
УДК 517.955:544.034.23

А.Я. Бомба, д-р техн. наук, **Е.В. Присяжнюк**, аспирант
Ровенский государственный гуманитарный университет
(Украина, 33028, Ровно, ул. Остафова, 31, каб. 110,
e-mail: lenapris@ukr.net)

Моделирование нелинейных сингулярно возмущенных процессов двухкомпонентного конвективно-диффузионного массопереноса в нанопористой среде

Разработана математическая модель сингулярно возмущенного процесса конвективно-диффузионно-адсорбционного массопереноса двух сортов загрязняющего вещества в среде, состоящей из частиц микропористой структуры. Соответствующая краевая задача решена в криволинейном четырехугольном параллелепипеде. Построено асимптотическое разложение ее решения, что дает возможность автономно дополнять к конвективной составляющей решения его массообменные и диффузионные составляющие, а также поправки на выходе фильтрационного течения и влияние боковых источников загрязнений. Приведены результаты численных расчетов.

Розроблено математичну модель сингулярно збуреного процесу конвективно-дифузійно-адсорбційного масопереносу двох сортів забруднюючої речовини в середовищі, що складається з частинок мікропористої структури. Відповідну крайову задачу розв'язано в криволинійному чотирикутному паралелепіді. Побудовано асимптотичне розкладання її розв'язку, що дає можливість автономно доповнювати до конвективної складової розв'язку масообмінні та дифузійні складові, а також поправки на виході фільтраційної течії та вплив бічних джерел забруднень. Наведено результати числових розрахунків.

К л ю ч е в ы е с л о в а: конвекция, диффузия, массоперенос, нанопористая среда.

Процессы разделения многокомпонентных смесей широко распространены во многих отраслях промышленности. Анализ результатов исследований [1—10] свидетельствует о наличии сложной структуры взаимозависимостей различных факторов, определяющих процессы одно- и многокомпонентного конвективно-диффузионного массопереноса в пористых и нанопористых средах. В работах [1, 2] рассмотрены проблемы математического моделирования массопереноса различной природы в пористых средах без учета внутренней структуры пористых частиц. Компетитивная диффузия загрязняющего вещества в кристаллических средах частиц микропористой

© А.Я. Бомба, Е.В. Присяжнюк, 2015

структуры исследована в работах [7, 8]. Актуальным является математическое моделирование процессов многокомпонентного массопереноса в нанопористых средах в случае превалирования одних составляющих процесса над другими, что приводит к появлению малого параметра при соответствующих членах уравнения.

Исследуем взаимовлияние массопереноса компонентов при моделировании сингулярно возмущенных процессов очистки жидкости от многокомпонентных примесей в среде, состоящей из частиц микропористой структуры в случае превалирования конвективных составляющих процесса над другими (диффузионными, массообменными).

Постановка задачи. В области $G = G_z \times (0, R^*) \times (0, \infty)$, где $G_z = ABCDA_*B_*C_*D_*$ — однородный криволинейный параллелепипед, ограниченный гладкими ортогональными между собой в угловых точках и по ребрам эквипотенциальными поверхностями $ABB_*A_* = \{z: f_1(x, y, z) = 0\}$, $CDD_*C_* = \{z: f_2(x, y, z) = 0\}$ и поверхностями течения $ADD_*A_* = \{z: f_3(x, y, z) = 0\}$, $BCC_*B_* = \{z: f_4(x, y, z) = 0\}$, $ABCD = \{z: f_5(x, y, z) = 0\}$, $A_*B_*C_*D_* = \{z: f_6(x, y, z) = 0\}$ (рис. 1, а), рассмотрим следующую модельную задачу процесса двухкомпонентного конвективно-адсорбционно-диффузионного массопереноса в наносреде частиц микропористой структуры [7, 10]:

$$D_{j1}\Delta\tilde{c}_1 + D_{j2}\Delta\tilde{c}_2 - \mathbf{v} \operatorname{grad} \tilde{c}_j - \left(S_{j1} \frac{\partial \tilde{q}_1}{\partial r} + S_{j2} \frac{\partial \tilde{q}_2}{\partial r} \right) \Big|_{r=R^*} = \sigma_1 \frac{\partial \tilde{c}_j}{\partial t}, \quad (1)$$

$$D_{j1}^* \left(\frac{\partial^2 \tilde{q}_1}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial \tilde{q}_1}{\partial r} \right) + D_{j1}^* \left(\frac{\partial^2 \tilde{q}_2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial \tilde{q}_2}{\partial r} \right) = \sigma_2 \frac{\partial \tilde{q}_j}{\partial t}, \quad (2)$$

$$\tilde{c}_j(x, y, z, t) \Big|_{t=0} = \tilde{c}_j^0(x, y, z), \quad \tilde{q}_j(x, y, z, r, t) \Big|_{t=0} = \tilde{q}_j^0(x, y, z, r), \quad j = \overline{1, 2},$$

$$\tilde{c}_j \Big|_{ABB_*A_*} = \tilde{c}_{j^*}(M, t), \quad \tilde{c}_j \Big|_{CDD_*C_*} = \tilde{c}_j^*(M, t), \quad \tilde{c}_j \Big|_{BCC_*B_*} = \tilde{c}_{j^{**}}(M, t), \quad (3)$$

$$\tilde{c}_j \Big|_{ADD_*A_*} = \tilde{c}_j^{**}(M, t), \quad \tilde{c}_j \Big|_{ABCD} = \tilde{c}_{j^{***}}(M, t), \quad \tilde{c}_j \Big|_{A_*B_*C_*D_*} = \tilde{c}_j^{***}(M, t),$$

$$\tilde{q}_j(x, y, z, r, t) \Big|_{r=R^*} = k_j \tilde{c}_j(x, y, z, t), \quad \frac{\partial \tilde{q}_j(x, y, z, r, t)}{\partial r} \Big|_{r=0} = 0, \quad (4)$$

$$\mathbf{v} = \operatorname{grad} \varphi, \quad \operatorname{div} \mathbf{v} = 0, \quad \varphi \Big|_{ABB_*A_*} = \varphi^*, \quad \varphi \Big|_{DCC_*D_*} = \varphi^*,$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial n} \Big|_{ADD_*A_* \cup A_*D_*C_*B_* \cup BCC_*B_* \cup ADCB} = 0. \quad (5)$$

Здесь $\tilde{c}_j(x, y, z, t)$ и $\tilde{q}_j(x, y, z, r, t)$ — концентрация j -го сорта загрязняющего вещества соответственно в межчастичном пространстве и в микро-

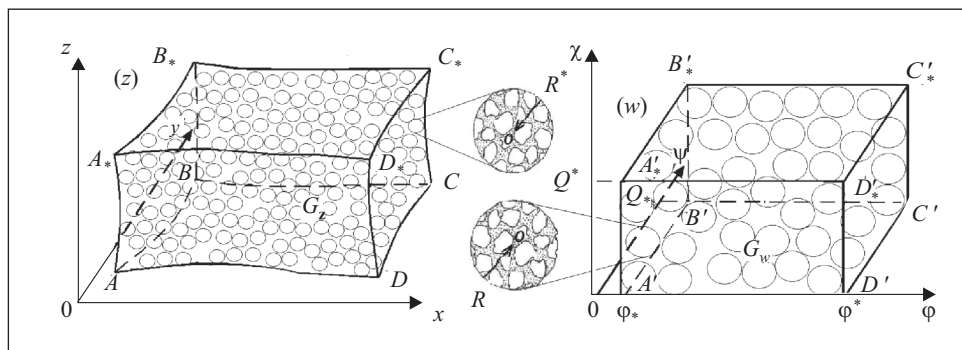


Рис. 1. Пространственная физическая область G_z (а) и соответствующая ей область комплексного потенциала G_w (б)

