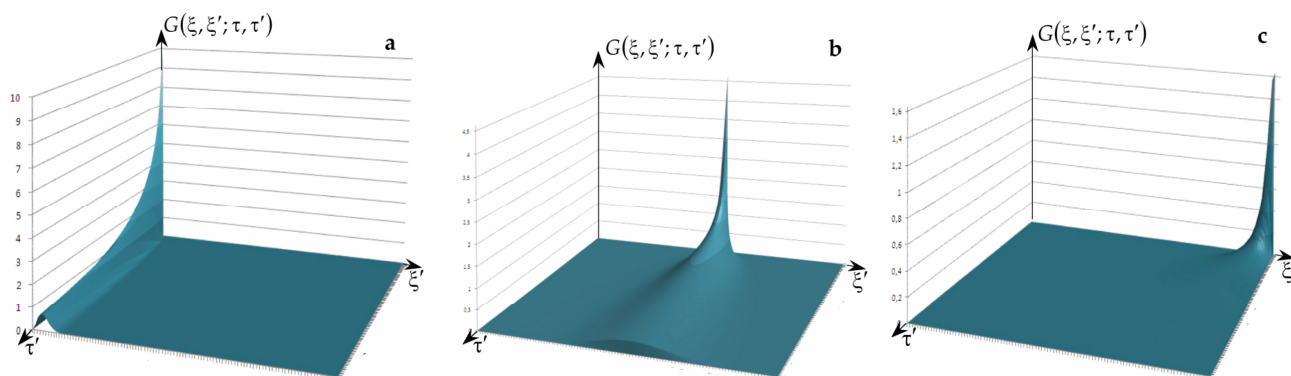


Рис. 3.3. Функція Гріна на кроці $i = 1$

Рис. 3.4 показує розподіли концентрацій розпадних частинок на кроці $i=0$, обчислених за формулою (3.9), $c^{(0)}(\xi, \tau)/c_0$ (рис. а) і на кроці $i=1$, розрахованої за формулою (3.15), $c^{(1)}(\xi, \tau)/c_0$ (рис. б) в різні моменти безрозмірного часу. Криві 1-6 на рис. а відповідають моментам часу $\tau=0.05; 0.125; 0.6; 0.9; 2.5; 5$, криві 1-8 на рис. б – $\tau=0.125; 0.6; 0.9; 2.5; 18; 25; 300; 400$. На рис. 3.5 наведені порівняльні розподіли концентрації $c^{(1)}(\xi, \tau)/c_0$ для різних значень відношення коефіцієнтів дифузії $d^{(1)}=0.01; 0.1; 0.5; 2; 5; 10$ (криві 1-6), а на рис. 3.6 – для різних значень $a^{(1)}=0.1; 0.2; 0.4; 0.5; 0.7$ в момент часу $\tau=0.125$. На рис. 3.7 показані графіки функції $c^{(1)}(\xi, \tau)/c_0$ в залежності від значення безрозмірного коефіцієнта $a_\lambda^{(0)}$, який визначає частку речовини $\mathbf{K}^{(0)}$, яка розпалась і потрапила на крок $i=1$. Тут криві 1-5 відповідають значенням $a_{\lambda e}=0.25; 0.4; 0.6; 0.8; 0.95$ для малих (рис. а) і великих (рис. б) значень відношень коефіцієнтів дифузії.

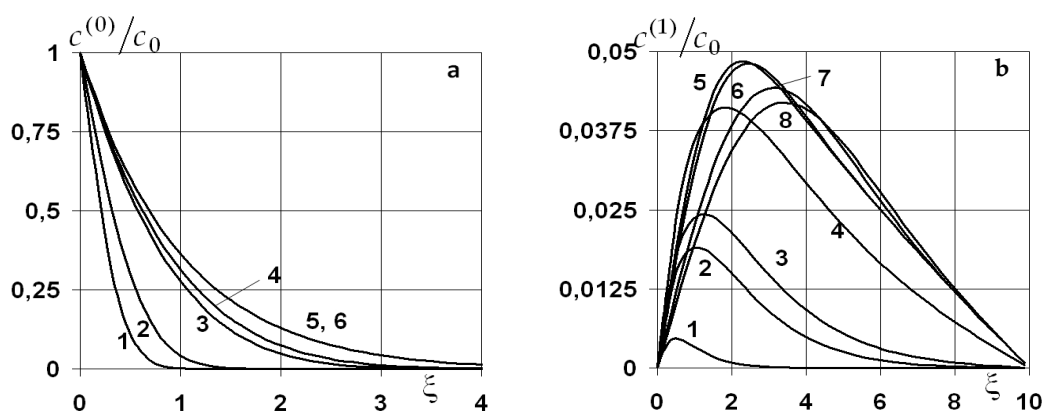


Рис. 3.4. Розподіли концентрацій $c^{(0)}(\xi, \tau)/c_0$ (рис.а) та $c^{(1)}(\xi, \tau)/c_0$ (рис.б)

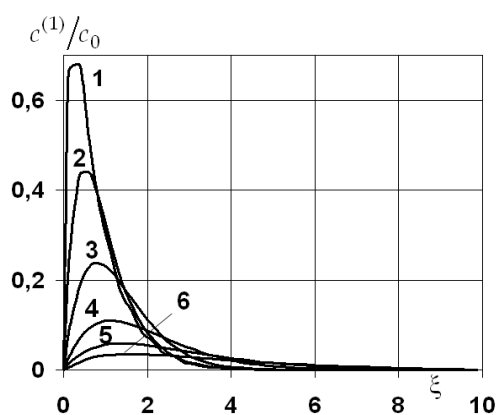


Рис. 3.5. Розподіли концентрації $c^{(1)}(\xi, \tau)/c_0$ для різних значень відношення коефіцієнтів дифузії $d^{(1)}$

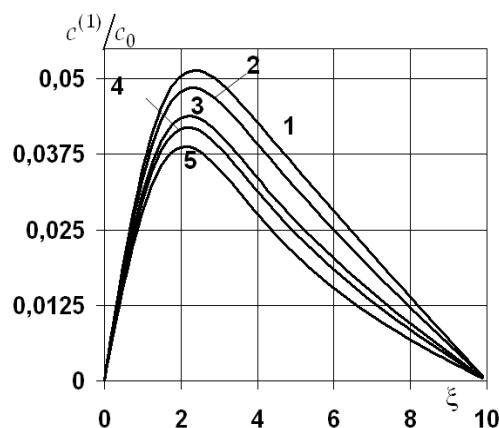


Рис. 3.6. Розподіли концентрації $c^{(1)}(\xi, \tau)/c_0$ для різних значень $a^{(1)}$

Зауважимо, що функція концентрації $c^{(0)}(\xi, \tau)/c_0$ є монотонно спадною на всьому проміжку (рис. 3.4a), зростаючи з часом доки не вийде на усталений режим (криві 5, 6 на рис. 3.4a). Стаціонарний розподіл концентрації на 0-му кроці розпаду суттєво відрізняється від лінійного, що характерно для нерозпадної мігруючої речовини. У випадку розподілів $c^{(1)}(\xi, \tau)/c_0$ спостерігається приповерхнєве зростання функції (крива 1 на рис. 3.4b), максимум якої з часом зростає і зсувається вглиб тіла (криві 1-5 на рис. 3.4b). З подальшим збільшенням часу протікання процесу дифузії концентрація $c^{(1)}(\xi, \tau)/c_0$ зменшується, що обумовлюється розпадом вже речовини $\mathbf{K}^{(1)}$ (криві 6-8 на рис. 3.4b). При цьому максимум функції продовжує зсуватись у глиб тіла. Така поведінка функції $c^{(1)}(\xi, \tau)/c_0$ характерна до її виходу на усталений режим (безрозмірний час $\tau = 400$, крива 8 на рис. 3.4b, є близьким до стаціонарного). Відзначимо, що часи виходу на стаціонарний режим функцій концентрацій на 0-му і 1-му кроках розпаду різняться на 2 порядки.

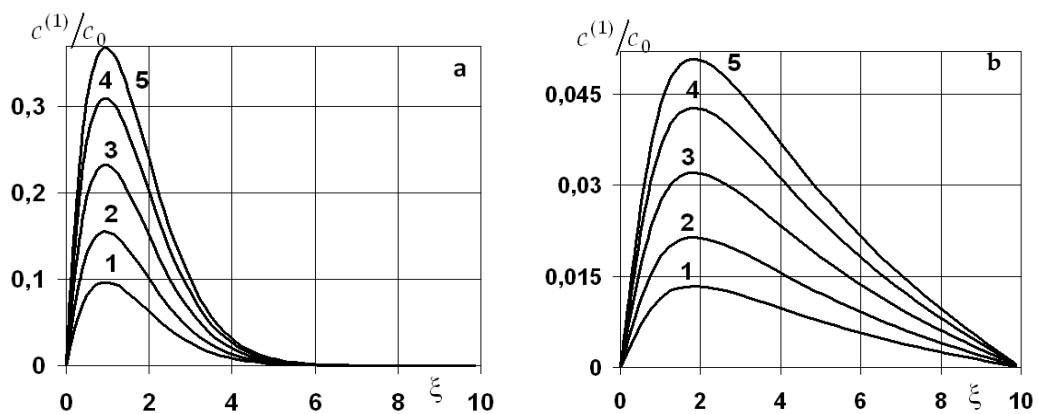


Рис. 3.7. Розподіли концентрації $c^{(1)}(\xi, \tau)/c_0$ для різних значень $a_{\lambda}^{(0)}$ при $d^{(1)} = 0,5$ (рис.а) та $d^{(1)} = 10$ (рис.б)

Коефіцієнт дифузії речовини $\mathbf{K}^{(1)}$ може бути як більшим, так і меншим ніж коефіцієнт дифузії домішки $\mathbf{K}^{(0)}$, тобто можливі випадки $d^{(1)} > 1$ і $d^{(1)} < 1$. При цьому чим менше відношення коефіцієнтів дифузії $d^{(1)}$, тим більшого максимуму досягає концентрація частинок на кроці $i = 1$ (крива 1 на рис. 3.5a) і тим ближче до поверхні шару, де діє джерело маси речовини $\mathbf{K}^{(0)}$, відбувається локалізація розпадних частинок речовини $\mathbf{K}^{(1)}$. Зміна безрозмірних коефіцієнтів розпаду $a_{\lambda}^{(0)}$, $a^{(1)}$ впливає тільки на значення функції концентрації $c^{(1)}(\xi, \tau)/c_0$, не змінюючи її поведінку (рис. 3.6,

3.7). При цьому її значення зростають пропорційно до збільшення коефіцієнта $a_\lambda^{(0)}$ (рис. 3.7) і зменшуються при зростанні коефіцієнта $a^{(1)}$, який характеризує інтенсивність розпаду речовини $\mathbf{K}^{(1)}$ по відношенню до інтенсивності розпаду частинок $\mathbf{K}^{(0)}$ (рис. 3.6).

На наступному $i = 2$ і на подальших кроках каскадного розпаду концентрації $c^{(i)}(\xi, \tau)$ приймають дедалі менші значення. Проте поведінка цих функцій аналогічна до $c^{(1)}(\xi, \tau)$, продемонстрована на рис. 3.4б, 3.5-3.9.

На рис. 3.9 подані розподіли потоків розпадних частинок $J_*^{(0)}(\tau)$ на кроці розпаду $i = 0$ (рис. а) і $J_*^{(1)}(\tau)$ на етапі $i = 1$ (рис. б) через різні перерізи $\xi_* = 0.75; 1; 1.5; 2; 3; 5; 10$ (криві 1-7, відповідно).

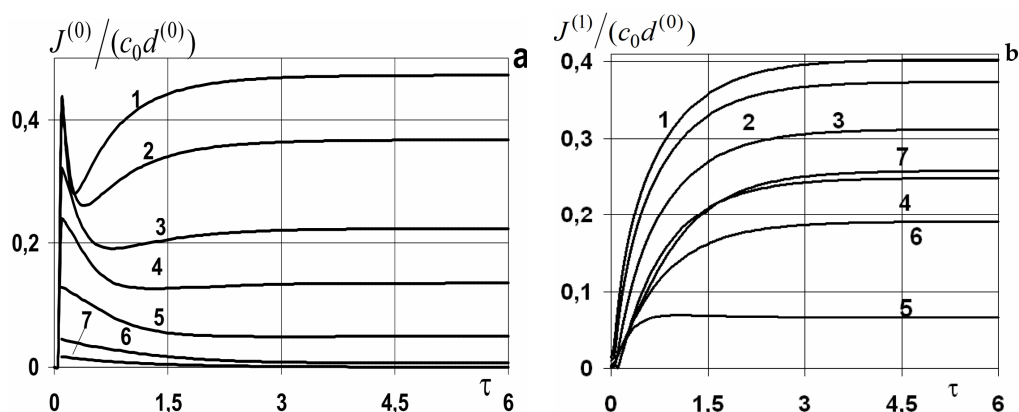


Рис. 3.9. Розподіли потоків розпадних частинок $J_*^{(0)}(\tau)$ (рис.а) і $J_*^{(1)}(\tau)$ (рис.б)

Зазначимо, що для $i = 0$ чим даліше від поверхні тіла, де діє джерело маси, знаходиться поверхня $\xi = \xi_*$, тим менших значень досягають дифузійні потоки $J_*^{(0)}(\tau)$ через цей переріз (рис. 3.9а). На кроці розпаду $i = 0$ від початку процесу дифузії відбувається суттєве зниження інтенсивності потоків маси (рис. 3.9а) в усьому тілі. Проте в околі поверхні $\xi = 0$ функція $J_*^{(0)}(\tau)$, досягши свого мінімуму, починає зростати доки не вийде на стаціонарний режим (криві 1-3, рис. 3.9а). На більших глибинах досягнення мінімальних значень відбувається пізніше, причому цей мінімум відповідає стаціонарному значенню потоку $J_*^{(0)}(\tau)$ (криві 5-7, рис. 3.9а).

Для кроку розпаду $i = 1$ характерне значне зростання значень потоку розпадної речовини до досягнення усталеного режиму (рис. 3.9б). Проте на відміну від

попереднього випадку з віддаленням від поверхні $\xi = 0$ дії джерела маси речовини $K^{(0)}$ величина $J_*^{(1)}(\tau)$ спочатку зменшується (криві 1-5, рис. 3.9б), а потім зростає (криві 5-7, рис. 3.9б). Найменші значення дифузійного потоку спостерігаються через поверхню $\xi_* = 3$ (крива 5, рис. 3.9б), причому функція $J_*^{(1)}(\tau)$ у цьому випадку найшвидше виходить на стаціонарний режим.

3.3. Математична модель невзаємодіючих потоків

3.3.1. Концентрації розпадних частинок

Математична модель невзаємодіючих потоків описує процес масоперенесення речовини двома шляхами з різними коефіцієнтами дифузії за відсутності масообміну між ними, тобто в моделі не враховуються процеси типу сорбції-десорбції [89]. Такий процес масоперенесення описується сукупністю двох незв'язаних рівнянь дифузії. Для цього випадку схема каскадного розпаду мігруючої речовини подана на рис. 3.10.

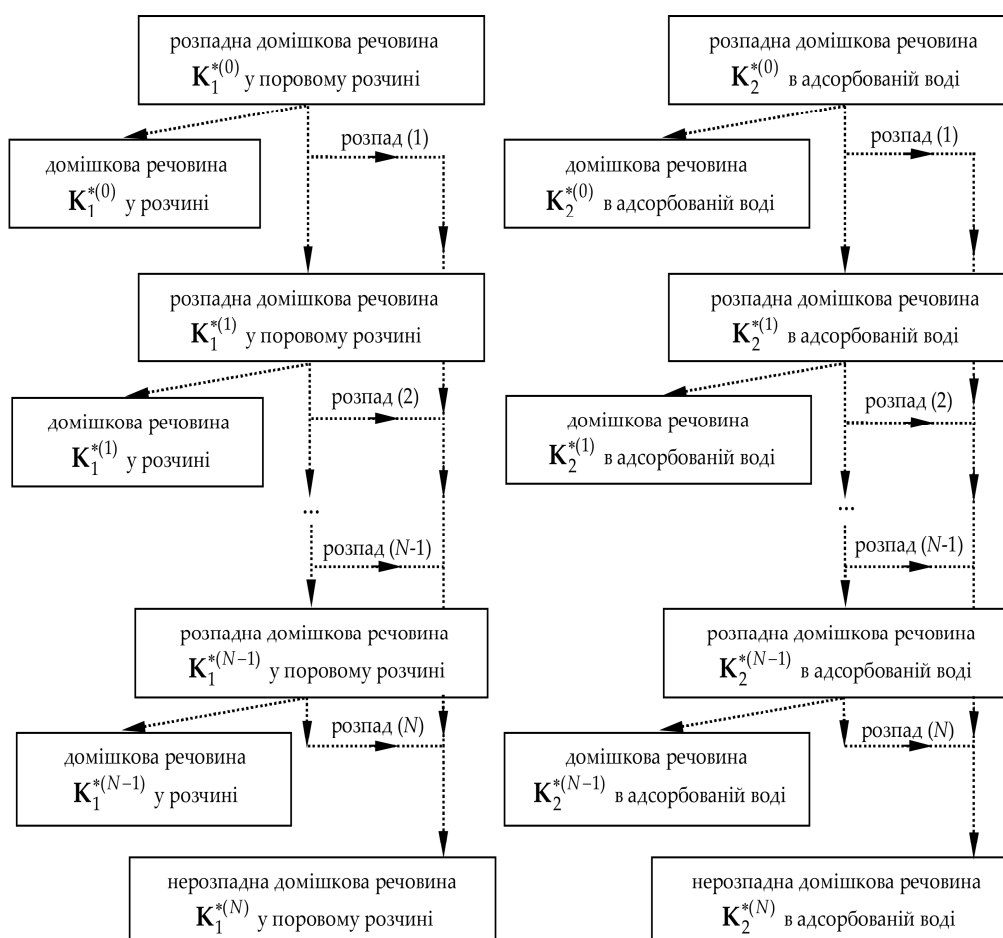


Рис. 3.10. Схема розпаду дифундуючої домішкової речовини за моделлю невзаємодіючих потоків

Для одновимірного за просторовою координатою випадку у безрозмірних змінних (3.1) міграція домішкових речовин за їх каскадного розпаду для моделі невзаємодіючих потоків описується такими сукупностями рівнянь

для $i = 0$

$$\begin{aligned}\frac{\partial c_1^{(0)}}{\partial \tau} &= d_1^{(0)} \frac{\partial^2 c_1^{(0)}}{\partial \xi^2} - a_1^{(0)} c_1^{(0)}, \\ \frac{\partial c_2^{(0)}}{\partial \tau} &= d_2^{(0)} \frac{\partial^2 c_2^{(0)}}{\partial \xi^2} \dots \dots \dots ;\end{aligned}\quad (3.30a)$$

для $i = \overline{1, N-1}$

$$\begin{aligned}\frac{\partial c_1^{(i)}}{\partial \tau} &= d_1^{(i)} \frac{\partial^2 c_1^{(i)}}{\partial \xi^2} + a_{\lambda_1}^{(i-1)} c_1^{(i-1)} - a_1^{(i)} c_1^{(i)}, \\ \frac{\partial c_2^{(i)}}{\partial \tau} &= d_2^{(i)} \frac{\partial^2 c_2^{(i)}}{\partial \xi^2} + a_{\lambda_2}^{(i-1)} c_2^{(i-1)} - a_2^{(i)} c_2^{(i)};\end{aligned}\quad (3.30б)$$

для $i = N$

$$\begin{aligned}\frac{\partial c_1^{(N)}}{\partial \tau} &= d_1^{(N)} \frac{\partial^2 c_1^{(N)}}{\partial \xi^2} + \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda_1}^{(iN)} c_1^{(i)}, \\ \frac{\partial c_2^{(N)}}{\partial \tau} &= d_2^{(N)} \frac{\partial^2 c_2^{(N)}}{\partial \xi^2} + \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda_2}^{(iN)} c_2^{(i)}\end{aligned}\quad (3.30в)$$

за нульових початкових

$$c_1^{(i)}(\xi, \tau) \Big|_{\tau=0} = 0, \quad c_2^{(i)}(\xi, \tau) \Big|_{\tau=0} = 0, \quad i = \overline{0; N} \quad (3.31)$$

і таких граничних умов

$$c_1^{(0)}(\xi, \tau) \Big|_{\xi=0} = \alpha c_0, \quad c_2^{(0)}(\xi, \tau) \Big|_{\xi=0} = (1 - \alpha) c_0; \quad (3.32a)$$

$$c_1^{(i)}(\xi, \tau) \Big|_{\xi=0} = c_2^{(i)}(\xi, \tau) \Big|_{\xi=0} = 0, \quad i = \overline{1; N}. \quad (3.32б)$$

Тут α ($0 \leq \alpha \leq 1$) - параметр, який визначає частину домішкової речовини, що з поверхні тіла потрапила на швидкий шлях дифузії (стан 1, 0-й етап розпаду).

Оскільки рівняння дифузії розпадної речовини (3.30) і крайові умови (3.31), (3.32) є незв'язаними, то можемо використати побудову розв'язків крайових задач (3.6)-(3.8), тобто формули (3.9), (3.15), (3.16), (3.21). У результаті одержимо вирази

для концентрації на швидкому $c_1^{(i)}$ та повільному $c_2^{(i)}$ шляхах міграції, а також сумарну концентрацію $c_{non}^{(i)}(\xi, \tau) = c_1^{(i)}(\xi, \tau) + c_2^{(i)}(\xi, \tau)$ в тілі для $i = 0$

$$\begin{aligned} \frac{c_1^{(0)}}{c_0} &= \alpha \left\{ 1 - \frac{\xi}{\xi_0} + \frac{a_1^{(0)}}{d_1^{(0)}} \left[1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\text{sh } \bar{\eta}_1^{(0)}(\xi_0 - \xi)}{\text{sh } \bar{\eta}_1^{(0)}\xi_0} \right] - \right. \\ &\quad \left. \frac{2}{\xi_0} \sum_{k=1}^{\infty} y_k \frac{\sin y_k \xi}{y_k^2 + \bar{\eta}_1^{(0)2}} e^{-\beta_{1k}^{(0)}\tau} \right\}, \\ \frac{c_2^{(0)}}{c_0} &= (1 - \alpha) \left\{ 1 - \frac{\xi}{\xi_0} + \frac{a_2^{(0)}}{d_2^{(0)}} \left[1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\text{sh } \bar{\eta}_2^{(0)}(\xi_0 - \xi)}{\text{sh } \bar{\eta}_2^{(0)}\xi_0} \right] - \right. \\ &\quad \left. - \frac{2}{\xi_0} \sum_{k=1}^{\infty} y_k \frac{\sin y_k \xi}{y_k^2 + \bar{\eta}_2^{(0)2}} e^{-\beta_{2k}^{(0)}\tau} \right\}, \\ \frac{c_{non}^{(0)}}{c_0} &= A_d^{(0)} \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0} \right) - \alpha \frac{a_1^{(0)}}{d_1^{(0)}} \frac{\text{sh } \bar{\eta}_1^{(0)}(\xi_0 - \xi)}{\text{sh } \bar{\eta}_1^{(0)}\xi_0} - (1 - \alpha) \frac{a_2^{(0)}}{d_2^{(0)}} \frac{\text{sh } \bar{\eta}_2^{(0)}(\xi_0 - \xi)}{\text{sh } \bar{\eta}_2^{(0)}\xi_0} - \\ &\quad - \frac{2}{\xi_0} \sum_{k=1}^{\infty} y_k \sin y_k \xi \left[\frac{\alpha}{y_k^2 + \bar{\eta}_1^{(0)2}} e^{-\beta_{1k}^{(0)}\tau} + \frac{(1 - \alpha)}{y_k^2 + \bar{\eta}_2^{(0)2}} e^{-\beta_{2k}^{(0)}\tau} \right]; \end{aligned} \quad (3.33)$$

для $i = 1$

$$\begin{aligned} \frac{c_1^{(1)}(\xi, \tau)}{c_0} &= \alpha a_1^{(1)} \left[\bar{a}_1 \left\{ \frac{\text{sh } \eta_1^{(0)}(\xi_0 - \xi)}{\text{sh } \eta_1^{(0)}\xi_0} - \frac{\text{sh } \eta_1^{(1)}(\xi_0 - \xi)}{\text{sh } \eta_1^{(0)}\xi_0} \right\} - \right. \\ &\quad - \eta_1^{(1)2} \left\{ 1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\text{sh } \eta_1^{(1)}(\xi_0 - \xi)}{\text{sh } \eta_1^{(0)}\xi_0} \right\} - \frac{2}{\xi_0} \sum_{k=1}^{\infty} \sin y_k \xi \left\{ \left(1 + \frac{a_1^{(0)}}{\beta_{1k}^{(0)}} \right) \frac{1 - e^{-\beta_{1k}^{(1)}\tau}}{y_k \beta_{1k}^{(1)}} + \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{y_k}{y_k^2 + \eta_1^{(0)2}} \frac{e^{-\beta_{1k}^{(1)}\tau} - e^{-\beta_{1k}^{(0)}\tau}}{\beta_{1k}^{(0)} - \beta_{1k}^{(1)}} \right\} \right], \\ \frac{c_2^{(1)}(\xi, \tau)}{c_0} &= (1 - \alpha) a_2^{(1)} \left[\bar{a}_2 \left\{ \frac{\text{sh } \eta_2^{(0)}(\xi_0 - \xi)}{\text{sh } \eta_2^{(0)}\xi_0} - \frac{\text{sh } \eta_2^{(1)}(\xi_0 - \xi)}{\text{sh } \eta_2^{(0)}\xi_0} \right\} - \right. \\ &\quad - \eta_2^{(1)2} \left\{ 1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\text{sh } \eta_2^{(1)}(\xi_0 - \xi)}{\text{sh } \eta_2^{(0)}\xi_0} \right\} - \frac{2}{\xi_0} \sum_{k=1}^{\infty} \sin y_k \xi \left\{ \left(1 + \frac{a_2^{(0)}}{\beta_{2k}^{(0)}} \right) \frac{1 - e^{-\beta_{2k}^{(1)}\tau}}{y_k \beta_{2k}^{(1)}} + \right. \\ &\quad \left. \left. + \frac{y_k}{y_k^2 + \eta_2^{(0)2}} \frac{e^{-\beta_{2k}^{(1)}\tau} - e^{-\beta_{2k}^{(0)}\tau}}{\beta_{2k}^{(0)} - \beta_{2k}^{(1)}} \right\} \right]; \end{aligned}$$

для $i = \overline{2, N-1}$

$$c_j^{(i)}(\xi, \tau) = a_j^{(i)} \int_0^\tau \int_0^{\xi_0} G_j^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') c_j^{(i-1)}(\xi', \tau') d\xi' d\tau', \quad (3.34)$$

для $i = N$

$$c_j^{(N)}(\xi, \tau) = \int_0^\tau \int_0^{\xi_0} G_j^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda_j}^{(iN)} c_j^{(i)}(\xi', \tau') d\xi' d\tau'; \quad (3.35)$$

тут

$$G_j^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') = \theta(\tau - \tau') \sum_{n=1}^{\infty} \sin(y_n \xi) \sin(y_n \xi') e^{-\beta_{jk}^{(i)}(\tau - \tau')}, \quad j = 1; 2, \quad i = \overline{2, N};$$

$$c_{non}^{(1)}(\xi, \tau) = c_1^{(1)}(\xi, \tau) + c_2^{(1)}(\xi, \tau), \quad (3.36)$$

де $\bar{\eta}_j^{(i)} = \sqrt{a_j^{(i)} / d_j^{(i)}}$, $\beta_{jk}^{(i)} = d_j^{(i)} y_k^2 + a_j^{(i)}$, $j = 1; 2$, $i = \overline{0, N}$; $A_d^{(i)} = 1 + \alpha \frac{a_1^{(i)}}{d_1^{(i)}} + (1 - \alpha) \frac{a_2^{(i)}}{d_2^{(i)}}$;

$$\bar{a}_j = \frac{a_j^{(0)}}{2d_j^{(0)} d_j^{(1)} (\eta_j^{(0)2} - \eta_j^{(1)2})}, \quad a_{\lambda_j}^{(iN)} = a_j^{(i)} - a_{\lambda_j}^{(i-1)}.$$

3.3.2. Потіки розпадних частинок за моделлю невзаємодіючих потоків

Для моделі, яка розглядається, потоки маси на швидкому та повільному шляхах міграції визначаються за формулою (3.25) з відповідним коефіцієнтом дифузії. Тоді, враховуючи вирази для концентрацій (3.33)-(3.35), для сумарного потоку маси через поверхню $\xi = \xi_*$ $J_{*non}^{(i)}(\tau) = J_{*1}^{(i)}(\tau) + J_{*2}^{(i)}(\tau)$ отримаємо

для $i = 0$

$$\frac{J_{*non}^{(0)}(\tau)}{c_0} = \frac{B_d}{\xi_0} - \alpha a_1^{(0)} \bar{\eta}_1^{(0)} \frac{\text{ch } \bar{\eta}_1^{(0)}(\xi_0 - \xi_*)}{\text{sh } \bar{\eta}_1^{(0)} \xi_0} - (1 - \alpha) a_2^{(0)} \bar{\eta}_2^{(0)} \frac{\text{ch } \bar{\eta}_2^{(0)}(\xi_0 - \xi_*)}{\text{sh } \bar{\eta}_2^{(0)} \xi_0} +$$

$$+ \frac{2}{\xi_0} \sum_{k=1}^{\infty} y_k^2 \cos y_k \xi_* \left[\frac{d_1^{(0)} \alpha}{y_k^2 + \bar{\eta}_1^{(0)2}} e^{-\beta_{1k}^{(0)} \tau} + \frac{d_2^{(0)} (1 - \alpha)}{y_k^2 + \bar{\eta}_2^{(0)2}} e^{-\beta_{2k}^{(0)} \tau} \right]; \quad (3.37a)$$

для $i = 1$

$$\frac{J_{*non}^{(1)}(\tau)}{c_0} = \sum_{j=1}^2 d_j^{(1)} a_j^{(1)} \alpha_j \left\{ \frac{a_j^{(0)}}{d_j^{(0)} d_j^{(1)} (\bar{\eta}_j^{(0)2} - \bar{\eta}_j^{(1)2})} \left[\bar{\eta}_j^{(0)} \frac{\text{ch } \bar{\eta}_j^{(0)}(\xi_0 - \xi_*)}{\text{sh } \bar{\eta}_j^{(0)} \xi_0} - \right. \right.$$

$$\left. \left. - \bar{\eta}_j^{(1)} \frac{\text{ch } \bar{\eta}_j^{(1)}(\xi_0 - \xi_*)}{\text{sh } \bar{\eta}_j^{(1)} \xi_0} \right] - \bar{\eta}_j^{(1)2} \left[\frac{1}{\xi_0} - \bar{\eta}_j^{(1)} \frac{\text{ch } \bar{\eta}_j^{(1)}(\xi_0 - \xi_*)}{\text{sh } \bar{\eta}_j^{(1)} \xi_0} \right] + \frac{2}{\xi_0} \sum_{k=1}^{\infty} \cos y_k \xi_* \times \right.$$

$$\times \left[\left(1 + \frac{a_j^{(0)}}{\beta_{jk}^{(0)}} \right) \frac{1 - e^{-\beta_{jk}^{(1)} \tau}}{\beta_{jk}^{(1)}} + \frac{1}{\beta_{jk}^{(0)} - \beta_{jk}^{(1)}} \frac{y_k^2}{y_k^2 + \eta^2} \left(e^{-\beta_{jk}^{(1)} \tau} - e^{-\beta_{jk}^{(0)} \tau} \right) \right]; \quad (3.37б)$$

для $i = 2, \dots, N-1$

$$J_{*j}^{(i)}(\tau) = -a_j^{(i)} d_j^{(i)} \int_0^\tau \int_0^{\xi_0} \frac{\partial G_j^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_*} c_j^{(i-1)}(\xi', \tau') d\xi' d\tau', \quad (3.37в)$$

$$\frac{\partial G_j^{(i)}}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_*} = \theta(\tau - \tau') \sum_{n=1}^{\infty} y_n \cos(y_n \xi_*) \sin(y_n \xi') e^{-(d_j^{(i)} y_n^2 + a_j^{(i)})(\tau - \tau')};$$

для $i = N$

$$J_{*j}^{(N)}(\tau) = -d_j^{(N)} \int_0^\tau \int_0^{\xi_0} \frac{\partial G_j^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_*} \sum_{i=0}^{N-1} a_j^{(i)} c_{\lambda j}^{(iN)}(\xi', \tau') d\xi' d\tau', \quad (3.37г)$$

$$\frac{\partial G_j^{(N)}}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_*} = \theta(\tau - \tau') \sum_{n=1}^{\infty} y_n \cos(y_n \xi_*) \sin(y_n \xi') e^{-d_j^{(N)} y_n^2 (\tau - \tau')}.$$

Тут $B_d = d_1^{(0)} \alpha (1 + \bar{\eta}_1^{(0)}) + d_2^{(0)} (1 - \alpha) (1 + \bar{\eta}_2^{(0)})$, $\alpha_1 = \alpha$, $\alpha_2 = 1 - \alpha$.

Після підстановки у формулах (3.37) $\xi_* = \xi_0$ одержимо вирази для сумарних потоків розпадних речовин $J_{0non}^{(i)}$ через нижню границю шару $\xi = \xi_0$

для $i = 0$

$$\begin{aligned} \frac{J_{0non}^{(0)}(\tau)}{c_0} &= \frac{B_d}{\xi_0} - \frac{\alpha a_1^{(0)} \bar{\eta}_1^{(0)}}{\text{sh } \bar{\eta}_1^{(0)} \xi_0} - \frac{(1 - \alpha) a_2^{(0)} \bar{\eta}_2^{(0)}}{\text{sh } \bar{\eta}_2^{(0)} \xi_0} + \\ &+ \frac{2}{\xi_0} \sum_{k=1}^{\infty} y_k^2 (-1)^k \left[\frac{d_1^{(0)} \alpha}{y_k^2 + \bar{\eta}_1^{(0)2}} e^{-\beta_{1k}^{(0)} \tau} + \frac{d_2^{(0)} (1 - \alpha)}{y_k^2 + \bar{\eta}_2^{(0)2}} e^{-\beta_{2k}^{(0)} \tau} \right]; \end{aligned} \quad (3.38а)$$

для $i = 1$

$$\begin{aligned} \frac{J_{0non}^{(1)}}{c_0} &= \sum_{j=1}^2 d_j^{(1)} a_j^{(1)} \alpha_j \left\{ \frac{a_j^{(0)}}{d_j^{(0)} d_j^{(1)} (\bar{\eta}_j^{(0)2} - \bar{\eta}_j^{(1)2})} \left[\bar{\eta}_j^{(0)} \frac{\text{ch } \bar{\eta}_j^{(0)} (\xi_0 - \xi_*)}{\text{sh } \bar{\eta}_j^{(0)} \xi_0} - \right. \right. \\ &- \bar{\eta}_j^{(1)} \frac{\text{ch } \bar{\eta}_j^{(1)} (\xi_0 - \xi_*)}{\text{sh } \bar{\eta}_j^{(1)} \xi_0} \left. \right] - \bar{\eta}_j^{(1)2} \left[\frac{1}{\xi_0} - \bar{\eta}_j^{(1)} \frac{\text{ch } \bar{\eta}_j^{(1)} (\xi_0 - \xi_*)}{\text{sh } \bar{\eta}_j^{(1)} \xi_0} \right] + \frac{2}{\xi_0} \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \times \\ &\times \left[\left(1 + \frac{a_j^{(0)}}{\beta_{jk}^{(0)}} \right) \frac{1 - e^{-\beta_{jk}^{(1)} \tau}}{\beta_{jk}^{(1)}} + \frac{1}{\beta_{jk}^{(0)} - \beta_{jk}^{(1)}} \frac{y_k^2}{y_k^2 + \eta^2} \left(e^{-\beta_{jk}^{(1)} \tau} - e^{-\beta_{jk}^{(0)} \tau} \right) \right] \Big\}; \end{aligned} \quad (3.38б)$$

для $i = 2, \dots, N-1$ справджується формула (3.37в), в якій

$$\left. \frac{\partial G_j^{(i)}}{\partial \xi} \right|_{\xi=\xi_0} = \theta(\tau - \tau') \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n y_n \sin(y_n \xi') e^{-(d_j^{(i)} y_n^2 + a_j^{(i)})(\tau - \tau')}; \quad (3.38в)$$

для $i = N$ справджується формула (3.37г), в якій

$$\left. \frac{\partial G_j^{(N)}}{\partial \xi} \right|_{\xi=\xi_0} = \theta(\tau - \tau') \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n y_n \sin(y_n \xi') e^{-d_j^{(N)} y_n^2 (\tau - \tau')}. \quad (3.38г)$$

3.3.3. Кількість розпадних речовин, що пройшли через нижню поверхню шару

Для моделі невзаємодіючих потоків кількість домішкових речовин, що за час τ_* пройшли через поверхню тіла $\xi = \xi_0$, також визначається за формулою (3.28). Підставляючи вирази для сумарних потоків розпадних домішкових речовин (3.38) у співвідношення (3.28), одержимо

для $i = 0$

$$\begin{aligned} \frac{Q_{0non}^{(0)}}{c_0} = & \sum_{j=1}^2 \alpha_j d_j^{(0)} \left(\frac{1}{\xi_0} + \bar{\eta}_j^{(0)2} \left[\frac{1}{\xi_0} - \frac{\bar{\eta}_j^{(0)}}{\text{sh } \bar{\eta}_j^{(0)} \xi_0} \right] \right) \tau_* + \\ & + \frac{2}{\xi_0} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k y_k^2}{(y_k^2 + \bar{\eta}_j^{(0)2}) \beta_{jk}^{(0)}} \left[1 - e^{-\beta_{jk}^{(0)} \tau_*} \right]; \end{aligned} \quad (3.39а)$$

для $i = 1$

$$\begin{aligned} \frac{Q_{0non}^{(1)}}{c_0} = & \sum_{j=1}^2 \alpha_j d_j^{(1)} a_j^{(1)} \left(\frac{a_j^{(0)}}{d_j^{(0)} d_j^{(1)} (\eta^2 - \eta_1^2)} \left\{ \left[\frac{\bar{\eta}_j^{(0)}}{\text{sh } \bar{\eta}_j^{(0)} \xi_0} - \frac{\bar{\eta}_j^{(1)}}{\text{sh } \bar{\eta}_j^{(1)} \xi_0} \right] \tau_* - \right. \right. \\ & - \bar{\eta}_j^{(1)2} \left[\frac{1}{\xi_0} - \frac{\bar{\eta}_j^{(1)}}{\text{sh } \bar{\eta}_j^{(1)} \xi_0} \right] \tau_* + \frac{2}{\xi_0} \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \left[\left(1 + \frac{a_j^{(0)}}{\beta_{jk}^{(0)}} \right) \frac{\beta_{jk}^{(1)} \tau_* - 1 + e^{-\beta_{jk}^{(1)} \tau_*}}{\beta_{jk}^{(1)2}} + \right. \\ & \left. \left. \left. + \frac{1}{\beta_{jk}^{(0)} \beta_{jk}^{(1)}} \frac{y_k^2}{y_k^2 + \bar{\eta}_j^{(0)2}} \left(1 + \frac{\beta_{jk}^{(1)} e^{-\beta_{jk}^{(0)} \tau_*} - \beta_{jk}^{(0)} e^{-\beta_{jk}^{(1)} \tau_*}}{\beta_{jk}^{(0)} - \beta_{jk}^{(1)}} \right) \right] \right\} \right); \end{aligned} \quad (3.39б)$$

для $i = 2, \dots, N-1$

$$Q_{*non}^{(i)} = - \sum_{j=1}^2 a_j^{(i)} d_j^{(i)} \int_0^{\tau_*} \left(\int_0^{\xi_0} \int_0^{\tau} \frac{\partial G_j^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_*} c_j^{(i-1)}(\xi', \tau') d\xi' d\tau' \right) d\tau; \quad (3.39в)$$

$$Q_{*non}^{(N)}(\tau) = - \sum_{j=1}^2 d_j^{(N)} \int_0^{\tau_*} \left(\int_0^{\xi_0} \int_0^{\tau} \frac{\partial G_j^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_*} \sum_{i=0}^{N-1} a_j^{(i)} c_{ij}^{(iN)}(\xi', \tau') d\xi' d\tau' \right) d\tau. \quad (3.39\Gamma)$$

Таким чином ми отримали формули для обчислення на кожному кроці каскадного розпаду кількості домішкової речовини, яка за час τ_* пройшла через нижню поверхню шару.

3.3.4. Числовий аналіз дифузії двома шляхами за моделлю невзаємодіючих потоків

Для моделі невзаємодіючих потоків на основі формул (3.33)-(3.36) розроблений програмний комплекс для комп'ютерного моделювання процесів дифузії домішок двома шляхами за каскадного розпаду мігруючих частинок без врахування процесів типу сорбції-десорбції [95].

На рис. 3.13 проілюстровано графіки сумарної концентрації $c^{(0)}/c_0$ залежно від значення параметра поверхневого розподілу домішки між станами $\alpha = 0.1; 0.3; 0.5; 0.7; 0.9$ (криві 1-5 в моменти часу $\tau = 0,125$ (рис. а) та $\tau = 10$ (рис. б) для $d_1^{(0)} = 1$, та $d_2^{(0)} = 0.125$. Тут прийнято, що $\xi_0 = 10$.

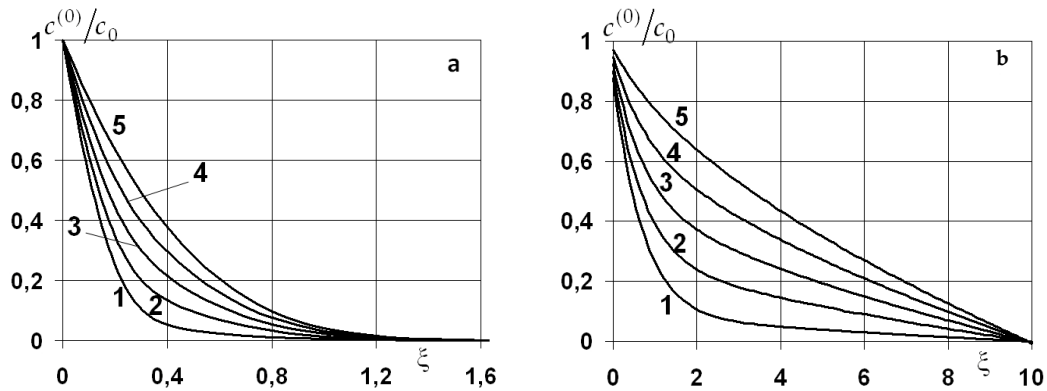


Рис. 3.13. Розподіли концентрації $c^{(0)}/c_0$ для різних значень α в моменти часу $\tau = 0.125$ (рис. а) та $\tau = 10$ (рис. б)

Зазначимо, що функція сумарної концентрації $c^{(0)}(\xi, \tau)$ на нульовому кроці розпаду є монотонно спадною для всіх фізично обґрунтованих параметрів задачі. При цьому чим більше розпадної речовини з поверхні потрапило на швидкий шлях дифузії, тим більшими є значення сумарної концентрації в тілі (рис. 3.13) і тим швидше вона виходить на усталений режим.

Рис. 3.14-3.16 ілюструють розподіли сумарної концентрації домішкових частинок в шарі на кроці розпаду $i = 1$. Тут рис. а наведені для $\tau = 0.125$, рис. б -

$\tau = 10$ для $d_1^{(1)} = 10$ та $d_2^{(1)} = 0.125$ при $a_1^{(1)} = a_2^{(1)} = 0.2$. На рис. 3.14 показані розподіли сумарної концентрації $c^{(1)}/c_0$ залежно від значення параметра поверхневого розподілу домішки між станами на нульовому етапі каскадного розпаду. Криві 1-5 відповідають значенням $\alpha = 0.1; 0.3; 0.5; 0.7; 0.9$ для $a_\lambda^{(0)} = 0.8$.

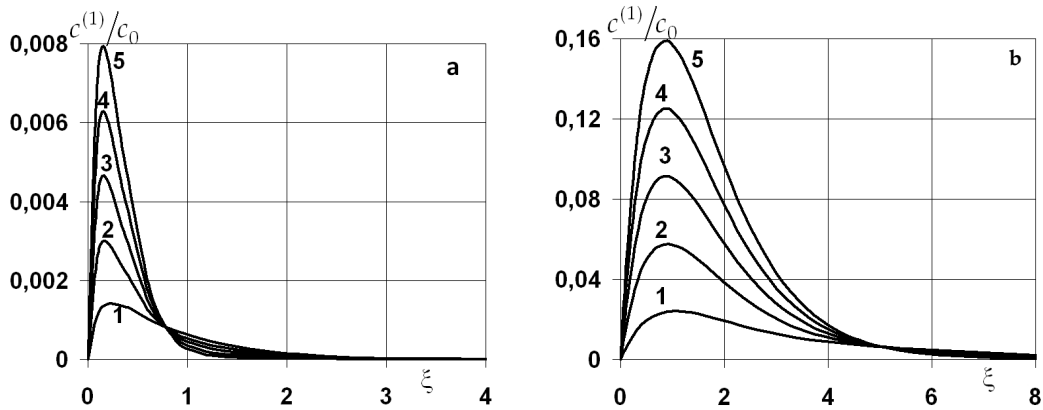


Рис. 3.14. Розподіли концентрації $c^{(1)}/c_0$ для різних значень α в моменти часу $\tau = 0.125$ (рис. а) та $\tau = 10$ (рис. б)

На рис. 3.15 і 3.16 показані графіки функції $c^{(1)}/c_0$ залежно від значення параметра $a_\lambda^{(0)} = 0.25; 0.4; 0.6; 0.8; 0.95$ (криві 1-5) для $\alpha = 0.9$ (рис. 3.15) і $\alpha = 0.1$ (рис. 3.16).

Зауважимо, що для сумарної концентрації домішкової речовини $\mathbf{K}^{(1)}$, що утворилась внаслідок розпаду речовини $\mathbf{K}^{(0)}$, характерне приповерхнєве зростання в околі границі шару, де діє джерело маси речовини $\mathbf{K}^{(0)}$ (рис. 3.14-3.16). Причому з часом максимум концентрації $c^{(1)}(\xi, \tau)$ зростає на порядки і дещо зсувається вглиб тіла (рис. 3.14а-3.16а і 3.14б-3.16б). Збільшення частини речовини $\mathbf{K}^{(0)}$, яка з поверхні потрапляє на швидкий шлях міграції, тобто збільшення коефіцієнта α , приводить до зростання значень функції $c^{(1)}(\xi, \tau)$ у приповерхневій області в рази (рис. 3.14). Зміна коефіцієнтів інтенсивності розпаду $a_j^{(0)}$, $a_j^{(1)}$ впливає тільки на значення сумарної концентрації на кроці розпаду $i=1$, не змінюючи її поведінку. Збільшення коефіцієнта $a_\lambda^{(0)}$, який визначає частину речовини $\mathbf{K}^{(0)}$, яка внаслідок розпаду є джерелом маси для речовини $\mathbf{K}^{(1)}$, спричинює зростання значень сумарної концентрації на всьому проміжку (рис. 3.15, 3.16). Зазначимо, що зменшення коефіцієнтів дифузії як на швидкому так і на повільному шляхах міграції на етапі розпаду $i=1$ приводить до зменшення сумарної концентрації речовини $\mathbf{K}^{(1)}$ у приповерхневій області шару і більшого проникнення в глиб тіла.

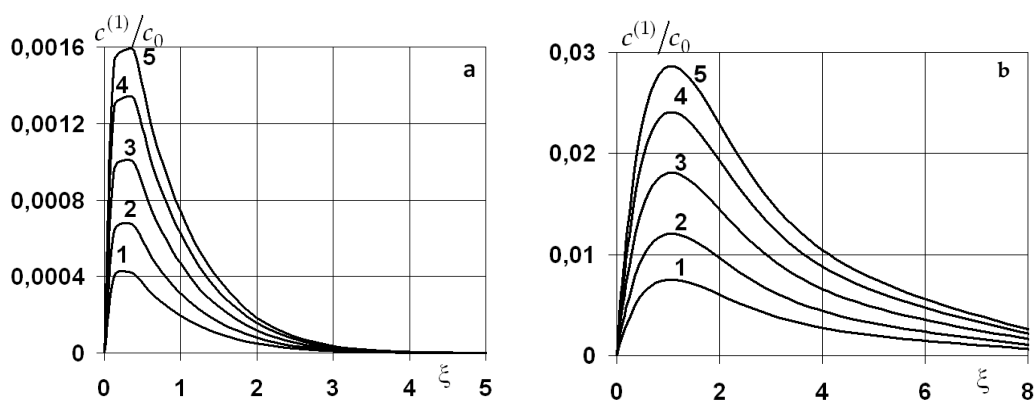


Рис. 3.15. Розподіли концентрації $c^{(1)}/c_0$ для різних значень $a_\lambda^{(0)}$ при $\alpha=0.9$ в моменти часу $\tau=0.125$ (рис. а) та $\tau=10$ (рис. б)

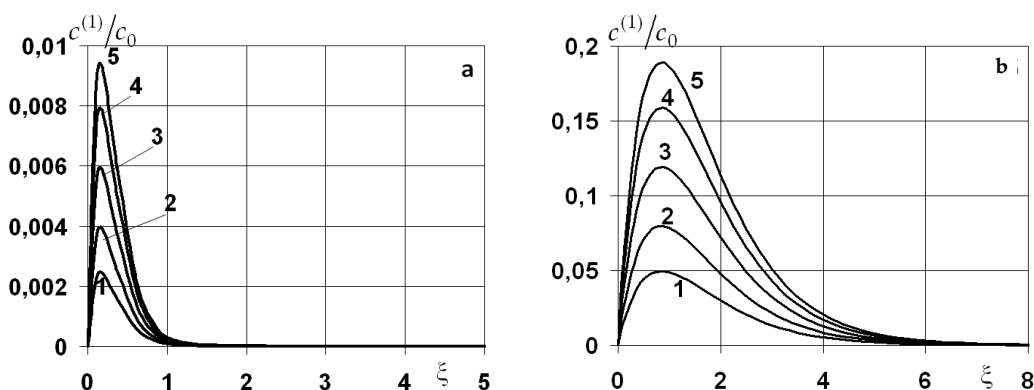


Рис.3.16. Розподіли концентрації $c^{(1)}/c_0$ в залежності від різних значень $a_\lambda^{(0)}$ при $\alpha=0.1$ в моменти часу $\tau=0.125$ (рис. а) та $\tau=10$ (рис. б)

На рис. 3.17 показані 3D-розподіли концентрації на швидкому $c_1^{(1)}(\xi, \tau)/c_0$ (рис. а) та повільному $c_2^{(1)}(\xi, \tau)/c_0$ (рис. б) шляхах міграції, а також їхньої суми $c^{(1)}(\xi, \tau)/c_0$ (рис. с) на площині $O\xi\tau$ для значень коефіцієнта інтенсивності розпаду речовини $a_\lambda^{(0)}=0,95$ та параметра поверхневого розподілу речовини між станами $\alpha=0,9$ при $d_1^{(1)}=10$, та $d_2^{(1)}=0.125$, $a_1^{(1)}=a_2^{(1)}=0.2$.

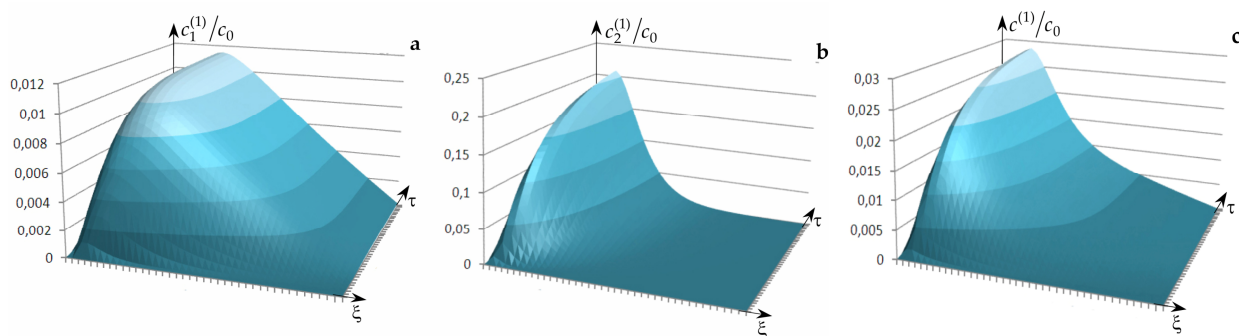


Рис.3.17. Поверхні розподілів концентрації $c_1^{(1)}(\xi, \tau)/c_0$ (рис. а), $c_2^{(1)}(\xi, \tau)/c_0$ (рис. б) та $c^{(1)}(\xi, \tau)/c_0$ (рис. с)

Зауважимо, що поведінка функцій концентрацій на швидкому $c_1^{(1)}(\xi, \tau)$ і повільному $c_2^{(1)}(\xi, \tau)$ шляхах міграції на етапі $i=1$ відрізняється значним накопиченням речовини $\mathbf{K}^{(1)}$ в околі поверхні $\xi=0$ на повільному шляху $j=2$ (рис. 3.17b) і суттєвим поширенням цієї речовини вглиб тіла швидким шляхом $j=1$ (рис. 3.17a). Причому обидві концентрації $c_1^{(1)}(\xi, \tau)$ і $c_2^{(1)}(\xi, \tau)$ є значимими для сумарної концентрації $c^{(1)}(\xi, \tau)$ (рис. 3.17c).

На наступному $i=2$ і на подальших кроках каскадного розпаду сумарної концентрації домішок $c^{(i)}(\xi, \tau)$ приймають дедалі менші значення. Проте поведінка цих функцій аналогічна до $c^{(1)}(\xi, \tau)$, продемонстрована на рис. 3.14-3.17.

3.4. Математична модель ефективної дифузії розпадних речовин у середовищі з пастками

3.4.1. Концентрації розпадних мігруючих частинок

Нехай в системі виконується умова локальної термодинамічної рівноваги між першим та другим станами домішкових частинок, тобто виконуються умови Теорема 2.8. Тоді процес масоперенесення за каскадного розпаду речовини у загальному випадку описується системами рівнянь (2.86), які у безрозмірних змінних (3.1) набувають вигляду (3.4). При цьому схема каскадного розпаду мігруючих частинок з урахуванням процесів типу сорбції-десорбції для даної часткової математичної моделі наведена на рис. 3.18.

Для одновимірного за просторовою координатою випадку зв'язані системи рівнянь (3.4) зводяться до наступного вигляду

для $i=0$

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_1^{e(0)}}{\partial \tau} &= d_0^{e(0)} \frac{\partial^2 c_1^{e(0)}}{\partial \xi^2} - a_{11}^{e(0)} c_1^{e(0)} + a_{23}^{(0)} c_3^{(0)}, \\ \frac{\partial c_3^{(0)}}{\partial \tau} &= a_{31}^{e(0)} c_1^{e(0)} - a_{33}^{(0)} c_3^{(0)}; \end{aligned} \quad (3.40a)$$

для $i = \overline{1, N-1}$

$$\frac{\partial c_1^{e(i)}}{\partial \tau} = d_0^{e(i)} \frac{\partial^2 c_1^{e(i)}}{\partial \xi^2} - a_{11}^{e(i)} c_1^{e(i)} + a_{23}^{(i)} c_3^{(i)} + a_{\lambda 1}^{e(i-1)} c_1^{e(i-1)},$$

$$\frac{\partial c_3^{(i)}}{\partial \tau} = a_{31}^{e(i)} c_1^{e(i)} - a_{33}^{(i)} c_3^{(i)} + a_{\lambda 3}^{(i-1)} c_3^{(i-1)}; \quad (3.40б)$$

для $i = N$

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_1^{e(N)}}{\partial \tau} &= a_0^{e(N)} \frac{\partial^2 c_1^{e(N)}}{\partial \xi^2} - a_{11}^{e(N)} c_1^{e(N)} + a_{23}^{(N)} c_3^{(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 1}^{e(iN)} c_1^{e(i)}, \\ \frac{\partial c_3^{(N)}}{\partial \tau} &= a_{31}^{e(N)} c_1^{e(N)} - a_{33}^{(N)} c_3^{(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 3}^{(iN)} c_3^{(i)} \end{aligned} \quad (3.40в)$$

за нульових початкових

$$c_1^{e(i)}(\xi, \tau) \Big|_{\tau=0} = c_3^{(i)}(\xi, \tau) \Big|_{\tau=0} = 0, \quad i = \overline{0; N} \quad (3.41)$$

і граничних умов

$$c_1^{e(0)}(\xi, \tau) \Big|_{\xi=0} = c_0 \equiv const, \quad c_1^{e(0)}(\xi, \tau) \Big|_{\xi=\xi_0} = 0; \quad (3.42а)$$

$$c_1^{e(i)}(\xi, \tau) \Big|_{\xi=0} = 0, \quad c_1^{e(i)}(\xi, \tau) \Big|_{\xi=\xi_0} = 0, \quad i = \overline{1; N}. \quad (3.42б)$$

Постановки крайових задач (3.40)-(3.42) можуть використовуватись не тільки як частковий випадок загальної моделі гетеродифузії з пастками за умов локальної термодинамічної рівноваги щодо процесу масообміну між першим та другим станами домішкових частинок, але й розглядатись як окрема задача дифузії у тілі з пастками з урахуванням каскадного розпаду мігруючої речовини. Тоді схема каскадного розпаду частинок та процеси сорбції-десорбції показані на рис. 3.18. Математична модель дифузії частинок у середовищі з пастками описує процес масоперенесення речовини двома шляхами з різними коефіцієнтами дифузії, який супроводжується масообміном частинками між ними [12, 193]. Проте коефіцієнт дифузії домішок на одному з шляхів настільки малий, що ним можна знехтувати, і тоді розглядаємо цей стан як пастки для домішкових частинок.

Знайдемо спочатку розв'язок крайової задачі для кроку $i = 0$ розпаду дифундууючої речовини, тобто задачі (3.40а), (3.41), (3.42а). Для цього введемо нові функції, які задовольняють нульові граничні умови

$$f_1(\xi, \tau) = c_1^{e(0)}(\xi, \tau) - c_0 \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0} \right), \quad f_2(\xi, \tau) = c_3^{(0)}(\xi, \tau). \quad (3.43)$$

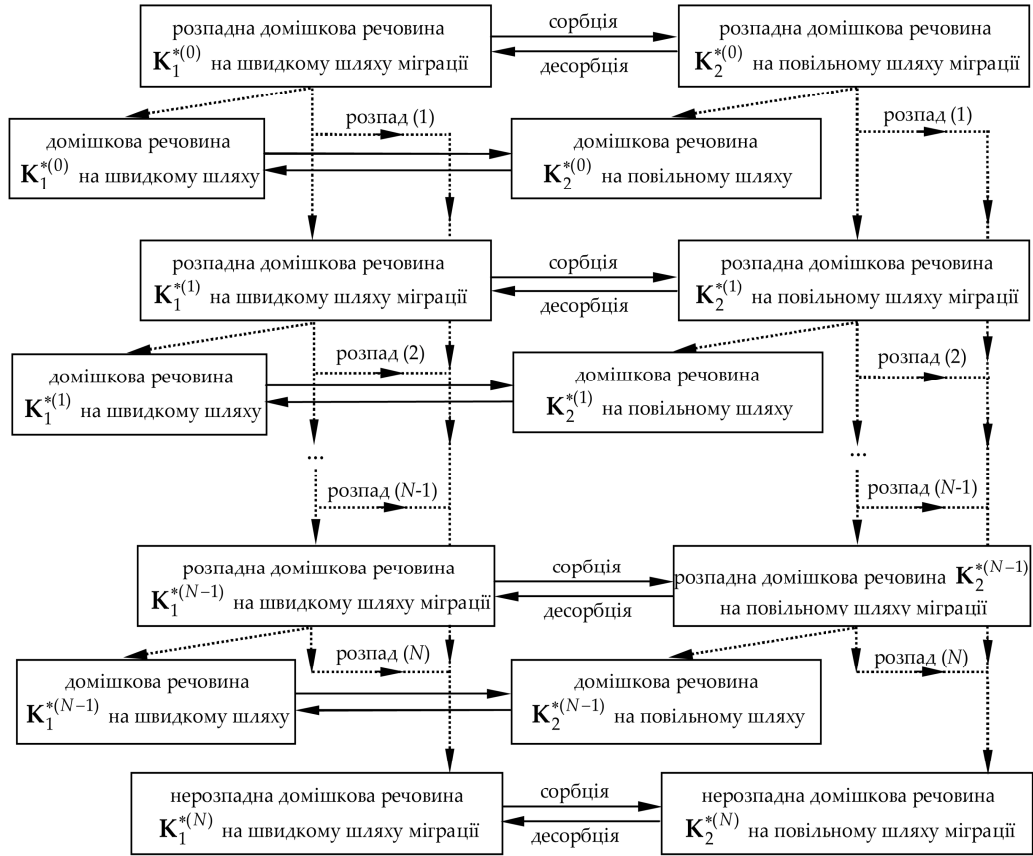


Рис. 3.18. Схема процесів каскадного розпаду домішкових компонент термодинамічної системи та процесів сорбції-десорбції

Тоді крайова задача (3.40а), (3.41), (3.42а) зведеться до форми

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_1}{\partial \tau} &= d_0^{e(0)} \frac{\partial^2 f_1}{\partial \xi^2} - a_{11}^{e(0)} f_1 + a_{23}^{(0)} f_2 - a_{11}^{e(0)} c_0 \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0}\right), \\ \frac{\partial f_2}{\partial \tau} &= a_{31}^{e(0)} f_1 - a_{33}^{(0)} f_2 + a_{31}^{e(0)} c_0 \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0}\right); \end{aligned} \quad (3.44)$$

$$\begin{aligned} f_1(\xi, \tau)|_{\tau=0} &= -c_0 \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0}\right), \quad f_2(\xi, \tau)|_{\tau=0} = 0; \\ f_1(\xi, \tau)|_{\xi=0} &= f_1(\xi, \tau)|_{\xi=\xi_0} = 0. \end{aligned} \quad (3.45)$$

Розв'язок задачі (3.44), (3.45) шукаємо у вигляді розкладу в ряди Фур'є по $\sin y_k \xi$:

$$f_j(\xi, \tau) = \frac{2}{\xi_0} \sum_{k=1}^{\infty} \tilde{f}_{jk}(k, \tau) \sin y_k \xi, \quad j = 1, 2. \quad (3.46)$$

Для функцій \tilde{f}_{jk} отримаємо наступну крайову задачу

$$\begin{aligned}\frac{d\tilde{f}_{1k}}{d\tau} &= -(d_0^{e(0)} y_k^2 + a_{11}^{e(0)}) \tilde{f}_{1k} + a_{23}^{(0)} \tilde{f}_{2k} - a_{11}^{e(0)} \frac{2c_0}{k\pi}, \\ \frac{d\tilde{f}_{2k}}{d\tau} &= a_{31}^{e(0)} \tilde{f}_{1k} - a_{33}^{(0)} \tilde{f}_{2k} + a_{31}^{e(0)} \frac{2c_0}{k\pi};\end{aligned}\quad (3.47)$$

$$\tilde{f}_{1k}(k, \tau)\Big|_{\tau=0} = -\frac{2c_0}{k\pi}, \quad \tilde{f}_{2k}(k, \tau)\Big|_{\tau=0} = 0. \quad (3.48)$$

Тут врахований розклад [141]

$$1 - \frac{\xi}{\xi_0} = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{2}{k\pi} \sin y_k \xi. \quad (3.49)$$

До задачі (3.47), (3.48) застосуємо інтегральне перетворення Лапласа за часом [262]: $\bar{f}_{jk}(k, s) = L[\tilde{f}_{jk}(k, \tau)]$, s - параметр перетворення Лапласа. Тоді маємо

$$(s + d_0^{e(0)} y_k^2 + a_{11}^{e(0)}) \bar{f}_{1k} - a_{23}^{(0)} \bar{f}_{2k} = -a_{11}^{e(0)} \frac{2c_0}{k\pi s} - \frac{2c_0}{k\pi}, \quad (3.40б)$$

$$-a_{31}^{e(0)} \bar{f}_{1k} + (s + a_{33}^{(0)}) \bar{f}_{2k} = a_{31}^{e(0)} \frac{2c_0}{k\pi s}. \quad (3.50)$$

Основний визначник системи рівнянь (3.50)

$$\Delta = \begin{vmatrix} s + d_0^{e(0)} y_k^2 + a_{11}^{e(0)} & -a_{23}^{(0)} \\ -a_{31}^{e(0)} & s + a_{33}^{(0)} \end{vmatrix} = (s - s_1)(s - s_2), \quad (3.51)$$

де s_1, s_2 - корені квадратного рівняння $s^2 + \zeta_1 s + \zeta_2 = 0$, в якому коефіцієнти мають вигляд

$$\begin{aligned}\zeta_1 &= d_0^{e(0)} y_k^2 + a_{11}^{e(0)} + a_{33}^{(0)}, \\ \zeta_2 &= a_{11}^{e(0)} a_{33}^{(0)} - a_{31}^{e(0)} a_{23}^{(0)} + a_{33}^{(0)} d_0^{e(0)} y_k^2,\end{aligned}$$

а саме

$$s_{1,2} = \left[-\zeta_1 \pm \sqrt{\zeta_1^2 - 4\zeta_2} \right] / 2. \quad (3.52)$$

Знайдемо допоміжні визначники системи (3.50)

$$\begin{aligned}\Delta_1 &= \frac{2c_0}{k\pi} \begin{vmatrix} -1 - a_{11}^{e(0)} \frac{1}{s} & -a_{23}^{(0)} \\ a_{31}^{e(0)} \frac{1}{s} & s + a_{33}^{(0)} \end{vmatrix} = -\frac{2c_0}{k\pi} \left\{ s + \tilde{A}_1 + \tilde{B}_1 \frac{1}{s} \right\}, \\ \Delta_2 &= \frac{2c_0}{k\pi} \begin{vmatrix} s + d_0^{e(0)} y_k^2 + a_{11}^{e(0)} & -1 - a_{11}^{e(0)} \frac{1}{s} \\ -a_{31}^{e(0)} & a_{31}^{e(0)} \frac{1}{s} \end{vmatrix} = \frac{2c_0}{k\pi} a_{31}^{e(0)} \left\{ \tilde{B}_2 \frac{1}{s} \right\},\end{aligned}$$

де $\tilde{A}_1 = a_{11}^{e(0)} + a_{33}^{e(0)}$, $\tilde{B}_1 = a_{11}^{e(0)}a_{33}^{(0)} - a_{31}^{e(0)}a_{23}^{(0)}$, $\tilde{B}_2 = d_0^{e(0)}y_k^2$.

Тоді маємо

$$\bar{f}_{1k} = \frac{\Delta_1}{\Delta} = -\frac{2c_0}{k\pi} \frac{s + \tilde{A}_1 + \tilde{B}_1/s}{(s-s_1)(s-s_2)}, \quad \bar{f}_{2k} = \frac{\Delta_2}{\Delta} = a_{31}^{e(0)} \frac{2c_0}{k\pi} \frac{\tilde{B}_2/s}{(s-s_1)(s-s_2)}.$$

Виконаємо обернене перетворення Лапласа. Врахуємо, що [109]

$$L^{-1}\left[\frac{s}{(s-s_1)(s-s_2)}\right] = \frac{1}{s_1-s_2} \{s_1 e^{s_1\tau} - s_2 e^{s_2\tau}\}, \quad (3.53a)$$

$$L^{-1}\left[\frac{1}{s(s-s_1)(s-s_2)}\right] = \frac{1}{s_1-s_2} \left\{ \frac{1}{s_1} e^{s_1\tau} - \frac{1}{s_2} e^{s_2\tau} \right\} + \frac{1}{s_1s_2}, \quad (3.53b)$$

а також формулу (3.12б). Зауважимо, що $s_1s_2 = \zeta_2 = a_{33}^{(0)}d_0^{e(0)}y_k^2 + a_{11}^{e(0)}a_{33}^{(0)} - a_{31}^{e(0)}a_{23}^{(0)}$.

Тоді одержимо

$$\begin{aligned} \tilde{f}_{1k} &= -\frac{2c_0}{k\pi} \left\{ \frac{1}{s_1-s_2} \left[\left(s_1 + \tilde{A}_1 + \frac{\tilde{B}_1}{s_1} \right) e^{s_1\tau} - \left(s_2 + \tilde{A}_1 + \frac{\tilde{B}_1}{s_2} \right) e^{s_2\tau} \right] + \frac{\tilde{B}_1}{s_1s_2} \right\}, \\ \tilde{f}_{2k} &= a_{31}^{e(0)} \frac{2c_0}{k\pi} \left\{ \frac{1}{s_1-s_2} \left[\frac{\tilde{B}_2}{s_1} e^{s_1\tau} - \frac{\tilde{B}_2}{s_2} e^{s_2\tau} \right] + \frac{\tilde{B}_2}{s_1s_2} \right\}. \end{aligned}$$

За формулою (3.46) отримаємо

$$\begin{aligned} f_1(\xi, \tau) &= -\frac{2}{\xi_0} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{2c_0}{k\pi} \sin y_k \xi \left\{ \frac{1}{s_1-s_2} \left[\left(s_1 + \tilde{A}_1 + \frac{\tilde{B}_1}{s_1} \right) e^{s_1\tau} - \left(s_2 + \tilde{A}_1 + \frac{\tilde{B}_1}{s_2} \right) e^{s_2\tau} \right] + \frac{\tilde{B}_1}{s_1s_2} \right\}, \\ f_2(\xi, \tau) &= a_{31}^{e(0)} \frac{2}{\xi_0} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{2c_0}{k\pi} \sin y_k \xi \left\{ \frac{1}{s_1-s_2} \left[\frac{\tilde{B}_2}{s_1} e^{s_1\tau} - \frac{\tilde{B}_2}{s_2} e^{s_2\tau} \right] + \frac{\tilde{B}_2}{s_1s_2} \right\}. \end{aligned} \quad (3.54)$$

Підсумуємо асимптотичні доданки у співвідношеннях (3.54). Використовуючи (3.14), для такого доданку у першому співвідношенні отримаємо

$$S'_1 = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{2c_0}{k\pi} \tilde{B}_1 \frac{\sin y_k \xi}{a_{33}^{(0)}d_0^{e(0)}y_k^2 + \tilde{B}_1} = c_0 \frac{\tilde{B}_1^2}{a_{33}^{(0)}d_0^{e(0)}} \left[1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\text{sh } \eta^{(0)}(\xi_0 - \xi)}{\text{sh } \eta^{(0)}\xi_0} \right],$$

де $\eta^{(0)} = \sqrt{\tilde{B}_1/a_{33}^{(0)}d_0^{e(0)}}$.

Суму асимптотичного доданку у другому співвідношенні (3.54)

$$S'_2 = a_{31}^{e(0)} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{2c_0}{k\pi} \frac{d_0^{e(0)}y_k^2}{a_{33}^{(0)}d_0^{e(0)}y_k^2 + \tilde{B}_1} \sin y_k \xi$$

можна знайти, двічі продиференціювавши ряд для S'_1 по ξ і домноживши отриманий вираз на (-1) . Маємо

$$S'_2 = a_{31}^{e(0)} c_0 \frac{\tilde{B}_1}{a_{33}^{(0)2} d_0^{e(0)2}} \frac{\text{sh } \eta^{(0)}(\xi_0 - \xi)}{\text{sh } \eta^{(0)} \xi_0}.$$

І, враховуючи заміну (3.43), отримаємо остаточні вирази для концентрацій розпадних частинок на кроці розпаду $i = 0$:

концентрація домішок у водному поровому розчині

$$\begin{aligned} \frac{1}{c_0} c_1^{e(0)}(\xi, \tau) = & 1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\tilde{B}_1^2}{a_{33}^{(0)2} d_0^{e(0)2}} \frac{2}{\xi_0} \left[1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\text{sh } \eta^{(0)}(\xi_0 - \xi)}{\text{sh } \eta^{(0)} \xi_0} \right] - \\ & - \frac{2}{\xi_0} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\sin y_k \xi}{y_k (s_1 - s_2)} \left\{ \left(s_1 + \tilde{A}_1 + \frac{\tilde{B}_1}{s_1} \right) e^{s_1 \tau} - \left(s_2 + \tilde{A}_1 + \frac{\tilde{B}_1}{s_2} \right) e^{s_2 \tau} \right\}; \end{aligned} \quad (3.55a)$$

концентрація частинок у пастках

$$\frac{1}{c_0} c_3^{(0)}(\xi, \tau) = \frac{a_{31}^{e(0)} \tilde{B}_1}{a_{33}^{(0)2} d_0^{e(0)2}} \frac{2}{\xi_0} \frac{\text{sh } \eta^{(0)}(\xi_0 - \xi)}{\text{sh } \eta^{(0)} \xi_0} + \frac{2}{\xi_0} a_{31}^{e(0)} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\sin y_k \xi}{y_k (s_1 - s_2)} \left\{ \frac{\tilde{B}_2}{s_1} e^{s_1 \tau} - \frac{\tilde{B}_2}{s_2} e^{s_2 \tau} \right\}; \quad (3.55b)$$

сумарна концентрація дифундуючих частинок $\tilde{c}^{(0)}(\xi, \tau) = c_1^{e(0)}(\xi, \tau) + c_3^{(0)}(\xi, \tau)$ у тілі з пастками

$$\begin{aligned} \frac{1}{c_0} \tilde{c}^{(0)}(\xi, \tau) = & 1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\tilde{B}_1^2}{a_{33}^{(0)2} d_0^{e(0)2}} \frac{2}{\xi_0} \left[1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \left(1 - \frac{a_{31}^{e(0)}}{\tilde{B}_1 a_{33}^{(0)}} \right) \frac{\text{sh } \eta^{(0)}(\xi_0 - \xi)}{\text{sh } \eta^{(0)} \xi_0} \right] - \\ & - \frac{2}{\xi_0} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\sin y_k \xi}{y_k (s_1 - s_2)} \left\{ \left(s_1 + \tilde{A}^{(0)} + \frac{\tilde{B}^{(0)}}{s_1} \right) e^{s_1 \tau} - \left(s_2 + \tilde{A}^{(0)} + \frac{\tilde{B}^{(0)}}{s_2} \right) e^{s_2 \tau} \right\}, \end{aligned} \quad (3.55b)$$

де $\tilde{A}^{(0)} = \tilde{A}_1$, $\tilde{B}^{(0)} = \tilde{B}_1 - a_{31}^{e(0)} \tilde{B}_2$.

Зазначимо, що концентрація в пастках є пропорційною не тільки значенню концентрації частинок на границі шару c_0 , але й коефіцієнту інтенсивності сорбції $a_{31}^{e(0)}$. Асимптотичні складові концентрацій $c_1^{e(0)}(\xi, \tau)$, $c_3^{(0)}(\xi, \tau)$, $\tilde{c}^{(0)}(\xi, \tau)$, як і в попередніх випадках, є суттєво нелінійними.

Зауважимо, що в рамках моделі, яка розглядається, концентрація частинок у пастках на границі шару $\xi = 0$ не дорівнює нулю, і, відповідно, сумарна концентрація дифундуючої речовини на цій межі не дорівнює c_0 :

$$\frac{1}{c_0} c_3^{(0)}(\xi, \tau) \Big|_{\xi=0} = \frac{2}{\xi_0} \frac{a_{31}^{e(0)} \tilde{B}_1}{a_{33}^{(0)2} d_0^{e(0)2}}; \quad \frac{1}{c_0} \tilde{c}^{(0)}(\xi, \tau) \Big|_{\xi=0} = 1 + \frac{2}{\xi_0} \frac{\tilde{B}_1 a_{31}^{e(0)}}{a_{33}^{(0)2} d_0^{e(0)2}}.$$

Це означає, що домішкова речовина може накопичуватись у пастках і на границі шару $\xi = 0$. У той же час на границі $\xi = \xi_0$ концентрації розпадних частинок (3.55а)-(3.55в) дорівнюють нулю.

Для інших кроків каскадного розпаду мігруючих речовин ($i=1, \dots, N-1$) розв'язок крайових задач (3.40б), (3.41), (3.42б) подамо через відповідні функції Гріна (аналогічно до моделей дифузії в ефективному середовищі та невзаємодіючих потоків):

$$c_1^{e(i)}(\xi, \tau) = a_{\lambda 1}^{e(i-1)} \int_0^{\tau} \int_0^{\xi_0} G_1^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') c_1^{e(i-1)}(\xi', \tau') d\xi' d\tau',$$

$$c_3^{(i)}(\xi, \tau) = a_{\lambda 3}^{(i-1)} \int_0^{\tau} \int_0^{\xi_0} G_3^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') c_3^{(i-1)}(\xi', \tau') d\xi' d\tau', \quad (3.56)$$

де $G_1^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')$, $G_3^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')$ - функції Гріна задачі (3.40б), (3.41), (3.42б) для $i=1, \dots, N-1$, тобто є розв'язками наступних крайових задач

$$\frac{\partial G_1^{(i)}}{\partial \tau} - d_0^{e(i)} \frac{\partial^2 G_1^{(i)}}{\partial \xi^2} + a_{11}^{e(i)} G_1^{(i)} - a_{23}^{(i)} G_3^{(i)} = \delta(\tau - \tau')(\xi - \xi'),$$

$$\frac{\partial G_3^{(i)}}{\partial \tau} - a_{31}^{e(i)} G_1^{(i)} + a_{33}^{(i)} G_3^{(i)} = \delta(\tau - \tau')(\xi - \xi') \quad (3.57)$$

за нульових крайових умов

$$G_1^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') \Big|_{\tau=0} = G_3^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') \Big|_{\tau=0} = 0,$$

$$G_1^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') \Big|_{\xi=0} = G_1^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') \Big|_{\xi=\xi_0} = 0, \quad i = \overline{1, N-1}. \quad (3.58)$$

Розв'язок крайової задачі (3.57), (3.58) також шукатимемо з допомогою інтегральних перетворень Лапласа і Фур'є [262]. Отже, застосуємо інтегральне перетворення Лапласа за часом

$$g_j^{(i)}(\xi, \xi'; s, \tau') = L[G_j^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')], \quad j = 1, 3.$$

Маємо

$$(s + a_{11}^{e(i)}) g_1^{(i)} - d_0^{e(i)} \frac{d^2 g_1^{(i)}}{d\xi^2} - a_{23}^{(i)} g_3^{(i)} = e^{-s\tau'} \delta(\xi - \xi'),$$

$$-a_{31}^{e(i)} g_1^{(i)} + (s + a_{33}^{(i)}) g_3^{(i)} = e^{-s\tau'} \delta(\xi - \xi');$$

$$g_1^{(i)}(\xi, \xi'; s, \tau') \Big|_{\xi=0} = g_1^{(i)}(\xi, \xi'; s, \tau') \Big|_{\xi=\xi_0} = 0, \quad i = \overline{1, N-1}.$$

Якщо до одержаної задачі застосувати скінченне інтегральне \sin -перетворення Фур'є $\bar{g}_j^{(i)}(y_n, \xi'; s, \tau') = F[g_j^{(i)}(\xi, \xi'; s, \tau')]$, $j = 1, 3$, тоді в зображеннях отримаємо таку систему рівнянь

$$(s + d_0^{e(i)} y_n^2 + a_{11}^{e(i)}) \bar{g}_1^{(i)} - a_{23}^{(i)} \bar{g}_3^{(i)} = e^{-s\tau'} \sin y_n \xi',$$

$$-a_{31}^{e(i)} \bar{g}_1^{(i)} + (s + a_{33}^{(i)}) \bar{g}_3^{(i)} = e^{-s\tau'} \sin y_n \xi'.$$

Основний визначник цієї системи рівнянь є ідентичним (3.51), тобто розв'язки відповідного квадратного рівняння s_{1n} , s_{2n} мають вигляд (3.52), в яких k замінено на n . Тепер запишемо допоміжні визначники

$$\Delta_1 = e^{-s\tau'} \sin y_n \xi' [s + a_{33}^{(i)} + a_{23}^{(i)}],$$

$$\Delta_2 = e^{-s\tau'} \sin y_n \xi' [s + d_0^{e(i)} y_n^2 + a_{11}^{e(i)} + a_{31}^{e(i)}].$$

Тоді

$$\bar{g}_1^{(i)}(y_n, \xi'; s, \tau') = \frac{(s + \bar{A}_1^{(i)}) e^{-s\tau'} \sin y_n \xi'}{(s - s_{1n})(s - s_{2n})},$$

$$\bar{g}_3^{(i)}(y_n, \xi'; s, \tau') = \frac{(s + \bar{A}_2^{(i)}) e^{-s\tau'} \sin y_n \xi'}{(s - s_{1n})(s - s_{2n})},$$

де $\bar{A}_1^{(i)} = a_{33}^{(i)} + a_{23}^{(i)}$, $\bar{A}_2^{(i)} = d_0^{e(i)} y_n^2 + a_{11}^{e(i)} + a_{31}^{e(i)}$.

Для оберненого перетворення Лапласа скористаємось формулами (3.126), (3.53а) і теоремою запізнювання [109]. Маємо

$$g_1^{(i)}(y_n, \xi'; \tau, \tau') = \theta(\tau - \tau') \frac{\sin(y_n \xi')}{s_{1n} - s_{2n}} [(s_{1n} + \bar{A}_1^{(i)}) e^{s_{1n}(\tau - \tau')} - (s_{2n} + \bar{A}_1^{(i)}) e^{s_{2n}(\tau - \tau)}],$$

$$g_3^{(i)}(y_n, \xi'; \tau, \tau') = \theta(\tau - \tau') \frac{\sin(y_n \xi')}{s_{1n} - s_{2n}} [(s_{1n} + \bar{A}_2^{(i)}) e^{s_{1n}(\tau - \tau')} - (s_{2n} + \bar{A}_2^{(i)}) e^{s_{2n}(\tau - \tau)}].$$

Застосовуючи обернене \sin -перетворення Фур'є, одержимо формули для визначення функцій Гріна $G_j^{(i)}$ на i -му кроці розпаду ($i = 1, \dots, N-1$):

$$G_1^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') = \theta(\tau - \tau') \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin(y_n \xi) \sin(y_n \xi')}{s_{1n} - s_{2n}} \times$$

$$\begin{aligned}
& \times \left[(s_{1n} + \bar{A}_1^{(i)})e^{s_{1n}(\tau-\tau')} - (s_{2n} + \bar{A}_1^{(i)})e^{s_{2n}(\tau-\tau')} \right]; \\
G_3^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') &= \theta(\tau - \tau') \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin(y_n \xi) \sin(y_n \xi')}{s_{1n} - s_{2n}} \times \\
& \times \left[(s_{1n} + \bar{A}_2^{(i)})e^{s_{1n}(\tau-\tau')} - (s_{2n} + \bar{A}_2^{(i)})e^{s_{2n}(\tau-\tau')} \right]. \tag{3.59}
\end{aligned}$$

Отже, знайшовши функції Гріна за формулою (3.59) і визначивши концентрації розпадних домішкових частинок на кроці $i-1$, за співвідношеннями (3.56) ми знайдемо концентрації розпадної речовини для $i=1, \dots, N-1$.

Для випадку $i=N$ (нерозпадні домішки) процес масоперенесення для даної моделі описується крайовою задачею (3.40в), (3.41), (3.42б). Її розв'язок також подамо через відповідні функції Гріна аналогічно до (3.56), а саме

$$\begin{aligned}
c_1^{e(N)}(\xi, \tau) &= \int_0^{\tau} \int_0^{\xi_0} G_1^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 1}^{e(iN)} c_1^{e(i)}(\xi', \tau') d\xi' d\tau', \\
c_3^{(N)}(\xi, \tau) &= \int_0^{\tau} \int_0^{\xi_0} G_3^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 3}^{(iN)} c_3^{(i)}(\xi', \tau') d\xi' d\tau', \tag{3.60}
\end{aligned}$$

де $G_j^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')$ ($j=1,3$) - функції Гріна задачі (3.40в), (3.41), (3.42б) і задовольняють відповідну крайову з точковим джерелом:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial G_1^{(N)}}{\partial \tau} - d_0^{e(N)} \frac{\partial^2 G_1^{(N)}}{\partial \xi^2} + a_{11}^{e(N)} G_1^{(N)} - a_{23}^{(N)} G_3^{(N)} &= \delta(\tau - \tau')(\xi - \xi'), \\
\frac{\partial G_3^{(N)}}{\partial \tau} - a_{31}^{e(N)} G_1^{(N)} + a_{33}^{(N)} G_3^{(N)} &= \delta(\tau - \tau')(\xi - \xi'); \tag{3.61}
\end{aligned}$$

$$G_1^{(N)} \Big|_{\tau=0} = G_3^{(N)} \Big|_{\tau=0} = G_1^{(N)} \Big|_{\xi=0} = G_1^{(N)} \Big|_{\xi=\xi_0} = 0. \tag{3.62}$$

Розв'язок крайової задачі (3.61), (3.62) має вигляд

$$\begin{aligned}
G_1^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') &= \theta(\tau - \tau') \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin(y_n \xi) \sin(y_n \xi')}{s_{1n} - s_{2n}} \times \\
& \times \left[(s_{1n} + \bar{A}_1^{(N)})e^{s_{1n}(\tau-\tau')} - (s_{2n} + \bar{A}_1^{(N)})e^{s_{2n}(\tau-\tau')} \right], \\
G_3^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') &= \theta(\tau - \tau') \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin(y_n \xi) \sin(y_n \xi')}{s_{1n} - s_{2n}} \times \\
& \times \left[(s_{1n} + \bar{A}_2^{(N)})e^{s_{1n}(\tau-\tau')} - (s_{2n} + \bar{A}_2^{(N)})e^{s_{2n}(\tau-\tau')} \right]. \tag{3.63}
\end{aligned}$$

Тоді, послідовно визначивши концентрації на кожному кроці $i=0, \dots, N-1$ за формулами (3.60) з урахуванням виразів (3.63) знайдемо концентрації нерозпадних або нешкідливих домішкових частинок у тілі за моделлю дифузії у середовищі з пастками.

3.4.2. Потоки розпадних домішкових частинок через задану поверхню

У рамках моделі дифузії у середовищі з пастками потік маси враховується лише у стані 1. В об'ємі скелету (пастках) приймається, що дифузійний потік є нехтовно малим. Тому сумарний потік частинок за даною моделлю визначається потоком у поровому розчині. В одновимірному за просторовою координатою випадку, враховуючи Теорему 2.8, потік частинок, що розпадаються, через переріз тіла $\xi = \xi_*$ знайдемо за формулою (3.25), яку для даного випадку запишемо у вигляді

$$J_{*p}^{(i)}(\tau) = -d_0^{e(i)} \frac{\partial c_1^{e(i)}(\xi, \tau)}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_*}, \quad i = \overline{0; N}. \quad (3.64)$$

Підставляємо вирази для концентрацій $c_1^{e(i)}(\xi, \tau)$ (3.55a), (3.36), (3.60) у співвідношення (3.64). Тоді отримаємо

для $i = 0$

$$\begin{aligned} \frac{\xi_0}{c_0 d_0^{e(0)}} J_{*p}^{(0)}(\tau) = & 1 + \frac{\tilde{B}_1^2 \eta^{(0)}}{a_{33}^{(0)} d_0^{e(0)}} \left[\frac{1}{\xi_0} - \eta^{(0)} \frac{\text{ch } \eta^{(0)}(\xi_0 - \xi_*)}{\text{sh } \eta^{(0)} \xi_0} \right] - \\ & - 2 \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\cos y_k \xi_*}{(s_1 - s_2)} \left\{ \left(s_1 + \tilde{A}_1 + \frac{\tilde{B}_1}{s_1} \right) e^{s_1 \tau} - \left(s_2 + \tilde{A}_1 + \frac{\tilde{B}_1}{s_2} \right) e^{s_2 \tau} \right\}; \end{aligned} \quad (3.65a)$$

для $i = 1, \dots, N-1$

$$J_{*p}^{(i)}(\tau) = -a_{\lambda 1}^{e(i-1)} d_0^{e(i)} \int_0^{\tau} \int_0^{\xi_0} \frac{\partial G_1^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_*} c_1^{e(i-1)}(\xi', \tau') d\xi' d\tau', \quad (3.65b)$$

$$\frac{\partial G_1^{(i)}}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_*} = \theta(\tau - \tau') \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} y_n \frac{\cos(y_n \xi_*) \sin(y_n \xi')}{s_{1n} - s_{2n}} \left[(s_{1n} + \bar{A}_1^{(i)}) e^{s_{1n}(\tau - \tau')} - (s_{2n} + \bar{A}_1^{(i)}) e^{s_{2n}(\tau - \tau')} \right];$$

для $i = N$

$$J_{*p}^{(N)}(\tau) = -d_0^{e(N)} \int_0^{\tau} \int_0^{\xi_0} \frac{\partial G_1^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_*} \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 1}^{e(iN)} c_1^{e(i)}(\xi', \tau') d\xi' d\tau', \quad (3.65b)$$

$$\left. \frac{\partial G_1^{(N)}}{\partial \xi} \right|_{\xi=\xi_*} = \theta(\tau - \tau') \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} y_n \cos(y_n \xi_*) \frac{\sin(y_n \xi')}{s_{1n} - s_{2n}} \times \\ \times \left[(s_{1n} + \bar{A}_1^{(i)}) e^{s_{1n}(\tau - \tau')} - (s_{2n} + \bar{A}_1^{(i)}) e^{s_{2n}(\tau - \tau')} \right].$$

Запишемо також вирази для потоків розпадних речовин через нижню границю шару $\xi = \xi_0$ як частковий випадок формул (3.65):

для $i = 0$

$$\frac{\xi_0}{c_0 d_0^{e(0)}} J_{0p}^{(0)}(\tau) = 1 + \frac{\tilde{B}_1^2 \eta^{(0)}}{a_{33}^{(0)} d_0^{e(0)}} \left[\frac{1}{\xi_0} - \frac{\eta^{(0)}}{\text{sh } \eta^{(0)} \xi_0} \right] - \\ - 2 \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(s_1 - s_2)} \left\{ \left(s_1 + \tilde{A}_1 + \frac{\tilde{B}_1}{s_1} \right) e^{s_1 \tau} - \left(s_2 + \tilde{A}_1 + \frac{\tilde{B}_1}{s_2} \right) e^{s_2 \tau} \right\}; \quad (3.66a)$$

для $i = 1, \dots, N-1$ справджується формула (3.65б), в якій

$$\left. \frac{\partial G_1^{(i)}}{\partial \xi} \right|_{\xi=\xi_0} = \theta(\tau - \tau') \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n y_n \frac{\sin(y_n \xi')}{s_{1n} - s_{2n}} \left[(s_{1n} + \bar{A}_1^{(i)}) e^{s_{1n}(\tau - \tau')} - (s_{2n} + \bar{A}_1^{(i)}) e^{s_{2n}(\tau - \tau')} \right]; \quad (3.66б)$$

для $i = N$ справджується формула (3.65в), в якій

$$\left. \frac{\partial G_1^{(N)}}{\partial \xi} \right|_{\xi=\xi_0} = \theta(\tau - \tau') \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n y_n \frac{\sin(y_n \xi')}{s_{1n} - s_{2n}} \left[(s_{1n} + \bar{A}_1^{(i)}) e^{s_{1n}(\tau - \tau')} - (s_{2n} + \bar{A}_1^{(i)}) e^{s_{2n}(\tau - \tau')} \right]. \quad (3.66в)$$

Зазначимо, що асимптотична частина виразів для потоків (3.65), зокрема і (3.66), є нелінійною, причому структура цих доданків є подібною до потоків домішки, знайдених за моделлю дифузії в середовищі з ефективними характеристиками (3.26), (3.27) відповідно.

3.4.3. Кількість розпадних речовин, що пройшли через нижню границю шару за заданий час

Знайдемо кількість розпадної домішкової речовини, що за час τ_* пройшла через одиницю площі поверхні $\xi = \xi_0$ - нижню поверхню шару, за співвідношенням (3.28), підставляючи відповідні вирази для потоків маси (3.66). У результаті отримаємо для $i = 0$

$$\frac{\xi_0 Q_{0p}^{(0)}}{c_0 d_0^{e(0)}} = \left(1 + \frac{\tilde{B}_1^2 \eta^{(0)}}{a_{33}^{(0)} d_0^{e(0)}} \left[\frac{1}{\xi_0} - \frac{\eta^{(0)}}{\text{sh } \eta^{(0)} \xi_0} \right] \right) \tau_* +$$

$$+ 2 \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(s_1 - s_2)} \left\{ \left(s_1 + \tilde{A}_1 + \frac{\tilde{B}_1}{s_1} \right) (1 - e^{s_1 \tau_*}) - \left(s_2 + \tilde{A}_1 + \frac{\tilde{B}_1}{s_2} \right) (1 - e^{s_2 \tau_*}) \right\}; \quad (3.67a)$$

для $i = 1, \dots, N-1$

$$Q_{0p}^{(i)} = -a_{\lambda 1}^{e(i-1)} d_0^{e(i)} \int_0^{\tau_*} \left(\int_0^{\tau} \int_0^{\xi_0} \frac{\partial G_1^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_0} c_1^{e(i-1)}(\xi', \tau') d\xi' d\tau' \right) d\tau; \quad (3.67b)$$

для $i = N$

$$Q_{0e}^{(N)} = -d_0^{e(N)} \int_0^{\tau_*} \left(\int_0^{\tau} \int_0^{\xi_0} \frac{\partial G_1^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_0} \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 1}^{(iN)} c_1^{e(i)}(\xi', \tau') d\xi' d\tau' \right) d\tau. \quad (3.67b)$$

Зауважимо, що як і в попередніх випадках для $i = \overline{1, N}$ вирази для потоків і кількості речовини, які за певний проміжок часу пройшло через шар, отримані в інтегральній формі.

3.4.4. Схема модулів комплексу програм пакету GeterPas для моделі дифузії у тілі з пастками. Числовий аналіз

На основі формул (3.55), (3.56), (3.59), а також розв'язків задач (3.60) і (3.63) для концентрацій розпадних домішкових компонент, а також (3.65) і (3.66) для відповідних потоків маси і (3.67) для кількості речовин, що пройшли через нижню границю шару за певний проміжок часу, розроблений програмний комплекс для комп'ютерного моделювання процесів дифузії у тілі з пастками за каскадного розпаду мігруючих частинок. Даний комплекс увійшов до пакету програм GeterPas. Архітектуру комплексу модулів програм [59] для моделювання процесів дифузії за каскадного розпаду частинок для моделі ефективної дифузії у тілі з пастками наведено на рис. 3.19. На рис. 3.20 продемонстрована схема алгоритму модуля пакету для розрахунку концентрацій домішкових речовин за їх каскадного розпаду для всіх етапів $i = \overline{0, N}$. Модулі для обчислення дифузійних потоків та кількості речовини, що пройшла через шар, наведені на рис. 3.21 та рис. 3.22 відповідно. При цьому зауважимо, що програмні модулі для потоків і кількості речовини містять тільки по одному циклічному процесу.

Зазначимо, що алгоритми модуля програми для розрахунку концентрацій розпадних домішок співпадає для моделей невзаємодіючих потоків та ефективної дифузії у тілі з пастками. У той же час алгоритми модулів програм для обчислення

потоків маси мігруючих частинок і кількості речовини, що пройшла через нижню поверхню шару за певний проміжок часу для моделі ефективної дифузії у середовищі з пастками співпадають з відповідними алгоритмами для моделі дифузії в ефективному середовищі.

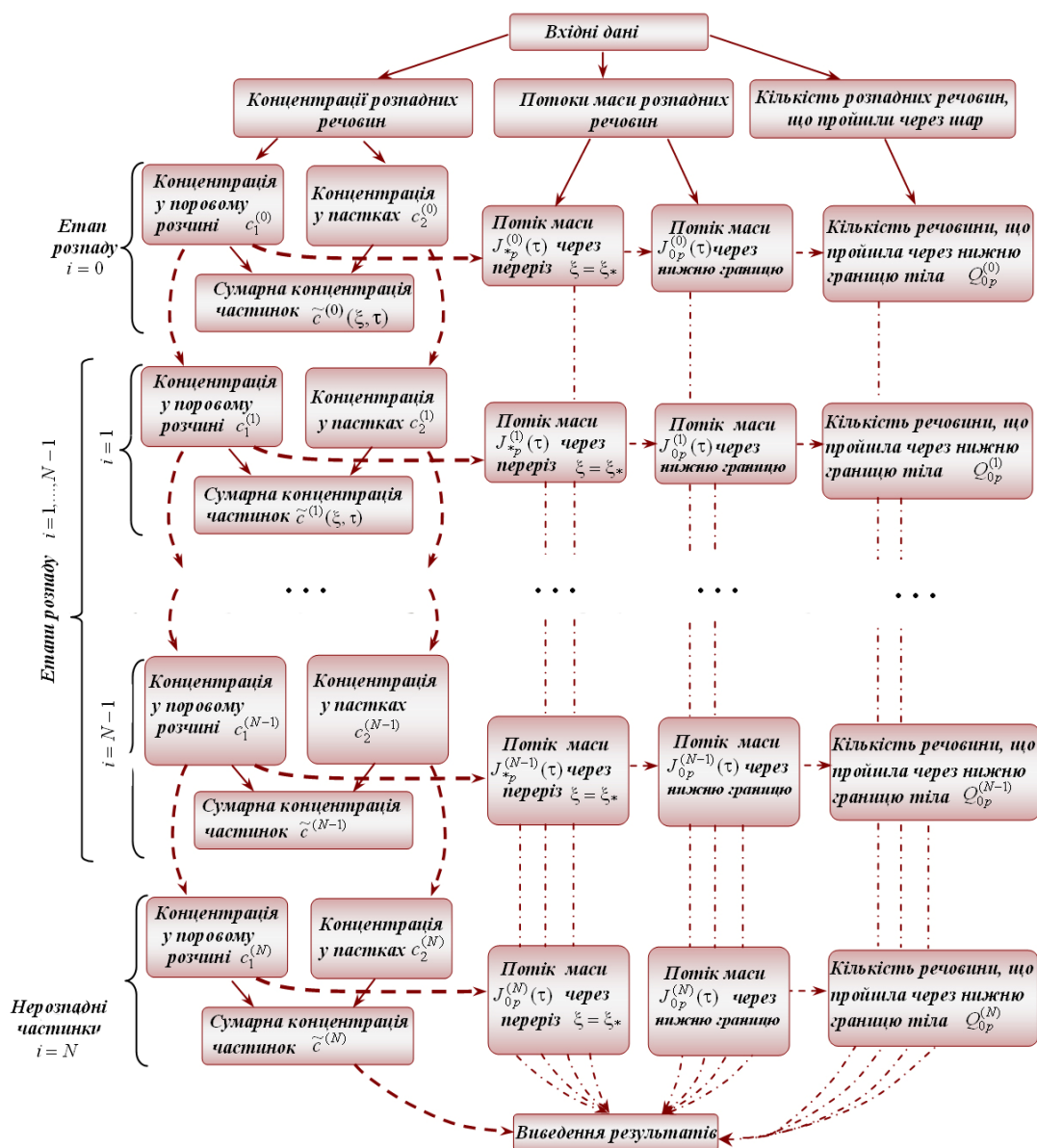


Рис. 3.19. Архітектура комплексу модулів програм для моделювання процесів дифузії за каскадного розпаду частинок для моделі ефективної дифузії у тілі з пастками

На рис. 3.23 показано розподіли концентрації домішок на етапі $i = 0$ у поровому просторі, де дифундує домішкова речовина (криві а), у пастках (криві б) та сумарна концентрація частинок для $a_{31}^{e(0)} = 5$ (рис. а) та $a_{31}^{e(0)} = 10$ (рис. б) у різні моменти безрозмірного часу $\tau = 0.01; 2; 20$ (криві 1-3 відповідно).

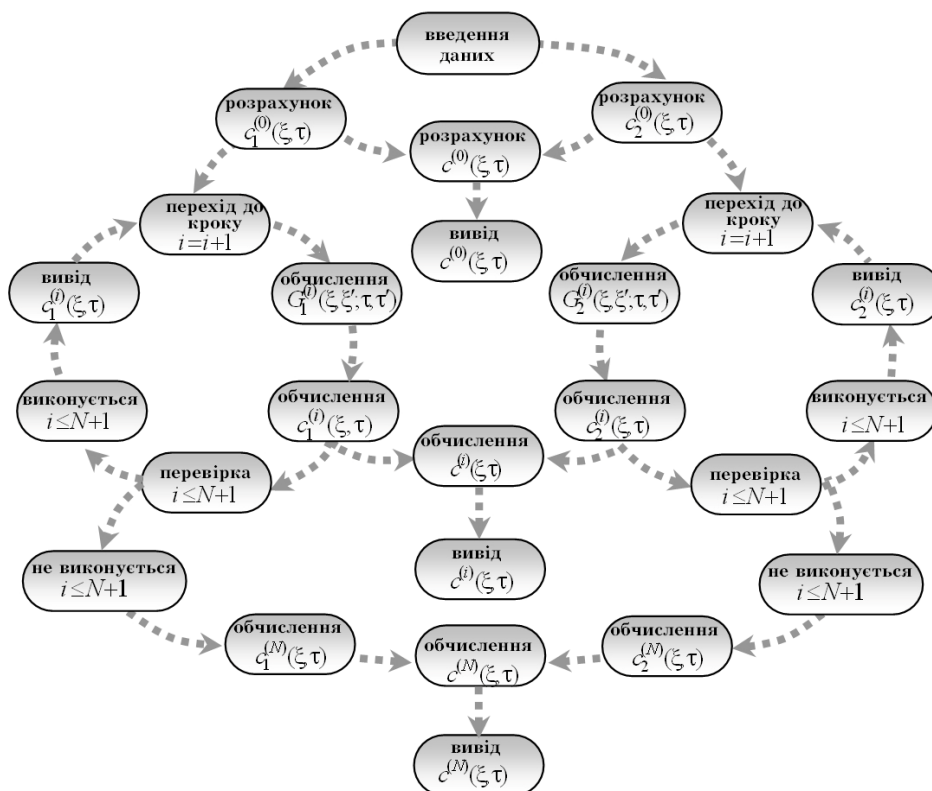


Рис.3.20. Схема алгоритму модуля пакету для розрахунку концентрацій домішкових речовин за їх каскадного розпаду у тілі з пастками

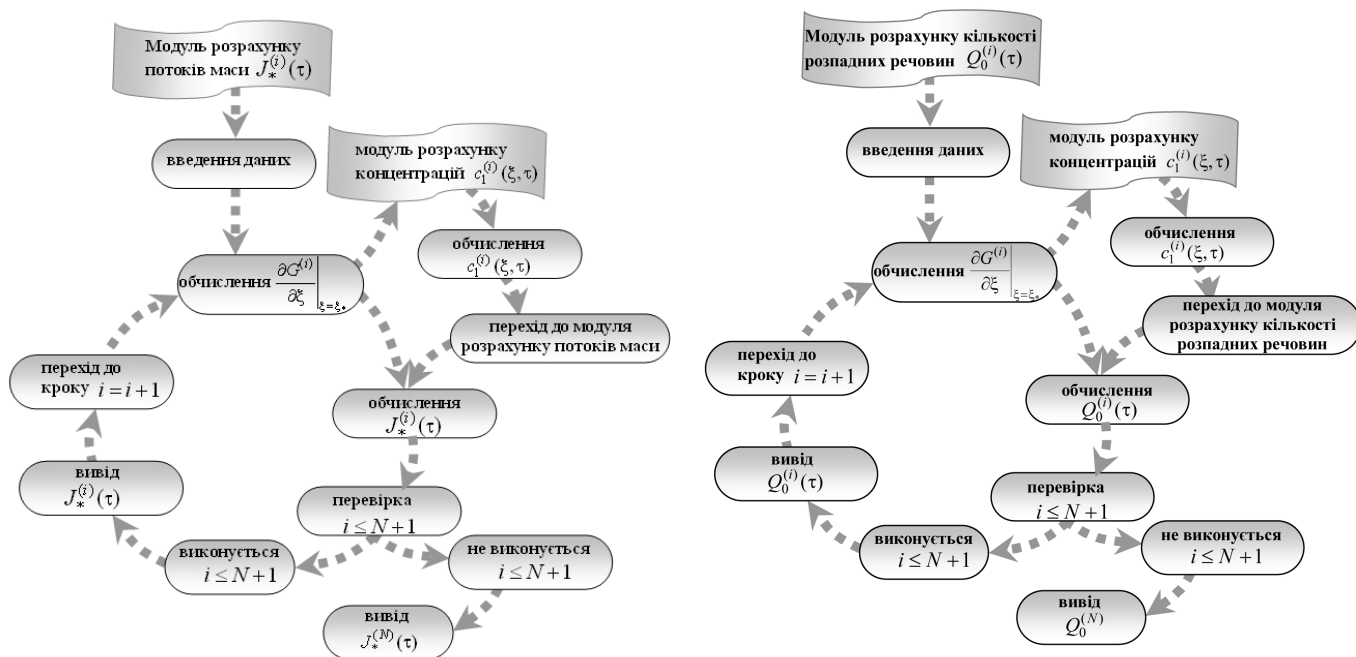


Рис.3.21. Схема алгоритму модуля пакету для розрахунку дифузійного потоку домішкових речовин за каскадного розпаду частинок для моделі ефективної дифузії у тілі з пастками

Рис.3.22. Схема алгоритму модуля пакету для розрахунку кількості розпадних речовин, що пройшли через нижню границю шару за заданий час для моделі ефективної дифузії у тілі з пастками

На рис. 3.24. показано залежність сумарної концентрації, утвореної після розпаду домішки $\mathbf{K}^{(0)}$ (тобто на етапі $i=1$), від різних значень коефіцієнта інтенсивності сорбції $a_{31}^{e(1)} = 2; 3; 4$ (криві 1-3) для $d_0^{(1)} = 0.05$ (криві а) та $d_0^{(1)} = 20$ (криві б) при $a_2^{(1)} = 0.8$ для $a_{\lambda 1}^{(1)} = 0.1$ $a_{\lambda 2}^{(1)} = 0.9$ при коефіцієнті інтенсивності сорбції $a_3^{(0)} = 5$ (рис. а) та $a_3^{(0)} = 10$ (рис. б).

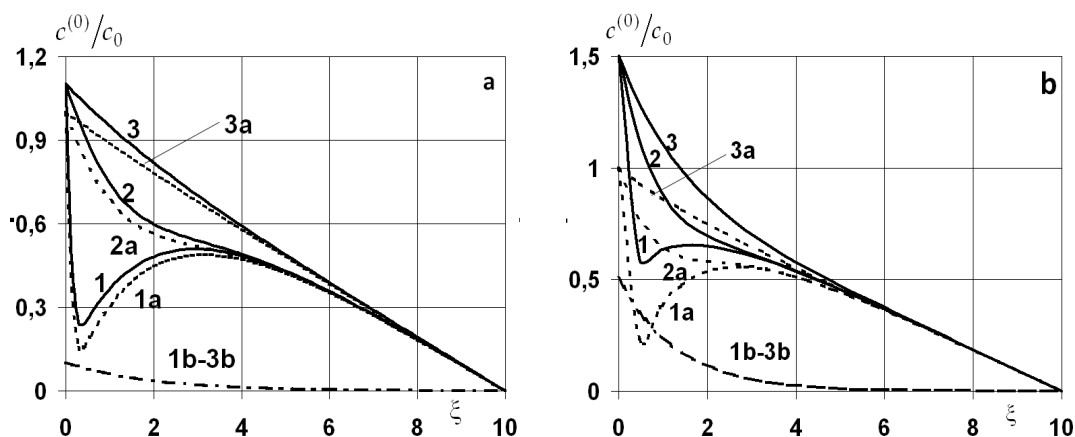


Рис.3.23. Розподіли концентрацій $c_1^{(0)}$, $c_2^{(0)}$ та $\tilde{c}^{(0)}$ в різні моменти часу

На рис. 3.25 показано розподіли потоків маси $\xi_0 J_{0p}^{(0)}(\tau)/c_0 d_0^{(0)}$ (рис. а) та кількість розпадної домішкової речовини $\xi_0 Q_{0p}^{(0)}(\tau)/c_0 d_0^{(0)}$, що за час τ_* пройшла через одиницю площі поверхні $\xi = \xi_0$ (рис. б) на 0-му етапі розпаду; на рис. 3.26 - дифузійних потоків $\xi_0 J_{0p}^{(1)}(\tau)/c_0 d_0^{(0)}$ на 1-му етапі розпаду. На рис. 3.25а криві 1-6 відповідають потокам розпадної домішки через перерізи тіла $\xi_* = 0.5, 1, 1.5, 2, 4, 6$. На рис. 3.25б криві 1-4 для функції $\xi_0 Q_{0p}^{(0)}(\tau)/c_0 d_0^{(0)}$ наведені при різних значеннях коефіцієнта інтенсивності сорбції $a_{31}^{e(0)} = 1, 5, 10, 20$.

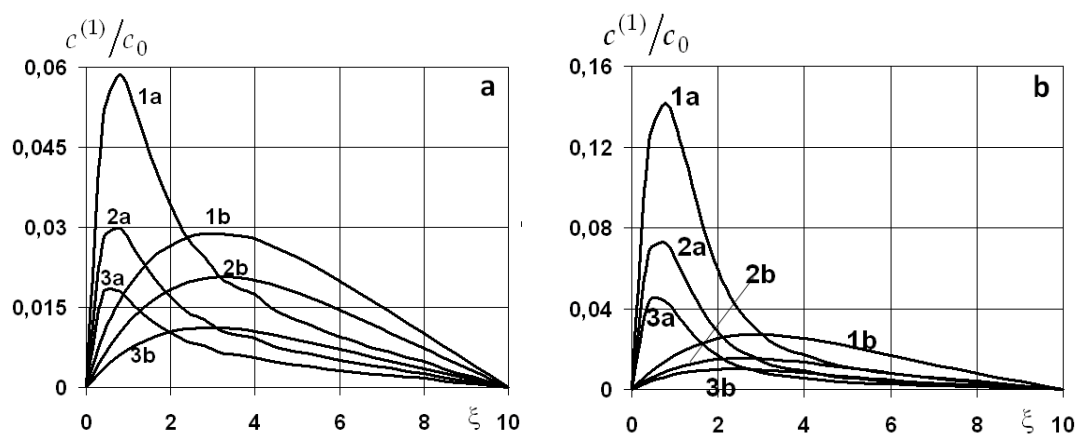


Рис.3.24. Розподіли концентрації домішок $\tilde{c}^{(1)}$ при різних значеннях $a_{31}^{e(1)}$

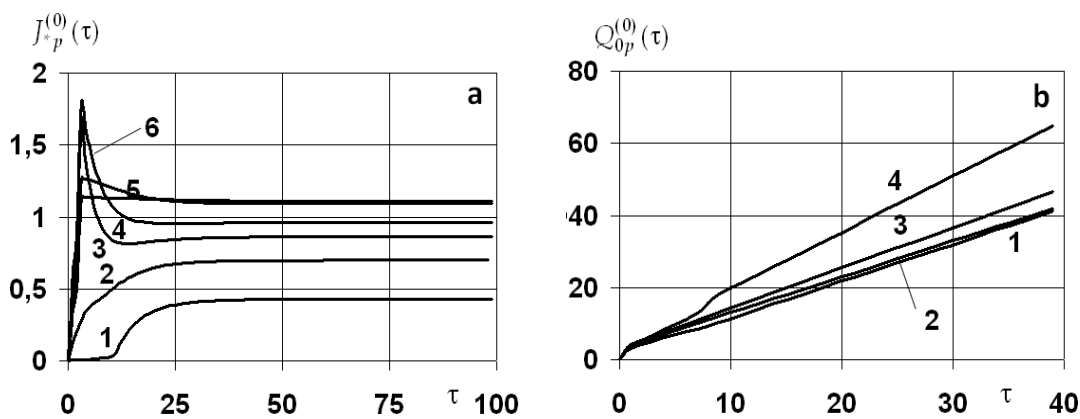


Рис.3.25. Розподіли потоків маси на 0-му етапі розпаду через переріз тіла $\xi = \xi_*$ (рис.а) та кількість розпадної домішкової речовини, що за час τ_* пройшла через одиницю площі поверхні $\xi = \xi_0$ (рис.б)

Рис. 3.26а, б ілюструють поведінку функції $\xi_0 J_{0p}^{(1)}(\tau) / c_0 d_0^{(0)}$ на 1-му етапі розпаду залежно від інтенсивності проходження домішки через перерізи $\xi_* = 6, 7, 8, 9$ (криві 1-4, відповідно) при значеннях коефіцієнта інтенсивності сорбції $a_{31}^{e(0)} = 5$ (рис. а) та $a_{31}^{e(0)} = 20$ (рис. б).

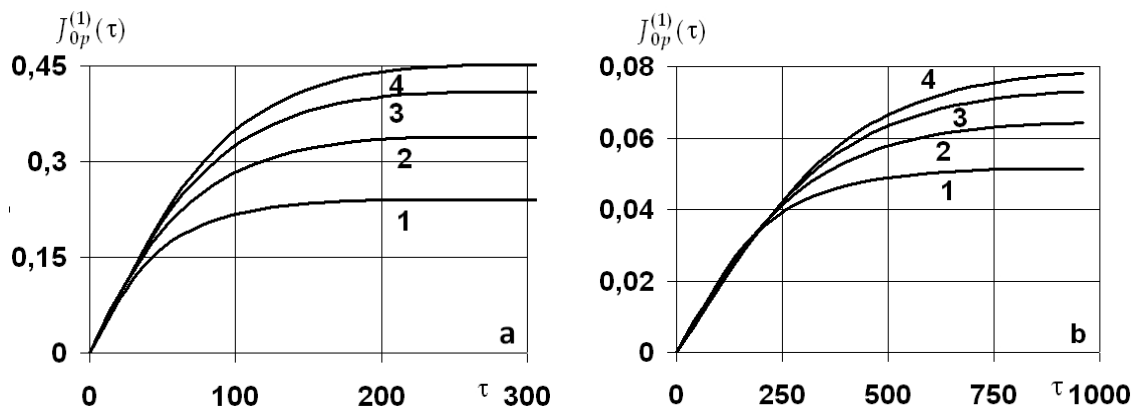


Рис.3.26. Розподіли потоків маси на 1-му етапі розпаду через переріз тіла $\xi = \xi_*$ при значеннях коефіцієнта інтенсивності сорбції $a_{31}^{e(0)} = 5$ (рис.а) та 20 (рис.б)

Зазначимо, що для етапу $i = 0$ характерне суттєве приповерхнєве зменшення сумарної концентрації $\tilde{c}^{(0)}$ для малих часів (криві 1, рис. 3.23). З часом сумарна концентрація у приповерхневій області зростає (криві 2, рис. 3.23) і виходить на усталений режим (криві 3, рис. 3.23), набуваючи монотонно спадного характеру.

Найбільше накопичення частинок у пастках спостерігається в околі границі шару $\xi = 0$ (криві 2б, рис. 3.23а,б). Причому функція $c_2^{(0)}$ є монотонно спадною, на її значення суттєво впливає коефіцієнт інтенсивності сорбції $a_{31}^{e(0)}$, проте зміна концентрації в часі є незначною, оскільки задіюється механізм розпаду речовини.

Поведінка функції сумарної концентрації домішкової компоненти на етапі розпаду $i=1$ суттєво залежить від значення відносного коефіцієнта дифузії речовини $\mathbf{K}^{(1)}$ $d_0^{(1)} = D_1 / D_0^{(0)}$ (рис. 3.24а). При цьому для великих $d_0^{(1)}$ характерно повільне зростання концентрації $\tilde{c}^{(1)}$ від поверхні з виходом на максимальне значення в середині тіла (криві б, рис. 3.24а). У той же час для $D_1 < D_0$ спостерігається значне накопичення домішкової речовини $\mathbf{K}^{(1)}$ в околі поверхні тіла $\xi = 0$, де діє максимальне джерело маси для речовини $\mathbf{K}^{(0)}$ (криві а, рис. 3.23, 3.24), що спричинене поведінкою функції концентрації розпадних частинок, які мігрують у поровому просторі. Далі відбувається зростання функцій $c_1^{(1)}$ і $\tilde{c}^{(1)}$, які досягають локального максимуму на проміжку $\xi \in [2; 4]$.

Зазначимо, що для етапу $i=0$ характерне суттєве зростання потоку розпадної речовини (крива 4-6, рис. 3.25а) для малих часів $\tau \in [5; 10]$, причому в середині тіла спостерігається різке зменшення функції $\xi_0 J_{0p}^{(0)}(\tau) / c_0 d_0^{e(0)}$ (криві 3-4, рис. 3.25а). Час виходу на усталений режим потоку маси для різних перерізів є приблизно однаковим, хоча значення функції $\xi_0 J_{0p}^{(0)}(\tau) / c_0 d_0^{e(0)}$ в стаціонарному режимі різняться від 0.42 для $\xi_* = 2$ до 1.11 для $\xi_* = 6$ (рис. 3.25а). Кількість розпадної домішкової речовини, що за час $\tau_* = 30$ пройшла через нижню поверхню шару $\xi = \xi_0$, при значеннях коефіцієнта інтенсивності сорбції на першому етапі розпаду $a_{31}^{e(0)} = 1$ в порівнянні з $a_{31}^{e(0)} = 20$ (криві 1 та 5, рис. 3.25b) зростає на 65 %.

Зазначимо, що поведінка функції дифузійного потоку речовини $\mathbf{K}^{(1)}$ є монотонно зростаючою в часі для всіх перерізів $\xi = \xi_*$ і фізично обґрунтованих параметрів задачі. При цьому чим ближче до нижньої границі тим більшого значення набуває потік маси на 1-му етапі розпаду і час виходу на усталений режим є пропорційний коефіцієнту інтенсивності сорбції (рис. 3.26а і 3.26б). Тобто, якщо значення коефіцієнта інтенсивності сорбції збільшується в чотири рази, то і час виходу потоку маси на 1-му етапі розпаду на усталений режим збільшується в стільки ж разів. Причому значення функції потоку у стаціонарному режимі тим більші, чим далі від джерела маси знаходиться переріз тіла, через який проходить потік, що обчислюється.

3.5. Висновки до Розділу 3

На основі доведених теорем 2.8 та 2.9 для часткових варіантів математичної моделі гетеродифузного перенесення домішок, що супроводжується каскадним розпадом частинок внаслідок радіоактивного розпаду або хімічних реакцій, сформульовано новий каскадний тип крайових задач математичної фізики – взаємозв'язані рівняння або системи рівнянь, коли концентрація частинок на певному кроці розпаду (одна з шуканих функцій) є джерелом маси розпадної речовини на наступному кроці (інша з шуканих функцій).

Запропоновано новий метод розв'язування крайових задач масоперенесення каскадного типу, що здійснюється ітераційною процедурою з використанням інтегральних перетворень та функцій Гріна на кожному етапі каскаду. Отримано розв'язки крайових задач в рамках часткових модельних варіантів дифузії в середовищі з ефективними характеристиками, невзаємодіючих потоків і ефективної дифузії в тілі з пастками. Одержання точних аналітичних розв'язків на перших етапах розпаду і розв'язків в інтегральному вигляді на наступних етапах каскаду дало можливість отримати розрахункові формули і дослідити сумарні дифузійні потоки та кількість речовини, що за певний проміжок часу пройшла через багатокомпонентний шар.

Спроектовано схеми модулів комплексів програм пакету GeterPas для моделей дифузії у тілі з пастками, невзаємодіючих потоків та дифузії з ефективними характеристиками.

Проведено числові експерименти щодо визначення концентрацій домішок у середовищі з ефективними характеристиками та встановлено, що стаціонарний розподіл концентрації на нульовому кроці розпаду суттєво відрізняється від лінійного, що характерно для нерозпадної мігруючої речовини. У випадку розподілів концентрації на першому етапі спостерігається приповерхнєве зростання функції, максимум якої з часом зростає і зсувається вглиб тіла.

Для моделі не взаємодіючих потоків за результатами числового аналізу встановлено, що функція сумарної концентрації на нульовому кроці розпаду є монотонно спадною для всіх фізично обґрунтованих параметрів задачі. При цьому чим більше розпадної речовини з поверхні потрапило на швидкий шлях дифузії, тим більшими є значення сумарної концентрації в тілі і тим швидше вона виходить на

усталений режим. Показано, що для сумарної концентрації домішкової речовини на першому етапі, що утворилась внаслідок розпаду речовини на нульовому етапі каскаду, характерне приповерхневе зростання в околі границі шару, де діє джерело маси речовини на нульовому етапі. Причому з часом максимум сумарної концентрації на першому етапі зростає на порядки і зсувається вглиб тіла. Встановлено, що збільшення частини речовини на нульовому етапі, яка з поверхні потрапляє на швидкий шлях міграції, приводить до зростання в рази значень функції концентрації на першому етапі у приповерхневій області.

Проведено чисельні дослідження розв'язків крайових задач масоперенесення каскадного типу та встановлено основні закономірності для концентрації і потоків маси на нульовому та першому етапах розпаду речовини, що мігрує у багатокомпонентному шарі. Так показано, що для моделі дифузії у тілі з пастками на нульовому етапі характерне суттєве приповерхневе зменшення сумарної концентрації для малих часів, і з часом вона у приповерхневій області зростає та виходить на усталений режим, набуваючи монотонно спадного характеру.

Поведінка функції сумарної концентрації домішкової компоненти на першому етапі розпаду суттєво залежить від значення відносного коефіцієнта дифузії. При цьому для великих значень коефіцієнта дифузії на цьому етапі характерно повільне зростання сумарної концентрації від поверхні з виходом на максимальне значення в середині тіла. Для коефіцієнтів дифузії на першому етапі менших ніж на нульовому спостерігається значне накопичення домішкової речовини в околі поверхні тіла, де діє максимальне джерело маси для речовини на нульовому етапі, що спричинене поведінкою функції концентрації розпадних частинок, які мігрують у поровому просторі.

РОЗДІЛ 4

МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ ПРОЦЕСІВ ГЕТЕРОДИFUZІЇ РОЗПАДНИХ РЕЧОВИН ДВОМА ШЛЯХАМИ

В рамках континуально-термодинамічного підходу, який використовується для побудови математичних моделей гетеродифузії домішки у середовищі з пастками за каскадного розпаду частинок у даній роботі, особливості процесів перенесення, сорбції-десорбції, розпаду, тощо, дозволяють обґрунтовано (з точки зору термодинаміки нерівноважних процесів) вводити у розгляд спрощену математичну модель гетеродифузії двома шляхами [94, 151, 257], яка отримана за умови локальної термодинамічної рівноваги між станами перебування домішкових частинок на внутрішній поверхні скелету і у пастках. При цьому отриманий частковий модельний варіант має своє окреме практичне значення. Так, модель гетеродифузії домішки двома шляхами у середовищах, в яких мігруючі частинки локально знаходяться в різних фізичних станах, суттєво відрізняючись своїми рухливостями [57, 63, 214], отримується для опису процесів перенесення у полікристалічних тілах, дрібнозернистих систем різної фізичної природи, пористих насичених рідиною середовищ тощо.

У розділі на основі Теорема 2.8 досліджуються процеси масоперенесення домішкових речовин двома шляхами з урахуванням взаємних переходів частинок між станами та каскадного розпаду домішкових компонент [154]. Розроблений у Розділі 3 аналітико-ітераційний метод побудови розв'язків крайових задач каскадного типу узагальнений для розв'язання взаємозв'язаних систем диференціальних рівнянь гетеродифузії [76]. Знайдено та кількісно досліджено концентрації та потоки маси мігруючих компонент, а також визначено кількість відповідних речовин, що за певний проміжок часу пройшли через одиницю площі деякої поверхні, наприклад, через нижню границю шару.

