

Комп'ютерне моделювання перерозподілу концентрації розпадних частинок, що дифундують у регулярних структурах

Вероніка Дмитрук¹, Володимир Гончарук², Ольга Чернуха³

¹ к. т. н., Центр математичного моделювання Інституту прикладних проблем механіки і математики ім. Я. С. Підстригача НАН України, вул. Д. Дудаєва, 15, Львів, 79005; Національний університет «Львівська політехніка», вул. С. Бандери, 12, Львів, 79013, e-mail: dmytruk15@gmail.com

² к. ф.-м. н., с. н. с., доцент, Національний університет «Львівська політехніка», вул. С. Бандери, 12, Львів, 79013, e-mail: vgonchcharuk@mail.ru

³ д. т. н., професор, Центр математичного моделювання Інституту прикладних проблем механіки і математики ім. Я. С. Підстригача НАН України, вул. Д. Дудаєва, 15, Львів, 79005, e-mail: cher@cmm.lviv.ua

У роботі досліджено процеси конвективної дифузії домішкової речовини з урахуванням натурального розпаду мігруючої речовини у двофазних структурах із періодично розташованими тонкими шарами. За допомогою відповідних інтегральних перетворень окремо в контактуючих областях отримано аналітичний розв'язок контактної-крайової задачі конвективної дифузії розпадної речовини за неідеальних умов контакту, сформульованих на функцію концентрації, та крайових умов I-го роду. Проведено числовий аналіз розподілів концентрації мігруючих частинок у скелеті та тонких шарів за їх натурального розпаду в процесі міграції. Показано, що інтенсивність розпаду мігруючої речовини суттєвіше впливає на кількісний характер розподілів її концентрації в області тонких шарів для малих швидкостей конвективного перенесення, а в області матеріалу — для великих.

Ключові слова: дифузія, конвекція, натуральний розпад, контактної-крайова задача, регулярна структура, тонкий шар, інтегральне перетворення, пакет програм.

Вступ. У багатьох інженерних розрахунках, прогнозуючи процеси, які протікають у навколишньому середовищі, виникає потреба математичного опису дифузії, фільтрації тощо у складних середовищах, зокрема просторово-регулярних. До таких середовищ належать, наприклад, бетони зі зв'язаними порами; ґрунти, які можна розглядати як двофазні регулярні структури, що містять періодично розташовані тонкі шари, в яких перенесення частинок відбувається як дифузійним, так і конвективним механізмами. При цьому мігруюча домішка може розпадатися внаслідок хімічних реакцій або радіоактивного розпаду. Оскільки побудова точних розв'язків такого типу задач навіть для найпростіших геометричних областей викликає значні труднощі, то, зазвичай, використовуються наближені аналітичні [1, 2] або числові [3, 4] розв'язки.

Для кількісного опису конвективної дифузії домішкових речовин у двофазних середовищах періодичної структури у працях [5, 6] удосконалено метод побудови точних розв'язків відповідних контактної-крайових задач масопереносу,

який не накладає обмежень на розміри та форми досліджуваних середовищ. У запропонованій роботі цей метод застосовується до моделювання процесів міграції домішки у шарі з регулярно розташованими тонкими шарами швидкого переміщення частинок з урахуванням розпаду мігруючої речовини та враховано масообмін між різними станами частинок.

1. Об'єкт дослідження та формулювання задачі

Нехай розпадна речовина одного хімічного типу мігрує в шарі товщини x_0 , який складається з періодично розташованих областей двох видів. Поверхні, що обмежують ці області, перпендикулярні до поверхонь шару (вісь Ox перпендикулярна до поверхонь тіла, Oy — до поверхонь складових областей). При цьому області з коефіцієнтом дифузії D_1 завширшки $2L$, а з коефіцієнтом D_2 — $2l$, окрім цього в областях із коефіцієнтом дифузії D_1 враховано конвективний механізм перенесення частинок з коефіцієнтом конвективного перенесення v , який приймається відомим і сталим. Така структура має сімейство площин симетрії ($y = \pm n(L + l)$, $n = 0, 1, 2, \dots$), які ділять навпіл сусідні контактуючі області. Тому можемо виділити елемент тіла, на вертикальних границях якого потоки в напрямку осі Oy дорівнюють нулю.

Концентрація розпадної домішки $c_1(x, y, t)$ в області $\Omega_1 =]0; x_0[\times]0; L[$ визначається з рівняння конвективної дифузії [7]

$$\frac{\partial c_1}{\partial t} = D_1 \left[\frac{\partial^2 c_1}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c_1}{\partial y^2} \right] - v \frac{\partial c_1}{\partial x} - \lambda c_1, \quad x, y \in \Omega_1, \quad (1)$$

де λ — коефіцієнт інтенсивності розпаду мігруючої речовини [c^{-1}].

