

Процеси гетеродифузії розпадної речовини двома шляхами у середовищі з пастками

Володимир Гончарук¹, Євген Чапля², Ольга Чернуха³, Ян Оведик⁴

¹ к. ф.-м. н., с. н. с., доцент, Національний університет «Львівська політехніка», вул. С. Бандери, 13, 79013; Центр математичного моделювання ІППММ ім. Я. С. Підстригача НАН України, вул. Дж. Дудаєва, 15, Львів, 79005, e-mail: vgoncharuk@mail.ru

² д. ф.-м. н., професор, Центр математичного моделювання ІППММ ім. Я. С. Підстригача НАН України, вул. Дж. Дудаєва, 15, Львів, 79005; Інститут механіки і прикладної інформатики Університету Казимира Великого в Бидгощі, вул. Коперніка 1, Бидгощ, 85-064, Польща, e-mail: chaplia@cmm.lviv.ua

³ д. т. н., с. н. с., Центр математичного моделювання ІППММ ім. Я. С. Підстригача НАН України, вул. Дж. Дудаєва, 15, Львів, 79005, e-mail: cher@cmm.lviv.ua

⁴ к. ф.-м. н., доцент, Куявсько-Поморська вища школа, вул. Кошалінська, 23А, Бидгощ, 85-714, Польща, e-mail: j.owedyk@kpsw.edu.pl

У роботі досліджено процеси гетеродифузії двома шляхами в тілі з пастками для розпадних домішкових частинок. Математична модель масопереносу враховує наявність трьох станів домішкових частинок, процеси типу сорбції – десорбції, а також натуральний розпад мігруючої речовини. Введено природну безрозмірну форму. За допомогою інтегральних перетворень знайдено аналітичні вирази для концентрацій розпадних частинок у трьох фізично різних станах та їхньої сумарної концентрації. Проведено числовий аналіз отриманих розв'язків та встановлено основні закономірності розподілів концентрації розпадних частинок, які мігрують двома шляхами у середовищі з пастками.

Ключові слова: гетеродифузія двома шляхами, середовище з пастками, розпад речовини.

Вступ. Прогнозування поширення розпадних домішкових субстанцій у ґрунтах та оцінка захищеності ґрунтових вод від поверхневих техногенних забруднень базується на певних модельних уявленнях про їх локальний і просторовий перерозподіл у приповерхневих шарах Землі [1-3].

Процес переносу частинок домішкових субстанцій є особливо інтенсивним у випадку зволжених приповерхневих шарів, коли пори середовища практично повністю насичені водою. Тоді домішкові частинки знаходяться в різних фізичних станах, перебуваючи в області гравітаційно рухомого водного порового розчину, адсорбованих і зв'язаних зі скелетом шарів води й області самого скелету [4-7] (рис. 1). У цих станах частинки мають різну рухливість, характеризуються різними коефіцієнтами концентраційного розширення тощо. У результаті процес просторового перенесення техногенних субстанцій відбувається декількома шляхами та супроводжується локальними переходами з одного шляху дифузії на інший (з одного фізичного стану в інший).

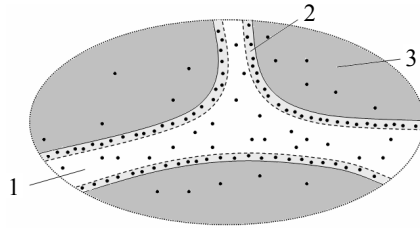


Рис. 1. Характерна структура фізично малого елемента тіла. Область 1 займає водний поровий розчин, 2 — адсорбовані на скелеті ґрунту шари води, 3 — скелет ґрунту. Крапками умовно позначено частинки домішкової речовини

Зазвичай, коефіцієнт дифузії частинок у поровому розчині є на декілька порядків більший, ніж в адсорбованих на скелеті шарах води, а, своєю чергою, коефіцієнт дифузії в адсорбованих шарах є на декілька порядків більший, ніж в об'ємі елементів скелету. Часто коефіцієнт дифузії в елементах скелету є такий малий, що їх можна вважати пастками для цих частинок [4, 8].

У певних випадках рівноважний розподіл частинок між поровим розчином і адсорбованими шарами води є такий, що їхня концентрація в адсорбованих шарах є на декілька порядків більша, ніж в області порового розчину. Тоді потоки домішок у поровому розчині й адсорбованих шарах води будуть співмірними. Зазначимо, що в загальному випадку можна також додатково виділити фізичні стани домішкових частинок у нейтральній, катіонній та аніонній формі, як у поровому розчині, так і адсорбованих шарах води, а також зв'язаними з органічними сполуками (як розчинними, так нерозчинними у воді) тощо.

Загальні основи опису такого гетеродифузного переносу наведено в роботах [9, 10], а в застосуванні до гетеродифузії радіонуклідів у пористих насичених середовищах у працях [8, 11, 12], також стислий огляд літератури стосовно мігруючих радіонуклідів можна знайти у роботах [8, 11, 12].

Важливою особливістю процесів гетеродифузії техногенних субстанцій є їх натуральний розпад (деградація), який відбувається з однаковою інтенсивністю у кожному з виділених станів. При цьому перерозподіл субстанції, що утворилась у процесі розпаду, зазвичай, вже не представляє інтересу для подальшого вивчення. Прикладом таких агресивних субстанцій, як уже згадувалося, можуть бути радіонукліди.

Ця робота стосується математичного моделювання процесів гетеродифузії домішкової речовини, що розпадається, двома шляхами у середовищі з пастками з урахуванням локальних переходів між різними станами частинок (процеси типу сорбції–десорбції).

