

Є.Я.Чапля, О.Ю.Чернуха, В.Є.Гончарук, В.В.Пабірівський, Ю.І.Білушак,
Центр математичного моделювання ІППММ НАНУ, м.Львів; НУ “Львівська
політехніка”, м.Львів; Університет Казіміра Великого у Бидгощі, м.Бидгощ,
Польща

МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ СТАЦІОНАРНОЇ ГЕТЕРОДИФУЗІЇ РОЗПАДНОЇ РЕЧОВИНИ У СЕРЕДОВИЩІ З ПАСТКАМИ

Abstract. In this paper the mathematical model for admixture mass transfer by two ways in a medium with traps taking into account processes of sorption-adsorption and natural decay of migration particles is considered. The natural dimensionless form is introduced. In the steady-state case analytical expressions for concentrations of decaying admixture particles in three physically different states and their total concentration are found as well as mass flows on fast and slow migration ways and total one.

Key-words: mathematical modelling, heterodiffusion, medium with traps, substance decay, mass flow

Анотація. В роботі розглянута математична модель масопереносу домішкової речовини двома шляхами у середовищі з пастками з урахуванням процесів сорбції-десорбції та натурального розпаду мігруючих частинок. Введена природна безрозмірна форма. У стаціонарному випадку знайдено аналітичні вирази для концентрацій розпадних частинок у трьох фізично різних станах, їхньої сумарної концентрації та потоків маси на швидкому і повільному шляхах міграції, а також сумарний потік частинок.

Ключові слова: математичне моделювання, гетеродифузія, середовище з пастками, розпад речовини, потік маси

Анотация. В работе рассмотрена математическая модель массопереноса примесного вещества двумя путями в среде с ловушками с учетом процессов сорбции-десорбции и натурального распада мигрирующих частиц. Введена природная безразмерная форма. В стационарном случае найдены аналитические выражения для концентраций распадающихся частиц в трех физически разных состояниях, их суммарной концентрации и потоков массы на быстром и медленном путях миграции, а также сумарный поток частиц.

Ключевые слова: математическое моделирование, гетеродиффузия, среда с ловушками, распад вещества, поток массы

Вступ. Оцінка захищено сті 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 шарях води та 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 і супроводжується локальними переходами з одного шляху дифузії на інший (з одного фізичного стану в інший). У цьому випадку говоримо про конвективну гетеродифузію домішкової субстанції одного сорту. Загальні основи опису гетеродифузійного переносу наведено в працях [8, 9], а в застосуванні до гетеродифузії радіонуклідів у пористих насичених середовищах у роботах [10-12].

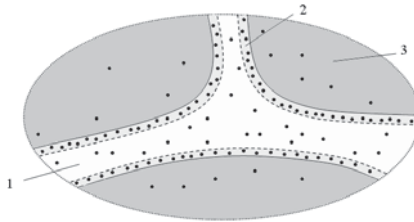


Рис.1. Характерна структура фізично малого елемента тіла. Область 1 займає водний поровий розчин, 2 – адсорбовані на скелеті ґрунту шари води, 3 – скелет ґрунту. Крапками умовно позначено частинки домішкової речовини

Як правило, коефіцієнт дифузії частинок в поровому розчині є на декілька порядків більшим ніж в адсорбованих на скелеті шарях води, а в свою чергу коефіцієнт дифузії в адсорбованих шарях є на декілька порядків більшим ніж в об'ємі елементів скелету. Часто коефіцієнт дифузії в елементах скелету є так малим, що їх можна вважати як пастки для цих частинок [4, 12].

В певних випадках рівноважний розподіл частинок між поровим розчином і адсорбованими шарями води є таким, що їхня концентрація в адсорбованих шарях є на декілька порядків більшою ніж в області порового розчину. Тоді потоки домішок у поровому розчині і адсорбованих шарях води будуть співмірними. Зазначимо, що в загальному випадку можна також додатково виділити фізичні стани домішкових частинок у нейтральній, катіонній і аніонній формі, як у поровому розчині, так і адсорбованих шарях води, а також зв'язаними з органічними сполуками (як розчинними, так нерозчинними у воді), тощо. Стислий огляд літератури стосовно мігруючих радіонуклідів наведених у роботах [10-12].

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, як правило, вже не представляє інтересу для подальшого вивчення. Прикладом таких агресивних субстанцій, як вже згадувалось, можуть бути радіонукліди.

Дана робота присвячена математичному моделюванню процесів гетеродифузії домішкової речовини, що розпадається, двома шляхами у середовищі з пастками з урахуванням локальних переходів між різними станами частинки (процеси типу сорбції–десорбції).