В області $\Omega_2 = [0; x_0] \times [L; L + l]$ перерозподіл розпадних частинок домішки $c_2(x, y, t)$ задовольняє двовимірне рівняння дифузії

$$\frac{\partial c_2}{\partial t} = D_2 \left[\frac{\partial^2 c_2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c_2}{\partial y^2} \right] - \lambda c_2, \quad x, y \in \Omega_2. \quad (2)$$

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

$$c_1(x, y, t)|_{t=0} = c_2(x, y, t)|_{t=0} = 0. \quad (3)$$

На поверхні шару $x = 0$ підтримуються постійні значення концентрацій, а на поверхні $x = x_0$ концентрації дорівнюють нулю:

$$\begin{aligned} c_1(x, y, t)|_{x=0} = c_0^{(1)} \equiv const, \quad c_2(x, y, t)|_{x=0} = c_0^{(2)} \equiv const, \\ c_1(x, y, t)|_{x=x_0} = c_2(x, y, t)|_{x=x_0} = 0. \end{aligned} \quad (4)$$

На бічних поверхнях виділеного елемента $y = 0$, $y = L + l$ нулю дорівнюють горизонтальні складники потоку, тобто

$$\left. \frac{\partial c_1(x, y, t)}{\partial y} \right|_{y=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial c_2(x, y, t)}{\partial y} \right|_{y=L+l} = 0. \quad (5)$$

На границі контакту $y = L$ задаємо умови неідеального контакту для функції концентрації у вигляді [8]:

$$\eta_1 c_1(x, y, t) \Big|_{y=L} = \eta_2 c_2(x, y, t) \Big|_{y=L}, \quad D_1 \left. \frac{\partial c_1(x, y, t)}{\partial y} \right|_{y=L} = D_2 \left. \frac{\partial c_2(x, y, t)}{\partial y} \right|_{y=L}. \quad (6)$$

Тут η_1, η_2 ($\eta_1 \neq \eta_2$) — коефіцієнти концентраційної залежності хімічного потенціалу частинок в областях Ω_1 і Ω_2 відповідно.

2. Побудова аналітичного розв'язку задачі

Розв'язок контактної крайової задачі масоперенесення (1)-(6) шукаємо з допомогою інтегральних перетворень за просторовими змінними окремо в контактуючих областях [5, 6]. Для цього доозначимо функції $\partial c_1 / \partial y$ на границі області Ω_1 і $\partial c_2 / \partial y$ на границі Ω_2 , враховуючи другу контактну умову (6):

$$D_1 \left. \frac{\partial c_1(x, y, t)}{\partial y} \right|_{y=L} = D_2 \left. \frac{\partial c_2(x, y, t)}{\partial y} \right|_{y=L} = g(x, t). \quad (7)$$

Тоді за змінною y можемо виконати скінченне інтегральне cos-перетворення в області Ω_1 [9]: $y \rightarrow y_k = k\pi/L$, $c_1(x, y, t) \rightarrow \bar{c}_1(x, k, t)$ та cos-перетворення із зсувом в області Ω_2 [10]: $y \rightarrow y_j = j\pi/l$, $c_2(x, y, t) \rightarrow \bar{c}_2(x, j, t)$. За змінною x в області Ω_1 було застосовано таке інтегральне перетворення [11]

$$\begin{aligned} \bar{c}_1(n, k, t) &= \int_0^{x_0} \tilde{c}_1(x, k, t) e^{-v_D x} \sin(x_n x) dx, \\ \tilde{c}_1(x, k, t) &= \frac{2}{x_0} e^{v_D x} \sum_{n=1}^{\infty} \bar{c}_1(n, k, t) \sin(x_n x). \end{aligned} \quad (8)$$

де $v_D = v/2D_1$, $x_n = n\pi/x_0$,

а в області Ω_2 — скінченне інтегральне sin-перетворення Фур'є [9]: $x \rightarrow x_m = m\pi/x_0$, $\tilde{c}_2(x, j, t) \rightarrow \bar{c}_2(m, j, t)$.

Розв'язок задачі (1)-(6) у зображеннях отримаємо у вигляді [12]:

$$\bar{c}_1(n, k, t) = e^{-[D_1(x_n^2 + y_k^2 + v_D^2) + \lambda]t} \int_0^t [D_1 a_k c_0^{(1)} x_n + (-1)^k \tilde{g}_n(t')] e^{-[D_1(x_n^2 + y_k^2 + v_D^2) + \lambda]t'} dt', \quad (9)$$

$$\bar{c}_2(m, j, t) = e^{-[D_2(x_m^2 + y_j^2) + \lambda]t} \int_0^t [D_2 a_j c_0^{(2)} x_m - \tilde{g}_m(t')] e^{-[D_2(x_m^2 + y_j^2) + \lambda]t'} dt'. \quad (10)$$