1. Об'єкт дослідження. Формулювання задачі

Розглядаємо однорідний та ізотропний насичений водою пористий шар завтовшки L , який віднесено до прямокутної системи координат так, що початок осі Ox є на верхній поверхні шару та її спрямовано вниз, а осі Oy і Oz знаходяться на цій поверхні. Вважаємо, що у кожній довільно вибраній фізично малій (репрезентативній)

області шару макроскопічна кількість частинок знаходиться у поровому розчині, адсорбованій на скелеті воді та в скелеті. Їхні концентрації позначимо через C_i ($i = \overline{1,3}$) відповідно.

Приймаємо ізотермічні умови під час протікання дифузійних процесів. Знехтуємо можливим конвективним перенесенням частинок у адсорбованій на скелеті воді та в самому скелеті, а також дифузію домішкових частинок в області скелету. Тоді в лінійному наближенні за змінами концентрацій, система рівнянь, що описує гетеродифузію домішок одного хімічного типу двома шляхами в середовищі з пастками з урахуванням взаємних переходів частинок і їх натурального розпаду, запишемо у вигляді [8, 11]

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_1}{\partial \tau} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla} c_1 &= \vec{\nabla} \cdot (D_{11} \vec{\nabla} c_1 + D_{12} \vec{\nabla} c_2) - (\lambda_{11} + \lambda) c_1 + \lambda_{12} c_2, \\ \frac{\partial c_2}{\partial \tau} &= \vec{\nabla} \cdot (D_{12} \vec{\nabla} c_1 + D_{22} \vec{\nabla} c_2) + \lambda_{11} c_1 - (\lambda_{12} + \lambda_{32} + \lambda) c_2 + \lambda_{33} c_3, \\ \frac{\partial c_3}{\partial \tau} &= \lambda_{32} c_2 - (\lambda_{33} + \lambda) c_3, \end{aligned} \quad (1)$$

де $c_i = C_i - C_i^{(0)}$ — відхилення концентрації C_i від свого рівноважного значення у відліковому стані $C_i^{(0)}$ ($i = \overline{1,3}$); \vec{v} — швидкість конвективного руху порового розчину; D_{11} і D_{22} — «власні», D_{12} і D_{21} — «перехресні» коефіцієнти дифузії; λ_{11} , λ_{12} , λ_{32} , λ_{33} — кінетичні коефіцієнти процесів локального переходу частинок з одного фізичного стану в інший, λ — коефіцієнт натурального розпаду дифундуючих частинок; $\vec{\nabla} = \vec{i}^\alpha \partial / \partial x_\alpha$ — оператор Гамільтона, x_α — координати, \vec{i}^α — одиничні орти вибраної системи координат ($\alpha = \overline{1,3}$; за індексами, що повторюються розуміється сумування); τ — час; крапкою між величинами позначено їхню згортку (скалярний добуток).

За початкові та граничні умови у загальному випадку прийmemo

$$\begin{aligned} c_1(x, y, z, \tau)|_{\tau=0} &= c_2(x, y, z, \tau)|_{\tau=0} = c_3(x, y, z, \tau)|_{\tau=0} = 0, \\ c_1(x, y, z, \tau)|_{x=0} &= \alpha C_0, \quad c_2(x, y, z, \tau)|_{x=0} = (1 - \alpha) C_0, \quad c_3(x, y, z, \tau)|_{x=0} = 0, \\ c_1(x, y, z, \tau)|_{x=L} &= c_2(x, y, z, \tau)|_{x=L} = c_3(x, y, z, \tau)|_{x=L} = 0, \end{aligned} \quad (2)$$

де α — параметр розподілу частинок домішки між першим і другим станом на верхній поверхні шару; C_0 — задана їх сумарна концентрація.

Природними безрозмірними змінними, що дозволяють проаналізувати вплив натурального розпаду на процес гетеродифузії, є такі

$$\xi_\alpha = (\lambda_{12} / D_{11})^{1/2} x_\alpha, \quad t = \lambda_{12} \tau, \quad \alpha = \overline{1,3}. \quad (3)$$

У цих безрозмірних змінних система рівнянь (1) і початкові та граничні умови (2) за постійних кінетичних коефіцієнтів частинок домішкової речовини запишемо у вигляді

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_1}{\partial t} + \bar{v}_\xi \cdot \bar{\nabla}_\xi c_1 &= \Delta_\xi c_1 + d_1 \Delta_\xi c_2 - (a + a_\lambda) c_1 + c_2, \\ \frac{\partial c_2}{\partial t} &= d_2 \Delta_\xi c_1 + d \Delta_\xi c_2 + a c_1 - (1 + a_2 + a_\lambda) c_2 + a_1 c_3, \quad \frac{\partial c_3}{\partial t} = a_2 c_2 - (a_1 + a_\lambda) c_3; \end{aligned}$$

а також

$$\begin{aligned} c_1(\xi_1, \xi_2, \xi_3, t)|_{t=0} &= c_2(\xi_1, \xi_2, \xi_3, t)|_{t=0} = c_3(\xi_1, \xi_2, \xi_3, t)|_{t=0} = 0, \\ c_1(\xi_1, \xi_2, \xi_3, t)|_{\xi_1=0} &= \alpha C_0, \quad c_2(\xi_1, \xi_2, \xi_3, t)|_{\xi_1=0} = (1 - \alpha) C_0, \quad c_3(\xi_1, \xi_2, \xi_3, t)|_{\xi_1=0} = 0, \\ c_1(\xi_1, \xi_2, \xi_3, t)|_{\xi_1=\xi_{1(0)}} &= c_2(\xi_1, \xi_2, \xi_3, t)|_{\xi_1=\xi_{1(0)}} = c_3(\xi_1, \xi_2, \xi_3, t)|_{\xi_1=\xi_{1(0)}} = 0, \end{aligned}$$