частицах; $D_{js} = \varepsilon d_{js}$ и $D_{js}^* = \varepsilon d_{js}^*$ — коэффициенты диффузии в межчастичном пространстве и в микрочастицах; S_{js} — коэффициенты влияния внутричастичного переноса на межчастичный; k_j — коэффициенты адсорбционного равновесия, $j = \overline{1, 2}$, $s = \overline{1, 2}$; M и n — бегущая точка и нормаль к соответствующей поверхности; $\mathbf{v}(v_x(x, y, z), v_y(x, y, z), v_z(x, y, z))$ — вектор, а $\varphi = \varphi(x, y, z)$ — потенциал скорости фильтрации ($\sqrt{v_x^2(x, y, z) + v_y^2(x, y, z) + v_z^2(x, y, z)} \gg \varepsilon > 0$, $0 < \varphi_* \leq \varphi \leq \varphi^* < \infty$) в точке $\mathbf{z} = (x, y, z)$; ε — малый параметр; R^* — радиус микрочастицы; σ_1, σ_2 — коэффициенты пористости соответственно макро- и микросреды; $\tilde{c}_j^0(x, y, z)$, $\tilde{q}_j^0(x, y, z, r)$, $\tilde{c}_{j*}^*(M, t)$, $\tilde{c}_j^*(M, t)$, $\tilde{c}_{j**}^*(M, t)$, $\tilde{c}_j^{***}(M, t)$, $\tilde{c}_{j***}^*(M, t)$, $\tilde{c}_j^{***}(M, t)$, $j = \overline{1, 2}$ — достаточно гладкие функции, согласованные между собой в угловых точках и по ребрам области G .

Полагаем, что фильтрационная задача (5) решена с помощью численного метода пространственного конформного отображения [3, 4] $G_z \mapsto G_w$ (или $G_w \mapsto G_z$), в частности, найдено поле скорости $\mathbf{v}(v_x(x, y, z), v_y(x, y, z), v_z(x, y, z))$. Здесь $G_w = \{w = (\varphi, \psi, \chi) : \varphi_* \leq \varphi \leq \varphi^*, Q_* < \psi < Q^*, Q_{**} < \chi < Q^{**}\}$ — соответствующая G_z область комплексного потенциала; $\psi = \psi(x, y, z)$, $\chi = \chi(x, y, z)$ — функции течения (комплексно сопряженные к $\varphi = \varphi(x, y, z)$); $Q = Q_0 Q^0$ — поток через произвольное поперечное сечение течения G_z , где $Q_0 = Q^* - Q_*$ и $Q^0 = Q^{**} - Q_{**}$ — потоки через соответствующие горизонтальный и вертикальный слои. Параметр Q находим в процессе решения этой задачи. Тогда, сделав замену переменных $x = x(\varphi, \psi, \chi)$, $y = y(\varphi, \psi, \chi)$, $z = z(\varphi, \psi, \chi)$, $t = t$, в уравнениях (1), (2) и условиях (3), (4), приходим к соответствующей задаче для области G_w :

$$\varepsilon \sum_{s=1}^2 D_{js} (v^2 c_{s\varphi\varphi} + b_{11} c_{s\psi\psi} + b_{12} c_{s\chi\chi} + b_{21} c_{s\psi} + b_{22} c_{s\chi}) - v^2 c_{j\varphi} - (S_{j1} q_{1r} + S_{j2} q_{2r})|_{r=R} = \sigma_1 c_{jt}, \quad (6)$$

$$\sigma_2 q_{jt} = \varepsilon D_{j1}^* \left(q_{1rr} + \frac{2}{r} q_{1r} \right) + \varepsilon D_{j2}^* \left(q_{2rr} + \frac{2}{r} q_{2r} \right), \quad (7)$$

$$c_j(\varphi, \psi, \chi, t)|_{t=0} = c_j^0(\varphi, \psi, \chi), \quad q_j(\varphi, \psi, \chi, r, t)|_{t=0} = q_j^0(\varphi, \psi, \chi, r), \\ c_j(\varphi^*, \psi, \chi, t) = c_{j^*}(\psi, \chi, t), \quad c_j|_{\varphi=\varphi^*} = c_j^*, \quad c_j|_{\psi=Q^*} = c_{j^{**}}, \quad c_j|_{\psi=Q^*} = c_j^{**}, \quad (8) \\ c_j|_{\chi=Q^{**}} = c_{j^{***}}, \quad c_j|_{\chi=Q^{**}} = c_j^{***},$$

$$q_j(\varphi, \psi, \chi, r, t)|_{r=R} = k_{j1} c_1(\varphi, \psi, \chi, t) + k_{j2} c_2(\varphi, \psi, \chi, t), \quad \frac{\partial q_j(\varphi, \psi, \chi, r, t)}{\partial r} \Big|_{r=0} = 0, \quad (9)$$

где $c_j = c_j(\varphi, \psi, \chi, t) = c_j(x(\varphi, \psi, \chi), y(\varphi, \psi, \chi), z(\varphi, \psi, \chi), t)$, $q_j = q_j(\varphi, \psi, \chi, r, t) = q_j(x(\varphi, \psi, \chi), y(\varphi, \psi, \chi), z(\varphi, \psi, \chi), r, t), \dots$, $b_{11} = b_{11}(\varphi, \psi, \chi) = \psi_x^2 + \psi_y^2 + \psi_z^2$, $b_{12} = b_{12}(\varphi, \psi, \chi) = \chi_x^2 + \chi_y^2 + \chi_z^2$, $b_{21} = b_{21}(\varphi, \psi, \chi) = \psi_{xx} + \psi_{yy} + \psi_{zz}$, $b_{22} = b_{22}(\varphi, \psi, \chi) = \chi_{xx} + \chi_{yy} + \chi_{zz}$.

Решение задачи (5)—(9) с точностью до $O(\varepsilon^{n+1})$ получаем в виде асимптотических рядов [10]:

$$c_j(\varphi, \psi, \chi, t) = \sum_{i=0}^n \varepsilon^i c_{(j,i)} + \sum_{i=0}^{n+1} \varepsilon^i \Pi_{(j,i)} + \sum_{i=0}^{2n+1} \varepsilon^{i/2} P_{\left(j, \frac{i}{2}\right)} + \sum_{i=0}^{2n+1} \varepsilon^{i/2} \Gamma_{\left(j, \frac{i}{2}\right)} + \\ + \sum_{i=0}^{2n+1} \varepsilon^{i/2} H_{\left(j, \frac{i}{2}\right)} + \sum_{i=0}^{2n+1} \varepsilon^{i/2} T_{\left(j, \frac{i}{2}\right)} + R_{j,n}^1, \quad (10)$$

$$q_j(\varphi, \psi, \chi, r, t) = \sum_{i=0}^n \varepsilon^i q_{(j,i)} + \sum_{i=0}^{2n+1} \varepsilon^{i/2} F_{\left(j, \frac{i}{2}\right)} + R_{j,n}^2. \quad (11)$$

Здесь $c_{j,i}(\varphi, \psi, \chi, t)$, $q_{j,i}(\varphi, \psi, \chi, r, t)$, $i = \overline{0, n}$ — члены соответствующих регулярных частей асимптотики; $\Pi_{j,i}(\xi, \psi, \chi, t)$, $i = \overline{0, n+1}$ — функции типа пограничного слоя в окрестности $\varphi = \varphi^*$ (поправки на выходе фильтрационного течения из данного пласта G_w); $P_{j,i/2}(\varphi, \mu, \chi, t)$, $\Gamma_{j,i/2}(\varphi, \eta, \chi, t)$, $H_{j,i/2}(\varphi, \psi, \lambda, t)$, $T_{j,i/2}(\varphi, \psi, \phi, t)$, $F_{j,i/2}(\varphi, \psi, \chi, \rho, t)$, $i = \overline{0, 2n+1}$ — функции типа пограничного слоя соответственно в окрестностях $\psi = Q^*$, $\psi = Q^*$,

