МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ТЕРНОПІЛЬСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМ. ІВАНА ПУЛЮЯ

БІЛУЩАК
Юрій Ігорович

УДК 517.958:532.72

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ МАСОПЕРЕНЕСЕННЯ У СКЛАДНИХ ТІЛАХ З МІКРОСТРУКТУРОЮ

01.05.02 – математичне моделювання та обчислювальні методи

РЕФЕРАТ
дисертації на здобуття наукового ступеня доктора технічних наук

Тернопіль – 2024

Дисертацією є рукопис.

Робота виконана в Інституті прикладних проблем механіки і математики ім. Я.С. Підстригача Національної академії наук України

Науковий консультант: доктор технічних наук, професор
Чернуха Ольга Юріївна,
Інститут прикладних проблем механіки і математики ім. Я.С. Підстригача НАН України,
провідний науковий співробітник відділу числових методів математичної фізики

Офіційні опоненти: доктор технічних наук, професор
Бомба Андрій Ярославович,
Національний університет водного господарства та природокористування Міністерства освіти і науки України,
професор, м. Рівне

доктор технічних наук, професор
Булавацький Володимир Михайлович,
Інститут кібернетики ім.В.М.Глушкова НАН України,
провідний науковий співробітник, м.Київ;

доктор технічних наук, ст.н.с.
Журавчак Любов Михайлівна,
Національний університет «Львівська політехніка» Міністерства освіти і науки України,
професор, м.Львів.

Захист відбудеться 15 січня 2025 р. о 13 00 на засіданні спеціалізованої вченої ради Д58.052.01 в Тернопільському національному технічному університеті імені Івана Пулюя, 46001, м. Тернопіль, вул. Руська, 56, ауд. 79.

З дисертацією можна ознайомитися у науково-технічній бібліотеці Тернопільського національного технічного університету імені Івана Пулюя, 46001, м. Тернопіль, вул. Руська, 56 та на офіційному сайті університету https://tntu.edu.ua/

Учений секретар спеціалізованої вченої ради,
кандидат технічних наук, доцент Наталія ЗАГОРОДНА

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

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 грунт, який є ключовим елементом земних екосистем та часто універсальним адсорбентом. Грунти відображають рівень багаторічних природніх перетворень і антропогенного впливу діяльності людини. При насиченні грунту хімічними елементами, він може стати джерелом вторинного забруднення продуктів харчування, кормів тварин, води водоймищ та атмосферного повітря. Грунти, як правило, не можуть швидко очищатися, і забруднюючі компоненти можуть в них зберігатися довгі роки. Погіршення якості грунтів, 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 грунту 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 покрить.

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, контактно-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); «Обгрунтування 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, застосовних 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 проєктування 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 термомеханогетеродифузії 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 проєктування.

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 каскадного розпаду дифундуючих 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-насипних фільтрів води й часових параметрів роботи промислових фільтрів води (використано у КП «Харківводоканал»);

- більш ефективного видалення органічних сполук, вилучення кольоровозабарвлених 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 недуже якісного фільтрів води [63, 71], розроблення програмних модулів пакетів Wodfil [77] та FlowRan [20, 53, 78]. У всіх опублікованих у співавторстві 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 базах Scopus та Web of Science, 14 статтей 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.

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У вступі дано загальну характеристику роботи, обгрунтовано актуальність теми та необхідність проведення дослідження, сформульовано мету роботи та задачі дослідження, наукову новизну та практичне значення отриманих результатів.

У першому розділі викладено огляд та проведено аналіз літератури за темою дисертації, визначено місце досліджень, наведених у роботі, у розв'язанні проблеми розробки підходів і методів математичного моделювання процесів перенесення в тілах з мікроструктурою.

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. 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. 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. 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. 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.

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.

Математичний опис процесів масоперенесення, фільтрації, конвективної дифузії забруднення такого як радіонукліди, нітрати, нітрити та інші небезпечні хімічні сполуки в грунті є вкрай актуальною проблемою, а їх математичне моделювання 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.Коноплььов, 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.

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

При цьому процеси масоперенесення в складних тілах з мікроструктурою можуть супроводжуватися каскадним розпадом речовин. 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, що зазначено в роботах С. Банти, І.Вілдона, І. Вілльямса, С.Лехманна, С.Д. Мінтера та інших.

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. В роботах Л.Дж.Бродбелта, Р.Віну, Х.-Ф.Джіанга, М.Жанга, П.Елліса, Дж.О.Расмуссена, зазначено, що 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.

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.

При побудові математичних моделей у багатофазних багатокомпонентних тілах необхідно враховувати локальну структуру матеріалу. Наприклад, у випадках, коли можна прийняти, що розподіл і розміри неоднорідностей структури є такі малі, що в кожній фізично малій області середовища знаходиться їх макроскопічне число. Частинки домішкової субстанції, які знаходяться в області неоднорідностей 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 контактно-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 накласти 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 актуальним 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 проєктування архітектури програмних комплексів для встановлення закономірностей масоперенесення домішок в елементах такого типу об'єктів.

У другому розділі побудовано математичну модель взаємозв'язних теплових, механічних та гетеродифузійних процесів, що супроводжуються каскадним розпадом мігруючих частинок, за континуально-термодинамічним підходом.

Тіло $\mathbf{K}^*$ (дискретна сукупність матеріальних частинок) є багатокомпонентним розчином і утворене частинками домішкової речовини у поровому розчині $\mathbf{K}_1^{*(1)}$, на поверхні $\mathbf{K}_2^{*(1)}$ та в об'ємі скелету $\mathbf{K}_3^{*(1)}$, які можуть розпадатися, та частинками порового розчину $\mathbf{K}_4^{*(0)}$ і скелету $\mathbf{K}_5^{*(0)}$. 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. 1). У свою чергу частинки домішки $\mathbf{K}_j^{*(2)}$ розпадаються і утворюють частинки речовини $\mathbf{K}_j^{*(3)}$ і нерозпадні (нешкідливі) речовини, які віднесено до $\mathbf{K}_j^{*(N)}$, і т.п. доки на ($N-1$)-у кроці не отримаємо тільки нерозпадні частинки домішкової речовини. 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 $\mathbf{K}_j^{(i)}$ ($i=\overline{0,N}$, $j=\overline{1,5}$).

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

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

де $\vec{r}_i^{(j)}$ - радіус-вектор матеріальних точок $\mathbf{K}_j^{(i)}$ в момент часу t; $\vec{r}_0$ - радіус-вектор у вихідній конфігурації. Одержано швидкість руху $\vec{v}_i^{(j)}$ матеріальних точок континуумів $\mathbf{K}_i^{(j)}$:

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

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

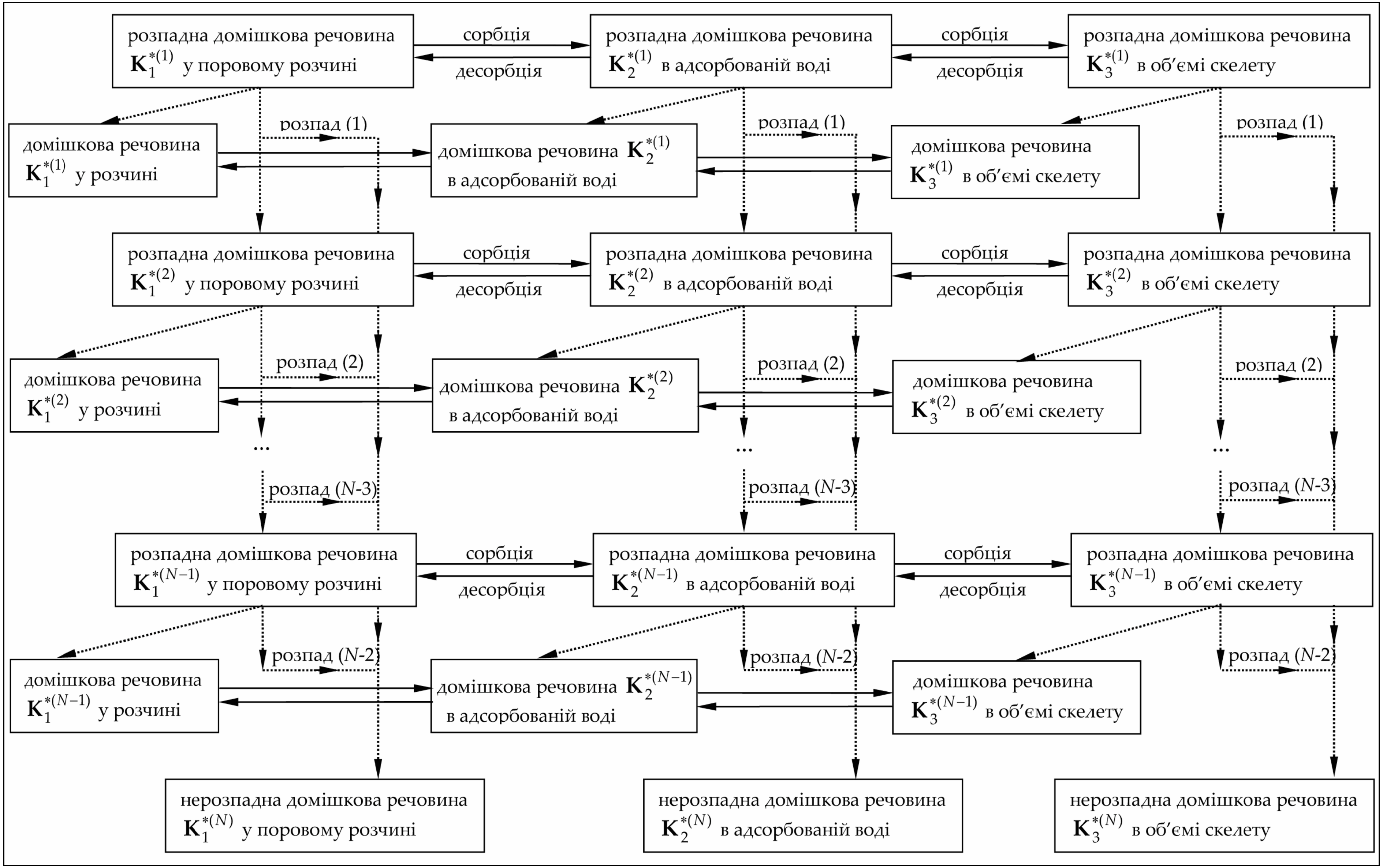

Рис. 1. Схема розпаду домішкових речовин і процесів сорбції-десорбції

Теорема 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

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

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

Потужність виробництва маси $w_j^{(i)}$ в загальному випадку можна подати так

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

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

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

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

Теорема 2. Якщо маса i-ї компоненти в стані j задовольняє балансове співвідношення (1), то мають місце рівняння балансу для концентрацій компонент:

$$\rho \frac{\mathrm{d} C_j^{(i)}}{\mathrm{d} t} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_j^{(i)} + w_j^{(i)}, \quad i = \overline{0, N},\ j = \overline{1,5}, \tag{2}$$

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

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

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

Постулат 1. Рівняння балансу імпульсу для тіла в цілому (континууму $\mathbf{K}_c$) має вигляд

$$\rho \frac{\mathrm{d}\vec{v}}{\mathrm{d}t} = \vec{\nabla} \cdot \hat{\Pi} + \sum_{j=1}^{5} \sum_{i=0}^{N} \rho_j^{(i)} \vec{F}_j^{(i)}, \tag{3}$$

