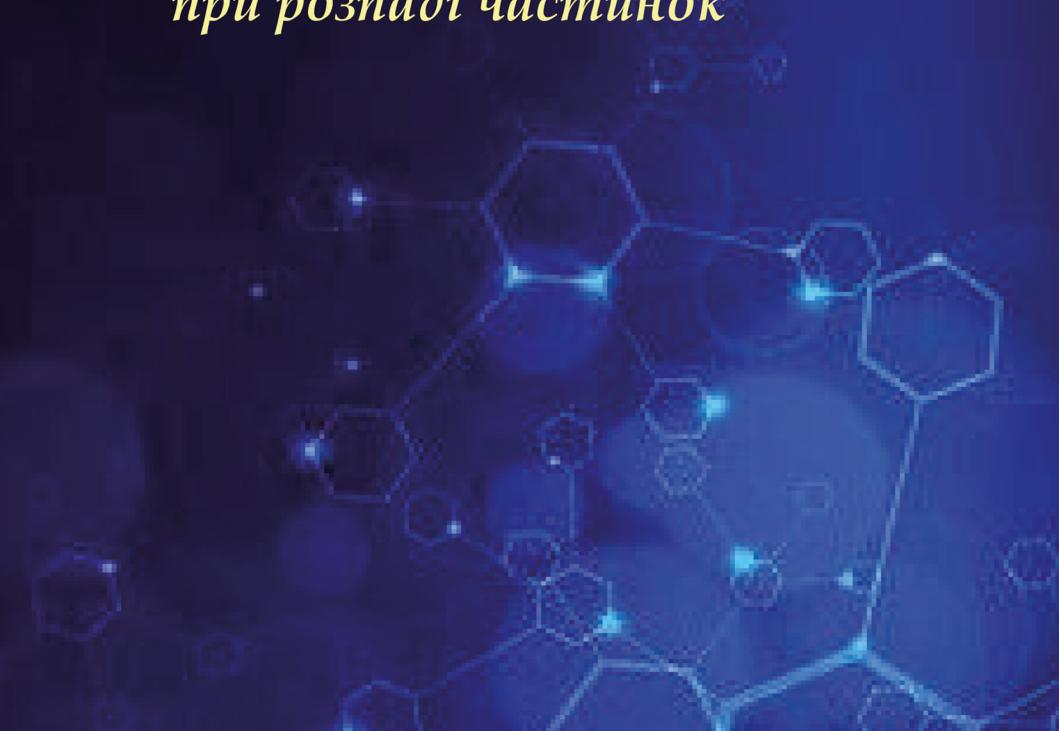


**Є.Я.ЧАПЛЯ**

**О.Ю.ЧЕРНУХА**

**Ю.І.БІЛУЩАК**

*Математичне моделювання  
гетеродифузійних процесів  
при розпаді частинок*



НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ

Центр математичного моделювання

Інституту прикладних проблем механіки і математики

ім. Я.С. Підстригача

**Є. Я. ЧАПЛЯ,**

**О. Ю. ЧЕРНУХА,**

**Ю. І. БІЛУЩАК**

# **Математичне моделювання гетеродифузійних процесів при розпаді частинок**

Львів  
Растр-7  
2018

УДК 532.72:517.958:004.2:004.942

Ч19

Чапля Є.Я., Чернуха О.Ю., Білущак Ю.І., Математичне моделювання гетеродифузійних процесів при розпаді частинок. – Львів: Растр-7, 2018. – 240 с.

ISBN 978-617-7497-92-8

У монографії запропоновано підходи і методи дослідження гетеродифузійних процесів, які супроводжуються розпадом мігруючих речовин. Методами термодинаміки нерівноважних процесів побудована математична модель термомеханогетеродифузії за каскадного розпаду домішкових частинок. Зроблено постановки і розв'язано низку краївих задач гетеродифузії для знаходження концентрацій мігруючої речовини, потоків маси та кількості речовини, що пройшла через шар.

Для фахівців у галузі математичного і комп'ютерного моделювання, математичної фізики тощо. Може бути корисною механікам, фізикам, інженерам, студентам і аспірантам відповідних спеціальностей.

Чапля Е.Я., Чернуха О.Ю., Билущак Ю.И. Математическое моделирование гетеродиффузионных процессов при распаде частиц. – Львов: Растр-7, 2018. – 240 с.

В монографии предложены подходы и методы исследования гетеродиффузионных процессов, сопровождающиеся распадом мигрирующих частиц. Методами термодинамики неравновесных процессов построена математическая модель термомеханогетеродиффузии при каскадном распаде примесных частиц. Сделаны постановки и решен ряд краевых задач гетеродиффузии для нахождения концентраций мигрирующих веществ, потоков массы и количества вещества и количества вещества, прошедшего через слой.

Для специалистов в области математического и компьютерного моделирования, математической физики и т.п. Может быть полезна механикам, физикам, инженерам, студентам и аспирантам соответствующих специальностей.

Chaplya Y., Chernukha O., Bilushchak Y. Mathematical modelling the heterodiffusion processes under particles decay. – Lviv: Rastr-7, 2018. – 240 p.

In the monograph the approaches and methods for investigation of heterodiffusion processes accompanied by decay of migrating particles are proposed. By methods of thermodynamics of non-equilibrium processes the mathematical of thermomechanoheterodiffusion under cascade decay of admixture particles. The statements are formulated and a number of initial-boundary value problems of heterodiffusion are solved for determination of migrating substance concentration, mass flows and quantity of substance passed through a layer.

For specialists in mathematical modelling and simulation, mathematical physics, etc. May be useful for mechanical engineers, physicists, students and post-graduates of corresponding specialties.

Затверджено до друку Вченю ради Центру математичного моделювання  
Інституту прикладних проблем механіки і математики ім. Я.С.Підстригача  
НАН України (протокол Вченої ради №4 від 25.06.2018р.)

Рецензенти: д.т.н., проф. О.С.Лимарченко, д.ф.-м.н., проф. Я.М.Чабанюк, д.т.н. Я.Д.П'янило

© Є.Я. Чапля, О.Ю.Чернуха, Ю.І.Білущак, 2018

ISBN 978-617-7497-92-8

© Видавництво «Растр-7», 2018



## ПЕРЕДМОВА

Математичні моделі процесів переносу складових компонент тіла широко використовують у різних галузях науки і техніки. На їх основі зокрема здійснюють моніторинг техногенних субстанцій в оточуючому нас довкіллі, прогнозують захищеність підземних вод від поверхневих забруднень, оцінюють надійність інженерних споруд для зберігання агресивних сполук тощо.

Окреме застосування такі моделі знаходять в техніці при описі процесів корозії чи деградації матеріалів, прогнозуванні надійності і довговічності поверхневих покрить.

При побудові згаданих математичних моделей певною проблемою є врахування впливу локальної структури середовища. У певній мірі умовно можна виділити два граничні випадки. У першому випадку в тілі є присутні включення, доля яких мала, проте їх розміри можуть бути співмірними з розмірами тіла (одно- і двовимірні включення). Як правило, властивості матеріалу включень добре відомі, проте невідоме їхнє розташування. Фізичні властивості матеріалу включень істотно відрізняються від властивостей основного матеріалу (матриці). Для оцінки впливу таких включень на процес дифузії в літературі запропоновано спеціальні підходи [81, 91, 93, 107].

У другому випадку приймається, що розміри „дефектів” структури є такі малі, що в кожній фізично малій області середовища (часто кажуть – репрезентативному об’ємі), знаходиться їх макроскопічне число. Частички домішкової субстанції, які знаходяться в області дефектів і поза ними, характеризуються суттєво різними фізичними властивостями, зокрема рухливістю чи коефіцієнтами дифузії. Це призводить до міграції частинок домішкової субстанції декількома шляхами, переходів з одного просторового положення в інше та у більшості випадків не типових, чи навіть парадоксальних розподілів концентрації домішкової речовини та її потоків, які спостерігають експериментально. Оскільки цей випадок представляє для нас

певний інтерес, то наведемо кілька прикладів і розглянемо його більш детально.

Одним з найбільш досліджуваних об'єктів на протязі останніх десятиліть є ґрунт, який є ключовим елементом земних екосистем та часто універсальним адсорбентом. Ґрунти відображають рівень багаторічних природніх перетворень і антропогенно-го впливу діяльності людини. При насиченні ґрунту хімічними елементами, він може стати джерелом вторинного забруднення продуктів харчування, кормів тварин, води водоймищ та атмосферного повітря [99]. Ґрунти, як правило, не можуть швидко очищатися, і забруднюючі компоненти можуть в них зберігатися довгі роки [94]. Погіршення якості ґрунтів, зниження їхньої біологічної цінності, здатності до самоочищення викликають ланцюгову реакцію, яка у випадку тривалого несприятливого впливу може привести до погіршення здоров'я населення [103]. Сьогодні технологічні викиди від стаціонарних та рухомих джерел забруднення надходять в атмосферу і, випадаючи на земну поверхню, накопичуються у верхніх горизонтах ґрунту і вподальшому знову включаються у різні міграційні цикли.

Прогнозування поширення розпадних домішкових субстанцій у ґрунтах та оцінка захищеності ґрутових вод від поверхневих техногенних забруднень базується на певних модельних уявленнях про їх локальний і просторовий перерозподіл у приповерхневих шарах Землі [4, 33, 58]. Процес перенесення частинок домішкових субстанцій є особливо інтенсивним у випадку зважених 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 шарах води та області самого скелету [2, 10, 34, 52]. 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).

Як правило, коефіцієнт дифузії частинок в поровому розчині є на декілька порядків більшим ніж в адсорбованих на скелет

шарах води, а в свою чергу коефіцієнт дифузії в адсорбованих шарах є на декілька порядків більшим ніж в об'ємі елементів скелету. Часто коефіцієнт дифузії в елементах скелету є таким малим, що їх можна вважати пастками для цих частинок [52, 78].

В певних випадках рівноважний розподіл частинок між поровим розчином і адсорбованими шарами води є таким, що їхня концентрація в адсорбованих шарах є на декілька порядків більшою ніж в області порового розчину. Тоді потоки домішок у поровому розчині і адсорбованих шарах 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 шарах води, а також зв'язаними з органічними сполуками (як розчинними, так нерозчинними у воді), тощо.

Загальні основи опису такого гетеродифузного переносу наведено в працях [11, 76], а в застосуванні до гетеродифузії радіонуклідів у пористих насичених середовищах у робтах [77, 78, 86], де також знаходить стислий огляд літератури стосовно міграції радіонуклідів. Аксіоматизація основних положень моделі викладена у варіанті, запропонованому в працях [96, 106].

Використаний у даній монографії континуально-термодинамічний підхід для побудови математичної моделі гетеродифузії домішки у середовищі з пастками за каскадного розпаду частинок, та опису особливостей процесів переносу, сорбції-десорбції, розпаду, тощо, дозволяє також обґрунтовано вводити у розгляд спрощені математичні моделі гетеродифузії, дифузії у середовищі з пастками, дифузії в ефективному середовищі та інш. [76]. При цьому отримані часткові модельні варіанти часто мають своє окреме практичне значення.

Так, модель гетеродифузії домішки двома шляхами у середовищах, в яких мігруючі частинки локально знаходяться в різних фізичних станах, суттєво відрізняючись своїми рухливостями [52, 71, 79], застосовується зокрема для опису процесів перенесення у дрібнозернистих системах різної фізичної природи, до яких відносимо зокрема полікристалічні тіла, пористі насичені рідинами середовища тощо. Наприклад, значне число металевих тіл і твердих металевих сплавів, що широко використову-

ються у техніці, є полікристалами. Їхня структура складається з зерен, які розділені границями, в області зерен знаходиться дислокації та внутрішні граници розділу фаз [69]. Така структура істотно впливає на протікання дифузійних процесів, оскільки в області границь зерен та інших дефектів локальна структура є «невпорядкованою», а параметри, що впливають на інтенсивність дифузії близькі до параметрів у рідкій фазі цієї субстанції [98].

Просторовий розподіл областей утворення і рекомбінації радіаційних дефектів обумовлює існування потоків дефектів, що у свою чергу викликає рух атомів, який призводить до неоднорідного їх розподілу в об'ємі, тобто сегрегації. Ступінь сегрегації визначається співвідношенням потоків атомів за різними механізмами і у свою чергу залежить від парціальних коефіцієнтів дифузії [9, 85]. При цьому властивості границь зерен визначають з одного боку хладономіцність сталей, а з іншого – жароміцність сплавів, зокрема на нікелевій основі і використовуються в аерокосмічній техніці [100]. Також до явищ, в основі яких лежать процеси, які контролюються дифузією вздовж границь зерен, відносяться низькотемпературна повзучість, електроміграція в тонких плівках, стійкість до дифузійного змішування багатошарових тонкоплівкових структур (які створюються, наприклад, у пристроях мікроелектроніки при багатошаровій металізації) тощо [8, 16, 100].

Актуальність розгляду явища дифузії в середовищах пастками обумовлена його застосуванням в таких галузях як фізика кристалів та напівпровідників, біофізики, наноматеріали, економіка, екологія тощо [8, 15]. Особливо важливе значення дослідження моделей дифузії у середовищах з пастками набуває при розв'язанні задач, пов'язаних з міграцією домішкових речовин у геологічних формациях [41], оскільки насьогодні ізоляцію найтоксичніших відходів вирішують шляхом глибинного підземного захоронення, а за великих часів можливий вихід радіоактивного забруднення за межі інженерних бар'єрів. При цьому основною моделлю для прогнозування перенесення домішок є модель дифузії у середовищах з пастками [41].

У свою чергу, процес дифузії в однорідному середовищі, у т.ч. з ефективними характеристиками, або гомогенізованому середовищі суттєво впливає на функціональні властивості мате-

ріалів, які використовуються у різних галузях техніки. Так, часто дифузія визначає механізм та кінетику хімічних реакцій і фізико-хімічних процесів та явищ, зокрема таких як конденсація, кристалізація, розчинення та набухання, технології спікання порошків, хіміко-термічної обробки металів (азотування і цементування сталей), гомогенізації сплавів, металізації та зварювання істотно залежать від інтенсивності дифузії складових компонент тіл [38, 64, 70, 83, 102]. Крім цього оцінка ролі процесів дифузії є важливою при створенні матеріалів із заданими властивостями, які повинні підтримуватися на протязі тривалого часу в реальних умовах експлуатації. У певних випадках необхідно враховувати деградацію технологічних субстанцій.

У розділі 1 в аксіоматизованому вигляді побудовано вихідні нелінійні співвідношення математичної моделі термомеханогетеродифузії у середовищі з пастками за каскадного розпаду домішкових частинок, які складаються з балансових рівнянь маси компонент і тіла в цілому, імпульсу, потенціальної, кінетичної, внутрішньої та повної енергії, ентропії, а також рівнянь стану та кінетичних співвідношень. Запропонований варіант лінеаризації рівнянь стану та кінетичних співвідношень та побудована ключова система рівнянь термомеханогетеродифузії у багатокомпонентному тілі з урахуванням каскадного розпаду частинок домішки у випадку вибору в якості розв'язуючих функцій температури, густини тіла, вектора переміщення точок континууму центрів мас та концентрації домішкових компонент, у т.ч. тих, що утворилися в наслідок розпаду. Отримано часткові варіанти математичної моделі механотермогетеродифузії у середовищі з пастками за каскадного розпаду мігруючих речовин за умов термодинамічної рівноваги щодо процесів переходу частинок між різними станами.

У Розділі 2 на основі отриманих часткових модельних варіантів досліджуються процеси масоперенесення домішкових речовин у середовищах з мікроструктурою за каскадного розпаду домішкових компонент. Для конкретної схеми розпаду для моделей дифузії у середовищі з ефективними характеристиками, невзаємодіючих потоків та дифузії у середовищі з пастками сформульовані зв'язані крайові задачі каскадного типу, коли

концентрація частинок на певному кроці розпаду є джерелом маси розпадної речовини на наступному кроці, яка теж дифундує, сорбується, десорбується і розпадається. Розв'язки крайових задач каскадного типу для зазначених математичних моделей побудовані за ітераційною процедурою з використанням функцій Гріна.

Розділ 3 присвячений дослідженню процесів масоперенесення домішкових речовин двома шляхами з урахуванням взаємних переходів частинок між станами та каскадного розпаду домішкових компонент. Розроблений аналітико-ітераційний метод побудови розв'язків крайових задач гетеродифузії каскадного типу. Знайдено та кількісно досліджено концентрації та потоки маси мігруючих компонент, а також визначено кількість відповідних речовин, що за певний проміжок часу пройшли через одиницю площині деякої поверхні, наприклад, через нижню граніцю шару.