де $\bar{v}_\xi = \bar{v}(\lambda_{12}/D_{11})^{1/2}$, $d_1 = D_{12}/D_{11}$, $d_2 = D_{21}/D_{11}$, $d = D_{22}/D_{11}$,
 $a = \lambda_{11}/\lambda_{12}$, $a_1 = \lambda_{33}/\lambda_{12}$, $a_2 = \lambda_{32}/\lambda_{12}$, $a_\lambda = \lambda/\lambda_{12}$,

$$\bar{\nabla}_\xi = \bar{i}^\alpha \partial / \partial \xi_\alpha, \quad \Delta_\xi = \bar{\nabla}_\xi \cdot \bar{\nabla}_\xi, \quad \xi_{1(0)} = (\lambda_{12}/D_{11})^{1/2} L.$$

Оцінки показують [4, 5, 13, 14], що швидкість руху порового розчину змінюється в межах $0 \div 3,5 \cdot 10^{-9}$ м/с. Тому надалі для одновимірного випадку крайову задачу гетеродифузії для шару запишемо у вигляді

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_1}{\partial t} &= \frac{\partial^2 c_1}{\partial \xi^2} + d_1 \frac{\partial^2 c_2}{\partial \xi^2} - (a + a_\lambda) c_1 + c_2, \\ \frac{\partial c_2}{\partial t} &= d_2 \frac{\partial^2 c_1}{\partial \xi^2} + d \frac{\partial^2 c_2}{\partial \xi^2} + a c_1 - (1 + a_2 + a_\lambda) c_2 + a_1 c_3, \quad \frac{\partial c_3}{\partial t} = a_2 c_2 - (a_1 + a_\lambda) c_3; \quad (4) \end{aligned}$$

а також

$$\begin{aligned} c_1(\xi, t)|_{t=0} &= c_2(\xi, t)|_{t=0} = c_3(\xi, t)|_{t=0} = 0, \\ c_1(\xi, t)|_{\xi=0} &= \alpha C_0, \quad c_2(\xi, t)|_{\xi=0} = (1 - \alpha) C_0, \quad c_3(\xi, t)|_{\xi=0} = 0, \\ c_1(\xi, t)|_{\xi=\xi_0} &= c_2(\xi, t)|_{\xi=\xi_0} = c_3(\xi, t)|_{\xi=\xi_0} = 0, \end{aligned} \quad (5)$$

де введені перепозначення $\xi \equiv \xi_1$ і $\xi_0 \equiv \xi_{1(0)} = (\lambda_{12}/D_{11})^{1/2} L$.

2. Розв'язок крайової задачі гетеродифузії з урахуванням розпаду частинок у середовищі з пастками

Для розв'язання крайової задачі гетеродифузії (4), (5) перейдемо до функцій

$$\begin{aligned} f_1(\xi, t) &= c_1(\xi, \tau) - \alpha c_0(1 - \xi/\xi_0), \quad f_2(\xi, t) = c_2(\xi, \tau) - (1 - \alpha) c_0(1 - \xi/\xi_0), \\ f_3(\xi, t) &= c_3(\xi, \tau), \end{aligned} \quad (6)$$

які задовольняють нульові граничні умови та такі початкові умови

$$f_1(\xi, \tau)|_{\tau=0} = -\alpha c_0 \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0}\right), \quad f_2(\xi, \tau)|_{\tau=0} = -(1-\alpha)c_0 \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0}\right), \quad f_3(\xi, \tau)|_{\tau=0} = 0.$$

Тут $\alpha_a = a_{11}\alpha - (1-\alpha)$, $\alpha_b = a\alpha - a_{22}(1-\alpha)$, $a_{11} = a + a_\lambda$, $a_{22} = 1 + a_2 + a_\lambda$.

Далі розв'язок отриманої задачі для введених функцій шукаємо у вигляді

розкладів $f_j(\xi, \tau) = \sum_{k=1}^{\infty} f_{jk}(k, \tau) \sin(y_k \xi)$ та для знаходження коефіцієнтів розкла-

дів $f_{jk}(\tau)$ отримаємо систему звичайних диференціальних рівнянь, до якої засто-
совуємо інтегральне перетворення Лапласа за часовою змінною. Отже, для ви-
значення коефіцієнтів отримаємо систему алгебричних рівнянь

$$\begin{aligned} (s + y_k^2 + a_{11})\bar{f}_{1k} + (d_1 y_k^2 - 1)\bar{f}_{2k} &= \bar{A}, \\ (d_2 y_k^2 - a)\bar{f}_{1k} + (s + d y_k^2 + a_{22})\bar{f}_{2k} - a_1 \bar{f}_{3k} &= \bar{B}, \quad -a_2 \bar{f}_{2k} + (s + a_{33})\bar{f}_{3k} = \bar{G}, \end{aligned} \quad (7)$$

де $\bar{A} = \frac{2c_0}{k\pi} \left(\frac{1}{s}\alpha_a + \alpha\right)$, $\bar{B} = \frac{2c_0}{k\pi} \left(\frac{1}{s}\alpha_b + 1 - \alpha\right)$, $\bar{G} = a_{32}(1-\alpha)\frac{2c_0}{k\pi s}$, $a_{33} = a_1 + a_\lambda$.

Основний визначник отриманої системи (8) має структуру

$$\Delta = s^3 + \eta_1 s^2 + \eta_2 s + \eta_3 = (s - s_1)(s - s_2)(s - s_3).$$

Тут $\eta_1 = (1+d)y_k^2 + a_{11} + a_{22} + a_{33}$, $\eta_2 = d^* y_k^4 + [d(a_{11} + a_{33}) + d_1 a + d_2 + a_{22} + a_{33}]y_k^2 +$
 $+ a_{11} a_{22} + a_{11} a_{33} + a_{22} a_{33} - a - a_1 a_2$, $\eta_3 = a_{33} d^* y_k^4 + a_{33} (d a_{11} + d_1 a + d_2 + a_{22})y_k^2 -$
 $- a_1 a_2 y_k^2 + a_{11} a_{22} a_{33} - a_{11} a_1 a_2 - a a_{33}$; $d^* = d - d_1 d_2$.