Об'єкт опису та постановка задачі. Розглядаємо однорідний та ізотропний насичений водою пористий шар товщиною L , який віднесений до прямокутної системи координат так, що початок осі Ox є на верхній поверхні шару і спрямована вниз, а осі Oy і Oz знаходяться 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 при протіканні дифузійних процесів. Знехтуємо можливим конвективним переносом частинок у адсорбованій на скелеті воді і в самому скелеті. Вважаємо нехтовно малою дифузію домішкових частинок в області скелету. Тоді в лінійному наближенні за змінами концентрацій, система рівнянь, що описує гетеродифузію домішок одного сорту двома шляхами в середовищі з пастками з урахуванням взаємних переходів частинок і їх натурального розпаду запишемо вигляді [11, 12]

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

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} — «перехрестні» коефіцієнти дифузії; λ_{11} , λ_{12} , λ_{32} і 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 їхня згортка (скалярний добуток).

В якості початкових і граничних умов у загальному випадку прийемо

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

$$c_1(x, y, z, \tau)|_{x=L} = c_2(x, y, z, \tau)|_{x=L} = c_3(x, y, z, \tau)|_{x=L} = 0, \quad (2)$$

де α — параметр розподілу частинок домішки між першим та 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 наступні

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

В цих безрозмірних змінних система рівнянь (1) і початкові та граничні умови (2) при постійних кінетичних коефіцієнтах частинок домішкової речовини запишемо у вигляді

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

а також

$$\begin{aligned} c_1(\xi_1, \xi_2, \xi_3, t)|_{t=0} &= c_2(\xi_1, \xi_2, \xi_3, t)|_{t=0} = c_3(\xi_1, \xi_2, \xi_3, t)|_{t=0} = 0, \\ c_1(\xi_1, \xi_2, \xi_3, t)|_{\xi_1=0} &= \alpha C_0, \quad c_2(\xi_1, \xi_2, \xi_3, t)|_{\xi_1=0} = (1 - \alpha) C_0, \quad c_3(\xi_1, \xi_2, \xi_3, t)|_{\xi_1=0} = 0, \\ c_1(\xi_1, \xi_2, \xi_3, t)|_{\xi_1=\xi_{1(0)}} &= c_2(\xi_1, \xi_2, \xi_3, t)|_{\xi_1=\xi_{1(0)}} = c_3(\xi_1, \xi_2, \xi_3, t)|_{\xi_1=\xi_{1(0)}} = 0, \\ \text{де } \vec{v}_\xi &= \vec{v}(\lambda_{12}/D_{11})^{1/2}, \quad d_1 = D_{12}/D_{11}, \quad d_2 = D_{21}/D_{11}, \quad d = D_{22}/D_{11}, \\ a &= \lambda_{11}/\lambda_{12}, \quad a_1 = \lambda_{33}/\lambda_{12}, \quad a_2 = \lambda_{32}/\lambda_{12}, \quad a_\lambda = \lambda/\lambda_{12}, \\ \vec{\nabla}_\xi &= \vec{i}^\alpha \partial/\partial \xi_\alpha, \quad \Delta_\xi = \vec{\nabla}_\xi \cdot \vec{\nabla}_\xi, \quad \xi_{1(0)} = (\lambda_{12}/D_{11})^{1/2} L. \end{aligned}$$

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

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

а також

$$c_1(\xi, t)|_{t=0} = c_2(\xi, t)|_{t=0} = c_3(\xi, t)|_{t=0} = 0,$$

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

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

Зазначимо, що умова термодинамічної рівноваги між різними фізичними станами в прийнятих позначеннях записується наступним чином. Між станами частинок у рухомій частині порового розчину і адсорбованими шарами води

$$ac_1^e - c_2^e = 0,$$

тобто величина $a = c_1^e/c_2^e$ є константою рівноваги відносно процесу переходу частинок між цими станами, або, якщо початкові значення концентрацій $C_1^{(0)}$ і $C_2^{(0)}$ є нульові, то це відомий у літературі коефіцієнт розподілу [4]. Індексом e зазначено рівноважні значення концентрацій.

Відповідно, між станами частинок у адсорбованих шарах води і об'ємі скелету ця умова рівноги буде

$$a_2c_2^e - a_1c_3^e = 0.$$

Тоді константа рівноваги для процесу переходу між цими станами визначається виразом $b = a_2/a_1 = c_3^e/c_2^e$.

Між станами домішкових частинок у поровому розчині та елементах скелету середовища безпосереднього переходу немає.

Судячи з опису умов експерименту та отриманих оцінок різними авторами [4-7, 15] величина a змінюється в широких межах $10^{-2} \div 10^3$. Відносно другої константи b дані в літературі відсутні. Певну оцінку коефіцієнтів a_1 і a_2 можна виконати, виходячи з припущень праці [16], тобто вважаючи, що процес сорбції (переходу) у „пастки” лімітується об'ємною дифузією частинок в елементах скелету.

Характеристики a і b є важливими для якісного аналізу процесу гетеродифузії. Зокрема, на верхній поверхні шару маємо термодинамічну рівновагу відносно процесу переходу частинок, якщо параметр $\alpha = (a+1)^{-1}$. Коли ж $\alpha > (a+1)^{-1}$, то частинки в приповерхневих шарах переходять зі швидкого шляху дифузії на повільний (з порового розчину в адсорбовані шари води), і в них слід очікувати нагромадження частинок, при цьому їхні концентрації більші ніж на поверхні. У протилежному випадку $\alpha < (a+1)^{-1}$ частинки з повільного шляху переходять на швидкий, і їх концентрація в приповерхневих шарах різко зменшується (є значно меншою ніж знайдена для середовища з ефективними характеристиками). Подібні міркування стосуються і характеристики b .