У Розділі 4 на основі загальної математичної моделі термо-механогетеродифузії розпадних мігруючих речовин у середовищі з пастками зроблені постановки відповідних крайових задач каскадного типу та за аналітико-ітераційним методом з використанням функцій Гріна побудовані розв'язки для концентрації розпадних домішок на кожному з етапів розпаду на швидкому, повільному шляхах міграції, в пастках та для сумарних концентрацій. Означені матричну функцію Гріна задачі гетеродифузії у середовищі з пастками та встановлено її основні закономірності. На основі отриманих формул розроблений пакет програм Geterpas для комп'ютерного моделювання процесів масоперенесення у тілі з пастками за каскадного розпаду домішкових речовин.

У Додатках узагальнені літературні джерела щодо каскадного радіоактивного розпаду та ланцюгових хімічних реакцій, каскадного механізму та його стадій хімічних реакцій, кінетичних закономірностей нерозгалужених ланцюгових реакцій, стосовно радіоактивних елементів в ґрунтах та хімічного забруднення ґрунтів.



## РОЗДІЛ 1

### *Континуально-термодинамічна модель механотермогетеродифузії за каскадного розпаду домішкової речовини при локальній зміні стану частинок*

#### **1.1. Об'єкт дослідження. Конфігураційні та кінематичні характеристики**

Будемо вважати, що мала довільно вибрана область складається з монокристалів мінералів різного типу, які утворюють деформівний пористий скелет. Пори частково або повністю заповнені водним розчином домішкових речовин, наявних у зоні аерації. Деяка частина води під впливом приповерхневих електричних полів знаходитьться в поляризованому зв'язаному стані [9, 18, 49]. У певній мірі умовно в ній виділяється міцнозв'язана складова безпосередньо біля поверхні монокристалів мінералів (для якої ряд авторів зауважують помітну зміну густини та інших властивостей) та слабко адсорбований шар води, що шляхом нагрівання до температури кипіння перетвориться в пароподібний стан. Ця частина води, як правило, знаходиться у капілярно-зв'язаному або рухомому стані, а при наявності мережі крупних тріщин і пор – у гравітаційно-рухомому вигляді [3, 18].

Частинки домішкової речовини одного сорту у рамках виділеного фізично малого елемента тіла (рис. 1.1) можуть знаходитись в об'ємі і на поверхні скелету (у зв'язаних зі скелетом поляризованих долях води) чи бути в розчині (капілярно-зв'язаній і гравітаційно рухомій долях води). З фізичної точки зору локально вони перебувають у трьох різних станах. При цьому в

наслідок радіоактивного розпаду, хімічних реакцій тощо вони розпадаються і утворюють частинки інших домішкових речовин, які також можуть розпадатися. Таким чином вважаємо, що кожен довільно вибраний фізично малий елемент тіла містить частинки води, твердого скелету ґрунту, розпадні домішкові частинки і частинки, які утворилися внаслідок розпаду, у вказаних вище станах. Ці складові розглядаються як термодинамічні компоненти системи (ґрунту).

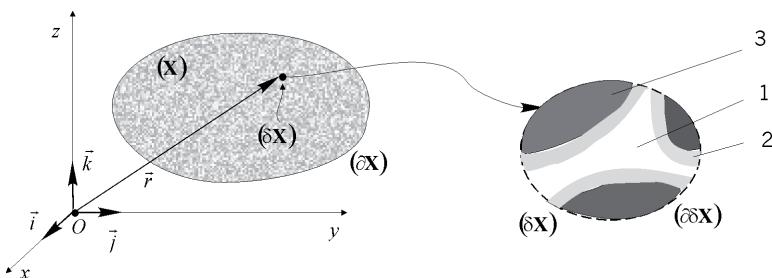


Рис. 1.1. Характерна структура фізично малого елемента тіла.

Область 1 займає водний поровий розчин, область 2 – адсорбовані на скелеті ґрунту шари води, 3 – скелет ґрунту

Приймемо, що тіло  $\mathbf{K}^*$  (дискретна сукупність матеріальних частинок) є багатокомпонентним розчином і утворене частинками домішкової речовини у поровому розчині  $\mathbf{K}_1^{*(1)}$ , поверхні  $\mathbf{K}_2^{*(1)}$  та об'ємі скелету  $\mathbf{K}_3^{*(1)}$ , які можуть розпадатися, та частинками порового розчину  $\mathbf{K}_4^{*(0)}$  і скелету  $\mathbf{K}_5^{*(0)}$ . При розпаді речовини  $\mathbf{K}_j^{*(1)}$  в стані  $j = \overline{1,3}$  утворюються частинки інших домішкових речовин  $\mathbf{K}_j^{*(2)}$  і  $\mathbf{K}_j^{*(N)}$ , причому частинки  $\mathbf{K}_j^{*(N)}$  вже не розпадаються (рис. 1.2). У свою чергу частинки домішки  $\mathbf{K}_j^{*(2)}$  розпадаються і утворюють частинки речовини  $\mathbf{K}_j^{*(3)}$  і нерозпадні (нешкідливі) речовини, які віднесемо до  $\mathbf{K}_j^{*(N)}$ , і т.п. доки на  $(N-1)$ -у кроці не отримаємо тільки нерозпадні частинки домішкової речовини.



## 1.1. Об'єкт дослідження. Конфігураційні та кінематичні характеристики

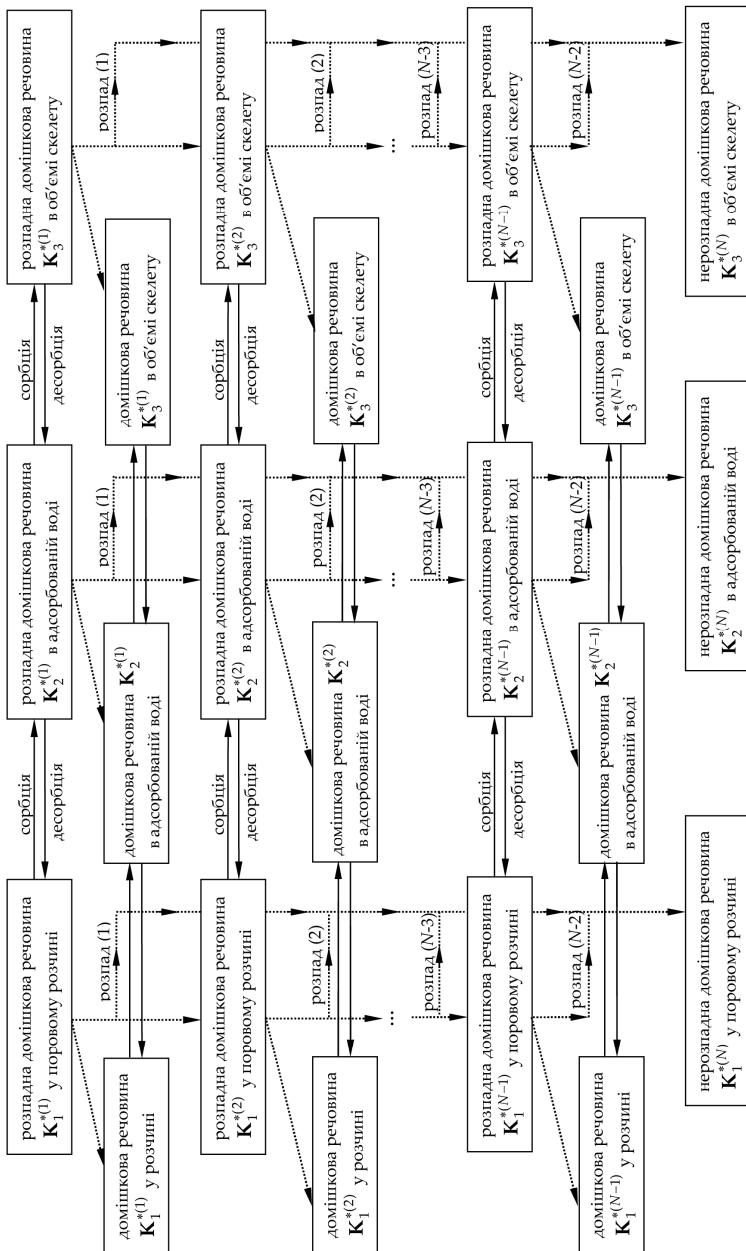


Рис. 1.2- Схема розпаду домішкових речовин

Частинки домішкової речовини одного хімічного виду, перебуваючи у різних фазах, знаходяться в істотно різних фізичних станах, характеризуючись, зокрема, різною рухливістю (коєфіцієнтами дифузії).

При макроскопічному описі тіло  $\mathbf{K}^*$  розглядається як термодинамічна система, яка вкладена в обмежену область евклідового простору  $\mathbf{x}$ , що віднесений до прямокутної декартової системи координат  $\{x^\alpha\}$  [23, 58]. Кожній компоненті тіла (підсистемам частинок  $\mathbf{K}_j^{*(0)}$ ,  $j = 4; 5$ , що утворюють скелет та поровий розчин, а також частинкам розпадної домішкової речовини в різних станах  $\mathbf{K}_j^{*(1)}$  і частинкам, які утворилися в наслідок розпаду,  $\mathbf{K}_j^{*(i)}$ ,  $j = \overline{1, 3}$ ,  $i = \overline{2, N}$ ) співставляються у відповідність континууми  $\mathbf{K}_j^{(i)}$  ( $i = \overline{0, N}$ ,  $j = \overline{1, 5}$ ).

Вважаємо, що в умовах нестаціонарної взаємодії із зовнішнім середовищем, основними нерівноважними процесами, що протікають у тілі, є процеси деформації, тепlopровідності і дифузії домішкової речовини у кожному із вище згаданих станів, що супроводжуються взаємними переходами між ними та розпадом частинок.

Приймається, що процеси деформації і тепlopровідності описуються з використанням кінематичних характеристик континуумів  $\mathbf{K}_j^{(i)}$  ( $i = \overline{0, N}$ ,  $j = \overline{1, 5}$ ), а процеси дифузії розглядаються як відносний рух точок  $K_j^{(i)}$  континуумів  $\mathbf{K}_j^{(i)}$  ( $i = \overline{0, N}$ ,  $j = \overline{1, 5}$ ) відносно континууму центрів мас  $\mathbf{K}_c$ .

Дискретна сукупність  $\mathbf{K}^*$  матеріальних частинок тіла в кожен момент часу  $t$  відображається в деяку область ( $\mathbf{X}$ ) обмежену границею ( $\partial\mathbf{X}$ ) скінченного об'єму  $V$  евклідового простору  $\mathbf{x}$ . При цьому дискретні сукупності  $\mathbf{K}_j^{*(i)}$  матеріальних частинок компонент відображаються в області ( $\mathbf{X}_j^{(i)}$ ), обмежені границями ( $\partial\mathbf{X}_j^{(i)}$ ) і об'ємами  $V_j^{(i)}$  ( $i = \overline{0, N}$ ,  $j = \overline{1, 5}$ ), так, що

$$\bigcup (\mathbf{X}_j^{(i)}) \subset (\mathbf{X}) \subset \mathbf{X}.$$



Система координат  $\{x^\alpha\}$  в евклідовому просторі вводиться відображенням

$$f : x \Leftrightarrow \{x^\alpha\}, \quad x \in (\mathbf{X}),$$

де  $x^\alpha \in \mathbf{R}$  - дійсні числа (координати точки  $x$ ),  $\mathbf{R}$  - однорідний одновимірний простір,  $\alpha = \overline{1,3}$ .

Приймемо, що кожна область  $(\mathbf{X}_j^{(i)})$  ( $i = \overline{0,N}$ ,  $j = \overline{1,5}$ ) мисленно і довільним чином може бути розбита за точками цього простору на фізично малі частини (підобласті). При цьому в кожну під область завжди відображається матроскопічно велике число елементарних матеріальних частинок кожної компоненти тіла. Для цих матеріальних частинок визначимо питомі середні значення екстенсивних та значення інтенсивних макроскопічних термодинамічних параметрів і кінематичних характеристик, які припишемо в певний спосіб внутрішній конкретній точці цієї області. Виконуючи однопараметричні трансляції вказаного розбиття [75], отримаємо відповідні поля цих величин, тобто їхню залежність від координат точок простору.

У початковий момент часу часу  $t = t_0$  (виходній конфігурації) підмножинам  $\mathbf{K}_j^{(i)} \cup \partial\mathbf{K}_j^{(i)}$  відповідає обмежена область  $(\mathbf{X}_j^{(i)}(t_0)) \cup (\partial\mathbf{X}_j^{(i)}(t_0)) \subset \mathbf{X}$ . Тобто вважаємо, що між матеріальними точками  $K_j^{(i)} \in \mathbf{K}_j^{(i)}$  і точками простору для моменту часу  $t = t_0$  є заданий взаємнооднозначний (біективний) зв'язок

$$f_t^c : K_j^{(i)} \Leftrightarrow x(t_0) \leftrightarrow \vec{r}(t_0) \equiv \vec{r}_0,$$

де  $\vec{r}_0$  - радіус-вектор точки  $x_0 = x_0(t_0) \in (\mathbf{X}(t_0))$  області евклідового простору  $\mathbf{x}$ .

У довільний момент часу  $t$ ,  $t \neq t_0$  (актуальній конфігурації), підсистемам  $\mathbf{K}_j^{(i)} \cup \partial\mathbf{K}_j^{(i)}$  відповідають змінні в часі геометричні конфігурації  $(\mathbf{X}_j^{(i)}(t)) \cup (\partial\mathbf{X}_j^{(i)}(t))$ . За умов біективності вказаних параметричних за часом відображень маємо

$$f_t^c : K_j^{(i)} \Leftrightarrow x_j^{(i)}(t) \leftrightarrow \vec{r}(\mathbf{X}_j^{(i)}(t)) \equiv \vec{r}_j^{(i)},$$

де  $\vec{r}_j^{(i)}$  - радіус-вектори матеріальних точок  $K_j^{(i)}$  в момент часу  $t$ .

Матеріальні точки  $K_j^{(i)} \in K_j^{(i)}$  цих континуумів наділяються властивостями вихідних дискретних сукупностей матеріальних частинок  $K_j^{*(i)}$ . Ці величини розглядаються як середні значення параметрів для підсистем  $\delta K_{jn}^{*(i)} \subset K_j^{*(i)}$ , які відображаються в області  $(\delta X_{jn}^{(i)}) \in (X_j^{(i)})$  при довільному мисленному розбитті. У випадку екстенсивних параметрів – це питомі величини.

Закони руху матеріальних точок континуумів  $K_j^{(i)}$  є задані, якщо відомі взаємнооднозначні залежності

$$\vec{r}_j^{(i)} = \vec{r}_j^{(i)}(x(t_0); t) \equiv \vec{r}_j^{(i)}(\vec{r}_0; t), \quad i = \overline{0, N}, \quad j = \overline{1, 5}. \quad (1.1)$$

При цьому як наслідок бієктивності цих залежностей мають місце також обернені зв'язки

$$\vec{r}_0 = \vec{r}_0(\vec{r}_j^{(i)}; t), \quad i = \overline{0, N}, \quad j = \overline{1, 5}. \quad (1.2)$$

Через диференціювання за часом залежностей (1.1) одержимо швидкості руху  $\vec{v}_j^{(i)}$  матеріальних точок континуумів  $K_j^{(i)}$ , а саме

$$\vec{v}_j^{(i)}(\vec{r}_0; t) = \frac{\partial \vec{r}_j^{(i)}(\vec{r}_0; t)}{\partial t} \equiv \vec{v}_j^{(i)}. \quad (1.3)$$

Якщо умова індивідуалізації матеріальних точок континуумів  $K_j^{(i)}$  задана так, що  $\vec{r}_0 = \vec{r}_j^{(i)}(\vec{r}_0; 0)$ , то з використанням зв'язків (1.2) швидкості  $\vec{v}_j^{(i)}$  можемо подати у вигляді

$$\vec{v}_j^{(i)} = \vec{v}_j^{(i)}(\vec{r}, t), \quad i = \overline{0, N}, \quad j = \overline{1, 5}, \quad (1.4)$$

де  $\vec{r}$  - радіус-вектор фіксованої точки евклідового простору.