Для визначення коренів $s_i (i = \overline{1,3})$ рівняння $\Delta = 0$ перейдемо до неповного
кубічного вигляду за допомогою заміни $s = y - \eta_1/3$. Тоді маємо $y^3 + py + q = 0$,
де $p = \eta_2 - \eta_1^2/3$, $q = 2(\eta_1/3)^3 - \eta_1 \eta_2/3 + \eta_3$. Якщо $Q = (p/3)^3 + (q/2)^2 < 0$, $p < 0$
(як у цьому випадку), то корені останнього рівняння є дійсні та визначаються
формулами $y_1 = 2\sqrt{-p/3} \cos(\beta/3)$, $y_{2,3} = -2\sqrt{-p/3} \cos[(\beta \pm \pi)/3]$, і відповідно
для коренів $s_i (i = \overline{1,3})$ отримаємо

$$s_1 = -\frac{\eta_1}{3} + 2\sqrt{-p/3} \cos(\beta/3), \quad s_{2,3} = -\frac{\eta_1}{3} - 2\sqrt{-p/3} \cos[(\beta \pm \pi)/3].$$

Тут $\cos\beta = -q/2\sqrt{-(p/3)^3}$.

Запишемо допоміжні визначники

$$\Delta_1 = \frac{2c_0}{k\pi} \left(\alpha s^2 + P_1 s + P_2 + \frac{P_3}{s}\right), \quad \Delta_2 = \frac{2c_0}{k\pi} \left[(1-\alpha)s^2 + P_1' s + P_2' + \frac{P_3'}{s}\right],$$

$$\Delta_3 = \frac{2c_0}{k\pi} a_{32} [2(1-\alpha)s + P_2'' + P_3''/s],$$

де

$$\begin{aligned}
 P_1 &= y_k^2 (\alpha d_1^* - d_1) + \alpha (a_{22} + a_{33}) + \alpha_a + a, \\
 P_2 &= y_k^2 [\alpha_a - (\alpha_b + a_{33})d_1 + a_{33}\alpha d_1^*] + \alpha (a_{22}a_{33} - a_{33} - a_1a_2) + \\
 &+ \alpha_a (a_{33} + a_{22}) + \alpha_b + a_{33}, \\
 P_3 &= y_k^2 [a_{33}d_a - a_1a_2(1-\alpha)d_1] + \alpha_a (a_{22}a_{33} - a_1a_2) + \alpha_b a_{33} + a_1a_2(1-\alpha); \\
 P'_1 &= -y_k^2 [\alpha d_2 + \alpha a_{11} - (1-\alpha)] + a_{11} + \alpha + \alpha_b + (1-\alpha)a_{33}, \\
 P'_2 &= -y_k^2 [(\alpha_a + \alpha a_{33})d_2 - \alpha_b - (1-\alpha)a_{33}] - \alpha (a_{11}a_{33} + a_1a_2 - aa_{33}) + \\
 &+ \alpha_b (a_{11} + a_{33}) + (1-\alpha)(a_{11}a_{33} + a_1a_2) + a(\alpha_a + \alpha a_{33}), \\
 P'_3 &= -y_k^2 [a_{33}\alpha_a d_2 - a_1a_2(1-\alpha)] + (1-\alpha)a_{11}a_1a_2 + a_{33}(a_{11}\alpha_b + a\alpha_a); \\
 P''_2 &= y_k^2 [2(1-\alpha) + d - \alpha d_2^*] - \alpha (a_{22} - a + 2a_{11}) + a_{22} + 2a_{11} + \alpha_b, \\
 P''_3 &= y_k^4 (1-\alpha)d^* + y_k^2 [(1-\alpha)(a_{11}d + ad_1) - (1+\alpha)d_2 + (1-\alpha)a_{22} - \alpha_b] + \\
 &+ (1-\alpha)(a_{11}a_{22} - a) + \alpha_b a_{11} + \alpha_a a; \\
 d_1^* &= d + d_1, \quad d_2^* = d + d_2, \quad d_a = \alpha_a d - \alpha_b d_1.
 \end{aligned}$$

Таким чином розв'язок системи рівнянь (7) запишеться у вигляді

$$\begin{aligned}
 \bar{f}_{1k} &= \frac{\Delta_1}{\Delta} = \frac{2c_0}{k\pi(s-s_1)(s-s_2)(s-s_3)} \left(\alpha s^2 + P_1 s + P_2 + \frac{P_3}{s} \right), \\
 \bar{f}_{2k} &= \frac{\Delta_2}{\Delta} = \frac{2c_0}{k\pi(s-s_1)(s-s_2)(s-s_3)} \left[(1-\alpha)s^2 + P'_1 s + P'_2 + \frac{P'_3}{s} \right], \\
 \bar{f}_{3k} &= \frac{\Delta_3}{\Delta} = \frac{2c_0 a_{32}}{k\pi(s-s_1)(s-s_2)(s-s_3)} \left[2(1-\alpha)s + P''_2 + \frac{P''_3}{s} \right]. \tag{8}
 \end{aligned}$$