Тут

$$a_k = \begin{cases} L, & k = 0, \\ 0, & k = 1, 2, \dots, \end{cases} \quad a_j = \begin{cases} l, & j = 0, \\ 0, & j = 1, 2, \dots \end{cases}.$$

При цьому, для функції $g(x, t)$ відповідно маємо

$$\tilde{g}_n(t) = \int_0^{x_0} g(x, t) e^{-v_D x} \sin(x_n x) dx, \quad \tilde{g}_m(t) = \int_0^{x_0} g(x, t) \sin(x_m x) dx. \quad (11)$$

Зауважимо, що інтегральні перетворення, обернені до (11), такі

$$g(x, t) = e^{v_D x} \sum_{n=1}^{\infty} \tilde{g}_n(t) \sin(x_n x), \quad g(x, t) = \frac{2}{x_0} \sum_{m=1}^{\infty} \tilde{g}_m \sin(x_m x). \quad (12)$$

У виразах (9) і (10) залишаються невідомими функції $\tilde{g}_n(t')$ і $\tilde{g}_m(t')$. Ці функції шукаємо з першої контактної умови (6) стрибка функції концентрації на границі розділу областей Ω_1 та Ω_2 . Для цього виконуємо відповідні обернені інтегральні перетворення й отримані вирази підставляємо в першу умову (6). Внаслідок цього отримуємо інтегральне рівняння Вольтерра I роду.

Зазначимо, що врахування в моделі розпаду мігруючої речовини на такий зв'язок не впливає. Отже маємо [6]

$$\tilde{g}_m(t') = \frac{2}{x_0} \sum_{n=1}^{\infty} A_{n,m} \tilde{g}_n(t') \quad \text{або} \quad \tilde{g}_n(t') = \frac{2}{x_0} \sum_{m=1}^{\infty} B_{n,m} \tilde{g}_m(t'), \quad (13)$$

де коефіцієнти $A_{n,m}$ і $B_{n,m}$ визначаються таким чином

$$A_{n,m} \equiv \frac{2v_D \pi^2}{x_0^2} \frac{nm \left[(-1)^{n+m} e^{v_D x_0} - 1 \right]}{\left[v_D^2 + \frac{\pi^2}{x_0^2} (n-m)^2 \right] \left[v_D^2 + \frac{\pi^2}{x_0^2} (n+m)^2 \right]}, \quad (14)$$

$$B_{n,m} \equiv -\frac{2v_D \pi^2}{x_0^2} \frac{nm \left[(-1)^{n+m} e^{-v_D x_0} - 1 \right]}{\left[v_D^2 + \frac{\pi^2}{x_0^2} (n-m)^2 \right] \left[v_D^2 + \frac{\pi^2}{x_0^2} (n+m)^2 \right]}. \quad (15)$$

Остаточню функція $\tilde{g}_n(t')$ має вигляд

$$\tilde{g}_n(t') = \frac{-\frac{\eta_1}{\eta_2} D_1 c_0^{(1)} x_n + \frac{2}{x_0} D_2 c_0^{(2)} \sum_{m=1}^{\infty} x_m B_{n,m} E_{n,m}(t-t')}{\frac{\eta_1}{\eta_2 L} \Theta_0 \left(0, e^{-D_1 \frac{\pi^2}{L^2} (t-t')} \right) + \frac{4}{x_0^2 l} \sum_{m=1}^{\infty} \Phi_m(t-t') A_{n,m} B_{n,m} e^{D_1 (v_D^2 + x_n^2) (t-t')}}}, \quad (16)$$

де $E_{n,m}(t-t') = \exp\left\{-\left[D_2 x_m^2 - D_1(v_D^2 + x_n^2)\right](t-t')\right\}$, $\Theta_0(v, x)$ — еліптична тета-функція [13], $\Phi_m(t-t') = e^{-D_2 x_m^2 (t-t')} \left(1 + 2 \sum_{j=1}^{\infty} e^{-D_2 y_j^2 (t-t')}\right)$.

Формули для концентрації розпадної домішкової речовини набувають вигляду в області Ω_1

$$c_1(x, y, t) = e^{-\lambda t} e^{v_D x} \left\langle c_0^{(1)} \frac{\text{sh } v_D (x_0 - x)}{\text{sh}(v_D x_0)} + \frac{2}{x_0} \sum_{n=1}^{\infty} \sin(x_n x) \left\{ -\frac{c_0^{(1)} x_n}{v_D^2 + x_n^2} e^{-D_1(v_D^2 + x_n^2)t} + \frac{1}{L} \int_0^t \tilde{g}_n(t') e^{\lambda t'} e^{-D_1(v_D^2 + x_n^2)(t-t')} \left(1 + 2 \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \cos(y_k y) e^{-D_1 y_k^2 (t-t')}\right) dt' \right\} \right\rangle, \quad (17)$$