4.1. Крайова задача каскадного типу для знаходження концентрацій мігруючих компонент

4.1.1. Постановка крайових задач гетеродифузії каскадного типу

Розглянемо тепер випадок реалізації в термодинамічній системі умови локальної термодинамічної рівноваги між станами мігруючих частинок в адсорбованих шарах

води та в об'ємі скелету [123]. Тоді виконуються умови Теорема 2.8, і процес масо-перенесення за каскадного розпаду частинок описується в загальному випадку системами рівнянь (2.81), а в безрозмірних змінних (3.1) – рівняннями (3.3). Розглянемо масо перенесення розпадних частинок у шарі (рис.3.1) за крайових умов I-го роду [154]. Тоді для одновимірного за просторовими координатами випадку системи рівнянь гетеродифузії (3.3) зведуться до такого вигляду:

для $i = 0$

$$\begin{aligned}\frac{\partial c_1^{(0)}}{\partial \tau} &= \frac{\partial^2 c_1^{(0)}}{\partial \xi^2} + d_1^{e(0)} \frac{\partial^2 c_2^{e(0)}}{\partial \xi^2} - a_{11}^{(0)} c_1^{(0)} + a_{12}^{e(0)} c_2^{e(0)}, \\ \frac{\partial c_2^{e(0)}}{\partial \tau} &= d_2^{(0)} \frac{\partial^2 c_1^{(0)}}{\partial \xi^2} + d^{e(0)} \frac{\partial^2 c_2^{e(0)}}{\partial \xi^2} + a_{21}^{(0)} c_1^{(0)} - a_{22}^{e(0)} c_2^{e(0)};\end{aligned}\quad (4.1a)$$

для $i = \overline{1, N-1}$

$$\begin{aligned}\frac{\partial c_1^{(i)}}{\partial \tau} &= d_0^{(i)} \frac{\partial^2 c_1^{(i)}}{\partial \xi^2} + d_1^{e(i)} \frac{\partial^2 c_2^{e(i)}}{\partial \xi^2} - a_{11}^{(i)} c_1^{(i)} + a_{12}^{e(i)} c_2^{e(i)} + a_{\lambda 1}^{(i-1)} c_1^{(i-1)}, \\ \frac{\partial c_2^{e(i)}}{\partial \tau} &= d_2^{(i)} \frac{\partial^2 c_1^{(i)}}{\partial \xi^2} + d^{e(i)} \frac{\partial^2 c_2^{e(i)}}{\partial \xi^2} + a_{21}^{(i)} c_1^{(i)} - a_{22}^{e(i)} c_2^{e(i)} + a_{\lambda 2}^{e(i-1)} c_2^{e(i-1)};\end{aligned}\quad (4.1b)$$

для $i = N$

$$\begin{aligned}\frac{\partial c_1^{(N)}}{\partial \tau} &= d_0^{(N)} \frac{\partial^2 c_1^{(N)}}{\partial \xi^2} + d_1^{e(N)} \frac{\partial^2 c_2^{e(N)}}{\partial \xi^2} - a_{11}^{(N)} c_1^{(N)} + a_{12}^{e(N)} c_2^{e(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 1}^{(iN)} c_1^{(i)}, \\ \frac{\partial c_2^{e(N)}}{\partial \tau} &= d_2^{(N)} \frac{\partial^2 c_1^{(N)}}{\partial \xi^2} + d^{e(N)} \frac{\partial^2 c_2^{e(N)}}{\partial \xi^2} + a_{21}^{(N)} c_1^{(N)} - \\ &\quad - a_{22}^{e(N)} c_2^{e(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 2}^{e(iN)} c_2^{e(i)}.\end{aligned}\quad (4.1b)$$

Прийmemo, що у початковий момент часу домішкові речовини були відсутні в тілі, тобто

$$c_1^{(i)}(\xi, \tau) \Big|_{\tau=0} = c_2^{e(i)}(\xi, \tau) \Big|_{\tau=0} = 0, \quad i = \overline{0, N}, \quad (4.2)$$

а для часів $\tau > 0$ на поверхні шару $\xi = 0$ підтримується стале значення сумарної концентрації c_0 , яке між різними шляхами міграції для $i = 0$ розподіляється так

$$c_1^{(0)}(\xi, \tau) \Big|_{\xi=0} = \alpha c_0, \quad c_2^{e(0)}(\xi, \tau) \Big|_{\xi=0} = (1 - \alpha) c_0, \quad (4.3a)$$

де α ($0 \leq \alpha \leq 1$) – параметр, який визначає частку домішкової речовини, що з поверхні тіла потрапила на швидкий шлях міграції (у водний поровий розчин).

Для $i = 1, \dots, N$ приймаємо нульові граничні умови:

$$c_1^{(i)}(\xi, \tau) \Big|_{\xi=0} = 0, \quad c_2^{e(i)}(\xi, \tau) \Big|_{\xi=0} = 0, \quad i = \overline{1, N}. \quad (4.3б)$$

Вважаємо, що на «нижній» границі шару $\xi = \xi_0$ концентрація частинок на всіх етапах розпаду дорівнює нулю, тобто

$$c_1^{(i)}(\xi, \tau) \Big|_{\xi=\xi_0} = c_2^{e(i)}(\xi, \tau) \Big|_{\xi=\xi_0} = 0, \quad i = \overline{0, N}. \quad (4.3в)$$

Зазначимо, що нульові крайові умови для $i = \overline{1, N}$ означають, що джерелом маси на i -му кроці розпаду є тільки ті частинки, що утворились внаслідок розпаду на кроці $i-1$.

Зауважимо також, що коефіцієнт поверхневого розподілу домішкових частинок між станами α можна визначити, наприклад, з умови термодинамічної рівноваги щодо процесу переходу частинок між різними шляхами міграції [80], тобто з умови (2.87), яка у безрозмірній формі прийме вигляд

$$a_{21}^{(0)} c_1^{(0)}(\xi, \tau) - a_{12}^{(0)} c_2^{e(0)}(\xi, \tau) = 0.$$

Тоді, враховуючи означення сумарної концентрації $c^{(0)} = c_1^{(0)} + c_2^{e(0)}$, маємо значення величини α , що відповідає рівноважному стану

$$\alpha_{eq} = \frac{a_{12}^{(0)}}{a_{12}^{(0)} + a_{21}^{(0)}}.$$

Як і для розглянутих у попередньому розділі часткових моделей, крайові задачі (4.1)-(4.3) можуть використовуватись не тільки як частковий випадок загальної моделі гетеродифузії з пастками за умов локальної термодинамічної рівноваги щодо процесу масообміну між другим та третім станами розпадних домішкових частинок, наприклад, для спрощення постановки задачі та відповідних обчислень, але й розглядатись як окрема задача гетеродифузії двома шляхами за каскадного розпаду мігруючої речовини. У цьому випадку схема каскадного розпаду частинок та процеси сорбції-десорбції співпадає зі схемою для моделі ефективної дифузії у середовищі з пастками (рис. 3.18). Тоді математична модель гетеродифузії описує процес масоперенесення двома шляхами із суттєво різними коефіцієнтами дифузії, який супроводжується масообміном частинками між ними (сорбція-

десорбція). Такий процес масоперенесення характерний для дрібнодисперсних і полікристалічних тіл, або для дифузії домішок у металах [72].

4.1.2. Побудова розв'язків крайових задач гетеродифузії каскадного типу

Розв'язок крайової задачі (4.1а), (4.2), (4.3а), (4.3в) для кроку $i = 0$ розпаду речовини знайдемо з допомогою інтегральних перетворень у введених тут позначеннях аналогічно до простіших випадків, отриманих у працях [72, 80].

Для цього перейдемо до нових функцій, які задовольняють нульовим граничним умовам:

$$\begin{aligned} f_1(\tau, \xi) &= c_1^{(0)}(\tau, \xi) - \alpha c_0 \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0}\right); \\ f_2(\tau, \xi) &= c_2^{(0)}(\tau, \xi) - (1 - \alpha)c_0 \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0}\right) \end{aligned} \quad (4.4)$$

і підставимо їх у крайову задачу (4.1а), (4.2), (4.3а), (4.3в). Тоді отримаємо наступну задачу на функції $f_l(\tau, \xi)$, $l = 1, 2$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_1(\tau, \xi)}{\partial \tau} &= \frac{\partial^2 f_1(\tau, \xi)}{\partial \xi^2} + d_1^{(0)} \frac{\partial^2 f_2(\tau, \xi)}{\partial \xi^2} - a_{11}^{(0)} f_1(\tau, \xi) + a_{12}^{(0)} f_2(\tau, \xi) - \alpha_1 c_0 \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0}\right), \\ \frac{\partial f_2(\tau, \xi)}{\partial \tau} &= d_2^{(0)} \frac{\partial^2 f_1(\tau, \xi)}{\partial \xi^2} + d^{(0)} \frac{\partial^2 f_2(\tau, \xi)}{\partial \xi^2} + a_{21}^{(0)} f_1(\tau, \xi) - a_{22}^{(0)} f_2(\tau, \xi) + \alpha_2 c_0 \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0}\right); \end{aligned} \quad (4.5)$$

$$\begin{aligned} f_1(\tau, \xi)|_{\tau=0} &= -\alpha c_0 \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0}\right), \quad f_2(\tau, \xi)|_{\tau=0} = -(1 - \alpha)c_0 \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0}\right); \\ f_1(\tau, \xi)|_{\xi=0} &= f_2(\tau, \xi)|_{\xi=0} = f_1(\tau, \xi)|_{\xi=\xi_0} = f_2(\tau, \xi)|_{\xi=\xi_0}, \end{aligned} \quad (4.6)$$

де $\alpha_1 = a_{12}^{(0)}(1 - \alpha) - a_{11}^{(0)}\alpha$, $\alpha_2 = a_{22}^{(0)}(1 - \alpha) - a_{21}^{(0)}\alpha$.

Розв'язок одержаної задачі (4.5)-(4.6) шукаємо у вигляді розкладів у тригонометричні ряди:

$$f_i(\tau, \xi) = \sum_{n=1}^{\infty} f_{in}(\tau, n) \sin y_n \xi, \quad i = 1, 2. \quad (4.7)$$

Тут, як і у попередніх випадках, $y_n = n\pi/\xi_0$.

Врахуємо відомий розклад [72] у ряд за $\sin y_n \xi$

$$1 - \frac{\xi}{\xi_0} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2}{n\pi} \sin(y_n \xi). \quad (4.8)$$

Підставляємо функції (4.7) в задачу (4.5)-(4.6), і з використанням співвідношення (4.8) одержимо систему звичайних диференціальних рівнянь

$$\begin{aligned}\frac{\partial f_{1n}(\tau, n)}{\partial \tau} &= -(y_n^2 + a_{11}^{(0)})f_{1n}(\tau, n) - (d_1^{(0)}y_n^2 - a_{12}^{(0)})f_{2n}(\tau, n) - \alpha_1 \frac{2c_0}{n\pi}; \\ \frac{\partial f_{2n}(\tau, n)}{\partial \tau} &= -(d_2^{(0)}y_n^2 - a_{21}^{(0)})f_{1n}(\tau, n) - (d_2^{(0)}y_n^2 + a_{22}^{(0)})f_{2n}(\tau, n) + \alpha_2 \frac{2c_0}{n\pi}\end{aligned}\quad (4.9)$$

з початковими умовами

$$f_1(\tau, n)|_{\tau=0} = -\alpha \frac{2c_0}{n\pi}; \quad f_2(\tau, \xi)|_{\tau=0} = -(1-\alpha) \frac{2c_0}{n\pi}. \quad (4.10)$$

Застосуємо до задачі (4.9), (4.10) перетворення Лапласа за часом ($\tau \rightarrow s$; $f_{in}(\tau, n) \rightarrow \bar{f}_{in}(s, n)$). Тоді в зображеннях отримаємо систему алгебраїчних рівнянь, а саме:

$$\begin{aligned}(s + y_n^2 + a_{11}^{(0)})\bar{f}_{1n}(s, n) + (d_1^{(0)}y_n^2 - a_{12}^{(0)})\bar{f}_{2n}(s, n) &= -\frac{2c_0}{n\pi} \left(\alpha + \frac{\alpha_1}{s} \right), \\ (d_2^{(0)}y_n^2 - a_{21}^{(0)})\bar{f}_{1n}(s, n) + (s + d_2^{(0)}y_n^2 + a_{22}^{(0)})\bar{f}_{2n}(s, n) &= -\frac{2c_0}{n\pi} \left((1-\alpha) - \frac{\alpha_2}{s} \right).\end{aligned}\quad (4.11)$$

Шукаємо головний визначник системи рівнянь (4.11)

$$\Delta = \begin{vmatrix} s + y_n^2 + a_{11}^{(0)} & d_1^{(0)}y_n^2 - a_{12}^{(0)} \\ d_2^{(0)}y_n^2 - a_{21}^{(0)} & s + d_2^{(0)}y_n^2 + a_{22}^{(0)} \end{vmatrix} = s^2 + \eta_1 s + \eta_2 = (s - s_1)(s - s_2),$$

де $\eta_1 = (d^{(0)} + 1)y_n^2 + a_{22}^{(0)} + a_{11}^{(0)}$; $\eta_2 = (d^{(0)} - d_1^{(0)}d_2^{(0)})y_n^4 + (a_{22}^{(0)} + a_{11}^{(0)}d_2^{(0)} + d_1^{(0)}a_{21}^{(0)} + d_2^{(0)}a_{12}^{(0)})y_n^2 + a_{11}^{(0)}a_{22}^{(0)} - a_{12}^{(0)}a_{21}^{(0)}$; $s_{1,2}$ - корені квадратного рівняння $s^2 + \eta_1 s + \eta_2 = 0$, тобто

$$s_{1,2} = -\frac{\eta_1}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\eta_1}{2}\right)^2 - \eta_2}.$$

Знайдемо допоміжні визначники

$$\begin{aligned}\Delta_1 &= \frac{2c_0}{n\pi} \begin{vmatrix} -\left(\alpha + \frac{\alpha_1}{s}\right) & d_1^{(0)}y_n^2 - a_{12}^{(0)} \\ -(1-\alpha) + \frac{\alpha_2}{s} & s + d_2^{(0)}y_n^2 + a_{22}^{(0)} \end{vmatrix} = -\frac{2c_0}{n\pi} \left(\alpha s + p_1 + \frac{p_2}{s} \right); \\ \Delta_2 &= \frac{2c_0}{n\pi} \begin{vmatrix} s + y_n^2 + a_{11}^{(0)} & -\left(\alpha + \frac{\alpha_1}{s}\right) \\ d_2^{(0)}y_n^2 - a_{21}^{(0)} & -(1-\alpha) + \frac{\alpha_2}{s} \end{vmatrix} = -\frac{2c_0}{n\pi} \left((1-\alpha)s + p_1' + \frac{p_2'}{s} \right);\end{aligned}$$

де $p_1 = (\alpha d^{(0)} - d_1^{(0)}(1-\alpha))y_n^2 + \alpha a_{22}^{(0)} + \alpha_1 + (1-\alpha)a_{12}^{(0)}$, $p_2 = (d_1^{(0)}\alpha_2 + d^{(0)}\alpha_1)y_n^2 + \alpha_1 a_{22}^{(0)} - \alpha_2 a_{12}^{(0)}$, $p'_1 = (1-\alpha - \alpha d_2^{(0)})y_n^2 + a(1-\alpha)_{11}^{(0)} + \alpha a_{21}^{(0)} + \alpha_2$; $p'_2 = (\alpha_2 + \alpha_1 d_2^{(0)})y_n^2 + \alpha_2 a_{11}^{(0)} - \alpha_1 a_{21}^{(0)}$.

Таким чином розв'язок системи (4.5) знаходимо у вигляді

$$\bar{f}_{1n}(s, n) = \frac{\Delta_1}{\Delta} = -\frac{2c_0}{n\pi} \frac{\alpha s + p_1 + p_2/s}{(s-s_1)(s-s_2)},$$

$$\bar{f}_{2n}(s, n) = \frac{\Delta_2}{\Delta} = -\frac{2c_0}{n\pi} \frac{(1-\alpha)s + p'_1 + p'_2/s}{(s-s_1)(s-s_2)}.$$

До отриманих виразів застосуємо обернене перетворення Лапласа:

$$f_{1n}(\tau, n) = -\frac{2c_0}{n\pi} \left\{ \frac{1}{(s_1-s_2)} \left[\left(\alpha s_1 + p_1 + \frac{p_2}{s_1} \right) e^{s_1\tau} - \left(\alpha s_2 + p_1 + \frac{p_2}{s_2} \right) e^{s_2\tau} \right] + \frac{p_2}{s_1 s_2} \right\};$$

$$f_{2n}(\tau, n) = -\frac{2c_0}{n\pi} \left\{ \frac{1}{(s_1-s_2)} \left[\left((1-\alpha)s_1 + p'_1 + \frac{p'_2}{s_1} \right) e^{s_1\tau} - \left((1-\alpha)s_2 + p'_1 + \frac{p'_2}{s_2} \right) e^{s_2\tau} \right] + \frac{p'_2}{s_1 s_2} \right\}. \quad (4.12)$$

Виконаємо обернене \sin -перетворення Фур'є виразів (4.12) за формулою (4.7).

Тоді маємо

$$f_1(\tau, \xi) = -\frac{2c_0}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin y_n \xi}{n} \left\{ \frac{1}{s_1-s_2} \left[\left(\alpha s_1 + p_1 + \frac{p_2}{s_1} \right) e^{s_1\tau} - \left(\alpha s_2 + p_1 + \frac{p_2}{s_2} \right) e^{s_2\tau} \right] + \frac{p_2}{s_1 s_2} \right\};$$

$$f_2(\tau, \xi) = -\frac{2c_0}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin y_n \xi}{n} \left\{ \frac{1}{s_1-s_2} \left[\left((1-\alpha)s_1 + p'_1 + \frac{p'_2}{s_1} \right) e^{s_1\tau} - \left((1-\alpha)s_2 + p'_1 + \frac{p'_2}{s_2} \right) e^{s_2\tau} \right] + \frac{p'_2}{s_1 s_2} \right\}.$$

Просумуємо останні (асимптотичні) доданки отриманих тригонометричних рядів. Зауважимо, що

$$s_1 s_2 = (d^{(0)} - d_1^{(0)} d_2^{(0)})y_n^4 + (a_{22}^{(0)} + a_{11}^{(0)} d^{(0)} + d_1^{(0)} a_{21}^{(0)} + d_2^{(0)} a_{12}^{(0)})y_n^2 + a_{11}^{(0)} a_{22}^{(0)} - a_{12}^{(0)} a_{21}^{(0)}.$$

Розглянемо ряд

$$I_0^{(1)} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{p_2 \sin(y_n \xi)}{n s_1 s_2} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin(y_n \xi)}{n} \frac{an^2 + b}{cn^4 + dn^2 + e}, \quad (4.13)$$

$$\text{де } a = (d_1^{(0)}\alpha_2 + d^{(0)}\alpha_1) \frac{\pi^2}{\xi_0^2}, \quad b = \alpha\alpha_1 a_{22}^{(0)} - \alpha_2 a_{12}^{(0)}, \quad c = (d^{(0)} - d_1^{(0)} d_2^{(0)}) \frac{\pi^4}{\xi_0^4},$$

$$d = (a_{22}^{(0)} + a_{11}^{(0)} d^{(0)} + d_1^{(0)} a_{21}^{(0)} + d_2^{(0)} a_{12}^{(0)}) \frac{\pi^2}{\xi_0^2}, \quad e = a_{11}^{(0)} a_{22}^{(0)} - a_{12}^{(0)} a_{21}^{(0)}.$$

Розкладемо останній множник виразу під знаком суми у формулі (4.13) на прості дробі:

$$\frac{ax^2 + b}{cx^4 + dx^2 + e} = \frac{A'}{x^2 - x_1^2} + \frac{B'}{x^2 - x_2^2}.$$

Розглянемо ряд

$$I_0^{(1)} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(an^2 + b)\sin(ny)}{n(cn^4 + dn^2 + e)} = a \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n \sin(ny)}{cn^4 + dn^2 + e} + b \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin(ny)}{n(cn^4 + dn^2 + e)}. \quad (4.14)$$

Тут $y = \pi\xi/\xi_0$.

Подамо знаменник у формулі (4.14) у вигляді $cn^4 + dn^2 + e = c(n^2 - x_1^2)(n^2 - x_2^2)$,

де $x_{1,2} = \frac{1}{2} \left(-\frac{d}{c} \pm \sqrt{\frac{d^2}{c^2} - 4e} \right)$. Тоді розклад на прості дробі має вигляд:

$$\frac{1}{c(n^2 - x_1^2)(n^2 - x_2^2)} = \frac{1}{c} \left(\frac{A'}{n^2 - x_1^2} + \frac{B'}{n^2 - x_2^2} \right).$$

Звідси знаходимо $A' + B' = 0$; $A'x_2^2 + B'x_1^2 = -1$. Тоді коефіцієнти розкладу на прості дробі мають вигляд

$$A' = \frac{1}{x_1^2 - x_2^2}; \quad B' = \frac{-1}{x_1^2 - x_2^2} = \frac{-c}{\sqrt{d^2 - 4ec^2}},$$

а отже маємо

$$\frac{1}{c(n^2 - x_1^2)(n^2 - x_2^2)} = \frac{1}{c(x_1^2 - x_2^2)} \left(\frac{1}{n^2 - x_1^2} - \frac{1}{n^2 - x_2^2} \right) = \frac{-c}{\sqrt{d^2 - 4ec^2}} \left(\frac{1}{n^2 - x_1^2} - \frac{1}{n^2 - x_2^2} \right).$$

Тоді формулу (4.14) подамо наступним чином

$$I_0^{(1)} = \frac{-c}{\sqrt{d^2 - 4ec^2}} \left(a \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n \sin(ny)}{n^2 - x_1^2} - a \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n \sin(ny)}{n^2 - x_2^2} + b \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin(ny)}{n(n^2 - x_1^2)} - b \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin(ny)}{n(n^2 - x_2^2)} \right).$$

Для підсумовування одержаного виразу використаємо відомий ряд [240]:

$$\sum_{k=1}^{\infty} \frac{k \sin kx}{k^2 - a^2} = \frac{\pi \sin(\pi - x)}{2 \sin \pi a},$$

обидві частини якого двічі проінтегруємо:

$$-\sum_{k=1}^{\infty} \frac{\sin kx}{k(k^2 - a^2)} = \frac{\pi}{2a^2} \left[-\frac{\sin(\pi - x)a}{\sin \pi a} - k_1 x - k_2 \right]. \quad (4.15)$$

Тут k_1, k_2 - сталі інтегрування.

Ліва частина рівності (4.15) дорівнює нулю, якщо $x=0$ і $x=\pi$ ($\forall x \in [0; \pi]$).

Тоді з правої частини (4.15) знаходимо:

$$1 + k_2 = 0 \Rightarrow k_2 = -1;$$

$$k_1\pi - 1 = 0 \Rightarrow k_1 = \frac{1}{\pi}.$$

В результаті отримаємо:

$$\sum_{k=1}^{\infty} \frac{\sin kx}{k(k^2 - a^2)} = \frac{\pi}{2a^2} \left[\frac{x}{\pi} - 1 + \frac{\sin(\pi - x)a}{\sin \pi a} \right].$$

І остаточно знаходимо вираз для $I_0^{(1)}$:

$$\begin{aligned} I_0^{(1)} &= \frac{\pi}{2\sqrt{d^2 - 4ec^2}} \left(a \frac{\sin(\pi - y)x_1}{\sin \pi x_1} - a \frac{\sin(\pi - y)x_2}{\sin \pi x_2} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{b}{x_1^2} \left(\frac{y}{\pi} - 1 + \frac{\sin(\pi - y)x_1}{\sin \pi x_1} \right) - \frac{b}{x_2^2} \left(\frac{y}{\pi} - 1 + \frac{\sin(\pi - y)x_2}{\sin \pi x_2} \right) \right) = \\ &= \frac{\pi}{2\sqrt{d^2 - 4ec^2}} \left[b \left(\frac{y}{\pi} - 1 \right) \frac{x_2^2 - x_1^2}{x_2^2 x_1^2} + \left(a + \frac{b}{x_1^2} \right) \frac{\sin(\pi - y)x_1}{\sin \pi x_1} - \left(a + \frac{b}{x_2^2} \right) \frac{\sin(\pi - y)x_2}{\sin \pi x_2} \right] = \\ &= \frac{\pi}{2} \left[\frac{b}{ce} \left(-\frac{y}{\pi} - 1 \right) + \frac{\pi}{\sqrt{d^2 - 4ec^2}} \left(\left(a + \frac{b}{x_1^2} \right) \frac{\sin(\pi - y)x_1}{\sin \pi x_1} - \left(a + \frac{b}{x_2^2} \right) \frac{\sin(\pi - y)x_2}{\sin \pi x_2} \right) \right], \end{aligned}$$

оскільки $x_1^2 x_2^2 = e$.

Розглянемо тепер підсумовування асимптотичного доданку у тригонометричному ряді для $f_{2n}(\tau, n)$:

$$I_0^{(2)} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{p'_2 \sin(y_n \xi)}{n s_1 s_2} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin(y_n \xi)}{n} \frac{a'n^2 + b'}{cn^4 + dn^2 + e},$$

де $a' = (\alpha_2 + \alpha_1 d_2^{(0)}) \frac{\pi^2}{\xi_0^2}$, $b' = \alpha_2 a_{11}^{(0)} - \alpha_1 a_{21}^{(0)}$.

Аналогічно до $f_{2n}(\tau, n)$ отримаємо асимптотичний доданок у вигляді

$$I_0^{(2)} = \frac{\pi}{2} \left[-\frac{b'}{ce} \left(\frac{y}{\pi} + 1 \right) + \frac{\pi}{\sqrt{d^2 - 4ec^2}} \left(\left(a' + \frac{b'}{x_1^2} \right) \frac{\sin(\pi - y)x_1}{\sin \pi x_1} - \left(a' + \frac{b'}{x_2^2} \right) \frac{\sin(\pi - y)x_2}{\sin \pi x_2} \right) \right].$$

Зазначимо, що $\sin(\pi - y)x_{1,2} = \sin\left(\frac{\pi x_{1,2}}{\xi_0} (\xi_0 - \xi)\right)$, $1 - \frac{y}{\pi} = 1 - \frac{\xi}{\xi_0}$.

Тоді отримаємо наступні вирази для функцій $f_j(\tau, \xi)$:

$$f_1(\tau, \xi) = -c_0 \left\{ \frac{\tilde{b}_1}{ce} \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0} \right) + \frac{1}{\sqrt{d^2 - 4ec^2}} \left[\left(\tilde{a}_1 + \frac{\tilde{b}_1}{x_1} \right) \frac{\sin(\pi - y)x_1}{\sin \pi x_1} - \left(\tilde{a}_1 + \frac{\tilde{b}_1}{x_2} \right) \frac{\sin(\pi - y)x_2}{\sin \pi x_2} \right] + \frac{2c_0}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin y_n \xi}{y_n (s_1 - s_2)} \left[\left(\alpha s_1 + p_1 + \frac{p_2}{s_1} \right) e^{s_1 \tau} - \left(\alpha s_2 + p_1 + \frac{p_2}{s_2} \right) e^{s_2 \tau} \right] \right\};$$

$$f_2(\tau, \xi) = -c_0 \left\{ \frac{\tilde{b}_2}{ce} \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0} \right) + \frac{1}{\sqrt{d^2 - 4ec^2}} \left[\left(\tilde{a}_2 + \frac{\tilde{b}_2}{x_1} \right) \frac{\sin(\pi - y)x_1}{\sin \pi x_1} - \left(\tilde{a}_2 + \frac{\tilde{b}_2}{x_2} \right) \frac{\sin(\pi - y)x_2}{\sin \pi x_2} \right] + \frac{2c_0}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin y_n \xi}{y_n (s_1 - s_2)} \left[\left((1 - \alpha) s_1 + p'_1 + \frac{p'_2}{s_1} \right) e^{s_1 \tau} - \left((1 - \alpha) s_2 + p'_1 + \frac{p'_2}{s_2} \right) e^{s_2 \tau} \right] \right\},$$

де $\tilde{a}_1 = \left(d_1^{(0)} \alpha_2 + d^{(0)} \alpha_1 \right) \frac{\pi^2}{\xi_0^2}$, $\tilde{b}_1 = \alpha_1 a_{22}^{(0)} - \alpha_2 a_{12}^{(0)}$, $\tilde{a}_2 = \left(\alpha_2 + \alpha_1 d_2^{(0)} \right) \frac{\pi^2}{\xi_0^2}$, $\tilde{b}_2 = \alpha_2 a_{11}^{(0)} - \alpha_1 a_{21}^{(0)}$,

Враховуючи заміну (4.4), остаточно одержимо

концентрація розпадної домішки на швидкому шляху міграції

$$\frac{c_1^{(0)}(\tau, \xi)}{c_0} = \left\{ \alpha - \frac{\tilde{b}_1}{ce} \right\} \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0} \right) - B \left[\left(\tilde{a}_1 + \frac{\tilde{b}_1}{x_1} \right) \frac{\sin(\pi - y)x_1}{\sin \pi x_1} - \left(\tilde{a}_1 + \frac{\tilde{b}_1}{x_2} \right) \frac{\sin(\pi - y)x_2}{\sin \pi x_2} \right] - \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin y_n \xi}{y_n (s_1 - s_2)} \left[\left(\alpha s_1 + p_1 + \frac{p_2}{s_1} \right) e^{s_1 \tau} - \left(\alpha s_2 + p_1 + \frac{p_2}{s_2} \right) e^{s_2 \tau} \right], \quad (4.16a)$$

концентрація розпадних частинок на повільному шляху міграції

$$\frac{c_2^{(0)}(\tau, \xi)}{c_0} = \left\{ 1 - \alpha - \frac{\tilde{b}_2}{ce} \right\} \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0} \right) - B \left[\left(\tilde{a}_2 + \frac{\tilde{b}_2}{x_1} \right) \frac{\sin(\pi - y)x_1}{\sin \pi x_1} - \left(\tilde{a}_2 + \frac{\tilde{b}_2}{x_2} \right) \frac{\sin(\pi - y)x_2}{\sin \pi x_2} \right] - \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin y_n \xi}{y_n (s_1 - s_2)} \left[\left((1 - \alpha) s_1 + p'_1 + \frac{p'_2}{s_1} \right) e^{s_1 \tau} - \left((1 - \alpha) s_2 + p'_1 + \frac{p'_2}{s_2} \right) e^{s_2 \tau} \right], \quad (4.16b)$$

сумарна концентрація розпадної речовини $c(\tau, \xi) = c_1(\tau, \xi) + c_2(\tau, \xi)$

$$\frac{c^{(0)}(\tau, \xi)}{c_0} = \left\{ 1 - \frac{\tilde{b}}{ce} \right\} \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0} \right) - B \left[\left(\tilde{a} + \frac{\tilde{b}}{x_1} \right) \frac{\sin(\pi - y)x_1}{\sin \pi x_1} - \left(\tilde{a} + \frac{\tilde{b}}{x_2} \right) \frac{\sin(\pi - y)x_2}{\sin \pi x_2} \right] - \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin y_n \xi}{y_n (s_1 - s_2)} \left[\left(s_1 + \tilde{p}_1 + \frac{\tilde{p}_2}{s_1} \right) e^{s_1 \tau} - \left(s_2 + \tilde{p}_1 + \frac{\tilde{p}_2}{s_2} \right) e^{s_2 \tau} \right], \quad (4.16b)$$

де $B = \frac{1}{\sqrt{d^2 - 4ec^2}}$, $\tilde{a} = \tilde{a}_1 + \tilde{a}_2$, $\tilde{b} = \tilde{b}_1 + \tilde{b}_2$, $\tilde{p}_1 = p_1 + p'_1$, $\tilde{p}_2 = p_2 + p'_2$.

Зазначимо, що отримані формули для концентрацій розпадної домішкової речовини задовольняють крайові умови задачі. Зокрема співвідношення (4.16а) і (4.16б), задовольняють умови (4.2), (4.3а) і (4.3в). В свою чергу формула (4.16в) для сумарної концентрації розпадних частинок задовольняє суму двох умов (4.3а) та нульові умови при $\tau = 0$ і $\xi = \xi_0$.

У стаціонарному режимі отримаємо наступні асимптотичні вирази для концентрацій домішок на нульовому етапі розпаду

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{c_1^{(0)}(\tau, \xi)}{c_0} = \left\{ \alpha - \frac{\tilde{b}_1}{ce} \right\} \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0} \right) - B \left[\left(\tilde{a}_1 + \frac{\tilde{b}_1}{x_1} \right) \frac{\sin(\pi - y)x_1}{\sin \pi x_1} - \left(\tilde{a}_1 + \frac{\tilde{b}_1}{x_2} \right) \frac{\sin(\pi - y)x_2}{\sin \pi x_2} \right],$$

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{c_2^{(0)}(\tau, \xi)}{c_0} = \left\{ 1 - \alpha - \frac{\tilde{b}_2}{ce} \right\} \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0} \right) - B \left[\left(\tilde{a}_2 + \frac{\tilde{b}_2}{x_1} \right) \frac{\sin(\pi - y)x_1}{\sin \pi x_1} - \left(\tilde{a}_2 + \frac{\tilde{b}_2}{x_2} \right) \frac{\sin(\pi - y)x_2}{\sin \pi x_2} \right],$$

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{c^{(0)}(\tau, \xi)}{c_0} = \left\{ 1 - \frac{\tilde{b}}{ce} \right\} \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0} \right) - B \left[\left(\tilde{a} + \frac{\tilde{b}}{x_1} \right) \frac{\sin(\pi - y)x_1}{\sin \pi x_1} - \left(\tilde{a} + \frac{\tilde{b}}{x_2} \right) \frac{\sin(\pi - y)x_2}{\sin \pi x_2} \right].$$

Зазначимо, що і для моделі гетеродифузії двома шляхами асимптотичні доданки отриманих розв'язків є суттєво нелінійними. Проте на відміну від попередніх випадків тут фігурують відношення типу $\frac{\sin(\pi - y)x}{\sin \pi x}$, а не різні комбінації відношень гіперболічних синусів. При цьому кожне з таких відношень є не більшим по модулю ніж 1.

Також зауважимо, що лінійні частини асимптотичних доданків розв'язків відповідної задачі гетеродифузії нерозпадної речовини, тобто $1 - \xi/\xi_0$, пропорційні коефіцієнту, який визначає долю домішки, що потрапила з поверхні на відповідний шлях міграції (α , $1 - \alpha$ і 1). В той же час урахування розпаду мігруючої речовини призводить до появи в таких коефіцієнтах деякої «поправки» (\tilde{b}_1/ce , \tilde{b}_2/ce і \tilde{b}/ce). Враховуючи, що ці «поправки» є невід'ємними, то лінійні частини асимптот функцій (4.16) є не більшими аналогічних доданків концентрацій нерозпадної речовини, причому у кожному стані зокрема.

Для інших кроків каскадного розпаду $i = \overline{1, N-1}$ розв'язки крайових задач (4.16), (4.2), (4.3б), (4.3в) як і для попередніх модельних варіантів подаємо через відповідні функції Гріна:

$$c_1^{(i)}(\tau, \xi) = a_{\lambda_1}^{(i-1)} \int_0^\tau \int_0^\xi G_1^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') c_1^{(i-1)}(\tau', \xi') d\xi' d\tau'; \quad (4.17a)$$

$$c_2^{e(i)}(\tau, \xi) = a_{\lambda 2}^{e(i-1)} \int_0^\tau \int_0^\xi G_2^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') c_2^{e(i-1)}(\tau', \xi') d\xi' d\tau'. \quad (4.17б)$$

Тут $G_1^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')$, $G_2^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')$ - функції Гріна задачі (4.1б), (4.2), (4.3б), (4.3в) для $i = \overline{1, N-1}$.

Тоді, знайшовши функції Гріна і визначивши концентрації розпадних домішкових частинок на кроці $i-1$, за співвідношеннями (4.17) знайдемо відповідні концентрації розпадної речовини для $i = 1, \dots, N-1$.

Для випадку $i = N$ (нерозпадні домішки) процес масоперенесення для даної моделі гетеродифузії описується крайовою задачею (4.1в), (4.2), (4.3б), (4.3в). Її розв'язок також подамо через відповідні функції Гріна аналогічно до (4.17) для $i = \overline{1, N-1}$, а саме

$$c_1^{(N)}(\xi, \tau) = \int_0^\tau \int_0^{\xi_0} G_1^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 1}^{(iN)} c_1^{(i)}(\xi', \tau') d\xi' d\tau'; \quad (4.18а)$$

$$c_2^{e(N)}(\xi, \tau) = \int_0^\tau \int_0^{\xi_0} G_2^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 2}^{e(iN)} c_2^{e(i)}(\xi', \tau') d\xi' d\tau', \quad (4.18б)$$

де $G_j^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')$ ($j = 1, 2$) - функції Гріна задачі (4.1в), (4.2), (4.3б), (4.3в).

4.1.3. Функції Гріна крайових задач гетеродифузії двома шляхами

Нехай вектор-функція $\mathbf{c}(\xi, \tau) = \begin{pmatrix} c_1(\xi, \tau) \\ c_2(\xi, \tau) \end{pmatrix}$ є такою, що її елементи $c_i(\xi, \tau)$, $i = 1, 2$,

є неперервними за змінними ξ , τ в області $R = \{(\xi, \tau) : \xi \in [0; \xi_0], \tau \in \mathfrak{R}_+\}$, задовольняють умову Ліпшиця за змінною ξ в області R з константою l [63, 185].

Розглянемо лінійну крайову задачу для системи зв'язаних диференціальних рівнянь в частинних похідних другого порядку

$$\mathbf{L}[\mathbf{c}(\xi, \tau)] = \mathbf{F}(\xi, \tau), \quad (4.19)$$

де

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} L_1^{c_1}(\xi, \tau) & L_1^{c_2}(\xi, \tau) \\ L_2^{c_1}(\xi, \tau) & L_2^{c_2}(\xi, \tau) \end{pmatrix}, \quad (4.19а)$$

- матричний диференціальний оператор, в якому $L_1^{c_1}(\xi, \tau) = \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + a_{11}$,

$$L_1^{c_2}(\xi, \tau) \equiv L_1^{c_2}(\xi) = -d_1 \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} - a_{12},$$

$$L_2^{c_1}(\xi, \tau) \equiv L_2^{c_1}(\xi) = -d_2 \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} - a_{21},$$

$L_2^{c_2}(\xi, \tau) = \frac{\partial}{\partial \tau} - d \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + a_{22}$ (верхні індекси елементів матриці оператора вказують на яку функцію діє даний елемент матричного оператора); $\mathbf{F}(\xi, \tau) = \begin{pmatrix} F_1(\xi, \tau) \\ F_2(\xi, \tau) \end{pmatrix}$ - вектор-функція джерел, де $F_i(z, t) \in L_2 \vee F_i \in D(\mathfrak{R}^2) \vee F_i \in \langle \Omega, \sigma, P \rangle$.

Нехай задані крайові умови

$$\mathbf{c}(\xi, \tau)|_{\tau=0} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad \mathbf{c}(\xi, \tau)|_{\xi=0} = \mathbf{c}_0 = \begin{pmatrix} c_0^{(1)} \\ c_0^{(2)} \end{pmatrix}; \quad \mathbf{c}(\xi, \tau)|_{\xi=\xi_0} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (4.20)$$

де $c_0^{(i)} \in L_2$.

Якщо $|\mathbf{c}(z, t) - \mathbf{c}_0(z, t)| \leq \beta$ для $\forall t \in \mathfrak{R}_+, z \in [0, z_0]$ (β - відома додатна константа), тоді існує єдиний класичний розв'язок задачі (4.19), (4.20) [2, 63].

Означення 4.1. Функцією Гріна задачі (4.19), (4.20) називається матрична функція

$$\mathbf{G}(\xi, \xi'; \tau, \tau') = \begin{pmatrix} G_1(\xi, \xi'; \tau, \tau') & 0 \\ 0 & G_2(\xi, \xi'; \tau, \tau') \end{pmatrix}, \quad (4.20a)$$

яка визначена в чотиривимірній області $K = K_1 \times K_2 = \{(\xi, \xi'; \tau, \tau') | \xi, \xi' \in [0, \xi_0]; \tau, \tau' \in \mathfrak{R}_+ : \tau' < \tau\}$ і задовольняє такі умови:

- 1) в K матрична функція $\mathbf{G}(\xi, \xi'; \tau, \tau')$ є неперервною і має неперервні похідні за змінною τ ;
- 2) для довільних $\xi' \in [0, \xi_0]$, $\tau' \in \mathfrak{R}_+$ має неперервні похідні першого і другого порядку за змінною ξ в кожному з інтервалів $[0, \xi')$ і $(\xi', \xi_0]$, причому похідна першого порядку за змінною ξ в точці $\xi = \xi'$ має стрибок, що дорівнює одиниці:

$$\frac{\partial}{\partial \xi} \mathbf{G}(\xi + 0, \xi'; \tau, \tau') - \frac{\partial}{\partial \xi} \mathbf{G}(\xi - 0, \xi'; \tau, \tau') = 1;$$

- 3) $\mathbf{G}(\xi, \xi'; \tau, \tau') = 0$ при $\tau \leq \tau'$;
- 4) в кожному з інтервалів $[0, \xi')$ і $(\xi', \xi_0]$ для $\tau' \leq \tau$ функція $\mathbf{G}(\xi, \xi'; \tau, \tau')$ як функція змінної ξ є розв'язком однорідного рівняння

$$\mathbf{L}[\mathbf{G}(\xi, \xi'; \tau, \tau')] = 0;$$

- 5) $\mathbf{G}(\xi, \xi'; \tau, \tau')$ як функція змінних ξ, τ задовольняє нульові крайові умови типу (4.20).

Зазначимо, що в банаховому просторі $\overline{C}^{(n,q)}(D^p)$ вектор-функцій $\mathbf{c}(\xi, \tau)$ з нормою

$$\|\mathbf{c}\|_{\overline{C}^{(\bar{n},2)}(D^p)} = \sum_{j=1}^2 \|c_j\|_{\overline{C}^{(n_j,2)}(D^p)},$$

де $D^p \equiv K' = \{(\xi, \xi'; \tau, \tau') \mid \xi, \xi' \in [0, z_0]; \tau, \tau' \in [0, T]: \tau' < \tau\}$, $\bar{n} = (n_1, n_2)$ і $n_1 = n_2 = 1$, для єдиності розв'язку крайової задачі (4.19), (4.20) необхідно і достатньо, щоб фундаментальна система розв'язків не мала б розв'язків у цілих числах [63].

Крайові задачі гетеродифузії каскадного типу (4.1)-(4.3) є еквівалентними постановці задачі (4.18), (4.19) для кожного $i = 0, \dots, N$ зокрема, якщо $\mathbf{c}(\xi, \tau) = \mathbf{c}^{(i)}(\xi, \tau)$, $\mathbf{F}(\xi, \tau) = \mathbf{F}[\xi, \tau; \mathbf{c}^{(i-1)}(\xi, \tau)]$, $\mathbf{c}^{(i)}(\xi, \tau)|_{\xi=0} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$ для $i = \overline{1, N}$.

Функція Гріна — це імпульсна характеристика неоднорідного лінійного диференціального оператора, визначеного в області Ω деякого евклідового простору \mathfrak{R}^n із заданими початковими і граничними умовами.

Означення 4.2. Якщо \mathbf{L} - матричний диференціальний оператор в частинних похідних (4.19а), який діє на узагальнених функціях на підмножині Ω деякого евклідового простору \mathfrak{R}^n , тоді

- функція Гріна (4.20а) в точці $(\xi', \tau') \in \Omega$, що відповідає оператору \mathbf{L} , є будь-яким розв'язком матричного рівняння

$$\mathbf{L}\mathbf{G}(\xi, \xi'; \tau, \tau') = \delta(\tau - \tau'; \xi - \xi'),$$

де $\delta(\tau - \tau'; \xi - \xi') = \begin{pmatrix} \delta(\xi - \xi')\delta(\tau - \tau') \\ \delta(\xi - \xi')\delta(\tau - \tau') \end{pmatrix}$ - векторна дельта-функція;

- розв'язком крайової задачі $\mathbf{L}[\mathbf{c}(\xi, \tau)] = \mathbf{F}(\xi, \tau)$ є згортка $(\mathbf{G} * \mathbf{F})$.

Для знаходження матричних функцій Гріна $\mathbf{G}(\xi, \xi'; \tau, \tau') = \mathbf{G}^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')$, $i = \overline{1, N-1}$, сформулюємо крайову задачу з точковим джерелом для елементів матриці:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial G_1^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')}{\partial \tau} - d_0^{(i)} \frac{\partial^2 G_1^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')}{\partial \xi^2} - d_1^{e(i)} \frac{\partial^2 G_2^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')}{\partial \xi^2} + \\ & + a_{11}^{(i)} G_1^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') - a_{12}^{(i)} G_2^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') = \delta(\tau - \tau')\delta(\xi - \xi'), \\ & \frac{\partial G_2^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')}{\partial \tau} - d_2^{(i)} \frac{\partial^2 G_1^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')}{\partial \xi^2} - d^{e(i)} \frac{\partial^2 G_2^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')}{\partial \xi^2} - \\ & - a_{21}^{(i)} G_1^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') + a_{22}^{(i)} G_2^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') = \delta(\tau - \tau')\delta(\xi - \xi') \end{aligned} \quad (4.21)$$

за нульових крайових умов

$$G_1^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') \Big|_{\tau=0} = G_2^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') \Big|_{\tau=0} = 0; \quad (4.22a)$$

$$G_1^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') \Big|_{\xi=0} = G_2^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') \Big|_{\xi=0} = 0, \quad i = \overline{1, N-1}; \quad (4.22б)$$

$$G_1^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') \Big|_{\xi=\xi_0} = G_2^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') \Big|_{\xi=\xi_0} = 0, \quad i = \overline{1, N-1}. \quad (4.22в)$$

Застосуємо до крайових задач (4.21), (4.22) інтегральне перетворення Лапласа за часовою змінною ($\tau \rightarrow s, G_j^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') \rightarrow \bar{g}_j^{(i)}(s, \tau'; \xi, \xi'), j = 1, 2$).

Тоді в зображеннях отримаємо систему звичайних диференціальних рівнянь:

$$\begin{aligned} (s + a_{11}^{(i)})\bar{g}_1^{(i)}(s, \tau'; \xi, \xi') - a_{12}^{e(i)}\bar{g}_2^{(i)}(s, \tau'; \xi, \xi') - d_0^{(i)} \frac{\partial^2 \bar{g}_2^{(i)}(s, \tau'; \xi, \xi')}{\partial \xi^2} - \\ - d_1^{e(i)} \frac{\partial^2 \bar{g}_2^{(i)}(s, \tau'; \xi, \xi')}{\partial \xi^2} = \delta(\xi - \xi')e^{-s\tau}, \\ (s + a_{22}^{(i)})\bar{g}_2^{(i)}(s, \tau'; \xi, \xi') - a_{21}^{(i)}\bar{g}_1^{(i)}(s, \tau'; \xi, \xi') - d_2^{(i)} \frac{\partial^2 \bar{g}_1^{(i)}(s, \tau'; \xi, \xi')}{\partial \xi^2} - \\ - d^{e(i)} \frac{\partial^2 \bar{g}_2^{(i)}(s, \tau'; \xi, \xi')}{\partial \xi^2} = \delta(\xi - \xi')e^{-s\tau} \end{aligned} \quad (4.23)$$

з нульовими граничними умовами

$$\begin{aligned} \bar{g}_1^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') \Big|_{\xi=0} = \bar{g}_2^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') \Big|_{\xi=0} = 0; \\ \bar{g}_1^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') \Big|_{\xi=\xi_0} = \bar{g}_2^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') \Big|_{\xi=\xi_0} = 0, \quad i = \overline{1, N-1}. \end{aligned} \quad (4.24)$$

До отриманої задачі застосуємо \sin -перетворенні Фур'є [262] ($\xi \rightarrow y_n, \bar{g}_j^{(i)}(s, \tau'; \xi, \xi') \rightarrow g_j^{(i)}(s, \tau'; y_n, \xi'), j = 1, 2$). При цьому врахуємо \sin -перетворення від δ -функції Дірака

$$\int_0^{\xi_0} \delta(\xi - \xi') \sin y_n \xi d\xi = \sin y_n \xi'. \quad (4.25)$$

Тоді в зображеннях задача (4.23), (4.24) зведеться системи алгебраїчних рівнянь

$$\begin{aligned} [s + a_{11}^{(i)} + d_0^{(i)} y_n^2] g_1^{(i)}(y_n, \xi; s, \tau') + [d_1^{(i)} y_n^2 - a_{12}^{e(i)}] g_2^{(i)}(y_n, \xi; s, \tau') = \sin(y_n \xi') e^{-s\tau'}, \\ [d_2^{(i)} y_n^2 - a_{21}^{(i)}] g_1^{(i)}(y_n, \xi; s, \tau') + [s + a_{22}^{(i)} + d^{e(i)} y_n^2] g_2^{(i)}(y_n, \xi; s, \tau') = \sin(y_n \xi') e^{-s\tau'}. \end{aligned} \quad (4.26)$$

Для отримання розв'язку системи рівнянь (4.26) знайдемо її головний визначник

$$\Delta = \begin{vmatrix} s + a_{11}^{(i)} + d_0^{(i)} y_n^2 & d_1^{(i)} y_n^2 - a_{12}^{e(i)} \\ d_2^{(i)} y_n^2 - a_{21}^{(i)} & s + a_{22}^{(i)} + d^{e(i)} y_n^2 \end{vmatrix} = s^2 + s\eta_1^{(i)} + \eta_2^{(i)} = (s - s_1^{(i)})(s - s_2^{(i)}),$$

де $\eta_1^{(i)} = y_n^2(d_0^{(i)} + d^{e(i)}) + a_{11}^{(i)} + a_{22}^{e(i)}$; $\eta_2^{(i)} = y_n^4(d_0^{(i)} d^{e(i)} - d_1^{e(i)} d_2^{(i)}) + y_n^2(a_{11}^{(i)} d^{e(i)} + d_0^{(i)} a_{22}^{e(i)} + a_{12}^{e(i)} d_2^{(i)} + d_1^{e(i)} a_{21}^{(i)}) + a_{11}^{(i)} a_{22}^{e(i)} - a_{12}^{e(i)} a_{21}^{(i)}$.

Знаходимо допоміжні визначники

$$\Delta_1 = \sin(y_n \xi') e^{-s\tau'} \begin{vmatrix} 1 & d_1^{(i)} y_n^2 - a_{12}^{e(i)} \\ 1 & s + a_{22}^{(i)} + d^{e(i)} y_n^2 \end{vmatrix} = \sin(y_n \xi') e^{-s\tau'} [s + y_n^2(d^{e(i)} - d_1^{e(i)}) + a_{22}^{e(i)} + a_{12}^{e(i)}],$$

$$\Delta_2 = \sin(y_n \xi') e^{-s\tau'} \begin{vmatrix} s + a_{11}^{(i)} + d_0^{(i)} y_n^2 & 1 \\ d_2^{(i)} y_n^2 - a_{21}^{(i)} & 1 \end{vmatrix} = \sin(y_n \xi') e^{-s\tau'} [s + y_n^2(d_0^{(i)} - d_2^{(i)}) + a_{11}^{(i)} + a_{21}^{(i)}].$$

Введемо позначення

$$A_1 = y_n^2(d^{e(i)} - d_1^{e(i)}) + a_{22}^{e(i)} + a_{12}^{e(i)};$$

$$A_2 = y_n^2(d_0^{(i)} - d_2^{(i)}) + a_{11}^{(i)} + a_{21}^{(i)}.$$

Тоді розв'язок системи рівнянь (4.26) має вигляд

$$g_1^{(i)}(y_n, \xi; s, \tau') = \frac{\Delta_1}{\Delta} = \frac{\sin(y_n \xi') e^{-s\tau'} (s - A_1)}{(s - s_1^{(i)})(s - s_2^{(i)})},$$

$$g_2^{(i)}(y_n, \xi; s, \tau') = \frac{\Delta_2}{\Delta} = \frac{\sin(y_n \xi') e^{-s\tau'} (s - A_2)}{(s - s_1^{(i)})(s - s_2^{(i)})}.$$

Тепер використаємо формули оберненого перетворення Лапласа [80] і теорему запізнювання [109]. Тоді маємо

$$\bar{g}_1^{(i)}(s, \tau'; \xi, \xi') = \frac{\theta(\tau - \tau') \sin y_n \xi'}{s_1^{(i)} - s_2^{(i)}} \left((s_1^{(i)} + A_1) e^{s_1^{(i)} \tau} - (s_2^{(i)} + A_1) e^{s_2^{(i)} \tau} \right);$$

$$\bar{g}_2^{(i)}(s, \tau'; \xi, \xi') = \frac{\theta(\tau - \tau') \sin y_n \xi'}{s_1^{(i)} - s_2^{(i)}} \left((s_1^{(i)} + A_2) e^{s_1^{(i)} \tau} - (s_2^{(i)} + A_2) e^{s_2^{(i)} \tau} \right).$$

Тепер застосуємо обернене перетворення Фур'є [262]. Тоді одержимо

$$G_1^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') = \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin y_n \xi \sin y_n \xi'}{s_1^{(i)} - s_2^{(i)}} \left[(s_1^{(i)} + A_1) e^{s_1^{(i)}(\tau - \tau')} - (s_2^{(i)} + A_1) e^{s_2^{(i)}(\tau - \tau')} \right],$$

$$G_2^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') = \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin y_n \xi \sin y_n \xi'}{s_1^{(i)} - s_2^{(i)}} \left[(s_1^{(i)} + A_2) e^{s_1^{(i)}(\tau - \tau')} - (s_2^{(i)} + A_2) e^{s_2^{(i)}(\tau - \tau')} \right]. \quad (4.27)$$

Таким чином ми знайшли функції Гріна задачі гетеродифузії двома шляхами розпадної речовини у шарі для етапів $i = \overline{1, N-1}$ каскадного розпаду домішкових частинок.

Для останнього етапу каскадного розпаду $i = N$ також шукатимемо матричну функцію Гріна $\mathbf{G}(\xi, \xi'; \tau, \tau') = \mathbf{G}^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')$ з крайової задачі з точковим джерелом, сформульованої на елементи матриці:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial G_1^{(N)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')}{\partial \tau} - d_0^{(N)} \frac{\partial^2 G_1^{(N)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')}{\partial \xi^2} - d_1^{e(N)} \frac{\partial^2 G_2^{(N)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')}{\partial \xi^2} + \\ & + a_{11}^{(N)} G_1^{(N)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') - a_{12}^{(N)} G_2^{(N)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') = \delta(\tau - \tau') \delta(\xi - \xi'), \\ & \frac{\partial G_2^{(N)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')}{\partial \tau} - d_2^{(N)} \frac{\partial^2 G_1^{(N)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')}{\partial \xi^2} - d^{e(N)} \frac{\partial^2 G_2^{(N)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')}{\partial \xi^2} - \\ & - a_{21}^{(N)} G_1^{(N)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') + a_{22}^{(N)} G_2^{(N)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') = \delta(\tau - \tau') \delta(\xi - \xi') \end{aligned} \quad (4.28)$$

за нульових крайових умов

$$G_1^{(N)} \Big|_{\tau=0} = G_2^{(N)} \Big|_{\tau=0} = G_1^{(N)} \Big|_{\xi=0} = G_2^{(N)} \Big|_{\xi=0} = G_1^{(N)} \Big|_{\xi=\xi_0} = G_2^{(N)} \Big|_{\xi=\xi_0} = 0. \quad (4.29)$$

Розв'язок крайової задачі (4.28), (4.29) має вигляд

$$\begin{aligned} G_1^{(N)} &= \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin(y_n \xi) \sin(y_n \xi')}{s_1^{(N)} - s_2^{(N)}} \left[(s_1^{(N)} + A_1^{(N)}) e^{s_1^{(N)}(\tau - \tau')} - (s_2^{(N)} + A_1^{(N)}) e^{s_2^{(N)}(\tau - \tau')} \right], \\ G_2^{(N)} &= \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin(y_n \xi) \sin(y_n \xi')}{s_1^{(N)} - s_2^{(N)}} \left[(s_1^{(N)} + A_2^{(N)}) e^{s_1^{(N)}(\tau - \tau')} - (s_2^{(N)} + A_2^{(N)}) e^{s_2^{(N)}(\tau - \tau')} \right], \end{aligned} \quad (4.30)$$

де $s_1^{(N)}, s_2^{(N)}$ - розв'язки квадратного рівняння $s^2 + s\eta_1'^{(N)} + \eta_2'^{(N)} = 0$ з коефіцієнтами $\eta_1'^{(N)} = y_n^2 (d_0^{(N)} + d^{e(N)}) + a_{11}^{(N)} + a_{22}^{e(N)}$; $\eta_2'^{(N)} = y_n^4 (d_0^{(N)} d^{e(N)} - d_1^{e(N)} d_2^{(N)}) + y_n^2 (a_{11}^{(N)} d^{e(N)} + d_0^{(N)} a_{22}^{(N)} + a_{12}^{e(N)} d_2^{(N)} + d_1^{e(N)} a_{21}^{(N)}) + a_{11}^{(N)} a_{22}^{e(N)} - a_{12}^{e(N)} a_{21}^{(N)}$; а також $A_1^{(N)} = y_n^2 (d^{e(N)} - d_1^{e(N)}) + a_{22}^{e(N)} + a_{12}^{e(N)}$; $A_2^{(N)} = y_n^2 (d_0^{(N)} - d_2^{(N)}) + a_{11}^{(N)} + a_{21}^{(N)}$.

Зазначимо, що для того, щоб при $\tau \rightarrow \infty$ отримані ряди у співвідношеннях, одержаних для функцій Гріна (4.26), (4.27) були збіжними [140], повинні виконуватися умови $s_1^{(i)} < 0$ та $s_2^{(i)} < 0$ для $\forall i = \overline{1, N}$ [278]. Враховуючи структуру виразів $s_1^{(i)}$ та $s_2^{(i)}$ і що $\eta_1^{(i)} > 0$, одержимо $s_1^{(i)} < 0$. Дослідивши умови, за яких $s_2^{(i)}$ набуває від'ємних значень, отримаємо обмеження [278]

$$d_1^{e(i)} d^{e(i)} < d_0^{(i)} d_2^{(i)}.$$

Числовий аналіз функцій Гріна $G_1^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')$ і $G_2^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')$ проведено для таких базових значень параметрів задачі: $d^{e(i)} = 0.1$, $d_0^{(i)} = 1$; $d_1^{e(i)} = d_2^{(i)} = 0$, $a_{11}^{(i)} = 4$, $a_{12}^{e(i)} = 1$, $a_{21}^{(i)} = 2.2$, $a_{22}^{e(i)} = 2.6$. На рис. 4.1, 4.2 проілюстровано характерні поверхні, які утворюють функції Гріна, обчислені за формулами (4.26). Тут наведено функції $G_1^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')$ та $G_2^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')$ в точках $(\xi', \tau') = (1; 0.01)$ (рис.а), $(\xi', \tau') = (2; 0.01)$ (рис.б), $(\xi', \tau') = (3.5; 0.01)$ (рис.с), $(\xi', \tau') = (5; 0.01)$ (рис.д) та $(\xi', \tau') = (8; 0.01)$ (рис.е). Вздовж осі абсцис відкладена просторова координата ξ , вздовж осі ординат – часова τ , вздовж осі аплікату – значення функцій $G_j^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')$, $j = 1, 2$.

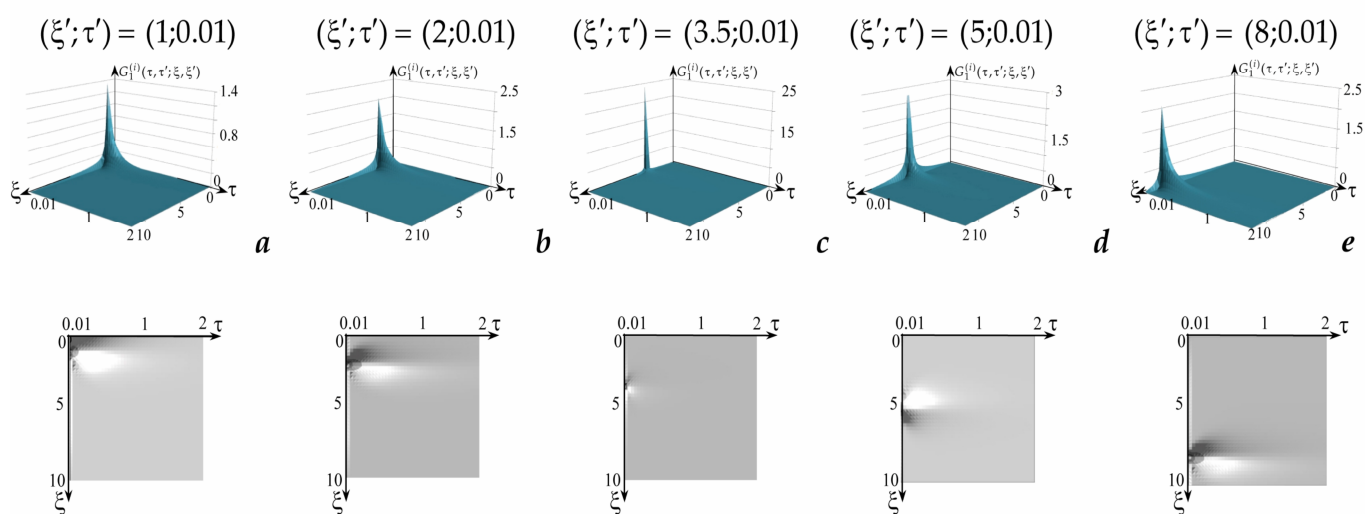


Рис. 4.1. Поверхні функції Гріна $G_1^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')$ в точках (ξ', τ')

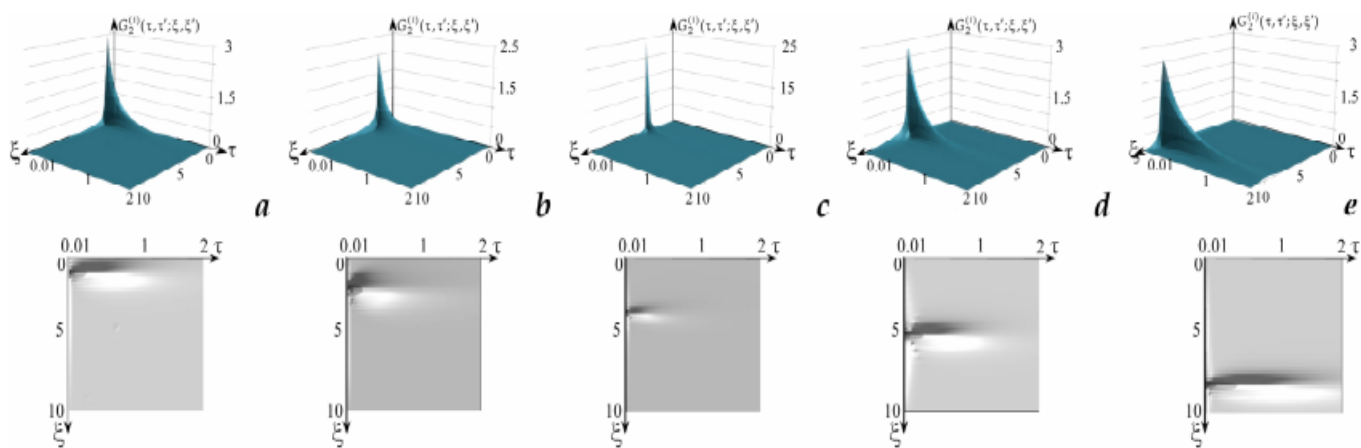


Рис. 4.2. Поверхні функції Гріна $G_2^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')$ в точках (ξ', τ')

Зазначимо, що поверхні, які утворюють функції Гріна (4.26), мають характерний гострий пік в околі точки $(\xi, \tau) = (\xi', \tau')$ (рис. 4.1, 4.2). При цьому для тих самих значень коефіцієнтів задачі в околі границі шару $\xi = 0$ значення

функції $G_2^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')$ в рази більші ніж $G_1^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')$, наприклад,

$$\left. \frac{\max_{\xi, \tau \in K'} G_2^{(i)}}{\max_{\xi, \tau \in K'} G_1^{(i)}} \right|_{(\xi', \tau')=(1; 0.01)} = 2.14 \quad (\text{рис. 4.1b і 4.2b}),$$

а в околі границі $\xi = \xi_0$ різниця сягає 30%: $\left. \frac{\max_{\xi, \tau \in K'} G_2^{(i)}}{\max_{\xi, \tau \in K'} G_1^{(i)}} \right|_{(\xi', \tau')=(8; 0.01)} = 1.29$, що пояснюється значно

більшим коефіцієнтом сорбції $a_{11}^{(i)}$, ніж інші «сорбційні» коефіцієнти. Зауважимо, що при зсуві координати джерела ξ' до середини шару суттєво збільшуються значення $G_1^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')$ і $G_2^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')$, а поверхні стають більш пологими. При цьому для функції $G_1^{(i)}$ пологіше спадання спостерігається біля границі тіла $\xi = 0$ (рис. 4.1a), тоді як для функції $G_2^{(i)}$ - в околі границі $\xi = \xi_0$ (рис. 4.2e). Зростання коефіцієнта $a_{11}^{(i)}$ майже не змінює пікові значення функцій $G_1^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')$ і $G_2^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')$, проте дещо сповільнює спадання функцій Гріна вздовж часової осі $O\tau$.

Варіація коефіцієнта $a_{21}^{(i)}$ в широких межах майже не змінює значення функції $G_1^{(i)}$ і для малих $a_{11}^{(i)}$ - $G_2^{(i)}$ (у цьому випадку звужується інтервал варіації через фізичні обмеження на коефіцієнти, коли розглядаються сорбційні процеси). Для великих значень $a_{11}^{(i)}$ зростання коефіцієнта $a_{21}^{(i)}$ веде до збільшення значень і більш похилого спадання поверхні $G_2^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')$, тобто збільшення часового інтервалу ненульових значень функції Гріна.

Для великих значень коефіцієнта $a_{22}^{(i)}$ ($a_{22}^{(i)} > 10$) для обох функцій Гріна наявна невелика область локалізації ненульових значень в околі джерела. Зменшення значень $a_{22}^{(i)}$ приводить до розширення цієї області, причому суттєво для функції $G_1^{(i)}$ при малих коефіцієнтах $a_{21}^{(i)}$ і $G_2^{(i)}$ - при великих. Зазначимо, що пікові значення функції $G_1^{(i)}$ практично не міняються зі зміною коефіцієнта $a_{21}^{(i)}$, а для функції $G_2^{(i)}$ характерне збільшення значень з ростом величини $a_{21}^{(i)}$, наприклад, для розташування

джерела в точці $(\xi'; t') = (5; 0.01)$ $\left. \frac{\max_{\xi, \tau \in K'} G_1^{(i)}}{\max_{\xi, \tau \in K'} G_1^{(i)}} \right|_{a_{21}^{(i)}=79} / \left. \frac{\max_{\xi, \tau \in K'} G_1^{(i)}}{\max_{\xi, \tau \in K'} G_1^{(i)}} \right|_{a_{21}^{(i)}=2.2} = 1.07$ і

$$\left. \frac{\max_{\xi, \tau \in K'} G_2^{(i)}}{\max_{\xi, \tau \in K'} G_2^{(i)}} \right|_{a_{21}^{(i)}=79} / \left. \frac{\max_{\xi, \tau \in K'} G_2^{(i)}}{\max_{\xi, \tau \in K'} G_2^{(i)}} \right|_{a_{21}^{(i)}=2.2} = 1.52 \quad \text{при } a_{22}^{(i)}=1.1.$$

4.2. Потоки розпадних домішкових частинок через задану поверхню

Відповідно до моделі гетеродифузії двома шляхами, враховуючи Теорему 2.7, знайдемо вирази для потоків розпадних речовин на різних етапах каскадного розпаду через одиницю площі поверхні $\xi = \xi_*$ [6]. Виходячи з лінійних кінетичних співвідношень (2.63) (Теорема 2.6) масові потоки визначаються формулами

$$J_{*1}^{(i)}(t) = - \left[d_0^{(i)} \frac{\partial c_1^{(i)}(x,t)}{\partial x} + d_1^{e(i)} \frac{\partial c_2^{e(i)}(x,t)}{\partial x} \right]_{x=x_*},$$

$$J_{*2}^{(i)}(t) = - \left[d_2^{(i)} \frac{\partial c_1^{(i)}(x,t)}{\partial x} + d^{e(i)} \frac{\partial c_2^{e(i)}(x,t)}{\partial x} \right]_{x=x_*}, \quad i = \overline{0; N}.$$

Використовуючи формули (3.1), запишемо ці співвідношення у безрозмірній формі:

$$J_{*1}^{(i)}(\tau) = -\sqrt{\bar{k}_2^{(0)} \bar{D}_{11}^{(0)}} \left[d_0^{(i)} \frac{\partial c_1^{(i)}(\xi, \tau)}{\partial \xi} + d_1^{e(i)} \frac{\partial c_2^{e(i)}(\xi, \tau)}{\partial \xi} \right]_{\xi=\xi_*},$$

$$J_{*2}^{(i)}(\tau) = -\sqrt{\bar{k}_2^{(0)} \bar{D}_{11}^{(0)}} \left[d_2^{(i)} \frac{\partial c_1^{(i)}(\xi, \tau)}{\partial \xi} + d^{e(i)} \frac{\partial c_2^{e(i)}(\xi, \tau)}{\partial \xi} \right]_{\xi=\xi_*}, \quad i = \overline{0; N},$$

при цьому сумарний потік через поверхню $\xi = \xi_*$ $J_*^{(i)}(\tau) = J_{*1}^{(i)} \Big|_{\xi=\xi_*} + J_{*2}^{(i)} \Big|_{\xi=\xi_*}$ для всіх $i = \overline{0; N}$ приймає вигляд

$$J_*^{(i)}(\tau) = -\sqrt{\bar{k}_2^{(0)} \bar{D}_{11}^{(0)}} \left[(d_0^{(i)} + d_2^{(i)}) \frac{\partial c_1^{(i)}(\xi, \tau)}{\partial \xi} + (d_1^{e(i)} + d^{e(i)}) \frac{\partial c_2^{e(i)}(\xi, \tau)}{\partial \xi} \right]_{\xi=\xi_*}. \quad (4.31)$$

Підставляємо вирази для концентрацій домішок $c_1^{(i)}(\xi, \tau)$ (4.16а), (4.17а), (4.18а) і $c_2^{e(i)}(\xi, \tau)$ (4.16б), (4.17б), (4.18б) на відповідних етапах розпаду у співвідношення (4.31). Тоді отримаємо

для $i = 0$

$$\frac{\xi_0}{c_0 \sqrt{\bar{k}_2^{(0)} \bar{D}_{11}^{(0)}}} J_*^{(0)}(\tau) = R - B\pi \left[\frac{R_1}{\sin(\pi x_1)} \cos\left(\frac{\pi x_1}{\xi_0}(\xi_0 - \xi_*)\right) - \frac{R_2}{\sin(\pi x_2)} \cos\left(\frac{\pi x_2}{\xi_0}(\xi_0 - \xi_*)\right) \right] -$$

$$-2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\cos y_n \xi_*}{s_1 - s_2} \left[\left(\bar{p} s_1 + \bar{p}_1 + \frac{\bar{p}_2}{s_1} \right) e^{s_1 \tau} - \left(\bar{p} s_2 + \bar{p}_1 + \frac{\bar{p}_2}{s_2} \right) e^{s_2 \tau} \right], \quad (4.32a)$$

де $\tilde{d}_1^{(i)} = d_0^{(i)} + d_2^{(i)}$, $\tilde{d}_2^{(i)} = d_1^{e(i)} + d^{e(i)}$; $R = \alpha \tilde{d}_1^{(i)} + (1-\alpha) \tilde{d}_2^{(i)} - \frac{1}{ce} (\tilde{b}_1 \tilde{d}_1^{(i)} + \tilde{b}_2 \tilde{d}_2^{(i)})$,
 $R_1 = \tilde{d}_1^{(i)} (\tilde{a}_1 x_1 + \tilde{b}_1) - \tilde{d}_2^{(i)} (\tilde{a}_2 x_1 + \tilde{b}_2)$, $R_2 = \tilde{d}_1^{(i)} (\tilde{a}_1 x_2 + \tilde{b}_1) - \tilde{d}_2^{(i)} (\tilde{a}_2 x_2 + \tilde{b}_2)$; $\bar{p} = \alpha \tilde{d}_1^{(i)} + (1-\alpha) \tilde{d}_2^{(i)}$,
 $\bar{p}_1 = \tilde{d}_1^{(i)} \tilde{A}_1 + \tilde{d}_2^{(i)} \tilde{A}_2$, $\bar{p}_2 = \tilde{d}_1^{(i)} \tilde{B}_1 + \tilde{d}_2^{(i)} \tilde{B}_2$. Також тут використано, що $\frac{\partial}{\partial \xi} [\sin((\pi - y)x_{1,2})] =$
 $= -\frac{\pi x_{1,2}}{\xi_0} \cos\left(\frac{\pi x_{1,2}}{\xi_0} (\xi_0 - \xi)\right)$.

Для $i = 1, \dots, N-1$ маємо

$$\frac{J_*^{(i)}(\tau)}{\sqrt{k_2^{(0)} D_{11}^{(0)}}} = \int_0^\tau \int_0^{\xi_0} \left\{ a_{\lambda 1}^{(i-1)} \tilde{d}_1^{(i)} \frac{\partial G_1^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_*} c_1^{(i-1)}(\xi', \tau') + \right. \\ \left. + a_{\lambda 2}^{e(i-1)} \tilde{d}_2^{e(i)} \frac{\partial G_2^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_*} c_2^{e(i-1)}(\xi', \tau') \right\} d\xi' d\tau', \quad (4.32б)$$

$$\frac{\partial G_1^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_*} = \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} y_n \frac{\cos(y_n \xi_*) \sin(y_n \xi')}{s_1^{(i)} - s_2^{(i)}} \left[(s_1^{(i)} + A_1^{(i)}) e^{s_1^{(i)}(\tau-\tau')} - (s_2^{(i)} + A_1^{(i)}) e^{s_2^{(i)}(\tau-\tau')} \right],$$

$$\frac{\partial G_2^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_*} = \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} y_n \frac{\cos(y_n \xi_*) \sin(y_n \xi')}{s_1^{(i)} - s_2^{(i)}} \left[(s_1^{(i)} + A_2^{(i)}) e^{s_1^{(i)}(\tau-\tau')} - (s_2^{(i)} + A_2^{(i)}) e^{s_2^{(i)}(\tau-\tau')} \right];$$

для $i = N$

$$\frac{J_*^{(N)}(\tau)}{\sqrt{k_2^{(0)} D_{11}^{(0)}}} = \int_0^\tau \int_0^{\xi_0} \left\{ \tilde{d}_1^{(N)} \frac{\partial G_1^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_*} \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 1}^{(iN)} c_1^{(i)}(\xi', \tau') + \right. \\ \left. + \tilde{d}_2^{(N)} \frac{\partial G_2^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_*} \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 2}^{e(iN)} c_2^{e(i)}(\xi', \tau') \right\} d\xi' d\tau', \quad (4.32в)$$

$$\frac{\partial G_1^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_*} = \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} y_n \frac{\cos(y_n \xi_*) \sin(y_n \xi')}{s_1^{(N)} - s_2^{(N)}} \times$$

$$\times \left[(s_1^{(N)} + A_1^{(N)}) e^{s_1^{(N)}(\tau-\tau')} - (s_2^{(N)} + A_1^{(N)}) e^{s_2^{(N)}(\tau-\tau')} \right],$$

$$\frac{\partial G_2^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_*} = \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} y_n \frac{\cos(y_n \xi_*) \sin(y_n \xi')}{s_1^{(N)} - s_2^{(N)}} \times$$

$$\times \left[\left(s_1^{(N)} + A_2^{(N)} \right) e^{s_1^{(N)}(\tau-\tau')} - \left(s_2^{(N)} + A_2^{(N)} \right) e^{s_2^{(N)}(\tau-\tau')} \right].$$

Запишемо також вирази для потоків розпадних речовин через нижню границю шару $\xi = \xi_0$ як частковий випадок формул (4.32):

для $i = 0$

$$\begin{aligned} \frac{\xi_0}{c_0 \sqrt{k_2^{(0)} D_{11}^{(0)}}} J_*^{(0)}(\tau) = R - B\pi \left[\frac{R_1}{\sin(\pi x_1)} - \frac{R_2}{\sin(\pi x_2)} \right] - \\ - 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{s_1 - s_2} \left[\left(\bar{p}s_1 + \bar{p}_1 + \frac{\bar{p}_2}{s_1} \right) e^{s_1 \tau} - \left(\bar{p}s_2 + \bar{p}_1 + \frac{\bar{p}_2}{s_2} \right) e^{s_2 \tau} \right], \end{aligned} \quad (4.33a)$$

для $i = 1, \dots, N-1$ справджується формула (4.32б), в якій

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial G_1^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \right|_{\xi=\xi_0} &= \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} y_n \frac{(-1)^n \sin(y_n \xi')}{s_1^{(i)} - s_2^{(i)}} \times \\ &\times \left[\left(s_1^{(i)} + A_1^{(i)} \right) e^{s_1^{(i)}(\tau-\tau')} - \left(s_2^{(i)} + A_1^{(i)} \right) e^{s_2^{(i)}(\tau-\tau')} \right], \\ \left. \frac{\partial G_2^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \right|_{\xi=\xi_0} &= \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} y_n \frac{(-1)^n \sin(y_n \xi')}{s_1^{(i)} - s_2^{(i)}} \times \\ &\times \left[\left(s_1^{(i)} + A_2^{(i)} \right) e^{s_1^{(i)}(\tau-\tau')} - \left(s_2^{(i)} + A_2^{(i)} \right) e^{s_2^{(i)}(\tau-\tau')} \right]; \end{aligned} \quad (4.33б)$$

для $i = N$ справджується формула (4.32в), в якій

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial G_1^{(N)}(\xi, \xi', \tau, \tau')}{\partial \xi} \right|_{\xi=\xi_0} &= \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} y_n \frac{(-1)^n \sin(y_n \xi')}{s_1^{(N)} - s_2^{(N)}} \times \\ &\times \left[\left(s_1^{(N)} + A_1^{(N)} \right) e^{s_1^{(N)}(\tau-\tau')} - \left(s_2^{(N)} + A_1^{(N)} \right) e^{s_2^{(N)}(\tau-\tau')} \right], \\ \left. \frac{\partial G_2^{(N)}(\xi, \xi', \tau, \tau')}{\partial \xi} \right|_{\xi=\xi_0} &= \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} y_n \frac{(-1)^n \sin(y_n \xi')}{s_1^{(N)} - s_2^{(N)}} \times \\ &\times \left[\left(s_1^{(N)} + A_2^{(N)} \right) e^{s_1^{(N)}(\tau-\tau')} - \left(s_2^{(N)} + A_2^{(N)} \right) e^{s_2^{(N)}(\tau-\tau')} \right]. \end{aligned} \quad (4.33в)$$

Зазначимо, що асимптотична частина виразів для потоків (4.32), зокрема і (4.33), для моделі гетеродифузії також є нелінійною. Проте структура цих доданків відрізняється від асимптот потоків домішки, знайдених в рамках простіших моделей масоперенесення у п.п.3.2.2, 3.3.2 і 3.4.2.

4.3. Кількість розпадних речовин, що пройшли через нижню границю шару за час τ_*

Знайдемо кількість розпадної домішкової речовини $Q_0^{(i)}(\tau)$, що за час τ_* пройшла через одиницю площі поверхні $\xi = \xi_0$ - нижню поверхню шару, за моделлю гетеродифузії двома шляхами, використовуючи формулу (3.27). Підставимо в дане співвідношення відповідні вирази для сумарних потоків маси (4.33) та проінтегруємо. У результаті отримаємо

для $i = 0$

$$\begin{aligned} \frac{\xi_0 Q_0^{(0)}}{c_0 d_0^{e(0)}} = & \left(R - B\pi \left[\frac{R_1}{\sin(\pi x_1)} - \frac{R_2}{\sin(\pi x_2)} \right] \right) \tau_* + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{s_1 - s_2} \times \\ & \times \left[\left(\bar{p}s_1 + \bar{p}_1 + \frac{\bar{p}_2}{s_1} \right) (1 - e^{s_1 \tau_*}) - \left(\bar{p}s_2 + \bar{p}_1 + \frac{\bar{p}_2}{s_2} \right) (1 - e^{s_2 \tau_*}) \right]; \end{aligned} \quad (4.34a)$$

для $i = 1, \dots, N-1$

$$\begin{aligned} \frac{Q_0^{(i)}}{\sqrt{k_2^{(0)} D_{11}^{(0)}}} = & \int_0^{\tau_*} \int_0^{\tau} \int_0^{\xi_0} \left\{ a_{\lambda_1}^{(i-1)} \tilde{d}_1^{(i)} \frac{\partial G_1^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_0} c_1^{(i-1)}(\xi', \tau') + \right. \\ & \left. + a_{\lambda_2}^{e(i-1)} \tilde{d}_2^{(i)} \frac{\partial G_2^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_0} c_2^{e(i-1)}(\xi', \tau') \right\} d\xi' d\tau' d\tau; \end{aligned} \quad (4.34б)$$

для $i = N$

$$\begin{aligned} \frac{Q_0^{(N)}}{\sqrt{k_2^{(0)} D_{11}^{(0)}}} = & \int_0^{\tau_*} \int_0^{\tau} \int_0^{\xi_0} \left\{ \tilde{d}_1^{(N)} \frac{\partial G_1^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_*} \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda_1}^{(iN)} c_1^{(i)}(\xi', \tau') + \right. \\ & \left. + \tilde{d}_2^{(N)} \frac{\partial G_2^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_*} \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda_2}^{e(iN)} c_2^{e(i)}(\xi', \tau') \right\} d\xi' d\tau' d\tau. \end{aligned} \quad (4.34в)$$

Зауважимо, що як і для попередніх модельних випадків для $i = \overline{1, N}$ вирази для потоків і кількості речовини, що за певний проміжок часу пройшла через шар, отримані в інтегральній формі [237]. Проте у порівнянні з простішими модельними варіантами зазначимо, що наявність двох шляхів міграції явно відображена у достатньо загальних формулах (4.34б) і (4.34в) для функцій $Q_0^{(i)}(\tau_*)$ (як і у моделі невзаємодіючих потоків та на відміну від інших часткових моделей).

4.4. Схема модулів комплексу програм пакету GeterPas для моделі гетеродифузії двома шляхами. Числовий аналіз

4.4.1. Архітектура комплексу модулів програм для моделі гетеродифузії

На основі формул (4.16), (4.17), (4.18), а також розв’язків задач (4.27), (4.30) для концентрацій розпадних домішкових компонент, а також (4.32) і (4.33) для відповідних потоків маси і (4.34) для кількості речовин, що пройшли через нижню границю шару за певний проміжок часу, розроблений пакет програм для комп’ютерного моделювання процесів гетеродифузії двома шляхами також увійшов до комплексу програм GeterPas [125, 149, 158]. Архітектуру комплексу модулів програм для моделювання процесів масоперенесення за каскадного розпаду частинок для моделі гетеродифузії двома шляхами наведено на рис. 4.3.

Алгоритми модуля програми для розрахунку концентрацій розпадних домішок співпадає з алгоритмами для моделей невзаємодіючих потоків та ефективною дифузії у тілі з пастками (рис. 3.20). Схема модулів для обчислення дифузійних потоків та кількості речовини, що пройшла через шар [127], подано на рис. 4.4 та рис. 4.5.



Рис.4.3. Архітектура комплексу модулів програм пакету GeterPas моделі гетеродифузії двома шляхами

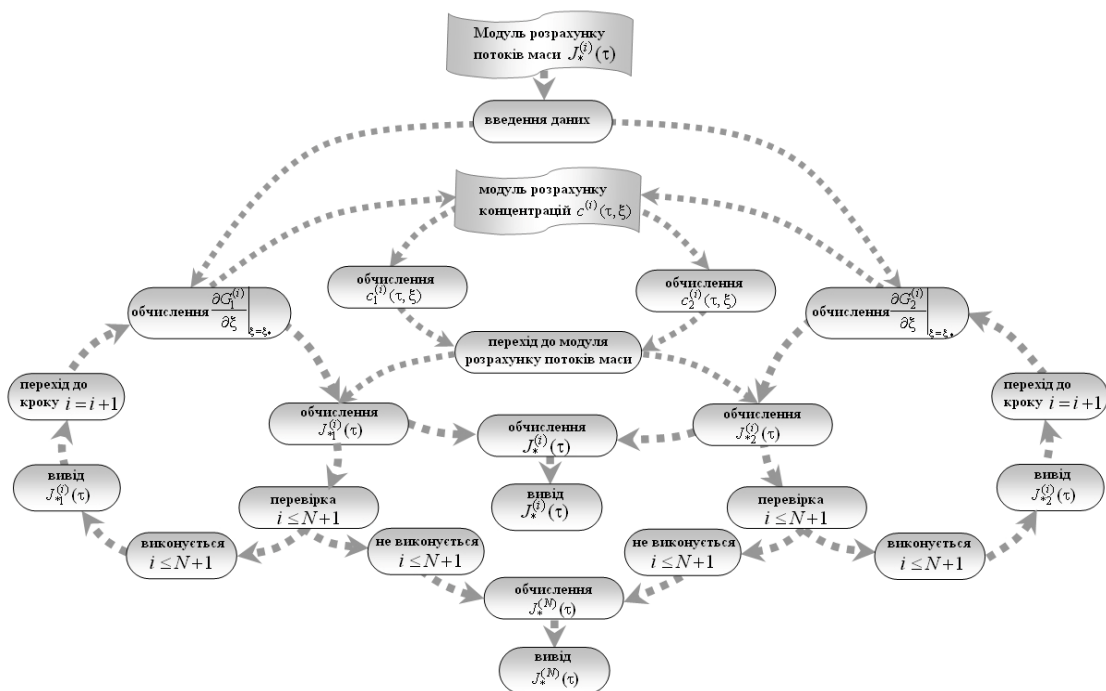


Рис.4.4. Схема алгоритму модуля пакету для розрахунку дифузійного потоку домішкових речовин за каскадного розпаду частинок для моделі гетеродифузії двома шляхами

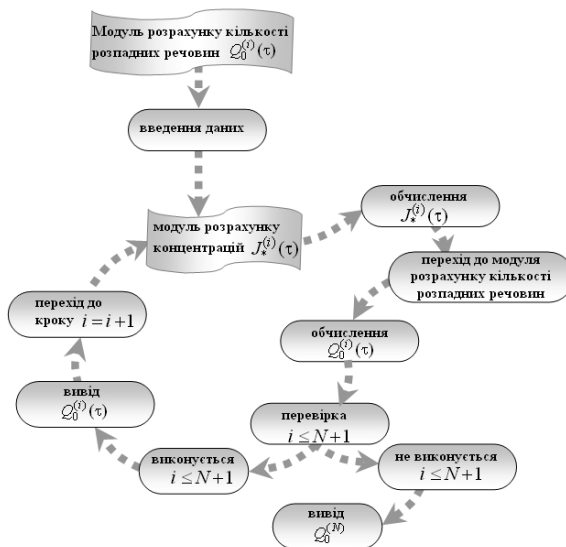


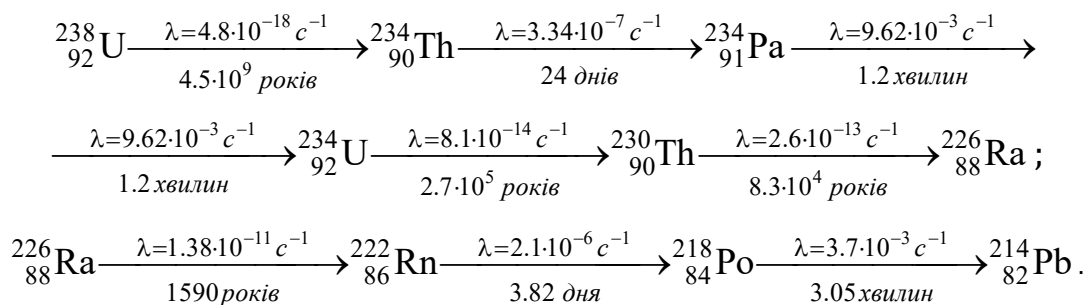
Рис.4.5. Схема алгоритму модуля пакету для розрахунку кількості розпадних речовин, що пройшли через нижню границю шару за заданий час для моделі гетеродифузії двома шляхами

При цьому зауважимо, що програмні модулі для потоків маси для моделі гетеродифузії на відміну від попередніх модельних варіантів містить по два циклічні процеси і на кожному етапі взаємодіють з модулем для концентрації на попередньому етапі розпаду.

4.4.2. Числовий експеримент для встановлення закономірностей концентрації частинок на нульовому етапі розпаду

Числовий аналіз концентрацій домішкової речовини за каскадного розпаду частинок для моделі гетеродифузії двома шляхами проведено для таких базових значень числового дослідження $\alpha = 0.25$; $d^{e(0)} = 0.1$, $d^{e(1)} = 0.3$, $d_0^{(1)} = 0.2$, $d^{e(1)} = 0.2$, $d_0^{(1)} = 0.1$; $a_{11}^{(0)} = 4$, $a_{12}^{(0)} = 1$, $a_{21}^{(0)} = 2.2$, $a_{22}^{(0)} = 2.6$, $a_{11}^{(1)} = 2$, $a_{12}^{(1)} = 1$, $a_{21}^{(1)} = 0.5$, $a_{22}^{(1)} = 1.2$; $a_{\lambda 1}^{(0)} = 0.5$, $a_{\lambda 2}^{(0)} = 0.5$, $a_{\lambda 1}^{(1)} = 0.3$, $a_{\lambda 2}^{(1)} = 0.3$; $\tau = 0.8$ [124].

При цьому при проведенні обчислень ми прийняли, що перехресні коефіцієнти дифузії завжди рівні нулю, тобто $d_1^{e(i)} = d_2^{e(i)} = 0$, $i = \overline{0, N}$. Оскільки ми при побудові моделей і постановках крайових задач розглядали стан домішкових речовин $j = 1$ як швидкий шлях дифузії (для ґрунтів – водний поровий розчин), то для коефіцієнтів дифузії має виконуватись умова $d_0^{(i)} > d^{e(i)}$, $\forall i = \overline{0, N}$. Коефіцієнти $a_{kl}^{(i)}$ визначають зміну станів частинок та зміну етапу каскадного розпаду (3.3). При цьому стосовно коефіцієнтів сорбції ми обмежимося випадком, коли процеси сорбції є інтенсивнішими ніж десорбції, тобто $\bar{k}_1^{(i)} > \bar{k}_2^{e(i)}$, $\forall i = \overline{0, N}$. Зазначимо, що така ситуація є характерною, наприклад, для ґрунтів [105], проте відомі експериментальні дані і для протилежного випадку [121, 175], зокрема для гетеродифузії домішки у кристалах. В свою чергу коефіцієнти $\lambda_j^{(i)}$ – сталі розпаду, які характеризують ймовірність (радіоактивного) розпаду за одиницю часу і визначаються формулою $\lambda = \ln 2 / T_{1/2}$, де $T_{1/2}$ – період піврозпаду [167]. При цьому молекули (атоми) речовини, що виникають у складних ланцюгах розпаду можуть мати періоди піврозпаду в дуже широкій області значень: від $3 \cdot 10^{-7} c$ для ^{212}Pa до $1.4 \cdot 10^{10}$ років для ^{232}Th у радіоактивному розпаді. Як приклад [114] наведемо каскадні розпади з відомими коефіцієнтами інтенсивності розпаду:



Тоді, і коефіцієнти інтенсивності процесів типу сорбції-десорбції, і коефіцієнти інтенсивності розпаду можуть вносити превалюючий вклад у коефіцієнти $a_{kl}^{(i)}$, або бути співвимірними. У той же час оскільки частинки на кожному кроці розпадаються з однаковою інтенсивністю незалежно від їхнього стану, тобто $\lambda_1^{(i)} = \lambda_2^{(i)}$, то для коефіцієнтів $a_{kl}^{(i)}$ зберігається обмеження, накладене на коефіцієнти інтенсивності сорбції, тобто $a_{21}^{(i)} > a_{12}^{e(i)}$, $\forall i = 0, N$.

Розподіли концентрацій на швидкому $c_1^{(0)}(\xi, \tau)$, на повільному $c_2^{e(0)}(\xi, \tau)$ шляхах міграції та їх сумарної концентрації $c^{(0)}(\xi, \tau)$ подано на рис. 4.6 у різні моменти безрозмірного часу $\tau = 0.8, 2, 20$ (криві 1-3 відповідно) для наступних значень коефіцієнтів поверхневого розподілу домішкових частинок між станами $\alpha = 0.25$ (рис.а), $\alpha = 0.5$ (рис.б), $\alpha = 0.75$ (рис.с) та $\alpha = 0.91$ (рис.д). Тут штриховими лініями позначено концентрацію на швидкому шляху (криві а), штрих-пунктирними лініями - концентрацію на повільному шляху (криві б), а суцільними – сумарну концентрацію домішкових частинок.

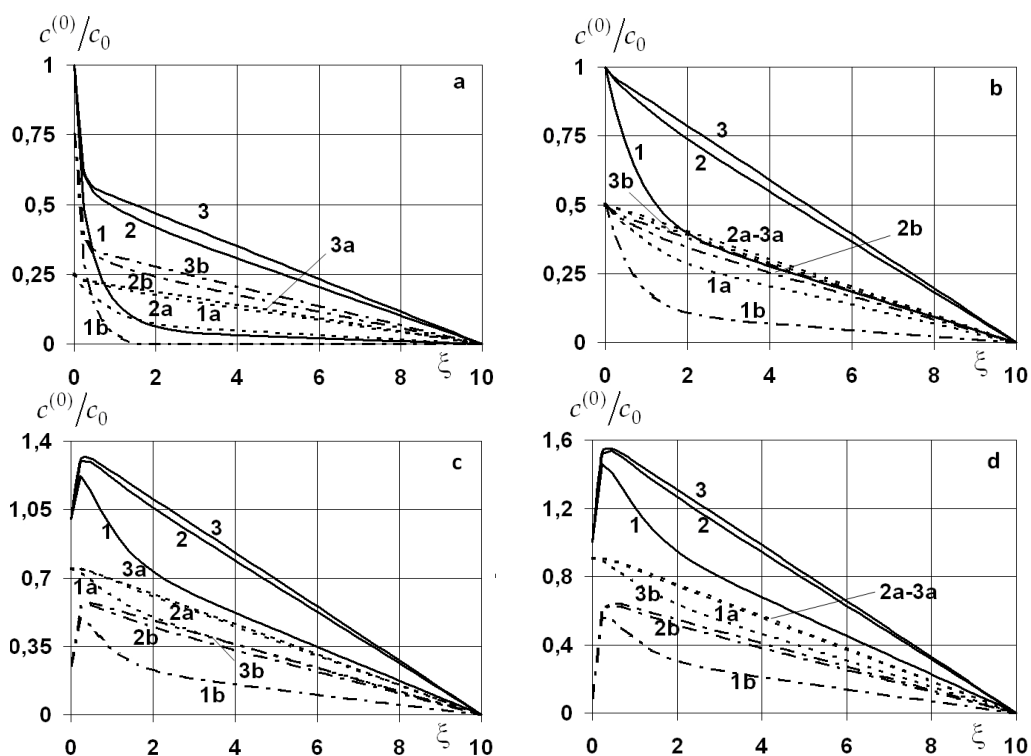


Рис.4.6. Розподіли концентрацій домішкової речовини $K_1^{(0)}$ на швидкому, $K_2^{(0)}$ на повільному шляхах міграції та їхня сума $K^{(0)}$ на нульовому етапі каскадного розпаду у різні моменти часу для $\alpha = 0.25$ (рис.а), $\alpha = 0.5$ (рис.б), $\alpha = 0.75$ (рис.с), $\alpha = 0.91$ (рис.д)

На рис. 4.7 наведено розподіли сумарної концентрації розпадної домішкової речовини $\mathbf{K}^{(0)}$ у різні моменти безрозмірного часу $\tau = 0.6; 0.8; 1.2; 2; 20$ (криві 1-5 відповідно). Тут і надалі рис.а наведено для малих ($\alpha = 0.25$), а рис.б – для великих ($\alpha = 0.91$) значень коефіцієнта α , який визначає частку домішкової речовини на нульовому етапі розпаду, що з поверхні тіла $\xi = 0$ потрапила на швидкий шлях дифузії. На рис. 4.8 проілюстровано розподіли сумарної концентрації домішкової речовини $c^{(0)}(\xi, \tau)$ при різних значеннях відношення коефіцієнтів дифузії на повільному і швидкому шляхах $d^{e(0)} = \bar{D}_{22}^{e(0)} / \bar{D}_{11}^{(0)} = 0.01, 0.05, 0.1, 0.25, 0.5, 0.9$ (криві 1-6 відповідно). На рис. 4.9 наведено розподіли сумарної концентрації домішкової речовини $\mathbf{K}^{(0)}$ при різних значеннях параметра $a_{11}^{(0)} = 4, 6, 8, 10, 20$ (криві 1-5 відповідно).

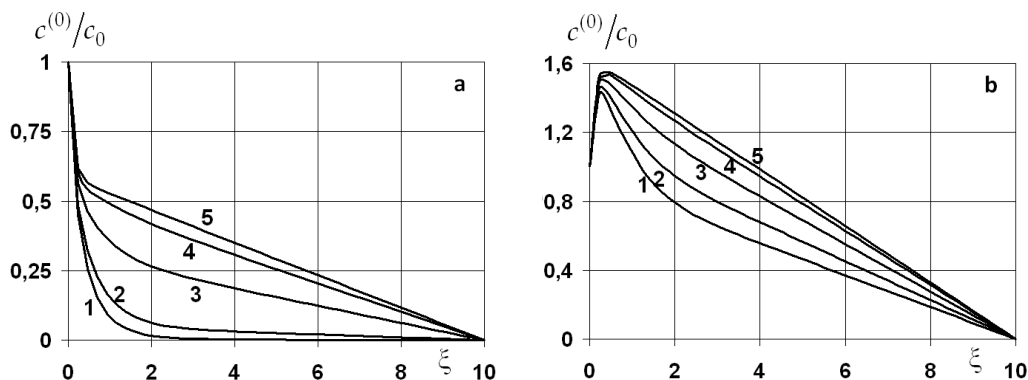


Рис.4.7. Розподіли сумарної концентрації домішкової речовини $\mathbf{K}^{(0)}$ на нульовому етапі каскадного розпаду у різні моменти часу для $\alpha = 0.25$ (рис.а) і $\alpha = 0.91$ (рис.б)

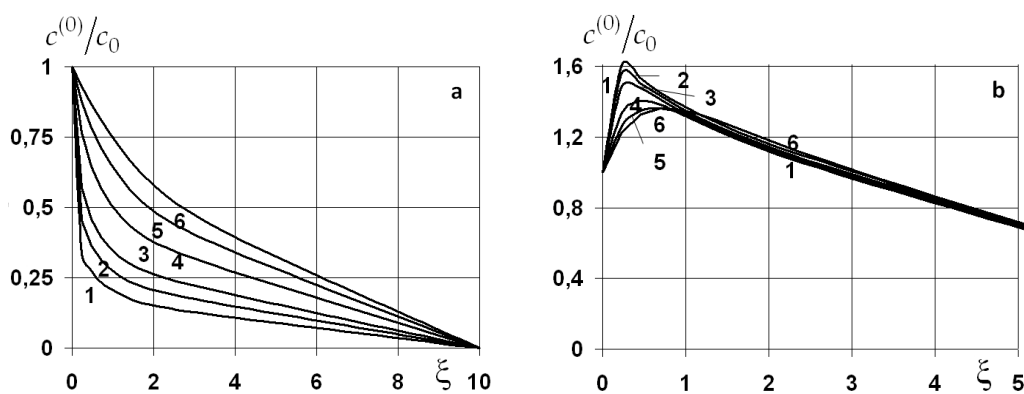


Рис.4.8. Розподіли концентрацій домішкової речовини сума $\mathbf{K}^{(0)}$ на 0-му етапі каскадного розпаду при різних значеннях коефіцієнта $d^{e(0)}$ для $\alpha = 0.25$ (рис.а), $\alpha = 0.91$ (рис.б)

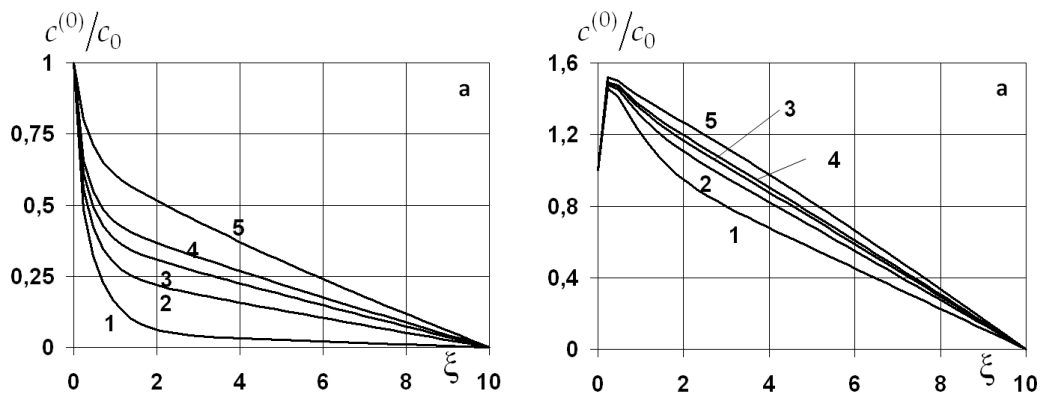


Рис.4.9. Розподіли концентрацій домішкової речовини $K^{(0)}$ на 0-му етапі каскадного розпаду при різних значеннях коефіцієнта $a_{11}^{(0)}$ для $\alpha = 0.25$ (рис.а), та $\alpha = 0.91$ (рис.б)

Зазначимо, що для нульового етапу розпаду коефіцієнт поверхневого розподілу домішкових частинок між станами α суттєво впливає на поведінку і значення як сумарної концентрації домішкової речовини, так і концентрацій на кожному зі шляхів міграції зокрема (рис. 4.6). При цьому для переважного попадання домішкової речовини з поверхні на повільний шлях міграції ($\alpha \leq 0.5$) характерна монотонно спадна поведінка функції сумарної концентрації (рис. 4.6а, б), значення якої з часом зростає на всьому проміжку доки не вийде на усталений режим (криві 3, рис. 4.6а і б). І якщо для $\alpha = 0.5$ поведінка функції $c^{(0)}(\xi, \tau)$ в усталеному режимі близька до лінійної, то для малих α залишається приповерхнева область різкого спадання значень сумарної концентрації. Так, для $\alpha = 0.25$ цей інтервал складає $[0; 0.03\xi_0]$ (рис. 4.6а). Якщо в системі превалує надходження частинок з поверхні на швидкий шлях міграції ($\alpha > 0.5$), то спотерігається характерне приповерхнєве зростання сумарної концентрації (криві 1-3, рис. 4.6с і d). При цьому формування максимуму сумарної концентрації $c^{(0)}(\xi, \tau)$ в приповерхневій області тіла відбувається за рахунок аналогічної поведінки функції концентрації домішкової речовини на повільному шляху міграції $c_2^{e(0)}(\xi, \tau)$ (криві 1б-3б, рис. 4.6с і d). Зазначимо, що зі зростанням коефіцієнта α величина максимуму сумарної концентрації зростає, зокрема для базових значень параметрів задачі збільшення значення від 0.75 до 0.91 приводить до зростання $\max_{\xi \in [0; \xi_0]} c^{(0)}(\xi, \tau)$ на 16% для $\forall \tau > 0$ (рис. 4.7с і d).

Зазначимо, що з часом сумарна концентрація домішки росте у всій області тіла (рис. 4.7) доки не вийде на усталений режим (криві 5, рис. 4.7). При цьому в околі

границі шару, де діє джерело маси, наявна область різкого падіння функції $c^{(0)}(\xi, \tau)$ для малих α ($\xi \in [0; 0.035\xi_0]$, рис. 4.7a) і різкого зростання для великих α ($\xi \in [0; 0.05\xi_0]$, рис. 4.7b). В іншій області тіла для малих часів функція концентрації має суттєво нелінійний характер (криві 1, 2, рис. 4.7), з ростом часу наближаючись до лінійного (криві 4, 5, рис. 4.7), що характерно для усталеного режиму.

Зменшення різниці між коефіцієнтами дифузії на повільному $\bar{D}_{22}^{e(0)}$ та швидкому шляхах міграції $\bar{D}_{11}^{(0)}$ приводить до суттєвого зростання сумарної концентрації розпадних частинок на всьому проміжку для малих α (рис. 4.8a). У той же час для великих α зі зростанням відношення $d^{e(0)}$ на проміжку $\xi \in [0; 0.1\xi_0]$ відбувається зменшення функції концентрації $c^{(0)}(\xi, \tau)$, згладження пікових значень та незначний зсув її максимуму від поверхні тіла (рис. 4.8b). На решті проміжку $\xi \in [0.1\xi_0; \xi_0]$ сумарна концентрація зростає, проте несуттєво (рис. 4.8b). Так для базових значень параметрів задачі максимальна різниця складає 6%. Зазначимо, що зростання коефіцієнта $a_{11}^{(1)}$, який характеризує інтенсивність процесів переходу частинок речовини $\mathbf{K}^{(0)}$ зі швидкого шляху міграції на повільний, призводить до зростання сумарної концентрації в усій області тіла (рис. 4.9). Причому для малих α (рис. 4.9a) таке зростання є набагато більшим, ніж для великих (рис. 4.9b).

4.4.3. Числовий аналіз концентрацій домішкових частинок на першому кроці каскадного розпаду

Проведемо симуляцію концентрації домішкової речовини $\mathbf{K}^{(1)}$, яка утворилася внаслідок розпаду домішкової речовини $\mathbf{K}^{(0)}$, за формулами (4.17). Оскільки вирази для концентрацій $c_1^{(1)}(\xi, \tau)$, $c_2^{(1)}(\xi, \tau)$ пропорційні коефіцієнтам $a_{\lambda 1}^{(0)}$, $a_{\lambda 2}^{(0)}$ (які рівні між собою) спочатку дослідимо вплив цих параметрів на поведінку сумарної концентрації $c^{(1)}(\xi, \tau)$. Для моменту безрозмірного часу $\tau = 0.8$ на рис. 4.10 і для моменту $\tau = 20$ на рис. 4.11 наведено розподіли сумарної концентрації домішкової речовини $\mathbf{K}^{(1)}$ на 1-му етапі каскадного розпаду для різних значень параметра $a_{\lambda 1}^{(0)} = a_{\lambda 2}^{(0)} = 0.1, 0.3, 0.5, 0.7, 1.1$ (криві 1-5 відповідно). Тут і надалі рис.а наведено для малих ($\alpha = 0.25$), а рис.б – для великих ($\alpha = 0.91$) значень коефіцієнта поверхневого розподілу домішкової речовини $\mathbf{K}^{(0)}$ між станами.

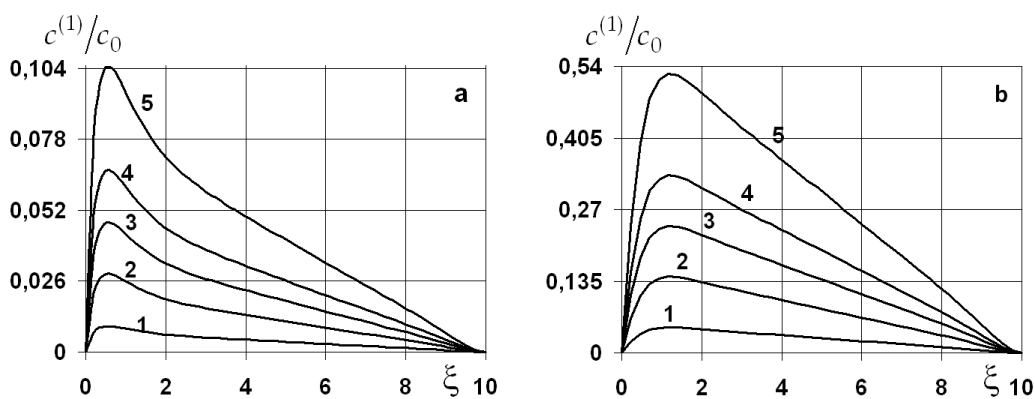


Рис.4.10. Розподіли сумарної концентрації речовини $\mathbf{K}^{(1)}$ на 1-му етапі каскадного розпаду у момент часу $\tau = 0.8$ залежно від параметра $a_{\lambda 1}^{(0)}$ для $\alpha = 0.25$ (рис.а) і $\alpha = 0.91$ (рис.б)

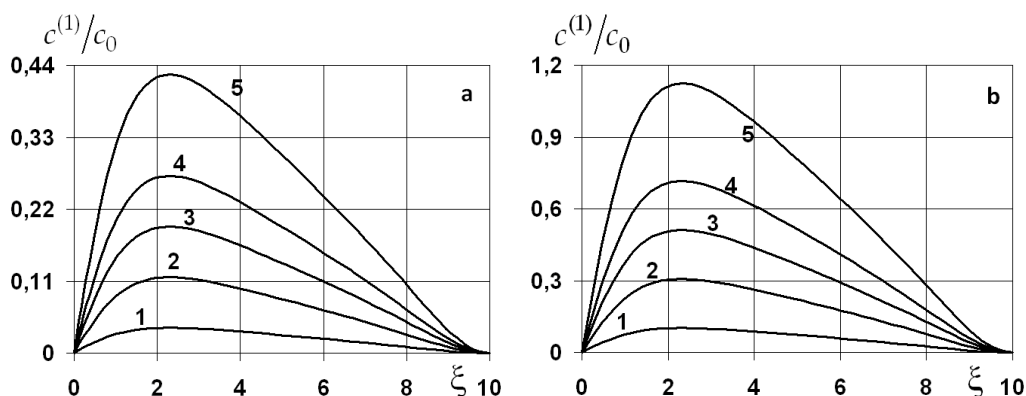


Рис.4.11. Розподіли сумарної концентрації речовини $\mathbf{K}^{(1)}$ на 1-му етапі каскадного розпаду у момент часу $\tau = 20$ залежно від параметра $a_{\lambda 1}^{(0)}$ для $\alpha = 0.25$ (рис.а) і $\alpha = 0.91$ (рис.б)

Зазначимо, що для всіх моментів часу і будь-якого $\alpha \in [0;1]$ збільшення коефіцієнта інтенсивності розпаду $a_{\lambda 1}^{(0)}$ приводить до пропорційного зростання сумарної концентрації в усій області тіла (рис. 4.10, 4.11). Якщо при розрахунках сумарної концентрації вилучити множник $a_{\lambda 1}^{(0)}$, то при значеннях $a_{\lambda 1}^{(0)} = q_1$, $a_{\lambda 1}^{(0)} = q_2$

різниця між відношеннями $\left(\frac{1}{a_{\lambda 1}^{(0)}} c^{(1)}(\xi, \tau) \right) \Big|_{a_{\lambda 1}^{(0)}=q_1} / \left(\frac{1}{a_{\lambda 1}^{(0)}} c^{(1)}(\xi, \tau) \right) \Big|_{a_{\lambda 1}^{(0)}=q_2}$ і $\frac{q_1}{q_2}$ є вкрай

незначною. Наприклад, при $q_1 = 0.3$, $q_2 = 0.7$ (криві 2 і 4 на рис. 4.10, 4.11) така різниця досягає шостої значимої цифри для $\alpha = 0.25$, $\tau = 0.8$ (рис. 4.10а), $\alpha = 0.25$, $\tau = 20$ (рис. 4.11а), $\alpha = 0.91$, $\tau = 20$ (рис. 4.11б) та найбільшої відмінності – у четвертій значимій цифрі ця різниця досягає для $\alpha = 0.91$, $\tau = 0.8$ (рис. 4.10б).

На рис. 4.12 подано залежності концентрацій домішкової речовини $c_1^{(1)}(\xi, \tau)$ на швидкому (криві а, штрихові лінії), $c_2^{e(1)}(\xi, \tau)$ на повільному (криві б, штрих-пунктирні

лінії) шляхах міграції та їхня сума $c^{(1)}(\xi, \tau)$ (суцільні лінії) на першому етапі каскадного розпаду у різні моменти безрозмірного часу $\tau = 0.8, 2, 20$ (криві 1-3 відповідно). Тут і надалі рис.а відповідають малому значенню коефіцієнта поверхневого розподілу домішкових частинок між станами на попередньому (нульовому) етапі розпаду $\alpha = 0.25$, а рис.б – превалюючому попаданню речовини $\mathbf{K}^{(0)}$ з поверхні на швидкий шлях дифузії, а саме $\alpha = 0.91$. На рис. 4.13 наведено розподіли сумарної концентрації розпадних частинок речовини $\mathbf{K}^{(1)}$ у різні моменти безрозмірного часу $\tau = 0.8, 1.2, 1.5, 2, 20, 50, 100$ (криві 1-7 відповідно). Рис. 4.14 ілюструє розподіл сумарної концентрації домішки $\mathbf{K}^{(1)}$ на 1-му етапі каскадного розпаду для різних значень коефіцієнта поверхневого розподілу α речовини $\mathbf{K}^{(0)}$ між швидким та повільним шляхами міграції на нульовому етапі. Тут криві 1-5 відповідають значенням $\alpha = 0.09, 0.25, 0.5, 0.75, 0.91$ у моменти безрозмірного часу $\tau = 0.6$ (рис.а), $\tau = 1$ (рис.б), $\tau = 2$ (рис.с) та $\tau = 50$ (рис.д).

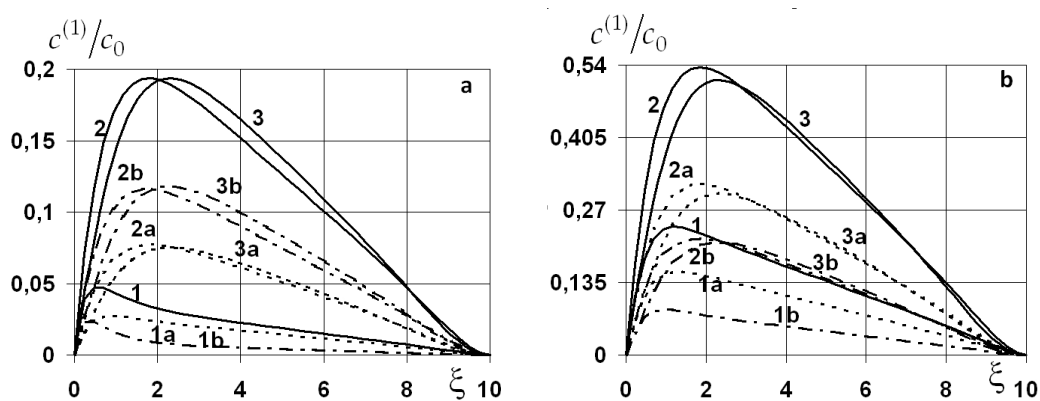


Рис.4.12. Розподіли концентрацій домішкової речовини на швидкому, на повільному шляхах міграції та їхня сума на першому етапі каскадного розпаду у різні моменти часу для $\alpha = 0.25$ (рис.а) і $\alpha = 0.91$ (рис.б)

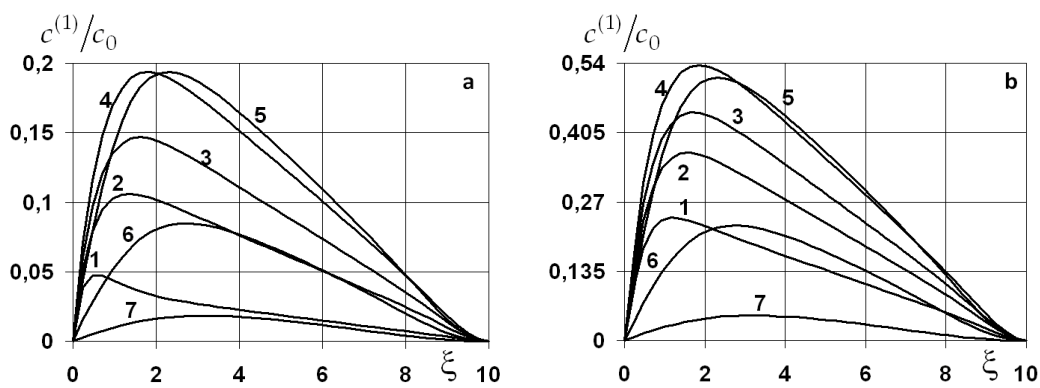


Рис.4.13 Розподіли сумарної концентрації домішкової речовини $\mathbf{K}^{(1)}$ на першому етапі каскадного розпаду у різні моменти часу для $\alpha = 0.25$ (рис.а) і $\alpha = 0.91$ (рис.б)

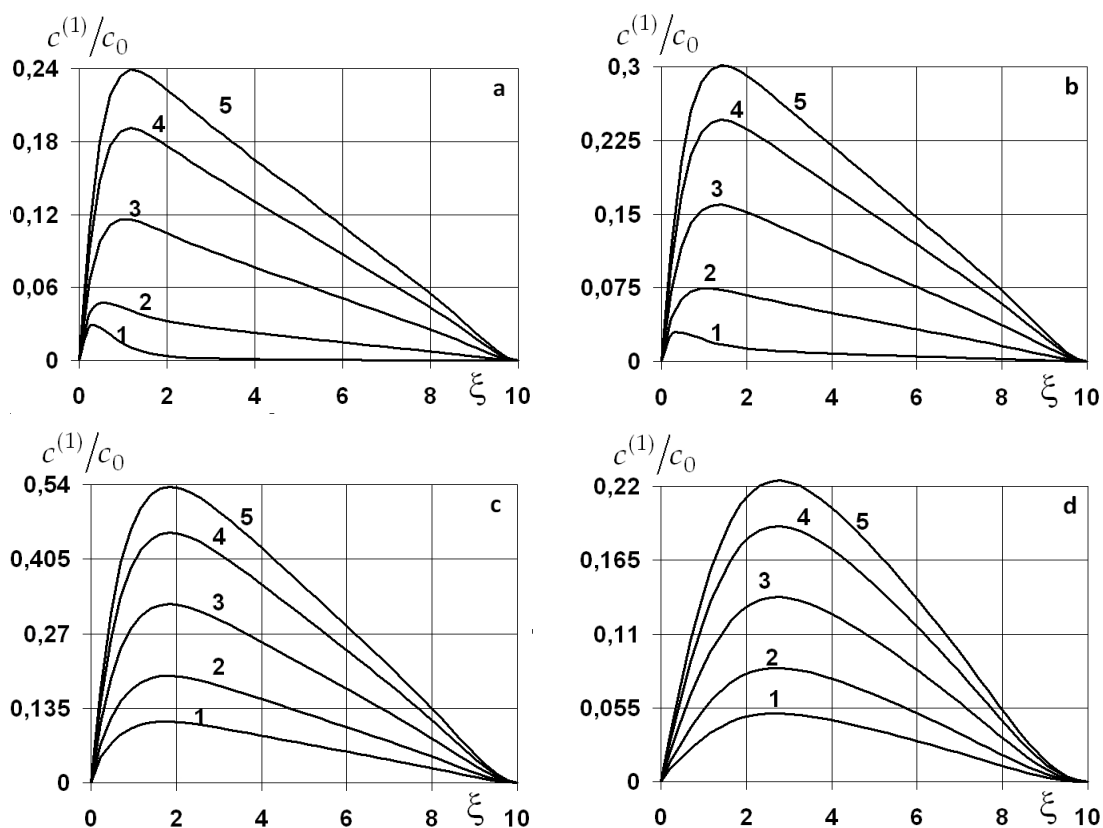


Рис.4.14. Розподіли сумарної концентрації домішки $c^{(1)}(\xi, \tau)$ на першому етапі розпаду при різних значеннях коефіцієнта α для малих (рис.а), середніх (рис.б, с) і великих (рис.д) часів

На рис. 4.15 подано розподіли сумарної концентрації домішкової речовини $c^{(1)}(\xi, \tau)$ на етапі $i=1$ каскадного розпаду при різних значеннях нормованого коефіцієнта дифузії на повільному шляху міграції $d^{e(1)} = \bar{D}_{22}^{e(1)} / \bar{D}_{11}^{(0)} = 0.01, 0.05, 0.1, 0.5, 1.1, 5, 20$ (криві – 1-7 відповідно). Рис. 4.16 ілюструє розподіли сумарної концентрації домішкової речовини $K^{(1)}$ для різних значень параметра $a_{11}^{(1)} = 2, 4, 6, 8, 20$ (криві 1-5). Поведінку сумарної концентрації домішкової речовини $c^{(1)}(\xi, \tau)$ продемонстровано у залежності від величин параметрів $a_{12}^{e(1)} = 0.1, 0.5, 0.8, 1, 2$ (криві 1-5 відповідно) на рис. 4.17; від $a_{21}^{(1)} = 0.1, 0.5, 0.8, 1, 1.5$ (криві 1-5) на рис. 4.18а та від $a_{22}^{e(1)} = 0.5, 0.8, 1, 1.5, 2$ (криві 1-5) на рис. 4.18б при $\alpha = 0.91$. На рис. 4.19 наведено розподіли сумарної концентрації домішкової речовини $c^{(1)}(\xi, \tau)$ на 1-му етапі каскадного розпаду для різних значень параметра $a_{11}^{(0)}$, який визначає інтенсивність сорбційних процесів та розпаду мігруючої речовини на нульовому етапі каскадного розпаду. Тут криві 1-5 відповідають значенням $a_{11}^{(0)} = 4, 6, 8, 10, 20$.

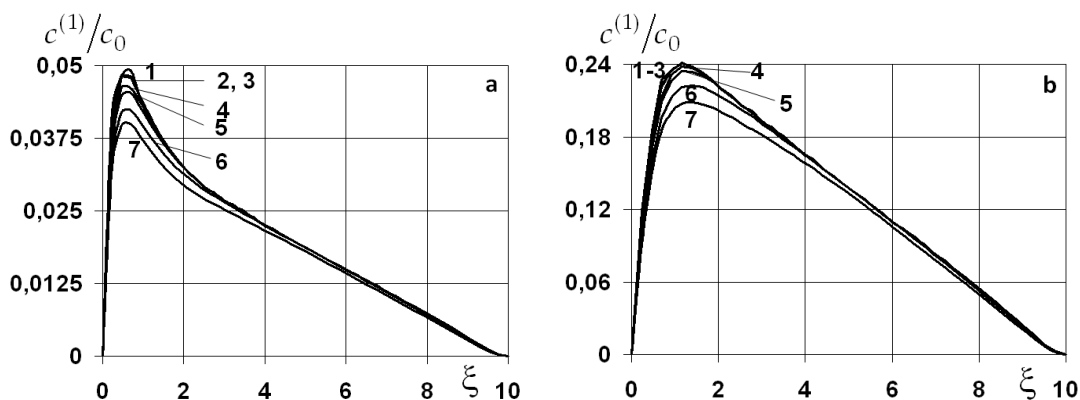


Рис.4.15. Розподіли сумарної концентрації домішки $c^{(1)}(\xi, \tau)$ на першому етапі розпаду при різних значеннях коефіцієнта $d^{e(1)}$ для $\alpha = 0.25$ (рис.а) і $\alpha = 0.91$ (рис.б)

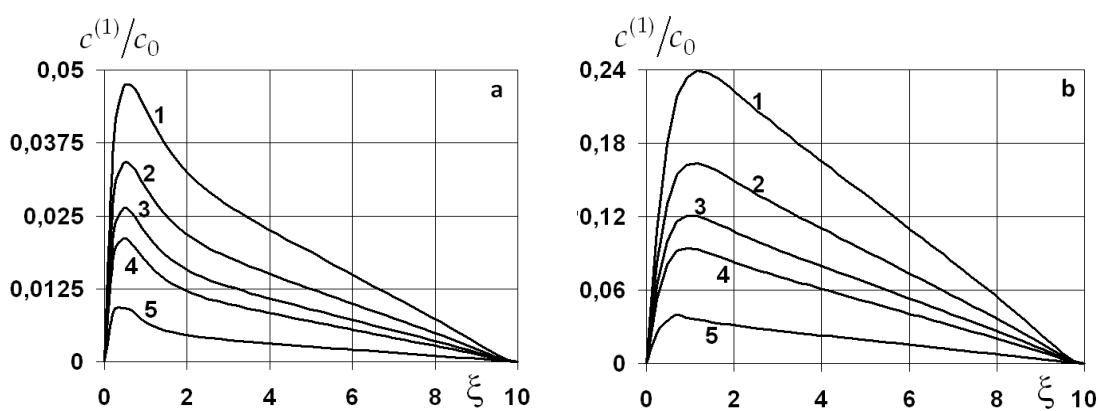


Рис.4.16. Розподіли концентрацій домішкової речовини $K^{(1)}$ на першому етапі каскадного розпаду при різних $a_{11}^{(1)}$ для $\alpha = 0.25$ (рис.а) та $\alpha = 0.91$ (рис.б)

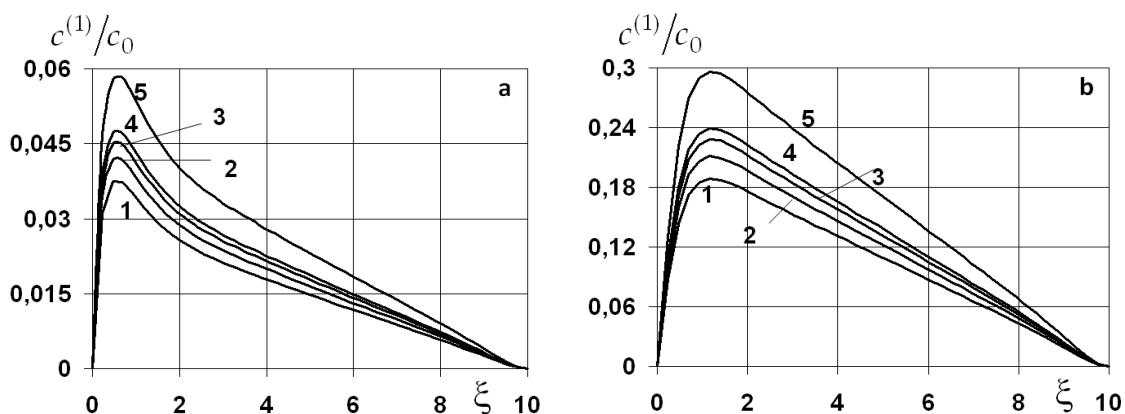


Рис.4.17 Розподіли концентрацій домішкової речовини $K^{(1)}$ на першому етапі каскадного розпаду при різних $a_{12}^{(1)}$ для $\alpha = 0.25$ (рис.а) та $\alpha = 0.91$ (рис.б)

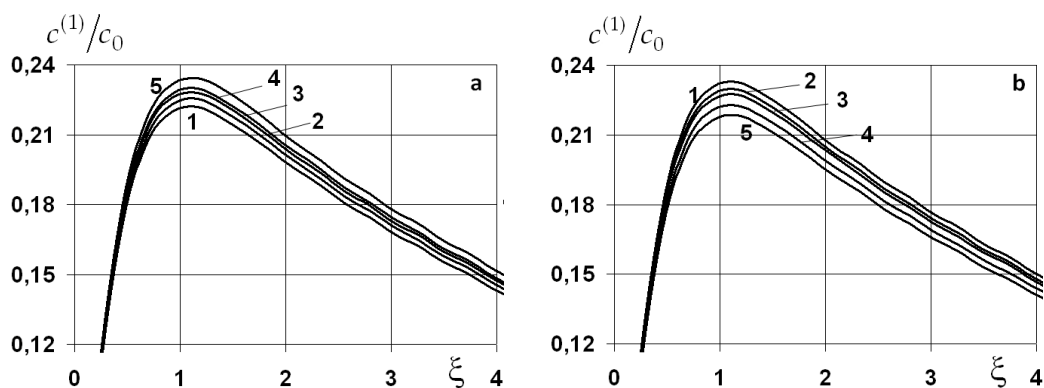


Рис.4.18. Розподіли концентрацій домішкової речовини $\mathbf{K}^{(1)}$ на першому етапі каскадного розпаду при різних $a_{21}^{(1)}$ (рис.а) та $a_{22}^{e(1)}$ (рис.б) для $\alpha = 0.91$

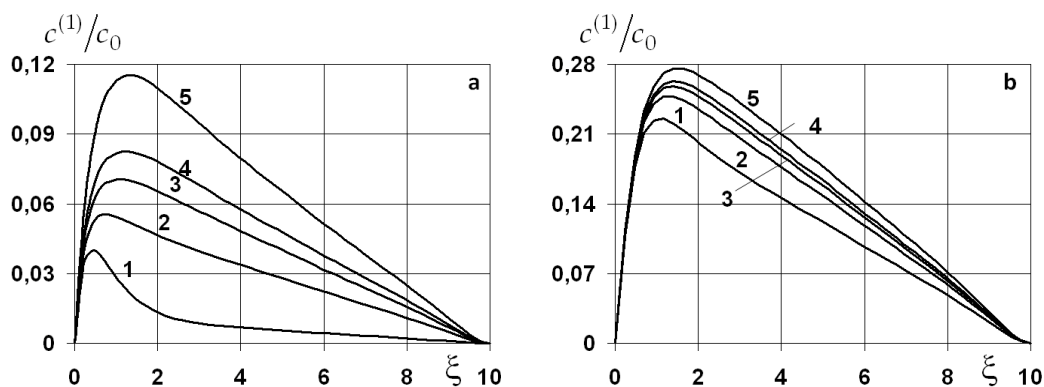


Рис.4.19 Розподіли концентрацій домішкової речовини $\mathbf{K}^{(1)}$ на першому етапі каскадного розпаду при різних $a_{11}^{(0)}$ для $\alpha = 0.25$ (рис.а), та $\alpha = 0.91$ (рис.б)

Зазначимо, що на першому кроці каскадного розпаду речовини, що утворилась внаслідок розпаду домішкової речовини $\mathbf{K}^{(0)}$, джерело якої діє на поверхні $\xi = 0$, сумарна концентрація частинок $\mathbf{K}^{(1)}$ з ростом часу протікання процесу гетеродифузії спочатку зростає, досягаючи максимальних значень у верхній половині тіла, а потім спадає на всьому проміжку (рис. 4.13). При цьому для малих часів характерне приповерхнєве накопичення частинок домішки, максимум якої зростає та зсувається в глиб тіла. Для безрозмірного часу $\tau = 2$ зафіксовано максимальні значення сумарної концентрації $c^{(1)}(\xi, \tau)$, як для малих (рис. 4.13а), так і для великих (рис. 4.13б) значень α . Проте, якщо для великих α сумарна концентрація, досягнувши максимуму, зразу ж починає спадати (криві 4, 5, рис. 4.13б), то для малих α $\max_{\xi \in [0; \xi_0]} c^{(1)}(\xi, \tau)$ тримається в околі максимально досяжних значень ще деякий час (криві 4, 5, рис. 4.13а).