$\chi = Q_{**}, \lambda = Q^{**}$ и $r = R; \xi = (\varphi^* - \varphi) \varepsilon^{-1}; \mu = (Q_* - \psi) \varepsilon^{-1/2}; \eta = (Q^* - \psi) \varepsilon^{-1/2};$
 $\lambda = (Q_{**} - \psi) \varepsilon^{-1/2}; \phi = (Q^{**} - \psi) \varepsilon^{-1/2}; \rho = (R - r) \varepsilon^{1/2}$ — соответствующие
 регуляризирующие преобразования; $R_{j,n}^1 = R_{j,n}^1(\varphi, \psi, \chi, t, \varepsilon), R_{j,n}^2 = R_{j,n}^2(\varphi,$
 $\psi, \chi, r, t, \varepsilon)$ — остаточные члены, оценка которых устанавливается на
 основе принципа максимума [4]; R — радиус образа микрочастицы, кото-
 рый с точностью до малых высшего порядка по сравнению с R^* принима-
 ем в виде шара (аналогично тому, как при плоских конформных отобра-
 жениях в малом круг переходит в круг): $R = 3 \sqrt{\frac{V_{G_w}}{V_{G_z}}} R^*$. При этом коэффи-

циент растяжения $\alpha (R = \alpha R^*)$ в точке (x, y, z) может быть представлен в
 виде якобиана данного преобразования (в случае плоских отображений
 коэффициент совпадает с модулем производной соответствующей анали-
 тической функции). Во многих случаях (для специальных типов областей)
 этот коэффициент может быть усреднен по области. Например, для мало
 искривленных областей значение α^3 можно принять приближенно рав-
 ным отношению объемов полученной области комплексного потенциала к
 исходной физической области.

Подставляя (10), (11) в (6)—(9) и приравнивая коэффициенты при
 одинаковых степенях ε [3, 10], получаем такие задачи для нахождения ре-
 гулярных частей асимптотики:

$$v^2(\varphi, \psi, \chi) c_{(j,i)\varphi}(\varphi, \psi, \chi, t) + \sigma_1 c_{(j,i)t}(\varphi, \psi, \chi, t) = g_{j,i}^1(\varphi, \psi, \chi, t),$$

$$c_{(j,i)}(\varphi, \psi, \chi, 0) = w_{j,i}^1(\varphi, \psi, \chi), c_{(j,i)}(\varphi, 0, \chi, t) = w_{j,i}^2(\psi, \chi, t);$$

$$\sigma_2 q_{(j,i)t}(\varphi, \psi, \chi, r, t) = g_{j,i}^2(\varphi, \psi, \chi, r, t),$$

$$q_{(j,i)}(\varphi, \psi, \chi, r, 0) = w_{j,i}^3(\varphi, \psi, \chi, r).$$

Здесь $g_{j,0}^1(\varphi, \psi, \chi, t) = 0; w_{j,0}^1(\varphi, \psi, \chi) = c_j^0(\varphi, \psi, \chi); w_{j,0}^2(\psi, \chi, t) = c_{j^*}(\psi, \chi, t);$

$$g_{j,i}^1(\varphi, \psi, \chi, t) = \sum_{s=1}^2 (D_{js} (v^2 c_{(s,i-1)\varphi\varphi} + b_{11} c_{(s,i-1)\psi\psi} + b_{12} c_{(s,i-1)\chi\chi} + b_{21} c_{(s,i-1)\psi} +$$

 $+ b_{22} c_{(s,i-1)\chi}) - S_{js}^* (q_{(s,i-1)r} + F_{(s,i-1)r} + \varepsilon^{1/2} F_{(s,i-1/2)r})|_{r=R}); w_{j,i}^1(\varphi, \psi, \chi) =$
 $= w_{j,i}^2(\varphi, \psi, \chi) = 0; g_{j,0}^2(\varphi, \psi, \chi, r, t) = 0; w_{j,0}^3(\varphi, \psi, \chi, r) = q_j^0(\varphi, \psi, \chi, r);$
 $g_{j,i}^2(\varphi, \psi, \chi, r, t) = D_{j1}^* (q_{(1,i-1)rr} - 2q_{(1,i-1)r} / r) + D_{j2}^* (q_{(2,i-1)rr} - 2q_{(2,i-1)r} / r),$
 $w_{j,i}^3(\varphi, \psi, r) = 0, i = \overline{1, n}, j = \overline{1, 2}.$

Решения этих задач получаем с помощью метода характеристик в виде

$$c_{j,0}(\varphi, \psi, \chi, t) = \begin{cases} c_j^0(f^{-1}(f(\varphi, \psi, \chi) - t), \psi, \chi), & t < f(\varphi, \psi, \chi), \\ c_{j^*}(t - f(\varphi, \psi, \chi), \psi, \chi), & t \geq f(\varphi, \psi, \chi); \end{cases}$$

$$q_{j,0}(\varphi, \psi, \chi, r, t) = q_j^0(\varphi, \psi, \chi, r);$$

$$c_{j,i}(t, \varphi, \chi, \psi) = \begin{cases} \frac{1}{\sigma_1} \int_0^t g_{j,i}^0(f^{-1}(f(\varphi, \psi, \chi) - t + \tilde{t}), \psi, \chi, \tilde{t}) d\tilde{t}, & t < f(\varphi, \psi, \chi), \\ \int_{\varphi_*}^{\varphi} \frac{g_{j,i}^1(\tilde{\varphi}, \psi, \chi, f(\tilde{\varphi}, \psi, \chi) + t - f(\varphi, \psi, \chi))}{v^2(\tilde{\varphi}, \psi, \chi)} d\tilde{\varphi}, & t \geq f(\varphi, \psi, \chi); \end{cases}$$

$$q_{j,1}(\varphi, \psi, \chi, r, t) = \frac{1}{\sigma_2} \sum_{s=1}^2 D_{js}^* \int_0^t (q_{(s,0)rr}(\varphi, \psi, \chi, r, \tilde{t}) + \frac{2}{r} q_{(s,0)r}(\varphi, \psi, \chi, r, \tilde{t})) d\tilde{t}.$$

Здесь $f(\varphi, \psi, \chi) = \sigma_1 \int_{\varphi_*}^{\varphi} \frac{d\tilde{\varphi}}{v^2(\tilde{\varphi}, \psi, \chi)}$ — время прохождения соответствующими

ми частицами пути от точки $(\varphi_*, \psi, \chi) \in A'B'B_*A'_*$ к точке $(\varphi, \psi, \chi) \in G_w$ вдоль соответствующей линии течения; f^{-1} — функция, обратная f относительно переменной φ . Заметим, что такая функция существует, поскольку $\tilde{v}^2(\varphi, \psi, \chi)$ — непрерывно-дифференцируемая, ограниченная, положительно-определенная функция, а $\sigma_1 > 0$ — постоянная.

В случае, когда коэффициент влияния внутричастичного переноса на межчастичный не является малым, получаем следующие задачи для нахождения регулярных частей асимптотики:

$$v^2(\varphi, \psi, \chi) c_{(j,i)\varphi}(\varphi, \psi, \chi, t) + \sigma_1 c_{(j,i)t}(\varphi, \psi, \chi, t) = \tilde{g}_{j,i}^1(\varphi, \psi, \chi, t),$$

$$c_{(j,i)}(\varphi, \psi, \chi, 0) = \tilde{w}_{j,i}^1(\varphi, \psi, \chi), \quad c_{(j,i)}(\varphi, 0, \chi, t) = \tilde{w}_{j,i}^2(\psi, \chi, t),$$

$$\sigma_2 q_{(j,i)t}(\varphi, \psi, \chi, r, t) = \tilde{g}_{j,i}^2(\varphi, \psi, \chi, r, t),$$

$$q_{(j,i)}(\varphi, \psi, \chi, r, 0) = \tilde{w}_{j,i}^3(\varphi, \psi, \chi, r),$$