в області Ω_2

$$c_2(x, y, t) = c_0^{(2)} \left(1 - \frac{x}{x_0}\right) - \frac{2}{x_0} \sum_{m=1}^{\infty} \sin(x_m x) \left[\frac{c_0^{(2)} e^{-\lambda t} e^{-D_2 x_m^2 t}}{x_m} + \frac{1}{L} \int_0^t \tilde{g}_m(t') e^{-[D_2 x_m^2 + \lambda](t-t')} \left(1 + 2 \sum_{j=1}^{\infty} (-1)^j \cos(y_j (y-L)) e^{-D_2 y_j^2 (t-t')}\right) dt' \right]. \quad (18)$$

$$c_2(x, y, t) = c_0^{(2)} \left(1 - \frac{x}{x_0}\right) - \frac{2}{x_0} \sum_{m=1}^{\infty} \sin(x_m x) \left\langle \frac{c_0^{(2)} e^{-\lambda t} e^{-D_2 x_m^2 t}}{x_m} + \frac{1}{L} \int_0^t \tilde{g}_m(t') e^{-[D_2 x_m^2 + \lambda](t-t')} \left\{1 + 2 \sum_{j=1}^{\infty} (-1)^j \cos[y_j (y-L)] e^{-D_2 y_j^2 (t-t')}\right\} dt' \right\rangle. \quad (18)$$

Зазначимо, що для знаходження $\tilde{g}_m(t')$ використовуємо співвідношення (16) разом із виразами (13)-(15).

3. Числовий аналіз розподілів концентрації розпадної речовини у структурних елементах тіла

Проілюструємо та проаналізуємо характерні розподіли функцій концентрації розпадних домішкових частинок за глибиною тіла в областях Ω_1 і Ω_2 . Числові розрахунки проводилися за формулами (17) і (18) у безрозмірних змінних [5]

$$\xi = (k/D_1)^{1/2} x, \quad \zeta = (k/D_1)^{1/2} y, \quad \tau = kt, \quad (19)$$

де k — коефіцієнт, який має розмірність $[c^{-1}]$ [14]. Обчислення виконувалися із точністю $\varepsilon = 10^{-9}$. При цьому прийняті такі базові значення параметрів:

$\hat{\lambda} = k/\lambda = 0,1$; $\xi_0 = (k/D_1)^{1/2} x_0 = 10$; $\Lambda = (k/D_1)^{1/2} L = 0,1$; $\gamma = (k/D_1)^{1/2} l = 0,9$;
 $d = D_2/D_1 = 0,01$; $\eta_1/\eta_2 = 0,1$; $c_0^{(2)}/c_0^{(1)} = 0,1$; $\tau = 5$.

На рис. 1, 2 показані характерні розподіли за глибиною шару концентрацій домішкової речовини $c_1(\xi, \zeta, \tau)$ в середині області Ω_1 , для $\zeta_* = 0,05$ (рис. 1а) і $c_2(\xi, \zeta, \tau)$ в середині області Ω_2 $\zeta_* = 0,55$ (рис. 1б, рис. 2а, 2б) залежно від різних значень параметрів задачі. Суцільні лінії наведені для великих швидкостей конвективного перенесення в області Ω_1 ($\bar{v} = 2$), а штрихові — для малих значень ($\bar{v} = 0,2$).

На рис. 1 подані розподіли $c_i(\xi, \zeta, \tau)/c_0^{(i)}$ у різні моменти часу τ . На рис. 1а криві 1-5 відповідають значенням $\tau = 1; 3; 5; 10; 50$, а на рис. 1б — $\tau = 1; 3; 5; 10; 30$. На рис. 2 проілюстровано залежність розподілів функцій $c_i(\xi, \zeta, \tau)/c_0^{(i)}$ від різних значень коефіцієнта інтенсивності розпаду мігруючої речовини λ . Криві 1-5

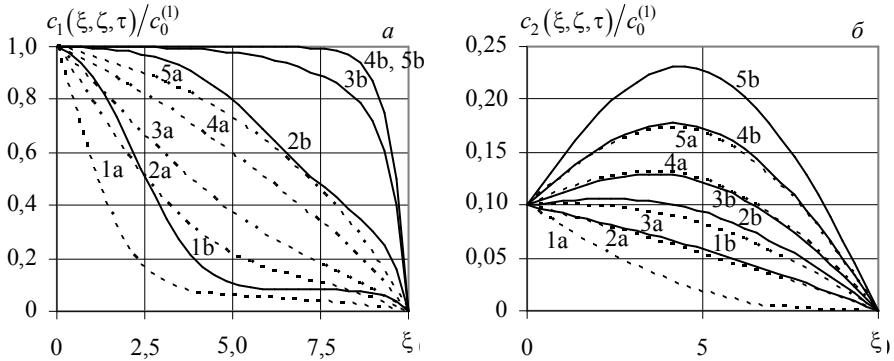


Рис. 1. Розподіли функцій концентрації домішки $c_1(\xi, \zeta, \tau)$ в області Ω_1 (а) і $c_2(\xi, \zeta, \tau)$ в області Ω_2 (б) у різні моменти безрозмірного часу τ ($\bar{v} = 2$ — суцільні лінії; для $\bar{v} = 0,2$ — штрихові лінії)

