

# Математичне Моделювання Дифузії у Середовищі з Пастками за Каскадного Розпаду Домішок

Ю.І Білушак

Відділ математичного моделювання нерівноважних процесів  
Центр математичного моделювання  
Інституту прикладних проблем механіки і математики ім. Я.С. Підстригача НАН України  
Львів, Україна  
byixx13@gmail.com

## Mathematical Modelling Diffusion in a Medium with Traps under Cascade Decay of Admixture

Y. Bilushchak

Department of mathematical modeling nonequilibrium processes  
Centre of Mathematical Modeling of Pidstryhach Institute for Applied Problems of Mechanics and Mathematics,  
Ukrainian Academy of Sciences  
Lviv, Ukraine  
byixx13@gmail.com

**Анотація**—Запропонована математична модель масоперенесення у середовищі з пастками за каскадного розпаду домішок, в рамках якої концентрація частинок на певному кроці розпаду є джерелом маси розпадної речовини, яка дифундує і сорбується, на наступному кроці. Розв'язки крайових задач дифузії каскадного типу побудовані за ітераційною процедурою з використанням функцій Гріна. Розроблений пакет програм для комп'ютерного моделювання дифузійних процесів у тілі з пастками за каскадного розпаду домішкових речовин.

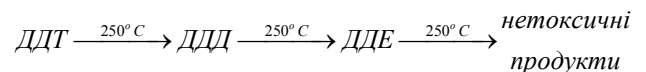
**Abstract**—It is proposed the mathematical model of mass transfer in a medium with traps under cascade decay of admixture with in the scope of which the concentration of particles at certain step of decay is the source of the mass of decaying substance, diffusing and being sorbed at the next step. Solutions of initial-boundary value problems of diffusion of cascade type constructed by the iterative procedure with using Green's functions. The software package is developed for simulation of diffusion processes in the body with traps under cascade decay of admixture substance.

**Ключові слова**—математичне моделювання; дифузія; сорбція-десорбція; середовище з пастками; каскадний розпад; функція Гріна; комп'ютерне моделювання

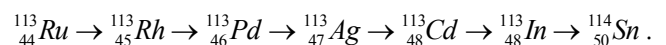
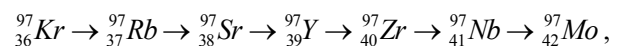
**Keywords**—mathematical modelling; diffusion; sorption-desorption; medium with traps; cascade decay; Green function; simulation

### I. ВСТУП

Важливою проблемою сьогодення є прогнозування поширення розпадних токсичних забруднень у природному середовищі дифузійним шляхом. Прикладом таких агресивних субстанцій можуть бути пестициди, гербіциди, інсектициди, а також радіонукліди. Так, наприклад, схема розпаду дихлордифенілтрихлорметилметану (ДДТ) є



тут ДДД – дихлордифенілдіхлоретан, ДДЕ – дихлордифенілдіхлоретилен. Період піврозпаду ДДТ – 12–16 років [1, 2]. У випадку радіонуклідів відомі схеми розпаду [3, 4], наприклад:



Причому у результаті розпаду радіоактивних речовин можуть виникати як більш, так і менш токсичні речовини. Так, у результаті розпаду плутонію-241 з періодом піврозпаду 14,4 років утворюється дуже токсичний америцій-241 з періодом піврозпаду 432,6 років. В той же час ре-

зультатом розпаду дуже шкідливого стронцію-90 з періо-

дом піврозпаду 28,8 років є радіоактивний ітрій-90 з періодом піврозпаду 64 години. Зазначимо, що в літературі такі розпади субстанцій часто називають каскадними [3].

Актуальність розгляду явища дифузії в середовищах пастками обумовлена його застосуванням в таких галузях як фізика кристалів та напівпровідників, біофізика, наноматеріали, економіка, екологія тощо [5, 6]. Особливо важливе значення дослідження моделей дифузії у середовищах з пастками набуває при розв'язанні задач, пов'язаних з міграцією домішкових речовин у геологічних формаціях [7], оскільки на сьогодні ізоляцію найтоксичніших відходів вирішують шляхом глибинного підземного захоронення, а за великих часів можливий вихід радіоактивного забруднення за межі інженерних бар'єрів. При цьому основною моделлю для прогнозування перенесення домішок є модель дифузії у середовищах з пастками [7].

У даній роботі запропонована математична модель масоперенесення у багатокомпонентному середовищі з пастками, в рамках якої концентрація частинок на певному кроці розпаду є джерелом маси розпадної речовини, яка дифундує, на наступному кроці.

