

В.А.Дмитрук, Центр математичного моделювання ІППММ НАНУ, м.Львів,
НУ “Львівська політехніка”

МОДЕЛЮВАННЯ МІГРАЦІЇ РОЗПАДНОЇ РЕЧОВИНИ В ТІЛАХ З РЕГУЛЯРНО РОЗТАШОВАНИМИ ТОНКИМИ ПРОШАРКАМИ У СТАЦІОНАРНОМУ ВИПАДКУ

Abstract. In this article stationary processes of decaying admixture migration are studied in structures with periodically arranged thin layers taking into account convective phenomena in these layers. The exact analytic solutions of the formulated contact boundary value problems of decaying admixture diffusion in two-phase regular structures accounting for the convective mass transfer mechanism in one of the phases is constructed using special integral transforms individually to each contacting domain. A numerical analysis of the concentration distribution of migrating particles is carried out in the skeleton and in thin layers at their natural decay process for steady migration. It is shown that the decay of the migrating substance significantly affects the quantitative and qualitative distribution of concentration in the skeleton.

Key-words: diffusion, convection, decaying admixture, integral transform, regular structure, thin layer

Анотація. В даній статті досліджуються стаціонарні процеси міграції домішки в двофазних структурах з періодично розташованими тонкими шарами з урахуванням конвективних явищ в них та розпаду мігруючої речовини. Отримано точні аналітичні розв'язки сформульованої контактної-крайової задачі дифузії розпадної домішки, які побудовані за допомогою застосування різних інтегральних перетворень окремо в контактуючих областях. Проведено числовий аналіз розподілів концентрації мігруючих частинок в скелеті основного матеріалу і тонких шарах за їхнього натурального розпаду для стаціонарного процесу міграції. Показано, що врахування розпаду мігруючої речовини суттєвіше впливає на кількісний та якісний характер розподілів її концентрації в скелеті основного матеріалу для великих швидкостей конвективного перетворення.

Ключові слова: дифузія, конвекція, розпадна речовина, інтегральне перетворення, періодична структура, тонкий шар

Вступ. Прогнозування поширення забруднень в елементах ландшафтно-геохімічних систем набуває першочергового значення для економії матеріальних ресурсів при ліквідації наслідків масштабних техногенних катастроф [1]. Необхідно вміти оцінювати здатність природних матеріалів утримувати небезпечні елементи в зоні аварії, так само як визначати закономірності їхнього концентрування і розповсюдження в конкретному фізико-хімічному середовищі (земля, ґрунти, поверхневі та підземні води, мули, зависі, аерозолі тощо). У зв'язку з цим виникає підвищений інтерес до задач масоперенесення у структурно неоднорідних пористих середовищах, і,

зокрема до моделювання таких процесів у ґрунті в силу того, що це середовище володіє високою ємністю поглинання. Необхідно зазначити, що існуючі моделі дифузійного вертикального перенесення домішкової речовини [2, 3, 4, 5] для їх застосовності для опису міграції речовини в ґрунті потребують деякого уточнення. При моделюванні міграції розпадної речовини в ґрунті необхідно враховувати наявність тонких шарів швидкого переміщення домішкової речовини, в яких перенесення частинок відбувається як дифузійним так і конвективним механізмами [5], а також масообмін між різними станами забруднення і розпад мігруючої речовини.

У даній роботі отримано точні аналітичні розв'язки контактної-крайової задачі конвективної дифузії розпадної домішки в двофазних структурах з періодично розташованими тонкими шарами та відповідні аналітичні вирази для функції концентрації домішкової речовини у стаціонарному випадку з врахуванням розпаду мігруючої речовини. Проведено числовий аналіз розподілів концентрації мігруючих частинок в скелеті і тонких шарах за їх натурального розпаду в процесі міграції.

Контактно-крайова задача стаціонарної конвективної дифузії розпадної домішки в регулярних структурах з періодично розташованими тонкими шарами. Моделюємо структуру ґрунту як сукупність мінеральних монокристалів, які утворюють пористий скелет [6], і розділені тонкими шарами швидкого переміщення розпадних частинок (рис. 1). Якщо ґрунт розглядати як структуру з геометрично правильними вclusions, то реальну неупорядковану структуру можна замінити регулярною структурою, яка має певну періодичність за просторовими координатами [6]. Тоді необхідно знаходити розв'язок задачі для виділеного елемента тіла, який містить один або декілька тонких шарів.