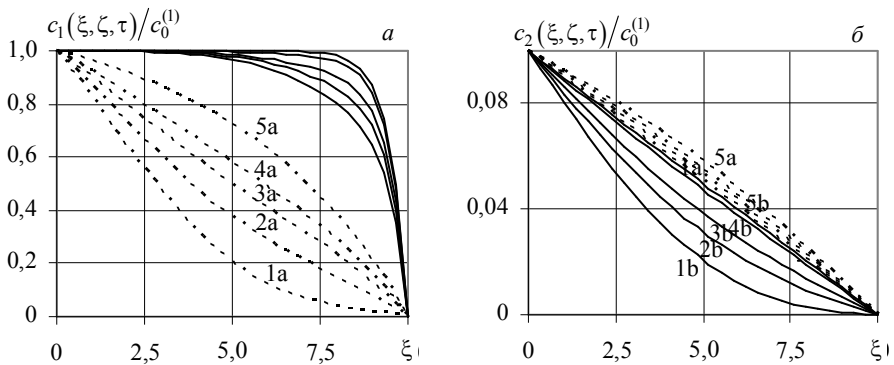


Рис. 2. Розподіли функцій концентрації розпадної домішки $c_1(\xi, \zeta, \tau)$ в області Ω_1 (а) і $c_2(\xi, \zeta, \tau)$ в області Ω_2 (б) для різних значень коефіцієнта інтенсивності розпаду λ

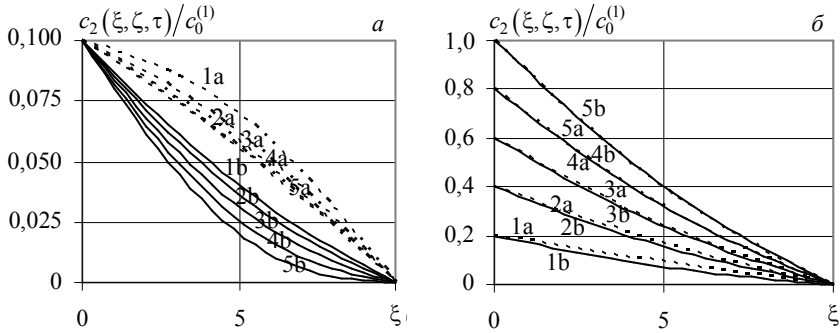


Рис. 3. Залежність функцій концентрації домішки $c_2(\xi, \zeta, \tau)$ в області Ω_2 від різних значень відношень коефіцієнтів концентраційної залежності хімічних потенціалів η_1/η_2 (а) та від різних значень відношення потужностей джерел маси $c_0^{(2)}/c_0^{(1)}$ (б)

відповідають значенням $\lambda = 0,01; 0,1; 0,2; 0,5; 1$. Рис. 3 демонструє залежність функцій концентрацій розпадних частинок в області Ω_2 від різних значень відношення $\eta_1/\eta_2 = 0,01; 0,05; 0,1; 0,15; 0,2$ (криві 1-5, рис. 3а) та для різних значень відношення потужностей джерел маси $c_0^{(2)}/c_0^{(1)} = 0,2; 0,4; 0,6; 0,8; 1$ (криві 1-5, рис. 3б).

Зазначимо, що суттєво відрізняються розподіли концентрації розпадної домішки в області тонких шарів Ω_1 , де масоперенесення відбувається як дифузійним, так і конвективним механізмами, і в області Ω_2 , де враховано тільки дифузію частинок. В області Ω_1 функція $c_1(\xi, \zeta, \tau)/c_0^{(1)}$ для більшості значень параметрів задачі має сталий або спадний характер (наприклад, рис. 1а). У той же час в області Ω_2 для більшості значень великих і для усіх малих швидкостей конвективного перенесення в області Ω_1 спостерігається зростання концентрації $c_2(\xi, \zeta, \tau)/c_0^{(1)}$ від верхньої поверхні $\xi = 0$ (рис. 1б).