где

$$\tilde{g}_{j,0}^1(\varphi, \psi, \chi, t) = - \sum_{s=1}^2 S_{js} (q_{(s,0)r} + F_{(s,0)r} + \varepsilon^{1/2} F_{(s,1/2)r})|_{r=R};$$

$$\begin{aligned} \tilde{w}_{j,0}^1(\varphi, \psi, \chi) &= c_j^1(\varphi, \psi, \chi); \tilde{w}_{j,0}^2(\psi, \chi, t) = c_{j*}(\psi, \chi, t); \tilde{w}_{j,i}^1(\varphi, \psi, \chi) = 0; \\ \tilde{w}_{j,i}^2(\psi, \chi, t) &= 0; \tilde{g}_{j,0}^2(\varphi, \psi, \chi, r, t) = 0; \tilde{w}_{j,0}^3(\varphi, \psi, \chi, r) = q_j^0(\varphi, \psi, \chi, r); \\ \tilde{g}_{j,i}^1(\varphi, \psi, \chi, t) &= \sum_{s=1}^2 (D_{js}(v^2 c_{(s,i-1)\varphi\varphi} + b_{11}c_{(s,i-1)\psi\psi} + b_{12}c_{(s,i-1)\chi\chi} + b_{21}c_{(s,i-1)\psi} + \\ &+ b_{22}c_{(s,i-1)\chi}) - S_{js}^*(q_{(s,i)r} + F_{(s,i)r} + \varepsilon^{1/2}F_{(s,i+1/2)r})|_{r=R}); \\ g_{j,i}^2(\varphi, \psi, \chi, r, t) &= D_{j1}^*(q_{(1,i-1)rr} - 2q_{(1,i-1)r}/r) + D_{j2}^*(q_{(2,i-1)rr} - 2q_{(2,i-1)r}/r, \\ w_{j,i}^3(\varphi, \psi, r) &= 0, \quad i = \overline{1, n}, \quad j = \overline{1, 2}. \end{aligned}$$

Задачи для нахождения приграничных поправок $\Pi_{(1,i)}$ ($i = \overline{0, n+1}, j = \overline{1, 2}$) в окрестности $\varphi = \varphi^*$ получим после введения переменной растяжения $\xi = (\varphi^* - \varphi)\varepsilon^{-1}$ в виде

$$\begin{aligned} D_{j1}\Pi_{(1,i)\xi\xi} + D_{j2}\Pi_{(2,i)\xi\xi} + \Pi_{(j,i)\xi} &= g_{j,i}^3(\xi, \psi, \chi, t), \quad j = \overline{1, 2}, \\ \Pi_{(j,0)}(\xi, \psi, \chi, t) &\xrightarrow{\xi \rightarrow \infty} 0, \quad \Pi_{(j,i)}(0, \psi, \chi, t) = w_{j,i}^3(\psi, \chi, t), \end{aligned} \quad (12)$$

где

$$\begin{aligned} g_{j,0}^3(\xi, \psi, \chi) &= 0; \quad w_{j,0}^3(\psi, \chi, t) = c_j^*(\psi, \chi, t) - c_{(j,0)}(\varphi^*, \psi, \chi, t); \\ g_{j,1}^3(\xi, \psi, \chi, t) &= \frac{1}{v^2(\varphi^*, \psi, \chi)} (\sigma_1 \Pi_{(j,0)t} + \\ &+ 2\xi v(\varphi^*, \psi, \chi) v'(\varphi^*, \psi, \chi) (D_{j,1}\Pi_{(1,0)\xi\xi} + D_{j,2}\Pi_{(2,0)\xi\xi} + \Pi_{(j,0)\xi})); \\ g_{j,i}^3(\xi, \psi, \chi, t) &= \frac{1}{v^2(\varphi^*, \psi, \chi)} (\sigma_1 \Pi_{(j,i-1)t} + \sum_{s=1}^i V_s (D_{j1}\Pi_{(1,i-s)\xi\xi} + \\ &+ D_{j2}\Pi_{(2,i-s)\xi\xi} + \Pi_{(j,i-s)\xi}) + \sum_{s=0}^{i-2} B_{11,s} (D_{j1}\Pi_{(1,i-2-s)\psi\psi} + D_{j2}\Pi_{(2,i-2-s)\psi\psi}) + \\ &+ \sum_{s=0}^{i-2} B_{12,s} (D_{j1}\Pi_{(1,i-2-s)\chi\chi} + D_{j2}\Pi_{(2,i-2-s)\chi\chi}) + \\ &+ \sum_{s=0}^{i-2} B_{21,s} (D_{j1}\Pi_{(1,i-2-s)\psi} + D_{j2}\Pi_{(2,i-2-s)\psi}) + \\ &+ \sum_{s=0}^{i-2} B_{22,s} (D_{j1}\Pi_{(1,i-2-s)\chi} + D_{j2}\Pi_{(2,i-2-s)\chi}), \quad i = \overline{2, n+1}; \end{aligned}$$

$$w_{j,i}^3(\psi, \chi, t) = c_j^*(\psi, \chi, t) - c_{(j,i)}^*(\varphi^*, \psi, \chi, t), \quad i = \overline{1, n}, \quad w_{j, n+1}^3(\psi, \chi, t) = 0;$$

$V_s, B_{11,s}, B_{12,s}, B_{21,s}, B_{22,s}$ — коэффициенты при s -х степенях ε в разложении соответствующих функций $\tilde{v}^2(\varphi^* - \varepsilon\xi, \psi, \chi)$, $b_{11}(\varphi^* - \varepsilon\xi, \psi, \chi)$, $b_{12}(\varphi^* - \varepsilon\xi, \psi, \chi)$, $b_{21}(\varphi^* - \varepsilon\xi, \psi, \chi)$, $b_{22}(\varphi^* - \varepsilon\xi, \psi, \chi)$ в ряд Тейлора в окрестности $\varphi = \varphi^*$.

Решение системы (12) получаем методом Лагранжа:

$$\begin{aligned} \Pi_{(1,i)} = & \frac{1}{D_{21}} \left(D_{21} g_{1,i}^3(\xi, \psi, \chi, t) - D_{11} g_{2,i}^3(\xi, \psi, \chi, t) + D_{21}(\rho_1 e^{l_1 \xi} + \rho_2 e^{l_2 \xi} + \right. \\ & \left. + e^{l_1 \xi} \int_0^\xi \frac{\vartheta(\xi, t) e^{-l_1 \xi}}{(D_{12} D_{21} - D_{11} D_{22})(l_1 - l_2)} d\xi - e^{l_2 \xi} \int_0^\xi \frac{\vartheta(\xi, t) e^{-l_2 \xi}}{(D_{12} D_{21} - D_{11} D_{22})(l_1 - l_2)} d\xi \right) - \\ & - (D_{12} D_{21} - D_{11} D_{22}) \left(l_1 \rho_1 e^{l_1 \xi} + \right. \\ & \left. + l_2 \rho_2 e^{l_2 \xi} + l_1 e^{l_1 \xi} \int_0^\xi \frac{\vartheta(\xi, t) e^{-l_1 \xi}}{(D_{12} D_{21} - D_{11} D_{22})(l_1 - l_2)} d\xi - \right. \\ & \left. - \frac{\vartheta(\xi, t) \vartheta'_\xi(\xi, t) l_1}{(D_{12} D_{21} - D_{11} D_{22})(l_1 - l_2)} - l_2 e^{l_2 \xi} \int_0^\xi \frac{\vartheta(\xi, t) e^{-l_2 \xi}}{(D_{12} D_{21} - D_{11} D_{22})(l_1 - l_2)} d\xi + \right. \\ & \left. + \frac{\vartheta(\xi, t) \vartheta'_\xi(\xi, t) l_2}{(D_{12} D_{21} - D_{11} D_{22})(l_1 - l_2)} \right), \\ \Pi_{(2,i)} = & \rho_1 e^{l_1 \xi} + \rho_2 e^{l_2 \xi} + e^{l_1 \xi} \int_0^\xi \frac{\vartheta(\xi, t) e^{-l_1 \xi}}{(D_{12} D_{21} - D_{11} D_{22})(l_1 - l_2)} d\xi - \\ & - e^{l_2 \xi} \int_0^\xi \frac{\vartheta(\xi, t) e^{-l_2 \xi}}{(D_{12} D_{21} - D_{11} D_{22})(l_1 - l_2)} d\xi, \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} \vartheta(\xi, t) = & D_{21}(g_{1,i}^3(\xi, \psi, \chi, t))'_\xi - D_{11}(g_{2,i}^3(\xi, \psi, \chi, t))'_\xi - \\ & - g_{2,i}^3(\xi, \psi, \chi, t) - \frac{D_{21}(D_{22} - D_{11})}{D_{11} D_{22} - D_{12} D_{21}} g_{1,i}^3(\xi, \psi, \chi, t), \\ l_{1/2} = & - \frac{(D_{11} + D_{22} \pm \sqrt{D_{11}^2 + 2D_{11} D_{22} - 3D_{22}^2 - 4D_{12} D_{21}})}{2(D_{11} D_{22} - D_{12} D_{21})}. \end{aligned}$$