де $\hat{\Pi} = \Pi^{\alpha\beta} \vec{i}^{\,\alpha} \otimes \vec{i}^{\,\beta}$ - симетричний тензор напружень Коші, $\vec{F}_j^{(i)}$ - масова потенціальна ($\vec{F}_j^{(i)} = -\vec{\nabla} \psi_j^{(i)}$) і консервативна ($\partial \psi_j^{(i)} \big/ \partial t = 0$) 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 1. Якщо виконуються співвідношення балансу маси i-ої компоненти у стані j (1), то мають місце рівняння балансу для потенціальної енергії компоненти

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

та рівняння балансу потенціальної енергії Ψ для тіла в цілому

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

Лема 2. Якщо виконуються співвідношення балансу імпульсу (3), то має місце рівняння балансу для кінетичної енергії

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

Постулат 2. Повна питома енергія e (з розрахунку на одиницю маси) задається виразом $\mathrm{e}\overset{*}{=}\rho(\mathrm{u}+\Psi+v^2/2)$ і задовольняє закон збереження

$$\frac{\partial\mathrm{e}}{\partial t}=-\vec{\nabla}\cdot\vec{J}_e, \tag{4}$$

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

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

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

Теорема 3. Якщо повна енергія підпорядковується співвідношенням (4), (5), тоді має місце рівняння балансу питомої внутрішньої енергії

$$\rho\frac{\mathrm{du}}{\mathrm{d}t}=-\vec{\nabla}\cdot\vec{J}_Q-\vec{\nabla}\cdot\left(\sum_{j=1}^{5}\sum_{i=0}^{N}\mu_j'^{(i)}\vec{J}_j^{(i)}\right)+\sum_{j=1}^{5}\sum_{i=0}^{N}\vec{J}_j^{(i)}\cdot\vec{F}_j^{(i)}+\hat{\Pi}:\left(\vec{\nabla}\otimes\vec{v}\right)^T+\sum_{j=1}^{5}\sum_{i=0}^{N}\psi_j^{(i)}w_j^{(i)},$$

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

Прийнято принцип локальної термодинамічної рівноваги. Стан малої підобласті системи означено за допомогою макроскопічних параметрів: абсолютна температура T - питома ентропія s; тензор напружень Коші у рівновазі $\hat{\bar{\Pi}}$ - тензор деформації $\hat{\varepsilon}$; хімічний потенціал $\mu_j'^{(i)}$ - масова концентрація $C_j^{(i)}$ компоненти i у стані j. Тоді питома внутрішня енергія термодинамічної системи є такою функцією стану $\mathrm{u}=\mathrm{u}\left(s,\mathrm{v},\{C_j^{(i)}\}\right)$, яка задовольняє співвідношення

$$\mathrm{u}=Ts+\frac{1}{\rho}\Pi^{\alpha\beta}\varepsilon_{\alpha\beta}+\sum_{j=1}^{5}\sum_{i=0}^{N}\mu_j'^{(i)}C_j^{(i)}, \tag{6}$$

за умови, що інфінітезимально малі зміни масової густини ентропії ds, питомого об'єму $d\mathrm{v}$ та масових концентрацій $dC_j^{(i)}$ задовольняють рівняння

$$d\mathrm{u}=Tds+\frac{1}{\rho}\Pi^{\alpha\beta}d\varepsilon_{\alpha\beta}+\sum_{j=1}^{5}\sum_{i=0}^{N}\mu_j'^{(i)}dC_j^{(i)} \quad \text{(рівняння Гіббса).} \tag{7}$$

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

Теорема 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 (6), (7), то рівняння стану мають вигляд

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

Теорема 5. Якщо в термодинамічній системі виконуються балансові співвідношення для концентрації компонент (2) та внутрішньої енергії, а також рівняння Гіббса у формі (7), то має місце рівняння балансу питомої ентропії

$$\rho \frac{\mathrm{d}s}{\mathrm{d}t} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_s + \frac{\sigma_s}{T}.$$

Тут $\vec{J}_s = \dfrac{\vec{J}_Q}{T}$ - потік ентропії; $\sigma_s = \vec{J}_Q \cdot \vec{X}_Q + \sum\limits_{j=1}^{5}\sum\limits_{i=0}^{N} \vec{J}_j^{(i)} \cdot \vec{X}_j^{(i)} + \sum\limits_{k=1}^{2}\sum\limits_{i=1}^{N} \omega_k^{(i)} X_k^{(i)} + \sum\limits_{j=1}^{3} q_j \geq 0$ - потужність виробництва ентропії, $q_j = \sum\limits_{i=1}^{N-1} \overline{X}_j^{(i)} \overline{w}_j^{(ii+1)} + \sum\limits_{i=1}^{N-1} \overline{X}_j^{(Ni)} \overline{w}_j^{(iN)}$ - локальні тепловиділення при розпаді компонент; $\vec{X}_Q = -\dfrac{1}{T}\vec{\nabla} T$ - векторна термодинамічна сила, що обумовлює теплопровідність і є спряженою до потоку тепла $\vec{J}_Q$; $\vec{X}_j^{(i)} = -\vec{\nabla}\left(\mu_j'^{(i)} + \psi_j^{(i)}\right)$ - векторні термодинамічні сили дифузії, спряжені до векторних потоків дифузії $\vec{J}_j^{(i)}$.

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

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

Прийнято, що термодинамічні потоки $\vec{J}_Q$, $\vec{J}_j^{(i)}$, $\omega_k^{(i)}$ є функціями термодинамічних сил $\vec{X}_Q$, $\vec{X}_j^{(i)}$, $X_k^{(i)}$.

Постулат 3. Термодинамічні потоки є функціями термодинамічних сил, структура функціональних залежностей яких задовольняє другий закон термодинаміки та умови взаємності Онзагера.

Означено кінетичний потенціал $\Phi = \Phi\left(\vec{X}_Q, \left\{\vec{X}_j^{(i)}\right\}, \left\{X_k^{(i)}\right\}\right)$, диференціал якого $\mathrm{d}\Phi = \vec{J}_Q \cdot \mathrm{d}\vec{X}_Q + \sum_{j=1}^{5}\sum_{i=0}^{N} \vec{J}_j^{(i)} \cdot \mathrm{d}\vec{X}_j^{(i)} + \sum_{k=1}^{2}\sum_{i=1}^{N} \omega_k^{(i)}\,\mathrm{d}X_k^{(i)}$.

Введено у розгляд вільну енергію Гельмгольца $f = f\left(T, \left\{\varepsilon_{\alpha\beta}\right\}, \left\{c_j^{(i)}\right\}\right)$.

Теорема 6. Якщо вільна енергія Гельмгольца є дійсною тричі диференційованою функцією температури, коваріантних компонент тензора деформації та концентрацій, то мають місце лінійні рівняння стану

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

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

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

де $\mathrm{t} = T - T_0$ - відхилення абсолютної температури.

Теорема 7. Якщо для ізотропного тіла кінетичний потенціал Φ є дійсною тричі диференційованою функцією термодинамічних сил, тоді мають місце лінійні кінетичні співвідношення

$$\vec{J}_Q = L_{QQ}\vec{X}_Q + \sum_{j=1}^{4}\sum_{i=0}^{N} L_{Qj}^{(i)} \vec{X}_j^{(i)},$$

$$\vec{J}_j^{(i)} = L_{jQ}^{(i)}\vec{X}_Q + \sum_{m=1}^{4}\sum_{n=0}^{N} L_{jm}^{(in)} \vec{X}_m^{(n)}, \quad \omega_k^{(i)} = \sum_{m=1}^{2}\sum_{l=1}^{N} \lambda_{km}^{(il)} X_m^{(l)}.$$

Тут коефіцієнти L_{QQ}, $L_{jm}^{(in)}$, $L_{Qj}^{(i)}$, $\lambda_{km}^{(il)}$ - кінетичні матеріальні характеристики тіла.

Повна система рівнянь моделі складається з кінематичних співвідношень, рівнянь стану, кінетичних рівнянь і балансових співвідношень. В якості розв'язуючих вибрані такі функції: t, ρ, u^{β}, $c_j^{(i)}$ ($i = 0,...,N$, $j = 1,...,4$). Тоді ключова система рівнянь набуває вигляду:

рівняння гетеродифузії у середовищі з пастками

для $i = 0$

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

$$\frac{\partial c_2^{(0)}}{\partial t} = \overline{D}_{21}^{(0)}\Delta c_1^{(0)} + \overline{D}_{22}^{(0)}\Delta c_2^{(0)} + \bar{k}_1^{(0)} c_1^{(0)} - \left(\bar{k}_2^{(0)} + \bar{k}_3^{(0)}\right) c_2^{(0)} + \bar{k}_4^{(0)} c_3^{(0)} - \tilde{\tilde{\lambda}}_2^{(1)} c_2^{(0)} - \tilde{\lambda}_2^{(0N)} c_2^{(0)},$$

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

для $i = \overline{1, N-1}$

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

$$\frac{\partial c_2^{(i)}}{\partial t} = \overline{D}_{21}^{(i)}\Delta c_1^{(i)} + \overline{D}_{22}^{(i)}\Delta c_2^{(i)} + \bar{k}_1^{(i)} c_1^{(i)} - \left(\bar{k}_2^{(i)} + \bar{k}_3^{(i)}\right) c_2^{(i)} + \bar{k}_4^{(i)} c_3^{(i)} + \tilde{\lambda}_2^{(i-1)} c_2^{(i-1)} - \tilde{\tilde{\lambda}}_2^{(i+1)} c_2^{(i)} - \tilde{\lambda}_2^{(iN)} c_2^{(i)},$$

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

для $i = N$

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

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

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

рівняння дифузії частинок води та скелету

$$\frac{\mathrm{d} c_4^{(0)}}{\mathrm{d} t} = \vec{\nabla} \cdot \left(\overline{D}_4^{(0)} \vec{\nabla} c_4^{(0)}\right), \quad C_5^{(0)} = 1 - \sum_{j=1}^{4} \sum_{i=0}^{N} C_j^{(0)};$$

рівняння теплопровідності

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

рівняння для визначення вектора переміщень

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

рівняння нерозривності

$$\frac{1}{\rho} \frac{\mathrm{d} \rho}{\mathrm{d} t} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{v},$$

де $\tilde{d}_{tj}^{(i)}$, $\tilde{\gamma}_j^{(i)}$, $\tilde{\lambda}_j^{(i-1)}$, $\tilde{\tilde{\lambda}}_j^{(i+1)}$, $\tilde{\lambda}_j^{(iN)}$ - сталі, які визначають процес розпаду, $\overline{D}_{11}^{(i)}$, $\overline{D}_{12}^{(i)}$, $\overline{D}_{21}^{(i)}$, $\overline{D}_{22}^{(i)}$ - кінетичні 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, $K = \frac{1}{3}\left(\frac{\partial \Pi}{\partial \varepsilon}\right)_{T, \left\{c_j^{(i)}\right\}}$ - модуль об'ємного стиску, де $\Pi = \Pi_{\alpha.}^{\cdot\alpha}$ - перший інваріант тензора напружень; $\alpha = \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial T}\right)_{\left\{\Pi^{\alpha\beta}\right\}, \left\{c_j^{(i)}\right\}}$ - температурний коефіцієнт об'ємного розширення матеріалу; $\bar{a}_{cj}^{(i)} = \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial c_j^{(i)}}\right)_{T, \left\{\Pi^{\alpha\beta}\right\}, \left\{c_{l \neq j}^{(k \neq i)}\right\}}$ - концентраційні коефіцієнти об'ємного розширення матеріалу; $G = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial \Pi^{\alpha\beta}}{\partial \varepsilon_{\alpha\beta}}\right)_{T, \left\{c_j^{(i)}\right\}, \left\{\alpha \neq \beta\right\}}$ - модуль зсуву, $\kappa = L_{QQ} / T$, $\kappa_j^{(i)} = L_{Qj}^{(i)} d_j^{(i)} / T$ - коефіцієнти теплопровідності; $Q_n = \sigma_s\left(\vec{\nabla} T, \vec{\nabla} \varepsilon, \vec{\nabla} c_j^{(i)}\right) / T$ - нескомпенсоване тепло, $\vec{u}$ - вектор переміщень.