## II. МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ

Приймаємо, що довільно вибрана фізично мала область середовища складається з твердої фази, в об'єм якої можуть проникати домішкові частинки, та порового простору, в якому дифундує домішкова речовина. Причому коефіцієнт дифузії домішки в об'ємі скелету настільки малий у порівнянні з коефіцієнтом дифузії у поровому просторі, що тверду фазу можна розглядати як пастки для домішкових частинок. Приймаємо, що в процесі такого масоперенесення скелет не деформується, і пористість залишається сталою (не враховуються зміни, пов'язані із сорбцією домішкової речовини).

Домішкова речовина  $\mathbf{K}^{(0)}$  з поверхні поступає у тіло  $\mathbf{K}^*$  і дифундує у поровому просторі, супроводжуючись процесами сорбції-десорбції. Частина  $\mathbf{K}^{(0)}$  розпадається і утворюються речовини  $\mathbf{K}^{(1)}$  і  $\mathbf{K}^{(N)}$ . Нехай частинки речовини  $\mathbf{K}^{(N)}$  є нерозпадними (нешкідливими). Субстанція  $\mathbf{K}^{(1)}$  теж розпадається і утворює речовину  $\mathbf{K}^{(2)}$  (яка у свою чергу розпадається) та нерозпадні частинки, які відносимо до  $\mathbf{K}^{(N)}$ , і т.п. Причому нова речовина на кожному етапі утворюється в обох станах – у поровому просторі і пастках з однаковим коефіцієнтом інтенсивності розпаду, вона дифундує, може сорбуватися і десорбуватися.

Вихідні співвідношення математичної моделі багатокомпонентної дифузії за каскадного розпаду мігруючих частинок у середовищі з пастками сформульовані з використанням континуально-термодинамічного підходу механіки твердих розчинів [8]. Кожній компоненті ставиться у відповідність континуум, з допомогою якого описується кінематичні та деформаційні властивості компонент, а також формулюються балансові співвідношення, які відображають закони збереження маси, імпульсу, енергії та

ентропії. З використанням концепції локальної термоди-

намічної рівноваги будуються рівняння стану та кінетичні рівняння. Вибравши в якості розв'язуючих функцій концентрації домішкових компонент, вектор переміщення, густину та температуру тіла, сформульовано ключову систему рівнянь, яка в подальшому лінеаризується.

У даному випадку деформація середовища і теплові процеси не розглядаються, і за ізотермічних умов, нехтуючи конвективними складовими масоперенесення та деформацією [8], отримаємо наступні рівняння дифузії у середовищі з пастками за каскадного розпаду мігруючих частинок на  $i$ -му кроці розпаду:

для  $i = 0$

$$\frac{\partial c_1^{(0)}}{\partial t} = D^{(0)} \Delta c_1^{(0)} - k_1^{(0)} c_1^{(0)} + k_2^{(0)} c_2^{(0)} - \lambda^{(1)} c_1^{(0)} - \lambda^{(0N)} c_1^{(0)},$$

$$\frac{\partial c_2^{(0)}}{\partial t} = k_1^{(0)} c_1^{(0)} - k_2^{(0)} c_2^{(0)} - \lambda^{(1)} c_2^{(0)} - \lambda^{(0N)} c_2^{(0)};$$

для  $i = \overline{1, N-1}$

$$\frac{\partial c_1^{(i)}}{\partial t} = D^{(i)} \Delta c_1^{(i)} - k_1^{(i)} c_1^{(i)} + k_2^{(i)} c_2^{(i)} + \lambda^{(i-1)} c_1^{(i-1)} - \lambda^{(i+1)} c_1^{(i)} - \lambda^{(iN)} c_1^{(i)},$$

$$\frac{\partial c_2^{(i)}}{\partial t} = k_1^{(i)} c_1^{(i)} - k_2^{(i)} c_2^{(i)} + \lambda^{(i-1)} c_2^{(i-1)} - \lambda^{(i+1)} c_2^{(i)} - \lambda^{(iN)} c_2^{(i)};$$

для  $i = N$

$$\frac{\partial c_1^{(N)}}{\partial t} = D^{(N)} \Delta c_1^{(N)} - k_1^{(N)} c_1^{(N)} + k_2^{(N)} c_2^{(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} \lambda^{(iN)} c_1^{(i)},$$

$$\frac{\partial c_2^{(N)}}{\partial t} = k_1^{(N)} c_1^{(N)} - k_2^{(N)} c_2^{(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} \lambda^{(iN)} c_2^{(i)}. \quad (1)$$