Для малих часів τ і для усіх швидкостей конвективного перенесення \hat{v} характерне падіння концентрації розпадної речовини $c_1(\xi, \zeta, \tau)/c_0^{(1)}$ у тонких шарах одразу від поверхні, де діє джерело маси. Щодо значень концентрації $c_2(\xi, \zeta, \tau)/c_0^{(1)}$ в області Ω_2 , то вона спадає лише для малих швидкостей (криві 1а, 2а на рис. 1б). Зі збільшенням часу процесу масоперенесення концентрація розпадної домішки як в області Ω_1 так і в області Ω_2 — збільшується (рис. 1а, 3б). Якщо упродовж усього процесу масоперенесення значення концентрації $c_1(\xi, \zeta, \tau)/c_0^{(1)}$ в області Ω_1 не більше, ніж її значення, яке підтримується на поверхні Ω_1 , то в області Ω_2 спостерігається наявність локального максимуму $c_2(\xi, \zeta, \tau)/c_0^{(1)}$, який із часом зростає та стає глобальним приблизно в околі середини шару, перевищуючи значення на поверхні Ω_2 в рази (рис. 1б). Зазначимо, що для малих \hat{v} функція $c_1(\xi, \zeta, \tau)/c_0^{(1)}$ виходить на стаціонарний режим, якщо $\tau = 50$ (крива 5а на рис. 1а),

а для великих — якщо $\tau = 10$ (криві 4б, 5б на рис. 1б). В області Ω_2 функція $c_2(\xi, \zeta, \tau)/c_0^{(1)}$ виходить на стаціонарний режим, якщо $\tau = 100$ незалежно від коефіцієнта \hat{v} (рис. 1б).

Зазначимо, що значення коефіцієнта інтенсивності розпаду мігруючої речовини $\hat{\lambda}$ суттєво впливають на кількісний характер розподілів концентрації за глибиною в області Ω_1 особливо для малих швидкостей конвективного перенесення (рис. 2а), а в області Ω_2 — саме для великих швидкостей (рис. 2б).

Збільшення відношення коефіцієнтів η_1/η_2 , які визначають стрибок функції концентрації на границі контакту, не впливає на значення $c_1(\xi, \zeta, \tau)/c_0^{(1)}$ і зменшує значення функції $c_2(\xi, \zeta, \tau)/c_0^{(1)}$ в області Ω_2 на всьому проміжку $[0, \xi_0]$ (рис. 3а), причому для більших значень швидкостей конвективного перенесення відповідають менші значення концентрації розпадної домішки (рис. 3а). Зміна відношення коефіцієнтів дифузії $d = D_2/D_1$ не змінює поведінку функцій концентрації домішки в області тонких шарів. Проте в області Ω_2 зі зменшенням d значення $c_2(\xi, \zeta, \tau)/c_0^{(1)}$ зростають. При цьому великим значенням швидкості конвективного перенесення в області Ω_1 відповідають малі значення $c_2(\xi, \zeta, \tau)/c_0^{(1)}$.

4. Комп'ютерне моделювання міграції цезію-137 у доломіті

На основі отриманих формул (17), (18) і розроблених програмних модулів дослідимо дифузію цезію-137 у шарі ґрунту, в якому переважає доломітова порода. За даними робіт [15, 16] відомо, що радіоактивні частинки переважно перебувають у ґрунтовому розчині та в шарах води, міцнозв'язаних із поверхнею мінерального скелета. В області порового розчину частинки ^{137}Cs мають коефіцієнт дифузії $D_1^{137}\text{Cs} = 3 \cdot 10^{-13} \text{ м}^2/\text{с}$ [17], в адсорбованих шарах (для доломітового типу ґрунту) — $D_2^{137}\text{Cs} = 3,75 \cdot 10^{-15} \text{ м}^2/\text{с}$ [18]. Коефіцієнт конвективного перенесення $v = 3,7 \cdot 10^{-11} \text{ м}/\text{с}$. Враховуючи, що період піврозпаду для ^{137}Cs — 30,17 року, коефіцієнти інтенсивності розпаду ^{137}Cs $\lambda = 1,04 \cdot 10^{-8} \text{ с}^{-1}$. Товщина приповерхневого шару, в якому мігрує забруднююча речовина, $x_0 = 3 \text{ м}$, а товщина тонких шарів конвективного переміщення ^{137}Cs $L = 10^{-3} \text{ м}$. Ми прийняли, що $c_2^{(0)}/c_1^{(0)} = 0,9$. Це означає, що з поверхні в тонкі шари потрапляє 53 % поверхневого забруднення, а в адсорбовані на мінеральних монокристалах шари — 47 % радіоактивних частинок.

Числові розрахунки проводились у безрозмірних змінних (19). Тоді безрозмірні швидкість конвективного перенесення та відношення коефіцієнтів дифузії: $\hat{v} = 0,0037$, $d = D_2^{137}\text{Cs}/D_1^{137}\text{Cs} = 0,08$. Відношення $\eta_1/\eta_2 = 0,4$ визначалося зі значень коефіцієнтів сорбції-десорбції ^{137}Cs [18]. Розглянуто два випадки розподілів концентрації цезію-137 у структурних елементах тіла в різні моменти безрозмірного часу: $\tau_1 = 3$, $\tau_2 = 50$. $2\lambda = 2 \cdot 10^5$ і $2\lambda = 10^2$ — ширини тонкого шару та монокристалу у безрозмірних змінних.