Ефективні характеристики досліджуваної системи введені на основі умови локальної термодинамічної рівноваги щодо процесів переходу домішкових частинок між різними станами, яка зводиться до рівності хімічних потенціалів відповідних компонент системи.

Теорема 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 $i=0$

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

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

для $i=\overline{1,N-1}$

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

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

для $i=N$

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

$$\frac{\partial c_2^{e(N)}}{\partial t}=\overline{D}_{21}^{(N)}\Delta c_1^{(N)}+\overline{D}_{22}^{e(N)}\Delta c_2^{e(N)}+\overline{k}_1^{(N)}c_1^{(N)}-\overline{k}_2^{e(N)}c_2^{e(N)}+\sum_{i=0}^{N-1}\widetilde{\lambda}_2^{e(iN)}c_2^{e(i)}.$$

Теорема 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 $i=0$

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

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

для $i=\overline{1,N-1}$

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

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

для $i=N$

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

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

Теорема 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 $i = 0$

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

для $i = \overline{1, N-1}$

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

для $i = N$

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

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

Індексом e позначено відповідні ефективні характеристики.

Третій розділ присвячений постановкам, розробленню методики знаходження розв'язків та розв'язанню крайових задач каскадного типу на основі отриманих модельних співвідношень масоперенесення у середовищах з ефективними характеристиками.

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. Накладено початкові і граничні умови першого роду. Розв'язки крайових задач каскадного типу для зазначених математичних моделей побудовані за ітераційною процедурою з використанням функцій Гріна.

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.

Спроєктовано схеми модулів комплексів програм пакету GeterPas для моделей дифузії у тілі з пастками (рис. 2), 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 приповерхневе зростання функції, максимум якої з часом зростає і зсувається вглиб тіла.

Для моделі невзаємодіючих 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

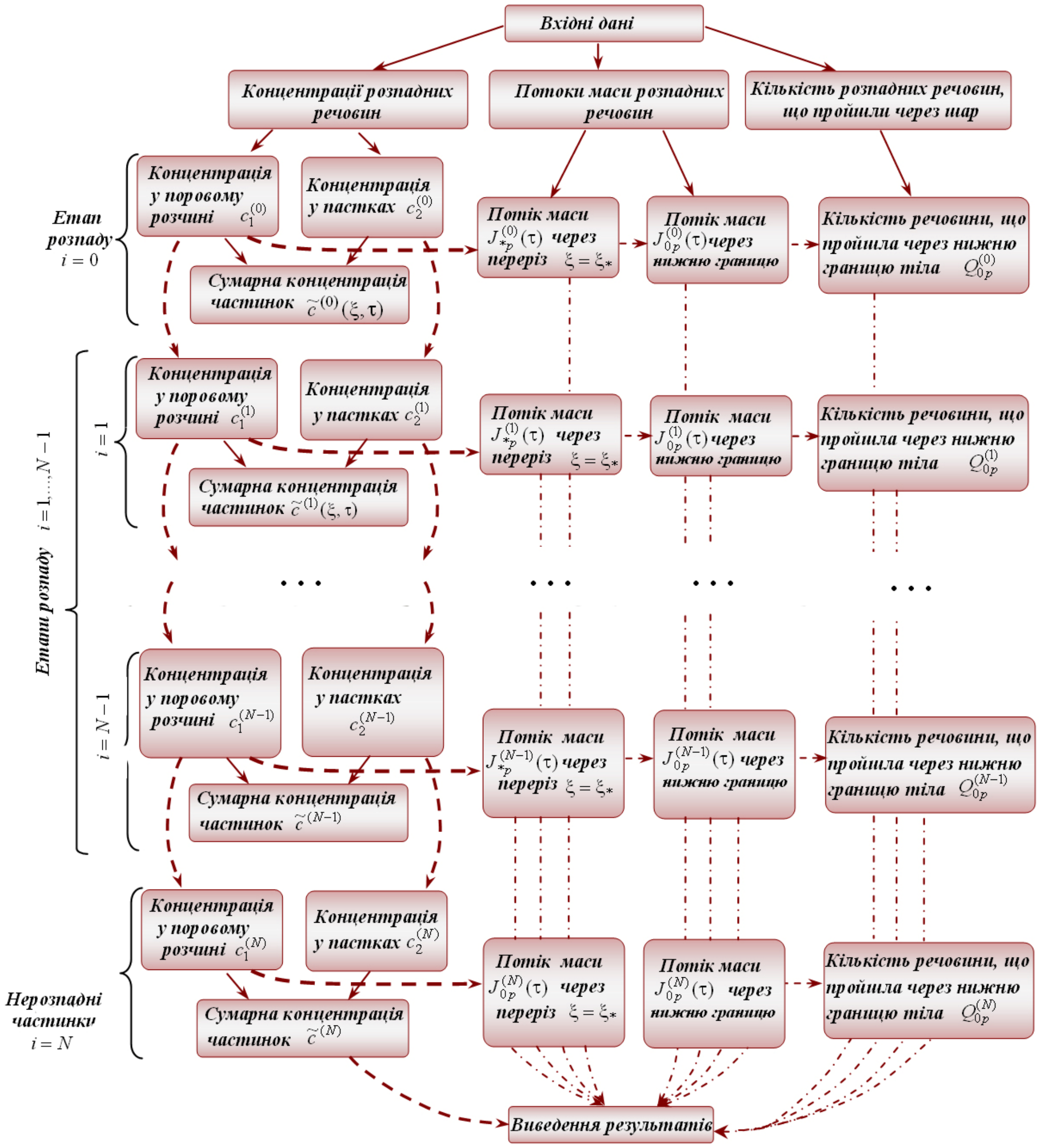

Рис. 2. Архітектура комплексу модулів програм для моделювання процесів дифузії за каскадного розпаду частинок для моделі ефективної дифузії у тілі з пастками

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 та інтенсивності сорбції $a_{31}^{e(i)} = \bar{k}_1^{e(i)} \big/ \bar{k}_2^{(0)}$. На рис. 3. 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 a) та $d_0^{(1)} = 20$ (криві b) при $a_2^{(1)} = 0.8$ для $a_{\lambda 1}^{(1)} = \tilde{\lambda}_j^{(1)} \big/ \bar{k}_2^{(0)} = 0.1$ $a_{\lambda 2}^{(1)} = \tilde{\lambda}_j^{(2)} \big/ \bar{k}_2^{(0)} = 0.9$ при коефіцієнті інтенсивності сорбції $a_3^{(0)} = 5$ (рис. a) та $a_3^{(0)} = 10$ (рис. b).

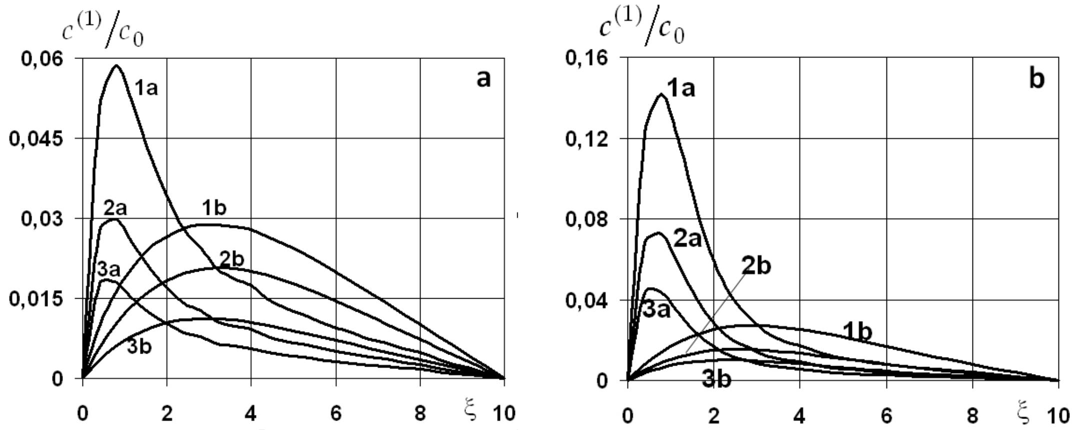

Рис. 3. Розподіли концентрації домішок $\tilde{c}^{(1)}$ при різних значеннях $a_{31}^{e(1)}$

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.

У четвертому розділі досліджено процеси масоперенесення домішкових речовин двома шляхами з урахуванням взаємних переходів частинок між станами та каскадного розпаду домішкових компонент.

Сформульовані зв’язані крайові задачі гетеродифузії, коли концентрація частинок на певному кроці розпаду є джерелом маси розпадної речовини, яка дифундує, на наступному кроці. Задано крайові умови першого роду на функції концентрації на всіх етапах каскаду. Прийнято, що на нульовому етапі на верхній границі шару діє стале джерело маси $c_0 = const$, яке між швидким та повільним шляхами міграції розподіляється наступним чином: $c_1^{(0)}(\xi,\tau)\big|_{\xi=0} = \alpha c_0$, $c_2^{e(0)}(\xi,\tau)\big|_{\xi=0} = (1-\alpha)c_0$, де α $(0 \le \alpha \le 1)$ – параметр, який визначає частку домішкової речовини, що з поверхні тіла потрапила на швидкий шлях міграції. Розв’язки відповідних крайових задач каскадного типу побудовані за ітераційною процедурою з використанням функцій Гріна $G^{(i)}(\xi,\xi';\tau,\tau')$.