Тут  $c_j^{(i)}$  - концентрація домішкової речовини, яка утворилася на  $i$ -му етапі розпаду, у стані  $j$  ( $i = \overline{0, N}$ ;  $j = 1, 2$ );  $D^{(i)}$  - коефіцієнт дифузії частинок для етапу  $i = \overline{0, N}$ ;  $k_1^{(i)}$  і  $k_2^{(i)}$  - коефіцієнти інтенсивності сорбції і десорбції,  $\lambda^{(i+1)}$  і  $\lambda^{(iN)}$  - коефіцієнти інтенсивності розпаду речовини на  $i$ -му кроці, що відповідають утворенню нової речовини на  $(i+1)$ -му етапі та нерозпадної речовини для  $i = N$ . Зазначимо, що одиниці вимірювання коефіцієнтів інтенсивності розпаду та сорбції-десорбції співпадають [ $c^{-1}$ ].

Приведемо системи рівнянь (1) до безрозмірного вигляду. З цією метою введемо нові змінні [9]

$$t = k_2^{(0)} \tau; \quad \xi^{(\alpha)} = (k_2^{(0)} / D^{(0)})^{1/2} x^{(\alpha)}, \quad \alpha = \overline{1, 3}. \quad (2)$$

Тоді отримаємо  
для  $i = 0$

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_1^{(0)}}{\partial \tau} &= d^{(0)} \Delta_\xi c_1^{(0)} - a_1^{(0)} c_1^{(0)} + a_2^{(0)} c_2^{(0)}, \\ \frac{\partial c_2^{(0)}}{\partial \tau} &= a_3^{(0)} c_1^{(0)} - a_4^{(0)} c_3^{(0)}; \end{aligned} \quad (3a)$$

для  $i = \overline{1, N-1}$

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_1^{(i)}}{\partial \tau} &= d^{(i)} \Delta_\xi c_1^{(i)} - a_1^{(i)} c_1^{(i)} + a_2^{(i)} c_2^{(i)} + a_{\lambda_1}^{(i-1)} c_1^{e(i-1)}, \\ \frac{\partial c_2^{(i)}}{\partial \tau} &= a_3^{(i)} c_1^{(i)} - a_4^{(i)} c_2^{(i)} + a_{\lambda_2}^{(i-1)} c_2^{(i-1)}; \end{aligned} \quad (3б)$$

для  $i = N$

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_1^{(N)}}{\partial \tau} &= d^{(N)} \Delta_\xi c_1^{(N)} - a_1^{(N)} c_1^{(N)} + a_2^{(N)} c_2^{(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda_1}^{(iN)} c_1^{(i)}, \\ \frac{\partial c_2^{(N)}}{\partial \tau} &= a_3^{(N)} c_1^{(N)} - a_4^{(N)} c_2^{(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda_2}^{(iN)} c_2^{(i)}. \end{aligned} \quad (3в)$$

де

$$\begin{aligned} \Delta_\xi &= \vec{\nabla}_\xi \cdot \vec{\nabla}_\xi, \quad \vec{\nabla}_\xi = \vec{i}^{(\alpha)} \partial / \partial \xi^{(\alpha)}, \quad d^{(i)} = D^{(i)} / D^{(0)}, \\ a_1^{(i)} &= (k_1^{(i)} + \lambda_1^{(i+1)} + \lambda_1^{(iN)}) / k_2^{(0)}, \quad a_3^{(i)} = k_1^{(i)} / k_2^{(0)}, \\ a_{\lambda_j}^{(i-1)} &= \lambda_j^{(i-1)} / k_2^{(0)}, \quad a_{\lambda_j}^{(iN)} = \lambda_j^{(iN)} / k_2^{(0)}, \quad i = \overline{0, N}, \quad j = 1, 2. \end{aligned}$$

Зазначимо, що безрозмірні змінні (2) стискають часову вісь і розтягують просторові. При цьому не залежать від геометричних розмірів тіла або характерних розмірів структурних неоднорідностей.

### III. КРАЙОВА ЗАДАЧА ДИФУЗІЇ У СЕРЕДОВИЩІ З ПАСТКАМИ КАСКАДНОГО ТИПУ

Нехай домішкова речовина мігрує в шарі безрозмірної товщини  $\xi_0$  (рис. 1), причому в тілі наявні пастки для домішкових частинок. Домішка може розпадатися, утворюючи нову речовину. Такі процеси описують рівняння (3) для одновимірного за просторовою координатою випадку.