Стационарний випадок. Якщо $t \rightarrow \infty$, то задача (4), (5) набуде вигляду

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 c_1}{\partial \xi^2} + d_1 \frac{\partial^2 c_2}{\partial \xi^2} - a^\lambda c_1 + c_2 &= 0, \\ d_2 \frac{\partial^2 c_1}{\partial \xi^2} + d \frac{\partial^2 c_2}{\partial \xi^2} + a c_1 - a_1^\lambda c_2 &= 0 \end{aligned} \quad (6)$$

та

$$\begin{aligned} c_1(\xi)|_{\xi=0} &= \alpha C_0, \quad c_2(\xi)|_{\xi=0} = (1-\alpha)C_0, \\ c_1(\xi)|_{\xi=\xi_0} &= c_2(\xi)|_{\xi=\xi_0} = 0, \end{aligned} \quad (7)$$

де $a^\lambda = a + a_\lambda$ і $a_1^\lambda = [1 + a_\lambda + a_2(1 - a_1/(a_1 + a_\lambda))]$.

При цьому, якщо знайдена концентрація $c_2(\xi)$, то концентрація в пастках у стаціонарному випадку знаходиться з виразу

$$c_3 = \frac{a_2}{a_1 + a_\lambda} c_2. \quad (8)$$

Перейдемо до нових функцій, які задовольняють нульовим граничним умовам

$$f_1(\xi) = c_1(\xi) - \alpha c_0 \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0}\right), \quad f_2(\xi) = c_2(\xi) - (1-\alpha)c_0 \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0}\right),$$

Тоді гранична задача (6), (7) запишеться у вигляді

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 f_1}{\partial \xi^2} + d_1 \frac{\partial^2 f_2}{\partial \xi^2} - a^\lambda f_1 + f_2 - \alpha_a c_0 \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0}\right) &= 0, \\ d_2 \frac{\partial^2 f_1}{\partial \xi^2} + d \frac{\partial^2 f_2}{\partial \xi^2} + a f_1 - a_1^\lambda f_2 + \alpha_b c_0 \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0}\right) &= 0, \end{aligned} \quad (9)$$

з нульовими граничними умовами

$$f_1(\xi)|_{\xi=0} = 0, \quad f_2(\xi)|_{\xi=0} = 0, \quad f_1(\xi)|_{\xi=\xi_0} = f_2(\xi)|_{\xi=\xi_0} = 0, \quad (10)$$

де $\alpha_a = \alpha(1 + a^\lambda) - 1$, $\alpha_b = a\alpha - a_1^\lambda(1 - \alpha)$.

Введемо допоміжні позначення

$$A = -\alpha_a c_0 \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0}\right), \quad B = \alpha_b c_0 \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0}\right), \quad (11)$$

і подамо ці функції у вигляді

$$A = \sum_{k=1}^{\infty} A_k \sin y_k \xi, \quad B = \sum_{k=1}^{\infty} B_k \sin y_k \xi, \quad (12)$$

де

$$A_k = -c_0 \alpha_a \frac{2}{k\pi}, \quad B_k = c_0 \alpha_b \frac{2}{k\pi}. \quad (13)$$

Підставляючи у систему рівнянь (9) і умови (10) розклади функцій

$$f_i(\xi) = \sum_{k=1}^{\infty} f_{ik}(k) \sin y_k \xi \quad \text{і використовуючи вирази (11)-(13), отримаємо}$$

систему алгебраїчних рівнянь для знаходження коефіцієнтів розкладів f_{ik} :

$$\begin{aligned} (y_k^2 + a^\lambda) f_{1k} + (d_1 y_k^2 - 1) f_{2k} &= A_k, \\ (d_2 y_k^2 - a) f_{1k} + (d y_k^2 + a_1^\lambda) f_{2k} &= B_k. \end{aligned} \quad (14)$$

Для визначення функцій $f_{ik}(\tau)$ ($i=1,3, k=1,2,\dots$) запишемо основний визначник отриманої системи. Він має структуру

$$\Delta = d^* y_k^4 + d_a y_k^2 + a^*. \quad (15)$$

$$\text{де } d^* = d - d_1 d_2, \quad d_a = a_1^\lambda + a^\lambda + a d_1 d + d_2, \quad a^* = a^\lambda a_1^\lambda - a.$$

Запишемо допоміжні визначники

$$\Delta_1 = \frac{2c_0}{k\pi} (d_{1\alpha} y_k^2 - \alpha_1), \quad \Delta_2 = c_0 \frac{2}{k\pi} [d_{2\alpha} y_k^2 + \alpha_2],$$

$$\text{де } d_{1\alpha} = \alpha_b d_1 - \alpha_a d, \quad \alpha_1 = \alpha_a a_1^\lambda + \alpha_b, \quad d_{2\alpha} = \alpha_b + \alpha_a d_2, \quad \alpha_2 = \alpha_b a^\lambda - \alpha_a a.$$