Відзначимо, що часто умову індивідуалізації записують у формі

$$x_0^\alpha \equiv \xi^\alpha \quad (\alpha = \overline{1, 3}),$$



де  $x_0^\alpha$  - компоненти радіус-вектора  $\vec{r}_0$  точок  $K_j^{(i)} \in \mathbf{K}_j^{(i)}$  у початковий момент часу  $t = t_0$ , тобто  $f: x(t_0) \Leftrightarrow \{x_0^\alpha\}$  і  $\vec{r}_0 = \xi^\alpha \vec{i}^0_\alpha$ , де  $\vec{i}^0_\alpha$  - базисні вектори декартової системи координат ( $\alpha = \overline{1,3}$ ).

Представлення для швидкостей (1.4) вказує, що в кожній точці  $x \in \mathbf{X}$  основної множини цього простору з радіус-вектором  $\vec{r}$  у даний момент часу  $t$  знаходяться певні матеріальні точки  $K_j^{(i)}$  континуумів  $\mathbf{K}_j^{(i)}$ , які мають швидкості  $\vec{v}_j^{(i)}$ . При такій трактовці швидкості  $\vec{v}_j^{(i)}$  можна розуміти як питомі просторові масові потоки імпульсу для матеріальних точок відповідних континуумів.

Зауважимо, що терміни «елементарна матеріальна частина», «елементарна частинка» і «частинка» застосовують скрізь у розумінні найменшої можливої складової (молекули) відповідної речовини, і кількість її механічних макроскопічних ступенів вільності у загальному випадку більша ніж три. Тоді як термін «матеріальна точка» використовується для континууму, наділеному деякими фізичними властивостями [12].

Якщо число частинок  $N_j^{(i)}$  компоненти  $ij$  системи  $\mathbf{K}^*$  є більшим, ніж деяка мінімальна величина  $N_j^{(i)0}$ , тобто  $N_j^{(i)} \geq N_j^{(i)0}$ , то множина параметрів ділиться на два класи: значення яких не залежать від конкретного числа частинок  $N_j^{(i)}$  компоненти  $ij$  у системі і значення яких прямо пропорційні цьому числу. Перші з них, значення яких практично не залежать від числа частинок системи, називають інтенсивними, тоді як другі – екстенсивними параметрами.

До інтенсивних параметрів належать, зокрема, температура, тиск, хімічні потенціали, а до екстенсивних – внутрішня енергія, ентропія, об'єм, маса. При цьому параметри, які визначають елементарну роботу над системою, обмін енергії у вигляді тепла та внаслідок зміни маси (через добуток значень інтенсивних на приrostи екстенсивних параметрів) називають взаємоспряженими [12].

Зазначимо, що від конкретного значення числа частинок  $N_j^{(i)}$  не залежать також густини екстенсивних параметрів з розрахунку на одну частинку.

Кажуть, що система знаходиться в макроскопічному стані, якщо існує такий набір фізичних параметрів, що будь-яка зміна їхніх значень може бути описана тільки з використанням параметрів, які входять до цього набору.

Конкретна кількість фізичних параметрів, що визначають такий стан, залежить від фізичних властивостей термодинамічної системи, умов її взаємодії із зовнішнім середовищем та етапів еволюції, а також, у певній мірі, від прийнятої повноти макроскопічного опису реального тіла. Між ними, як правило, існують алгебраїчні, функціональні чи більш загальні зв'язки [20].

У рівноважному макроскопічному стані, який у цьому випадку називають термодинамічним станом (означається для однорідних систем), число таких параметрів є мінімальним. При цьому їхні значення не залежать від моменту часу вимірювання і відповідні зв'язки між ними є алгебраїчними та функціональними [14, 42].

При використанні континуальних характеристик термодинамічних систем зручніше ґрунтуватись на питомих величинах (густинах) з розрахунку на одиницю маси або об'єму.

Нехай фізично мала частина термодинамічної системи ( $\delta\mathbf{K}^*$ ) містить  $\delta N_j^{(i)}$  частинок компоненти  $ij$ . Тоді введемо в розгляд її повну масу  $\delta m$  як суму мас елементарних матеріальних частинок компонент, тобто

$$\delta m = \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N m_j^{(i)} \delta N_j^{(i)}, \quad (1.5)$$

де  $m_j^{(i)}$  - дійсна невід'ємна величина – маса окремої елементарної матеріальної частинки компоненти  $ij$ .

Приймається, що при фіксованих значеннях інтенсивних параметрів об'єм  $\delta V$  області ( $\delta\mathbf{X}$ ), в яку відображається така фізично мала макрочастина тіла, є пропорційним числу елементарних частинок, що її складають. Тоді шляхом граничного переходу



$$n_j^{(i)}(X, t) = \lim_{\delta V \rightarrow 0} \frac{\delta N_j^{(i)}}{\delta V} \quad (1.6)$$

можна означити функцiї густин частинок  $ij$ -компоненти  $n_j^{(i)}(X, t)$  та їхню сумарну густину в точках областi

$$n(X, t) = \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N n_j^{(i)}(X, t). \quad (1.7)$$

Об'ємнi густини компонент мас  $\rho_j^{(i)}(X, t)$  введемо за формулой

$$\rho_j^{(i)}(X, t) = \lim_{\delta V \rightarrow 0} \frac{\delta m_j^{(i)}}{\delta V}. \quad (1.8)$$

Тодi використовуючи спiввiдношення (1.5)-(1.8), для масових характеристик макрочастини системи одержуємо

$$\rho_j^{(i)}(X, t) = m_j^{(i)} n_j^{(i)}(X, t), \quad \rho(X, t) = \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \rho_j^{(i)}(X, t), \quad (1.9)$$

де  $\rho(X, t)$  - сумарна густина маси.

Зазначимо, що число  $\delta N_j^{(i)}$  елементарних частинок фiзично малої макрочастини системи ( $\delta K^*$ ), як i об'єм  $\delta V$  областi ( $\delta X$ ), в яку вони вiдображаються, не може бути меншим нiж деякi мiнiмальнi значення  $\delta N_j^{(i)0}$  i  $\delta V^0$ , необхiднi для визначення вiдповiдних макроскопiчних фiзичних параметрiв.

Викладемо основнi положення математичного моделювання, орiєнтуючись на аксiоматичний пiдхiд, запропонований в роботах [23, 58].

## || 1.2. Балансовi спiввiдношення

За вихiднi спiввiдношення математичної моделi термомеханогетеродифузiї домiшкової речовини двома шляхами у середовищi з пастками з урахуванням каскадного розпаду мiгруючих речовин приймемо закони збереження i балансовi рiвняння для маси, iмпульсу та енергiї, якi сформулююємо для кожної з компонент та континууму центрiв мас.

**Теорема 1.1.** Якщо зміна маси компоненти  $m_j^{(i)}$  відбувається за рахунок масових потоків і внутрішніх джерел, то мають місце рівняння балансу маси компоненти  $i j$  у вигляді

$$\frac{\partial \rho_j^{(i)}}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot (\rho_j^{(i)} \vec{v}_j^{(i)}) + w_j^{(i)} \quad (i = \overline{0, N}, j = \overline{1, 5}), \quad (1.10)$$

де  $\vec{\nabla}$  - набла-оператор Гамільтона;  $w_j^{(i)}$  - інтенсивність джерела (або стоку) компоненти; крапкою позначений скалярний добуток.

*Доведення.* За точками ейлерового простору  $x$  виберемо довільним чином область  $(X)$ , що належить тілу. Масу компонент  $m_j^{(i)}$ , які знаходяться в цій області, запишемо у вигляді

$$m_j^{(i)} = \int_{(X)} \rho_j^{(i)} dV. \quad (1.11)$$

Зміна маси  $m_j^{(i)}$  в часі може відбуватися за рахунок масових потоків через поверхню  $(\Sigma)$  області  $(X)$  і виробництва маси  $w_j^{(i)}$   $i$ -ї компоненти в стані  $j$ . Тому

$$\frac{dm_j^{(i)}}{dt} = - \int_{(\Sigma)} \rho_j^{(i)} \vec{v}_j^{(i)} \cdot \vec{n} d\Sigma + \int_{(X)} w_j^{(i)} dV_j^{(i)},$$

де  $\vec{n}$  - нормаль до поверхні  $(\Sigma)$  (рис. 1.3).

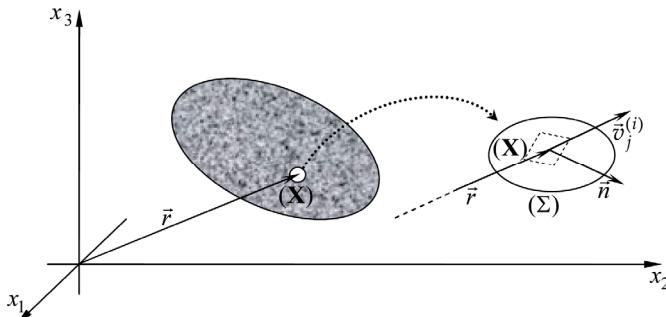


Рис. 1.3. Репрезентативна область середовища



З іншого боку із спiввiдношення (1.11) отримуємо

$$\frac{dm_j^{(i)}}{dt} = \int_{(X)} \frac{\partial \rho_j^{(i)}}{\partial t} dV.$$

Порiвнюючи записанi вирази, маємо

$$\int_{(X)} \frac{\partial \rho_j^{(i)}}{\partial t} dV = - \int_{(\Sigma)} \rho_j^{(i)} \vec{v}_j^{(i)} \cdot \vec{n} d\Sigma + \int_{(X)} w_j^{(i)} dV.$$

Враховуючи теорему Остроградського-Гауса i довiльнiсть вибору областi (X), отримаємо закон збереження маси компонент у диференцiальнiй (локальнiй) формi

$$\frac{\partial \rho_j^{(i)}}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot (\rho_j^{(i)} \vec{v}_j^{(i)}) + w_j^{(i)}.$$

Теорема доведена.

**Зауваження 1.1.** Оскiльки ми прийняли, що джерелом (стоком) маси компоненти можуть бути процеси сорбцiї-десорбцiї частинок i розпад домiшкової речовини, то потужнiсть виробництва маси  $w_j^{(i)}$  в загальному випадку можна подати у виглядi суми

$$w_j^{(i)} = \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^5 \omega_{jk}^{(i)} + \bar{w}_j^{(i)} \quad (i = \overline{0, N}, j = \overline{1, 5}), \quad (1.12)$$

де  $\omega_{jk}^{(i)}$  - потужнiсть виробництва маси компоненти  $i$  у станi  $j$  у зв'язку з iї переходом з континууму  $K_k^{(i)}$ ;  $\bar{w}_j^{(i)}$  - потужнiсть виробництва маси компоненти  $ij$  за рахунок розпаду частинок компоненти  $i-1$  ( $i = \overline{2, N}$ ,  $j = \overline{1, 3}$ ). Тодi

$$w_j^{(0)} = 0 \quad (\forall j), \quad \sum_{j=1}^3 \sum_{i=1}^N w_j^{(i)} = 0; \quad (1.12a)$$

у тому числi

$$\omega_{jj}^{(i)} = 0 \quad (\forall j), \quad \omega_{jk}^{(i)} = -\omega_{kj}^{(i)} \quad (\forall i, j, k), \quad \sum_{j=1}^5 \sum_{k=1}^5 \omega_{jk}^{(i)} = 0 \quad (\forall i). \quad (1.12b)$$

**Зауваження 1.2.** Балансове рівняння (1.10) можна подати у вигляді

$$\frac{\partial \rho_j^{(i)}}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_j^{(i)0} + w_j^{(i)} \quad (i = \overline{0, N}, j = \overline{1, 5}), \quad (1.13)$$

де  $\vec{J}_j^{(i)0} = \rho_j^{(i)} \vec{v}_j^{(i)}$  - масовий потік частинок компоненти  $i$  у стані  $j$ .

**Теорема 1.2.** Якщо маса  $i$ -ї компоненти в стані  $j$  задовільняє балансове співвідношення (1.10), то мають місце рівняння балансу для концентрацій компонент:

$$\rho \frac{dC_j^{(i)}}{dt} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_j^{(i)} + w_j^{(i)}, \quad i = \overline{0, N}, j = \overline{1, 5}, \quad (1.14)$$

де  $C_j^{(i)} = \rho_j^{(i)} / \rho$  - масові концентрації компонент, які задовільняють умову нормування

$$\sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N C_j^{(i)} = 1; \quad (1.15)$$

$\vec{J}_j^{(i)}$  - дифузійний потік компоненти  $ij$ .

**Доведення.** Нехай значення для густини тіла  $\rho$ , які вводяться другим співвідношенням (1.9), а для швидкості  $\vec{v}$  - наступним рівнянням

$$\vec{v} = \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \rho_j^{(i)} \vec{v}_j^{(i)} / \rho \quad (1.16)$$

приписуються точкам континууму  $K_c$ . Просумуємо рівняння (1.10) або (1.13) за всіма індексами  $i, j$ :

$$\sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \frac{\partial \rho_j^{(i)}}{\partial t} = -\sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \vec{\nabla} \cdot (\rho_j^{(i)} \vec{v}_j^{(i)}) + \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N w_j^{(i)}.$$

Використовуючи вирази (1.9), (1.12) та (1.16), отримаємо

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot \rho \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \frac{\rho_j^{(i)} \vec{v}_j^{(i)}}{\rho} = -\rho \vec{\nabla} \cdot \vec{v} - \vec{v} \cdot \vec{\nabla} \rho. \quad (1.17)$$



Враховуючи, що повна похідна за часом  $\frac{d}{dt} = \frac{\partial}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla}$ , спiввiдношення (1.17) перепишемо у виглядi

$$\frac{d\rho}{dt} = -\rho \vec{\nabla} \cdot \vec{v}. \quad (1.18a)$$

Оскiльки  $\rho = 1/v$ , де  $v$  - питомий об'єм, то формула (1.18a) еквiвалентна

$$\frac{dv}{dt} = v \vec{\nabla} \cdot \vec{v}. \quad (1.18b)$$

Перепишемо рiвняння балансу маси компонентi  $ij$  (1.13) через повну похiдну за часом

$$\frac{d\rho_j^{(i)}}{dt} = \vec{v} \cdot \vec{\nabla} \rho_j^{(i)} - \vec{\nabla} \cdot (\rho_j^{(i)} \vec{v}) + w_j^{(i)} = \vec{\nabla} \cdot (\rho_j^{(i)} \vec{v}) - \vec{\nabla} \cdot (\rho_j^{(i)} \vec{v}) - \rho_j^{(i)} \vec{\nabla} \cdot \vec{v} + w_j^{(i)}.$$

Враховуючи, що  $\rho_j^{(i)} = C_j^{(i)} \rho$ , одержимо

$$\frac{d\rho_j^{(i)}}{dt} + \rho_j^{(i)} \vec{\nabla} \cdot \vec{v} = \rho \frac{dC_j^{(i)}}{dt} + C_j^{(i)} \frac{d\rho}{dt} + C_j^{(i)} \rho \vec{\nabla} \cdot \vec{v} = \rho \frac{dC_j^{(i)}}{dt},$$

оскiльки виконується спiввiдношення (1.18a). У результатi отримаємо

$$\rho \frac{dC_j^{(i)}}{dt} = -\vec{\nabla} \cdot \rho_j^{(i)} (\vec{v}_j^{(i)} - \vec{v}) + w_j^{(i)} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{j}_j^{(i)} + w_j^{(i)}$$

рiвняння балансу концентрацiї компонентi  $i$  у станi  $j$ . Величина  $\vec{j}_j^{(i)} = \rho_j^{(i)} (\vec{v}_j^{(i)} - \vec{v})$  називається дифузiйним потоком компонентi  $ij$ , введенiм по вiдношенню до точок континууму  $K_c$ .

Зазначимо, якщо використати умову нормування (1.15), то балансове рiвняння (1.14) можна записати у виглядi

$$\rho \frac{dC_j^{(i)}}{dt} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{j}_j^{(i)} + w_j^{(i)}, \quad i = \overline{0, N}, \quad j = \overline{1, 4},$$

$$C_5^{(0)} = 1 - \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N C_j^{(0)}.$$

**Постулат 1.1.** Рівняння балансу імпульсу для тіла в цілому (континууму  $K_c$ ) має вигляд

$$\rho \frac{d\vec{v}}{dt} = \vec{\nabla} \cdot \hat{\Pi} + \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \rho_j^{(i)} \vec{F}_j^{(i)}, \quad (1.19)$$

де  $\hat{\Pi} = \Pi^{\alpha\beta} \vec{i}^\alpha \otimes \vec{i}^\beta$  - симетричний тензор напружень Коші [23, 68],  $\vec{F}_j^{(i)}$  - масова потенціальна ( $\vec{F}_j^{(i)} = -\vec{\nabla} \psi_j^{(i)}$ ) і консервативна ( $\partial \psi_j^{(i)} / \partial t = 0$ ) сила, яка діє на  $i$ -ту компоненту у стані  $j$ ,  $\psi_j^{(i)}$  - потенціал сил (потенціальна енергія одиниці маси компоненти  $i$  у стані  $j$ ),  $\otimes$  - тензорний добуток.