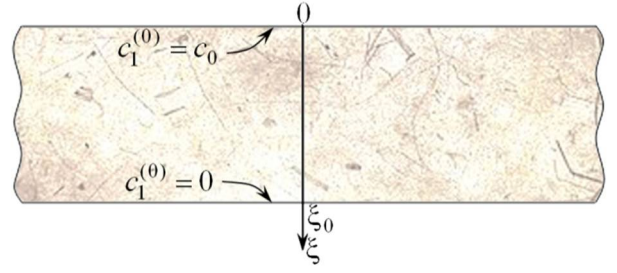


Рис. 1. Шар товщини  $\xi_0$ , в якому мігрує домішкова речовина

Приймаємо, що в початковий момент часу в тілі відсутня домішкова речовина:

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

Для часів  $\tau > 0$  на межі шару  $\xi = 0$  діє стале джерело маси для речовини  $\mathbf{K}^{(0)}$  і частинки з поверхні можуть попадати лише у поровий простір. На границі  $\xi = \xi_0$  підтримується нульове значення концентрації  $c_1^{(0)}$ . Також приймаємо, що джерелом маси для речовини  $\mathbf{K}^{(i)}$  ( $i = \overline{1, N}$ ) є розпад речовини  $\mathbf{K}^{(i-1)}$ . Тоді маємо такі граничні умови:

$$c_1^{(0)}(\xi, \tau) \Big|_{\xi=0} = c_0 \equiv const, \quad c_1^{(0)}(\xi, \tau) \Big|_{\xi=\xi_0} = 0; \quad (5a)$$

$$c_1^{(i)}(\xi, \tau) \Big|_{\xi=0} = 0, \quad c_1^{(i)}(\xi, \tau) \Big|_{\xi=\xi_0} = 0, \quad i = \overline{1; N}. \quad (5б)$$

Таким чином ми отримала крайову задачу (3)-(5) каскадного типу.

Розв'язок крайової задачі для кроку  $i = 0$  розпаду дифундуючої речовини, тобто задачі (3a), (4), (5a), знаходимо з допомогою інтегральних перетворень Лапласа за часом і Фур'є [9]. У результаті одержимо

концентрація домішок у поровому просторі

$$\begin{aligned} \frac{1}{c_0} c_1^{(0)}(\xi, \tau) &= 1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{2\tilde{B}_1^2}{\xi_0 a_4^{(0)} d^{(0)}} \left[ 1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\text{sh } \eta^{(0)}(\xi_0 - \xi)}{\text{sh } \eta^{(0)} \xi_0} \right] + \frac{2}{\xi_0} \times \\ &\times \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\sin y_k \xi}{y_k (s_1 - s_2)} \left\{ \left( s_1 + \tilde{A}_1 + \frac{\tilde{B}_1}{s_1} \right) e^{s_1 \tau} - \left( s_2 + \tilde{A}_1 + \frac{\tilde{B}_1}{s_2} \right) e^{s_2 \tau} \right\}; \end{aligned} \quad (6a)$$

концентрація частинок у пастках

$$\begin{aligned} \frac{1}{c_0} c_2^{(0)}(\xi, \tau) &= \frac{2a_3^{(0)} \tilde{B}_1}{\xi_0 a_4^{(0)2} d^{(0)2}} \frac{\text{sh } \eta^{(0)}(\xi_0 - \xi)}{\text{sh } \eta^{(0)} \xi_0} + \frac{2}{\xi_0} a_3^{(0)} \times \\ &\times \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\sin y_k \xi}{y_k (s_1 - s_2)} \left\{ \left( \frac{\tilde{B}_2}{s_1} \right) e^{s_1 \tau} - \left( \frac{\tilde{B}_2}{s_2} \right) e^{s_2 \tau} \right\}; \end{aligned} \quad (6б)$$

сумарна концентрація дифундуючих частинок  
 $\tilde{c}^{(0)}(\xi, \tau) = c_1^{(0)}(\xi, \tau) + c_2^{(0)}(\xi, \tau)$  у тилі з пастками

$$\frac{1}{c_0} \tilde{c}^{(0)}(\xi, \tau) = 1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{2\tilde{B}_1^2}{\xi_0 a_4^{(0)} d_0^{(0)}} \times$$

$$\times \left[ 1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \left( 1 - \frac{a_3^{(0)}}{d^{(0)} a_4^{(0)} \tilde{B}_1} \right) \frac{\text{sh } \eta^{(0)}(\xi_0 - \xi)}{\text{sh } \eta^{(0)} \xi_0} \right] + \frac{2}{\xi_0} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\sin y_k \xi}{y_k (s_1 - s_2)} \times$$