Таким чином розв'язок системи рівнянь (14) запишеться у вигляді

$$\begin{aligned} f_{1k} &= \frac{\Delta_1}{\Delta} = \frac{2c_0}{k\pi} \frac{d_{1\alpha} y_k^2 - \alpha_1}{d^* y_k^4 + d_a y_k^2 + a^*}, \\ f_{2k} &= \frac{\Delta_2}{\Delta} = \frac{2c_0}{k\pi} \frac{d_{2\alpha} y_k^2 + \alpha_2}{d^* y_k^4 + d_a y_k^2 + a^*}, \end{aligned}$$

Тоді

$$\begin{aligned} f_1(\xi) &= \frac{2c_0}{\xi_0} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{d_{1\alpha} y_k^2 - \alpha_1}{y_k (d^* y_k^4 + d_a y_k^2 + a^*)} \sin y_k \xi, \\ f_2(\xi) &= \frac{2c_0}{\xi_0} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{d_{2\alpha} y_k^2 + \alpha_2}{y_k (d^* y_k^4 + d_a y_k^2 + a^*)} \sin y_k \xi, \end{aligned}$$

а для шуканих концентрацій $c_i(\xi)$, $i=1,2$ отримаємо

$$\begin{aligned} c_1(\xi) &= \alpha c_0 \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0} \right) + \frac{2c_0}{\xi_0} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{d_{1\alpha} y_k^2 - \alpha_1}{y_k (d^* y_k^4 + d_a y_k^2 + a^*)} \sin y_k \xi, \\ c_2(\xi) &= (1 - \alpha) c_0 \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0} \right) + \frac{2c_0}{\xi_0} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{d_{2\alpha} y_k^2 + \alpha_2}{y_k (d^* y_k^4 + d_a y_k^2 + a^*)} \sin y_k \xi, \end{aligned} \quad (16)$$

Обчислимо суми, які фігурують у виразах (16). Маємо

$$I_1(\xi) = \frac{2}{\pi} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{d_{1\alpha} y_k^2 - \alpha_1}{k (d^* y_k^4 + d_a y_k^2 + a^*)} \sin y_k \xi. \quad (17)$$

Спочатку розглянемо ряд

$$I_1'(\xi) = -\alpha_1 \frac{2}{\pi} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\sin y_k \xi}{k(d^* y_k^4 + d_a y_k^2 + a^*)}.$$

Знаменник цього ряду подамо у вигляді

$$k \left[d^* \frac{\pi^4}{\xi_0^4} k^4 + d_a \frac{\pi^2}{\xi_0^2} k^2 + a^* \right] = k(k^2 - b_1')(k^2 - b_2'),$$

де $b_{1,2}' = \frac{\xi_0^2}{2d^*} \left(-d_a \pm \sqrt{d_a^2 - 4a^* d^*} \right)$, причому $b_1', b_2' \leq 0$. Тому позначимо

$b_1 = -b_1', b_2 = -b_2'$ і перепишемо I_1' так

$$I_1' = -\alpha_1 \frac{2}{\pi} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\sin y_k \xi}{k(k^2 + b_1)(k^2 + b_2)}.$$

Розкладемо вираз $\frac{1}{(k^2 + b_1)(k^2 + b_2)}$ на прості дробі:

$$\frac{1}{(k^2 + b_1)(k^2 + b_2)} = \frac{A}{k^2 + b_1} + \frac{B}{k^2 + b_2} = \frac{(A+B)k^2 + Ab_2 + Bb_1}{(k^2 + b_1)(k^2 + b_2)}.$$

Звідси маємо $A+B=0$; $Ab_2 + Bb_1 = 1$.

Тоді знаходимо

$$A = \frac{1}{b_2 - b_1}, \quad B = \frac{-1}{b_2 - b_1}.$$

Вираз для I_1' запишемо у вигляді

$$I_1' = -\frac{2}{\pi} \frac{\alpha_1}{b_2 - b_1} \sum_{k=1}^{\infty} \left[\frac{\sin y_k \xi}{k(k^2 + b_1)} - \frac{\sin y_k \xi}{k(k^2 + b_2)} \right].$$

Враховуючи відомі формули [17], одержимо

$$I_1' = -2d^* \frac{\alpha_1}{b_2 - b_1} \left(\frac{1}{b_1} \left[1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\text{sh } \bar{a}_1(\xi_0 - \xi)}{\text{sh } \bar{a}_1 \xi_0} \right] - \frac{1}{b_2} \left[1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\text{sh } \bar{a}_2(\xi_0 - \xi)}{\text{sh } \bar{a}_2 \xi_0} \right] \right).$$

Тут $\bar{a}_j = \sqrt{b_j/2d^*}$, $j=1, 2$.