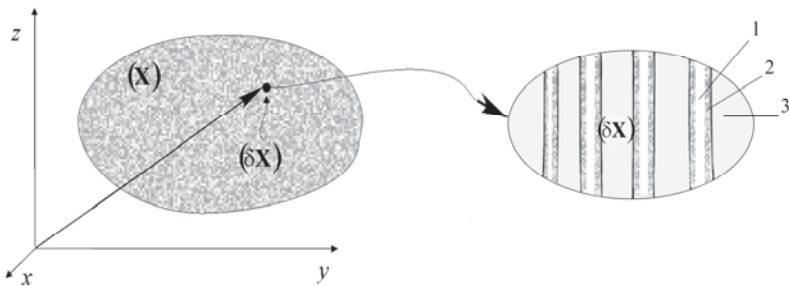


Рис.1. Характерна структура фізично малого елемента ґрунту: 1 - водний поровий розчин; 2 – адсорбовані на скелеті ґрунту шари води; 3 – скелет ґрунту

Тому структуру ґрунту розглядаємо як шар товщини x_0 , який складається з періодично розташованих областей двох типів. Области з коефіцієнтом дифузії D_1 мають ширину $2L$, а з коефіцієнтом D_2 - $2l$, $L \ll l$, крім цього в областях з коефіцієнтом дифузії D_1 враховано

конвективне перенесення частинок зі швидкістю v , яка приймається відомою і сталою. Така структура має сімейство площин симетрії, які ділять навпіл сусідні контактуючі області. Тому можемо виділити елемент тіла, на вертикальних границях якого потоки в напрямку осі Oy , дорівнюють нулю.

У стаціонарному випадку концентрація розпадної домішкової речовини $c_1^\infty(x, y)$ в області $\Omega_1 =]0; x_0[\times]0; L[$ визначається з рівняння конвективної дифузії [5]

$$D_1 \left[\frac{\partial^2 c_1^\infty}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c_1^\infty}{\partial y^2} \right] - v \frac{\partial c_1^\infty}{\partial x} - \lambda c_1^\infty = 0, \quad x, y \in \Omega_1. \quad (1)$$

В області $\Omega_2 =]0; x_0[\times]L; L+l[$ концентрація частинок домішки $c_2^\infty(x, y)$, що розпадається, задовольняє рівняння дифузії

$$D_2 \left[\frac{\partial^2 c_2^\infty}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c_2^\infty}{\partial y^2} \right] - \lambda c_2^\infty = 0, \quad x, y \in \Omega_2, \quad (2)$$

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

Приймаємо, що на поверхні шару $x=0$ підтримується постійні значення концентрацій, а на поверхні $x=x_0$ концентрації дорівнюють нулю.

$$\begin{aligned} c_1^\infty(x, y) \Big|_{x=0} &= c_0^{(1)} \equiv \text{const}, \quad c_2^\infty(x, y) \Big|_{x=0} = c_0^{(2)} \equiv \text{const}, \\ c_1^\infty(x, y) \Big|_{x=x_0} &= c_2^\infty(x, y) \Big|_{x=x_0} = 0. \end{aligned} \quad (3)$$

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

$$\frac{\partial c_1^\infty(x, y)}{\partial y} \Big|_{y=0} = 0, \quad \frac{\partial c_2^\infty(x, y)}{\partial y} \Big|_{y=L+l} = 0. \quad (4)$$

На границях контакту фаз на функцію концентрації накладено неідеальні умови [4]:

$$\eta_1 c_1^\infty(x, y) \Big|_{y=L} = \eta_2 c_2^\infty(x, y) \Big|_{y=L}, \quad (5)$$

$$D_1 \frac{\partial c_1^\infty(x, y)}{\partial y} \Big|_{y=L} = D_2 \frac{\partial c_2^\infty(x, y)}{\partial y} \Big|_{y=L}, \quad (6)$$

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

Розв'язок контактної-крайової задачі дифузії (1)-(6) будемо шукати з допомогою інтегральних перетворень в контактуючих областях.

Виконаємо інтегральні перетворення за змінною y окремо в областях Ω_1 і Ω_2 . Для того, щоб застосувати перетворення Фур'є необхідно знати

величину відповідних функцій або їхніх похідних на границях області перетворення [5]. При $y = 0$ і $y = L+l$ граничні умови (6) дають значення функцій $\partial c_1^\infty / \partial y$ на границі області Ω_1 і $\partial c_2^\infty / \partial y$ на границі Ω_2 . На інших границях областей Ω_1 і Ω_2 (поверхні контакту) величини $\partial c_i^\infty / \partial y$ є невідомими. Доозначимо їх, враховуючи другу контактну умову (6). Вона означає, що на границі контакту $y = L$ масові потоки рівні між собою і, в свою чергу, дорівнюють деякій функції $g^\infty(x)$, тобто

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

Звідси отримаємо значення функцій $\partial c_i^\infty / \partial y$ на поверхні $y = L$:

$$\left. \frac{\partial c_1^\infty}{\partial y} \right|_{y=L} = \frac{1}{D_1} g^\infty(x), \quad \left. \frac{\partial c_2^\infty}{\partial y} \right|_{y=L} = \frac{1}{D_2} g^\infty(x). \quad (8)$$

Тоді за змінною y можемо виконати скінченне інтегральне cos-перетворення в області Ω_1 [7]: $y \rightarrow y_k = k\pi/L$, $c_1^\infty(x, y) \rightarrow \bar{c}_1^\infty(x, k)$, та cos-перетворення із зсувом в області Ω_2 [8]: $y \rightarrow y_j = j\pi/l$, $c_2^\infty(x, y) \rightarrow \bar{c}_2^\infty(x, j)$.