$$\times \left\{ \left( s_1 + \tilde{A}_1 + \frac{\tilde{B}^{(0)}}{s_1} \right) e^{s_1 \tau} - \left( s_2 + \tilde{A}_1 + \frac{\tilde{B}^{(0)}}{s_2} \right) e^{s_2 \tau} \right\}, \quad (6\text{в})$$

$$\text{тм} \Sigma \tilde{B}^{(0)} = a_3^{(0)} \tilde{B}_2 - \tilde{B}_1, \quad \tilde{A}_1 = a_1^{(0)} + a_4^{(0)}, \quad \tilde{B}_1 = a_1^{(0)} a_4^{(0)} - a_3^{(0)} a_2^{(0)},$$

$$\tilde{B}_2 = d_0^{(0)} y_k^2, \quad s_{1,2} = \left[ -\zeta_1 \pm \sqrt{\zeta_1^2 - 4\zeta_2} \right] / 2,$$

$$\zeta_1 = d_0^{(0)} y_k^2 + a_1^{(0)} + a_4^{(0)}, \quad \zeta_2 = a_1^{(0)} a_4^{(0)} - a_3^{(0)} a_2^{(0)} + a_4^{(0)} d_0^{(0)} y_k^2$$

$$, \quad \eta^{(0)} = \sqrt{\tilde{B}_1 / a_4^{(0)} d_0^{(0)}}$$

Зазначимо, що концентрація в пастках є пропорційною не тільки значенню концентрації частинок на границі шару  $c_0$ , але й коефіцієнту інтенсивності сорбції  $a_3^{(0)}$ . Асимптотичні складові концентрацій  $c_1^{(0)}(\xi, \tau)$ ,  $c_2^{(0)}(\xi, \tau)$ ,  $\tilde{c}^{(0)}(\xi, \tau)$  є суттєво нелінійними.

Зауважимо, що в рамках моделі, яка розглядається, концентрація частинок у пастках на границі шару  $\xi = 0$  не дорівнює нулю, і, відповідно, сумарна концентрація дифундуючої речовини на цій межі не дорівнює  $c_0$ :

$$\frac{1}{c_0} c_2^{(0)}(\xi, \tau) \Big|_{\xi=0} = \frac{2a_3^{(0)} \tilde{B}_1}{\xi_0 a_4^{(0)2} d^{(0)2}}; \quad \frac{1}{c_0} \tilde{c}^{(0)}(\xi, \tau) \Big|_{\xi=0} = 1 + \frac{2\tilde{B}_1 a_3^{(0)}}{\xi_0 a_4^{(0)2} d^{(0)2}}.$$

Це означає, що домішкова речовина може накопичуватись у пастках і на границі шару  $\xi = 0$ . У той же час на границі  $\xi = \xi_0$  концентрації розпадних частинок (6а)-(6в) дорівнюють нулю.

Для інших кроків каскадного розпаду мігруючих речовин ( $i = \overline{1, N-1}$ ) розв'язок крайових задач (3б), (4), (5б) подамо через відповідні функції Гріна:

$$c_1^{(i)}(\xi, \tau) = a_{\lambda 1}^{(i-1)} \int_0^{\tau} \int_0^{\xi_0} G_1^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') c_1^{(i-1)}(\xi', \tau') d\xi' d\tau',$$

$$c_2^{(i)}(\xi, \tau) = a_{\lambda 2}^{(i-1)} \int_0^{\tau} \int_0^{\xi_0} G_2^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') c_2^{(i-1)}(\xi', \tau') d\xi' d\tau', \quad (7)$$

де  $G_1^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')$ ,  $G_2^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')$  - функції Гріна задачі (3б), (4), (5б) для  $i = \overline{1, N-1}$ , тобто є розв'язками наступних крайових задач

$$\frac{\partial G_1^{(i)}}{\partial \tau} - d^{(i)} \frac{\partial^2 G_1^{(i)}}{\partial \xi^2} + a_1^{(i)} G_1^{(i)} - a_2^{(i)} G_2^{(i)} = \delta(\tau - \tau') \delta(\xi - \xi'),$$

$$\frac{\partial G_2^{(i)}}{\partial \tau} - a_3^{(i)} G_1^{(i)} + a_4^{(i)} G_2^{(i)} = \delta(\tau - \tau') \delta(\xi - \xi') \quad (8)$$