Тепер розглянемо другу частину ряду (17). Маємо

$$I_1'' = \frac{2\pi}{\xi_0^2} d_{1\alpha} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{k \sin y_k \xi}{d^* y_k^4 + d_a y_k^2 + a^*}.$$

Як і в попередньому випадку, розкладемо вираз під знаком суми на прості дробі:

$$I_{12} = I_1'' = \frac{2\pi}{\xi_0^2} \frac{d_{1\alpha}}{b_2 - b_1} \sum_{k=1}^{\infty} \left[\frac{k \sin y_k \xi}{k^2 + b_1} - \frac{k \sin y_k \xi}{k^2 + b_2} \right].$$

Використаємо відомий ряд [17]

$$\sum_{k=1}^{\infty} \frac{k \sin kx}{k^2 + a^2} = \frac{\pi \operatorname{sh}(\pi - x)a}{2 \operatorname{sh} \pi a}$$

і отримаємо

$$I_1'' = 2d^* \frac{d_{1\alpha}}{b_2 - b_1} \left(\frac{\operatorname{sh} \bar{a}_1(\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \bar{a}_1 \xi_0} - \frac{\operatorname{sh} \bar{a}_2(\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \bar{a}_2 \xi_0} \right).$$

Остаточо для I_1 одержимо

$$I_1 = 2 \frac{a_1 d^*}{b_2 - b_1} \left(\frac{A_{\alpha 1}}{b_1} \left[1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\operatorname{sh} \bar{a}_1(\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \bar{a}_1 \xi_0} \right] - \frac{A_{\alpha 1}}{b_2} \left[1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\operatorname{sh} \bar{a}_2(\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \bar{a}_2 \xi_0} \right] + A_{d1} \left[\frac{\operatorname{sh} \bar{a}_1(\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \bar{a}_1 \xi_0} - \frac{\operatorname{sh} \bar{a}_2(\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \bar{a}_2 \xi_0} \right] \right). \quad (18)$$

Значимо, що ряд у виразі для $c_2(\xi)$ (15) має структуру, аналогічну I_1 (18) в $c_1(\xi)$, відрізняючись лише коефіцієнтом. Тому ми можемо записати

$$I_2 = \frac{2}{\pi} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{A_{d2} y_k^2 - A_{\alpha 2}}{k [a_1 d^* y_k^4 + d_{a1} y_k^2 + a_{1\lambda}]} \sin y_k \xi,$$

де $A_{d2} = a_1 \alpha_a d_2 - a_2 a_1^\lambda (1 - \alpha)$, $A_{\alpha 2} = (1 - \alpha) a^\lambda a_2 a_1^\lambda + a_1 (a^\lambda \alpha_b + \alpha \alpha_a)$.

І в результаті маємо

$$I_2 = 2 \frac{a_1 d^*}{b_2 - b_1} \left(-\frac{A_{\alpha 2}}{b_1} \left[1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\operatorname{sh} \bar{a}_1(\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \bar{a}_1 \xi_0} \right] + \frac{A_{\alpha 2}}{b_2} \left[1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\operatorname{sh} \bar{a}_2(\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \bar{a}_2 \xi_0} \right] + A_{d2} \left[\frac{\operatorname{sh} \bar{a}_1(\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \bar{a}_1 \xi_0} - \frac{\operatorname{sh} \bar{a}_2(\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \bar{a}_2 \xi_0} \right] \right). \quad (19)$$

Для знаходження $c_3(\xi)$ скористаємось формулою (8).

Із врахуванням формул (18)-(19), (8) вирази для розподілів концентрацій $c_j(\xi)$ запишемо у вигляді

концентрація домішок у поровому розчині

$$c_1(\xi) = \alpha \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0} \right) + 2 \frac{a_1 d^*}{b_2 - b_1} \left(\frac{A_{\alpha 1}}{b_1} \left[1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\operatorname{sh} \bar{a}_1(\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \bar{a}_1 \xi_0} \right] - \frac{A_{\alpha 1}}{b_2} \left[1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\operatorname{sh} \bar{a}_2(\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \bar{a}_2 \xi_0} \right] + A_{d1} \left[\frac{\operatorname{sh} \bar{a}_1(\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \bar{a}_1 \xi_0} - \frac{\operatorname{sh} \bar{a}_2(\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \bar{a}_2 \xi_0} \right] \right), \quad (20a)$$

концентрація домішок на внутрішній поверхні скелету

$$c_2(\xi) = (1 - \alpha) \left(1 - \frac{\xi}{\xi_0} \right) + 2 \frac{a_1 d^*}{b_2 - b_1} \left(-\frac{A_{\alpha 2}}{b_1} \left[1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\text{sh } \bar{a}_1 (\xi_0 - \xi)}{\text{sh } \bar{a}_1 \xi_0} \right] + \frac{A_{\alpha 2}}{b_2} \left[1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\text{sh } \bar{a}_2 (\xi_0 - \xi)}{\text{sh } \bar{a}_2 \xi_0} \right] + A_{d2} \left[\frac{\text{sh } \bar{a}_1 (\xi_0 - \xi)}{\text{sh } \bar{a}_1 \xi_0} - \frac{\text{sh } \bar{a}_2 (\xi_0 - \xi)}{\text{sh } \bar{a}_2 \xi_0} \right] \right), \quad (20б)$$