В зображенні контактної-крайова задача (1)-(5), (8) набуде вигляду

$$D_1 \frac{d^2 \bar{c}_1^\infty(x)}{dx^2} - v \frac{d \bar{c}_1^\infty(x)}{dx} - (D_1 y_k^2 + \lambda) \bar{c}_1^\infty(x) + (-1)^k g^\infty(x) = 0, \quad (9)$$

$$D_2 \frac{d^2 \bar{c}_2^\infty(x)}{dx^2} - D_2 y_j^2 \bar{c}_2^\infty(x) - g^\infty(x) = 0, \quad x \in]0; x_0[; \quad (10)$$

$$\bar{c}_1^\infty(x) \Big|_{x=0} = a_k c_0^{(1)}, \quad \bar{c}_2^\infty(x) \Big|_{x=0} = a_j c_0^{(2)},$$

$$\bar{c}_1^\infty(x) \Big|_{x=x_0} = \bar{c}_2^\infty(x) \Big|_{x=x_0} = 0, \quad (11)$$

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

За змінною x в області Ω_1 застосуємо наступне перетворення [9]

$$\bar{c}_1^\infty(n, k) = \int_0^{x_0} \tilde{c}_1^\infty(x, k) e^{-v_D x} \sin(x_n x) dx, \quad (12)$$

$$\tilde{c}_1^\infty(x, k) = \frac{2}{x_0} e^{v_D x} \sum_{n=1}^{\infty} \sin(x_n x) \bar{c}_1^\infty(n, k), \quad (13)$$

де $v_D = v/2D_1$, $x_n = n\pi/x_0$, а в області Ω_2 - скінченне інтегральне sin-

перетворення Фур'є [7]: $x \rightarrow x_m = m\pi/x_0$, $\tilde{c}_2^\infty(x, j) \rightarrow \bar{c}_2^\infty(m, j)$.

Тоді з (9)-(11) отримаємо такі алгебраїчні рівняння

$$\begin{aligned} -[D_1(v_D^2 + x_n^2 + y_k^2) + \lambda] \tilde{c}_1^\infty + D_1 x_n a_k c_0^{(1)} + (-1)^k \bar{g}_n^\infty &= 0, \\ -[D_2(x_m^2 + y_j^2) + \lambda] \bar{c}_2^\infty(m, j) - D_2 a_j x_m c_0^{(2)} + \bar{g}_m^\infty &= 0. \end{aligned}$$

Звідси знаходимо

$$\bar{c}_1^\infty = \frac{1}{D_1(v_D^2 + x_n^2 + y_k^2) + \lambda} [D_1 a_k c_0^{(1)} x_n + (-1)^k \bar{g}_n^\infty], \quad (14)$$

$$\bar{c}_2^\infty(m, j) = \frac{1}{D_2(x_m^2 + y_j^2) + \lambda} [D_2 a_j c_0^{(2)} x_m - \bar{g}_m^\infty]. \quad (15)$$

Зауважимо, що у виразах (14) і (15) залишаються невідомими функції \bar{g}_n^∞ і \bar{g}_m^∞ .

Виконаємо обернені перетворення за змінною x . Враховуючи вирази для a_k і a_j , запишемо їх окремо для нульових і ненульових членів рядів по k і j :

$$\begin{aligned} \bar{c}_1^\infty(x, k) \Big|_{k=0} &= \frac{2}{x_0} e^{v_D x} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{D_1 x_n L c_0^{(1)} + \bar{g}_n^\infty}{D_1(v_D^2 + x_n^2) + \lambda} \sin(x_n x), \\ \bar{c}_1^\infty(x, k) \Big|_{k \neq 0} &= \frac{2}{x_0} e^{v_D x} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{D_1(v_D^2 + x_n^2 + y_k^2) + \lambda} \bar{g}_n^\infty \sin(x_n x), \\ \bar{c}_2^\infty(x, j) \Big|_{j=0} &= \frac{2}{x_0} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{D_2 x_m l c_0^{(2)} - \bar{g}_m^\infty}{D_2 x_m^2 + \lambda} \sin(x_m x), \\ \bar{c}_1^\infty(x, j) \Big|_{j \neq 0} &= -\frac{2}{x_0} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{1}{D_2(x_m^2 + y_j^2) + \lambda} \bar{g}_m^\infty \sin(x_m x). \end{aligned}$$