за нульових крайових умов

$$G_1^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') \Big|_{\tau=0} = G_2^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') \Big|_{\tau=0} = 0,$$

$$G_1^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') \Big|_{\xi=0} = G_1^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') \Big|_{\xi=\xi_0} = 0, \quad i = \overline{1, N-1}. \quad (9)$$

Розв'язок крайової задачі (8), (9) також шукаємо з допомогою інтегральних перетворень Лапласа і Фур'є [10, 11]. Формули для визначення функцій Гріна  $G_j^{(i)}$  на  $i$ -му кроці розпаду ( $i = \overline{1, N-1}$ ) одержано у вигляді:

$$G_1^{(i)} = \theta(\tau - \tau') \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin(y_n \xi) \sin(y_n \xi')}{s_{1n} - s_{2n}} \times$$

$$\times \left[ (s_{1n} + \bar{A}_1^{(i)}) e^{s_{1n}(\tau - \tau')} - (s_{2n} + \bar{A}_1^{(i)}) e^{s_{2n}(\tau - \tau')} \right].$$

$$G_2^{(i)} = \theta(\tau - \tau') \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin(y_n \xi) \sin(y_n \xi')}{s_{1n} - s_{2n}} \times$$

$$\times \left[ (s_{1n} + \bar{A}_2^{(i)}) e^{s_{1n}(\tau - \tau')} - (s_{2n} + \bar{A}_2^{(i)}) e^{s_{2n}(\tau - \tau')} \right]. \quad (10)$$

де  $\bar{A}_1^{(i)} = a_{33}^{(i)} + a_{23}^{(i)}$ ,  $\bar{A}_2^{(i)} = d_0^{(i)} y_n^2 + a_{11}^{(i)} + a_{31}^{(i)}$ .

Отже, знайшовши функцію Гріна за формулою (10) і визначивши концентрацію розпадних домішкових частинок на кроці  $i-1$ , за співвідношеннями (7) ми знайдемо концентрацію розпадної речовини для  $i = \overline{1, N-1}$ .

Для випадку  $i = N$  (нерозпадні домішки) процес масоперенесення описується задачею (3в), (4), (5б). Її розв'язок також подамо через відповідні функції Гріна

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

$$c_2^{(N)}(\xi, \tau) = \int_0^{\tau} \int_0^{\xi_0} G_2^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 2}^{(iN)} c_2^{(i)}(\xi', \tau') d\xi' d\tau', \quad (11)$$

де  $G_j^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')$  ( $j=1,2$ ) - функції Гріна задачі (3в), (4), (5б) і задовольняють крайову задачу з точковим джерелом

$$\frac{\partial G_1^{(N)}}{\partial \tau} - d^{(N)} \frac{\partial^2 G_1^{(N)}}{\partial \xi^2} + a_1^{(N)} G_1^{(N)} - a_2^{(N)} G_2^{(N)} = \delta(\tau - \tau') \delta(\xi - \xi')$$

$$\frac{\partial G_2^{(N)}}{\partial \tau} - a_3^{(N)} G_1^{(N)} + a_4^{(N)} G_2^{(N)} = \delta(\tau - \tau') \delta(\xi - \xi'); \quad (12)$$

$$G_1^{(N)}|_{\tau=0} = G_2^{(N)}|_{\tau=0} = G_1^{(N)}|_{\xi=0} = G_1^{(N)}|_{\xi=\xi_0} = 0. \quad (13)$$

Розв'язок крайової задачі (12), (13) має вигляд

$$G_1^{(N)} = \theta(\tau - \tau') \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin(y_n \xi) \sin(y_n \xi')}{s_{1n} - s_{2n}} \times \\ \times [(s_{1n} + \bar{A}_1^{(N)}) e^{s_{1n}(\tau - \tau')} - (s_{2n} + \bar{A}_1^{(N)}) e^{s_{2n}(\tau - \tau')}] , \\ G_2^{(N)} = \theta(\tau - \tau') \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin(y_n \xi) \sin(y_n \xi')}{s_{1n} - s_{2n}} \times \\ \times [(s_{1n} + \bar{A}_2^{(N)}) e^{s_{1n}(\tau - \tau')} - (s_{2n} + \bar{A}_2^{(N)}) e^{s_{2n}(\tau - \tau')}] . \quad (14)$$

Тоді, послідовно визначивши концентрації на кожному кроці  $i = 0, N-1$  за формулами (11) з урахуванням виразів (14) знайдемо концентрації нерозпадних частинок у тілі.