концентрація частинок у «пастках»

$$c_3(\xi) = 2 \frac{a_1 d^*}{b_2 - b_1} \left(-\frac{A_{\alpha 2}}{b_1} \left[1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\text{sh } \bar{a}_1 (\xi_0 - \xi)}{\text{sh } \bar{a}_1 \xi_0} \right] + \frac{A_{\alpha 2}}{b_2} \left[1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\text{sh } \bar{a}_2 (\xi_0 - \xi)}{\text{sh } \bar{a}_2 \xi_0} \right] + A_{d2} \left[\frac{\text{sh } \bar{a}_1 (\xi_0 - \xi)}{\text{sh } \bar{a}_1 \xi_0} - \frac{\text{sh } \bar{a}_2 (\xi_0 - \xi)}{\text{sh } \bar{a}_2 \xi_0} \right] \right), \quad (20в)$$

сумарна концентрація домішкових частинок у середовищі

$$c(\xi) = 1 - \frac{\xi}{\xi_0} + \frac{2d^*}{b_2 - b_1} \left(\frac{B^*}{b_1} \left[1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\text{sh } \bar{a}_1 (\xi_0 - \xi)}{\text{sh } \bar{a}_1 \xi_0} \right] - \frac{B^*}{b_2} \left[1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\text{sh } \bar{a}_2 (\xi_0 - \xi)}{\text{sh } \bar{a}_2 \xi_0} \right] + B_d \left[\frac{\text{sh } \bar{a}_1 (\xi_0 - \xi)}{\text{sh } \bar{a}_1 \xi_0} - \frac{\text{sh } \bar{a}_2 (\xi_0 - \xi)}{\text{sh } \bar{a}_2 \xi_0} \right] \right). \quad (20г)$$

Тут $B^* = a_1 A_{\alpha 1} - (a_1 + a_1^\lambda) A_{\alpha 2}$, $B_d = a_1 A_{d1} - (a_1 + a_1^\lambda) A_{d2}$.

На рис.2 наведено розподіли концентрацій розпадної речовини, що мігрує двома шляхами у середовищі з пастками. Розподіли концентрацій $c_i(\xi)$ ($i = \overline{1,3}$), пораховані за формулами (20а)-(20в), відповідають кривим 1-3, сумарна концентрація $c(\xi)$ - кривій 4 на рис.2а при $\xi_0 = 10$, $d = 0,001$, $a_1 = 10$, $a_3 = 0,0001$, $a_4 = 0,9$, $\lambda = 5,5$, $\alpha = 1$. Рис.2б демонструє порівняльні розподіли сумарної концентрації для різних значень коефіцієнта поверхневого розподілу частинок між станами $\alpha = 1; 0.75; 0.5; 0.25; 0$ (криві 1-5).

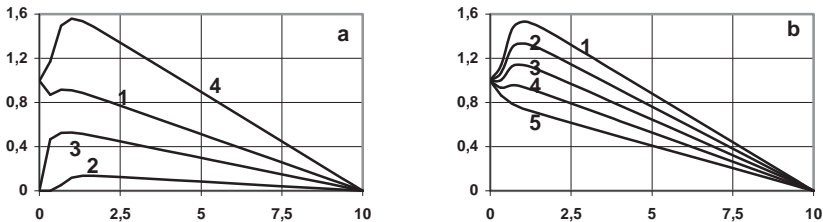


Рис.2. Розподіли концентрацій $c_i(\xi)$ і сумарна концентрація $c(\xi)$ (рис.а) і порівняльні розподіли $c(\xi)$ для різних α (рис.б)

Потоки розпадної домішкової речовини. При оцінці інтенсивності забруднення домішковими частинками водоносних горизонтів важливими характеристиками є потоки в рідкій фазі, по внутрішній поверхні скелету та їхня сума. Як впливає з кінетичних співвідношень [18] для даного випадку формули для потоків маси набудуть вигляду

$$J_1 = -D_{11} \frac{\partial c_1(x, \tau)}{\partial x} - D_{12} \frac{\partial c_2(x, \tau)}{\partial x},$$

$$J_2 = -D_{12} \frac{\partial c_1(x, \tau)}{\partial x} - D_{22} \frac{\partial c_2(x, \tau)}{\partial x}.$$

У безрозмірній формі (3) відповідно отримаємо

$$J_1 = -(\lambda_{12} D_{11})^{1/2} \left(\frac{\partial c_1(\xi, t)}{\partial \xi} + d_1 \frac{\partial c_2(\xi, t)}{\partial \xi} \right),$$

$$J_2 = -(\lambda_{12} D_{11})^{1/2} \left(d_2 \frac{\partial c_1(\xi, t)}{\partial \xi} + d \frac{\partial c_2(\xi, t)}{\partial \xi} \right). \quad (21)$$

При цьому сумарний потік домішкових частинок $J = J_1 + J_2$ через поверхню $\xi = \xi_*$ прийме вигляд

$$J(t) = -(\lambda_{12} D_{11})^{1/2} \left((1 + d_2) \frac{\partial c_1(\xi, t)}{\partial \xi} + (d + d_1) \frac{\partial c_2(\xi, t)}{\partial \xi} \right) \Bigg|_{\xi=\xi_*}. \quad (22)$$