Після застосування відповідних обернених перетворень за змінною y одержимо

$$c_1^\infty(x, y) = \frac{2}{x_0} e^{v_D x} \sum_{n=1}^{\infty} \left[\frac{c_0^{(1)} x_n}{\psi_n^2} + \frac{\bar{g}_n^\infty}{D_1} \tilde{R}_n(y) \right] \sin(x_n x), \quad (16)$$

$$c_2^\infty(x, y) = \frac{2}{x_0} \sum_{m=1}^{\infty} \left[\frac{c_0^{(2)} x_m}{\tilde{\psi}_m^2} - \frac{\bar{g}_m^\infty \operatorname{ch}[\tilde{\psi}_m(L + l - y)]}{D_2 \tilde{\psi}_m \operatorname{sh}(\tilde{\psi}_m l)} \right], \quad (17)$$

де $\tilde{R}_n(y) = \frac{\operatorname{ch}(\psi_n y)}{\operatorname{sh}(\psi_n L)} / \psi_n + \left(1 - \frac{1}{L}\right) / \psi_n^2$, $\psi_n = \sqrt{v_D^2 + x_n^2 + \lambda/D_1}$,

$$\tilde{\psi}_m = \sqrt{x_m^2 + \lambda/D_2},$$

$$\bar{g}_n^\infty = \int_0^{x_0} g^\infty(x) e^{-v_D x} \sin(x_n x) dx, \quad \bar{g}_m^\infty = \int_0^{x_0} g^\infty(x) \cos(x_m x) dx. \quad (18)$$

У виразах (16), (17) залишаються невідомими функції \bar{g}_n^∞ і \bar{g}_m^∞ . Шукатимемо їх з першої контактної умови (5) стрибка функції концентрації на границі розділу областей Ω_1 та Ω_2 . Підставляємо вирази (16), (17) в умову (5) і одержуємо таке рівняння

$$\eta_1 e^{v_D x} \sum_{n=1}^{\infty} \sin(x_n x) \left\{ \frac{c_0^{(1)} x_n}{\psi_n^2} + \frac{\tilde{g}_n^\infty}{D_1} R_n \right\} = \eta_2 \sum_{m=1}^{\infty} \sin(x_m x) \left\{ \frac{c_0^{(2)} x_m}{\tilde{\psi}_m^2} - \frac{\tilde{g}_m^\infty}{D_2 \tilde{\psi}_m} \text{cth}(\tilde{\psi}_m l) \right\}, \quad (19)$$

де $R_n = \text{cth}(\psi_n L) / \psi_n + \left(1 - \frac{1}{L}\right) / \psi_n^2$.

Для знаходження зв'язку між функціями \bar{g}_n^∞ і \bar{g}_m^∞ розглянемо співвідношення, обернене до першого співвідношення (18), тобто

$$g^\infty(x) = \frac{2}{x_0} e^{v_D x} \sum_{n=1}^{\infty} \bar{g}_n^\infty \sin(x_n x). \quad (20)$$

Домножимо обидві частини цієї рівності на $\sin(x_m x)$ і проінтегруємо по x від 0 до x_0 , тобто застосуємо скінченне інтегральне перетворення Фур'є (12) за змінною x . Маємо

$$\int_0^{x_0} g^\infty(x) \sin(x_m x) dx = \int_0^{x_0} \frac{2}{x_0} e^{v_D x} \sin(x_m x) \sum_{n=1}^{\infty} \bar{g}_n^\infty \sin(x_n x) dx.$$

Ліва частина цієї рівності є \bar{g}_m^∞ . Тоді після інтегрування отримаємо

$$\bar{g}_m^\infty = \frac{1}{x_0} \sum_{n=1}^{\infty} A_{n,m} \bar{g}_n^\infty, \quad (21)$$

де коефіцієнти $A_{n,m}$ визначаються наступним чином

$$A_{n,m} \equiv \frac{2v_D \pi^2}{x_0^2} \frac{nm \left[(-1)^{n+m} e^{v_D x_0} - 1 \right]}{\left\{ v_D^2 + \frac{\pi^2}{x_0^2} (n-m)^2 \right\} \left\{ v_D^2 + \frac{\pi^2}{x_0^2} (n+m)^2 \right\}}. \quad (22)$$

З іншого боку, якщо розглянемо рівність

$$g^\infty(x) = \frac{2}{x_0} \sum_{m=1}^{\infty} \bar{g}_m^\infty \sin(x_m x)$$

і застосуємо до неї скінченне інтегральне \sin -перетворення (12), то отримаємо

$$\int_0^{x_0} g^\infty(x) e^{-v_D x} \sin(x_n x) dx = \int_0^{x_0} \frac{2}{x_0} \sum_{m=1}^{\infty} \bar{g}_m^\infty \sin(x_m x) e^{-v_D x} \sin(x_n x) dx.$$