Для учета влияния боковых источников загрязнения используем поправки $P_{j,i/2}(\varphi, \mu, \chi, t)$, $\Gamma_{(j,i/2)}(\varphi, \eta, \chi, t)$, $H_{(j,i/2)}(\varphi, \psi, \lambda, t)$, $T_{(j,i/2)}(\varphi, \psi, \phi, t)$, $i = \overline{0, 2n+1}$, которые находим из решения следующих задач:

$$b_{11}(\varphi, Q^*, \eta)(D_{j1}P_{(1,i)\mu\mu} + D_{j2}P_{(2,i)\mu\mu}) - \tilde{v}^2(\varphi, Q^*, \chi)P_{(j,i)\varphi} = g_{j,i}^4(\varphi, \mu, \chi, t),$$

$$P_{(j,i)}(\varphi, \mu, \chi, t) \xrightarrow{\mu \rightarrow \infty} 0, P_{(j,i)}(\varphi, 0, \chi, t) = w_{j,i}^4(\varphi, \chi, t), j = \overline{1, 2}; \quad (13)$$

$$b_{11}(\varphi, Q^*, \eta)(D_{j1}\Gamma_{(1,i)\eta\eta} + D_{j2}\Gamma_{(2,i)\eta\eta}) - \tilde{v}^2(\varphi, Q^*, \chi)\Gamma_{(j,i)\varphi} = g_{j,i}^5(\varphi, \eta, \chi, t),$$

$$\Gamma_{(j,i)}(\varphi, \eta, \chi, t) \xrightarrow{\eta \rightarrow \infty} 0, \Gamma_{(j,i)}(\varphi, 0, \chi, t) = w_{j,i}^5(\varphi, \chi, t), j = \overline{1, 2}; \quad (14)$$

$$b_{12}(\varphi, \psi, Q^{**})(D_{j1}H_{(1,i)\lambda\lambda} + D_{j2}H_{(2,i)\lambda\lambda}) -$$

$$- \tilde{v}^2(\varphi, \psi, Q^{**})H_{(j,i)\varphi} = g_{j,i}^6(\varphi, \psi, \lambda, t),$$

$$H_{(j,i)}(\varphi, \psi, \lambda, t) \xrightarrow{\lambda \rightarrow \infty} 0, H_{(j,i)}(\varphi, \psi, 0, t) = w_{j,i}^6(\varphi, \psi, t), j = \overline{1, 2}; \quad (15)$$

$$b_{12}(\varphi, \psi, Q^{**})(D_{j1}T_{(1,i)\phi\phi} + D_{j2}T_{(2,i)\phi\phi}) -$$

$$- \tilde{v}^2(\varphi, \psi, Q^{**})T_{(j,i)\phi} = g_{j,i}^7(\varphi, \psi, \phi, t),$$

$$T_{j,i}(\varphi, \psi, \phi, t) \xrightarrow{\phi \rightarrow \infty} 0, T_{(j,i)}(\varphi, \psi, 0, t) = w_{j,i}^7(\varphi, \psi, t), j = \overline{1, 2}, \quad (16)$$

где

$$g_{j,0}^4(\varphi, \mu, \chi, t) = 0; g_{j,0}^5(\varphi, \eta, \chi, t) = 0; g_{j,0}^6(\varphi, \psi, \lambda, t) = 0;$$

$$g_{j,0}^7(\varphi, \psi, \phi, t) = 0; g_{j,1/2}^4(\varphi, \mu, \chi, t) = \tilde{V}_{1/2}P_{(j,0)\varphi} - \tilde{B}_{11,1/2}\tilde{P}_{0\mu\mu} - \tilde{B}_{21,1/2}\tilde{P}_{0\mu};$$

$$\tilde{P}_i = (D_{11}P_{(1,i)} + D_{12}P_{(2,i)});$$

$$g_{j,1/2}^4(\varphi, \mu, \chi, t) = \sum_{s=1}^i \tilde{V}_{i/2}P_{(j, \frac{i-s}{2})\varphi} - \sum_{s=1}^i \left(\tilde{B}_{11, i/2} \tilde{P}_{\frac{i-s}{2}\mu\mu} + \tilde{B}_{21, i/2} \tilde{P}_{\frac{i-s}{2}\mu} \right) -$$

$$- \sum_{s=0}^{i-2} \tilde{V}_{i/2} \tilde{P}_{\frac{i-2-s}{2}\varphi\varphi} - \sum_{s=0}^{i-2} \tilde{B}_{12, i/2} \tilde{P}_{\frac{i-2-s}{2}\chi\chi} - \sum_{s=0}^{i-2} \tilde{B}_{22, i/2} \tilde{P}_{\frac{i-2-s}{2}\chi};$$

$$g_{j,1/2}^5(\varphi, \eta, \chi, t) = \tilde{V}_{1/2}^*P_{(j,0)\varphi} - \tilde{B}_{11,1/2}^*\tilde{\Gamma}_{0\eta\eta} - \tilde{B}_{21,1/2}^*\tilde{\Gamma}_{0\eta};$$