На рис. 4 показано 3-D розподіли концентрації ^{137}Cs щодо $c_1^{(0)}$ за глибиною шару доломітового ґрунту та графіки рівнів однакових концентрацій цього радіонукліда в різні моменти безрозмірного часу τ_1 (рис. 4а) і τ_2 (рис. 4б).

Зазначимо, що упродовж усього процесу міграції концентрація ^{137}Cs значно вища у зоні тонких шарів, ніж в об'ємі матеріалу. Для малих часів τ розподіл функцій $c_i^{137\text{Cs}}/c_0^{(1)}$ має сталий характер в обох областях (рис. 4а). Зі збільшенням часу процесу масоперенесення концентрація цезію в області тонких шарів зростає, причому це відбувається одразу ж від верхньої поверхні $\xi = 0$, а в області Ω_2 — навпаки спостерігається його зниження, причому максимальне абсолютне значення досягається, якщо $\xi \approx \xi_0/2$ (в середині шару) (рис. 4б). Такі ефекти є результатом перерозподілу розпадних частинок цезію-137 між областями тонких шарів та основного матеріалу. Зазначимо, що функція $c_i^{137\text{Cs}}/c_1^{(0)}$ виходить на стаціонарний режим, якщо $\tau = 50$ (рис. 4б) незалежно від значень коефіцієнта швидкості конвективного перенесення ^{137}Cs у тонких шарах \hat{v} .

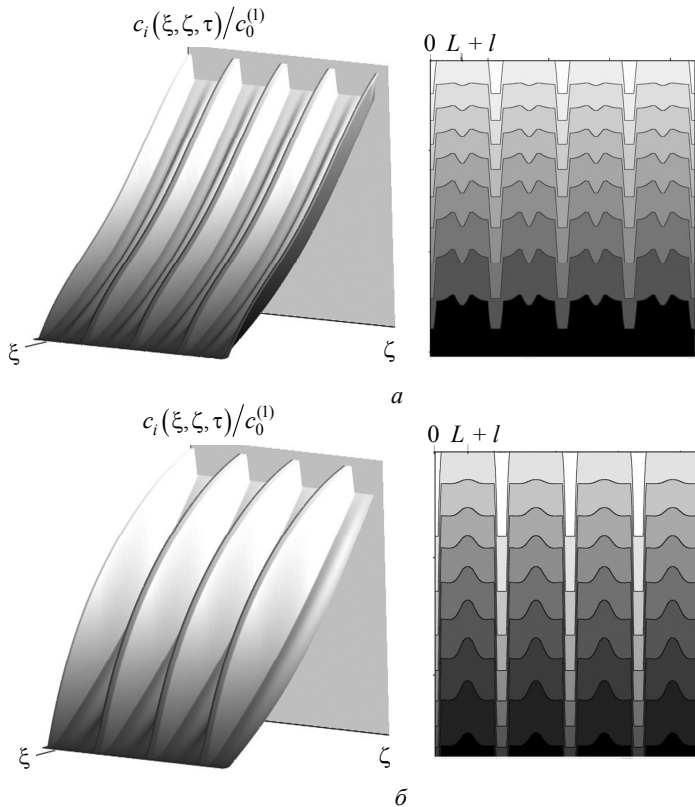


Рис. 4. Просторові розподіли функцій концентрації ^{137}Cs і рівні однакових концентрацій ^{137}Cs для малих значень безрозмірного часу τ_1 (а) та для великих значень безрозмірного часу τ_2 (б)

Висновки. Розглянуто контактну-крайову задачу масоперенесення домішкової речовини у двофазній регулярній структурі з урахуванням наявності тонких шарів швидкого переміщення частинок, у яких перенесення частинок відбувається як дифузійним, так і конвективним механізмами, а також з урахуванням масообміну між різними станами забруднення та розпаду мігруючої речовини. Точний аналітичний розв'язок задачі побудовано з допомогою інтегральних перетворень окремо в контактуючих областях. Зв'язок між цими інтегральними перетвореннями знайдено з неідеальних умов контакту на концентрацію на міжфазній границі. Показано, що розпад мігруючої речовини не впливає на інтенсивність потоку через границю контакту областей, з яких складене тіло, тобто на масообмін між контактуючими областями. Проте він значно впливає на кількісний характер розподілів її концентрації в області тонких шарів, особливо за малих швидкостей конвективного перенесення, а в області матеріалу — саме за великих. Проведено комп'ютерне моделювання міграції цезію-137 у шарі доломіту.

Перспективним для подальших досліджень є моделювання конвективної дифузії в тілах регулярної структури за наявності шарів швидкого переміщення частинок з урахуванням каскадного розпаду мігруючої речовини.