Для малих значень коефіцієнта поверхневого розподілу домішки на нульовому етапі сумарна концентрація частинок приблизно вдвічі менша за концентрацію для

великих значень α (рис. 4.12a і b). При цьому поведінка сумарної концентрації, концентрацій домішки на швидкому та повільному шляхах залишається тією самою при зміні параметра α . Зазначимо, що для малих значень коефіцієнта поверхневого розподілу домішки на нульовому етапі більший (у 1.5 разів) вклад у сумарну концентрацію частинок на першому кроці вносить концентрація домішки, що мігрує на повільному шляху для середніх та великих часів протікання процесу (криві 2, 3, рис. 4.12a). У той же час для великих α наявна протилежна ситуація – більший вклад вносить концентрація розпадних частинок на швидкому шляху незалежно від часу протікання процесу (криві 1-3, рис. 4.12b). Для малих значень α і малих часів концентрації в обох станах вносять сумірний вклад у функцію $c^{(1)}(\xi, \tau)$ (криві 1, рис. 4.12a).

На першому етапі каскадного розпаду, на відміну від нульового етапу, зміна параметра α впливає лише на значення сумарної концентрації домішки $\mathbf{K}^{(1)}$ (рис. 4.14) для $\forall \tau$. Проте з ростом α від 0.09 до 0.91 значення сумарної концентрації $c^{(1)}(\xi, \tau)$ зростають на порядок (рис. 4.14). При цьому чим менше α тим ближче до поверхні концентруються частинки $\mathbf{K}^{(1)}$ (крива 1, рис. 4.14a). Зі збільшенням коефіцієнта α максимум функції сумарної концентрації суттєво зростає і незначно зсувається вглиб тіла (рис. 4.14), зокрема, для часів $\tau = 0.6$ цей зсув відбувається від точки $\xi_{\max} = 0.023\xi_0$ до $\xi_{\max} = 0.116\xi_0$. Проте для великих часів (рис. 4.14c і d) максимальна різниця між значеннями функції $c^{(1)}(\xi, \tau)$ для $\alpha = 0.09$ і $\alpha = 0.91$ досягається ближче до середини тіла, де значення сумарної концентрації зростають у 4.3 рази при рості параметра α .

Щодо коефіцієнтів дифузії зауважимо, що коефіцієнт $d_0^{(1)}$ практично не впливає на функцію $c^{(1)}(\xi, \tau)$ (при варіюванні коефіцієнта $d_0^{(1)}$ у широких межах величина сумарної концентрації змінюється у п'ятій значимій цифрі). Зміна коефіцієнта $d^{e(1)}$ впливає лише на значення сумарної концентрації домішкової речовини на першому кроці розпаду, не змінюючи її поведінки. При цьому досліджувались випадки, коли значення цього коефіцієнта є як меншими (криві 1-4, рис. 4.15), так і більшими (криві 5-7, рис. 4.15) ніж аналогічний коефіцієнт дифузії речовини $\mathbf{K}^{(0)}$ на нульовому кроці розпаду на повільному шляху міграції. Зазначимо,

що збільшення коефіцієнта $d^{e(1)}$ призводить до зменшення сумарної концентрації $c^{(1)}(\xi, \tau)$ на всьому проміжку, причому при зміні цього параметра від 0.01 до 20 максимум функції концентрації зменшується на 23%.

Коефіцієнти $a_{kl}^{(1)}$, які визначають інтенсивність процесів переходу частинок $\mathbf{K}^{(1)}$ між станами та інтенсивність розпаду домішкової речовини на першому етапі каскадного розпаду, впливають лише на значення сумарної концентрації $c^{(1)}(\xi, \tau)$ (рис. 4.16-4.18). Так збільшення параметра $a_{11}^{(1)}$ на порядок приводить до зменшення сумарної концентрації в 4.5 разів для малих значень коефіцієнта поверхневого розподілу α (рис. 4.16a) і в 6 разів для великих значень α (рис. 4.16b). Зростання коефіцієнтів $a_{12}^{e(1)}$ і $a_{21}^{(1)}$ веде до збільшення сумарної концентрації $c^{(1)}(\xi, \tau)$ в тілі (рис. 4.17, 4.18a). При цьому зростання параметра $a_{12}^{e(1)}$ на порядок збільшує максимум $c^{(1)}(\xi, \tau)$ у 1.5-1.6 разів як для малих так і для великих α (рис. 4.17a, b). В той же час для великих α зі зростанням коефіцієнта $a_{21}^{(1)}$ на порядок максимум сумарної концентрації незначно збільшується до 6% (рис. 4.18a). Зміна на порядок коефіцієнта $a_{22}^{e(1)}$ при $\alpha = 0.91$ також змінює максимум функції $c^{(1)}(\xi, \tau)$ до 6%, проте сумарна концентрація зменшується (рис. 4.18b). Для малих значень α числові значення сумарної концентрації $c^{(1)}(\xi, \tau)$ змінюються несуттєво (до 2%) при зміні на порядок як коефіцієнта $a_{21}^{(1)}$, так і коефіцієнта $a_{22}^{e(1)}$.

Зауважимо, що на відміну від коефіцієнтів $a_{kl}^{(1)}$, які не сильно впливають на значення функції $c^{(1)}(\xi, \tau)$, параметр $a_{11}^{(0)}$, який визначає інтенсивність процесів переходу частинок $\mathbf{K}^{(0)}$ між станами та інтенсивність розпаду домішкової речовини на нульовому етапі каскадного розпаду, суттєво впливає на сумарну концентрацію $c^{(1)}(\xi, \tau)$ на етапі $i = 1$ (рис. 4.19). Для малих значень α з ростом коефіцієнта $a_{11}^{(0)}$ у 5 разів сумарна концентрація зростає на всьому проміжку, причому в середині тіла - до 6 разів. Для малих значень $a_{11}^{(0)}$ при $\alpha = 0.25$ спостерігається приповерхнева концентрація частинок $\mathbf{K}^{(1)}$ (крива 1, рис. 4.19a), тоді як для більших значень $\max_{\xi \in [0; \xi_0]} c^{(1)}(\xi, \tau)$ зростає, зсувається вглиб тіла і спадання функції стає близьким до

лінійного (криві 3-5, рис. 4.19a). Зазначимо, що для великих значень α при базових значеннях параметрів задачі інтервал можливих значень $\max_{\xi \in [0; \xi_0]} c^{(1)}(\xi, \tau)$ досягає 22% на інтервалі $\xi_{\max} \in [0.11\xi_0; 0.18\xi_0]$, при тому для $\xi > 0.18\xi_0$ різниця між значеннями функції $c^{(1)}(\xi, \tau)$ збільшується і досягає 30% (рис. 4.19b).

4.4.4. Числовий аналіз концентрацій домішкової речовини на другому кроці каскадного розпаду

В цьому пункті проілюструємо та проаналізуємо характерні розподіли концентрацій домішкової речовини на другому етапі каскадного розпаду, тобто частинок, які утворилися внаслідок ланцюгу з двох (хімічних або ядерних) реакцій [31]. На рис. 4.20 подано залежності концентрацій домішкової речовини $K_1^{(2)}$ на швидкому (криві а, штрихові лінії), $K_2^{(2)}$ на повільному шляхах міграції (криві б, штрих-пунктирні лінії) та їхня сума $K^{(2)}$ (суцільні лінії) на другому етапі каскадного розпаду в різні моменти безрозмірного часу $\tau = 0,8; 2; 20, 50$ (криві 1-4 відповідно) для наступних значень коефіцієнтів поверхневого розподілу домішкових частинок $K^{(0)}$ між станами $\alpha = 0.25$ (рис.а) та $\alpha = 0.91$ (рис.б). На рис. 4.21 наведено розподіли сумарної концентрації домішкової речовини $K^{(2)}$, що утворилась внаслідок розпаду речовини $K^{(1)}$, у різні моменти безрозмірного часу $\tau = 0.8; 1.2; 2; 20; 30; 40; 100$ (криві 1-7) для малих ($\alpha = 0.25$, рис. 4.21a) та великих ($\alpha = 0.91$ рис. 4.21b) значень коефіцієнта α .

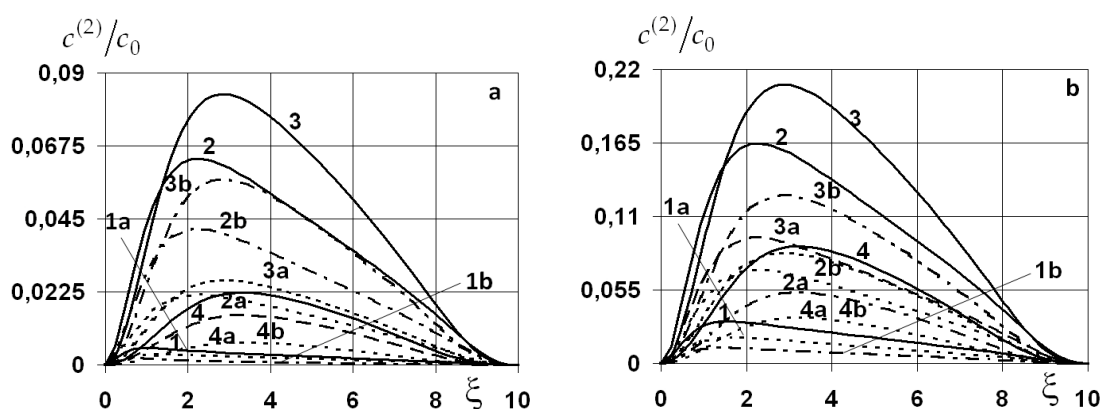


Рис.4.20 Розподіли концентрацій домішкової речовини на швидкому $K_1^{(2)}$, на повільному $K_2^{(2)}$ шляхах міграції та їхня сума $K^{(2)}$ на другому етапі каскадного розпаду у різні моменти часу для $\alpha = 0.25$ (рис.а) і $\alpha = 0.91$ (рис.б)

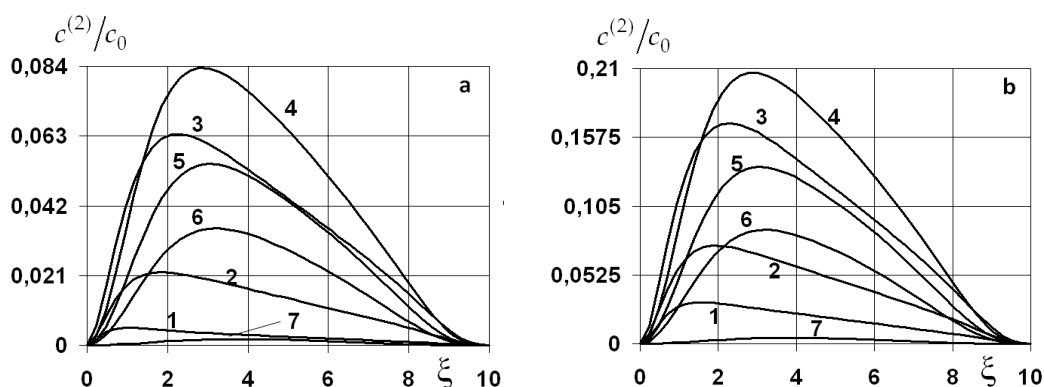


Рис.4.21 Розподіли сумарної концентрації домішкової речовини $\mathbf{K}^{(2)}$ на другому етапі каскадного розпаду у різні моменти часу для $\alpha = 0.25$ (рис.а) і $\alpha = 0.91$ (рис.б)

Зазначимо, що для малих значень коефіцієнта α , який визначає частку домішкової речовини на нульовому етапі розпаду, що з поверхні тіла $\xi = 0$ потрапила на швидкий шлях дифузії, сумарна концентрація речовини $\mathbf{K}^{(2)}$ на 2 етапі каскадного розпаду приблизно у 2.5 рази менша ніж для великих значень α (рис. 4.20а і б) незалежно від часу протікання процесу. При цьому для малих α вклад концентрацій $c_2^{(2)}(\xi, \tau)$ на повільному шляху міграції значно більший ніж концентрації $c_1^{(2)}(\xi, \tau)$ на швидкому шляху. Так в момент часу $\tau = 20$ $\max_{\xi \in [0; \xi_0]} c_2^{(2)}(\xi, \tau) / \max_{\xi \in [0; \xi_0]} c_1^{(2)}(\xi, \tau) \approx 2$ (криві 3а і 3б на рис. 4.20а). Зазначимо, що така різниця між значеннями концентрацій домішки $\mathbf{K}^{(2)}$ на різних шляхах міграції зберігається і для інших моментів безрозмірного часу. У той же час для великих значень α ситуація дещо інша – спочатку різниця між концентраціями в різних станах зменшується до 3% при $\tau = 20$ (криві 3а і 3б на рис. 4.20б), а потім збільшується до 23% для $\tau = 50$ (криві 4а і 4б на рис. 4.20б) при зменшенні значень концентрацій на обох шляхах міграції. При цьому при зростанні концентрацій ($\tau \in [0; 20]$) функція $c_1^{(2)}(\xi, \tau)$ є більшою ніж $c_2^{(2)}(\xi, \tau)$ на всьому проміжку, а при їхньому спаданні ($\tau > 20$) концентрація на швидкому шляху $\mathbf{K}_1^{(2)}$ завжди є меншою ніж концентрація на повільному шляху міграції $\mathbf{K}_2^{(2)}$ (рис. 4.20б).

Зауважимо, що сумарна концентрація $\mathbf{K}^{(2)}$ на другому етапі розпаду спочатку зростає, а її максимум зсувається в глиб тіла, зокрема, від точки $\xi_{\max} = 0.093\xi_0$ до $\xi_{\max} = 0.28\xi_0$ для малих (рис. 4.21а) так і для великих (рис. 4.21б) значень

коефіцієнта α . Для часів $\tau > 20$ сумарна концентрація домішки $c^{(2)}(\xi, \tau)$ зменшується, проте її максимум продовжує зсуватись в глиб тіла, а саме від точки $\xi_{\max} = 0.28\xi_0$ до точки $\xi_{\max} = 0.372\xi_0$ для моменту $\tau = 100$.

Рис. 4.22 ілюструє розподіл сумарної концентрації домішки $\mathbf{K}^{(2)}$ на 2-му етапі каскадного розпаду для різних значень коефіцієнта поверхневого розподілу α речовини $\mathbf{K}^{(0)}$ між швидким та повільним шляхами міграції. Тут криві 1-5 відповідають значенням $\alpha = 0.09, 0.25, 0.5, 0.75, 0.91$ у моменти безрозмірного часу $\tau = 0.8$ (рис.а), $\tau = 2$ (рис.б), $\tau = 20$ (рис.с), $\tau = 100$ (рис.д).

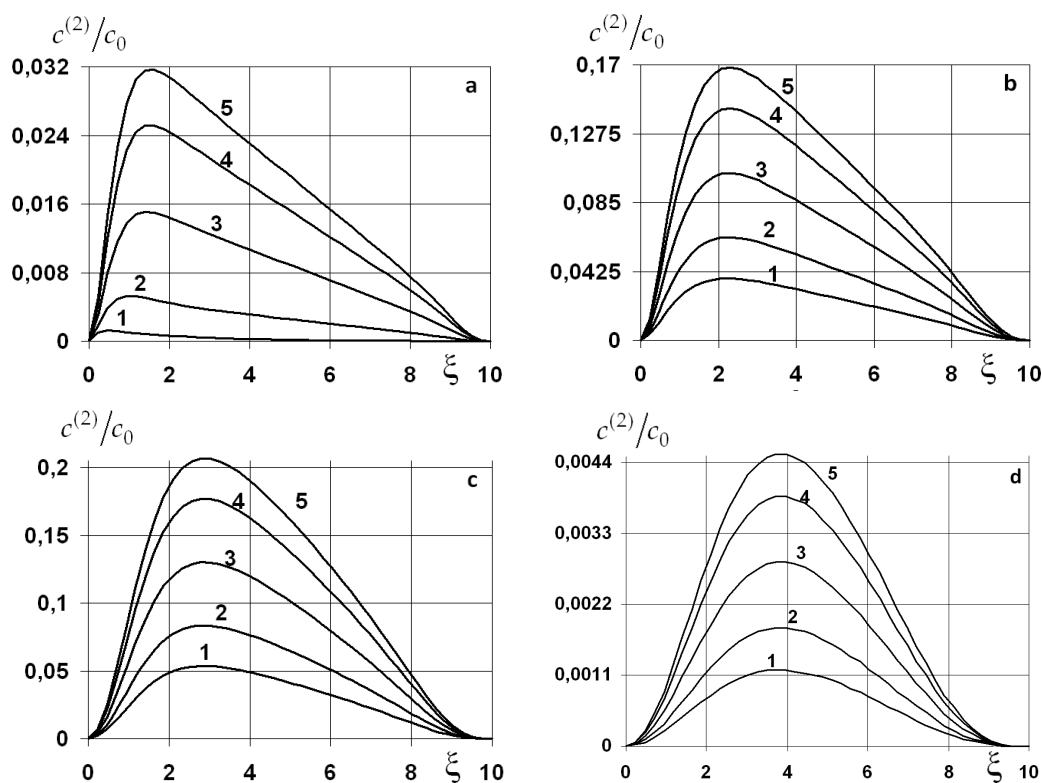


Рис.4.22 Розподіли сумарної концентрації домішки $c^{(2)}(\xi, \tau)$ на першому етапі розпаду при різних значеннях коефіцієнта α для малих (рис.а), середніх (рис.б, с) і великих (рис.д) часів

Зазначимо, що якщо для малих часів накопичення сумарної концентрації $c^{(2)}(\xi, \tau)$ відбувається біля поверхні тіла $\xi = 0$ для $\forall \alpha$ (рис. 4.22а), то з ростом часу протікання процесу гетеродифузії речовина $\mathbf{K}^{(2)}$ у більшій мірі накопичується у середині тіла (рис. 4.22д). На нашу думку, цьому сприяє певний зсув джерела маси від поверхні (рис. 4.13), а також розпад частинок, що накопичились або їхня міграція вглиб шару.

Розподіли сумарної концентрації домішкової речовини $K^{(2)}$ для різних значень параметра інтенсивності сорбції $a_{11}^{(2)} = 2, 4, 6, 8, 12$ продемонстровані на рис. 4.23а, а для коефіцієнта, що визначає інтенсивність процесу десорбції $a_{12}^{e(2)} = 0.1, 0.5, 0.8, 1, 1.6$ (криві 1-5) - на рис. 4.23b при $\alpha = 0.25$ за базових значень решти параметрів задачі.

Рис. 4.24 ілюструє залежність сумарної концентрації частинок речовини $K^{(2)}$ від коефіцієнтів інтенсивності сорбції на попередніх етапах каскадного розпаду. На рис. 4.24а криві 1-5 відповідають значенням параметрів сорбції на нульовому етапі розпаду $a_{11}^{(0)} = 4, 6, 8, 10, 20$, а на рис. 4.24b криві 1-5 описують функцію $c^{(2)}(\xi, \tau)$ для різних значень коефіцієнта сорбції на етапі $i=1$ $a_{11}^{(1)} = 2, 4, 6, 8, 20$ (криві 1-5) при $\alpha = 0.25$.

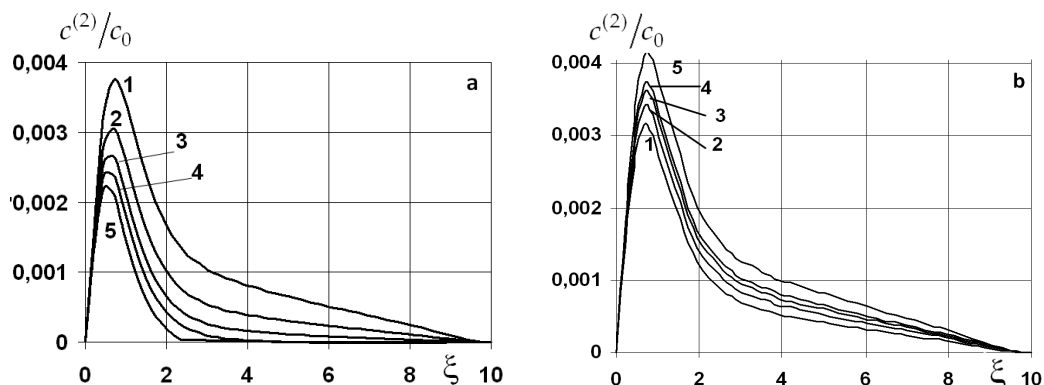


Рис. 4.23 Розподіли концентрацій домішкової речовини $K^{(2)}$ на другому етапі каскадного розпаду при різних $a_{11}^{(2)}$ (рис.а), та $a_{12}^{(2)}$ (рис.б)

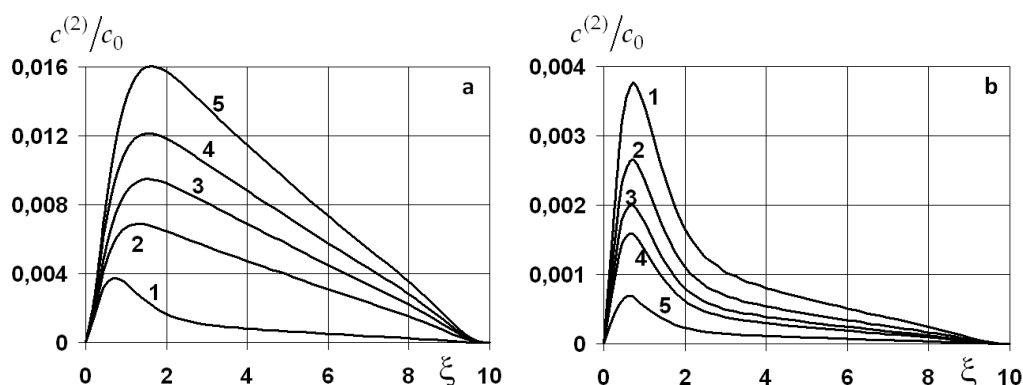


Рис. 4.24 Розподіли концентрацій домішкової речовини $K^{(2)}$ на другому етапі каскадного розпаду при різних $a_{11}^{(0)}$ (рис.а), та $a_{11}^{(1)}$ (рис.б)

Зауважимо, що зі збільшенням інтенсивності сорбції (тобто зростання коефіцієнта $a_{11}^{(2)}$) на другому етапі каскадного розпаду сумарна концентрація

домішкових частинок, утворених внаслідок розпаду на попередньому етапі, зменшується в усій області тіла, причому максимум концентрації незначно зсувається до поверхні $\xi = 0$ (рис. 4.23а). Крім цього $\max_{\xi \in [0; \xi_0]} c^{(2)}(\xi, \tau)$ зменшується у

1.7 разів зі зростанням коефіцієнта $a_{11}^{(2)}$ у 6 разів. Зазначимо, що чим більшим є коефіцієнт сорбції, тим на меншій глибині сумарна концентрація стає нулем в межах точності проведення розрахунків ($\varepsilon = 10^{-6}$), зокрема, $c^{(2)}(\xi, \tau)|_{a_{11}^{(2)}=8} = 0$ в точці $\xi = 0.44\xi_0$ (крива 4, рис. 4.23а), $c^{(2)}(\xi, \tau)|_{a_{11}^{(2)}=12} = 0$ в точці $\xi = 0.39\xi_0$ (крива 5, рис. 4.23а). В той же час збільшення коефіцієнта інтенсивності десорбції (коефіцієнт $a_{12}^{(2)}$) призводить до зростання сумарної концентрації речовини $\mathbf{K}^{(2)}$ в усій області тіла, при цьому поведінка функції $c^{(2)}(\xi, \tau)$ залишається тою самою (рис. 4.23б). Так зі зростанням значення коефіцієнта $a_{12}^{(2)}$ від 0.1 до 1.6 максимум сумарної концентрації збільшується на 31%. При цьому функція $c^{(2)}(\xi, \tau)$ досягає свого максимуму в тій самій точці, зокрема, для даного випадку $\xi_{\max} = 0.078\xi_0$ (рис. 4.23б).

Відзначимо, що коефіцієнти інтенсивності сорбції та десорбції на попередніх етапах каскадного розпаду суттєво впливають на поведінку і значення сумарної концентрації домішки на етапі $i = 2$ (рис. 4.24). Наприклад, при збільшенні коефіцієнта інтенсивності сорбції на нульовому етапі розпаду в 5 разів значення сумарної концентрації $c^{(2)}(\xi, \tau)$ зростає на порядок (рис. 4.24а). При цьому для малих значень коефіцієнта $a_{11}^{(0)}$ спостерігається накопичення сумарної концентрації речовини $\mathbf{K}^{(2)}$ у приповерхневій області тіла (крива 1, рис. 4.24а). При зміні коефіцієнта інтенсивності сорбції на етапі $i = 1$ спостерігається протилежна ситуація – концентрація $c^{(2)}(\xi, \tau)$ зростає в рази при зменшенні на порядок значень коефіцієнта $a_{11}^{(1)}$ (рис. 4.24б). При цьому функція $c^{(2)}(\xi, \tau)$ досягає свого максимуму в тій самій точці, зокрема, $\xi_{\max} = 0.069\xi_0$ для базових значень параметрів задачі (рис. 4.24б).

Ми вважаємо, що ефект (рис. 4.16, рис. 4.23а та рис. 4.24б) пов'язаний зі зростанням сумарних концентрацій домішок, як на першому так і на другому етапах розпаду (речовини $\mathbf{K}^{(1)}$ і $\mathbf{K}^{(2)}$) при збільшенні інтенсивності переходів відповідних

частинок зі швидкого шляху на повільний, викликаний значно більшою потужністю джерела маси на повільному шляху міграції за рахунок інтенсивнішого процесу сорбції ніж десорбції ще на нульовому етапі каскадного розпаду. Тобто частинки речовини $\mathbf{K}^{(0)}$, потрапивши у тіло концентруються на повільному шляху міграції і там розпадаються, генеруючи більшу кількість частинок речовини $\mathbf{K}^{(1)}$ саме на повільному шляху. Крім цього за рахунок інтенсивнішого процесу сорбції і на першому етапі розпаду суттєво збільшується потужність джерела маси для речовини $\mathbf{K}^{(2)}$ у другому стані. Отже інтенсивність процесів сорбції-десорбції впливає на розподіл джерел маси речовин, які утворюються внаслідок процесу розпаду між різними станами (різними шляхами міграції).

4.4.5. Числовий аналіз дифузійних потоків домішкових частинок на першому етапі розпаду

Кількісне дослідження потоків маси проведено на основі формул (4.32), (4.33). Побудований ітераційний процес знаходження дифузійних потоків від етапу $i = 0$ до етапу $i = N - 1$ базується на прямому (безпосередньому) ітераційному процесі для розрахунку концентрації з горизонтальним галуженням на кожному кроці i [103].

На рис. 4.25 проілюстровано поведінку функції потоку $\xi_0 J_{*p}^{(1)}(\tau) / c_0 d_0^{(0)}$ на першому етапі розпаду через різні перерізи тіла $\xi_* = 0.5, 1, 2, 4, 6, 8, 9.5$ (криві 1-7) для $\alpha = 0.25$ (рис. а) та $\alpha = 0.91$ (рис. б).

Рис. 4.26 ілюструє поведінку функції $\xi_0 J_{*p}^{(1)}(\tau) / c_0 d_0^{(0)}$ через переріз $\xi_* = 1$ (рис. 4.26а) та нижню границю тіла (рис. 4.26б) при $d^{(1)} = 0.3$, $d_0^{(1)} = 0.2$ залежно від значень коефіцієнта поверхневого розподілу між станами речовини $\mathbf{K}^{(0)}$. Тут криві 1-5 відповідають значенням $\alpha = 0.1, 0.25, 0.5, 0.75, 0.91$.

На рис. 4.27 показаний вплив приведених коефіцієнтів дифузії у різних станах на розподіли сумарних дифузійних потоків частинок домішки $\mathbf{K}^{(1)}$ через нижню границю шару $\xi = \xi_0$ для значення параметра поверхневого розподілу речовини $\mathbf{K}^{(0)}$ $\alpha = 0.91$. Графіки на рис. 4.27а обчислені для різних значень коефіцієнта дифузії речовини $\mathbf{K}^{(1)}$ на швидкому шляху міграції по відношенню до коефіцієнта дифузії домішки у стані 1 на нульовому етапі, а саме криві 1-7 відповідають $d_0^{(1)} = 0.3, 0.9, 1.5, 2, 4, 8, 10$ при

$d^{(1)} = 0.2$. Рис. 4.27b ілюструє потоки маси $J_{*p}^{(1)}(\tau)$ залежно від значення коефіцієнта дифузії домішки $\mathbf{K}^{(1)}$ на повільному шляху міграції по відношенню до коефіцієнта дифузії на швидкому шляху на 0-му етапі, а саме криві 1-7 відповідають значенням $d^{(1)} = 0.2, 0.9, 1.5, 2, 4, 8, 10$ при $d_0^{(1)} = 10$.

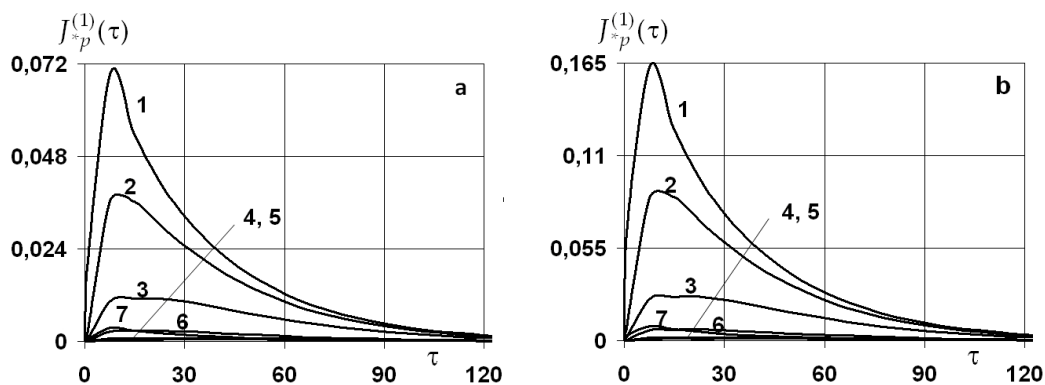


Рис.4.25. Потік маси на першому етапі розпаду через різні перерізи тіла для $\alpha = 0.25$ (рис.а) та $\alpha = 0.91$ (рис.б)

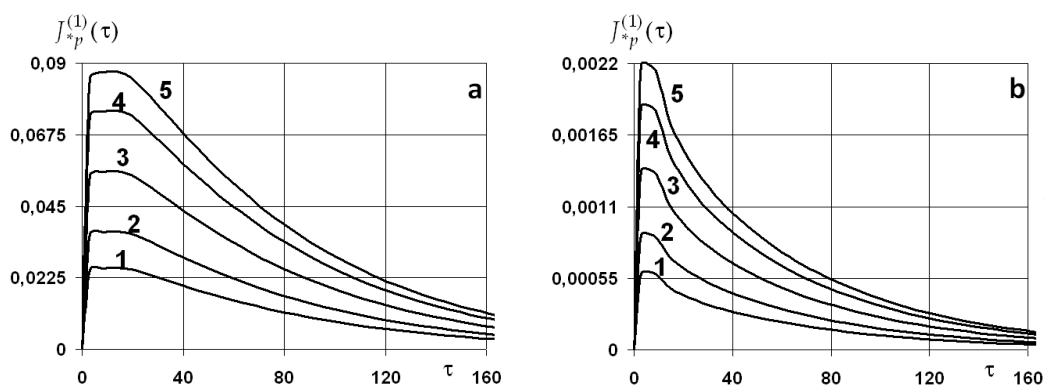


Рис.4.26. Потік маси на першому етапі розпаду через переріз $\xi_* = 1$ (рис.а) та нижню границю тіла (рис.б) для різних значень α

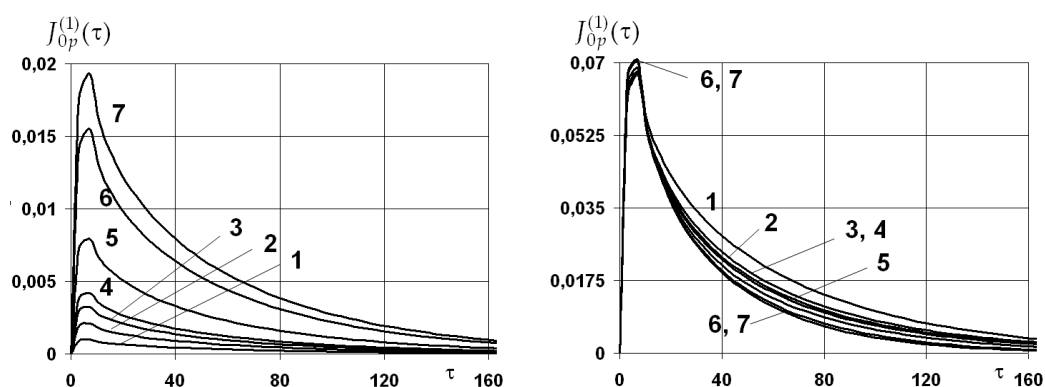


Рис.4.27. Потоки домішки $\mathbf{K}^{(1)}$ для різних значень коефіцієнта дифузії $d_0^{(1)}$ та $d^{(1)}$

Характерною особливістю поведінки сумарних дифузійних потоків домішкової речовини $\mathbf{K}^{(1)}$, що утворилася в наслідок розпаду речовини $\mathbf{K}^{(0)}$, є різке зростан-

ня $J_{*p}^{(1)}(\tau)$ від початку процесу гетеродифузії за каскадного розпаду мігруючих речовин (рис. 4.25), швидке досягнення свого максимуму ($\tau_{\max} \in [8;15]$) і подальше повільне монотонне падіння значень сумарного потоку. Проте для перерізів – поверхонь тіла, через які обчислюється дифузійний потік, біля верхньої границі тіла, наприклад, $\xi = \xi_* = 1$, після проміжку різкого зростання функції наявний проміжок подальшого повільного зростання (рис. 4.26а) для коефіцієнтів дифузії $d^{(1)}$ і $d_0^{(1)}$, на етапі $i = 1$ менших ніж відповідні коефіцієнти на нульовому етапі (рис. 4.26а).

Найінтенсивнішими є потоки домішки $\mathbf{K}^{(1)}$ через перерізи біля поверхні тіла, де діє джерело маси речовини $\mathbf{K}^{(0)}$ (рис. 4.25). З віддаленням поверхні $\xi = \xi_*$ від джерела інтенсивність потоку подає, досягаючи свого мінімуму в околі $\xi_{*\min} \in [3.8;5.5]$, при цьому максимальні значення $J_{*p}^{(1)}(\tau)$ зменшуються на порядки $J_{*p\max}^{(1)}(\tau)|_{\xi=5} / J_{*p\max}^{(1)}(\tau)|_{\xi=0.5} = 0.0073$ для $\alpha = 0.25$ і $J_{*p\max}^{(1)}(\tau)|_{\xi=5} / J_{*p\max}^{(1)}(\tau)|_{\xi=0.5} = 0.0074$ для $\alpha = 0.91$. Подальший зсув поверхні $\xi = \xi_*$ до нижньої границі шару веде до збільшення інтенсивності сумарного потоку домішки, проте максимальні значення $J_{*p}^{(1)}(\tau)$ зростають лише в рази: $J_{*p\max}^{(1)}(\tau)|_{\xi=9.5} / J_{*p\max}^{(1)}(\tau)|_{\xi=5} = 6.9$ для $\alpha = 0.25$ і $J_{*p\max}^{(1)}(\tau)|_{\xi=9.5} / J_{*p\max}^{(1)}(\tau)|_{\xi=5} = 7.1$ для $\alpha = 0.91$.

Для різних значень коефіцієнта α поведінка функції $J_{*p}^{(1)}(\tau)$ не міняється, проте значення потоку зростає в рази на всьому часовому проміжку і для всіх перерізів для великих α (рис. 4.25а і 4.25b, рис. 4.26). Так, $J_{*p\max}^{(1)}(\tau)|_{\alpha=0.91} / J_{*p\max}^{(1)}(\tau)|_{\alpha=0.25} = 2.3$ для $\xi_* = 0.5$ і $J_{*p\max}^{(1)}(\tau)|_{\alpha=0.91} / J_{*p\max}^{(1)}(\tau)|_{\alpha=0.25} = 2.4$ для $\xi_* = 9.5$ при базових значеннях параметрів задачі. Поведінка функції потоку через нижню границю шару речовини $\mathbf{K}^{(1)}$ є аналогічною – чим більше речовини $\mathbf{K}^{(0)}$ з поверхні потрапляє на швидкий шлях дифузії, тим інтенсивніший потік речовини $\mathbf{K}^{(1)}$ через границю $\xi = \xi_0$ (рис. 4.26b). При цьому максимальні значення потоку різняться в рази: $J_{0p\max}^{(1)}(\tau)|_{\alpha=0.91} / J_{0p\max}^{(1)}(\tau)|_{\alpha=0.25} = 2.5$.

Зазначимо, що зміна коефіцієнта дифузії на швидкому шляху міграції на етапі $i = 1$ найбільше впливає для малих часових інтервалів процесу гетеродифузії (рис. 4.27a), в той же час зміна коефіцієнта дифузії на повільному шляху найбільше впливає на функцію $J_{0p}^{(1)}(\tau)$ для середніх часів, зокрема, для базових значень параметрів задачі $\Delta\tau_m = [20; 110]$ (рис. 4.27b). При цьому збільшення коефіцієнта дифузії на швидкому шляху веде до зростання значення сумарного потоку розпадної речовини (рис. 4.27a), а зростання коефіцієнта дифузії на повільному шляху – до зменшення значень $J_{0p}^{(1)}(\tau)$ на проміжку $\Delta\tau_m$ (рис. 4.27b).

4.5 Висновки до Розділу 4

В цьому розділі розглянуто випадок реалізації в термодинамічній системі умови локальної термодинамічної рівноваги між станами мігруючих частинок в адсорбованих шарах води та в об'ємі скелету, що відповідає виконанню умов Теорема 2.8, де процес масоперенесення за каскадного розпаду частинок описується в загальному випадку системами рівнянь (2.81).

Сформульовані зв'язані крайові задачі гетеродифузії, коли концентрація частинок на певному кроці розпаду є джерелом маси розпадної речовини, яка дифундує, на наступному кроці. Розв'язки відповідних крайових задач каскадного типу побудовані за ітераційною процедурою з використанням функцій Гріна. Наведено означення матричної функції Гріна задачі гетеродифузії двома шляхами, отримано відповідні формули, за якими досліджено функції Гріна на певному етапі каскаду. Таке подання розв'язків 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.

На основі отриманих формул розроблений пакет програм для комп'ютерного моделювання процесів гетеродифузії і встановлено вплив вхідних даних на поведінку і значення концентрацій розпадних частинок на швидкому і повільному шляхах міграції та їхньої суми на перших трьох етапах розпаду. Проаналізовано поведінку сумарних дифузійних потоків домішки на першому етапі каскаду.

Показано, що на нульовому етапі каскадного розпаду з часом сумарна

концентрація домішки росте у всій області тіла доки не вийде на усталений режим. При цьому в околі границі шару, де діє джерело маси, наявна область різкого падіння функції концентрації для малих значень коефіцієнта поверхневого розподілу частинок між станами та її різкого зростання для великих значень цього коефіцієнта.

На першому кроці каскадного розпаду для речовини, що утворилась внаслідок розпаду домішкової речовини на 0-му етапі розпаду, джерело якої діє на одній з поверхонь шару, сумарна концентрація частинок на 1-му етапі з ростом часу протікання процесу гетеродифузії спочатку зростає, досягаючи максимальних значень у верхній половині тіла, а потім спадає на всьому проміжку. При цьому для малих часів характерне приповерхневе накопичення частинок, максимум якої зростає та зсувається в глиб тіла.

Для малих значень коефіцієнта поверхневого розподілу домішки на 0-му етапі сумарна концентрація частинок на 1-му етапі приблизно вдвічі менша за концентрацію для великих значень коефіцієнта поверхневого розподілу. Для малих значень цього коефіцієнта на 0-му етапі більший (у 1.5 разів) вклад у сумарну концентрацію на 1-му кроці вносить концентрація домішки, що мігрує на повільному шляху, для середніх та великих часів протікання процесу. Проте для великих значень поверхневого розподілу наявна протилежна ситуація – більший вклад вносить концентрація розпадних частинок на швидкому шляху незалежно від часу протікання процесу.

Встановлено, що сумарна концентрація на другому етапі розпаду спочатку зростає, а її максимум зсувається в глиб тіла і для малих, і для великих значень коефіцієнта поверхневого розподілу на нульовому етапі. Показано, якщо для малих часів накопичення сумарної концентрації на 2-му кроці розпаду відбувається біля поверхні тіла, де діє джерело маси на 0-му етапі розпаду, то з ростом часу протікання процесу гетеродифузії речовина на другому кроці у більшій мірі накопичується у середині тіла, чому сприяє певний зсув джерела маси цієї речовини від поверхні, а також розпад частинок, що накопичились, та їхня міграція вглиб шару.

РОЗДІЛ 5

МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ ГЕТЕРОДИFUЗІЇ ДВОМА ШЛЯХАМИ У ТІЛІ
З ПАСТКАМИ ЗА КАСКАДНОГО РОЗПАДУ ДОМІШКОВИХ РЕЧОВИН

У Розділі 5 на основі загальної математичної моделі термомеханогетеродифузії розпадних мігруючих речовин у середовищі з пастками зроблені постановки відповідних крайових задач каскадного типу. Такі системи диференціальних рівнянь зв'язані між собою розпадом мігруючих речовин типу хімічних реакцій або радіоактивного розпаду. За аналітико-ітераційним методом з використанням функцій Гріна побудовані розв'язки для концентрацій розпадних домішок на кожному з етапів розпаду на швидкому, повільному шляхах міграції, в пастках та для сумарних концентрацій. Означено матричну функцію Гріна задачі гетеродифузії у середовищі з пастками та встановлено її основні закономірності [29]. На основі отриманих формул розроблений пакет програм GeterPas для комп'ютерного моделювання процесів масоперенесення у тілі з пастками за каскадного розпаду домішкових речовин.

5.1. Крайова задача каскадного типу для знаходження концентрацій мігруючих компонент

Розглянемо найзагальніший модельний випадок процесів масоперенесення домішкових частинок у середовищі з пастками за каскадного розпаду мігруючих речовин. Якщо знехтуємо перехресними ефектами в системі рівнянь гетеродифузії у тілі з пастками для розпадних домішкових частинок (2.77), то в одновимірному за просторовою координатою випадку отримуємо наступну систему диференціальних рівнянь у безрозмірних змінних:

для $i = 0$

$$\begin{aligned}\frac{\partial c_1^{(0)}}{\partial \tau} &= \frac{\partial^2 c_1^{(0)}}{\partial \xi^2} + d_1^{(0)} \frac{\partial^2 c_2^{(0)}}{\partial \xi^2} c_2^{(0)} - a_{11}^{(0)} c_1^{(0)} + a_{12}^{(0)} c_2^{(0)}, \\ \frac{\partial c_2^{(0)}}{\partial \tau} &= d_2^{(0)} \frac{\partial^2 c_1^{(0)}}{\partial \xi^2} + d^{(0)} \frac{\partial^2 c_2^{(0)}}{\partial \xi^2} + a_{21}^{(0)} c_1^{(0)} - a_{22}^{(0)} c_2^{(0)} + a_{23}^{(0)} c_3^{(0)}, \\ \frac{\partial c_3^{(0)}}{\partial \tau} &= a_{32}^{(0)} c_2^{(0)} - a_{33}^{(0)} c_3^{(0)};\end{aligned}\tag{5.1a}$$

для $i = \overline{1, N-1}$

$$\frac{\partial c_1^{(i)}}{\partial \tau} = d_0^{(i)} \frac{\partial^2 c_1^{(i)}}{\partial \xi^2} + d_1^{(i)} \frac{\partial^2 c_2^{(i)}}{\partial \xi^2} - a_{11}^{(i)} c_1^{(i)} + a_{12}^{(i)} c_2^{(i)} + a_{\lambda 1}^{(i-1)} c_1^{(i-1)},$$

$$\begin{aligned}\frac{\partial c_2^{(i)}}{\partial \tau} &= d_2^{(i)} \frac{\partial^2 c_1^{(i)}}{\partial \xi^2} + d^{(i)} \frac{\partial^2 c_2^{(i)}}{\partial \xi^2} + a_{21}^{(i)} c_1^{(i)} - a_{22}^{(i)} c_2^{(i)} + a_{23}^{(i)} c_3^{(i)} + a_{\lambda 2}^{(i-1)} c_2^{(i-1)}, \\ \frac{\partial c_3^{(i)}}{\partial \tau} &= a_{32}^{(i)} c_2^{(i)} - a_{33}^{(i)} c_3^{(i)} + a_{\lambda 3}^{(i-1)} c_3^{(i-1)};\end{aligned}\quad (5.16)$$

для $i = N$

$$\begin{aligned}\frac{\partial c_1^{(N)}}{\partial \tau} &= d_0^{(N)} \frac{\partial^2 c_1^{(N)}}{\partial \xi^2} + d_1^{(N)} \frac{\partial^2 c_2^{(N)}}{\partial \xi^2} - a_{11}^{(N)} c_1^{(N)} + a_{12}^{(N)} c_2^{(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 1}^{(iN)} c_1^{(i)}, \\ \frac{\partial c_2^{(N)}}{\partial \tau} &= d_2^{(N)} \frac{\partial^2 c_1^{(N)}}{\partial \xi^2} + d^{(N)} \frac{\partial^2 c_2^{(N)}}{\partial \xi^2} + a_{21}^{(N)} c_1^{(N)} - a_{22}^{(N)} c_2^{(N)} + a_{23}^{(N)} c_3^{(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 2}^{(iN)} c_2^{(i)}, \\ \frac{\partial c_3^{(N)}}{\partial \tau} &= a_{32}^{(N)} c_2^{(N)} - a_{33}^{(N)} c_3^{(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 3}^{(iN)} c_3^{(i)},\end{aligned}\quad (5.1b)$$

Як і в попередніх часткових модельних випадках розглянемо шар безрозмірної товщини ξ_0 (рис. 3.1), в якому початкові значення шуканих функцій концентрацій приймемо нульовими, а на границях $\xi = 0$ і $\xi = \xi_0$ вважаємо відомими їхні фіксовані значення і розподіл частинок між станами α [17], тобто

початкові умови для всіх етапів розпаду $i = \overline{0, N}$

$$c_1^{(i)}(\xi, \tau) \Big|_{\tau=0} = c_2^{(i)}(\xi, \tau) \Big|_{\tau=0} = c_3^{(i)}(\xi, \tau) \Big|_{\tau=0} = 0; \quad (5.2)$$

граничні умови на поверхні тіла $\xi = 0$ для етапу $i = 0$

$$c_1^{(0)}(\xi, \tau) \Big|_{\xi=0} = \alpha c_0, \quad c_2^{(0)}(\xi, \tau) \Big|_{\xi=0} = (1 - \alpha) c_0; \quad (5.3a)$$

граничні умови на поверхні $\xi = 0$ для етапів $i = \overline{1, N}$

$$c_1^{(i)}(\xi, \tau) \Big|_{\xi=\xi_0} = c_2^{(i)}(\xi, \tau) \Big|_{\xi=\xi_0} = 0; \quad (5.3b)$$

граничні умови на поверхні $\xi = \xi_0$ для всіх етапів розпаду $i = \overline{0, N}$

$$c_1^{(i)}(\xi, \tau) \Big|_{\xi=\xi_0} = c_2^{(i)}(\xi, \tau) \Big|_{\xi=\xi_0} = 0. \quad (5.4)$$

Параметр α , що визначає поверхневий розподіл домішкових частинок між станами, означений у п.3.3.1.

Розглянемо крайову задачу гетеродифузії розпадної речовини у тілі з пастками на нульовому етапі розпаду частинок $i = 0$ [73, 74], а саме задачу (5.1a), (5.2), (5.3a), (5.4). Для побудови розв'язків такої задачі перейдемо до нових функцій, які задовольняють нульовим граничним умовам

$$\begin{aligned}
f_1(\xi, t) &= c_1^{(0)}(\xi, \tau) - \alpha c_0 \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0}\right), \\
f_2(\xi, t) &= c_2^{(0)}(\xi, \tau) - (1 - \alpha) c_0 \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0}\right), \\
f_3(\xi, t) &= c_3^{(0)}(\xi, \tau).
\end{aligned} \tag{5.5}$$

Тоді крайова задача (5.1a), (5.2), (5.3a), (5.4) запишеться у вигляді

$$\begin{aligned}
\frac{\partial f_1}{\partial \tau} &= \frac{\partial^2 f_1}{\partial \xi^2} + d_1 \frac{\partial^2 f_2}{\partial \xi^2} - a_{11} f_1 + a_{12} f_2 - \alpha_a c_0 \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0}\right), \\
\frac{\partial f_2}{\partial \tau} &= d_2 \frac{\partial^2 f_1}{\partial \xi^2} + d \frac{\partial^2 f_2}{\partial \xi^2} + a_{21} f_1 - a_{22} f_2 + a_{23} f_3 + \alpha_b c_0 \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0}\right), \\
\frac{\partial f_3}{\partial \tau} &= a_{32} f_2 - a_{33} f_3 + a_{32} (1 - \alpha) c_0 \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0}\right)
\end{aligned} \tag{5.6}$$

з нульовими граничними і такими початковими умовами

$$f_1(\xi, \tau)|_{\tau=0} = -\alpha c_0 \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0}\right), \quad f_2(\xi, \tau)|_{\tau=0} = -(1 - \alpha) c_0 \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0}\right), \quad f_3(\xi, \tau)|_{\tau=0} = 0, \tag{5.7}$$

де $\alpha_a = a_{11}\alpha - a_{12}(1 - \alpha)$, $\alpha_b = a_{21}\alpha - a_{22}(1 - \alpha)$.

Введемо допоміжні позначення

$$A = -\alpha_a c_0 \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0}\right), \quad B = \alpha_b c_0 \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0}\right), \quad H = a_{32} (1 - \alpha) c_0 \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0}\right) \tag{5.8}$$

і, враховуючи розклад (3.49), подамо функції (5.8) у вигляді

$$A = \sum_{k=1}^{\infty} A_k \sin y_k \xi, \quad B = \sum_{k=1}^{\infty} B_k \sin y_k \xi, \quad H = \sum_{k=1}^{\infty} H_k \sin y_k \xi, \tag{5.9}$$

де

$$A_k = c_0 \alpha_a \frac{2}{k\pi}, \quad B_k = c_0 \alpha_b \frac{2}{k\pi}, \quad H_k = c_0 a_{32} (1 - \alpha) \frac{2}{k\pi}. \tag{5.10}$$

Підставляючи в систему рівнянь (5.6) і умови (5.7) розклади функцій

$$\left(f_j(\xi, \tau) = \sum_{k=1}^{\infty} f_{jk}(k, \tau) \sin y_k \xi \right), \text{ а також використовуючи вирази (5.9) і (5.10), отримемо систему звичайних диференціальних рівнянь для знаходження коефіцієнтів розкладів } f_{jk}(\tau):$$

маємо систему звичайних диференціальних рівнянь для знаходження коефіцієнтів розкладів $f_{jk}(\tau)$:

$$\begin{aligned}\frac{df_{1k}}{d\tau} &= -y_k^2 f_{1k} - d_1 y_k^2 f_{2k} - a_{11} f_{1k} + a_{12} f_{2k} + A_k, \\ \frac{df_{2k}}{d\tau} &= -d_2 y_k^2 f_{1k} - d y_k^2 f_{2k} + a_{21} f_{1k} - a_{22} f_{2k} + a_{23} f_{3k} + B_k, \\ \frac{df_3}{d\tau} &= a_{32} f_{2k} - a_{33} f_{3k} + H_k\end{aligned}\quad (5.11)$$

за початкових умов

$$f_{1k}(\tau)|_{\tau=0} = -\alpha c_0 \frac{2}{k\pi}, \quad f_{2k}(\tau)|_{\tau=0} = -(1-\alpha)c_0 \frac{2}{k\pi}, \quad f_{3k}(\tau)|_{\tau=0} = 0. \quad (5.12)$$

Застосовуючи до системи диференціальних рівнянь (5.11) перетворення Лапласа ($\bar{f}_{jk}(s) = L[f_{jk}(\tau)]$, $j = \overline{1,3}$) і враховуючи умови (5.12), знайдемо

$$\begin{aligned}(s + y_k^2 + a_{11})\bar{f}_{1k} + (d_1 y_k^2 - a_{12})\bar{f}_{2k} &= \bar{A}, \\ (d_2 y_k^2 - a_{21})\bar{f}_{1k} + (s + d y_k^2 + a_{22})\bar{f}_{2k} - a_{23}\bar{f}_{3k} &= \bar{B}, \\ -a_{32}\bar{f}_{2k} + (s + a_{33})\bar{f}_{3k} &= \bar{H},\end{aligned}\quad (5.13)$$

де

$$\bar{A} = \frac{2c_0}{k\pi} \left[\frac{1}{s} \alpha_a + \alpha \right], \quad \bar{B} = \frac{2c_0}{k\pi} \left[\frac{1}{s} \alpha_b + 1 - \alpha \right], \quad \bar{H} = a_{32}(1-\alpha) \frac{2c_0}{k\pi s}.$$

Для визначення функцій $f_{jk}(\tau)$ ($j = \overline{1,3}$, $k = 1, 2, \dots$) дослідимо основний визначник отриманої системи. Він має структуру

$$\Delta = s^3 + \eta_1 s^2 + \eta_2 s + \eta_3 = (s - s_1)(s - s_2)(s - s_3), \quad (5.14)$$

$$\begin{aligned}\text{де } \eta_1 &= (1+d)y_k^2 + a_{11} + a_{22} + a_{33}, \quad \eta_2 = d^* y_k^4 + [d(a_{11} + a_{33}) + d_1 a_{21} + d_2 a_{12} + a_{22} + a_{33}] y_k^2 + \\ &+ a_{11} a_{22} + a_{11} a_{33} + a_{22} a_{33} - a_{12} a_{21} - a_{23} a_{32}, \quad \eta_3 = a_{33} d^* y_k^4 + a_{33} (d a_{11} + d_1 a_{21} + d_2 a_{12} + a_{22}) y_k^2 - \\ &- a_{23} a_{32} y_k^2 + a_{11} a_{22} a_{33} - a_{11} a_{23} a_{32} - a_{33} a_{12} a_{21}; \quad d^* = d - d_1 d_2.\end{aligned}\quad (5.15)$$

Для знаходження коренів рівняння $s^3 + \eta_1 s^2 + \eta_2 s + \eta_3 = 0$ зведемо його до неповного кубічного вигляду з допомогою заміни $s = y - \eta_1/3$, тоді

$$y^3 + py + q = 0, \quad (5.16)$$

$$\text{де } p = \eta_2 - \frac{\eta_1^2}{3}, \quad q = 2 \left(\frac{\eta_1}{3} \right)^3 - \frac{\eta_1 \eta_2}{3} + \eta_3.$$

Розглянемо величину $Q = \left(\frac{p}{3}\right)^3 + \left(\frac{q}{2}\right)^2$. Якщо $Q < 0$, $p < 0$ (інші випадки розглянуті в [198]), то корені рівняння (5.16) є дійсними і визначаються формулами

$$y_1 = 2\sqrt{-p/3} \cos(\beta/3), \quad y_{2,3} = -2\sqrt{-p/3} \cos\left(\frac{\beta}{3} \pm \frac{\pi}{3}\right),$$

і, відповідно для коренів s_i ($i = \overline{1,3}$)

$$s_1 = -\frac{\eta_1}{3} + 2\sqrt{-p/3} \cos(\beta/3), \quad s_{2,3} = -\frac{\eta_1}{3} - 2\sqrt{-p/3} \cos\left(\frac{\beta}{3} \pm \frac{\pi}{3}\right), \quad (5.16a)$$

де $\cos\beta = -\frac{q}{2\sqrt{-(p/3)^3}}$.

Запишемо допоміжні визначники

$$\Delta_1 = \frac{2c_0}{k\pi} \left\{ \alpha s^2 + P_1 s + P_2 + \frac{P_3}{s} \right\}, \quad \Delta_2 = -\frac{2c_0}{k\pi} \left\{ (1-\alpha)s^2 + P'_1 s + P'_2 + \frac{P'_3}{s} \right\},$$

$$\Delta_3 = \frac{2c_0}{k\pi} a_{32} \left\{ 2(1-\alpha)s + P''_2 + \frac{P''_3}{s} \right\}.$$

Тут використані позначення

$$P_1 = y_k^2 (\alpha d_1^* - d_1) + \alpha (a_{22} + a_{33} - a_{12} + 1) + \alpha_a + a_{12},$$

$$P_2 = y_k^2 (\alpha_a - (\alpha_b + a_{33})d_1 + a_{33}\alpha d_1^*) + \alpha (a_{22}a_{33} - a_{12}a_{33} - a_{23}a_{32}) +$$

$$+ \alpha_a (a_{33} + a_{22}) + a_{12} (\alpha_b + a_{33}),$$

$$P_3 = y_k^2 (a_{33}d_a - a_{23}a_{32}(1-\alpha)d_1) + \alpha_a (a_{22}a_{33} - a_{23}a_{32}) + \alpha_b a_{12}a_{33} + a_{23}a_{32}(a_{12} - \alpha);$$

$$P'_1 = ((1-\alpha) - \alpha d_2)y_k^2 + (1-\alpha)(a_{11} + a_{33}) + \alpha_b + a_{21}\alpha,$$

$$P'_2 = (\alpha_b - d_2(\alpha_a - \alpha a_{33}) + a_{33}(1-\alpha))y_k^2 + a_{11}\alpha_b + a_{21}\alpha_a +$$

$$+ a_{33}(\alpha_b + a_{11} - a_{11}\alpha + a_{21}\alpha) + a_{23}a_{32}(1-\alpha),$$

$$P'_3 = (a_{33}\alpha_b - a_{33}d_2\alpha_a + a_{23}a_{32}(1-\alpha))y_k^2 + a_{33}(a_{11}\alpha_b + a_{21}\alpha_a) + a_{11}a_{23}a_{32}(1-\alpha),$$

$$P''_2 = ((1-\alpha)d + 2(1-\alpha) - d_2\alpha)y_k^2 + (1-\alpha)(a_{22} + 2a_{11}) + a_{21}\alpha + \alpha_b,$$

$$P''_3 = (1-\alpha)(dy_k^4 - d_1d_2y_k^4 + (1 + a_{11}d + d_1a_{21} + a_{12}d_2)y_k^2 + a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}) -$$

$$- (d_2\alpha_a - \alpha_b)y_k^2 + a_{21}\alpha_a + a_{11}\alpha_b, \quad (5.17)$$

де $d_1^* = d + d_1$, $d_2^* = d + d_2$, $d_a = \alpha_a d - \alpha_b d_1$.

Таким чином розв'язок системи рівнянь (4.13) запишеться у вигляді

$$\begin{aligned}
\bar{f}_{1k} &= \frac{\Delta_1}{\Delta} = \frac{2c_0}{k\pi(s-s_1)(s-s_2)(s-s_3)} \left\{ \alpha s^2 + P_1 s + P_2 + \frac{P_3}{s} \right\}, \\
\bar{f}_{2k} &= \frac{\Delta_2}{\Delta} = \frac{2c_0}{k\pi(s-s_1)(s-s_2)(s-s_3)} \left\{ (1-\alpha)s^2 + P'_1 s + P'_2 + \frac{P'_3}{s} \right\}, \\
\bar{f}_{3k} &= \frac{\Delta_3}{\Delta} = \frac{2c_0 a_{32}}{k\pi(s-s_1)(s-s_2)(s-s_3)} \left\{ 2(1-\alpha)s + P''_2 + \frac{P''_3}{s} \right\}. \tag{5.18}
\end{aligned}$$

До отриманих виразів (5.18) застосуємо обернене перетворення Лапласа. Використовуючи наступні співвідношення [109]

$$\begin{aligned}
L^{-1} \left[\frac{1}{(s-s_1)(s-s_2)(s-s_3)} \right] &= -\frac{1}{s^*} \left\{ (s_2-s_3)e^{s_1\tau} + (s_3-s_1)e^{s_2\tau} + (s_1-s_2)e^{s_3\tau} \right\}, \\
L^{-1} \left[\frac{s}{(s-s_1)(s-s_2)(s-s_3)} \right] &= -\frac{1}{s^*} \left\{ s_1(s_2-s_3)e^{s_1\tau} + s_2(s_3-s_1)e^{s_2\tau} + s_3(s_1-s_2)e^{s_3\tau} \right\}, \\
L^{-1} \left[\frac{s^2}{(s-s_1)(s-s_2)(s-s_3)} \right] &= -\frac{1}{s^*} \left\{ s_1^2(s_2-s_3)e^{s_1\tau} + s_2^2(s_3-s_1)e^{s_2\tau} + s_3^2(s_1-s_2)e^{s_3\tau} \right\}, \\
L^{-1} \left[\frac{1}{s(s-s_1)(s-s_2)(s-s_3)} \right] &= -\frac{1}{s_1 s_2 s_3} - \frac{1}{s^*} \left\{ \frac{1}{s_1}(s_2-s_3)e^{s_1\tau} + \frac{1}{s_2}(s_3-s_1)e^{s_2\tau} + \frac{1}{s_3}(s_1-s_2)e^{s_3\tau} \right\}, \tag{5.19}
\end{aligned}$$

де $s^* = (s_1-s_2)(s_2-s_3)(s_3-s_1)$, знаходимо вирази для коефіцієнтів розкладу $f_{jk}(k, \tau)$, $j = \overline{1,3}$

$$\begin{aligned}
f_{1k} &= \frac{2c_0}{k\pi s^*} \left\{ (s_2-s_3) \left[\alpha s_1^2 + P_1 s_1 + P_2 + \frac{P_3}{s_1} \right] e^{s_1\tau} + (s_3-s_1) \left[\alpha s_2^2 + P_1 s_2 + P_2 + \frac{P_3}{s_2} \right] e^{s_2\tau} + \right. \\
&\quad \left. + (s_1-s_2) \left[\alpha s_3^2 + P_1 s_3 + P_2 + \frac{P_3}{s_3} \right] e^{s_3\tau} \right\} + \frac{2c_0 P_3}{k\pi s_1 s_2 s_3}, \\
f_{2k} &= \frac{2c_0}{k\pi s^*} \left\{ (s_2-s_3) \left[(1-\alpha)s_1^2 + P'_1 s_1 + P'_2 + \frac{P'_3}{s_1} \right] e^{s_1\tau} + (s_3-s_1) \left[(1-\alpha)s_2^2 + P'_1 s_2 + \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + P'_2 + \frac{P'_3}{s_2} \right] e^{s_2\tau} + (s_1-s_2) \left[(1-\alpha)s_3^2 + P'_1 s_3 + P'_2 + \frac{P'_3}{s_3} \right] e^{s_3\tau} \right\} + \frac{2c_0 P'_3}{k\pi s_1 s_2 s_3}, \\
f_{3k} &= \frac{2c_0 a_{32}}{k\pi s^*} \left\{ (s_2-s_3) \left[2(1-\alpha)s_1 + P''_2 + \frac{P''_3}{s_1} \right] e^{s_1\tau} + (s_3-s_1) \left[2(1-\alpha)s_2 + \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + P''_2 + \frac{P''_3}{s_2} \right] e^{s_2\tau} + (s_1-s_2) \left[2(1-\alpha)s_3 + P''_2 + \frac{P''_3}{s_3} \right] e^{s_3\tau} \right\} + \frac{2c_0 a_{32} P''_3}{k\pi s_1 s_2 s_3},
\end{aligned}$$

$$+ P_2'' + \frac{P_3''}{s_2} \left] e^{s_2 \tau} + (s_1 - s_2) \left[2(1 - \alpha) s_3 + P_2'' + \frac{P_3''}{s_3} \right] e^{s_3 \tau} \right\} + \frac{2c_0 a_{32} P_3''}{k\pi s_1 s_2 s_3}.$$

Тоді з використанням формул (5.5) для шуканих концентрацій $c_j^{(0)}(\xi, \tau)$, $j = \overline{1,3}$ отримаємо

$$\begin{aligned} \frac{c_1^{(0)}(\xi, \tau)}{c_0} &= \alpha \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0} \right) + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{2}{k\pi} \sin y_k \xi \left\{ \frac{P_3}{s_1 s_2 s_3} + \frac{1}{s^*} \left((s_2 - s_3) \left[\alpha s_1^2 + P_1 s_1 + \right. \right. \right. \\ &+ P_2 + \frac{P_3}{s_1} \left. \left. \left. \right] e^{s_1 \tau} + (s_3 - s_1) \left[\alpha s_2^2 + P_1 s_2 + P_2 + \frac{P_3}{s_2} \right] e^{s_2 \tau} + (s_1 - s_2) \left[\alpha s_3^2 + P_1 s_3 + P_2 + \frac{P_3}{s_3} \right] e^{s_3 \tau} \right\}, \\ \frac{c_2^{(0)}(\xi, \tau)}{c_0} &= (1 - \alpha) \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0} \right) + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{2}{k\pi} \sin y_k \xi \left\{ \frac{P_3'}{s_1 s_2 s_3} + \frac{1}{s^*} \left((s_2 - s_3) \left[(1 - \alpha) s_1^2 + P_1' s_1 + P_2' + \frac{P_3'}{s_1} \right] e^{s_1 \tau} + \right. \right. \\ &+ (s_3 - s_1) \left[(1 - \alpha) s_2^2 + P_1' s_2 + P_2' + \frac{P_3'}{s_2} \right] e^{s_2 \tau} + (s_1 - s_2) \left[(1 - \alpha) s_3^2 + P_1' s_3 + P_2' + \frac{P_3'}{s_3} \right] e^{s_3 \tau} \left. \right\}, \\ \frac{c_3^{(0)}(\xi, \tau)}{c_0} &= \sum_{k=1}^{\infty} \frac{2a_{32}}{k\pi} \sin y_k \xi \left\{ \frac{P_3''}{s_1 s_2 s_3} + \frac{1}{s^*} \left((s_2 - s_3) \left[2(1 - \alpha) s_1 + P_2'' + \frac{P_3''}{s_1} \right] e^{s_1 \tau} + \right. \right. \\ &+ (s_3 - s_1) \left[2(1 - \alpha) s_2 + P_2'' + \frac{P_3''}{s_2} \right] e^{s_2 \tau} + (s_1 - s_2) \left[2(1 - \alpha) s_3 + P_2'' + \frac{P_3''}{s_3} \right] e^{s_3 \tau} \left. \right\}. \quad (5.20) \end{aligned}$$

У записаних формулах присутні доданки, що погано збігаються, а саме ті, які задають асимптотику розв'язку при $\tau \rightarrow \infty$. Просумуємо їх окремо. У виразі для концентрації $c_1^{(0)}(\xi, \tau)$ маємо член

$$I_1 = \frac{2}{\pi} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{P_3}{k s_1 s_2 s_3} \sin y_k \xi = -\frac{2}{\pi} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{P_3}{k \eta_3} \sin y_k \xi.$$

Після перетворень з використанням формул (5.15), (5.17) його можна представити наступним чином

$$I_1 = -\frac{2}{\pi} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{A_{d1} y_k^2 + A_{\alpha 1}}{k \left[a_{33} d^* y_k^4 + d_{a1} y_k^2 + a_{1\lambda} \right]} \sin y_k \xi, \quad (5.21)$$

де $A_{d1} = a_{33} d_a - a_{23} a_{32} (1 - \alpha) d_1$, $A_{\alpha 1} = \alpha_a (a_{22} a_{33} - a_{23} a_{32}) + a_{12} a_{33} \alpha_b + a_{23} a_{32} a_{12} (1 - \alpha)$, $d_{a1} = a_{33} (d a_{11} + d_1 a_{21} + d_2 a_{12} + a_{22}) - a_{23} a_{32}$, $a_{1\lambda} = a_{11} a_{22} a_{33} - a_{11} a_{23} a_{32} - a_{33} a_{12} a_{21}$.

Спочатку розглянемо вираз

$$I_{11} = \frac{2}{\pi} A_{\alpha 1} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\sin y_k \xi}{k [a_{33} d^* y_k^4 + d_{a1} y_k^2 + a_{1\lambda}]}$$

Знаменник цього ряду подамо у вигляді

$$k \left[a_{33} d^* \frac{\pi^4}{\xi_0^4} k^4 + d_{a1} \frac{\pi^2}{\xi_0^2} k^2 + a_{1\lambda} \right] = k(k^2 - b'_1)(k^2 - b'_2),$$

де $b'_{1,2} = \frac{\xi_0^2}{2a_{33}d^* \pi^2} \left\{ -d_{a1} \pm \sqrt{d_{a1}^2 - 4a_{33}a_{1\lambda}d^*} \right\}$, причому $b'_1, b'_2 \leq 0$. Тому позначимо $b_1 = -b'_1$,

$b_2 = -b'_2$ і перепишемо I_{11} так

$$I_{11} = \frac{2}{\pi} A_{\alpha 1} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\sin y_k \xi}{k(k^2 + b_1)(k^2 + b_2)}$$

Розкладемо вираз $\frac{1}{(k^2 + b_1)(k^2 + b_2)}$ на прості дробі:

$$\frac{1}{(k^2 + b_1)(k^2 + b_2)} = \frac{A}{k^2 + b_1} + \frac{B}{k^2 + b_2} = \frac{(A+B)k^2 + Ab_2 + Bb_1}{(k^2 + b_1)(k^2 + b_2)}$$

Звідси маємо $A + B = 0$; $Ab_2 + Bb_1 = 1$. Тоді знаходимо

$$A = \frac{1}{b_2 - b_1}, \quad B = \frac{-1}{b_2 - b_1}$$

Вираз для I_{11} запишемо у вигляді

$$I_{11} = \frac{2}{\pi} \frac{A_{\alpha 1}}{b_2 - b_1} \sum_{k=1}^{\infty} \left[\frac{\sin y_k \xi}{k(k^2 + b_1)} - \frac{\sin y_k \xi}{k(k^2 + b_2)} \right]$$

Враховуючи формулу (3.14), одержимо

$$I_{11} = \frac{2}{\pi} \frac{A_{\alpha 1}}{b_2 - b_1} \left(\frac{\pi}{2b_1} \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\text{sh}(\tilde{a}_1(\xi_0 - \xi))}{\text{sh}_1(\tilde{a}_1 \xi_0)} \right) - \frac{\pi}{2b_2} \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\text{sh}(\tilde{a}_2(\xi_0 - \xi))}{\text{sh}(\tilde{a}_2 \xi_0)} \right) \right)$$

Тут $\tilde{a}_j = \frac{\pi \sqrt{|b_j|}}{\xi_0}$, $j = 1, 2$.

Зазначимо, що коефіцієнт $b_1 < 0$, тоді $\tilde{a}_1 = \frac{\pi i \sqrt{|b_1|}}{\xi_0} = i\hat{a}_1$. Враховуючи, що

$$\text{sh}(ix) = i \sin(x) \text{ [198]}, \text{ маємо } \frac{\text{sh}(\tilde{a}_1(\xi_0 - \xi))}{\text{sh}(\tilde{a}_1 \xi_0)} = \frac{\sin(\hat{a}_1(\xi_0 - \xi))}{\sin(\hat{a}_1 \xi_0)}$$

Тепер розглянемо другу частину ряду (5.21):

$$I_{12} = \frac{2\pi}{\xi_0^2} A_{d1} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{k \sin y_k \xi}{a_{33} d^* y_k^4 + d_{a1} y_k^2 + a_{1\lambda}}.$$

Як і для I_{11} , розкладемо вираз під знаком суми на прості дроби:

$$I_{12} = \frac{2\pi}{\xi_0^2} \frac{A_{d1}}{b_2 - b_1} \sum_{k=1}^{\infty} \left[\frac{k \sin y_k \xi}{k^2 + b_1} - \frac{k \sin y_k \xi}{k^2 + b_2} \right].$$

Використаємо відомий ряд [240]

$$\sum_{k=1}^{\infty} \frac{k \sin kx}{k^2 + a^2} = \frac{\pi \operatorname{sh}(\pi - x)a}{2 \operatorname{sh} \pi a}.$$

Тоді одержимо

$$\begin{aligned} I_{12} &= \frac{\pi^2}{\xi_0^2} \frac{A_{d1}}{b_2 - b_1} \left(\frac{\operatorname{sh}(\tilde{a}_1(\xi_0 - \xi))}{\operatorname{sh}(\tilde{a}_1 \xi_0)} - \frac{\operatorname{sh}(\tilde{a}_2(\xi_0 - \xi))}{\operatorname{sh}(\tilde{a}_2 \xi_0)} \right) = \\ &= \frac{\pi^2}{\xi_0^2} \frac{A_{d1}}{b_2 - b_1} \left(\frac{\sin(\hat{a}_1(\xi_0 - \xi))}{\sin(\hat{a}_1 \xi_0)} - \frac{\operatorname{sh}(\tilde{a}_2(\xi_0 - \xi))}{\operatorname{sh}(\tilde{a}_2 \xi_0)} \right). \end{aligned}$$

І остаточно для I_1 отримаємо

$$\begin{aligned} I_1 = I_{11} + I_{12} &= \frac{1}{b_2 - b_1} \left\{ \left(\frac{A_{\alpha 1}}{b_1} \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\sin(\hat{a}_1(\xi_0 - \xi))}{\sin(\hat{a}_1 \xi_0)} \right) - \right. \right. \\ &\left. \left. - \frac{A_{\alpha 1}}{b_2} \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\operatorname{sh}(\tilde{a}_2(\xi_0 - \xi))}{\operatorname{sh}(\tilde{a}_2 \xi_0)} \right) \right) + \frac{A_{d1} \pi^2}{\xi_0^2} \left(\frac{\sin(\hat{a}_1(\xi_0 - \xi))}{\sin(\hat{a}_1 \xi_0)} - \frac{\operatorname{sh}(\tilde{a}_2(\xi_0 - \xi))}{\operatorname{sh}(\tilde{a}_2 \xi_0)} \right) \right\}. \quad (5.22) \end{aligned}$$

Зазначимо, що асимптотичний доданок у виразі для $c_2^{(0)}(\xi, \tau)$ (5.20) має структуру, аналогічну асимптотичному доданку I_1 (5.22) в $c_1^{(0)}(\xi, \tau)$, відрізняючись лише коефіцієнтом P'_3 . Тому ми можемо записати

$$I_2 = \frac{2}{\pi} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{P'_3}{k s_1 s_2 s_3} \sin y_k \xi = \frac{2}{\pi} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{A_{d2} y_k^2 - A_{\alpha 2}}{k [a_{33} d^* y_k^4 + d_{a1} y_k^2 + a_{1\lambda}]} \sin y_k \xi,$$

де $A_{d2} = a_{33} \alpha_a d_2 - a_{23} a_{32} (1 - \alpha)$, $A_{\alpha 2} = (1 - \alpha) a_{11} a_{23} a_{32} + a_{33} (a_{11} \alpha_b + a_{21} \alpha_a)$.

І в результаті маємо

$$I_2 = \frac{1}{b_2 - b_1} \left\{ \left(- \frac{A_{\alpha 2}}{b_1} \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\sin(\hat{a}_1(\xi_0 - \xi))}{\sin(\hat{a}_1 \xi_0)} \right) + \frac{A_{\alpha 2}}{b_2} \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\operatorname{sh}(\tilde{a}_2(\xi_0 - \xi))}{\operatorname{sh}(\tilde{a}_2 \xi_0)} \right) \right) \right\} +$$

$$+ \frac{A_{d2}\pi^2}{\xi_0^2} \left\{ \frac{\sin(\hat{a}_1(\xi_0 - \xi))}{\sin(\hat{a}_1\xi_0)} - \frac{\text{sh}(\tilde{a}_2(\xi_0 - \xi))}{\text{sh}(\tilde{a}_2\xi_0)} \right\}. \quad (5.23)$$

Оскільки при $\tau \rightarrow \infty$ з третього рівняння системи (5.1a) випливає, що $c_{3\infty}^{(0)}(\xi) = (a_{32}/a_{33})c_{2\infty}^{(0)}(\xi)$ і враховуючи, що стаціонарна частина для виразу має вигляд

$$I_3 = \frac{2}{\pi} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{P_3''}{ks_1s_2s_3} \sin y_k \xi,$$

то і відповідно

$$\begin{aligned} I_3 &= (a_{32}/a_{33})I_2 = \\ &= \frac{a_{32}}{b_2 - b_1} \left\{ \left(-\frac{A_{\alpha 2}}{b_1} \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\sin(\hat{a}_1(\xi_0 - \xi))}{\sin(\hat{a}_1\xi_0)} \right) + \frac{A_{\alpha 2}}{b_2} \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\text{sh}(\tilde{a}_2(\xi_0 - \xi))}{\text{sh}(\tilde{a}_2\xi_0)} \right) \right) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{A_{d2}\pi^2}{\xi_0^2} \left(\frac{\sin(\hat{a}_1(\xi_0 - \xi))}{\sin(\hat{a}_1\xi_0)} - \frac{\text{sh}(\tilde{a}_2(\xi_0 - \xi))}{\text{sh}(\tilde{a}_2\xi_0)} \right) \right\}. \end{aligned} \quad (5.24)$$

З урахуванням формул (5.22)-(5.24) вирази для розподілів концентрацій $c_j^{(0)}(\xi, \tau)$ на етапі розпаду $i = 0$ запишемо у вигляді
концентрація домішок у поровому розчині

$$\begin{aligned} \frac{c_1(\xi, \tau)}{c_0} &= \alpha \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0} \right) - \frac{1}{b_2 - b_1} \left\{ \left(\frac{A_{\alpha 1}}{b_1} \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\sin(\hat{a}_1(\xi_0 - \xi))}{\sin(\hat{a}_1\xi_0)} \right) - \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{A_{\alpha 1}}{b_2} \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\text{sh}(\tilde{a}_2(\xi_0 - \xi))}{\text{sh}(\tilde{a}_2\xi_0)} \right) \right) + \frac{A_{d1}\pi^2}{\xi_0^2} \left(\frac{\sin(\hat{a}_1(\xi_0 - \xi))}{\sin(\hat{a}_1\xi_0)} - \frac{\text{sh}(\tilde{a}_2(\xi_0 - \xi))}{\text{sh}(\tilde{a}_2\xi_0)} \right) \right\} + \\ &\quad + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{2}{k\pi s^*} \sin y_k \xi \left\{ (s_2 - s_3) \left[\alpha s_1^2 + P_1 s_1 + P_2 + \frac{P_3}{s_1} \right] e^{s_1 \tau} + \right. \\ &\quad \left. + (s_3 - s_1) \left[\alpha s_2^2 + P_1 s_2 + P_2 + \frac{P_3}{s_2} \right] e^{s_2 \tau} + (s_1 - s_2) \left[\alpha s_3^2 + P_1 s_3 + P_2 + \frac{P_3}{s_3} \right] e^{s_3 \tau} \right\}, \end{aligned} \quad (5.25a)$$

концентрація домішок на внутрішній поверхні скелету

$$\frac{c_2(\xi, \tau)}{c_0} = (1 - \alpha) \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0} \right) - \frac{1}{b_2 - b_1} \left\{ \left(\frac{A_{\alpha 2}}{b_1} \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\sin(\hat{a}_1(\xi_0 - \xi))}{\sin(\hat{a}_1\xi_0)} \right) - \right.$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{A_{\alpha 2}}{b_2} \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\text{sh}(\tilde{a}_2(\xi_0 - \xi))}{\text{sh}(\tilde{a}_2 \xi_0)} \right) \Bigg) + \frac{A_{d2} \pi^2}{\xi_0^2} \left(\frac{\sin(\hat{a}_1(\xi_0 - \xi))}{\sin(\hat{a}_1 \xi_0)} - \frac{\text{sh}(\tilde{a}_2(\xi_0 - \xi))}{\text{sh}(\tilde{a}_2 \xi_0)} \right) \Bigg) \Bigg\} + \\
& + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{2}{k \pi s^*} \sin y_k \xi \left\{ (s_2 - s_3) \left[(1 - \alpha) s_1^2 + P'_1 s_1 + P'_2 + \frac{P'_3}{s_1} \right] e^{s_1 \tau} + \right. \\
& \left. + (s_3 - s_1) \left[(1 - \alpha) s_2^2 + P'_1 s_2 + P'_2 + \frac{P'_3}{s_2} \right] e^{s_2 \tau} + (s_1 - s_2) \left[(1 - \alpha) s_3^2 + P'_1 s_3 + P'_2 + \frac{P'_3}{s_3} \right] e^{s_3 \tau} \right\}, \quad (5.256)
\end{aligned}$$

концентрація частинок у «пастках»

$$\begin{aligned}
\frac{c_3(\xi, \tau)}{c_0} = & -\frac{a_{32}}{b_2 - b_1} \left\{ \left(-\frac{A_{\alpha 2}}{b_1} \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\sin(\hat{a}_1(\xi_0 - \xi))}{\sin(\hat{a}_1 \xi_0)} \right) + \frac{A_{\alpha 2}}{b_2} \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\text{sh}(\tilde{a}_2(\xi_0 - \xi))}{\text{sh}(\tilde{a}_2 \xi_0)} \right) \right) \right\} + \\
& + \frac{A_{d2} \pi^2}{\xi_0^2} \left(\frac{\sin(\hat{a}_1(\xi_0 - \xi))}{\sin(\hat{a}_1 \xi_0)} - \frac{\text{sh}(\tilde{a}_2(\xi_0 - \xi))}{\text{sh}(\tilde{a}_2 \xi_0)} \right) \Bigg\} + \\
& + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{2a_{32}}{k \pi s^*} \sin y_k \xi \left\{ (s_2 - s_3) \left[2(1 - \alpha) s_1 + P''_2 + \frac{P''_3}{s_1} \right] e^{s_1 \tau} + \right. \\
& \left. + (s_3 - s_1) \left[2(1 - \alpha) s_2 + P''_2 + \frac{P''_3}{s_2} \right] e^{s_2 \tau} + (s_1 - s_2) \left[2(1 - \alpha) s_3 + P''_2 + \frac{P''_3}{s_3} \right] e^{s_3 \tau} \right\}, \quad (5.25B)
\end{aligned}$$

сумарна концентрація домішкових частинок у середовищі з пастками

$$\begin{aligned}
\frac{c^{(0)}(\xi, \tau)}{c_0} = & \left(1 + \frac{a_{32}}{a_{33}} (1 - \alpha) \right) \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0} \right) + \frac{2d^*}{b_2 - b_1} \left(\frac{B^*}{b_1} \left[1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\sin(\hat{a}_1(\xi_0 - \xi))}{\sin(\hat{a}_1 \xi_0)} \right] - \right. \\
& \left. - \frac{B^*}{b_2} \left[1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\text{sh} \bar{a}_2(\xi_0 - \xi)}{\text{sh} \bar{a}_2 \xi_0} \right] + B_d \left[\frac{\sin(\hat{a}_1(\xi_0 - \xi))}{\sin(\hat{a}_1 \xi_0)} - \frac{\text{sh} \bar{a}_2(\xi_0 - \xi)}{\text{sh} \bar{a}_2 \xi_0} \right] \right) + \\
& + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{2}{k \pi s^*} \sin y_k \xi \left\{ (s_2 - s_3) \left[s_1^2 + B_1 s_1 + B_2 + \frac{B_3}{s_1} \right] e^{s_1 \tau} + \right. \\
& \left. + (s_3 - s_1) \left[s_2^2 + B_1 s_2 + B_2 + \frac{B_3}{s_2} \right] e^{s_2 \tau} + (s_1 - s_2) \left[s_3^2 + B_1 s_3 + B_2 + \frac{B_3}{s_3} \right] e^{s_3 \tau} \right\}. \quad (5.25Г)
\end{aligned}$$

Тут $B^* = a_{33} A_{\alpha 1} - (a_{33} + a_{32}/a_{33}) A_{\alpha 2}$, $B_d = a_{33} A_{d1} + (a_{33} + a_{32}/a_{33}) A_{d2}$,

$B_1 = P_1 + P'_1 + 2a_{32}(1 - \alpha)/a_{33}$, $B_j = P_j + P'_j + P''_j/a_{33}$, $j = 2, 3$.

Якщо в системі рівнянь гетеродифузії розпадної речовини (5.1а) знехтуємо перехресними ефектами, тобто покладемо $d_1^{(0)} = d_2^{(0)} = 0$, то одержимо розв'язок задачі у вигляді (5.25), в якому коефіцієнти набудуть вигляду

$$A_{d1} = a_{33}d_a, \quad A_{d2} = -a_{23}a_{32}(1-\alpha), \quad d_{a1} = a_{33}(da_{11} + a_{22}) - a_{23}a_{32}, \quad d_i^* = d, \quad i = 1, 2$$

$$b'_{1,2} = \frac{-\xi_0^2}{2a_{33}d^*\pi^2} \left\{ -d_{a1} \pm \sqrt{d_{a1}^2 - 4a_{33}a_{1\lambda}d} \right\}, \quad d_a = \alpha_a d,$$

$$P_1 = y_k^2(\alpha d) + \alpha(a_{22} + a_{33} - a_{12} + 1) + \alpha_a + a_{12},$$

$$P_2 = y_k^2(\alpha_a + a_{33}\alpha d) + \alpha(a_{22}a_{33} - a_{12}a_{33} - a_{23}a_{32}) + \alpha_a(a_{33} + a_{22}) + a_{12}(\alpha_b + a_{33}),$$

$$P_3 = y_k^2 a_{33} d_a + \alpha_a(a_{22}a_{33} - a_{23}a_{32}) + \alpha_b a_{12} a_{33} + a_{23} a_{32} (a_{12} - \alpha);$$

$$P'_1 = (1-\alpha)y_k^2 + (1-\alpha)(a_{11} + a_{33}) + \alpha_b + a_{21}\alpha,$$

$$P'_2 = (\alpha_b + a_{33}(1-\alpha))y_k^2 + a_{11}\alpha_b + a_{21}\alpha_a + a_{33}(\alpha_b + a_{11} - a_{11}\alpha + a_{21}\alpha) + a_{23}a_{32}(1-\alpha),$$

$$P'_3 = (a_{33}\alpha_b + a_{23}a_{32}(1-\alpha))y_k^2 + a_{33}(a_{11}\alpha_b + a_{21}\alpha_a) + a_{11}a_{23}a_{32}(1-\alpha);$$

$$P''_2 = ((1-\alpha)d)y_k^2 + (1-\alpha)(a_{22} + 2a_{11}) + a_{21}\alpha + \alpha_b,$$

$$P''_3 = (1-\alpha)(dy_k^4 + (1+a_{11}d)y_k^2 + a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}) + \alpha_b y_k^2 + a_{21}\alpha_a + a_{11}\alpha_b,$$

$$\eta_2 = d^* y_k^4 + [d(a_{11} + a_{33}) + a_{22} + a_{33}]y_k^2 + a_{11}a_{22} + a_{11}a_{33} + a_{22}a_{33} - a_{12}a_{21} - a_{23}a_{32},$$

$$\eta_3 = a_{33}dy_k^4 + a_{33}(da_{11} + a_{22})y_k^2 - a_{23}a_{32}y_k^2 + a_{11}a_{22}a_{33} - a_{11}a_{23}a_{32} - a_{33}a_{12}a_{21}.$$

Отже, отримано формули для знаходження концентрацій розпадних домішок на етапі розпаду $i = 0$ у трьох станах та їхня сума і виділено асимптотичні складові концентрацій. Зазначимо, що отримані залежності суттєво відрізняються від класичних (лінійних), які знаходять з розв'язків незв'язаної системи рівнянь гетеродифузії або з поодинокого рівняння з ефективними характеристиками, не враховуючи

розпад домішкової речовини. Причому доданки типу $\frac{\text{sh } \bar{a}_j(\xi_0 - \xi)}{\text{sh } \bar{a}_j \xi_0}$ вносять суттєвий

вклад в розподіли концентрацій у приповерхневому шарі і показують збільшення концентрації домішкових частинок в околі верхньої границі тіла. Також зауважимо, що врахування розпаду домішкових частинок призводить до посилення нелінійності в асимптотичних доданках у формулах як для кожного стану домішки, так і для її сумарної концентрації.

Для наступних кроків каскадного розпаду $i = \overline{1, N-1}$ розв'язки крайових задач (5.1б), (5.2), (5.3б), (5.4) як і для попередніх модельних варіантів подаємо через відповідні функції Гріна:

$$c_1^{(i)}(\tau, \xi) = a_{\lambda_1}^{(i-1)} \int_0^\tau \int_0^\xi G_1^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') c_1^{(i-1)}(\tau', \xi') d\xi' d\tau'; \quad (5.26a)$$

$$c_2^{(i)}(\tau, \xi) = a_{\lambda_2}^{(i-1)} \int_0^\tau \int_0^\xi G_2^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') c_2^{(i-1)}(\tau', \xi') d\xi' d\tau'; \quad (5.26б)$$

$$c_3^{(i)}(\tau, \xi) = a_{\lambda_3}^{(i-1)} \int_0^\tau \int_0^\xi G_3^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') c_3^{(i-1)}(\tau', \xi') d\xi' d\tau'. \quad (5.26в)$$

Тут $G_1^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')$, $G_2^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')$ і $G_3^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')$ - функції Гріна задачі (5.1б), (5.2), (5.3б), (5.4) для кожного з етапів розпаду $i = \overline{1, N-1}$.

Для випадку $i = N$ (нерозпадні домішки) процес масоперенесення для даної моделі гетеродифузії у тілі з пастками описується крайовою задачею (5.1в), (5.2), (5.3б), (5.4). Її розв'язок також подамо через відповідні функції Гріна аналогічно до (5.26) для $i = \overline{1, N-1}$, а саме

$$c_1^{(N)}(\xi, \tau) = \int_0^\tau \int_0^{\xi_0} G_1^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda_1}^{(iN)} c_1^{(i)}(\xi', \tau') d\xi' d\tau', \quad (5.27a)$$

$$c_2^{(N)}(\xi, \tau) = \int_0^\tau \int_0^{\xi_0} G_2^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda_2}^{(iN)} c_2^{(i)}(\xi', \tau') d\xi' d\tau', \quad (5.27б)$$

$$c_3^{(N)}(\xi, \tau) = \int_0^\tau \int_0^{\xi_0} G_3^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda_3}^{(iN)} c_3^{(i)}(\xi', \tau') d\xi' d\tau'. \quad (5.27в)$$

Тоді почергово визначивши концентрації $c_j^{(i)}(\xi, \tau)$ через відповідні значення функцій на попередньому етапі каскаду, а також знайшовши функції Гріна, за співвідношеннями (5.26), (5.27) визначимо повний розв'язок вихідної крайової задачі гетеродифузії у середовищі з пастками.

Означимо функції Гріна для крайових задач (5.1б), (5.2), (5.3б), (5.4) аналогічно до моделі гетеродифузії у п.4.1.3.

5.2. Функції Гріна крайових задач гетеродифузії у тілі з пастками каскадного типу

Для узагальнення визначення функцій Гріна математичних моделей, що описують процеси з урахуванням трьох фізично різних станів, подамо вихідні крайові задачі у матричному вигляді.

Нехай вектор-функція $\hat{\mathbf{c}}(\xi, \tau) = \begin{pmatrix} c_1(\xi, \tau) \\ c_2(\xi, \tau) \\ c_3(\xi, \tau) \end{pmatrix}$ є такою, що її елементи $c_i(\xi, \tau)$, $i = \overline{1,3}$,

є неперервними за змінними ξ , τ в області $R = \{(\xi, \tau) : \xi \in [0; \xi_0], \tau \in \mathfrak{R}_+\}$; задовольняють умову Ліпшиця за змінною ξ в області R з константою l [63, 185].

Розглянемо лінійну крайову задачу для системи трьох зв'язаних диференціальних рівнянь в часткових похідних другого порядку

$$\hat{\mathbf{L}}[\hat{\mathbf{c}}(\xi, \tau)] = \hat{\mathbf{F}}(\xi, \tau), \quad (5.28)$$

де

$$\hat{\mathbf{L}} = \begin{pmatrix} L_1^{c_1}(\xi, \tau) & L_1^{c_2}(\xi, \tau) & 0 \\ L_2^{c_1}(\xi, \tau) & L_2^{c_2}(\xi, \tau) & L_2^{c_3}(\xi, \tau) \\ 0 & L_3^{c_2}(\xi, \tau) & L_3^{c_3}(\xi, \tau) \end{pmatrix}, \quad (5.28a)$$

- матричний диференціальний оператор, в якому $L_1^{c_1}(\xi, \tau) = \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + a_{11}$, $L_1^{c_2}(\xi, \tau) \equiv$

$\equiv L_1^{c_2}(\xi) = -d_1 \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} - a_{12}$, $L_2^{c_1}(\xi, \tau) \equiv L_2^{c_1}(\xi) = -d_2 \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} - a_{21}$, $L_2^{c_2}(\xi, \tau) = \frac{\partial}{\partial \tau} - d \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + a_{22}$,

$L_2^{c_3}(\xi, \tau) \equiv L_2^{c_3} = a_{23}$, $L_3^{c_2}(\xi, \tau) \equiv L_3^{c_2} = -a_{32}$, $L_3^{c_3}(\xi, \tau) = \frac{\partial}{\partial \tau} - a_{33}$ (верхні індекси елементів

матриці оператора вказують на яку функцію діє даний елемент $\hat{\mathbf{L}}$); $\hat{\mathbf{F}}(\xi, \tau) = \begin{pmatrix} F_1(\xi, \tau) \\ F_2(\xi, \tau) \\ F_3(\xi, \tau) \end{pmatrix}$

- вектор-функція джерел, де $F_i(z, t) \in L_2 \vee F_i \in D(\mathfrak{R}^2)$.

Нехай задані крайові умови

$$\hat{\mathbf{c}}(\xi, \tau)|_{\tau=0} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}; \hat{\mathbf{c}}(\xi, \tau)|_{\xi=0} = \hat{\mathbf{c}}_0 = \begin{pmatrix} c_0^{(1)} \\ c_0^{(2)} \\ c_0^{(3)} \end{pmatrix}; \hat{\mathbf{c}}(\xi, \tau)|_{\xi=\xi_0} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (5.29)$$

де $c_0^{(i)} \in L_2$, $i = 1, 2, 3$.

Якщо $|\hat{c}(z,t) - \hat{c}_0(z,t)| \leq \beta$ для $\forall t \in \mathfrak{R}_+, z \in [0, z_0]$ (β - відома додатна константа), тоді існує єдиний класичний розв'язок задачі (5.28), (5.29) [185].

Означення 5.1. Функцією Гріна задачі (5.28), (5.29) називається матрична функція

$$\hat{\mathbf{G}}(\xi, \xi'; \tau, \tau') = \begin{pmatrix} G_1(\xi, \xi'; \tau, \tau') & 0 & 0 \\ 0 & G_2(\xi, \xi'; \tau, \tau') & 0 \\ 0 & 0 & G_3(\xi, \xi'; \tau, \tau') \end{pmatrix} = \quad (5.30)$$

$$= \begin{pmatrix} \bar{\mathbf{G}}(\xi, \xi'; \tau, \tau') & 0 \\ 0 & G_3(\xi, \xi'; \tau, \tau') \end{pmatrix}, \quad \bar{\mathbf{G}} = \begin{pmatrix} G_1(\xi, \xi'; \tau, \tau') & 0 \\ 0 & G_2(\xi, \xi'; \tau, \tau') \end{pmatrix},$$

яка визначена в чотиривимірній області $K = K_1 \times K_2 = \{(\xi, \xi'; \tau, \tau') | \xi, \xi' \in [0, \xi_0]; \tau, \tau' \in \mathfrak{R}_+ : \tau' < \tau\}$ і задовольняє такі умови:

- 1) в K матрична функція $\hat{\mathbf{G}}(\xi, \xi'; \tau, \tau')$ є неперервною і має неперервні похідні за змінною τ ;
- 2) для довільних $\xi' \in [0, \xi_0]$, $\tau' \in \mathfrak{R}_+$ функція $\bar{\mathbf{G}}(\xi, \xi'; \tau, \tau')$ має неперервні похідні першого і другого порядку за змінною ξ в кожному з інтервалів $[0, \xi')$ і $(\xi', \xi_0]$, причому похідна першого порядку за змінною ξ у точці $\xi = \xi'$ має стрибок, що дорівнює одиниці:

$$\frac{\partial}{\partial \xi} \bar{\mathbf{G}}(\xi + 0, \xi'; \tau, \tau') - \frac{\partial}{\partial \xi} \bar{\mathbf{G}}(\xi - 0, \xi'; \tau, \tau') = 1;$$

- 3) $\hat{\mathbf{G}}(\xi, \xi'; \tau, \tau') = 0$ при $\tau \leq \tau'$;
- 4) в кожному з інтервалів $[0, \xi')$ і $(\xi', \xi_0]$ для $\tau' \leq \tau$ функція $\hat{\mathbf{G}}(\xi, \xi'; \tau, \tau')$ як функція змінної ξ є розв'язком однорідного рівняння

$$\hat{\mathbf{L}}[\hat{\mathbf{G}}(\xi, \xi'; \tau, \tau')] = 0;$$

- 5) $\hat{\mathbf{G}}(\xi, \xi'; \tau, \tau')$ як функція змінних ξ, τ задовольняє нульові крайові умови типу (5.29).

Зазначимо, що в банаховому просторі $\bar{C}^{(n,q)}(D^p)$ вектор-функцій $\hat{c}(\xi, \tau)$ з нормою

$$\|\mathbf{c}\|_{\bar{C}^{(n,2)}(D^p)} = \sum_{j=1}^2 \|\mathbf{c}_j\|_{\bar{C}^{(n,2)}(D^p)},$$

де $D^p \equiv K' = \{(\xi, \xi'; \tau, \tau') \mid \xi, \xi' \in [0, z_0]; \tau, \tau' \in [0, T]: \tau' < \tau\}$, $\bar{n} = (n_1, n_2)$ і $n_1 = n_2 = 1$, для єдиності розв'язку крайової задачі (5.28), (5.29) необхідно і достатньо, щоб фундаментальна система розв'язків не мала б розв'язків у цілих числах [63].

Крайові задачі гетеродифузії у середовищі з пастками каскадного типу (4.1)-(4.4) є еквівалентними постановці задачі (5.28), (5.29) для кожного $i = 0, \dots, N$ зокрема, якщо

$$\hat{\mathbf{c}}(\xi, \tau) = \hat{\mathbf{c}}^{(i)}(\xi, \tau), \quad \hat{\mathbf{F}}(\xi, \tau) = \hat{\mathbf{F}}[(\xi, \tau); \hat{\mathbf{c}}^{(i-1)}(\xi, \tau)], \quad \hat{\mathbf{c}}^{(i)}(\xi, \tau) \Big|_{\xi=0} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ для } i = \overline{1, N}.$$

Означення 5.2. Якщо $\hat{\mathbf{L}}$ - матричний диференціальний оператор в частинних похідних (5.28а), який діє на узагальнених функціях на підмножині Ω деякого евклідового простору \mathfrak{R}^n , тоді

- функція Гріна (5.30) в точці $(\xi', \tau') \in \Omega$, що відповідає оператору $\hat{\mathbf{L}}$, є будь-яким розв'язком матричного рівняння

$$\hat{\mathbf{L}}\hat{\mathbf{G}}(\xi, \xi'; \tau, \tau') = \hat{\mathbf{\delta}}(\tau - \tau'; \xi - \xi'),$$

$$\text{де } \hat{\mathbf{\delta}}(\tau - \tau'; \xi - \xi') = \begin{pmatrix} \delta(\xi - \xi')\delta(\tau - \tau') \\ \delta(\xi - \xi')\delta(\tau - \tau') \\ \delta(\xi - \xi')\delta(\tau - \tau') \end{pmatrix};$$

- розв'язком крайової задачі $\hat{\mathbf{L}}[\hat{\mathbf{c}}(\xi, \tau)] = \hat{\mathbf{F}}(\xi, \tau)$ є згортка $(\hat{\mathbf{G}} * \hat{\mathbf{F}})$.

Для знаходження матричних функцій Гріна $\hat{\mathbf{G}}(\xi, \xi'; \tau, \tau') = \hat{\mathbf{G}}^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')$, $i = \overline{1, N-1}$, сформулюємо крайову задачу з точковим джерелом для елементів матриці (5.30):

$$\begin{aligned} & \frac{\partial G_1^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')}{\partial \tau} - d_0^{(i)} \frac{\partial^2 G_1^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')}{\partial \xi^2} - d_1^{(i)} \frac{\partial^2 G_2^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')}{\partial \xi^2} + \\ & + a_{11}^{(i)} G_1^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') - a_{12}^{(i)} G_2^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') = \delta(\tau - \tau')\delta(\xi - \xi'), \\ & \frac{\partial G_2^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')}{\partial \tau} - d_2^{(i)} \frac{\partial^2 G_1^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')}{\partial \xi^2} - d^{(i)} \frac{\partial^2 G_2^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')}{\partial \xi^2} - a_{21}^{(i)} G_1^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') + \\ & + a_{22}^{(i)} G_2^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') - a_{23}^{(i)} G_3^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') = \delta(\tau - \tau')\delta(\xi - \xi'), \\ & \frac{\partial G_3^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')}{\partial \tau} - a_{32}^{(i)} G_2^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') + a_{33}^{(i)} G_3^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') = \delta(\tau - \tau')\delta(\xi - \xi') \quad (5.31) \end{aligned}$$

за нульових крайових умов

$$G_1^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') \Big|_{\tau=0} = G_2^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') \Big|_{\tau=0} = G_3^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') \Big|_{\tau=0} = 0;$$

$$\begin{aligned}
G_1^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') \Big|_{\xi=0} &= G_2^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') \Big|_{\xi=0} = 0, \quad i = \overline{1, N-1}; \\
G_1^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') \Big|_{\xi=\xi_0} &= G_2^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') \Big|_{\xi=\xi_0} = 0, \quad i = \overline{1, N-1}.
\end{aligned} \tag{5.32}$$

Застосуємо до крайових задач (5.31), (5.32) інтегральне перетворення Лапласа за часовою змінною ($\tau \rightarrow s$, $G_j^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') \rightarrow \bar{g}_j^{(i)}(s, \tau'; \xi, \xi')$, $j = \overline{1, 3}$). Тоді в зображеннях отримаємо систему диференціально-алгебраїчних рівнянь:

$$\begin{aligned}
(s + a_{11}^{(i)}) \bar{g}_1^{(i)}(s, \tau'; \xi, \xi') - a_{12}^{(i)} \bar{g}_2^{(i)}(s, \tau'; \xi, \xi') - d_0^{(i)} \frac{\partial^2 \bar{g}_2^{(i)}(s, \tau'; \xi, \xi')}{\partial \xi^2} - \\
- d_1^{(i)} \frac{\partial^2 \bar{g}_2^{(i)}(s, \tau'; \xi, \xi')}{\partial \xi^2} = \delta(\xi - \xi') e^{-s\tau}, \\
(s + a_{22}^{(i)}) \bar{g}_2^{(i)}(s, \tau'; \xi, \xi') - a_{21}^{(i)} \bar{g}_1^{(i)}(s, \tau'; \xi, \xi') - a_{23}^{(i)} \bar{g}_3^{(i)}(s, \tau'; \xi, \xi') - \\
- d_2^{(i)} \frac{\partial^2 \bar{g}_1^{(i)}(s, \tau'; \xi, \xi')}{\partial \xi^2} - d^{(i)} \frac{\partial^2 \bar{g}_2^{(i)}(s, \tau'; \xi, \xi')}{\partial \xi^2} = \delta(\xi - \xi') e^{-s\tau}, \\
(s + a_{33}^{(i)}) \bar{g}_3^{(i)}(s, \tau'; \xi, \xi') - a_{32}^{(i)} \bar{g}_2^{(i)}(s, \tau'; \xi, \xi') = \delta(\xi - \xi') e^{-s\tau}
\end{aligned} \tag{5.33}$$

з нульовими граничними умовами

$$\begin{aligned}
\bar{g}_1^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') \Big|_{\xi=0} &= \bar{g}_2^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') \Big|_{\xi=0} = 0; \\
\bar{g}_1^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') \Big|_{\xi=\xi_0} &= \bar{g}_2^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') \Big|_{\xi=\xi_0} = 0, \quad i = \overline{1, N-1}.
\end{aligned} \tag{5.34}$$

До отриманої задачі застосуємо \sin -перетворення Фур'є [262] ($\xi \rightarrow y_n$, $\bar{g}_j^{(i)}(s, \tau'; \xi, \xi') \rightarrow g_j^{(i)}(s, \tau'; y_n, \xi')$, $j = 1, 2$). При цьому врахуємо \sin -перетворення від δ -функції Дірака (4.25). Тоді в зображеннях задача (5.33), (5.34) зведеться до системи алгебраїчних рівнянь

$$\begin{aligned}
[s + a_{11}^{(i)} + d_0^{(i)} y_n^2] g_1^{(i)}(y_n, \xi; s, \tau') + [d_1^{(i)} y_n^2 - a_{12}^{(i)}] g_2^{(i)}(y_n, \xi; s, \tau') &= \sin(y_n \xi') e^{-s\tau'}, \\
[d_2^{(i)} y_n^2 - a_{21}^{(i)}] g_1^{(i)}(y_n, \xi; s, \tau') + [s + a_{22}^{(i)} + d_1^{(i)} y_n^2] g_2^{(i)}(y_n, \xi; s, \tau') - \\
- a_{23}^{(i)} g_3^{(i)}(y_n, \xi; s, \tau') &= \sin(y_n \xi') e^{-s\tau'}, \\
- a_{32}^{(i)} g_2^{(i)}(y_n, \xi; s, \tau') + [s + a_{33}^{(i)}] g_3^{(i)}(y_n, \xi; s, \tau') &= \sin(y_n \xi') e^{-s\tau'}.
\end{aligned} \tag{5.35}$$

Для отримання розв'язку системи рівнянь (5.35) знайдемо її головний визначник [62]

$$\Delta = \begin{vmatrix} s + a_{11}^{(i)} + d_0^{(i)} y_n^2 & d_1^{(i)} y_n^2 - a_{12}^{(i)} & 0 \\ d_2^{(i)} y_n^2 - a_{21}^{(i)} & s + a_{22}^{(i)} + d^{(i)} y_n^2 & a_{23}^{(i)} \\ 0 & -a_{32}^{(i)} & s + a_{33}^{(i)} \end{vmatrix} =$$

$$= s^3 + \bar{\eta}_1 s^2 + \bar{\eta}_2 s + \bar{\eta}_3 = (s - s_1^{(i)}) (s - s_2^{(i)}) (s - s_3^{(i)}),$$

де $\bar{\eta}_1 = (d_0^{(i)} + d^{(i)}) y_n^2 + a_{11}^{(i)} + a_{22}^{(i)} + a_{33}^{(i)}$, $\bar{\eta}_2 = (d_0^{(i)} d^{(i)} - d_2^{(i)} d_1^{(i)}) y_n^4 + [d^{(i)} (a_{33}^{(i)} + a_{11}^{(i)}) +$
 $+ d_0^{(i)} (a_{33}^{(i)} + a_{11}^{(i)}) + d_1^{(i)} a_{21}^{(i)} + d_2^{(i)} a_{12}^{(i)}] y_n^2 + a_{33}^{(i)} (a_{11}^{(i)} + a_{22}^{(i)}) + d_1^{(i)} a_{21}^{(i)} + d_2^{(i)} a_{12}^{(i)}] y_n^2 + a_{33}^{(i)} (a_{11}^{(i)} + a_{22}^{(i)}) +$
 $+ a_{11}^{(i)} a_{22}^{(i)} - a_{23}^{(i)} a_{32}^{(i)} - a_{21}^{(i)} a_{12}^{(i)}$, $\bar{\eta}_3 = y_n^2 a_{33}^{(i)} [(d_0^{(i)} d^{(i)} - d_2^{(i)} d_1^{(i)}) y_n^2 + d^{(i)} a_{11}^{(i)} + d_0^{(i)} (a_{22}^{(i)} - a_{23}^{(i)}) +$
 $+ d_1^{(i)} a_{21}^{(i)} + d_2^{(i)} a_{12}^{(i)}] + a_{11}^{(i)} a_{22}^{(i)} a_{33}^{(i)} - a_{11}^{(i)} a_{23}^{(i)} a_{32}^{(i)} - a_{12}^{(i)} a_{21}^{(i)} a_{33}^{(i)}$.

Визначаємо корені кубічного рівняння $s^3 + \bar{\eta}_1 s^2 + \bar{\eta}_2 s + \bar{\eta}_3 = 0$ аналогічно до визначення коренів рівняння (5.14) з урахуванням відповідних виразів для коефіцієнтів $\bar{\eta}_1$, $\bar{\eta}_2$, $\bar{\eta}_3$ і у виразах (5.16а) η_1 , η_2 , η_3 набувають наступного вигляду $\eta_1 = \bar{\eta}_1$, $\eta_2 = \bar{\eta}_2$, $\eta_3 = \bar{\eta}_3$.

Знаходимо допоміжні визначники системи рівнянь (5.35)

$$\Delta_1 = \sin(y_n \xi') e^{-s\tau'} \begin{vmatrix} 1 & d_1^{(i)} y_n^2 - a_{12}^{(i)} & 0 \\ 1 & s + a_{22}^{(i)} + d^{(i)} y_n^2 & a_{23}^{(i)} \\ 1 & -a_{32}^{(i)} & s + a_{33}^{(i)} \end{vmatrix} = \sin(y_n \xi') e^{-s\tau'} (s^2 + s\bar{A}_1 + \bar{A}_2),$$

$$\Delta_2 = \sin(y_n \xi') e^{-s\tau'} \begin{vmatrix} s + a_{11}^{(i)} + d_0^{(i)} y_n^2 & 1 & 0 \\ d_2^{(i)} y_n^2 - a_{21}^{(i)} & 1 & a_{23}^{(i)} \\ 0 & 1 & s + a_{33}^{(i)} \end{vmatrix} = \sin(y_n \xi') e^{-s\tau'} (s^2 + s\bar{\bar{A}}_1 + \bar{\bar{A}}_2),$$

$$\Delta_3 = \sin(y_n \xi') e^{-s\tau'} \begin{vmatrix} s + a_{11}^{(i)} + d_0^{(i)} y_n^2 & d_1^{(i)} y_n^2 - a_{12}^{(i)} & 1 \\ d_2^{(i)} y_n^2 - a_{21}^{(i)} & s + a_{22}^{(i)} + d^{(i)} y_n^2 & 1 \\ 0 & -a_{32}^{(i)} & 1 \end{vmatrix} = \sin(y_n \xi') e^{-s\tau'} (s^2 + s\bar{\bar{\bar{A}}}_1 + \bar{\bar{\bar{A}}}_2),$$

де $\bar{A}_1 = (d^{(i)} - d_1^{(i)}) y_n^2 + a_{33}^{(i)} + a_{22}^{(i)} + a_{12}^{(i)}$; $\bar{A}_2 = (a_{33}^{(i)} (d^{(i)} - d_1^{(i)}) - d_1^{(i)} a_{23}^{(i)}) y_n^2 + a_{22}^{(i)} a_{33}^{(i)} -$
 $- a_{23}^{(i)} a_{32}^{(i)} + a_{12}^{(i)} a_{33}^{(i)} + a_{23}^{(i)} a_{12}^{(i)}$. $\bar{\bar{A}}_1 = (d_0^{(i)} - d_2^{(i)}) y_n^2 + a_{33}^{(i)} + a_{23}^{(i)} + a_{11}^{(i)} + a_{21}^{(i)}$; $\bar{\bar{A}}_2 = (a_{33}^{(i)} (d_0^{(i)} - d_2^{(i)}) +$
 $+ d_0^{(i)} a_{23}^{(i)}) y_n^2 + a_{11}^{(i)} a_{33}^{(i)} + a_{11}^{(i)} a_{23}^{(i)} + a_{21}^{(i)} a_{33}^{(i)}$; $\bar{\bar{\bar{A}}}_1 = a_{22}^{(i)} + a_{32}^{(i)} + a_{11}^{(i)} + y_n^2 (d_0^{(i)} + d^{(i)})$;
 $\bar{\bar{\bar{A}}}_2 = (d_0^{(i)} d^{(i)} - d_1^{(i)} d_2^{(i)}) y_n^4 + (a_{32}^{(i)} (d_0^{(i)} - d_2^{(i)}) + d_0^{(i)} a_{22}^{(i)} + d_1^{(i)} a_{21}^{(i)} + d_1^{(i)} a_{12}^{(i)}) y_n^2 +$

$$+ a_{11}^{(i)}(a_{22}^{(i)} + d^{(i)} y_n^2 + a_{32}^{(i)}) + a_{21}^{(i)}(a_{32}^{(i)} - a_{12}^{(i)}).$$

Тоді розв'язок системи рівнянь (5.35) набуде вигляду

$$\begin{aligned} g_1^{(i)}(y_n, \xi; s, \tau') &= \frac{\Delta_1}{\Delta} = \sin(y_n \xi') e^{-s\tau'} \frac{s^2 + s\bar{A}_1 + \bar{A}_2}{(s - s_1^{(i)})(s - s_2^{(i)})(s - s_3^{(i)})}, \\ g_2^{(i)}(y_n, \xi; s, \tau') &= \frac{\Delta_2}{\Delta} = \sin(y_n \xi') e^{-s\tau'} \frac{s^2 + s\bar{\bar{A}}_1 + \bar{\bar{A}}_2}{(s - s_1^{(i)})(s - s_2^{(i)})(s - s_3^{(i)})}, \\ g_3^{(i)}(y_n, \xi; s, \tau') &= \frac{\Delta_3}{\Delta} = \sin(y_n \xi') e^{-s\tau'} \frac{s^2 + s\bar{\bar{\bar{A}}}_1 + \bar{\bar{\bar{A}}}_2}{(s - s_1^{(i)})(s - s_2^{(i)})(s - s_3^{(i)})}. \end{aligned} \quad (5.36)$$

До отриманих виразів (5.36) застосуємо обернене перетворення Лапласа, використаємо співвідношення (5.19), а також теорему запізнення [109]. Тоді маємо

$$\begin{aligned} \bar{g}_1^{(i)}(s, \tau'; \xi, \xi') &= \theta(\tau - \tau') \frac{\sin y_n \xi'}{s_i^*} \left\{ (s_2^{(i)} - s_3^{(i)}) [s_1^{(i)2} + \bar{A}_1 s_1^{(i)} + \bar{A}_2] e^{s_1^{(i)}(\tau - \tau')} + \right. \\ &+ \left. (s_3^{(i)} - s_1^{(i)}) [s_2^{(i)2} + \bar{A}_1 s_2^{(i)} + \bar{A}_2] e^{s_2^{(i)}(\tau - \tau')} + (s_1^{(i)} - s_2^{(i)}) [s_3^{(i)2} + \bar{A}_1 s_3^{(i)} + \bar{A}_2] e^{s_3^{(i)}(\tau - \tau')} \right\}, \\ \bar{g}_2^{(i)}(s, \tau'; \xi, \xi') &= \theta(\tau - \tau') \frac{\sin y_n \xi'}{s_i^*} \left\{ (s_2^{(i)} - s_3^{(i)}) [s_1^{(i)2} + \bar{\bar{A}}_1 s_1^{(i)} + \bar{\bar{A}}_2] e^{s_1^{(i)}(\tau - \tau')} + \right. \\ &+ \left. (s_3^{(i)} - s_1^{(i)}) [s_2^{(i)2} + \bar{\bar{A}}_1 s_2^{(i)} + \bar{\bar{A}}_2] e^{s_2^{(i)}(\tau - \tau')} + (s_1^{(i)} - s_2^{(i)}) [s_3^{(i)2} + \bar{\bar{A}}_1 s_3^{(i)} + \bar{\bar{A}}_2] e^{s_3^{(i)}(\tau - \tau')} \right\}, \\ \bar{g}_3^{(i)}(s, \tau'; \xi, \xi') &= \theta(\tau - \tau') \frac{\sin y_n \xi'}{s_i^*} \left\{ (s_2^{(i)} - s_3^{(i)}) [s_1^{(i)2} + \bar{\bar{\bar{A}}}_1 s_1^{(i)} + \bar{\bar{\bar{A}}}_2] e^{s_1^{(i)}(\tau - \tau')} + \right. \\ &+ \left. (s_3^{(i)} - s_1^{(i)}) [s_2^{(i)2} + \bar{\bar{\bar{A}}}_1 s_2^{(i)} + \bar{\bar{\bar{A}}}_2] e^{s_2^{(i)}(\tau - \tau')} + (s_1^{(i)} - s_2^{(i)}) [s_3^{(i)2} + \bar{\bar{\bar{A}}}_1 s_3^{(i)} + \bar{\bar{\bar{A}}}_2] e^{s_3^{(i)}(\tau - \tau')} \right\}. \end{aligned}$$

Тепер застосуємо обернене перетворення Фур'є [262]. Одержимо

$$\begin{aligned} G_1^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') &= \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin y_n \xi \sin y_n \xi'}{s_i^*} \left\{ (s_2^{(i)} - s_3^{(i)}) [s_1^{(i)2} + \bar{A}_1 s_1^{(i)} + \bar{A}_2] e^{s_1^{(i)}(\tau - \tau')} + \right. \\ &+ \left. (s_3^{(i)} - s_1^{(i)}) [s_2^{(i)2} + \bar{A}_1 s_2^{(i)} + \bar{A}_2] e^{s_2^{(i)}(\tau - \tau')} + (s_1^{(i)} - s_2^{(i)}) [s_3^{(i)2} + \bar{A}_1 s_3^{(i)} + \bar{A}_2] e^{s_3^{(i)}(\tau - \tau')} \right\}, \\ G_2^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') &= \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin y_n \xi \sin y_n \xi'}{s_i^*} \left\{ (s_2^{(i)} - s_3^{(i)}) [s_1^{(i)2} + \bar{\bar{A}}_1 s_1^{(i)} + \bar{\bar{A}}_2] e^{s_1^{(i)}(\tau - \tau')} + \right. \\ &+ \left. (s_3^{(i)} - s_1^{(i)}) [s_2^{(i)2} + \bar{\bar{A}}_1 s_2^{(i)} + \bar{\bar{A}}_2] e^{s_2^{(i)}(\tau - \tau')} + (s_1^{(i)} - s_2^{(i)}) [s_3^{(i)2} + \bar{\bar{A}}_1 s_3^{(i)} + \bar{\bar{A}}_2] e^{s_3^{(i)}(\tau - \tau')} \right\}, \\ G_3^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') &= \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin y_n \xi \sin y_n \xi'}{s_i^*} \left\{ (s_2^{(i)} - s_3^{(i)}) [s_1^{(i)2} + \bar{\bar{\bar{A}}}_1 s_1^{(i)} + \bar{\bar{\bar{A}}}_2] e^{s_1^{(i)}(\tau - \tau')} + \right. \end{aligned}$$

$$+ \left(s_3^{(i)} - s_1^{(i)} \right) \left[s_2^{(i)2} + \overline{\overline{A}}_1 s_2^{(i)} + \overline{\overline{A}}_2 \right] e^{s_2^{(i)}(\tau - \tau')} + \left(s_1^{(i)} - s_2^{(i)} \right) \left[s_3^{(i)2} + \overline{\overline{A}}_1 s_3^{(i)} + \overline{\overline{A}}_2 \right] e^{s_3^{(i)}(\tau - \tau')} \}. \quad (5.37)$$

Таким чином ми знайшли функції Гріна задачі гетеродифузії розпадної речовини для шару, коли домішкові речовини перебувають у трьох станах, для етапів $i = \overline{1, N-1}$ каскадного розпаду мігруючих частинок.

Тепер знайдемо матричну функцію Гріна $\mathbf{G}(\xi, \xi'; \tau, \tau') = \mathbf{G}^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')$, яка є розв'язком крайової задачі з точковим джерелом, сформульованої для елементів матриці $G_j^{(N)}$:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial G_1^{(N)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')}{\partial \tau} - d_0^{(N)} \frac{\partial^2 G_1^{(N)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')}{\partial \xi^2} - d_1^{(N)} \frac{\partial^2 G_2^{(N)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')}{\partial \xi^2} + \\ & + a_{11}^{(N)} G_1^{(N)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') - a_{12}^{(N)} G_2^{(N)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') = \delta(\tau - \tau') \delta(\xi - \xi'), \\ & \frac{\partial G_2^{(N)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')}{\partial \tau} - d_2^{(N)} \frac{\partial^2 G_1^{(N)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')}{\partial \xi^2} - d^{(N)} \frac{\partial^2 G_2^{(N)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')}{\partial \xi^2} - a_{21}^{(N)} G_1^{(N)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') + \\ & + a_{22}^{(N)} G_2^{(N)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') - a_{23}^{(N)} G_3^{(N)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') = \delta(\tau - \tau') \delta(\xi - \xi'), \\ & \frac{\partial G_3^{(N)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')}{\partial \tau} - a_{32}^{(N)} G_2^{(N)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') + a_{33}^{(N)} G_3^{(N)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') = \delta(\tau - \tau') \delta(\xi - \xi') \end{aligned} \quad (5.38)$$

за нульових крайових умов

$$\begin{aligned} G_1^{(N)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') \Big|_{\tau=0} &= G_2^{(N)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') \Big|_{\tau=0} = G_3^{(N)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') \Big|_{\tau=0} = 0; \\ G_1^{(N)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') \Big|_{\xi=0} &= G_2^{(N)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') \Big|_{\xi=0} = 0; \\ G_1^{(N)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') \Big|_{\xi=\xi_0} &= G_2^{(N)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') \Big|_{\xi=\xi_0} = 0. \end{aligned} \quad (5.39)$$

Розв'язок крайової задачі (5.38), (5.39) має вигляд

$$\begin{aligned} G_1^{(N)} &= \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin y_n \xi \sin y_n \xi'}{s_N^*} \left\{ (s_2^{(N)} - s_3^{(N)}) \left[s_1^{(N)2} + \overline{\overline{A}}_1 s_1^{(N)} + \overline{\overline{A}}_2 \right] e^{s_1^{(N)}(\tau - \tau')} + \right. \\ & + \left. (s_3^{(N)} - s_1^{(N)}) \left[s_2^{(N)2} + \overline{\overline{A}}_1 s_2^{(N)} + \overline{\overline{A}}_2 \right] e^{s_2^{(N)}(\tau - \tau')} + (s_1^{(N)} - s_2^{(N)}) \left[s_3^{(N)2} + \overline{\overline{A}}_1 s_3^{(N)} + \overline{\overline{A}}_2 \right] e^{s_3^{(N)}(\tau - \tau')} \right\}, \\ G_2^{(N)} &= \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin y_n \xi \sin y_n \xi'}{s_N^*} \left\{ (s_2^{(N)} - s_3^{(N)}) \left[s_1^{(N)2} + \overline{\overline{A}}_1 s_1^{(N)} + \overline{\overline{A}}_2 \right] e^{s_1^{(N)}(\tau - \tau')} + \right. \\ & + \left. (s_3^{(N)} - s_1^{(N)}) \left[s_2^{(N)2} + \overline{\overline{A}}_1 s_2^{(N)} + \overline{\overline{A}}_2 \right] e^{s_2^{(N)}(\tau - \tau')} + (s_1^{(N)} - s_2^{(N)}) \left[s_3^{(N)2} + \overline{\overline{A}}_1 s_3^{(N)} + \overline{\overline{A}}_2 \right] e^{s_3^{(N)}(\tau - \tau')} \right\}, \end{aligned}$$

$$G_3^{(N)} = \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin y_n \xi \sin y_n \xi'}{s_N^*} \left\{ (s_2^{(N)} - s_3^{(N)}) \left[s_1^{(N)2} + \overline{\overline{A}}_1^{(N)} s_1^{(N)} + \overline{\overline{A}}_2^{(N)} \right] e^{s_1^{(N)}(\tau - \tau')} + (s_3^{(N)} - s_1^{(N)}) \times \right. \\ \left. \times \left[s_2^{(N)2} + \overline{\overline{A}}_1^{(N)} s_2^{(N)} + \overline{\overline{A}}_2^{(N)} \right] e^{s_2^{(N)}(\tau - \tau')} + (s_1^{(N)} - s_2^{(N)}) \left[s_3^{(N)2} + \overline{\overline{A}}_1^{(N)} s_3^{(N)} + \overline{\overline{A}}_2^{(N)} \right] e^{s_3^{(N)}(\tau - \tau')} \right\}, \quad (5.40)$$

де $s_N^* = (s_1^{(N)} - s_2^{(N)})(s_2^{(N)} - s_3^{(N)})(s_3^{(N)} - s_1^{(N)})$, $s_1^{(N)}$, $s_2^{(N)}$, $s_3^{(N)}$ - розв'язки кубічного рівняння $s^3 + \overline{\eta}_1^{(N)} s^2 + \overline{\eta}_2^{(N)} s + \overline{\eta}_3^{(N)} = 0$, які знаходимо аналогічно до визначення коренів рівняння (5.14) з урахуванням відповідних виразів для коефіцієнтів $\overline{\eta}_1^{(N)}$, $\overline{\eta}_2^{(N)}$, $\overline{\eta}_3^{(N)}$.