$$\tilde{\Gamma}_i = (D_{11}\Gamma_{(1,i)} + D_{12}\Gamma_{(2,i)});$$

$$\begin{aligned}
 & g_{j,1/2}^5(\varphi, \eta, \chi, t) = \\
 & = \sum_{s=1}^i \tilde{V}_{i/2}^* \tilde{\Gamma}_{\left(j, \frac{i-s}{2}\right) \varphi} - \sum_{s=1}^i \left(\tilde{B}_{11, i/2}^* \tilde{\Gamma}_{\frac{i-s}{2} \eta \eta} + \tilde{B}_{21, i/2}^* \tilde{\Gamma}_{\frac{i-s}{2} \eta} \right) - \sum_{s=0}^{i-2} \tilde{V}_{i/2}^* \tilde{\Gamma}_{\frac{i-2-s}{2} \varphi \varphi} - \\
 & \quad - \sum_{s=0}^{i-2} \tilde{B}_{12, i/2} \tilde{\Gamma}_{\frac{i-2-s}{2} \chi \chi} - \sum_{s=0}^{i-2} \tilde{B}_{22, i/2} \tilde{\Gamma}_{\frac{i-2-s}{2} \chi}; \\
 & g_{j,1/2}^6(\varphi, \psi, \lambda, t) = \bar{V}_{1/2} H_{(j,0) \varphi} - \bar{B}_{12, 1/2} \tilde{H}_{0 \lambda \lambda} - \bar{B}_{22, 1/2} \tilde{H}_{0 \lambda}, \\
 & \quad \tilde{H}_i = (D_{11} H_{(1,i)} + D_{12} H_{(2,i)}); \\
 & g_{j,1/2}^6(\varphi, \psi, \lambda, t) = \sum_{s=1}^i \bar{V}_{i/2} H_{\left(j, \frac{i-s}{2}\right) \varphi} - \\
 & \quad - \sum_{s=1}^i \left(\bar{B}_{12, i/2} \tilde{H}_{\frac{i-s}{2} \lambda \lambda} + \bar{B}_{22, i/2} \tilde{H}_{\frac{i-s}{2} \lambda} \right) - \sum_{s=0}^{i-2} \bar{V}_{i/2} \tilde{H}_{\frac{i-2-s}{2} \varphi \varphi} - \\
 & \quad - \sum_{s=0}^{i-2} \bar{B}_{11, i/2} \tilde{H}_{\frac{i-2-s}{2} \psi \psi} - \sum_{s=0}^{i-2} \bar{B}_{21, i/2} \tilde{H}_{\frac{i-2-s}{2} \psi}; \\
 & g_{j,1/2}^7(\varphi, \psi, \phi, t) = \bar{V}_{1/2}^* T_{(j,0) \varphi} - \bar{B}_{12, 1/2}^* \tilde{T}_{0 \phi \phi} - \bar{B}_{22, 1/2}^* \tilde{T}_{0 \phi}, \\
 & \quad \tilde{T}_i = (D_{11} T_{(1,i)} + D_{12} T_{(2,i)}); \\
 & g_{j,1/2}^7(\varphi, \psi, \phi, t) = \sum_{s=1}^i \bar{V}_{i/2}^* T_{\left(j, \frac{i-s}{2}\right) \varphi} - \sum_{s=1}^i \left(\bar{B}_{12, i/2}^* \tilde{T}_{\frac{i-s}{2} \phi \phi} + \bar{B}_{22, i/2}^* \tilde{T}_{\frac{i-s}{2} \phi} \right) - \\
 & \quad - \sum_{s=0}^{i-2} \bar{V}_{i/2}^* \tilde{T}_{\frac{i-2-s}{2} \varphi \varphi} - \sum_{s=0}^{i-2} \bar{B}_{11, i/2}^* \tilde{T}_{\frac{i-2-s}{2} \psi \psi} - \sum_{s=0}^{i-2} \bar{B}_{21, i/2}^* \tilde{T}_{\frac{i-2-s}{2} \psi}, \quad i = \overline{2, 2n+1}; \\
 & w_{j,0}^4(\varphi, \chi, t) = c_{j^{**}}(\varphi, \chi, t) - c_{(j,0)}(\varphi, Q^*, \chi, t) - \Pi_{(j,0)}(\varphi, Q^*, \chi, t); \\
 & w_{j,0}^5(\varphi, \chi, t) = c_j^{**}(\varphi, \chi, t) - c_{(j,0)}(\varphi, Q^*, \chi, t) - \Pi_{(j,0)}(\varphi, Q^*, \chi, t); \\
 & w_{j,0}^6(\varphi, \psi, t) = c_{j^{***}}(\varphi, \psi, t) - c_{(j,0)}(\varphi, \psi, Q^{**}, t) - \Pi_{(j,0)}(\varphi, \psi, Q^{**}, t), \\
 & w_{j,0}^7(\varphi, \psi, t) = c_j^{***}(\varphi, \psi, t) - c_{(j,0)}(\varphi, \psi, Q^{**}, t) - \Pi_{(j,0)}(\varphi, \psi, Q^{**}, t);
 \end{aligned}$$

$$w_{j,i/2}^4(\varphi, \chi, t) = \begin{cases} -c_{(j,i/2)}(\varphi, Q_*, \chi, t) - \Pi_{(j,i/2)}(\varphi, Q_*, \chi, t), & \text{если } i - \text{четное,} \\ 0, & \text{если } i - \text{нечетное, } i = \overline{1, 2n+1}; \end{cases}$$

$$w_{j,i/2}^5(\varphi, \chi, t) = \begin{cases} -c_{(j,i/2)}(\varphi, Q^*, \chi, t) - \Pi_{(j,i/2)}(\varphi, Q^*, \chi, t), & \text{если } i - \text{четное,} \\ 0, & \text{если } i - \text{нечетное, } i = \overline{1, 2n+1}; \end{cases}$$

$$w_{j,i/2}^6(\varphi, \psi, t) = \begin{cases} -c_{(j,i/2)}(\varphi, \psi, Q_{**}, t) - \Pi_{(j,i/2)}(\varphi, \psi, Q_{**}, t), & \text{если } i - \text{четное,} \\ 0, & \text{если } i - \text{нечетное, } i = \overline{1, 2n+1}; \end{cases}$$

$$w_{j,i/2}^7(\varphi, \psi, t) = \begin{cases} -c_{(j,i/2)}(\varphi, \psi, Q^{**}, t) - \Pi_{(j,i/2)}(\varphi, \psi, Q^{**}, t), & \text{если } i - \text{четное,} \\ 0, & \text{если } i - \text{нечетное, } i = \overline{1, 2n+1}; \end{cases}$$

$\tilde{V}_s, \tilde{B}_{11,s}, \tilde{B}_{12,s}, \tilde{B}_{21,s}, \tilde{B}_{22,s}, \tilde{V}_s^*, \tilde{B}_{11,s}^*, \tilde{B}_{12,s}^*, \tilde{B}_{21,s}^*, \tilde{B}_{22,s}^*, \bar{V}_s, \bar{B}_{11,s}, \bar{B}_{12,s}, \bar{B}_{21,s}, \bar{B}_{22,s}, \bar{V}_s^*, \bar{B}_{11,s}^*, \bar{B}_{12,s}^*, \bar{B}_{21,s}^*, \bar{B}_{22,s}^*$ — коэффициенты при s -х степенях $\sqrt{\varepsilon}$ в разложении соответствующих функций

$$\begin{aligned} & v^2(\varphi, Q_* - \sqrt{\varepsilon} \mu, \chi), b_{11}(\varphi, Q_* - \sqrt{\varepsilon} \mu, \chi), b_{12}(\varphi, Q_* - \sqrt{\varepsilon} \mu, \chi), \\ & b_{21}(\varphi, Q_* - \sqrt{\varepsilon} \mu, \chi), b_{22}(\varphi, Q_* - \sqrt{\varepsilon} \mu, \chi), v^2(\varphi, Q^* - \sqrt{\varepsilon} \eta, \chi), \\ & b_{11}(\varphi, Q^* - \sqrt{\varepsilon} \eta, \chi), b_{12}(\varphi, Q^* - \sqrt{\varepsilon} \eta, \chi), b_{21}(\varphi, Q^* - \sqrt{\varepsilon} \eta, \chi), \\ & b_{22}(\varphi, Q^* - \sqrt{\varepsilon} \eta, \chi), v^2(\varphi, \psi, Q_{**} - \sqrt{\varepsilon} \lambda), b_{11}(\varphi, \psi, Q_{**} - \sqrt{\varepsilon} \lambda), \\ & b_{12}(\varphi, \psi, Q_{**} - \sqrt{\varepsilon} \lambda), b_{21}(\varphi, \psi, Q_{**} - \sqrt{\varepsilon} \lambda), b_{22}(\varphi, \psi, Q_{**} - \sqrt{\varepsilon} \lambda), \\ & v^2(\varphi, \psi, Q^{**} - \sqrt{\varepsilon} \phi), b_{11}(\varphi, \psi, Q^{**} - \sqrt{\varepsilon} \phi), b_{12}(\varphi, \psi, Q^{**} - \sqrt{\varepsilon} \phi), \\ & b_{21}(\varphi, \psi, Q^{**} - \sqrt{\varepsilon} \phi), b_{22}(\varphi, \psi, Q^{**} - \sqrt{\varepsilon} \phi) \end{aligned}$$

в ряд Тейлора в окрестностях $\psi = Q_*, \psi = Q^*, \chi = Q_{**}, \chi = Q^{**}$.