**Лема 1.1.** Якщо виконуються співвідношення балансу маси  $i$ -ої компоненти у стані  $j$  (1.10), то мають місце рівняння балансу для потенціальної енергії компоненти

$$\frac{\partial(\rho_j^{(i)} \psi_j^{(i)})}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho_j^{(i)} \psi_j^{(i)} \vec{v}_j^{(i)}) = -\rho_j^{(i)} \vec{v}_j^{(i)} \cdot \vec{F}_j^{(i)} + \psi_j^{(i)} w_j^{(i)} \quad (1.20)$$

та рівняння балансу потенціальної енергії  $\Psi$  для тіла в цілому

$$\rho \frac{d\Psi}{dt} = -\vec{\nabla} \cdot \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \psi_j^{(i)} \vec{j}_j^{(i)} - \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \rho_j^{(i)} \vec{F}_j^{(i)} \cdot \vec{v} - \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \vec{j}_j^{(i)} \cdot \vec{F}_j^{(i)} + \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \psi_j^{(i)} w_j^{(i)}. \quad (1.21)$$

*Доведення.* Домножимо закон збереження маси складових компонент (1.10) на скалярний потенціал  $\psi_i^{(j)}$ , віднесений до одиниці маси компоненти

$$\psi_j^{(i)} \frac{\partial \rho_j^{(i)}}{\partial t} = -\psi_j^{(i)} \vec{\nabla} \cdot (\rho_j^{(i)} \vec{v}_j^{(i)}) + \psi_j^{(i)} w_j^{(i)}$$

і врахуємо умову їх консервативності. Тоді знайдемо рівняння балансу потенціальної енергії компоненти

$$\frac{\partial(\rho_j^{(i)} \psi_j^{(i)})}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho_j^{(i)} \psi_j^{(i)} \vec{v}_j^{(i)}) = -\rho_j^{(i)} \vec{v}_j^{(i)} \cdot \vec{F}_j^{(i)} + \psi_j^{(i)} w_j^{(i)}.$$

Врахуємо, що

$$\vec{\nabla} \cdot (\rho_j^{(i)} \psi_j^{(i)} \vec{v}_j^{(i)}) = \vec{\nabla} \cdot (\rho_j^{(i)} \psi_j^{(i)} \vec{v}_j^{(i)} - \rho_j^{(i)} \psi_j^{(i)} \vec{v} + \rho_j^{(i)} \psi_j^{(i)} \vec{v}) =$$



$$= -\vec{\nabla} \cdot [\Psi_j^{(i)} \rho_j^{(i)} (\vec{v}_j^{(i)} - \vec{v}) + \Psi_j^{(i)} \rho_j^{(i)} \vec{v}] = \vec{\nabla} \cdot (\Psi_j^{(i)} \vec{J}_j^{(i)}) + \vec{\nabla} \cdot (\Psi_j^{(i)} \rho_j^{(i)} \vec{v}).$$

Пiдсумовуючи записане рiвняння за iндексами  $i$  та  $j$ , означуючи потенцiальну енергiю  $\Psi$  точок континууму  $\mathbf{K}_c$  формулою

$$\rho \Psi = \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \rho_j^{(i)} \Psi_j^{(i)} \quad (1.22)$$

i оскiльки  $\vec{J}_j^{(i)0} = \vec{J}_j^{(i)} + \rho_j^{(i)} \vec{v}$ , отримаємо

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho\Psi)}{\partial t} &= -\vec{\nabla} \cdot \left( \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \Psi_j^{(i)} \vec{J}_j^{(i)} + \rho \Psi \vec{v} \right) - \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \rho_j^{(i)} \vec{F}_j^{(i)} \cdot \vec{v} - \\ &\quad - \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \vec{J}_j^{(i)} \cdot \vec{F}_j^{(i)} + \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \Psi_j^{(i)} w_j^{(i)}. \end{aligned}$$

Враховуючи рiвнiсть (1.18a), одержимо рiвняння балансу потенцiальної енергiї для тiла в цiому (1.21). Отже лема доведена.

**Лема 1.2.** Якщо виконуються спiвiдношення балансу iмпульсу (1.19), то має мiсце рiвняння балансу для кiнетичної енергiї

$$\rho \frac{d}{dt} \left( \frac{v^2}{2} \right) = \vec{\nabla} \cdot (\vec{v} \cdot \hat{\Pi}) - \hat{\Pi} : \vec{\nabla} \otimes \vec{v} + \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \rho_j^{(i)} \vec{F}_j^{(i)} \cdot \vec{v}. \quad (1.23)$$

*Доведення.* Домножимо скалярно рiвняння балансу iмпульсу (1.19) на вектор швидкостi центру мас  $\vec{v}$ :

$$\rho \vec{v} \cdot \frac{d\vec{v}}{dt} = \vec{v} \cdot \vec{\nabla} \cdot \hat{\Pi} + \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \rho_j^{(i)} \vec{F}_j^{(i)} \cdot \vec{v}.$$

Використаємо тотожнiсть

$$\vec{\nabla} \cdot (\hat{\Pi} \cdot \vec{v}) \equiv \vec{v} \cdot (\vec{\nabla} \cdot \hat{\Pi}) + \hat{\Pi} : \vec{\nabla} \otimes \vec{v},$$

де знак « $\equiv$ » означає подвiйний внутрiшнiй скалярний добуток (подвiйну внутрiшню згортку). Тодi отримаємо рiвняння балансу кiнетичної енергiї (1.23). I лема доведена.

**Постулат 1.2.** Повна питома енергiя  $e$  (з розрахунку на одиницю маси) задається виразом

$$e \stackrel{*}{=} \rho(u + \Psi + v^2/2) \quad (1.24)$$

і задовільняє закон збереження

$$\frac{\partial e}{\partial t} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_e, \quad (1.25)$$

де  $e$  - питома внутрішня енергія з розрахунку на одиницю маси;  $\vec{J}_e$  - потік повної енергії, що має вигляд

$$\vec{J}_e = \rho(u + \Psi + v^2/2) \vec{v} + \vec{J}_Q - \hat{\Pi} \cdot \vec{v} + \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N (\psi_j^{(i)} + \mu_j'^{(i)}) \vec{J}_j^{(i)}. \quad (1.26)$$

Тут  $\vec{J}_Q^{(j)}$  - потік енергії у формі тепла,  $\mu_j'^{(i)}$  - хімічний потенціал компоненти  $i$  у стані  $j$  [42].

**Теорема 1.3.** Якщо повна енергія підпорядковується співвідношенням (1.24)-(1.26), тоді має місце рівняння балансу питомої внутрішньої енергії

$$\begin{aligned} \rho \frac{du}{dt} &= -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_Q - \vec{\nabla} \cdot \left( \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \mu_j'^{(i)} \vec{J}_j^{(i)} \right) + \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \vec{J}_j^{(i)} \cdot \vec{F}_j^{(i)} + \\ &+ \hat{\Pi} : (\vec{\nabla} \otimes \vec{v})^T + \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \psi_j^{(i)} w_j^{(i)}, \end{aligned} \quad (1.27)$$

де символ  $(\dots)^T$  означає операцію транспонування.

*Доведення.* Підставимо в закон збереження повної енергії (1.25) її значення (1.24) і вираз для потоку (1.26). Тоді маємо

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\rho \vec{v}^2}{2} + \rho \Psi \right) &= -\vec{\nabla} \cdot (\rho u \vec{v}) - \vec{\nabla} \cdot \rho \left( \frac{\vec{v}^2}{2} + \Psi \right) \vec{v} - \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_Q + \\ &+ \vec{\nabla} \cdot (\hat{\Pi} \cdot \vec{v}) - \vec{\nabla} \cdot \left( \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N (\psi_j^{(i)} + \mu_j'^{(i)}) \vec{J}_j^{(i)} \right). \end{aligned}$$

Враховуючи співвідношення (1.18a), перепишемо цю рівність у вигляді

$$\rho \frac{du}{dt} = -\rho \frac{d}{dt} \left( \frac{\vec{v}^2}{2} + \Psi \right) - \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_Q + \vec{\nabla} \cdot (\hat{\Pi} \cdot \vec{v}) - \vec{\nabla} \cdot \left( \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N (\psi_j^{(i)} + \mu_j'^{(i)}) \vec{J}_j^{(i)} \right).$$



Використаємо балансові спiввiдношення для потенцiальної (1.20) та для кiнетичної енергiї (1.23), тодi отримаємо рiвняння балансу внутрiшньої енергiї

$$\rho \frac{du}{dt} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_Q - \vec{\nabla} \cdot \left( \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \mu_j^{(i)} \vec{J}_j^{(i)} \right) + \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \vec{J}_j^{(i)} \cdot \vec{F}_j^{(i)} + \\ + \hat{\Pi} : (\vec{\nabla} \otimes \vec{v})^T + \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \Psi_j^{(i)} w_j^{(i)}.$$

I теорема доведена.

Зазначимо, що вираз  $\hat{\Pi} : (\vec{\nabla} \otimes \vec{v})^T$  у компонентній формі набуває вигляду [12, 23]  $\frac{1}{\rho} \Pi^{\alpha\beta} \frac{d\varepsilon_{\alpha\beta}}{dt}$ , де  $\varepsilon_{\alpha\beta}$  - компоненти тензора деформації.

### ||| 1.3. Гіпотеза локальної термодинамічної рівноваги. Рівняння Гіббса

При модельному описі неоднорiдної багатокомпонентної термодинамiчної системи  $K^*$ , яка зовнiшnimi нестaционарними дiями виведена зi станu рiвноваги або пiдтримується u нерiвноважному станi, приймається принцип локальної термодинамiчної рiвноваги [10, 17, 19, 23, 50]. Ця гiпотеза полягає в припущенi низки базових положень, а саме:

» Приймається, що для опису макроскопiчного стану фiзично малої макрочастини системи ( $\delta K^*$ ) достатньo використати фiзичнi параметри, якi характеризують iї u рiвноважному станi. Цi фiзичнi параметри вiдповiдають осередненим (експериментально вимiрювальнiм) значенням, встановленим за певним набором мiкроскопiчних характеристик частинок, що складають фiзично малої макрочастини ( $\delta K^*$ ).

» Властивостi вихiдної системи  $K^*$  приймаються такими, що однорiднi рiвноважнi (стацiонарнi) термодинамiчнi стани довiльної фiзично малої макрочастини ( $\delta K^*$ ) i всiєї системи збiгаються за одинакових зовнiшnих умов. Тобто це означає, що не розглядаються ситуацiї, коли рiзнi макрочастини ( $\delta K^*$ ) системи

$K^*$  необхідно описувати різним числом макроскопічних (термодинамічних) змінних.

➤ З урахуванням нескомпенсованого тепла приймаються як визначальні всі основні співвідношення рівноважної термодинаміки. Нескомпенсоване тепло пов'язується з протіканням необоротніх процесів і виникненням ентропії.

Ці положення узгоджуються з близькодіючим характером взаємодії між елементарними матеріальними частинками системи і застосовні, тоді як час релаксації дисипативних процесів, що «хаотизують» направлений (впорядкований) рух матеріальних частинок або перенесення імпульсу чи енергії у межах фізично малої макрочастини тіла ( $\delta K^*$ ), значно менший ніж час, необхідний для суттєвої (експериментально вимірюваної) зміни параметрів, що характеризують ці макрочастини в цілому.

Нехай термодинамічний стан довільного макроскопічного елемента системи, який займає її малу під область, означений з допомогою таких спряжених макроскопічних параметрів як абсолютна температура  $T$ , питома ентропія  $s$ ; тензор напружень Коші у рівновазі  $\hat{\Pi}$ , тензор деформації  $\hat{\epsilon}$ ; хімічний потенціал  $\mu_j^{(i)}$  і масова концентрація  $C_j^{(i)}$  компоненти  $i$  у стані  $j$ :

$$T - s, \quad \bar{\Pi}^{\alpha\beta} - \varepsilon_{\alpha\beta}, \quad \mu_j^{(i)} - C_j^{(i)}, \quad (1.28)$$

де  $s = S/m$ ,  $S$  - ентропія системи в цілому, що займає область  $(V)$ ;  $v = V/m \equiv 1/\rho$ ;  $\bar{\Pi}^{\alpha\beta}$  - контраваріантні компоненти тензора напружень Коші у рівновазі,  $\varepsilon_{\alpha\beta}$  - коваріантні компоненти тензора деформації.

Виберемо за вихідний (початковий, природний) термодинамічний стан такий, що відповідає рівноважному стану необмеженої термодинамічної системи за відсутності зовнішніх дій. Цей стан відмітимо індексом 0:

$$T_0 - s_0, \quad \bar{\Pi}_0^{\alpha\beta} - \varepsilon_{\alpha\beta 0}, \quad \mu_{j0}^{(i)} - C_{j0}^{(i)}. \quad (1.29)$$

Питома внутрішня енергія термодинамічної системи є такою функцією стану  $u = u(s, v, \{C_j^{(i)}\})$ , яка задоволяє співвідношення



$$u = Ts + \frac{1}{\rho} \Pi^{\alpha\beta} \varepsilon_{\alpha\beta} + \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \mu_j^{(i)} C_j^{(i)}, \quad (1.30)$$

за умови, що в той же час інфінітізимально малі зміни масової густини ентропії  $ds$ , питомого об'єму  $dv$  та масових концентрацій  $dC_j^{(i)}$  задовольняють рівняння

$$du = Tds + \frac{1}{\rho} \Pi^{\alpha\beta} d\varepsilon_{\alpha\beta} + \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \mu_j^{(i)} dC_j^{(i)} \quad (\text{рівняння Гіббса}). \quad (1.31)$$

Оскільки масові концентрації задовольняють умову нормування (1.15), то рівняння Гіббса (1.31) можна переписати у вигляді

$$du = Tds + \frac{1}{\rho} \Pi^{\alpha\beta} d\varepsilon_{\alpha\beta} + \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N \mu_j^{(i)} dc_j^{(i)}, \quad (1.32)$$

де  $\mu_j^{(i)} = \mu_j^{(i)} - \mu_5^{(0)}$  - відносний хімічний потенціал компоненти  $i$  у стані  $j$ .

Субстанціональна форма рівняння Гіббса (1.32) буде

$$\rho \frac{du}{dt} = T\rho \frac{ds}{dt} + \Pi^{\alpha\beta} \frac{d\varepsilon_{\alpha\beta}}{dt} + \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N \mu_j^{(i)} \frac{dc_j^{(i)}}{dt}, \quad (1.33)$$

де  $d/dt$  - субстанціональна похідна.

Зазначимо, що рівняння (1.33) також можна отримати з рівняння балансу внутрішньої енергії (1.27), якщо спрямувати до нуля масові потоки  $\vec{J}_j^{(i)}$ , потік тепла  $\vec{J}_Q$  і величини  $\omega_j^{(i)}$ , тобто  $\vec{J}_j^{(i)} \rightarrow 0$ ,  $\vec{J}_Q \rightarrow 0$  і  $\omega_j^{(i)} \rightarrow 0$ . При цьому компоненти тензора напружень Коші  $\Pi_{(i)j}^{\alpha\beta}$  прямують до своїх рівноважних значень  $\bar{\Pi}_{(i)j}^{\alpha\beta}$ , тобто  $\Pi_{(i)j}^{\alpha\beta} \rightarrow \bar{\Pi}_{(i)j}^{\alpha\beta}$ .

Диференціальні 1-форми (1.32) і (1.33) пов'язують дві масові густини термодинамічних екстенсивних величин – внутрішньої енергії  $s$  та ентропії  $s$ , кожна з яких може розглядатися як функція стану при довільному виборі незалежних параметрів, що задають стан.

## || 1.4. Рівняння стану

При аналізі відкритих фізично малих областей термодинамічної системи в якості визначального термодинамічного потенціалу стану системи зазвичай використовують внутрішню енергію і, яка введена рівнянням (1.30).