Тобто маємо

$$s_1^{(N)} = -\frac{\overline{\eta}_1^{(N)}}{3} + 2\sqrt{-\overline{p}_N/3} \cos(\overline{\beta}_N/3), \quad s_{2,3}^{(N)} = -\frac{\overline{\eta}_1^{(N)}}{3} - 2\sqrt{-\overline{p}_N/3} \cos\left(\frac{\overline{\beta}_N \pm \pi}{3}\right),$$

$$\text{де } \overline{p}_N = \overline{\eta}_2^{(N)} - \frac{\overline{\eta}_1^{(N)2}}{3}, \quad \overline{q}_N = 2\left(\frac{\overline{\eta}_1^{(N)}}{3}\right)^3 - \frac{\overline{\eta}_1^{(N)}\overline{\eta}_2^{(N)}}{3} + \overline{\eta}_3^{(N)}; \quad \cos \overline{\beta}_N = -\frac{\overline{q}_N}{2\sqrt{-(\overline{p}_N/3)^3}};$$

$$\overline{\eta}_1^{(N)} = (d_0^{(N)} + d^{(N)})y_k^2 + a_{11}^{(N)} + a_{22}^{(N)} + a_{33}^{(N)},$$

$$\overline{\eta}_2^{(N)} = d_N^* y_k^4 + [d^{(N)}(a_{11}^{(N)} + a_{33}^{(N)}) + d_1^{(N)} a_{21}^{(N)} + d_2^{(N)} a_{12}^{(N)} + a_{22}^{(N)} + a_{33}^{(N)}] y_k^2 + \\ + a_{11}^{(N)} a_{22}^{(N)} + a_{11}^{(N)} a_{33}^{(N)} + a_{22}^{(N)} a_{33}^{(N)} - a_{12}^{(N)} a_{21}^{(N)} - a_{23}^{(N)} a_{32}^{(N)},$$

$$\overline{\eta}_3^{(N)} = a_{33}^{(N)} d_N^* y_k^4 + a_{33}^{(N)} [d^{(N)} a_{11}^{(N)} + d_1^{(N)} a_{21}^{(N)} + d_2^{(N)} a_{12}^{(N)} + a_{22}^{(N)}] y_k^2 - \\ - a_{23}^{(N)} a_{32}^{(N)} y_k^2 + a_{11}^{(N)} a_{22}^{(N)} a_{33}^{(N)} - a_{11}^{(N)} a_{23}^{(N)} a_{32}^{(N)} - a_{33}^{(N)} a_{12}^{(N)} a_{21}^{(N)};$$

$$d_N^* = d^{(N)} - d_1^{(N)} d_1^{(N)}; \quad \overline{A}_1^{(N)} = (d^{(N)} - d_1^{(N)}) y_n^2 + a_{33}^{(N)} + a_{22}^{(N)} + a_{12}^{(N)},$$

$$\overline{A}_2^{(N)} = (a_{33}^{(N)} (d^{(N)} - d_1^{(N)}) - d_1^{(N)} a_{23}^{(N)}) y_n^2 + a_{22}^{(N)} a_{33}^{(N)} - a_{23}^{(N)} a_{32}^{(N)} + a_{12}^{(N)} a_{33}^{(N)} + a_{23}^{(N)} a_{12}^{(N)},$$

$$\overline{\overline{A}}_1^{(N)} = (d_0^{(N)} - d_2^{(N)}) y_n^2 + a_{33}^{(N)} + a_{23}^{(N)} + a_{11}^{(N)} + a_{21}^{(N)};$$

$$\overline{\overline{A}}_2^{(N)} = (a_{33}^{(N)} (d_0^{(N)} - d_2^{(N)}) + d_0^{(N)} a_{23}^{(N)}) y_n^2 + a_{11}^{(N)} a_{33}^{(N)} + a_{11}^{(N)} a_{23}^{(N)} + a_{21}^{(N)} a_{33}^{(N)};$$

$$\overline{\overline{\overline{A}}}_1^{(N)} = a_{22}^{(N)} + a_{32}^{(N)} + a_{11}^{(N)} + y_n^2 (d_0^{(N)} + d^{(N)});$$

$$\overline{\overline{\overline{A}}}_2^{(N)} = (d_0^{(N)} d^{(N)} - d_1^{(N)} d_2^{(N)}) y_n^4 + (a_{32}^{(N)} (d_0^{(N)} - d_2^{(N)}) + d_0^{(N)} a_{22}^{(N)} + \\ + d_1^{(N)} a_{21}^{(N)} + d_1^{(N)} a_{12}^{(N)}) y_n^2 + a_{11}^{(N)} (a_{22}^{(N)} + d^{(N)} y_n^2 + a_{32}^{(N)}) + a_{21}^{(N)} (a_{32}^{(N)} - a_{12}^{(N)}).$$

Проілюструємо поведінку отриманих функцій Гріна (5.40). Нехай такого типу функції в просторі $O\xi\tau z$ утворюють поверхні $G_j^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')$, як показано на рис. 5.1.

Зробимо переріз цієї поверхні площиною $\tau = \tau' + \Delta\tau$, перпендикулярною до осі $O\tau$, в

момент часу на віддалі $\Delta\tau$ від моменту дії точкового джерела τ' (рис. 5.1). І позначимо отриману криву $\hat{G}_j^{(i)}(\xi, \xi') \Big|_{\text{задане } \xi'}$, тобто $\hat{G}_j^{(i)}(\xi, \xi') \Big|_{\text{задане } \xi'} = G_j^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') \Big|_{\substack{\tau=\tau'+\Delta\tau \\ \text{задані } \tau', \xi'}}$.

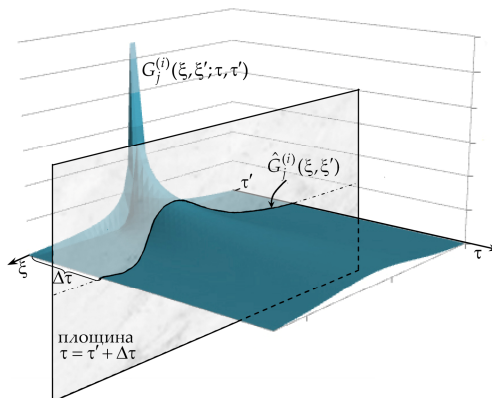


Рис. 5.1. Переріз поверхні $G_j^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')$ площиною $\tau = \tau' + \Delta\tau$

Рис. 5.2-5.4 показують розподіли функцій $\hat{G}_j^{(i)}(\xi, \xi')$ за товщиною шару при фіксованому ξ' . При цьому обчислення функцій $\hat{G}_1^{(i)}(\xi, \xi')$ (рис. 5.2), $\hat{G}_2^{(i)}(\xi, \xi')$ (рис. 5.3) і $\hat{G}_3^{(i)}(\xi, \xi')$ (рис. 5.4) проведені для $\Delta\tau = 0.01$ і таких значень числового дослідження: $d = 0.1$, $d_0 = 0.7$, $a_{11} = 10.5$, $a_{12} = 1$, $a_{21} = 10$, $a_{22} = 5.5$, $a_{23} = 2$, $a_{32} = 4$, $a_{33} = 2.5$; $\tau = 2$, $z_0 = 10$, $\varepsilon = 10^{-6}$. На рис. а наведені графіки функцій $\hat{G}_j^{(i)}(\xi, \xi')$ залежно від координати точкового миттєвого джерела $\xi' = 1; 3; 5; 7; 9$ (криві 1-5 відповідно), на рис. б – вплив коефіцієнта a_{21} на поведінку $\hat{G}_j^{(i)}(\xi, \xi')$ в точці $\xi' = 3$, де криві 1-5 відповідають значенням $a_{21} = 6; 10; 20; 30; 50$.

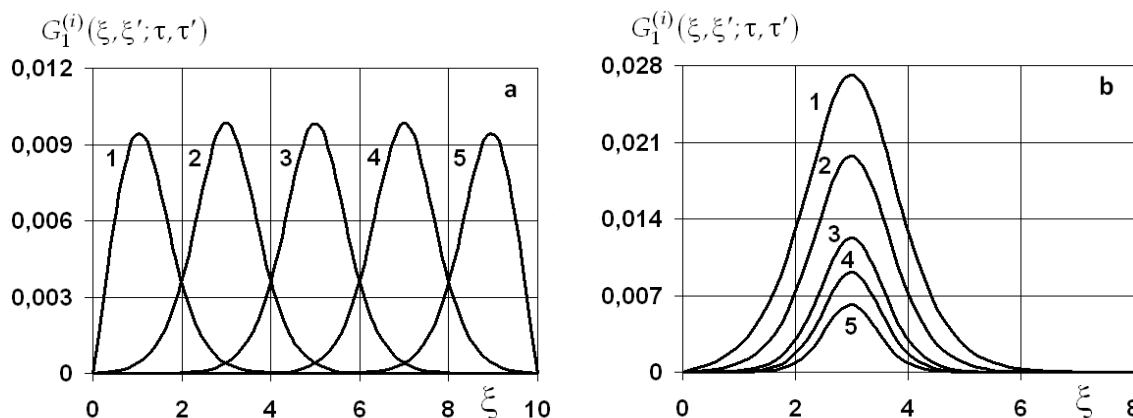


Рис. 5.2. Залежність функції $\hat{G}_1^{(i)}(\xi, \xi')$ від координати розташування джерела (рис. а) і від коефіцієнта a_{21} (рис. б)

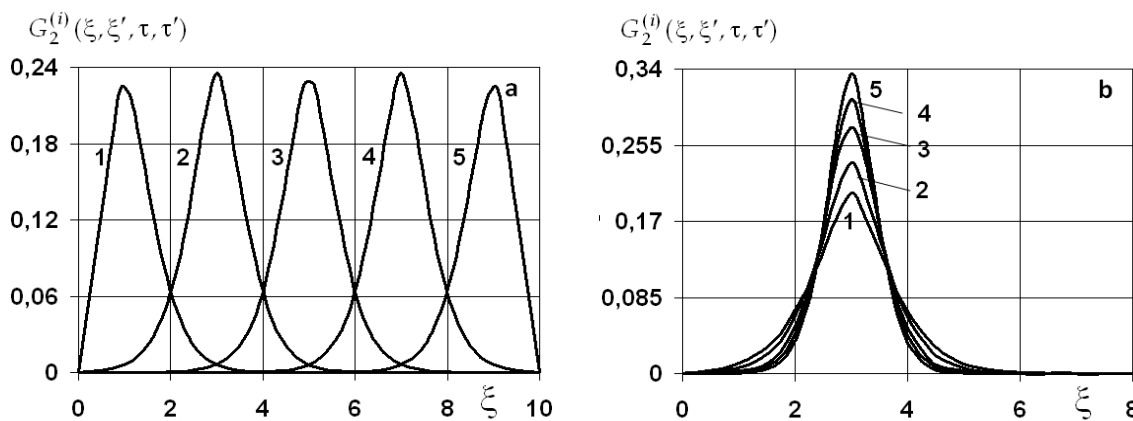


Рис. 5.3. Залежність функції $\hat{G}_2^{(i)}(\xi, \xi')$ від координати розташування джерела (рис. а) і від коефіцієнта a_{21} (рис. б)

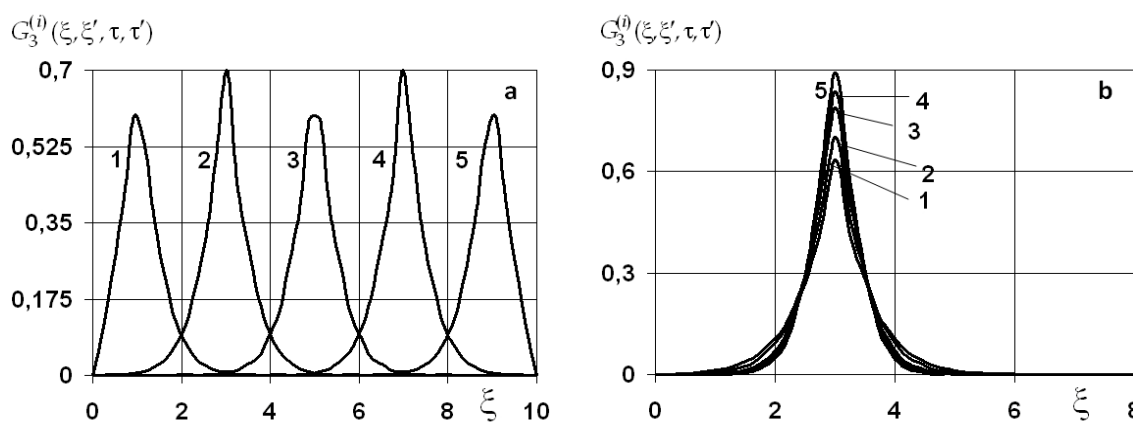


Рис. 5.4. Залежність функції $\hat{G}_3^{(i)}(\xi, \xi')$ від координати розташування джерела (рис. а) і від коефіцієнта a_{21} (рис. б)

Зазначимо, що функції Гріна $G_j^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')$ за рахунок миттєвої дії точкового джерела формують характерні поверхні (рис. 5.1) в момент $\tau = \tau'$, які з часом різко зменшують свої максимальні значення, проте спадання функцій стає більш пологим (рис. 5.2а-5.4а). Зсув координати точкового джерела ξ' від однієї границі тіла до іншої приводить спочатку до зростання максимальних значень $\hat{G}_j^{(i)}(\xi, \xi')$ то точки $\xi' = \xi_0/4$, далі відбувається зменшення $\max_{\xi \in [0; \xi_0]} \hat{G}_j^{(i)}(\xi, \xi')$ до координати $\xi' = \xi_0/2$, а потім зростання - до $\xi' = 3\xi_0/4$ і знову зменшення на інтервалі $\xi' \in [3\xi_0/4; \xi_0]$.

Зауважимо, що значення функції $\hat{G}_1^{(i)}$ на порядок менші значень функції $\hat{G}_2^{(i)}$, яка у свою чергу в рази менша ніж $\hat{G}_3^{(i)}$. Зокрема, для максимальних значень маємо співвідно-

$$\text{шення } \max_{\xi \in [0; \xi_0]} \hat{G}_1^{(i)}(\xi, \xi') \Big|_{\xi'=3} : \max_{\xi \in [0; \xi_0]} \hat{G}_2^{(i)}(\xi, \xi') \Big|_{\xi'=3} : \max_{\xi \in [0; \xi_0]} \hat{G}_3^{(i)}(\xi, \xi') \Big|_{\xi'=3} = 1:24:71 \text{ (рис. 5.2а-5.4а).}$$

Зміна коефіцієнтів дифузії приводить до несуттєвих змін функцій $\hat{G}_j^{(i)}(\xi, \xi')$. Варіація «сорбційних» коефіцієнтів не змінює поведінку $\hat{G}_j^{(i)}(\xi, \xi')$, проте значно впливає на їхні значення. При цьому зростання коефіцієнта a_{21} на порядок приводить до зменшення в рази функції $\hat{G}_1^{(i)}$ (рис. 5.2b) і збільшення значень функцій $\hat{G}_2^{(i)}$ (рис. 5.3b) та $\hat{G}_3^{(i)}$ (рис. 5.4b).

Отже, одержавши значення функцій концентрацій домішки на нульовому кроці розпаду за співвідношеннями (5.25) і послідовно визначивши концентрації частинок на кожному кроці $i = 1, \dots, N - 1$ за формулами (5.26) з урахуванням виразів для функцій Гріна (5.37), (5.40), знайдемо концентрації нерозпадних домішкових частинок у тілі за моделлю гетеродифузії двома шляхами з пастками.

Таким чином ми побудували розв'язок крайової задачі гетеродифузії у тілі з пастками каскадного типу за ітераційною процедурою з використанням функцій Гріна на кожному етапі розпаду домішкових речовин.

5.3. Потоки домішкових компонент через заданий переріз тіла

При оцінці інтенсивності забруднення домішковими частинками водоносних горизонтів важливими характеристиками є потоки в рідкій фазі, по внутрішній поверхні скелету та їхня сума. Як впливає з кінетичних співвідношень (2.63), доведених за Теоремою 2.6, для даної моделі гетеродифузії у середовищі з пастками з урахуванням каскадного розпаду домішкових компонент потоки маси у станах $j = 1$ і $j = 2$ визначаються аналогічно до математичної моделі гетеродифузії двома шляхами (або формулами (4.31) у безрозмірних змінних (3.1)). Зазначимо, що третій стан домішкових частинок $j = 3$ ми означили як «пастки», тобто потік маси є відсутній у цьому стані, хоча домішкові речовини можуть сорбуватися і десорбуватися, ланцюгово розпадатися на дві нові речовини, або не розпадатися.

Отже, сумарний потік маси для даної моделі на кожному з етапів розпаду домішкових речовин $i = 0, \dots, N$ у безрозмірних змінних (3.1) визначається за формулою (4.31).

Знайдемо співвідношення для потоків маси, підставляючи концентрації домішкових частинок (5.25) для $i = 0$, (5.26) для $i = \overline{1, N-1}$ та (5.27) для $i = N$ у формулу (3.96).

Тоді маємо

для $i = 0$

потік домішок у поровому розчині

$$\begin{aligned} \frac{J_{*1}^{(0)}(\tau)}{c_0 \sqrt{k_2^{(0)}} \overline{D}_{11}^{(0)}} &= (d_{\alpha 1}^{(0)} + a_{d1}^{(0)}) \frac{1}{\xi_0} - a_{d1}^{(0)} \left[\frac{\overline{a}_1 \operatorname{ch} \overline{a}_1 (\xi_0 - \xi_*)}{b_1 \operatorname{sh} \overline{a}_1 \xi_0} - \frac{\overline{a}_2 \operatorname{ch} \overline{a}_2 (\xi_0 - \xi_*)}{b_2 \operatorname{sh} \overline{a}_2 \xi_0} \right] + (d_0^{(0)} A_{d1} + d_1^{(0)} A_{d2}) \times \\ &\times \left[\frac{\overline{a}_1 \operatorname{ch} \overline{a}_1 (\xi_0 - \xi_*)}{\operatorname{sh} \overline{a}_1 \xi_0} - \frac{\overline{a}_2 \operatorname{ch} \overline{a}_2 (\xi_0 - \xi_*)}{\operatorname{sh} \overline{a}_2 \xi_0} \right] - \frac{2}{\xi_0} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\cos y_k \xi_*}{s^*} \left\{ (s_2 - s_3) \left[d_{\alpha 1}^{(0)} s_1^2 + \tilde{P}_1 s_1 + \tilde{P}_2 + \frac{\tilde{P}_3}{s_1} \right] e^{s_1 \tau} + \right. \\ &\left. + (s_3 - s_1) \left[d_{\alpha 1}^{(0)} s_2^2 + \tilde{P}_1 s_2 + \tilde{P}_2 + \frac{\tilde{P}_3}{s_2} \right] e^{s_2 \tau} + (s_1 - s_2) \left[d_{\alpha 1}^{(0)} s_3^2 + \tilde{P}_1 s_3 + \tilde{P}_2 + \frac{\tilde{P}_3}{s_3} \right] e^{s_3 \tau} \right\}, \quad (5.41a) \end{aligned}$$

потік домішок по внутрішній поверхні скелету

$$\begin{aligned} \frac{J_{*2}^{(0)}(\tau)}{c_0 \sqrt{k_2^{(0)}} \overline{D}_{11}^{(0)}} &= (d_{\alpha 2}^{(0)} + a_{d2}^{(0)}) \frac{1}{\xi_0} - a_{d2}^{(0)} \left[\frac{\overline{a}_1 \operatorname{ch} \overline{a}_1 (\xi_0 - \xi_*)}{b_1 \operatorname{sh} \overline{a}_1 \xi_0} - \frac{\overline{a}_2 \operatorname{ch} \overline{a}_2 (\xi_0 - \xi_*)}{b_2 \operatorname{sh} \overline{a}_2 \xi_0} \right] + (d_0^{(0)} A_{d1} + d_1^{(0)} A_{d2}) \times \\ &\times \left[\frac{\overline{a}_1 \operatorname{ch} \overline{a}_1 (\xi_0 - \xi_*)}{\operatorname{sh} \overline{a}_1 \xi_0} - \frac{\overline{a}_2 \operatorname{ch} \overline{a}_2 (\xi_0 - \xi_*)}{\operatorname{sh} \overline{a}_2 \xi_0} \right] - \frac{2}{\xi_0} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\cos y_k \xi_*}{s^*} \left\{ (s_2 - s_3) \left[d_{\alpha 2}^{(0)} s_1^2 + \tilde{\tilde{P}}_1 s_1 + \tilde{\tilde{P}}_2 + \frac{\tilde{\tilde{P}}_3}{s_1} \right] e^{s_1 \tau} + \right. \\ &\left. + (s_3 - s_1) \left[d_{\alpha 2}^{(0)} s_2^2 + \tilde{\tilde{P}}_1 s_2 + \tilde{\tilde{P}}_2 + \frac{\tilde{\tilde{P}}_3}{s_2} \right] e^{s_2 \tau} + (s_1 - s_2) \left[d_{\alpha 2}^{(0)} s_3^2 + \tilde{\tilde{P}}_1 s_3 + \tilde{\tilde{P}}_2 + \frac{\tilde{\tilde{P}}_3}{s_3} \right] e^{s_3 \tau} \right\}, \quad (5.41b) \end{aligned}$$

сумарний потік домішкових частинок

$$\begin{aligned} \frac{J_*^{(0)}(\tau)}{c_0 \sqrt{k_2^{(0)}} \overline{D}_{11}^{(0)}} &= (d_{\alpha 2}^{(0)} + a_{d2}^{(0)}) \frac{1}{\xi_0} - a_d^{(0)} \left[\frac{\overline{a}_1 \operatorname{ch} \overline{a}_1 (\xi_0 - \xi_*)}{b_1 \operatorname{sh} \overline{a}_1 \xi_0} - \frac{\overline{a}_2 \operatorname{ch} \overline{a}_2 (\xi_0 - \xi_*)}{b_2 \operatorname{sh} \overline{a}_2 \xi_0} \right] + \\ &+ \left([d_0^{(0)} + d_2^{(0)}] A_{d1} + [d_1^{(0)} + d^{(0)}] A_{d2} \right) \left[\frac{\overline{a}_1 \operatorname{ch} \overline{a}_1 (\xi_0 - \xi_*)}{\operatorname{sh} \overline{a}_1 \xi_0} - \frac{\overline{a}_2 \operatorname{ch} \overline{a}_2 (\xi_0 - \xi_*)}{\operatorname{sh} \overline{a}_2 \xi_0} \right] - \\ &- \frac{2}{\xi_0} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\cos y_k \xi_*}{s^*} \left\{ (s_2 - s_3) \left[d_{\alpha}^{(0)} s_1^2 + \tilde{\tilde{\tilde{P}}}_1 s_1 + \tilde{\tilde{\tilde{P}}}_2 + \frac{\tilde{\tilde{\tilde{P}}}_3}{s_1} \right] e^{s_1 \tau} + \right. \end{aligned}$$

$$+ (s_3 - s_1) \left[d_{\alpha}^{(0)} s_2^2 + \tilde{\tilde{P}}_1 s_2 + \tilde{\tilde{P}}_2 + \frac{\tilde{\tilde{P}}_3}{s_2} \right] e^{s_2 \tau} + (s_1 - s_2) \left[d_{\alpha}^{(0)} s_3^2 + \tilde{\tilde{P}}_1 s_3 + \tilde{\tilde{P}}_2 + \frac{\tilde{\tilde{P}}_3}{s_3} \right] e^{s_3 \tau} \Bigg\}, \quad (5.41B)$$

де $d_{\alpha 1}^{(0)} = \alpha d_0^{(0)} + (1 - \alpha) d_1^{(0)}$, $d_{\alpha 2}^{(0)} = \alpha d_2^{(0)} + (1 - \alpha) d^{(0)}$, $d_{\alpha}^{(0)} = d_{\alpha 1}^{(0)} + d_{\alpha 2}^{(0)}$,

$$a_{d1}^{(0)} = 2 \frac{a_{33} d^*}{b_2 - b_1} [d_0^{(0)} A_{\alpha 1} - d_1^{(0)} A_{\alpha 2}], \quad a_{d2}^{(0)} = 2 \frac{a_{33} d^*}{b_2 - b_1} [d_2^{(0)} A_{\alpha 1} - d^{(0)} A_{\alpha 2}], \quad \tilde{P}_i = d_0^{(0)} P_i + d_1^{(0)} P_i',$$

$$\tilde{\tilde{P}}_i = d_2^{(0)} P_i + d^{(0)} P_i', \quad \tilde{\tilde{P}}_i = \tilde{P}_i + \tilde{\tilde{P}}_i, \quad i = \overline{1, 3}; \quad a_d^{(0)} = a_{d1}^{(0)} + a_{d2}^{(0)}, \quad \bar{R} = d_{\alpha 1}^{(0)} + d_{\alpha 2}^{(0)} + a_{d1}^{(0)} + a_{d2}^{(0)};$$

для $i = 1, \dots, N-1$ маємо

потік домішок у поровому розчині

$$\begin{aligned} \frac{J_{*1}^{(i)}(\tau)}{\sqrt{\bar{k}_2^{(0)} \bar{D}_{11}^{(0)}}} &= \int_0^{\tau} \int_0^{\xi_0} \left\{ a_{\lambda 1}^{(i-1)} d_0^{(i)} \frac{\partial G_1^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_*} c_1^{(i-1)}(\xi', \tau') + \right. \\ &\quad \left. + a_{\lambda 2}^{(i-1)} d_1^{(i)} \frac{\partial G_2^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_*} c_2^{(i-1)}(\xi', \tau') \right\} d\xi' d\tau', \end{aligned} \quad (5.42a)$$

потік домішок по внутрішній поверхні скелету

$$\begin{aligned} \frac{J_{*2}^{(i)}(\tau)}{\sqrt{\bar{k}_2^{(0)} \bar{D}_{11}^{(0)}}} &= \int_0^{\tau} \int_0^{\xi_0} \left\{ a_{\lambda 1}^{(i-1)} d_2^{(i)} \frac{\partial G_1^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_*} c_1^{(i-1)}(\xi', \tau') + \right. \\ &\quad \left. + a_{\lambda 2}^{(i-1)} d^{(i)} \frac{\partial G_2^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_*} c_2^{(i-1)}(\xi', \tau') \right\} d\xi' d\tau', \end{aligned} \quad (5.42b)$$

сумарний потік домішкових частинок

$$\begin{aligned} \frac{J_*^{(i)}(\tau)}{\sqrt{\bar{k}_2^{(0)} \bar{D}_{11}^{(0)}}} &= \int_0^{\tau} \int_0^{\xi_0} \left\{ [a_{\lambda 1}^{(i-1)} d_0^{(i)} + a_{\lambda 1}^{(i-1)} d_2^{(i)}] \frac{\partial G_1^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_*} c_1^{(i-1)}(\xi', \tau') + \right. \\ &\quad \left. + [a_{\lambda 2}^{(i-1)} d_1^{(i)} + a_{\lambda 2}^{(i-1)} d^{(i)}] \frac{\partial G_2^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_*} c_2^{(i-1)}(\xi', \tau') \right\} d\xi' d\tau'. \end{aligned} \quad (5.42B)$$

Для даної математичної моделі похідні від функцій Гріна набувають вигляду

$$\frac{\partial G_1^{(i)}}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_*} = \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} y_n \frac{\cos(y_n \xi_*) \sin(y_n \xi')}{s_i^*} \left\{ (s_2^{(i)} - s_3^{(i)}) [s_1^{(i)2} + \bar{A}_1 s_1^{(i)} + \bar{A}_2] e^{s_1^{(i)}(\tau - \tau')} + \right.$$

$$\begin{aligned}
& + \left(s_3^{(i)} - s_1^{(i)} \right) \left[s_2^{(i)2} + \bar{A}_1 s_2^{(i)} + \bar{A}_2 \right] e^{s_2^{(i)}(\tau - \tau')} + \left(s_1^{(i)} - s_2^{(i)} \right) \left[s_3^{(i)2} + \bar{A}_1 s_3^{(i)} + \bar{A}_2 \right] e^{s_3^{(i)}(\tau - \tau')} \Big\}, \\
\frac{\partial G_2^{(i)}}{\partial \xi} \Big|_{\xi = \xi_*} & = \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} y_n \frac{\cos(y_n \xi_*) \sin(y_n \xi')}{s_i^*} \left\{ \left(s_2^{(i)} - s_3^{(i)} \right) \left[s_1^{(i)2} + \bar{A}_1 s_1^{(i)} + \bar{A}_2 \right] e^{s_1^{(i)}(\tau - \tau')} + \right. \\
& \left. + \left(s_3^{(i)} - s_1^{(i)} \right) \left[s_2^{(i)2} + \bar{A}_1 s_2^{(i)} + \bar{A}_2 \right] e^{s_2^{(i)}(\tau - \tau')} + \left(s_1^{(i)} - s_2^{(i)} \right) \left[s_3^{(i)2} + \bar{A}_1 s_3^{(i)} + \bar{A}_2 \right] e^{s_3^{(i)}(\tau - \tau')} \right\},
\end{aligned}$$

для $i = N$

потік нерозпадних домішок у поровому розчині

$$\begin{aligned}
\frac{J_{*1}^{(N)}(\tau)}{\sqrt{k_2^{(0)}} \bar{D}_{11}^{(0)}} & = \int_0^{\tau} \int_0^{\xi_0} \left\{ d_0^{(N)} \frac{\partial G_1^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Big|_{\xi = \xi_*} \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 1}^{(iN)} c_1^{(i)}(\xi', \tau') + \right. \\
& \left. + d_1^{(N)} \frac{\partial G_2^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Big|_{\xi = \xi_*} \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 2}^{(iN)} c_2^{(i)}(\xi', \tau') \right\} d\xi' d\tau', \quad (5.43a)
\end{aligned}$$

потік нерозпадних домішок по внутрішній поверхні скелету

$$\begin{aligned}
\frac{J_{*2}^{(N)}(\tau)}{\sqrt{k_2^{(0)}} \bar{D}_{11}^{(0)}} & = \int_0^{\tau} \int_0^{\xi_0} \left\{ d_2^{(N)} \frac{\partial G_1^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Big|_{\xi = \xi_*} \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 1}^{(iN)} c_1^{(i)}(\xi', \tau') + \right. \\
& \left. + d^{(N)} \frac{\partial G_2^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Big|_{\xi = \xi_*} \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 2}^{(iN)} c_2^{(i)}(\xi', \tau') \right\} d\xi' d\tau', \quad (5.43б)
\end{aligned}$$

сумарний потік домішкових частинок

$$\begin{aligned}
\frac{J_*^{(N)}(\tau)}{\sqrt{k_2^{(0)}} \bar{D}_{11}^{(0)}} & = \int_0^{\tau} \int_0^{\xi_0} \left\{ \left(d_0^{(N)} + d_2^{(N)} \right) \frac{\partial G_1^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Big|_{\xi = \xi_*} \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 1}^{(iN)} c_1^{(i)}(\xi', \tau') + \right. \\
& \left. + \left(d_1^{(N)} + d^{(N)} \right) \frac{\partial G_2^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Big|_{\xi = \xi_*} \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 2}^{(iN)} c_2^{(i)}(\xi', \tau') \right\} d\xi' d\tau'; \quad (5.43в)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial G_1^{(N)}(\xi, \xi', \tau, \tau')}{\partial \xi} \Big|_{\xi = \xi_*} & = \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} y_n \frac{\cos(y_n \xi_*) \sin(y_n \xi')}{s_N^*} \left\{ \left(s_2^{(N)} - s_3^{(N)} \right) \left[s_1^{(N)2} + \right. \right. \\
& \left. \left. + \bar{A}_1 s_1^{(N)} + \bar{A}_2 \right] e^{s_1^{(N)}(\tau - \tau')} + \left(s_3^{(N)} - s_1^{(N)} \right) \left[s_2^{(N)2} + \bar{A}_1 s_2^{(N)} + \bar{A}_2 \right] e^{s_2^{(N)}(\tau - \tau')} + \right. \\
& \left. + \left(s_1^{(N)} - s_2^{(N)} \right) \left[s_3^{(N)2} + \bar{A}_1 s_3^{(N)} + \bar{A}_2 \right] e^{s_3^{(N)}(\tau - \tau')} \right\},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial G_2^{(N)}(\xi, \xi', \tau, \tau')}{\partial \xi} \right|_{\xi=\xi_*} &= \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} y_n \frac{\cos(y_n \xi_*) \sin(y_n \xi')}{s_N^*} \left\{ (s_2^{(N)} - s_3^{(N)}) \left[s_1^{(N)2} + \right. \right. \\ &+ \left. \left. \bar{A}_1 s_1^{(N)} + \bar{A}_2 \right] e^{s_1^{(N)}(\tau-\tau')} + (s_3^{(N)} - s_1^{(N)}) \left[s_2^{(N)2} + \bar{A}_1 s_2^{(N)} + \bar{A}_2 \right] e^{s_2^{(N)}(\tau-\tau')} + \right. \\ &\left. + (s_1^{(N)} - s_2^{(N)}) \left[s_3^{(N)2} + \bar{A}_1 s_3^{(N)} + \bar{A}_2 \right] e^{s_3^{(N)}(\tau-\tau')} \right\}. \end{aligned}$$

Потоки розпадних домішкових речовин через нижню границю шару $\xi = \xi_0$ знаходимо як частковий випадок формул (5.41)-(5.43):

для $i = 0$

потік домішок у поровому розчині

$$\begin{aligned} \frac{J_{01}^{(0)}(\tau)}{c_0 \sqrt{k_2^{(0)}} \bar{D}_{11}^{(0)}} &= (d_{\alpha 1}^{(0)} + a_{d1}^{(0)}) \frac{1}{\xi_0} + a_{d1}^{(0)} \left[\frac{\bar{a}_1}{\text{sh } \bar{a}_1 \xi_0} - \frac{\bar{a}_2}{b_2 \text{sh } \bar{a}_2 \xi_0} \right] + \\ &+ (d_0^{(0)} A_{d1} + d_1^{(0)} A_{d2}) \left[\frac{\bar{a}_1}{\text{sh } \bar{a}_1 \xi_0} - \frac{\bar{a}_2}{\text{sh } \bar{a}_2 \xi_0} \right] - \frac{2}{\xi_0} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{s^*} \left\{ (s_2 - s_3) \left[d_{\alpha 1}^{(0)} s_1^2 + \right. \right. \\ &+ \left. \left. \tilde{P}_1 s_1 + \tilde{P}_2 + \frac{\tilde{P}_3}{s_1} \right] e^{s_1 \tau} + (s_3 - s_1) \left[d_{\alpha 1}^{(0)} s_2^2 + \tilde{P}_1 s_2 + \tilde{P}_2 + \frac{\tilde{P}_3}{s_2} \right] e^{s_2 \tau} + \right. \\ &\left. + (s_1 - s_2) \left[d_{\alpha 1}^{(0)} s_3^2 + \tilde{P}_1 s_3 + \tilde{P}_2 + \frac{\tilde{P}_3}{s_3} \right] e^{s_3 \tau} \right\}. \end{aligned} \quad (5.44a)$$

потік домішок по внутрішній поверхні скелету

$$\begin{aligned} \frac{J_{02}^{(0)}(\tau)}{c_0 \sqrt{k_2^{(0)}} \bar{D}_{11}^{(0)}} &= (d_{\alpha 2}^{(0)} + a_{d2}^{(0)}) \frac{1}{\xi_0} - a_{d2}^{(0)} \left[\frac{\bar{a}_1}{b_1 \text{sh } \bar{a}_1 \xi_0} - \frac{\bar{a}_2}{b_2 \text{sh } \bar{a}_2 \xi_0} \right] + \\ &+ (d_0^{(0)} A_{d1} + d_1^{(0)} A_{d2}) \left[\frac{\bar{a}_1}{\text{sh } \bar{a}_1 \xi_0} - \frac{\bar{a}_2}{\text{sh } \bar{a}_2 \xi_0} \right] - \frac{2}{\xi_0} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{s^*} \left\{ (s_2 - s_3) \left[d_{\alpha 2}^{(0)} s_1^2 + \right. \right. \\ &+ \left. \left. \tilde{\tilde{P}}_1 s_1 + \tilde{\tilde{P}}_2 + \frac{\tilde{\tilde{P}}_3}{s_1} \right] e^{s_1 \tau} + (s_3 - s_1) \left[d_{\alpha 2}^{(0)} s_2^2 + \tilde{\tilde{P}}_1 s_2 + \tilde{\tilde{P}}_2 + \frac{\tilde{\tilde{P}}_3}{s_2} \right] e^{s_2 \tau} + \right. \\ &\left. + (s_1 - s_2) \left[d_{\alpha 2}^{(0)} s_3^2 + \tilde{\tilde{P}}_1 s_3 + \tilde{\tilde{P}}_2 + \frac{\tilde{\tilde{P}}_3}{s_3} \right] e^{s_3 \tau} \right\}. \end{aligned} \quad (5.44б)$$

сумарний потік домішкових частинок

$$\begin{aligned}
\frac{J_0^{(0)}(\tau)}{c_0 \sqrt{k_2^{(0)} D_{11}^{(0)}}} &= \left(d_{\alpha 2}^{(0)} + a_{d 2}^{(0)} \right) \frac{1}{\xi_0} - a_d^{(0)} \left[\frac{\bar{a}_1}{b_1 \operatorname{sh} \bar{a}_1 \xi_0} - \frac{\bar{a}_2}{b_2 \operatorname{sh} \bar{a}_2 \xi_0} \right] + \\
&+ \left(\left[d_0^{(0)} + d_2^{(0)} \right] A_{d1} + \left[d_1^{(0)} + d^{(0)} \right] A_{d2} \right) \left[\frac{\bar{a}_1}{\operatorname{sh} \bar{a}_1 \xi_0} - \frac{\bar{a}_2}{\operatorname{sh} \bar{a}_2 \xi_0} \right] - \\
&- \frac{2}{\xi_0} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{s^*} \left\{ (s_2 - s_3) \left[d_{\alpha}^{(0)} s_1^2 + \tilde{\tilde{P}}_1 s_1 + \tilde{\tilde{P}}_2 + \frac{\tilde{\tilde{P}}_3}{s_1} \right] e^{s_1 \tau} + (s_2 - s_3) \left[d_{\alpha}^{(0)} s_2^2 + \tilde{\tilde{P}}_1 s_2 + \right. \right. \\
&\left. \left. + \tilde{\tilde{P}}_2 + \frac{\tilde{\tilde{P}}_3}{s_2} \right] e^{s_2 \tau} + (s_1 - s_2) \left[d_{\alpha}^{(0)} s_3^2 + \tilde{\tilde{P}}_1 s_3 + \tilde{\tilde{P}}_2 + \frac{\tilde{\tilde{P}}_3}{s_3} \right] e^{s_3 \tau} \right\}. \quad (5.44\text{В})
\end{aligned}$$

Для інших етапів каскадного розпаду домішкових речовин справджуються формули (5.42) для $i = 1, \dots, N-1$ та (5.43) для $i = N$, в яких

$$\begin{aligned}
\left. \frac{\partial G_1^{(i)}}{\partial \xi} \right|_{\xi=\xi_0} &= \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} y_n \frac{(-1)^n \sin(y_n \xi')}{s_i^*} \left\{ (s_2^{(i)} - s_3^{(i)}) \left[s_1^{(i)2} + \bar{A}_1 s_1^{(i)} + \bar{A}_2 \right] e^{s_1^{(i)}(\tau-\tau')} + \right. \\
&+ \left. (s_3^{(i)} - s_1^{(i)}) \left[s_2^{(i)2} + \bar{A}_1 s_2^{(i)} + \bar{A}_2 \right] e^{s_2^{(i)}(\tau-\tau')} + (s_1^{(i)} - s_2^{(i)}) \left[s_3^{(i)2} + \bar{A}_1 s_3^{(i)} + \bar{A}_2 \right] e^{s_3^{(i)}(\tau-\tau')} \right\}, \\
\left. \frac{\partial G_2^{(i)}}{\partial \xi} \right|_{\xi=\xi_0} &= \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} y_n \frac{(-1)^n \sin(y_n \xi')}{s_i^*} \left\{ (s_2^{(i)} - s_3^{(i)}) \left[s_1^{(i)2} + \bar{\bar{A}}_1 s_1^{(i)} + \bar{\bar{A}}_2 \right] e^{s_1^{(i)}(\tau-\tau')} + \right. \\
&+ \left. (s_3^{(i)} - s_1^{(i)}) \left[s_2^{(i)2} + \bar{\bar{A}}_1 s_2^{(i)} + \bar{\bar{A}}_2 \right] e^{s_2^{(i)}(\tau-\tau')} + (s_1^{(i)} - s_2^{(i)}) \left[s_3^{(i)2} + \bar{\bar{A}}_1 s_3^{(i)} + \bar{\bar{A}}_2 \right] e^{s_3^{(i)}(\tau-\tau')} \right\}, \\
\left. \frac{\partial G_1^{(N)}}{\partial \xi}(\xi, \xi', \tau, \tau') \right|_{\xi=\xi_0} &= \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} y_n \frac{(-1)^n \sin(y_n \xi')}{s_N^*} \left\{ (s_2^{(N)} - s_3^{(N)}) \left[s_1^{(N)2} + \right. \right. \\
&+ \left. \bar{A}_1 s_1^{(N)} + \bar{A}_2 \right] e^{s_1^{(N)}(\tau-\tau')} + (s_3^{(N)} - s_1^{(N)}) \left[s_2^{(N)2} + \bar{A}_1 s_2^{(N)} + \bar{A}_2 \right] e^{s_2^{(N)}(\tau-\tau')} + \\
&\left. + (s_1^{(N)} - s_2^{(N)}) \left[s_3^{(N)2} + \bar{A}_1 s_3^{(N)} + \bar{A}_2 \right] e^{s_3^{(N)}(\tau-\tau')} \right\}, \\
\left. \frac{\partial G_2^{(N)}}{\partial \xi}(\xi, \xi', \tau, \tau') \right|_{\xi=\xi_0} &= \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} y_n \frac{(-1)^n \sin(y_n \xi')}{s_N^*} \left\{ (s_2^{(N)} - s_3^{(N)}) \left[s_1^{(N)2} + \right. \right. \\
&+ \left. \bar{\bar{A}}_1 s_1^{(N)} + \bar{\bar{A}}_2 \right] e^{s_1^{(N)}(\tau-\tau')} + (s_3^{(N)} - s_1^{(N)}) \left[s_2^{(N)2} + \bar{\bar{A}}_1 s_2^{(N)} + \bar{\bar{A}}_2 \right] e^{s_2^{(N)}(\tau-\tau')} + \\
&\left. + (s_1^{(N)} - s_2^{(N)}) \left[s_3^{(N)2} + \bar{\bar{A}}_1 s_3^{(N)} + \bar{\bar{A}}_2 \right] e^{s_3^{(N)}(\tau-\tau')} \right\}
\end{aligned}$$

$$+ \left(s_1^{(N)} - s_2^{(N)} \right) \left[s_3^{(N)2} + \bar{A}_1 s_3^{(N)} + \bar{A}_2 \right] e^{s_3^{(N)}(\tau - \tau')} \Big\}. \quad (5.45)$$

Зазначимо, що, хоча потоки розпадних речовин визначаються лише процесами масоперенесення у поровому розчині та по внутрішній поверхні скелету (як і у моделі гетеродифузії двома шляхами), наявність у моделі третього стану для домішкових частинок (тобто пасток) значно ускладнює як асимптотичні доданки [88] для кроку розпаду $i = 0$ у формулах (5.41), так і ті, що залежать від часової змінної для всіх етапів каскадного розпаду домішкових компонент, тобто співвідношення (5.42), (5.43).

5.4. Кількість розпадних речовин, що пройшла через нижню границю шару за час τ_*

Кількість розпадних домішкових речовин $Q_0^{(i)}(\tau)$, що за час τ_* пройшли через одиницю площі поверхні шару $\xi = \xi_0$, для кожного етапу каскадного розпаду можемо знайти, проінтегрувавши за часом відповідні вирази для сумарних потоків (5.44в), (5.45). Після інтегрування від 0 до τ_* отримаємо

для $i = 0$

$$\begin{aligned} \frac{Q_0^{(0)}(\tau)}{c_0 \sqrt{k_2^{(0)} D_{11}^{(0)}}} &= \left\{ \left(d_{\alpha 2}^{(0)} + a_{d 2}^{(0)} \right) \frac{1}{\xi_0} - a_d^{(0)} \left[\frac{\bar{a}_1}{b_1 \operatorname{sh} \bar{a}_1 \xi_0} - \frac{\bar{a}_2}{b_2 \operatorname{sh} \bar{a}_2 \xi_0} \right] + \right. \\ &+ \left. \left[d_0^{(0)} + d_2^{(0)} \right] A_{d 1} + \left[d_1^{(0)} + d^{(0)} \right] A_{d 2} \left[\frac{\bar{a}_1}{\operatorname{sh} \bar{a}_1 \xi_0} - \frac{\bar{a}_2}{\operatorname{sh} \bar{a}_2 \xi_0} \right] \right\} \tau_* - \\ &- \frac{2}{\xi_0} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{s_*^k} \left\{ (s_2 - s_3) \left[d_{\alpha}^{(0)} s_1^2 + \tilde{\tilde{P}}_1 s_1 + \tilde{\tilde{P}}_2 + \frac{\tilde{\tilde{P}}_3}{s_1} \right] (1 - e^{s_1 \tau}) + (s_2 - s_3) \left[d_{\alpha}^{(0)} s_2^2 + \right. \right. \\ &+ \left. \left. \tilde{\tilde{P}}_1 s_2 + \tilde{\tilde{P}}_2 + \frac{\tilde{\tilde{P}}_3}{s_2} \right] (1 - e^{s_2 \tau}) + (s_1 - s_2) \left[d_{\alpha}^{(0)} s_3^2 + \tilde{\tilde{P}}_1 s_3 + \tilde{\tilde{P}}_2 + \frac{\tilde{\tilde{P}}_3}{s_3} \right] (1 - e^{s_3 \tau}) \right\}, \quad (5.46a) \end{aligned}$$

для $i = 1, \dots, N-1$

$$\frac{Q_0^{(i)}(\tau)}{\sqrt{k_2^{(0)} D_{11}^{(0)}}} = \int_0^{\tau_*} \int_0^{\tau} \int_0^{\xi_0} \left\{ \left[a_{\lambda 1}^{(i-1)} d_0^{(i)} + a_{\lambda 1}^{(i-1)} d_2^{(i)} \right] \frac{\partial G_1^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Big|_{\xi = \xi_*} c_1^{(i-1)}(\xi', \tau') + \right.$$

$$+ \left[a_{\lambda_2}^{(i-1)} d_1^{(i)} + a_{\lambda_2}^{(i-1)} d^{(i)} \right] \frac{\partial G_2^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_*} c_2^{(i-1)}(\xi', \tau') \Big\} d\xi' d\tau' d\tau, \quad (5.46б)$$

для $i = N$

$$\frac{Q_0^{(N)}(\tau)}{\sqrt{k_2^{(0)} D_{11}^{(0)}}} = \int_0^{\tau_*} \int_0^{\tau} \int_0^{\xi_0} \left\{ (d_0^{(N)} + d_2^{(N)}) \frac{\partial G_1^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_*} \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda_1}^{(iN)} c_1^{(i)}(\xi', \tau') + \right. \\ \left. + (d_1^{(N)} + d^{(N)}) \frac{\partial G_2^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_*} \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda_2}^{(iN)} c_2^{(i)}(\xi', \tau') \right\} d\xi' d\tau' d\tau. \quad (5.46в)$$

Зазначимо, що для $i = 0$ ми отримали формулу (5.46а) для знаходження кількісних значень $Q_0^{(0)}(\tau_*)$. У той же час для обчислення функцій $Q_0^{(i)}(\tau_*)$ ми побудували ітераційний процес, який для кожного кроку вимагає звертання до функцій концентрацій, знайдених на попередньому кроці та похідних від функцій Гріна, визначених для даного етапу.

5.5. Схема модулів комплексу програм пакету GeterPas для моделі гетеродифузії двома шляхами у тілі з пастками

Для розрахунку і аналізу концентрацій розпадних домішкових компонент, у тому числі в різних станах знаходження частинок – дифузія у водному поровому розчині, переміщення по внутрішній поверхні скелету та потрапляння і перебування у пастках, на всіх ($i = \overline{0, N}$) етапах каскадного розпаду розроблено програмний модуль комплексу програм моделі гетеродифузії двома шляхами з пастками пакету GeterPas. Комп'ютерні програми створені на мовах Fortran та Pascal на основі формул (5.25а)-(5.25г) для концентрацій частинок у трьох станах та їхньої суми на нульовому етапі розпаду, співвідношень (5.26а)-(5.26в) для концентрацій на i -му ($i = \overline{1, N-1}$) етапі з використанням формул (5.37) для знаходження відповідних функцій Гріна, а також виразів (5.27а)-(5.27в) для концентрацій нерозпадних домішкових речовин ($i = N$) разом з формулами (5.40) для функцій Гріна на останньому етапі каскадного розпаду [62, 93].

Розроблено окремі програмні модулі для розрахунку потоків маси [87] за формулами (5.41а)-(5.41в), (5.42а)-(5.42в) і (5.43а)-(5.43в) для кількості речовин, що пройшли через нижню границю шару за певний проміжок часу, на основі виразів (5.46а)-(5.46в).

Архітектуру комплексу модулів програм для моделювання процесів масо перенесення домішкових речовин, що супроводжуються взаємними переходами частинок між їхніми станами, за каскадного розпаду мігруючих речовин в рамках моделі гетеродифузії двома шляхами у середовищі з пастками наведено на рис. 5.5. Зазначимо, що програмний модуль для концентрацій є базовим (і незалежним) в даній реалізації комплексу, а модулі для розрахунку потоків маси та кількості речовини, що пройшла через шар, функціонують лише у взаємодії з програмним модулем для концентрацій (рис. 5.5), при цьому в рамках кожного етапу каскадного розпаду – «горизонтальна» взаємодія модулів.

На рис. 5.6 наведена схема алгоритму модуля комплексу для розрахунку концентрацій домішкових речовин за їх каскадного розпаду для всіх етапів $i = \overline{0, N}$. В той же час алгоритми модуля пакету програм для розрахунку потоків розпадних домішок співпадають з відповідними алгоритмами для моделі гетеродифузії двома шляхами, тобто їх схема відповідає зображеній на рис. 4.4. На рис. 5.7 проілюстрована схема алгоритму модуля комплексу для розрахунку кількостей домішкових речовин, що за заданий проміжок часу пройшли через шар, за каскадного розпаду мігруючих домішкових частинок для всіх етапів $i = \overline{0, N}$.

Зауважимо, що програмний модуль для розрахунку концентрацій домішкових компонент, які мігрують у тілі, містить три циклічні процеси, які запускаються на виконання, наприклад, для знаходження сумарних концентрацій (рис. 5.5) на різних етапах розпаду. Проте за необхідності розрахунку концентрацій домішкових частинок в окремих станах запускається на виконання і виконується тільки відповідні окремі програми модуля. Програмний модуль для обчислення кількостей домішкових речовин, що пройшли через шар, розроблений з використанням циклічного процесу з галуженням у взаємодії з модулем розрахунку концентрацій на кожному етапі розпаду.

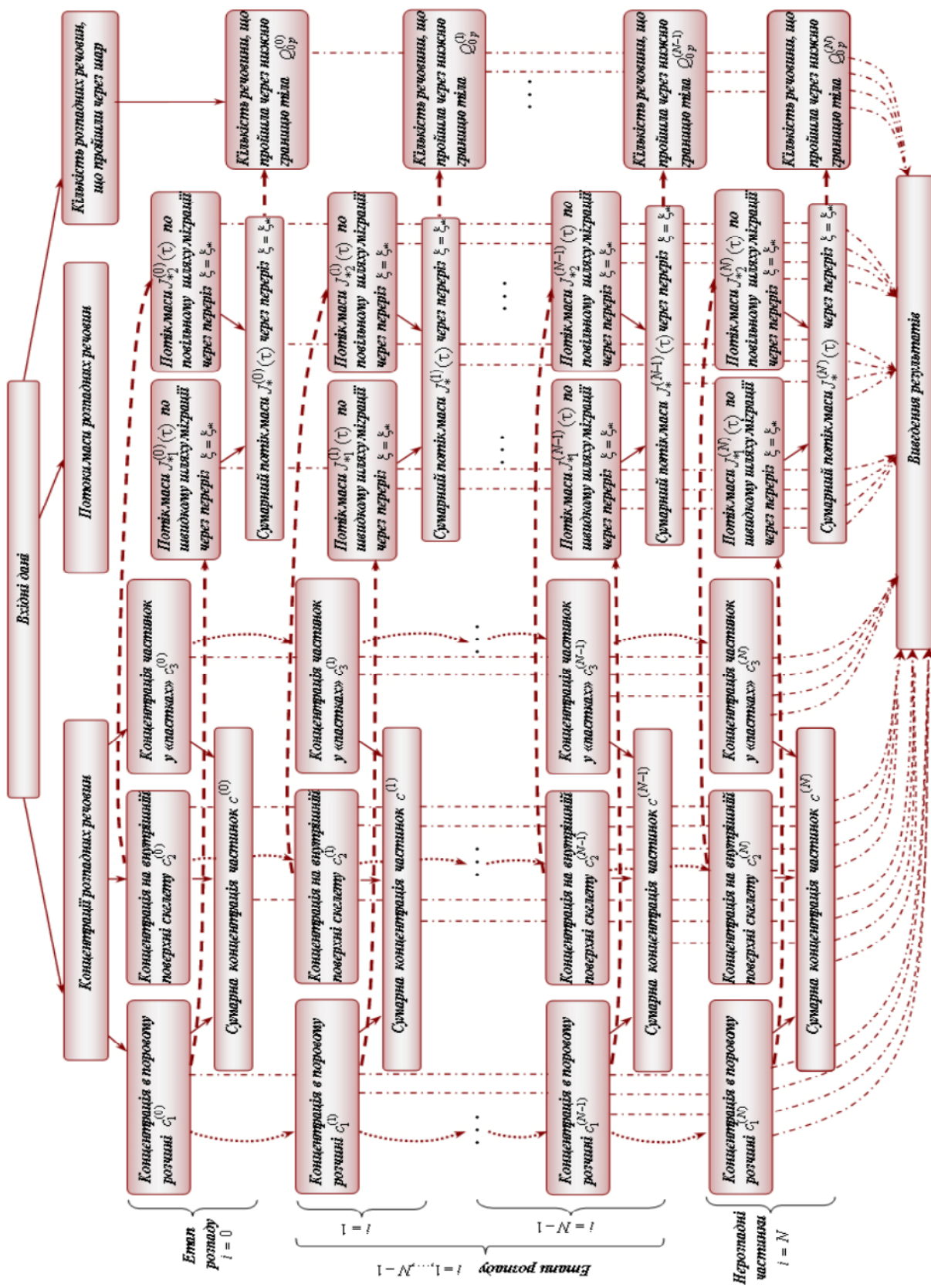


Рис. 5.5. Архітектура комплексу модулів програм пакету GeterPas моделі гетеродифузії у тілі з пастками за каскадного розпаду частинки

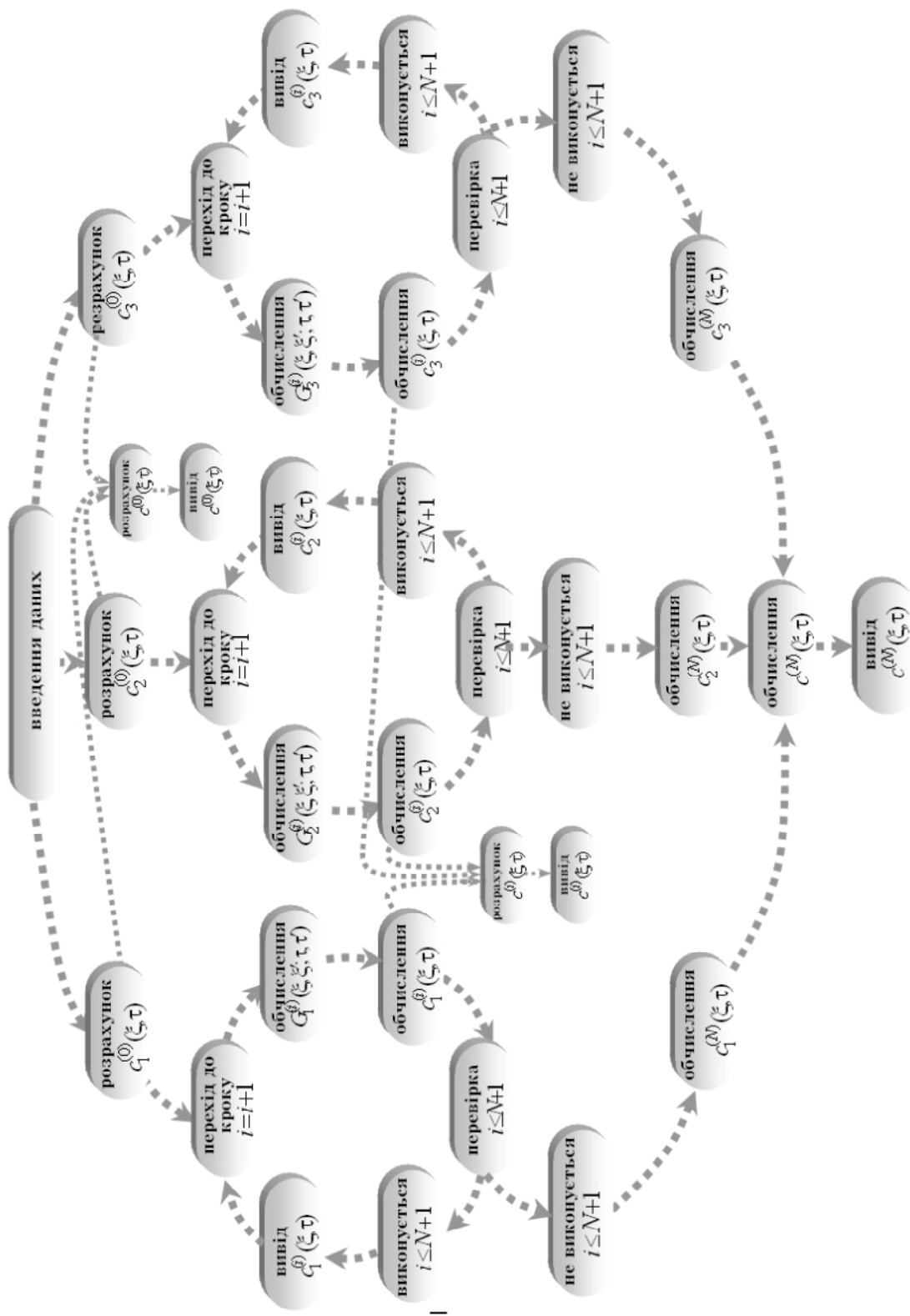


Рис. 5.6. Схема модуля комплексу програм пакету GeterPas для моделі гетеродифузії двома шляхами у тілі з пастками

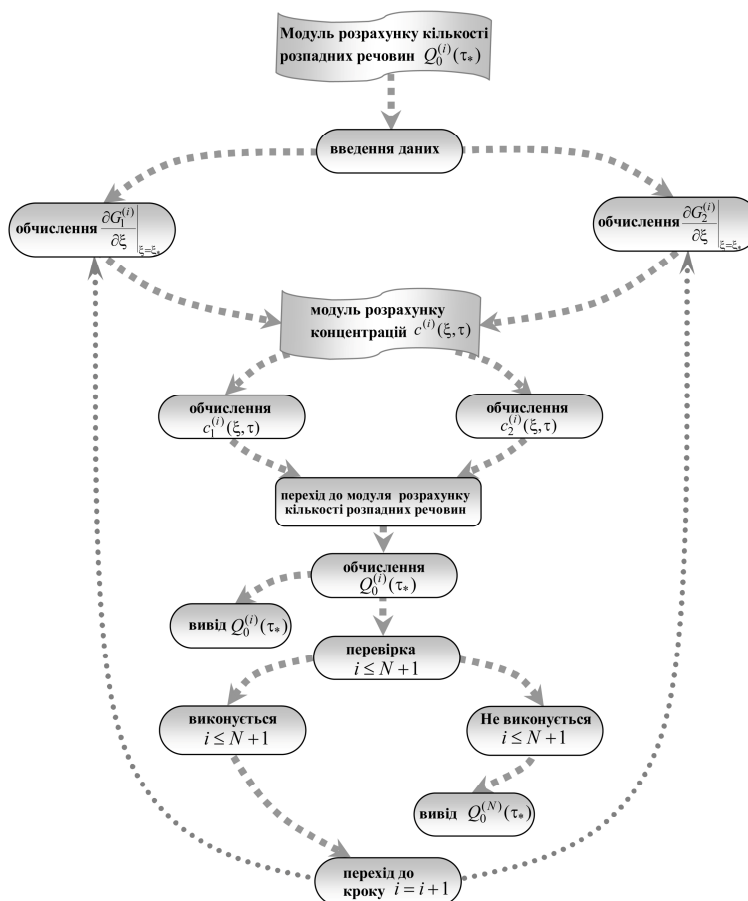


Рис. 5.7. Схема модуля комплексу програм пакету GeterPas для розрахунку кількості домішкових речовин, що пройшли через шар, за моделлю гетеродифузії двома шляхами у тілі з пастками

На рис. 5.8 наведений приклад роботи програмного модуля для розрахунку концентрацій з введенням параметрів задачі на нульовому і першому етапах каскадного розпаду.

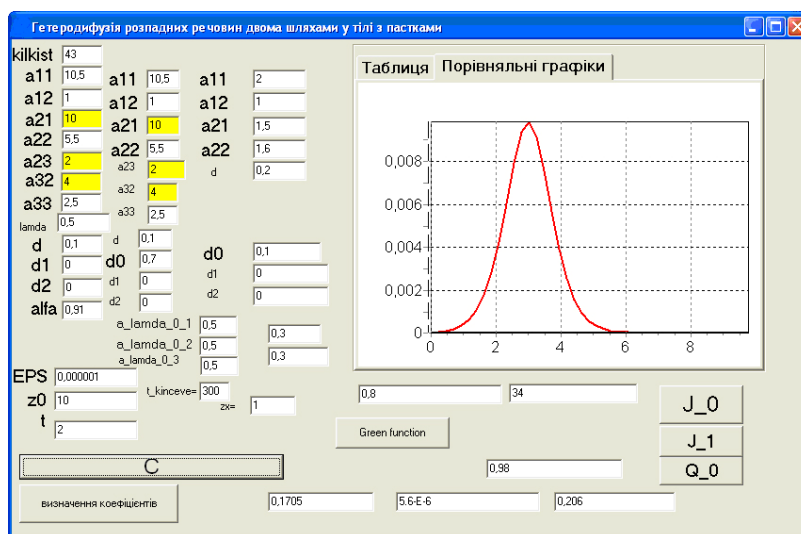


Рис. 5.8. Приклад роботи програмного модуля для розрахунку концентрацій за моделлю гетеродифузії з пастками

5.6. Числовий експеримент для моделі гетеродифузії двома шляхами у тілі з пастками

Числовий аналіз концентрацій домішкової речовини за каскадного розпаду частинок для моделі гетеродифузії розпадної речовини у середовищі з пастками проведено за формулами (5.25), (5.26) для таких базових значень числового дослідження, $\bar{k}_1^{(0)} = 4$, $\bar{k}_2^{(0)} = 1$, $\bar{k}_3^{(0)} = 2$, $\bar{k}_4^{(0)} = 1$, $\tilde{\lambda}_1^{(1)} = 0.5$, $\tilde{\lambda}_2^{(1)} = 0.5$, $\tilde{\lambda}_3^{(1)} = 0.5$, $\tilde{\lambda}_1^{(0N)} = 0.01$, $\tilde{\lambda}_2^{(0N)} = 0.01$, $\tilde{\lambda}_3^{(0N)} = 0.01$, $\bar{k}_1^{(1)} = 2$, $\bar{k}_2^{(1)} = 0.5$, $\bar{k}_3^{(1)} = 1.5$, $\bar{k}_4^{(1)} = 0.1$, $\tilde{\lambda}_1^{(2)} = 0.4$, $\tilde{\lambda}_2^{(2)} = 0.4$, $\tilde{\lambda}_3^{(2)} = 0.4$, $\tilde{\lambda}_1^{(1N)} = 0.01$, $\tilde{\lambda}_2^{(1N)} = 0.01$, $\tilde{\lambda}_3^{(1N)} = 0.01$, $\bar{k}_1^{(2)} = 3$, $\bar{k}_2^{(2)} = 0.8$, $\bar{k}_3^{(2)} = 1.5$, $\bar{k}_4^{(2)} = 0.2$, $\tilde{\lambda}_1^{(3)} = 0.45$, $\tilde{\lambda}_2^{(3)} = 0.45$, $\tilde{\lambda}_3^{(3)} = 0.45$, $\tilde{\lambda}_1^{(2N)} = 0.01$, $\tilde{\lambda}_2^{(2N)} = 0.01$, $\tilde{\lambda}_3^{(2N)} = 0.01$. В розрахункових формулах ці параметри використовуються в коефіцієнтах, які в собі містять складові від сорбції, десорбції і розпаду на певному етапі розпаду. Відповідно для розрахунків базові значення таких коефіцієнтів є такими: $\alpha = 0.25$; $a_{11}^{(0)} = 4.51$, $a_{12}^{(0)} = 1$, $a_{21}^{(0)} = 4$, $a_{22}^{(0)} = 3.51$, $a_{23}^{(0)} = 1$, $a_{32}^{(0)} = 2$, $a_{33}^{(0)} = 1.51$, $d^{(0)} = 0.8$, $a_{\lambda 1}^{(0)} = a_{\lambda 2}^{(0)} = a_{\lambda 3}^{(0)} = 0.5$, $a_{11}^{(1)} = 2.41$, $a_{12}^{(1)} = 0.5$, $a_{21}^{(1)} = 2$, $a_{22}^{(1)} = 2.41$; $a_{23}^{(1)} = 0.1$, $a_{32}^{(1)} = 1.5$, $a_{33}^{(1)} = 0.51$, $d^{(1)} = 0.1$, $d_0^{(1)} = 0.9$, $a_{\lambda 1}^{(1)} = a_{\lambda 2}^{(1)} = a_{\lambda 3}^{(1)} = 0.4$, $a_{11}^{(2)} = 3.46$, $a_{12}^{(2)} = 0.8$, $a_{21}^{(2)} = 3$, $a_{22}^{(2)} = 2.76$; $a_{23}^{(2)} = 0.2$, $a_{32}^{(2)} = 1.5$, $a_{33}^{(2)} = 0.66$, $d^{(2)} = 0.2$, $d_0^{(2)} = 0.8$, $a_{\lambda 1}^{(2)} = a_{\lambda 2}^{(2)} = a_{\lambda 3}^{(2)} = 0.45$, $\tau = 0.8$.

5.6.1. Числовий експеримент для встановлення закономірностей концентрації частинок на нульовому етапі розпаду

Для моделі гетеродифузії двома шляхами у тілі з пастками розподіли концентрацій на швидкому $c_1^{(0)}(\xi, \tau)$, на повільному $c_2^{(0)}(\xi, \tau)$ шляхах міграції, в пастках $c_3^{(0)}(\xi, \tau)$ та їх сумарної концентрації $c^{(0)}(\xi, \tau)$ подано на рис. 5.9 у різні моменти безрозмірного часу $\tau = 0.8, 2, 20$ (криві – 1-3 відповідно) для наступних значень коефіцієнтів поверхневого розподілу домішкових частинок між станами $\alpha = 0.25$ (рис.а), $\alpha = 0.5$ (рис.б), $\alpha = 0.75$ (рис.с) та $\alpha = 0.91$ (рис.д). Тут штриховими лініями позначено концентрацію на швидкому шляху (криві а), малими штриховими лініями – концентрацію на повільному шляху (криві б), штрих-пунктирними лініями – концентрацію, що потрапила в пастки (криві с), а суцільними – сумарну концентрацію домішкових частинок.

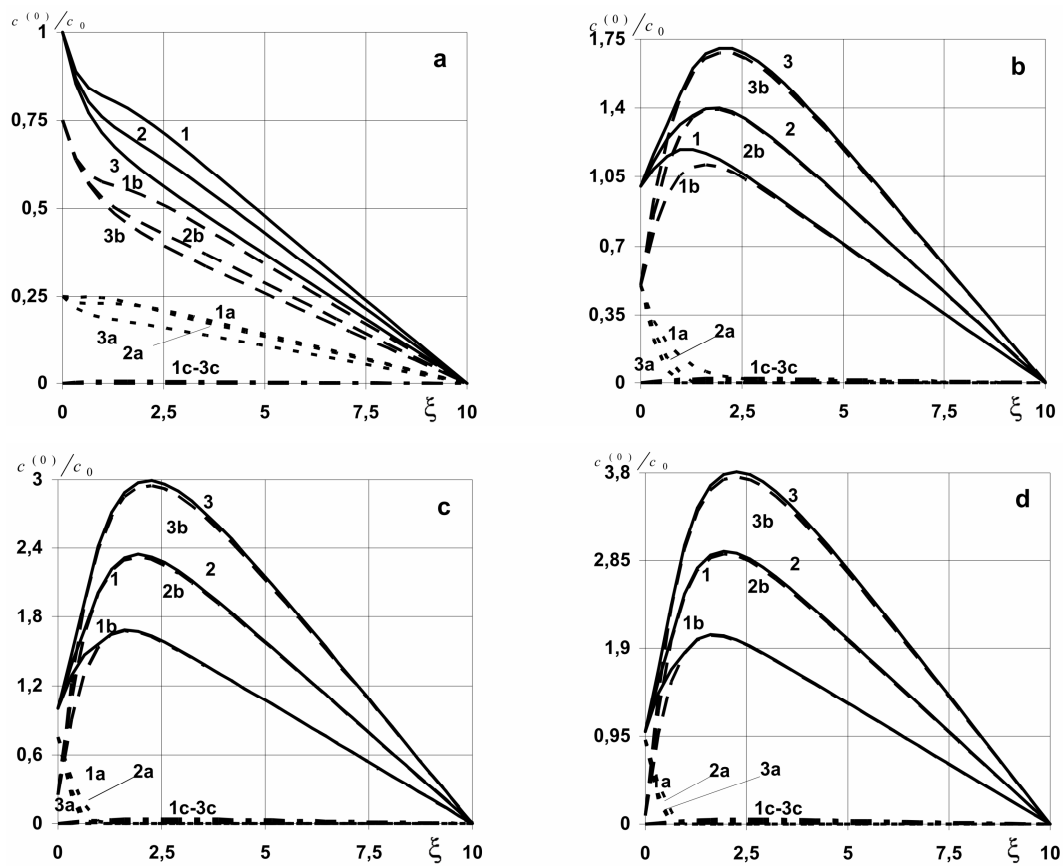


Рис. 5.9. Розподіли концентрацій домішкової речовини $K_1^{(0)}$ на швидкому, $K_2^{(0)}$ на повільному шляхах міграції, $K_3^{(0)}$ в об'ємі скелету та їхня сума $K^{(0)}$ на нульовому етапі каскадного розпаду у різні моменти часу для $\alpha = 0.25$ (рис.а), $\alpha = 0.5$ (рис.б), $\alpha = 0.75$ (рис.с) та $\alpha = 0.91$ (рис.д)

Для моделі гетеродифузії двома шляхами у тілі з пастками коефіцієнт поверхневого розподілу домішкових частинок між станами α суттєво впливає на поведінку і значення як концентрацій на кожному зі шляхів міграції, так і сумарної концентрації домішкової речовини, проте не має суттєвого впливу на концентрацію в пастках (рис. 5.9). Так для малих часів (криві 1с, рис. 5.9) концентрації речовини, що попала в пастки з повільного шляху міграції майже не спостерігається, це зумовлено малим часом протікання процесу міграції речовини та розпадом частинок на нульовому етапі каскаду. З часом спостерігається повільне накопичення мігруючої речовини в пастках, але по відношенню до сумарної концентрації її частка складає в точці досягнення максимуму концентрації в пастках до концентрації в тій самій точці 1.41% у момент часу $\tau = 20$ для випадків $\alpha = 0.5, 0.75, 0.91$ (рис. 5.9б, 5.9с, 5.9д) та 1% для $\alpha = 0.25$ (рис. 5.9а).

Для моделі гетеродифузії двома шляхами у тілі з пастками характерна подібна поведінка сумарної концентрації для переважного попадання домішкової речовини з

поверхні на повільний шлях міграції ($\alpha < 0.5$) як і для моделі гетеродифузії двома шляхами, де функція сумарної концентрації є спадною для досліджуваних моментів часу (рис. 5.9a), проте для ($\alpha \geq 0.5$) сумарна концентрація приймає дещо більші значення (рис. 5.9 b, c, d). Максимум сумарної концентрації досягається в при поверхневій області тіла на таких глибинах $[0.129\xi_0; 0.225\xi_0]$ (рис. 5.9 b, c, d).

На рис. 5.10 наведено розподіли сумарної концентрації розпадної домішкової речовини $\mathbf{K}^{(0)}$ у різні моменти безрозмірного часу $\tau = 0.6; 0.8; 1.2; 2; 20$ (криві – 1-5 відповідно). Тут і надалі рис.а наведено для малих ($\alpha = 0.25$), а рис.б – для великих ($\alpha = 0.91$) значень коефіцієнта α , який визначає частку домішкової речовини на нульовому етапі розпаду, що з поверхні тіла $\xi = 0$ потрапила на швидкий шлях дифузії.

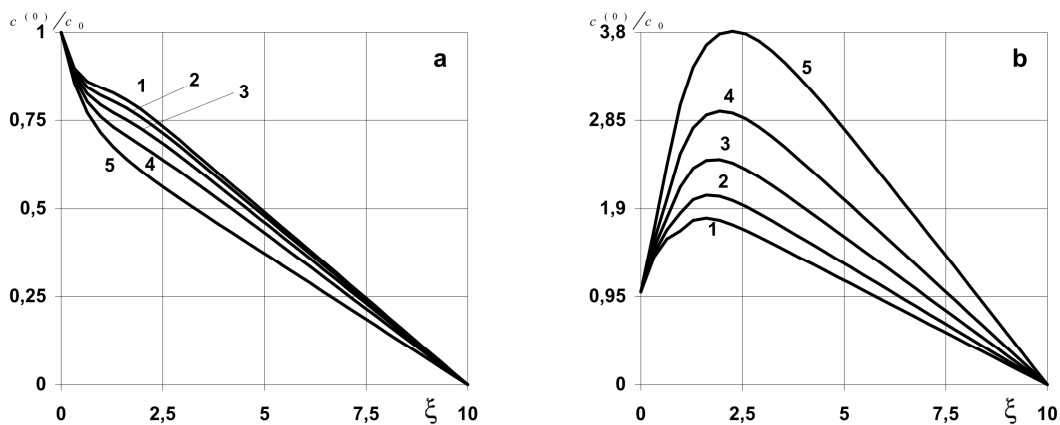


Рис.5.10. Розподіли сумарної концентрації домішкової речовини $\mathbf{K}^{(0)}$ на нульовому етапі каскадного розпаду у різні моменти часу для $\alpha = 0.25$ (рис.а) і $\alpha = 0.91$ (рис.б)

Коефіцієнт поверхневого розподілу домішкових частинок впливає на поведінку сумарної концентрації речовини. І для випадку $\alpha = 0.25$ (рис. 5.10a) маємо зменшення концентрації з часом, тоді як для випадку $\alpha = 0.91$ (рис. 5.10b) концентрація зростає, що зумовлено потраплянням більшої кількості речовини на швидкий шлях міграції речовини та накопиченню її в тілі. Для випадку переважного потрапляння речовини на швидкий шлях міграції $\alpha = 0.91$ (рис. 5.10b) $\max_{\xi \in [0; \xi_0]} c^{(0)}(\xi, \tau)$ спостерігається в такій області тіла $[0.161\xi_0; 0.225\xi_0]$.

На рис. 5.11 проілюстровано розподіли сумарної концентрації домішкової речовини $c^{(0)}(\xi, \tau)$ при різних значеннях відношення коефіцієнтів дифузії на повільному і швидкому шляхах $d = 0.01, 0.05, 0.1, 0.25, 0.5, 0.9$ (криві 1-6 відповідно).

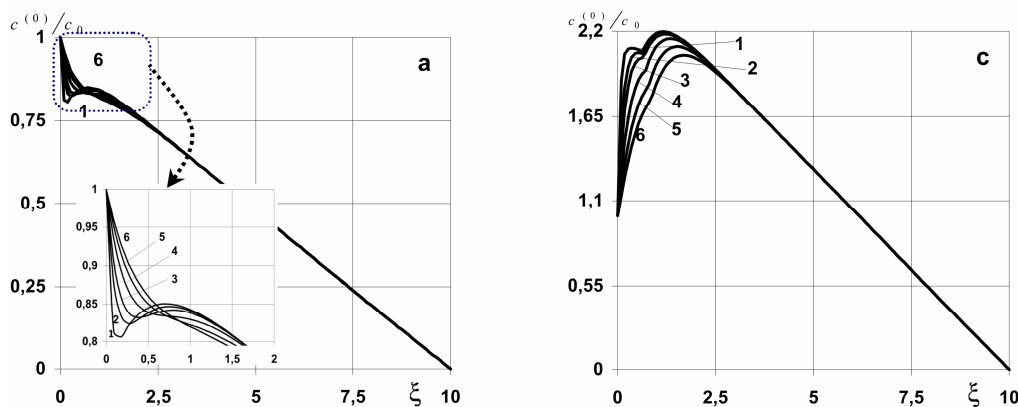


Рис. 5.11. Розподіли концентрацій домішкової речовини сума $\mathbf{K}^{(0)}$ на нульовому етапі каскадного розпаду при різних значеннях коефіцієнта дифузії d для $\alpha = 0.25$ (рис.а) і $\alpha = 0.91$ (рис.б)

Зростання коефіцієнта дифузії d для $\alpha = 0.91$ (рис. 5.11б) призводить до зростання сумарної концентрації, проте на відстані $0.22\xi_0$ вплив цього коефіцієнта є не значимим і відмінність між значеннями сумарної концентрації спостерігаються в третій значимій цифрі. Для випадку $\alpha = 0.25$ (рис. 5.11а) відсутність впливу коефіцієнта дифузії d на сумарну концентрацію спостерігається на тій самій відділі від поверхні, що і для випадку $\alpha = 0.91$, але в при поверхневій області тіла спостерігається спочатку зростання значень концентрації $c^{(0)}(\xi, \tau)$ з відповідним збільшенням коефіцієнта дифузії. Для $d \leq 0.1$ спостерігається локальне зростання сумарної концентрації від точки $\xi = 0.027\xi_0$ для $d = 0.01$ (крива 1, рис. 5.11а), $\xi = 0.036\xi_0$ для $d = 0.05$ (крива 2, рис. 5.11а) та $\xi = 0.045\xi_0$ для $d = 0.05$ (крива 3, рис. 5.11а).

На рис. 5.12 наведено розподіли сумарної концентрації домішкової речовини $\mathbf{K}^{(0)}$ при різних значеннях параметра $k_1^{(0)} = 4, 6, 8, 10, 12$ (криві 1-5 відповідно).

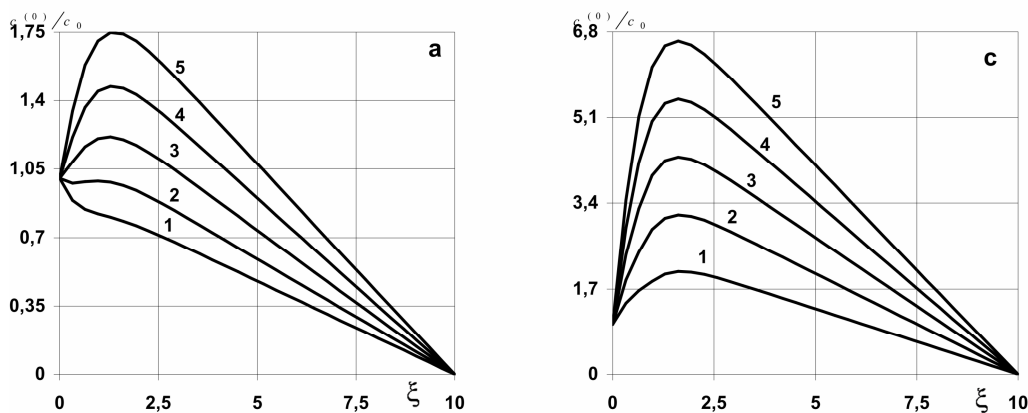


Рис.5.12. Розподіли концентрацій домішкової речовини $\mathbf{K}^{(0)}$ на нульовому етапі каскадного розпаду при різних значеннях коефіцієнта $k_1^{(0)}$ для $\alpha = 0.25$ (рис.а) і $\alpha = 0.91$ (рис.б)

При зростанні коефіцієнта $k_1^{(0)}$, який показує, яка частина речовини $\mathbf{K}^{(0)}$ перемістилась зі швидкого шляху міграції на повільний, відбувається зростання сумарної концентрації в усій області тіла (рис. 5.12). Так для випадку $\alpha = 0.91$ (рис. 5.12b) збільшення коефіцієнта $k_1^{(0)}$ у двічі призводить до зростання $\max_{\xi \in [0; \xi_0]} c^{(0)}(\xi, \tau)$ в 2.1 рази (криві 2 та 5, рис. 5.12b), а для випадку $\alpha = 0.25$ (рис. 5.12a) - у 1.77 разів (криві 2 та 5, рис. 5.12a).

5.6.2. Числовий експеримент для встановлення закономірностей концентрації частинок на першому етапі розпаду

Проведено симуляцію концентрації домішкової речовини $\mathbf{K}^{(1)}$, яка утворилася внаслідок розпаду домішкової речовини $\mathbf{K}^{(0)}$, за формулами (5.26). Оскільки вирази для концентрацій $c_1^{(1)}(\xi, \tau)$, $c_2^{(1)}(\xi, \tau)$, $c_3^{(1)}(\xi, \tau)$ пропорційні коефіцієнтам $a_{\lambda_1}^{(0)}$, $a_{\lambda_2}^{(0)}$, $a_{\lambda_3}^{(0)}$ (які рівні між собою) спочатку дослідимо вплив цих параметрів на поведінку сумарної концентрації $c^{(1)}(\xi, \tau)$. Для моменту безрозмірного часу $\tau = 0.8$ на рис. 5.13 і для моменту $\tau = 20$ на рис. 5.14 наведено розподіли сумарної концентрації домішкової речовини $\mathbf{K}^{(1)}$ на 1-му етапі каскадного розпаду для різних значень нормованого коефіцієнта інтенсивності розпаду на нульовому етапі $a_{\lambda_1}^{(0)} = a_{\lambda_2}^{(0)} = a_{\lambda_3}^{(0)} = 0.1, 0.3, 0.5, 0.7, 1.1$ (криві 1-5 відповідно).

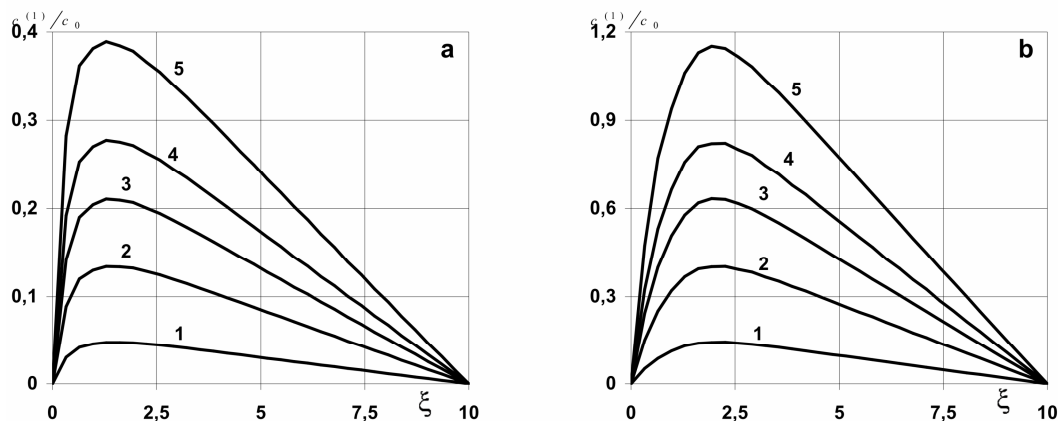


Рис.5.13. Розподіли сумарної концентрації речовини $\mathbf{K}^{(1)}$ на першому етапі каскадного розпаду у момент часу $\tau = 0.8$ залежно від параметра $a_{\lambda_1}^{(0)}$ для $\alpha = 0.25$ (рис.а) і $\alpha = 0.91$ (рис.б)

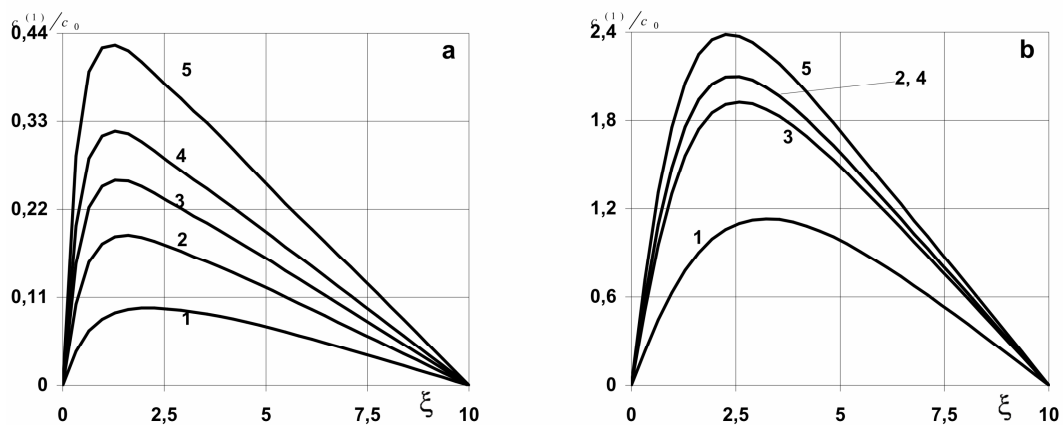


Рис. 5.14. Розподіли сумарної концентрації речовини $K^{(1)}$ на першому етапі каскадного розпаду у момент часу $\tau = 20$ залежно від параметра $a_{\lambda_1}^{(0)}$ для $\alpha = 0.25$ (рис.а) і $\alpha = 0.91$ (рис.б)

Зазначимо, що для моделі гетеродифузії двома шляхами у тілі з пастками як і для моделі гетеродифузії двома шляхами на першому етапі розпаду для всіх моментів часу та довільного коефіцієнта поверхневого розподілу домішкових частинок між станами $\alpha \in [0;1]$ збільшення коефіцієнта, що відповідає за інтенсивність розпаду, спричинює пропорційне зростання сумарної концентрації в усій області тіла (рис. 5.13, 5.14).

На рис. 5.15 наведено розподіли сумарної концентрації розпадних частинок речовини $K^{(1)}$ у різні моменти безрозмірного часу $\tau = 0.8, 1.2, 1.5, 2, 20, 50, 100$ (криві 1-7 відповідно).

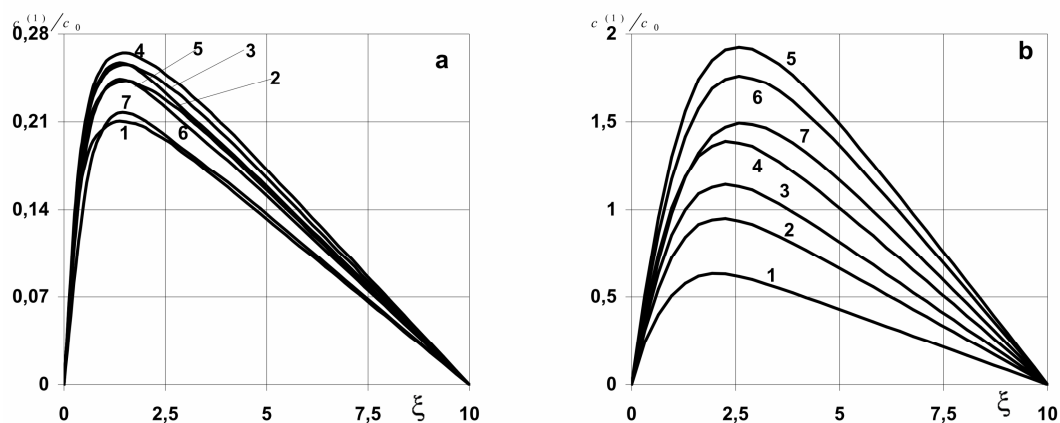


Рис. 5.15 Розподіли сумарної концентрації домішкової речовини $K^{(1)}$ на першому етапі каскадного розпаду у різні моменти часу для $\alpha = 0.25$ (рис.а) і $\alpha = 0.91$ (рис.б)

З ростом часу протікання масоперенесення функція концентрації $K^{(1)}$ спочатку зростає в усій області тіла, досягає своїх максимальних значень на проміжку $\xi_{\max} \in (1.3\xi_0, 1.6\xi_0)$ для $\alpha = 0.25$ (криві 1-4, рис. 5.15а) і $\xi_{\max} \in (1.9\xi_0, 2.6\xi_0)$ для

$\alpha = 0.91$ (криві 1-5, рис. 5.15b) і потім набуває спадного характеру (криві 5-7 на рис. 5.15a і криві 6,7 на рис. 5.15b).

Рис. 5.16 ілюструє розподіли сумарної концентрації домішкової речовини на першому етапі каскаду $\mathbf{K}^{(1)}$ для різних значень параметра параметра $k_1^{(1)} = 2, 4, 6, 8, 20$ (криві 1-5).

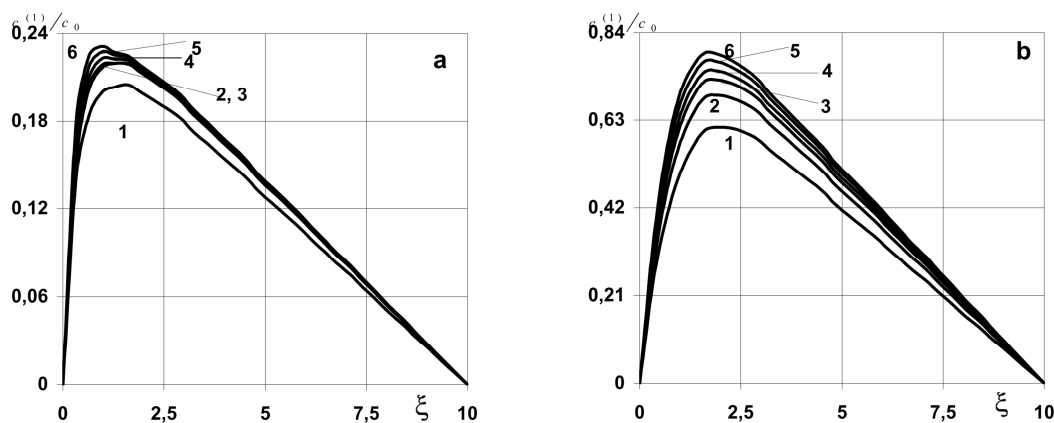


Рис. 5.16. Розподіли концентрацій домішкової речовини $\mathbf{K}^{(1)}$ на першому етапі каскадного розпаду при різних $k_1^{(1)}$ для $\alpha = 0.25$ (рис.а), та $\alpha = 0.91$ (рис.б)

Зміна параметра $k_1^{(1)}$ не впливає на поведінку сумарної концентрації домішкової речовини на першому етапі каскадного розпаду, проте дещо впливає на її значення. Зі збільшенням параметра $k_1^{(1)}$ концентрація домішкової речовини $\mathbf{K}^{(1)}$ зростає і максимум функції $c^{(1)}(\xi, \tau)$ зсувається ближче до поверхні тіла $\xi = 0$ для малих значень α (рис. 5.16a), а для великих значень α досягнення $\max_{\xi \in [0; \xi_0]} c^{(1)}(\xi, \tau)$ спостерігається на проміжку $[0.161\xi_0; 0.225\xi_0]$ (рис. 5.16b). Зазначимо, що при збільшенні параметра $k_1^{(1)}$ на порядок максимум сумарної концентрації на першому етапі розпаду зростає у 1.13 разів як для $\alpha = 0.25$ (криві 1 і 6 на рис. 5.16a) так і для $\alpha = 0.91$ (криві 1 і 6 на рис. 5.16b).

5.6.3. Числовий експеримент щодо сумарної концентрації частинок на другому етапі розпаду

На рис. 5.17 для різних значень коефіцієнта інтенсивності розпаду на першому етапі проілюстровано розподіли сумарної концентрації домішкової речовини на другому етапі каскаду $\mathbf{K}^{(2)}$, яка утворилась внаслідок хімічних реакцій або радіоактивного розпаду на першому етапі при дії джерела маси на поверхні шару на нульовому етапі.

Тут криві 1-5 відповідають значенням $a_{\lambda_j}^{(1)} = 0.1, 0.3, 0.5, 0.7, 1.1$ ($j = 1, 2, 3$) в момент безрозмірного часу $\tau = 0.8$ для базових значень інших коефіцієнтів задачі.

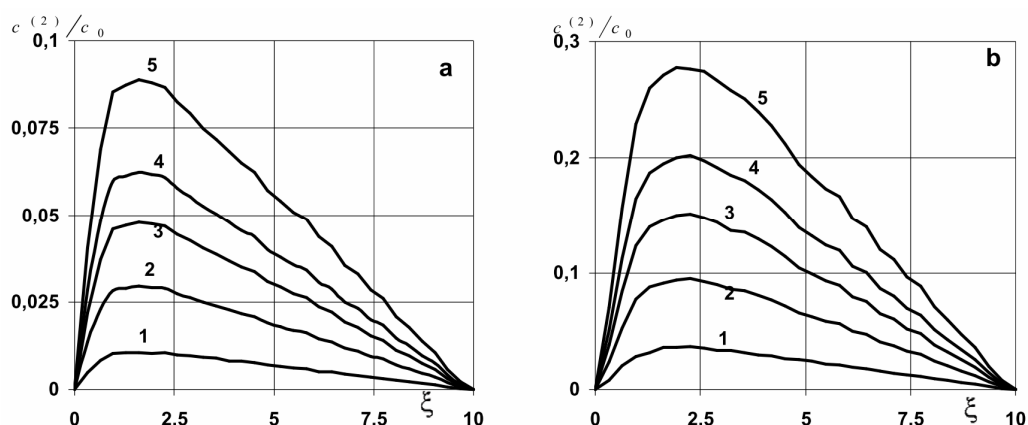


Рис. 5.17. Розподіли сумарної концентрації речовини $\mathbf{K}^{(2)}$ на другому етапі каскадного розпаду у момент часу $\tau = 0.8$ залежно від параметра $a_{\lambda_1}^{(1)}$ для $\alpha = 0.25$ (рис.а) і $\alpha = 0.91$ (рис.б)

Зазначимо, що поверхневий розподіл речовини α на нульовому етапі розпаду суттєво впливає на подальші етапи каскаду. Так збільшення коефіцієнта α від 0.25 до 0.91 призводить до зростання сумарної концентрації мігруючої речовини на другому етапі каскадного розпаду у тричі для всіх значень нормованого коефіцієнта інтенсивності розпаду на першому етапі $a_{\lambda_j}^{(1)}$. При цьому

$$\max_{\xi \in [0; \xi_0]} c^{(2)}(\xi, \tau) \Big|_{\substack{\alpha=0.91, \\ a_{\lambda_j}^{(1)}=1.1}} / \max_{\xi \in [0; \xi_0]} c^{(2)}(\xi, \tau) \Big|_{\substack{\alpha=0.25, \\ a_{\lambda_j}^{(1)}=1.1}} = 3.16.$$

Також зауважимо, що явне врахування пасток у математичній моделі може призвести до суттєвих змін у значеннях сумарної концентрації речовини на другому етапі розпаду. При цьому поведінка функцій $c^{(1)}(\xi, \tau)$ і $c^{(2)}(\xi, \tau)$ є подібною. Отже сумарна концентрація домішкової речовини на другому етапі $\mathbf{K}^{(2)}$, обчислена за моделлю гетеродифузії у середовищі з пастками, є значно більшою ніж сумарна концентрація, знайдена за моделлю гетеродифузії двома шляхами. Відмінність між значеннями сумарної концентрації речовини $\mathbf{K}^{(2)}$, порахованої за цими двома моделями, може досягати 6 разів. Так у випадку тих самих базових параметрів для максимальних значень $c^{(2)}(\xi, \tau)$ спостерігається

$$\text{наступне: } \max_{\xi \in [0; \xi_0]} c^{(2)}(\xi, \tau) \Big|_{\substack{\alpha=0.25 \\ \text{модель(5.47)}}} / \max_{\xi \in [0; \xi_0]} c^{(2)}(\xi, \tau) \Big|_{\substack{\alpha=0.25 \\ \text{модель(4.52)}}} = 5.63 \text{ (крива 2 на рис. 5.17a)}$$

та крива 2 на рис. 4.22a) і $\max_{\xi \in [0; \xi_0]} c^{(2)}(\xi, \tau) \Big|_{\alpha=0.91} \Big|_{\text{модель(5.47)}} / \max_{\xi \in [0; \xi_0]} c^{(2)}(\xi, \tau) \Big|_{\alpha=0.91} \Big|_{\text{модель(4.52)}} = 3.0$

(крива 2 на рис. 5.17b та крива 5 на рис. 4.22a) для $a_{\lambda_j}^{(1)} = 0.3$.

5.7 Висновки до Розділу 5

Таким чином сформульовано крайову задачу каскадного типу за математичною моделлю гетеродифузії двома шляхами у тілі з пастками з урахуванням каскадного розпаду домішкових речовин. Узагальнено ітераційну процедуру побудови розв'язку такого типу крайової задачі на взаємозв'язані системи трьох диференціальних рівнянь в частинних похідних з урахуванням функцій Гріна для кожної з систем рівнянь. Означено матричну функцію Гріна задачі гетеродифузії двома шляхами за наявності пасток для мігруючих речовин. Досліджено функції Гріна в залежності від координати розташування точкового джерела та коефіцієнтів інтенсивності сорбції на i -му етапі каскаду.

Знайдено асимптотичні складові функцій концентрацій і показано їхній суттєво нелінійний характер. Встановлено, що врахування розпаду домішкових частинок призводить до посилення нелінійності в асимптотичних доданках у формулах як для кожного стану домішки, так і для її сумарної концентрації.

Отримано розрахункові формули для потоків маси на швидкому та повільному шляхах міграції на всіх етапах каскадного розпаду та кількості розпадних компонент, що за заданий проміжок часу пройшли через нижню поверхню тіла.

Розроблено архітектуру комплексу модулів програм GeterPas для моделювання процесів масоперенесення домішкових речовин, що супроводжуються взаємними переходами частинок між їхніми станами, за каскадного розпаду мігруючих речовин в рамках моделі гетеродифузії двома шляхами у середовищі з пастками. Програмний модуль для концентрацій є базовим (і незалежним) в даній реалізації комплексу, а модулі для розрахунку потоків маси та кількості речовини, що пройшла через шар, функціонують лише у взаємодії з програмним модулем для концентрацій, при цьому в рамках кожного етапу каскадного розпаду реалізована «горизонтальна» взаємодія модулів. Також створені алгоритми модуля комплексу для розрахунку концентрацій

домішкових речовин, потоків маси та для розрахунку кількостей домішкових речовин, що за заданий проміжок часу пройшли через шар, за їх каскадного розпаду для всіх етапів.

Збільшення коефіцієнта, що відповідає за інтенсивність розпаду на першому етапі, спричинює пропорційне зростання сумарної концентрації в усій області тіла.

Проведено числовий експеримент для моделі гетеродифузії двома шляхами у тілі з пастками. Збільшення коефіцієнта, що відповідає за інтенсивність розпаду на першому етапі, спричинює пропорційне зростання сумарної концентрації в усій області тіла. Встановлено, що поверхневий розподіл речовини на нульовому етапі розпаду суттєво впливає на подальші етапи каскаду. Так збільшення цього коефіцієнта від 0.25 до 0.91 призводить до зростання сумарної концентрації мігруючої речовини на другому етапі каскадного розпаду у тричі для всіх значень коефіцієнта інтенсивності розпаду на першому етапі.

Показано, що явне врахування пасток у математичній моделі може призвести до суттєвих змін у значеннях сумарної концентрації речовини на другому етапі розпаду. При цьому поведінка функцій сумарних концентрацій на першому і другому етапах розпаду є подібною. Встановлено, що сумарна концентрація домішкової речовини на другому етапі, обчислена за моделлю гетеродифузії у середовищі з пастками, є значно більшою ніж сумарна концентрація, знайдена за моделлю гетеродифузії двома шляхами. Відмінність між значеннями сумарних концентрацій речовини на другому етапі каскаду, порахованої за цими двома моделями, може досягати 6 разів.

Встановлено, що вплив наявності пасток у тілі відчутний навіть на другому етапі розпаду в порівнянні з математичною моделлю процесів гетеродифузії розпадних речовин двома шляхами і відмінність у максимальних значеннях на цьому етапі каскадного розпаду може бути більшою навіть у 5.6 рази для базових параметрів розрахунків за цими моделями.

РОЗДІЛ 6

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ КОНВЕКТИВНОЇ ДИФУЗІЇ У ТІЛАХ СКЛАДНОЇ ТА СКЛАДЕНОЇ СТРУКТУРИ

У цьому розділі розглядаються шаруваті тіла, кожен макроелемент (фаза) якого має свою складну мезо- або мікроструктуру (пористу або композитну), яку необхідно враховувати ще на етапі побудови математичної моделі [50]. При цьому розв'язання контактних-крайових задач, сформульованих на основі побудованих математичних моделей, викликають значні труднощі і спричинюють необхідність нових або удосконалення існуючих аналітичних, чисельних або аналітико-числових методів. Тому пропонується два підходи до математичного моделювання процесів перенесення в багатофазних багатокомпонентних, у тому числі пористих, тілах. Перший з них базується на фізично обґрунтованій математичній моделі у лінеаризованому варіанті, формулюванні на цій основі контактних-крайових задач з урахуванням умов неідеального контакту на концентрацію домішкової речовини, знаходженні точного аналітичного розв'язку сформульованої задачі за допомогою методу інтегральних перетворень окремо в різних фазах, комп'ютерному моделюванні отриманих розв'язків. При цьому недостатність розробленого інструментарію для комп'ютерного моделювання спричинює розвинення нових чисельних методів та алгоритмів [137, 181, 221, 256]. У рамках даної роботи запропоновано і обґрунтовано новий метод чисельного інтегрування подвійного інтеграла зі змінними верхніми межами та змінною областю інтегрування, а також алгоритму розв'язання нелінійного функціонального рівняння на відрізку невідомої довжини. Другий підхід, наведений у цьому розділі, розробляється для математичного опису таких складених об'єктів і систем, для яких виходячи з фізичних міркувань, неможливо коректно накласти граничні або початкові умови, навіть в достатньо загальному вигляді, проте наявні експериментальні дані щодо шуканої функції або її похідної на границі тіла чи в початковий момент часу. Цей системний підхід до опису складних та складених систем ґрунтується на синтезі класичного підходу математичного моделювання зв'язаних процесів різної фізичної природи в неоднорідних середовищах для добре структурованої частини системи та неklasичного статистичного підходу до моделювання невідомої граничної умови на основі експериментальних даних. Розроблені підходи застосовуються до математичного опису процесів конвективної дифузії з урахуванням сорбції на скелет у тришаровому пористому тілі (міграція забруднення у промислових насипних фільтрах води).

6.1. Математична модель процесів перенесення домішкових речовин у середовищах складної та складеної структури

Підвищення вимог до якості матеріалів конструктивних елементів, що використовуються у низці важливих галузей промисловості, зокрема, аерокосмічній промисловості, електротехнічній і радіоелектронній галузях, електроенергетиці, хімічній промисловості, машинобудуванні, медицині, агропромислому комплексі, будівельній галузі, комунальному господарстві, вимагає створення нових матеріалів і/або конструкцій зі складеною (наприклад багатофазною) структурою [45]. При цьому кожний елемент (фаза) таких матеріалів, конструкцій або об'єктів має свою мезо- або мікроструктуру (зокрема, пористі матеріали або композити), фізико-хімічні властивості якого відрізняються від інших (рис. 6.1).

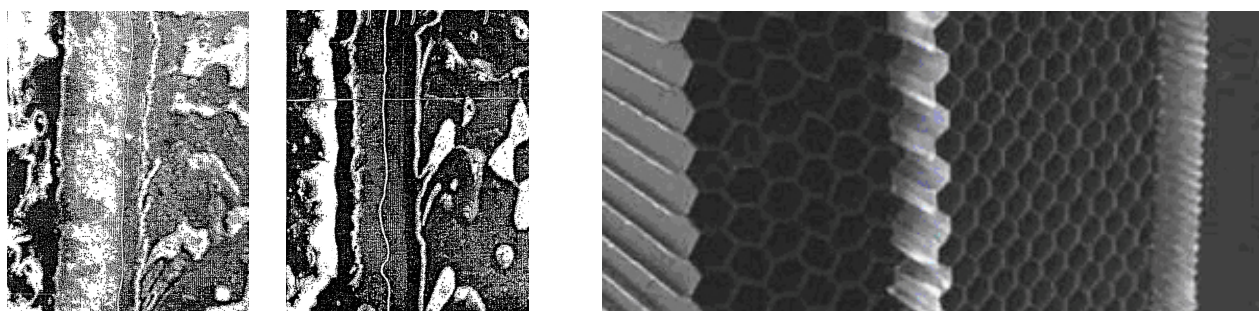


Рис. 6.1. Мікрофотографії багатофазних композитних [201] та трифазного пористого [39] матеріалів

6.1.1. Об'єкт дослідження

Нехай розподіл і розміри включень (або пор) структурних елементів багатофазних композитів (або пористих матеріалів) є такими малими, щоб у кожній фізично малій області середовища знаходилося макроскопічне число включень. Частинки домішкової речовини, які знаходяться у включеннях (порах) і поза ними, характеризуються різними фізичними властивостями, зокрема рухливостями або коефіцієнтами дифузії [202, 220]. Це призводить до міграції частинок домішки декількома шляхами і переходів з одного просторового положення в інше, що спричинює нетипові розподіли концентрацій та масових потоків мігруючої речовини.

Нехай частинки одного хімічного сорту мігрують у тілі з двома шляхами міграції та масообміном між станами (дрібнодисперсне або пористе середовище, монокристали тощо) [22-24, 42, 110, 111, 148]. Приймаємо, що тіло K^* (дискретна сукупність матеріальних частинок) складається з N різних просторово розділених фаз, кожна з

яких є багатокомпонентним твердим розчином. За термодинамічні компоненти цієї системи приймаємо взаємодіючі дискретні сукупності матеріальних частинок $\mathbf{K}_j^{*(i)}$ [11], які утворюють основу тіла ($j = 0$) та домішкові частинки у двох виділених станах ($j = 1; 2$), i - номер фази (структурного макроелемента). Кожній компоненті тіла (підсистемам частинок $\mathbf{K}_0^{*(i)}$, що утворюють скелет, а також частинкам домішкової речовини в різних станах $\mathbf{K}_j^{*(i)}$ ($j = 1; 2$, $i = \overline{1, N}$) співставляються континууми $\mathbf{K}_j^{(i)}$ ($i = \overline{1, N}$, $j = \overline{0, 2}$).

6.1.2. Балансові рівняння моделі

За вихідні співвідношення моделі приймемо балансові рівняння для мас кожної компоненти окремої фази системи. Якщо зміна маси компоненти відбувається за рахунок масових потоків і внутрішніх джерел [183], то мають місце рівняння балансу маси компоненти ij

$$\frac{\partial \rho_j^{(i)}}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot (\rho_j^{(i)} \vec{v}_j^{(i)}) + w_j^{(i)} \quad (i = \overline{1, N}, j = \overline{0, 2}), \quad (6.1)$$

де $\rho_j^{(i)}$ - густини компонент фази i системи; $\vec{v}_j^{(i)}$ - швидкості руху матеріальних точок континуумів $\mathbf{K}_j^{(i)}$; $\vec{\nabla}$ - набла-оператор Гамільтона; $w_j^{(i)}$ - густина внутрішнього джерела (або стоку) компоненти; t - час; $\vec{\xi} = (\xi^{(1)}, \xi^{(2)}, \xi^{(3)})$ - радіус-вектор біжучої точки крапкою позначений скалярний добуток [22].

Приймемо, що джерелом (стоком) маси компоненти є процеси сорбції-десорбції частинок [30]. Тоді можемо записати наступні умови

$$w_j^{(0)} = 0 \quad (\forall j), \quad \sum_{j=1}^2 \sum_{i=1}^N w_j^{(i)} = 0. \quad (6.2)$$

У свою чергу, потужність виробництва маси $w_j^{(i)}$ компоненти j фази i визначається сумою потужностей виробництва маси $\omega_{jk}^{(i)}$ цієї компоненти у зв'язку з її переходом з континууму $\mathbf{K}_k^{(i)}$:

$$w_j^{(i)} = \sum_{\substack{k=0 \\ k \neq j}}^2 \omega_{jk}^{(i)} \quad (i = \overline{1, N}, j = 1; 2). \quad (6.3)$$

Тоді

$$\omega_{jj}^{(i)} = 0 \quad (\forall j), \quad \omega_{jk}^{(i)} = -\omega_{kj}^{(i)} \quad (\forall i, j, k), \quad \sum_{j=0}^2 \sum_{k=0}^2 \omega_{jk}^{(i)} = 0 \quad (\forall i). \quad (6.4)$$

Нехай значення для густини фази $\rho^{(i)} = \sum_{i,j} \rho_j^{(i)}$ і швидкості $\vec{v}'^{(i)}$, яка вводиться

наступним рівнянням

$$\vec{v}'^{(i)} = \sum_{j=0}^2 \rho_j^{(i)} \vec{v}'_j^{(i)} / \rho^{(i)}, \quad (6.5)$$

приписуються точкам континууму центрів мас \mathbf{K}_c . Просумуємо рівняння (6.1) за індексом j, i , використовуючи вирази (6.3), та (6.5), отримаємо

$$\frac{\partial \rho^{(i)}}{\partial t} = -\vec{\nabla}_\xi \cdot \rho^{(i)} \sum_{j=0}^2 \frac{\rho_j^{(i)} \vec{v}'_j^{(i)}}{\rho^{(i)}} = -\rho^{(i)} \vec{\nabla}_\xi \cdot \vec{v}'^{(i)} - \vec{v}'^{(i)} \cdot \vec{\nabla}_\xi \rho^{(i)}. \quad (6.6)$$

Враховуючи, що повна похідна за часом $d/dt = \partial/\partial t + \vec{v}'^{(i)} \cdot \vec{\nabla}_\xi$, співвідношення (6.6) перепишемо у вигляді

$$\frac{d\rho^{(i)}}{dt} = -\rho^{(i)} \vec{\nabla}_\xi \cdot \vec{v}'^{(i)}. \quad (6.7)$$

Перепишемо рівняння балансу маси компоненти ij через повну похідну за часом

$$\frac{d\rho_j^{(i)}}{dt} = \vec{v}'^{(i)} \cdot \vec{\nabla}_\xi \rho_j^{(i)} - \vec{\nabla}_\xi \cdot (\rho_j^{(i)} \vec{v}') + w_j^{(i)} = \vec{\nabla}_\xi \cdot (\rho_j^{(i)} \vec{v}'^{(i)}) - \vec{\nabla}_\xi \cdot (\rho_j^{(i)} \vec{v}'^{(i)}) - \rho_j^{(i)} \vec{\nabla}_\xi \cdot \vec{v}'^{(i)} + w_j^{(i)}.$$

Враховуючи, що $\rho_j^{(i)} = C_j^{(i)} \rho^{(i)}$, де $C_j^{(i)} = \rho_j^{(i)} / \rho^{(i)}$ - масові концентрації компонент, які задовольняють умову нормування

$$\sum_{j=0}^2 C_j^{(i)} = 1, \quad i = \overline{1, N}, \quad (6.8)$$

одержимо

$$\frac{d\rho_j^{(i)}}{dt} + \rho_j^{(i)} \vec{\nabla}_\xi \cdot \vec{v}'^{(i)} = \rho^{(i)} \frac{dC_j^{(i)}}{dt} + C_j^{(i)} \frac{d\rho}{dt} + C_j^{(i)} \rho^{(i)} \vec{\nabla}_\xi \cdot \vec{v}'^{(i)} = \rho^{(i)} \frac{dC_j^{(i)}}{dt},$$

оскільки виконується співвідношення (6.7). У результаті отримаємо

$$\rho^{(i)} \frac{dC_j^{(i)}}{dt} = -\vec{\nabla}_\xi \cdot \rho_j^{(i)} (\vec{v}'_j^{(i)} - \vec{v}'^{(i)}) + w_j^{(i)} = -\vec{\nabla}_\xi \cdot \vec{J}_j^{(i)} + w_j^{(i)}$$

рівняння балансу концентрації компоненти i фази j .

Величина $\vec{J}_j^{(i)} = \rho_j^{(i)} (\vec{v}'_j^{(i)} - \vec{v}'^{(i)})$ є дифузійним потоком компоненти ij , введеним по відношенню до точок континууму центрів мас фази $\mathbf{K}_c^{(i)}$.

Зазначимо, якщо використати умову нормування (6.8), то балансові рівняння (6.1) можна записати у вигляді

$$\rho^{(i)} \frac{dC_j^{(i)}}{dt} = -\vec{\nabla}_\xi \cdot \vec{J}_j^{(i)} + w_j^{(i)}, \quad i = \overline{1, N}, \quad j = 1, 2, \quad (6.9)$$

які супроводжуються співвідношенням для концентрації скелету

$$C_0^{(i)} = 1 - \sum_{j=1}^2 C_j^{(i)}. \quad (6.10)$$

6.1.3. Кінетичні рівняння та рівняння стану

Якщо маємо сукупність спряжених термодинамічних сил і відповідних термодинамічних потоків: $\vec{X}_j^{(i)} \div \vec{J}_j^{(i)}$, $X_k^{(i)} \div \omega_k^{(i)}$, то у даному випадку лінійні кінетичні співвідношення мають вигляд

$$\vec{J}_j^{(i)} = \sum_{m=1}^2 L_{jm}^{(i)} \vec{X}_m^{(i)}, \quad \omega_k^{(i)} = \sum_{m=1}^2 \lambda_{km}^{(i)} X_m^{(i)}, \quad \lambda_{km}^{(i)} = \left(\frac{\partial \omega_k^{(i)}}{\partial X_m^{(i)}} \right)_0, \quad (6.11)$$

де $\vec{X}_j^{(i)}$ - векторні термодинамічні сили дифузії, спряжені до векторних потоків дифузії $\vec{J}_j^{(i)}$, а саме [22]

$$\vec{X}_j^{(i)} = -\vec{\nabla}_\xi (\mu_j^{(i)} + \psi_j^{(i)}); \quad (6.12)$$

$X_m^{(i)}$ - термодинамічні сили, спряжені до термодинамічних потоків $\omega_m^{(i)}$; $\mu_j^{(i)}$ - хімічний потенціал компоненти ij , $\psi_j^{(i)}$ - потенціальна енергія одиниці маси компоненти i фази j .

Оскільки $\psi_j^{(0)} = \psi_j^{(1)} = \dots = \psi_j^{(N)} = \psi$, то враховуючи умови (6.2), яким задовольняють потужності виробництва маси $w_j^{(i)}$, отримаємо

$$\sum_{j=0}^2 \sum_{i=1}^N \psi_j^{(i)} w_j^{(i)} = \psi \sum_{j=0}^2 \sum_{i=1}^N w_j^{(i)} = 0.$$

Прийmemo до уваги для кожної фази тільки процеси переходу домішкових частинок між двома шляхами міграції $\omega_{12}^{(i)}$ ($i = \overline{1, N}$), тобто відмінними від нуля будуть потужності виробництва маси за рахунок процесів сорбції-десорбції $\omega_{12}^{(i)}$ і $\omega_{21}^{(i)}$.

Розглянемо вираз

$$\sum_{j=0}^2 \mu_j^{(i)} w_j^{(i)} = \sum_{j=1}^2 \mu_j'^{(i)} \sum_{k=1}^2 \omega_{jk}^{(i)}, \quad (6.13)$$

де $\mu_j^{(i)} = \mu_j'^{(i)} - \mu_0^{(i)}$, $\mu_j'^{(i)}$ - відносний хімічний потенціал компоненти j фази i .

Праву частину (6.13) можна перетворити до вигляду

$$\sum_{j=1}^2 \sum_{k=1}^2 \mu_j'^{(i)} \omega_{jk}^{(i)} = -(\mu_2^{(i)} - \mu_1^{(i)}) \omega_{12}^{(i)}.$$

Позначимо $\omega_1^{(i)} = \omega_{12}^{(i)}$ ($i = \overline{1, N}$) - скалярні масові потоки, які характеризують масообмін частинок між станами; $X_1^{(i)}$ - скалярні термодинамічні сили, спряжені до відповідних масових потоків $\omega_j^{(i)}$, а саме

$$X_1^{(i)} = \mu_2^{(i)} - \mu_1^{(i)} \quad (i = \overline{1, N}). \quad (6.14)$$

Як наслідок умов взаємності Онзагера [171], коефіцієнти $L_{jm}^{(i)}$, $\lambda_{km}^{(i)}$ повинні задовольняти умови $L_{jm}^{(i)} = L_{mj}^{(i)}$, $\lambda_{km}^{(i)} = \lambda_{mk}^{(i)}$, а внаслідок другого закону термодинаміки – такі обмеження:

$$L_{jj}^{(i)}, \lambda_{kk}^{(i)} \geq 0, \quad L_{jj}^{(i)} L_{mm}^{(i)} \geq (L_{jm}^{(i)} + L_{mj}^{(i)})^2 / 4, \quad \lambda_{kk}^{(i)} \lambda_{mm}^{(i)} \geq (\lambda_{km}^{(i)} + \lambda_{mk}^{(i)})^2 / 4.$$

Лінійні рівняння стану мають вигляд

$$\mu_j^{(i)} = \mu_{j0}^{(i)} + \sum_{k=1}^2 d_{jk}^{(i)} c_k^{(i)}. \quad (6.15)$$

Тут $\mu_{j0}^{(i)}$ - хімічний потенціал чистої речовини компоненти ij ; $d_j^{(i)} = \left(\partial \mu_j^{(i)} / \partial c_j^{(i)} \right)_0$ - матеріальні характеристики системи.

Таким чином, ми побудували повну систему рівнянь моделі, яка включає співвідношення (6.2)-(6.15), а також всі зазначені обмеження.

6.1.4. Ключова система рівнянь моделі

В якості розв'язуючих функцій виберемо відхилення концентрацій домішкових компонент $c_j^{(i)} = C_j^{(i)} - C_j^{(i)0}$ від значень концентрацій у вихідному стані $C_j^{(i)0}$, який відповідає природному стану необмеженого тіла за відсутності зовнішніх впливів.

Якщо у кінетичні рівняння для термодинамічних потоків (6.11) підставити вирази для термодинамічних сил (6.12), (6.14), то отримаємо

$$\bar{J}_j^{(i)} = - \sum_{m=1}^2 L_{jm}^{(i)} \bar{\nabla}_\xi \mu_m^{(i)}, \quad \omega_k^{(i)} = \lambda_{k1}^{(i)} (\mu_2^{(i)} - \mu_1^{(i)}).$$

Хімічні потенціали виразимо через розв'язуючі функції за допомогою лінійних рівнянь стану (6.15). Прийmemo матеріальні характеристики тіла незалежними від координат, тоді знайдемо

$$\bar{J}_j^{(i)} = -\sum_{m=1}^2 L_{jm}^{(i)} d_m^{(i)} \bar{\nabla}_\xi c_m^{(i)}, \quad \omega_k^{(i)} = \bar{\lambda}_{k1}^{(i)} c_1^{(i)} + \bar{\lambda}_{k2}^{(i)} c_2^{(i)} + M_k^{(i)}, \quad (6.16)$$

де $\bar{\lambda}_{k1}^{(i)} = -\lambda_{k1}^{(i)} d_1^{(i)}$, $\bar{\lambda}_{k2}^{(i)} = (\lambda_{k1}^{(i)} - \lambda_{k2}^{(i)}) d_2^{(i)}$ - концентраційні коефіцієнти інтенсивності процесів переходу частинок з одного шляху міграції на інший; $M_k^{(i)} = -\lambda_{k1}^{(i)} \mu_{10}^{(i)} + (\lambda_{k1}^{(i)} - \lambda_{k2}^{(i)}) \mu_{20}^{(i)}$ - сталі моделі.

Сума членів виразу (6.16) типу $\bar{\lambda}_{k1}^{(i)} c_1^{(i)} + \bar{\lambda}_{k2}^{(i)} c_2^{(i)} + M_k^{(i)}$ описує виробництво маси компоненти фази термодинамічної системи. На початку ми припустили, що зміна маси домішки може відбуватись тільки за рахунок переходів домішкових частинок між різними станами. Тобто $M_k^{(i)} \equiv 0$.

Якщо у співвідношення балансу концентрації компонент (6.9) підставимо вирази для термодинамічних потоків домішки з формул (6.16), то отримаємо рівняння гетеродифузії двома шляхами для фази i у вигляді

$$\rho^{(i)} \frac{dc_1^{(i)}}{dt} = \bar{\nabla}_\xi \cdot \left[\sum_{m=1}^2 D_{1m}^{(i)} \bar{\nabla}_\xi c_m^{(i)} \right] - \lambda_1^{(i)} c_1^{(i)} + \lambda_2^{(i)} c_2^{(i)},$$

$$\rho^{(i)} \frac{dc_2^{(i)}}{dt} = \bar{\nabla}_\xi \cdot \left[\sum_{m=1}^2 D_{2m}^{(i)} \bar{\nabla}_\xi c_m^{(i)} \right] + \lambda_1^{(i)} c_1^{(i)} - \lambda_2^{(i)} c_2^{(i)},$$

Тут $D_{jm}^{(i)} = L_{jm}^{(i)} d_m^{(i)}$ - кінетичні коефіцієнти дифузії у фазі i ; $\lambda_1^{(i)}$, $\lambda_2^{(i)}$ - кінетичні коефіцієнти, пов'язані з процесами сорбції-десорбції.

Приймаємо незалежність коефіцієнтів моделі від координат та врахуємо вигляд повної похідної за часом, тоді отримаємо ключову систему рівнянь гетеродифузії для фази i :

$$\frac{\partial c_1^{(i)}}{\partial t} = \bar{D}_{11}^{(i)} \Delta_\xi c_1^{(i)} + \bar{D}_{12}^{(i)} \Delta_\xi c_2^{(i)} - \bar{v}_1^{(i)} \cdot \bar{\nabla}_\xi c_1^{(i)} - \bar{k}_1^{(i)} c_1^{(i)} + \bar{k}_2^{(i)} c_2^{(i)},$$

$$\frac{\partial c_2^{(i)}}{\partial t} = \bar{D}_{21}^{(i)} \Delta_\xi c_1^{(i)} + \bar{D}_{22}^{(i)} \Delta_\xi c_2^{(i)} - \bar{v}_2^{(i)} \cdot \bar{\nabla}_\xi c_2^{(i)} + \bar{k}_1^{(i)} c_1^{(i)} - \bar{k}_2^{(i)} c_2^{(i)}, \quad (6.17)$$

Тут $\bar{D}_{jm}^{(i)} = D_{jm}^{(i)} / \rho^{(i)}$ ($j, m = 1, 2$, $i = \overline{1, N}$) - коефіцієнти дифузії; $\bar{k}_1^{(i)} = -\lambda_1^{(i)} / \rho^{(i)}$, $\bar{k}_2^{(i)} = \lambda_2^{(i)} / \rho^{(i)}$ - коефіцієнти інтенсивності процесів переходу частинок між станами.