Отримано аналітичний розв’язок крайової задачі для $i=0$:

концентрація розпадної домішки на швидкому шляху міграції

$$\frac{c_1^{(0)}(\tau,\xi)}{c_0} = \left\{\alpha - \frac{\tilde{b}_1}{ce}\right\}\left(1 - \frac{\xi}{\xi_0}\right) - B\left[\left(\tilde{a}_1 + \frac{\tilde{b}_1}{x_1}\right)\frac{\sin(\pi - y)x_1}{\sin \pi x_1} - \left(\tilde{a}_1 + \frac{\tilde{b}_1}{x_2}\right)\frac{\sin(\pi - y)x_2}{\sin \pi x_2}\right] -$$

$$-\frac{2}{\xi_0}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\sin y_n\xi}{y_n(s_1-s_2)}\left[\left(\alpha s_1+p_1+\frac{p_2}{s_1}\right)e^{s_1\tau}-\left(\alpha s_2+p_1+\frac{p_2}{s_2}\right)e^{s_2\tau}\right],$$

концентрація розпадних частинок на повільному шляху міграції

$$\frac{c_2^{(0)}(\tau,\xi)}{c_0}=\left\{1-\alpha-\frac{\tilde{b}_2}{ce}\right\}\left(1-\frac{\xi}{\xi_0}\right)-B\left[\left(\tilde{a}_2+\frac{\tilde{b}_2}{x_1}\right)\frac{\sin(\pi-y)x_1}{\sin\pi x_1}-\left(\tilde{a}_2+\frac{\tilde{b}_2}{x_2}\right)\frac{\sin(\pi-y)x_2}{\sin\pi x_2}\right]-$$

$$-\frac{2}{\xi_0}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\sin y_n\xi}{y_n(s_1-s_2)}\left[\left((1-\alpha)s_1+p_1'+\frac{p_2'}{s_1}\right)e^{s_1\tau}-\left((1-\alpha)s_2+p_1'+\frac{p_2'}{s_2}\right)e^{s_2\tau}\right],$$

сумарна концентрація розпадної речовини $c^{(0)}(\tau,\xi)=c_1^{(0)}(\tau,\xi)+c_2^{(0)}(\tau,\xi)$

$$\frac{c^{(0)}(\tau,\xi)}{c_0}=\left\{1-\frac{\tilde{b}}{ce}\right\}\left(1-\frac{\xi}{\xi_0}\right)-B\left[\left(\tilde{a}+\frac{\tilde{b}}{x_1}\right)\frac{\sin(\pi-y)x_1}{\sin\pi x_1}-\left(\tilde{a}+\frac{\tilde{b}}{x_2}\right)\frac{\sin(\pi-y)x_2}{\sin\pi x_2}\right]-$$

$$-\frac{2}{\xi_0}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\sin y_n\xi}{y_n(s_1-s_2)}\left[\left(s_1+\tilde{p}_1+\frac{\tilde{p}_2}{s_1}\right)e^{s_1\tau}-\left(s_2+\tilde{p}_1+\frac{\tilde{p}_2}{s_2}\right)e^{s_2\tau}\right],$$

де $B=\dfrac{1}{\sqrt{d^2-4ec^2}}$, $\tilde{a}=\tilde{a}_1+\tilde{a}_2$, $\tilde{b}=\tilde{b}_1+\tilde{b}_2$, $\tilde{p}_1=p_1+p_1'$, $\tilde{p}_2=p_2+p_2'$, $\tilde{b}_1=\alpha_1a_{22}^{(0)}-\alpha_2a_{12}^{(0)}$, $\tilde{a}_1=\left(d_1^{(0)}\alpha_2+d^{(0)}\alpha_1\right)\dfrac{\pi^2}{\xi_0^2}$, $\tilde{a}_2=\left(\alpha_2+\alpha_1d_2^{(0)}\right)\dfrac{\pi^2}{\xi_0^2}$, $\tilde{b}_2=\alpha_2a_{11}^{(0)}-\alpha_1a_{21}^{(0)}$, $p_1=\left(\alpha d^{(0)}-d_1^{(0)}(1-\alpha)\right)y_n^2+$ $+\alpha a_{22}^{(0)}+\alpha_1+(1-\alpha)a_{12}^{(0)}$, $p_2=\left(d_1^{(0)}\alpha_2+d^{(0)}\alpha_1\right)y_n^2+\alpha_1a_{22}^{(0)}-\alpha_2a_{12}^{(0)}$, $p_1'=\left(1-\alpha-\alpha d_2^{(0)}\right)y_n^2+a(1-\alpha)_{11}^{(0)}+$ $+\alpha a_{21}^{(0)}+\alpha_2$; $p_2'=\left(\alpha_2+\alpha_1d_2^{(0)}\right)y_n^2+\alpha_2a_{11}^{(0)}-\alpha_1a_{21}^{(0)}$.

Розв'язки крайових задач для $i=\overline{1,N-1}$ отримано за такою ітераційною процедурою

$$c_1^{(i)}(\tau,\xi)=a_{\lambda1}^{(i-1)}\int_0^{\tau}\int_0^{\xi}G_1^{(i)}(\tau,\tau';\xi,\xi')c_1^{(i-1)}(\tau',\xi')d\xi'd\tau';$$

$$c_2^{e(i)}(\tau,\xi)=a_{\lambda2}^{e(i-1)}\int_0^{\tau}\int_0^{\xi}G_2^{(i)}(\tau,\tau';\xi,\xi')c_2^{e(i-1)}(\tau',\xi')d\xi'd\tau';$$

сумарна концентрація дифундуючих частинок для етапів $i=\overline{1,N-1}$

$$c^{(i)}(\tau,\xi)=c_1^{(i)}(\tau,\xi)+c_2^{(i)}(\tau,\xi).$$

Розв'язок крайової задачі для $i=N$ має вигляд

$$c_1^{(N)}(\xi,\tau)=\int_0^{\tau}\int_0^{\xi_0}G_1^{(N)}(\xi,\xi';\tau,\tau')\sum_{i=0}^{N-1}a_{\lambda1}^{(iN)}c_1^{(i)}(\xi',\tau')d\xi'd\tau';$$

$$c_2^{e(N)}(\xi,\tau)=\int_0^{\tau}\int_0^{\xi_0}G_2^{(N)}(\xi,\xi';\tau,\tau')\sum_{i=0}^{N-1}a_{\lambda2}^{e(iN)}c_2^{e(i)}(\xi',\tau')d\xi'd\tau'.$$

Лінійну крайову задачу для системи зв'язаних диференціальних рівнянь гетеродифузії подано у матричному вигляді

$$\mathbf{L}[\mathbf{c}(\xi,\tau)]=\mathbf{F}(\xi,\tau),\quad \mathbf{L}=\begin{pmatrix}L_1^{c_1}(\xi,\tau) & L_1^{c_2}(\xi,\tau)\\ L_2^{c_1}(\xi,\tau) & L_2^{c_2}(\xi,\tau)\end{pmatrix}, \tag{8}$$

де $L_1^{c_1}(\xi,\tau)=\frac{\partial}{\partial\tau}-\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}+a_{11}$, $L_1^{c_2}(\xi,\tau)=-d_1\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}-a_{12}$, $L_2^{c_1}(\xi,\tau)=-d_2\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}-a_{21}$, $L_2^{c_2}(\xi,\tau)=\frac{\partial}{\partial\tau}-d\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}+a_{22}$ (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 $F_i(z,t)\in L_2\vee F_i\in D(\Re^2)\vee F_i\in\langle\Omega,\sigma,P\rangle$.

Нехай задані крайові умови

$$\mathbf{c}(\xi,\tau)\big|_{\tau=0}=\begin{pmatrix}0\\0\end{pmatrix};\ \mathbf{c}(\xi,\tau)\big|_{\xi=0}=\mathbf{c}_0=\begin{pmatrix}c_0^{(1)}\\c_0^{(2)}\end{pmatrix};\ \mathbf{c}(\xi,\tau)\big|_{\xi=\xi_0}=\begin{pmatrix}0\\0\end{pmatrix},\ c_0^{(i)}\in L_2. \tag{9}$$

Якщо $|\mathbf{c}(z,t)-\mathbf{c}_0(z,t)|\le\beta$ для $\forall t\in\Re_+$, $z\in[0,\,z_0]$ (β- відома додатна константа), тоді існує єдиний класичний розв'язок задачі (8), (9).

Означення 1. Функцією Гріна задачі (8), (9) називається матрична функція

$$\mathbf{G}(\xi,\xi';\tau,\tau')=\begin{pmatrix}G_1(\xi,\xi';\tau,\tau') & 0\\0 & G_2(\xi,\xi';\tau,\tau')\end{pmatrix}, \tag{10}$$

яка визначена в чотиривимірній області $K=K_1\times K_2=\{(\xi,\xi';\tau,\tau')\,|\,\xi,\xi'\in[0,\xi_0];\tau,\tau'\in\Re_+:\tau'<\tau\}$ 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 $\xi'\in[0,\xi_0]$, $\tau'\in\Re_+$ 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 $\tau\le\tau'$;

4) в кожному з інтервалів $[0,\xi')$ і $(\xi',\xi_0]$ для $\tau'\le\tau$ 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 (9).

Означення 2. Якщо $\mathbf{L}$ - матричний диференціальний оператор в частинних похідних (8), який діє на узагальнених функціях на підмножині Ω деякого евклідового простору $\Re^n$, тоді

- функція Гріна (10) в точці $(\xi',\tau')\in\Omega$, що відповідає оператору $\mathbf{L}$, є будь-яким розв'язком матричного рівняння

$$\mathbf{LG}(\xi,\xi';\tau,\tau')=\boldsymbol{\delta}(\tau-\tau';\xi-\xi'),$$

де $\boldsymbol{\delta}(\tau-\tau';\xi-\xi')=\begin{pmatrix}\delta(\xi-\xi')\delta(\tau-\tau')\\\delta(\xi-\xi')\delta(\tau-\tau')\end{pmatrix}$ - векторна дельта-функція;

- розв'язком крайової задачі $\mathbf{L}[\mathbf{c}(\xi,\tau)]=\mathbf{F}(\xi,\tau)$ є згортка $(\mathbf{G}*\mathbf{F})$.

Знайдено функції Гріна $G_j^{(i)}$ на i-му кроці розпаду ($i=1,...,N-1$):

$$G_1^{(i)}(\xi,\xi';\tau,\tau')=\frac{2}{\xi_0}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\sin y_n\xi\sin y_n\xi'}{s_1^{(i)}-s_2^{(i)}}\left[\left(s_1^{(i)}+A_1\right)e^{s_1^{(i)}(\tau-\tau')}-\left(s_2^{(i)}+A_1\right)e^{s_2^{(i)}(\tau-\tau')}\right];$$

$$G_2^{(i)}(\xi,\xi';\tau,\tau') = \frac{2}{\xi_0}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\sin y_n\xi \sin y_n\xi'}{s_1^{(i)} - s_2^{(i)}}\left[\left(s_1^{(i)} + A_2\right)e^{s_1^{(i)}(\tau-\tau')} - \left(s_2^{(i)} + A_2\right)e^{s_2^{(i)}(\tau-\tau')}\right],$$

функції Гріна $G_j^{(N)}$ для нерозпадних домішок, $i = N$:

$$G_1^{(N)} = \frac{2}{\xi_0}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\sin(y_n\xi)\sin(y_n\xi')}{s_1^{(N)} - s_2^{(N)}}\left[\left(s_1^{(N)} + A_1^{(N)}\right)e^{s_1^{(N)}(\tau-\tau')} - \left(s_2^{(N)} + A_1^{(N)}\right)e^{s_2^{(N)}(\tau-\tau')}\right];$$

$$G_2^{(N)} = \frac{2}{\xi_0}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\sin(y_n\xi)\sin(y_n\xi')}{s_1^{(N)} - s_2^{(N)}}\left[\left(s_1^{(N)} + A_2^{(N)}\right)e^{s_1^{(N)}(\tau-\tau')} - \left(s_2^{(N)} + A_2^{(N)}\right)e^{s_2^{(N)}(\tau-\tau')}\right],$$

де $A_1 = y_n^2(d^{e(i)} - d_1^{e(i)}) + a_{22}^{e(i)} + a_{12}^{e(i)}$; $A_2 = y_n^2(d_0^{(i)} - d_2^{(i)}) + a_{11}^{(i)} + a_{21}^{(i)}$; $A_1^{(N)} = y_n^2(d^{e(N)} - d_1^{e(N)}) + a_{22}^{e(N)} + a_{12}^{e(N)}$; $A_2^{(N)} = y_n^2(d_0^{(N)} - d_2^{(N)}) + a_{11}^{(N)} + a_{21}^{(N)}$.