До отриманих виразів (8) застосовуємо обернене перетворення Лапласа [15], знаходимо вирази для коефіцієнтів розкладу $f_{jk}(k, \tau)$ та з формул (6) отримуємо вирази для шуканих концентрацій $c_j(\xi, \tau)$. Після підсумовування асимптотичних доданків і врахування наслідку останнього рівняння системи (4) $\lim_{\tau \rightarrow \infty} c_3(\xi) = a_2/a_{33} \lim_{\tau \rightarrow \infty} c_2(\xi)$ отримаємо вирази для розподілів концентрацій $c_j(\xi, \tau)$ у вигляді: концентрація домішок у поровому розчині

$$\begin{aligned}
 \frac{c_1(\xi, \tau)}{c_0} &= \alpha \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0} \right) + 2 \frac{a_{33}d^*}{b_2 - b_1} \left[\frac{A_{\alpha 1}}{b_1} H_1(\xi) - \frac{A_{\alpha 1}}{b_2} H_2(\xi) + \right. \\
 &+ \left. A_{d1} (H_1(\xi) - H_2(\xi)) \right] + G_1(\xi, \tau); \tag{9a}
 \end{aligned}$$

концентрація домішок на внутрішній поверхні скелету

$$\frac{c_2(\xi, \tau)}{c_0} = (1 - \alpha) \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0} \right) + 2 \frac{a_{33} d^*}{b_2 - b_1} \left[-\frac{A_{\alpha 2}}{b_1} H_1(\xi) + \frac{A_{\alpha 2}}{b_2} H_2(\xi) + A_{d2} (H_1(\xi) - H_2(\xi)) \right] + G_2(\xi, \tau); \quad (9б)$$

концентрація частинок у «пастках»

$$\frac{c_3(\xi, \tau)}{c_0} = 2 \frac{a_2 d^*}{b_2 - b_1} \left[-\frac{A_{\alpha 2}}{b_1} H_1(\xi) + \frac{A_{\alpha 2}}{b_2} H_2(\xi) + A_{d2} (H_1(\xi) - H_2(\xi)) \right] + G_3(\xi, \tau), \quad (9в)$$

сумарна концентрація домішкових частинок у середовищі

$$\frac{c(\xi, \tau)}{c_0} = 1 - \frac{\xi}{\xi_0} + \frac{2d^*}{b_2 - b_1} \left[\frac{B^*}{b_1} H_1(\xi) - \frac{B^*}{b_2} H_2(\xi) + B_d (H_1(\xi) - H_2(\xi)) \right] + G(\xi, \tau). \quad (9г)$$

Тут $H_k(\xi) = 1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\text{sh } \bar{a}_k (\xi_0 - \xi)}{\text{sh } \bar{a}_k \xi_0}$, $\bar{a}_k = \sqrt{b_k / 2d}$, $k = 1, 2$;

$$b_{1,2} = \frac{\xi_0^2}{2d^*} \left(d_a \pm \sqrt{d_a^2 - 4a^* d^*} \right), \quad A_{d1} = a_{33} d_a - a_1 a_2 (1 - \alpha) d_1,$$

$$A_{\alpha 1} = \alpha_a (a_{22} a_{33} - a_1 a_2) + \alpha_b a_{33} + a_1 a_2 (1 - \alpha), \quad A_{d2} = a_1 \alpha_a d_2 - a_2 a_1^\lambda (1 - \alpha),$$

$$A_{\alpha 2} = (1 - \alpha) a^\lambda a_2 a_1^\lambda + a_1 (a^\lambda \alpha_b + a \alpha_a), \quad d_{a1} = a_{33} (d_{a11} + d_1 a + d_2 + a_{22}) - a_1 a_2,$$

$$a_{1\lambda} = a_{11} a_{22} a_{33} - a_{11} a_1 a_2 - a_{33} a;$$

$$G_1(\xi, \tau) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{2}{k\pi s^*} \sin(y_k \xi) \left\{ (s_2 - s_3) \left(\alpha s_1^2 + P_1 s_1 + P_2 + \frac{P_3}{s_1} \right) e^{s_1 \tau} + (s_3 - s_1) \left(\alpha s_2^2 + P_1 s_2 + P_2 + \frac{P_3}{s_2} \right) e^{s_2 \tau} + (s_1 - s_2) \left(\alpha s_3^2 + P_1 s_3 + P_2 + \frac{P_3}{s_3} \right) e^{s_3 \tau} \right\},$$

$$G_2(\xi, \tau) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{2}{k\pi s^*} \sin(y_k \xi) \left\{ (s_2 - s_3) \left[(1 - \alpha) s_1^2 + P_1' s_1 + P_2' + \frac{P_3'}{s_1} \right] e^{s_1 \tau} + (s_3 - s_1) \left[(1 - \alpha) s_2^2 + P_1' s_2 + P_2' + \frac{P_3'}{s_2} \right] e^{s_2 \tau} + (s_1 - s_2) \left[(1 - \alpha) s_3^2 + P_1' s_3 + P_2' + \frac{P_3'}{s_3} \right] e^{s_3 \tau} \right\},$$

$$G_3(\xi, \tau) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{2a_{32}}{k\pi s^*} \sin(y_k \xi) \left\{ (s_2 - s_3) \left[2(1 - \alpha) s_1 + P_2'' + \frac{P_3''}{s_1} \right] e^{s_1 \tau} + (s_3 - s_1) \left[2(1 - \alpha) s_2 + P_2'' + \frac{P_3''}{s_2} \right] e^{s_2 \tau} + (s_1 - s_2) \left[2(1 - \alpha) s_3 + P_2'' + \frac{P_3''}{s_3} \right] e^{s_3 \tau} \right\},$$

$$G(\xi, \tau) = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{2}{k\pi s^*} \sin(y_k \xi) \left[(s_2 - s_3) \left(s_1^2 + B_1 s_1 + B_2 + \frac{B_3}{s_1} \right) e^{s_1 \tau} + \right. \\
 \left. + (s_3 - s_1) \left(s_2^2 + B_1 s_2 + B_2 + \frac{B_3}{s_2} \right) e^{s_2 \tau} + (s_1 - s_2) \left(s_3^2 + B_1 s_3 + B_2 + \frac{B_3}{s_3} \right) e^{s_3 \tau} \right]; \\
 B^* = a_{33} A_{\alpha 1} - (a_{33} + a_2) A_{\alpha 2}, B_d = a_{33} A_{d1} + (a_{33} + a_2) A_{d2}, B_1 = P_1 + P'_1 + 2a_2(1 - \alpha) \\
 B_j = P_j + P'_j + P''_j, \quad j = 2, 3; \quad s^* = (s_1 - s_2)(s_2 - s_3)(s_3 - s_1).$$