Системи рівнянь гетеродифузії (6.17) потрібно доповнити рівнянням для знаходження концентрації частинок матеріалу тіла (6.9) і рівнянням нерозривності (6.5).

6.1.5. Часткові варіанти математичної моделі

Якщо ми знехтуємо конвективними складовими, тоді ключова модель гетеродифузії двома шляхами мігруючої речовини (6.17) набуде вигляду

$$\begin{aligned}\frac{\partial c_1^{(i)}}{\partial t} &= \overline{D}_{11}^{(i)} \Delta_{\xi} c_1^{(i)} + \overline{D}_{12}^{(i)} \Delta_{\xi} c_2^{(i)} - \overline{k}_1^{(i)} c_1^{(i)} + \overline{k}_2^{(i)} c_2^{(i)}, \\ \frac{\partial c_2^{(i)}}{\partial t} &= \overline{D}_{21}^{(i)} \Delta_{\xi} c_1^{(i)} + \overline{D}_{22}^{(i)} \Delta_{\xi} c_2^{(i)} + \overline{k}_1^{(i)} c_1^{(i)} - \overline{k}_2^{(i)} c_2^{(i)}, \quad i = \overline{1, N}.\end{aligned}\quad (6.18)$$

Для пористих середовищ більш характерний випадок, коли у поровому просторі ($j = 1$) наявні як дифузійний, так і конвективний механізми перенесення речовини, а на внутрішній поверхні скелету відбувається лише дифузія домішок [92], причому з коефіцієнтом дифузії, нехтовно малим у порівнянні з коефіцієнтом дифузії частинок у поровому об'ємі. Якщо ми також знехтуємо перехресними коефіцієнтами дифузії, тоді одержимо систему рівнянь конвективної дифузії у середовищі з пастками:

$$\begin{aligned}\frac{\partial c_1^{(i)}}{\partial t} &= \overline{D}_{11}^{(i)} \Delta_{\xi} c_1^{(i)} - \vec{v}_1^{(i)} \cdot \vec{\nabla}_{\xi} c_1^{(i)} - \overline{k}_1^{(i)} c_1^{(i)} + \overline{k}_2^{(i)} c_2^{(i)}, \\ \frac{\partial c_2^{(i)}}{\partial t} &= \overline{k}_1^{(i)} c_1^{(i)} - \overline{k}_2^{(i)} c_2^{(i)}, \quad i = \overline{1, N}.\end{aligned}\quad (6.19)$$

Для процесів масоперенесення забруднень через багаточаровий фільтр води характерно незначні процеси десорбції. В цьому випадку система рівнянь (6.19) редукується до

$$\begin{aligned}\frac{\partial c_1^{(i)}}{\partial t} &= \overline{D}_{11}^{(i)} \Delta_{\xi} c_1^{(i)} - \vec{v}_1^{(i)} \cdot \vec{\nabla}_{\xi} c_1^{(i)} - \overline{k}_1^{(i)} c_1^{(i)}, \\ \frac{\partial c_2^{(i)}}{\partial t} &= \overline{k}_1^{(i)} c_1^{(i)}, \quad i = \overline{1, N}.\end{aligned}\quad (6.20)$$

Якщо у фазі i виконується локальна термодинамічна рівновага між першим ($j = 1$) та другим ($j = 2$) станами домішкових частинок, тобто

$$\mu_1^{(i)} = \mu_2^{(i)}, \quad i = \overline{1, N}, \quad (6.21)$$

тоді масоперенесення домішкових частинок підпорядковується рівнянням конвективної дифузії в середовищі з ефективними характеристиками.

Рівність (6.21) є еквівалентною

$$\bar{k}_1^{(i)} c_1^{(i)} - \bar{k}_2^{(i)} c_2^{(i)} = 0 \quad \text{для } \forall i = \overline{1, N}. \quad (6.22)$$

Введемо в розгляд сумарну ефективну концентрацію $c_{ef}^{(i)} = c_1^{(i)} + c_2^{(i)}$. Додамо для кожного i рівняння (6.17) і врахуємо співвідношення (6.22), тоді одержимо

$$\frac{\partial c_{ef}^{(i)}}{\partial t} = \frac{\bar{k}_2^{(i)} (\bar{D}_{11}^{(i)} + \bar{D}_{21}^{(i)}) + \bar{k}_1^{(i)} (\bar{D}_{12}^{(i)} + \bar{D}_{22}^{(i)})}{k_1^{(i)} + k_2^{(i)}} \Delta_{\xi} c_{ef}^{(i)} - \frac{\bar{k}_2^{(i)} \bar{v}_1^{(i)} + \bar{k}_1^{(i)} \bar{v}_2^{(i)}}{k_1^{(i)} + k_2^{(i)}} \cdot \vec{\nabla}_{\xi} c_{ef}^{(i)}.$$

Введемо позначення

$$\bar{D}_{ef}^{(i)} = \frac{\bar{k}_2^{(i)} (\bar{D}_{11}^{(i)} + \bar{D}_{21}^{(i)}) + \bar{k}_1^{(i)} (\bar{D}_{12}^{(i)} + \bar{D}_{22}^{(i)})}{k_1^{(i)} + k_2^{(i)}}, \quad \bar{v}_{ef}^{(i)} = \frac{\bar{k}_2^{(i)} \bar{v}_1^{(i)} + \bar{k}_1^{(i)} \bar{v}_2^{(i)}}{k_1^{(i)} + k_2^{(i)}}.$$

У результаті отримаємо рівняння конвективної дифузії в середовищі з ефективними характеристиками

$$\frac{\partial c_{ef}^{(i)}}{\partial t} = \bar{D}_{ef}^{(i)} \Delta_{\xi} c_{ef}^{(i)} - \bar{v}_{ef}^{(i)} \cdot \vec{\nabla}_{\xi} c_{ef}^{(i)}, \quad i = \overline{1, N}.$$

Зауважимо, що у випадку нехтовно малого вкладу конвективних складових у процес масоперенесення за локальної термодинамічної рівноваги між станами домішкових частинок, ми отримаємо рівняння дифузії в середовищі з ефективними характеристиками [79, 81], сформульованих для кожної фази зокрема.

6.1.6. Безрозмірна форма різних модельних варіантів

Отримані системи рівнянь різних модельних варіантів дозволяють звести їх до природної безрозмірної форми, оскільки містять коефіцієнти розмірності [сек⁻¹] – коефіцієнти інтенсивності процесів сорбції та десорбції, тобто $\bar{k}_1^{(i)}$ і $\bar{k}_2^{(i)}$. Надалі вважатимемо, що для моделей гетеродифузії стан домішкових частинок $j = 1$ відповідає швидкому шляху міграції, а стан $j = 2$ – повільному: $\bar{D}_{11}^{(i)} > \bar{D}_{22}^{(i)}$. Крім цього, процеси сорбції у кожному структурному елементі є інтенсивнішими, ніж десорбції: $\bar{k}_1^{(i)} < \bar{k}_2^{(i)}$. Використавши більші коефіцієнти дифузії та менші інтенсивності переходів між станами у першому структурному елементі (першій фазі) введемо нові змінні [79]

$$\tau = \bar{k}_2^{(1)} t, \quad \xi^{(\alpha)} = \left(\bar{k}_2^{(1)} / \bar{D}_{11}^{(1)} \right) x^{(\alpha)} \quad \alpha = \overline{1, 3}. \quad (6.23)$$

Тоді ті самі коефіцієнти у різних фазах можуть бути як більшими, так меншими тих, на які нормуємо (у першому структурному елементі).

У безрозмірних змінних (6.23) системи рівнянь набувають вигляду для моделі конвективної гетеродифузії

$$\begin{aligned}\frac{\partial c_1^{(i)}}{\partial \tau} &= d_{11}^{(i)} \Delta_x c_1^{(i)} + d_{12}^{(i)} \Delta_x c_2^{(i)} - \vec{v}_1^{(i)} \cdot \vec{\nabla}_x c_1^{(i)} - a_1^{(i)} c_1^{(i)} + a_2^{(i)} c_2^{(i)}, \\ \frac{\partial c_2^{(i)}}{\partial \tau} &= d_{21}^{(i)} \Delta_x c_1^{(i)} + d_{22}^{(i)} \Delta_x c_2^{(i)} - \vec{v}_2^{(i)} \cdot \vec{\nabla}_x c_2^{(i)} + a_1^{(i)} c_1^{(i)} - a_2^{(i)} c_2^{(i)},\end{aligned}\quad (6.17a)$$

де $d_{kl}^{(i)} = \bar{D}_{kl}^{(i)} / \bar{D}_{11}^{(1)}$, $k, l = 1; 2$, причому $d_{11}^{(1)} = 1$; $\vec{v}_k^{(i)} = \vec{v}_k^{(i)} \bar{D}_{11}^{(1)} / \bar{k}_2^{(1)}$, $a_k^{(1)} = \bar{k}_k^{(i)} / \bar{k}_2^{(i)}$, $k = 1; 2$;

для моделі гетеродифузії

$$\begin{aligned}\frac{\partial c_1^{(i)}}{\partial \tau} &= d_{11}^{(i)} \Delta_x c_1^{(i)} + d_{12}^{(i)} \Delta_x c_2^{(i)} - a_1^{(i)} c_1^{(i)} + a_2^{(i)} c_2^{(i)}, \\ \frac{\partial c_2^{(i)}}{\partial \tau} &= d_{21}^{(i)} \Delta_x c_1^{(i)} + d_{22}^{(i)} \Delta_x c_2^{(i)} + a_1^{(i)} c_1^{(i)} - a_2^{(i)} c_2^{(i)}, \quad i = \overline{1, N};\end{aligned}\quad (6.18a)$$

для моделі конвективної дифузії у середовищі з пастками:

$$\begin{aligned}\frac{\partial c_1^{(i)}}{\partial \tau} &= d_{11}^{(i)} \Delta_x c_1^{(i)} - \vec{v}_1^{(i)} \cdot \vec{\nabla}_x c_1^{(i)} - a_1^{(i)} c_1^{(i)} + a_2^{(i)} c_2^{(i)}, \\ \frac{\partial c_2^{(i)}}{\partial \tau} &= a_1^{(i)} c_1^{(i)} - a_2^{(i)} c_2^{(i)}, \quad i = \overline{1, N};\end{aligned}\quad (6.19a)$$

для моделі конвективної дифузії у середовищі з пастками з урахуванням сорбційних процесів:

$$\begin{aligned}\frac{\partial c_1^{(i)}}{\partial \tau} &= d_{11}^{(i)} \Delta_x c_1^{(i)} - \vec{v}_1^{(i)} \cdot \vec{\nabla}_x c_1^{(i)} - a_1^{(i)} c_1^{(i)}, \\ \frac{\partial c_2^{(i)}}{\partial \tau} &= a_1^{(i)} c_1^{(i)}, \quad i = \overline{1, N};\end{aligned}\quad (6.20a)$$

для моделі конвективної дифузії в середовищі з ефективними характеристиками

$$\frac{\partial c_{ef}^{(i)}}{\partial \tau} = d_{ef}^{(i)} \Delta_x c_{ef}^{(i)} - \vec{v}_{ef}^{(i)} \cdot \vec{\nabla}_x c_{ef}^{(i)}, \quad i = \overline{1, N}.$$

Тут $d_{ef}^{(i)} = \bar{D}_{ef}^{(i)} / \bar{D}_{11}^{(1)}$; $\vec{v}_{ef}^{(i)} = \vec{v}_{ef}^{(i)} \bar{D}_{11}^{(1)} / \bar{k}_2^{(1)}$.

Зазначимо, що безрозмірні змінні (6.23) стискають часову вісь і розтягують просторові. При цьому не залежать від геометричних розмірів тіла або характерних розмірів структурних елементів тіла або мікронеоднорідностей.

6.1.7. Підхід до математичного опису процесів масоперенесення домішкових речовин у середовищах складної та складеної структури

Розв'язання контактнo-крайових задач, що описують процеси гетеродифузії домішкових речовин або конвективної дифузії мігруючих частинок, які супроводжуються їхньою сорбцією на скелет, у багатофазних середовищах (складених структурах), викликають значні труднощі. Це пов'язано, з одного боку, з неможливістю застосовувати класичні методи математичної фізики, а з іншого боку врахування конвективного механізму масоперенесення і/або неідеальних умов контакту на міжфазних границях вимагає розробки нових або удосконалення існуючих чисельних методів для адекватного математичного опису масоперенесення домішок у тілах складної та складеної структури.

Тому розвинуто підхід до математичного опису процесів масоперенесення у багатофазному багатокомпонентному тілі, що складається з етапів:

- побудова математичної моделі у лінеаризованому варіанті;
- формулювання на цій основі контактнo-крайових задач з урахуванням умов неідеального контакту на концентрацію домішкової речовини;
- знаходження точного аналітичного розв'язку сформульованої задачі з допомогою методу інтегральних перетворень окремо в різних фазах;
- комп'ютерне моделювання отриманих розв'язків, яке містить такі підетапи:
 - побудова алгоритмів для кожної структурної частини розв'язку контактнo-крайової задачі для чисельного аналізу:
 - ✦ концентрацій домішкових частинок, що мігрують двома шляхами у випадку гетеродифузії або у поровому просторі, для кожного макроелемента тіла з використанням відомого методу чисельного інтегрування, а саме Ньютона-Котеса замкненого типу за 7 і 10 вузлами;
 - ✦ для пористих тіл концентрації частинок забруднення, сорбованих на скелеті фази, для чого розробляємо новий метод чисельного інтегрування подвійного інтеграла зі змінними верхніми межами;
 - ✦ потоків маси для кожного стану мігруючих частинок та сумарних дифузійних потоків через заданий переріз тіла, зокрема, через нижню його поверхню;
 - ✦ для задач конвективної дифузії у пористих тілах, знаходження часу насичення тіла (наприклад, фільтра води) на основі запропонованого нами алгоритму розв'язання нелінійного функціонального рівняння на відрізьку невідомої довжини;
 - розробка програмного забезпечення та використання його для аналізу отриманих результатів.

Розглянемо спочатку моделювання процесів конвективної дифузії домішкових частинок у багатошаровому пористому тілі. Такі задачі є актуальними для математичного опису функціонування багатошарових фільтрів води, у тому числі засипних промислових фільтрів. При цьому використаємо побудовану у п. 6.1 модель міграції домішкової речовини, коли водний розчин є двокомпонентним, а тіло – тришаровим, і запропонуємо новий метод розв’язання крайових задач, в яких враховуються як дифузійний, так і конвективний механізми переносу, а також процеси сорбції частинок забруднення на скелет.

6.2. Контактно-крайова задача вертикальної конвективної дифузії у тришаровому пористому тілі

6.2.1. Постановка контактної-крайової задачі конвективної дифузії

Розглянемо шар безрозмірної товщини x_0 , що складається з трьох пористих підшарів (областей Ω_i , $i = \overline{1,3}$) з товщинами x_1 , $x_2 - x_1$ та $x_0 - x_2$ (рис. 6.2). Система декартових координат вибрана таким чином, щоб вісь Ox була перпендикулярною до поверхні шару з початком на верхній границі шару і спрямована в глиб тіла [82, 86, 165]. Нехай на поверхні $x = 0$ діє стале джерело маси для домішкових частинок потужності c_0 .

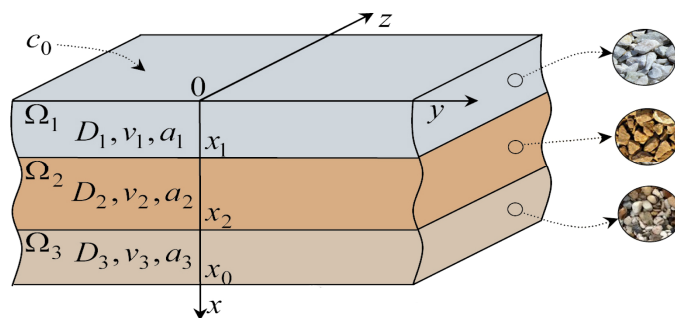


Рис. 6.2. Тришарове тіло, кожний структурний елемент якого є пористим з різними фізичними характеристиками

У випадку одномірної (вертикальної) конвективної дифузії системи рівнянь (6.20а) масоперенесення домішок у пористому структурному елементі тіла зводяться до форми: в області $x \in \Omega_1$ ($\Omega_1 =]0; x_1[$):

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_1^{(1)}(\tau, x)}{\partial \tau} &= d_1 \frac{\partial^2 c_1^{(1)}(\tau, x)}{\partial x^2} - v_1 \frac{\partial c_1^{(1)}(\tau, x)}{\partial x} - a_1 c_1^{(1)}(\tau, x), \\ \frac{\partial c_2^{(1)}(\tau, x)}{\partial \tau} &= a_1 c_1^{(1)}(\tau, x); \end{aligned} \quad (6.24a)$$

в області $x \in \Omega_2$ ($\Omega_2 =]x_1; x_2[$):

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_1^{(2)}(\tau, x)}{\partial \tau} &= d_2 \frac{\partial^2 c_1^{(2)}(\tau, x)}{\partial x^2} - v_2 \frac{\partial c_1^{(2)}(\tau, x)}{\partial x} - a_2 c_1^{(2)}(\tau, x), \\ \frac{\partial c_2^{(2)}(\tau, x)}{\partial \tau} &= a_2 c_1^{(2)}(\tau, x); \end{aligned} \quad (6.24б)$$

в області $x \in \Omega_3$ ($\Omega_3 =]x_2; x_0[$):

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_1^{(3)}(\tau, x)}{\partial \tau} &= d_3 \frac{\partial^2 c_1^{(3)}(\tau, x)}{\partial x^2} - v_3 \frac{\partial c_1^{(3)}(\tau, x)}{\partial x} - a_3 c_1^{(3)}(\tau, x), \\ \frac{\partial c_2^{(3)}(\tau, x)}{\partial \tau} &= a_3 c_1^{(3)}(\tau, x), \end{aligned} \quad (6.24в)$$

де $d_l = d_{ll}^{(l)}$; $v_l = v_l^{(l)}$ - коефіцієнти дифузії домішки і конвективного перенесення в області Ω_l , $a_l = a_l^{(l)}$ - коефіцієнти інтенсивності сорбції, $x \in \Omega_l$ ($l = \overline{1,3}$).

Ми прийняли, що на верхній поверхні тіла відоме значення постійної концентрації домішки, тоді як на нижній границі тіла концентрація відсутня:

$$c_1^{(1)}(\tau, x) \Big|_{x=0} = c_0 \equiv \text{const}, \quad c_1^{(3)}(\tau, x) \Big|_{x=x_0} = 0. \quad (6.25)$$

Також приймаємо, що в початковий момент часу:

$$c_1^{(i)}(\tau, x) \Big|_{\tau=0} = c_2^{(i)}(\tau, x) \Big|_{\tau=0} = c_3^{(i)}(\tau, x) \Big|_{\tau=0} = 0, \quad i = \overline{1,3}. \quad (6.26)$$

На границях контакту фаз виконуються умови рівностей хімічних потенціалів і сумарних масових потоків, які запишемо у вигляді:

на першій границі контакту $x = x_1$

$$\lambda^{(1)} c_1^{(1)}(\tau, x) \Big|_{x=x_1} = c_1^{(2)}(\tau, x) \Big|_{x=x_1}, \quad (6.27а)$$

$$d_1 \frac{\partial c_1^{(1)}}{\partial x} - v_1 c_1^{(1)} \Big|_{x=x_1} = d_2 \frac{\partial c_1^{(2)}}{\partial x} - v_2 c_1^{(2)} \Big|_{x=x_1}; \quad (6.27б)$$

на другій границі контакту $x = x_2$

$$\lambda^{(2)} c_1^{(2)}(\tau, x) \Big|_{x=x_2} = c_1^{(3)}(\tau, x) \Big|_{x=x_2}, \quad (6.28а)$$

$$d_2 \frac{\partial c_1^{(2)}}{\partial x} - v_2 c_1^{(2)} \Big|_{x=x_2} = d_3 \frac{\partial c_1^{(3)}}{\partial x} - v_3 c_1^{(3)} \Big|_{x=x_2}, \quad (6.28б)$$

де $\lambda^{(l)} = \lambda_1^{(l)} / \lambda_2^{(l+1)}$ - відношення коефіцієнтів концентраційної залежності хімічних потенціалів.

Зазначимо, що існування та єдиність розв'язків задач перенесення для параболічних систем з неоднорідними умовами спряження типу неідеального контакту в класі функцій $L_2(\Omega)$, де область $\Omega \in R^3$, показано в роботах [58, 217].

6.2.2 Знаходження аналітичних співвідношень для концентрацій домішкових частинок, що мігрують у розчині, у контактуючих пористих областях

Другі рівняння систем (6.24) можна проінтегрувати. З урахуванням початкових умов (6.26) маємо

$$c_2^{(i)}(\tau, x) = a_i \int_0^\tau c_1^{(i)}(\tau', x) d\tau', \quad i = \overline{1,3}. \quad (6.29)$$

Розв'язок контактної-крайової задачі (6.24)-(6.28) будемо шукати за допомогою методу, запропонованому в монографії [79], тобто використовуючи інтегральні перетворення за просторовою змінною окремо в областях Ω_i , $i = \overline{1,3}$.

Для того, щоб застосувати інтегральне перетворення за змінною x , необхідно знати значення відповідних функцій або їх похідних на границях області перетворення [237, 262]. Тому на міжфазних границях $x = x_1$ та $x = x_2$ (рис. 6.2) доозначимо шукані функції $c_1^{(i)}(\tau, x)$ на границях контакту за допомогою контактних умов (6.27а), (6.28а). Це означає, що ми приймаємо рівність функцій $\lambda^{(1)}c_1^{(1)}(\tau, x)$ і $c_1^{(2)}(\tau, x)$ на поверхні $x = x_1$, $\lambda^{(2)}c_1^{(2)}(\tau, x)$ і $c_1^{(3)}(\tau, x)$ на поверхні $x = x_2$, і у свою чергу вони дорівнюють деяким функціям часу $g_1(\tau)$ і $g_2(\tau)$:

$$\lambda^{(1)}c_1^{(1)}(\tau, x)\Big|_{x=x_1} = c_1^{(2)}(\tau, x)\Big|_{x=x_1} = g_1(\tau, x_1) \equiv g_1(\tau), \quad (6.30a)$$

$$\lambda^{(2)}c_1^{(2)}(\tau, x)\Big|_{x=x_2} = c_1^{(3)}(\tau, x)\Big|_{x=x_2} = g_2(\tau, x_1) \equiv g_2(\tau). \quad (6.30b)$$

Запишемо концентрації на границях контакту через функції $g_1(\tau)$ та $g_2(\tau)$:

$$c_1^{(1)}(\tau, x)\Big|_{x=x_1} = \frac{1}{\lambda^{(1)}} g_1(\tau), \quad c_1^{(2)}(\tau, x)\Big|_{x=x_1} = g_1(\tau); \quad (6.31a)$$

$$c_1^{(2)}(\tau, x)\Big|_{x=x_2} = \frac{1}{\lambda^{(2)}} g_2(\tau), \quad c_1^{(3)}(\tau, x)\Big|_{x=x_2} = g_2(\tau). \quad (6.31b)$$

Тепер можемо виконати скінченні інтегральні перетворення окремо в областях Ω_i [216]. Крайова задача конвективної дифузії для області Ω_1 з урахуванням (6.31а) набула вигляду

$$\frac{\partial c_1^{(1)}(t, x)}{\partial t} = d_1 \frac{\partial^2 c_1^{(1)}(t, x)}{\partial x^2} - v_1 \frac{\partial c_1^{(1)}(t, x)}{\partial x} - a_1 c_1^{(1)}(t, x)$$

$$c_1^{(1)}(\tau, x) \Big|_{x=0} = c_0, \quad c_1^{(1)}(\tau, x) \Big|_{x=x_1} = \frac{1}{\lambda^{(1)}} g_1(\tau), \quad c_1^{(1)}(\tau, x) \Big|_{\tau=0} = 0. \quad (6.32)$$

Враховуючи вигляд операторів рівнянь (6.24) $L_i \equiv d_i \frac{\partial^2}{\partial x^2} - v_i \frac{\partial}{\partial x}$, а також те, що задано граничні умови першого роду, в області $\Omega_1 =]0; x_1[$ застосуємо таке інтегральне перетворення [213]:

$$\bar{c}_1(\tau, n) = \int_0^{x_1} c_1^{(1)}(\tau, x) \exp\left(\frac{-v_1 x}{2d_1}\right) \sin(y_n x) dx, \quad y_n = \frac{n\pi}{x_1}, \quad n = 1, 2, \dots, \quad (6.33)$$

оберненим до якого є перетворення

$$c_1^{(1)}(\tau, x) = \frac{2}{x_1} \exp\left(\frac{v_1 x}{2d_1}\right) \sum_{n=1}^{\infty} \bar{c}_1(\tau, n) \sin(y_n x). \quad (6.34)$$

Визначаємо перетворення (6.33) від виразу $d_1 \frac{\partial^2 c_1^{(1)}}{\partial x^2} - v_1 \frac{\partial c_1^{(1)}}{\partial x}$, проінтегрувавши частинами та врахувавши граничні умови (6.32):

$$\int_0^{x_1} \left(d_1 \frac{\partial^2 c_1^{(1)}(\tau, x)}{\partial x^2} - v_1 \frac{\partial c_1^{(1)}(\tau, x)}{\partial x} \right) \exp\left(\frac{-v_1 x}{2d_1}\right) \sin(y_n x) dx =$$

$$= d_1 y_n c_0 + \frac{d_1 y_n}{\lambda^{(1)}} \exp\left(\frac{-v_1 x}{2d_1}\right) g_1(\tau) (-1)^{n+1} - \left(y_n^2 d_1 + \frac{v_1^2}{4d_1} \right) \bar{c}_1(\tau, n).$$

Тоді крайову задачу в зображеннях в області Ω_1 запишемо так

$$\frac{\partial \bar{c}_1(\tau, n)}{\partial \tau} = - \left(a_1 + y_n^2 d_1 + \frac{v_1^2}{4d_1} \right) \bar{c}_1(\tau, n) + d_1 y_n c_0 + (-1)^{n+1} \frac{d_1 y_n}{\lambda^{(1)}} \exp\left(\frac{-v_1 x}{2d_1}\right) g_1(\tau),$$

$$\bar{c}_1(\tau, n) \Big|_{\tau=0} = 0.$$

Розв'язок такої задачі має вигляд [192]

$$\bar{c}_1(\tau, n) = e^{-\left(a_1 + y_n^2 d_1 + \frac{v_1^2}{4d_1} \right) \tau} \int_0^{\tau} d_1 y_n e^{-\left(a_1 + y_n^2 d_1 + \frac{v_1^2}{4d_1} \right) \tau'} \left(c_0 + \frac{(-1)^{n+1}}{\lambda^{(1)}} e^{-\left(\frac{v_1 x}{2d_1} \right)} g_1(\tau') \right) d\tau'. \quad (6.35)$$

Тепер розглянемо крайову задачу конвективної дифузії домішкової речовини в області $\Omega_2 =]x_1; x_2[$ з урахуванням умов (6.31a), (6.31б):

$$\frac{\partial c_1^{(2)}(\tau, x)}{\partial \tau} = d_2 \frac{\partial^2 c_1^{(2)}(\tau, x)}{\partial x^2} - v_2 \frac{\partial c_1^{(2)}(\tau, x)}{\partial x} - a_2 c_1^{(2)}(\tau, x),$$

$$c_1^{(2)}(\tau, x) \Big|_{x=x_1} = g_1(\tau), \quad c_1^{(2)}(\tau, x) \Big|_{x=x_2} = \frac{1}{\lambda^{(2)}} g_2(\tau), \quad c_1^{(2)}(\tau, x) \Big|_{\tau=0} = 0. \quad (6.36)$$

Щоби застосувати інтегральне перетворення типу (6.33), (6.34), яке визначається оператором диференціального рівняння та граничними умовами, необхідно врахувати, що границя області Ω_2 зсунута від початку координат на x_1 . Введемо інтегральне перетворення (6.33), (6.34) зі зсувом [14, 79]

$$\bar{c}_2(\tau, m) = \int_{x_1}^{x_2} c_1^{(2)}(\tau, x) \exp\left(\frac{-v_2(x-x_1)}{2d_2}\right) \sin(y_m(x-x_1)) dx,$$

$$y_m = \frac{m\pi}{(x_2-x_1)}, \quad m = 1, 2, \dots \quad (6.37)$$

Формулу оберненого перетворення до (6.37) можна знайти, зробивши заміну змінних $r = x - x_1$. Тоді отримаємо

$$\bar{c}_2(\tau, m) = \int_0^{x_2-x_1} c_1^{(2)}(\tau, r+x_1) \exp\left(\frac{-v_2 r}{2d_2}\right) \sin(y_m r) dr.$$

Для цього перетворення в області від 0 до $x_2 - x_1$ маємо обернене перетворення (6.34) у вигляді

$$c_1^{(2)}(\tau, r+x_1) = \frac{2}{x_2-x_1} \exp\left(\frac{v_2 r}{2d_2}\right) \sum_{m=1}^{\infty} \bar{c}_2(\tau, m) \sin(y_m r).$$

Повернувшись до змінної x і врахувавши $r = x - x_1$ одержимо формулу зворотного інтегрального перетворення в області Ω_2

$$c_1^{(2)}(\tau, x) = \frac{2}{x_2-x_1} \exp\left(\frac{v_2(x-x_1)}{2d_2}\right) \sum_{m=1}^{\infty} \bar{c}_2(\tau, m) \sin(y_m(x-x_1)). \quad (6.38)$$

Тепер можемо знайти перетворення (6.37) від виразу $d_2 \frac{\partial^2 c_1^{(2)}}{\partial x^2} - v_2 \frac{\partial c_1^{(2)}}{\partial x}$:

$$\int_{x_1}^{x_2} \left(d_2 \frac{\partial^2 c_1^{(2)}(\tau, x)}{\partial x^2} - v_2 \frac{\partial c_1^{(2)}(\tau, x)}{\partial x} \right) \exp\left(\frac{-v_2(x-x_1)}{2d_2}\right) \sin(y_m(x-x_1)) dx =$$

$$= -\frac{d_2 y_m (-1)^m}{\lambda^{(2)}} g_2(\tau) + d_2 y_m g_1(\tau) - \left(y_m^2 d_2 + \frac{v_2^2}{4d_2} \right) \bar{c}_2(\tau, m). \quad (6.39)$$

З урахуванням формули (6.39) запишемо крайову задачу (6.36) в зображеннях

$$\frac{\partial \bar{c}_2(\tau, m)}{\partial \tau} = - \left(a_2 + y_m^2 d_2 + \frac{v_2^2}{4d_2} \right) \bar{c}_2(\tau, m) + d_2 y_m g_1(\tau) + d_2 y_m \frac{(-1)^{m+1}}{\lambda^{(2)}} g_2(\tau),$$

$$\bar{c}_2(\tau, m) \Big|_{\tau=0} = 0.$$

Розв'язок цієї задачі має вигляд [192]

$$\bar{c}_2(\tau, m) = e^{- \left(a_2 + y_m^2 d_2 + \frac{v_2^2}{4d_2} \right) \tau} \int_0^\tau d_2 y_m e^{- \left(a_2 + y_m^2 d_2 + \frac{v_2^2}{4d_2} \right) \tau'} \left(g_1(\tau) + \frac{(-1)^{m+1}}{\lambda^{(2)}} g_2(\tau') \right) d\tau', \quad (6.40)$$

Тепер розглянемо крайову задачу в третій області $\Omega_3 =]x_2; x_0[$, враховуючи умову (6.31б):

$$\frac{\partial c_1^{(3)}(\tau, x)}{\partial \tau} = d_3 \frac{\partial^2 c_1^{(3)}(\tau, x)}{\partial x^2} - v_3 \frac{\partial c_1^{(3)}(\tau, x)}{\partial x} - a_3 c_1^{(3)}(\tau, x)$$

$$c_1^{(3)}(\tau, x) \Big|_{x=x_2} = g_2(\tau), \quad c_1^{(3)}(\tau, x) \Big|_{x=x_0} = 0, \quad c_1^{(3)}(\tau, x) \Big|_{\tau=0} = 0. \quad (6.41)$$

Враховуючи зсув границі області Ω_3 на відстань x_2 від початку координат, маємо таке пряме скінченне інтегральне перетворення для цієї області

$$\bar{c}_3(\tau, k) = \int_{x_2}^{x_0} c_1^{(3)}(\tau, x) \exp\left(\frac{-v_3(x-x_2)}{2d_3} \right) \sin(y_k(x-x_2)) dx, \quad y_k = \frac{k\pi}{x_0 - x_2}, \quad k = 1, 2, \dots \quad (6.42)$$

Формулу оберненого перетворення знаходимо аналогічно до перетворення в області Ω_2 . В результаті отримаємо

$$c_1^{(3)}(\tau, x) = \frac{2}{x_0 - x_2} \exp\left(\frac{v_3(x-x_2)}{2d_3} \right) \sum_{k=1}^{\infty} \bar{c}_3(\tau, k) \sin(y_k(x-x_2)). \quad (6.43)$$

Перетворення (6.42) від виразу $d_3 \frac{\partial^2 c_1^{(3)}}{\partial x^2} - v_3 \frac{\partial c_1^{(3)}}{\partial x}$ набуває форми

$$\int_{x_2}^{x_0} \left(d_3 \frac{\partial^2 c_1^{(3)}(\tau, x)}{\partial x^2} - v_3 \frac{\partial c_1^{(3)}(\tau, x)}{\partial x} \right) \exp\left(\frac{-v_3(x-x_2)}{2d_3} \right) \sin(y_k(x-x_2)) dx =$$

$$= d_3 y_k g_2(\tau) - \left(y_k^2 d_3 + \frac{v_3^2}{4d_3} \right) \bar{c}_3(\tau, k).$$

Тоді крайова задача (6.41) в зображеннях матиме вигляд

$$\frac{\partial \bar{c}_3(\tau, k)}{\partial \tau} = - \left(a_3 + y_k^2 d_3 + \frac{v_3^2}{4d_3} \right) \bar{c}_3(\tau, k) + d_3 y_3 g_2(\tau),$$

$$\bar{c}_3(\tau, k) \Big|_{\tau=0} = 0,$$

розв'язок якої запишемо так, як і у попередніх випадках

$$\bar{c}_3(\tau, k) = e^{- \left(a_3 + y_k^2 d_3 + \frac{v_3^2}{4d_3} \right) \tau} \int_0^{\tau} d_3 y_k e^{\left(a_3 + y_k^2 d_3 + \frac{v_3^2}{4d_3} \right) \tau'} g_2(\tau') d\tau'. \quad (6.44)$$

У виразах (6.35), (6.40) і (6.44) залишаються невідомими функції $g_1(\tau')$ та $g_2(\tau')$. Визначатимемо їх із контактних умов рівності потоків мас на обох границях поділу областей (6.27б) та (6.28б).

Зауважимо, що розв'язки (6.35), (6.40) та (6.44) отримані для кожного макроелемента, розглядаючи його як окреме тіло [15]. При цьому нормаль завжди перпендикулярна до поверхні тіла і спрямована з його об'єму [53].

Двохстороння поверхня тіла Φ характеризується такою властивістю: для будь-якої точки $M \in \Phi$ і для довільного контуру, який проходить по поверхні Φ і не перетинається з границею поверхні, вибраний в точці M напрямок нормалі, неперервно змінюючись при русі точки по контуру, не змінює свого напрямку на протилежний при поверненні в точку M . Враховуючи це, у випадку нашої задачі на границі контакту $x = x_1$ для макроелемента Ω_1 його зовнішня нормаль спрямована у напрямку осі Ox , а зовнішня нормаль макроелемента Ω_2 спрямована у протилежному напрямі (Рис. 6.3). Аналогічна ситуація відбувається на границі контакту $x = x_2$: для макроелемента Ω_2 його зовнішня нормаль спрямована у напрямку осі Ox , а зовнішня нормаль макроелемента Ω_3 спрямована у протилежному напрямі (Рис. 6.3).

Маючи розв'язки для кожного макроелемента тіла, проводимо їх «зшивання» в єдину систему. Тоді, враховуючи незмінність напрямку потоку в кожному макроелементі, для коректного зшивання другі умови контакту трансформуються до вигляду на першій границі контакту $x = x_1$

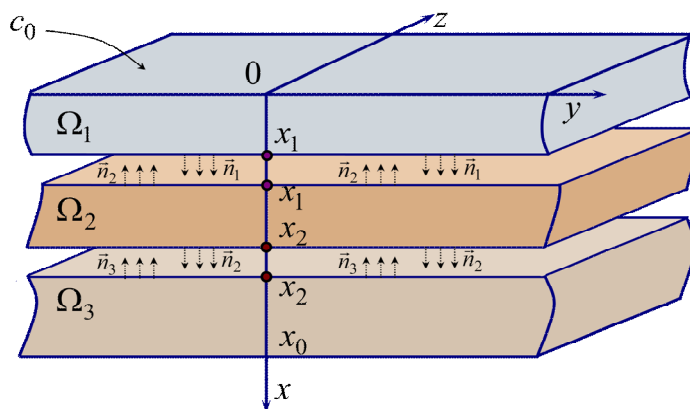


Рис. 6.3. Зовнішні нормалі до макроелементів тіла

$$d_1 \frac{\partial c_1^{(1)}}{\partial x} - v_1 c_1^{(1)} \Big|_{x=x_1-0} = d_2 \frac{\partial c_1^{(2)}}{\partial x} - v_2 c_1^{(2)} \Big|_{x=x_1+0} ;$$

на другій границі контакту $x = x_2$

$$-d_2 \frac{\partial c_1^{(2)}}{\partial x} - v_2 c_1^{(2)} \Big|_{x=x_2-0} = d_3 \frac{\partial c_1^{(3)}}{\partial x} + v_3 c_1^{(3)} \Big|_{x=x_2+0} .$$

Після виконання обернених перетворень (6.34), (6.38) та (6.43) відповідно до виразів (6.35), (6.40) і (6.44) підставимо вирази для концентрацій та їх похідних у точках $x = x_1$, та $x = x_2$ у співвідношення (6.27б) і (6.28б) відповідно. Тоді одержимо систему двох інтегральних рівнянь:

$$\begin{aligned} & \frac{2d_1^2}{x_1} e^{\frac{v_1 x_1}{2d_1}} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n y_n^2 e^{-b_{n1}\tau} \int_0^{\tau} e^{b_{n1}\tau'} \left(c_0 + \frac{(-1)^{n+1}}{\lambda^{(1)}} e^{-\left(\frac{v_1 x}{2d_1}\right)} g_1(\tau') \right) d\tau' = \\ & = \frac{2d_2^2}{x_2 - x_1} \sum_{m=1}^{\infty} y_m^2 e^{-b_{m2}\tau} \int_0^{\tau} e^{b_{m2}\tau'} \left(g_1(\tau') + \frac{(-1)^{m+1}}{\lambda^{(2)}} g_2(\tau') \right) d\tau' ; \\ & \frac{2d_2^2}{x_2 - x_1} e^{\frac{v_2(x_2-x_1)}{2d_2}} \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^m y_m^2 e^{-b_{m2}\tau} \int_0^{\tau} e^{b_{m2}\tau'} \left(g_1(\tau') + \frac{(-1)^{m+1}}{\lambda^{(2)}} g_2(\tau') \right) d\tau' = \\ & = \frac{2d_3^2}{x_0 - x_2} \sum_{k=1}^{\infty} y_k^2 e^{-b_{k3}\tau} \int_0^{\tau} e^{b_{k3}\tau'} g_2(\tau') d\tau' , \end{aligned} \quad (6.45)$$

$$\text{де } b_{n1} = a_1 + y_n^2 d_1 + \frac{v_1^2}{4d_1}, \quad b_{m2} = a_2 + y_m^2 d_2 + \frac{v_2^2}{4d_2}, \quad b_{k3} = a_3 + y_k^2 d_3 + \frac{v_3^2}{4d_3}.$$

Цю систему інтегральних рівнянь розв'язуємо відносно функцій $g_1(\tau')$ та $g_2(\tau')$. Зауважимо, що інтегральна система рівнянь (6.45) у цьому випадку має неєдиний розв'язок, оскільки існує така функція $F(t')$, що $\int_0^t F(t')dt' = 0$. Проте розв'язок вихідної задачі є єдиним незалежно від способу розв'язання системи рівнянь (6.45), оскільки функція $g_1(\tau')$ у виразах (6.35) і (6.40), як і функція $g_2(\tau')$ у виразах (6.40) і (6.44) фігурують тільки під знаком інтегралів за змінною τ' .

Зазначимо, що всі інтеграли у (6.45) є означеними, причому в одних і тих самих межах $[0; \tau]$, де τ - конкретний біжучий момент часу. Відповідно, кожне рівняння можемо привести до одного інтеграла. Для того, щоб означений інтеграл від неперіодичної функції дорівнював нулю, достатньо, щоб нулю дорівнювала підінтегральна функція. Тоді отримаємо систему рівнянь для визначення невідомих функцій $g_1(\tau')$ та $g_2(\tau')$:

$$\begin{aligned}
 g_1(\tau') & \left[\frac{A_{11}d_1}{\lambda^{(1)}} \sum_{n=1}^{\infty} y_n^2 e^{-b_{n1}(\tau-\tau')} - A_{21} \sum_{m=1}^{\infty} y_m^2 e^{-b_{m2}(\tau-\tau')} \right] - g_2(\tau') \frac{A_{21}}{\lambda^{(2)}} \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^m y_m^2 e^{-b_{m2}(\tau-\tau')} = \\
 & = A_{11}d_1c_0 e^{\frac{v_1x_1}{2d_1}} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^{n+1} y_n^2 e^{-b_{n1}(\tau-\tau')} ; \\
 & g_1(\tau') A_{21} e^{\frac{v_2(x_2-x_1)}{2d_2}} \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^m y_m^2 e^{-b_{m2}(\tau-\tau')} - \\
 & - g_2(\tau') \left[\frac{A_{21}}{\lambda^{(2)}} e^{\frac{v_2(x_2-x_1)}{2d_2}} \sum_{m=1}^{\infty} y_m^2 e^{-b_{m2}(\tau-\tau')} + A_{25} \sum_{k=1}^{\infty} y_k^2 e^{-b_{k3}(\tau-\tau')} \right] = 0, \quad (6.46)
 \end{aligned}$$

$$\text{де } A_{11} = \frac{2d_1}{x_1}; \quad A_{21} = \frac{2d_2^2}{\lambda^{(2)}(x_2 - x_1)}; \quad A_{25} = \frac{2d_3^2}{x_0 - x_2}.$$

І в результаті з системи рівнянь (6.46) отримаємо вирази для $g_1(\tau')$ та $g_2(\tau')$:

$$g_1(\tau') = \frac{A_{11}c_0 \exp\left(\frac{v_1x_1}{2d_1}\right) \Sigma_n - g_2(\tau') A_{12} \Sigma_m^+}{A_{13} 2d_2^2 (x_1 \lambda^{(1)} \Sigma_m^+ + (x_2 - x_1) \Sigma_n)}; \quad (6.47a)$$

$$g_2(\tau') = \left[A_{21} e^{\frac{v_2x_1}{2d_2}} \left(\Sigma_m^- - \frac{\Sigma_m^+ A_{22}}{A_{23} \Sigma_m^+ + A_{24} \Sigma_n} \right) - A_{25} e^{\frac{v_2x_2}{2d_2}} \Sigma_k \right] \frac{A_{23} \Sigma_m^+ + A_{24} \Sigma_n}{A_{26} c_0 \Sigma_n \Sigma_m^+}, \quad (6.47б)$$

де $A_{12} = \frac{1}{\lambda^{(2)}} \frac{2d_2}{x_2 - x_1}$; $A_{13} = \frac{1}{\lambda^{(2)}} \frac{2d_2}{x_2 - x_1}$; $A_{22} = 2x_1\lambda^{(1)}$; $A_{23} = 2d_2^2 x_1\lambda^{(1)}$; $A_{24} = 2d_1^2(x_2 - x_1)$;
 $A_{26} = -4d_1d_2\lambda^{(1)}$; $\Sigma_n^\pm = \sum_{n=1}^{\infty} (\pm 1)^n y_n^2 e^{-b_{n1}(\tau-\tau')}$; $\Sigma_m^\pm = \sum_{m=1}^{\infty} (\pm 1)^{m+1} y_m^2 e^{-b_{m2}(\tau-\tau')}$, $\Sigma_k^\pm = \sum_{k=1}^{\infty} (\pm 1)^k y_k^2 e^{-b_{k3}(\tau-\tau')}$.

Зазначимо, що якщо в одному з підшарів, наприклад першому, коефіцієнт конвективного перенесення є набагато більшим ніж решта коефіцієнтів в інших підшарах, то для малих часів протікання процесу відбувається різке збільшення концентрації частинок на нижній границі цього матеріалу.

Структура розв'язку (6.35) в області Ω_1 після оберненого перетворення дозволяє перший доданок підінтегральної функції проінтегрувати та виділити асимптотичну частину, просумувавши відповідний ряд [5, 240]. В результаті для функцій концентрації домішкової речовини, яка мігрує у поровому розчині, одержимо

в області Ω_1

$$c_1^{(1)}(\tau, x) = \exp\left(\frac{v_1 x}{2d_1}\right) \left\{ c_0 \frac{\text{sh}(\omega(x_1 - x))}{\text{sh}(\omega x_1)} - \frac{2d_1}{x_1} \sum_{n=1}^{\infty} y_n \sin(y_n x) \left[\frac{c_0 e^{-b_{n1}\tau}}{b_{n1}} + \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{(-1)^n}{\lambda^{(1)}} e^{-\left(\frac{v_1 x}{2d_1}\right)} e^{-b_{n1}\tau} \int_0^{\tau} e^{b_{n1}\tau'} g_1(\tau') d\tau' \right] \right\}; \quad (6.48a)$$

в області Ω_2

$$c_1^{(2)}(\tau, x) = \frac{2d_2}{x_2 - x_1} \exp\left(\frac{v_2(x - x_1)}{2d_2}\right) \sum_{m=1}^{\infty} y_m \sin(y_m(x - x_1)) \times \\ \times e^{-b_{m2}\tau} \int_0^{\tau} e^{b_{m2}\tau'} \left(g_1(\tau') + \frac{(-1)^{m+1}}{\lambda^{(2)}} g_2(\tau') \right) d\tau'; \quad (6.48б)$$

в області Ω_3

$$c_1^{(3)}(\tau, x) = \frac{2d_3}{x_0 - x_2} \exp\left(\frac{v_3(x - x_2)}{2d_3}\right) \sum_{k=1}^{\infty} y_k \sin(y_k(x - x_2)) e^{-b_{k3}\tau} \int_0^{\tau} e^{b_{k3}\tau'} g_2(\tau') d\tau', \quad (6.48в)$$

де $\omega = \sqrt{a_1/d_1 + v_1^2/4d_1^2}$, а функції $g_1(\tau')$ і $g_2(\tau')$ визначаються за формулами (6.47а) і (6.47б) відповідно.

Таким чином, за допомогою інтегральних перетворень за просторовими змінними, які застосовуються окремо в областях, що контактують, ми отримали аналітичний розв'язок контактної-крайової задачі конвективної дифузії домішкової

речовини у тришаровому шарі, кожен макроелемент якого є пористим з відмінними від інших характеристиками.

6.2.3. Аналіз функцій $g_1(\tau)$ і $g_2(\tau)$

Фізичний сенс умов (6.31а), (6.31б) полягає в тому, що задаються значення функцій концентрацій $c_1^{(i)}(\tau, x)$ на границях контакту фаз деякими функціями часу $g_1(\tau)$ і $g_2(\tau)$. Тоді можемо стверджувати, що функція $g_1(\tau)$ - це значення функції концентрації $c_1^{(2)}(\tau, x)$ на верхній границі області Ω_2 або функції концентрації $c_1^{(1)}(\tau, x)$, нормованої на коефіцієнт $\lambda^{(1)}$, на нижній границі області Ω_1 . Відповідно, функція $g_2(\tau)$ - це значення функції концентрації $c_1^{(3)}(\tau, x)$ на верхній границі області Ω_3 або функції концентрації $c_1^{(2)}(\tau, x)$, нормованої на коефіцієнт $\lambda^{(2)}$, на нижній границі області Ω_2 . Тоді, враховуючи нульові початкові умови (6.26), отримуємо значення функцій $g_1(\tau)$ і $g_2(\tau)$ у початковий момент безрозмірного часу

$$g_1(\tau)|_{\tau=0} = 0, \quad g_2(\tau)|_{\tau=0} = 0.$$

Функції (6.47) містять ряди типу $\Sigma_s = \sum_{s=1}^{\infty} y_s^2 \exp(-p_s(\tau - \tau'))$, які в точці $\tau' = \tau$,

що входить в область визначення, стають розбіжними. Тому для знаходження границь $\lim_{\tau' \rightarrow \tau} g_i(\tau')$, $i = 1; 2$ розділимо чисельник і знаменник співвідношень (6.47) на відповідні ряди. А саме (6.47а) поділимо на ряд Σ_n і врахуємо, що

$$\lim_{\tau' \rightarrow \tau} \Sigma_m^+ / \Sigma_n = \sum_{m=1}^{\infty} \lim_{\tau' \rightarrow \tau} y_m^2 \exp\left(-\left(a_2 + d_2 y_m^2 \frac{v_2^2}{4d_2}\right)(\tau - \tau')\right) / \Sigma_n = 0. \quad (6.49)$$

Тоді одержимо

$$\lim_{\tau' \rightarrow \tau} g_1(\tau') = \frac{A_{11}c_0}{A_{13}2d_2^2(x_2 - x_1)} \exp\left(\frac{v_1 x_1}{2d_1}\right). \quad (6.50a)$$

Якщо подамо вираз для функції $g_2(\tau')$ у вигляді

$$g_2(\tau') = \frac{A_{11}c_0 \exp\left(\frac{v_1 x_1}{2d_1}\right) \Sigma_n - g_1(\tau') A_{13} 2d_2^2 (x_1 \lambda^{(1)} \Sigma_m^+ + (x_2 - x_1) \Sigma_n)}{A_{12} \Sigma_m^+},$$

тоді з урахуванням (6.49) і (6.50а) отримаємо

$$\lim_{\tau' \rightarrow \tau} g_2(\tau') = \frac{A_{11}c_0x_1\lambda^{(1)}}{A_{12}(x_2 - x_1)} \exp\left(\frac{v_1x_1}{2d_1}\right). \quad (6.50б)$$

Зазначимо, що точка $\tau' = \tau$ є точкою виходу функцій $g_i(\tau')$ на стаціонарний режим, оскільки вони стають незалежними від часу. Крім цього за формулою (6.50а) концентрації домішкових частинок у поровому розчині на границі контакту $x = x_1$ залежать від потужності джерела маси c_0 , товщин контактуючих на цій границі пористих шарів та коефіцієнтів дифузії x_1, d_1 і $x_2 - x_1, d_2$, при цьому не залежать від товщини третього пористого шару $x_0 - x_2$ та коефіцієнта дифузії d_3 . Щодо виразу (6.50б) для функції $g_2(\tau')$, яка описує концентрацію частинок на границі контакту $x = x_2$ у стаціонарному режимі, виявилось, що вона також не залежить від характеристик третього пористого шару Ω_3 , проте залежить від товщин шарів Ω_1 і Ω_2 та коефіцієнтів дифузії саме у цих областях. Також зауважимо, що $\lim_{\tau' \rightarrow \tau} g_2(\tau')$ є прямо пропорційним відношенню $\lambda^{(1)}/\lambda^{(2)}$ кінетичних коефіцієнтів, визначають величину стрибків функції концентрації на границях контакту фаз.

6.2.4. Порівняльний числовий аналіз функцій $g_1(\tau), g_2(\tau)$ та встановлення закономірностей

Зазначимо, що коефіцієнти системи рівнянь, яким підпорядковуються функції $g_1(\tau)$ і $g_2(\tau)$, а також вільні члени є настільки малими, що виходять за межі точності обчислень (для розглядуваних параметрів задачі їхній порядок є в межах $10^{-10} - 10^{-70}$). Тому для проведення порівняльного аналізу поведінки функцій $g_1(\tau)$ і $g_2(\tau)$, які отримані у вигляді (6.47), використаємо теорему про властивості множення матриці на вектор [70, 206]. Відповідно обчислення проводимо для еквівалентної системи рівнянь [40, 238], яка отримана з вихідної системи (6.46)

домноженням на вектор $\begin{bmatrix} (\min B_{1j})^{-1} \\ (\min B_{2j})^{-1} \end{bmatrix}$ ($j = 1, 2$), де B_{ij} - коефіцієнти (6.46).

Числові розрахунки проводились в природних безрозмірних змінних (6.23). При цьому за базові приймалися наступні значення коефіцієнтів $a_1 = 1; a_2 = 1.5; a_3 = 2; d_1 = 1; d_2 = 0.5; d_3 = 0.3; v_1 = 0.4; v_2 = 0.3; v_3 = 0.2; x_0 = 10; x_1 = 3; x_2 = 7;$

$c_0 = 1$; $\lambda^{(1)} = 1.5$; $\lambda^{(2)} = 1.7$). Вздовж осі абсцис відкладається безрозмірна часова змінна τ , а вздовж осі ординат – функції $g_1(\tau)/c_0$ та $g_2(\tau)/c_0$.

На рис. 6.3-6.8 проілюстровано характерну поведінку функцій концентрацій домішкової речовини на верхній границі області Ω_2 (рис. а) та значення функції концентрації частинок на верхній границі області Ω_3 (рис. б) для різних значень параметрів задачі.

На рис. 6.3, 6.4 наведені графіки функцій $g_1(\tau)$ та $g_2(\tau)$ для різних значень коефіцієнтів інтенсивності сорбції в другому шарі Ω_2 $a_2 = 0.5; 0.8; 1; 1.2; 1.5; 1.7; 2$ (криві 1-7, рис. 6.3) та третьому шарі Ω_3 $a_3 = 0.5; 0.8; 1; 1.2; 1.5; 1.7; 2$ (криві 1-7, рис. 6.4).

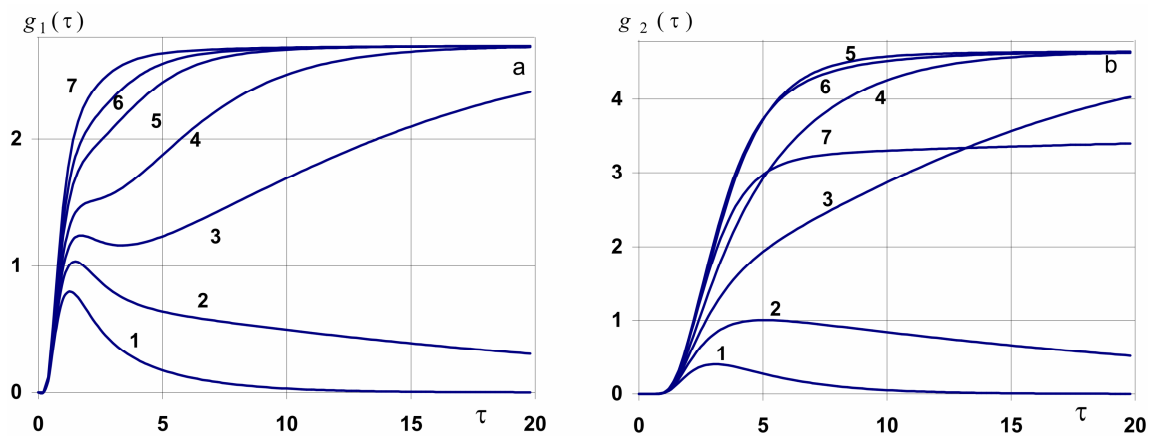


Рис. 6.3. Графіки функцій $g_1(\tau)$ (рис. а) і $g_2(\tau)$ (рис. б) для різних значень коефіцієнта інтенсивності сорбції a_2

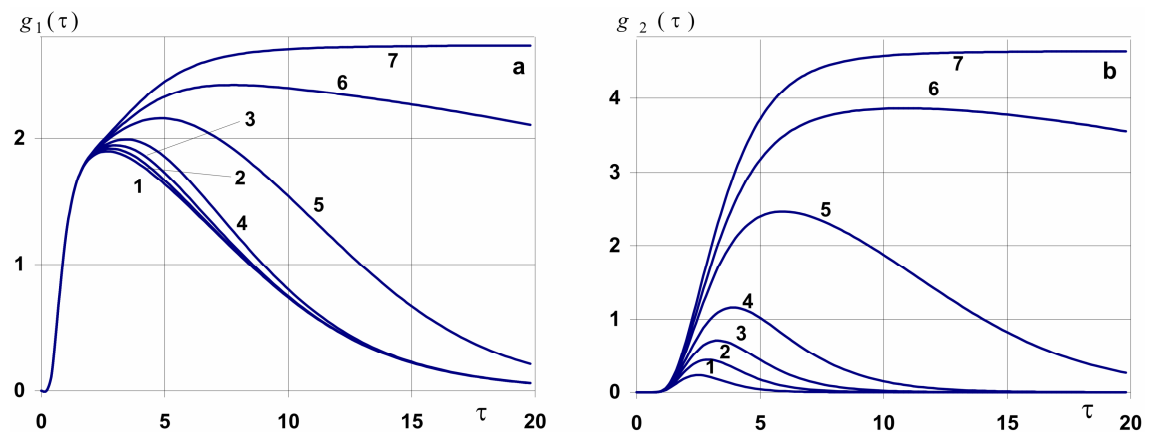


Рис. 6.4. Графіки функцій $g_1(\tau)$ (рис. а) і $g_2(\tau)$ (рис. б) для різних значень коефіцієнта інтенсивності сорбції a_3

На рис. 6.5, 6.6 проілюстровано поведінку функцій концентрацій домішкової речовини на верхній границі області Ω_2 (рис. а) та значення функції концентрації частинок на верхній границі області Ω_3 (рис. б) для різних значень коефіцієнтів швид-

кості конвективного перенесення у всіх макроелементах тіла. Рис. 6.5 показує відповідні графіки для значень $v_1 = 0.1; 0.2; 0.3; 0.4; 0.6; 1$ (криві 1-6), рис. 6.6 - $v_2 = 0.1; 0.2; 0.3; 0.4; 0.6; 1$ (криві 1-6).

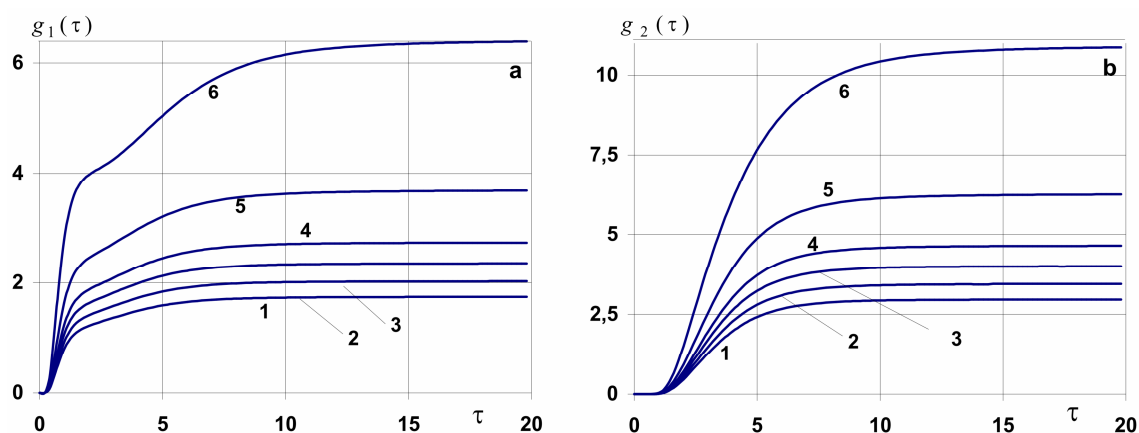


Рис. 6.5. Графіки функцій $g_1(\tau)$ (рис. а) і $g_2(\tau)$ (рис. б) для різних значень коефіцієнта швидкості конвективного перенесення в першому макроелементі

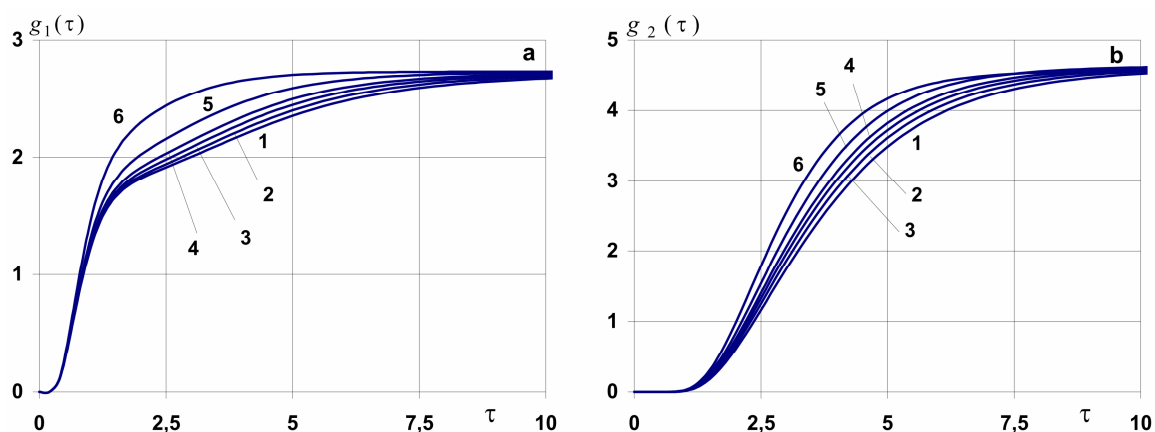


Рис. 6.6. Графіки функцій $g_1(\tau)$ (рис. а) і $g_2(\tau)$ (рис. б) для різних значень коефіцієнта швидкості конвективного перенесення в другому макроелементі

Рис. 6.7 демонструє поведінку функції $g_1(\tau)$ і $g_2(\tau)$ для відношень коефіцієнтів концентраційної залежності хімічних потенціалів на границях контакту, які визначають величину стрибків концентрації на відповідних поверхнях. На рис. 6.7 показано функції $g_1(\tau)$ (рис. а) і $g_2(\tau)$ (рис. б) для $\lambda^{(1)} = 0.2; 0.5; 1; 1.5; 1.7; 2; 2.2$ (криві 1-7).

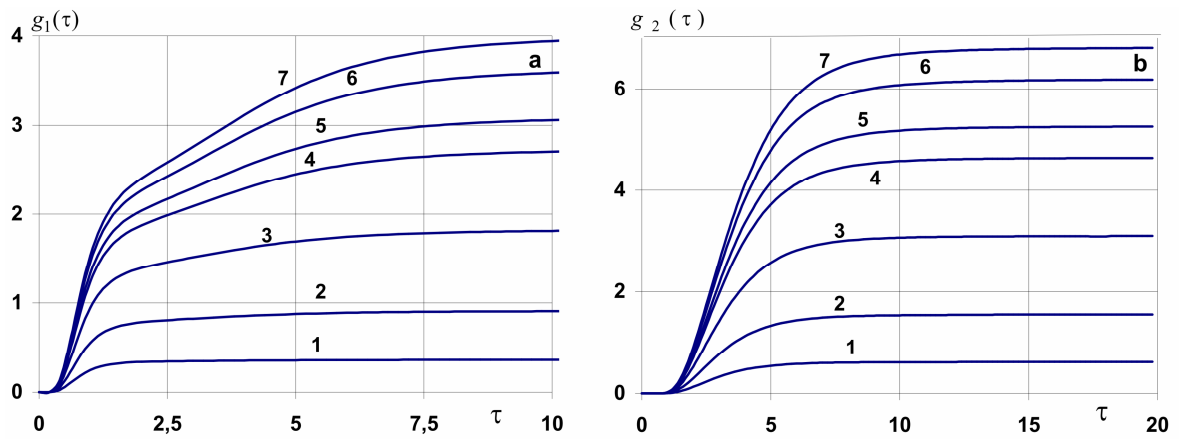


Рис. 6.7. Графіки функцій $g_1(\tau)$ (рис. а) і $g_2(\tau)$ (рис. б) для різних значень коефіцієнта $\lambda^{(1)}$

На рис. 6.8 проілюстровано як зміна товщин прошарків макроелементів за тої самої товщини тришарового тіла впливає на функції $g_1(\tau)$ і $g_2(\tau)$ на границях контакту. Рис. 6.8 демонструє поведінку функцій $g_1(\tau)$ і $g_2(\tau)$ при зсуві верхньої границі третього макроелемента Ω_3 до нижньої границі тіла, а саме $x_2 = 4; 4.5; 5; 6; 7; 8; 9$ (криві 1-7) при $x_1 = 3$.

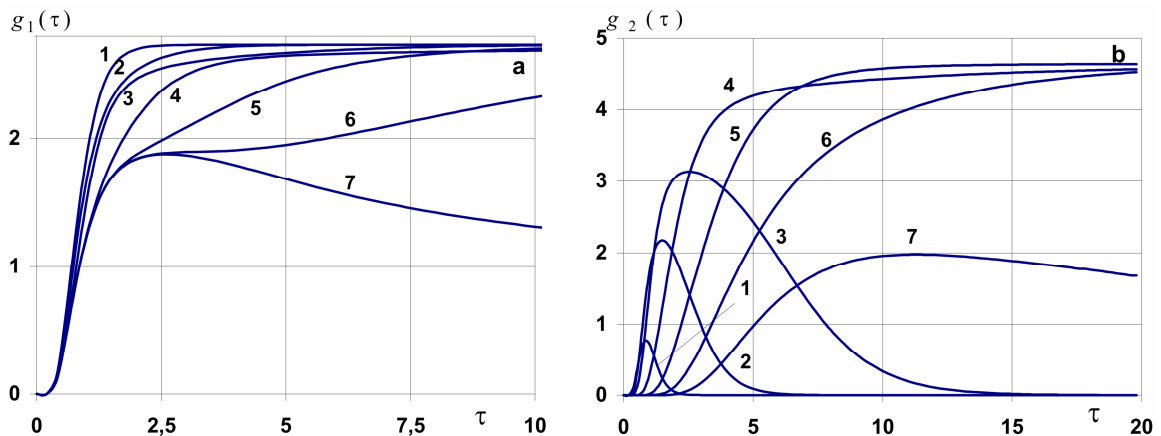


Рис. 6.8. Графіки функцій $g_1(\tau)$ (рис. а) і $g_2(\tau)$ (рис. б) для різних значень товщини другого макроелемента

Відзначимо, що для достатньо широкого діапазону значень параметрів задачі спостерігається наявність стаціонарного режиму для функцій $g_1(\tau)$ і $g_2(\tau)$ [153]. Причому значення $g_1(\tau)$ і $g_2(\tau)$ в усталеному режимі змінюється від нехтовно малих (наприклад, криві 1, рис. 6.3), тобто на границі контакту домішкові частинки не накопичуються, до великих значень, які в декілька разів перевищують значення концентрації, що підтримується на верхній поверхні тіла $x = 0$ (наприклад, криві 5-

7, рис. 6.3), що відповідає випадку значного накопичення домішкової речовини на границях контакту макроелементів.

У формулюванні задачі приймалося, що в початковий момент часу домішкова речовина відсутня в усьому тілі, у т.ч. на границях контакту. Далі в околі поверхонь $x = x_1$ та $x = x_2$ відбувається незначне зростання концентрації частинок, а потім функції $g_1(\tau)$ і $g_2(\tau)$ різко зростають до виходу на усталений режим (наприклад, криві 7, рис. 6.4) або, досягнувши свого максимуму спадають доки не вийдуть на стаціонарне значення (наприклад, криві 5, рис. 6.4). Зауважимо, що довжина часового інтервалу нульових або нехтовно малих значень $g_1(\tau)$ і $g_2(\tau)$ на початку процесу конвективної дифузії є тим більшою, чим далі від джерела маси знаходиться границя контакту (рис. 6.8).

Зазначимо, що зміна таких коефіцієнтів як коефіцієнти інтенсивності сорбції в другому і третьому контактуючих шарах, приведений кінетичний коефіцієнт переносу в області Ω_2 , коефіцієнти швидкості конвективного перенесення в першому і другому шарах, коефіцієнти концентраційної залежності хімічних потенціалів суттєво впливає на поведінку і/або значення функцій $g_1(\tau)$ і $g_2(\tau)$. Зміна ж інших коефіцієнтів не тягне за собою зміни значень досліджуваних функцій.

Коефіцієнт інтенсивності сорбції в області Ω_1 є фіксованим (на нього проведено нормування), а в областях Ω_2 і Ω_3 відповідні коефіцієнти можуть бути як більшими, рівними, так і меншими ніж в області Ω_1 , тобто можливі випадки $a_2 < 1$, $a_2 = 1$, $a_2 > 1$ і $a_3 < 1$, $a_3 = 1$, $a_3 > 1$. При цьому, якщо сорбція у другому шарі менш інтенсивна ніж в першому, то наявний максимум функції $g_1(\tau)$ в околі точки $\tau = 1.5$ (криві 1, 2, рис. 6.3а), причому чим більші значення приймає коефіцієнт a_2 , тим більшого максимуму досягає функція концентрації на границі контакту $x = x_1$. Якщо $a_2 = 1$, то $\max g_1(\tau)$ в околі точки $\tau = 1.5$ стає локальним, і зі збільшенням a_2 взагалі зникає (криві 3 і 4-7, рис. 6.3а). При цьому значення функції $g_1(\tau)$ в усталеному режимі є однаковими для всіх $a_2 \geq 1$, і $g_1(\tau)$ тим швидше виходить на стаціонарний режим, чим більшими є значення коефіцієнта a_2 , тобто чим інтенсивніший процес сорбції у другому шарі (рис. 6.3а). Подібним чином інтенсивність сорбції в області Ω_2 впливає на поведінку функції концентрації $g_2(\tau)$ на другій границі контакту $x = x_2$ (рис. 6.3б). Про-

те досягнувши можливих максимальних значень при $a_2 = 1.5$, зі зростанням a_2 починають зменшуватися значення $g_2(\tau)$ в стаціонарному режимі (криві 6, 7, рис. 6.3b).

Збільшення коефіцієнта інтенсивності сорбції в третьому шарі a_3 призводить до зростання значень функцій концентрацій на обох границях контакту (рис. 6.4). При цьому, якщо $a_3 \leq a_1$, то значення функції $g_1(\tau)$ можуть зрости максимально до 4% (криві 1-3, рис. 6.4a). Для $a_3 > a_1$ зростання інтенсивності сорбції в області Ω_3 призводить до монотонно зростаючого характеру функції $g_1(\tau)$ і збільшення значень стаціонарного режиму цієї функції (криві 4-7, рис. 6.4a).

На другій границі контакту зміна коефіцієнта інтенсивності сорбції призводить до суттєво більшого впливу на значення концентрації домішкової речовини (рис. 6.4b). Так зростання коефіцієнта a_3 у 1.5 рази призводить до збільшення максимальних значень функції концентрації у двічі: $\max_{\tau>0} g_2(\tau) \Big|_{a_3=0.8} / \max_{\tau>0} g_2(\tau) \Big|_{a_3=0.5} \approx 2$. В той же час зростання коефіцієнта a_3 від 0.5 до 2 спричинює зростання максимальних значень $g_2(\tau)$ на порядок. При цьому свого максимуму функція концентрації на границі $x = x_2$ досягає для більших часових інтервалів (рис. 6.4b). Зауважимо, як і для функції $g_1(\tau)$, зростання інтенсивності сорбції в області Ω_3 призводить до монотонно зростаючого характеру функції $g_2(\tau)$ і збільшення значень стаціонарного режиму цієї функції (криві 5-7, рис. 6.4b).

Зазначимо, що найбільший вплив на значення функцій концентрацій на границях контакту має коефіцієнт швидкості конвективного перенесення в першому макроелементі, а найменший – у третьому (рис. 6.5-6.6). При цьому зміна значення v_1 призводить до аналогічних змін у поведінці функцій $g_1(\tau)$ і $g_2(\tau)$, включно з їхніми стаціонарними режимами. Так зростання швидкості конвективного перенесення в першому шарі в 1.5 рази призводить до збільшення значень $g_1(\tau)$ на 35%, наприклад $g_1(\tau) \Big|_{v_1=0.6, \tau>1} / g_1(\tau) \Big|_{v_1=0.4, \tau>1} \approx 1.35$, а значення $g_2(\tau)$ зростають на 30%, зокрема, $g_2(\tau) \Big|_{v_1=0.6, \tau>1} / g_2(\tau) \Big|_{v_1=0.4, \tau>1} \approx 1.3$ (криві 4, 5, рис. 6.5a і b). Зауважимо, що зміна величини швидкості конвективного перенесення в області Ω_1 не змінює поведінку функції концентрації на другій границі контакту (рис. 6.5b), проте на першій границі

контакту втрачається рівномірність зростання функції $g_1(\tau)$ на проміжку $\tau \in [2.5; 5]$ для великих значень v_1 (криві 5, 6, рис. 6.5а).

Зауважимо, що якщо для кожного значення v_1 функції $g_1(\tau)$ і $g_2(\tau)$ виходять на свій стаціонарний режим (рис. 6.5), то незалежно від зміни значень коефіцієнта швидкості конвективного перенесення в другому макроелементі v_2 значення у стаціонарному режимі як для $g_1(\tau)$, так і для $g_2(\tau)$ залишаються незмінними (рис. 6.6). Чим більше значення коефіцієнта v_2 тим більші значення приймають концентрації на границях контакту і тим скоріше виходять на усталені режими. При цьому існують часові проміжки, коли різниця між значеннями функцій $g_1(\tau)$ і $g_2(\tau)$ для різних значень v_2 зростає: $\tau \in (1, 7.5)$ для $g_1(\tau)$ і $\tau \in (2, 7.5)$ для $g_2(\tau)$, а максимальна відмінність складає 26% на границі $x = x_1$ і 31% на границі $x = x_2$.

Коефіцієнти концентраційної залежності хімічних потенціалів $\lambda^{(i)}$, які визначають на відповідних границях контакту $x = x_i$ величину стрибка функції концентрації домішкових частинок, можуть суттєво впливати на значення $g_1(\tau)$ і $g_2(\tau)$, проте не змінюють поведінку цих функцій (рис. 6.7). Зростання значень $\lambda^{(i)}$ призводить до накопичення домішкових частинок в околі границь контакту. Чим більших значень набувають коефіцієнти $\lambda^{(i)}$, тим пізніше функції $g_1(\tau)$ і $g_2(\tau)$ виходять на стаціонарний режим. Наприклад, при $\lambda^{(1)} = 0.2$ час виходу на усталений режим $g_1(\tau) \in \tau_s = 1.8$ (рис. 6.7а), $g_2(\tau) - \tau_s = 8.4$ (рис. 6.7b), а при $\lambda^{(1)} = 2.2$ $\tau_s = 11.5$ для $g_1(\tau)$ і $\tau_s = 12.3$ для $g_2(\tau)$. Також зазначимо, що різні значення коефіцієнтів $\lambda^{(i)}$ тягнуть за собою суттєво різні значення функцій $g_1(\tau)$ і $g_2(\tau)$ в усталеному режимі. Так збільшення коефіцієнта $\lambda^{(1)}$ на порядок (від 0.2 до 2.2) призводить до зростання на порядок стаціонарних значень $g_1(\tau)$: $g_1(\tau_s)|_{\lambda^{(1)}=2.2} / g_1(\tau_s)|_{\lambda^{(1)}=0.2} = 10.8$, і $g_2(\tau)$: $g_2(\tau_s)|_{\lambda^{(1)}=2.2} / g_2(\tau_s)|_{\lambda^{(1)}=0.2} = 11$ (рис. 6.7). Зауважимо, що величини товщин шарів, з яких складене тіло, суттєво впливають як на поведінку, так і на значення функцій концентрацій мігруючої речовини на границях контакту цих макроелементів (рис. 6.8).

При фіксації товщини першого шару зміна положення границі контакту між другим та третім шарами також суттєво впливає на поведінку функцій $g_1(\tau)$ $g_2(\tau)$ (рис. 6.8). При цьому на початковому часовому інтервалі ($\tau \in (0; 0.7)$) значення

функції $g_1(\tau)$ залишаються тими самими для різних товщин шарів Ω_2 , Ω_3 (рис. 6.8a). Якщо границя контакту $x = x_2$ зсувається до границі тіла $x = x_0$, то значення функції концентрації на границі $x = x_1$ зменшується і $g_1(\tau)$ пізніше виходить на стаціонарний режим (наприклад, криві 1 і 4, рис. 6.8a). Зазначимо, що для функції $g_2(\tau)$ характерно одночасне зростання значень за малих товщин другого шару (криві 1-3, рис. 6.8b) і наявність максимуму цієї концентрації. При цьому при зростанні величини $x_2 - x_1$ від $0.1x_0$ до $0.2x_0$ максимум зростає в чотири рази:

$$\max_{\tau > 0} g_2(\tau) \Big|_{x_2 - x_1 = 0.2x_0} / \max_{\tau > 0} g_2(\tau) \Big|_{x_2 - x_1 = 0.1x_0} = 4.12. \text{ Подальше зростання товщини шару і}$$

зменшення третього призводить спочатку до зростання функції концентрації домішки на границі $x = x_2$, а потім до її поступового значного зменшення (криві 4-7, рис. 6.8b). Причому чим ближче границя контакту $x = x_2$ до границі тіла тим пізніше функція $g_2(\tau)$ виходить на усталений режим.

Зазначимо, що при дослідженні функції $g_1(\tau)$ і $g_2(\tau)$ ми накладали умови неідеального контакту на функцію концентрації домішкової речовини, при цьому умови ідеального контакту ми можемо досліджувати як частковий випадок при $\lambda^{(1)} = \lambda^{(2)} = 1$.

6.2.5. Обчислення інтегральних складових розв'язків та кількісний аналіз концентрації частинок, які мігрують у поровому розчині

Розв'язки контактної-крайової задачі конвективної дифузії (6.48) в трьох областях Ω_1 , Ω_2 і Ω_3 мають подібну структуру. При цьому у другому і третьому шарах вирази для концентрацій отримані в інтегральному вигляді, а у першому шарі функція концентрації містить інтегральний доданок такого самого типу.

Для обчислення інтегралів

$$\int_0^{\tau} e^{-b_{n1}(\tau-\tau')} g_1(\tau') d\tau', \int_0^{\tau} e^{-b_{m2}(\tau-\tau')} \left(g_1(\tau') + \frac{(-1)^{m+1}}{\lambda^{(2)}} g_2(\tau') \right) d\tau', \int_0^{\tau} e^{-b_{k3}(\tau-\tau')} g_2(\tau') d\tau'$$

застосовувався метод Ньютона-Котеса замкненого типу за 7-ма вузлами [18, 109]

$$\int_{x_0}^{x_7} f(x) dx = \frac{7h}{17280} (751f_0 + 3577f_1 + 1323f_2 + 2989f_3 + 2989f_4 + 1323f_5 + 3577f_6 + 751f_7) - \frac{8183h^9}{518400} f^{(8)}(\xi),$$

де $x_k = x_{k-1} + h$ - вузли чисельного інтегрування ($k = \overline{1,7}$), f_k - значення підінтегральної функції у вузлі x_k , $x_0 < \xi < x_7$.

Для контролю точності обчислень використовувалася формула Ньютона-Котеса за 10-ма вузлами [16, 109]

$$\int_{x_0}^{x_{10}} f(x) dx = \frac{5h}{299376} \{16067(f_0 + f_{10}) + 106300(f_1 + f_9) - 48525(f_2 + f_8) + 272400(f_3 + f_7) - 260550(f_4 + f_6) + 427368f_5\} - \frac{1346350h^{13}}{326918592} f^{(12)}(\xi).$$

У випадку неспівпадіння отриманих результатів за методом Ньютона-Котеса за 7-ма і 10-ма вузлами (або вихід за межі точності) проміжок інтегрування ділився навпіл [16].

6.2.6. Концентрації домішкових частинок, сорбованих на скелеті, у макроелементах тришарового тіла

Для знаходження концентрацій частинок домішкової субстанції, сорбованих на скелеті тришарового тіла, підставимо вирази для функцій концентрації домішки у розчині (6.48) у відповідні співвідношення (6.29). Тоді маємо

у першому шарі (область Ω_1)

$$c_2^{(1)} = c_0 e^{\frac{v_1 x}{2d_1}} \left\{ \frac{\text{sh } \eta_1 (x' - x)}{\text{sh } \eta_1 x'} \tau + \frac{x'}{2\eta_1 d_1} \left[\frac{\text{sh } \eta_1 x}{(\text{sh } \eta_1 x')^2} + \left(1 + \frac{x}{x'}\right) \frac{\text{ch } \eta_1 (x' - x)}{\text{sh } \eta_1 x'} \right] + \frac{2d_1}{x'} e^{-a_1 \tau} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{y_n \sin(y_n x)}{(d_1 y_n^2 + a_1)^2} e^{-d_1 y_n^2 \tau} \right\} \frac{2d_1}{\lambda x'} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n y_n \sin(y_n x) \int_0^{\tau} \int_0^{\tau'} g(\tau'') e^{-(d_1 y_n^2 + a_1)(\tau' - \tau'')} d\tau'' d\tau';$$

у другому шарі (область Ω_2)

$$c_2^{(2)} = c_* e^{-\frac{v_2 (x_* - x)}{2d_2}} \left\{ \frac{\text{sh } \eta_2 (x - x')}{\text{sh } \eta_2 \delta x} \tau - \frac{\delta x}{2\eta_2 d_2} \left[\frac{\text{sh } \eta_2 (\delta x + x - x')}{(\text{sh } \eta_2 \delta x)^2} + \left(1 + \frac{x - x'}{\delta x}\right) \frac{\text{ch } \eta_2 (x - x')}{\text{sh } \eta_2 \delta x} \right] + \frac{2d_2}{\delta x} e^{-a_2 \tau} \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^m \frac{y_m \sin(y_m (x - x'))}{(d_2 y_m^2 + a_2)^2} e^{-d_2 y_m^2 \tau} \right\} - \frac{2d_2}{\delta x} e^{-\frac{v_2 (x - x')}{2d_2}} \sum_{m=1}^{\infty} y_m \sin(y_m (x - x')) \int_0^{\tau} \int_0^{\tau'} g(\tau'') e^{-(d_2 y_m^2 + a_2)(\tau' - \tau'')} d\tau'' d\tau';$$

у третьому шарі (область Ω_3)

$$c_2^{(3)}(\tau, x) = \frac{a_3 2d_3}{x_0 - x_2} \exp\left(\frac{v_3(x - x_2)}{2d_3}\right) \sum_{k=1}^{\infty} y_k \sin(y_k(x - x_2)) \int_0^{\tau} \int_0^{\tau'} g(\tau'') e^{-(d_3 y_k^2 + a_3)(\tau' - \tau'')} d\tau'' d\tau'. \quad (6.51)$$

6.2.7. Чисельний метод знаходження подвійних інтегралів зі змінними верхніми межами

6.2.7.1. Побудова формули для знаходження подвійних інтегралів зі змінними верхніми межами

Структуру розв'язків (6.51) для функцій концентрацій домішкової речовини, сорбованої на скелеті тіла, $c_2^{(j)}(t, x)$ можемо подати наступним чином

$$c_2^{(j)} = F_j(x) - \frac{2d_2}{\delta x} e^{\frac{v_2(x-x')}{2d_2}} \sum_{m=1}^{\infty} B_m(x) \int_0^{\tau} \int_0^{\tau'} g(\tau'') f(\tau' - \tau'') d\tau'' d\tau'. \quad (6.52)$$

У літературі (наприклад, [35, 129]) розроблено методи подвійного інтегрування, проте у визначених межах і тільки методами квадратур або кубатур. При цьому враховувались тільки ті елементи, які повністю входять в область інтегрування, а інші відкидалися. В результаті виникають проблеми із забезпеченням точності обчислень, оскільки для підвищення точності пропонується збільшити розбиття, тобто ущільнити сітку, а це в свою чергу для громіздких підінтегральних функцій веде до суттєвого накопичення похибки обчислень.

У роботі [238] зазначено, що апроксимації подвійного інтеграла $\int_a^b \int_c^d f(x, y) dx dy$

отримуються у припущенні, що часткові похідні підінтегральної функції належать простору Лебега L_p для деяких $1 \leq p \leq \infty$. У цьому випадку простої інтегрованості функції $f(x, y)$ є недостатньо, тому необхідно накладати додаткові обмеження: якщо підінтегральна функція є дійсною в області $\Omega = [a; b] \times [c; d]$, тоді формули чисельного інтегрування подвійного інтеграла існують у припущенні, що змішана часткова похідна f_{xy} належить одному з просторів Лебега $L_p(\Omega)$ для деяких $1 \leq p \leq \infty$ (якщо $p = \infty$, тоді $f(x, y)$ є неперервно диференційованою функцією обох змінних). Крім цього припускається, що норма $\|f_{xy}\|_p$ є обмеженою. Причому похибку інтегрування можна оцінити через норму $\|f_{xy}\|_p$.

У випадку подвійного інтегралу зі змінними межами не можливо встановити похибку обчислень класичними методами. Крім цього, змінні межі інтеграла

$$I(\tau) = \int_0^{g_1(\tau)} \int_0^{g_2(\tau')} f(\tau', \tau'', \tau) d\tau'' d\tau' \quad (6.53)$$

є функціями незалежних часових змінних $\tau, \tau' \in [0; \infty)$, що приводить до змінності області інтегрування.

Вважаємо, що інтеграл (6.53), функції $f(\tau', \tau'', \tau)$, $g_1(\tau)$ і $g_2(\tau')$ підпорядковуються необхідним обмеженням (зокрема, функції $g_1(\tau)$, $g_2(\tau')$ є неперервними функціями своїх аргументів) [97]. Без втрати загальності можемо прийняти, що $g_1(\tau) = \tau$ та $g_2(\tau') = \tau'$, оскільки, якщо існують обернені функції $g_1^{-1}(\tau)$, $g_2^{-1}(\tau')$, то заміною змінних $t = g_1(\tau)$ та $t' = g_2(\tau')$ інтеграл (6.53) можна звести до вигляду

$$I(\tau) \equiv I(g_1^{-1}(t)) = \int_0^t \int_0^{t'} f(t', \tau'', t) \frac{\partial g_2^{-1}(t')}{\partial t'} d\tau'' dt'.$$

Зазначимо, що нульові значення нижніх меж інтегрування можна отримати, скориставшись адитивною властивістю інтеграла.

Метод чисельного інтегрування подвійних інтегралів зі змінними верхніми межами, що пропонується, можна поділити на такі етапи [152]:

- встановлення області інтегрування;
- накладення прямокутної сітки на область інтегрування;
- розділення областей інтегрування на підобласті, які складаються з квадратних і трикутних елементів;
- застосування квадратур у підобласті, яка складається з квадратних елементів;
- здійснення триангуляційного розбиття вздовж змінної межі $\tau'' = \tau'$;
- обчислення об'ємів елементарних елементів, в основі яких є трикутники;
- підрахунок вихідного інтеграла;
- встановлення похибки обчислень.

Область інтегрування підінтегральної функції (6.53) у просторі $O\tau\tau'\tau''$ має вигляд нахиленого трикутника (рис. 6.9а). Враховуючи, що τ - це час, тобто змінна неперервно змінюється від 0 до ∞ , тоді зі зміною τ область інтегрування в просторі

$O\tau\tau'\tau''$ залишається трикутником. При цьому зміна τ призводить до зміни максимальних значень τ' і τ'' .

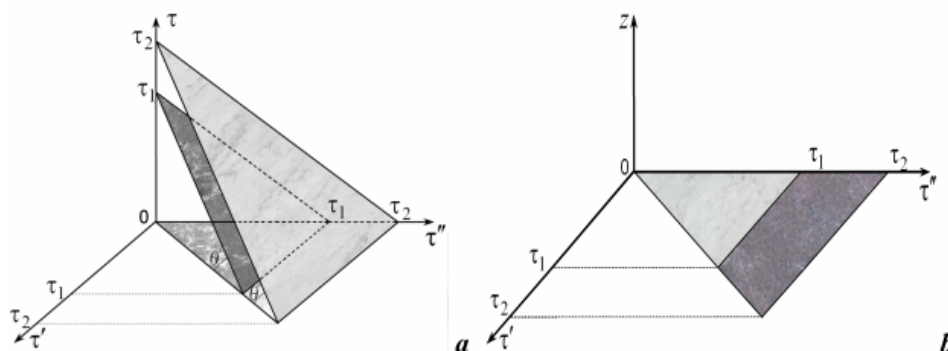


Рис. 6.9. Область інтегрування в просторі $O\tau\tau'\tau''$ (рис. а) та схематичне зображення множини областей інтегрування в просторі $O\tau'\tau''z$ (рис. б)

Для $\tau = \tau_1$ маємо $\max \tau' = \max \tau'' = \tau_1$, а для $\tau = \tau_2$ - $\max \tau' = \max \tau'' = \tau_2$ (рис. 6.9а). Ці області є подібними трикутниками, які знаходяться в паралельних площинах, тобто під однаковим кутом нахилу θ до площини $O\tau'\tau''$ (рис. 6.9а). При цьому змінюється площа поверхні інтегрування. Для $\tau = 0$ область інтегрування є точкою $(0, 0, 0)$.

Зробимо проєкцію поверхні інтегрування на площину $O\tau'\tau''$ (рис. 6.9б). Тоді отримуємо множину областей інтегрування в просторі $O\tau'\tau''z$.

В результаті ми отримаємо сімейство підінтегральних функцій, параметризованих змінною τ (рис. 6.10а).

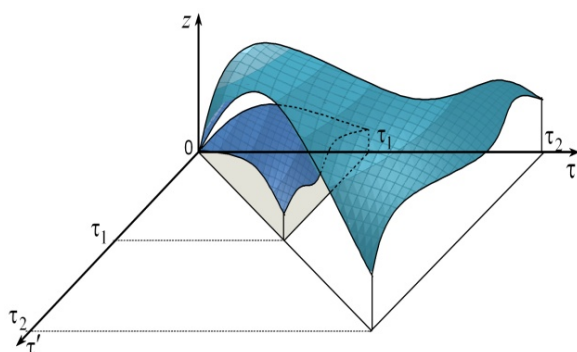


Рис. 6.10. Схематичне зображення множини підінтегральних функцій в просторі $O\tau'\tau''z$

6.2.7.2. Накладання сітки для змінної області інтегрування

На проєкцію області інтегрування накладемо квадратну сітку (рис. 6.11а). І врахуємо змінність області інтегрування. Зазначимо, що при зміні значення τ може

змінюватись або кількість елементів розбиття N_{el} або ширина ґратки (кроку) h ,

тобто $N_{el} = N_{ei}(\tau)$, $h = h(\tau)$ і $h(\tau) = \frac{\tau}{N_{el}(\tau)}$.

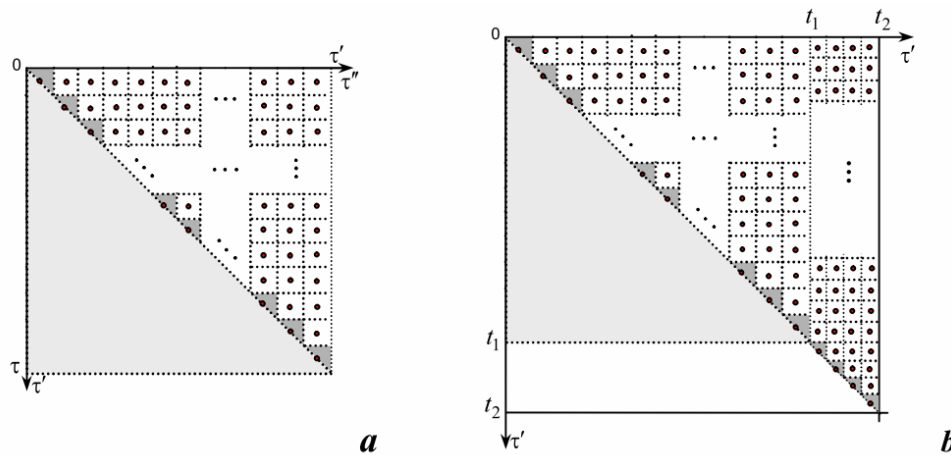


Рис. 6.11. Розбиття області інтегрування для фіксованого τ (рис. а) та області інтегрування для збільшення τ від t_1 до t_2 (рис. б)

Якщо врахуємо, що область інтегрування S є трикутником, то зі збільшенням τ від t_1 до t_2 область інтегрування залишається трикутником, збільшується, причому площа додаткової області S_a зростає на величину $S_a = (t_2^2 - t_1^2)/2$. Тоді якщо зафіксована сітка для $\tau = t_1$ ($N_{el} = N_{ei}(t_1)$, $h = h(t_1)$), то при тому самому кроці h кількість елементів розбиття збільшується на $N_a = \frac{t_2 - t_1}{h}$ елементів. Якщо зафіксуємо кількість елементів розбиття N_{el} , то зі зміною τ від t_1 до t_2 відбувається зміна ширини ґратки $h = \frac{t_2}{N_{el}}$. Зазначимо, що може змінюватися одночасно і кількість елементів і ширина ґратки, при цьому завжди виконується співвідношення $hN_{el} = t_2$.

В той же час за необхідності додаткову область S_a можна розбити з відмінною від області S сіткою з шириною ґратки $h_{t_2} = \frac{t_2 - t_1}{N_a}$.

Аналогічні міркування можна зробити для прямокутної сітки, але ми обмежимося випадком квадратної сітки.

6.2.7.3. Формула для знаходження подвійного інтегралу зі змінними верхніми межами

Розбиваємо область інтегрування $S(\tau)$ на невеликі підобласті $N_{el}(\tau)$. Потім ми застосовуємо кубатурну формулу з ваговою функцією $w(\tau', \tau'') \equiv 1$. Залежно від кількості змін елементів ділення або зміни ширини сітки при зміні змінної τ ми отримуємо наступні випадки.

Врахуємо адитивну властивість інтеграла:

А) Зі зміною τ змінюється лише розмір ґратки накладеної сітки

$$\int_0^{\tau} \int_0^{\tau'} f(\tau', \tau'', \tau) d\tau'' d\tau' = \sum_{el}^{N_{el}} \iint_{(V_{el}(\tau))} f(\tau', \tau'', \tau) d\tau'' d\tau', \quad (6.54a)$$

Б) Зі зміною τ змінюється лише кількість елементів розбиття

$$\int_0^{\tau} \int_0^{\tau'} f(\tau', \tau'', \tau) d\tau'' d\tau' = \sum_{el}^{N_{el}(\tau)} \iint_{(V_{el})} f(\tau', \tau'', \tau) d\tau'' d\tau', \quad (6.54б)$$

В) Зі зміною τ змінюються і розмір ґратки і кількість елементів розбиття

$$\int_0^{\tau} \int_0^{\tau'} f(\tau', \tau'', \tau) d\tau'' d\tau' = \sum_{el}^{N_{el}(\tau)} \iint_{(V_{el}(\tau))} f(\tau', \tau'', \tau) d\tau'' d\tau', \quad (6.54в)$$

де V_{el} - об'єм окремого елемента розбиття області інтегрування.

У результаті розбиття області інтегрування ми отримали квадратні і трикутні елементи (рис. 6.12b). При цьому сумування відбувається по всіх елементах

$$\bigcup_{el} V_{el} = [0, \tau'] \times [0, \tau].$$

Відокремлюємо квадратні і трикутні елементи:

$$A) \sum_{el}^{N_{el}} \iint_{(V_{el}(\tau))} f(\tau', \tau'', \tau) d\tau'' d\tau' = \sum_{sq_{el}}^{N_{sq_{el}}} \iint_{(V_{sq_{el}}(\tau))} f(\tau', \tau'', \tau) d\tau'' d\tau' + \sum_{tr_{el}}^{N_{tr_{el}}} \iint_{(V_{tr_{el}}(\tau))} f(\tau', \tau'', \tau) d\tau'' d\tau', \quad (6.55a)$$

$$B) \sum_{el}^{N_{el}(\tau)} \iint_{(V_{el})} f(\tau', \tau'', \tau) d\tau'' d\tau' = \sum_{sq_{el}}^{N_{sq_{el}}(\tau)} \iint_{(V_{sq_{el}})} f(\tau', \tau'', \tau) d\tau'' d\tau' + \sum_{tr_{el}}^{N_{tr_{el}}(\tau)} \iint_{(V_{tr_{el}})} f(\tau', \tau'', \tau) d\tau'' d\tau', \quad (6.55б)$$

$$B) \sum_{el}^{N_{el}(\tau)} \iint_{(V_{el}(\tau))} f(\tau', \tau'', \tau) d\tau'' d\tau' = \sum_{sq_{el}}^{N_{sq_{el}}(\tau)} \iint_{(V_{sq_{el}}(\tau))} f(\tau', \tau'', \tau) d\tau'' d\tau' + \sum_{tr_{el}}^{N_{tr_{el}}(\tau)} \iint_{(V_{tr_{el}}(\tau))} f(\tau', \tau'', \tau) d\tau'' d\tau', \quad (6.55в)$$

де sq_{el} – квадратний елемент, tr_{el} – трикутний елемент; $V_{sq_{el}}$ і $V_{tr_{el}}$ – об'єми квадратного і трикутного елементів.

Відберемо елементи V_{el} , які є квадратами (рис. 6.12а). І тут застосуємо чисельне інтегрування в квадратурах:

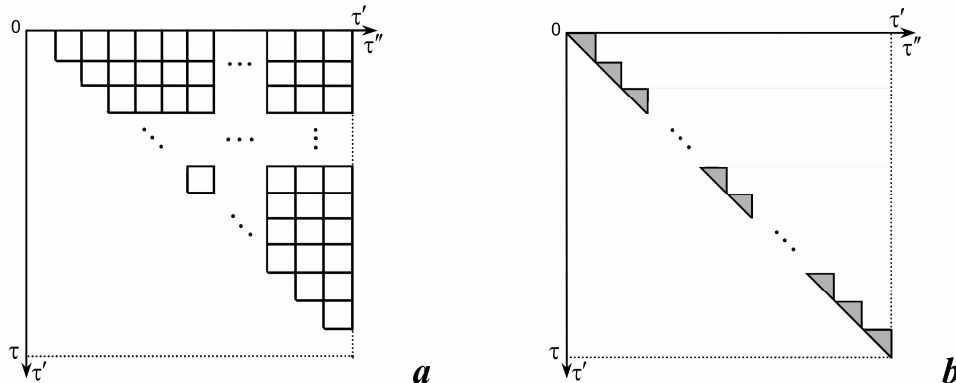


Рис. 6.12. Области, які складаються з квадратних (рис. а) і трикутних (рис. б) елементів

$$A) \quad \iint_{\bigcup_{sq_{el}} V_{el}(\tau)} f(\tau', \tau'', \tau) d\tau'' d\tau' = \sum_{sq_{el}} \iint_{(V_{sq_{el}}(\tau))} f(\tau', \tau'', \tau) d\tau'' d\tau' = \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n h^2(\tau) f(\tau'_i, \tau''_j, \tau), \quad (6.56a)$$

де $n \equiv const$, $n \in \mathbb{N}$, $n-1$ - кількість квадратних елементів в найдовшому рядку, $h(\tau)$ - ширина ґратки, яка залежить від τ .

$$B) \quad \iint_{\bigcup_{sq_{el}(\tau)} V_{el}(\tau)} f(\tau', \tau'', \tau) d\tau'' d\tau' = \sum_{sq_{el}} \iint_{(V_{sq_{el}}(\tau))} f(\tau', \tau'', \tau) d\tau'' d\tau' = \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n h^2(\tau) f(\tau'_i, \tau''_j, \tau), \quad (6.56б)$$

де $h \equiv const$, $n(\tau)$ змінюється зі зміною τ .

$$B) \quad \iint_{\bigcup_{sq_{el}(\tau)} V_{el}(\tau)} f(\tau', \tau'', \tau) d\tau'' d\tau' = \sum_{sq_{el}} \iint_{(V_{sq_{el}}(\tau))} f(\tau', \tau'', \tau) d\tau'' d\tau' = \sum_{i=1}^{n(\tau)-1} \sum_{j=i+1}^{n(\tau)} h^2(\tau) f(\tau'_i, \tau''_j, \tau), \quad (6.56в)$$

де $n(\tau)$ і $h(\tau)$ змінюються зі зміною τ .

Зазначимо, що $h(\tau) = \tau/n(\tau)$.

Тепер розглянемо область, яка складається тільки з трикутників (рис. 6.12б).

Сума об'ємів елементів із трикутною основою набуде вигляду

$$A) \quad \sum_{tr_{el}} \iint_{(V_{tr_{el}}(\tau))} f(\tau', \tau'', \tau) d\tau'' d\tau' = \sum_{i=1}^n h^2(\tau) f(\tau'_i, \tau''_i, \tau), \quad (6.57a)$$

$$\text{Б)} \quad \sum_{\text{tr}_{el}(\tau)} \iint_{(V_{\text{tr}_{el}})} f(\tau', \tau'', \tau) d\tau'' d\tau' = \sum_{i=1}^{n(\tau)} h^2 f(\tau'_i, \tau''_i, \tau), \quad (6.57\text{б})$$

$$\text{В)} \quad \sum_{\text{tr}_{el}(\tau)} \iint_{(V_{\text{tr}_{el}}(\tau))} f(\tau', \tau'', \tau) d\tau'' d\tau' = \sum_{i=1}^{n(\tau)} h^2(\tau) f(\tau'_i, \tau''_i, \tau), \quad (6.57\text{в})$$

де n - кількість трикутних елементів; $\tau'_{i+1} = \tau'_i + h(\tau)$; τ'_i - значення τ' у i -му вузлі (трикутному елементі); τ''_i - значення τ'' у i -му вузлі (трикутному елементі).

Зазначимо, що кількість трикутних елементів на 1 більше ніж квадратних в найдовшому рядку.

За формулою (6.55) сумуємо співвідношення (6.56) та (6.57). Тоді отримаємо формулу чисельного інтегрування для подвійного інтегралу зі змінними верхніми межами:

$$\text{А)} \quad \int_0^{\tau} \int_0^{\tau'} f(\tau', \tau'', \tau) dx dy \approx \left(\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n h^2(\tau) f(\tau'_i, \tau''_i, \tau) + \sum_{i=1}^{n-1} \sum_{j=i+1}^n h^2(\tau) f(\tau'_i, \tau''_j, \tau) \right), \quad (6.58\text{а})$$

$$\text{Б)} \quad \int_0^{\tau} \int_0^{\tau'} f(\tau', \tau'', \tau) dx dy \approx \left(\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n(\tau)} h^2 f(\tau'_i, \tau''_i, \tau) + \sum_{i=1}^{n(\tau)-1} \sum_{j=i+1}^{n(\tau)} h^2 f(\tau'_i, \tau''_j, \tau) \right), \quad (6.58\text{б})$$

$$\text{В)} \quad \int_0^{\tau} \int_0^{\tau'} f(\tau', \tau'', \tau) dx dy \approx \left(\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{n(\tau)} h^2(\tau) f(\tau'_i, \tau''_i, \tau) + \sum_{i=1}^{n(\tau)-1} \sum_{j=i+1}^{n(\tau)} h^2(\tau) f(\tau'_i, \tau''_j, \tau) \right), \quad (6.58\text{в})$$

де $\tau'_{i+1} = \tau'_i + h(\tau)$; $\tau''_{i+1} = \tau''_i + h(\tau)$.

Схематично такий метод чисельного інтегрування для подвійного інтегралу зі змінними верхніми межами представлено на рис. 6.13.

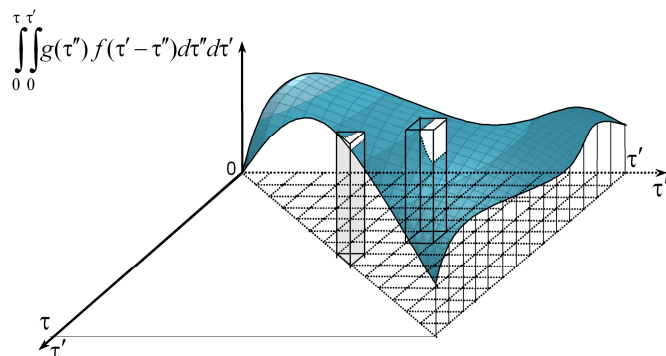


Рис. 6.13. Схема чисельного подвійного інтегрування зі змінними верхніми межами

Отже, на основі квадратур у внутрішній області інтегрування та триангуляційного розбиття вздовж змінної межі $\tau'' = \tau'$ отримано формулу чисельного інтегрування для подвійного інтеграла зі змінними верхніми межами.

6.2.7.4. Похибка чисельного інтегрування

Похибку чисельного інтегрування знаходимо за формулою Тейлора [150].

Головний член похибки має вигляд [26]

$$R = \int_0^{\tau} \int_0^{\tau'} f(\tau, \tau', \tau'') d\tau'' d\tau' - S \cdot f(\tau, \tau'_c, \tau''_c), \quad (6.59)$$

де S - площа області інтегрування.

Вибираємо центральну точку області інтегрування (τ'_c, τ''_c) , в околі якої розкладаємо функцію

$$F(\tau, \tau', \tau'') = \int_0^{\tau} \int_0^{\tau'} f(\tau, \tau', \tau'') d\tau'' d\tau'$$

в ряд Тейлора

$$F(\tau, \tau', \tau'') = F(\tau, \tau'_c, \tau''_c) + (\tau' - \tau'_c) F'_{\tau'}(\tau, \tau'_c, \tau''_c) + (\tau'' - \tau''_c) F'_{\tau''}(\tau, \tau'_c, \tau''_c) + \dots$$

Зазначимо, що функцію можна розкласти в ряд Тейлора $F(\tau, \tau', \tau'')$, якщо в деякому околі точки (τ'_c, τ''_c) існують неперервні часткові похідні до $n + 1$ порядку [34].

Нехай $f(\tau, \tau', \tau'')$ неперервна в області $[0, \tau] \times [0, \tau]$. Тоді вона інтегрована в цій області, а також інтегрована у будь-якій підобласті $[0, \tau] \times [0, \tau']$ [34]. Тоді $F(\tau, \tau', \tau'')$ неперервна в області $[0, \tau] \times [0, \tau]$. Якщо $f(\tau, \tau', \tau'')$ неперервна в області $[0, \tau] \times [0, \tau]$, то $F(\tau, \tau', \tau'')$ диференційована в $[0, \tau] \times [0, \tau]$ [34].

Враховуючи, що функція $F(\tau, \tau', \tau'')$ - це подвійний інтеграл зі змінними верхніми межами, тоді шукаємо (за аналогією подвійного інтегрування в квадратурах):

$$F(\tau, \tau'_c, \tau''_c) = \int_0^{\tau} \int_0^{\tau'_c} f(\tau, \tau', \tau'') d\tau'' d\tau' = f(\tau, \tau'_c, \tau''_c) \int_0^{\tau} \int_0^{\tau'_c} d\tau'' d\tau' = f(\tau, \tau'_c, \tau''_c) \tau \tau'_c;$$

$$F'_{\tau'}(\tau, \tau'_c, \tau''_c) = \int_0^{\tau} \int_0^{\tau'_c} f'_{\tau'}(\tau, \tau', \tau'') \Big|_{\tau'=\tau'_c} d\tau'' d\tau' = \int_0^{\tau} f(\tau, \tau'_c, \tau''_c) d\tau' = f(\tau, \tau'_c, \tau''_c) \tau;$$

$$F'_{\tau''}(\tau, \tau'_c, \tau''_c) = \int_0^{\tau} \int_0^{\tau'_c} f'_{\tau''}(\tau, \tau'_c, \tau''_c) \Big|_{\tau''=\tau''_c} d\tau'' d\tau'' = f'_{\tau''}(\tau, \tau'_c, \tau''_c) \Big|_{\tau''=\tau''_c} \tau \tau'_c;$$

... .

Тут використана теорема Барроу [34]

$$\left(\int_a^t f(x) dx \right)' = f(t).$$

Зазначимо, що на відміну від подвійного інтегрування в означених межах в нашому випадку не пропадають перші похідні, і потрібно їх враховувати. Відносимо їх до похибки.

Запишемо окремо похибки для трикутного і квадратного елементів. Похибка інтегрування (6.59) для кожного трикутного елемента набуває вигляду

$$R_i = 1/2 S_{\text{tr}_{el}i} (h(\tau) F'_{\tau'}(\tau, \tau'_c, \tau''_c) + h(\tau) F'_{\tau''}(\tau, \tau'_c, \tau''_c)) \quad (i = \overline{1, n}). \quad (6.60)$$

Похибка інтегрування (6.59) для кожного квадратного елемента є

$$R_{ij} = 1/24 S_{sq_{el}ij} (h^2(\tau) F''_{\tau'\tau'}(\tau, \tau'_c, \tau''_c) + h^2(\tau) F''_{\tau''\tau''}(\tau, \tau'_c, \tau''_c)) \quad (i = \overline{1, n-1}, j = \overline{i+1, n}). \quad (6.61)$$

Тут $S_{\text{tr}_{el}i}$ і $S_{sq_{el}ij}$ - площі i -го трикутного і ij -го квадратного елементів відповідно.

Сумуючи вирази (6.60) і (6.61) по тій області, в якій визначений інтеграл, отримуємо похибку нашого методу

$$R \approx \frac{h(\tau)}{2} \left(\iint_{(V_{quad_{el}})} F'_{\tau'}(\tau, \tau', \tau'') d\tau' d\tau'' + \iint_{(V_{quad_{el}})} F'_{\tau''}(\tau, \tau', \tau'') d\tau' d\tau'' \right) + \frac{h^2(\tau)}{24} \left(\iint_{(V_{triangular_{el}})} F''_{\tau'\tau'}(\tau, \tau', \tau'') d\tau' d\tau'' + \iint_{(V_{triangular_{el}})} F''_{\tau''\tau''}(\tau, \tau', \tau'') d\tau' d\tau'' \right) \quad (6.62)$$

або

$$R = O(2h(\tau) + 2h^2(\tau)) = O(2h(\tau)). \quad (6.63)$$

Оскільки в оцінці (6.60) та (6.61) відкинуті більш високі степені $h(\tau)$, тому відношення для похибки (6.62) є асимптотичним, і виконується при $h(\tau) \rightarrow 0$ з точністю до членів більш високого порядку малості за $h(\tau)$.

6.2.7.5. Приклади використання чисельного інтегрування для подвійного інтегралу зі змінною внутрішньою верхньою межею інтегрування

Для перевірки ефективності та достовірності отриманих формул чисельного методу застосуємо його до інтегрування достатньо простих функцій, для яких можна знайти вираз аналітично.

I. Нехай дано такий інтеграл $f(\tau', \tau'') = \tau' \tau''$. Поверхня, утворена функцією $f(\tau', \tau'')$ над областю інтегрування, показана на рис. 6.14.

Тоді інтеграл $I_{num} = \int_0^{\tau} \int_0^{\tau'} \tau' \tau'' d\tau' d\tau''$ обчис-

люємо за формулами (6.58а), (6.58б), (6.58в) і

аналітично $I_{analyt} = \frac{1}{8} \tau$. Результати розрахунків

наведені в таблицях 6.1-6.4 для різної кількості трикутних елементів $n(\tau)$ і ширини сітки $h(\tau)$.

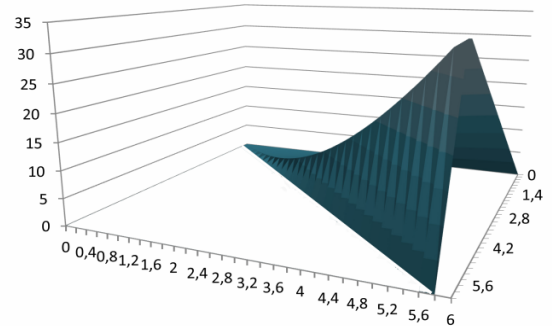


Рис. 6.14. Поверхня, утворена функцією $f(\tau', \tau'') = \tau' \tau''$

Наведено значення загальних об'ємів квадратних $V_{sq_{el}}$ і трикутних елементів $V_{tr_{el}}$, різниці між аналітичним та чисельним розрахунком $|I_{analyt} - I_{num}|$, а також відносну похибку $E(\tau) = \left| (I_{analyt} - I_{num}) / I_{analyt} \right|$ [168]. Вибрано такі основні значення параметрів $n(1) = 10^4$, $h(1) = 10^{-4}$.

У табл. 6.1 наведено відповідні значення для випадку, коли зі зміною τ , (А) змінюється лише розмір накладеної сітки $h(\tau)$. Розрахункові значення для випадку, коли для змінної τ , (Б) змінюється лише кількість елементів поділу $N_{el}(\tau)$, наведено в табл. 6.2.

У табл. 6.3 і 6.4 наведено відповідні значення параметрів інтегрування для випадку, коли зі зміною τ змінюється як розмір сітки, так і кількість елементів поділу (В). Зміна кількості вузлів в таблиці 6.3 описується зростаючою функцією, а саме $n(\tau) = 10^4 \cdot \sqrt[3]{\tau}$, відповідно $h(\tau) = 10^{-4} \cdot \sqrt[3]{\tau^2}$. Зміна кількості вузлів в таблиці 6.4 описується спадною функцією, а саме $n(\tau) = 10^4 / \sqrt[3]{\tau}$, відповідно $h(\tau) = 10^{-4} \cdot \sqrt[3]{\tau^4}$.

Таблиця 6.1. Розрахунок інтеграла $\int_0^\tau \int_0^{\tau'} \tau' \tau'' d\tau' d\tau''$ для випадку А

$n(\tau)$	$h(\tau)$	τ	$V_{sq_{el}}$	$V_{tr_{el}}$	I_{analyt}	I_{num}	$ I_{analyt} - I_{num} $	$E(\tau)$
10^4	0.0001	1	0.124983331	0.00016667	0.125	0.124999998	2×10^{-9}	$1.999999992 \times 10^{-8}$
10^4	0.0002	2	1.999733293	0.000266667	2	1.999999996	4×10^{-8}	$1.999999992 \times 10^{-8}$
10^4	0.0003	3	10.123649798	0.00135	10.125	10.124999798	2.03×10^{-7}	$2.000000004 \times 10^{-8}$
10^4	0.0004	4	31.995732693	0.004266667	32	31.99999936	6.4×10^{-7}	$1.999999992 \times 10^{-8}$
10^4	0.0005	5	78.114581771	0.010416667	78.125	78.124998438	1.562×10^{-6}	$1.999999987 \times 10^{-8}$
10^4	0.0006	6	161.97839676	0.0216	162	161.99999676	3.24×10^{-6}	$2.000000004 \times 10^{-8}$
10^4	0.0007	7	300.084977331	0.040016667	300.125	300.124993998	6.002×10^{-6}	$1.999999967 \times 10^{-8}$
10^4	0.0008	8	511.931723094	0.068266666	512	511.99998976	1.024×10^{-5}	$1.999999992 \times 10^{-8}$
10^4	0.0009	9	820.015633598	0.109350000	820.125	820.124983598	1.6402×10^{-5}	$1.999999987 \times 10^{-8}$
10^4	0.001	10	1249.833308334	0.166666666	1250	1249.999975	2.5×10^{-5}	$1.999999987 \times 10^{-8}$
10^4	0.0011	11	1829.880946731	0.244016666	1830.125	1830.12496339	3.6603×10^{-5}	$2.000000001 \times 10^{-8}$
10^4	0.0012	12	2591.654348161	0.345599999	2592	2591.99994816	5.184×10^{-5}	$2.000000004 \times 10^{-8}$
10^4	0.0013	13	3569.648911932	0.476016665	3570.125	3570.12492859	7.1402×10^{-5}	$1.999999996 \times 10^{-8}$
10^4	0.0014	14	4801.359637295	0.640266665	4802	4801.99990396	9.604×10^{-5}	$1.999999967 \times 10^{-8}$
10^4	0.0015	15	6327.28112344	0.843749998	6328.125	6328.12487343	1.26562×10^{-4}	$1.999999974 \times 10^{-8}$
10^4	0.0016	16	8190.907569496	1.092266664	8192	8191.99983616	1.6384×10^{-4}	$1.999999992 \times 10^{-8}$
10^4	0.0017	17	$1.0438732774534 \times 10^4$	1.392016663	1.044×10^4	1.0440124791×10^4	2.08803×10^{-4}	$2.000000001 \times 10^{-8}$
10^4	0.0018	18	$1.3120250137564 \times 10^4$	1.749599996	13122	1.3121999737×10^4	2.6244×10^{-4}	$1.999999987 \times 10^{-8}$
10^4	0.0019	19	$1.6287952657536 \times 10^4$	2.172016661	1.629×10^4	1.6290124674×10^4	3.25802×10^{-4}	$1.999999984 \times 10^{-8}$
10^4	0.002	20	$1.9997332933340 \times 10^4$	2.666666660	2×10^4	1.999999996×10^4	4×10^{-4}	$1.999999987 \times 10^{-8}$

Таблиця 6.2. Розрахунок інтеграла $\int_0^\tau \int_0^{\tau'} \tau' \tau'' d\tau' d\tau''$ для випадку Б

$n(\tau)$	$h(\tau)$	τ	$V_{sq_{el}}$	$V_{tr_{el}}$	I_{analyt}	I_{num}	$ I_{analyt} - I_{num} $	$E(\tau)$
10^4	0.0001	1	0.124983331	1.67×10^{-5}	0.125	0.124999998	2.5×10^4	2×10^{-8}
2×10^4	0.0001	2	1.999866657	0.000133333	2	1.999999999	10^{-8}	5×10^{-9}
3×10^4	0.0001	3	10.12454998	0.00045	10.125	10.12499998	2.25×10^{-8}	2.2222×10^{-9}
4×10^4	0.0001	4	31.99893329	0.001066667	32	31.99999996	4×10^{-8}	1.25×10^{-9}
5×10^4	0.0001	5	78.1229166	0.002083333	78.125	78.12499994	6.25×10^{-8}	8×10^{-9}
6×10^4	0.0001	6	161.9963999	0.0036	162	161.9999999	9.00002×10^{-8}	5.5556×10^{-10}
7×10^4	0.0001	7	300.1192832	0.005716667	300.125	300.1249999	1.225×10^{-7}	4.0816×10^{-10}
8×10^4	0.0001	8	511.9914665	0.008533333	512	511.9999998	1.60001×10^{-7}	3.1250×10^{-10}
9×10^4	0.0001	9	820.1128498	0.01215	820.125	820.1249998	2.02501×10^{-7}	2.4692×10^{-10}
10×10^4	0.0001	10	1249.983333	0.016666667	1250	1250	2.50003×10^{-7}	2×10^{-10}
11×10^4	0.0001	11	1830.102816	0.022183333	1830.125	1830.125	3.02503×10^{-7}	1.6529×10^{-10}
12×10^4	0.0001	12	2591.9712	0.0288	2592	2592	3.60004×10^{-7}	1.3889×10^{-10}
13×10^4	0.0001	13	3570.088383	0.036616667	3570.125	3570.125	4.22503×10^{-7}	1.1834×10^{-10}
14×10^4	0.0001	14	4801.954266	0.045733333	4802	4802	4.90006×10^{-7}	1.0204×10^{-10}
15×10^4	0.0001	15	6328.068749	0.05625	6328.125	6328.124999	5.62506×10^{-7}	8.8890×10^{-11}
16×10^4	0.0001	16	8191.931733	0.068266667	8192	8191.999999	6.40006×10^{-7}	7.8126×10^{-11}
17×10^4	0.0001	17	1.044004312×10^4	0.081883333	1.0440125×10^4	1.0440125×10^4	7.22506×10^{-7}	6.9205×10^{-11}
18×10^4	0.0001	18	1.31219028×10^4	0.0972	1.3122×10^4	1.3122×10^4	8.10030×10^{-7}	6.1731×10^{-11}
19×10^4	0.0001	19	1.629001068×10^4	0.114316667	1.6290125×10^4	1.6290125×10^4	9.02534×10^{-7}	5.5404×10^{-11}
20×10^4	0.0001	20	1.999986667×10^4	0.133333333	2×10^4	2×10^4	1.00003×10^{-6}	5.0002×10^{-11}

Таблиця 6.3. Розрахунок інтеграла $\int_0^{\tau} \int_0^{\tau'} \tau' \tau'' d\tau' d\tau''$ для випадку В і зростаючої

функції $n(\tau) = 10^4 \cdot \sqrt[3]{\tau}$

$n(\tau)$	$h(\tau)$	τ	$V_{sq_{el}}$	$V_{tr_{el}}$	I_{analyt}	I_{num}	$ I_{analyt} - I_{num} $	$E(\tau)$
1×10^4	0.0001	1	0.1249833308	0.0000166667	0.125	0.1249999975	2.5×10^{-9}	2×10^{-8}
1.2599×10^4	0.000159	2	1.9997883178	0.0002116657	2	1.9999999748	2.5199263×10^{-8}	1.26×10^{-8}
1.4422×10^4	0.000208	3	10.1240638327	0.0009360699	10.125	10.1249999026	9.735854×10^{-8}	9.616×10^{-9}
1.5874×10^4	0.000252	4	31.9973119127	0.0026878334	32	31.999999746	2.539845×10^{-7}	7.937×10^{-9}
1.71×10^4	0.000292	5	78.1189078477	0.0060916179	78.125	78.1249994656	5.3435247×10^{-7}	6.84×10^{-9}
1.8171×10^4	0.00033	6	161.9881119459	0.0118870728	162	161.9999990187	9.8126738×10^{-7}	6.057×10^{-9}
1.9129×10^4	0.000366	7	300.1040789876	0.020919372	300.125	300.1249983596	1.640392×10^{-6}	5.466×10^{-9}
2×10^4	0.0004	8	511.9658641067	0.0341333333	512	511.99999744	2.5599998×10^{-6}	5×10^{-9}
2.0801×10^4	0.000433	9	820.0724266211	0.052569588	820.125	820.1249962091	3.7908936×10^{-6}	4.622×10^{-9}
2.1544×10^4	0.000464	10	1249.9226335542	0.0773610595	1250	1249.9999946137	5.3862598×10^{-6}	4.309×10^{-9}
2.224×10^4	0.000495	11	1830.0152728757	0.1097197242	1830.125	1830.1249925998	7.4001611×10^{-6}	4.044×10^{-9}
2.2894×10^4	0.000524	12	2591.849033527	0.1509565824	2592	2591.9999901094	9.8905776×10^{-6}	3.816×10^{-9}
2.3513×10^4	0.000553	13	3569.922538794	0.2024482909	3570.125	3570.1249870849	1.2915086×10^{-5}	3.618×10^{-9}
2.4101×10^4	0.000581	14	4801.7343236731	0.2656597927	4802	4801.9999834658	1.6534156×10^{-5}	3.443×10^{-9}
2.4662×10^4	0.000608	15	6327.782853654	0.3421255371	6328.125	6328.1249791911	2.0808869×10^{-5}	3.288×10^{-9}
2.5198×10^4	0.000635	16	8191.56650064	0.4334735559	8192	8191.999974196	2.5804043×10^{-5}	3.15×10^{-9}
2.5713×10^4	0.000661	17	$1.04395836015357 \times 10^4$	0.541366883	1.044×10^4	$1.04401249684 \times 10^4$	3.1581314×10^{-5}	3.025×10^{-9}
2.6207×10^4	0.000687	18	$1.31213323538976 \times 10^4$	0.6676078908	1.3122×10^4	$1.31219999618 \times 10^4$	3.8211616×10^{-5}	2.912×10^{-9}
2.6684×10^4	0.000712	19	$1.6289310977079 \times 10^4$	0.8139771646	1.629×10^4	$1.62901249542 \times 10^4$	4.5756477×10^{-5}	2.809×10^{-9}
2.7144×10^4	0.000737	20	$1.99990175309358 \times 10^4$	0.9824147752	2×10^4	1.9999999457×10^4	5.4289055×10^{-5}	2.714×10^{-9}

Таблиця 6.4. Розрахунок інтеграла $\int_0^{\tau} \int_0^{\tau'} \tau' \tau'' d\tau' d\tau''$ для випадку В і спадної

функції $n(\tau) = 10^4 / \sqrt[3]{\tau}$

$n(\tau)$	$h(\tau)$	τ	$V_{sq_{el}}$	$V_{tr_{el}}$	I_{analyt}	I_{num}	$ I_{analyt} - I_{num} $	$E(\tau)$
10^4	0.0001	1	0.124983331	1.67×10^{-5}	0.125	0.124999998	2.5×10^{-9}	2×10^{-8}
7937	0.000251984	2	1.999663957	0.000335979	2	1.999999937	6.3496×10^{-8}	3.1748×10^{-8}
6934	0.000432651	3	10.12305265	0.001946928	10.125	10.12499958	4.2117×10^{-7}	4.1597×10^{-8}
6300	0.000634921	4	31.9932259	0.006772487	32	31.99999839	1.6125×10^{-6}	5.0391×10^{-8}
5848	0.000854993	5	78.10718307	0.017812357	78.125	78.12499543	4.5688×10^{-6}	5.8481×10^{-8}
5503	0.001090314	6	161.960738	0.039251317	162	161.9999893	1.0699×10^{-5}	6.6044×10^{-8}
5228	0.001338944	7	300.0484351	0.076542973	300.125	300.124978	2.1961×10^{-5}	7.3174×10^{-8}
5000	0.0016	8	511.8634257	0.136533332	512	511.999959	4.096×10^{-5}	8×10^{-8}
4807	0.00187227	9	819.8974483	0.227480755	820.125	820.124929	7.0984×10^{-5}	8.6553×10^{-8}
4642	0.002154244	10	1249.640843	0.359040639	1250	1249.999884	1.1602×10^{-4}	9.2815×10^{-8}
4496	0.002446619	11	1829.582077	0.54274169	1830.125	1830.124819	1.8107×10^{-4}	9.8941×10^{-8}
4368	0.002747253	12	2591.20852	0.791208781	2592	2591.999728	2.7171×10^{-4}	1.0482×10^{-7}
4253	0.003056666	13	3569.005356	1.119249142	3570.125	3570.124605	3.9475×10^{-4}	1.1057×10^{-7}
4149	0.003374307	14	4800.456259	1.543183074	4802	4801.999442	5.5791×10^{-4}	1.1618×10^{-7}
4055	0.003699137	15	6326.043466	2.080764457	6328.125	6328.12423	7.6970×10^{-4}	1.2163×10^{-7}
3969	0.004031242	16	8189.246965	2.751994581	8192	8191.99896	1.0401×10^{-3}	1.2696×10^{-7}
3889	0.004371304	17	1.043654425×10^4	3.579369102	10440.125	1.044012362×10^4	1.3806×10^{-3}	1.3224×10^{-7}
3816	0.004716981	18	1.311741329×10^4	4.584905582	1.3122×10^4	1.31219982×10^4	1.8022×10^{-3}	1.3735×10^{-7}
3748	0.00506937	19	1.628432755×10^4	5.79513508	1.62901×10^4	1.629012268×10^4	2.3193×10^{-3}	1.4237×10^{-7}
3684	0.005428882	20	1.999275854×10^4	7.238508734	2×10^4	1.999999705×10^4	2.9473×10^{-3}	1.4736×10^{-7}

На рис. 6.15 наведено порівняльні графіки абсолютної (рис. а) та відносної (рис. б) похибок чисельного інтегрування за формулами (6.58а) випадку А, (6.58а) випадку Б, (6.58в) випадків В1 для зростаючої функції $n(\tau)$ та В2 для спадаючої $n(\tau)$.