#### IV. СХЕМА МОДУЛЯ ПАКЕТУ ПРОГРАМ. ЧИСЛОВИЙ АНАЛІЗ

На основі формул (6), (7), (10), а також розв'язків задач (8), (9) і (12), (13) розроблений пакет програм для комп'ютерного моделювання процесів дифузії у тілі з пастками за каскадного розпаду мігруючих частинок. Схему алгоритму модуля пакету для розрахунку концентрацій розпадних мігруючих частинок для всіх  $i = 0, \bar{N}$  наведено на рис. 2.

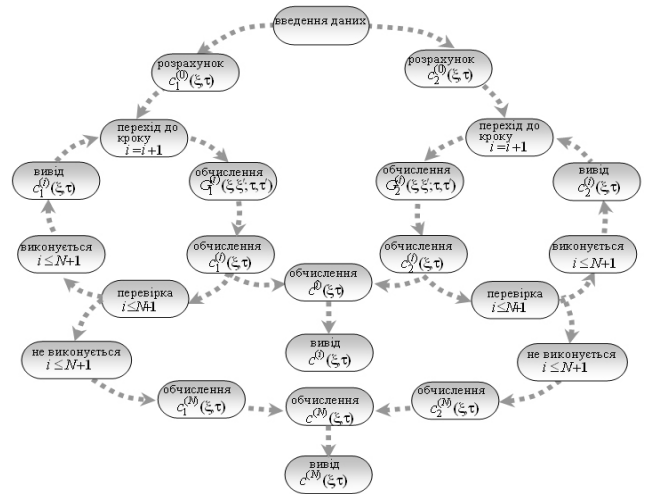


Рис. 2. Схема алгоритму модуля пакету для розрахунку концентрацій домішкових речовин за каскадного розпаду частинок у тілі з пастками

На рис. 3 показано розподіли концентрації домішок на етапі  $i = 0$  у поровому просторі (криві - 1а-3а), у пастках (криві - 1б-3б) та сумарна концентрація частинок (криві - 1-3) в різні моменти часу  $\tau = 0,01; 2; 20$  для коефіцієнта інтенсивності сорбції  $a_3^{(0)} = 5$ . Рис. 4. ілюструє розподіл сумарної концентрації утвореної після розпаду домішки ( $i = 1$ ) при різних значеннях коефіцієнта інтенсивності сорбції  $a_3^{(1)} = 2; 3; 4$  для коефіцієнта дифузії утвореної речовини  $d_0^{(1)} = 0,05$  (криві а) та  $d_0^{(1)} = 20$  (криві б).

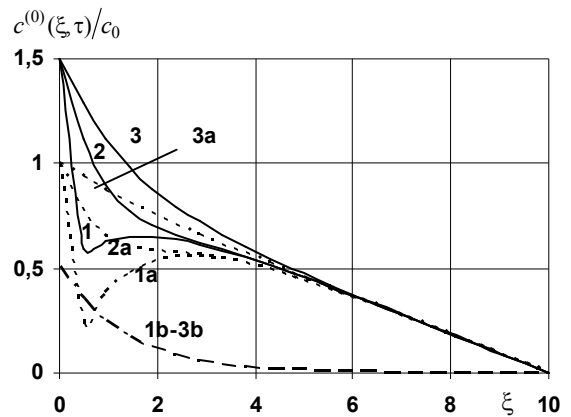


Рис. 3. Розподіли концентрацій  $c_1^{(0)}$ ,  $c_2^{(0)}$  та  $\tilde{c}^{(0)}$  в різні моменти часу

$$c^{(1)}(\xi, \tau)/c_0$$

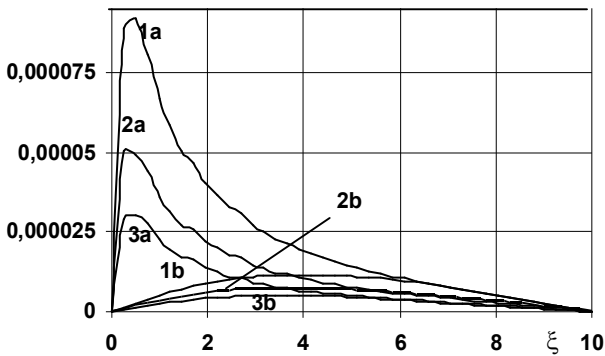


Рис. 4. Розподіли концентрації  $\tilde{c}^{(1)}$  при різних значеннях  $a_3^{(1)}$

Зазначимо, що для етапу  $i = 0$  характерне суттєве при поверхнєве зменшення сумарної концентрації  $\tilde{c}^{(0)}$  для малих часів (крива 1, рис. 3) проте з часом сумарна концентрація зростає в цій області (крива 2, рис. 3) і виходить на усталений режим (крива 3, рис. 3), набуваючи монотонно спадного характеру.