**Теорема 1.4.** Якщо питома внутрішня енергія  $u$  є задана як функція змінних  $s$ ,  $\varepsilon_{\alpha\beta}$ ,  $\{c_j^{(i)}\}$  (де  $\{c_j^{(i)}\}$  - набір відхилень концентрацій  $c_j^{(i)} = C_j^{(i)} - C_{j0}^{(i)}$  для  $\forall i, j$ ) і підпорядковується співвідношенням (1.30), (1.31), то рівняння стану мають вигляд

$$T = \left( \frac{\partial u}{\partial s} \right)_{\varepsilon_{\alpha\beta}, c_j^{(i)}}, \quad \frac{1}{\rho} \bar{\Pi}^{\alpha\beta} = \left( \frac{\partial u}{\partial \varepsilon_{\alpha\beta}} \right)_{s, c_j^{(i)}}, \quad \mu_j^{(i)} = \left( \frac{\partial u}{\partial c_j^{(i)}} \right)_{T, \varepsilon_{\alpha\beta}, \{c_l^{(k \neq i)}\}_{l \neq j}}. \quad (1.34)$$

*Доведення.* Якщо внутрішня енергія системи є задана як функція питомої ентропії, компонент тензора деформації та нормованих концентрацій компонент, тобто

$$u = u(s, \varepsilon_{\alpha\beta}, \{c_j^{(i)}\}), \quad (1.35)$$

тоді вона є термодинамічним потенціалом по відношенню до спряжених змінних абсолютної температури  $T$ , компонент тензора напруженень Коші  $\hat{\Pi}$  та нормованих хімічних потенціалів компонент системи  $\mu_j^{(i)}$ . Тоді за означенням повного диференціалу з рівняння Гіббса (1.32) випливають наступні співвідношення

$$T = \left( \frac{\partial u}{\partial s} \right)_{\varepsilon_{\alpha\beta}, c_j^{(i)}}, \quad \frac{1}{\rho} \bar{\Pi}^{\alpha\beta} = \left( \frac{\partial u}{\partial \varepsilon_{\alpha\beta}} \right)_{s, c_j^{(i)}}, \quad \mu_j^{(i)} = \left( \frac{\partial u}{\partial c_j^{(i)}} \right)_{T, \varepsilon_{\alpha\beta}, \{c_l^{(k \neq i)}\}_{l \neq j}},$$

які називаються рівняннями стану.

Для вихідного стану співвідношення (1.34) можна записати у вигляді

$$T_0 = \left( \frac{\partial u}{\partial s} \right)_{\varepsilon_{\alpha\beta}, c_j^{(i)}}^{(0)}, \quad \frac{1}{\rho} \bar{\Pi}_0^{\alpha\beta} = \left( \frac{\partial u}{\partial \varepsilon_{\alpha\beta}} \right)_{s, c_j^{(i)}}^{(0)}, \quad \mu_{j0}^{(i)} = \left( \frac{\partial u}{\partial c_j^{(i)}} \right)_{T, \varepsilon_{\alpha\beta}, \{c_l^{(k \neq i)}\}_{l \neq j}}^{(0)}. \quad (1.36)$$

І теорема 1.4 доведена.



Зауважимо, що конкретна структура залежностей (1.35) за макроскопічним описом матеріальної системи може бути встановлена з використанням експериментальних даних або методами фізики твердого тіла.

### || 1.5. Рівняння балансу питомої енергії

**Теорема 1.5.** Якщо в термодинамічній системі виконуються балансові співвідношення для концентрації компонент (1.14) та внутрішньої енергії, а також рівняння Гіббса у формі (1.32), то має місце рівняння балансу питомої ентропії

$$\rho \frac{ds}{dt} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_s + \frac{\sigma_s}{T}. \quad (1.37)$$

*Доведення.* Домножимо рівняння Гіббса (1.32) на величину  $\rho/dt$ :

$$\rho \frac{ds}{dt} = \frac{1}{T} \left( \rho \frac{du}{dt} + \Pi^{\alpha\beta} \frac{d\varepsilon_{\alpha\beta}}{dt} - \sum_{j=1}^N \sum_{i=0}^N \mu_j^{(i)} \rho \frac{dc_j^{(i)}}{dt} \right).$$

Підставимо в отримане рівняння співвідношення (1.10), (1.18б) і (1.27). Тоді отримаємо

$$\begin{aligned} \rho \frac{ds}{dt} = & \frac{1}{T} \left[ -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_Q - \vec{\nabla} \cdot \left( \sum_{j=1}^N \sum_{i=0}^N \mu_j^{(i)} \vec{J}_j^{(i)} \right) + \sum_{j=1}^N \sum_{i=0}^N \vec{J}_j^{(i)} \cdot \vec{F}_j^{(i)} + \hat{\Pi} : (\vec{\nabla} \otimes \vec{v})^T - \right. \\ & \left. - \sum_{j=1}^N \sum_{i=0}^N \psi_j^{(i)} w_j^{(i)} - P v \vec{\nabla} \cdot \vec{v} + \sum_{j=1}^N \sum_{i=0}^N \mu_j^{(i)} \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_j^{(i)} - \sum_{j=1}^N \sum_{i=0}^N \mu_j^{(i)} w_j^{(i)} \right]. \end{aligned} \quad (1.38)$$

Врахуємо, що

$$\begin{aligned} \frac{1}{T} \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_Q &= \vec{\nabla} \cdot \frac{\vec{J}_Q}{T} - \vec{J}_Q \cdot \vec{\nabla} \frac{1}{T}, \quad \vec{\nabla} \frac{1}{T} = -\frac{1}{T^2} \vec{\nabla} T \quad i \\ \mu_j^{(i)} \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_j^{(i)} &= \vec{\nabla} \cdot (\mu_j^{(i)} \vec{J}_j^{(i)}) - \vec{J}_j^{(i)} \cdot \vec{\nabla} \mu_j^{(i)}. \end{aligned} \quad (1.39)$$

Тоді

$$\rho \frac{ds}{dt} = -\vec{\nabla} \cdot \frac{\vec{J}_Q}{T} + \vec{J}_Q \cdot \vec{\nabla} \frac{1}{T} + \frac{1}{T} \left[ \sum_{j=1}^N \sum_{i=0}^N \vec{J}_j^{(i)} \cdot (\vec{F}_j^{(i)} - \vec{\nabla} \mu_j^{(i)}) + \hat{\Pi} : (\vec{\nabla} \otimes \vec{v})^T + \right.$$

$$+ P \nabla \vec{\nabla} \cdot \vec{v} - \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \psi_j^{(i)} w_j^{(i)} - \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \mu_j'^{(i)} w_j^{(i)} \Bigg].$$

Знехтуємо ефектами в'язкості і приймемо  $\hat{\Pi} = -P\hat{I}$  (де  $\hat{I}$  - одиничний тензор). Тоді маємо

$$\begin{aligned} \rho \frac{ds}{dt} = & -\vec{\nabla} \cdot \frac{\vec{J}_Q}{T} + \vec{J}_Q \cdot \vec{\nabla} \frac{1}{T} + \frac{1}{T} \left[ \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \vec{J}_j^{(i)} \cdot (\vec{F}_j^{(i)} - \vec{\nabla} \mu_j'^{(i)}) - \right. \\ & \left. - \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \psi_j^{(i)} w_j^{(i)} - \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \mu_j'^{(i)} w_j^{(i)} \right]. \end{aligned} \quad (1.40)$$

Позначимо

$$\vec{J}_s = \frac{\vec{J}_Q}{T} \quad (1.41)$$

- потік ентропії;

$$\vec{X}_Q = -\frac{1}{T} \vec{\nabla} T \quad (1.42)$$

- векторна термодинамічна сила, що обумовлює тепlopровідність і є спряженою до потоку тепла  $\vec{J}_Q$ ;

$$\vec{X}_j^{(i)} = -\vec{\nabla} (\mu_j'^{(i)} + \psi_j^{(i)}) \quad (1.43)$$

- векторні термодинамічні сили дифузії, спряжені до векторних потоків дифузії  $\vec{J}_j^{(i)}$ .

Розглянемо дві останні суми рівності (1.40). Оскільки  $\psi_j^{(0)} = \psi_j^{(1)} = \dots = \psi_j^{(N)} = \psi$ , то враховуючи умови (1.12а), яким задовільняють потужності виробництва маси  $w_j^{(i)}$ , отримаємо

$$\sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \psi_j^{(i)} w_j^{(i)} = \psi \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N w_j^{(i)} = 0.$$

Приймемо до уваги тільки процеси переходу домішкових частинок між адсорбованими на скелеті шарами води і поровим розчином  $\omega_{12}^{(i)}$  ( $i = \overline{1, N}$ ) та поверхнею і об'ємом скелету  $\omega_{23}^{(i)}$



( $i = \overline{1, N}$ ), тобто відмінними від нуля будуть потужності виробництва маси за рахунок процесів сорбції-десорбції  $\omega_{12}^{(i)}$ ,  $\omega_{21}^{(i)}$ ,  $\omega_{23}^{(i)}$ ,  $\omega_{32}^{(i)}$ .

Крім цього потужності виробництва маси  $\bar{w}_j^{(i)}$  для компонент  $i = \overline{1, N}$  підпорядковуються умовам

$$\bar{w}_j^{(i)} = \bar{w}_j^{(ii-1)} + \bar{w}_j^{(ii+1)} + \bar{w}_j^{(iN)}, \quad \bar{w}_j^{(11)} = 0,$$

$$\bar{w}_j^{(i+1i)} = -\bar{w}_j^{(ii+1)} \quad (i = \overline{1, N}, j = \overline{1, 3}),$$

$$\bar{w}_j^{(ii\pm l)} = 0 \text{ для } l \geq 2, \quad \bar{w}_j^{(ii)} = 0 \text{ для } \forall i; \quad \bar{w}_j^{(iN)} = -\bar{w}_j^{(Ni)},$$

$$\bar{w}_j^{(N)} = \sum_{i=1}^{N-1} \bar{w}_j^{(Ni)} = -\sum_{i=1}^{N-1} \bar{w}_j^{(iN)}; \quad \bar{w}_j^{(i)} = 0 \quad (j = 4; 5);$$

$$\bar{w}^{(i)} = \bar{w}_1^{(i)} = \bar{w}_2^{(i)} = \bar{w}_3^{(i)} \quad (i = \overline{1, N}).$$

Тоді маємо

$$\sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \mu_j'^{(i)} w_j^{(i)} = \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \mu_j'^{(i)} \left[ \sum_{k=1}^5 \omega_{jk}^{(i)} + \bar{w}_j^{(i)} \right]. \quad (1.44)$$

Перший доданок правої частини (1.44) можна перетворити до вигляду

$$\sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \sum_{k=1}^5 \mu_j'^{(i)} \omega_{jk}^{(i)} = \sum_{i=1}^N \left[ -(\mu_2'^{(i)} - \mu_1'^{(i)}) \omega_{12}^{(i)} - (\mu_3'^{(i)} - \mu_2'^{(i)}) \omega_{23}^{(i)} \right].$$

Позначимо

$$\omega_1^{(i)} = \omega_{12}^{(i)}, \quad \omega_2^{(i)} = \omega_{23}^{(i)} \quad (i = \overline{1, N}) \quad (1.45)$$

- скалярні масові потоки, які визначають інтенсивність переходу домішкових частинок відповідно між поровим розчином і поверхнею скелету та між адсорбованою водою і об'ємом скелету;

$$X_1^{(i)} = \mu_2'^{(i)} - \mu_1'^{(i)}, \quad X_2^{(i)} = \mu_3'^{(i)} - \mu_2'^{(i)} \quad (i = \overline{1, N}) \quad (1.46)$$

- скалярні термодинамічні сили, спряжені до відповідних масових потоків  $\omega_j^{(i)}$ .

Другий доданок правої частини рівності (1.44) можемо подати так

$$\sum_{i=0}^N \mu_j'^{(i)} \bar{w}_j^{(i)} = - \sum_{i=1}^{N-1} (\mu_j'^{(i+1)} - \mu_j'^{(i)}) \bar{w}_j^{(ii+1)} - \sum_{i=1}^{N-1} (\mu_j'^{(N)} - \mu_j'^{(i)}) \bar{w}_j^{(iN)}, \quad (1.47)$$

де приймаємо, що

$$\bar{w}_j^{(ik)}, \quad \bar{w}_j^{(iN)} \quad (i, k = \overline{1, N-1}) \quad (1.48)$$

- скалярні масові потоки, які характеризують розпад частинок домішкової речовини, вважаємо відомими;

$$\bar{X}_j^{(i)} = \mu_j'^{(i+1)} - \mu_j'^{(i)}, \quad \bar{X}_j^{(Ni)} = \mu_j'^{(N)} - \mu_j'^{(i)} \quad (i = \overline{1, N}, j = \overline{1, 3}) \quad (1.49)$$

- скалярні величини, спряжені до відповідних масових потоків  $\bar{w}_j^{(ik)}$ ,  $\bar{w}_j^{(iN)}$  відповідно, які визначають супутнє тепловиділення в процесі розпаду.

Тоді з використанням позначень (1.41)-(1.43), (1.45)-(1.49) рівняння (1.40) перепишемо у вигляді

$$\rho \frac{ds}{dt} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_s + \frac{1}{T} \left[ \vec{J}_Q \cdot \vec{X}_Q + \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \vec{J}_j^{(i)} \cdot \vec{X}_j^{(i)} + \sum_{k=1}^2 \sum_{i=1}^N \omega_k^{(i)} X_k^{(i)} + \sum_{i=1}^N q^{(i)} \right]$$

або остаточно

$$\rho \frac{ds}{dt} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_s + \frac{\sigma_s}{T},$$

де  $\sigma_s^{(j)} = \vec{J}_Q \cdot \vec{X}_Q + \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \vec{J}_j^{(i)} \cdot \vec{X}_j^{(i)} + \sum_{k=1}^2 \sum_{i=1}^N \omega_k^{(i)} X_k^{(i)} + \sum_{j=1}^3 q_j \geq 0$  - потужність виробництва ентропії,  $q_j = \sum_{i=1}^{N-1} \bar{X}_j^{(i)} \bar{w}_j^{(ii+1)} + \sum_{i=1}^{N-1} \bar{X}_j^{(Ni)} \bar{w}_j^{(iN)}$  - локальні тепловиділення при розпаді компонент.

Отже, теорема доведена.

Зауважимо, що додатна означеність потужності виробництва ентропії є наслідком другого закону термодинаміки [19, 23].



## || 1.6. Кінетичні спiввiдношення

Ми маємо сукупнiсть спряжених величин – термодинамiчнi сили i вiдповiднi термодинамiчнi потоки:

$$\vec{X}_Q \div \vec{J}_Q, \quad \vec{X}_j^{(i)} \div \vec{J}_j^{(i)}, \quad X_k^{(i)} \div \omega_k^{(i)}.$$

У вихiдному станi сукупнiсть спряжених термодинамiчнiх потокiв i сил приймає значення

$$\vec{X}_{Q0} \div \vec{J}_{Q0}, \quad \vec{X}_{j0}^{(i)} \div \vec{J}_{j0}^{(i)}, \quad X_{k0}^{(i)} \div \omega_{k0}^{(i)}.$$

**Постулат 1.3.** Термодинамiчнi потоки є функцiями термодинамiчнiх сил, структура функцiональних залежностей яких задоволює другий закон термодинамiки та умови взаємностi Онзагера.

Тобто мають мiсце:

I. Функцiональнi залежностi

$$\begin{aligned} \vec{J}_Q &= \vec{J}_Q\left(\vec{X}_Q, \vec{X}_{j=1}^{(0)}, \dots, \vec{X}_{j=5}^{(N)}, \vec{X}_{k=1}^{(1)}, \dots, \vec{X}_{k=1}^{(N)}, \vec{X}_{k=2}^{(1)}, \dots, \vec{X}_{k=2}^{(N)}\right), \\ \vec{J}_j^{(i)} &= \vec{J}_j^{(i)}\left(\vec{X}_Q, \vec{X}_{j=1}^{(0)}, \dots, \vec{X}_{j=5}^{(N)}, \vec{X}_{k=1}^{(1)}, \dots, \vec{X}_{k=1}^{(N)}, \vec{X}_{k=2}^{(1)}, \dots, \vec{X}_{k=2}^{(N)}\right), \\ \omega_k^{(i)} &= \omega_k^{(i)}\left(\vec{X}_Q, \vec{X}_{j=1}^{(0)}, \dots, \vec{X}_{j=5}^{(N)}, \vec{X}_{k=1}^{(1)}, \dots, \vec{X}_{k=1}^{(N)}, \vec{X}_{k=2}^{(1)}, \dots, \vec{X}_{k=2}^{(N)}\right). \end{aligned} \quad (1.50)$$

Вирази (1.50) записанi для скалярних компонент вiдповiдних векторних потокiв i сил. Причому мається на увазi, що

$$\begin{aligned} \vec{X}_Q &= (X_1^Q, X_2^Q, X_3^Q), \quad \vec{J}_Q = (J_1^Q, J_2^Q, J_3^Q); \\ \vec{X}_j^{(i)} &= (X_1^{(i)j}, X_2^{(i)j}, X_3^{(i)j}), \quad \vec{J}_j^{(i)} = (J_1^{(i)j}, J_2^{(i)j}, J_3^{(i)j}), \quad i = \overline{0, N}, \quad j = \overline{0, 5}, \end{aligned}$$

де  $X_\alpha^Q$ ,  $J_\alpha^Q$ ,  $X_\alpha^{(i)j}$ ,  $X_\alpha^{(i)j}$  - вiдповiднi декартовi складовi ( $\alpha = \overline{1, 3}$ ).