Поверхні, які утворюють функції Гріна $G_1^{(i)}(\tau,\tau';\xi,\xi')$, наведено на рис. 4.

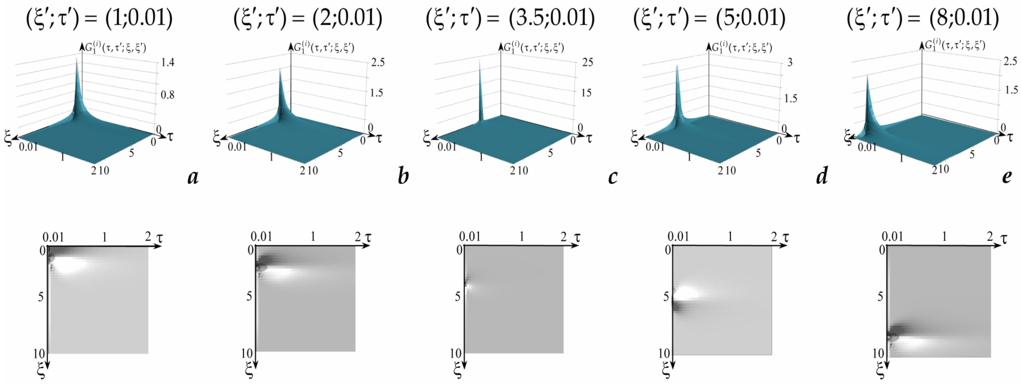

Рис. 4. Поверхні функції Гріна $G_1^{(i)}(\tau,\tau';\xi,\xi')$ в точках (ξ',τ')

На основі отриманих формул розроблений пакет програм для комп'ютерного моделювання процесів гетеродифузії двома шляхами, який увійшов до комплексу програм GeterPas. Схему модулів для обчислення концентрацій розпадних домішкових компонент, розроблену за моделлю гетеродифузії, подано на рис. 5.

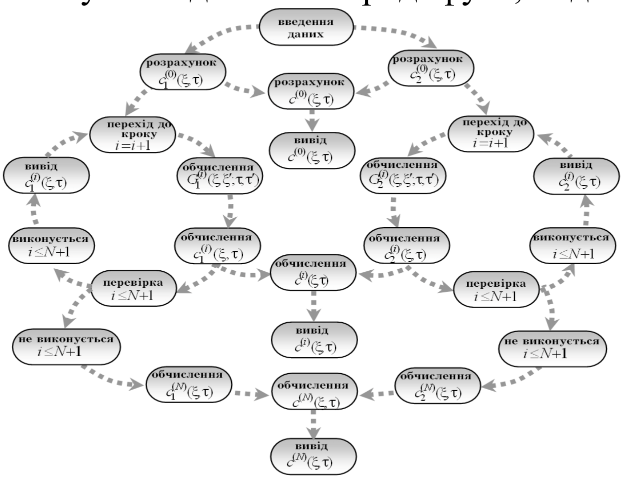

Рис. 5. Схема алгоритму модуля пакету для розрахунку концентрацій домішкових речовин за їх каскадного розпаду

Досліджено коефіцієнти крайової задачі гетеродифузії каскадного типу. Встановлено, що молекули (атоми) речовини, що виникають у складних ланцюгах розпаду можуть мати періоди піврозпаду в дуже широкій області значень: від $3\cdot10^{-7}c$ для ^{212}Pa до $1.4\cdot10^{10}$ років для ^{232}Th у радіоактивному розпаді, наприклад:

$$^{238}_{92}U \xrightarrow[4.5\cdot 10^{9}\ \textit{років}]{\lambda=4.8\cdot 10^{-18}\,c^{-1}} {}^{234}_{90}Th \xrightarrow[24\ \textit{днів}]{\lambda=3.34\cdot 10^{-7}\,c^{-1}} {}^{234}_{91}Pa \xrightarrow[1.2\,\textit{хвилин}]{\lambda=9.62\cdot 10^{-3}\,c^{-1}}$$

$$\xrightarrow[1.2\,\textit{хвилин}]{\lambda=9.62\cdot 10^{-3}\,c^{-1}} {}^{234}_{92}U \xrightarrow[2.7\cdot 10^{5}\ \textit{років}]{\lambda=8.1\cdot 10^{-14}\,c^{-1}} {}^{230}_{90}Th \xrightarrow[8.3\cdot 10^{4}\ \textit{років}]{\lambda=2.6\cdot 10^{-13}\,c^{-1}} {}^{226}_{88}Ra\,;$$

$$^{226}_{88}Ra \xrightarrow[1590\,\textit{років}]{\lambda=1.38\cdot 10^{-11}\,c^{-1}} {}^{222}_{86}Rn \xrightarrow[3.82\ \textit{дня}]{\lambda=2.1\cdot 10^{-6}\,c^{-1}} {}^{218}_{84}Po \xrightarrow[3.05\,\textit{хвилин}]{\lambda=3.7\cdot 10^{-3}\,c^{-1}} {}^{214}_{82}Pb\,.$$

На рис. 6-8 продемонстровано результати роботи комплекса програм для моделі гетеродифузії. На рис. 6 показані розподіли концентрацій на нульовому етапі розпаду, на рис. 7 - на першому етапі, а на рис. 8 – на другому у різні моменти безрозмірного часу $\tau = 0.8,\ 2,\ 20$ (криві 1-3 відповідно) для коефіцієнтів поверхневого розподілу домішкових частинок між станами $\alpha = 0.25$ (рис.a) та $\alpha = 0.91$ (рис.b). Тут швидкому шляху відповідають штрихові лінії, повільному шляху – штрих-пунктирні лінії, а розподілам сумарної концентрації - суцільні лінії. Розрахунки проведені для таких значень коефіцієнтів $\alpha = 0.25;\ d^{e(0)} = 0.1,\ d^{e(1)} = 0.3,\ d_0^{(1)} = 0.2,$ $d^{e(1)} = 0.2,\ d_0^{(1)} = 0.1;\ a_{11}^{(0)} = 4,\ a_{12}^{(0)} = 1,\ a_{21}^{(0)} = 2.2,\ a_{22}^{(0)} = 2.6,\ a_{11}^{(1)} = 2,\ a_{12}^{(1)} = 1,\ a_{21}^{(1)} = 0.5,$ $a_{22}^{(1)} = 1.2;\ a_{\lambda 1}^{(0)} = 0.5,\ a_{\lambda 2}^{(0)} = 0.5,\ a_{\lambda 1}^{(1)} = 0.3,\ a_{\lambda 2}^{(1)} = 0.3;\ \tau = 0.8.$

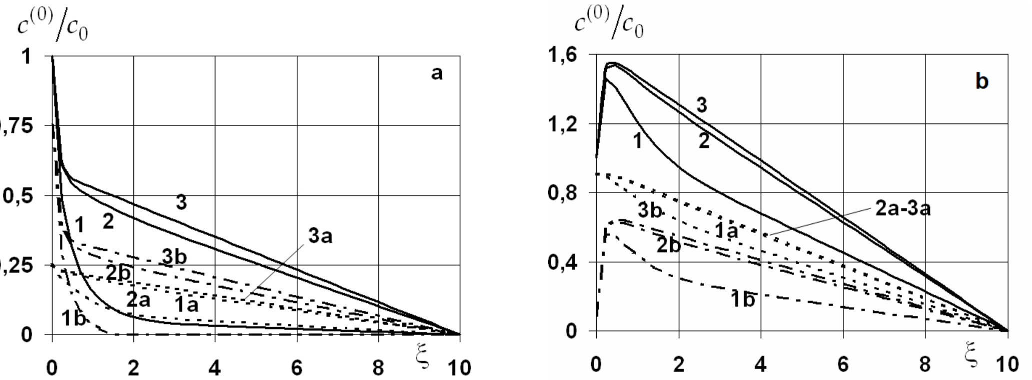

Рис. 6. Розподіли концентрацій домішкової речовини $\mathbf{K}_1^{(0)}$ на швидкому, $\mathbf{K}_2^{(0)}$ на повільному шляхах міграції та їхня сума $\mathbf{K}^{(0)}$ на нульовому етапі каскадного розпаду у різні моменти часу для $\alpha = 0.25$ (рис.a), $\alpha = 0.91$ (рис.b)

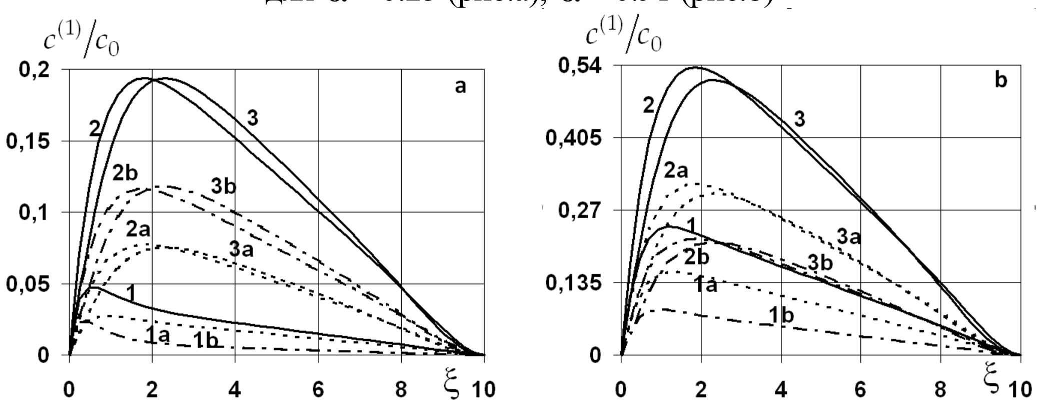

Рис. 7. Розподіли концентрацій домішкової речовини на швидкому, на повільному шляхах міграції та їхня сума на першому етапі каскадного розпаду у різні моменти часу для $\alpha = 0.25$ (рис.a) і $\alpha = 0.91$ (рис.b)

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

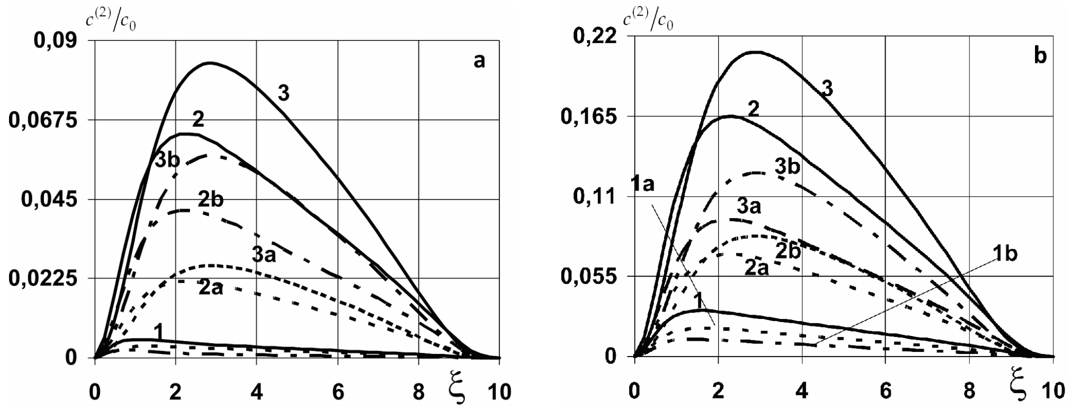

Рис. 8 Розподіли концентрацій домішкової речовини на швидкому $\mathbf{K}_1^{(2)}$, на повільному $\mathbf{K}_2^{(2)}$ шляхах міграції та їхня сума $\mathbf{K}^{(2)}$ на другому етапі каскадного розпаду у різні моменти часу для $\alpha = 0.25$ (рис.a) і $\alpha = 0.91$ (рис.b)

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.