Аналогично строятся приграничные функции [10] $F_{(j,i/2)}(\varphi, \psi, \chi, \rho, t)$, $i = \overline{0, 2n+1}$, учитывающие переход загрязнения из межчастичного пространства внутрь микрочастиц, т.е. в окрестности $r = R$. Задачи для их нахождения имеют вид

$$\begin{aligned} & \sigma_2 F_{(j,i/2)}(\varphi, \psi, \chi, \rho, t) = \\ & = D_{j1}^* F_{(1,i/2)\rho\rho}(\varphi, \psi, \chi, \rho, t) + D_{j2}^* F_{(2,i/2)\rho\rho}(\varphi, \psi, \chi, \rho, t) + g_{j,i/2}^8(\varphi, \psi, \chi, \rho, t), \\ & F_{(j,i/2)}(\varphi, \psi, \chi, \rho, 0) = 0, F_{(j,i/2)}(\varphi, \psi, \chi, 0, t) = w_{j,i/2}^8(\varphi, \psi, \chi, t), \end{aligned}$$

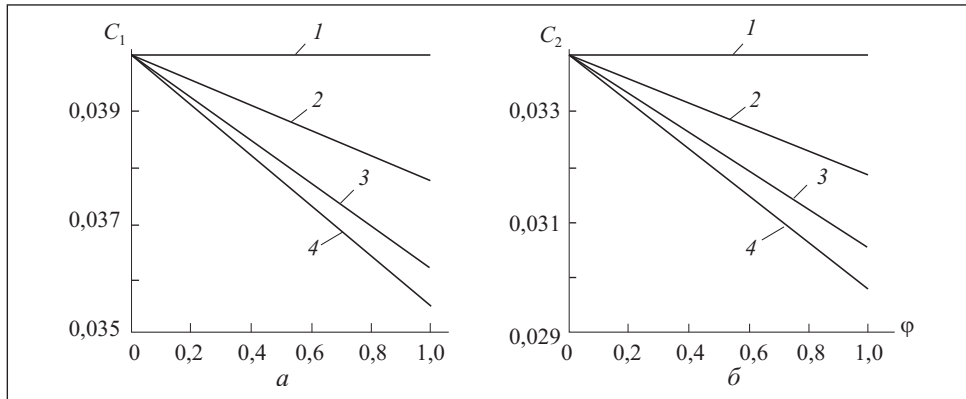


Рис. 2. Графики распределения концентраций первого (а) и второго (б) сортов загрязняющих веществ вдоль линии течения $\{\bar{\varphi} = (\varphi, 1, 1), 0 \leq \varphi \leq 1\}$ в момент времени $t = 5$ сут: 1 — $c_{1,0}(\varphi, \psi, \chi, t)$ и $c_{2,0}(\varphi, \psi, \chi, t)$ соответственно для а и б; 2–4 — $c_i(\varphi, \psi, \chi, t) = c_{i,0}(\varphi, \psi, \chi, t) + \varepsilon c_{i,1}(\varphi, \psi, \chi, t)$ для а и б при $S_{11} = S_{22} = 10^{-3}$, $S_{12} = S_{21} = 0$ (кривые 2), $S_{11} = S_{22} = 10^{-3}$, $S_{12} = S_{21} = 10^{-4}$ (кривые 3), $S_{11} = S_{22} = 2 \cdot 10^{-3}$, $S_{12} = S_{21} = 10^{-4}$ (кривые 4)

$$F_{(j, i/2)\rho}(\varphi, \psi, \chi, \rho, t) \Big|_{\rho \rightarrow \infty} = 0; \quad g_{j,0}^8(\varphi, \psi, \chi, \rho, t) = 0,$$

$$g_{j, i/2}^8(\varphi, \psi, \chi, \rho, t) =$$

$$= \sum_{s=1}^i \frac{2\rho^{s-1}}{R^s} \left(D_{j1}^* F_{\left(1, \frac{i-1}{2}\right)\rho}(\varphi, \psi, \chi, \rho, t) - D_{j2}^* F_{\left(2, \frac{i-1}{2}\right)\rho}(\varphi, \psi, \chi, \rho, t) \right), \quad i = \overline{1, 2n+1};$$

$$w_{j, i/2}^8(\varphi, \psi, \chi, t) =$$

$$= \begin{cases} k_j (c_{(j, i/2)} + \Pi_{(j, i/2)} + P_{(j, i/2)} + \Gamma_{(j, i/2)} + H_{(j, i/2)} + T_{(j, i/2)}), & \text{если } j \text{ — четное;} \\ k_j (P_{(j, i/2)} + \Gamma_{(j, i/2)} + H_{(j, i/2)} + T_{(j, i/2)}), & \text{если } j \text{ — нечетное;} \end{cases}$$

$$w_{j, n+1}^8(\varphi, \psi, \chi, t) = k_j (\Pi_{(j, i/2)} + P_{(j, i/2)} + \Gamma_{(j, i/2)} + H_{(j, i/2)} + T_{(j, i/2)}).$$

Следует заметить, что для решения последней задачи, а также задач (13)—(16), требуется применение таких численных методов, как например, метода сеток [11], метод конечных элементов. Однако, учитывая тот факт, что в соответствующих уравнениях фигурируют вторые производные по одним пространственным переменным, а первые — по другим (ортогональным к первым), при выполнении процедуры расщепления можно использовать некоторые аналитические методы [12].

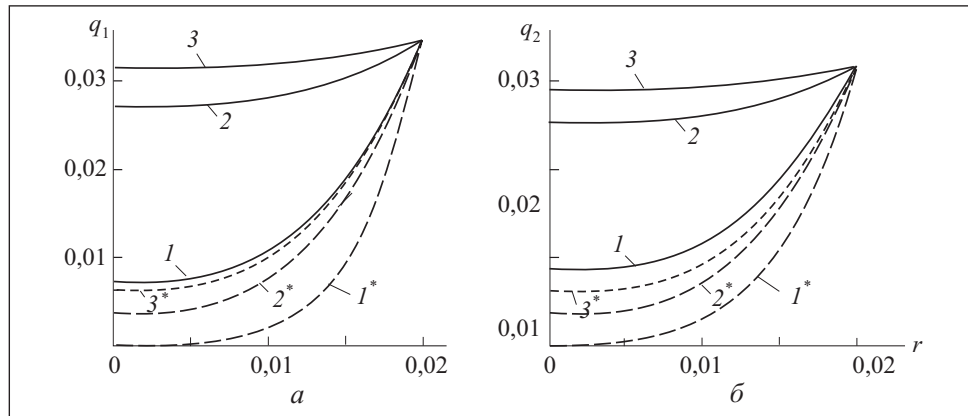


Рис. 3. Графики распределения концентраций первого ($q_1(\varphi_1, \psi_1, \chi_1, r, t)$) и второго ($q_2(\varphi_1, \psi_1, \chi_1, r, t)$) сортов загрязняющих веществ в микрочастицах: 1 — $t=1$ сут; 2 — $t=3$ сут; 3 — $t=5$ сут при $D_{11}^* = D_{22}^* = 10^{-4} \text{ м}^2/\text{сут}$; 1*—3* — при $D_{11}^* = D_{22}^* = 10^{-5} \text{ м}^2/\text{сут}$

Результаты численного эксперимента. Для компьютерного моделирования процесса двухкомпонентного массопереноса загрязняющих веществ в нанопористой среде использован идеальный фильтрационный фон в области G_z [4] при таких значениях коэффициентов: $k=0,45$ м/сут, $\sigma_1=0,87$, $\sigma_2=0,94$, $D_{11}=10^{-8} \text{ м}^2/\text{сут}$, $D_{12}=10^{-9} \text{ м}^2/\text{сут}$, $D_{21}^*=10^{-9} \text{ м}^2/\text{сут}$, $D_{22}^*=10^{-8} \text{ м}^2/\text{сут}$, $D_{11}^*=6 \cdot 10^{-7} \text{ м}^2/\text{сут}$, $D_{22}^*=4 \cdot 10^{-7} \text{ м}^2/\text{сут}$, $D_{12}^*=D_{21}^*=10^{-12} \text{ м}^2/\text{сут}$, $k_1=0,8$, $k_2=0,95$ и следующих начальных и граничных условиях:

$$c_1^0(\varphi, \psi, \chi) = c_2^0(\varphi, \psi, \chi) = 0, \quad q_j^0(\varphi, \psi, \chi, r) = 0,$$

$$c_{1*}(\psi, \chi, t) = \begin{cases} 0,02 \cos(5t + \pi) + 0,02, & t \leq \pi/5, \\ 0,04, & t > \pi/5, \end{cases}$$

$$c_{2*}(\psi, \chi, t) = \begin{cases} 0,017 \cos(10t + \pi) + 0,017, & t \leq \pi/10, \\ 0,034, & t > \pi/10. \end{cases}$$

На рис. 2 представлены результаты исследования влияния внутрочастичного переноса на межчастичный, а на рис. 3 — графики распределения накопления двух сортов загрязняющего вещества в микрочастицах при $\varphi_1=0,02$, $\psi_1=0,1$, $\chi_1=0,1$.