II. Другий закон термодинамiки у виглядi

$$\sigma_s^{(j)} = \vec{J}_Q \cdot \vec{X}_Q + \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \vec{J}_j^{(i)} \cdot \vec{X}_j^{(i)} + \sum_{k=1}^2 \sum_{i=1}^N \omega_k^{(i)} X_k^{(i)} + \sum_{j=1}^3 q_j \geq 0. \quad (1.51)$$

III. Умови взаємностi Онзагера [19, 23]

$$\frac{\partial \vec{J}_Q}{\partial \vec{X}_j^{(i)}} = \frac{\partial \vec{J}_j^{(i)}}{\partial \vec{X}_Q}, \quad \frac{\partial \vec{J}_Q}{\partial X_k^{(i)}} = \frac{\partial \omega_k^{(i)}}{\partial \vec{X}_Q}, \quad \frac{\partial \omega_k^{(i)}}{\partial \vec{X}_j^{(i)}} = \frac{\partial \vec{J}_j^{(i)}}{\partial X_k^{(i)}}. \quad (1.52)$$

Тут похідні означені формулами

$$\frac{\partial \vec{J}}{\partial \vec{X}} \equiv \overset{\alpha}{\vec{i}}_0 \otimes \frac{\partial \vec{J}}{\partial X_0^\alpha}, \quad \vec{X} \equiv \overset{\alpha}{\vec{i}}_0 X_0^\alpha,$$

де  $\overset{\alpha}{\vec{i}}_0 = g_0^{\alpha\beta} \overset{0}{\vec{i}}_\beta$  - контраваріантні базисні вектори,  $g_0^{\alpha\beta}$  - контраваріантні компоненти метричного тензора декартової системи координат.

Враховуючи вигляд функціональної залежності (1.51) виробництва ентропії від термодинамічних потоків і сил, можна ввести кінетичний потенціал [23, 48]

$$\Phi = \Phi(\vec{X}_Q, \{\vec{X}_j^{(i)}\}, \{X_k^{(i)}\}), \quad (1.53)$$

диференціал якого має вигляд

$$d\Phi = \vec{J}_Q \cdot d\vec{X}_Q + \sum_{i=1}^5 \sum_{j=0}^N \vec{J}_j^{(i)} \cdot d\vec{X}_j^{(i)} + \sum_{k=1}^2 \sum_{i=1}^N \omega_k^{(i)} dX_k^{(i)}. \quad (1.54)$$

Співвідношення (1.53) і (1.54) дозволяють записати загальну форму кінетичних рівнянь у вигляді

$$\vec{J}_Q = \frac{\partial \Phi}{\partial \vec{X}_Q}, \quad \vec{J}_j^{(i)} = \frac{\partial \Phi}{\partial \vec{X}_j^{(i)}}, \quad \omega_k^{(i)} = \frac{\partial \Phi}{\partial X_k^{(i)}}. \quad (1.55)$$

Зауважимо, що у початковому рівноважному однорідному ста-ні термодинамічні сили і потоки дорівнюють нулю, тобто

$$\vec{X}_{Q0} = \vec{X}_{j0}^{(i)} = X_{k0}^{(i)} = 0, \quad \vec{J}_{Q0} = \vec{J}_{j0}^{(i)} = \omega_{k0}^{(i)} = 0. \quad (1.56)$$

Відзначимо також, що залежність (1.53) може бути встановлена на основі експериментальних даних або визначена методами фізики твердого тіла.

Записані співвідношення складають повну систему рівнянь для знаходження введених у розгляд величин.

### ||| 1.7. Лінійні рівняння стану

Введемо у розгляд нову термодинамічну функцію – вільну енергію Гельмгольца  $f = u - Ts$ , яка визначена в просторі температури  $T$ , коваріантних компонент тензора деформації  $\{\epsilon_{\alpha\beta}\}$  і концентрацій  $\{c_j^{(i)}\}$ , тобто



$$f = f(T, \{\varepsilon_{\alpha\beta}\}, \{c_j^{(i)}\}). \quad (1.57)$$

Рівняння Гіббса для вільної енергії  $f$  відповідно до (1.32)

$$df = -sdT + \frac{1}{\rho} \Pi^{\alpha\beta} d\varepsilon_{\alpha\beta} + \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N \mu_j^{(i)} dc_j^{(i)}. \quad (1.58)$$

Тому зі співвідношень (1.57) і (1.58) маємо наступну загальну форму рівнянь стану

$$s = \left( \frac{\partial f}{\partial T} \right)_{\varepsilon_{\alpha\beta}, c_j^{(i)}}, \quad \frac{1}{\rho} \bar{\Pi}^{\alpha\beta} = \left( \frac{\partial f}{\partial \varepsilon_{\alpha\beta}} \right)_{s, c_j^{(i)}}, \quad \mu_j^{(i)} = \left( \frac{\partial f}{\partial c_j^{(i)}} \right)_{T, \varepsilon_{\alpha\beta}, \{c_l^{(k \neq i)}\}}, \quad (1.59)$$

які для вихідного стану набувають значень

$$s_0 = \left( \frac{\partial f}{\partial T} \right)_{\varepsilon_{\alpha\beta}, c_j^{(i)}}^{(0)}, \quad \frac{1}{\rho} \bar{\Pi}_0^{\alpha\beta} = \left( \frac{\partial f}{\partial \varepsilon_{\alpha\beta}} \right)_{s, c_j^{(i)}}^{(0)}, \quad \mu_{j0}^{(i)} = \left( \frac{\partial f}{\partial c_j^{(i)}} \right)_{T, \varepsilon_{\alpha\beta}, \{c_l^{(k \neq i)}\}}^{(0)}.$$

**Теорема 1.6.** Якщо вільна енергія Гельмгольца є дійсною тричі диференційованою функцією температури, коваріантних компонент тензора деформації та концентрацій, то мають місце лінійні рівняння стану

$$\begin{aligned} s - s_0 &= T_0^{-1} c_V t + \sum_{\alpha, \beta} \alpha^{\alpha\beta} \varepsilon_{\alpha\beta} - \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N d_{tj}^{(i)} c_j^{(i)}, \\ \frac{\bar{\Pi}^{\alpha\beta}}{\rho} &= \alpha^{\alpha\beta} t + \sum_{\gamma, \delta} \beta^{\alpha\beta\gamma\delta} \varepsilon_{\gamma\delta} + \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N \gamma_j^{\alpha\beta(i)} c_j^{(i)}, \\ \mu_j^{(i)} - \mu_{j0}^{(i)} &= d_{tj}^{(i)} t + \sum_{\alpha, \beta} \gamma_j^{\alpha\beta(i)} \varepsilon_{\alpha\beta j}^{(i)} + d_j^{(i)} c_j^{(i)}. \end{aligned} \quad (1.60)$$

*Доведення.* Якщо вільна енергія Гельмгольца  $f$  є дійсною тричі диференційованою функцією змінних  $T, \{\varepsilon_{\alpha\beta}\}$  і  $\{C_j^{(i)}\}$  в околі вихідного стану, то у випадку малих відхилень цих змінних від значень у початковому стані

$$(T - T_0)/T_0 \ll 1, \quad \varepsilon_{\alpha\beta} \ll 1, \quad C_j^{(i)} - C_{j0}^{(i)} \ll 1$$

можемо розкласти її в ряд Тейлора до квадратичних членів включно. Тоді, враховуючи (1.59) і те, що  $\bar{\Pi}_0^{\alpha\beta} = 0$ , отримаємо

$$\begin{aligned} f = f_0 - s_0 t + \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N \mu_{j0}^{(i)} c_j^{(i)} - \frac{1}{2} \left( \frac{\partial s}{\partial T} \right)_0 t^2 + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \delta} \left( \frac{\partial (\bar{\Pi}^{\alpha\beta}/\rho)}{\partial \varepsilon_{\gamma\delta}} \right)_0 \varepsilon_{\alpha\beta} \varepsilon_{\gamma\delta} + \\ + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N \left( \frac{\partial \mu_j^{(i)}}{\partial c_j^{(i)}} \right)_0 c_j^{(i)2} + \sum_{\alpha, \beta} \left( \frac{\partial (\bar{\Pi}^{\alpha\beta}/\rho)}{\partial T} \right)_0 t \varepsilon_{\alpha\beta} + \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N \left( \frac{\partial \mu_j^{(i)}}{\partial T} \right)_0 t c_j^{(i)} + \\ + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N \sum_{\alpha\beta} \left( \frac{\partial \mu_j^{(i)}}{\partial \varepsilon_{\alpha\beta}} \right)_0 \varepsilon_{\alpha\beta} c_j^{(i)}, \end{aligned} \quad (1.61)$$

де  $t = T - T_0$  - відхилення абсолютної температури.

Введемо матеріальні характеристики системи

$$\begin{aligned} c_V = T_0 \left( \frac{\partial s}{\partial T} \right)_0, \quad d_j^{(i)} = \left( \frac{\partial \mu_j^{(i)}}{\partial c_j^{(i)}} \right)_0, \quad d_{tj}^{(i)} = T_0 \left( \frac{\partial \mu_j^{(i)}}{\partial T} \right)_0, \\ \alpha^{\alpha\beta} = \left( \frac{\partial (\bar{\Pi}^{\alpha\beta}/\rho)}{\partial T} \right)_0, \quad \beta^{\alpha\beta\gamma\delta} = \left( \frac{\partial (\bar{\Pi}^{\alpha\beta}/\rho)}{\partial \varepsilon_{\gamma\delta}} \right)_0, \quad \gamma_j^{\alpha\beta(i)} = \left( \frac{\partial \mu_j^{(i)}}{\partial \varepsilon_{\alpha\beta}} \right)_0. \end{aligned} \quad (1.62)$$

Підставляючи розклад вільної енергії Гельмгольца (1.61) у формули (1.59) і враховуючи введені матеріальні характеристики системи (1.62), знаходимо лінійні рівняння стану

$$\begin{aligned} s - s_0 = T_0^{-1} c_V t + \sum_{\alpha, \beta} \alpha^{\alpha\beta} \varepsilon_{\alpha\beta} - \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N d_{tj}^{(i)} c_j^{(i)}, \\ \frac{\bar{\Pi}^{\alpha\beta}}{\rho} = \alpha^{\alpha\beta} t + \sum_{\gamma, \delta} \beta^{\alpha\beta\gamma\delta} \varepsilon_{\gamma\delta} + \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N \gamma_j^{\alpha\beta(i)} c_j^{(i)}, \\ \mu_j^{(i)} - \mu_{j0}^{(i)} = d_{tj}^{(i)} t + \sum_{\alpha, \beta} \gamma_j^{\alpha\beta(i)} \varepsilon_{\alpha\beta} + d_j^{(i)} c_j^{(i)}. \end{aligned}$$

I теорема доведена.

Для ізотропних систем лінійні рівняння стану можна привести до вигляду [12]



$$s - s_0 = T_0^{-1} c_V t + \alpha \frac{K}{\rho} \varepsilon - \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N d_{ij}^{(i)} c_j^{(i)},$$

$$\frac{\bar{\Pi}_{\alpha\beta}}{\rho} = \left[ \left( K - \frac{2}{3} G \right) \varepsilon - K \left( \alpha t + \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N d_{\sigma j}^{(i)} c_j^{(i)} \right) \right] \delta_{\alpha\beta} + 2G\varepsilon_{\alpha\beta},$$

$$\mu_j^{(i)} - \mu_{j0}^{(i)} = d_{tj}^{(i)} t - d_{\sigma j}^{(i)} \frac{K}{\rho} \varepsilon + \bar{a}_{cj}^{(i)} c_j^{(i)}. \quad (1.60a)$$

Тут використано наступні позначення

$$K = \frac{1}{3} \left( \frac{\partial \Pi}{\partial \varepsilon} \right)_{T, \{c_j^{(i)}\}}$$

- модуль об'ємного стиску, де  $\Pi = \Pi_{\alpha}^{\alpha}$  - перший інваріант тензора напружень;

$$\alpha = \left( \frac{\partial \varepsilon}{\partial T} \right)_{\{\Pi^{\alpha\beta}\}, \{c_j^{(i)}\}}$$

- температурний коефіцієнт об'ємного розширення матеріалу;

$$\bar{a}_{cj}^{(i)} = \left( \frac{\partial \varepsilon}{\partial c_j^{(i)}} \right)_{T, \{\Pi^{\alpha\beta}\}, \{c_{j\neq i}^{(k\neq i)}\}}$$

- концентраційні коефіцієнти об'ємного розширення матеріалу;

$$G = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \Pi^{\alpha\beta}}{\partial \varepsilon_{\alpha\beta}} \right)_{T, \{c_j^{(i)}\}, \{\alpha \neq \beta\}}$$

- модуль зсуву.

### || 1.8. Лінійні кінетичні співвідношення

**Теорема 1.6.** Якщо для ізотропного тіла кінетичний потенціал  $\Phi$  (1.53) є дійсною тричі диференційованою функцією термодинамічних сил, тоді мають місце лінійні кінетичні співвідношення

$$\vec{J}_Q = L_{QQ} \vec{X}_Q + \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N L_{Qj}^{(i)} \vec{X}_j^{(i)},$$

$$\begin{aligned}\vec{J}_j^{(i)} &= L_{jQ}^{(i)} \vec{X}_Q + \sum_{m=1}^4 \sum_{n=0}^N L_{jm}^{(in)} \vec{X}_m^{(n)}, \\ \omega_k^{(i)} &= \sum_{m=1}^2 \sum_{l=1}^N \lambda_{km}^{(il)} X_m^{(l)}.\end{aligned}\quad (1.63)$$

*Доведення.* Нехай функція  $\Phi = \Phi\left(\vec{X}_Q, \{\vec{X}_j^{(i)}\}, \{X_k^{(i)}\}\right)$  є дійсною тричі диференційованою, тоді в околі вихідного рівноважного стану можемо розкласти її в ряд Тейлора до другого порядку включно. Маємо

$$\begin{aligned}\Phi &= \Phi_0 + \left( \frac{\partial \Phi}{\partial \vec{X}_Q} \right)_0 \cdot \vec{X}_Q + \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N \left( \frac{\partial \Phi}{\partial \vec{X}_j^{(i)}} \right)_0 \cdot \vec{X}_j^{(i)} + \sum_{k=1}^2 \sum_{i=1}^N \left( \frac{\partial \Phi}{\partial X_k^{(i)}} \right)_0 X_k^{(i)} + \\ &\quad \frac{1}{2} \left[ \left( \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \vec{X}_Q^2} \right)_0 : \vec{X}_Q \otimes \vec{X}_Q + 2 \sum_{m=1}^4 \sum_{n=0}^N \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N \left( \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \vec{X}_j^{(i)} \partial \vec{X}_m^{(n)}} \right)_0 : \vec{X}_j^{(i)} \otimes \vec{X}_m^{(n)} + \right. \\ &\quad + 2 \sum_{m=1}^2 \sum_{l=1}^N \sum_{k=1}^2 \sum_{i=1}^N \left( \frac{\partial^2 \Phi}{\partial X_k^{(i)} \partial X_m^{(l)}} \right)_0 X_k^{(i)} X_m^{(l)} + 2 \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N \left( \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \vec{X}_Q \partial \vec{X}_j^{(i)}} \right)_0 : \vec{X}_Q \otimes \vec{X}_j^{(i)} + \\ &\quad \left. + 2 \sum_{k=1}^2 \sum_{i=1}^N \left( \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \vec{X}_Q \partial X_k^{(i)}} \right)_0 \cdot \vec{X}_Q X_k^{(i)} + 2 \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N \sum_{k=1}^2 \sum_{l=1}^N \left( \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \vec{X}_j^{(i)} \partial X_k^{(l)}} \right)_0 \cdot \vec{X}_j^{(i)} X_k^{(l)} \right].\end{aligned}$$

Зазначимо, що у початковому стані термодинамічні сили  $\vec{X}_{Q0}, \vec{X}_{j0}^{(i)}, X_{k0}^{(i)} = 0$  для  $\forall i, j, k$ . Тоді, враховуючи співвідношення (1.55), (1.56), маємо

$$\begin{aligned}\Phi &= \Phi_0 + \frac{1}{2} \left[ \left( \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \vec{X}_Q^2} \right)_0 : \vec{X}_Q \otimes \vec{X}_Q + 2 \sum_{m=1}^4 \sum_{n=0}^N \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N \left( \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \vec{X}_j^{(i)} \partial \vec{X}_m^{(n)}} \right)_0 : \vec{X}_j^{(i)} \otimes \vec{X}_m^{(n)} + \right. \\ &\quad + 2 \sum_{m=1}^2 \sum_{l=1}^N \sum_{k=1}^2 \sum_{i=1}^N \left( \frac{\partial^2 \Phi}{\partial X_k^{(i)} \partial X_m^{(l)}} \right)_0 X_k^{(i)} X_m^{(l)} + 2 \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N \left( \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \vec{X}_Q \partial \vec{X}_j^{(i)}} \right)_0 : \vec{X}_Q \otimes \vec{X}_j^{(i)} + \\ &\quad \left. + 2 \sum_{k=1}^2 \sum_{i=1}^N \left( \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \vec{X}_Q \partial X_k^{(i)}} \right)_0 \cdot \vec{X}_Q X_k^{(i)} + 2 \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N \sum_{k=1}^2 \sum_{l=1}^N \left( \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \vec{X}_j^{(i)} \partial X_k^{(l)}} \right)_0 \cdot \vec{X}_j^{(i)} X_k^{(l)} \right].\end{aligned}$$



В ізотропних системах явища, які описуються термодинамічними силами і потоками різного тензорного рангу, не впливають один на одного (принцип Кюрі для ізотропного тіла [19, 23, 50]).