У п’ятому розділі 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.

Системи диференціальних рівнянь зв'язані між собою розпадом мігруючих речовин типу хімічних реакцій або радіоактивного розпаду і в одновимірному випадку мають вигляд

для $i=0$

$$\frac{\partial c_1^{(0)}}{\partial \tau}=\frac{\partial^2 c_1^{(0)}}{\partial \xi^2}+d_1^{(0)}\frac{\partial^2 c_2^{(0)}}{\partial \xi^2}c_2^{(0)}-a_{11}^{(0)}c_1^{(0)}+a_{12}^{(0)}c_2^{(0)},$$

$$\frac{\partial c_2^{(0)}}{\partial \tau}=d_2^{(0)}\frac{\partial^2 c_1^{(0)}}{\partial \xi^2}+d^{(0)}\frac{\partial^2 c_2^{(0)}}{\partial \xi^2}+a_{21}^{(0)}c_1^{(0)}-a_{22}^{(0)}c_2^{(0)}+a_{23}^{(0)}c_3^{(0)},$$

$$\frac{\partial c_3^{(0)}}{\partial \tau}=a_{32}^{(0)}c_2^{(0)}-a_{33}^{(0)}c_3^{(0)};$$

для $i=\overline{1,N-1}$

$$\frac{\partial c_1^{(i)}}{\partial \tau}=d_0^{(i)}\frac{\partial^2 c_1^{(i)}}{\partial \xi^2}+d_1^{(i)}\frac{\partial^2 c_2^{(i)}}{\partial \xi^2}-a_{11}^{(i)}c_1^{(i)}+a_{12}^{(i)}c_2^{(i)}+a_{\lambda 1}^{(i-1)}c_1^{(i-1)},$$

$$\frac{\partial c_2^{(i)}}{\partial \tau}=d_2^{(i)}\frac{\partial^2 c_1^{(i)}}{\partial \xi^2}+d^{(i)}\frac{\partial^2 c_2^{(i)}}{\partial \xi^2}+a_{21}^{(i)}c_1^{(i)}-a_{22}^{(i)}c_2^{(i)}+a_{23}^{(i)}c_3^{(i)}+a_{\lambda 2}^{(i-1)}c_2^{(i-1)},$$

$$\frac{\partial c_3^{(i)}}{\partial \tau}=a_{32}^{(i)}c_2^{(i)}-a_{33}^{(i)}c_3^{(i)}+a_{\lambda 3}^{(i-1)}c_3^{(i-1)};$$

для $i=N$

$$\frac{\partial c_1^{(N)}}{\partial \tau}=d_0^{(N)}\frac{\partial^2 c_1^{(N)}}{\partial \xi^2}+d_1^{(N)}\frac{\partial^2 c_2^{(N)}}{\partial \xi^2}-a_{11}^{(N)}c_1^{(N)}+a_{12}^{(N)}c_2^{(N)}+\sum_{i=0}^{N-1}a_{\lambda 1}^{(iN)}c_1^{(i)},$$

$$\frac{\partial c_2^{(N)}}{\partial \tau}=d_2^{(N)}\frac{\partial^2 c_1^{(N)}}{\partial \xi^2}+d^{(N)}\frac{\partial^2 c_2^{(N)}}{\partial \xi^2}+a_{21}^{(N)}c_1^{(N)}-a_{22}^{(N)}c_2^{(N)}+a_{23}^{(N)}c_3^{(N)}+\sum_{i=0}^{N-1}a_{\lambda 2}^{(iN)}c_2^{(i)},$$

$$\frac{\partial c_3^{(N)}}{\partial \tau}=a_{32}^{(N)}c_2^{(N)}-a_{33}^{(N)}c_3^{(N)}+\sum_{i=0}^{N-1}a_{\lambda 3}^{(iN)}c_3^{(i)}$$

за початкових умов

$$c_1^{(i)}(\xi,\tau)\Big|_{\tau=0}=c_2^{(i)}(\xi,\tau)\Big|_{\tau=0}=c_3^{(i)}(\xi,\tau)\Big|_{\tau=0}=0,\qquad i=\overline{0,N};$$

граничних умов на поверхні тіла $\xi=0$ для етапу $i=0$

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

граничних умов на поверхні $\xi=0$ для етапів $i=\overline{1,N}$

$$c_1^{(i)}(\xi,\tau)\Big|_{\xi=\xi_0}=c_2^{(i)}(\xi,\tau)\Big|_{\xi=\xi_0}=0;$$

граничних умов на поверхні $\xi=\xi_0$ для всіх етапів розпаду $i=\overline{0,N}$

$$c_1^{(i)}(\xi,\tau)\Big|_{\xi=\xi_0}=c_2^{(i)}(\xi,\tau)\Big|_{\xi=\xi_0}=0.$$

Метод побудови розв'язку крайових задач каскадного типу для часткових моделей узагальнено на модель гетеродифузії в середовищі з пастками. А саме, знайдено точний аналітичний розв'язок на нульовому етапі. Для знаходження концентрацій на етапах від 1 до N застосована процедура простої ітерації з використання функції Гріна. Сформульовані означення матричної функції Гріна для даної моделі у двох еквівалентних варіантах. Функції Гріна знайдено із системи рівнянь гетеродифузії у середовищі з пастками з точкового джерела. 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 (рис. 9) та кількості речовини (рис 10), 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.

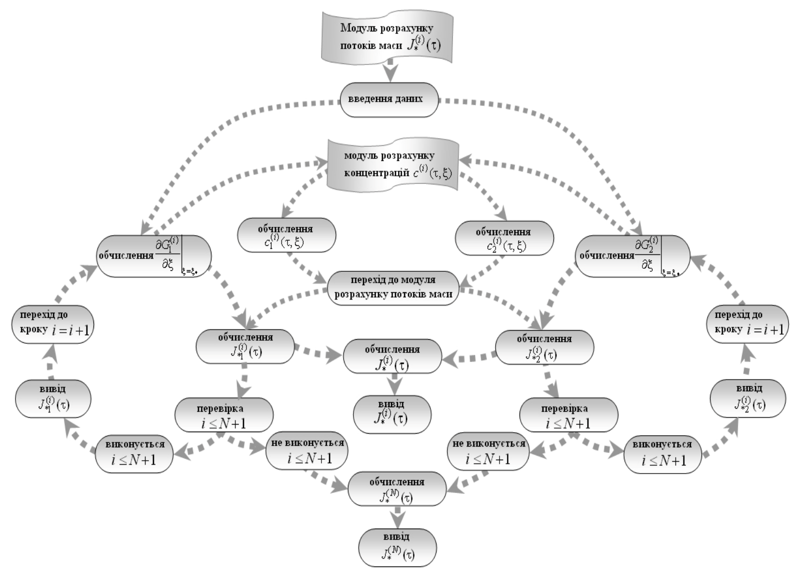

Рис. 9. Схема алгоритму модуля пакету для розрахунку дифузійного потоку домішкових речовин за каскадного розпаду частинок для моделі гетеродифузії двома шляхами у тілі з пастками

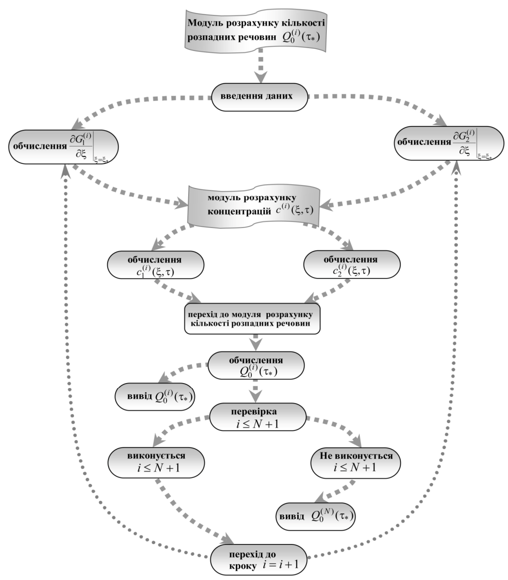

Рис. 10. Схема модуля комплексу програм пакету GeterPas для розрахунку кількості домішкових речовин, що пройшли через шар

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.

Шостий розділ присвячений розробці двом підходам до математичного моделювання процесів конвективної дифузії в складених пористих тілах з врахуванням ефектів міжфазних границь та експериментальних даних на поверхні тіла, розвиненню чисельного методу знаходження подвійного інтеграла зі змінними верхніми межами та змінною областю інтегрування.

Розвинуто підхід до математичного опису процесів масоперенесення в об’єктах складної та складеної структури в умовах масообміну між макроелементами системи, що складається з етапів: побудова математичної моделі у лінеаризованому варіанті; формулювання на цій основі контактно-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 контактно-крайової задачі для чисельного аналізу; розробка програмного забезпечення та використання його для аналізу отриманих результатів.

Побудована математична модель гетеродифузії домішкової речовини у складеному тілі, кожен макроелемент якої має свою пористу мікроструктуру. Отримано балансові співвідношення 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 контактно-крайову задачу конвективної дифузії у тришаровому пористому шарі (рис. 11) за умов неідеального контакту на шукану функцію:

в області $x \in \Omega_j$ ($\Omega_1 =]0; x_1[$, $\Omega_2 =]x_1; x_2[$, $\Omega_3 =]x_1; x_0[$):

$$\frac{\partial c_1^{(j)}(\tau, x)}{\partial \tau} = d_j \frac{\partial^2 c_1^{(j)}(\tau, x)}{\partial x^2} - v_j \frac{\partial c_1^{(j)}(\tau, x)}{\partial x} - a_j c_1^{(j)}(\tau, x),$$

$$\frac{\partial c_2^{(j)}(\tau, x)}{\partial \tau} = a_j c_1^{(j)}(\tau, x),$$

де d_j; v_j - коефіцієнти дифузії домішки і конвективного перенесення в області Ω_j, a_j - коефіцієнти інтенсивності сорбції, $x \in \Omega_j$ ($j = \overline{1,3}$).