Література

- [1] Fisher J. S. Calculation of diffusion penetration curves for surface and grain boundary diffusion // J. Appl. Phys. — 1951. — Vol. 22. — P. 74-77.
- [2] Klinger L., Rabkin E. Diffusion along the grain boundaries in crystals with dislocations // Interface Science. — 1998. — Vol. 6. — P. 197-203.
- [3] Savula Y. H., Koukhar'skiy V. M., Chaplya Y. Y. Numerical analysis of advection diffusion in the continuum with thin canal // Numerical Heat Transfer. Part A. — 1998. — Vol. 38. — № 3. — P. 657-679.
- [4] Bonelli S. Approximate solution to the diffusion equation and its application to seepage-related problems // Applied Mathematical Modelling. — 2009. — Vol. 33. — P. 110-126.
- [5] Чапля С. Я., Чернуха О. Ю., Дмитрук В. А. Математичне моделювання стаціонарних процесів конвективно-дифузійного масопереносу у бінарних періодичних структурах // Доповіді НАН України. — 2011. — № 7. — С. 44-49.
- [6] Chaplya Y., Chernukha O., Dmytruk V. Advective-diffusive mass transfer in binary regular structures in the steady-state regime // Applied Mathematical Modelling. — 2013. — Vol. 37. — P. 6191-6211.
- [7] Гончарук В. С. Моделювання міграції розпадної речовини в тілах з каналами швидкого переміщення частинок // Моделювання та інформаційні технології. — Київ: Інститут проблем моделювання в енергетиці імені Г. С. Пухова НАН України. — 2013. — Вип. 68. — С. 114-124.
- [8] Бурак Я. Й., Чапля С. Я., Чернуха О. Ю. Континуально-термодинамічні моделі механіки твердих розчинів. — Київ: Наукова думка, 2006. — 272 с.
- [9] Снеддон И. Преобразования Фурье. — Москва: Изд-во иностр. литературы, 1955. — 667 с.
- [10] Chernukha O. Admixture mass transfer in a body with horizontally periodical structure // International Journal of Heat and Mass Transfer. — 2005. — Vol. 48. — P. 2290-2298.
- [11] Мартыненко Н. А., Пустыльников Л. М. Конечные интегральные преобразования и их применение к исследованию систем с распространенными параметрами. — Москва: Наука, 1986. — 304 с.
- [12] Камке Э. Справочник по обыкновенным дифференциальным уравнениям. — Москва: Наука, 1985. — 304 с.
- [13] Справочник по специальным функциям; под ред. М. Абрамовица и И. Стиган. — Москва: Наука, 1979. — 830 с.

- [14] Чапля Є. Я., Чернуха О. Ю. Фізико-математичне моделювання гетеродифузного масопереносу. — Львів: СПОЛОМ, 2003. — 128 с.
- [15] Фрид Ж. Загрязнение подземных вод. — Москва: Недра, 1981. — 304 с.
- [16] Борзилов В. А. Физико-математическое моделирование поведения радионуклидов // Природа. — 1991. — № 5. — С. 42-51.
- [17] Дунаева А. Н., Мироненко М. В. Сорбция цезия некоторыми глинистыми минералами // Геохимия. — 2000. — № 2. — С. 213-221.
- [18] Прохоров В. М. Миграция радиоактивных загрязнений в почвах. — Москва: Энергоатомиздат, 1981. — 106 с.

Simulation for redistribution of concentration of decaying particles diffusing in regular structures

Veronika Dmytruk, Volodymyr Goncharuk, Olha Chernukha

In this paper, the processes of admixture convective diffusion taking into account natural decay of migrating substance in two-phase structures with periodically located thin channels are investigated. With the help of integral transforms used separately in contacting domains, the analytic solution of the contact initial-boundary value problem of convective diffusion of decaying substance under the non-ideal contact conditions set on the function of concentration, and the boundary conditions of the first kind is obtained. A numerical analysis of the concentration distribution of migrating particles in the skeleton and thin channels over their natural decay process is carried out. It is shown that the intensity of the decay of the migrating substance has more quantitative affect on the distribution of concentration in the thin channels for small values of convective velocity, and for great ones in the material.

Компьютерное моделирование перераспределения концентрации распадающихся частиц, диффундирующих в регулярных структурах

Вероника Дмитрук, Владимир Гончарук, Ольга Чернуха

В работе исследованы процессы конвективной диффузии примесного вещества с учетом натурального распада мигрирующего вещества в двухфазных структурах с периодически расположенными тонкими слоями. С помощью соответствующих интегральных преобразований отдельно в контактирующих областях получено аналитическое решение контактно-краевой задачи конвективной диффузии распадающегося вещества при неидеальных условиях контакта, сформулированных на функцию концентрации, и краевых условий I-го рода. Проведен численный анализ распределений концентрации мигрирующих частиц в скелете и тонких слоях при их натуральном распаде в процессе миграции. Показано, что интенсивность распада мигрирующего вещества существенно влияет на количественный характер распределений ее концентрации в области тонких слоев для малых скоростей конвективного переноса, а в области материала — для больших.

Отримано 06.05.14