Враховуючи, що за формулою (18) ліва частина цієї рівності є \bar{g}_n^∞ , одержимо

$$\bar{g}_n^\infty = \frac{2}{x_0} \sum_{m=1}^{\infty} B_{n,m} \bar{g}_m^\infty, \quad (23)$$

де

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

Зазначимо також, що

$$B_{n,m} = -\frac{(-1)^{n+m} e^{-v_D x_0} - 1}{(-1)^{n+m} e^{v_D x_0} - 1} A_{n,m}.$$

Зауважимо, що, зважаючи на співвідношення (21) і (23), для знаходження розв'язку задачі необхідно визначити лише одну з функцій \bar{g}_n^∞ і \bar{g}_m^∞ .

Подамо перший доданок у правій частині (19) у вигляді розвинення за n . Її другий доданок з урахуванням співвідношення (21) перетворимо до вигляду

$$\sum_{m=1}^{\infty} \sin(x_m x) \frac{\bar{g}_m^\infty \operatorname{cth}(\tilde{\psi}_m L)}{D_2 \tilde{\psi}_m} = \left(\frac{2}{x_0} \right)^2 e^{v_D x} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=1}^{\infty} A_{n,m} B_{n,m} \frac{\bar{g}_n^\infty \operatorname{cth}(\tilde{\psi}_m L)}{D_2 \tilde{\psi}_m} \sin(x_n x).$$

Тоді рівняння (19) можна звести до форми

$$\begin{aligned} & \eta_1 e^{v_D x} \sum_{n=1}^{\infty} \sin(x_n x) \left\{ \frac{c_0^{(1)} x_n}{\psi_n^2} + \frac{\bar{g}_n^\infty}{D_1} R_n \right\} = \\ & = \eta_2 \sum_{m=1}^{\infty} \frac{2}{x_0} e^{v_D x} \sum_{n=1}^{\infty} \sin(x_n x) \left\{ \frac{c_0^{(2)} x_m}{\tilde{\psi}_m^2} B_{n,m} - \frac{2}{x_0} \frac{\operatorname{cth}(\tilde{\psi}_m l)}{D_2 \tilde{\psi}_m} B_{n,m} A_{n,m} \bar{g}_n^\infty \right\}. \end{aligned}$$

Звідси знаходимо

$$\begin{aligned} \bar{g}_n^\infty = & \frac{D_1 D_2 \left(\frac{2\eta_2}{x_0} c_0^{(2)} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{x_m}{\tilde{\psi}_m^2} B_{n,m} - \eta_1 \frac{c_0^{(1)} x_n}{\psi_n^2} \right)}{\eta_1 D_2 R_n + \eta_2 D_1 \frac{4}{x_0^2} \sum_{m=1}^{\infty} \frac{\operatorname{cth}(\tilde{\psi}_m l)}{\tilde{\psi}_m} B_{n,m} A_{n,m}}. \end{aligned} \quad (24)$$

І остаточно функції концентрації домішкової речовини (16), (17) набудуть вигляду

$$c_1^\infty(x, y) = e^{v_D x} \left\{ c_0^{(1)} \frac{\text{sh}(\sqrt{v_D^2 + \lambda/D_1}(x_0 - x))}{\text{sh}(\sqrt{v_D^2 + \lambda/D_1}x_0)} + \frac{2}{x_0 D_1} \sum_{n=1}^{\infty} \sin(x_n x) \bar{g}_n^\infty \tilde{R}_n(y) \right\}, \quad (25)$$

$$c_2^\infty(x, y) = c_0^{(2)} \frac{\text{sh}(\sqrt{\lambda/D_2}(x_0 - x))}{\text{sh}(\sqrt{\lambda/D_2}x_0)} - \frac{2}{x_0 D_2} \sum_{m=1}^{\infty} \sin(x_m x) \bar{g}_m^\infty \frac{\text{ch}[\tilde{\psi}_m(L + l - y)]}{\tilde{\psi}_m \text{sh}(\tilde{\psi}_m l)}. \quad (26)$$

Зазначимо, що для знаходження \bar{g}_m^∞ використовуємо співвідношення (21) разом з виразом (24).

Таким чином для стаціонарного випадку отримано точний аналітичний розв'язок контактної-крайової задачі дифузії розпадної речовини у двофазній регулярній структурі з урахуванням конвективної складової в одній з фаз.