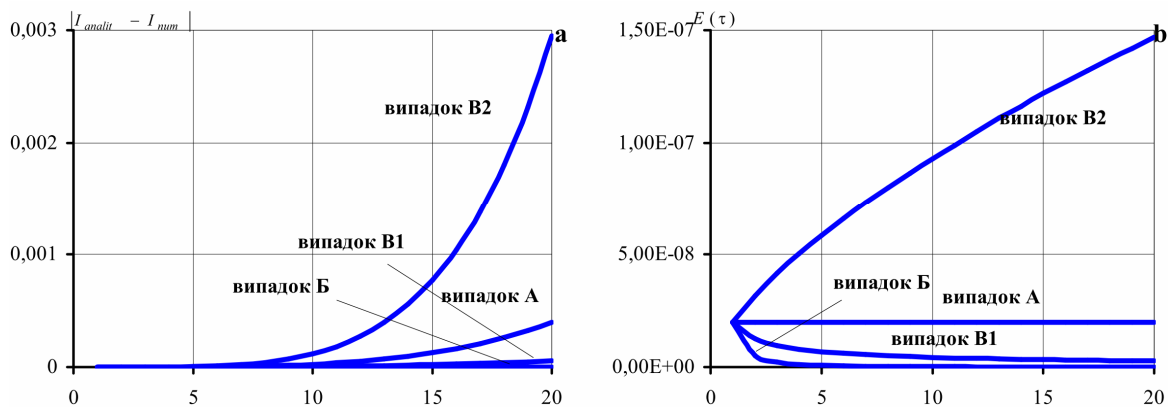


Рис. 6.15. Графіки абсолютної (рис. а) і відносної (рис. б) похибок для чотирьох розглянутих випадків А, Б, В1 і В2 зв'язку між кількістю вузлів і шириною сітки для підінтегральної функції $f(\tau', \tau'') = \tau' \tau''$

Зауважимо, що значення, найближчі до аналітичних значень інтеграла, отримуються у разі незмінної ширини сітки та збільшення кількості елементів розбиття разом зі збільшенням інтегрування (рис. 6.15а, 6.15б). Результати, розраховані за формулою (6.58в) при накладенні зростаючої функції кількості вузлів $n(\tau)$ (випадок В1, рис. 6.15), показують, що значення абсолютної та відносної похибок є цілком прийнятними. Однак у цьому випадку кількість операцій менша, ніж у випадку Б. Зауважимо, що лише один випадок В2, тобто накладення спадної функції числа вузлів $n(\tau)$, призводить до різкого збільшення абсолютних і відносних похибок зі збільшенням τ і може виходити за межі заданої точності розрахунків (рис. 6.15, табл. 6.4). У випадках А, Б і В1 різниця між аналітичними та чисельними розрахунками $|I_{analyt} - I_{num}|$ знаходиться в межах прийнятного відхилення. У цьому випадку при більш щільній сітці, накладеній на змінну область інтегрування, зменшуються як абсолютна, так і відносна похибки. Зокрема, при збільшенні на порядок різниця зменшується на два порядки (табл. 6.1-6.4).

II. Розглянемо наступну підінтегральну функцію: $f(\tau', \tau'') = e^{\tau'} \tau''$ на тому самому часовому проміжку $\tau \in [0; 2]$. Поверхня, утворена функцією над областю інтегрування, показана на рис. 6.16.

Інтеграл $I_{num} = \int_0^{\tau} \int_0^{\tau'} e^{\tau'} \tau'' d\tau' d\tau''$ також обчислюємо за формулами за формулами

(6.58а), (6.58б), (6.58в), аналітичний вираз знайдено у вигляді $I_{analyt} = \frac{1}{2} e^{\tau} (\tau^2 - 2\tau + 2) - 1$.

У табл. 6.5 наведено відповідні значення для випадку, коли зі зміною τ , (А) змінюється лише розмір накладеної сітки $h(\tau)$. Розрахункові значення для випадку,

коли зі змінною τ , (Б) змінюється лише кількість елементів поділу $N_{el}(\tau)$, наведені в табл. 6.6. У табл. 6.7 і 6.8 наведено значення параметрів інтегрування для випадку, коли зі змінною τ , змінюється як розмір сітки, так і кількість елементів ділення (В), а саме для $n(\tau) = 10^4 \cdot \sqrt[3]{\tau}$, $h(\tau) = 10^{-4} \cdot \sqrt[3]{\tau^2}$ і $n(\tau) = 10^4 / \sqrt[3]{\tau}$, $h(\tau) = 10^{-4} \cdot \sqrt[3]{\tau^4}$, відповідно.

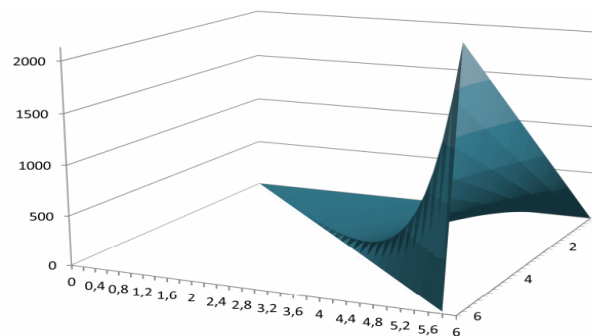


Рис. 6.16. Поверхня, утворена функцією $f(\tau', \tau'') = e^{\tau' \tau''}$

Таблиця 6.5. Розрахунок інтеграла $\int_0^\tau \int_0^{\tau'} \exp(\tau') \tau'' d\tau' d\tau''$ для випадку А.

$n(\tau)$	$h(\tau)$	τ	$V_{sq_{el}}$	$V_{tr_{el}}$	I_{analyt}	I_{num}	$ I_{analyt} - I_{num} $	$E(\tau)$
10^4	0.0001	1	0.359090906	0.00005	0.359140914	0.359140906	0.000000008	2.267×10^{-8}
10^4	0.0002	2	6.388217048	0.000838906	6.389056099	6.389055954	0.000000145	2.271×10^{-8}
10^4	0.0003	3	49.207665438	0.006175661	49.213842308	49.213841099	0.000001209	2.457×10^{-8}
10^4	0.0004	4	271.957783692	0.032958890	271.990750166	271.990742582	0.000007584	2.788×10^{-8}
10^4	0.0005	5	1260.363148341	0.148663157	1260.511852372	1260.511811497	0.000040874	3.243×10^{-8}
10^4	0.0006	6	5242.968672666	0.605443177	5243.574315406	5243.574115843	0.000199562	3.806×10^{-8}
10^4	0.0007	7	2.028440925×10^4	2.303279570	$2.0286713430927 \times 10^4$	$2.028671252433 \times 10^4$	0.000906595	4.469×10^{-8}
10^4	0.0008	8	74514.5987×10^4	8.347082077	$7.4522.949676043 \times 10^4$	$7.452294578116 \times 10^4$	0.003894878	5.226×10^{-8}
10^4	0.0009	9	2.633200401×10^5	29.171550908	$2.633492276462 \times 10^5$	$2.633492116479 \times 10^5$	0.015998222	6.075×10^{-8}
10^4	0.001	10	9.029849147×10^5	99.119591029	$9.0308409758708 \times 10^5$	$9.030840342614 \times 10^5$	0.063325711	7.012×10^{-8}
10^4	0.0011	11	3.023313605×10^6	329.30830951	$3.0236431566175 \times 10^6$	$3.023642913616 \times 10^6$	0.243001233	8.037×10^{-8}
10^4	0.0012	12	9.926966186×10^6	1074.1821472	$9.9280412765592 \times 10^6$	$9.928040368388 \times 10^6$	0.908171151	9.148×10^{-8}
10^4	0.0013	13	3.207151578×10^7	3450.8248242	$3.2074969920647 \times 10^7$	$3.207496660282 \times 10^7$	3.317823097	1.034×10^{-7}
10^4	0.0014	14	1.022104076×10^8	1.09436987×10^4	$1.0222136315401 \times 10^8$	$1.022213512703 \times 10^8$	11.883732932	1.163×10^{-7}
10^4	0.0015	15	3.219638437×10^8	3.43246795×10^4	$3.219982101885 \times 10^8$	$3.219981683553 \times 10^8$	41.833202855	1.299×10^{-7}
10^4	0.0016	16	1.004023709×10^9	1.06633314×10^5	$1.0041304878174 \times 10^9$	$1.004130342796 \times 10^9$	145.021310075	1.444×10^{-7}
10^4	0.0017	17	3.103582425×10^9	3.28507313×10^5	$3.1039114278344 \times 10^9$	$3.103910931908 \times 10^9$	495.926285982	1.598×10^{-7}
10^4	0.0018	18	9.519689251×10^9	1.00459738×10^6	$9.5206955239129 \times 10^9$	$9.520693848599 \times 10^9$	1675.31390521	1.760×10^{-7}
10^4	0.0019	19	$2.900031626 \times 10^{10}$	3.05204684×10^6	$2.9003373905518 \times 10^{10}$	$2.9003368308 \times 10^{10}$	5597.53888766	1.930×10^{-7}
10^4	0.002	20	$8.780566371 \times 10^{10}$	9.21813702×10^6	$8.781490036817 \times 10^{10}$	$8.7814881851 \times 10^{10}$	1.85171357×10^4	2.109×10^{-7}

Таблиця 6.6. Розрахунок інтеграла $\int_0^\tau \int_0^{\tau'} \exp(\tau') \tau'' d\tau' d\tau''$ для випадку Б

$n(\tau)$	$h(\tau)$	τ	$V_{sq_{el}}$	$V_{tr_{el}}$	I_{analyt}	I_{num}	$ I_{analyt} - I_{num} $	$E(\tau)$
10000	0.0001	1	0.359090906	0.000050000	0.359140914	0.359140906	0.000000008	2.267×10^{-8}
20000	0.0001	2	6.38863661	0.000419453	6.389056099	6.389056063	0.000000036	5.682×10^{-9}
30000	0.0001	3	49.21178362	0.002058554	49.213842308	49.21384217	0.000000134	2.723×10^{-9}
40000	0.0001	4	271.98251	0.008239722	271.990750166	271.9907497	0.000000474	1.743×10^{-9}
50000	0.0001	5	1260.482118	0.029732632	1260.511852372	1260.511851	0.000001630	1.293×10^{-9}
60000	0.0001	6	5243.473403	0.100907198	5243.574315406	5243.57431	0.000005540	1.057×10^{-9}
70000	0.0001	7	20286.38437	0.329039947	20286.713430927	20286.71341	0.000018500	9.119×10^{-10}
80000	0.0001	8	74521.90623	1.043385295	74522.949676043	74522.94962	0.000060900	8.172×10^{-10}
90000	0.0001	9	263316.8146	32.41283402	263349.2276462	263349.2274	0.000197509	7.500×10^{-10}
100000	0.0001	10	902984.9774	99.11959103	903084.097587075	903084.097	0.000633257	7.012×10^{-10}
110000	0.0001	11	3023343.783	299.3711936	3023643.15661749	3023643.155	0.002008275	6.642×10^{-10}
120000	0.0001	12	9927146.118	895.1518087	9928041.27655924	9928041.27	0.006306744	6.352×10^{-10}
130000	0.0001	13	32072315.42	2654.480723	32074969.9206467	32074969	0.019632090	6.121×10^{-10}
140000	0.0001	14	102213546.2	7816.927971	102221363.154006	102221363	0.060631293	5.931×10^{-10}
150000	0.0001	15	321975326	22883.12102	321998210.188503	321998210	0.185925351	5.774×10^{-10}
160000	0.0001	16	1004063841	66645.8262	1004130487.81739	1004130487	0.566489518	5.642×10^{-10}
170000	0.0001	17	3103718187	193239.6135	3103911427.83443	3103911426	1.716008036	5.529×10^{-10}
180000	0.0001	18	9520137409	558109.7122	9520695523.91292	9520695519	5.170722441	5.431×10^{-10}
190000	0.0001	19	29001767549	1606340.635	29003373905.5179	29003373890	15.505649770	5.346×10^{-10}
200000	0.0001	20	87810291253	4609069.145	87814900368.172	87814900322	46.292846120	5.272×10^{-10}

Таблиця 6.7. Розрахунок інтеграла $\int_0^{\tau} \int_0^{\tau'} \exp(\tau') \tau'' d\tau' d\tau''$ для випадку В і

зростаючої функції $n(\tau) = 10^4 \cdot \sqrt[3]{\tau}$

$n(\tau)$	$h(\tau)$	τ	$V_{sq_{el}}$	$V_{tr_{el}}$	I_{analyt}	I_{num}	$ I_{analyt} - I_{num} $	$E(\tau)$
10000	0.0001	1	0.359090906	0.000050000	0.359140914	0.359140906	0.000000008	2.267×10^{-8}
12599	0.000159	2	6.388390157	0.000665851	6.389056099	6.389056008	0.000000091	1.431×10^{-8}
14422	0.000208	3	49.209559615	0.004282111	49.21384231	49.213841727	0.000000581	1.181×10^{-8}
15874	0.000252	4	271.969984343	0.020762813	271.9907502	271.990747156	0.000003010	1.107×10^{-8}
17100	0.000292	5	1260.424900874	0.086937519	1260.511852	1260.511838393	0.000013978	1.109×10^{-8}
18171	0.000330	6	5243.241062964	0.333192002	5243.574315	5243.574254966	0.000060439	1.153×10^{-8}
19129	0.000366	7	20285.50910579	1.204077378	20286.71343	20286.713183168	0.000247759	1.221×10^{-8}
20000	0.000400	8	74518.775161178	4.173541146	74522.94968	74522.948702324	0.000973719	1.307×10^{-8}
20801	0.000433	9	263335.199838432	14.024110310	263349.2276	263349.223948742	0.003697458	1.404×10^{-8}
21544	0.000464	10	903038.07596219	46.007981335	903084.0976	903084.083943526	0.013643550	1.511×10^{-8}
22240	0.000495	11	3023495.03719817	148.0702902	3023643.157	3023643.10748837	0.049129116	1.625×10^{-8}
22894	0.000524	12	9927571.90515446	469.198134373	9928041.277	9928041.10328883	0.173270407	1.745×10^{-8}
23513	0.000553	13	32073501.6962112	1467.6243169	32074969.92	32074969.3205281	0.600118610	1.871×10^{-8}
24101	0.000581	14	102216820.342374	4540.7657393	102221363.2	102221361.108113	2.045892619	2.001×10^{-8}
24662	0.000608	15	321984285.265473	13918.0449908	321998210.2	321998203.310464	6.878038824	2.136×10^{-8}
25198	0.000635	16	1004088146.8071	42318.1700992	1004130488	1004130464.9772	22.840187703	2.275×10^{-8}
25713	0.000661	17	3103783593.57882	127759.2469053	3103911428	3103911352.82573	75.008696351	2.417×10^{-8}
26207	0.000687	18	9520311948.23899	383331.7459578	9520695524	9520695279.98495	243.927973829	2.562×10^{-8}
26684	0.000712	19	29002229345.1111	1143774.2751396	29003373906	29003373119.3863	786.131675605	2.710×10^{-8}
27144	0.000737	20	87811501841.6839	3396013.2932944	87814900368	87814897854.9772	2513.194845602	2.862×10^{-8}

Таблиця 6.8. Розрахунок інтеграла $\int_0^{\tau} \int_0^{\tau'} \exp(\tau') \tau'' d\tau' d\tau''$ для випадку В і спадної

функції $n(\tau) = 10^4 / \sqrt[3]{\tau}$

$n(\tau)$	$h(\tau)$	τ	$V_{sq_{el}}$	$V_{tr_{el}}$	I_{analyt}	I_{num}	$ I_{analyt} - I_{num} $	$E(\tau)$
10000	0.0001	1	0.359090906	0.000050000	0.359140914	0.359140906	0.000000008	2.267×10^{-8}
7937	0.00025	2	6.387998913	0.001056956	6.389056099	6.389055869	0.000000023	3.605×10^{-8}
6934	0.00043	3	49.204933446	0.008906347	49.21384231	49.213839793	0.0000002515	5.110×10^{-8}
6300	0.00063	4	271.938415361	0.052315697	271.9907502	271.990731058	0.000019107	7.025×10^{-8}
5848	0.00085	5	1260.257520896	0.254211957	1260.511852	1260.511732853	0.000119519	9.482×10^{-8}
5503	0.00109	6	5242.473450803	1.100205612	5243.574315	5243.573656415	0.00065899	1.257×10^{-7}
5228	0.00134	7	20282.304453274	4.405660679	20286.71343	20286.710113953	0.003316973	1.635×10^{-7}
5000	0.00160	8	74506.239934095	16.694162437	74522.94968	74522.934096532	0.015579511	2.091×10^{-7}
4807	0.00187	9	263288.472855473	60.685556091	263349.2276	263349.158411563	0.069234637	2.629×10^{-7}
4642	0.00215	10	902870.275976446	213.527730828	903084.0976	903083.803707273	0.293879802	3.254×10^{-7}
4496	0.00245	11	3022909.50734272	732.447132721	3023643.157	3023641.954475440	1.202142053	3.976×10^{-7}
4368	0.00275	12	9925577.30913699	2459.207472851	9928041.277	9928036.516609840	4.759949403	4.794×10^{-7}
4253	0.00306	13	32066837.720614	8113.8573721	32074969.92	32074951.5779861	18.3426607	5.719×10^{-7}
4149	0.00337	14	102194917.417471	26376.7020856	102221363.2	102221294.119557	69.0344492	6.753×10^{-7}
4055	0.00370	15	321913308.030068	84647.7454870	321998210.2	321997955.775555	254.4129479	7.901×10^{-7}
3969	0.00403	16	1003860901.95183	268665.2688719	1004130488	1004129567.22071	920.5966830	9.168×10^{-7}
3889	0.00437	17	3103063440.52175	844708.3159021	3103911428	3103908148.83765	3278.9967729	1.056×10^{-6}
3816	0.00472	18	9518051428.73358	2632590.3768091	9520695524	9520684019.11039	11504.8025332	1.208×10^{-6}
3748	0.00507	19	28995190932.0917	8143126.2440291	29003373906	2900334058.3357	39847.1821992	1.374×10^{-6}
3684	0.00543	20	87789741872.4442	25022058.0945624	87814900368	87814763930.5388	136437.6332618	1.554×10^{-6}

На рис. 6.17 наведено порівняльні графіки абсолютної (рис. а) та відносної (рис. б) похибок чисельного інтегрування за формулами (6.58а) у випадку А, (6.58б) випадку Б, (6.58в) випадків В1 для зростаючої функції $n(\tau)$ та В2 для зменшення $n(\tau)$.

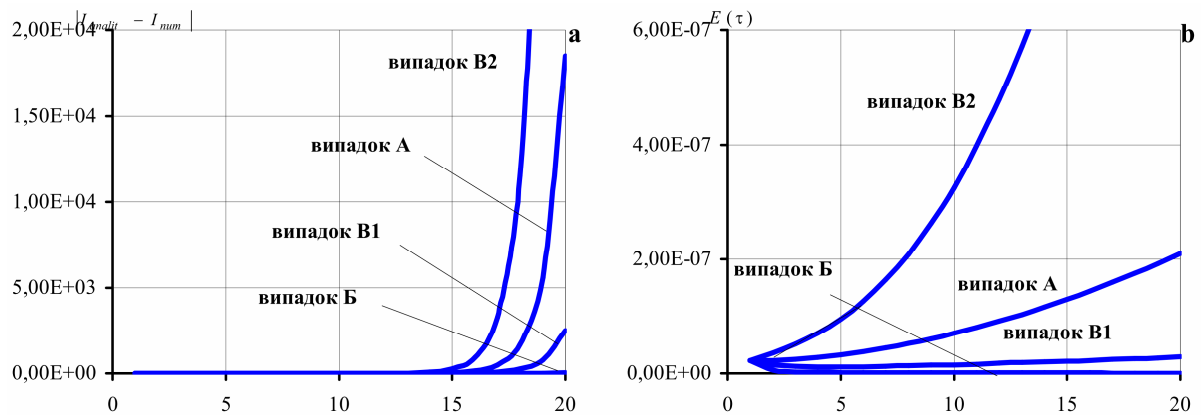


Рис. 6.17. Графіки абсолютної (рис. а) і відносної (рис. б) похибок для чотирьох розглянутих випадків А, Б, В1 і В2 зв'язку між кількістю вузлів і шириною сітки для підінтегральної функції $f(\tau', \tau'') = e^{\tau' \tau''}$

Коли підінтегральна функція містить експоненціальну функцію, різке збільшення підінтегральної функції майже не впливає на величину як абсолютної, так і відносної похибок числового обчислення інтеграла за формулами (6.58б) і (6.58в) при зростанні функції від кількості вузлів, тобто випадок В1 (рис. 6.17, табл. 6.6 і 6.7).

Зазначимо, що у випадку коли підінтегральна функція містить експоненціальну функцію, різке зростання підінтегральної функції практично не впливає на значення як абсолютної та відносної похибок для чисельного підрахунку інтеграла за формулами (6.58б) і (6.58в) при зростаючій функції кількості вузлів, тобто у випадку В1 (рис 6.17, табл. 6.6 і 6.7).

Для даного інтеграла різниця між аналітичним та чисельним розрахунком $|I_{analit} - I_{num}|$ також знаходиться в межах допустимого відхилення для випадків А, Б і В1. Проте на відміну від попереднього випадку І. величина цієї різниці більша на порядок: так для випадку Б і $n(\tau) = 10^4$, $\tau = 20$ $E(\tau)|_{f(\tau', \tau'') = \tau' \tau''} \sim 10^{-11}$, а $E(\tau)|_{f(\tau', \tau'') = e^{\tau' \tau''}} \sim 10^{-10}$ (табл. 6.2 та 6.6). При цьому при зростанні n на порядок відносна похибка зменшується на два порядки.

ІІІ. Тепер розглянемо підінтегральну функцію $f(\tau', \tau'') = \sin(\tau') \sin(\tau'')$ на тому само-

му часовому проміжку $\tau \in [0; 2]$. Інтеграл $I_{num} = \int_0^{\tau} \int_0^{\tau'} \sin(\tau') \sin(\tau'') d\tau' d\tau''$ також обчислю-

ємо за формулою (6.58), аналітичний вираз знайдено у вигляді $I_{analit} = \frac{1}{4} \sin(2\tau) + \frac{1}{2} \tau$.

Результати розрахунків наведено в табл. 6.9-6.12 для різної кількості трикутних елементів $n(\tau)$ і ширини сітки $h(\tau)$. Поверхня, утворена функцією над областю інтегрування, показана на рис. 6.18.

У табл. 6.9 наведено відповідні значення для випадку, коли зі зміною τ , (А) змінюється лише розмір накладеної сітки $h(\tau)$. Розрахункові значення для випадку, коли зі зміною τ , (Б) змінюється лише кількість елементів ділення $N_{el}(\tau)$, наведені в табл. 6.10. У табл. 6.11 і 6.12 наведено значення параметрів інтегрування для випадку, коли зі зміною τ , змінюється як розмір сітки, так

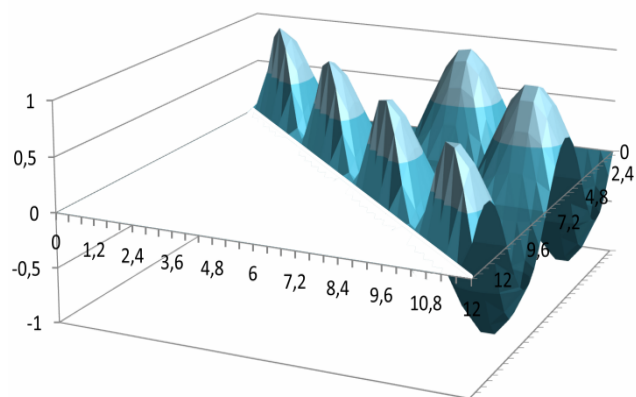


Рис. 6.18. Поверхня, утворена функцією

$$f(\tau', \tau'') = \sin(\tau') \sin(\tau'')$$

і кількість елементів поділу (В), а саме для $n(\tau) = 10^4 \cdot \sqrt[3]{\tau}$, $h(t) = 10^{-4} \cdot \sqrt[3]{\tau^2}$ і $n(\tau) = 10^4 / \sqrt[3]{\tau}$, $h(t) = 10^{-4} \cdot \sqrt[3]{\tau^4}$ відповідно.

Таблиця 6.9. Розрахунок інтеграла $\int_0^{\tau'} \int_0^{\tau''} \sin(\tau') \sin(\tau'') d\tau' d\tau''$ для випадку А

$n(\tau)$	$h(\tau)$	τ	$V_{sq_{el}}$	$V_{tr_{el}}$	I_{analyt}	I_{num}	$ I_{analyt} - I_{num} $	$E(\tau)$
10000	0.0001	1	0.105647349	1.36E-05	0.105660985	0.105660983	2.2104×10^{-9}	2.0920×10^{-8}
10000	0.0002	2	1.002616986	0.00011892	1.002735931	1.002735906	2.4980×10^{-8}	2.4912×10^{-8}
10000	0.0003	3	1.979799515	0.000235478	1.980035068	1.980034994	7.4699×10^{-8}	3.7726×10^{-8}
10000	0.0004	4	1.366917966	0.000350532	1.367268612	1.367268498	1.1406×10^{-7}	8.3423×10^{-8}
10000	0.0005	5	0.255910847	0.000659001	0.256569932	0.256569848	8.4197×10^{-8}	3.2816×10^{-7}
10000	0.0006	6	-0.000147047	0.000940243	0.000793203	0.000793196	7.1455×10^{-9}	9.0085×10^{-6}
10000	0.0007	7	0.029143669	0.001138322	0.03028205	0.030281991	5.9057×10^{-8}	1.9502×10^{-6}
10000	0.0008	8	0.654456042	0.00162879	0.656085164	0.656084832	3.3157×10^{-7}	5.0537×10^{-7}
10000	0.0009	9	1.824099302	0.002109486	1.826209439	1.826208788	6.5074×10^{-7}	3.5633×10^{-7}
10000	0.001	10	1.688705384	0.002385882	1.691092045	1.691091266	7.7861×10^{-7}	4.6042×10^{-6}
10000	0.0011	11	0.492557326	0.003026217	0.495584095	0.495583543	5.5235×10^{-7}	1.1145×10^{-6}
10000	0.0012	12	0.008454845	0.003735837	0.012190793	0.012190682	1.1096×10^{-7}	9.1021×10^{-6}
10000	0.0013	13	0.000181887	0.004101084	0.004283049	0.004282972	7.7604×10^{-8}	1.8119×10^{-5}
10000	0.0014	14	0.367757939	0.004852591	0.372611315	0.37261053	7.8514×10^{-7}	2.1071×10^{-6}
10000	0.0015	15	1.54243883	0.005810256	1.548250775	1.548249086	1.6894×10^{-6}	1.0911×10^{-6}
10000	0.0016	16	1.909923509	0.006289715	1.91621532	1.916213223	2.0970×10^{-6}	1.0944×10^{-6}
10000	0.0017	17	0.805906553	0.00711257	0.813020769	0.813019123	1.6468×10^{-6}	2.0255×10^{-6}
10000	0.0018	18	0.049368684	0.00832315	0.057692369	0.057691835	5.3471×10^{-7}	9.2683×10^{-6}
10000	0.0019	19	-0.00889084	0.008954612	6.38×10^{-5}	6.38×10^{-5}	2.0367×10^{-8}	3.1927×10^{-4}
10000	0.002	20	0.165368576	0.009813722	0.175183423	0.175182297	1.1254×10^{-6}	6.4243×10^{-6}

Таблиця 6.10. Розрахунок інтеграла $\int_0^\tau \int_0^{\tau'} \sin(\tau') \sin(\tau'') d\tau' d\tau''$ для випадку Б

$n(\tau)$	$h(\tau)$	τ	$V_{sq_{el}}$	$V_{tr_{el}}$	I_{analyt}	I_{num}	$ I_{analyt} - I_{num} $	$E(\tau)$
1×10^{-4}	0.0001	1	0.105524426	0.000136557	0.105660985	0.105660983	2.2104×10^{-9}	2.0920×10^{-8}
2×10^{-4}	0.0001	2	1.002140706	0.000595219	1.002735931	1.002735925	6.2451×10^{-9}	6.2281×10^{-9}
3×10^{-4}	0.0001	3	1.979249311	0.000785749	1.980035068	1.980035068	8.2999×10^{-9}	4.1918×10^{-9}
4×10^{-4}	0.0001	4	1.366391569	0.000877036	1.367268612	1.367268605	7.1288×10^{-9}	5.2139×10^{-9}
5×10^{-4}	0.0001	5	0.255251593	0.001318336	0.256569932	0.256569929	3.3679×10^{-9}	1.3127×10^{-8}
6×10^{-4}	0.0001	6	-0.000773888	0.001567091	0.000793203	0.000793203	1.9849×10^{-10}	2.5023×10^{-7}
7×10^{-4}	0.0001	7	0.028655756	0.001626293	0.03028205	0.030282049	1.2053×10^{-9}	3.9801×10^{-8}
8×10^{-4}	0.0001	8	0.654048658	0.002036501	0.656085164	0.656085159	5.1808×10^{-9}	7.8965×10^{-9}
9×10^{-4}	0.0001	9	1.823864762	0.002344669	1.826209439	1.826209431	8.0338×10^{-9}	4.3992×10^{-9}
10×10^{-4}	0.0001	10	1.688705384	0.002386653	1.691092045	1.691092037	7.7861×10^{-9}	4.6042×10^{-9}
11×10^{-4}	0.0001	11	0.492832533	0.002751558	0.495584095	0.495584091	4.5649×10^{-9}	9.2111×10^{-9}
12×10^{-4}	0.0001	12	0.009077519	0.003113274	0.012190793	0.012190792	7.7057×10^{-10}	6.3209×10^{-8}
13×10^{-4}	0.0001	13	0.001128323	0.003154726	0.004283049	0.004283049	4.5920×10^{-10}	1.0721×10^{-7}
14×10^{-4}	0.0001	14	0.369144778	0.003466533	0.372611315	0.372611311	4.0058×10^{-9}	1.0751×10^{-8}
15×10^{-4}	0.0001	15	1.544376521	0.003874247	1.548250775	1.548250768	7.5082×10^{-9}	4.8495×10^{-9}
16×10^{-4}	0.0001	16	1.91228343	0.003931883	1.91621532	1.916215312	8.1915×10^{-9}	4.2748×10^{-9}
17×10^{-4}	0.0001	17	0.808836335	0.004184429	0.813020769	0.813020764	5.6983×10^{-9}	7.0088×10^{-9}
18×10^{-4}	0.0001	18	0.053068232	0.004624136	0.057692369	0.057692368	1.6503×10^{-9}	2.8606×10^{-8}
19×10^{-4}	0.0001	19	-0.004649167	0.00471296	6.37928×10^{-5}	6.37928×10^{-5}	5.6423×10^{-11}	8.8446×10^{-7}
20×10^{-4}	0.0001	20	0.170276281	0.004907139	0.175183423	0.17518342	2.8136×10^{-9}	1.6061×10^{-8}

Таблиця 6.11. Розрахунок інтеграла $\int_0^\tau \int_0^{\tau'} \sin(\tau') \sin(\tau'') d\tau' d\tau''$ для випадку В і

зростаючої функції $n(\tau) = 10^4 \cdot \sqrt[3]{\tau}$

$n(\tau)$	$h(\tau)$	τ	$V_{sq_{el}}$	$V_{tr_{el}}$	I_{analyt}	I_{num}	$ I_{analyt} - I_{num} $	$E(\tau)$
10000	0.0001	1	0.105647349	1.36×10^{-5}	0.105660985	0.105660983	2.2104×10^{-9}	2.0920×10^{-8}
12599	0.000158743	2	1.002641527	9.44×10^{-5}	1.002735931	1.002735916	1.5737×10^{-8}	1.5694×10^{-8}
14422	0.000208016	3	1.979871755	0.000163277	1.980035068	1.980035032	3.5914×10^{-8}	1.8138×10^{-8}
15874	0.000251984	4	1.367047746	0.000220822	1.367268612	1.367268567	4.5265×10^{-8}	3.3106×10^{-8}
17100	0.000292398	5	0.256184523	0.000385381	0.256569932	0.256569903	2.8794×10^{-8}	1.1223×10^{-7}
18171	0.000330196	6	0.000275759	0.000517442	0.000793203	0.000793201	2.1641×10^{-9}	2.7283×10^{-6}
19129	0.000365937	7	0.029686958	0.000595077	0.03028205	0.030282034	1.6139×10^{-8}	5.3297×10^{-7}
20000	0.0004	8	0.655270686	0.000814395	0.656085164	0.656085081	8.2892×10^{-8}	1.2634×10^{-7}
20801	0.000432672	9	1.825195161	0.001014127	1.826209439	1.826209289	1.5040×10^{-7}	8.2355×10^{-8}
21544	0.000464166	10	1.689984431	0.001107446	1.691092045	1.691091877	1.6775×10^{-7}	9.9198×10^{-8}
22240	0.000494604	11	0.494223275	0.001360709	0.495584095	0.495583984	1.1167×10^{-7}	2.2533×10^{-7}
22894	0.000524155	12	0.010558975	0.001631797	0.012190793	0.012190772	2.1171×10^{-8}	1.7366×10^{-6}
23513	0.000552886	13	0.002538858	0.001744177	0.004283049	0.004283035	1.4037×10^{-8}	3.2773×10^{-6}
24101	0.000580889	14	0.37059774	0.00201344	0.372611315	0.37261118	1.3517×10^{-7}	3.6276×10^{-7}
24662	0.000608223	15	1.545894543	0.002355955	1.548250775	1.548250498	2.7776×10^{-7}	1.7940×10^{-7}
25198	0.000634971	16	1.913718874	0.002496117	1.91621532	1.91621499	3.3027×10^{-7}	1.7236×10^{-7}
25713	0.000661144	17	0.810254383	0.002766138	0.813020769	0.81302052	2.4908×10^{-7}	3.0636×10^{-7}
26207	0.000686839	18	0.054516365	0.003175926	0.057692369	0.057692291	7.7854×10^{-8}	1.3495×10^{-6}
26684	0.000712037	19	-0.003292008	0.003355798	6.38×10^{-5}	6.38×10^{-5}	2.8606×10^{-9}	4.4843×10^{-5}
27144	0.000736811	20	0.171567841	0.003615429	0.175183423	0.17518327	1.5275×10^{-7}	8.7193×10^{-7}

Таблиця 6.12. Розрахунок інтеграла $\int_0^{\tau} \int_0^{\tau'} \sin(\tau') \sin(\tau'') d\tau' d\tau''$ для випадку В і спадної функції $n(\tau) = 10^4 / \sqrt[3]{\tau}$

$n(\tau)$	$h(\tau)$	τ	$V_{sd_{el}}$	$V_{tr_{el}}$	I_{analyt}	I_{num}	$ I_{analyt} - I_{num} $	$E(\tau)$
10 ⁴	0.0001	1	0.105647349	1.36×10^{-5}	0.105660985	0.105660983	2.2104×10^{-9}	2.092×10^{-8}
7937	0.000251984	2	1.002586062	0.00014983	1.002735931	1.002735892	3.9654×10^{-8}	3.9546×10^{-8}
6934	0.000432651	3	1.979695314	0.000339599	1.980035068	1.980034913	1.5536×10^{-7}	7.8465×10^{-8}
6300	0.000634921	4	1.366711925	0.0005564	1.367268612	1.367268325	2.8738×10^{-7}	2.1019×10^{-7}
5848	0.000854993	5	0.255442803	0.001126883	0.256569932	0.256569686	2.462×10^{-7}	9.5957×10^{-7}
5503	0.001090314	6	-0.000915421	0.001708601	0.000793203	0.000793179	2.3596×10^{-8}	2.9747×10^{-5}
5228	0.001338944	7	0.028104478	0.002177356	0.03028205	0.030281834	2.1607×10^{-7}	7.1354×10^{-6}
5000	0.0016	8	0.652826257	0.003257581	0.656085164	0.656083837	1.3263×10^{-6}	2.0215×10^{-6}
4807	0.00187227	9	1.82181826	0.004388363	1.826209439	1.826206623	2.8162×10^{-6}	1.5421×10^{-6}
4642	0.002154244	10	1.68594866	0.005139771	1.691092045	1.691088431	3.6134×10^{-6}	2.1367×10^{-6}
4496	0.002446619	11	0.488850453	0.00673091	0.495584095	0.495581363	2.7325×10^{-6}	5.5137×10^{-6}
4368	0.002747253	12	0.003637471	0.00855274	0.012190793	0.012190212	5.8157×10^{-7}	4.7706×10^{-5}
4253	0.003056666	13	-0.005360183	0.009642803	0.004283049	0.00428262	4.2903×10^{-7}	1.0017×10^{-4}
4149	0.003374307	14	0.360910945	0.01169581	0.372611315	0.372606754	4.561×10^{-6}	1.2241×10^{-5}
4055	0.003699137	15	1.533911879	0.014328622	1.548250775	1.548240501	1.0274×10^{-5}	6.6358×10^{-6}
3969	0.004031242	16	1.900354908	0.015847101	1.91621532	1.916202009	1.3312×10^{-5}	6.9469×10^{-6}
3889	0.004371304	17	0.794720939	0.018288942	0.813020769	0.813009881	1.0888×10^{-5}	1.3393×10^{-5}
3816	0.004716981	18	0.035877505	0.021811192	0.057692369	0.057688697	3.6719×10^{-6}	6.3647×10^{-5}
3748	0.00506937	19	-0.02382806	0.023891708	6.38×10^{-5}	6.36×10^{-5}	1.4492×10^{-7}	2.2717×10^{-3}
3684	0.005428882	20	0.148536366	0.026638764	0.175183423	0.17517513	8.2924×10^{-6}	4.7335×10^{-5}

На рис. 6.19 наведено порівняльні графіки абсолютної (рис. а) та відносної (рис. б) похибок чисельного інтегрування $\int_0^{\tau} \int_0^{\tau'} \sin(\tau') \sin(\tau'') d\tau' d\tau''$ за формулами (6.58а) випадку А, (6.58б) випадку Б, (6.58в) випадків В1 для зростаючої функції та В2 для зменшення $n(\tau)$.

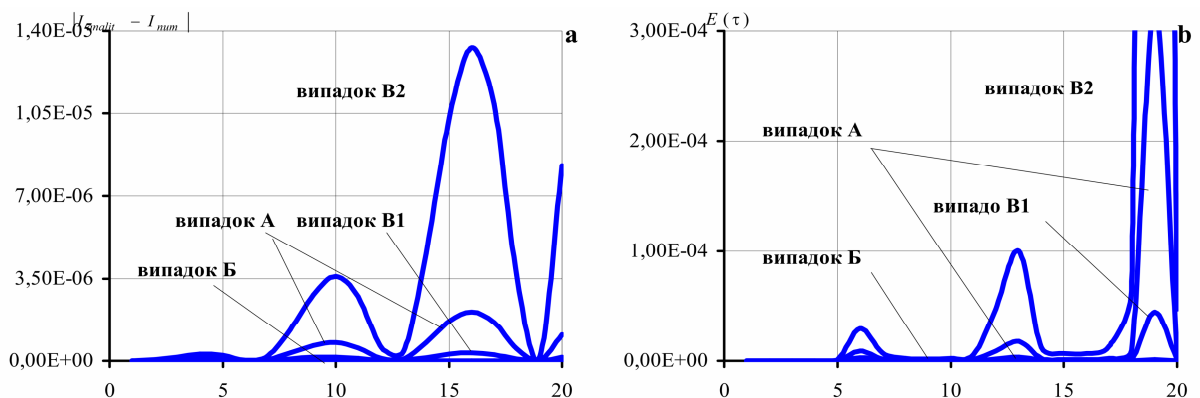


Рис. 6.19. Графіки абсолютної (рис. а) і відносної (рис. б) похибок для чотирьох розглянутих випадків А, Б, В1 і В2 зв'язку між кількістю вузлів і шириною сітки для підінтегральної функції $f(\tau', \tau'') = \sin(\tau') \sin(\tau'')$

Зазначимо, що для періодичного підінтегрального виразу найбільш близьке до аналітичного значення інтеграл виходить у разі сталої ширини сітки та у разі збільшення кількості елементів розбиття разом із збільшенням області інтегрування

(рис. 6.19а та б). Тут цілком прийнятними є результати для абсолютної та відносної похибок, розрахованих за формулою (6.58в) для накладення зростаючої функції числа вузлів, випадок В1 (рис. 6.19).

Для даного інтеграла різниця між аналітичним та чисельним розрахунком $|I_{analit} - I_{num}|$ також знаходиться в межах допустимого відхилення для випадків А, Б і В1. У цьому випадку різниця між аналітичним і чисельним обчисленням $|I_{analit} - I_{num}|$ такого ж порядку, як і для підінтегрального виразу $f(\tau', \tau'') = \tau' \tau''$. А при збільшенні n на порядок величина $E(\tau)$ також зменшується на два порядки.

Зверну увагу, що для всіх трьох розглянутих підінтегральних функцій не спостерігалось значного накопичення машинної похибки.

6.2.8. Довговічність роботи промислових тришарових засипних фільтрів води

6.2.8.1. Чисельний метод розв'язування нелінійних функціональних рівнянь

Отримані формули (6.51) для знаходження концентрацій частинок домішкової субстанції, сорбованих на скелеті кожного макроелемента тришарового тіла, дають можливість визначити часи насичення $\tau_*(x)$ [143], розподілені за глибиною. Відповідно можна проаналізувати довговічність роботи тришарового фільтра [7, 16]. Якщо відоме максимальне значення концентрації частинок домішкової речовини, спроможної адсорбуватися скелетом тіла (це експериментально вимірювана величина), в кожному структурному макроелементі N_j ($j = \overline{1,3}$), тоді часи насичення $\tau_*^{(j)}(x)$ в макроелементі j знаходимо, розв'язуючи рівняння (у позначеннях формули (6.52))

$$c_2^{(j)}(x, \tau_*^{(j)}(x)) = F_j(x) - \frac{2d_2}{\delta x} e^{\frac{v_2(x-x')}{2d_2}} \sum_{m=1}^{\infty} B_m(x) \int_0^{\tau_*^{(j)}(x)} \int_0^{\tau'} g(\tau'') f(\tau' - \tau'') d\tau'' d\tau' = N_j. \quad (6.64)$$

Зазначимо, що концентрації насичення N_j визначаються для порового матеріалу, тому приймаємо, що в області j -го макроелемента $N_j \equiv const$. Тоді, враховуючи, що повне насичення макроелемента, а відповідно і втрата сорбційної здатності, відбудеться при досягненні концентрації $c_2^{(j)}(x, \tau_*^{(j)}(x))$ максимального значення N_j в кожній точці $x \in \Omega_j$, рівняння (6.64) зводиться до такого нелінійного функціонального рівняння:

$$\sup_{x \in \Omega_j} c_2^{(j)}(x, \tau_*^{(j)}(x)) = N_j. \quad (6.65)$$

Зауважимо, що оскільки $\tau_*^{(j)} = \tau_*^{(j)}(x)$, то звідси випливає, що край відрізка $[0; \tau_*^{(j)}(x)]$ $\tau = \tau_*^{(j)}$ може бути рухомим (рухомим у площині $O\xi\tau$).

Даний алгоритм відноситься до класу лінійних.

Складність даного алгоритму визначається сумарною кількістю кроків ітераційного процесу необхідних для отримання значення часу насичення фільтра $\Theta(N_j)$, де $N_j = n_0^{(j)} + n_2^{(j)} + n_2^{(j)} + \dots + n_l^{(j)}$ - сумарна кількість кроків ітераційного процесу, $n_i^{(j)}$ ($i = \overline{1, l}$) - кількість кроків на рівномірному проміжку (етапі).

Для перевірки ефективності роботи алгоритму застосуємо його до розв'язування достатньо простих рівнянь $f(\tau) = 0$, коли $f(\tau)$ є лінійною і нелінійною функціями.

I. Нехай $f(\tau)$ є лінійною функцією $f(\tau) = 10 - \tau$, тобто потрібно знайти розв'язок рівняння $10 - \tau = 0$. Задавалися такі параметри алгоритму: $h = 0.2$; $k = 9$; $\varepsilon = 0.001$; $\tau_0 = 0.01$.

В результаті отриманий розв'язок $\tau_* = 9.999910074684$; програма використала $i = 72$ етапів для досягнення заданої точності, при цьому 5 разів відбулось зменшення кроку h у 9 разів ($k = 9$), останній крок $h_5 = 0.000030483158$.

На рис. 6.21 наведений графік функції $f(\tau) = 10 - \tau$, а на рис. 6.22 – результат роботи алгоритму у цьому випадку.

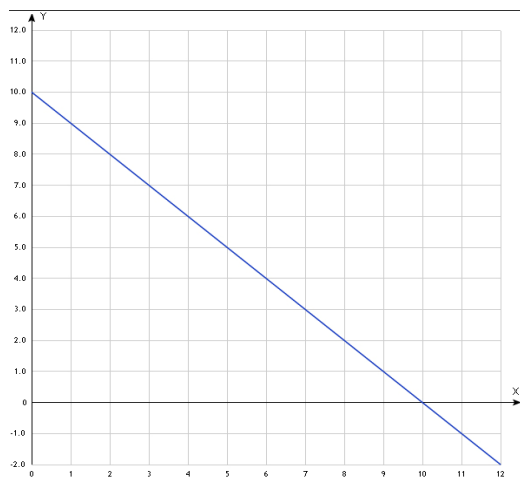


Рис. 6.21. Графік лінійної функції $f(\tau) = 10 - \tau$

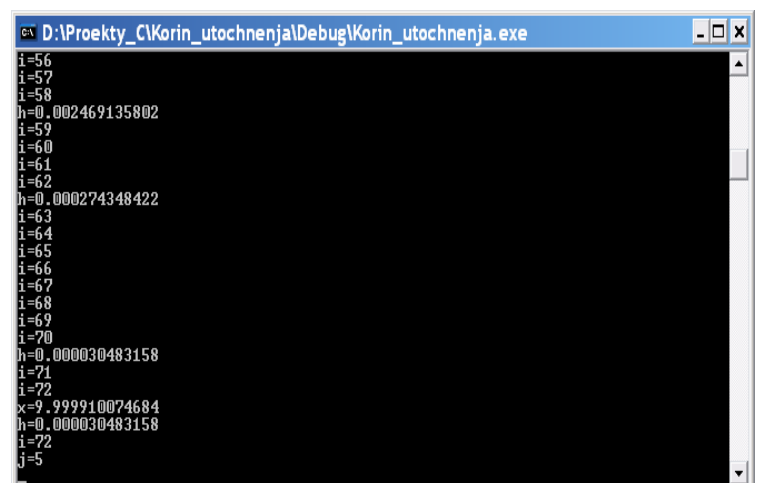


Рис. 6.22. Результат роботи алгоритму при розв'язуванні рівняння $10 - \tau = 0$

II. Розглянемо випадок, коли $f(\tau)$ є нелінійною функцією. А саме $f(\tau) = 9 - x^3 + x^2$. Тоді потрібно знайти розв'язок рівняння $9 - x^3 + x^2 = 0$. Задавалися такі параметри алгоритму: $h = 0.2$; $k = 9$; $\varepsilon = 0.00001$; $\tau_0 = 0.01$.

В результаті отриманий розв'язок $\tau_* = 2.4723778871$; програма використала $i = 41$ етап для досягнення заданої точності, при цьому 7 разів відбулось зменшення кроку h у 9 разів ($k = 9$), останній крок $h_7 = 0.000000376335$.

На рис. 6.23 наведений графік функції $f(\tau) = 9 - \tau^3 + \tau^2$, а на рис. 6.22 – результат роботи алгоритму у цьому випадку.

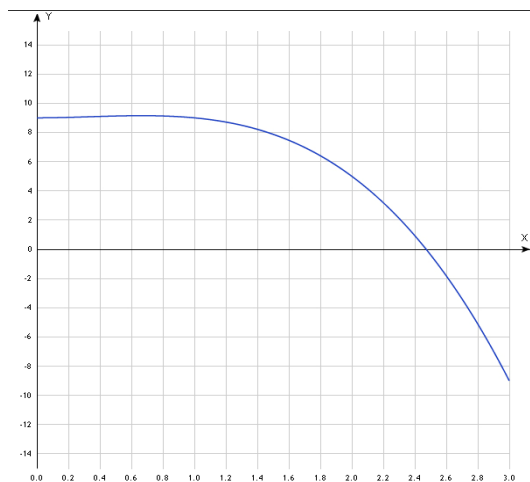


Рис. 6.23. Графік лінійної функції
 $f(\tau) = 9 - \tau^3 + \tau^2$

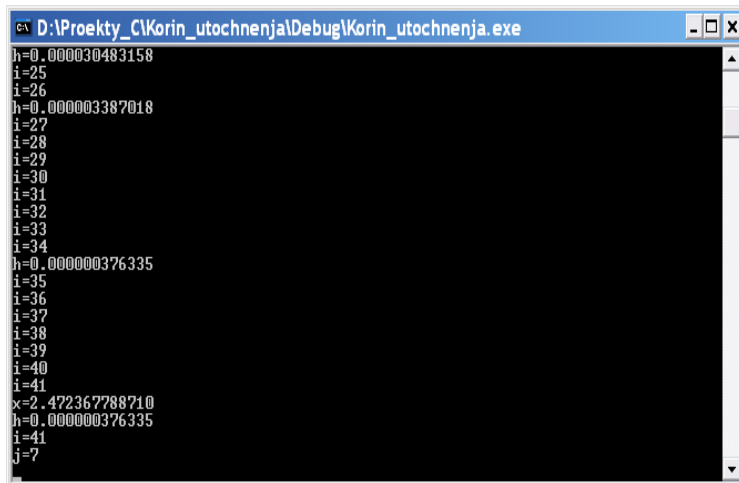


Рис. 6.24. Результат роботи алгоритму при розв'язуванні рівняння $9 - \tau^3 + \tau^2 = 0$

Зазначимо, що кількість кроків такого типу алгоритмів суттєво залежить від початкового наближення (задання значення τ_0). При тестуванні даного алгоритму за «невдалого» вибору τ_0 - в околі нуля, для досягнення точності знадобилося 72 кроки та 5 переходів на метод простої ітерації для лінійної функції і 41 крок та 7 переходів – для нелінійної при $k = 9$. Менша кількість кроків при суттєвому підвищенні точності пояснюється значно крутішим спаданням нелінійної функції (рис. 6.21 і 6.23), і відповідно швидшим наближенням до розв'язку τ_* .

Зазначимо, що розвинений метод розроблявся для монотонно спадних функцій, оскільки саме така поведінка функцій

$$F \equiv N_j - \sup_{x \in \Omega_j} c_2^{(j)}(x, \tau_*^{(j)})$$

є фізично обґрунтованою в переважній більшості випадків при встановленні часу насичення промислових фільтрів води.

Такий метод на основі композиції методу простої ітерації та модифікації методу дихотомії розроблявся для монотонно спадних функцій, оскільки різниці концентрацій насичення і функцій концентрацій сорбованої речовини у шаруватих

фільтрах є саме монотонно спадними функціями. Проте за врахування наведених доповнень до алгоритму цей метод застосовних для знаходження нулів довільних неперервних функцій.

6.2.8.2. Побудова та дослідження розв'язку рівняння $\sup_{x \in \Omega_j} c_2^{(j)}(x, \tau_*^{(j)}) = N_j$

Метод на основі композиції методу простої ітерації та модифікації методу дихотомії був застосований до розв'язання рівняння (6.65) за умови $a_1 > a_2 > a_3$, тобто коли найменш інтенсивні сорбційні процеси відбуваються у пористому шарі Ω_3 , і концентрації насичення для різних макроелементів є приблизно однаковими. Тоді достатньо знайти $\tau_*^{(3)}$ для встановлення часу насичення всього фільтра.

На рис. 6.25 показані розподіли часу $\tau_*^{(3)}$, за який відбувається насичення забрудненням третього шару фільтра, для різних значень відношення коефіцієнтів концентраційної залежності хімічних потенціалів в станах 2 і 3 $\lambda^{(2)} = 0,5; 1; 2; 3$ (криві 1-4) при $\lambda^{(1)} = 1,5$, тобто залежно від величини стрибка шуканої функції на другій поверхні контакту. Тут прийнято наступні значення параметрів задачі $d_1 = 1; d_2 = 0,01; d_3 = 0,02; a_1 = 1; a_2 = 1,1; a_3 = 1,2; v_1 = 1; v_2 = 0,1; v_3 = 0,01$.

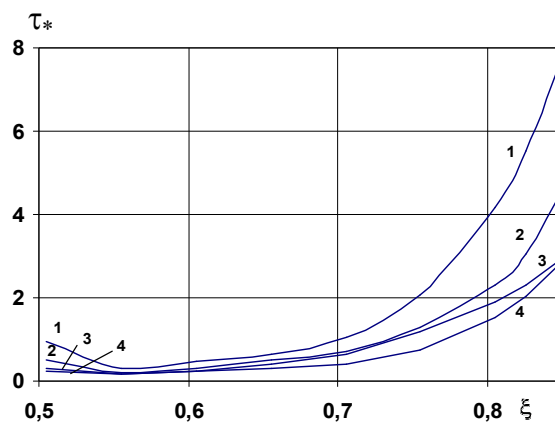


Рис. 6.25. Час насичення для різних значень відношення коефіцієнтів концентраційної залежності хімічних потенціалів в станах 1 і 2

Зазначимо, що час насичення збільшується в околі границі контакту і значно зростає біля нижньої границі фільтруючої установки (рис. 6.26).

У табл. 6.13 показано як впливають коефіцієнт сорбції і швидкість конвективного перенесення у третьому шарі на максимальний час насичення тришарового фільтра [168]. Розрахунки проводились для тих самих значень параметрів задачі, що і рис. 6.21.

Таблиця 6.13. Час насичення фільтра забрудненням за різних значень коефіцієнта сорбції та швидкості конвективного перенесення у третьому шарі

a_3	$\tau_*^{(3)}$	v_3	$\tau_*^{(3)}$
0.01	1.6209	0.01	1.6209
0.05	1.1409	0.05	1.1409
0.1	1.1409	0.1	0.9914
0.25	0.6011	0.25	0.4809
0.5	1.5009	0.5	0.3209
0.65	1.5009	0.65	0.2809
0.85	0.8409	0.85	0.2019
1	1.6809	1	0.1809
1.25	1.3809	1.25	0.1208
1.5	0.9009	1.5	0.0209
1.75	0.9609	1.75	0.0112
2	1.9209	2	0.0081
2.25	1.9209	2.25	0.0073
2.5	1.9209	2.5	0.0064

Зазначимо, що зі зростання швидкості конвективного переносу v_3 час насичення $\tau_*^{(3)}$ зменшується (див. друга половина табл. 6.13 зверху вниз).

6.3. Системний підхід до математичного опису процесів перенесення домішкових речовин у тілах складної та складеної структури

У попередніх пунктах ми розглянули контактну-крайову задачу конвективної дифузії у тришаровому пористому тілі, коли відомо сталі значення шуканої функції на зовнішніх границях. При цьому на одній з границь без втрати загальності можна накладати нульову крайову умову, оскільки простою заміною завжди можна звести до такої постановки задачі [209]. Проте існують такі об'єкти, для яких виходячи з фізичних міркувань, неможливо коректно накласти граничні або початкові умови, навіть в достатньо загальному вигляді. Це спричинено складністю та недостатністю проведення експериментальних досліджень, і відповідно відсутній аналіз та необхідні узагальнення. Тоді нам потрібно розробляти такі підходи, які би враховували як особливості математичного опису на мезо- або мікро-рівні, тобто врахування мікроструктури матеріалу макроелемента при побудові вихідних рівнянь моделі, характеристики макроелементів (наприклад, геометричні), взаємовплив процесів між макроелементами (зокрема, умови контакту), так і можливість коректного формулювання крайових задач та особливості застосування методів розв'язування сформульованих задач [225].

Такі проблеми виникають при визначенні оптимальних режимів роботи вузлів пристроїв та агрегатів, елементи яких виготовлені з композитних матеріалів, встановлення часу насичення шаруватих промислових насипних фільтрів, що скла-

даються з зернистих засипок різних фільтраційних властивостей та багато інших. Зокрема, на сьогоднішній день в науковій літературі не запропоновано фізично обґрунтованої граничної умови на нижній границі насипного фільтра води [99].

Тому пропонуємо вирішення окреслених проблем в комплексі завдяки розробці системного підходу до математичного опису процесів перенесення в складних і складених системах за наявності експериментальних даних на одній з границь тіла. І застосувати цей підхід до математичного опису процесів у тришарових фільтрах води (тришарове пористе тіло).

6.3.1. Системний підхід до опису складних та складених систем за відомих експериментальних даних на одній з границь тіла

Запропонований системний підхід до опису складних та складених систем ґрунтується на синтезі класичного підходу до математичного моделювання [211, 247, 277] зв'язаних процесів різної фізичної природи в неоднорідних середовищах [22, 78, 79] для добре структурованої частини системи та некласичного статистичного підходу до моделювання невідомої граничної умови на основі експериментальних даних. Структурна схема підходу показана на рис. 6.26.

Системний підхід складається з трьох частин (блоків), кожен з яких містить етапи та підетапи (кроки). Перша частина підходу – класичний підхід до математичного моделювання взаємозв'язаних процесів у неоднорідних середовищах, складається з етапів:

Етап I. Опис системи, що поділяється на такі підетапи [162]:

Крок 1. Визначення об'єкта дослідження та його структури, процесів, що протікають в об'єкті; встановлення умов, обмежень, взаємовпливів та взаємозв'язків, зумовлених як фізичними, хімічними, соціальними і т.п. законами, так і цілями дослідження.

Крок 2. Побудова моделі. На основі уявлень та методів термодинаміки нерівноважних процесів, фізики і механіки суцільного середовища, методів аналітичної хімії, біохімії, тощо, будуються вихідні співвідношення моделі, яка включає балансові рівняння енергії, тепла та імпульсу для фази в цілому, рівняння балансу маси для кожної компоненти фази і для фази в цілому, отримані кінетичні рівняння та рівняння стану, рівняння балансу ентропії та необхідні обмеження.

Крок 3. Лінеаризація модельних співвідношень, зокрема, рівнянь стану та кінетичних співвідношень.

Крок 4. Побудова ключових моделей. Вибір в якості розв'язуючих функцій температури, густини фази, вектора переміщення точок континуумів центрів мас та концентрацій компонент дає можливість отримати часткові варіанти математичної моделі взаємозв'язаних теплових, механічних та гетеродифузійних процесів в багатофазному багатокомпонентному (пористому) середовищі за умов термодинамічної рівноваги щодо процесів переходу частинок між різними станами. Різні варіанти термодинамічної рівноваги приводять до різних ключових моделей.

Крок 5. Аналіз додаткових умов та обмежень на процеси для вибору часткового варіанту та вибір ключової моделі відповідно до умов, що вимагаються.

Зазначимо, що математична модель конвективної дифузії, що супроводжується сорбцією мігруючих частинок на скелет, у тришаровому пористому тілі побудована п. 6.1.1-6.1.5 цього розділу.

Етап II. Формулювання контактної-крайової задачі та побудова розв'язку сформульованої задачі, що поділяється на 6 підетапів [162].

Крок 1. Постановка контактної-крайової задачі. На основі отриманої ключової моделі конкретизуємо систему рівнянь з урахуванням симетрії, розмірності тощо, накладаємо крайові умови та умови контакту на границях розділу фаз.

Припустимо, що досліджуємо перенесення забруднення з урахуванням процесів сорбції через тришаровий фільтр води – тришарове пористе тіло. Вважаємо, що процеси, які протікають в системі, є ізотермічними та адіабатичними. Тоді у випадку одновимірної (вертикальної) конвективної дифузії процес масоперенесення домішкових частинок в тришаровому пористому шарі описується системами рівнянь (6.24), на границях контакту пористих підшарів виконуються умови неідеального контакту для функції концентрації частинок у поровому розчині (6.27), (6.28). У початковий момент часу накладені умови (6.26). І на верхній границі тіла $x = 0$ підтримується стале значення концентрації – перша умова (6.25). Якщо відома умова на іншій границі тіла, то накладаємо її, і отримуємо коректну постановку контактної-крайової задачі масоперенесення.

Проте існують випадки, коли неможливо встановити адекватні граничні умови. Для вирішення цієї проблеми за можливості отримати експериментальні дані розроблено статистичний підхід до моделювання невідомої граничної умови.

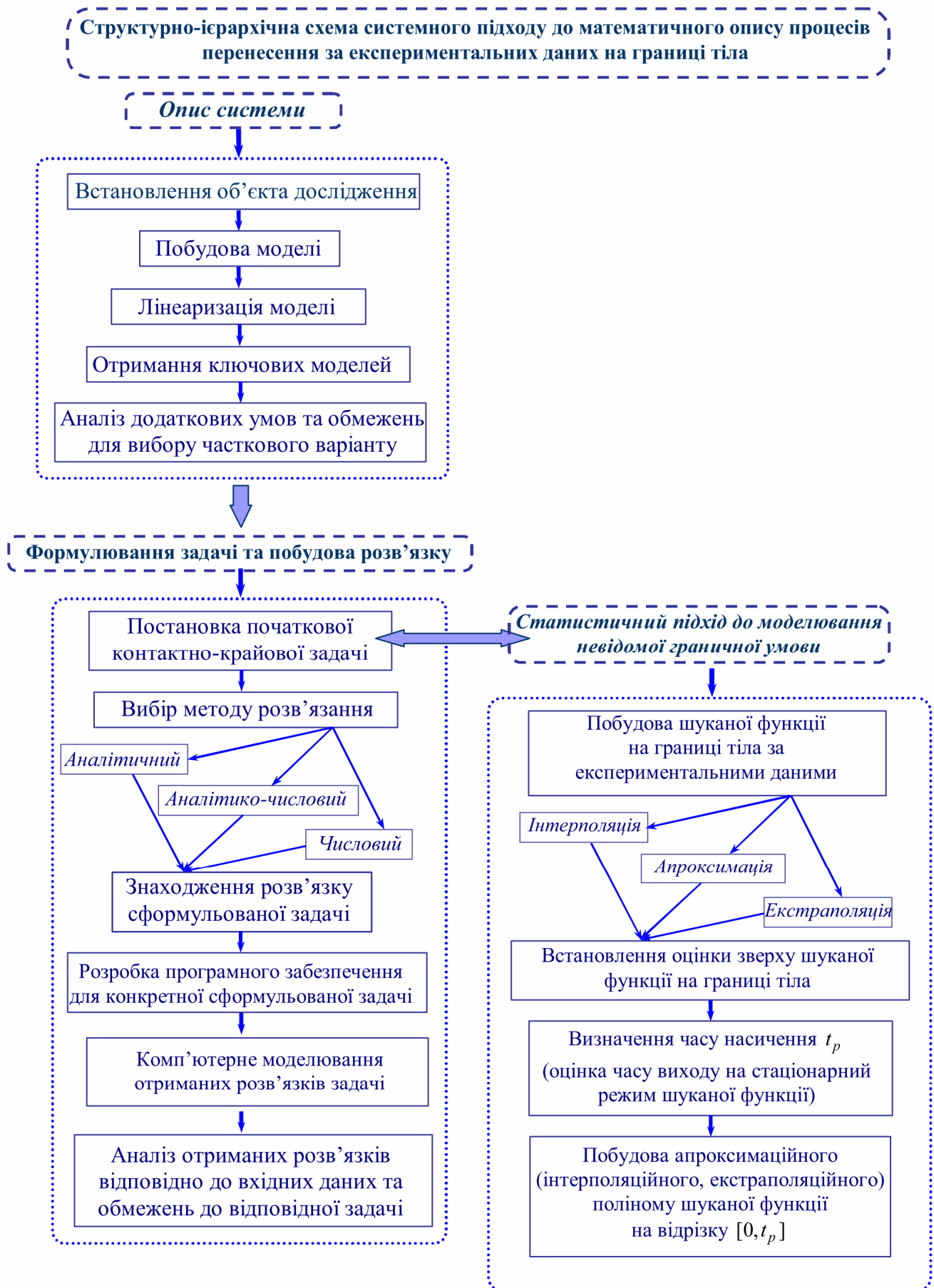


Рис. 6.26. Структурно-ієрархічна схема системного підходу

Етап III. Статистичний підхід до моделювання невідомої граничної умови на основі експериментальних даних [162].

Для встановлення оцінки значення шуканої функції на поверхні тіла врахуємо наступне. Функція концентрації частинок на нижній границі фільтра є неперервною або кусково-неперервною функцією часової змінної, тобто належить простору $PC[0;T]$, $t < T < \infty$. [104]. При цьому для малих часів вона рівна нулю (що пояснюється необхідністю певного часу для проходження домішок через фільтр та ефективною роботою фільтра). Також розглядається випадок, коли шукана функція концентрації на межі тіла має стаціонарний режим (для фільтрів завжди існує час насичення, після якого сорбційні властивості фільтра втрачаються). Тоді поведінку цієї функції часу $F(t)$ - функція концентрації частинок на нижній границі тіла, схематично можна зобразити так (рис. 6.27) [9]

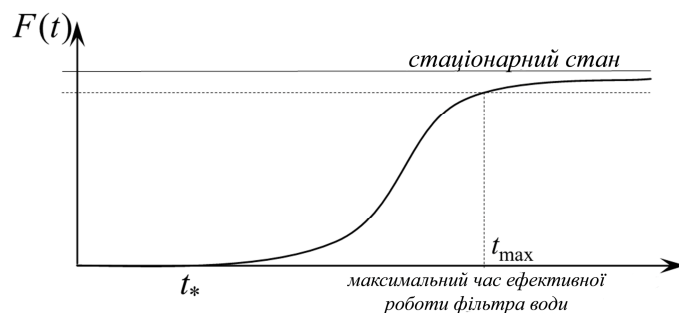


Рис. 6.27. Схематична поведінка функції $F(t)$

Нехай відомо (або можна виміряти) значення функції концентрації на нижній границі $x = x_0$ в певні моменти часу:

t	t_1	t_2	t_3	t_4	t_5	...	t_n
$F(t)$	0	0	0	$F(t_4)$	$F(t_5)$...	$F(t_n)$

В нашому випадку $t_* = t_3$ (див. рис. 6.27)

Зазначимо також, що якщо було проведено кілька серій вимірювань у тих самих часових точках, то значення функції $F(t)$ в точках t_j визначаються як усереднені значення (рис. 6.28):

$$F(t_j) = \frac{1}{K_j} \sum_{i=1}^{K_j} F^{(i)}(t_j), \quad j = 1, \dots, n,$$

де i - номер серії експерименту, $i = 1, \dots, K_j$, K_j - кількість вимірів в точці t_j .

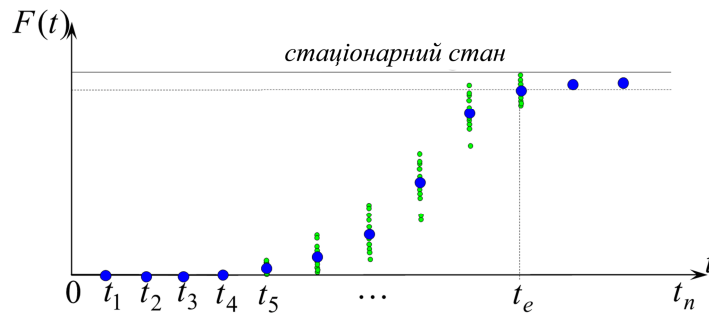


Рис. 6.28. Схематичне представлення серій вимірювань і відповідні середні значення

Крок 1. Вибір методу побудови функції на нижній границі тіла за значеннями $F(t)$ в точках t_i . Побудова інтерполяційної функції або апроксимаційної або екстраполяційної функції [122, 164].

Наприклад, маючи достатній набір експериментальних (вимірних) даних, будуємо інтерполяційну функцію. Для задачі конвективної дифузії у тришаровому фільтрі використана форма Лагранжа для інтерполювання на відрізку $[0, t_e]$ у вигляді полінома [169]:

$$F(t) = P_n(t) = \sum_{k=0}^n F(t_k) \frac{(t-t_0)(t-t_1)\dots(t-t_n)}{(t_k-t_0)(t_k-t_1)\dots(t_k-t_n)}, \quad (6.67)$$

при цьому похибка інтерполювання функції $F(t)$ поліномом $P_n(t)$ є такою

$$|F(t) - P_n(t)| \leq \frac{\|F^{(n+1)}(t)\|}{(n+1)!} \cdot \|\Pi_n(t)\|, \quad \Pi_n(t) = \prod_{k=0}^n (t-t_k).$$

У просторі дійсних неперервних функцій відповідні норми набувають вигляду

$$\|F^{(n+1)}(t)\| = \max_{t \in [t_0; t_n]} |F^{(n+1)}(t)|, \quad \|\Pi_n(t)\| = \max_{t \in [t_0; t_n]} |\Pi_n(t)|.$$

Якщо відома додаткова інформація про поведінку функції $F(t)$, тоді застосовуємо методи апроксимації, використовуючи, наприклад, метод найменших квадратів для оптимального визначення параметрів функції наближення. У разі недостатньої кількості експериментальних даних використовуємо, наприклад, прості покрокові методи екстраполяції для пошуку точкових оцінок з довірчими інтервалами [135]

$$F^*(t_i) = \bar{F}_i \pm t_a^{(i)} \sigma_i \sqrt{1 + \frac{1}{i}}, \quad i = n+1, n+2, \dots,$$

де $t_a^{(i)}$ - табличне значення L -критерію Стьюдента з $i-1$ ступенями вільності [135],
 σ_i - середні квадратичні відхилення:

$$\sigma_i = \sqrt{\frac{\sum_{k=1}^i F(t_k) - \bar{F}_i}{i-1}},$$

\bar{F}_i - середні значення функції $F(t)$ за множиною i даних, причому \bar{F}_n - середнє значення за множиною всіх можливих значень $F(t_k)$, тобто по вибірці.

Зауважимо, що правий кінець відрізка інтерполяції - точка t_e , є невідомою. Відповідно невідомо момент часу припинення експериментальної серії. Враховуючи мету дослідження тобто встановлення параметрів роботи фільтра, використаємо умову існування часу насичення фільтра, тобто втрату сорбційної здатності [130]. Після часу насичення t_p , який теж є невідомим, в тілі відбувається лише процес конвективної дифузії частинок забруднення, а процес очищення забрудненого розчину припиняється. Відповідно потрібно припинити експериментальні вимірювання та завершити роботу фільтра [90].

Крок 2. Для оцінки зверху функції концентрації домішки на нижній границі тіла та визначення оціночного часу насичення t_p розв'язуємо спрощену задачу конвективної дифузії в тришаровому тілі за контактних (6.27) (6.28), початкових (6.26) та першої граничної (6.25) умов і граничної умови на дифузійний потік, запропонованою А.Бомбою та А.Сафоником [132], проте ненульової. А саме, на границі $x = x_0$ підтримується стале значення дифузійного потоку

$$\left. \frac{\partial c_{1est}^{(3)}(t, x)}{\partial x} \right|_{x=x_0} = c_* \equiv const, \quad (6.68)$$

де $c_{1est}^{(3)}(t, x)$ - функція концентрації домішок у третьому підшарі, яка є розв'язком спрощеної задачі.

У роботі [209] зазначено, що умови типу (6.68) відповідають випадку, коли конвективна складова потоку є нехтовно малою, процес перенесення через поверхню відбувається дифузійним шляхом і густина потоку є сталою на всьому часовому проміжку.

Рівняння конвективної дифузії без врахування сорбційних процесів мають вигляд

в області Ω_1 ($x \in \Omega_1$) $\Omega_1 =]0; x_1[$:

$$\frac{\partial c_{1est}^{(1)}(t, x)}{\partial t} = d_1 \frac{\partial^2 c_{1est}^{(1)}(t, x)}{\partial x^2} - v_1 \frac{\partial c_{1est}^{(1)}(t, x)}{\partial x}, \quad (6.69a)$$

в області Ω_2 ($x \in \Omega_2$) $\Omega_2 =]x_1; x_2[$:

$$\frac{\partial c_{1est}^{(2)}(t, x)}{\partial t} = d_2 \frac{\partial^2 c_{1est}^{(2)}(t, x)}{\partial x^2} - v_2 \frac{\partial c_{1est}^{(2)}(t, x)}{\partial x}, \quad (6.69b)$$

в області Ω_3 ($x \in \Omega_3$) $\Omega_3 =]x_2; x_0[$:

$$\frac{\partial c_{1est}^{(3)}(t, x)}{\partial t} = d_3 \frac{\partial^2 c_{1est}^{(3)}(t, x)}{\partial x^2} - v_3 \frac{\partial c_{1est}^{(3)}(t, x)}{\partial x}. \quad (6.69b)$$

Тут $c_{1est}^{(i)}(t, x)$ - концентрація домішкових частинок у розчині, які мігрують за відсутності сорбційних процесів, в i -му макроелементі.

Крок 3. Визначення t_p , тобто часу виходу на стаціонарний режим (визначення концентрації з певною точністю) Нехай різниця між концентраціями в біжучий момент часу і часу насичення t_p , менше наперед заданого числа ε

$$\min_{t > 0} |c_{1est}^{(3)}(t, x_0) - c_{1est}^{(3)}(t_p, x_0)| < \varepsilon. \quad (6.70)$$

Крок 4. Побудова інтерполяційного (апроксимаційного, екстраполяційного) полінома на відрізку $[0, t_p]$, тобто знаходження наближеної функції $F(t, t_p)$ де $t_n = t_p$.

Тоді гранична умова на нижній поверхні тіла набуває вигляду.

$$c_1^{(3)}(t, x) \Big|_{x=x_0} = F(t, t_p). \quad (6.71)$$

Далі повертаємось на Етап II, Крок 1, коректно сформулювавши контактну-крайову задачу з наближеною граничною умовою першого роду на нижній поверхні тіла.

Крок 2. Вибір методу розв'язання задачі: аналітичний, аналітико-числовий, числовий.

Крок 3. Знаходження розв'язку сформульованої задачі.

Крок 4. Розробка програмного забезпечення для конкретного розв'язку відповідної контактної-крайової задачі [108].

Крок 5. Комп'ютерне моделювання отриманих розв'язків задачі.

Крок 6. Аналіз отриманих розв'язків відповідно до вхідних даних та обмежень до відповідної задачі.

Розроблений системний підхід застосовано до задачі перенесення забруднення через тришаровий фільтр води, коли наявні дані вимірювання концентрації забруднення на його нижній границі.

6.3.2. Задача конвективної дифузії домішки з урахуванням сорбційних процесів у тришаровому пористому тілі за наявності даних вимірювань концентрації на нижній поверхні тіла

Розглянемо задачу конвективної дифузії домішкової речовини, яка сорбується на скелет, у шарі безрозмірної товщини x_0 , що складається з трьох пористих структурних елементів тіла - областей Ω_i , $i = \overline{1,3}$ з товщинами x_1 , $x_2 - x_1$ та $x_0 - x_2$ (рис. 6.2). Такі процеси описують системи рівнянь (6.24). На границях контакту пористих підшарів реалізуються умови неідеально контакту на функцію концентрації домішок у поровому розчині, в якому мігрують частинки, тобто виконуються умови (6.27), (6.28).

Вважаємо, що у початковий момент часу в тілі відсутня домішкова речовина – умови (6.26). На поверхні $x = 0$ діє стале джерело маси для домішкових частинок потужності c_0 - перша гранична умова (6.25), а на границі $x = x_0$ задана наближена гранична умова (6.71), тобто концентрація мігруючих частинок на цій поверхні описується інтерполяційним (апроксимаційним або екстраполяційним) поліномом $F(t, t_p)$.

Розв'язувати контактну-крайову задачу (6.24)-(6.28), (6.71) будемо аналогічно до попереднього випадку (п. 6.2.2). Проінтегруємо другі рівняння систем (6.24) і отримаємо формулу (6.29) для знаходження концентрацій домішкових частинок, сорбованих на скелеті кожного структурного елемента тіла. Розв'язок диференціальних рівнянь в частинних похідних, що описують процеси масоперенесення частинок з поровим розчином – перші рівняння систем (6.24), знаходимо за допомогою інтегральних перетворень за просторовою змінною окремо в контактуючих областях. Для цього доозначуємо значення шуканих функцій на границях контакту (6.30), вводячи у розгляд функції часу $g_1(t)$ на границі $x = x_1$ і $g_2(t)$ на поверхні $x = x_2$ [13].

В областях Ω_1 і Ω_2 одержимо крайові задачі (6.32) і (6.36) відповідно. Їхні розв'язки мають вигляд (6.34), (6.35) і (6.38), (6.40). Проте функції $g_1(t)$ і $g_2(t)$ залишаються невідомими.

Розглянемо крайову задачу в третій області $\Omega_3 =]x_2; x_0[$, враховуючи умови (6.31б) і (6.69):

$$\frac{\partial c_1^{(3)}(\tau, x)}{\partial \tau} = d_3 \frac{\partial^2 c_1^{(3)}(\tau, x)}{\partial x^2} - v_3 \frac{\partial c_1^{(3)}(\tau, x)}{\partial x} - a_3 c_1^{(3)}(\tau, x) \quad (6.72)$$

$$c_1^{(3)}(\tau, x) \Big|_{x=x_2} = g_2(\tau), \quad c_1^{(3)}(\tau, x) \Big|_{x=x_0} = F(\tau, \tau_p), \quad c_1^{(3)}(\tau, x) \Big|_{\tau=0} = 0. \quad (6.73)$$

Застосуємо скінченне інтегральне перетворення з зсувом (6.42), (6.43) для знаходження розв'язку задачі (6.72), (6.73).

Перетворення (6.42) від виразу $d_3 \frac{\partial^2 c_1^{(3)}}{\partial x^2} - v_3 \frac{\partial c_1^{(3)}}{\partial x}$ з урахуванням умови на границі $x = x_0$, тобто (6.71), набуває форми

$$\int_{x_2}^{x_0} \left(d_3 \frac{\partial^2 c_1^{(3)}(\tau, x)}{\partial x^2} - v_3 \frac{\partial c_1^{(3)}(\tau, x)}{\partial x} \right) \exp\left(\frac{-v_3(x-x_2)}{2d_3} \right) \sin(y_k(x-x_2)) dx =$$

$$= d_3 y_k g_2(\tau) + (-1)^k \frac{v_3}{2} e^{\frac{v_3(x_0-x_2)}{2d_3}} F(\tau, \tau_p) - \left(y_k^2 d_3 + \frac{v_3^2}{4d_3} \right) \bar{c}_3(\tau, k).$$

Тоді крайова задача (6.72), (6.73) в зображеннях матиме вигляд

$$\frac{\partial \bar{c}_3(\tau, k)}{\partial \tau} = -b_{k3} \bar{c}_3(\tau, k) + d_3 y_k g_2(\tau) + (-1)^k \frac{v_3}{2} e^{\frac{v_3(x_0-x_2)}{2d_3}} F(\tau, \tau_p),$$

$$\bar{c}_3(\tau, k) \Big|_{\tau=0} = 0,$$

розв'язок якої запишемо так, як і у попередніх випадках

$$\bar{c}_3(\tau, k) = e^{-b_{k3}\tau} \int_0^\tau e^{b_{k3}\tau'} \left(d_3 y_k g_2(\tau') + (-1)^k \frac{v_3}{2} e^{\frac{v_3(x_0-x_2)}{2d_3}} F(\tau', \tau_p) \right) d\tau'. \quad (6.74)$$

Якщо функція $F(\tau, \tau_p)$ побудована у вигляді полінома, то формулу (6.74) можна конкретизувати.

Нехай $F(\tau, \tau_p)$ - інтерполяційний поліном Лагранжа (6.67). Тоді можемо обчислити інтеграл

$$I_* = \int_0^\tau e^{b_{k3}\tau'} F(\tau', \tau_p) d\tau' = \sum_{l=0}^n \frac{F(\tau_l)}{(\tau_l - \tau_0) \dots (\tau_l - \tau_n)} \int_0^\tau (\tau' - \tau_0)(\tau' - \tau_1) \dots (\tau' - \tau_n) e^{b_{k3}\tau'} d\tau'.$$

Враховуючи, що [240]

$$\int P(x) e^{\alpha x} dx = \frac{e^{\alpha x}}{\alpha} \sum_{l=0}^n \frac{(-1)^l}{\alpha^l} \frac{d^l}{dx^l} P(x), \quad (6.75)$$

де $P(x)$ - поліном степені n , маємо

$$\begin{aligned} \int_0^{\tau} (\tau' - \tau_0)(\tau' - \tau_1)\dots(\tau' - \tau_n) e^{b_{k3}\tau'} d\tau' &= \frac{e^{b_{k3}\tau}}{b_{k3}} \sum_{s=0}^n \frac{(-1)^s}{b_{k3}^s} \frac{d^s}{d\tau'^s} P_*(\tau') \Big|_0^{\tau} = \\ &= \frac{e^{b_{k3}\tau}}{b_{k3}} \sum_{s=0}^n \frac{(-1)^s}{b_{k3}^s} \frac{d^s}{d\tau^s} P_*(\tau) - \frac{1}{b_{k3}} \sum_{s=0}^n \frac{(-1)^s}{b_{k3}^s} \frac{d^s}{d\tau'^s} P_*(\tau') \Big|_{\tau'=0}, \end{aligned}$$

де $P_*(\tau') = (\tau' - \tau_0)(\tau' - \tau_1)\dots(\tau' - \tau_n)$;

$$\frac{dP_*(\tau)}{d\tau} = (\tau - \tau_1)\dots(\tau - \tau_n) + (\tau - \tau_0)(\tau - \tau_2)\dots(\tau - \tau_n) + \dots + (\tau - \tau_0)\dots(\tau - \tau_{n-1});$$

$$\left. \frac{dP_*(\tau')}{d\tau'} \right|_{\tau'=0} = (-1)^n \tau_1 \dots \tau_n + (-1)^n \tau_0 \tau_2 \dots \tau_n + \dots + (-1)^n \tau_0 \tau_1 \dots \tau_{n-1}.$$

$$\frac{d^2 P_*(\tau)}{d\tau^2} = (\tau - \tau_2)\dots(\tau - \tau_n) + (\tau - \tau_1)(\tau - \tau_3)\dots(\tau - \tau_n) + \dots + (\tau - \tau_0)\dots(\tau - \tau_{n-2});$$

$$\left. \frac{d^2 P_*(\tau')}{d\tau'^2} \right|_{\tau'=0} = (-1)^{n-1} \tau_2 \dots \tau_n + (-1)^{n-1} \tau_1 \tau_3 \dots \tau_n + \dots + (-1)^{n-1} \tau_0 \tau_1 \dots \tau_{n-2}$$

і тому подібне.

Тоді (6.74) набуде вигляду

$$\begin{aligned} \bar{c}_3(\tau, k) &= e^{-b_{k3}\tau} \int_0^{\tau} e^{b_{k3}\tau'} d_3 y_k g_2(\tau') d\tau' + (-1)^k \frac{v_3}{2b_{k3}} e^{\frac{v_3(x_0 - x_2)}{2d_3}} \times \\ &\times \sum_{l=0}^n \frac{F(\tau_l)}{(\tau_l - \tau_0)\dots(\tau_l - \tau_n)} \left(\sum_{s=0}^n \frac{(-1)^s}{b_{k3}^s} \frac{d^s}{d\tau^s} P_*(\tau) - e^{-b_{k3}\tau} \sum_{s=0}^n \frac{(-1)^s}{b_{k3}^s} \frac{d^s}{d\tau'^s} P_*(\tau') \Big|_{\tau'=0} \right). \end{aligned} \quad (6.74a)$$

Нехай $F(\tau, \tau_p)$ - апроксимаційний поліном виду

$$F(\tau, \tau_p) = \sum_{l=0}^n a_l \tau^l.$$

Тоді обчислюємо інтеграл I_{**} з урахуванням співвідношення (6.75):

$$\begin{aligned} I_{**} &= \int_0^{\tau} e^{b_{k3}\tau'} F(\tau', \tau_p) d\tau' = \sum_{l=0}^n a_l \int_0^{\tau} \tau'^l e^{b_{k3}\tau'} d\tau' = \\ &= \frac{e^{b_{k3}\tau}}{b_{k3}} \sum_{l=0}^n \frac{(-1)^l}{b_{k3}^l} \frac{d^l}{d\tau'^l} P_{**}(\tau') \Big|_0^{\tau} = \frac{e^{b_{k3}\tau}}{b_{k3}} \sum_{l=0}^n \frac{(-1)^l}{b_{k3}^l} \frac{d^l}{d\tau^l} P_{**}(\tau) - \frac{1}{b_{k3}} \sum_{l=0}^n \frac{(-1)^l}{b_{k3}^l} l a_l, \end{aligned}$$

тут $P_{**}(\tau) = \sum_{l=0}^n a_l \tau^l$; $\frac{dP_{**}(\tau)}{d\tau} = \sum_{l=1}^n l a_l \tau^{l-1}$, $\frac{d^2 P_{**}(\tau)}{d\tau^2} = \sum_{l=2}^n l(l-1) a_l \tau^{l-2}$, ..., $\frac{d^n P_{**}(\tau)}{d\tau^n} = n! a_n$.

Тоді (6.74) набуде вигляду

$$\begin{aligned} \bar{c}_3(\tau, k) = & e^{-b_{k3}\tau} \int_0^{\tau} e^{b_{k3}\tau'} d_3 y_k g_2(\tau') d\tau' + (-1)^k \frac{v_3}{2b_{k3}} e^{\frac{v_3(x_0-x_2)}{2d_3}} \times \\ & \times \left(e^{b_{k3}\tau} \sum_{l=0}^n \frac{(-1)^l}{b_{k3}^l} \frac{d^l}{d\tau^l} P_{**}(\tau) - \sum_{l=0}^n \frac{(-1)^l}{b_{k3}^l} l a_l \right). \end{aligned} \quad (6.746)$$

Після оберненого перетворення (6.43) розв'язок задачі (6.72), (6.73) з врахуванням (6.74) отримаємо у вигляді

$$\begin{aligned} c_1^{(3)}(\tau, x) = & \frac{2}{x_0 - x_2} \exp\left(\frac{v_3(x-x_2)}{2d_3}\right) \sum_{k=1}^{\infty} \sin(y_k(x-x_2)) \times \\ & \times e^{-b_{k3}\tau} \int_0^{\tau} e^{b_{k3}\tau'} \left(d_3 y_k g_2(\tau') + (-1)^k \frac{v_3}{2} e^{\frac{v_3(x_0-x_2)}{2d_3}} F(\tau', \tau_p) \right) d\tau', \end{aligned} \quad (6.76)$$

зокрема, якщо функція $F(\tau, \tau_p)$ побудована у вигляді інтерполяційного полінома Лагранжа, одержимо

$$\begin{aligned} c_1^{(3)}(\tau, x) = & \frac{2}{x_0 - x_2} \exp\left(\frac{v_3(x-x_2)}{2d_3}\right) \sum_{k=1}^{\infty} \sin(y_k(x-x_2)) \left(e^{-b_{k3}\tau} \int_0^{\tau} e^{b_{k3}\tau'} d_3 y_k g_2(\tau') d\tau' + \right. \\ & \left. + (-1)^k \frac{v_3}{2b_{k3}} e^{\frac{v_3(x_0-x_2)}{2d_3}} \sum_{l=0}^n \frac{F(\tau_l)}{(\tau_l - \tau_0) \dots (\tau_l - \tau_n)} \left(\sum_{s=0}^n \frac{(-1)^s}{b_{k3}^s} \frac{d^s}{d\tau^s} P_{**}(\tau) - e^{-b_{k3}\tau} \sum_{s=0}^n \frac{(-1)^s}{b_{k3}^s} \frac{d^s}{d\tau^s} P_{**}(\tau) \right) \Big|_{\tau=0} \right). \end{aligned} \quad (6.76a)$$

а для представлення функції $F(\tau, \tau_p)$ апроксимаційним поліномом маємо

$$\begin{aligned} c_1^{(3)}(\tau, x) = & \frac{2}{x_0 - x_2} \exp\left(\frac{v_3(x-x_2)}{2d_3}\right) \sum_{k=1}^{\infty} \sin(y_k(x-x_2)) \left(e^{-b_{k3}\tau} \int_0^{\tau} e^{b_{k3}\tau'} d_3 y_k g_2(\tau') d\tau' + \right. \\ & \left. + (-1)^k \frac{v_3}{2b_{k3}} e^{\frac{v_3(x_0-x_2)}{2d_3}} \left(e^{b_{k3}\tau} \sum_{l=0}^n \frac{(-1)^l}{b_{k3}^l} \frac{d^l}{d\tau^l} P_{**}(\tau) - \sum_{l=0}^n \frac{(-1)^l}{b_{k3}^l} l a_l \right) \right). \end{aligned} \quad (6.76b)$$

Для знаходження функцій $g_1(\tau')$ та $g_2(\tau')$ використаємо контактні умови рівності потоків мас на обох границях поділу областей (6.276) та (6.286). Підставимо вирази для концентрацій $c_1^{(j)}(\tau, x)$ та їх похідних у точках $x = x_1$, та $x = x_2$ у співвідношення (6.276) і (6.286) відповідно. Тоді одержимо систему двох інтегральних рівнянь

$$\begin{aligned}
& \frac{2d_1^2}{x_1} e^{\frac{v_1 x_1}{2d_1}} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n y_n^2 e^{-b_{n1}\tau} \int_0^{\tau} e^{b_{n1}\tau'} \left(c_0 + \frac{(-1)^{n+1}}{\lambda^{(1)}} e^{-\left(\frac{v_1 x}{2d_1}\right)} g_1(\tau') \right) d\tau' = \\
& = \frac{2d_2^2}{x_2 - x_1} \sum_{m=1}^{\infty} y_m^2 e^{-b_{m2}\tau} \int_0^{\tau} e^{b_{m2}\tau'} \left(g_1(\tau') + \frac{(-1)^{m+1}}{\lambda^{(2)}} g_2(\tau') \right) d\tau'; \\
& \frac{2d_2^2}{x_2 - x_1} e^{\frac{v_2(x_2-x_1)}{2d_2}} \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^m y_m^2 e^{-b_{m2}\tau} \int_0^{\tau} e^{b_{m2}\tau'} \left(g_1(\tau') + \frac{(-1)^{m+1}}{\lambda^{(2)}} g_2(\tau') \right) d\tau' = \\
& = \frac{2d_3}{x_0 - x_2} \sum_{k=1}^{\infty} y_k e^{-b_{k3}\tau} \int_0^{\tau} e^{b_{k3}\tau'} y_k g_2(\tau') d\tau' + \frac{v_3}{x_0 - x_2} e^{\frac{v_3(x_0-x_2)}{2d_3}} \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k y_k e^{-b_{k3}\tau} \int_0^{\tau} e^{b_{k3}\tau'} F(\tau', \tau_p) d\tau'. \quad (6.77)
\end{aligned}$$

У випадку знаходження функції $F(\tau, \tau_p)$ у вигляді інтерполяційного полінома Лагранжа друге рівняння системи (6.77) набуде форму

$$\begin{aligned}
& \frac{2d_2^2}{x_2 - x_1} e^{\frac{v_2(x_2-x_1)}{2d_2}} \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^m y_m^2 e^{-b_{m2}\tau} \int_0^{\tau} e^{b_{m2}\tau'} \left(g_1(\tau') + \frac{(-1)^{m+1}}{\lambda^{(2)}} g_2(\tau') \right) d\tau' = \\
& = \frac{2d_3}{x_0 - x_2} \sum_{k=1}^{\infty} y_k e^{-b_{k3}\tau} \int_0^{\tau} e^{b_{k3}\tau'} y_k g_2(\tau') d\tau' + \\
& + \frac{v_3}{x_0 - x_2} e^{\frac{v_3(x_0-x_2)}{2d_3}} \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \frac{y_k}{b_{k3}} \sum_{l=0}^n \frac{F(\tau_l)}{(\tau_l - \tau_0) \dots (\tau_l - \tau_n)} \times \\
& \times \left(\sum_{s=0}^n \frac{(-1)^s}{b_{k3}^s} \frac{d^s}{d\tau^s} P_*(\tau) - e^{-b_{k3}\tau} \sum_{s=0}^n \frac{(-1)^s}{b_{k3}^s} \frac{d^s}{d\tau'^s} P_*(\tau') \Big|_{\tau'=0} \right). \quad (6.77a)
\end{aligned}$$

а для представлення функції $F(\tau, \tau_p)$ апроксимаційним поліномом маємо

$$\begin{aligned}
& \frac{2d_2^2}{x_2 - x_1} e^{\frac{v_2(x_2-x_1)}{2d_2}} \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^m y_m^2 e^{-b_{m2}\tau} \int_0^{\tau} e^{b_{m2}\tau'} \left(g_1(\tau') + \frac{(-1)^{m+1}}{\lambda^{(2)}} g_2(\tau') \right) d\tau' = \\
& = \frac{2d_3}{x_0 - x_2} \sum_{k=1}^{\infty} y_k e^{-b_{k3}\tau} \int_0^{\tau} e^{b_{k3}\tau'} y_k g_2(\tau') d\tau' + \frac{v_3}{x_0 - x_2} e^{\frac{v_3(x_0-x_2)}{2d_3}} \times \\
& \times \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \frac{y_k}{b_{k3}} \left(\sum_{l=0}^n \frac{(-1)^l}{b_{k3}^l} \frac{d^l}{d\tau^l} P_{**}(\tau) - e^{-b_{k3}\tau} \sum_{l=0}^n \frac{(-1)^l}{b_{k3}^l} l a_l \right). \quad (6.77б)
\end{aligned}$$

Перші інтегральні рівняння систем (6.78) лишаються тими самими.

Цю систему інтегральних рівнянь розв'язуємо відносно функцій $g_1(\tau')$ та $g_2(\tau')$.

Тоді одержимо

$$\begin{aligned} g_1(\tau') &= (Z_x B_y - B_x Z_y) / (A_x B_y - A_y B_x); \\ g_2(\tau') &= (Z_y A_x - Z_x A_y) / (A_x B_y - A_y B_x), \end{aligned} \quad (6.78)$$

$$\begin{aligned} \text{де } A_x &= \frac{-2d_1^2}{x_{\lambda^{(1)1}}} \Sigma_n^+ - \frac{2d_2^2}{x_2 - x_1} \Sigma_m^+; \quad B_x = \frac{2d_2^2}{(x_2 - x_1)\lambda^{(2)}} \Sigma_m^-; \quad A_y = \frac{2d_2^2}{x_2 - x_1} e^{\frac{v_2(x_2-x_1)}{2d_2}} \Sigma_m^-; \\ B_y &= \frac{-2d_2^2}{(x_2 - x_1)\lambda^{(2)}} e^{\frac{v_2(x_2-x_1)}{2d_2}} \Sigma_m^- - \frac{2d_3}{x_0 - x_2} \Sigma_k^+; \quad Z_x = \frac{2d_1^2 c_0}{x_1} e^{\frac{v_1 x_1}{2d_1}} \Sigma_n^-; \quad Z_y = \frac{v_3}{x_0 - x_2} e^{\frac{v_3(x_0-x_2)}{2d_3}} F(\tau', \tau_p) \Sigma_k^-. \end{aligned}$$

Таким чином, ми отримали розв'язок контактної-крайової задачі конвективної дифузії домішкової речовини, що мігрує в розчині тришарового пористого тіла, (6.24)-(6.28), (6.71) у загальному вигляді. При цьому ще необхідно конкретизувати і дослідити умову (6.71) в залежності від наближення функції $F(\tau, \tau_p)$, розв'язати спрощену задачу конвективної дифузії без урахування сорбційних процесів та визначити час насичення τ_p .

6.3.4. Наближення функції $F(\tau, \tau_p)$ інтерполяційним та апроксимаційними поліномами

Розв'язок контактної-крайової задачі конвективної дифузії з урахуванням сорбційних процесів (6.76) знайдений для функції $F(\tau, \tau_p)$ за умови її неперервності та інтегрованості. Проте подання $F(\tau, \tau_p)$ у вигляді поліному дає можливість проінтегрувати відповідні доданки, залишаючи в інтегральному вигляді тільки члени, що містять функції $g_1(\tau')$ і $g_2(\tau')$. Тоді отримаємо співвідношення (6.76а) для представлення функції $F(\tau, \tau_p)$ інтерполяційним поліномом і (6.76б) – апроксимаційним. Знайдемо і дослідимо різні наближення функції концентрації домішкових частинок $F(\tau, \tau_p)$ на нижній границі тришарового фільтра $x = x_0$ для конкретних експериментальних даних.

6.3.4.1. Наближення функції $F(\tau, \tau_p)$ інтерполяційним поліномом

Нехай задані експериментальні дані – концентрація забруднення на нижній поверхні фільтра у певні моменти часу, перераховані у безрозмірну форму. За нульовий момент часу прийнято початок роботи фільтра (після очищення). Об'єм вибірки (кількість експериментальних даних) $n = 9$. Статистичні дані наведені в табл. 6.14. Відзначимо, що нульові значення $F(\tau)$ (для проміжку $t \in [0; 0.02)$) були відкинута.

Таблиця 6.14. Дані вимірювань концентрації забруднення на нижній поверхні фільтра у певні моменти часу

t	0.02	0.06	0.1	0.14	0.18	0.22	0.26	0.3	0.34
$F(t) \times 10^{+10}$	0.014	0.015	0.02	0.033	0.65	0.98	1.24	1.29	1.3

У графічній формі дані табл. 6.14 подані на рис. 6.29.

За даними табл. 6.14 будуємо інтерполяційний поліном 8-ї степені за формулою (6.67).

$$F(t) = P_8(t) = \sum_{k=0}^8 F(t_k) \prod_{j=0, j \neq k}^8 \frac{(t - t_j)}{(t_k - t_j)}. \quad (6.79)$$

Зазначимо, що базисні поліноми

$$l_k(t) = \prod_{j=0, j \neq k}^8 \frac{(t - t_j)}{(t_k - t_j)} \text{ володіють такими}$$

властивостями: є поліномами 8 степені, $l_k(t_k) = 1$ та $l_k(t_j) = 0$ при $j \neq k$ [166, 248]. Враховуючи, що заданий рівномірний розподіл вузлів інтерполяції $t_k \equiv t_0 + kh$, де $h = 0.04$, базисний поліном можемо записати у вигляді

$$l_k(t) = \prod_{j=0, j \neq k}^8 (t - t_0 - jh) / \left(h^8 \prod_{j=0, j \neq k}^8 (k - j) \right),$$

за яким будемо проводити обчислення інтерполяційного поліному:

$$F(t) = P_8(t) = \sum_{k=0}^8 F(t_k) \frac{\prod_{j=0, j \neq k}^8 (t - t_0 - jh)}{h^8 \prod_{j=0, j \neq k}^8 (k - j)}. \quad (6.80)$$

За даними табл. 6.14 побудовано інтерполяційний поліном 8-ї степені у вигляді

$$F(t) = 5.659981408 \cdot 10^7 t^8 - 8.30247668 \cdot 10^7 t^7 + 5.0619337411 \cdot 10^7 t^6 - 1.65838244 \cdot 10^7 t^5 + 3.148474772 \cdot 10^6 t^4 - 3.478699093 \cdot 10^5 t^3 + 21289.39433 t^2 - 634.0433122 t + 6.508245264.$$

На рис. 6.30 наведено порівняльні криві інтерполяційного поліному 8-ї степені, обчислені з урахуванням та без рівномірного розподілу вузлів інтерполяції, тобто за

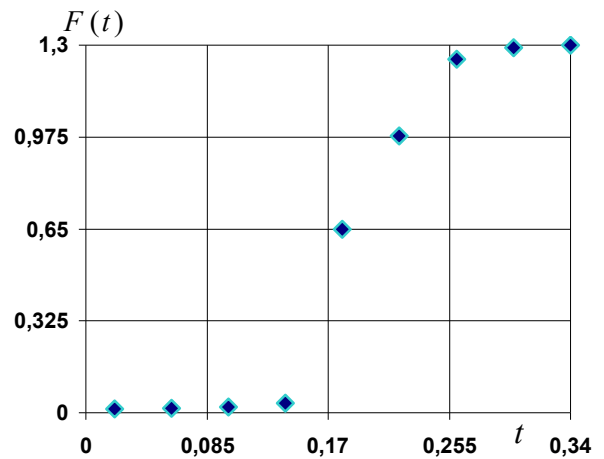


Рис. 6.29. Дані вимірювань концентрації забруднення на нижній поверхні фільтра у моменти часу табл. 6.14

формулами (6.80) та (6.79). Тут синя крива позначає інтерполяційний поліном з урахуванням рівномірного розподілу вузлів, а червона - наведена за формулою (6.79)

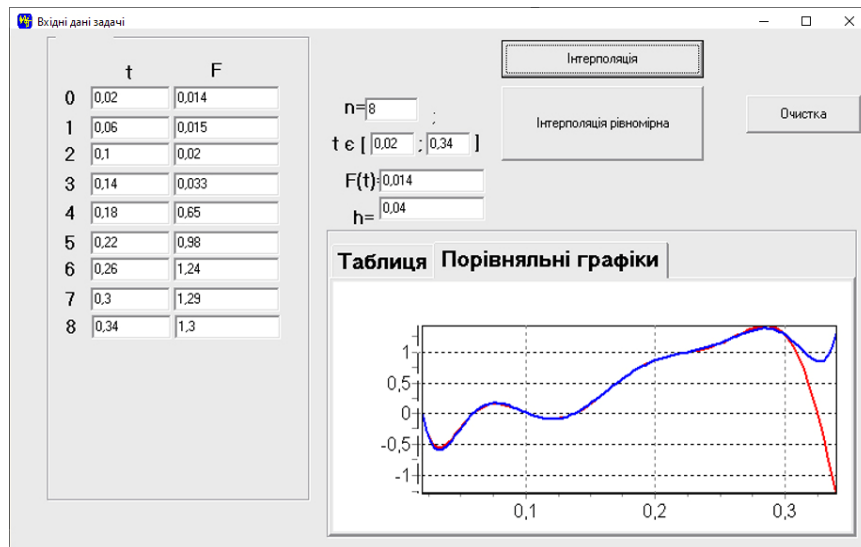


Рис. 6.30. Порівняльні криві інтерполяційного поліному 8-ї степені

Зазначимо, що на проміжку $t \in [0, 0.3]$ значення цих поліномів достатньо добре співпадають, причому в усіх вузлах інтерполяції – повністю співпадають, в тому числі із заданими значеннями $F(t)$, а між вузлами співпадіння спостерігається до третьої значимої цифри [4]. У той же час на останньому проміжку інтерполяції наявна суттєва відмінність у поведінці інтерполяційних поліномів (рис. 6.30). Проте, якщо вважати, що функція $F(t)$ в останній точці експериментальних вимірів виходить на усталений режим (з фізичних міркувань), то додаючи додаткові вузли інтерполяції зі значенням функції у них рівним значенню в 9 вузлі $F(t_{10}) = \dots = F(t_{13}) = F(t_8)$, отримаємо повне співпадіння результатів, що показано на рис.6.31.

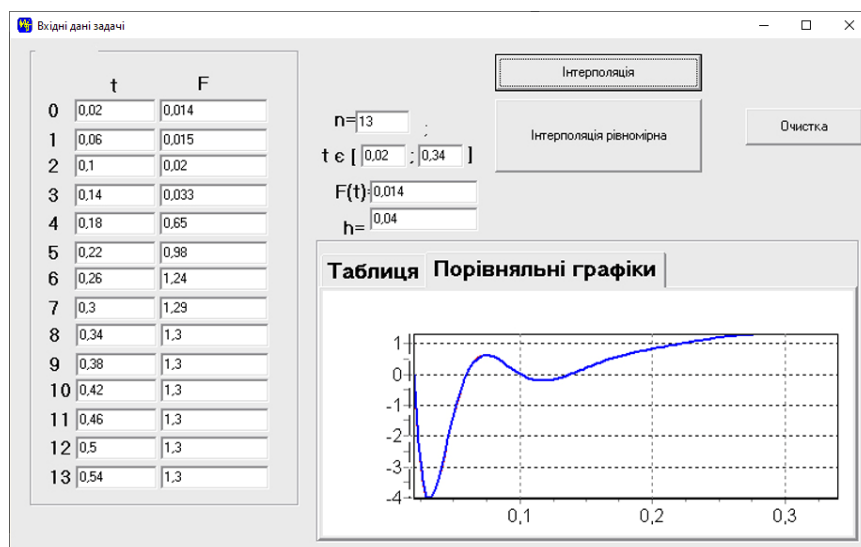


Рис. 6.31. Порівняльні криві інтерполяційного поліному 13-ї степені з врахуванням додаткових вузлів стаціонарного режиму

Зазначимо, що отримана поведінка інтерполяційної функції $F(t)$ для всіх розглядуваних випадків суперечить фізичним умовам процесу масоперенесення, зокрема функція $F(t)$ – це концентрація домішкових частинок на нижній границі фільтра, і вона не може приймати від’ємні значення. При цьому від’ємні значення складають понад 30% досліджуваного інтервалу (рис.6.30, 6.31). Також відзначимо, що мінімальні від’ємні значення функції $F(t)$ є дуже великими за абсолютними величинами, які досягаються при $t = 0.0328$. Так для поліному 8-ї степені $F(0.328) = -0.549$, а для поліному 13-ї степені абсолютне значення суттєво зростає: $F(0.328) = -4.027$.

Порівнюючи графіки, наведені на рис. 6.29 і рис. 6.30, 6.31, з нашої точки зору наближення інтерполяційним поліномом функції $F(t)$ не дає адекватного представлення експериментальних даних.

6.3.4.2. Наближення функції $F(\tau, \tau_p)$ апроксимаційними поліномами

Побудуємо тепер на основі експериментальних даних, заданих табл. 6.14, апроксимаційні поліноми 5-ї і 7-ї степенів [157, 208]

Апроксимуючий поліном 5-ї степені отриманий методом найменших квадратів

$$f(a_1, \dots, a_5) = \sum_{i=1}^n \left[F(t_i) - \sum_{k=0}^5 a_k t^{5-k} \right]^2 \xrightarrow{\{a_k\} \in R} \min.$$

У результаті одержали

$$f(t) = a_0 t^5 + a_1 t^4 + a_2 t^3 + a_3 t^2 + a_4 t + a_5, \quad (6.81)$$

де коефіцієнти знайдені наступним чином

$$a_0 = 142790.655; \quad a_1 = -13097.26244; \quad a_2 = 4130.984575; \quad a_3 = -507.1611396; \\ a_4 = 23.52842174; \quad a_5 = -0.286711311.$$

Дані, що обчислені за результатами апроксимації поліномом п’ятої степені (6.81) з кроком $\tilde{h} = 0.02$ на проміжку апроксимації, наведені в табл. 6.15, а відповідний графік функції $f(t)$ - на рис. 6.32.

Таблиця 6.15. Значення функції $f(t)$, апроксимовані поліномом 5-ї степені

t	$f(t) \times 10^{10}$	t	$f(t) \times 10^{10}$
0.02	0.011991	0.2	0.794095
0.04	0.075284	0.22	1.007464
0.06	0.032869	0.24	1.170693
0.08	-0.02488	0.26	1.266956
0.1	-0.04143	0.28	1.294928
0.12	0.011382	0.3	1.274275
0.14	0.138851	0.32	1.251132
0.16	0.328874	0.34	1.30359
0.18	0.557436		

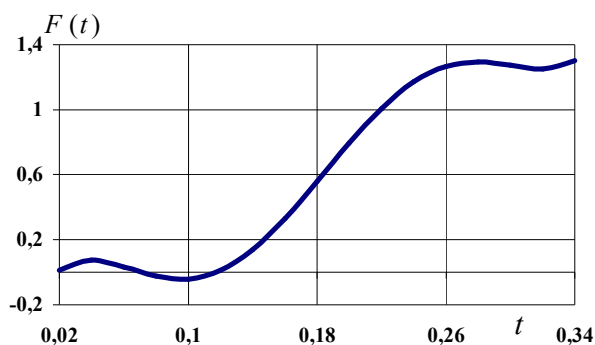


Рис. 6.32. Апроксимаційний поліном 5-ї степені (6.81)

Враховуючи, що апроксимаційний поліном 5-ї степені приймає на проміжку апроксимації від'ємні значення, зокрема для $t \in [0.08, 0.12)$, і не є монотонною функцією в околі правого кінця апроксимаційного інтервалу, зокрема для $t \in [0.28, 0.34]$ (рис. 6.32, табл. 6.15), побудуємо інші варіанти апроксимаційних поліномів для тих самих експериментальних даних.

Знову застосовуючи метод найменших квадратів, будуємо апроксимаційний поліном п'ятої степені з непарними степенями з вільним членом:

$$f(t) = a_0 t^5 + a_2 t^3 + a_4 t + a_5, \quad (6.81a)$$

де $a_0 = -924,9024445$; $a_2 = 146,8541036$; $a_4 = -0,991847199$; $a_5 = 0,010855253$,

а також апроксимаційний поліном п'ятої степені з непарними степенями без вільного члена:

$$f(t) = a_0 t^5 + a_2 t^3 + a_4 t, \quad (6.81б)$$

де $a_0 = -914,0356499$; $a_2 = 144,7979744$; $a_4 = -0,864526932$.

Графіки функції $f(t)$, що обчислені за результатами апроксимації поліномом п'ятої степені з непарними степенями із вільним членом, тобто за формулою (6.81a), та без вільного члена, тобто за формулою (6.81б), продемонстровані на рис. 6.33а і 6.33б відповідно.

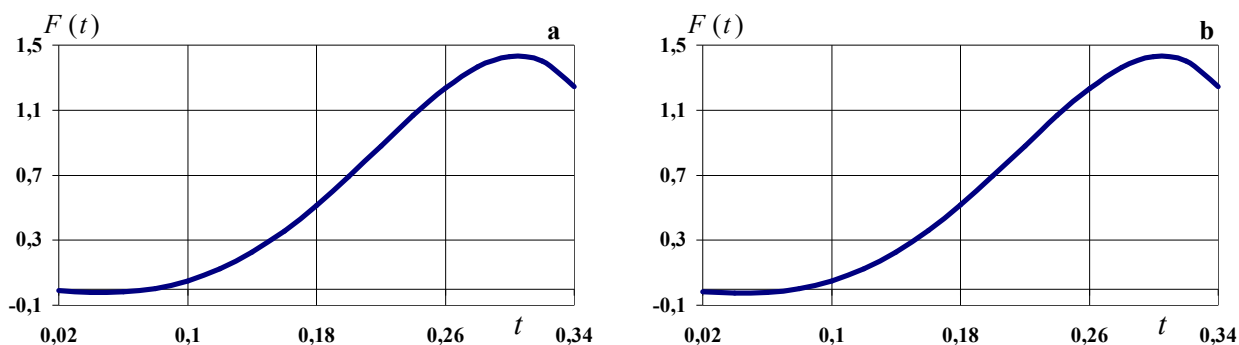


Рис. 6.33. Результат апроксимації вхідних даних поліномом п'ятої степені з непарними степенями з (рис. а) та без (рис. б) вільного члена

Апроксимуючий поліном 3-ї степені отриманий у вигляді

$$f(t) = a_0 t^3 + a_1 t^2 + a_2 t + a_3,$$

де коефіцієнти знайдені наступним чином

$$a_0 = -202,9934764; \quad a_1 = 113,3678301; \quad a_2 = -12,09226942; \quad a_3 = 0,264223214.$$

Дані, що обчислені за результатами апроксимації поліномом третьої степені з кроком $\tilde{h} = 0.02$ на проміжку апроксимації, наведені в табл. 6.16, а відповідний графік функції $f(t)$ - на рис. 6.34.

Таблиця 6.16. Значення функції $f(t)$, апроксимовані поліномом 3-ї степені

t	$f(t) \times 10^{+10}$	t	$f(t) \times 10^{+10}$
0.02	0.066101	0.2	0.756535
0.04	-0.05107	0.22	0.929452
0.06	-0.09704	0.24	1.085884
0.08	-0.08154	0.26	1.216085
0.1	-0.01432	0.28	1.310313
0.12	0.094875	0.3	1.358823
0.14	0.236301	0.32	1.351873
0.16	0.400215	0.34	1.279717
0.18	0.576874		

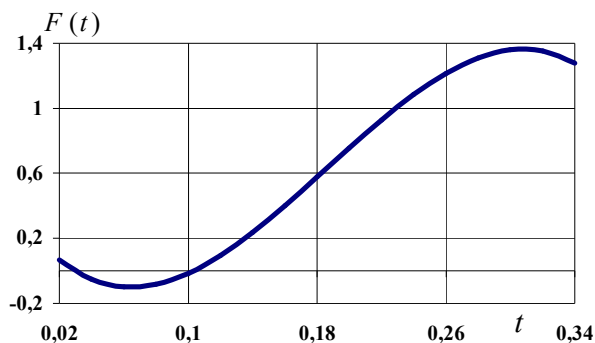


Рис. 6.34. Результат апроксимації вхідних даних поліномом третьої степені

Також побудуємо апроксимаційний поліном сьомої степені аналогічно до побудови поліному 5-ї степені:

$$f(a_1, \dots, a_7) = \sum_{i=1}^n \left[F(t_i) - \sum_{k=0}^7 a_k t^{7-k} \right]^2 \xrightarrow{\{a_k\} \in R} \min.$$

В результаті одержимо:

$$f(t) = a_0 t^7 + a_1 t^6 + a_2 t^5 + a_3 t^4 + a_4 t^3 + a_5 t^2 + a_6 t + a_7, \quad (6.81в)$$

де

$$\begin{aligned} a_0 &= -1450796,01260295; & a_1 &= 1805555,50843512; & a_2 &= -886069,070361889; \\ a_3 &= 216715,41178415; & a_4 &= -27645,2171774296; & a_5 &= 1802,76008721805; \\ a_6 &= -54,3462380059829; & a_7 &= 0,567848833287208. \end{aligned}$$

На рис. 6.35 проілюстровано поведінку апроксимаційного поліному $f(t)$ сьомої степені, побудований за формулою (6.81в).

Зауважимо, що хоча вважається, що поліномом п'ятої степені адекватно апроксимується неперервна функція в рівномірній метриці [210], для отримання точнішого результату апроксимації не вдалося підняти степінь многочлена до 7, або опустити до 3 та використати часткові випадки апроксимуючого поліному 5-ї степені. Для вибору нелінійної

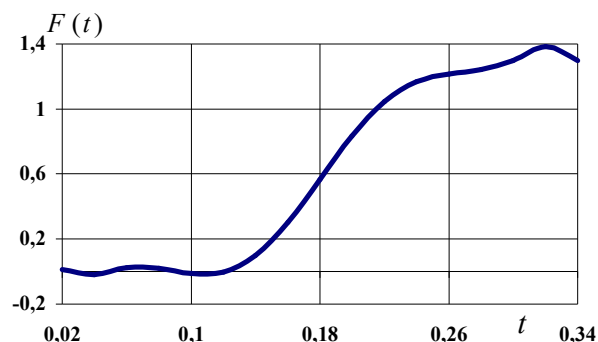


Рис. 6.35. Результат апроксимації вхідних даних поліномом сьомої степені

апроксимаційної функції (для даного випадку, наприклад, \arctg) і застосування методу вирівнювання [245], необхідно враховувати, що апроксимаційна функція має бути зручною при подальшому застосуванні методу інтегральних перетворень, у т.ч. неklasичних.

При цьому «застосування методу найменших квадратів (МНК) для побудови математичних моделей реальних процесів за результатами конкретних вимірів вихідних параметрів призводить до необхідності розв'язку некоректно поставлених задач» [58, 217].

6.3.3.3. Наближення функції $F(\tau, \tau_p)$ екстраполяційними поліномами

Врахуємо, що екстраполяція – особливий вид апроксимації, за якого функцію апроксимують поза заданим інтервалом, а не між заданими значеннями [205]. При цьому методи екстраполяції в багатьох випадках подібні до методів інтерполяції. Найбільш поширеним методом екстраполяції є поліноміальна екстраполяція, за якої в якості значення $F(t)$ в точці t вибираємо значення полінома $P_n(t)$ степені n , який приймає в точці $n+1$ задані значення $F(t_{n+1})$. Тому скористаємося побудованими інтерполяційними формулами (6.79), (6.80).

За даними табл. 6.14 точка $t_{n+1} = t_9 = t_8 + h = 0.38$.

За поліномом (6.79) знаходимо

$$F(0.38) = P_8(0.38) = \sum_{k=0}^8 F(t_k) \prod_{j=0, j \neq k}^8 \frac{(0.38 - t_j)}{(t_k - t_j)} = 25.93690526.$$

Будуємо інтерполяційний поліном 9-ї степені 25,93690526

$$F(t) = -998x^9 + 5.66014301 \cdot 10^7 \cdot x^8 - 8.30258818 \cdot 10^7 \cdot x^7 + 5.06197653 \cdot 10^7 \cdot x^6 - \\ - 1.658392846 \cdot 10^7 \cdot x^5 + 3.148489372 \cdot 10^6 \cdot x^4 - 3.47871221 \cdot 10^5 \cdot x^3 + \\ + 21289.46303 \cdot x^2 - 634.0451407x + 6.508262832.$$

На рис. 6.36 наведено порівняльні криві екстраполяційного поліному 9-ї степені, обчислені з урахуванням та без рівномірного розподілу вузлів інтерполяції,

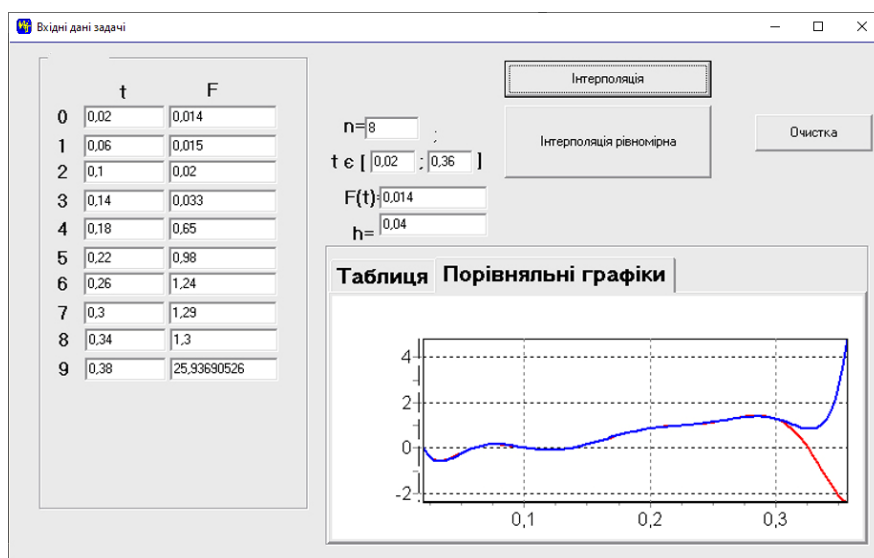


Рис. 6.36. Порівняльні криві екстраполяційного поліному 9-ї степені

тобто за формулами (6.80) та (6.79). Тут синя крива позначає інтерполяційний поліном з урахуванням рівномірного розподілу вузлів, а червона - наведена за формулою (6.79).

Тепер побудуємо інтерполяційний поліном 10-ї степені

$$F(t) = -6245 \cdot 10^7 \cdot x^{10} + 11490 \cdot x^9 + 5.6590605 \cdot 10^7 \cdot x^8 - 8.3020547 \cdot 10^7 \cdot x^7 + \\ + 5.06181198 \cdot 10^7 \cdot x^6 - 1.658359910 \cdot 10^7 \cdot x^5 + 3.14844635 \cdot 10^6 \cdot x^4 - \\ - 3.478676680 \cdot 10^5 \cdot x^3 + 21289.28786 \cdot x^2 - 634.040679x + 6.50822097.$$

На рис. 6.37 наведено порівняльні криві екстраполяційного поліному 10-ї степені – з двома додатковими вузлами, обчислені з урахуванням та без рівномірного розподілу вузлів інтерполяції, тобто за формулами (6.80) та (6.79), синя крива - інтерполяційний поліном з урахуванням рівномірного розподілу вузлів, а червона - за формулою (6.79).

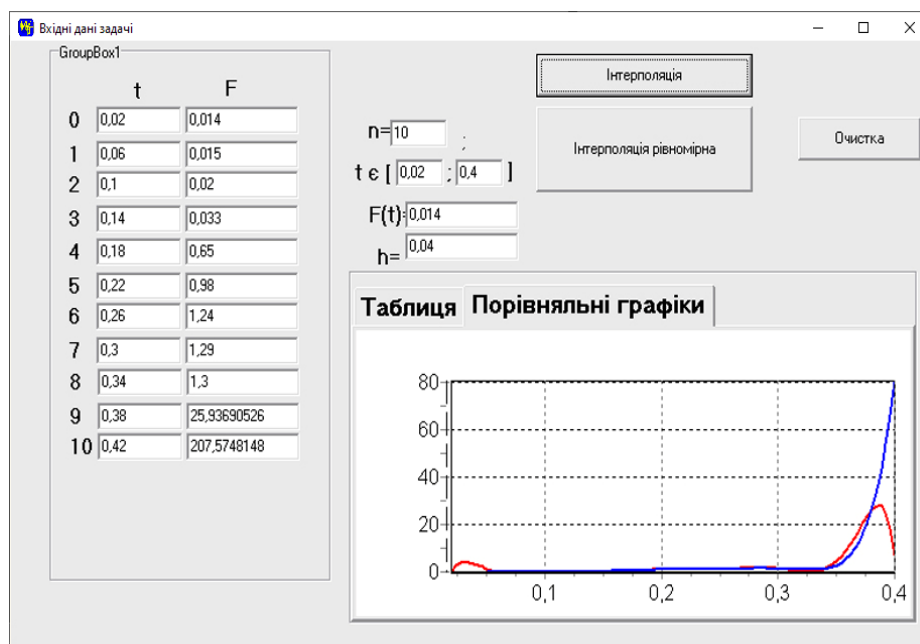


Рис. 6.37. Порівняльні криві екстраполяційного поліному 10-ї степені

Для того, щоб покращити результати екстраполяції, використаємо метод раціональної екстраполяції, запропонованої Буліршем і Штером [129]

$$T_{r,-1} = 0, \quad r = 1, \dots, M; \quad T_{r,0} = F(t_{i+1}, h_r), \quad r = 0, 1, \dots, M;$$

$$T_{r,s} = T_{r+1,s-1} + \frac{T_{r+1,s-1} - T_{r,s-1}}{\left(\frac{h_r}{h_{r+s}}\right)^\gamma \left(1 - \frac{T_{r+1,s-1} - T_{r,s-1}}{T_{r+1,s-1} - T_{r+1,s-2}}\right) - 1}, \quad s = 1, 2, \dots, M; \quad r = 0, 1, \dots, M - s.$$

Зазвичай покладають $\gamma = 1$ або $\gamma = 2$. В результаті формуємо таблицю даних.

	$T_{0,0}$				
$T_{1,-1}$		$T_{0,1}$			
	$T_{1,0}$		$T_{0,2}$		
$T_{2,-1}$		$T_{1,1}$			
	$T_{2,0}$			$T_{0,M-1}$	
	\vdots				$T_{0,M}$
		$T_{M-2,1}$		$T_{1,M-1}$	
	$T_{M-1,0}$		$T_{M-2,2}$		
$T_{M,-1}$		$T_{M-1,1}$			
	$T_{M,0}$				

В якості уточненого результату $\hat{F}(t_{n+1})$ приймається значення $T_{0,M}$.

В роботі [129] рекомендують приймати максимальний порядок екстраполяції $M = 6$.