Підставляючи у співвідношення (21) і (22) відповідні вирази для концентрацій (25), одержимо наступні формули для потоків через поверхню $\xi = \xi_*$ у стаціонарному випадку:

потік маси у поровому розчині

$$\frac{J_1}{c_0(\lambda_{12} D_{11})^{1/2}} = \frac{d_{1\alpha}}{\xi_0} + 2a_1 d^* \left((1 - d_1) \frac{A_{\alpha 1}}{b_1 b_2 \xi_0} - \frac{\tilde{A}_1}{b_2 - b_1} \frac{\bar{a}_1 \operatorname{ch} \bar{a}_1 (\xi_0 - \xi_*)}{\operatorname{sh} \bar{a}_1 \xi_0} + \frac{\tilde{A}_2}{b_2 - b_1} \frac{\bar{a}_2 \operatorname{ch} \bar{a}_2 (\xi_0 - \xi_*)}{\operatorname{sh} \bar{a}_2 \xi_0} \right),$$

потік в адсорбованих на скелеті шарах води

$$\frac{J_2}{c_0(\lambda_{12} D_{11})^{1/2}} = \frac{d_{2\alpha}}{\xi_0} + 2a_1 d^* \left((d_2 - d) \frac{A_{\alpha 2}}{b_1 b_2 \xi_0} - \frac{\tilde{B}_1}{b_2 - b_1} \frac{\bar{a}_1 \operatorname{ch} \bar{a}_1 (\xi_0 - \xi_*)}{\operatorname{sh} \bar{a}_1 \xi_0} + \frac{\tilde{B}_2}{b_2 - b_1} \frac{\bar{a}_2 \operatorname{ch} \bar{a}_2 (\xi_0 - \xi_*)}{\operatorname{sh} \bar{a}_2 \xi_0} \right),$$

сумарний потік домішкових частинок

$$\frac{J}{c_0(\lambda_{12} D_{11})^{1/2}} = \frac{d_{\alpha}^*}{\xi_0} + 2a_1 d^* \left(\frac{(1 - d_1) A_{\alpha 1} + (d_2 - d) A_{\alpha 2}}{b_1 b_2 \xi_0} - \right.$$

$$\left. - \frac{\tilde{A}_1 + \tilde{B}_1}{b_2 - b_1} \frac{\bar{a}_1 \operatorname{ch} \bar{a}_1 (\xi_0 - \xi_*)}{\operatorname{sh} \bar{a}_1 \xi_0} + \frac{\tilde{A}_2 + \tilde{B}_2}{b_2 - b_1} \frac{\bar{a}_2 \operatorname{ch} \bar{a}_2 (\xi_0 - \xi_*)}{\operatorname{sh} \bar{a}_2 \xi_0} \right), \quad (23)$$

де $d_{1\alpha} = \alpha + (1 - \alpha)d_1$, $d_{2\alpha} = \alpha d_2 + (1 - \alpha)d_1$, $d_\alpha^* = 1 + d_2 + (1 - \alpha)(d + d_1)$,
 $\tilde{A}_i = (1 - d_1)A_{\alpha 1}/b_i - (1 + d_1)A_{d1}$, $\tilde{B}_i = (d_2 - d)A_{\alpha 2}/b_i - (d_2 + d)A_{d2}$.

Якщо у формулах (23) покладемо $\xi_* = \xi_0$, то отримаємо потоки маси через «нижню» поверхню шару ґрунту, а саме потік маси у поровому розчині

$$\frac{J_{10}}{c_0(\lambda_{12}D_{11})^{1/2}} = \frac{d_{1\alpha}}{\xi_0} + 2a_1 d^* \left((1 - d_1) \frac{A_{\alpha 1}}{b_1 b_2 \xi_0} - \frac{\tilde{A}_1}{b_2 - b_1} \frac{\bar{a}_1}{\operatorname{sh} \bar{a}_1 \xi_0} + \frac{\tilde{A}_2}{b_2 - b_1} \frac{\bar{a}_2}{\operatorname{sh} \bar{a}_2 \xi_0} \right),$$

потік в адсорбованих на скелеті шарах води

$$\frac{J_{20}}{c_0(\lambda_{12}D_{11})^{1/2}} = \frac{d_{2\alpha}}{\xi_0} + 2a_1 d^* \left((d_2 - d) \frac{A_{\alpha 2}}{b_1 b_2 \xi_0} - \frac{\tilde{B}_1}{b_2 - b_1} \frac{\bar{a}_1}{\operatorname{sh} \bar{a}_1 \xi_0} + \frac{\tilde{B}_2}{b_2 - b_1} \frac{\bar{a}_2}{\operatorname{sh} \bar{a}_2 \xi_0} \right)$$

сумарний потік домішкових частинок

$$\frac{J_0}{c_0(\lambda_{12}D_{11})^{1/2}} = \frac{d_\alpha^*}{\xi_0} + 2a_1 d \left(\frac{(1 - d_1)A_{\alpha 1} + (d_2 - d)A_{\alpha 2}}{b_1 b_2 \xi_0} - \frac{\tilde{A}_1 + \tilde{B}_1}{b_2 - b_1} \frac{\bar{a}_1}{\operatorname{sh} \bar{a}_1 \xi_0} + \frac{\tilde{A}_2 + \tilde{B}_2}{b_2 - b_1} \frac{\bar{a}_2}{\operatorname{sh} \bar{a}_2 \xi_0} \right).$$

Зазначимо, якщо в отриманих формулах для концентрацій і потоків маси покласти $\lambda = 0$, то одержані результати співпадуть з наведеними в [11, 12].