Числовий аналіз концентрації розпадної речовини в структурних елементах тіла. Дослідимо тепер вплив характеристик середовища на поведінку та значення концентрації розпадних частинок за глибиною виділеного елемента як в скелеті основного матеріалу Ω_2 , так і в тонких шарах Ω_1 . Числові розрахунки проведені за формулами (25) і (26) в безрозмірних змінних [4, 5, 6, 8, 10] $\xi = (k/D_1)^{1/2} x$, $\zeta = (k/D_1)^{1/2} y$, де k - коефіцієнт, який має розмірність $[c^{-1}]$. Обчислення виконувались з точністю $\varepsilon = 10^{-7}$. За базові прийнято такі значення параметрів задачі: $\hat{\lambda} = k/\lambda = 0.1$, $\eta_1/\eta_2 = 0.1$, $\xi_0 = (k/D_1)^{1/2} x_0 = 10$, $c_0^{(2)}/c_0^{(1)} = 0.1$, $d = D_2/D_1 = 0.01$, $\Lambda = (k/D_1)^{1/2} L = 0.1$, $\gamma = (k/D_1)^{1/2} l = 0.9$.

На рис.2-4 показані характерні розподіли за глибиною шару концентрацій домішкової речовини $c_1^\infty(\xi, \zeta)$ в середині області Ω_1 при $\zeta_* = 0.05$ (рис.2а, 3а) і $c_2^\infty(\xi, \zeta)$ в середині області Ω_2 $\zeta_* = 0.55$ (рис.2б, 3б, 4а, 4б) в залежності від різних значень параметрів задачі. Суцільні лінії наведені для великих швидкостей конвективного перенесення в області Ω_1 ($\hat{v}=2$), а штрихові – для малих значень ($\hat{v}=0.2$). На рис.2 показаний вплив швидкості конвективного перенесення частинок в області Ω_1 на значення і поведінку функцій $c_i^\infty(\xi, \zeta)$. Тут криві 1а-5а відповідають малим значенням $\hat{v} = (k_2 D_1)^{-1/2} v = 0.1; 0.2; 0.3; 0.4; 0.5$, а криві 1б-5б – великим значенням $\hat{v} = 1; 2; 3; 4; 5$. На рис.3 проілюстровано залежність розподілів функцій $c_i^\infty(\xi, \zeta)/c_0^{(1)}$ від різних значень коефіцієнта інтенсивності розпаду мігруючої речовини $\hat{\lambda}$. Криві 1-5 відповідають значенням $\hat{\lambda} = 0.01, 0.1, 0.2, 0.5, 1$. Рис.4 демонструє залежність функцій концентрацій розпадних частинок в області

Ω_2 від різних значень відношення коефіцієнтів концентраційної залежності хімічних потенціалів $\eta_1/\eta_2 = 0.1; 0.2; 0.3; 0.4; 0.5$ (криві 1-5, рис.4а) та для різних значень відношення потужностей джерел маси $c_0^{(2)}/c_0^{(1)} = 0.1; 0.2; 0.5; 0.8; 1$ (криві 1-5, рис.4б).

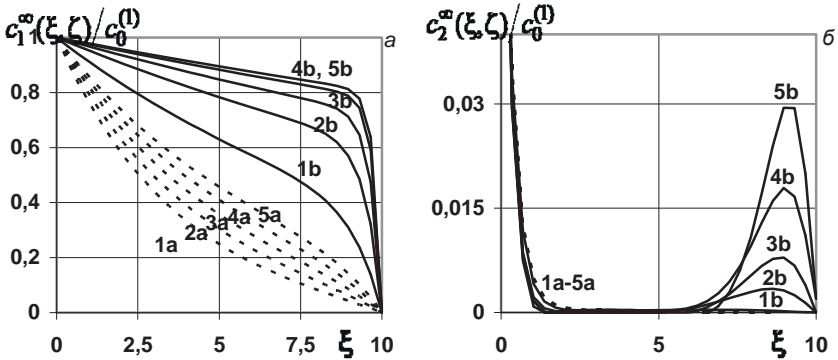


Рис.2. Розподіли функцій концентрації розпадної домішки $c_1^\infty(\xi, \zeta)$ в області Ω_1 (а) і $c_2^\infty(\xi, \zeta)$ в області Ω_2 (б) для різних значень швидкості конвективного перенесення \hat{v}

Зазначимо, що характер розподілів концентрації розпадної домішки в області основного матеріалу Ω_2 , де концентрація визначається рівнянням дифузії, і в області тонких шарів Ω_1 , де враховується ще й конвективна складова масоперенесення, суттєво відрізняється. В області дифузії розпадної домішки Ω_2 її концентрація різко падає практично від самої поверхні $\xi = 0$ (рис. 2б, 3б, 4б) і змінюється в межах похибки на більшій частині шляху міграції. При цьому для великих значень швидкості конвективного перенесення в області тонких шарів Ω_1 - в області Ω_2 спостерігається зростання концентрації мігруючої речовини біля нижньої поверхні шару $\xi = \xi_0$ (рис. 2б) і поява локального максимуму функції концентрації (за рахунок частинок, які переходять із сусідньої області). Зазначимо, що чим більша швидкість конвективного перенесення в області тонких шарів, тим більших абсолютних значень набуває функція концентрації в області Ω_2 . У той же час, в області тонких шарів Ω_1 функція $c_i^\infty(\xi, \zeta)/c_0^{(1)}$ для більшості значень параметрів задачі має монотонно спадний характер (наприклад, рис. 2а, 3а). Проте із ростом значень швидкості конвективного перенесення концентрація розпадних частинок суттєво зростає, але не перевищує значення $c_0^{(1)}$, яке підтримується на поверхні тіла $\xi = 0$.