Підсумовуючи, зазначимо, що на нашу думку найбільш адекватним до реальної ситуації є апроксимаційний поліном 5 степені. Тому саме його вибрали для наближення граничної умови. Отже, гранична умова на нижній поверхні тіла:

$$c_1^{(3)}(t, x) \Big|_{x=x_0} = F(t, t_p) = 14279.09t^5 - 13097.26t^4 + 4130.98t^3 - 507.16t^2 + 23.52t - 0.286, \quad 0 < t \leq t_p = 0.34.$$

6.3.4. Контактно-крайова задача конвективної дифузії домішки без урахування сорбційних процесів у тришаровому пористому тілі

Для оцінки зверху функції концентрації домішки на нижній границі тіла та визначення оціночного часу насичення τ_p розв'язуємо спрощену задачу конвективної дифузії без урахування сорбційних процесів в тришаровому тілі (6.69) за контактних (6.27), (6.28), початкових (6.26) та першої граничної (6.25) умови і другої граничної умови на дифузійний потік (6.68).

Розв'язувати контактну-крайову задачу (6.70), (6.25)-(6.28), (6.68) також будемо за допомогою інтегральних перетворень за просторовою змінною окремо в контактуючих областях. Для цього доозначуємо значення шуканих функцій на границях контакту (6.30), вводячи у розгляд функції часу $\bar{g}_1(\tau)$ на границі $x = x_1$ і $\bar{g}_2(\tau)$ на поверхні $x = x_2$.

Для знаходження розв'язку в області Ω_1 застосовуємо інтегральне перетворення [83]:

$$\bar{f}_*(\lambda_n) = \int_0^{x_0} f(\xi) \varphi_*(\lambda_n, \xi) r(\xi) d\xi, \quad (6.82a)$$

оберненим до якого є вираз

$$f(x) = \sum_{\lambda_n} \varphi_*(\lambda_n, x) \bar{f}_*(\lambda_n), \quad (6.82b)$$

де $\varphi_*(\lambda_n, x) = \frac{\varphi(\lambda_n, x)}{\|\varphi_n\|_{L_r^2[0, x_0]}}$, $\varphi(\lambda_n, x)$ - власна функція, $\|\varphi_n\|_{L_r^2[0, x_0]}^2 = \int_0^{x_0} \varphi^2(\lambda_n, \xi) r(\xi) d\xi$,

$r(x) = \exp\left\{-\int v dx\right\} = e^{-vx}$ - вагова функція, $\|\varphi_n\|_{L_r^2[0, x_0]}^2 = \int_0^{x_0} \varphi^2(\lambda_n, \xi) r(\xi) d\xi$.

Тоді крайова задача в зображеннях набуде вигляду

$$\frac{d\bar{c}_{1est}(\tau, n)}{d\tau} = -\left(y_n^2 d_1 + \frac{v_1^2}{4d_1}\right) \bar{c}_{1est}(\tau, n) + d_1 y_n c_0 + (-1)^{n+1} \frac{d_1 y_n}{\lambda^{(1)}} \exp\left(\frac{-v_1 x}{2d_1}\right) \bar{g}_1(\tau),$$

$$\bar{c}_{1est}(\tau, n)|_{\tau=0} = 0.$$

Розв'язок такої задачі має вигляд [192]

$$\bar{c}_{1est}(\tau, n) = e^{-\left(y_n^2 d_1 + \frac{v_1^2}{4d_1}\right)\tau} \int_0^\tau d_1 y_n e^{-\left(y_n^2 d_1 + \frac{v_1^2}{4d_1}\right)\tau'} \left(c_0 + \frac{(-1)^{n+1}}{\lambda^{(1)}} e^{-\left(\frac{v_1 x}{2d_1}\right)} \bar{g}_1(\tau') \right) d\tau'. \quad (6.83)$$

В області Ω_2 застосовуємо інтегральне перетворення (6.37). Тоді отримаємо таку крайову задачу в зображеннях

$$\frac{d\bar{c}_{2est}(\tau, m)}{d\tau} = -\left(y_m^2 d_2 + \frac{v_2^2}{4d_2}\right) \bar{c}_{2est}(\tau, m) + d_2 y_m \bar{g}_1(\tau) + d_2 y_m \frac{(-1)^{m+1}}{\lambda^{(2)}} \bar{g}_2(\tau),$$

$$\bar{c}_{2est}(\tau, m)|_{\tau=0} = 0.$$

Розв'язок цієї задачі має вигляд [192]

$$\bar{c}_{2est}(\tau, m) = e^{-\left(y_m^2 d_2 + \frac{v_2^2}{4d_2}\right)\tau} \int_0^\tau d_2 y_m e^{-\left(y_m^2 d_2 + \frac{v_2^2}{4d_2}\right)\tau'} \left(\bar{g}_1(\tau) + \frac{(-1)^{m+1}}{\lambda^{(2)}} \bar{g}_2(\tau') \right) d\tau'. \quad (6.83)$$

Тепер розглянемо крайову задачу в третій області $\Omega_3 =]x_2; x_0[$, враховуючи умову на границі $x = x_0$ (6.68). До цієї задачі застосуємо інтегральне перетворення (6.82а).

Враховуючи перетворення (6.82) від виразу $\frac{\partial^2 c_{1est}^{(3)}}{\partial x^2} - v_3 \frac{\partial c_{1est}^{(3)}}{\partial x}$, крайова задача (6.69в), (6.25), (6.26), (6.28), (6.68) в третій області $\Omega_3 =]x_2; x_0[$ в зображеннях набуде вигляду

$$\frac{d\bar{c}_{3est}(k, \tau)}{d\tau} = -d_3 \lambda_k^2 \bar{c}_{3est}(k, \tau) + d_3 a_k \bar{g}_2(\tau) + e^{-\frac{v_3(x_0-x_2)}{2d_3}} \sin\{a_k(x_0-x_2)\} c_*,$$

$$\bar{c}_{3est}(k, \tau)|_{\tau=0} = 0, \quad (6.85)$$

де $\lambda_k^2 = \left(\frac{z_k + k\pi}{x_0 - x_2}\right)^2 + \left(\frac{v_3}{2d_3}\right)^2$, $a_k = \frac{v_3}{2d_3} \frac{k\pi}{1 + (v_3/2d_3)(x_0 - x_2)}$, $z_k = -\frac{k\pi}{1 + (v_3/2d_3)(x_0 - x_2)}$.

Розв'язок задачі (6.85) знайдено у вигляді [192]

$$\bar{c}_{3est}(k, \tau) = \left(1 - e^{-d_3 \lambda_k^2 \tau}\right) \frac{c_*}{d_3 \lambda_k^2} e^{-\frac{v_3(x_0-x_2)}{2d_3}} \sin\{a_k(x_0-x_2)\} +$$

$$+ e^{-\left(\lambda_k^2 d_3 + \frac{v_3^2}{4d_3}\right) \tau} \frac{a_k d_3}{\lambda_k} \int_0^\tau e^{-\left(\lambda_k^2 d_3 + \frac{v_3^2}{4d_3}\right) \tau'} \bar{g}_2(\tau') d\tau'. \quad (6.86)$$

В одержаних виразах для \bar{c}_{jest} $j = 1, 2, 3$ (6.83), (6.84) і (6.86) залишаються невідомими функції $\bar{g}_1(\tau')$ та $\bar{g}_2(\tau')$. Як і в попередніх випадках визначатимемо їх із контактних умов рівності потоків мас на обох границях поділу областей (6.27б) та (6.28б). Після виконання обернених перетворень (6.34), (6.38) та (6.82б) відповідно виразів (6.83), (6.84) і (6.86), підставимо вирази для концентрацій та їх похідних у точках $x = x_1$, та $x = x_2$ у співвідношення (6.27б) і (6.28б) відповідно. Тоді одержимо систему двох інтегральних рівнянь

$$\frac{2d_1^2}{x_1} e^{\frac{v_1 x_1}{2d_1}} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n y_n^2 e^{-\bar{b}_{n1} \tau} \int_0^\tau e^{\bar{b}_{n1} \tau'} \left(c_0 + \frac{(-1)^{n+1}}{\lambda^{(1)}} e^{-\left(\frac{v_1 x}{2d_1}\right)} \bar{g}_1(\tau') \right) d\tau' =$$

$$= \frac{2d_2^2}{x_2 - x_1} \sum_{m=1}^{\infty} y_m^2 e^{-\bar{b}_{m2} \tau} \int_0^\tau e^{\bar{b}_{m2} \tau'} \left(\bar{g}_1(\tau') + \frac{(-1)^{m+1}}{\lambda^{(2)}} \bar{g}_2(\tau') \right) d\tau';$$

$$\frac{2d_2^2}{x_2 - x_1} e^{\frac{v_2(x_2-x_1)}{2d_2}} \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^m y_m^2 e^{-\bar{b}_{m2} \tau} \int_0^\tau e^{\bar{b}_{m2} \tau'} \left(\bar{g}_1(\tau') + \frac{(-1)^{m+1}}{\lambda^{(2)}} \bar{g}_2(\tau') \right) d\tau' =$$

$$= \sum_{\substack{k=m, \\ \lambda_m^2 > v_3^2/4d_3^2}}^{\infty} \frac{d_3 \sqrt{\lambda_k^2 - (v_3/2d_3)^2}}{\frac{x_0 - x_2}{2} + \frac{v_3}{4d_3 \lambda_k^2}} \times \\ \times e^{-\bar{b}_{k3}\tau} \int_0^{\tau} d_3 \lambda_k e^{\bar{b}_{k3}\tau'} \left(e^{-\frac{v_3(x_0-x_2)}{2d_3}} \sin\{a_k(x_0-x_2)\} c_* - d_3 a_k \bar{g}_2(\tau) \right) d\tau', \quad (6.87)$$

$$\text{де } \bar{b}_{n1} = y_n^2 d_1 + \frac{v_1^2}{4d_1}, \quad \bar{b}_{m2} = y_m^2 d_2 + \frac{v_2^2}{4d_2}, \quad \bar{b}_{k3} = \lambda_k^2 d_3 + \frac{v_3^2}{4d_3}.$$

Зазначимо, якщо на нижній границі тіла прийняти нульову граничну умову, тобто $\left. \frac{\partial c_{lest}^{(3)}(t, x)}{\partial x} \right|_{x=x_0} = 0$, тоді перше рівняння системи (6.87) залишається без змін, а

друге рівняння спрощується до форми:

$$\frac{2d_2^2}{x_2 - x_1} e^{\frac{v_2(x_2-x_1)}{2d_2}} \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^m y_m^2 e^{-\bar{b}_{m2}\tau} \int_0^{\tau} e^{\bar{b}_{m2}\tau'} \left(\bar{g}_1(\tau') + \frac{(-1)^{m+1}}{\lambda^{(2)}} \bar{g}_2(\tau') \right) d\tau' = \\ = -d_3^2 \sum_{\substack{k=m, \\ \lambda_m^2 > v_3^2/4d_3^2}}^{\infty} \frac{\lambda_k a_k}{\frac{x_0 - x_2}{2} + \frac{v_3}{4d_3 \lambda_k^2}} e^{-\bar{b}_{k3}\tau} \int_0^{\tau} e^{\bar{b}_{k3}\tau'} \bar{g}_2(\tau) d\tau'.$$

Систему інтегральних рівнянь (6.87) розв'язуємо відносно функцій $\bar{g}_1(\tau')$ та $\bar{g}_2(\tau')$. В результаті одержимо

$$\bar{g}_1(\tau') = (\bar{Z}_x(\tau') \bar{B}_y(\tau') - \bar{B}_x(\tau') \bar{Z}_y(\tau')) / (\bar{A}_x(\tau') \bar{B}_y(\tau') - \bar{A}_y(\tau') \bar{B}_x(\tau')); \quad (6.88a)$$

$$\bar{g}_2(\tau') = (\bar{Z}_y(\tau') \bar{A}_x(\tau') - \bar{Z}_x(\tau') \bar{A}_y(\tau')) / (\bar{A}_x(\tau') \bar{B}_y(\tau') - \bar{A}_y(\tau') \bar{B}_x(\tau')), \quad (6.88b)$$

$$\text{де } \bar{A}_x(\tau') = \frac{-2d_1^2}{x_{\lambda^{(1)}}} \bar{\Sigma}_n^+(\tau') - \frac{2d_2^2}{x_2 - x_1} \bar{\Sigma}_m^+(\tau'); \quad \bar{A}_y(\tau') = \frac{2d_2^2}{x_2 - x_1} e^{\frac{v_2(x_2-x_1)}{2d_2}} \bar{\Sigma}_m^-(\tau'); \quad \bar{B}_x(\tau') = \frac{2d_2^2}{(x_2 - x_1) \lambda^{(2)}} \bar{\Sigma}_m^-(\tau');$$

$$\bar{B}_y(\tau') = \frac{-2d_2^2}{(x_2 - x_1) \lambda^{(2)}} e^{\frac{v_2(x_2-x_1)}{2d_2}} \bar{\Sigma}_m^+(\tau') + \frac{d_3^2}{x_0 - x_2} \Sigma_k^{1\lambda}(\tau'); \quad \bar{Z}_x(\tau') = \frac{2d_1^2 c_0}{x_1} e^{\frac{v_1 x_1}{2d_1}} \bar{\Sigma}_n^-(\tau'); \quad \bar{Z}_y(\tau') = c_* d_3 \Sigma_k^{2\lambda}(\tau');$$

$$\bar{\Sigma}_n^{\pm}(\tau') = \sum_{n=1}^{\infty} (\pm 1)^n y_n^2 e^{-\bar{b}_{n1}(\tau-\tau')}; \quad \bar{\Sigma}_m^{\pm}(\tau') = \sum_{m=1}^{\infty} (\pm 1)^{m+1} y_m^2 e^{-\bar{b}_{m2}(\tau-\tau')}; \quad \Sigma_k^{1\lambda}(\tau') = \sum_{\substack{k=m, \\ \lambda_m^2 > v_3^2/4d_3^2}}^{\infty} \frac{\lambda_k a_k e^{-\bar{b}_{k3}(\tau-\tau')}}{\frac{x_0 - x_2}{2} + \frac{v_3}{4d_3 \lambda_k^2}};$$

$$\Sigma_k^{2\lambda}(\tau') = \sum_{\substack{k=m, \\ \lambda_m^2 > v_3^2/4d_3^2}}^{\infty} \frac{\sin(a_k(x_0 - x_2)) e^{-\bar{b}_{k3}(\tau-\tau')}}{\frac{x_0 - x_2}{2} + \frac{v_3}{4d_3 \lambda_k^2}}.$$

Зокрема, якщо на нижній границі тіла прийнята нульова гранична умова, тоді вирази для $\bar{g}_1(\tau')$ та $\bar{g}_2(\tau')$ спрощуються до такого вигляду

$$\bar{g}_1(\tau') = \bar{Z}_x(\tau')\bar{B}_y(\tau') / (\bar{A}_x(\tau')\bar{B}_y(\tau') - \bar{A}_y(\tau')\bar{B}_x(\tau')); \quad (6.89a)$$

$$\bar{g}_2(\tau') = \bar{Z}_x(\tau')\bar{A}_y(\tau') / (\bar{A}_y(\tau')\bar{B}_x(\tau') - \bar{A}_x(\tau')\bar{B}_y(\tau')). \quad (6.89б)$$

Остаточно для функцій концентрації домішкової речовини, яка мігрує у поровому розчині тришарового тіла без урахування сорбційних процесів, одержимо в області Ω_1

$$c_{1est}^{(1)}(\tau, x) = \exp\left(\frac{v_1 x}{2d_1}\right) \left\{ c_0 \frac{\text{sh}(v_1(x_1 - x)/2d_1)}{\text{sh}(v_1 x_1/2d_1)} - \frac{2d_1}{x_1} \sum_{n=1}^{\infty} y_n \sin(y_n x) \left[\frac{c_0 e^{-\bar{b}_{n1}\tau}}{\bar{b}_{n1}} + \frac{(-1)^n}{\lambda^{(1)}} e^{-\left(\frac{v_1 x}{2d_1}\right)} e^{-\bar{b}_{n1}\tau} \int_0^{\tau} e^{\bar{b}_{n1}\tau'} \bar{g}_1(\tau') d\tau' \right] \right\}; \quad (6.90a)$$

в області Ω_2

$$c_{1est}^{(2)}(\tau, x) = \frac{2d_2}{x_2 - x_1} \exp\left(\frac{v_2(x - x_1)}{2d_2}\right) \sum_{m=1}^{\infty} y_m \sin(y_m(x - x_1)) \times e^{-\bar{b}_{m2}\tau} \int_0^{\tau} e^{\bar{b}_{m2}\tau'} \left(\bar{g}_1(\tau') + \frac{(-1)^{m+1}}{\lambda^{(2)}} \bar{g}_2(\tau') \right) d\tau'; \quad (6.90б)$$

в області Ω_3

$$c_{1est}^{(3)}(\tau, x) = \sum_{\substack{k=m, \\ \lambda_m^2 > v_3^2/4d_3^2}}^{\infty} \frac{e^{\frac{v_3(x-x_2)}{2d_3}} \sin\left\{\sqrt{\lambda_k^2 - (v_3/2d_3)^2}(x - x_2)\right\}}{\frac{x_0 - x_2}{2} + \frac{v_3}{4d_3\lambda_k^2}} \times \left\{ \frac{c_* (1 - e^{-d_3\lambda_k^2\tau})}{d_3\lambda_k^2} e^{-\frac{v_3(x_0 - x_2)}{2d_3}} \sin\{a_k(x_0 - x_2)\} - e^{-\bar{b}_{k3}\tau} \frac{a_k d_3}{\lambda_k} \int_0^{\tau} e^{\bar{b}_{k3}\tau'} \bar{g}_2(\tau') d\tau' \right\}. \quad (6.90в)$$

При цьому функції $\bar{g}_1(\tau')$ і $\bar{g}_2(\tau')$ визначаються за формулами (6.88a) і (6.88б) відповідно.

Зокрема, якщо на нижній границі тіла прийнята нульова гранична умова, тоді вирази для концентрацій в областях Ω_1 та Ω_2 залишаються тими самими, проте

змінюються формули, за якими визначаються функції $\bar{g}_1(\tau')$ і $\bar{g}_2(\tau')$, а саме (6.89а) і (6.89б). В області Ω_3 функція концентрації спрощується до такого вигляду

$$c_{1est}^{(3)}(\tau, x) = - \sum_{\substack{k=m, \\ \lambda_m^2 > v_3^2/4d_3^2}}^{\infty} \frac{e^{\frac{v_3(x-x_2)}{2d_3}} \sin \left\{ \sqrt{\lambda_k^2 - (v_3/2d_3)^2} (x-x_2) \right\}}{\frac{x_0-x_2}{2} + \frac{v_3}{4d_3\lambda_k^2}} e^{-\bar{b}_{k3}\tau} \frac{a_k d_3}{\lambda_k} \int_0^{\tau} e^{\bar{b}_{k3}\tau'} \bar{g}_2(\tau') d\tau',$$

причому $\bar{g}_2(\tau')$ визначається за формулою (6.89б).

6.3.5. Визначення оцінки часу виходу на стаціонарний режим

Визначимо тепер безрозмірний час τ_p , тобто часу виходу концентрації домішки на нижній границі тришарового пористого тіла на стаціонарний режим. Для цього використаємо мінімізацію нерівності (6.70), яка у безрозмірних змінних має вигляд

$$\min_{\tau > 0} \left| c_{1est}^{(3)}(\tau, x_0) - c_{1est}^{(3)}(\tau_p, x_0) \right| < \varepsilon, \quad (6.91)$$

Оскільки визначення функції $c_{1est}^{(3)}(\tau, x)$ в границі при $\tau \rightarrow \infty$ викликає деякі труднощі, зокрема знаходження границі від останнього інтегрального доданку, розв'яжемо безпосередньо граничну задачу конвективної дифузії в області Ω_3 в стаціонарному режимі:

$$d_3 \frac{d^2 c_{1s}^{(3)}(x)}{dx^2} - v_3 \frac{dc_{1s}^{(3)}(x)}{dx} = 0$$

$$c_{1s}^{(3)}(x) \Big|_{x=x_2} = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \bar{g}_2(\tau), \quad \frac{dc_{1s}^{(3)}(x)}{dx} \Big|_{x=x_0} = c_* \equiv const.$$

Розв'язок цієї граничної задачі є

$$c_{1s}^{(3)}(x) = c_* \left(e^{-(x_0-x)} - e^{-(x_0-x_2)} \right) + \lim_{\tau \rightarrow \infty} \bar{g}_2(\tau). \quad (6.92)$$

Дослідимо стаціонарний режим функції $\bar{g}_2(\tau)$. Для знаходження границі при $\tau \rightarrow \infty$ розділимо чисельник і знаменник виразу (6.88б) на добуток рядів з найбільшою сумою. В результаті отримали два випадки стаціонарного режиму $\bar{g}_2(\tau)$ в залежності від співвідношень коефіцієнтів задачі. Якщо виконується нерівність

$$\frac{v_3}{2d_3} > \frac{\sqrt{x_0-x_2}}{\sqrt{2}(x_2-x_1) - (x_0-x_2)\sqrt{x_0-x_2}},$$

то чисельник і знаменник формули (6.88б) ділимо на $\Sigma_k^{1\lambda}(\tau) \cdot \bar{\Sigma}_n^+(\tau)$, і одержуємо шукану границю у вигляді

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \bar{g}_2(\tau) = \frac{c_*(x_0 - x_2)}{d_3}.$$

У випадку виконання співвідношення

$$\frac{v_3}{2d_3} < \frac{\sqrt{x_0 - x_2}}{\sqrt{2(x_2 - x_1) - (x_0 - x_2)\sqrt{x_0 - x_2}}} \quad (6.93)$$

чисельник і знаменник формули (6.88б) ділимо на добуток $\bar{\Sigma}_m^+(\tau) \cdot \bar{\Sigma}_n^+(\tau)$. Тоді границя $\lim_{\tau \rightarrow \infty} \bar{g}_2(\tau)$ набуває від'ємних значень, тобто, враховуючи фізичні обмеження на концентрацію, можемо стверджувати, що цієї границі у випадку (6.93) не існує.

Розв'язувати нерівність (6.91) можна, наприклад, за допомогою методу покрокової ітерації.

Для експериментальних даних, наведених у табл. 6.14, були задані наступні значення параметрів задачі: $\varepsilon = 10^{-4}$, крок ітерації $h_\tau = 0.01$, $x_0 = 1$, $x_2 = 0.7$, $d_3 = 0.01$, $v_3 = 0.1$, $c_* = 0.01$, n_h - кількість кроків ітерації. Результати обчислень наведені в табл. 6.17.

Таблиця 6.17. Час виходу концентрації на стаціонарний режим

$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \bar{g}_2(\tau)$	d_3	n_h	τ_p	v_3	n_h	τ_p
0.03	0.1	14	0.290654	0.2	16	0.291702
0.3	0.01	27	0.313259	0.4	31	0.319658
3	0.001	38	0.336567	0.6	42	0.336901

За отриманими даними Табл. 6.17 можна зробити висновок, що чим менша швидкість конвективного перенесення, тим скоріше досягається концентрація насичення і тим швидше потрібно припиняти експериментальні вимірювання.

6.4. Висновки до Розділу 6

Таким чином, для математичного опису процесів конвективної дифузії в об'єктах складної та складеної структури в умовах масообміну між макроелементами системи розвинуто підхід до математичного опису процесів масоперенесення у багатофазному багатокомпонентному тілі, що складається з етапів: побудова мате-

матичної моделі у лінеаризованому варіанті; формулювання на цій основі контактнo-крайових задач з урахуванням умов неідеального контакту на концентрацію домішкової речовини; знаходження точного аналітичного розв'язку сформульованої задачі з допомогою методу інтегральних перетворень окремо в різних макроелементах; комп'ютерне моделювання отриманих розв'язків; побудова алгоритмів для кожної структурної частини розв'язку контактнo-крайової задачі для чисельного аналізу; розробка програмного забезпечення та використання його для аналізу отриманих результатів.

Побудована нова математична модель гетеродифузії домішкової речовини у складеному тілі, кожен макроелемент якої має свою, наприклад, пористу мікроструктуру. Отримано балансові співвідношення, зокрема рівняння балансу маси для кожної компоненти кожної фази, рівняння руху частинок води і умови нормування для кожного макроелемента, лінійні кінетичні співвідношення, записані формули для термодинамічних сил та спряжених термодинамічних потоків, одержано лінійні рівняння стану. Вибравши в якості розв'язуючих функцій відхилення концентрацій домішкових компонент від значень концентрацій у певному відліковому стані, отримано ключові системи рівнянь гетеродифузії для кожної фази. Знайдені часткові варіанти математичної моделі: систему рівнянь конвективної дифузії у середовищі з пастками; систему рівнянь конвективної дифузії з урахуванням процесів сорбції, рівняння конвективної дифузії в середовищі з ефективними характеристиками.

Сформульовано контактнo-крайову задачу конвективної дифузії у тришаровому пористому шарі за умов неідеального контакту на шукану функцію. За допомогою інтегральних перетворень за просторовими змінними, які застосовуються окремо в областях, що контактують, отримано аналітичний розв'язок контактнo-крайової задачі конвективної дифузії домішкової речовини у тришаровому шарі, кожен макроелемент якого є пористим з відмінними від інших характеристиками.

Розроблений новий чисельний метод знаходження подвійних інтегралів зі змінними верхніми межами, що складається з встановлення змінної області інтегрування; накладання прямокутної сітки на область інтегрування; розділення

областей інтегрування на підобласті, які складаються з квадратних і трикутних елементів; застосування квадратур у підобласті, яка складається з квадратних елементів; здійснення триангуляційного розбиття вздовж змінної межі; обчислення об'ємів елементарних елементів, в основі яких є трикутники; підрахунку вихідного інтеграла та встановлення похибки обчислень.

Розроблений алгоритм чисельного розв'язання нелінійного функціонального рівняння на відрізку невідомої довжини, який базується на основі композиції методу простої ітерації та модифікації методу дихотомії і реалізований для конвективної дифузії частинок у трьох пористих макроелементах.

Запропоновано системний підхід до опису складних та складених систем в умовах невизначеності, який ґрунтується на синтезі класичного підходу математичного моделювання зв'язаних процесів різної фізичної природи в неоднорідних середовищах для добре структурованої частини системи та неklasичного статистичного підходу до моделювання невідомої граничної умови на основі експериментальних даних. Підхід складається з трьох частин (блоків), кожен з яких містить етапи та підетапи (кроки). Перша частина підходу – класичний підхід до математичного моделювання взаємозв'язаних процесів у неоднорідних середовищах, складається з етапів: опису системи, що поділяється на 5 підетапів; формулювання контактної-крайової задачі та побудова розв'язку сформульованої задачі, що поділяється на 6 підетапів; статистичного підходу до моделювання невідомої граничної умови на основі експериментальних даних, який складається з 4 підетапів. Розроблений системний підхід застосовано до задачі перенесення забруднення через тришаровий фільтр води, коли наявні дані вимірювання концентрації забруднення на його нижній границі. Встановлено, що найбільш адекватно до фізичних умов використовувати апроксимацію експериментальних даних щодо концентрації частинок забруднення на нижній границі фільтра поліномом 5-ї степені.

РОЗДІЛ 7

МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ КОНВЕКТИВНОЇ ДИФУЗІЇ ЗАБРУДНЕНОГО РОЗЧИНУ У ФІЛЬТРІ ВОДИ З ПОМ'ЯКШЕННЯМ ЖОРСТКОЇ ВОДИ ЗА ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНИХ ДАНИХ НА ГРАНИЦІ

Цей розділ присвячений побудові математичної моделі конвективної дифузії забрудненого розчину у фільтрі води з пом'якшенням жорсткої води за експериментальних даних на границі на основі балансових співвідношення маси компонент системи. Отримана система шести диференціальних рівнянь в частинних похідних, яка включає два рівняння масоперенесення домішкових частинок, які сорбуються на скелет, у двох станах, рівняння масоперенесення сполуки одного з основних катіонів і реагента, що вступають у хімічну реакцію, рівняння масоперенесення частинок нерозчинної речовини, що утворилися в наслідок хімічної реакції та рівняння перенесення частинок води. Сформульовано крайову задачу для шару, через який відбувається фільтрування водного розчину, де на поверхню тіла рівномірно подається реагент. В початковий момент часу механічний фільтр є чистим і заповнений водою, яка характеризується сталою підвищеною твердістю. Запропоновано модельний опис хімічної реакції пом'якшення води. Розроблено пакет програм «WodFil» для дослідження процесів очищення від забруднення у водному фільтрі, який призначений для кількісного та якісного аналізу ефективності роботи засипного фільтра води [21, 109].

7.1. Побудова математичної моделі

Розглянемо процес фільтрування забрудненої твердої води механічним (засипним) фільтром. Вважаємо, що водний розчин містить частинки забруднення у вигляді важких металів або органічних сполук, які здатні сорбуватися на скелеті засипних елементів фільтрувальної установки [37]. Крім цього вода характеризується значною твердістю, зумовленою наявністю в ній розчинених солей кальцію і/або магнію (сульфатів, хлоридів, карбонатів, гідрокарбонатів тощо).

При формулюванні вихідних співвідношень моделі перенесення забруднення у засипному фільтрі води вважаємо, що довільна інфінітесимально мала область тіла складається зі скелета та водного розчину, який заповнює поровий простір. Прийmemo, що в процесі фільтрації скелет не деформується, і пористість залишається постійною

(не враховуються зміни пов'язані із сорбцією домішкової речовини). Водний розчин є багатокомпонентним і складається з частинок води, забруднюючих частинок типу важких металів і солей кальцію або магнію. Частинки забруднення знаходяться у двох станах – у конвективно рухомому розчині і на поверхні скелету. На поверхню тіла подається реагент, який спричинює хімічну реакцію типу (1.10) або (1.11). В результаті такої реакції утворюються частинки солей кальцію або магнію, води та газу, який миттєво випаровується. Речовини, що залишилися після реакції мігрують з водним розчином.

Основними процесами, що розглядаються, є конвективна дифузія домішок та їх сорбція скелетом. Ці процеси описуються з використанням наближення континууму центрів мас [72] для рідкої фази, причому приймається, що швидкість конвективного руху частинок \vec{v}_r наближено рівною істинній швидкості порового розчину при фільтрації, тобто $\vec{v}_r \cong \vec{v}_f / \kappa$, де \vec{v}_f - швидкість фільтрації, κ - пористість. Зазначимо, що середовище вважається ізотропним, і поверхнева та об'ємна пористості покладаються рівними.

Рівняння балансу для j компоненти порового розчину запишемо у вигляді [79]

$$\rho \frac{dc_j(\tau, \xi)}{d\tau} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_j + \sigma_{mj}, \quad j = 1, \dots, 7, \quad (7.1)$$

де ρ - сумарна густина розчину; $c_j(\tau, \xi)$ - масова концентрація компоненти j ; \vec{J}_j - дифузійний потік j -ї складової; σ_{mj} - потужність виробництва маси компоненти j ($\sigma_{m0} = 0$); $d/d\tau$ - повна похідна за часом, τ - час, ξ - радіус-вектор біжучої точки.

Частинкам, які утворюють основу тіла відповідає значення індексу $j = 0$, частинкам водного розчину - індекс $j = 1$, домішковим частинкам забруднюючої речовини у конвективно рухомому розчині - $j = 2$ і у зв'язаному стані - $j = 3$, сполучі одного з основних катіонів – індекс $j = 4$, частинкам реагента – індекс $j = 5$, частинки солей кальцію або магнію, які утворилися в наслідок хімічної реакції - індекс $j = 6$ та молекулам газу, які миттєво випаровуються – індекс $j = 7$.

Дифузійний потік визначається градієнтами хімічних потенціалів, які лінійно залежать від концентрацій

$$\vec{J}_j = -L_j \vec{\nabla} c_j(\tau, \xi), \quad j = 1, \dots, 7, \quad (7.2)$$

де L_j - кінетичний коефіцієнт перенесення j -ї складової.

Прийmemo, що джерелом (стоком) маси компонент $j = 2,3$ є процеси сорбції-десорбції частинок, а компонент $j = 1,4-7$ - хімічна реакція. Вважаємо, що між компонентами $j = 1,4-7$ відбувається одна хімічна реакція у вигляді локальних внутрішніх перетворень [183], які розглядаємо як перерозподіл внутрішніх степенів свободи молекул у будь-якій точці континууму [171, 239].

Потужності виробництва маси компонент $j = 2,3$ (компонент, які приймають участь в процесах сорбції-десорбції) є пропорційними до локальної різниці хімічних потенціалів і, як наслідок, різниці концентрацій $c_j(\tau, \xi)$:

$$\sigma_{mj} = -k_j c_j(\tau, \xi) \quad (j = 2,3), \quad (7.3)$$

де k_2, k_3 - кінетичні коефіцієнти процесів сорбції і десорбції відповідно.

Якщо знехтувати зворотним переходом частинок домішки зі зв'язаного стану в розчин, то $\sigma_{m3} = 0$.

Потужності виробництва маси компонент, які приймають участь у хімічній реакції, є [183]

$$\sigma_{mj} = \nu_j J \quad (j = 1,4,\dots,7). \quad (7.4)$$

де $\nu_j = \frac{\nu_j^c M_j}{\sum_{j=1,6,7} \nu_j^c M_j}$ і в знаменнику сумування відбувається за тими компонентами,

які є продуктом хімічної реакції [171], тут ν_j^c - стехіометричний коефіцієнт j -ї компоненти, при чому $\sum_{j=1,4,\dots,7} \nu_j = 0$ [183]; M_j - молекулярна маса j -ї компоненти,

J - швидкість хімічної реакції, віднесеної до одиниці об'єму ΔV :

$$J = \sum_{j=1,4,\dots,7} \frac{1}{\nu_j} \frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{\Delta M_j}{\Delta V} \right),$$

Звідки в граничному випадку $\Delta V \rightarrow 0$ і з врахуванням означення густини j -го компонента $\rho_j(\tau, \xi) = \frac{dM_j}{dV}$ ($j = 0,\dots,7$), отримаємо локальну швидкість хімічної реакції

$$J = \sum_{j=1,4,\dots,7} \frac{1}{\nu_j} \frac{\partial \rho_j}{\partial \tau}.$$

Враховуючи, що $\rho_j = c_j \rho$, де $c_j = \rho_j / \rho$ - масові концентрації компонент, маємо

$$J = \sum_{j=1,4,\dots,7} \frac{\rho}{\nu_j} \frac{\partial c_j}{\partial \tau}. \quad (7.5)$$

Зауважимо, що відповідно до хімічної реакції (1.10) коефіцієнти ν_4 та ν_5 є від'ємними, а ν_1 , ν_6 та ν_7 - додатними.

Концентрації $c_j(\tau, \xi)$ та потоки \vec{J}_j ($j=0, \dots, 7$) задовольняють умови нормування $\sum_j c_j(\tau, \xi) = 1$ і $\sum_j \mathbf{J}_j = 0$. Густина ρ і кінетичні коефіцієнти L_j , k_j , також ν_j вважаємо сталими. Крім цього вважаємо, що всі швидкості конвективного перенесення \vec{v}_j є рівні між собою і дорівнюють швидкості конвективного перенесення водного розчину: $\vec{v}_j = \vec{v}_1 = \vec{v}$ ($j=2, 4, 5, 6$).

Вважаємо, що газ який утворився внаслідок хімічної реакції є неконденсованим і нерозчинним, він утворює бульбашки газу, для яких діють закони ідеального газу. Приймаємо, що бульбашки газу після утворення миттєво вилучаються з водного розчину. Густина такого газу підпорядковується закону ідеального газу

$$\rho_{газу} = \rho_7 = \frac{p}{RT}, \quad (7.6)$$

де T - температура рідини, p - тиск, R - універсальна газова стала. Враховуючи (7.6) зміна концентрації миттєво вилученого газу рівна нулю.

Враховуючи (7.1)-(7.5) концентрації $c_j(\tau, \xi)$ визначаємо з рівнянь:

Рівняння масоперенесення домішкових частинок, які сорбуються-десорбуються, у станах $j = 2, 3$

$$\frac{\partial c_2(\tau, \xi)}{\partial \tau} = D_2 \Delta_\xi c_2(\tau, \xi) - \vec{v} \cdot \nabla_\xi c_2(\tau, \xi) - k_2 c_2(\tau, \xi) + k_3 c_3(\tau, \xi); \quad (7.7)$$

$$\frac{\partial c_3(\tau, \xi)}{\partial \tau} = D_3 \Delta_\xi c_3(\tau, \xi) + k_2 c_2(\tau, \xi) - k_3 c_3(\tau, \xi). \quad (7.8)$$

Рівняння масоперенесення сполуки одного з основних катіонів ($j=4$) і реагента ($j=5$), що вступають у хімічну реакцію

$$\frac{\partial c_4(\tau, \xi)}{\partial \tau} = D_4 \Delta_\xi c_4(\tau, \xi) - \vec{v} \cdot \nabla_\xi c_4(\tau, \xi) - \nu_4 \sum_{j=1,4,\dots,7} \frac{\rho}{\nu_j} \frac{\partial c_j(\tau, \xi)}{\partial \tau}; \quad (7.9)$$

$$\frac{\partial c_5(\tau, \xi)}{\partial \tau} = D_5 \Delta_\xi c_5(\tau, \xi) - \vec{v} \cdot \nabla_\xi c_5(\tau, \xi) - \nu_5 \sum_{j=1,4,\dots,7} \frac{\rho}{\nu_j} \frac{\partial c_j(\tau, \xi)}{\partial \tau}. \quad (7.10)$$

Рівняння масоперенесення частинок нерозчинної речовини, що утворилися в наслідок хімічної реакції ($j = 6$)

$$\frac{\partial c_6(\tau, \xi)}{\partial \tau} = D_6 \Delta_{\xi} c_6(\tau, \xi) - \vec{v} \cdot \nabla_{\xi} c_6(\tau, \xi) + v_6 \sum_{j=1,4,\dots,7} \frac{\rho}{v_j} \frac{\partial c_j(\tau, \xi)}{\partial \tau}. \quad (7.11)$$

Балансове рівняння для миттєво випарованого газу

$$\frac{\partial c_7(\tau, \xi)}{\partial \tau} = 0. \quad (7.12)$$

Рівняння перенесення частинок води

$$\frac{\partial c_1(\tau, \xi)}{\partial \tau} = D_1 \Delta_{\xi} c_1(\tau, \xi) - \vec{v} \cdot \nabla_{\xi} c_1(\tau, \xi) + v_1 \sum_{j=1,4,\dots,7} \frac{\rho}{v_j} \frac{\partial c_j(\tau, \xi)}{\partial \tau}. \quad (7.13)$$

Тут $D_j = L_j / \rho$ - коефіцієнт дифузії j -ї компоненти.

Всі отримані рівняння масоперенесення для $j = 1, \dots, 7$ супроводжуються співвідношенням для концентрації скелету

$$c_0 = 1 - \sum_{j=1}^7 c_j. \quad (7.14)$$

Якщо перенесення у зв'язаному стані відсутнє і інтенсивність процесів десорбції є нехтовно малою, то рівняння (7.7) та (7.8) набувають вигляду

$$\frac{\partial c_2(\tau, \xi)}{\partial \tau} = D_2 \Delta_{\xi} c_2(\tau, \xi) - \vec{v} \cdot \nabla_{\xi} c_2(\tau, \xi) - k_2 c_2(\tau, \xi); \quad (7.15)$$

$$\frac{\partial c_3(\tau, \xi)}{\partial \tau} = k_2 c_2(\tau, \xi). \quad (7.16)$$

Диференціальні рівняння (7.9)-(7.16) складають математичну модель масоперенесення забрудненої важкими металами води у засипному фільтрі з пом'якшенням води додаванням реагенту.

7.1.1. Безрозмірна форма

Отримана система рівнянь моделі дозволяє звести її до природної безрозмірної форми [72], оскільки містить коефіцієнт розмірності $[сек^{-1}]$ - коефіцієнт інтенсивності сорбції k_2 . Використавши коефіцієнти дифузії та інтенсивності сорбції у стані $j = 2$, тобто домішкові частинки, що переносяться з поровим розчином і сорбуються на скелет, введемо нові змінні [79]

$$t = k_2 \tau, \quad x^{(\alpha)} = (k_2 / D_2) \xi^{(\alpha)} \quad \alpha = \overline{1,3}. \quad (7.17)$$

Зазначимо, що ті самі коефіцієнти у різних фазах можуть бути як більшими, так меншими тих, на які нормуємо (для компоненти $j = 2$).

Рівняння масоперенесення домішкових частинок, які сорбуються на скелет, у станах $j = 2, 3$

$$\frac{\partial c_2(t, \vec{x})}{\partial t} = d_2 \Delta_x c_2(t, \vec{x}) - \vec{v} \cdot \nabla_x c_2(t, \vec{x}) - a_2 c_2(t, \vec{x}); \quad (7.18)$$

$$\frac{\partial c_3(t, \vec{x})}{\partial t} = a_2 c_2(t, \vec{x}). \quad (7.19)$$

Рівняння масоперенесення сполуки одного з основних катіонів ($j = 4$) і реагента ($j = 5$), що вступають у хімічну реакцію

$$\frac{\partial c_4(t, \vec{x})}{\partial t} = d_4 \Delta_x c_4(t, \vec{x}) - \vec{v} \cdot \nabla_x c_4(t, \vec{x}) - \bar{v}_4 \sum_{j=1,4,\dots,7} \frac{\rho}{v_j} \frac{\partial c_j(t, \vec{x})}{\partial t}; \quad (7.20)$$

$$\frac{\partial c_5(t, \vec{x})}{\partial t} = d_5 \Delta_x c_5(t, \vec{x}) - \vec{v} \cdot \nabla_x c_5(t, \vec{x}) - \bar{v}_5 \sum_{j=1,4,\dots,7} \frac{\rho}{v_j} \frac{\partial c_j(t, \vec{x})}{\partial t}. \quad (7.21)$$

Рівняння масоперенесення частинок нерозчинної речовини, що утворилися в наслідок хімічної реакції ($j = 6$)

$$\frac{\partial c_6(t, \vec{x})}{\partial t} = d_6 \Delta_x c_6(t, \vec{x}) - \vec{v} \cdot \nabla_x c_6(t, \vec{x}) + \bar{v}_6 \sum_{j=1,4,\dots,7} \frac{\rho}{v_j} \frac{\partial c_j(t, \vec{x})}{\partial t}. \quad (7.22)$$

Балансове рівняння для миттєво випаровуваного газу

$$\frac{\partial c_7(t, \vec{x})}{\partial t} = 0. \quad (7.23)$$

Рівняння перенесення частинок води

$$\frac{\partial c_1(t, \vec{x})}{\partial t} = d_1 \Delta_x c_1(t, \vec{x}) - \vec{v} \cdot \nabla_x c_1(t, \vec{x}) + \bar{v}_1 \sum_{j=1,4,\dots,7} \frac{\rho}{v_j} \frac{\partial c_j(t, \vec{x})}{\partial t}, \quad (7.24)$$

де $d_j = D_j/D_2$, $d_2 = 1$; $\vec{v} = D_2 \vec{v}/k_2$, $a_2 = 1$, $a_3 = k_3/k_2$, $\bar{v}_j = \frac{D_2 v_j}{d\tau/dt} = k_2 D_2 v_j$ ($j = 1, 4, 5, 6$).

Зазначимо, що безрозмірні змінні (7.17) стискають часову вісь і розтягують просторові. При цьому не залежать від геометричних розмірів тіла або характерних розмірів мікронеоднорідностей.

7.1.2. Постановка крайової задачі

7.1.2.1. Система рівнянь масоперенесення

Розглянемо шар безрозмірної товщини x_0 ($x_0 = (k_2/D_2)\xi_0$), в якому відбуваються процеси конвективної дифузії твердого забрудненого водного розчину, що

супроводжуються процесами сорбції важких металів або органічних сполук на скелет фільтра (рис. 7.1). Система декартових координат вибрана таким чином, щоб вісь Ox була перпендикулярною до поверхні шару з початком на верхній границі шару і спрямована в глиб тіла [156]. Нехай на поверхні $x = 0$ діє стале джерело маси для домішкових частинок потужності c_0 .

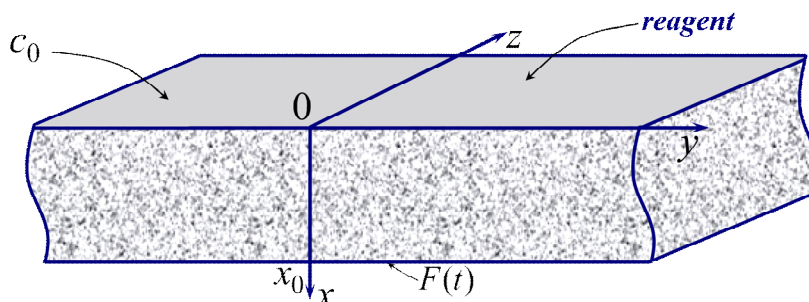


Рис. 7.1. Схематичне представлення структури фільтра

У випадку одномірної (вертикальної) конвективної дифузії система рівнянь (7.9)-(7.16) масоперенесення домішок у пористому шарі в безрозмірних змінних (7.17) зводиться до форми:

Рівняння масоперенесення домішкових частинок, які сорбуються на скелет, у станах $j = 2,3$

$$\frac{\partial c_2(t,x)}{\partial t} = d_2 \frac{\partial^2 c_2(t,x)}{\partial x^2} - v \cdot \frac{\partial c_2(t,x)}{\partial x} - a_2 c_2(t,x); \quad (7.25)$$

$$\frac{\partial c_3(t,x)}{\partial t} = a_2 c_2(t,x). \quad (7.26)$$

Рівняння масоперенесення сполуки одного з основних катіонів ($j = 4$) і реагента ($j = 5$), що вступають у хімічну реакцію

$$(1 + a_{44}) \frac{\partial c_4(t,x)}{\partial t} = d_4 \frac{\partial^2 c_4(t,x)}{\partial x^2} - v \frac{\partial c_4(t,x)}{\partial x} - \sum_{j=1,5,6,7} a_{4j} \frac{\partial c_j(t,x)}{\partial t}; \quad (7.27)$$

$$(1 + a_{55}) \frac{\partial c_5(t,x)}{\partial t} = d_5 \frac{\partial^2 c_5(t,x)}{\partial x^2} - v \frac{\partial c_5(t,x)}{\partial x} - \sum_{j=1,4,6,7} a_{5j} \frac{\partial c_j(t,x)}{\partial t}. \quad (7.28)$$

Рівняння масоперенесення частинок нерозчинної речовини, що утворилися в наслідок хімічної реакції ($j = 6$)

$$(1 - a_{66}) \frac{\partial c_6(t,x)}{\partial t} = d_6 \frac{\partial^2 c_6(t,x)}{\partial x^2} - v \frac{\partial c_6(t,x)}{\partial x} + \sum_{j=1,4,5,7} a_{6j} \frac{\partial c_j(t,x)}{\partial t}. \quad (7.29)$$

Балансове рівняння для миттєво випаровуваного (виділення) газу (7.23).

Рівняння перенесення частинок води

$$(1 - a_{11}) \frac{\partial c_1(t, x)}{\partial t} = d_1 \frac{\partial^2 c_1(t, x)}{\partial x^2} - v \frac{\partial c_1(t, x)}{\partial x} + \sum_{j=4,5,6,7} a_{1j} \frac{\partial c_j(t, x)}{\partial t}. \quad (35) \quad (7.30)$$

де $a_{kj} = \frac{\bar{v}_k \rho}{v_j}$ ($k, j = 1, 4, 5, 6$).

7.1.2.2. Початкові та граничні умови

Приймаємо, що в початковий момент часу механічний фільтр є чистим, його поровий простір заповнений незабрудненою важкими металами водою:

$$c_2(t, x)|_{t=0} = c_3(t, x)|_{t=0} = 0, \quad (7.31)$$

$$c_1(t, x)|_{t=0} = c_{10} \equiv const, \quad (7.32)$$

проте, цей розчин характеризується сталою підвищеною твердістю

$$c_4(t, x)|_{t=0} = c_{40} \equiv const, \quad (7.33)$$

реагент у тіло ще не поступив

$$c_5(t, x)|_{t=0} = 0, \quad (7.34)$$

відповідно хімічна реакція ще не відбулась і нема продуктів цієї реакції

$$c_6(t, x)|_{t=0} = c_7(t, x)|_{t=0} = 0. \quad (7.35)$$

На верхню поверхню тіла для $t > 0$ подається забруднений водний розчин підвищеної твердості зі сталою концентрацією важких металів

$$c_2(t, x)|_{x=0} = c_{20} \equiv const, \quad c_4(t, x)|_{x=0} = c_{40} \equiv const, \quad c_1(t, x)|_{x=0} \approx c_{10}, \quad (7.36)$$

а також подається однакова кількість реагенту

$$c_5(t, x)|_{x=0} = c_{50} \equiv const; \quad (7.37)$$

на верхній поверхні фільтра утворюється стала кількість речовини, що випадає в осад

$$c_6(t, x)|_{x=0} = c_{60} = const. \quad (7.38)$$

На нижній границі фільтра $x = x_0$ відомо (або можна виміряти) значення функції концентрації важких металів $c_2(t, x)$ в певні моменти часу:

Таблиця 7.1. Функції концентрації важких металів $c_2(t, x)$ в певні моменти часу

t	t_1	t_2	...	t_i	...	t_n
$F(t)$	$F(t_1)$	$F(t_2)$...	$F(t_i)$...	$F(t_n)$

Якщо за цими експериментальними даними побудований апроксимаційний поліном степені M , тоді гранична умова при $x = x_0$ набуде вигляду

$$c_2(t, x)|_{x=x_0} = \sum_{k=0}^M b_k t^k, \quad (7.39)$$

де b_k - коефіцієнти апроксимаційного поліному.

Вважаємо, що внаслідок хімічної реакції сполука одного з основних катіонів на нижній границі фільтра відсутня

$$c_4(t, x)|_{x=x_0} = 0, \quad (7.40)$$

також весь реагент прийняв участь у хімічній реакції розкладу сполуки одного з основних катіонів:

$$c_5(t, x)|_{x=x_0} = 0, \quad (7.41)$$

при цьому на границі $x = x_0$ відома стала кількість нерозпадної речовини, що випадає в осад

$$c_6(t, x)|_{x=x_0} = c_{6*} \equiv const. \quad (7.42)$$

Крім цього накладається умова

$$c_1(t, x)|_{x=x_0} = c_{10} + \Delta = c_{1*}. \quad (7.43)$$

Якщо врахуємо, що внаслідок хімічної реакції концентрація води змінюється незначно і приймемо, наприклад, що $\Delta = 0$, то $c_1(t, x)$ є сталою. Тоді сформульована крайова задача розпадається на дві крайові задачі: задача конвективної дифузії у середовищі з пастками (7.25), (7.26), (7.31), (7.36), (7.39) і задача масоперенесення сполуки одного з основних катіонів та реагента, що вступають у хімічну реакцію, (7.23), (7.29), (7.30), (7.32)-(7.38), (7.40)-(7.42).

7.1.2.3. Модельний опис хімічної реакції пом'якшення води

Ми розглядаємо випадок, коли для пом'якшення води на поверхню фільтра подається реагент, який спричинює, наприклад хімічну реакцію (1.10), що описується співвідношеннями (7.6)-(7.8). На рис. 7.2 показана схема хімічної взаємодії двох речовин з стехіометричними коефіцієнтами ν_4 та ν_5 . Для того щоби повністю прореагував діоксид кальцію CaO_2 необхідно додати оцтову кислоту CH_3COOH у співвідношенні 9 до 4 (варіант 1 на рис. 7.2). Для цього випадку стехіометричні коефіцієнти позначимо верхнім індексом "c". Тоді $\nu_1^c = 6$ - стехіометричний коефіцієнт

води, $\nu_4^c=4$ - стехіометричний коефіцієнт катіону, $\nu_5^c=9$ - стехіометричний коефіцієнт реагенту, $\nu_6^c=4$ - стехіометричний коефіцієнт осаду, $\nu_7^c=2$ - стехіометричний коефіцієнт газу. В результаті такої хімічної реакції отримаємо речовини з коефіцієнтами ν_1^c , ν_6^c , ν_7^c , масоперенесення яких описується рівняннями (7.23), (7.29), (7.30). Тоді система рівнянь моделі включає співвідношення (7.25), (7.26), (7.23), (7.29), (7.30).

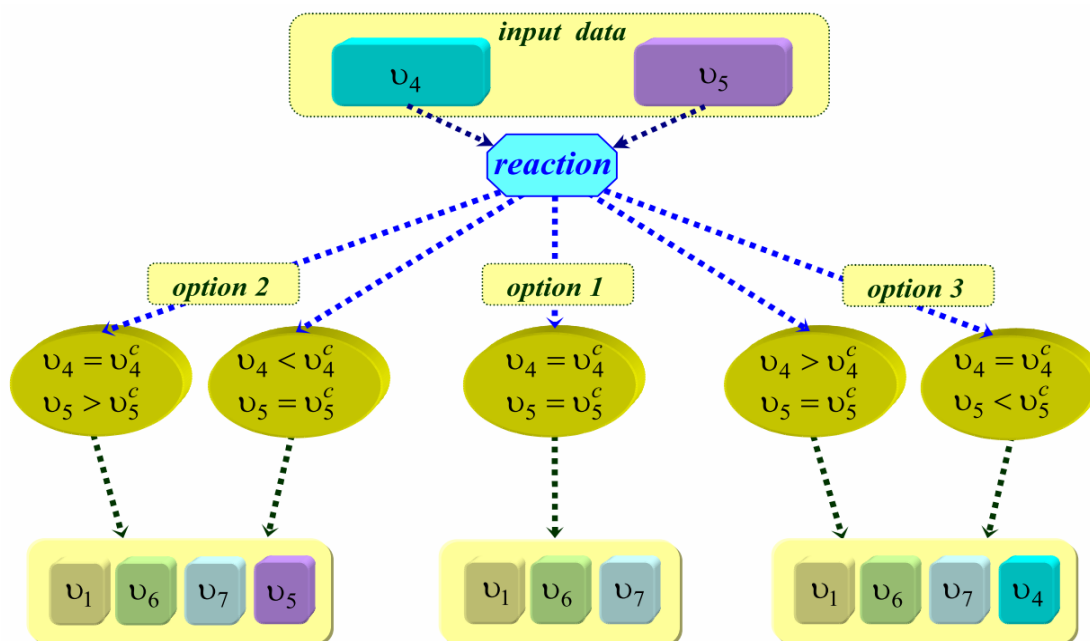


Рис. 7.2. Схема хімічної реакції двох речовин з коефіцієнтами ν_4 та ν_5

Якщо на верхню поверхню подано більшу кількість реагенту ніж необхідно для проходження повної реакції (варіант 2 на рис. 7.2), то в результаті отримаємо речовини з коефіцієнтами ν_1 , ν_5 , ν_6 , ν_7 . В цьому випадку система рівнянь моделі складається з рівнянь (7.25), (7.26), (7.23), (7.28), (7.29), (7.30).

Якщо на верхню поверхню подано меншу кількість реагенту ніж необхідно для проходження повної реакції (варіант 3 на рис. 7.2), то в результаті отримаємо речовини з коефіцієнтами ν_1 , ν_4 , ν_6 , ν_7 . В цьому випадку система рівнянь моделі складається з рівнянь (7.23), (7.25)-(7.27), (7.29), (7.30).

Для концентрацій $c_4(t, x)$, $c_5(t, x)$ та $c_6(t, x)$ характерна наступна закономірність: скільки лишилося речовини після хімічної реакції на поверхні $x=0$, стільки промігрувало через шар і вийшло на поверхню $x=x_0$.

Зазначимо, що у варіантах 2 і 3 рівності $v_j = v_j^c$ є максимальними значеннями величин v_j , за яких справджуються відповідні результати хімічної реакції.

7.2. Крайова задача конвективної дифузії у середовищі з пастками за експериментальних даних на нижній границі фільтра

Розглянемо крайову задачу конвективної дифузії частинок забруднення у середовищі з пастками, якщо на верхній границі шару діє стале джерело маси, а на нижній границі побудований апроксимаційний поліном степені M за відомими експериментальними дані в певні моменти часу (7.25), (7.26), (7.31), (7.39), (7.43).

Рівняння (7.26) можна проінтегрувати. З урахуванням початкових умов (7.31) маємо

$$c_3(t, x) = a_2 \int_0^t c_2(t', x) dt'. \quad (7.44)$$

Знайдемо розв'язок крайової задачі (7.25), (7.31), (7.39), (7.43) зведенням до нульових граничних умов і застосуванням скінченного інтегрального перетворення (6.33), (6.34) за просторовою координатою x та інтегрального перетворення Лапласа за часом.

Зробимо наступну заміну

$$w(t, x) = c_2(t, x) - c_{20} \left(1 - \frac{x}{x_0}\right) - \sum_{k=0}^M b_k t^k \frac{x}{x_0}. \quad (7.47)$$

Тоді одержимо крайову задачу у вигляді

$$\frac{\partial w}{\partial t} = d_2 \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} - v \frac{\partial w}{\partial x} - a_2 w - \left[\frac{v}{x_0} + a_2 \frac{x}{x_0} \right] \sum_{k=0}^M b_k t^k - \frac{x}{x_0} \sum_{k=0}^M k b_k t^{k-1} + v \frac{c_{20}}{x_0} - a_2 c_{20} \left(1 - \frac{x}{x_0}\right), \quad (7.48)$$

$$w(x, t)|_{t=0} = -c_{20} \left(1 - \frac{x}{x_0}\right), \quad (7.49)$$

$$w(x, t)|_{x=0} = 0, \quad w(x, t)|_{x=x_0} = 0. \quad (7.50)$$

Знайдемо перетворення від комплексу $d_2 \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} - v \frac{\partial w}{\partial x}$ з урахуванням (7.50):

$$L_1 \left(d_2 \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} - v \frac{\partial w}{\partial x} \right) = \int_0^{x_0} \left(d_2 \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} - v \frac{\partial w}{\partial x} \right) e^{-v_d x} \sin(y_n x) dx = -d_2 (y_n^2 + v_d^2) \bar{w}(t, n), \quad (7.51)$$

де $v_d = \frac{v}{2d_2}$, а також врахуємо, що

$$L_1(K) = \int_0^{x_0} K e^{-v_d x} \sin(y_n x) dx = K \frac{y_n}{v_d^2 + y_n^2} \left[1 + (-1)^{n+1} e^{-v_d x_0} \right],$$

$$L_1(x) = \int_0^{x_0} x e^{-v_d x} \sin(y_n x) dx = \frac{y_n}{v_d^2 + y_n^2} \left[\frac{2v_d}{v_d^2 + y_n^2} + (-1)^{n+1} e^{-v_d x_0} \left(x_0 + \frac{2v_d}{v_d^2 + y_n^2} \right) \right],$$

$$L_1\left(1 - \frac{x}{x_0}\right) = \int_0^{x_0} \left(1 - \frac{x}{x_0}\right) e^{-v_d x} \sin(y_n x) dx = \frac{y_n}{v_d^2 + y_n^2} \left[1 - \frac{1}{x_0} \frac{2v_d}{v_d^2 + y_n^2} \left(1 + (-1)^{n+1} e^{-v_d x_0} \right) \right].$$

Тоді застосування інтегрального перетворення (7.45) до крайової задачі (7.48)-(7.50) приводить до наступної задачі в зображеннях

$$\frac{\partial \bar{w}}{\partial t} = -[d_2(y_n^2 + v_d^2) + a_2] \bar{w} - \sum_{k=0}^M b_k t^k A_n - \sum_{k=0}^M b_k k t^{k-1} Q_n + B_n, \quad (7.52)$$

$$\bar{w}(t, n)|_{t=0} = -c_{20} v_{yn} \left[1 - \frac{1}{x_0} \frac{2v_d}{v_d^2 + y_n^2} \left(1 + (-1)^{n+1} e^{-v_d x_0} \right) \right], \quad (7.53)$$

де $v_{yn} = \frac{y_n}{v_d^2 + y_n^2}$, $A_n = \frac{v_{yn}}{x_0} \left\{ v \left[1 + (-1)^{n+1} e^{-v_d x_0} \right] + a_2 \left[\frac{2v_d}{v_d^2 + y_n^2} + (-1)^{n+1} e^{-v_d x_0} \left(x_0 + \frac{2v_d}{v_d^2 + y_n^2} \right) \right] \right\}$;

$$Q_n = \frac{v_{yn}}{x_0} \left[\frac{2v_d}{v_d^2 + y_n^2} + (-1)^{n+1} e^{-v_d x_0} \left(x_0 + \frac{2v_d}{v_d^2 + y_n^2} \right) \right];$$

$$B_n = v \frac{c_{20}}{x_0} v_{yn} \left[1 + (-1)^{n+1} e^{-v_d x_0} \right] - a_2 c_{20} v_{yn} \left[1 - \frac{1}{x_0} \frac{2v_d}{v_d^2 + y_n^2} \left(1 + (-1)^{n+1} e^{-v_d x_0} \right) \right].$$

До задачі (7.52), (7.53) застосуємо інтегральне перетворення Лапласа L_2 [259] і врахуємо, що [8, 162, 209]

$$L_2 \left[\sum_{k=0}^M Q_n k b_k t^{k-1} \right] = \sum_{k=1}^M Q_n k b_k \frac{\Gamma(k)}{s^k}$$

(тут можемо сумувати як від $k=0$, так і від $k=1$, оскільки при $k=0$ член суми дорівнює нулю);

$$L_2 \left[\sum_{k=0}^M b_k A_n t^k \right] = \sum_{k=0}^M b_k A_n \frac{\Gamma(k+1)}{s^{k+1}},$$

де $\Gamma(k)$ - гамма-функція [109] і $\Gamma(k) = (k-1)!$, $k \in N$.

У зображеннях ($t \rightarrow s$, $\bar{w}(t, n) \rightarrow \tilde{w}(s, n)$) маємо рівняння

$$[s + a_n] \tilde{w} = - \sum_{k=0}^M b_k A_n \frac{\Gamma(k+1)}{s^{k+1}} - \sum_{k=0}^M b_k k Q_n \frac{\Gamma(k)}{s^k} - \frac{B_n}{s} - c_{20} v_{yn} \left[1 - \frac{1}{x_0} \frac{2v_d}{y_n} \left(1 + (-1)^{n+1} e^{-v_d x_0} \right) \right],$$

звідки одержимо розв'язок

$$\tilde{w} = \frac{1}{[s + a_n]} \left\{ - \sum_{k=0}^M b_k A_n \frac{\Gamma(k+1)}{s^{k+1}} - \sum_{k=0}^M b_k k Q_n \frac{\Gamma(k)}{s^k} - \frac{B_n}{s} - c_{20} v_{yn} \left[1 - \frac{1}{x_0} \frac{2v_d}{y_n} \left(1 + (-1)^{n+1} e^{-v_d x_0} \right) \right] \right\}, \quad (7.54)$$

де $a_n = d_2(y_n^2 + v_d^2) + a_2$.

Використаємо формули оберненого перетворення Лапласа (3.12) і [109, 209]

$$L^{-1} \left[\frac{1}{s^k [s + a_n]} \right] = \sum Res \left[\frac{e^{st}}{s^k [s + a_n]} \right],$$

де $Res[\dots]$ - лишки, які для випадку кратних коренів визначаються за теоремою Хевісайда [198, 209]:

$$\sum Res \left[\frac{e^{st}}{s^k [s + a_n]} \right] = \frac{e^{-a_n t}}{(-1)^k a_n^k} + \frac{1}{(k-1)!} \lim_{s \rightarrow 0} \frac{d^{k-1}}{ds^{k-1}} \left[\frac{e^{st}}{(s + a_n)^k} \right]. \quad (7.57)$$

Для даної задачі випишемо вирази останнього доданку (7.57) для перших семи кратностей полюсів поліному в знаменнику степеня M відносно s

$$\begin{aligned} k=1: \lim_{s \rightarrow 0} \left[\frac{e^{st}}{(s + a_n)} \right] &= \frac{1}{a_n}, \\ k=2: \frac{1}{(k-1)!} \lim_{s \rightarrow 0} \frac{d^{k-1}}{ds^{k-1}} \left[\frac{e^{st}}{(s + a_n)^k} \right] &= \lim_{s \rightarrow 0} \frac{d}{ds} \left[\frac{e^{st}}{(s + a_n)^2} \right] = \frac{ta_n - 2}{a_n^3}, \\ k=3: \lim_{s \rightarrow 0} \frac{d^2}{ds^2} \left[\frac{e^{st}}{(s + a_n)^3} \right] &= \frac{t^2 a_n^2 - 6ta_n + 12}{a_n^5}, \\ k=4: \lim_{s \rightarrow 0} \frac{d^3}{ds^3} \left[\frac{e^{st}}{(s + a_n)^4} \right] &= \frac{t^3 a_n^3 - 12t^2 a_n^2 + 60ta_n - 120}{a_n^7}, \end{aligned} \quad (7.58)$$

$$\begin{aligned}
k = 5: \lim_{s \rightarrow 0} \frac{d^4}{ds^4} \left[\frac{e^{st}}{(s + a_n)^5} \right] &= \frac{t^4 a_n^4 - 20t^3 a_n^3 + 180t^2 a_n^2 - 840t a_n + 1680}{a_n^9}, \\
k = 6: \lim_{s \rightarrow 0} \frac{d^5}{ds^5} \left[\frac{e^{st}}{(s + a_n)^6} \right] &= \frac{t^5 a_n^5 - 30t^4 a_n^4 + 420t^3 a_n^3 - 3360t^2 a_n^2 + 15120t a_n - 30240}{a_n^{11}}, \\
k = 7: \lim_{s \rightarrow 0} \frac{d^6}{ds^6} \left[\frac{e^{st}}{(s + a_n)^7} \right] &= \\
&= \frac{t^6 a_n^6 - 42t^5 a_n^5 + 840t^4 a_n^4 - 10080t^3 a_n^3 + 75600t^2 a_n^2 - 332640t a_n + 665280}{a_n^{13}},
\end{aligned}$$

і тому подібне.

Отже, після оберненого перетворення Лапласа функції (7.54) отримаємо

$$\begin{aligned}
\bar{w}(t, n) = -c_{20} v_{yn} \left[1 - \frac{1}{x_0} \frac{2v_d}{y_n} \left(1 + (-1)^{n+1} e^{-v_d x_0} \right) \right] e^{-a_n t} - B_n \frac{1}{a_n} \left\{ 1 - e^{-a_n t} \right\} - \\
- \sum_{k=0}^M b_k \Gamma(k+1) \frac{e^{-a_n t}}{(-1)^k a_n^k} \left(Q_n - \frac{A_n}{a_n} \right) - \\
- \sum_{k=1}^M b_k \frac{\Gamma(k+1)}{(k)!} \left(A_n \lim_{s \rightarrow 0} \frac{d^k}{ds^k} \left[\frac{e^{st}}{(s + a_n)^{k+1}} \right] + Q_n k \lim_{s \rightarrow 0} \frac{d^{k-1}}{ds^{k-1}} \left[\frac{e^{st}}{(s + a_n)^k} \right] \right). \quad (7.59)
\end{aligned}$$

Після застосування оберненого інтегрального перетворення (7.46) до виразу (7.59) та формули (7.47) в результаті одержимо

$$\begin{aligned}
c_2(t, x) = c_{20} \left(1 - \frac{x}{x_0} \right) + \sum_{k=0}^M b_k t^k \frac{x}{x_0} + \\
+ \frac{2}{x_0} \exp(v_d x) \sum_{n=1}^{\infty} \sin(y_n x) \left\{ -c_{20} v_{yn} \left[1 - \frac{1}{x_0} \frac{2v_d}{y_n} \left(1 + (-1)^{n+1} e^{-v_d x_0} \right) \right] e^{-a_n t} - \right. \\
- B_n \frac{1}{a_n} \left\{ 1 - e^{-a_n t} \right\} - \sum_{k=0}^M b_k \Gamma(k+1) \frac{e^{-a_n t}}{(-1)^k a_n^k} \left(Q_n - \frac{A_n}{a_n} \right) - \\
\left. - \sum_{k=1}^M b_k \frac{\Gamma(k+1)}{(k)!} \left(A_n \lim_{s \rightarrow 0} \frac{d^k}{ds^k} \left[\frac{e^{st}}{(s + a_n)^{k+1}} \right] + Q_n k \lim_{s \rightarrow 0} \frac{d^{k-1}}{ds^{k-1}} \left[\frac{e^{st}}{(s + a_n)^k} \right] \right) \right\}. \quad (7.60)
\end{aligned}$$

Для знаходження концентрації частинок у зв'язаному стані ($j = 3$) підставимо отриману формулу (7.60) у співвідношення (7.44) та проінтегруємо його. В результаті маємо

$$\begin{aligned}
\frac{c_3(t, x)}{a_2} &= c_{20} \left(1 - \frac{x}{x_0}\right) t + \sum_{k=0}^M \frac{b_k t^{k+1} x}{(k+1)x_0} + \\
&+ \frac{2}{x_0} \exp(v_d x) \sum_{n=1}^{\infty} \sin(y_n x) \left\{ -\frac{c_{20} v_{yn}}{a_n} \left[1 - \frac{1}{x_0} \frac{2v_d}{y_n} \left(1 + (-1)^{n+1} e^{-v_d x_0}\right) + \frac{B_n}{a_n} \right] (1 - e^{-a_n t}) - \right. \\
&- B_n \frac{t}{a_n} - \sum_{k=0}^M b_k \Gamma(k+1) \frac{(1 - e^{-a_n t})}{(-1)^k a_n^{k+1}} \left(Q_n - \frac{A_n}{a_n} \right) - \\
&\left. - \sum_{k=1}^M b_k \frac{\Gamma(k+1)}{(k)!} \int_0^t \left(A_n \lim_{s \rightarrow 0} \frac{d^k}{ds^k} \left[\frac{e^{st'}}{(s+a_n)^{k+1}} \right] + Q_n k \lim_{s \rightarrow 0} \frac{d^{k-1}}{ds^{k-1}} \left[\frac{e^{st'}}{(s+a_n)^k} \right] \right) dt' \right\}, \quad (7.61)
\end{aligned}$$

$$\text{де: } k=1: \int_0^t \lim_{s \rightarrow 0} \left[\frac{e^{st'}}{(s+a_n)} \right] dt' = \frac{t}{a_n},$$

$$k=2: \int_0^t \frac{1}{(k-1)!} \lim_{s \rightarrow 0} \frac{d^{k-1}}{ds^{k-1}} \left[\frac{e^{st'}}{(s+a_n)^k} \right] dt' = \int_0^t \frac{t' a_n - 2}{a_n^3} dt' = \frac{t^2}{2a_n^2} - \frac{2t}{a_n^3},$$

$$k=3: \int_0^t \lim_{s \rightarrow 0} \frac{d^2}{ds^2} \left[\frac{e^{st'}}{(s+a_n)^3} \right] dt' = \frac{t^3}{3a_n^3} - \frac{3t^2}{a_n^4} + 12 \frac{t}{a_n^5},$$

$$k=4: \int_0^t \lim_{s \rightarrow 0} \frac{d^3}{ds^3} \left[\frac{e^{st'}}{(s+a_n)^4} \right] dt' = \frac{t^4}{4a_n^4} - \frac{4t^3}{a_n^5} + \frac{30t^2}{a_n^6} - \frac{120t}{a_n^7},$$

$$k=5: \int_0^t \lim_{s \rightarrow 0} \frac{d^4}{ds^4} \left[\frac{e^{st'}}{(s+a_n)^5} \right] dt' = \frac{t^5}{5a_n^5} - \frac{5t^4}{a_n^6} + \frac{60t^3}{a_n^7} - \frac{420t^2}{a_n^8} + \frac{1680t}{a_n^9},$$

$$k=6: \int_0^t \lim_{s \rightarrow 0} \frac{d^5}{ds^5} \left[\frac{e^{st'}}{(s+a_n)^6} \right] dt' = \frac{t^6}{6a_n^6} - \frac{6t^5}{a_n^7} + \frac{105t^4}{a_n^8} - \frac{1120t^3}{a_n^9} + \frac{7560t^2}{a_n^{10}} - \frac{30240t}{a_n^{11}},$$

$$k=7: \int_0^t \lim_{s \rightarrow 0} \frac{d^6}{ds^6} \left[\frac{e^{st'}}{(s+a_n)^7} \right] dt' =$$

$$= \frac{t^7}{7a_n^7} - \frac{7t^6}{a_n^8} + \frac{168t^5}{a_n^9} - \frac{2520t^4}{a_n^{10}} + \frac{25200t^3}{a_n^{11}} - \frac{166320t^2}{a_n^{12}} + \frac{665280t}{a_n^{13}}$$

і тому подібне.

Зазначимо, що оскільки гранична умова (7.39) на поверхні шару $x = x_0$ задана як поліном за степенями часової змінної, який апроксимує експериментальні дані, виміря-

ні на цій границі, на часовому проміжку $t \in [0; t_n]$, то отримана формула для концентрації домішкової речовини (7.60) є застосовною саме в цьому часовому інтервалі.

7.3. Числовий аналіз концентрації частинок забруднення, які переносяться поровим розчином

Дослідимо функцію концентрації забруднюючих частинок, які мігрують у водному розчині, на основі формули (7.60) [163]. Розрахунки проведено у безрозмірних змінних (7.17). Тоді коефіцієнти нормування дорівнюють одиниці, тобто $d_2 = 1$ і $a_2 = 1$. Прийемо, що безрозмірна товщина фільтра $x_0 = 1$ [65]. Точність обчислення рядів становить 10^{-6} .

Розглянемо два випадки наборів експериментальних даних для $\frac{c_2(t, x)}{c_{20}}$ на нижній границі фільтра в моменти часу t_i , $i = 1, \dots, 22$. Перший з них, поданий в Табл. 7.2, відповідає ефективній роботі фільтра, а другий набір, наведений у Табл. 7.3, - значно менш ефективному очищенню водного розчину. На основі цих даних будуємо апроксимаційні поліноми 5-ї степені: $M = 5$.

Таблиця 7.2. Експериментальні значення функції концентрації $c_2(t, x)/c_{20}$ на нижній границі $x = x_0$ в певні моменти часу за якісного очищення водного розчину

	t_1	t_2	t_3	t_4	t_5	t_5	t_7	t_8	t_9	t_{10}	t_{11}
t_i	0	0.035	0.07	0.105	0.14	0.175	0.21	0.245	0.28	0.315	0.35
$F(t_i)$	0	0	0.0007	0.00085	0.0013	0.0039	0.0175	0.0315	0.0455	0.0545	0.062
	t_{12}	t_{13}	t_{14}	t_{15}	t_{16}	t_{17}	t_{18}	t_{19}	t_{20}	t_{21}	t_{22}
t_i	0.385	0.42	0.455	0.49	0.525	0.56	0.595	0.63	0.665	0.7	0.735
$F(t_i)$	0.066	0.0725	0.082	0.0905	0.096	0.0965	0.097	0.098	0.099	0.098	0.1

Апроксимаційний поліном, побудований за даними, наведеними у Табл. 7.2, має вигляд

$$F(t) = b_0 + b_1 t + b_2 t^2 + b_3 t^3 + b_4 t^4 + b_5 t^5, \quad (7.62)$$

де $b_0 = -0.000199144132$; $b_1 = -0.134459778795$; $b_2 = 1.345898697464$;

$b_3 = -0.747575263503$; $b_4 = -2.551264921144$; $b_5 = 2.393736575580$.

Графічно представлені значення експериментальних даних щодо концентрації речовини $\frac{c_2(t, x)}{c_{20}}$ на нижній границі тіла, побудовані за табл. 7.2, показані на рис. 7.3а. Графік відповідного апроксимаційного поліному 5-ї степені, побудованого за формулою (7.62), наведено на рис. 7.3б.

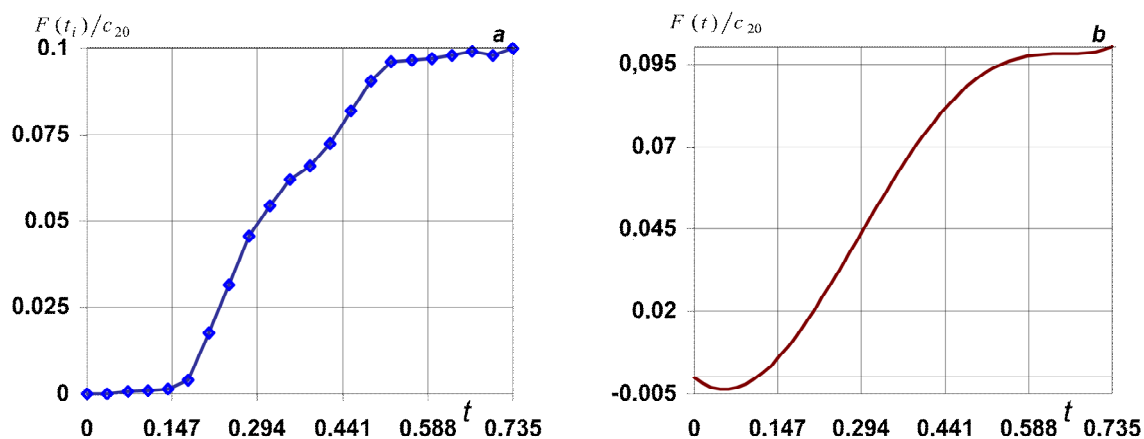


Рис. 7.3. Задані експериментальні дані (рис. а) та відповідний апроксимаційний поліном 5-ї степені (рис. б) за даними табл. 7.2

На рис. 7.4. наведено концентрацію частинок забруднення, які переносяться поровим розчином $\frac{c_2(t, x)}{c_{20}}$, в різні моменти безрозмірного часу $t = 0.001, 0.01, 0.15, 0.3, 0.45, 0.6, 0.72$ (криві 1-7) для таких коефіцієнтів швидкості конвективного перенесення: $\nu = 0.8$ (рис. 7.4а) та $\nu = 1.5$ (рис. 7.4б).

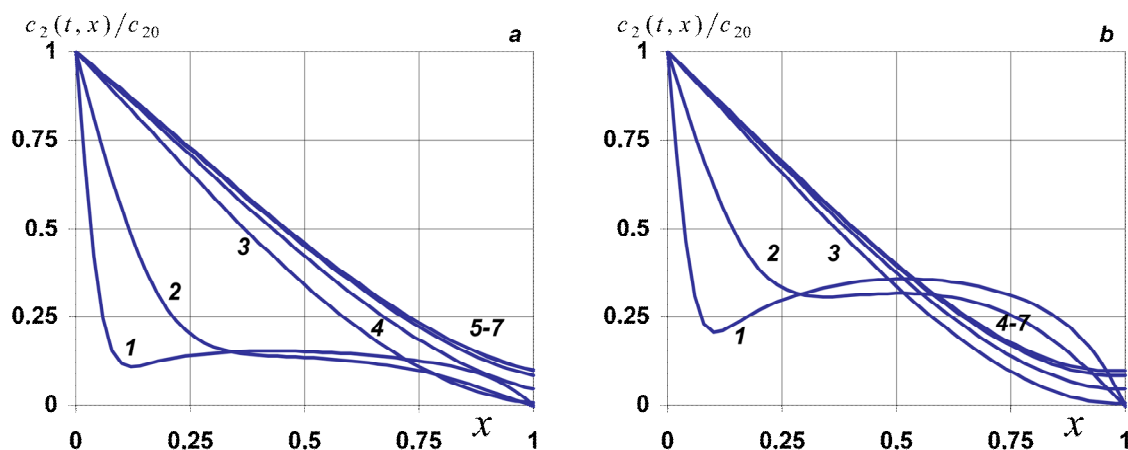


Рис. 7.4. Концентрація частинок забруднення, які переносяться поровим розчином, в різні моменти часу t для $\nu = 0.8$ (рис. а) та $\nu = 1.5$ (рис. б) за даними табл. 7.2

На рис. 7.5 продемонстровано розподіли функції концентрації частинок забруднення, які переносяться водним розчином $\frac{c_2(t, x)}{c_{20}}$, для різних коефіцієнтів

швидкості конвективного перенесення $\nu = 0.8, 1.2, 1.5, 2, 2.5$ (криві 1-5) в моменти часу $t = 0.01$ (рис. 7.5a), $t = 0.12$ (рис. 7.5b) та $t = 0.7$ (рис. 7.5c).

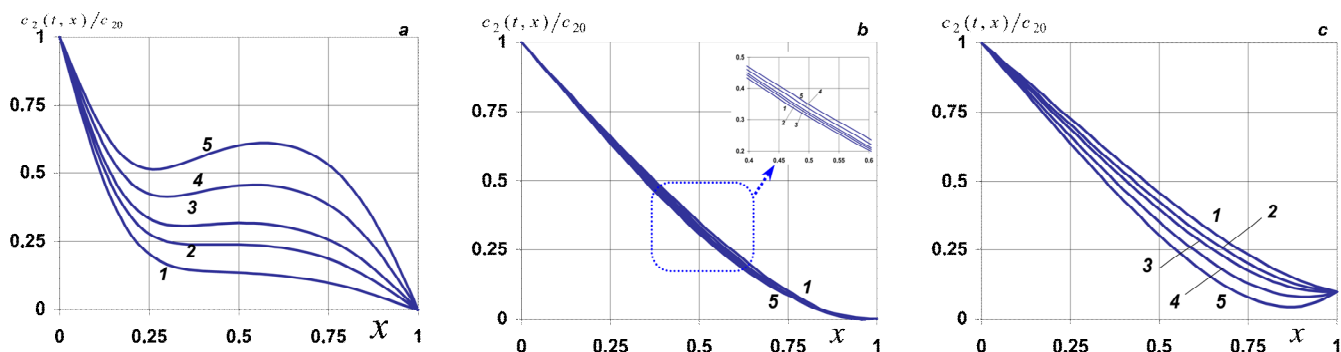


Рис. 7.5. Концентрація частинок забруднення, які переносяться водним розчином, для різних коефіцієнтів швидкості конвективного перенесення ν в моменти часу $t = 0.01$ (рис. а), $t = 0.12$ (рис. б) та $t = 0.7$ (рис. с) за даними табл. 7.2

Зазначимо, що для малих швидкостей конвективного перенесення з часом концентрація у водному розчині збільшується (рис. 7.4a) доки не вийде на стаціонарний режим (криві 6 та 7, рис. 7.4a). Для малих часів спостерігається різке падіння функції $\frac{c_2(t, x)}{c_{20}}$ від поверхні, де діє джерело маси. Наприклад, концентрація в момент часу

$t = 0.001$ досягає свого мінімуму на проміжку $x \in (0.1; 0.13)$ для всіх значень коефіцієнта ν (криві 1, рис. 7.4a та 7.4b). На наступному проміжку концентрація зростає, а в нижній половині фільтра знову спадає (рис. 7.4). При цьому чим більші значення коефіцієнта конвективного перенесення, тим більшими є значення мінімуму

і максимуму функції $\frac{c_2(t, x)}{c_{20}}$ (рис. 7.5a). Зі збільшенням часу протікання процесу кон-

вективної дифузії значення функції концентрації в середині тіла поступово зменшуються, причому відбувається зменшення різниці між значеннями $\frac{c_2(t, x)}{c_{20}}$ для різ-

них значень коефіцієнта ν . Тоді на проміжку $t \in (0.1; 0.15)$ ці значення практично співпадають. Для $t > 0.12$ зростання різниці між значеннями $\frac{c_2(t, x)}{c_{20}}$ для різних ν по-

чинається в околі нижньої границі фільтра (рис. 7.5b). Для $t > 0.15$ чим більшим є значення швидкості конвективного перенесення, тим менші значення приймає функція $c_2(t, x)$ (рис. 7.5c). Також відзначимо, що чим більшим є значення ν , тим швидше концентрація забруднюючих частинок у водному розчині виходить на усталений режим.

Тепер проаналізуємо розподіли функції $\frac{c_2(t, x)}{c_{20}}$ для експериментальних даних на

нижній границі фільтра, які відповідають менш ефективному очищенню водного розчину (табл. 7.3). Виміри проведено в ті самі моменти часу t_i , $i = 1, \dots, 22$, що і в табл. 7.2.

Таблиця 7.3. Експериментальні значення функції концентрації $c_2(t, x)/c_{20}$ на нижній границі $x = x_0$ в певні моменти часу для не дуже якісного очищення водного розчину

	t_1	t_2	t_3	t_4	t_5	t_5	t_7	t_8	t_9	t_{10}	t_{11}
t_i	0	0.035	0.07	0.105	0.14	0.175	0.21	0.245	0.28	0.315	0.35
$F(t_i)$	0	0.00219	0.003319	0.007655	0.015061	0.029182	0.054661	0.09839	0.142119	0.170231	0.193657
	t_{12}	t_{13}	t_{14}	t_{15}	t_{16}	t_{17}	t_{18}	t_{19}	t_{20}	t_{21}	t_{22}
t_i	0.385	0.42	0.455	0.49	0.525	0.56	0.595	0.63	0.665	0.7	0.735
$F(t_i)$	0.218151	0.236454	0.256127	0.282677	0.29656	0.301418	0.30298	0.306103	0.309227	0.3103	0.311235

За експериментальними даними табл. 7.3 будемо апроксимаційний поліном 5 степені (7.62) з коефіцієнтами $b_0 = -0.000516262216299482$; $b_1 = -0.294647909545$; $b_2 = 3.339069571396$; $b_3 = 0.105019957599$; $b_4 = -11.160897571623$; $b_5 = 9.057142477313$.

Графік експериментальних даних щодо концентрації забруднюючої речовини $\frac{c_2(t, x)}{c_{20}}$ на нижній границі тіла, побудований за даними табл. 3, показаний на рис. 7.6а. Графік відповідного апроксимаційного поліному 5-ї степені, побудованого за формулою (7.62), наведено на рис. 7.6б.

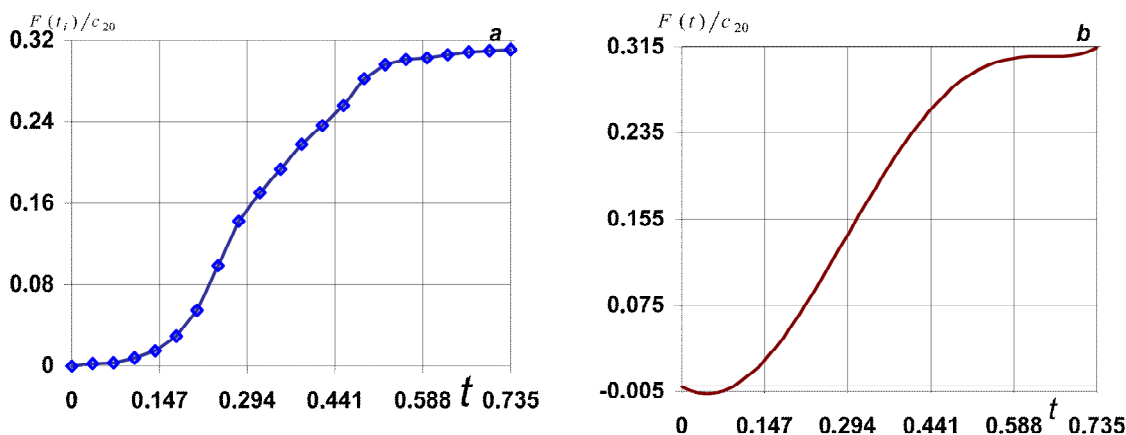


Рис. 7.6. Задані експериментальні дані (рис. а) та відповідний апроксимаційний поліном 5-ї степені (рис. б) за даними таблиці 7.3

Рис. 7.7 демонструє поведінку функції концентрації частинок забруднення, які переносяться водним розчином, $\frac{c_2(t, x)}{c_{20}}$, порахованої за даними табл. 7.3 в різні моменти безрозмірного часу $t=0.001, 0.01, 0.15, 0.3, 0.45, 0.6, 0.72$ (криві 1-7) для таких коефіцієнтів швидкості конвективного перенесення: $v=0.8$ (рис. 7.7a) та $v=1.5$ (рис. 7.7b).

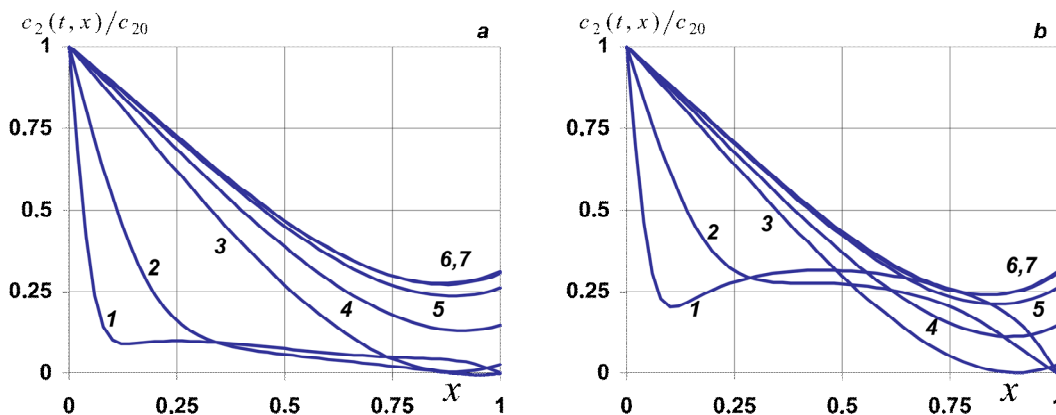


Рис. 7.7. Концентрація частинок забруднення, які переносяться водним розчином, в різні моменти часу t для $v=0.8$ (рис. a) та $v=1.5$ (рис. b) за даними табл. 7.3

На рис. 7.8 проілюстровано розподіли функції $c_2(t, x)/c_{20}$, порахованої за даними таблиці 3 для різних коефіцієнтів швидкості конвективного перенесення $v=0.8, 1.2, 1.5, 2, 2.5$ (криві 1-5) в моменти часу $t=0.01$ (рис. 7.8a), $t=0.19$ (рис. 7.8b) та $t=0.7$ (рис. 7.8c).

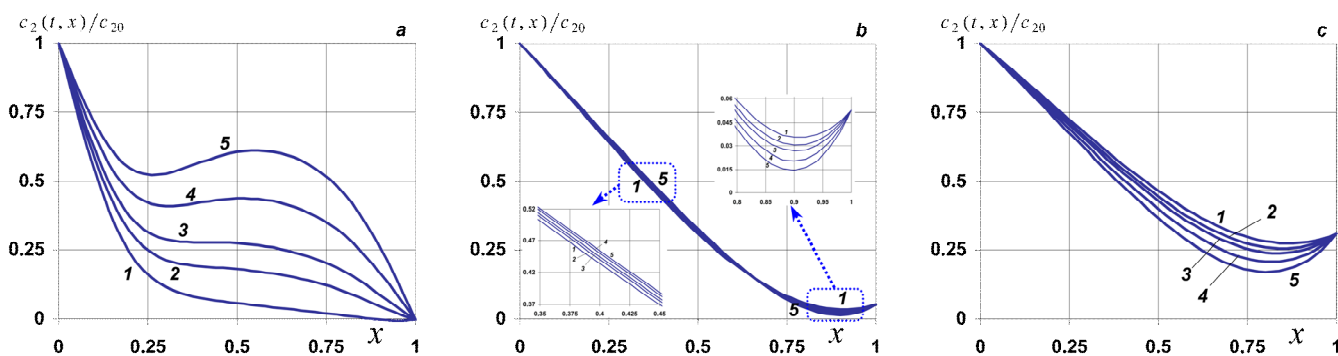


Рис. 7.8. Концентрація частинок забруднення, які переносяться водним розчином, для різних коефіцієнтів швидкості конвективного перенесення v в моменти часу $t=0.01$ (рис. a), $t=0.19$ (рис. b) та $t=0.7$ (рис. c) за даними табл. 7.3

Зазначимо, що для малих часів поведінка та значення функції концентрації, пораховані за даними табл. 7.2 і 7.3, практично співпадають, незначно відрізняючись лише біля нижньої границі фільтра (рис. 7.5a і 7.8a). Для більших часів поведінка функції $c_2(t, x)/c_{20}$, порахованої за даними табл. 7.3, подібна до поведінки функції,

порахованої за даними табл. 7.2. Проте часовий інтервал найменшої різниці між значеннями $c_2(t, x)/c_{20}$ для різних ν настає пізніше, а саме $t \in (0.14, 0.2)$ (рис. 7.8b). Для $t > 0.2$ значення концентрації $c_2(t, x)/c_{20}$, пораховані за табл. 7.3, є більшими на всьому проміжку $x \in (0, 1)$, ніж у випадку вхідних даних табл. 7.2 (рис. 7.5c і 7.8c). Причому різниця між ними може сягати 60%.

На Рис. 7.9 наведено порівняльні розподіли функції $c_2(t, x)/c_{20}$ для різних товщин фільтра $x_0 = 0.4, 0.6, 0.8, 1, 1.2$ (криві 1-5) для $\nu = 1.5$ в момент часу $t = 0.45$. Криві на рис. 7.9a пораховані за даними табл. 7.2, а на рис. 7.9b – за даними табл. 7.3. Штриховою лінією позначено значення концентрації $c_2(t, x)/c_{20}$ на нижній границі фільтра в момент безрозмірного часу $t = 0.45$ за даними відповідної табл. 7.2 (рис. a) або табл. 7.3 (рис. b).

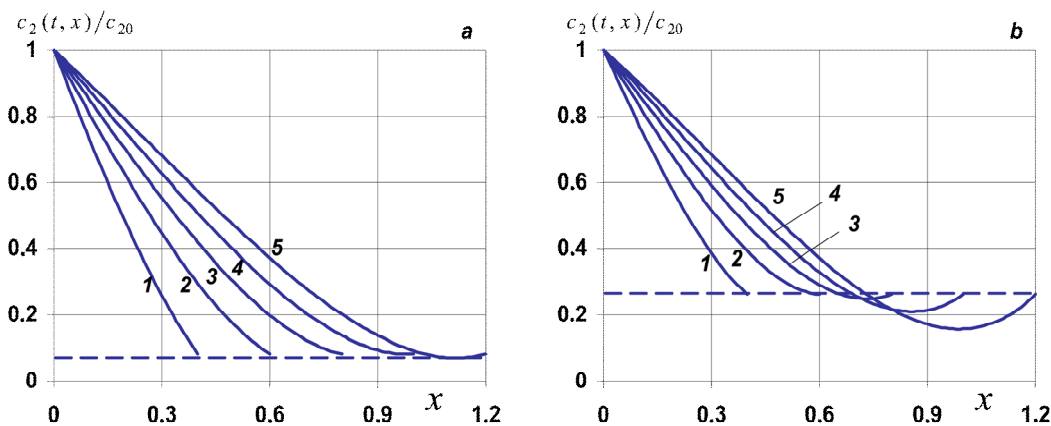


Рис. 7.9. Розподіли концентрації домішок у водному розчині в залежності від товщини фільтра

Зазначимо, що чим більша товщина фільтра, тим більших значень набуває концентрація забруднюючих частинок у водному поровому розчині при ефективній роботі фільтра (рис. 7.9a). Аналогічна ситуація спостерігається для невеликих товщин фільтра при значно менш ефективному очищенню водного розчину (криві 1 та 2, рис. 7.9b). Зі збільшенням величини x_0 на останній ділянці фільтра концентрація набуває значень менших ніж її апроксимоване значення на нижній границі фільтра і, досягаючи свого мінімуму, зростає до цього значення (криві 1-5, рис. 7.9b). Довжини таких ділянок складають від 18% безрозмірної товщини фільтра для $x_0 = 0.6$ до 40% для $x_0 = 1.2$. Також, чим менша товщина фільтру, тим ближче до лінійного розподілу наближається функція $c_2(t, x)/c_{20}$ для обох наборів експериментальних даних. При цьому для даних табл. 7.2 значення функції концентрації у водному розчині завжди менші ніж відповідні значення цієї функції, обчисленої за даними табл. 7.3.

7.4. Числовий аналіз концентрації частинок забруднення, які сорбовані на скелеті фільтра

Проведемо числовий аналіз функції концентрації забруднюючих частинок, які сорбовані на скелеті фільтра, на основі формули (7.61). Розрахунки проведено у безрозмірних змінних (7.17) [21]. Тут також розглядаємо два випадки наборів експериментальних даних для $c_2(t, x)/c_{20}$ на нижній границі фільтра, представлені в табл. 7.2 і 7.3 з використанням тих самих апроксимаційних поліномів 5-ї степені (7.62).

Рис. 7.10 демонструє поведінку функції концентрації частинок забруднення, які сорбовані на скелеті фільтра $c_3(t, x)/c_{20}$ (7.61), порашованої за даними табл. 7.2 в різні моменти безрозмірного часу $t = 0.001, 0.01, 0.15, 0.3, 0.45, 0.6, 0.72$ (криві 1-7) для таких коефіцієнтів швидкості конвективного перенесення: $v = 0.8$ (рис. 7.10a) та $v = 1.5$ (рис. 7.10b).

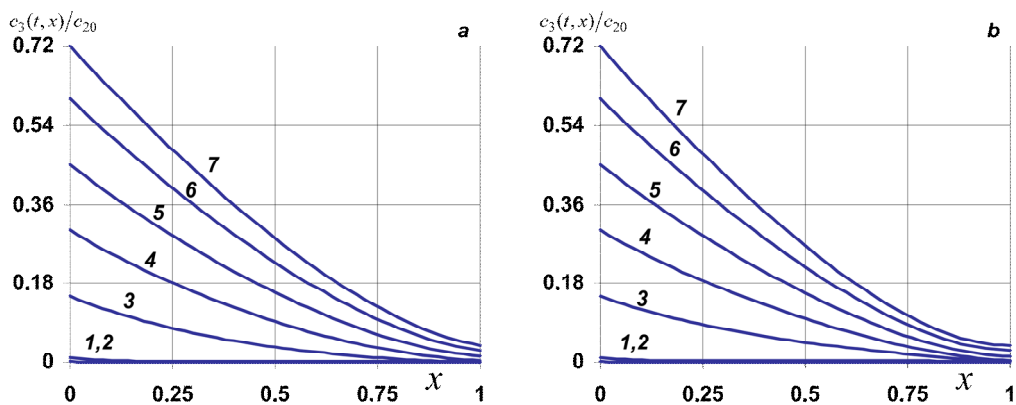


Рис. 7.10. Концентрація частинок забруднення, які сорбовані на скелеті фільтра, в різні моменти часу t для $v = 0.8$ (рис. а) та $v = 1.5$ (рис. б) за даними табл. 7.2

На рис. 7.11 проілюстровано розподіли функції $c_3(t, x)/c_{20}$, порашованої за даними табл. 7.2 для різних коефіцієнтів швидкості конвективного перенесення $v = 0.8, 1.2, 1.5, 2, 2.5$ (криві 1-5) в моменти часу $t = 0.01$ (рис. 7.11a), $t = 0.15$ (рис. 7.11b) та $t = 0.7$ (рис. 7.11c).

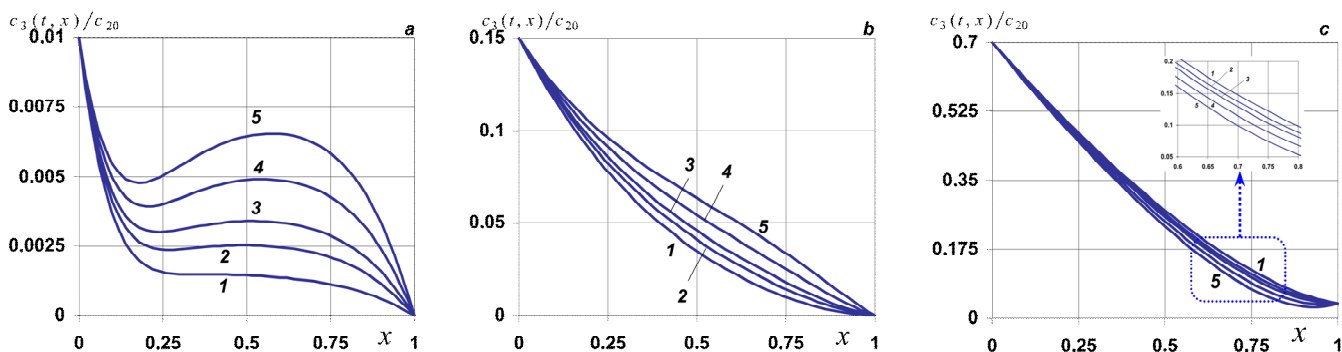


Рис. 7.11. Концентрація частинок забруднення, сорбованих на скелеті фільтра для різних коефіцієнтів швидкості конвективного перенесення v в моменти часу $t = 0.01$ (рис. а), $t = 0.15$ (рис. б) та $t = 0.7$ (рис. с) за даними табл. 7.3

Зауважимо, що з часом значення концентрації сорбованих частинок зростають у всій області фільтра (рис. 7.10). Так при збільшенні t від 0.01 до 0.6 значення $c_3(t, x)/c_{20}$ зростають на два порядки у всій області тіла. При чому така тенденція зберігається для всіх фізично обґрунтованих значень коефіцієнта швидкості конвективного перенесення.

Для малих часів можливе накопичення частинок забруднення в середині фільтра (криві 2-5, рис. 7.11a). В подальшому за рахунок суттєвого зростання значень концентрації $\frac{c_3(t, x)}{c_{20}}$ в приповерхневій області дії джерела маси функція концентрації

набуває спадного характеру (рис. 7.11b). Наприклад, якщо в момент часу $t=0.01$ $\left. \frac{c_3(t, x)}{c_{20}} \right|_{x=0, t=0.01} = 0.01$, то в момент $t=0.15$ $\left. \frac{c_3(t, x)}{c_{20}} \right|_{x=0, t=0.15} = 0.15$ (рис. 7.11a і 7.11b). Зазна-

чимо, що як і для функції $\frac{c_2(t, x)}{c_{20}}$ збільшення коефіцієнта ν призводить до зростання

значень функції $\frac{c_3(t, x)}{c_{20}}$, проте інтервал такого зростання суттєво збільшується.

Наприклад, для $\frac{c_2(t, x)}{c_{20}}$ такий інтервал є $t \in (0; 0.1)$, а для $\frac{c_3(t, x)}{c_{20}}$ маємо $t \in (0; 0.36)$. У

цьому випадку часовий інтервал найменшої різниці між значеннями $\frac{c_3(t, x)}{c_{20}}$ для різних

ν настає значно пізніше ніж для $\frac{c_2(t, x)}{c_{20}}$, а саме $t \in (0.36, 0.45)$. Для $t > 0.45$ зі збільшен-

ням коефіцієнта ν значення концентрації сорбованої речовини зменшуються (рис. 11с).

Рис. 7.12 демонструє поведінку функції концентрації частинок забруднення, які сорбовані на скелеті фільтра, $\frac{c_3(t, x)}{c_{20}}$, порохованої за даними табл. 7.3, в різні

моменти безрозмірного часу $t = 0.001, 0.01, 0.15, 0.3, 0.45, 0.6, 0.72$ (криві 1-7) для таких коефіцієнтів швидкості конвективного перенесення: $\nu = 0.8$ (рис. 7.12a) та $\nu = 1.5$ (рис. 7.12b).

На рис. 7.13 проілюстровано розподіли функції $\frac{c_3(t, x)}{c_{20}}$, порохованої за дани-

ми табл. 7.3, для різних коефіцієнтів швидкості конвективного перенесення $\nu = 0.8, 1.2, 1.5, 2, 2.5$ (криві 1-5) в моменти часу $t = 0.01$ (рис. 7.13a), $t = 0.15$ (рис. 7.13b) та $t = 0.7$ (рис. 7.13c).

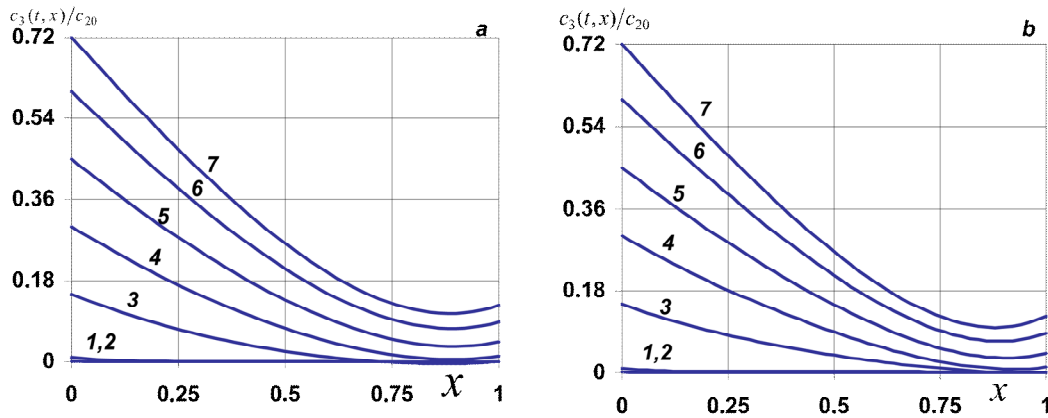


Рис. 7.12. Концентрація частинок забруднення, які сорбовані на скелеті фільтра, в різні моменти часу t для $\nu = 0.8$ (рис. а) та $\nu = 1.5$ (рис. б) за даними табл.7.3

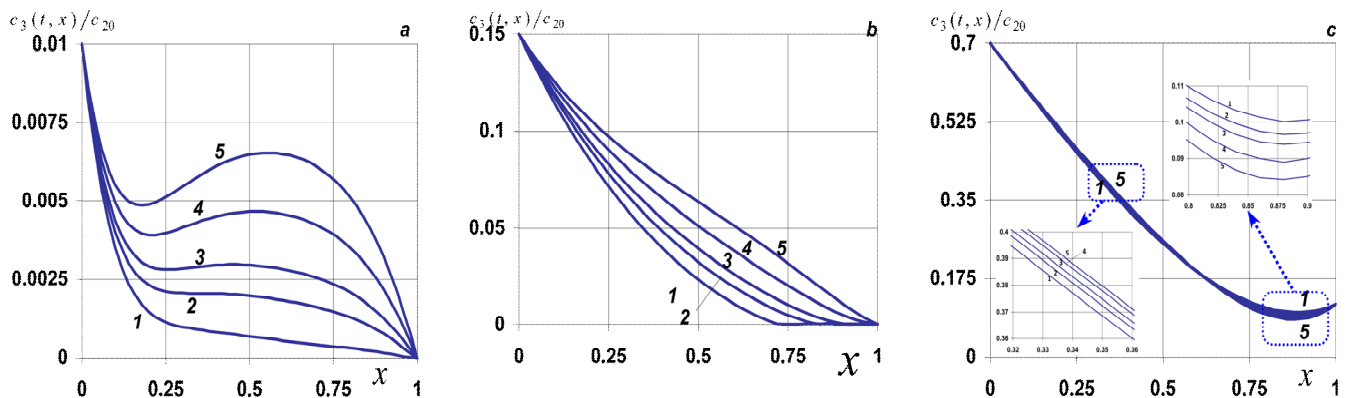


Рис. 7.13. Концентрація частинок забруднення, сорбованих на скелеті фільтра для різних коефіцієнтів швидкості конвективного перенесення ν в моменти часу $t = 0.01$ (рис. а), $t = 0.15$ (рис. б) та $t = 0.7$ (рис. с) за даними табл. 7.3

Зазначимо, що поведінка функції концентрації $c_3(t, x)/c_{20}$ для не дуже якісного фільтра в процесі фільтрування є аналогічною до поведінки цієї функції для якісного фільтра (рис. 7.10 і 7.12). Відмінність спостерігається на ділянках біля нижньої границі тіла, довжини яких сягають 25% товщини фільтра, що спричинено різними значеннями концентрації сорбованої речовини на цій границі. Тут з часом формується мінімум функції $c_3(t, x)/c_{20}$ (рис. 7.12). При цьому чим більше значення приймає коефіцієнт швидкості конвективного перенесення, тим менші значення мінімуму спостерігаються для функції концентрації. Так при зростанні значення ν з 0.8 до 2.5 мінімум $c_3(t, x)/c_{20}$ зменшується на 16.6%.

Як і для якісного фільтра для малих часів можливе накопичення частинок забруднення в середині фільтра (криві 3-5, рис. 7.13а), а в подальшому функція концентрації набуває спадного характеру (рис. 7.13б). Зазначимо, що тут також збільшення коефіцієнта ν призводить до зростання значень функції $c_3(t, x)/c_{20}$,

проте часовий інтервал такого зростання збільшується в порівнянні з аналогічним інтервалом для цієї функції, обчисленої за даними табл. 7.2. Зокрема, для даного випадку $t \in (0; 0.55)$. А часовий інтервал зменшення значень $c_3(t, x)/c_{20}$ зі збільшенням коефіцієнта ν відсутній (рис. 7.13с).

На Рис. 7.14 наведено порівняльні розподіли функції $c_3(t, x)/c_{20}$ для різних товщин фільтра $x_0 = 0.4, 0.6, 0.8, 1, 1.2$ (криві 1-5) для $\nu = 1.5$ в момент часу $t = 0.45$. Криві на рис. 7.14а пораховані за даними табл. 7.2., а на рис. 7.14b – за даними табл. 7.3.

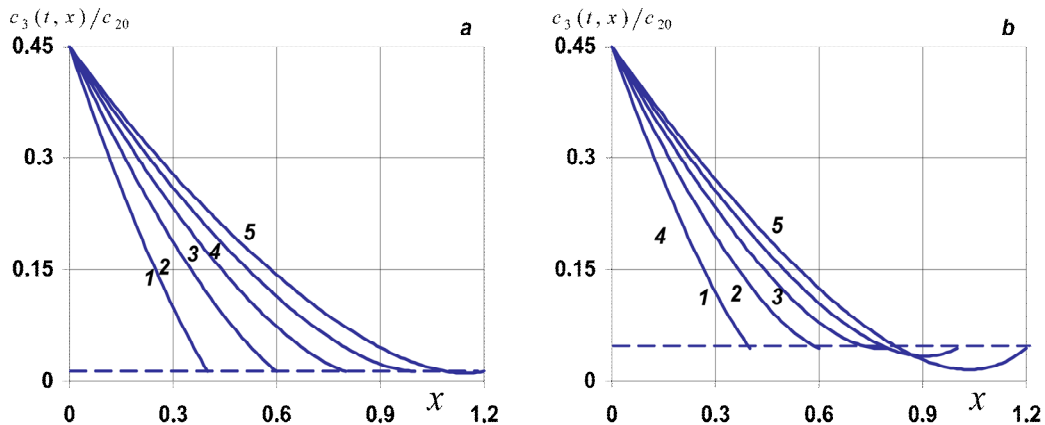


Рис. 7.14. Розподіли концентрації домішок, сорбованих на скелеті фільтра, в залежності від його товщини

Зазначимо, що величина товщини фільтра впливає на концентрацію сорбованих частинок забруднення аналогічно до впливу на концентрацію домішкової речовини в водному розчині (рис. 7.9 і 7.14). А саме, чим більша товщина фільтра, тим більших значень набуває концентрація сорбованих частинок при ефективній роботі фільтра (рис. 7.14а).

При значно менш ефективному очищенні водного розчину для невеликих товщин фільтра також спостерігається аналогічна закономірність (криві 1-3, рис. 7.14b). Ділянки значень концентрації $c_3(t, x)/c_{20}$, обчислених за даними табл. 7.3, менших ніж її апроксимоване значення на нижній границі фільтра, з'являються для дещо більших значень x_0 ніж відповідні ділянки значень $c_2(t, x)/c_{20}$. Тут довжини таких ділянок складають 20% безрозмірної товщини фільтра $x_0 = 1$ і 31% для $x_0 = 1.2$.

Отримання аналітичної формули для функції $c_3(t, x)$ дає можливість обчислити її значення на границі фільтра $x = x_0$ в моменти часу t_i задання експериментальних даних для функції $c_2(t, x)$. Такі значення для $\nu = 1.5$ наведені в табл. 7.4 для якісного очищення водного розчину і в табл. 7.5 для не дуже якісного очищення. У графічній формі ці дані наведені на рис. 7.15.

Таблиця 7.4. Розраховані значення функції концентрації $\frac{c_3(t, x)}{c_{20}}$ на нижній границі $x = x_0$ в певні моменти часу для якісного очищення водного розчину для $\nu = 1.5$

	t_1	t_2	t_3	t_4	t_5	t_5	t_7	t_8	t_9	t_{10}	t_{11}
t_i	0	0.035	0.07	0.105	0.14	0.175	0.21	0.245	0.28	0.315	0.35
$\frac{c_3(t_i, x_0)}{c_{20}}$	0	0	0	0	0	0.00006315	0.00061111	0.00147696	0.0026877	0.00425677	0.00617969

	t_{12}	t_{13}	t_{14}	t_{15}	t_{16}	t_{17}	t_{18}	t_{19}	t_{20}	t_{21}	t_{22}
t_i	0.385	0.42	0.455	0.49	0.525	0.56	0.595	0.63	0.665	0.7	0.735
$\frac{c_3(t_i, x_0)}{c_{20}}$	0.00844112	0.01100595	0.01383579	0.01688296	0.02009101	0.02341788	0.02681229	0.03023685	0.03367568	0.03710785	0.04058649

Таблиця 7.5. Розраховані значення функції концентрації $\frac{c_3(t, x)}{c_{20}}$ на нижній границі $x = x_0$ в певні моменти часу для не дуже якісного очищення водного розчину для $\nu = 1.5$

	t_1	t_2	t_3	t_4	t_5	t_5	t_7	t_8	t_9	t_{10}	t_{11}
t_i	0	0.035	0.07	0.105	0.14	0.175	0.21	0.245	0.28	0.315	0.35
$\frac{c_3(t_i, x_0)}{c_{20}}$	0	0	0	0	0	0.001064949	0.002973331	0.005852865	0.009787273	0.014820585	0.020941396

	t_{12}	t_{13}	t_{14}	t_{15}	t_{16}	t_{17}	t_{18}	t_{19}	t_{20}	t_{21}	t_{22}
t_i	0.385	0.42	0.455	0.49	0.525	0.56	0.595	0.63	0.665	0.7	0.735
$\frac{c_3(t_i, x_0)}{c_{20}}$	0.028104661	0.036202415	0.045115667	0.054695081	0.064763133	0.075187249	0.085806737	0.096506642	0.10724322	0.117962999	0.128852436

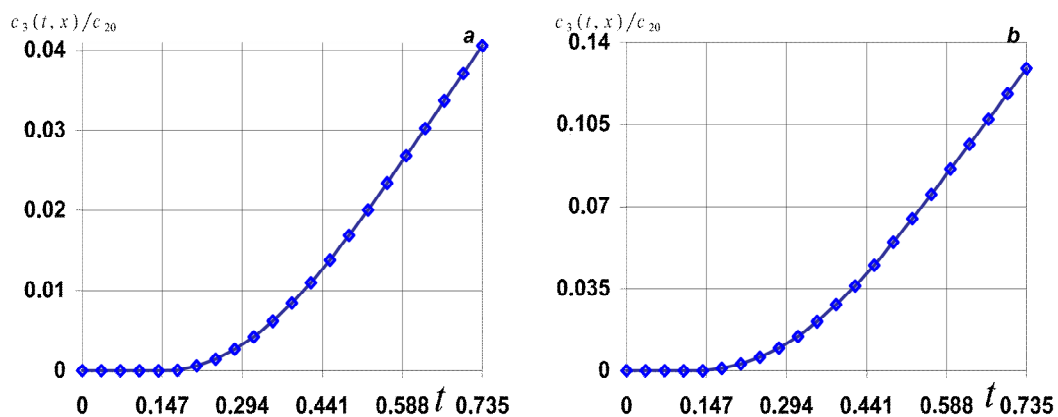


Рис. 7.15. Розраховані значення функції $\frac{c_3(t, x)}{c_{20}}$ на границі $x = x_0$ для якісного (рис. а) та не дуже якісного (рис. б) очищення водного розчину

Зазначимо, що $c_3(t, x)$ на нижній границі фільтра $x = x_0$ є монотонно зростаючою функцією. Причому для функції $\frac{c_3(t, x_0)}{c_{20}}$ часовий інтервал нульових значень

від початку процесу конвективної дифузії значно більший ніж для функції $\frac{c_2(t, x_0)}{c_{20}}$.

На всьому інтервалі $t \in [0; t_n]$ значення $\frac{c_3(t, x_0)}{c_{20}}$ в рази менші ніж $\frac{c_2(t, x_0)}{c_{20}}$.

Наприклад, в момент часу $t = 0.56$ $c_2(t, x_0)|_{t=0.56} / c_3(t, x_0)|_{t=0.56} = 4.12$ за вхідних даних таблиці 7.2 і $c_2(t, x_0)|_{t=0.56} / c_3(t, x_0)|_{t=0.56} = 4.0$ за вхідних даних таблиці 7.3.

7.5. Довговічність роботи промислових засипних фільтрів води

Отримана формула (7.61) для знаходження концентрацій частинок домішкової субстанції, сорбованих на скелеті фільтра, дає можливість визначати його час насичення t_* . Відповідно можна проаналізувати довговічність роботи фільтра [126]. Якщо відоме максимальне значення концентрації частинок домішкової речовини N , спроможної адсорбуватися скелетом тіла (це експериментально вимірювана величина), тоді час насичення t_* фільтра можна знайти з нелінійного функціонального рівняння. Зазначимо, що концентрація N насичення визначається для порового матеріалу, тому приймаємо, що ця величина є сталою. Тоді, враховуючи, що повне насичення фільтра, а відповідно і втрата сорбційної здатності, відбудеться при досягненні концентрації $c_3(x, t)$ максимального значення N в кожній точці $x \in [0, x_0]$, сформуємо нелінійне функціональне рівняння типу (6.65). Нам потрібно знайти розв'язок цього рівняння $t = t_*$ на проміжку $[0, t_n]$, де задані експериментальні дані (табл. 7.1). Оскільки ми розглядали апроксимацію цих даних поліномом заданої степені M саме на цьому проміжку, то вихід за проміжок $[0, t_n]$ призводить до некоректності отриманого розв'язку. При цьому концентрація домішки $c_3(x, t)$ за час t_n може як досягнути, так і не досягнути концентрації насичення N . Відповідно рівняння (7.63) може як мати, так і не мати розв'язку. При цьому дослідження існування розв'язку рівняння (7.63) є вкрай проблематичним.

Для вирішення цієї проблеми будемо таблицю (матрицю) значень $c_3(x, t)$ у

точках (x_{l_1}, t_{l_2}) , де $x_{l_1} \in [0, x_0]$, $t_{l_2} \in [0, t_n]$. Методом перебору на рівномірній сітці знаходимо час насичення t_* для заданого N .

В табл. 7.6 і 7.7 наведено обчислені значення концентрації сорбованої на скелеті фільтра речовини $c_3(x, t)$ для експериментальних даних значень концентрації речовини $\frac{c_2(t, x)}{c_{20}}$ на нижній границі тіла (табл. 7.2 і табл. 7.3 відповідно).

Таблиця 7.6. Значення концентрації $c_3(x, t)$ в точках (x_{l_1}, t_{l_2}) на проміжках $x_{l_1} \in [0, 1]$, $t_{l_2} \in [0, t_{22}]$ для експериментальних даних $\frac{c_2(t, x)}{c_{20}}$, наведених в табл. 7.2

	t																					
x	0.000	0.035	0.070	0.105	0.140	0.175	0.210	0.245	0.280	0.315	0.350	0.385	0.420	0.455	0.490	0.525	0.560	0.595	0.630	0.665	0.700	0.735
0.000	0.000	0.035	0.070	0.105	0.140	0.175	0.210	0.245	0.280	0.315	0.350	0.385	0.420	0.455	0.490	0.525	0.560	0.595	0.630	0.665	0.700	0.735
0.030	0.000	0.031	0.064	0.097	0.131	0.164	0.198	0.231	0.265	0.299	0.332	0.366	0.400	0.433	0.467	0.501	0.534	0.568	0.602	0.636	0.669	0.703
0.061	0.000	0.027	0.058	0.090	0.122	0.154	0.186	0.219	0.251	0.283	0.315	0.348	0.380	0.412	0.445	0.477	0.509	0.542	0.574	0.607	0.639	0.671
0.091	0.000	0.024	0.053	0.083	0.114	0.145	0.175	0.206	0.237	0.268	0.299	0.330	0.361	0.392	0.423	0.454	0.485	0.516	0.547	0.578	0.609	0.640
0.121	0.000	0.021	0.049	0.077	0.106	0.136	0.165	0.194	0.224	0.253	0.283	0.312	0.342	0.372	0.401	0.431	0.461	0.491	0.520	0.550	0.580	0.609
0.152	0.000	0.019	0.045	0.072	0.099	0.127	0.155	0.183	0.211	0.239	0.267	0.296	0.324	0.352	0.381	0.409	0.437	0.466	0.494	0.523	0.551	0.579
0.182	0.000	0.017	0.041	0.067	0.093	0.119	0.145	0.172	0.199	0.225	0.252	0.279	0.306	0.333	0.360	0.387	0.414	0.441	0.469	0.496	0.523	0.550
0.212	0.000	0.016	0.038	0.062	0.086	0.111	0.136	0.161	0.187	0.212	0.238	0.263	0.289	0.315	0.340	0.366	0.392	0.418	0.443	0.469	0.495	0.521
0.242	0.000	0.014	0.035	0.058	0.081	0.104	0.128	0.151	0.175	0.199	0.223	0.248	0.272	0.296	0.321	0.345	0.370	0.394	0.419	0.443	0.467	0.492
0.273	0.000	0.013	0.033	0.053	0.075	0.097	0.119	0.142	0.164	0.187	0.210	0.233	0.256	0.279	0.302	0.325	0.348	0.371	0.394	0.418	0.441	0.464
0.303	0.000	0.013	0.030	0.050	0.070	0.090	0.111	0.132	0.153	0.175	0.196	0.218	0.240	0.261	0.283	0.305	0.327	0.349	0.371	0.393	0.414	0.436
0.333	0.000	0.012	0.028	0.046	0.065	0.084	0.104	0.123	0.143	0.163	0.183	0.204	0.224	0.245	0.265	0.286	0.306	0.327	0.347	0.368	0.389	0.409
0.364	0.000	0.012	0.027	0.043	0.060	0.078	0.096	0.115	0.133	0.152	0.171	0.190	0.209	0.228	0.247	0.267	0.286	0.305	0.325	0.344	0.363	0.383
0.394	0.000	0.011	0.025	0.040	0.056	0.073	0.089	0.106	0.124	0.141	0.159	0.176	0.194	0.212	0.230	0.248	0.266	0.284	0.303	0.321	0.339	0.357
0.424	0.000	0.011	0.024	0.037	0.052	0.067	0.083	0.098	0.114	0.130	0.147	0.163	0.180	0.197	0.213	0.230	0.247	0.264	0.281	0.298	0.315	0.331
0.455	0.000	0.011	0.022	0.035	0.048	0.062	0.076	0.090	0.105	0.120	0.135	0.150	0.166	0.181	0.197	0.213	0.228	0.244	0.260	0.275	0.291	0.307
0.485	0.000	0.011	0.021	0.032	0.044	0.057	0.070	0.083	0.096	0.110	0.124	0.138	0.152	0.167	0.181	0.196	0.210	0.225	0.239	0.254	0.268	0.283
0.515	0.000	0.010	0.020	0.030	0.041	0.052	0.064	0.076	0.088	0.101	0.113	0.126	0.139	0.152	0.166	0.179	0.193	0.206	0.219	0.233	0.246	0.259
0.545	0.000	0.010	0.019	0.028	0.037	0.047	0.058	0.069	0.080	0.091	0.103	0.115	0.127	0.139	0.151	0.163	0.175	0.188	0.200	0.212	0.225	0.237
0.576	0.000	0.010	0.018	0.026	0.034	0.043	0.052	0.062	0.072	0.082	0.093	0.104	0.114	0.125	0.137	0.148	0.159	0.170	0.182	0.193	0.204	0.215
0.606	0.000	0.010	0.017	0.024	0.031	0.039	0.047	0.056	0.065	0.074	0.083	0.093	0.103	0.113	0.123	0.133	0.143	0.154	0.164	0.174	0.184	0.194
0.636	0.000	0.009	0.016	0.022	0.028	0.035	0.042	0.049	0.057	0.065	0.074	0.083	0.091	0.100	0.110	0.119	0.128	0.137	0.147	0.156	0.165	0.174
0.667	0.000	0.009	0.014	0.020	0.025	0.031	0.037	0.043	0.050	0.058	0.065	0.073	0.081	0.089	0.097	0.105	0.114	0.122	0.131	0.139	0.147	0.156
0.697	0.000	0.009	0.013	0.018	0.022	0.027	0.032	0.038	0.044	0.050	0.057	0.064	0.071	0.078	0.085	0.093	0.100	0.108	0.115	0.123	0.130	0.138
0.727	0.000	0.008	0.012	0.016	0.019	0.023	0.028	0.032	0.038	0.043	0.049	0.055	0.061	0.067	0.074	0.081	0.087	0.094	0.101	0.108	0.114	0.121
0.758	0.000	0.007	0.011	0.014	0.016	0.020	0.023	0.027	0.032	0.036	0.041	0.047	0.052	0.058	0.064	0.069	0.075	0.081	0.088	0.094	0.100	0.106
0.788	0.000	0.007	0.010	0.012	0.014	0.016	0.019	0.023	0.026	0.030	0.034	0.039	0.044	0.049	0.054	0.059	0.065	0.070	0.075	0.081	0.086	0.091
0.818	0.000	0.006	0.008	0.010	0.011	0.013	0.015	0.018	0.021	0.024	0.028	0.032	0.036	0.041	0.045	0.050	0.055	0.059	0.064	0.069	0.074	0.079
0.848	0.000	0.005	0.007	0.008	0.009	0.010	0.012	0.014	0.017	0.019	0.022	0.026	0.030	0.033	0.038	0.042	0.046	0.050	0.055	0.059	0.063	0.068
0.879	0.000	0.004	0.005	0.006	0.007	0.008	0.009	0.010	0.012	0.015	0.017	0.020	0.024	0.027	0.031	0.034	0.038	0.042	0.046	0.050	0.054	0.058
0.909	0.000	0.003	0.004	0.004	0.005	0.005	0.006	0.007	0.009	0.011	0.013	0.016	0.019	0.022	0.025	0.029	0.032	0.036	0.040	0.043	0.047	0.051
0.939	0.000	0.002	0.003	0.003	0.003	0.003	0.004	0.005	0.006	0.008	0.010	0.012	0.015	0.018	0.021	0.024	0.028	0.031	0.035	0.038	0.041	0.045
0.970	0.000	0.001	0.001	0.001	0.001	0.001	0.002	0.003	0.004	0.006	0.008	0.010	0.012	0.015	0.018	0.021	0.025	0.028	0.031	0.035	0.038	0.042
1.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.001	0.003	0.004	0.006	0.008	0.011	0.014	0.017	0.020	0.023	0.027	0.030	0.034	0.037	0.041

Насичення фільтра відбувається нерівномірно за товщиною. Врахуємо, що насичення фільтра відбувається від верхньої границі до нижньої і, якщо ділянки біля границі $x = 0$ втратили сорбційну здатність, то на інших ділянках ще відбувається ефективне очищення забрудненого розчину. Тому розв'язок рівняння (6.65) шукатимемо на проміжку $x \in (0.75x_0; x_0)$.