На верхній поверхні тіла відоме значення постійної концентрації домішки, тоді як на нижній границі тіла концентрація відсутня:

$$c_1^{(1)}(\tau, x)\Big|_{x=0} = c_0 \equiv \mathrm{const}, \qquad c_1^{(3)}(\tau, x)\Big|_{x=x_0} = 0.$$

Також прийнято, що в початковий момент часу:

$$c_1^{(i)}(\tau, x)\Big|_{\tau=0} = c_2^{(i)}(\tau, x)\Big|_{\tau=0} = c_3^{(i)}(\tau, x)\Big|_{\tau=0} = 0, \qquad i = \overline{1,3}.$$

На границях контакту фаз виконуються умови рівностей хімічних потенціалів і сумарних масових потоків у вигляді:

на першій границі контакту $x = x_1$

$$\lambda^{(1)} c_1^{(1)}(\tau, x)\Big|_{x=x_1} = c_1^{(2)}(\tau, x)\Big|_{x=x_1}, \quad d_1 \frac{\partial c_1^{(1)}}{\partial x} - v_1 c_1^{(1)}\Bigg|_{x=x_1} = d_2 \frac{\partial c_1^{(2)}}{\partial x} - v_2 c_1^{(2)}\Bigg|_{x=x_1};$$

на другій границі контакту $x = x_2$

$$\lambda^{(2)} c_1^{(2)}(\tau, x)\Big|_{x=x_2} = c_1^{(3)}(\tau, x)\Big|_{x=x_2}, \quad d_2 \frac{\partial c_1^{(2)}}{\partial x} - v_2 c_1^{(2)}\Bigg|_{x=x_2} = d_3 \frac{\partial c_1^{(3)}}{\partial x} - v_3 c_1^{(3)}\Bigg|_{x=x_2},$$

де $\lambda^{(l)} = \lambda_1^{(l)} / \lambda_2^{(l+1)}$ - відношення коефіцієнтів концентраційної залежності хімічних потенціалів.

За допомогою інтегральних перетворень за просторовими змінними, які застосовуються окремо в областях, що контактують, отримано аналітичний розв'язок контактно-крайової задачі конвективної дифузії домішкової речовини у тришаровому шарі, кожен макроелемент якого є пористим з відмінними від інших характеристиками.

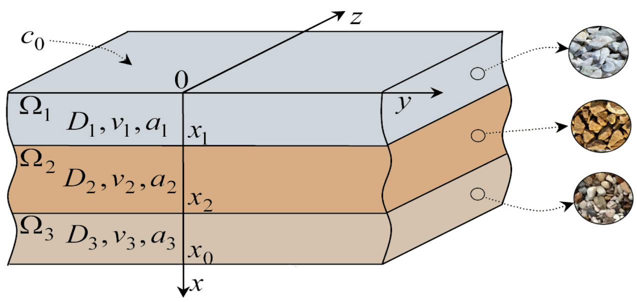

Рис. 11. Тришарове тіло, кожний структурний елемент якого є пористим з різними фізичними характеристиками

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.

На область інтегрування накладено квадратну сітку і враховано змінність області інтегрування: при зміні значення τ може змінюватись або кількість елементів розбиття N_{el} або ширина гратки (кроку) h, тобто $N_{el} = N_{ei}(\tau)$, $h = h(\tau)$ і $h(\tau) = \tau / N_{el}(\tau)$.

Отримано формули чисельного інтегрування для $F(\tau, \tau', \tau'') = \int\limits_0^{\tau}\int\limits_0^{\tau'} f(\tau, \tau', \tau'') d\tau'' d\tau'$:

А) зі зміною τ змінюється лише розмір гратки накладеної сітки

$$\int\limits_0^{\tau}\int\limits_0^{\tau'} f(\tau', \tau'', \tau) dxdy \approx \left(\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n} h^2(\tau) f(\tau'_i, \tau''_i, \tau) + \sum_{i=1}^{n-1}\sum_{j=i+1}^{n} h^2(\tau) f(\tau'_i, \tau''_j, \tau) \right),$$

Б) зі зміною τ змінюється лише кількість елементів розбиття

$$\int\limits_0^{\tau}\int\limits_0^{\tau'} f(\tau', \tau'', \tau) dxdy \approx \left(\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n(\tau)} h^2 f(\tau'_i, \tau''_i, \tau) + \sum_{i=1}^{n(\tau)-1}\sum_{j=i+1}^{n(\tau)} h^2 f(\tau'_i, \tau''_j, \tau) \right),$$

В) зі зміною τ змінюються і розмір гратки і кількість елементів розбиття

$$\int\limits_0^{\tau}\int\limits_0^{\tau'} f(\tau', \tau'', \tau) dxdy \approx \left(\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n(\tau)} h^2(\tau) f(\tau'_i, \tau''_i, \tau) + \sum_{i=1}^{n(\tau)-1}\sum_{j=i+1}^{n(\tau)} h^2(\tau) f(\tau'_i, \tau''_j, \tau) \right),$$

де $\tau'_{i+1} = \tau'_i + h(\tau)$; $\tau''_{i+1} = \tau''_i + h(\tau)$.

Похибка чисельного інтегрування знайдена за формулою Тейлора розкладом в ряд самого інтеграла з використанням теореми Барроу:

$$R \approx \frac{h(\tau)}{2}\left(\iint\limits_{(V_{quad_{el}})} F'_{\tau'}(\tau, \tau', \tau'') d\tau' d\tau'' + \iint\limits_{(V_{quad_{el}})} F'_{\tau''}(\tau, \tau', \tau'') d\tau' d\tau'' \right) +$$

$$+ \frac{h^2(\tau)}{24}\left(\iint\limits_{(V_{\text{triangular}_{el}})} F''_{\tau'\tau'}(\tau, \tau', \tau'') d\tau' d\tau'' + \iint\limits_{(V_{\text{triangular}_{el}})} F''_{\tau''\tau''}(\tau, \tau', \tau'') d\tau' d\tau'' \right),$$

де $(V_{quad_{el}})$, $(V_{triangular_{el}})$ - області, що займають квадратні і трикутні елементи відповідно.

Метод застосований для знаходження концентрації частинок забруднення, сорбованих на скелеті тришарового фільтра води.

Структура розв'язків для функцій концентрацій домішкової речовини, сорбованої на скелеті тіла має вигляд

$$c_2^{(j)}(x, \tau) = F_j(x) - \frac{2d_j}{\delta x} e^{\frac{v_j(x - x')}{2d_j}} \sum_{m=1}^{\infty} B_m(x) \int\limits_0^{\tau}\int\limits_0^{\tau'} g(\tau'') f(\tau' - \tau'') d\tau'' d\tau',$$

де $F_j(x)$, $B_m(x)$, $g(\tau'')$, $f(\tau' - \tau'')$ - неперервні функції своїх аргументів.

Проаналізовано довговічність роботи тришарового фільтра. Якщо відоме максимальне значення концентрації частинок домішкової речовини, спроможної адсорбуватися скелетом тіла, в кожному структурному макроелементі N_j ($j = \overline{1,3}$), тоді часи насичення $\tau_*^{(j)}(x)$ в макроелементі j знаходимо, розв'язуючи нелінійне функціональне рівняння на відрізку невідомої довжини

$$\sup_{x\in\Omega_j} c_2^{(j)}\left(x, \tau_*^{(j)}\right) = N_j . \qquad (11)$$

Для розв’язання рівняння (11) розвинуто метод на основі композиції методу простої ітерації та модифікації методу дихотомії. Його алгоритм наведено на рис. 12.

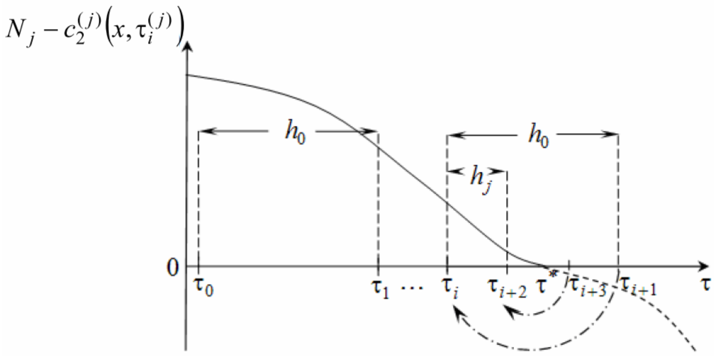

Рис. 12. Схема методу розв’язання нелінійного рівняння (11)

Метод застосований до розв’язання рівняння (11) за умови, коли найменш інтенсивні сорбційні процеси відбуваються у третьому пористому шарі, і концентрації насичення для різних макроелементів є приблизно однаковими.

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 добреструктурованої частини системи та некласичного статистичного підходу до моделювання невідомої граничної умови на основі експериментальних даних. Його схема наведена на рис. 13.

Розглянуто шар, що складається з трьох пористих підшарів, в якому протікає процес конвективної дифузії, що супроводжується сорбцією на скелет. На нижній границі тіла відомі експериментальні дані щодо концентрації забруднення в певні моменти часу, проте проміжок, на якому визначена шукана функція є невідомим.

Статистичний підхід складається з таких етапів:

Етап 1. Вибір методу побудови функції на нижній границі тіла за значеннями шуканої функції $F(t)$ в точках t_i. Побудова інтерполяційної або апроксимаційної або екстраполяційної функції.

Етап 2. Встановлення оцінки зверху шуканої функції на границі тіла. Для цього та визначення часу насичення t_p розв’язуємо рівняння конвективної дифузії без врахування сорбційних процесів в області Ω_j:

$$\frac{\partial c_{1est}^{(j)}(t,x)}{\partial t} = d_j \frac{\partial^2 c_{1est}^{(j)}(t,x)}{\partial x^2} - v_j \frac{\partial c_{1est}^{(j)}(t,x)}{\partial x}, \ j = 1,2,3,$$

де $c_{1est}^{(j)}(t,x)$ - концентрація домішки у розчині, які мігрують за відсутності сорбційних процесів, в j-му макроелементі, за граничної умови на потік

$$\left.\frac{\partial c_{1est}^{(3)}(t,x)}{\partial x}\right|_{x=x_0} = c_* \equiv const ,$$

де $c_{1est}^{(3)}(t,x)$ - функція концентрації домішок у третьому підшарі, яка є розв'язком спрощеної задачі.