Висновки. Таким чином досліджена математична модель гетеродифузії розпадної речовини у середовищі з пастками. Введена природна безрозмірна форма, яка не використовує ні розміри тіла чи його неоднорідностей, ні характерних просторово-часових масштабів змін процесу гетеродифузії. При цьому введені змінні стискають часову вісь і розтягують осі просторових координат.

У стаціонарному випадку знайдено аналітичні вирази для концентрацій розпадних частинок у трьох фізично різних станах, процеси масопереносу в яких супроводжуються процесами типу сорбції-десорбції і натурального розпаду мігруючих частинок, та їхньої сумарної концентрації. Зазначимо, що отримані залежності суттєво відрізняються від класичних (лінійних), які знаходяться з розв'язків незв'язаної системи рівнянь гетеродифузії або з поодиноким рівнянням з ефективними характеристиками, не враховуючи розпад домішкової речовини. Причому доданки типу $\operatorname{sh} \bar{a}_j (\xi_0 - \xi) / \operatorname{sh} \bar{a}_j \xi_0$ вносять суттєвий вклад в розподіли концентрацій у приповерхневому шарі і показують збільшення концентрації радіонуклідів в околі границі ґрунту. Також

зауважимо, що врахування розпаду домішкових частинок призводить до посилення нелінійності в асимптотичних доданках у формулах як для кожного стану домішки, так і для її сумарної концентрації.

1. *Сытников А.* Динамика воды в насыщенных и ненасыщенных грунтах зон аэрации. – Киев: Наукова думка, 1978. – 156 с.
2. *Фрид Ж.* Загрязнение подземных вод. – М.: Недра, 1981. – 304 с.
3. *Бэр Я., Заславски Д., Ирмей С.* Физико-математические основы фильтрации воды. – М.: Мир, 1971. – 451 с.
4. *Прохоров В. М.* Миграция радиоактивных загрязнений в повах. – М.: 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 ^{137}Cs в почвах в зоне аварии на Чернобыльской АЭС // Почвоведение. – 1991. – № 9. – С. 31-40.
8. *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.
9. *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.
10. *Чапля Е. Я., Чернуха О. Ю.* Кінетика переносу домішок при локальній зміні стану частинок (1. Модельні представлення, гетеродифузія двома шляхами). – Львів, 1993. – 44 с. – (Препрінт/АН України. Центр мат. моделювання ІППММ; № 3-93).
11. *Чапля Е. Я., Чернуха О. Ю.* Кінетика переносу домішок при локальній зміні стану частинок (2. Гетеродифузія двома шляхами у тілі з пастками). – Львів, 1993. – 28 с. (Препрінт/АН України. Центр мат. моделювання ІППММ; № 5-93).
12. *Чапля Е. Я., Чернуха О. Ю.* Фізико-математичне моделювання гетеродифузного масопереносу. – Львів: СПОЛЮМ, 2003. – 125 с.
13. Радиоактивное загрязнение природных сред при подземных ядерных взрывах и методы его прогнозирования / Под ред. Израэля Ю. А. – Л.: Гидрометеоздат, 1970. – 67 с.
14. *Пристер Б. С., Перепелятникова Л. В., Омеляненко Н. П.* Вертикальная и горизонтальная миграция радионуклидов в агроландшафтах зоны аврии на Чернобыльской АЭС // Докл. АН Украины. – 1993. – № 1. – С. 163-171.
15. *Коноплев А. В., Копылова А. П., Бобовникова Ц. И., Сиверина А. А.* Распределение ^{90}Sr и ^{137}Cs в системе донные отложения – вода водоемов ближней зоны Чернобыльской АЭС // Метеорология и гидрология. – 1992. – № 1. – С. 35-42.
16. *Долін В. В., Бондаренко Г. М., Соботович Е. В.* Дифузійний механізм міграції ^{137}Cs і ^{90}Sr паливних випадань ЧАЕС // Доп. АН України. – 1990. – № 12. – С. 6-9.
17. *Прудников А. П., Брычков Ю. А., Маричев О. И.* Интегралы и ряды. Элементарные функции. – М.: Наука, 1981. – 798 с.
18. *Бурак Я.Й., Чапля Е.Я., Чернуха О.Ю.* Континуально-термодинамічні моделі механіки твердих розчинів. – К.: Наукова думка, 2006. – 272 с.

Поступила 9.9.2013р.