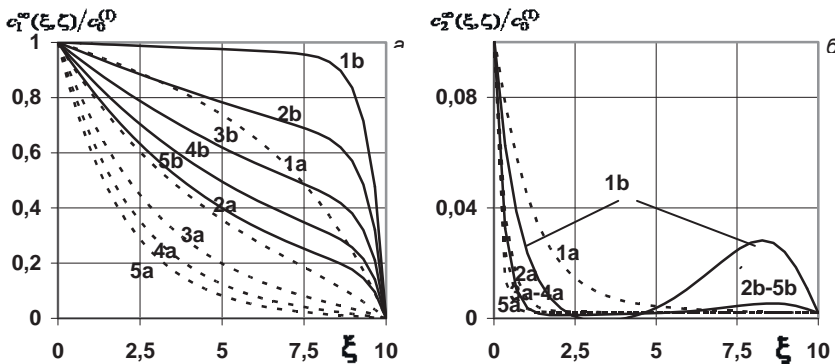


Рис.3. Розподіли функцій концентрації розпадної домішки $c_1^\infty(\xi, \zeta)$ в області Ω_1 (а) і $c_2^\infty(\xi, \zeta)$ в області Ω_2 (б) для різних значень коефіцієнта інтенсивності розпаду λ ($\hat{\nu}=2$ – суцільні лінії; для $\hat{\nu}=0.2$ – штрихові лінії)

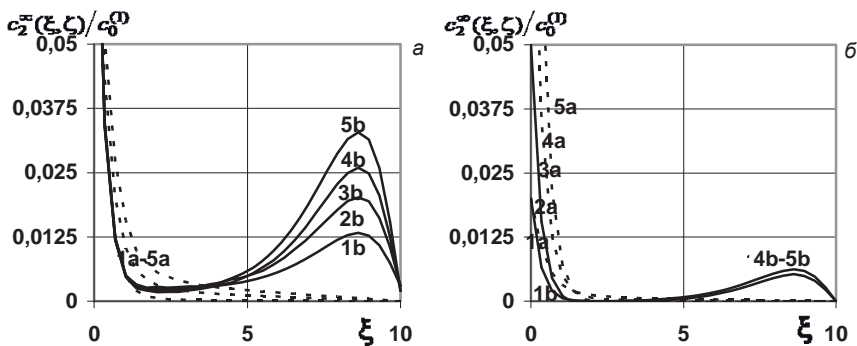


Рис.4. Залежність функцій концентрації розпадної домішки $c_2^\infty(\xi, \zeta)$ в області Ω_2 від різних значень відношень коефіцієнтів концентраційної залежності хімічних потенціалів η_1/η_2 (а) та від різних значень відношення потужностей джерел маси $c_0^{(2)}/c_0^{(1)}$ (б)

Зауважимо також, що такі параметри задачі як відношення коефіцієнтів концентраційної залежності хімічних потенціалів η_1/η_2 , які визначають стрибок концентрації на міжфазній границі, і відношення $d = D_2/D_1$ коефіцієнтів дифузії в контактуючих областях суттєво впливають на значення функції $c_i^\infty(\xi, \zeta)/c_0^{(i)}$, не змінюючи при цьому її поведінки (рис. 4а).

Щодо впливу відношення потужностей джерел маси, що підтримуються на поверхнях областей Ω_1 і Ω_2 - $c_0^{(2)}/c_0^{(1)}$ на розподіли функцій концентрації

$c_i^\infty(\xi, \zeta)/c_0^{(1)}$, то тільки значне збільшення потужності джерела маси $c_0^{(2)}$ може призвести до зростання концентрації в області Ω_2 і появи максимуму цієї функції біля нижньої границі виділеного елемента (рис. 4б).

Зазначимо, що місце розташування поверхні контакту $\zeta = \Lambda$ практично не впливає на розподіл концентрації по глибині в області Ω_1 , а в області Ω_2 спостерігається незначний вплив у нижніх областях шару.