3. Числовий аналіз концентрації розпадної домішки, яка мігрує двома шляхами у середовищі з пастками

Отримані вирази концентрацій (9а-г) містять ряд невідомих характеристик середовища, зокрема таких, що визначають інтенсивність переходу частинок між різними шляхами міграції. Ці величини можна знаходити шляхом чисельного експерименту з підгонки розрахункових профілів концентрацій до знайдених експериментально [16] або реалізуючи цільові експериментальні дослідження. Ідею таких експериментів наведено, зокрема, у роботі [17].

Для встановлення основних закономірностей гетеродифузії розпадної речовини у середовищі з пастками, зважаючи на введenu безрозмірну форму (3), наведено залежності розподілів концентрацій домішки від відповідних характеристик у широких межах на рис. 2-5. На рис. 2 проілюстровано розподіли концентрацій розпадної речовини $c_i(\xi, \tau)$ ($i = \overline{1,3}$), які пораховані за формулами (9а), (9в) і відповідають кривим 1-3, сумарна концентрація $c(\xi, \tau)$ — кривий 4 за таких базових значень коефіцієнтів задачі: $\xi_0 = 10$, $\tau = 0,2$, $d = 0,001$, $a = 0,5$, $a_1 = 0,0001$, $a_2 = 0,9$, $\lambda = 5,5$. На рис. 2а суцільні лінії відповідають значенню $\alpha = 1$, штрихові — $\alpha = 0,75$ (криві а), на рис. 2б суцільні лінії наведені для $\alpha = 0,5$, штрихові — $\alpha = 0$ (криві а).

На рис. 3 проілюстровано порівняльні розподіли сумарної концентрації у різні моменти безрозмірного часу $\tau = 0,05; 0,1; 0,15; 0,2; 0,5$ (криві 1-5) для $\alpha = 1$, $a = 10$ (рис. 3а) і $\alpha = 0,75$, $a = 0,5$ (рис. 3б). На рис. 4 наведено розподіли функції $c(\xi, \tau)$ для різних значень коефіцієнта поверхневого розподілу частинок між станами $\alpha = 0; 0,25; 0,5; 0,75; 1$ (криві 1-5) для $a = 10$ (рис. 4а) й $a = 0,5$ (рис. 4б).

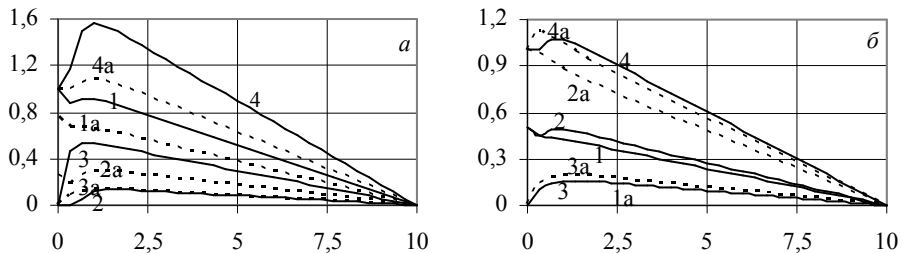


Рис. 2. Розподіли концентрацій $c_i(\xi, \tau)$ і сумарна концентрація $c(\xi, \tau)$ для $\alpha = 1$ (криві 1-4) і $\alpha = 0,75$ (криві а) на рис. а і для $\alpha = 0,5$ (криві 1-4) і $\alpha = 0$ (криві а) на рис. б

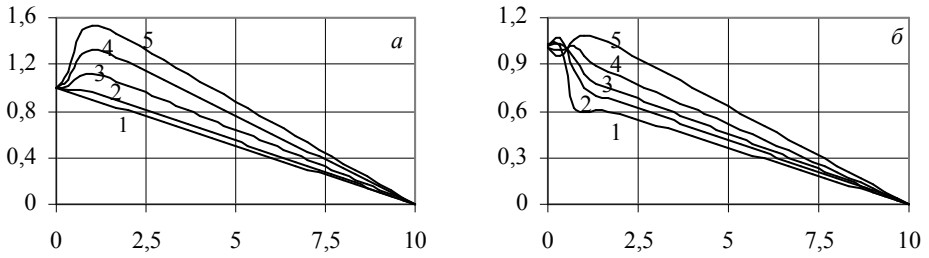


Рис.3. Порівняльні розподіли концентрації $c(\xi, \tau)$ у різні моменти безрозмірного часу $\alpha = 1, a = 10$ (рис. *a*) й $\alpha = 0,75, a = 0,5$ (рис. *б*)