Выводы

На основе построенного асимптотического разложения решения соответствующей пространственной нелинейной сингулярно возмущенной краевой задачи проведен компьютерный эксперимент, в частности графически изображено пространственно-временное распределение концентраций двух сортов загрязняющих веществ в межчастичном пространстве и в микрочастицах при различных значениях параметров процесса и различных соотношениях характеристик входных компонентов. Предлагаемая методика эффективна также при решении задач конвективно-диффузионно-адсорбционного массопереноса более чем двух растворимых веществ. Такие задачи возникают при исследовании соответствующих сингулярно возмущенных процессов. В перспективе предлагается идентификация параметров такого рода процессов, исследования массопереноса многокомпонентного загрязнения в многослойных нанопористых средах, а также более подробное исследование взаимовлияния межчастичного и внутривчастичного составляющих процесса, что связано с прогнозированием процессов очистки жидкостей путем фильтрования через нанопористые среды.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Ruthven D.M.* Principles of adsorption and adsorption processes. — N Y: Wiley-Interscience, 1984. — 464 p.
2. *Веригин Н.Н., Шершук Б.С.* Диффузия и массообмен при фильтрации жидкостей в пористых средах // Развитие исследований по теории фильтрации в СССР (1917—1967). — М.: Наука, 1969. — С. 237—313.
3. *Бомба А.Я., Булавацький В.М., Скопецький В.В.* Нелінійні математичні моделі процесів геодинаміки. — Київ: Наук. думка, 2007. — 308 с.
4. *Бомба А.Я., Климяк Ю.С.* Математичне моделювання просторових сингулярно-збурених процесів типу фільтрація-конвекція-дифузія. — Рівне: «Асоль», 2014. — 273 с.
5. *Rolando M.A. Roque-Malherbe* Adsorption and Diffusion in Nanoporous Materials. — Boca Raton: CRC Press, 2012. — 288 p.
6. *Quirke N.* Adsorption and Transport at the Nanoscale. — Taylor & Francis, 2006. — 186 p.
7. *Petryk M.* Mathematical modeling of mass transfer in symmetric heterogeneous and nanoporous media with a system of n-interface interactions // Cybernetics and System Analysis. — 2007. — Vo. 43, № 1. — P. 94—111.
8. *Петрик М.Р., Фрессард Ж., Михалик Д.М.* Моделирование и анализ концентрационных полей нелинейной конкурентивной двухкомпонентной диффузии в среде нанопористых частиц // Проблемы управления и информатики. — 2009. — № 4. — С. 73—83.
9. *Дейнека В.С., Петрик М.Р., Фрессард Ж.* Идентификация кинетических параметров массопереноса в составляющих многокомпонентных неоднородных нанопористых сред системы конкурентивной диффузии // Кибернетика и системный анализ. — 2011. — № 5. — С. 45—64.
10. *Бомба А.Я., Присяжнюк І.М., Присяжнюк О.В.* Асимптотичний метод розв'язання одного класу модельних сингулярно збурених задач процесу масопереносу в різнопористих середовищах // Доп. НАН України. — 2013. — № 3. — С. 28—34.

11. Самарский А.А., Гулин А.В. Численные методы математической физики.— М.: Научный мир, 2000. —358 с.
12. Воеводин А.Ф., Гончарова О.Н. Метод расщепления по физическим процессам для расчета задач конвекции // Матем. моделирование. — 2001. — 13. — № 5. — С. 90—96.

A.Ya. Bomba, O.V. Prysiazhniuk

MODELING OF NONLINEAR SINGULARLY PERTURBED
PROCESSES OF TWO-COMPONENT CONVECTION-DIFFUSION
MASS TRANSFER IN NANOPOROUS MEDIUM

Mathematical model of singularly perturbed process of convection-diffusion-adsorption mass transfer of two types of pollutant in a medium consisting of particles of microporous structure is developed. The corresponding boundary value problem is solved in a curvilinear quadrangular parallelepiped. An asymptotic expansion of its decision is constructed, which makes it possible to complement autonomously the convective component of solution with mass transfer and diffusion components, and take into account the amendments on the output of the filter flow and the impact of lateral sources. The results of numerical calculations are given.

Key words: convection, diffusion, mass transfer, nanoporous medium.

REFERENCES

1. Ruthven, D.M. (1984), Principles of adsorption and adsorption processes, Wiley-Interscience, New York, USA.
2. Verigin, N.N. and Sherzhukov, B.S. (1969), “Diffusion and mass transfer at liquid filtration in porous media”, *Razvitie issledovaniy po teorii filtratsii v SSSR (1917-1967)*, pp. 237-313.
3. Bomba, A.Ya., Bulavatsky, V.M. and Skopetsky, V.V. (2007), *Nelineyni matematychni modeli protsesiv heohidrodynamiky* [Nonlinear mathematical models of the hydrodynamics], Naukova Dumka, Kyiv, Ukraine.
4. Bomba, A.Ya. and Klymyuk, Yu. E. (2014), *Matematychni modelyuvannya prostorovykh syngulyarno-zburenykh protsesiv typu filtratsiya-konvektsiya-difuziya* [Mathematical modeling of spatial singularly perturbed process type filtration-convection-diffusion], Asol, Rivne, Ukraine.
5. Rolando, M.A. Roque-Malherbe (2012), Adsorption and Diffusion in Nanoporous Materials, CRC Press, Taylor & Francis, Boca Raton, USA.
6. Quirke, N. (2006), Adsorption and Transport at the Nanoscale, CRC Press, Taylor & Francis, Boca Raton, USA.
7. Petryk, M. (2007), “Mathematical modeling of mass transfer in symmetric heterogeneous and nanoporous media with a system of n-interface interactions”, *Cybernetics and System Analysis*, Vol. 43, no. 1, pp. 94-111.
8. Petryk, M.R., Fressard, G. and Mihalyk, D.M. (2009), “Modeling and analysis of concentration fields of nonlinear competitive binary diffusion among particles”, *Problemy upravleniya i informatiki*, no. 4, pp. 73-83.
9. Deineka, V.S., Petryk, M.R. and Fressard, G. (2011), “Identification of kinetic parameters of components of multicomponent mass transfer in inhomogeneous media nanoporous system kompetitive diffusion”, *Kibernetika i systemnyi analiz*, no. 5, pp. 45-64.

10. Bomba, A.Ya., Prisyazhniuk, I.M. and Prisyazhniuk, O.V. (2013), “An asymptotic method for solving a class of singularly perturbed model problems of mass transfer process in different porous environments”, *Dopovidi NAN Ukrainy*, no. 3, pp. 28-34.
11. Samarskiy, A.A. and Gulin, A.V. (2000), *Chislennyye metody matematicheskoy fiziki* [Numerical methods of mathematical physics], Nauchnyi mir, Moscow, Russia.
12. Voevodin, A.F. and Goncharova, O.N. (2001) “Method of splitting into physical processes for numerical investigation of convection problems”, *Matematicheskoe modelirovaniye*, Vol. 13, no. 5, pp. 90-96.

Поступила 16.03.15;
после доработки 27.05.15

БОМБА Андрей Ярославович, д-р техн. наук, профессор, заведующий кафедрой прикладной математики и информатики Ровенского государственного гуманитарного университета. В 1972 г. окончил Львовский государственный университет им. И. Франко. Область научных исследований — числовые методы комплексного анализа и теории возмущений моделирования нелинейных процессов в пористых средах с последствием в условиях управления, идентификации и оптимизации параметров.

ПРИСЯЖНЮК Елена Викторовна, аспирант кафедры прикладной математики и информатики Ровенского государственного гуманитарного университета, которую окончила в 2010 г. и Область научных исследований — методы теории возмущений решения нелинейных сингулярно возмущенных задач конвективно-диффузионного массопереноса в пористых и нанопористых средах.