Зауважимо, що поведінка функції сумарної концентрації на етапі розпаду  $i = 1$  суттєво залежить від значення відносного коефіцієнта дифузії  $d_0^{(1)} = D_1 / D_0^{(0)}$  (рис. 4) при цьому для великих  $d_0^{(1)}$  характерно повільне зростання концентрації  $\tilde{c}^{(1)}$  від поверхні з виходом на максимальне значення в середині тіла (криві b, рис. 4). У той же час для  $D_1 < D_0$  спостерігається значне накопичення домішкової речовини  $\mathbf{K}^{(1)}$  в околі поверхні тіла  $\xi = 0$ , де діє джерело маси для речовини  $\mathbf{K}^{(0)}$  (криві a, рис. 4).

## V. Висновки

Таким чином для опису процесів масоперенесення домішкових речовин за їх каскадного розпаду у середовищі з пастками сформована математична модель за континуально-термодинамічним підходом. Сформульовані зв'язані крайові задачі дифузії для тіла з пастками, коли концентрація частинок на певному кроці розпаду є джерелом маси розпадної речовини на наступному кроці,

яка теж дифундує, сорбується, десорбується і розпадається.

Розв'язки відповідних крайових задач каскадного типу побудовані за ітераційною процедурою з використанням функцій Гріна. Таке подання розв'язків дозволяє не тільки проводити кількісний та якісний аналіз концентрацій розпадних домішок, а й знайти їхні потоки маси, як і визначити кількість відповідних речовин, що за певний проміжок часу пройшли через одиницю площі деякої поверхні, наприклад, через нижню границю шару. На основі отриманих формул розроблений пакет програм для комп'ютерного моделювання процесів дифузії у тілі з пастками за каскадного розпаду домішкових речовин. Встановлено вплив вхідних даних на поведінку і значення сумарних концентрацій частинок на всіх етапах каскадного розпаду.

## ЛІТЕРАТУРА REFERENCES

- [1] Н. Н. Мельников, Пестициды. Химия, технология и применение. – М., Химия, 1987. – 712 с.
- [2] Ю. Білуцзяк, В. Гончарук, Є. Чапля, О. Чернуха, Математичне моделювання дифузії домішкових компонент за їх каскадного розпаду // Математичні машини і системи. – 2015. – № 1. – С. 146-155.
- [3] В. Колобашкин, П. Рубцов, П. Ружанский, В. Сидоренко Радиационные характеристики облученного ядерного топлива. – М., Энергоатомиздат, 1983. – 384 с.
- [4] Ю. Білуцзяк, В. Гончарук, О. Чернуха, Математична модель не-взаємодіючих потоків для опису процесів масопереносу двома шляхами за каскадного розпаду частинок // Прикладні проблеми механіки і математики. – 2014. – Вип. 12. – С. 137-145.
- [5] А. Большов, В. Головизнин, А. Дьхне, В. Киселев, П. Кондратенко, В. Семенов, Новые подходы к оценке безопасности захоронений радиоактивных отходов // Извест. РАН. Энергетика. -2004. - №4. - С. 99-108.
- [6] В. Головизнин, В. Киселев, И. Короткин, Ю. Юрков, Прямые задачи неклассического переноса радионуклидов в геологических формациях // Известия РАН. Энергетика. - 2004. - №4. - С. 121-130.
- [7] М. Моисеев, И. Завершинский, Диффузия в среде со случайно распределенными ловушками // Матем. моделирование и краев. задачи. - 2005, часть 2. – С. 185-187.
- [8] Я. Бурак, Є. Чапля, О. Чернуха., Континуально-термодинамічні моделі механіки твердих розчинів. – Київ, Наукова думка. - 2006. – 272 с.
- [9] Є. Я. Чапля, О. Ю. Чернуха, Фізико-математичне моделювання гетеродифузного масопереносу. - Львів: СПОЛЮМ. - 2003. – 128 с.
- [10] Y. Chaplya, O. Chernukha, Y. Bilushchak, Contact initial boundary-value problem of the diffusion of admixture particles in a two-phase stochastically inhomogeneous stratified strip // Journal of Mathematical Sciences. – 2012. – Vol. 183, No 1. – P. 83-99
- [11] И. Снеддон Преобразования Фурье. - М: Изд-во иностр. лит-ры, 1955. - 667 с.