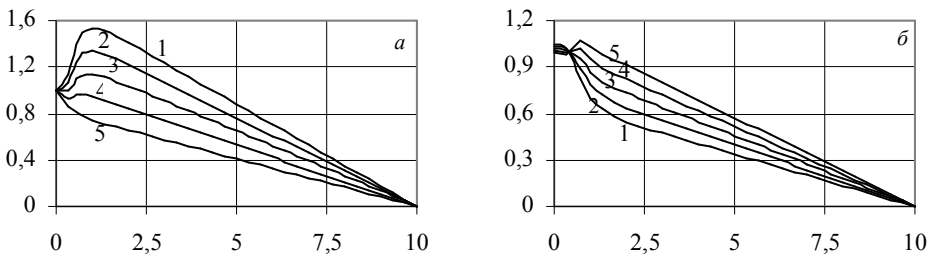


Рис. 4. Порівняльні розподіли концентрації $c(\xi, \tau)$ для різних значень коефіцієнта поверхневого розподілу α , якщо $a = 10$ (рис. *a*) й $a = 0,5$ (рис. *б*)

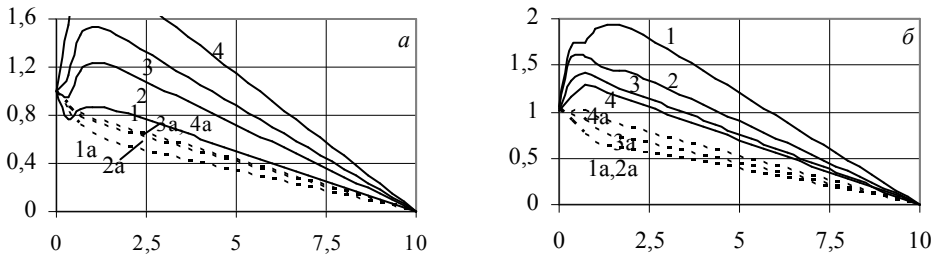


Рис. 5. Порівняльні розподіли концентрації $c(\xi, \tau)$ для різних значень коефіцієнта інтенсивностей сорбції a (рис. *a*) та розпаду λ (рис. *б*)

На рис. 5*a* проілюстровано розподіли сумарної концентрації залежно від значення коефіцієнта інтенсивності переходу частинок зі швидкого шляху міграції на повільний $a = 0,5; 5; 7; 10; 20$ для $\alpha = 1$ (суцільні лінії), $\alpha = 0$ (штрихові). На рис. 5*б* показано залежність розподілів $c(\xi, \tau)$ від коефіцієнта інтенсивності розпаду $\lambda = 2; 2,5; 4; 5$ для $\alpha = 0,75, a = 5$ (суцільні лінії) та $a = 0,5$ (штрихові).

Зазначимо, що накопичення домішкових частинок у поровому розчині можливе лише, якщо майже всі частинки з поверхні поступають на цей шлях міграції (крива 1 рис. 2*a*). В адсорбованих шарах води приповерхневе зростання концентрації спостерігається для $\alpha > 0,1$ (криві 2 і 2*a*, рис. 2). Зауважимо також, що для $\alpha = 0$ концентрація домішки у першому стані приймає нехтовно малі

значення на всьому проміжку (крива 1а, рис. 2б), що пояснюється більшим коефіцієнтом сорбції з розчину до адсорбованих шарів, ніж навпаки, при цьому відсутні джерела маси у цьому стані.

Для великих часів наявний приповерхневий максимум сумарної концентрації домішкової речовини, після досягнення якого функція лінійно спадає (рис. 3). Для малих часових інтервалів теж можливе приповерхнєве зростання концентрації для випадку інтенсивнішого переходу частинок із повільного на швидкий шлях дифузії (криві 1, 2, рис. 3б), після якого відбувається стрімке зменшення сумарної концентрації. Коефіцієнт поверхневого розподілу α суттєво впливає на поведінку $c(\xi, \tau)$ (рис. 4). При чому для випадку інтенсивнішого переходу частинок із розчину до адсорбованих шарів із ростом α від 0 до 1 відбувається зменшення значень функції $c(\xi, \tau)$ (рис. 4а), тоді як для інтенсивнішої десорбції частинок, навпаки — спостерігається зростання сумарної концентрації (рис. 4б).

Зазначимо, що чим інтенсивніша сорбція домішкових частинок, тим більшою є їхня сумарна концентрація в тілі (рис. 5а). Причому для $\alpha = 1$ наявний локальний (криві 1, 2) або глобальний (криві 3-5, рис. 5а) максимум $c(\xi, \tau)$. Для $\alpha = 0$ зміна коефіцієнта a не впливає на поведінку функції концентрації, яка залишається монотонно спадною функцією для достатньо широкого інтервалу значень коефіцієнта сорбції, який досліджувався в роботі. Зауважимо, що врахування розпаду мігруючої речовини призводить до суттєво нелінійної поведінки функції $c(\xi, \tau)$ у приповерхневих областях тіла для переважного змиву домішкових частинок у поровий розчин (криві 1-4, рис. 5б). Причому в цьому випадку чим менші значення приймає коефіцієнт інтенсивності розпаду, тим більшою є сумарна концентрація. Зміна ж відношення коефіцієнтів дифузії на швидкому та повільному шляхах міграції призводить до зміни значень сумарної концентрації лише в межах до 5 %.

Висновки. Досліджено математичну модель гетеродифузії двома шляхами розпадної речовини у середовищі з пастками. Введено природну безрозмірну форму, яка не використовує розмірів тіла чи характеристик часових масштабів змін процесу гетеродифузії. При цьому введені змінні стискають часову вісь і розтягують осі просторових координат.

В отриманих розв'язках виділено асимптотичні складники концентрацій. Ці асимптотичні складники суттєво відрізняються від класичних лінійних залежностей, які виникають із розв'язків відповідних задач для незв'язаної системи рівнянь гетеродифузії або для поодинокого рівняння з ефективними характеристиками, зокрема без врахування розпаду домішкової речовини. Причому доданки, що містять вирази типу $\text{sh } \bar{a}_k (\xi_0 - \xi) / \text{sh } \bar{a}_k \xi_0$ вносять суттєвий вклад у розподіли концентрацій у приповерхневому шарі тіла та показують збільшення концентрації радіонуклідів в околі його границі. Врахування розпаду домішкових частинок призводить до додаткового вкладу в нелінійні залежності в асимптотичних

доданках розподілів концентрацій, як для кожного стану домішки, так і для її сумарної концентрації.