Зауважимо, що поряд із швидкістю конвективного перенесення домішки в області тонких шарів параметром задачі, який найбільше впливає на функцію концентрації розпадної домішки є коефіцієнт інтенсивності розпаду мігруючої речовини $\hat{\lambda}$. За глибиною в області Ω_1 він змінює розподіли $c_i^\infty(\xi, \zeta)/c_0^{(1)}$ як якісно, так і кількісно для усіх швидкостей конвективного перенесення (рис. 3а), а в області Ω_2 - особливо для великих швидкостей (рис. 3б). Причому із збільшенням значень інтенсивності розпаду домішки $\hat{\lambda}$ спостерігається зниження рівня концентрації домішки, яка мігрує в шарі.

Висновки. Розглянуто стаціонарні процеси дифузії домішкової речовини в двофазних структурах з періодично розташованими тонкими шарами з урахуванням періодичного характеру конвективних явищ та розпаду мігруючої речовини. Крайова задача математичної фізики сформульована за неідеальних умов контакту на функцію концентрації. Розв'язок задачі конвективної дифузії розпадних частинок отримано застосуванням інтегральних перетворень окремо в контактуючих областях з урахуванням різних видів операторних рівнянь. Врахування розпаду мігруючої речовини привело до зміни лінійного доданку у виразі для функції концентрації в області скелета на нелінійний. Проведений числовий аналіз розподілів концентрації мігруючих частинок в скелеті і тонких шарах за їхнього натурального розпаду підтвердив, що врахування розпаду мігруючої речовини суттєвіше впливає на кількісний та якісний характер розподілів її концентрації в скелеті основного матеріалу.

Для подальших досліджень моделювання потоків маси через довільні перерізи тіла з урахуванням розпаду мігруючої речовини є перспективним.

1. Чорнобиль. 1986-1987рр. Участь установ НАН України у подоланні наслідків катастрофи. – Київ : Академперіодика, 2005. – 492 с.
2. Fisher J. Calculation of diffusion penetration curves for surface and grain boundary diffusion // J.Appl.Phys. – 1951. – Vol. 22. – P. 74-77.
3. Ху С. Диффузия в кремнии и германии / В кн.: Атомная диффузия в полупроводниках. – Под ред. Шоу Д. – М.: Мир, 1975. – С. 248-405.
4. Чапля С., Чернуха О. Математичне моделювання дифузійних процесів у випадкових і регулярних структурах. - К.: Наук. думка, 2009. – 302 с.
5. Chaplya Y., Chernukha O., Dmytruk V. Advective-diffusive mass transfer in binary regular structures in the steady-state regime // Applied Math. Modelling. – 2013. – V. 37. – P.6191-6211.

6. Гончарук В. Моделювання міграції розпадної речовини в тілах з каналами швидкого переміщення частинок // Моделювання та інформаційні технології. – 2013. – Вип. 68. – С. 114-124.
7. Снеддон И. Преобразования Фурье. – М.: Изд-во иностр. литературы, 1955. – 667 с.
8. Дмитрук В. Моделювання стаціонарних процесів конвективної дифузії у двофазних тілах періодичної структури за змішаних граничних умов структурах / В. Дмитрук // Моделювання та інформаційні технології. – 2011. – Вип. 59. – С. 161-170.
9. Мартыненко Н.А., Пустыльников Л.М. Конечные интегральные преобразования и их применение к исследованию систем с распространенными параметрами. – М.: Наука, 1986. – 304 с.
10. Чернуха О.Ю., Гончарук В.С., Дмитрук В.А. Моделювання граничних випадків контактної-крайової задачі стаціонарної конвективної дифузії в періодичних структурах // Моделювання та інформаційні технології. – 2010. – Вип. 58. – С. 242-253.

Поступила 20.01.2014р.

УДК 621.311

О.Тимченко^{3,4}, А. Вовк⁴

ІНФОРМАЦІЙНІ ТЕХНОЛОГІЇ ПІДТРИМКИ ВИРОБНИЧИХ ПРОЦЕСІВ В СКЛАДНИХ АГРЕГОВАНИХ СТРУКТУРАХ З ВИКОРИСТАННЯМ САПР І АСУ-ТП

Анотація В статті розглянуто методи побудови систем підтримки прийняття рішень агрегованими структурами з використанням інформаційних технологій і засобів штучного інтелекту в САПР і АСУ-ТП.

Аннотация В статье рассмотрены методы построения систем поддержки принятия решений агрегированными структурами с использованием информационных технологий и средств искусственного интеллекта в САПР и АСУ-ТП.

Abstract The paper deals with methods for constructing decision support systems aggregated structures using information technology and artificial intelligence in CAD and ACS-TP.

Ключові слова: інформація, дані, знання, управління.

Ключевые слова: информация, данные, знания, управления.

Keywords: information, data, knowledge, management.

Актуальність.

Стрімкий розвиток сучасних технологій виробництва з агрегрованою структурою потокових ліній з циклічним та неперервним режимом вимагає

³ Uniwersytet Warmińsko-Mazurski w Olsztynie

⁴ Українська академія друкарства