Застосуємо принцип Кюрі, тоді одержимо

$$\Phi = \Phi_0 + \frac{1}{2} \left[ \left( \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \vec{X}_Q^2} \right)_0 : \vec{X}_Q \otimes \vec{X}_Q + 2 \sum_{m=1}^4 \sum_{n=0}^N \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N \left( \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \vec{X}_j^{(i)} \partial \vec{X}_m^{(n)}} \right)_0 : \vec{X}_j^{(i)} \otimes \vec{X}_m^{(n)} + \right. \\ \left. + 2 \sum_{m=1}^2 \sum_{l=1}^N \sum_{k=1}^2 \sum_{i=1}^N \left( \frac{\partial^2 \Phi}{\partial X_k^{(i)} \partial X_m^{(l)}} \right) X_k^{(i)} X_m^{(l)} + 2 \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N \left( \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \vec{X}_Q \partial \vec{X}_j^{(i)}} \right)_0 : \vec{X}_Q \otimes \vec{X}_j^{(i)} \right]. \quad (1.64)$$

Під кінетичними матеріальними характеристиками (коєфіцієнтами) надалі будемо розуміти характеристики об'єкта дослідження, які можна виразити через значення спряжених термодинамічних потоків і сил. Означимо їх наступним чином

$$L_{QQ} = \left( \frac{\partial \vec{J}_Q}{\partial \vec{X}_Q} \right)_0, \quad L_{jm}^{(in)} = \left( \frac{\partial \vec{J}_j^{(i)}}{\partial \vec{X}_m^{(n)}} \right)_0, \\ L_{Qj}^{(i)} = \left( \frac{\partial \vec{J}_Q}{\partial \vec{X}_j^{(i)}} \right)_0 = \left( \frac{\partial \vec{J}_j^{(i)}}{\partial \vec{X}_Q} \right)_0, \quad \lambda_{km}^{(il)} = \left( \frac{\partial \omega_k^{(i)}}{\partial X_m^{(l)}} \right)_0.$$

Врахуємо у формулі (1.64) означення введених кінетичних матеріальних коєфіцієнтів. Тоді розклад кінетичного потенціалу запишемо у вигляді

$$\Phi = \Phi_0 + \frac{1}{2} \left[ L_{QQ} \vec{X}_Q^2 + 2 \sum_{m=1}^4 \sum_{n=0}^N \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N L_{jm}^{(in)} \vec{X}_j^{(i)} \cdot \vec{X}_m^{(n)} + \right. \\ \left. + 2 \sum_{m=1}^2 \sum_{l=1}^N \sum_{k=1}^2 \sum_{i=1}^N \lambda_{km}^{(il)} X_k^{(i)} X_m^{(l)} + 2 \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N L_{Qj}^{(i)} \vec{X}_Q \cdot \vec{X}_j^{(i)} \right]. \quad (1.65)$$

Підставимо формулу (1.65) у спiввiдношення (1.55). Отримаємо лінійні кінетичні спiввiдношення

$$\vec{J}_Q = L_{QQ} \vec{X}_Q + \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N L_{Qj}^{(i)} \vec{X}_j^{(i)}, \quad \vec{J}_j^{(i)} = L_{jQ}^{(i)} \vec{X}_Q + \sum_{m=1}^4 \sum_{n=0}^N L_{jm}^{(in)} \vec{X}_m^{(n)},$$

$$\omega_k^{(i)} = \sum_{m=1}^2 \sum_{l=1}^N \lambda_{km}^{(il)} X_m^{(l)},$$

що і треба було довести.

**Зауваження 1.3.** Як наслідок умов взаємності Онзагера (1.52) коефіцієнти рівнянь (1.63) повинні задовольняти умови

$$L_{Qj}^{(i)} = L_{jQ}^{(i)}, \quad L_{jm}^{(in)} = L_{mj}^{(ni)}, \quad \lambda_{km}^{(il)} = \lambda_{mk}^{(li)}. \quad (1.66)$$

Наслідком другого закону термодинаміки (1.51) є певні обмеження на коефіцієнти кінетичних рівнянь, зокрема

$$L_{QQ}, L_{jj}^{(ii)}, \lambda_{kk}^{(ii)} \geq 0, \quad L_{QQ} L_{jj}^{(ii)} - L_{Qj}^{(i)2} \geq 0,$$

$$L_{jj}^{(ii)} L_{mm}^{(nn)} \geq (L_{jm}^{(in)} + L_{mj}^{(ni)})^2 / 4, \quad \lambda_{kk}^{(ii)} \lambda_{mm}^{(ll)} \geq (\lambda_{km}^{(il)} + \lambda_{mk}^{(li)})^2 / 4. \quad (1.67)$$

Надалі будемо враховувати ці умови та обмеження.

### || 1.9. Повна система рівнянь моделі

Повну систему рівнянь математичної моделі термомеханогетеродифузії домішкових речовин двома шляхами з пастками за каскадного розпаду мігруючих частинок складають: кінематичні співвідношення, рівняння стану, балансові співвідношення та кінетичні рівняння.

У попередніх підрозділах для визначення функцій  $T, s, \bar{\Pi}$ ,  $\varepsilon, \mu_j^{(i)}, C_j^{(i)}, w_j^{(i)}, \rho, \vec{v}, \vec{J}_Q, \vec{X}_Q, \vec{J}_j^{(i)}, \vec{X}_j^{(i)}, X_k^{(i)}$  ми отримали такі співвідношення:

балансові рівняння

$$\rho \frac{ds}{dt} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_s + \frac{\sigma_s}{T}, \quad (1.37)$$

$$\rho \frac{d\vec{v}}{dt} = \vec{\nabla} \cdot \hat{\Pi} + \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \rho_j^{(i)} \vec{F}_j^{(i)}, \quad (1.19)$$

$$\rho \frac{d\Psi}{dt} = -\vec{\nabla} \cdot \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \psi_j^{(i)} \vec{J}_j^{(i)} - \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \rho_j^{(i)} \vec{F}_j^{(i)} \cdot \vec{v} - \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \vec{J}_j^{(i)} \cdot \vec{F}_j^{(i)} + \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \psi_j^{(i)} w_j^{(i)}, \quad (1.21)$$



$$\rho \frac{d}{dt} \left( \frac{v^2}{2} \right) = \vec{\nabla} \cdot (\vec{v} \cdot \hat{\Pi}) - \hat{\Pi} : \vec{\nabla} \otimes \vec{v} + \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \rho_j^{(i)} \vec{F}_j^{(i)} \cdot \vec{v}, \quad (1.23)$$

$$\begin{aligned} \rho \frac{du}{dt} = & -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_Q - \vec{\nabla} \cdot \left( \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \mu_j^{(i)} \vec{J}_j^{(i)} \right) + \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \vec{J}_j^{(i)} \cdot \vec{F}_j^{(i)} + \\ & + \hat{\Pi} : (\vec{\nabla} \otimes \vec{v})^T + \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \psi_j^{(i)} w_j^{(i)}, \end{aligned} \quad (1.27)$$

$$\rho \frac{dC_1^{(0)}}{dt} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_1^{(0)} + \omega_1^{(0)} - \bar{w}_1^{(1)} - \bar{w}_1^{(N)},$$

$$\begin{aligned} \rho \frac{dC_1^{(i)}}{dt} = & -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_1^{(i)} + \omega_1^{(i)} + \bar{w}_1^{(i-1)} - \bar{w}_1^{(i+1)} - \bar{w}_1^{(N)}, \quad i = \overline{1, N-1}, \\ \rho \frac{dC_1^{(N)}}{dt} = & -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_1^{(N)} + \omega_1^{(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} \bar{w}_1^{(i)}; \end{aligned}$$

$$\rho \frac{dC_2^{(0)}}{dt} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_2^{(0)} - \omega_1^{(0)} + \omega_2^{(0)} - \bar{w}_2^{(1)} - \bar{w}_2^{(N)},$$

$$\rho \frac{dC_2^{(i)}}{dt} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_2^{(i)} - \omega_1^{(i)} + \omega_2^{(i)} + \bar{w}_2^{(i-1)} - \bar{w}_2^{(i+1)} - \bar{w}_2^{(N)}, \quad i = \overline{1, N-1},$$

$$\rho \frac{dC_2^{(N)}}{dt} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_2^{(N)} - \omega_1^{(N)} + \omega_2^{(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} \bar{w}_2^{(i)};$$

$$\rho \frac{dC_3^{(0)}}{dt} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_3^{(0)} - \omega_2^{(0)} - \bar{w}_3^{(1)} - \bar{w}_3^{(N)},$$

$$\rho \frac{dC_3^{(i)}}{dt} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_3^{(i)} - \omega_2^{(i)} + \bar{w}_3^{(i-1)} - \bar{w}_3^{(i+1)} - \bar{w}_3^{(N)}, \quad i = \overline{1, N-1},$$

$$\rho \frac{dC_3^{(N)}}{dt} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_3^{(N)} - \omega_2^{(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} \bar{w}_3^{(i)};$$

$$\rho \frac{dC_l^{(0)}}{dt} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_l^{(0)}, \quad l = 4, 5; \quad (1.14)$$

рівняння Гіббса

$$\rho \frac{du}{dt} = T \rho \frac{ds}{dt} + \Pi^{\alpha\beta} \frac{d\varepsilon_{\alpha\beta}}{dt} + \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N \mu_j^{(i)} \frac{dc_j^{(i)}}{dt}; \quad (1.33)$$

рівняння стану

$$T = \left( \frac{\partial u}{\partial s} \right)_{\varepsilon_{\alpha\beta}, c_j^{(i)}}, \quad \frac{1}{2\rho} \bar{\Pi}^{\alpha\beta} = \left( \frac{\partial u}{\partial \varepsilon_{\alpha\beta}} \right)_{s, c_j^{(i)}}, \quad \mu_j^{(i)} = \left( \frac{\partial u}{\partial c_j^{(i)}} \right)_{T, \varepsilon_{\alpha\beta}, \{c_l^{(k\neq i)}\}_{l\neq j}},$$

або їх лінійний варіант для анізотропного тіла

$$\begin{aligned} s - s_0 &= T_0^{-1} c_V t + \sum_{\alpha, \beta} \alpha^{\alpha\beta} \varepsilon_{\alpha\beta} - \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N d_{tj}^{(i)} c_j^{(i)}, \\ \frac{\bar{\Pi}^{\alpha\beta}}{\rho} &= \alpha^{\alpha\beta} t + \sum_{\gamma, \delta} \beta^{\alpha\beta\gamma\delta} \varepsilon_{\gamma\delta} + \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N \gamma_j^{\alpha\beta(i)} c_j^{(i)}, \\ \mu_j^{(i)} - \mu_{j0}^{(i)} &= d_{tj}^{(i)} t + \sum_{\alpha, \beta} \gamma_j^{\alpha\beta(i)} \varepsilon_{\alpha\beta j}^{(i)} + d_j^{(i)} c_j^{(i)}; \end{aligned} \quad (1.60)$$

зокрема, для ізотропного тіла

$$\begin{aligned} s - s_0 &= T_0^{-1} c_V t + \alpha \frac{K}{\rho} \varepsilon - \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N d_{tj}^{(i)} c_j^{(i)}, \\ \frac{\bar{\Pi}_{\alpha\beta}}{\rho} &= \left[ \left( K - \frac{2}{3} G \right) \varepsilon - K \left( \alpha t + \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N d_{\sigma j}^{(i)} c_j^{(i)} \right) \right] \delta_{\alpha\beta} + 2G \varepsilon_{\alpha\beta}, \\ \mu_j^{(i)} - \mu_{j0}^{(i)} &= d_{tj}^{(i)} t - d_{\sigma j}^{(i)} \frac{K}{\rho} \varepsilon + \bar{a}_{cj}^{(i)} c_j^{(i)}; \end{aligned} \quad (1.60a)$$

кінетичні співвідношення

$$\vec{J}_Q = \frac{\partial \Phi}{\partial \vec{X}_Q}, \quad \vec{J}_j^{(i)} = \frac{\partial \Phi}{\partial \vec{X}_j^{(i)}}, \quad \omega_k^{(i)} = \frac{\partial \Phi}{\partial X_k^{(i)}}, \quad (1.55)$$

або їх лінійний варіант

$$\begin{aligned} \vec{J}_Q &= L_{QQ} \vec{X}_Q + \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N L_{Qj}^{(i)} \vec{X}_j^{(i)}, \\ \vec{J}_j^{(i)} &= L_{jQ}^{(i)} \vec{X}_Q + \sum_{m=1}^4 \sum_{n=0}^N L_{jm}^{(in)} \vec{X}_m^{(n)}, \\ \omega_k^{(i)} &= \sum_{m=1}^2 \sum_{l=1}^N \lambda_{km}^{(il)} X_m^{(l)}; \end{aligned} \quad (1.63)$$



термодинамічні сили

$$\vec{X}_Q = -\frac{1}{T} \vec{\nabla} T, \quad \vec{X}_j^{(i)} = -\vec{\nabla} (\mu_j'^{(i)} + \psi_j^{(i)}), \quad (1.42)$$

$$X_1^{(i)} = \mu_2'^{(i)} - \mu_1'^{(i)}, \quad X_2^{(i)} = \mu_3'^{(i)} - \mu_2'^{(i)} \quad (i = \overline{1, N}); \quad (1.46)$$

співвідношення для локального тепловиділення при розпаді компонент

$$q_j = \sum_{i=1}^{N-1} \bar{X}_j^{(i)} \bar{w}_j^{(ii+1)} + \sum_{i=1}^{N-1} \bar{X}_j^{(Ni)} \bar{w}_j^{(iN)};$$

умови нормування

$$\sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N C_j^{(i)} = 1, \quad \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \bar{J}_j^{(i)} = 0, \quad \sum_k \omega_k^{(i)} = 0 \text{ для } \forall i; \quad (1.15)$$

інші співвідношення

$$\bar{J}_s = \bar{J}_Q / T, \quad (1.41)$$

$$\sigma_s^{(j)} = \bar{J}_Q \cdot \vec{X}_Q + \sum_{j=1}^5 \sum_{i=0}^N \bar{J}_j^{(i)} \cdot \vec{X}_j^{(i)} + \sum_{k=1}^2 \sum_{i=1}^N \omega_k^{(i)} X_k^{(i)} + \sum_{j=1}^3 q_j$$

та умови

$$\omega_{jj}^{(i)} = 0 \quad (\forall j), \quad \omega_{jk}^{(i)} = -\omega_{kj}^{(i)} \quad (\forall i, j, k), \quad \sum_{j=1}^5 \sum_{k=1}^5 \omega_{jk}^{(i)} = 0 \quad (\forall i); \quad (1.12\bar{5})$$

$$\bar{w}_j^{(i)} = \bar{w}_j^{(ii-1)} + \bar{w}_j^{(ii+1)} + \bar{w}_j^{(iN)}, \quad \bar{w}_j^{(11)} = 0,$$

$$\bar{w}_j^{(i+1i)} = -\bar{w}_j^{(ii+1)} \quad (i = \overline{1, N}, \quad j = \overline{1, 3}),$$

$$\bar{w}_j^{(ii\pm l)} = 0 \text{ для } l \geq 2, \quad \bar{w}_j^{(ii)} = 0 \text{ для } \forall i; \quad \bar{w}_j^{(iN)} = -\bar{w}_j^{(Ni)},$$

$$\bar{w}_j^{(N)} = \sum_{i=1}^{N-1} \bar{w}_j^{(Ni)} = -\sum_{i=1}^{N-1} \bar{w}_j^{(iN)}; \quad \bar{w}_j^{(i)} = 0 \quad (j = 4; 5);$$

$$\bar{w}^{(i)} = \bar{w}_1^{(i)} = \bar{w}_2^{(i)} = \bar{w}_3^{(i)} \quad (i = \overline{1, N}).$$

Зауважимо, що при використанні співвідношень повної моделі мають виконуватись умови (1.66), (1.67).