У рамках розглянутої моделі можна вивчити також потоки маси на швидкому та повільному шляхах міграції, а також сумарний потік частинок в області тіла та через поверхні.

Література

- [1] *Сытников А.* Динамика воды в насыщенных и ненасыщенных грунтах зон аэрации. — Киев: Наукова думка, 1978. — 156 с.
- [2] *Фрид Ж.* Загрязнение подземных вод. — Москва: Недра, 1981. — 304 с.
- [3] *Бэр Я., Заславски Д., Ирмей С.* Физико-математические основы фильтрации воды. — Москва: Мир, 1971. — 451 с.
- [4] *Прохоров В. М.* Миграция радиоактивных загрязнений в почвах. — Москва: Энергоатомиздат, 1981. — 106 с.
- [5] *Коноплев А. В., Голубенков А. В.* Моделирование вертикальной миграции радионуклидов в почве (по результатам ядерной аварии) // Метеорология и гидрология. — 1991. — № 10. — С. 62-68.
- [6] *Борзилов В. А.* Физико-математическое моделирование поведения радионуклидов // Природа. — 1991. — № 6. — С. 42-51.
- [7] *Анисимов В. С., Санжарова Н. И., Алексахин Р. М.* О формах нахождения и вертикальном распределении ¹³⁷Cs в почвах в зоне аварии на Чернобыльской АЭС // Почвоведение. — 1991. — № 9. — С. 31-40.
- [8] *Чапля Є. Я., Чернуха О. Ю.* Кінетика переносу домішок при локальній зміні стану частинок (2. Гетеродифузія двома шляхами у тілі з пастками). — Львів, 1993. — 28 с. (Препринт / АН України. Центр мат. моделювання ІППММ; № 5-93).
- [9] *Чапля Є. Я., Чернуха О. Ю.* Фізико-математичне моделювання гетеродифузного масопереносу. — Львів: СПОЛОМ, 2003. — 125 с.
- [10] *Бурак Я. И., Галапац Б. П., Чапля Е. Я.* Деформация электропроводных тел с учетом гетеродиффузии заряженных примесных частиц // Физ.-хим. мех. материалов. — 1980. — № 5. — С. 8-14.
- [11] *Aifantis E. C., Hill J. M.* On the theory of diffusion in media with double diffusivity. I. Basic mathematical results // [Q. J.] Mech. Appl. Math. — 1980. — Vol. 33, Pt. 1. — P. 1-21.
- [12] *Чапля Є. Я., Чернуха О. Ю.* Кінетика переносу домішок при локальній зміні стану частинок (1. Модельні представлення, гетеродифузія двома шляхами). — Львів, 1993. — 44 с. — (Препринт / АН України. Центр мат. моделювання ІППММ; № 3-93).
- [13] Радиоактивное загрязнение природных сред при подземных ядерных взрывах и методы его прогнозирования; под ред. *Ю. А. Израэля.* — Ленинград: Гидрометеониздат, 1970. — 67 с.
- [14] *Пристер Б. С., Перепелятникова Л. В., Омельянеко Н. П.* Вертикальная и горизонтальная миграция радионуклидов в агроландшафтах зоны аварии на Чернобыльской АЭС // Докл. АН Украины. — 1993. — № 1. — С. 163-171.
- [15] Справочник по специальным функциям; под ред. *М. Абрамовица, И. Стиган.* — Москва: Наука, 1979. — 830 с.
- [16] Модели тепловлагодпереноса в почве и задачи идентификации их параметров по наземным измерениям и дистанционным данным в ИК-диапазоне / *Я. С. Подстригач, А. В. Карасев, Б. В. Гера* и др. — Львов, 1988. — 53 с. (Препринт/АН УССР. Ин-т прикл. пробл. мех. и математики; № 19).
- [17] *Купряжкин А. Я., Волобуев П. В., Суетин П. Е.* Механизмы диффузии неона в хлориде калия // Журн. техн. физики. — 1975. — Т. 45, № 2. — С. 431-432.

The processes of decaying admixture heterodiffusion by two ways in a medium with traps

Volodymyr Goncharuk, Yevhen Chaplya, Olha Chernukha, Jan Owedyk

In the paper the processes of heterodiffusion by two ways in a body with traps for decaying admixture particles are studied. The mathematical model of mass transfer takes into account occurrence of three states of admixture particles, the processes of type sorption-desorption as well as natural decay of migrating substance. A natural dimensionless form is introduced. By integral transformations analytical expressions are found for concentrations of decaying particles in three physically different states and their total concentration. Numerical analysis of obtained solutions is carried out and it is established general regularities of concentration distributions of decaying particles which migrate by two ways in a medium with traps.

Процессы гетеродиффузии распадающегося вещества двумя путями в среде с ловушками

Владимир Гончарук, Евгений Чапля, Ольга Чернуха, Ян Оведык

В работе исследованы процессы гетеродиффузии двумя путями в теле с ловушками для распадающихся примесных частиц. Математическая модель массопереноса учитывает наличие трех состояний примесных частиц, процессы типа сорбции-десорбции, а также натуральный распад мигрирующего вещества. Введена природная безразмерная форма. С помощью интегральных преобразований найдены аналитические выражения для концентраций распадающихся частиц в трех физически разных состояниях и их суммарной концентрации. Проведен численный анализ полученных решений и установлены основные закономерности распределений концентрации распадающихся частиц, которые мигрируют двумя путями в среде с ловушками.

Отримано 21.10.13