Таблиця 7.7. Значення концентрації $c_3(x, t)$ в точках (x_{l_1}, t_{l_2}) на проміжках $x_{l_1} \in [0, 1]$, $t_{l_2} \in [0, t_{22}]$ для експериментальних даних $\frac{c_2(t, x)}{c_{20}}$, наведених в табл. 7.3

	t																					
x	0.000	0.035	0.070	0.105	0.140	0.175	0.210	0.245	0.280	0.315	0.350	0.385	0.420	0.455	0.490	0.525	0.560	0.595	0.630	0.665	0.700	0.735
0.000	0.000	0.035	0.070	0.105	0.140	0.175	0.210	0.245	0.280	0.315	0.350	0.385	0.420	0.455	0.490	0.525	0.560	0.595	0.630	0.665	0.700	0.735
0.030	0.000	0.031	0.064	0.097	0.130	0.164	0.198	0.231	0.265	0.298	0.332	0.366	0.400	0.433	0.467	0.501	0.535	0.569	0.602	0.636	0.670	0.704
0.061	0.000	0.027	0.058	0.090	0.122	0.154	0.186	0.218	0.250	0.282	0.315	0.347	0.380	0.412	0.445	0.477	0.510	0.543	0.575	0.608	0.640	0.673
0.091	0.000	0.024	0.053	0.083	0.113	0.144	0.174	0.205	0.236	0.267	0.298	0.329	0.360	0.392	0.423	0.454	0.485	0.517	0.548	0.580	0.611	0.642
0.121	0.000	0.021	0.048	0.077	0.105	0.134	0.163	0.193	0.222	0.252	0.281	0.311	0.341	0.371	0.401	0.431	0.461	0.491	0.522	0.552	0.582	0.612
0.152	0.000	0.019	0.044	0.071	0.098	0.125	0.153	0.181	0.209	0.237	0.265	0.294	0.323	0.351	0.380	0.409	0.438	0.467	0.495	0.524	0.553	0.582
0.182	0.000	0.017	0.040	0.065	0.091	0.117	0.143	0.169	0.196	0.223	0.250	0.277	0.304	0.332	0.359	0.387	0.414	0.442	0.470	0.497	0.525	0.552
0.212	0.000	0.015	0.037	0.060	0.084	0.109	0.133	0.158	0.183	0.209	0.234	0.260	0.286	0.312	0.339	0.365	0.391	0.418	0.444	0.470	0.497	0.523
0.242	0.000	0.014	0.034	0.056	0.078	0.101	0.124	0.148	0.171	0.195	0.220	0.244	0.269	0.294	0.319	0.344	0.369	0.394	0.419	0.444	0.469	0.494
0.273	0.000	0.013	0.031	0.051	0.072	0.093	0.115	0.137	0.159	0.182	0.205	0.228	0.252	0.275	0.299	0.323	0.347	0.370	0.394	0.418	0.442	0.466
0.303	0.000	0.012	0.029	0.047	0.066	0.086	0.107	0.127	0.148	0.169	0.191	0.213	0.235	0.257	0.280	0.302	0.325	0.348	0.370	0.393	0.415	0.438
0.333	0.000	0.011	0.026	0.043	0.061	0.079	0.098	0.117	0.137	0.157	0.177	0.198	0.219	0.240	0.261	0.282	0.304	0.325	0.346	0.368	0.389	0.410
0.364	0.000	0.011	0.024	0.040	0.056	0.073	0.090	0.108	0.126	0.145	0.164	0.183	0.203	0.222	0.243	0.263	0.283	0.303	0.323	0.343	0.363	0.383
0.394	0.000	0.010	0.023	0.037	0.051	0.067	0.083	0.099	0.116	0.133	0.151	0.169	0.187	0.206	0.225	0.244	0.263	0.282	0.301	0.320	0.338	0.357
0.424	0.000	0.010	0.021	0.033	0.047	0.061	0.075	0.090	0.106	0.122	0.138	0.155	0.172	0.190	0.207	0.225	0.243	0.261	0.279	0.296	0.314	0.332
0.455	0.000	0.009	0.019	0.031	0.042	0.055	0.068	0.082	0.096	0.111	0.126	0.142	0.158	0.174	0.190	0.207	0.224	0.241	0.257	0.274	0.290	0.307
0.485	0.000	0.009	0.018	0.028	0.038	0.050	0.061	0.074	0.087	0.100	0.114	0.129	0.143	0.159	0.174	0.190	0.205	0.221	0.237	0.252	0.268	0.283
0.515	0.000	0.009	0.017	0.025	0.034	0.044	0.055	0.066	0.078	0.090	0.103	0.116	0.130	0.144	0.158	0.173	0.188	0.202	0.217	0.231	0.246	0.260
0.545	0.000	0.009	0.015	0.023	0.031	0.039	0.049	0.058	0.069	0.080	0.092	0.104	0.117	0.130	0.143	0.157	0.171	0.184	0.198	0.212	0.225	0.239
0.576	0.000	0.008	0.014	0.020	0.027	0.034	0.043	0.051	0.061	0.071	0.082	0.093	0.105	0.117	0.129	0.142	0.154	0.167	0.180	0.193	0.205	0.218
0.606	0.000	0.008	0.013	0.018	0.024	0.030	0.037	0.045	0.053	0.062	0.072	0.082	0.093	0.104	0.116	0.127	0.139	0.151	0.163	0.175	0.187	0.198
0.636	0.000	0.008	0.012	0.016	0.020	0.026	0.032	0.038	0.046	0.054	0.063	0.072	0.082	0.092	0.103	0.114	0.125	0.136	0.147	0.158	0.169	0.180
0.667	0.000	0.007	0.011	0.014	0.017	0.022	0.027	0.032	0.039	0.046	0.054	0.062	0.072	0.081	0.091	0.102	0.112	0.122	0.133	0.143	0.154	0.164
0.697	0.000	0.007	0.009	0.012	0.014	0.018	0.022	0.027	0.032	0.039	0.046	0.054	0.062	0.071	0.081	0.090	0.100	0.110	0.120	0.129	0.139	0.149
0.727	0.000	0.006	0.008	0.010	0.012	0.014	0.017	0.022	0.027	0.032	0.039	0.046	0.054	0.062	0.071	0.080	0.089	0.099	0.108	0.117	0.126	0.136
0.758	0.000	0.006	0.007	0.008	0.009	0.011	0.014	0.017	0.021	0.026	0.032	0.039	0.046	0.054	0.063	0.071	0.080	0.089	0.098	0.107	0.116	0.125
0.788	0.000	0.005	0.006	0.006	0.007	0.008	0.010	0.013	0.017	0.021	0.027	0.033	0.040	0.047	0.055	0.064	0.072	0.081	0.090	0.098	0.107	0.115
0.818	0.000	0.004	0.005	0.005	0.005	0.005	0.007	0.009	0.013	0.017	0.022	0.028	0.035	0.042	0.050	0.058	0.066	0.075	0.083	0.092	0.100	0.108
0.848	0.000	0.004	0.004	0.003	0.003	0.003	0.005	0.007	0.010	0.014	0.019	0.024	0.031	0.038	0.046	0.054	0.062	0.071	0.079	0.087	0.096	0.104
0.879	0.000	0.003	0.003	0.002	0.001	0.002	0.003	0.005	0.008	0.011	0.016	0.022	0.029	0.036	0.043	0.052	0.060	0.068	0.077	0.086	0.094	0.103
0.909	0.000	0.002	0.002	0.001	0.000	0.001	0.002	0.003	0.006	0.010	0.015	0.021	0.028	0.035	0.043	0.051	0.060	0.069	0.077	0.086	0.095	0.104
0.939	0.000	0.001	0.001	0.000	0.000	0.000	0.001	0.003	0.006	0.010	0.015	0.021	0.028	0.036	0.044	0.053	0.062	0.071	0.081	0.090	0.099	0.109
0.970	0.000	0.001	0.000	0.000	0.000	0.000	0.002	0.004	0.007	0.012	0.017	0.024	0.031	0.040	0.048	0.058	0.067	0.077	0.087	0.097	0.107	0.117
1.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.001	0.003	0.006	0.010	0.015	0.021	0.028	0.036	0.045	0.055	0.065	0.075	0.086	0.097	0.107	0.118	0.129

Для значення концентрації насичення $\frac{N}{c_{20}} = 0.11$ за даними таблиці 7.6

рівняння (6.65) немає розв'язку, тобто на проміжку $t \in [0, t_{22}]$ концентрація важких металів, сорбованих на скелеті фільтра, не досягає критичного значення на нижній ділянці фільтра, і він може ефективно працювати далі.

У випадку експериментальних даних $\frac{c_2(t, x)}{c_{20}}$, наведених в табл. 7.3., декілька

значень на проміжку $x \in (0.75x_0; x_0)$ перевищують значення концентрації насичення $\frac{N}{c_{20}}$. Вони в табл. 7.7 замарковані жовтим кольором. Найменший час насичення

приблизно дорівнює $t_* \approx 0.7$. Тому це значення t_* вважаємо розв'язком рівняння (7.62) і цей час є часом завершення ефективної роботи фільтра, коли наприклад необхідно очистити фільтр.

Зазначимо, що можливі і інші критерії ефективної роботи фільтра, тоді функціональне рівняння (6.65) набуде іншого вигляду.

7.6 Висновки до Розділу 7

Для кількісного опису процесів масоперенесення частинок забруднення з водним розчином через засипний фільтр води з урахуванням пом'якшення води за допомогою хімічної реакції побудована математична модель на основі балансових співвідношення маси компонент системи. За компоненти термодинамічної системи прийнято взаємодіючі дискретні сукупності матеріальних частинок, які утворюють основу тіла (скелет фільтра), водного розчину та домішкові частинки, які сорбуються, у двох виділених станах - у водному розчині та сорбовані на скелеті фільтра, сполуку одного з основних катіонів (яка спричинює надмірну твердість води), реагент, частинки нерозчинної речовини, які утворилися в наслідок хімічної реакції та молекули газу, які миттєво випаровуються. Дифузійний потік визначається градієнтами хімічних потенціалів, які лінійно залежать від концентрацій. Прийнято, що джерелом (стоком) маси компонент типу важких металів є процеси сорбції-десорбції частинок, а компонент, які приймають участь в хімічній реакції - хімічна реакція. При цьому відбувається одна хімічна реакція у вигляді локальних внутрішніх перетворень у кожній точці термодинамічної системи. Потужності виробництва маси компонент, які приймають участь в процесах сорбції-десорбції, є пропорційними до локальної різниці хімічних потенціалів і, як наслідок, різниці концентрацій. У результаті, після врахування умови нормування отримана система шести диференціальних рівнянь в частинних похідних.

Крайова задача сформульована для шару, через який відбувається фільтрування водного розчину і на його поверхню рівномірно подається реагент. Крайові умови враховують, що в початковий момент часу механічний фільтр є чистим, його поровий простір заповнений водою, проте цей водний розчин характеризується сталою підвищеною твердістю; реагент у тіло ще не поступив, відповідно хімічна реакція ще не відбулась і нема продуктів цієї реакції. В подальшому на верхню поверхню пористого шару подається водний розчин підвищеної твердості та однакова кількість реагенту і на цій поверхні речовина, що випадає в осад, не утворюється. На нижній границі фільтра внаслідок хімічної реакції сполука одного з основних катіонів відсутня, весь реагент прийняв участь у хімічній реакції розкладу сполуки одного з основних катіонів, при цьому утворюється стала кількість нерозпадної речовини, що випадає в осад. З урахуванням умов на рух водного розчину сформульована крайова задача поділилася на дві окремі крайові задачі – задача кон-

вективної дифузії з урахуванням сорбційних процесів і задача масоперенесення речовин з водним розчином, які вступають в хімічну реакцію або є її наслідком.

Граничні та початкові умови на шукані функції сформульовані у відповідності із фізичними та хімічними процесами, які відбуваються на поверхнях фільтра. При цьому прийнято, що на нижній границі фільтра відомо або можна виміряти значення функції концентрації важких металів у водному розчині в певні моменти часу. Такі експериментальні дані апроксимуються поліномом заданої степені.

Запропоновано модельний опис хімічної реакції пом'якшення води. Крайова задача конвективної дифузії частинок забруднення, що супроводжуються їхньою сорбцією на скелет, якщо на верхній границі шару діє стале джерело маси, а на нижній границі побудований апроксимаційний поліном, розв'язана за допомогою інтегральних перетворень та отримані відповідні розрахункові формули.

Проведено числовий аналіз функцій концентрації забруднюючих частинок, які мігрують у водному розчині, та концентрації частинок, сорбованих на скелеті фільтра. Числові розрахунки проведені для двох наборів експериментальних даних – для якісного очищення води та менш якісного. На їх основі побудовані апроксимаційні поліноми 5-ї степені, які використані як гранична умова для функції концентрації частинок забруднення у водному розчині на нижній поверхні фільтра. Обчислення проведені у природних безрозмірних змінних. Визначено закономірності зазначених процесів, встановлено вплив коефіцієнта швидкості конвективного перенесення та товщини фільтра на концентрацію частинок забруднення, що мігрують з розчином, і концентрації сорбованої речовини. Показано, що для малих швидкостей конвективного перенесення з часом концентрація у водному розчині збільшується доки не вийде на усталений режим. Для більших значень цього коефіцієнта спостерігається наявність часового інтервалу, коли величина швидкості конвективного перенесення практично не впливає на поведінку і значення концентрації забруднення у розчині. Причому чим якісніша робота фільтра, тим такий інтервал настає раніше.

Для малих часів практично не відчутний вплив заданих експериментальних даних як для якісної, так і не дуже якісної роботи фільтра, і значення відповідних концентрацій практично співпадають. На решті часовому проміжку значення концентрації частинок у розчині для випадку якісного фільтра завжди менші ніж для не дуже якісного.

ВИСНОВКИ

У дисертаційній роботі поставлено та розв'язано нову науково-прикладну проблему розвинення підходів і методів математичного моделювання процесів масоперенесення в складних і складених тілах, що супроводжуються процесами сорбції-десорбції, каскадним розпадом або хімічними реакціями, за експериментальних даних на границі тіла. При цьому отримано такі основні результати та висновки.

1. В рамках континуальної теорії твердих розчинів сформульовано математичну модель взаємозв'язаних гетеродифузійних теплових та механічних процесів, що супроводжуються каскадним розпадом домішкових компонент у багатозфазних середовищах. В аксіоматизованому вигляді сформовано повну нелінійну систему рівнянь моделі, отримано ключову лінеаризовану систему рівнянь гетеродифузії двома шляхами у середовищі з пастками за каскадного розпаду частинок та на основі умов локальної термодинамічної рівноваги між станами, отримано часкові варіанти моделі.

2. На основі побудованих математичних моделей механотермогетеродифузії вперше сформульовано новий тип крайових задач математичної фізики – задачі каскадного типу. Розвинено метод знаходження розв'язків такого типу задач на основі ітераційної процедури з використанням функцій Гріна на кожному етапі каскаду. Знайдено і досліджено розв'язки задач дифузії, не взаємодіючих потоків, дифузії в середовищі з пастками, гетеродифузії двома шляхами та гетеродифузії в середовищі з пастками за каскадного розпаду часинок.

3. Розроблення системного підходу до математичного опису процесів перенесення в складних і складених системах за наявності експериментальних даних на одній з границь тіла, який ґрунтується на синтезі класичного підходу математичного моделювання зв'язаних процесів різної фізичної природи в неоднорідних середовищах для добре структурованої частини системи та неklasичного статистичного підходу до моделювання невідомої граничної умови на основі експериментальних даних. Для отримання невідомої граничної умови задачі конвективної дифузії у тришаровому фільтрі побудовані інтерполяційні поліноми у формі Лагранжа 8-ї та 13-ї степені, апроксимаційні поліноми третьої, п'ятої, сьомої степені за методом найменших квадратів для оптимального визначення параметрів функції наближення

та екстраполяційні поліноми 9-ї та 10-ї за простим покроковим методом для пошуку точкових оцінок. За розвиненим підходом з використанням технічної умови існування часу насичення фільтра, тобто втрату його сорбційної здатності, встановлено параметри роботи фільтра.

4. Запропоновано та обгрунтовано метод чисельного інтегрування подвійних інтегралів зі змінними верхніми межами і змінною областю інтегрування який складається зі встановлення області інтегрування; накладення прямокутної сітки на область інтегрування; розділення областей інтегрування на підобласті, які складаються з квадратних і трикутних елементів; застосування квадратур у підобласті, яка складається з квадратних елементів; здійснення триангуляційного розбиття вздовж змінної межі; обчислення об'ємів елементарних елементів, в основі яких є трикутники; підрахунок вихідного інтеграла; встановлення похибки обчислень розкладом інтеграла в ряд Тейлора з використанням теореми Барроу.

5. Побудовано математичну модель процесів перенесення домішкових речовин у середовищах складної та складеної структури. На цій основі сформульована та розв'язана контактна-крайова задача конвективної дифузії, що супроводжується сорбційними процесами, у тришаровому пористому тілі за неідеальних умов масового контакту. Для знаходження концентрації домішкової речовини, сорбованої на скелеті тіла, застосовано розвинений метод чисельного інтегрування подвійних інтегралів зі змінними верхніми межами. Показано, що величина концентрації домішкової речовини на границях контакту пористих шарів можуть набувати значень від нехтовно малих, тобто на границі контакту домішкові частинки не накопичуються, до значень, які в декілька разів перевищують значення концентрації на поверхні, де діє джерело маси.

6. Для розв'язання нелінійних функціональних рівнянь на відрізьку невідомої довжини розвинуто чисельний метод на основі композиції методу простої ітерації та модифікації методу дихотомії. Алгоритм методу відноситься до класу лінійних, його складність визначається сумарною кількістю кроків ітераційного процесу, не обхідних для отримання значення часу насичення фільтра. Показано, що час насичення збільшується в околі границі контакту і значно зростає біля нижньої границі фільтруючої установки.

7. Побудована математична модель, яка описує процеси перенесення забруднюючих речовин водним поровим розчином через засипний фільтр, що супроводжуються хімічною реакцією пом'якшення води. Крайова задача сформульована для шару, через який відбувається фільтрування водного розчину і на його поверхню рівномірно подається реагент. Граничні та початкові умови на шукані функції накладені у відповідності із фізичними та хімічними процесами, які відбуваються на поверхнях фільтра. При цьому прийнято, що на нижній границі фільтра відомо значення функції концентрації важких металів у водному розчині в певні моменти часу. Такі експериментальні дані апроксимуються поліномом заданої степені. Запропоновано модельний опис хімічної реакції пом'якшення води. Отримано три варіанти математичної моделі конвективної дифузії забрудненого розчину у фільтрі води з пом'якшенням жорсткої води в залежності від кількості реагенту, поданого на поверхню тіла, який бере участь в хімічній реакції пом'якшення води.

8. Визначено закономірності функцій концентрації забруднюючих частинок, які мігрують у водному розчині, та концентрації частинок, сорбованих на скелеті фільтра. Числові розрахунки проведені для двох наборів експериментальних даних – для якісного очищення води та менш якісного. Встановлено вплив коефіцієнта швидкості конвективного перенесення та товщини фільтра на концентрацію частинок забруднення, що мігрують з розчином, і концентрації сорбованої речовини. Показано, що для малих швидкостей конвективного перенесення з часом концентрація у водному розчині збільшується доки не вийде на усталений режим. Для більших значень цього коефіцієнта спостерігається наявність часового інтервалу, коли величина швидкості конвективного перенесення практично не впливає на поведінку і значення концентрації забруднення у розчині, причому чим якісніша робота фільтра, тим такий інтервал настає раніше.

9. Для всіх сформульованих і розв'язаних у роботі задач розроблено розрахункові схеми, побудовані алгоритми, спроектовано архітектури програмні комплекси та створено пакети програм GeterPas, WodFill та FlowRan для кількісного дослідження масоперенесення домішок у тілах зі складною та складеною внутрішньою структурою в залежності від геометричних параметрів і характеристик матеріалу середовища. При цьому розглянуто практичні задачі, що моделюють промислові багат шарові засипні фільтри води і фільтрів механічного очищення та

хімічного пом'якшення води, утримуючих елементів інженерних конструкцій і сховищ техногенних забруднень, тощо.

10. Практичне значення дисертаційної роботи полягає у наступному: розраховано експлуатаційні параметри каркасно-насіпних фільтрів води й часових параметрів роботи промислових фільтрів води (використано: КП «Харківводоканал»); запропоновано підходи більш ефективного видалення органічних сполук, вилучення кольорово-забарвлених частинок, а також речовин, які впливають на запах та каламутності водних розчинів (використано: ДП «Угерський спиртзавод»); досліджено процеси очищення від забруднення у водному фільтрі, яким проведено комп'ютерні обчислення щодо пом'якшення води, а саме вилучення надлишків іонів кальцію (використано: Випробувальною лабораторією Товариства з додатковою відповідальністю «Хмельницькзалізобетон»); проведено оцінки процесів гетеродифузії техногенних речовин за їх натурального розпаду, а саме розпаду органічних азотовмісних сполук, пестицидів та радіоактивних речовин (використано: Департаментом екології та природних ресурсів «Львівська обласна державна адміністрація»); частина результатів теоретичного характеру впровадженні в навчальний процес при розробці курсу “Аналітичні та чисельні методи досліджень” для студентів Національного університету «Львівська політехніка» за спеціальністю 113 “Прикладна математика”.

Список використаних джерел

1. Амінокислоти: [Електрон. ресурс]. - Режим доступу: <https://ukrayinska.libretexts.org/>.
2. Білий М.У., Охріменко Б.А. Атомна фізика. – К.: Знання, 2009. – 559 с.
3. Білуцак 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.
4. Білуцак Ю.І. Моделювання других моментів випадкового поля концентрації в півпросторі з експоненціальним розподілом шаруватих включень // Вісник Кременчуцького національного університету ім. М. Остроградського – 2014. – Вип. 6, Т. 89 –С.71-79.
5. Білуцак Ю.І, Чапля Є.Я., Чернуха О.Ю. Про підсумовування асимптотичних доданків у розв'язках задач дифузії // Фізико-математичне моделювання та інформаційні технології. – 2014. – Вип. 19. – С. 11-20.
6. Білуцак Ю. І, Гончарук В. Є., Чернуха О. Ю. Математична модель невзаємодіючих потоків для опису процесів масопереносу двома шляхами за каскадного розпаду частинок // Прикладні проблеми механіки і математики. – 2014. – Вип. 12. – С 137-145.
7. Білуцак Ю.І., Чернуха О.Ю., Чучвара А.Є. Дослідження алгоритму розв'язування нелінійних // Матеріали Міжнародної науково-практичної конференції "Інформаційні технології та комп'ютерне моделювання", Івано-Франківськ: п. Голіней О.М., 2024. –С.170-173.
8. Білуцак Ю., Чернуха О., Чучвара А. Про побудову інтегрального перетворення оператора параболічного диференціального рівняння за мішаних граничних умов I і II роду / Матеріали Міжнародної науково-практичної конференції "Інформаційні технології та комп'ютерне моделювання", Івано-Франківськ: п. Голіней О.М., 2021. – С. 168-169.
9. Білуцак Ю., Чернуха О., Чучвара А. Апроксимація граничної умови на невідомому часовому інтервалі при моделюванні процесів конвективної дифузії у промислових фільтрах води / Матеріали Міжнародної наукової конференції "Сучасні проблеми термомеханіки – 2021", Львів, 2021. – С. 20-19.
10. Білуцак Ю.І. Дослідження концентрації та потоків маси домішкових речовин за моделлю дифузії у тілі з пастками, що супроводжується ланцюговим розпадом / Міжнародна наукова конференція «Сучасні проблеми математичного моделювання, обчислювальних методів та інформаційних технологій», Рівне, 2018. – С. 32-34.
11. Білуцак Ю.І., Чернуха О.Ю., Чучвара А.Є. Математичний опис конвективної дифузії двокомпонентного розчину у багатошарових каркарсно-насіпних фільтрах води / Матеріали XVII міжнар. наук.-техн. конф. «Фізичні процеси та поля технічних та біологічних об'єктів», Кременчук: КрНУ, 2018. – С. 156-158.
12. Білуцак Ю. Математичне моделювання дифузії у середовищі з пастками за каскадного розпаду домішок / Матеріали статей між. науково-практичної конф. «Інформаційні технології та компютерне моделювання». – Івано Франківськ: п.Голіней О.М. – 2017. - С.342-348.

13. Білуцак Ю.І., Гончарук В.Є., Чернуха О.Ю., Чучвара А.Є. Математичне моделювання дифузійних процесів у випадкових шаруватих структурах за явного врахування стрибків концентрації та її похідної на міжфазних границях / Матеріали 19-ї міжнар. науково-технічної конф. SAIT «Системний аналіз та інформаційні технології» (Київ, 22-25 травня 2017р.), К.:ННК «ПСА» НУТУ «КП», 2017, С. 38-39.
14. Білуцак Ю.І., Гончарук В.Є., Давидок А.Є., Чернуха О.Ю. Математичне та комп'ютерне моделювання двошарового засипного фільтра очистки води // Матеріали IV науково-технічної конференції «Обчислювальні методи і системи перетворення інформації» присв. пам'яті проф. Б.О.Попова. – Львів: ФМІ НАНУ, 2016. – С. 162-166.
15. Білуцак Ю. Комп'ютерне моделювання других моментів випадкового поля концентрації в півпросторі з ерлангівський розподілом шаруватих включень / Інформаційні технології та комп'ютерне моделювання: матеріали статей міжнародної науково-практичної конференції м. Івано-Франківськ, 2016. – С. 195-197.
16. Білуцак Ю.І., Гончарук В.Є., Чернуха О.Ю., Чучвара А.Є. Числові методи для комп'ютерного моделювання довговічності роботи двошарового фільтра води // Матеріали XV Міжнародної науково-технічної конференції «Фізичні процеси та поля технічних та біологічних об'єктів». – Кременчук: В-во КрНУ ім. М. Остроградського, 2016. – С. 118-120.
17. Білуцак Ю.І., Гончарук В.Є., Давидок А.Є., Чернуха О.Ю. Математичне моделювання взаємозв'язних теплових і дифузійних процесів з урахуванням розпаду домішки у двофазній стохастично неоднорідній багатошаровій смузі / Матеріали міжнародної наукової конференції «Сучасні проблеми математичного моделювання та обчислювальних методів». – Рівне: РВВ РДГУ, 2015. – С. 30.
18. Білуцак Ю.І., Гончарук В.Є., Давидок А.Є., Чернуха О.Ю. Пакет програм для розв'язування крайових задач дифузії у випадкових структурах // Збірник наукових праць ХХІ Всеукраїнської наукової конференції «Сучасні проблеми прикладної математики та інформатики». – Львів: ЛНУ ім. І. Франка, 2015. – С. 63-66.
19. Білуцак Ю.І., Гончарук В.Є., Чернуха О.Ю. Математичне моделювання процесів дифузії за каскадного розпаду мігруючих речовин / Матеріали 16-ї міжнар. науково-технічної конф. SAIT «Системний аналіз та інформаційні технології» (Київ, 26-30 травня 2014р.). – К.:ННК «ПСА» НТУУ «КП», 2014. – С. 57-58.
20. Білуцак Ю. Пакет програм для комп'ютерного моделювання дифузії домішок у випадково неоднорідній шаруватій структурі //Матеріали IX Міжнародної наукової конференції «Математичні проблеми механіки неоднорідних структур» (15-19 вересня 2014 р. Львів) ІППММ НАНУ, 2014. – С. 17-19.
21. Білуцак Ю., Чернуха О., Чучвара А. Пакет програм «WodFil» для дослідження процесів очищення від забруднення у водному фільтрі // Свідоцтво про реєстрацію авторського права на твір № 118818 від 08.05.2023р.
22. Бурак Я.Й., Чапля Є.Я., Чернуха О.Ю. Континуально-термодинамічні моделі механіки твердих розчинів. – К.: Наукова думка, 2006. – 272 с.

23. Бурак Я.Й., Галапац Б.П., Чапля Є.Я. Деформація електропровідних тіл з урахуванням гетеродифузії заряджених домішкових частинок // Фіз.-хім. мех. матеріалів. – 1980. – №5. – С. 8-14.
24. Бурак Я.Й., Галапац Б.П., Чапля Є.Я. Вихідні рівняння процесів деформації електропровідних твердих розчинів з урахуванням різних шляхів дифузії домішкових частинок // Мат. методи і фіз.-мех. поля. – 1980. – Вип.11. – С. 60-66.
25. Вода – основа життя Землі [Електронний ресурс]. – Режим доступу: http://www.mediana-filter.com.ua/water_filter_granular_load.htm
26. Гаврилюк І.П., Макаров В.Л. Методи обчислень. – Київ: Вища школа, 1995. – 367 с.
27. Грицько Є.Г., Журавчак Л.М., Шуміліна Н.В. Інтерпретація нестационарного фільтраційного потоку при визначенні геометричних параметрів непровідного включення // Мат. методи та фіз.-мех. поля. 2001. – 44, № 1. – С. 174-183.
28. Гончаров А.І., Серета І.П. Хімічна технологія. – К.: Вища школа, 1979. – Т.1. – 288 с.
29. Гончарук В.Є., Білуцак Ю.І., Чапля Є.Я., Чернуха О.Ю. Прогнозування поширення забруднення у ґрунті на основі математичних моделей гетеродифузії з урахуванням пасток та розпаду / 3-й Міжнародний конгрес «Захист навколишнього середовища. Енергоощадність збалансоване природокористування (Львів 17-19 вересня 2014 р) НУ ЛП, 2014. – С. 23.
30. Гончарук В.Є., Білуцак Ю.І., Чапля Є.Я., Чернуха О.Ю. Математичне моделювання міграції забруднень у ґрунті з кругового джерела на поверхні / Матеріали XVI Міжнародної науково-методичної конференції. “Безпека життя і діяльності людини – освіта, наука, практика”. – Харків; 2015. – С. 48-50.
31. Гончарук В., Білуцак Ю., Чернуха О. Моделювання міграції забруднення у середовищі з пастками за каскадного розпаду частинок / Матеріали IV міжнародної науково-практичної конф. «Безпека життєдіяльності на транспорті та виробництві – освіта, наука, практика». – Херсон: В-во Херсонської державної морської академії, 2017. – С. 341-347.
32. Гончарук В.Є., Білуцак Ю.І., Чапля Є.Я., Чернуха О.Ю. Математичне моделювання та прогнозування поширення забруднень у ґрунті // Комунальне господарство міст. Серія: Безпека життя і діяльності – наука, освіта, практика. – 2015. – Вип. 120 (1). – С 115-121.
33. Гродзинський Д.М. Радиобіологія. - К. Либідь. - 2001. - 448 с.
34. Дороговцев А.Я. Математичний аналіз. – К.: Либідь. – 1993. – 321с.
35. Задачин В.М., Конюшенко І.Г. Чисельні методи. – Харків: Вид. ХНЕУ ім. С. Кузнеця, 2014. – 180 с.
36. Застосування гумінових кислот: [Електрон. ресурс]. - Режим доступу: <http://www.myshared.ru/slide/396883/>.
37. Іванчук Н.В., Мартинюк П.М., Филипчук В.Л. Математичне моделювання очищення води в біоплато-фільтрі / Математичне та комп'ютерне моделювання. Серія: Технічні науки. – 2020. – Вип. 21. – С.76-82.
38. Екологічна катастрофа: по всій Україні отруйна вода [Електронний ресурс]. – Режим доступу: https://nnovosti.info/articles/ekologichna_katastrofa_po_vsij_ukrajini_otrujna_voda_video-198.html

39. Енциклопедія з машинобудування. Обладнання, Матеріалознавство, Механіка [Електронний ресурс]. – Режим доступу: <https://mash-xxl.info/info/152422/>
40. *Калужнін Л.А., Вишенський В.А., Шуб Ц.О.* Лінійні простори. – К. : Вища школа, 1971. – 344 с.
41. Кварцовий пісок <http://www.lbud.com.ua/uk/subie-stroitelnye-smesi/cement-izvest-kroschka/kvarcevyj-pesok.html>
42. *Кожушко О.Д., Мартинюк П.М.* Дослідження впливу розливу забруднюючої речовини на вологоперенесення в ґрунті засобами комп'ютерного та математичного моделювання. Математичне та комп'ютерне моделювання. Серія: Технічні науки. Видавництво Кам'янець-Подільського національного університету імені Івана Огієнка. - 2018. - Вип. 17. - С. 80-92.
43. *Красноьорова А.П.* Хімія радіоактивних елементів. Вид. «Основа». Ч.І. Харків., 2011. - 78с.
44. *Красноьорова А.П.* Хімія радіоактивних елементів. Вид. «Основа». Ч.ІІ. Харків. «Основа». 2011. - 93 с.
45. *Лаврик В.І., Булавацький В.М.* Математичне моделювання деяких нерівноважних процесів фільтраційно-конвективної дифузії // Доповіді НАН України. – 2002. - № 2. – С. 68-72.
46. *Лановенко О.Г., Остапівщина О.О.* Словник-довідник з екології. - Херсон : ПП Вишемирський В.С., 2013. — С. 188.
47. Ланцюгові реакції: [Електрон. ресурс]. - Режим доступу: http://www.xumuk.ru/encyklopedia/2/sernye_reakcii.html.
48. Львівводоканал [Електронний ресурс]. – Режим доступу: <http://lvivvodokanal.com.ua/>
49. *Малишев В., Габ А., Шахнін Д.* Аналітична хімія. Якісний та кількісний аналіз. – Університет «Україна», 2018.- 212 с.
50. Математичне моделювання нерівноважних процесів у складних системах / *Білуцак Ю.І., Гайвась Б.І.* під заг. ред. *Є.Я. Чанлі.* – Львів: Растр-7, 2019. – 256 с.
51. *Мацієвська О.* Водовідвідні очисні споруди: навч. посібник. – Львів: Видавництво Львівської політехніки, 2015. – 220 с.
52. *Мідак Л.Я., Кравець І.В.* Основи радіохімії. – Івано-Франківськ: пп Голіней, 2013. – 160с.
53. Напрямок нормалі для поверхонь і оболонок http://support.ptc.com/help/creo/creo_pma/russian/index.html#page/simulate/simulate/modstr/i_dealizations/reference/dir_surfshell.html
54. Норми радіаційної безпеки України (НРБУ-97). Київ. - 1997 р.
55. Основні джерела радіаційного забруднення біосфери: [Електрон. ресурс]. - Режим доступу: <http://nuclphys.sinp.msu.ru/ecology/ecol/ecol04.htm>.
56. Основні санітарні правила роботи з радіоактивними речовинами та джерелами іонізуючого опромінення ОСПУ-2000. Київ-2000.

57. Органічна речовина [Електрон. ресурс]. - Режим доступу:
http://zilant.kpfu.ru/kek/gidrogeo/organ_1.php.
58. *Охріменко М.Г., Фартушний І.Д., Кулик А.Б.* Некоректно поставлені задачі та методи їх розв'язування. – Київ: В-во «Політехніка» - 225 с.
59. *Пастух О.А.* Архітектура квантових нечітких інформаційних систем другого роду // Вісник КНУТД. – Вип. 4. - 2009. – С. 33-37.
60. *Підстригач Я.С.* Диференціальні рівняння дифузійної теорії деформації твердого тіла // Доп. АН УРСР. – 1963. - № 3. - С. 336-40.
61. *Підстригач Я.С., Карасьов О.Б., Гера Б.В., Жук П.А., Чапля Е.Я.* Математичне моделювання тепловологопереносу в ґрунті та задачі інтерпретації даних дистанційного зондування земної поверхні // Мат.мет. і фіз.- мех поля. - 1992. - Вип. 35. - С. 8-20.
62. *Попов О.В., Рудич О.В.* До розв'язування систем лінійних рівнянь на комп'ютерах гібридної архітектури / Математичне та комп'ютерне моделювання. Серія: Фізико-математичні науки: зб. наук. Праць. – 2017. – Т.15 . - С. 158-164
63. *Пташник Б.Й., Ільків В.С., Кміть І.Я., Поліщук В.М.* Нелокальні крайові задачі для рівнянь із частинними похідними. – Київ: Наукова думка, 2002. - 416 с.
64. *П'янило Я., Чернуха О., Гончарук В., Білуцак Ю.* Математичне моделювання та прогнозування поширення радіоактивних забруднень у приповерхневих шарах землі / Семінар «Сталий розвиток – погляд у майбутнє (Львів, 15 вересня 2017р.), Львів: Видавництво львівської політехніки, 2017. – С. 26.
65. *Сівак В., Чапля Є., Чернуха О.* Процеси дифузії-конвекції з урахуванням сорбції у двошаровому фільтрі // Фізико-математичне моделювання та інформаційні технології. – 2006. - Вип. 4. – С. 78-91.
66. *Сотник І.М., Мазін Ю.О.* Еколого-економічні механізми управління інноваційним ресурсозбереженням у машинобудуванні Університетська книга, 2023. -252с.
67. Сульфовугілля, іонообмінна смола <https://alhim.com.ua/uk/produksiia/khimvodochistka-vodopidgotovka/sulfvugillya-ionoobminna-smola>
68. Фільтри для очищення води зі свердловини [Електронний ресурс]. – Режим доступу:
http://www.syl.ru/article/202895/new_filtryi-dlya-ochistki-vodyi-iz-skvajinyi-kakomu-otdat-predpochtenie
69. *Хільчевський В.К., Осадчий В.І., Курило С.М.* Основи гідрохімії: Підручник. - К.: Ніка-Центр, 2012. - 312 с.
70. *Чарін В.С.* Лінійна алгебра. — К. : Техніка, 2004. — 416 с.
71. *Чапля Є.Я.* Континуально-термодинамічний опис відкритих деформівних систем. Вихідні положення. – Львів, 1995. – 56 с. – (Препрінт/ НАН України. Центр математичного моделювання ІППММ, №12-95).
72. *Чапля Є.Я., Чернуха О.Ю.* Фізико-математичне моделювання гетеродифузного масо-переносу. – Львів: СПОЛОМ, 2003. – 125 с.

73. Чапля Є.Я., Чернуха О.Ю. Кінетика переносу домішок при локальній зміні стану частинок (1. Модельні представлення, гетеродифузія двома шляхами). – Львів, 1993. – 44 с. – (Препрінт/АН України. Центр мат. моделювання ППММ; № 3-93).
74. Чапля Є.Я., Чернуха О.Ю. Кінетика переносу домішок при локальній зміні стану частинок (2. Гетеродифузія двома шляхами у тілі з пастками). – Львів, 1993. – 28 с. – (Препрінт/АН України. Центр мат. моделювання ППММ; № 5-93).
75. Чапля Є.Я., Чернуха О.Ю., Білуцак Ю.І. Математичне моделювання гетеродифузійних процесів при розпаді частинок. – Львів: Растр-7, 2018. – 240 с.
76. Чапля Є., Чернуха О., Білуцак Ю. Аналітико-ітераційний метод розв'язування крайових задач гетеродифузії каскадного типу / Матеріали XXIV всеукраїнської наукової конференції «Сучасні проблеми прикладної математики та інформатики», Львів: Вид-во Тараса Сороки, 2018. – С. 179-185.
77. Чапля Є., Чернуха О., Білуцак Ю. Континуальні моделі багатошвидкісних процесів масоперенесення розпадних речовин у тілах з мікроструктурою / Матеріали міжнародної наукової конференції «Мікро- та нанонеоднорідні матеріали: моделі та експеримент»; Львів: Растр-7, 2018. – С. 36-37.
78. Чапля Є.Я., Чернуха О.Ю., Білуцак Ю.І. Метод функцій Гріна для розв'язування крайових задач гетеродифузії двома шляхами / Матеріали V науково-технічної конференції «Обчислювальні методи і системи перетворення інформації» присв. пам. проф. Б.О.Попова, Львів: ФМІ НАНУ, 2018. – С. 119-125.
79. Чапля Є., Чернуха О. Математичне моделювання дифузійних процесів у випадкових і регулярних структурах. – Київ: Наук. думка, 2009. – 302 с.
80. Чапля Є., Чернуха О., Гончарук В., Торський А. Процеси переносу розпадної речовини в гетерогенних середовищах. – Львів: Євросвіт, 2009. – 261с.
81. Чернуха О., Білуцак Ю., Чучвара А. Моделювання дифузійних процесів у стохастично неоднорідних шаруватих структурах. – Львів: Растр-7, 2016. – 262 с.
82. Чернуха О.Ю., Білуцак Ю.І. Математичне моделювання процесів конвективної дифузії і сорбції у тришаровому пористому тілі. II. Кількісний аналіз концентрації домішкових частинок на границях контакту фаз // Мат. методи та фіз.-мех. поля. 2022. – 65, № 1-2. – С. 229-240. (категорія А)
83. Чернуха О.Ю., Білуцак Ю.І. Про побудову інтегрального перетворення для оператора рівняння конвективної дифузії за мішаних граничних умов // Фізико-математичне моделювання та інформаційні технології. – 2020. – Вип. 30. – 85-102.
84. Чернуха О., Гончарук В., Білуцак Ю., Давидок А. Математичне моделювання та прогнозування поширення радіоактивних забруднень у приповерхневих шарах насиченого ґрунту // Математичні машини і системи. – 2017. – № 3. – С. 82-101.
85. Чернуха О., Білуцак Ю. Комп'ютерне моделювання дифузії домішкових речовин у середовищі з пастками за каскадного розпаду частинок // Фізико-математичне моделювання та інформаційні технології. – 2017. – Вип. 25. – С. 170-183.

86. Чернуха О., Білуцак Ю., Гончарук В. Математичне моделювання розподілу концентрації домішок у стохастичних шаруватих тілах за неідеальних умов контакту на міжфазних границях // Вісник Кременчуцького національного університету ім.М.Остроградського – 2017. – Вип. 3, Т. 104 – С.52-61.
87. Чернуха О., Гончарук В., Білуцак Ю., Давидок А. Пакет програм “FlowRan” для дослідження дифузійних потоків у випадкових шаруватих структурах // Математичні машини і системи. – 2016. – № 1. – С. 106-119.
88. Чернуха О., Білуцак Ю. Моделювання усередненого поля концентрації у випадкових шаруватих структурах з урахуванням стрибків шуканої функції на міжфазних границях // Міжнародна наукова конференція «Сучасні проблеми термомеханіки: збірник наукових праць» [Електронний ресурс]. – Львів: ІППММ ім. Я.С.Підстригача НАН України, 2016. – Режим доступу: www.iapmm.lviv.ua/MPT2016. – С. 135-136
89. Чернуха О.Ю., Гончарук В.Є., Білуцак Ю.І. Математичний опис процесів масопереносу двома шляхами з каскадним розпадом частинок за моделлю невзаємодіючих потоків // Тези доповідей XIII Міжнародної науково-технічної конференції «Фізичні процеси та поля технічних і біологічних об’єктів». – Кременчук: КрНУ ім. М. Остроградського, 2014. – С. 196-197.
90. Чернуха О.Ю., Білуцак Ю.І. Моделювання конвективної дифузії забруднень у двошарових фільтрах води за апроксимації граничної умови на невідомому часовому інтервалі // Матеріали Міжнародної науково-практичної конференції "Інформаційні технології та комп’ютерне моделювання", Івано-Франківськ: п. Голіней О.М., 2020. – С. 207-211.
91. Чернуха О., Білуцак Ю., Чучвара А. Програмний комплекс для моделювання дифузії у тілі з пастками за каскадного розпаду мігруючих частинок / Матеріали 20-ї міжнар. науково-технічної конф. SAIT «Системний аналіз та інформаційні технології», Київ: ННК «ПСА» НУТУ «КПІ», 2018. - С. 98-99.
92. Чернуха О.Ю., Білуцак Ю.І. Процеси конвективної дифузії у тришаровому пористому тілі // Математичні проблеми механіки неоднорідних структур: збірник наукових праць 10-ї Міжнародної наукової конференції / за заг. ред. Р.М. Кушніра і Г.С. Кіта // Львів: Інститут прикладних проблем механіки і математики ім. Я.С. Підстригача НАН України. – 2019. – Вип. 5. – С. 236-237.
93. Чернуха О.Ю., Білуцак Ю. І., Пахолок Б.Б., Ментинський С.М. Архітектура пакету комп’ютерних програм GeterPas1 для кількісного дослідження процесів переносу за каскадних хімічних реакцій / Матеріали наукової конференції «Сучасні тенденції розвитку української науки», Переяслав-Хмельницький, 2018. – Вип. 4 (14). – С. 56-65.
94. Чернуха О., Білуцак Ю., Чучвара А. Модель гетеродифузії двома шляхами при поверхневому забрудненні ґрунту за каскадного розпаду частинок / Матеріали V міжнародної науково-практичної конф. «Безпека життєдіяльності на транспорті та виробництві – освіта, наука, практика», Херсон: В-во Херсонської державної морської академії, 2018. – С. 283-287.

95. Чернуха О.Ю., Гончарук В.Є., Білуцак Ю.І. Комп'ютерне моделювання дифузійних процесів за каскадного розпаду мігруючих речовин / Матеріали III науково-технічної конференції «Обчислювальні методи і системи перетворення інформації» (Львів, 25-26 вересня, 2014р.), Львів: ФМІ НАНУ, 2014. – С. 59-62.
96. Чернуха О.Ю., Гончарук В.Є., Білуцак Ю.І. Процеси масоперенесення в багатокомпонентному середовищі за каскадного розпаду частинок / Матеріали науков-технічної конференції «Мікро- та нанонеоднорідні матеріали: моделі та експеримент» (INTERPOR'15). – Львів: В-во Львівської політехніки, 2015. – С. 79-80.
97. Чернуха О.Ю., Білуцак Ю.І. Числовий метод знаходження подвійного інтеграла зі змінними верхніми межами / Сучасні проблеми механіки та математики: збірник наукових праць у 3-х т. – Львів: Інститут прикладних проблем механіки і математики ім. Я.С. Підстригача НАН України. – 2018. – Т. 3. – С. 38-40.
98. Чернуха О., Білуцак Ю., Чапля Є. Функції Гріна задач дифузії двома шляхами / Матеріали Міжнародної науково-практичної конференції "Інформаційні технології та комп'ютерне моделювання", Івано-Франківськ: п. Голіней О.М., 2018. –С. 287-291.
99. Чернуха О.Ю., Гончарук В.Є., Білуцак Ю.І., Давидок А.Є. Комп'ютерне моделювання роботи двошарового засипного фільтра води // Збірник наукових праць XV міжнародної науково-практичної конференції «Безпека життя і діяльності людини – освіта, наука, практика». – Київ: «Темпо», 2016. – С. 312-316.
100. Чернуха О., Гончарук В., Білуцак Ю., Чучвара А. Моделювання та прогнозування поширення радіоактивних забруднень у ґрунтах. / Міжнародна конференція "Проблеми зняття з експлуатації об'єктів ядерної енергетики та відновлення навколишнього середовища", м. Славутич, 25-27 квітня 2017. – С. 309-322.
101. Чернуха О., Білуцак Ю. Математичне та комп'ютерне моделювання процесів конвективної дифузії у двошарових засипних фільтрах води// Матеріали статей між. науково-практичної конф. «Інформаційні технології та комп'ютерне моделювання». – Івано-Франківськ: п.Голіней О.М. – 2017. – С.349-354.
102. Чернуха О., Лянце Г., Білуцак Ю. Перенесення радіонуклідів ґрунтовими водами // Матеріали IV міжнар. науково-практичної конференції «Екологія і природокористування в системі оптимізації відносин природи і суспільства». м. Тернопіль, 27-28 квітня 2017 року. – Тернопіль: Крок, 2017. – С. 134-135.
103. Чернуха О.Ю., Чапля Є.Я., Гончарук В.Є., Білуцак Ю.І., Давидок А.Є. Пакет програм для розрахунку дифузійних потоків у двофазних тілах випадкової шаруватої структури («FlowRan») // Свідоцтво про реєстрацію авторського права на твір № 61858 від 28.09.2015р.
104. Чернуха О., Білуцак Ю., Білуцак Г. Процеси перенесення в шарі за лінійної регресійної моделі на нижній границі // Modeling, Control and Information Technologies: Proceedings of International Scientific and Practical Conference, Рівне. – 9–11 листопада 2023. – С. 161–164.

105. *Шибецький Ю.О., Шестопалов В.М., Почтаренко В.І., Борисова Т.А., Шурнач Н.О.* Концепції геологічного захоронення радіоактивних відходів. *Геологічний журнал*. 2022. № 1 (378). С. 03—23. <https://doi.org/10.30836/igs.1025-6814.2022.1.247970>
106. *Шумейко В.М., Глухівський І.В., Овруцький В.М.* та інші. *Екологічна токсикологія*. – Київ: АТ „Столиця”, 1996. – 204 с.
107. Як вибрати фільтруючу засипку <https://vencon.ua/ua/articles/kak-vybrat-zasytku-dlya-filtra>
108. *Ясній О.П., Кришок І.В.* Фактори впливу на надійність комп’ютерних систем в процесі їх розробки / *Матеріали XI науково-технічної конференції «Інформаційні моделі, системи та технології»*. - 2023. – С. 161.
109. Abramowitz M and Stegun I (EDs) *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*. - Washington: Government Printing Office, 1948 – 1046p.
110. *Achter M.R., Smoluchowski R.* Diffusion in grain boundaries and their structure // *J. Appl. Phys.* – 1951. - V. 22, N 10. - P. 1260-1264.
111. *Aifantis E.C., Hill J.M.* On the theory of diffusion in media with double diffusivity. I. Basic mathematical results // *Mech. Appl. Math.* – 1980. – V. 33., Pt. 1. – P. 1-21.
112. *Ardkhean R., Caputo D.F.J., Morrow S.M., Shi H., Xiong Y., Anderson E.A.* Cascade polycyclizations in natural product synthesis // *Chem. soc. rev.* - 2016. - V. 45. - P. 1557-1569.
113. *Atkins P., de Paula J.* *Physical Chemistry*. 8th edition. - Oxford: Oxford Univ. Press, 2006. – 1064 p.
114. *Audi G., Wapstra A., Thibault C.* The Ame2003 atomic mass evaluation: (II). Tables, graphs and references // *Nuclear Physics A* . – V. 729, Iss. 1. – P. 337-676.
115. *Balluffi R.W.* Grain boundary diffusion mechanisms in metals // *Diffusion in crystalline solids* / Eds. G.E. Murch, A.S. Nowick. – New-York-London: Academic Press, 1984. - P. 319-377.
116. *Barrenblatt G.E., Zheltov I.P., Kochina I.N.* Basic Concepts in the Theory of Seepage of Homogeneous Liquids in Fissured Rocks // *Journal of Applied Mathematics*. – 1960. –V. 25. – P. 58-63.
117. *Baranger M., Vogt E.* *Advances in Nuclear Physics*. - New York: Springer New York, 1973. – 329p. <https://doi.org/10.1007/978-1-4615-9044-6>
118. *Barenblatt G. I., Entov V. M., and Ryzhik V. M.* *Theory of Nonstationary Fluid and Gas*. - M.Nauka, 1972. – 288p.
119. *Bear J., Cheng A. H.-D.* *Modeling Groundwater Flow and Contaminant Transport*. - Dordrecht: Springer Dordrecht, 2010. - 834p. <https://doi.org/10.1007/978-1-4020-6682-5>
120. *Bibby R.* Mass transport of solutes in dual porosity media // *Water Resour. Res.* – 1981. – V. 17 (4). – P. 1075-1081.
121. *Bialik R., Nikora V., Karpiński M., Rowiński P.* Diffusion of bedload particles in open-channel flows: distribution of travel times and second-order statistics of particle trajectories / *Environmental Fluid Mechanics*. 2015. Vol. 15. – P. 1281-1292.

122. *Bilushchak Y., Chernukha O., Chuchvara A.* Approximation of boundary condition according to experimental data on the lower surface of the body during the simulation of the bulk water filter / Technical research and development: collective monograph.– Boston : Published Primedia eLaunch, 2021. – P. 64-79.
123. *Bilushchak Y., Chernukha O.* Modeling of the processes of heterodiffusion in two ways for the cascade decay of admixture particles. I. Cascade-type initial-boundary-value problems // Journal of Mathematical Sciences. – 2021. – Vol. 254, No 1. – P. 142-155. (Q3)
124. *Bilushchak Y., Chernukha O.* Modeling of the Processes of Heterodiffusion in Two Ways for the Cascade Decay of Admixture Particles. II. Quantitative Analysis //Journal of Mathematical Sciences. – 2021. – Vol. 256, No 4. – P. 482-496. (Q3)
125. *Bilushchak Yu.I., Chernukha O.Yu., Gera B.V., Goncharuk V.Ye.* Software for description of diffusion by two ways with cascade particle decay / System analysis and information technologies: 17-th International conference SAIT 2015. – Kyiv: ESC “IASA” NTUU “KPI”, 2015. – P. 23-24.
126. *Bilushchak Y., Chernukha O., Chuchvara A.* Method for numerical solving a nonlinear functional equation in an interval of unknown length / Abstracts of IV International Scientific and Practical Conference Prospects And Achievements in Applied and Basic Sciences (Budapest, Hungary February 9 – 12, 2021). – P. 501-506.
127. *Bilushchak Yu.I., Chernukha O.Y., Davydok A.Y., Goncharuk V.Y.* Mathematical model for mass flow in a strip with randomly disposed sublayer of stochastic thickness / System analysis and information technologies: 18-th International conference SAIT 2016. Proceedings. – Kyiv: ESC “IASA” NTUU “KPI”, 2016. – P. 24-25.
128. *Bobovnikova Ts.I., Makhon'ko K.P., Siverina A.A., Rabotnova F.A, Gutareva V.P., Volokitin A.A.* Physical-chemical forms of radionuclides in atmospheric fallout, and their transformations in soil, after the accident at the Chernobyl Atomic Energy Plant // Atomic Energy. - 1991. –Vol. 71, P 932–936. <https://link.springer.com/article/10.1007/BF01124214>
129. *Boehm W.* Numerical Methods 1st Edition. - Natick, Massachusetts: A K Peters/CRC Press, 1993. -196 p.
130. *Bogaenko V. Bulavatsky V.* Numerical-analytic solution of one modeling problem of fractional-differential dynamics of computer viruses. // International Scientific Technical Journal "Problems of Control and Informatics. 2022. - Vol. 67, No. 1. – P. 56-65.
131. *Bokstein B.S., Mendeleev M.I., Srolovitz D.J.* Kinetics of homogeneous chemical reactions / in Thermodynamics and Kinetics in Materials Science. Oxford: Oxford University Press, 2005. - P. 134–151.
132. *Bomba A., Safonyk A.* Modelling of processes of liquids cleaning from multicomponent impurities in sorption filters // Physical and mathematical model and information technology. – 2012. – Issue 16. – P. 32-41.
133. *Borzilov V.A.* Physico-Mathematical Modelling of Radionuclide Behaviour // Radiation Protection Dosimetry (Oxford Academic), 1996. – Vol. 64, Iss. 1-2. - P. 3-10.

134. *Bossew P., Kirchner G.* Modelling the vertical distribution of radionuclides in soil. Part 1: the convection–dispersion equation revisited // *Journal of Environmental Radioactivity.* – 2004. – Vol. 73, Iss. 2. – P. 127-150.
135. *Brezinski C., Zaglia R.M.* Extrapolation Methods: Theory and Practice (Volume 2). – Publisher North Holland. – 1991. – 474 p.
136. *Brezonik P., Arnold W.* Water Chemistry: An Introduction to the Chemistry of Natural and Engineered Aquatic Systems. – Oxford: Oxford University Press, 2011 -782p.
137. *Butenko S., Pardalos P.* Numerical Methods and Optimization: An Introduction. – Chapman and Hall/CRC, 2014. – 412 p.
138. *Cahn R.W., Haasen P.* Physical Metallurgy. - Amsterdam: North-Holland, 1996. - 2740 p.
139. *Chaplya Y., Chernukha O., Bilushchak Y.* Contact initial boundary-value problem of the diffusion of admixture particles in a two-phase stochastically inhomogeneous stratified strip // *J. of Mathematical Sciences.* – 2012. – V. 183, N 1. – P. 83-99.
140. *Chaplya Y., Chernukha O., Bilushchak Y.* Matrix Green's function of double-diffusivity problem and its applications to problems with inner point source // *Task Quarterly.* – 2019. – Vol. 23, No. 1. – P.75-99.
141. *Chaplya Ye., Chernukha O. Bilushchak Y.* Mathematical Modeling and Simulation of Processes of Heterodiffusion with Cascade Decay of Particles / *Матеріали Міжнародної науково-практичної конференції "Інформаційні технології та комп'ютерне моделювання"*, Івано-Франківськ: п. Голіней О.М., 2018. – С. 276-286.
142. *Chen J., Dong T., Ren Z.* Cross sections of proton- and neutron-induced reactions by the liège intranuclear cascade model // *Physical review C.* - 2016. – V. 93, Iss. 6. DOI:<https://doi.org/10.1103/PhysRevC.93.064608>.
143. *Chernukha O.Y., Bilushchak Yu. I.* Mathematical modeling of random concentration field and its second moments in a semispace with erlangian distribution of layered inclusions // *Task Quarterly.* – 2016. – V. 20, N 3. – P. 295-334.
144. *Chitimus A.-D., Nedeff V., Mosnegutu E., Barsan N.* Influence of liquid pollutants' leaching speed in the soil on the process of cleaning and self-cleaning // *Int. Journal of Applied Microbiology and Biotechnology Research.* – 2016. - V. 4 (5). – P. 66-74.
145. *Crank J.* The mathematics of diffusion. - Oxford: Clarendon Press, 1956. – 575 p.
146. *Coleman B.D, Dill E.H.* Thermodynamics of electromagnetic fields in materials with memory // *Arch. Rationnal Mech. Anal.* – 1971. – V. 41, № 2. – P. 132-162.
147. *Corwin E.I., Clusel M., Siemens O.N., et al.* Model for random packing of polydisperse frictionless // *Soft Matter.* – 2010. – № 6. – P. 2945-2959.
148. *Coutelieis A.F., Delgado J.M.P.Q.* Transport Processes in Porous Media. – Berlin: Springer, 2012. – 235 p.
149. *Chernukha O., Chuchvara A., Bilushchak Y.* Simulation of admixture diffusion in a layer with randomly disposed spherical inclusions / *Information Technology in Selected Areas of Management 2017.* – Krakow: Wydawnictwa AGH, 2018. – P. 109-123.

150. *Chernukha O.Y., Bilushchak Y.I., Chuchvara A.Y.* On the error of the approximate calculation of double integrals with variable upper limits // Carpathian Mathematical Publications. – 2024. – 16, No 1. – P. 267-289. (Q1)
151. *Chernukha O., Bilushchak Y.* Mathematical Modeling of the Processes of Convective Diffusion and Sorption in a Three-Layer Porous Body. I. Mass Transfer of Impurity Particles with a Porous Solution // Journal of Mathematical Sciences. – 2024. – Vol. 279, No 2. – P. 247-259. (Q3)
152. *Chernukha O., Bilushchak Y., Shakhovska N., Kulhánek R.* A Numerical Method for Computing Double Integrals with Variable Upper Limits / Mathematics. – 2022. – Vol. 10 (1), 108. – 26 p. (Q1)
153. *Chernukha O., Chuchvara A., Bilushchak Y., Pukach P., Kryvinska N.* Mathematical modelling of diffusion flows in two-phase stratified bodies with randomly disposed layers of stochastically set thickness // Mathematics. – 2022. – Vol. 10 (19), 3650. – 25p. (Q1)
154. *Chernukha O., Bilushchak Y.* A mathematical model of two-way heterodiffusion processes with cascade decay of migrating particles // Journal of Mathematical Sciences. – 2021. – Vol. 253, No 1. – P. 156-167. (Q3)
155. *Chernukha O., Bilushchak Y.* Mathematical modeling of the mean concentration field in random stratified structures with regard for the jumps of sought function on the interfaces // Journal of Mathematical Sciences. – 2019. – Vol. 240, – P. 70-84. (Q3)
156. *Chernukha O., Bilushchak Y., Chuchvara A.* Mathematical modeling diffusion of admixture particles in a strip with randomly located spherical inclusions of different materials with commensurable volume fractions of phases // Scientific Journal of TNTU. – 2021. – Vol. 101, № 1. – P. 28-46.
157. *Chernukha O., Bilushchak Y., Chuchvara A.* Program package “FlowRan” for computing of diffusion flow in random stratified body / International scientific and practical conference “Prospects for the development of technical sciences in EU countries and Ukraine” Wloclawek, Republic of Poland, 21–22 december 2018). – P.33-38.
158. *Chernukha O., Bilushchak Y.* Simulation of double-diffusivity processes with cascade decay of admixture particles / International scientific and practical conference “Technical sciences: history, the present time, the future, EU experience” Wloclawek, Republic of Poland, September 27-28, 2019. P.56-61.
159. *Chernukha O., Bilushchak Y., Chuchvara A.* Mathematical model of chemical purification of water in a mechanical filter / Scientific debates and prospective orientations of scientific development: Collection of scientific papers «ΛΟΓΟΣ», materials from the III International Scientific and Practical Conference, Paris, 8 July, 2022. – P. 192-203.
160. *Chernukha O., Bilushchak Y.* Interpolation of Boundary Condition at Time-Interval of Unknown Length for the Problem of Convective Diffusion in a Three-Layered Water Filter // Conference Modeling, Control and Information Technologies, 2019. – P. 25-28.

161. *Chernukha O., Bilushchak Y., Pakholok B.* System approach to mathematical description of transport processes with chemical reaction in multiphase multicomponent body / 2020 IEEE 2nd International Conference on System Analysis & Intelligent Computing (SAIC). – Proceedings (2020). – P. 144-149.
162. *Chernukha O., Bilushchak Y.* Method of Construction of Finite Integral Transform for Operator of Parabolic Differential Equation under Mixed Boundary Conditions / 2020 IEEE 6th International Conference on Methods and Systems of Navigation and Motion Control (MSNMC). – Proceedings (2020). – P. 38-42.
163. *Chernukha O., Chuchvara A., Bilushchak Y.* The model of diffusion processes in a two-phase strip with randomly disposed spherical inclusions near the mass source on the body surface / Proceedings of IEEE 3rd International Conference on System Analysis and Intelligent Computing (SAIC 2022), Kyiv, 4-7 October, 2022. – pp. 1-6.
164. *Chernukha O., Bilushchak Y., Chuchvara A.* Model problem of thermodiffusion of admixture particles in aircraft materials / 2019 IEEE 5th International Conference Actual Problems of Unmanned Aerial Vehicles Developments, APUAVD 2019. – Proceedings (2019). – P. 290-294.
165. *Chernukha O.Y., Bilushchak Yu.I.* Mathematical modeling of random concentration field and its second moments in a semispace with erlangian distribution of layered inclusions // Task Quarterly. – 2016. – Vol. 20, No. 3. – P.295-334.
166. *Chernukha, O.; Pukach, P.; Bilushchak, H.; Bilushchak, Y.; Vovk, M.* Advanced statistical approach for the mathematical modeling of transfer processes in a layer based on experimental data at the boundary / Symmetry. – 2024. - 16, 802. -34p.
167. *Choppin G., Liljenzin J.-O., Rydberg J., Ekberg C.* Radiochemistry and Nuclear Chemistry. Cambridge, Massachusetts: Academic Press. - 2013. – 858p. <https://doi.org/10.1016/C2011-0-07260-5>
168. *Chuchvara A., Bilushchak Y., Chernukha O.* Investigation of dispersion and correlation function of the probable beta-distribution // MODERN SCIENTIFIC CHALLENGES AND TRENDS: a collection scientific works of the International scientific conference (20th April, 2019) – Warsaw: Sp. z o. o. "iScience", 2019. – P. 115-119.
169. *Davis P.J.* Interpolation and Approximation. - N Chelmsford: Courier Corporation, 1975. – 393p.
170. *Day W.A.* The Thermodynamics of Simple Materials with Fading Memory. - Berlin-Heidelberg: Springer, 1972. - 136p. <https://doi.org/10.1007/978-3-642-65318-6>
171. *de Groot S. R., Mazur P.* Non-equilibrium Thermodynamics. Dover Publication, Inc. New York. 1987. -544p.
172. Definition, genesis and benefits: [Електрон. ресурс]. - Режим доступу: <http://www.humintech.com/agriculture/information/what-are-humic-acids.html>

173. Evaluation of Guidelines for Exposures to Technologically Enhanced Naturally Occurring Radioactive Materials. [Электрон. ресурс]. - Режим доступа: <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/books/NBK230654/>
174. *Fiaud J.C., Malleron J.-L., Legros J.Y.* Handbook of Palladium-Catalysed Organic Reactions. London: Elsevier, 1997. – 304p.
175. *Fisher J.C.* Concentration of diffusion penetration curves for surface and grain boundary diffusion // *J. Appl. Phys.* – 1951. - V. 22, № 1. - P. 74-77.
176. *Fodor L., Szegedi L., Tury R.* Heavy metals in the soil - plant system /9th Alps-Adria Scientific Workshop, Špičák, Czech Republik, 2010. – P. 405-408.
177. *Fried J.J.* Groundwater pollution. - Elsevier, Amsterdam: Elsevier, 1975. - 329 p.
178. *Garbuio F.J., Howard J.L., Macedo dos Santos L.* Impact of Human Activities on Soil Contamination // *Applied and Environmental Soil Science.* –2012. –V. 2012. - Article ID 619548, 2 p.
179. *Gibbs, J.W.* (1875-78) "On the Equilibrium of Heterogeneous Substances", Connecticut Acad. Sci. Reprinted in *The Scientific Papers of J. Willard Gibbs*, by Dover Publications, Inc., New York (1961).
180. *Gibbs, J. W.* (1902), *Elementary Principles in Statistical Mechanics*, Yale University Press, New Haven, Conn. Reprinted in *The Col lected Works of J. Willard Gibbs*, Vol. 2 by Dover Publications, Inc., New York (1960).
181. *Gillham R.W., Sudicky E.A., Cherry J.A., Frind E.O.* An advection diffusion concept for solute transport in heterogeneous unconsolidated geologic deposits // *Water Resour. Res.* - 1984. – V. 20 (3). – P. 369- 378.
182. *Grant C., Talvila E.* Elementary Numerical Methods for Double Integrals // *Minnesota Journal of Undergraduate Mathematics.* – 2019. – V. 4(1) – P. 1-18.
183. *Gyarmati I.* Non-equilibrium Thermodynamics. Field Theory and Variational Principles. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York. 1970.
184. *Gushchin P.A., Lubimenko V.A., Petrova D.A., Ivanov E.V., Kolesnikov I.M., Vinokurov V.A.* Thermodynamic Calculations to Determine the Optimal Composition of Oxide Catalysts // *Chemical Engineering Science.* – 2018.- Vol. 227, (115903) <https://doi.org/10.1002/cphc.201701317>
185. *Hassani S.* Foundations of Mathematical Physics. -Boston: Allyn and Bacon, 1991. – 918p.
186. *Haywood S.* Symmetries and Conservation Laws in Particle Physics An Introduction to Group Theory for Particle Physicists. Singapore: World Scientific, 2010. - 168p. <https://doi.org/10.1142/p757>
187. *Hawksworth D.L., Bull A.T.* Biodiversity and Conservation in Europe. - Berlin: Springer, 2008. – 439p.
188. *Jabbar-Lopez Z. K., Ung C. Y., Alexander H., Gurung N., Chalmers J., Danby S. & Flohr, C.* The effect of water hardness on atopic eczema, skin barrier function: A systematic review, meta-analysis // *Clinical & Experimental Allergy.* 2021. – Vol. 51, Iss. 3. - P. 430-451.

189. *Jackson M.L.* Soil Chemical Analysis: Advanced Course : a Manual of Methods Useful for Instruction and Research in Soil Chemistry, Physical Chemistry of Soils, Soil Fertility, and Soil Genesis.- Madison: UW-Madison Libraries Parallel Press, 2005 – 930p.
190. *Jalvo, B., Aguilar-Sanchez, A., Ruiz-Caldas, M.X., & Mathew, A.P.* Water filtration membranes based on non-woven cellulose fabrics: Effect of nanopolysaccharide coatings on selective particle rejection, antifouling, and antibacterial properties // *Nanomaterials*. – 2021. – Vol. 11, Iss. 7, 1752.
191. *Rasmussen J.O., Ellis P.* Steinberg Radioactivity [Электрон. ресурс]. - Режим доступа: <https://www.britannica.com/science/radioactivity/additional-info#contributors>
192. *Kamke E* Differentialgleichungen. Lösungsmethoden und Lösungen. Band 1: Gewöhnliche Differentialgleichungen. – Leipzig: Akademische Verlagsgesellschaft Becker & Erler, 1944. – 666p.
193. *Kayser R.F., Hubbard J.B.* Diffusion in a Medium with a Random Distribution of Static Traps // *Phys. Rev. Lett.* – 1983. – Vol. 51, Iss. 79. – P. 79-82.
194. *Khoroshun, L.P.* General dynamic equations of electromagnetomechanics for dielectrics and piezoelectrics // *Int. Appl. Mech.* – 2006. – Vol. 42, No. 4, P. 407-420.
195. *Klimov A.* Nuclear Physics And Nuclear Reactors. - University Reprints 2018. – 410 p.
196. *Konoplev A.V., Deville-Cavelin G., Voitsekhovich O.V., Zhukova O.M.* Transfer of Chernobyl 137Cs and 90Sr by surface run-off // *Radioprotection 2002*, Vol. 37, n° C1, P. C1-315 - C1-318. <https://doi.org/10.1051/radiopro/2002058>
197. *Kryuchkov E.F., Opalovsky V.A., Tikhomirov G.V.* Comparative analysis of radiation characteristics from various types of spent nuclear fuel / Conference: International conference on supercomputing in nuclear applications SNA'2003, Paris (France), 22-24 Sep 2003; Other Information: 6 refs; PBD: 2003. - 11 p.
198. *Korn, G.A. and Korn, T.M.* Mathematical handbook for scientists and engineers definitions, theorems, and formulas for reference and review. Dover Publications. 2000.- 1152p.
199. *Kozisek F.* Regulations for calcium, magnesium or hardness in drinking water in the European Union member states, *Regulatory Toxicology and Pharmacology*, Volume 112, 2020, 104589, ISSN 0273-2300, <https://doi.org/10.1016/j.yrtph.2020.104589>.
200. *Kubik J., Kachmaryk M., Chaplya E.* Methods for the Determination of the Characteristics of Porous Saturated Media // *Materials Science*. – 2001. – V. 37, Issue 1, P. 92–102.
201. *Kumar V., Mandal T. K., Parvin N., Joo S. W., Park S.-S.* The multifunctional composites based on new generation carbon microsphere and their hybrids with robust interfacial mechanical strength // *Surfaces and Interfaces*. – 2023. -Vol. 42, Part B, P. 103378 – 103426.
202. *Kutya T.V., Gerus V.A., Martynyuk P.M.* Modeling of the Moisture Transfer in Soils with Regard for Thermal and Chemical Factors. *Journal of Mathematical Sciences*. - 2019. - Vol. 240, Issue 2. - P. 208-219
203. *Lal R.* Restoring Soil Quality to Mitigate Soil Degradation // *Sustainability*. – 2015. – V. 7. – P. 5875-5895.

204. *Larikov L.N.* Diffusion, in: *Intermetallic Compounds*. - New York: Wiley, 1994. -757 p.
205. *Laurent P.J.* Approximation et Optimisation. – Paris: Hermann, 1972. – 531p.
206. *Lay D.C.* Linear Algebra and its Applications, 3rd updated edition. Addison Wesley, 2005. — 576 p.
207. *Lehr J.H.* Water Encyclopedia: Domestic, Municipal, and Industrial Water Supply and Waste Disposal, John Wiley&Sons, 2005.
208. *Lehmann C.* Interaction of radiation with solids and elementary defect production. - Amsterdam: North-Holland, 1977. - 359 p.
209. *Lykov A.V.* Theory, thermal conductivity. M. High school. - 1978 - 480 p.
210. *Milovanovic G.* Numerical Methods and Approximation theory. – Yugoslavia: Faculty of Electronic Engineering, 1984. – 199 p.
211. *Marchuk G.I.* Mathematical Models in Environmental Problems. - North Holland, 2012. – 220 p.
212. *Marin G.B., Yablonsky G.S., Constales D.* Kinetics of Chemical Reactions: Decoding Complexity New York: John Wiley & Sons, 2019. – 464p.
213. *Martinenko N.A. and Pustilnikov L.M.* Finite integral transformations and their application to the study of systems with distributed parameters. Nauka. -1986. – 304 c.
214. *Melnikov N.N.* Chemistry of Pesticides. – Berlin: Springer Science & Business Media, 2012. – 480p.
215. *Mishin Y., Herzig Chr., Bernardini J., and Gust W.* Grain boundary diffusion: fundamentals to recent developments // *International Materials Reviews*. – 1997. - Volume 42, Issue 4. P. 155 - 178 <https://doi.org/10.1179/imr.1997.42.4.155>
216. *Mohan H. Srivastava* Integral Transforms and Operational Calculus. - Basel: MDPI 2019. - 510p. <https://doi.org/10.3390/books978-3-03921-619-2>
217. *Morozov V.A.* Methods for Solving Incorrectly Posed Problems. - Berlin-Heidelberg: Springer Science & Business Media, 2012. – 257p.
218. *Münster A.* Classical Thermodynamics. - Hoboken: Wiley-Interscience, 1970. – 387p.
219. *Nandy S., Syam Kumar U.K., Ila H. J.* Domino Carbocationic Cyclization of Functionalized Cyclopropyl Ketones: Facile One-Pot Access to Peri- and Angularly Fused Polycyclic Aromatic and Heteroaromatic Frameworks // *The Journal of organic chemistry*. –2002. - V. 67, Iss. 14. – P. 4916–4923.
220. *Nikolaevskij V.N.* Mechanics of Porous And Fractured Media. - World Scientific, 1990. – 492p.
221. *Nicolet M-A., Bartur M.* Diffusion barriers in layered contact structure // *J. of Vacuum Science and Tech*. - 1981. – V. 19, Iss. 3. - P. 786-793.
222. *Odum . E. P.* Fundamentals of Ecology. - Saunders. – 1971. - 574 p.
223. *Ojovan M.I., Steinmetz H.J.* Approaches to Disposal of Nuclear Waste // *Energies*. - 2022, Vol. 15, Iss. 20, 7804; <https://doi.org/10.3390/en15207804>)

224. *Ojala S., Koivikko N., Laitinen T., Mouammine A., Seelam P.K., Laassiri S., Ainassaari K., Brahmi R., Keiski R.L.* Utilization of Volatile Organic Compounds as an Alternative for Destructive Abatement // *Catalysts*. – 2015. –Vol.5, Iss. 3. – P. 1092-1151. <https://doi.org/10.3390/catal5031092>
225. *Pankratov V.* The creation of strategy for innovation development of socio-economic systems // *International Journal. «Information technologies & knowledge». ITHEA. SOFIA.* – 2014. – V.3, № 1.–P. 84-99.
226. *Petryk M.R., Khimich A., Petryk M.M., Fraissard J.* Experimental and computer simulation studies of dehydration on microporous adsorbent of natural gas used as motor fuel // *Fuel*. – Vol. 239, 1 2019, Pages 1324-1330
227. *Petryk M., Leclerc S., Canet D., Sergienko I., Deineka V., Fraissard J.* Competitive Diffusion of Gases in a Zeolite Bed: NMR and Slice Selection Procedure, Modeling, and Parameter Identification // *J. Phys. Chem. C* 2015, 119, 47, 26519–26525
228. *Petryk M., Ivanchov M., Leclerc S., Canet D. and Fraissard J.* Competitive Adsorption and Diffusion of Gases in a Microporous Solid // FROM THE EDITED VOLUME *Zeolites - New Challenges* Edited by Karmen Margeta and Anamarija Farkaš. 2019. -. 23p. DOI: <http://dx.doi.org/10.5772/intechopen.88138>
229. *Petryk M., Vorobiev E.* Numerical and Analytical Modeling of Solid–Liquid Expression from Soft Plant Materials // *American Institute of Chemical Engineers AIChE J.* 2013. – Vol. 59. – P. 4762–4771. <https://doi.org/10.1002/aic.14213>
230. *Petryk M., Vorobiev E.* Liquid flowing from porous particles during the pressing of biological materials // *Computers and Chemical Engineering*. 2007. – Vol. 31. - P 1336-1345. doi:10.1016/j.compchemeng.2006.12.011
231. *Petryk M., Leclerc S., Canet D., Fraissard J.* Modeling of gas transport in a microporous solid using a slice selection procedure: Application to the diffusion of benzene in ZSM5 // *Catalysis Today*. 2008. – Vol. 139. – P. 234-240
232. *Petryk M., Boyko I., Fraissard J., Lebovka N.* Modelling of non-isothermal adsorption of gases in nanoporous adsorbent based on Langmuir equilibrium // *Adsorption*. 2023.- Vol. 29(3-4). – P. 1-10 DOI:10.1007/s10450-023-00389-9
233. *Plante La, Simonetti E. C., Wang D. A., Al-Turki J., A., Chen, X., Jassby, D., & Sant, G.N.* Saline water-based mineralization pathway for gigatonne-scale CO2 management // *ACS Sustainable Chemistry & Engineering*, 2021. –Vol. 9(3), P.1073-1089.
234. *Plumb O.A., Whitaker S.* Diffusion, adsorption and dispersion in porous media: Small-scale averaging and local-volume averaging / *Dynamics of Fluids in Hierarchical Porous Media*, ed by J.H. Cushman. - San Diego: Academic, 1990. – P. 97-176.
235. *Podstrigach Y.S., Kolyano Y.M., Gromovyk V.I., Lozben V.L.* Thermoelasticity of Bodies with Variable Heat Transfer Coefficients. - Kiev: Naukova Dumka, 1977. – 158p.
236. *Polubarinova-Kochina P.Y.* Theory of Ground Water Movement. – Princeton: Princeton University Press, 2015. - 634p.

237. *Polyanin A.D., Manzhurov A.V.* Handbook of Integral Equations. – Boca Raton: CRC Press, 1998. – 796 p.
238. *Poole D.* Linear Algebra: A Modern Introduction, 2nd edition. Brooks/Cole, 2006. — 712 p.
239. *Prigogine, I and Mazur, P.* Sur l'extension de la thermodynamique aux phénomènes irréversibles liés aux degrés de liberté internes // *Physica*. -1953. – Vol. 19. 241-254.
240. *Prudnikov A.B, Brychkov Yu. A., Marichev O.I.* Integrals and Series 1st Edition. – Champaign, Illinois: Gordon and Breach Science Publishers, 1992. – 640p.
241. Quantification Of Radionuclide Transfer In Terrestrial And Freshwater Environments For Radiological Assessments Iaea, Vienna, Printed by the IAEA in Austria, 2009. – 622p.
242. Radiation Safety and Radiological Instrumentation [Электрон. ресурс]. - Режим доступа: https://professionals.engineering.osu.edu/crehp/radiation-safety-and-radiological-instrumentation?gad_source=1&gclid=CjwKCAjwp4m0BhBAEiwAsdc4aKYsz2AQquM_PV1PvB4pVQJDIYRXieAy4IHj0jgLfat_7gpseSAAcxoC4DEQAvD_BwE
243. *Raimi O. M., Ilesanmi A., Alima O., Omini D.* Exploring How Human Activities Disturb the Balance of Biogeochemical Cycles: Evidence from the Carbon, Nitrogen and Hydrologic Cycles // *Research on World Agricultural Economy*.- 2021.- Vol. 2, Iss. 3. – P. 23–44. <https://doi.org/10.36956/rwae.v2i3.426>
244. *Razafindralambo H., Delvigne F., Blecker C.* Physico-chemical approach for characterizing probiotics at the solid and dispersed states // *Food Research International*. – 2019. - Vol. 116. – P. 897-904
245. *Roland H.C. Yap* Parametric Sequence Alignment with Constraints // *Constraints*. – 2001. – V. 6. – P. 157–172.
246. *Rubenowitz-Lundin, Eva, and Kevin M. Hiscock.* "Water hardness and health effects." *Essentials of Medical Geology*. Springer, Dordrecht, 2013. 337-350.
247. *Samarskii A.A., Mikhailov A.P.* Principles of mathematical modelling: Ideas, methods, examples. – CRC Press, 2001. – 360 p.
248. *Sastry S.S.* Introductory methods of numerical analysis. – New Delhi: PHI Learning Pvt. Ltd., 2012 - 464 p.
249. *Scheidegger A.E.* The Physics of Flow Through Porous Media. - New York: Univ. of Toronto Press, 1974. – 353 p.
250. *Tan K.H.* Principles of Soil Chemistry. - Athens (Georgia, USA): Taylor and Fransis Group, LLS, 2011. – 362 p.
251. *Taylor S.A., Cary J.W.* Linear equations for the simultaneous flow of matter and energy in a continuous system // *Proc. Soil Sci. Soc. Am.* – 1964 – V. 28. – P. 167-172.
252. *Tietze L., Brasche G., Gericke K.* Domino Reactions in Organic Synthesis. – Weinheim: WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2006. – 617 p.
253. *Tinsley I.J.* Chemical Concepts in Pollutant Behaviour, 2nd Edn. - New York: John Wiley, 2004. – 416p.

254. *Truesdell C.* First Course in Rational Continuum Mechanics. Vol. 1, General Concepts. - New York: Academic Press, 1977. – 417p.
255. *Turekian, K.K.; Wedepohl, K.H.* Distribution of the Elements in Some Major Units of the Earth's Crust // GSA Bull. -1961. – Vol. 72. – P. 175–192.
256. *Savula Y.H., Koukharskiy V.M., Chaplia Y.Y.* Numerical analysis of advection diffusion in the continuum with thin canal // Numerical Heat Transfer. Part A. – 1998. – V. 36, № 3. – P. 657-679.
257. *Saini P.* Impacts of Soil Pollution on Human Health and Ecosystem Sustainability // International Journal of Advanced Research in Arts, Science, Engineering & Management. 2022. Vol. 9, Iss.1. – P. 102-109.
258. *Sedov L.I.* Mechanics of Continuous Media. - Singapore: World Scientific, 1997. - 1310p.
259. *Schaeffer A, Amelung W., Hollert H, Kaestner M., Kandeler E., Kruse J., Miltner A., Ottermanns R., Pagel H., Peth S., Poll C., Rambold G., Schloter M., Schulz S., Streck T., Roß-Nickoll M.* The impact of chemical pollution on the resilience of soils under multiple stresses: A conceptual framework for future research // Science of The Total Environment. – 2016. – Vol. 568, Iss. 15. – P. 1076-1085.
260. *Shestopalov V.M.* Chernobyl Disaster and Groundwater. - CRC Press, 2002. - 304p.
261. *Smith M., March J.* Advanced Organic Chemistry: Reactions, Mechanisms, and Structure, 6th Edition.– Hoboken, New Jersey: John Wiley & Sons, Inc., 2007. – 2357 p.
262. *Sneddon, I.N.* Fourier Transforms. McGraw-Hill Book Company. – 1951.
263. *Underwood, A.J.* Ecological research and (and research into) environmental management // Ecological Applications. – 1995. – Vol. 5. Iss. 1. – P. 232-247.
264. *Urbancl D. & Goricanec D.* Evaluation of Thermal Flow Losses and Increased Consumption of Electricity due to Water Scale Precipitation on Heaters of Domestic Appliances. 2022
265. *Van der Bruggen, B., Everaert, K., Wilms, D., & Vandecasteele, C.* (2001). Application of nanofiltration for removal of pesticides, nitrate and hardness from ground water: rejection properties and economic evaluation // Journal of Membrane Science. 2001. – Vol. 193, Iss.2. – P. 239-248.
266. *Van der Bruggen B.* Sustainable implementation of innovative technologies for water purification // Nature Reviews Chemistry. – 2021. – Vol. 5, Iss.4. – P. 217-218.
267. *Van Kampen N.G.* Stochastic Processes in Chemistry and Physics. - Norwell: Elsevier, 1992. – 480 p.
268. *Vallance C.* An Introduction to Chemical Kinetics. – San Rafael, CA, USA: Morgan & Claypool Publishers, 2017. - DOI:10.1088/978-1-6817-4664-7.
269. *Vinu R.; Broadbelt L.J.* Unraveling reaction pathways and specifying reaction kinetics for complex systems // Annual review of chemical and biomolecular engineering. – 2012. – Vol. 3, Iss.1. -P. 29-54.
270. *Vladimirov V.* Equations of Mathematical Physics. - M. Dekker, 1971. – 418p.

271. Voskressensky L.G., Listratova A.V., Borisova T.N., Alexandrov G.G., Varlamov A.V. Synthesis of Benzoazocines from Substituted Tetrahydroisoquinolines and Activated Alkynes in a Tetrahydropyridine Ring Expansion // *European Journal of Organic Chemistry*. – 2007. - Iss. 36. – P. 6106–6117.
272. Wang Y, Hutter K. Phenomenological thermodynamics of irreversible processes: physical foundations // *Entropy*. – 2018. – Vol. 20, Iss.6, 479. <https://doi.org/10.3390/e20060479>
273. Williams I. *Environmental Chemistry, A Modular Approach*. - Wiley, 2001. – 416 p.
274. World Health Organization. (2010). *Hardness in drinking-water: background document for development of WHO guidelines for drinking-water quality (No. WHO/HSE/WSH/10.01/10)*. World Health Organization.
275. Wheeldon I., Minter S.D., Banta S., Barton S.C., Atanassov P., Sigman M. Substrate channelling as an approach to cascade reactions // *Nature Chemistry*. – 2016. – V. 8. – P. 299-309.
276. Yablokov A.V., Nesterenko V.B. Chernobyl contamination through time and space. // *Ann N Y Acad Sci*. 2009. – Vol.1181. – P. 5–30.
277. Zgurovsky M.Z., Pankratova N.D. *System analysis: theory and applications*. – Berlin & Heidelberg: Springer, 2007. – 427 p.
278. Zhang M., Jiang H.-F. A New Multicomponent Reaction Catalyzed by a Lewis Acid Catalyst: Convenient Synthesis of Polyfunctional Tetrahydropyrimidines // *European Journal of Organic Chemistry*. – 2008. - Iss. 20. – P. 3519- 3523.
279. Zhilyaev A.P., Pshenichnyuk A.I. *Superplasticity and grain boundaries in ultrafine-grained materials*. M. Fizmatlit, 2008. – 320 p.
280. Zhurba M.G. *Water and wastewater treatment* // *Water Treatment: Equipment and Processes*. [Электрон. ресурс]. - Режим доступа: <https://www.eolss.net/sample-chapters/c07/E2-13-03.pdf>

ДОДАТКИ

ДОДАТОК А

СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

Монографії

1. Чапля Є.Я., Чернуха О.Ю., Білуцак Ю.І. Математичне моделювання гетеродифузійних процесів при розпаді частинок. – Львів: Растр-7, 2018. – 240 с.
2. Математичне моделювання нерівноважних процесів у складних системах / Білуцак Ю.І., Гайвась Б.І. під заг. ред. Є.Я. Чаплі. – Львів: Растр-7, 2019. – 256 с.

Розділи колективних монографій

3. Bilushchak Y., Chernukha O., Chuchvara A. Approximation of boundary condition according to experimental data on the lower surface of the body during the simulation of the bulk water filter / Technical research and development: collective monograph.– Boston : Published Primedia eLaunch, 2021. – P. 64-79.
4. Chernukha O., Chuchvara A., Bilushchak Y. Simulation of admixture diffusion in a layer with randomly disposed spherical inclusions / Information Technology in Selected Areas of Management 2017. – Krakow: Wydawnictwa AGH, 2018. – P. 109-123.

Статті, опубліковані в журналах, які індексуються науково-метричними базами Scopus та Web of Science

5. Chernukha O.Y., Bilushchak Y.I., Chuchvara A.Y. On the error of the approximate calculation of double integrals with variable upper limits // Carpathian Mathematical Publications. – 2024. – 16, No 1. – P. 267-289. (Q1)
6. Chernukha O., Bilushchak Y. Mathematical Modeling of the Processes of Convective Diffusion and Sorption in a Three-Layer Porous Body. I. Mass Transfer of Impurity Particles with a Porous Solution // Journal of Mathematical Sciences. – 2024. – Vol. 279, No 2. – P. 247-259. (Q3)
7. Chernukha O., Bilushchak Y., Shakhovska N., Kulhánek R. A Numerical Method for Computing Double Integrals with Variable Upper Limits / Mathematics. – 2022. – Vol. 10 (1), 108. – 26 p. (Q1)
8. Chernukha O., Chuchvara A., Bilushchak Y., Pukach P., Kryvinska N. Mathematical modelling of diffusion flows in two-phase stratified bodies with randomly disposed layers of stochastically set thickness // Mathematics. – 2022. – Vol. 10 (19), 3650. – 25p. (Q1)
9. Chernukha O., Bilushchak Y. A mathematical model of two-way heterodiffusion processes with cascade decay of migrating particles // Journal of Mathematical Sciences. – 2021. – Vol. 253, No 1. – P. 156-167. (Q3)
10. Bilushchak Y., Chernukha O. Modeling of the processes of heterodiffusion in two ways for the cascade decay of admixture particles. I. Cascade-type initial-boundary-value problems // Journal of Mathematical Sciences. – 2021. – Vol. 254, No 1. – P. 142-155. (Q3)

11. *Bilushchak Y., Chernukha O.* Modeling of the Processes of Heterodiffusion in Two Ways for the Cascade Decay of Admixture Particles. II. Quantitative Analysis // *Journal of Mathematical Sciences.* – 2021. – Vol. 256, No 4. – P. 482-496. (Q3)

12. *Chernukha O., Bilushchak Y.* Mathematical modeling of the mean concentration field in random stratified structures with regard for the jumps of sought function on the interfaces // *Journal of Mathematical Sciences.* – 2019. – Vol. 240, – P. 70-84. (Q3)

Статті у наукових фахових виданнях

13. *Чернуха О.Ю., Білуцзяк Ю.І.* Математичне моделювання процесів конвективної дифузії і сорбції у тришаровому пористому тілі. II. Кількісний аналіз концентрації домішкових частинок на границях контакту фаз // *Мат. методи та фіз.-мех. поля.* 2022. – 65, № 1-2. – С. 229-240. (категорія А)

14. *Chernukha O., Bilushchak Y., Chuchvara A.* Mathematical modeling diffusion of admixture particles in a strip with randomly located spherical inclusions of different materials with commensurable volume fractions of phases // *Scientific Journal of TNTU.* – 2021. – Vol. 101, № 1. – P. 28-46.

15. *Chaplya Y., Chernukha O., Bilushchak Y.* Matrix Green's function of double-diffusivity problem and its applications to problems with inner point source // *Task Quarterly.* – 2019. – Vol. 23, No. 1. – P.75-99.

16. *Чернуха О. Ю., Білуцзяк Ю. І.* Про побудову інтегрального перетворення для оператора рівняння конвективної дифузії за мішаних граничних умов // *Фізико-математичне моделювання та інформаційні технології.* – 2020. – Вип. 30. – 85-102.

17. *Чернуха О., Гончарук В., Білуцзяк Ю., Давидок А.* Математичне моделювання та прогнозування поширення радіоактивних забруднень у приповерхневих шарах насиченого ґрунту // *Математичні машини і системи.* – 2017. – № 3. – С. 82-101.

18. *Чернуха О., Білуцзяк Ю.* Комп'ютерне моделювання дифузії домішкових речовин у середовищі з пастками за каскадного розпаду частинок // *Фізико-математичне моделювання та інформаційні технології.* – 2017. – Вип. 25. – С. 170-183.

19. *Чернуха О., Білуцзяк Ю., Гончарук В.* Математичне моделювання розподілу концентрації домішок у стохастичних шаруватих тілах за неідеальних умов контакту на міжфазних границях // *Вісник Кременчуцького національного університету ім.М.Остроградського* – 2017. – Вип. 3, Т. 104 – С.52-61.

20. *Чернуха О., Гончарук В., Білуцзяк Ю., Давидок А.* Пакет програм “FlowRan” для дослідження дифузійних потоків у випадкових шаруватих структурах // *Математичні машини і системи.* – 2016. – № 1. – С. 106-119.

21. *Chernukha O.Y., Bilushchak Yu. I.* Mathematical modeling of random concentration field and its second moments in a semispace with erlangian distribution of layered inclusions // *Task Quarterly.* – 2016. – Vol. 20, No. 3. – P.295-334.

22. Білуцак 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.
23. Гончарук В. Є., Білуцак Ю. І., Чапля Є. Я., Чернуха О. Ю. Математичне моделювання та прогнозування поширення забруднень у ґрунті // Комунальне господарство міст. Серія: Безпека життя і діяльності – наука, освіта, практика. – 2015. – Вип. 120 (1). – С 115-121.
24. Білуцак Ю.І., Чапля Є.Я., Чернуха О.Ю Про підсумовування асимптотичних доданків у розв'язках задач дифузії // Фізико-математичне моделювання та інформаційні технології. – 2014. – Вип. 19. – С. 11-20.
25. Білуцак Ю.І. Моделювання других моментів випадкового поля концентрації в півпросторі з експоненціальним розподілом шаруватих включень // Вісник Кременчуцького національного університету ім. М. Остроградського – 2014. – Вип. 6, Т. 89 –С.71-79.
26. Білуцак Ю. І., Гончарук В. Є., Чернуха О. Ю. Математична модель невзаємодіючих потоків для опису процесів масопереносу двома шляхами за каскадного розпаду частинок // Прикладні проблеми механіки і математики. – 2014. – Вип. 12. – С 137-145.

Матеріали у міжнародних конференціях, які індексуються у Scopus та Web of Science

27. Chernukha O., Bilushchak Y., Pakholok B. System approach to mathematical description of transport processes with chemical reaction in multiphase multicomponent body / 2020 IEEE 2nd International Conference on System Analysis & Intelligent Computing (SAIC). – Proceedings (2020). – P. 144-149.
28. Chernukha O., Bilushchak Y. Method of Construction of Finite Integral Transform for Operator of Parabolic Differential Equation under Mixed Boundary Conditions / 2020 IEEE 6th International Conference on Methods and Systems of Navigation and Motion Control (MSNMC). – Proceedings (2020). – P. 38-42.
29. Chernukha O., Chuchvara A., Bilushchak Y. The model of diffusion processes in a two-phase strip with randomly disposed spherical inclusions near the mass source on the body surface / Proceedings of IEEE 3rd International Conference on System Analysis and Intelligent Computing (SAIC 2022), Kyiv, 4-7 October, 2022. – pp. 1-6.
30. Chernukha O., Bilushchak Y., Chuchvara A. Model problem of thermodiffusion of admixture particles in aircraft materials / 2019 IEEE 5th International Conference Actual Problems of Unmanned Aerial Vehicles Developments, APUAVD 2019. – Proceedings (2019). – P. 290-294.

Матеріали міжнародних і національних конференцій

31. Білуцак Ю.І., Чернуха О.Ю., Чучвара А.Є. Дослідження алгоритму розв'язування нелінійних // Матеріали Міжнародної науково-практичної конференції "Інформаційні технології та комп'ютерне моделювання", Івано-Франківськ: п. Голіней О.М., 2024. –С.170-173.

32. Чернуха О., Білуцак Ю., Білуцак Г. Процеси перенесення в шарі за лінійної регресійної моделі на нижній границі // Modeling, Control and Information Technologies: Proceedings of International Scientific and Practical Conference, Рівне. – 9–11 листопада 2023. – С. 161–164.
33. Chernukha O., Bilushchak Y., Chuchvara A. Mathematical model of chemical purification of water in a mechanical filter / Scientific debates and prospective orientations of scientific development: Collection of scientific papers «ΛΟΓΟΣ», materials from the III International Scientific and Practical Conference, Paris, 8 July, 2022. – P. 192-203.
34. Bilushchak Y., Chernukha O., Chuchvara A. Method for numerical solving a nonlinear functional equation in an interval of unknown length // Abstracts of IV International Scientific and Practical Conference Prospects And Achievements in Applied and Basic Sciences (Budapest, Hungary February 9 – 12, 2021). – P. 501-506.
35. Білуцак Ю., Чернуха О., Чучвара А. Про побудову інтегрального перетворення оператора параболічного диференціального рівняння за мішаних граничних умов I і II роду / Матеріали Міжнародної науково-практичної конференції "Інформаційні технології та комп'ютерне моделювання", Івано-Франківськ: п. Голіней О.М., 2021. – С. 168-169.
36. Білуцак Ю., Чернуха О., Чучвара А. Апроксимація граничної умови на невідомому часовому інтервалі при моделюванні процесів конвективної дифузії у промислових фільтрах води / Матеріали Міжнародної наукової конференції "Сучасні проблеми термомеханіки – 2021", Львів, 2021. – С. 20-19.
37. Чернуха О.Ю., Білуцак Ю.І. Моделювання конвективної дифузії забруднень у двошарових фільтрах води за апроксимації граничної умови на невідомому часовому інтервалі // Матеріали Міжнародної науково-практичної конференції "Інформаційні технології та комп'ютерне моделювання", Івано-Франківськ: п. Голіней О.М., 2020. – С. 207-211.
38. Chernukha O., Bilushchak Y. Interpolation of Boundary Condition at Time-Interval of Unknown Length for the Problem of Convective Diffusion in a Three-Layered Water Filter // Conference Modeling, Control and Information Technologies, 2019. – P. 25-28.
39. Chuchvara A., Bilushchak Y., Chernukha O. Investigation of dispersion and correlation function of the probable beta-distribution // MODERN SCIENTIFIC CHALLENGES AND TRENDS: a collection scientific works of the International scientific conference (20th April, 2019) – Warsaw: Sp. z o. o. "iScience", 2019. – P. 115-119.
40. Чернуха О.Ю., Білуцак Ю.І. Процеси конвективної дифузії у тришаровому пористому тілі // Математичні проблеми механіки неоднорідних структур: збірник наукових праць 10-ї Міжнародної наукової конференції / за заг. ред. Р.М. Кушніра і Г.С. Кіма // Львів: Інститут прикладних проблем механіки і математики ім. Я.С. Підстригача НАН України. – 2019. – Вип. 5. – С. 236-237.
41. Chernukha O., Bilushchak Y., Simulation of double-diffusivity processes with cascade decay of admixture particles / International scientific and practical conference "Technical sciences: history, the

present time, the future, EU experience” Wloclawek, Republic of Poland, September 27-28, 2019. P.56-61.

42. Білуцзяк Ю.І. Дослідження концентрації та потоків маси домішкових речовин за моделлю дифузії у тілі з пастками, що супроводжується ланцюговим розпадом / Міжнародна наукова конференція «Сучасні проблеми математичного моделювання, обчислювальних методів та інформаційних технологій», Рівне, 2018. – С. 32-34.

43. Чернуха О.Ю., Білуцзяк Ю.І. Числовий метод знаходження подвійного інтеграла зі змінними верхніми межами / Сучасні проблеми механіки та математики: збірник наукових праць у 3-х т. – Львів: Інститут прикладних проблем механіки і математики ім. Я.С. Підстригача НАН України. – 2018. – Т. 3. – С. 38-40.

44. Чернуха О., Білуцзяк Ю., Чапля Є. Функції Гріна задач дифузії двома шляхами / Матеріали Міжнародної науково-практичної конференції "Інформаційні технології та комп'ютерне моделювання", Івано-Франківськ: п. Голіней О.М., 2018. –С. 287-291.

45. Chaplya Ye., Chernukha O. Bilushchak Y. Mathematical Modeling and Simulation of Processes of Heterodiffusion with Cascade Decay of Particles / Матеріали Міжнародної науково-практичної конференції "Інформаційні технології та комп'ютерне моделювання", Івано-Франківськ: п. Голіней О.М., 2018. – С. 276-286.

46. Чернуха О., Білуцзяк Ю., Чучвара А. Програмний комплекс для моделювання дифузії у тілі з пастками за каскадного розпаду мігруючих частинок / Матеріали 20-ї міжнар. науково-технічної конф. САІТ «Системний аналіз та інформаційні технології», Київ: ННК «ІПСА» НУТУ «КПШ», 2018. - С. 98-99.

47. Чернуха О. Ю., Білуцзяк Ю. І., Пахолок Б. Б., Ментинський С. М. Архітектура пакету комп'ютерних програм GeterPas1 для кількісного дослідження процесів переносу за каскадних хімічних реакцій / Матеріали наукової конференції «Сучасні тенденції розвитку української науки», Переяслав-Хмельницький, 2018. – Вип. 4 (14). – С. 56-65.

48. Чапля Є., Чернуха О., Білуцзяк Ю. Континуальні моделі багатошвидкісних процесів масоперенесення розпадних речовин у тілах з мікроструктурою / Матеріали міжнародної науково конференції “Мікро- та нанонеоднорідні матеріали: моделі та експеримент”; Львів: Растр-7, 2018. – С. 36-37.

49. Чапля Є., Чернуха О., Білуцзяк Ю. Аналітико-ітераційний метод розв'язування крайових задач гетеродифузії каскадного типу / Матеріали ХХІV всеукраїнської наукової конференції «Сучасні проблеми прикладної математики та інформатики», Львів: Вид-во Тараса Сороки, 2018. – С. 179-185.

50. Чапля Є.Я., Чернуха О.Ю., Білуцзяк Ю.І. Метод функцій Гріна для розв'язування крайових задач гетеродифузії двома шляхами / Матеріали V науково-технічної конференції «Обчислювальні методи і системи перетворення інформації» присв. пам'яті проф. Б.О.Попова, Львів: ФМІ НАНУ, 2018. – С. 119-125.

51. Чернуха О., Білуцак Ю., Чучвара А. Модель гетеродифузії двома шляхами при поверхневому забрудненні ґрунту за каскадного розпаду частинок / Матеріали V міжнародної науково-практичної конф. «Безпека життєдіяльності на транспорті та виробництві – освіта, наука, практика», Херсон: В-во Херсонської державної морської академії, 2018. – С. 283-287.
52. Білуцак Ю.І., Чернуха О.Ю., Чучвара А.Є. Математичний опис конвективної дифузії двокомпонентного розчину у багатошарових каркарсно-насіпних фільтрах води / Матеріали XVII міжнар. наук.-техн. конф. «Фізичні процеси та поля технічних та біологічних об'єктів», Кременчук: КрНУ, 2018. – С. 156-158.
53. Chernukha O., Bilushchak Y., Chuchvara A. Program package "FlowRan" for computing of diffusion flow in random stratified body / International scientific and practical conference "Prospects for the development of technical sciences in EU countries and Ukraine" Wloclawek, Republic of Poland, 21–22 december 2018). – P.33-38.
54. Гончарук В., Білуцак Ю., Чернуха О. Моделювання міграції забруднення у середовищі з пастками за каскадного розпаду частинок // Матеріали IV міжнародної науково-практичної конф. «Безпека життєдіяльності на транспорті та виробництві – освіта, наука, практика». – Херсон: В-во Херсонської державної морської академії, 2017. – С. 341-347.
55. Чернуха О., Гончарук В., Білуцак Ю., Чучвара А. Моделювання та прогнозування поширення радіоактивних забруднень у ґрунтах. // Міжнародна конференція "Проблеми зняття з експлуатації об'єктів ядерної енергетики та відновлення навколишнього середовища", м. Славутич, 25-27 квітня 2017. – С. 309-322.
56. П'янило Я., Чернуха О., Гончарук В., Білуцак Ю. Математичне моделювання та прогнозування поширення радіоактивних забруднень у приповерхневих шарах землі // Семінар «Сталий розвиток – погляд у майбутнє (Львів, 15 вересня 2017р.), Львів: Видавництво львівської політехніки, 2017. – С. 26.
57. Чернуха О., Білуцак Ю. Математичне та комп'ютерне моделювання процесів конвективної дифузії у двошарових засипних фільтрах води // Матеріали статей між. науково-практичної конф. «Інформаційні технології та комп'ютерне моделювання». – Івано Франківськ: п.Голіней О.М. – 2017. – С.349-354.
58. Білуцак Ю., Математичне моделювання дифузії у середовищі з пастками за каскадного розпаду домішок // Матеріали статей між. науково-практичної конф. «Інформаційні технології та комп'ютерне моделювання». – Івано Франківськ: п.Голіней О.М. – 2017. - С.342-348.
59. Чернуха О., Лянце Г., Білуцак Ю. Перенесення радіонуклідів ґрунтовими водами // Матеріали IV міжнар. науково-практичної конференції «Екологія і природокористування в системі оптимізації відносин природи і суспільства». м. Тернопіль, 27-28 квітня 2017 року. – Тернопіль: Крок, 2017. – С. 134-135.
60. Білуцак Ю.І., Гончарук В.Є., Чернуха О.Ю., Чучвара А.Є. Математичне моделювання дифузійних процесів у випадкових шаруватих структурах за явного врахування стрибків концентрації та її похідної на міжфазних границях // Матеріали 19-ї міжнар. науково-технічної

конф. SAIT «Системний аналіз та інформаційні технології» (Київ, 22-25 травня 2017р.), К.:ННК «ІПСА» НУТУ «КПІ», 2017, С. 38-39.

61. Чернуха О.Ю., Гончарук В.Є., Білуцак Ю.І., Давидок А.Є. Комп'ютерне моделювання роботи двошарового засипного фільтра води // Збірник наукових праць XV міжнародної науково-практичної конференції «Безпека життя і діяльності людини – освіта, наука, практика». – Київ: «Темпо», 2016. – С. 312-316.

62. Білуцак Ю.І., Гончарук В.Є., Давидок А.Є., Чернуха О.Ю. Математичне та комп'ютерне моделювання двошарового засипного фільтра очистки води // Матеріали IV науково-технічної конференції «Обчислювальні методи і системи перетворення інформації» присв. пам'яті проф. Б.О.Попова. – Львів: ФМІ НАНУ, 2016. – С. 162-166.

63. Чернуха О., Білуцак Ю. Моделювання усередненого поля концентрації у випадкових шаруватих структурах з урахуванням стрибків шуканої функції на міжфазних границях // Міжнародна наукова конференція «Сучасні проблеми термомеханіки: збірник наукових праць» [Електронний ресурс]. – Львів: ІППММ ім. Я.С.Підстригача НАН України, 2016. – Режим доступу: www.iapmm.lviv.ua/MPT2016. – С. 135-136

64. Білуцак Ю.І., Гончарук В.Є., Чернуха О.Ю., Чучвара А.Є. Числові методи для комп'ютерного моделювання довговічності роботи двошарового фільтра води // Матеріали XV Міжнародної науково-технічної конференції «Фізичні процеси та поля технічних та біологічних об'єктів». – Кременчук: В-во КрНУ ім. М. Остроградського, 2016. – С. 118-120.

65. Bilushchak Yu. I., Chernukha O. Yu., Davydok A. Yu., Goncharuk V. Yu. Mathematical model for mass flow in a strip with randomly disposed sublayer of stochastic thickness // System analysis and information technologies: 18-th International conference SAIT 2016. Proceedings. – Kyiv: ESC “IASA” NTUU “KPI”, 2016. – P. 24-25.

66. Білуцак Ю. Комп'ютерне моделювання других моментів випадкового поля концентрації в півпросторі з ерлангівський розподілом шаруватих включень // Інформаційні технології та комп'ютерне моделювання: матеріали статей міжнародної науково-практичної конференції м. Івано-Франківськ, 2016. – С. 195-197.

67. Гончарук В. Є., Білуцак Ю. І., Чапля Є. Я., Чернуха О. Ю. Математичне моделювання міграції забруднень у ґрунті з кругового джерела на поверхні // Матеріали XVI Міжнародної науково-методичної конференції. “Безпека життя і діяльності людини – освіта, наука, практика”. – Харків; 2015. – С. 48-50.

68. Bilushchak Yu. I., Chernukha O. Yu., Gera B. V., Goncharuk V. Ye. Software for description of diffusion by two ways with cascade particle decay // System analysis and information technologies: 17-th International conference SAIT 2015. – Kyiv: ESC “IASA” NTUU “KPI”, 2015. – P. 23-24.

69. Чернуха О.Ю., Гончарук В.Є., Білуцак Ю.І. Процеси масоперенесення в багатокомпонентному середовищі за каскадного розпаду частинок // Матеріали науков-технічної конференції «Мікро- та нанонеоднорідні матеріали: моделі та експеримент» (INTERPOR'15). – Львів: В-во Львівської політехніки, 2015. – С. 79-80.

70. Білуцак Ю. І., Гончарук В. Є., Давидок А. Є., Чернуха О. Ю. Математичне моделювання взаємозв'язних теплових і дифузійних процесів з урахуванням розпаду домішки у двофазній стохастично неоднорідній багатошаровій смузі // Матеріали міжнародної наукової конференції «Сучасні проблеми математичного моделювання та обчислювальних методів». – Рівне: РВВ РДГУ, 2015. – С. 30.

71. Білуцак Ю. І., Гончарук В. Є., Давидок А. Є., Чернуха О. Ю. Пакет програм для розв'язування крайових задач дифузії у випадкових структурах // Збірник наукових праць XXI Всеукраїнської наукової конференції «Сучасні проблеми прикладної математики та інформатики». – Львів: ЛНУ ім. І. Франка, 2015. – С. 63-66.

72. Білуцак Ю. І., Гончарук В. Є., Чернуха О. Ю. Математичне моделювання процесів дифузії за каскадного розпаду мігруючих речовин // Матеріали 16-ї міжнар. науково-технічної конф. SAIT «Системний аналіз та інформаційні технології» (Київ, 26-30 травня 2014р.). – К.:ННК «ПСА» НТУУ «КПІ», 2014. – С. 57-58.

73. Чернуха О.Ю., Гончарук В.Є., Білуцак Ю.І. Комп'ютерне моделювання дифузійних процесів за каскадного розпаду мігруючих речовин // Матеріали III науково-технічної конференції «Обчислювальні методи і системи перетворення інформації» (Львів, 25-26 вересня, 2014р.), Львів: ФМІ НАНУ, 2014. – С. 59-62.

74. Білуцак Ю. Пакет програм для комп'ютерного моделювання дифузії домішок у випадково неоднорідній шаруватій структурі // Матеріали IX Міжнародної наукової конференції «Математичні проблеми механіки неоднорідних структур» (15-19 вересня 2014 р. Львів) ІППММ НАНУ, 2014. – С. 17-19.

75. Гончарук В.Є., Білуцак Ю.І., Чапля Є.Я., Чернуха О.Ю. Прогнозування поширення забруднення у ґрунті на основі математичних моделей гетеродифузії з урахуванням пасток та розпаду // 3-й Міжнародний конгрес «Захист навколишнього середовища. Енергоощадність збалансоване природокористування (Львів 17-19 вересня 2014 р) НУ ЛП, 2014. – С. 23.

76. Чернуха О.Ю., Гончарук В.Є., Білуцак Ю.І. Математичний опис процесів масопереносу двома шляхами з каскадним розпадом частинок за моделлю невзаємодіючих потоків // Тези доповідей XIII Міжнародної науково-технічної конференції «Фізичні процеси та поля технічних і біологічних об'єктів». – Кременчук: КрНУ ім. М. Остроградського, 2014. – С. 196-197.

Публікації, які додатково відображають результати дисертації

77. Білуцак Ю., Чернуха О., Чучвара А. Пакет програм «WodFil» для дослідження процесів очищення від забруднення у водному фільтрі // Свідоцтво про реєстрацію авторського права на твір № 118818 від 08.05.2023р.

78. Чернуха О.Ю., Чапля Є.Я., Гончарук В.Є., Білуцак Ю.І., Давидок А.Є. Пакет програм для розрахунку дифузійних потоків у двофазних тілах випадкової шаруватої структури («FlowRan») // Свідоцтво про реєстрацію авторського права на твір № 61858 від 28.09.2015р.

ДОДАТОК Б

Свідоцтва про реєстрацію авторського права на комп'ютерні програми

УКРАЇНА



СВІДОЦТВО

про реєстрацію авторського права на твір

№ 118818

Комп'ютерна програма «Пакет програм «WodFil» для дослідження процесів очищення від забруднення у водному фільтрі» («Пакет програм «WodFil»)

(вид, назва твору)

Автор(и) Білушак Юрій Ігорович, Чернуха Ольга Юрївна, Чучвара Анастасія Євгенівна

(повне ім'я, псевдонім (за наявності))

Дата реєстрації 8 травня 2023 р.

Директор
Державної організації
«Український національний
офіс інтелектуальної власності
та інновацій»

 Олена ОРЛЮК


М.П.

УКРАЇНА



ДЕРЖАВНА СЛУЖБА ВЛАСНОСТІ УКРАЇНИ
ІНТЕЛЕКТУАЛЬНОЇ

СВІДОЦТВО
про реєстрацію авторського права на твір

№ 61858

Комп'ютерна програма "Пакет програм для розрахунку дифузійних потоків у двофазних тілах випадкової шаруватої структури ("FlowRan")" ("Пакет програм "FlowRan")

(вид, назва твору)

Автор(и) Чернуха Ольга Юріївна, Чапля Євген Ярославович, Гончарук Володимир Євтихійович, Білушак Юрій Ігорович, Давидок Анастасія Євгенівна

(повне ім'я, псевдонім (за наявності))

Дата реєстрації 28.09.2015



Голова Державної служби інтелектуальної власності України
А.Г. Жарінова



ДОДАТОК В

Акти впроваджень



Львівська ОДА
№31-7004/0/2-22 від 15.11.2022
КЕП: Війтик О. Г. 15.11.2022 11:48
58E2D9E7F900307B04000004C5A1F00EBADA200



УКРАЇНА
ЛЬВІВСЬКА ОБЛАСНА ДЕРЖАВНА АДМІНІСТРАЦІЯ
ДЕПАРТАМЕНТ ЕКОЛОГІЇ ТА ПРИРОДНИХ РЕСУРСІВ

вул. Стрийська, 98, м. Львів, 79026, тел./факс (032) 238-73-83, тел. 238-73-83
E-mail: envir@loda.gov.ua Код ЄДРПОУ 38739037

№ _____ На № _____ від _____

**Національна академія
наук України**

79000, м. Львів, вул. Наукова 3 б

Щодо розгляду клопотання

Департамент екології та природних ресурсів Львівської облдержадміністрації розглянув клопотання Національної академії наук України від 15.11.2022 № 75-2/21-151 про розгляд результатів, отриманих в наукових дослідженнях кандидата технічних наук Юрія Ігоровича Білушака та повідомляє.

Результати, отримані в наукових дослідженнях дисертаційної роботи на здобуття ступеня доктора технічних наук к.т.н. Ю.І.Білушаком, докторантом Інституту прикладних проблем механіки і математики ім.Я.С.Підстригача НАН України, використані Департаментом екології та природних ресурсів Львівської обласної державної адміністрації для оцінки процесів гетеродифузії техногенних речовин та їх натурального розпаду, а саме розпаду органічних азотовмісних сполук, пестицидів та радіоактивних речовин в ґрунтах.

Сформульовані та розв'язані Ю.І. Білушаком зв'язані крайові задачі дифузії каскадного типу, коли концентрація частинок на певному кроці розпаду є джерелом маси на наступному кроці. Враховано, що на всіх етапах розпаду мігруючі сполуки дифундують у ґрунті, сорбуються, десорбуються і розпадаються. Такі моделі показали можливості математичного опису проникності речовин в дрібнодисперсних середовищах з урахуванням процесів розпаду та подальшого поширення вже новоутвореної речовини в різного типу ґрунтах. На основі отриманих формул розроблений пакет програм з оптимальною архітектурою взаємодії програмних модулів та їх синхронізацією на кожному етапі. Проведено симуляцію забруднюючих речовин за їх каскадного розпаду та побудовано профілі концентрацій та дифузійних потоків частинок на швидкому, повільному шляхах міграції та в пастках, що дало можливість встановити характерні закономірності досліджуваних процесів.

Т.в.о. директора

Оксана ВІЙТИК

ХАРКІВСЬКА МІСЬКА РАДА
ДЕПАРТАМЕНТ З ПИТАНЬ
ЗАБЕЗПЕЧЕННЯ
ЖИТТЄДІЯЛЬНОСТІ МІСТА

КОМУНАЛЬНЕ ПІДПРИЄМСТВО
«ХАРКІВВОДОКАНАЛ»

вул. Шевченка, 2, м. Харків, 61013
р/р UA 03307123000026001010172441
в ПАТ «БАНК ВОСТОК», код ЄДРПОУ 03361715
тел.: +38 (057) 712-15-21
e-mail: office@vodokanal.kharkov.ua
http://vodokanal.kharkov.ua



KHARKIV CITY COUNCIL

DEPARTMENT FOR MUNICIPAL
MAINTENANCE

COMMUNAL ENTERPRISE
«KHARKIVVODOKANAL»

2, Shevchenko Str., Kharkiv, 61013
p/a UA 03307123000026001010172441
PJSC «BANK VOSTOK», EDRPOU 03361715
tel.: +38 (057) 712-15-21
e-mail: office@vodokanal.kharkov.ua
http://vodokanal.kharkov.ua

27.09.2022 № 27-08-05/1204

на № _____

АКТ ПРО ВИКОРИСТАННЯ

наукових результатів дисертаційної роботи
Білуцака Юрія Ігоровича

Цей акт складений про те, що отримані результати докторського дисертаційного дослідження старшого наукового співробітника Інституту прикладних проблем механіки і математики ім.Я.С.Підстригача НАН України, к.т.н. Ю.І.Білуцака, використані КП «Харківводоканал» при розрахунку експлуатаційних параметрів каркасно-насіпних фільтрів води й часових параметрів роботи промислових фільтрів.

Для підвищення ефективності роботи фільтрів проведено комп'ютерне моделювання процесів фільтрування забруднених рідин шаруватими каркасно-засипними фільтрами води, з урахуванням процесів сорбції домішки на скелет, міжфазного масообміну речовиною, наявності експериментальних даних на нижній границі фільтра. Встановлено вплив геометричних параметрів фільтруючого об'єкта, зернистості засипок різних фракцій і порядок їхнього розташування на час ефективної роботи фільтра. Змодельовані варіативні ситуації одночасного дифузійного і конвективного перенесення забруднення в залежності від товщини фільтруючих шарів.

Результати дослідження мають важливе галузеве значення та можуть бути використані при проектуванні й реконструкції водоочисних споруд.

Заступник Генерального директора з
експлуатації водопровідного господарства
- директор Комплексу «Харківводопостачання»



В.М. Волков

03300000

УКРАЇНА
 ТОВАРИСТВО З ДОДАТКОВОЮ ВІДПОВІДАЛЬНІСТЮ
 «ХМЕЛЬНИЦЬКЗАЛІЗОБЕТОН»
 29010, м. Хмельницький, вул. Чорновола, 31
 п/р UA57380805000000026004424345
 в АТ "Райффайзен Банк Аваль"
 код ЄДРПОУ 01267076,
 ст. Хмельницький, код 330704
 Код заводу 0632
 Тел.: 644-396. Тел./факс (0382) 644-358
 E-mail: xmbeton@gmail.com

Ukraine
 Additional Liability Company
 «Khmelnytskzhelezobeton»
 29010 Khmelnytsky, Chornovola Str., 31
 Acc. No. UA57380805000000026004424345
 at PJSC «Raiffeisen Bank Aval»,
 ID: 01267076,
 St. Khmelnytsky, code 330704
 Plant code 0632
 Tel: 644-396. Tel/Fax (0382) 644-358
 E-mail: xmbeton@gmail.com

07.05.2024 № 07-05-2024/12

Акт

про використання

наукових результатів докторської дисертаційної роботи

к.т.н. Білушак Юрія Ігоровича

Випробувальна лабораторія Товариства з додатковою відповідальністю «Хмельницькзалізобетон» підтверджує ефективність та корисність отриманих наукових результатів докторської дисертаційної роботи щодо комбінованого механічно-хімічного очищення води к.т.н. Білушак Юрія Ігоровича, старшого наукового співробітника Інституту прикладних проблем механіки і математики ім. Я.С. Підстригача НАН України. Його науковий доробок присвячений побудові математичної моделі очищення забрудненого розчину у водному фільтрі з пом'якшенням жорсткості води за експериментальних даних на границі фільтра. Отримані результати показують можливості приведення води, що використовується для технічних цілей, до необхідних параметрів, а саме дозволяють вилучати надлишки грубих домішкових речовин механічним способом, тобто сорбуючи відповідні речовини, і одночасно хімічним способом одержувати воду для утворення піщано-цементних розчинів необхідної твердості, лужності або окисненості.

Юрієм Білушаком побудована нова математична модель, отримані відповідні розрахункові формули і розроблено програмний комплекс WodFil для дослідження процесів очищення від забруднення у водному фільтрі, яким проведено комп'ютерні обчислення щодо пом'якшення води, а саме вилучення надлишків іонів кальцію, оскільки така вода застосовується для утворення цементних розчинів з додаванням пластифікаторів марки Centrament N9 виробництва ТОВ «МЦ Баухемі».

На цій основі складено цей акт щодо використання результатів докторської дисертації з технічних наук ст.н.с. ІППММ ім. Я.С. Підстригача НАН України, к.т.н. Ю.І. Білушак на підприємстві «Хмельницькзалізобетон».

Директор технічний
 ТДВ „Хмельницькзалізобетон“



Юрій Веретін

Начальник ВЛ
 ТДВ „Хмельницькзалізобетон“

Вячеслав Звершхановський

Провідний інженер ВЛ
 ТДВ „Хмельницькзалізобетон“

Аліна Шеремета

“ЗАТВЕРДЖУЮ”

ДП «Угерський спиртзавод»
с. Угерське, Стрийський р-н,
Львівська область

Петрик І. І.
“ 10 ” 2022 р.



АКТ

ПРО ВИКОРИСТАННЯ

наукових результатів докторської дисертаційної роботи
к.т.н. Білушака Юрія Ігоровича

Цей акт складений про те, що науково-технічні результати, отримані к.т.н. Ю.І. Білушаком, старшим науковим співробітником Інституту прикладних проблем механіки і математики ім. Я.С. Підстригача НАН України в рамках досліджень, які увійшли до докторської дисертації здобувача, використані на ДП «Угерський спиртзавод», для більш ефективного видалення органічних сполук, вилучення кольорово-забарвлених частинок, а також речовин, які впливають на запах та каламутності водних розчинів.

Проведені симуляційні розрахунки процесів масоперенесення частинок забруднення потоком води в каркасно-засипних фільтрах. Математична модель конвективно-дифузійного перенесення побудована на основі балансових співвідношень маси для кожного пористого мікроелемента досліджуваного об'єкта. Процеси сорбції домішкових частинок на скелет фільтра враховано в лінеаризованому варіанті. На основі отриманих розв'язків відповідних контактних-крайових задач розроблено симуляційний програмний комплекс для встановлення закономірностей зазначених процесів у двошарових фільтрувальних установках. Проаналізовано рівень накопичення надлишкових речовин на границях стику фільтрувальних шарів різної пористості, що застосовано в процесі виготовлення відповідних розчинів. Проведена симуляція рівня насиченості гуміновими речовинами каркасно-засипних фільтрів на вихідних каналах фільтрувальних устаткувань.

Заступник директора з технічних питань

Б.І. Сосуловський



Затверджую
 Проректор з науково-педагогічної
 роботи Національного університету
 «Львівська політехніка»
 Олег ДАВИДЧАК
 04 2024 р.

АКТ ПРО ВИКОРИСТАННЯ

у Національному університету «Львівська політехніка»
 наукових результатів дисертаційної роботи Білушак Юрія Ігоровича


Ми, що нижче підписалися, склали цей акт про використання результатів наукової роботи старшого наукового співробітника Інституту прикладних проблем механіки і математики ім.Я.С.Підстригача НАН України Ю.І.Білушак, що увійшли до дисертаційної роботи на здобуття ступеня доктора технічних наук, у педагогічному процесі в Інституті прикладної математики та фундаментальних наук на кафедрі обчислювальної математики та програмування Національного університету «Львівська політехніка».

Ю.І.Білушак в аксіоматизованому вигляді методами термодинаміки нерівноважних процесів побудував математичну модель гетеродифузійного перенесення домішкової речовини у середовищі з пастками за каскадного розпаду мігруючих частинок, отримав 4 термодинамічно обґрунтовані часткові варіанти моделі. На цій основі сформулював новий тип крайових задач – каскадні крайові задачі для взаємозв'язаних параболічних рівнянь і систем рівнянь математичної фізики, коли розпад речовини на одному етапі каскаду є джерелом маси на наступному. Запропонував метод побудови розв'язків каскадних крайових задач на основі ітераційної процедури з використанням функцій Гріна для кожного етапу каскаду. Розробив пакет програм для розрахунку функцій концентрацій мігруючих декількома шляхами речовин, які сорбуються-десорбуються і розпадаються, потоків маси та кількості речовин, що пройшли через шар. Дані аспекти дисертаційної роботи Ю.І.Білушак були використані при розробці курсу «Аналітичні та чисельні методи досліджень» для студентів Національного університету «Львівська політехніка» за спеціальністю 113 «Прикладна математика».

Директор Інституту прикладної
 математики та фундаментальних наук
 д.т.н., професор

 Петро ПУКАЧ

Завідувач кафедри обчислювальної
 математики та програмування
 д.ф.-м.н., професор

 Ігор ДЕМКІВ