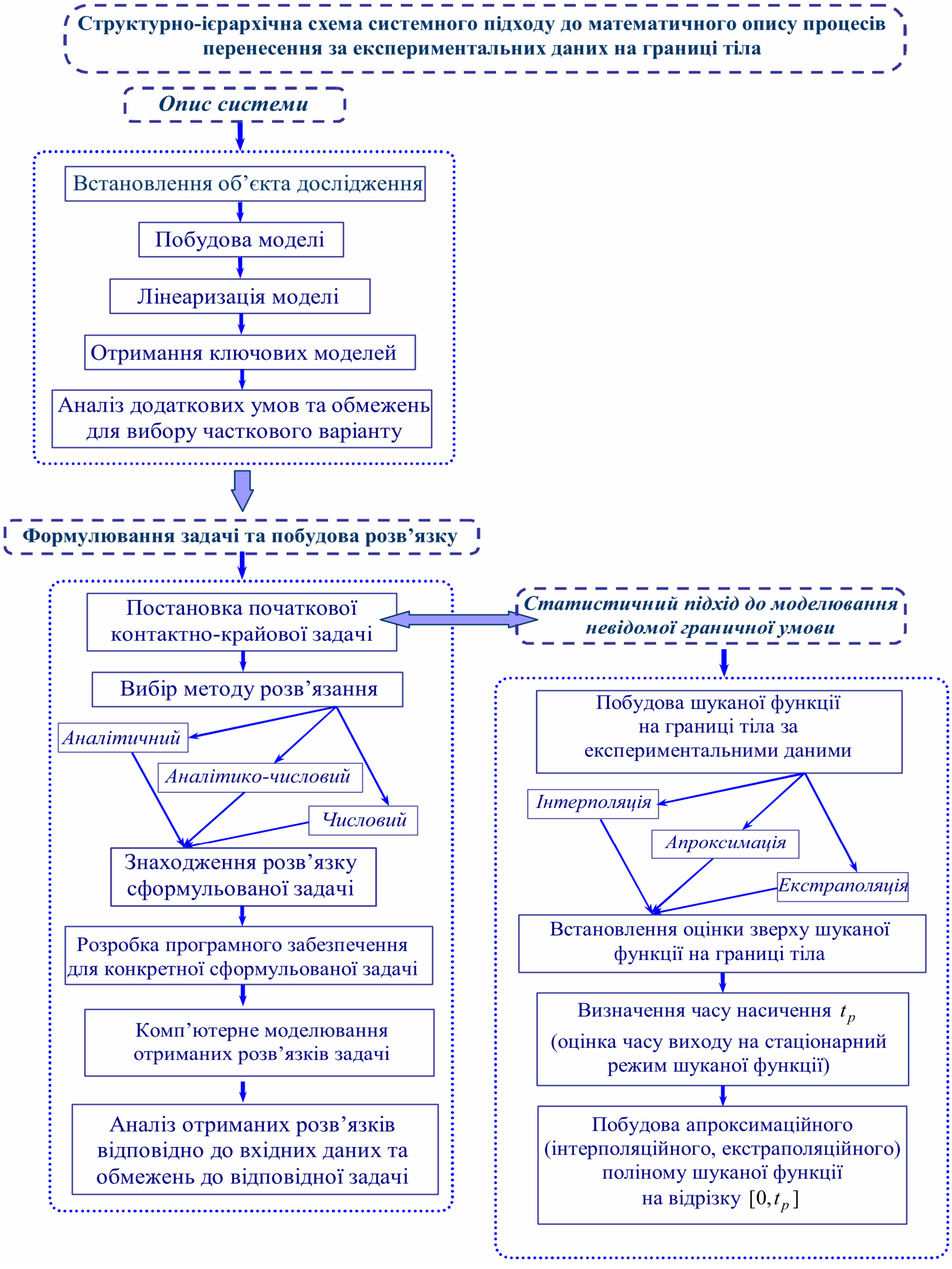

Рис. 13. Структурно-ієрархічна схема системного підходу

Етап 3. Визначення часу насичення t_p (оцінка часу виходу на стаціонарний режим):

$$\min_{t>0}\left(\left|c_{1est}^{(3)}(t,x_0)-c_{1est}^{(3)}(t_p,x_0)\right|<\varepsilon\right).$$

Етап 4. Побудова інтерполяційного (апроксимаційного, екстраполяційного) многочлена 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.

$$c_1^{(3)}(t,x)\Big|_{x=x_0} = F(t,t_p).$$

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. 1.

Таблиця 1. Дані вимірювань концентрації забруднення на нижній поверхні фільтра

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

Розрахунок часу виходу на стаціонарний режим за експериментальними даними, наведеними в табл. 1, і наступними значеннями 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, подано в табл. 2.

Таблиця 2. Час виходу концентрації на стаціонарний режим

$\lim\limits_{\tau\to\infty} \bar{g}_2(\tau)$	d_3	n_h	τ_p
0.03	0.1	14	0.290654
0.3	0.01	27	0.313259
3	0.001	38	0.336567

v_3	n_h	τ_p
0.2	16	0.291702
0.4	31	0.319658
0.6	42	0.336901

Встановлено, що чим менша швидкість конвективного перенесення, тим скоріше досягається концентрація насичення і тим швидше потрібно припиняти експериментальні вимірювання.

У сьомому розділі побудована математична модель конвективної дифузії забрудненого розчину у фільтрі води з пом'якшенням жорсткої води за експериментальних даних на границі на основі балансових співвідношення маси компонент системи. 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, 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.

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. 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. Також 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.

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.

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. 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 раніше настає такий інтервал.

Для малих часів практично не відчутний вплив заданих експериментальних даних як для якісної, так і недуже 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 недуже 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 багатофаз-

них 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 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, невзаємодіючих потоків, дифузії в середовищі з пастками, гетеродифузії двома шляхами та гетеродифузії в середовищі з пастками за каскадного розпаду часинок.

3. Розроблено системний підхід 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 некласичного 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 контактно-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 накопичу-

ються, до значень, які в декілька разів перевищують значення концентрації на поверхні, де діє джерело маси.

6. Для розв'язання нелінійних функціональних рівнянь на відрізку 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 кількість кроків ітераційного процесу, необхідних 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 наступає раніше.

9. Для всіх сформульованих і розв'язаних у роботі задач розроблено розрахункові схеми, побудовані алгоритми, спроєктовано архітектури програмних комплексів 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 багатошарові засипні фільтри води і фільтрів механічного очищення та хімічного пом'якшення води, утримуючих елементів інженерних конструкцій і сховищ техногенних забруднень, тощо.

СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

Монографії

1. *Чапля Є.Я. Чернуха О.Ю., Білущак Ю.І.* Математичне моделювання гетеродифузійних процесів при розпаді частинок. – Львів: Растр-7, 2018. – 240 с.

2. Математичне моделювання нерівноважних процесів у складних системах / *Білущак 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 базах 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., Білущак 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., Білущак 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., Білущак 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., Білущак 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., Білущак 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., Білущак 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 disrtibution of layered inclusions // Task Quarterly. – 2016. – Vol. 20, No. 3. – P.295-334.

22. *Білущак 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., Білущак Ю. І., Чапля Є. Я., Чернуха О. Ю.* Математичне моделювання та прогнозування поширення забруднень у грунті // Комунальне господарство міст. Серія: Безпека життя і діяльності – наука, освіта, практика. – 2015. – Вип. 120 (1). – С 115-121.

24. *Білущак 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. *Білущак 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. *Білущак 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

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. *Білущак 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., Білущак Ю., Білущак 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 «ΛΌΓΟΣ», 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. *Білущак 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. *Білущак 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., Білущак 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 Lenghth 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., Білущак 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.

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. *Білущак 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., Білущак 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., Білущак 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., Білущак 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 «ІПСА» НУТУ «КПІ», 2018. - С. 98-99.

47. *Чернуха О. Ю., Білущак 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., Білущак 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., Білущак 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.

50. *Чапля Є.Я., Чернуха О.Ю., Білущак 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., Білущак Ю., Чучвара А.* Модель гетеродифузії двома шляхами при поверхневому забрудненні грунту 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. *Білущак Ю.І., Чернуха О.Ю., Чучвара А.Є.* Математичний опис конвективної дифузії двокомпонентного розчину у багатошарових каркарсно-насипних 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., Білущак 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., Білущак Ю., Чучвара А.* Моделювання та прогнозування поширення радіоактивних забруднень у грунтах. // Міжнародна коференція "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., Білущак 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., Білущак 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. *Білущак 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., Білущак Ю.* Перенесення радіонуклідів грунтовими 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. *Білущак 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.,Білущак 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, пактика». – Київ: «Темпо», 2016. – С. 312-316.

62. *Білущак 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., Білущак 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. *Білущак 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.Y., Davydok A.Y., Goncharuk V.Y.* Mathematical model for mass flow in a strip with randomly disposed sublayer of stochastical thickness // System analysis and information technologies: 18-th International conference SAIT 2016. Proceedings. – Kyiv: ESC "IASA" NTUU "KPI", 2016. – P. 24-25.

66. *Білущак 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., Білущак Ю. І., Чапля Є. Я., Чернуха О. Ю.* Математичне моделювання міграції забруднень у грунті 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., Білущак Ю.І.* Процеси масоперенесення в багатокомпонентному середовищі за каскадного розпаду частинок // Матеріали наукoв-технічної конференції «Мікро- та нанонеоднорідні матеріали: моделі та експеримент» (INTERPOR'15). – Львів: В-во Львівської політехніки, 2015. – С. 79-80.

70. *Білущак 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. *Білущак 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. *Білущак 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 «ІПСА» НТУУ «КПІ», 2014. – С. 57-58.

73. *Чернуха О.Ю., Гончарук В.Є., Білущак 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. *Білущак Ю.* Пакет програм для комп'ютерного моделювання дифузії домішок у випадково неоднорідній шаруватій структурі //Матеріали IX Міжнародної наукової конференція «Математичні проблеми механіки неоднорідних структур» (15-19 вересня 2014 р. Львів) ІППММ НАНУ, 2014. – С. 17-19.

75. *Гончарук В.Є, Білущак Ю.І., Чапля Є.Я., Чернуха О.Ю.* Прогнозування поширення забруднення у грунті 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., Білущак 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. *Білущак 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., Білущак 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.

АНОТАЦІЯ

Білущак 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 розвиненню 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. Сформульовано основні співвідношення математичної моделі термомеханогетеродифузії за каскадного розпаду дифундуючих речовин у багатокомпонентному середовищі з пастками; проведена аксіоматизація базових положень континуально-термодинамічного модельного опису процесів перенесення. За умовами локальної термодинамічної рівноваги між станами отримано часткові математичні моделі масоперенесення з ефективними характеристиками, які враховують каскадний розпад мігруючих частинок та особливості мікроструктури тіла. На основі розвинених моделей сформульовано нові постановки 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. Побудовано математичні моделі конвективної дифузії забруднення у тришаровому фільтрі води та моделі механічного очищення та хімічного пом'якшення води в умовах невизначеності засипних фільтрів води. Розроблено системний підхід до математичного опису процесів перенесення в складних і складених системах за наявності експериментальних даних на одній з границь тіла, який грунтується на синтезі класичного підходу математичного моделювання зв'язаних процесів різної фізичної природи в неоднорідних середовищах для добре структурованої частини системи та некласичного статистичного підходу до моделювання невідомої граничної умови на основі експериментальних даних. Розвинено метод 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. Здійснено проєктування архітектури та розроблено програмні комплекси для кількісного дослідження поширення домішкових речовин в тілах з мікроструктурою, що

моделюють захисні шари технічних конструкцій, сховищ агресивних домішок, промислові фільтри, тощо.

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 original nonlinear relationships of the mathematical model of thermomechanoheterodiffusion in a medium with traps accompaning the cascade decay of impurity particles were 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 was proposed and the key system of equations for thermomechanoheterodiffusion in a multicomponent body was 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 were obtained under conditions of thermodynamic equilibrium with respect to the processes of intertransition of particles between different states. 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 were investigated. For the specific scheme of decay, the coupled cascade-type initial-boundary value problems were 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 were constructed by an iterative procedure using Green's functions. 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 were investigated. The concentrations and mass fluxes of migrating components were 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, was determined. 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 were 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 were 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 was defined and its main regularities were established. Based on the obtained formulas, the Geterpas software package was developed for simulation of mass transfer processes in a body with traps under the cascade decay of impurities. Two approaches to the mathematical modeling of transport processes in complex and composite, including porous, bodies were developed. 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 was developed. This approach was applied to the mathematical description of processes in three-layered water filters. The method of numerical double integration with variable upper limits was developed and a new algorithm was constructed for solving a nonlinear functional equation on an interval of unknown length. The 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 was constructed. 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.

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.