### 1.10. Ключова система рівнянь гетеродифузії домішок за їх каскадного розпаду

Частина із записаних рівнянь є кінцевими співвідношеннями, зокрема, рівняння стану (1.60) і кінетичні рівняння (1.63), які дають можливість подати ряд функцій шуканого розв'язку, наприклад,  $s$ ,  $\mu_j^{(i)}$ ,  $\bar{\Pi}^{\alpha\beta}$ ,  $\omega_k^{(i)}$ ,  $\vec{J}_j^{(i)}$ ,  $\vec{J}_Q$ , через спряжені, тобто  $T$ ,  $C_j^{(i)}$ ,  $\varepsilon_{\alpha\beta}$ ,  $X_k^{(i)}$ ,  $\vec{X}_Q$ ,  $\vec{X}_j^{(i)}$ . Це дозволяє зменшити кількість шуканих функцій невідомого розв'язку. Вибір мінімальної кількості функцій, які називають розв'язуючими, необхідних для представлення повного розв'язку, неоднозначний і залежить від специфіки задачі та потреби максимального спрощення її математичної постановки. Виберемо надалі в якості розв'язуючих функцій  $t$ ,  $\rho$ ,  $u^\beta$ ,  $c_j^{(i)}$ , де  $u^\beta$  - компоненти тензора переміщення  $\vec{u} = \vec{r} - \vec{r}_0$  точок континууму  $K_c$  ( $\beta = \overline{1,3}$ ). Підкреслимо, що  $\varepsilon_{\alpha\beta} = \frac{1}{2}(\partial u_\alpha / \partial x_\beta + \partial u_\beta / \partial x_\alpha)$ .

Зупинимось детальніше на отриманні ключових рівнянь математичної моделі гетеродифузії розпадної речовини двома шляхами у середовищі з пастками.

Якщо у кінетичні рівняння для термодинамічних потоків (1.63) підставити вирази для термодинамічних сил (1.42), (1.43), (1.46), то отримаємо

$$\begin{aligned}\vec{J}_Q &= -\left( \frac{L_{QQ}}{T} \vec{\nabla} T + \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N L_{Qj}^{(i)} \vec{\nabla} \mu_j^{(i)} \right), \\ \vec{J}_j^{(i)} &= -\left( \frac{L_{jQ}^{(i)}}{T} \vec{\nabla} T + \sum_{m=1}^4 \sum_{n=0}^N L_{jm}^{(in)} \vec{\nabla} \mu_m^{(n)} \right), \\ \omega_k^{(i)} &= \sum_{l=0}^N \left[ \lambda_{k1}^{(il)} \left( \mu_2^{(l)} - \mu_1^{(l)} \right) + \lambda_{k2}^{(il)} \left( \mu_3^{(l)} - \mu_2^{(l)} \right) \right].\end{aligned}$$

Хімічні потенціали виразимо через розв'язуючі функції за допомогою лінійних рівнянь стану (1.60). Приймемо матеріальні характеристики (1.62) незалежними від координат, тоді знайдемо



$$\vec{J}_Q = - \left[ \left( \frac{L_{QQ}}{T} + \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N L_{Qj}^{(i)} d_{tj}^{(i)} \right) \vec{\nabla} T + \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N L_{Qj}^{(i)} d_{\sigma j}^{(i)} \frac{K}{\rho} \vec{\nabla} \varepsilon + \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N L_{Qj}^{(i)} d_j^{(i)} \vec{\nabla} c_j^{(i)} \right],$$

$$\vec{J}_j^{(i)} = - \left[ \left( \frac{L_{jQ}^{(i)}}{T} + \sum_{m=1n=0}^4 \sum_{m=1n=0}^N L_{jm}^{(in)} d_m^{(n)} \right) \vec{\nabla} T + \sum_{m=1n=0}^4 \sum_{m=1n=0}^N L_{jm}^{(in)} d_{\sigma m}^{(n)} \frac{K}{\rho} \vec{\nabla} \varepsilon + \sum_{m=1n=0}^4 \sum_{m=1n=0}^N L_{jm}^{(in)} d_m^{(n)} \vec{\nabla} c_m^{(n)} \right],$$

$$\omega_k^{(i)} = \sum_{l=0}^N \left[ \bar{\lambda}_{kt}^{(il)} t + E_k^{(il)} + \bar{\lambda}_{k1}^{(il)} c_1^{(l)} + \bar{\lambda}_{k2}^{(il)} c_2^{(l)} + \bar{\lambda}_{k3}^{(il)} c_3^{(l)} + M_k^{(il)} \right], \quad (1.68)$$

де  $\bar{\lambda}_{kt}^{(il)} = -\lambda_{k1}^{(il)} d_{t1}^{(l)} + (\lambda_{k1}^{(il)} - \lambda_{k2}^{(il)}) d_{t2}^{(l)} + \lambda_{k2}^{(il)} d_{t3}^{(l)}$  - кінетичні коефіцієнти переходу частинок між станами, пов'язані зі змінами температури;  $E_k^{(il)} = \sum_{\alpha, \beta} \left[ \bar{\lambda}_{k\epsilon 1}^{\alpha \beta (il)} \varepsilon_{\alpha \beta 1}^{(l)} + \bar{\lambda}_{k\epsilon 2}^{\alpha \beta (il)} \varepsilon_{\alpha \beta 2}^{(l)} + \bar{\lambda}_{k\epsilon 3}^{\alpha \beta (il)} \varepsilon_{\alpha \beta 3}^{(l)} \right]$ ;  $\bar{\lambda}_{k\epsilon 1}^{\alpha \beta (il)} = -\lambda_{k1}^{(il)} \gamma_1^{\alpha \beta (l)}$ ,  $\bar{\lambda}_{k\epsilon 2}^{\alpha \beta (il)} = (\lambda_{k1}^{(il)} - \lambda_{k2}^{(il)}) \gamma_2^{\alpha \beta (l)}$ ,  $\bar{\lambda}_{k\epsilon 3}^{\alpha \beta (il)} = \lambda_{k2}^{(il)} \gamma_3^{\alpha \beta (l)}$  - кінетичні коефіцієнти переходу частинок між станами, пов'язані зі змінами напружень;  $\bar{\lambda}_{k1}^{(il)} = -\lambda_{k1}^{(il)} d_1^{(l)}$ ,  $\bar{\lambda}_{k2}^{(il)} = (\lambda_{k1}^{(il)} - \lambda_{k2}^{(il)}) d_2^{(l)}$ ,  $\bar{\lambda}_{k3}^{(il)} = \lambda_{k2}^{(il)} d_3^{(l)}$  - концентраційні коефіцієнти інтенсивності процесів переходу частинок з одного шляху міграції на інший;  $M_k^{(il)} = -\lambda_{k1}^{(il)} \mu_{10}^{(l)} + (\lambda_{k1}^{(il)} - \lambda_{k2}^{(il)}) \mu_{20}^{(l)} + \lambda_{k2}^{(il)} \mu_{30}^{(l)}$  - сталі моделі.

Зазначимо, що ми знехтували прискоренням вільного падіння  $\vec{g} = -\vec{\nabla} \psi$ .

Сума членів виразу (1.69) типу  $\bar{\lambda}_{kt}^{(il)} t + E_k^{(il)} + \bar{\lambda}_{k1}^{(il)} c_1^{(l)} + \bar{\lambda}_{k2}^{(il)} c_2^{(l)} + \bar{\lambda}_{k3}^{(il)} c_3^{(l)} + M_k^{(il)}$  описує виробництво маси компонента термодинамічної системи. На початку ми припустили, що зміна маси домішки може відбуватись за рахунок переходів домішкових частинок між різними (трьома) станами і внаслідок розпаду частинок. Тобто  $M_k^{(il)} \equiv 0$ .

Враховуючи вираз для  $q_j$  у виробництві ентропії, приймемо також, що в лінійному наближенні

$$\bar{w}_j^{(i)} = -\tilde{d}_{tj}^{(i)} t - \tilde{\gamma}_j^{(i)} \varepsilon + \tilde{\lambda}_j^{(i-1)} c_j^{(i-1)} - \tilde{\lambda}_j^{(i+1)} c_j^{(i)} - \tilde{\lambda}_j^{(iN)} c_j^{(i)},$$

де  $\tilde{d}_{ij}^{(i)}$ ,  $\tilde{\gamma}_j^{(i)}$ ,  $\tilde{\lambda}_j^{(i-1)}$ ,  $\tilde{\lambda}_j^{(i+1)}$ ,  $\tilde{\lambda}_j^{(iN)}$  - сталі, які визначають процес розпаду,  $\varepsilon = \sum \varepsilon_{\alpha\alpha}$  - кульова частина тензора деформації.

Врахуємо, що  $\frac{1}{T} \vec{\nabla} T = \vec{\nabla} (\ln(t + T_0)) = \vec{\nabla} [t + T_0 - 1 + ...] \approx \vec{\nabla} t$ . Якщо у співвідношення балансу концентрації компонент (1.14) підставимо вирази для термодинамічних потоків домішки з формул (1.68), то отримаємо рівняння гетеродифузії у вигляді

для  $i = 0$

$$\rho \frac{dc_1^{(0)}}{dt} = \vec{\nabla} \cdot \left[ D_1^{t(0)} \vec{\nabla} t + D_1^{\varepsilon(0)} \vec{\nabla} \varepsilon + \sum_{m=1}^4 \sum_{n=0}^N D_{1m}^{(0n)} \vec{\nabla} c_m^{(n)} \right] + \lambda_{1t}^{(0)} t + E_1^{(0)} +$$

$$+ \sum_{l=0}^N \left[ \bar{\lambda}_{11}^{(0l)} c_1^{(l)} + \bar{\lambda}_{12}^{(0l)} c_2^{(l)} + \bar{\lambda}_{13}^{(0l)} c_3^{(l)} \right] - \tilde{\lambda}_1^{(1)} c_1^{(0)} - \tilde{\lambda}_1^{(0N)} c_1^{(0)},$$

$$\rho \frac{dc_2^{(0)}}{dt} = -\vec{\nabla} \cdot \left[ D_2^{t(0)} \vec{\nabla} t + D_2^{\varepsilon(0)} \vec{\nabla} \varepsilon + \sum_{m=1}^4 \sum_{n=0}^N D_{2m}^{(0n)} \vec{\nabla} c_m^{(n)} \right] + \lambda_{2t}^{(0)} t + E_2^{(0)} -$$

$$- \sum_{l=0}^N \left[ \bar{\lambda}_{11}^{(0l)} c_1^{(l)} + \bar{\lambda}_{12}^{(0l)} c_2^{(l)} + \bar{\lambda}_{13}^{(0l)} c_3^{(l)} \right] + \sum_{l=0}^N \left[ \bar{\lambda}_{21}^{(0l)} c_1^{(l)} + \bar{\lambda}_{22}^{(0l)} c_2^{(l)} + \bar{\lambda}_{23}^{(0l)} c_3^{(l)} \right] -$$

$$- \tilde{\lambda}_2^{(1)} c_2^{(0)} - \tilde{\lambda}_2^{(0N)} c_2^{(0)},$$

$$\rho \frac{dc_3^{(0)}}{dt} = -\vec{\nabla} \cdot \left[ D_3^{t(0)} \vec{\nabla} t + D_3^{\varepsilon(0)} \vec{\nabla} \varepsilon + \sum_{m=1}^4 \sum_{n=0}^N D_{3m}^{(0n)} \vec{\nabla} c_m^{(n)} \right] + \lambda_{3t}^{(0)} t + E_3^{(0)} -$$

$$- \sum_{l=0}^N \left[ \bar{\lambda}_{21}^{(0l)} c_1^{(l)} + \bar{\lambda}_{22}^{(0l)} c_2^{(l)} + \bar{\lambda}_{23}^{(0l)} c_3^{(l)} \right] + \sum_{l=0}^N \left[ \bar{\lambda}_{31}^{(0l)} c_1^{(l)} + \bar{\lambda}_{32}^{(0l)} c_2^{(l)} + \bar{\lambda}_{33}^{(0l)} c_3^{(l)} \right] -$$

$$- \tilde{\lambda}_3^{(1)} c_3^{(0)} - \tilde{\lambda}_3^{(0N)} c_3^{(0)};$$

для  $i = \overline{1, N-1}$

$$\rho \frac{dc_1^{(i)}}{dt} = \vec{\nabla} \cdot \left[ D_1^{t(i)} \vec{\nabla} t + D_1^{\varepsilon(i)} \vec{\nabla} \varepsilon + \sum_{m=1}^4 \sum_{n=0}^N D_{1m}^{(in)} \vec{\nabla} c_m^{(n)} \right] + \lambda_{1t}^{(i)} t + E_1^{(i)} +$$

$$+ \sum_{l=0}^N \left[ \bar{\lambda}_{11}^{(il)} c_1^{(l)} + \bar{\lambda}_{12}^{(il)} c_2^{(l)} + \bar{\lambda}_{13}^{(il)} c_3^{(l)} \right] + \tilde{\lambda}_1^{(i-1)} c_1^{(i-1)} - \tilde{\lambda}_1^{(i+1)} c_1^{(i)} - \tilde{\lambda}_1^{(iN)} c_1^{(i)},$$



$$\begin{aligned} \rho \frac{dc_2^{(i)}}{dt} = & -\vec{\nabla} \cdot \left[ D_2^{t(i)} \vec{\nabla} t + D_2^{\varepsilon(i)} \vec{\nabla} \varepsilon + \sum_{m=1}^4 \sum_{n=0}^N D_{2m}^{(in)} \vec{\nabla} c_m^{(n)} \right] + \lambda_{2t}^{(i)} t + E_2^{(i)} - \\ & - \sum_{l=0}^N \left[ \bar{\lambda}_{11}^{(il)} c_1^{(l)} + \bar{\lambda}_{12}^{(il)} c_2^{(l)} + \bar{\lambda}_{13}^{(il)} c_3^{(l)} \right] + \sum_{l=0}^N \left[ \bar{\lambda}_{21}^{(il)} c_1^{(l)} + \bar{\lambda}_{22}^{(il)} c_2^{(l)} + \bar{\lambda}_{23}^{(il)} c_3^{(l)} \right] + \\ & + \tilde{\lambda}_2^{(i-1)} c_2^{(i-1)} - \tilde{\lambda}_2^{(i+1)} c_2^{(i)} - \tilde{\lambda}_2^{(iN)} c_2^{(i)}, \\ \rho \frac{dc_3^{(i)}}{dt} = & -\vec{\nabla} \cdot \left[ D_3^{t(i)} \vec{\nabla} t + D_3^{\varepsilon(i)} \vec{\nabla} \varepsilon + \sum_{m=1}^4 \sum_{n=0}^N D_{3m}^{(in)} \vec{\nabla} c_m^{(n)} \right] + \lambda_{3t}^{(i)} t + E_3^{(i)} - \\ & - \sum_{l=0}^N \left[ \bar{\lambda}_{21}^{(il)} c_1^{(l)} + \bar{\lambda}_{22}^{(il)} c_2^{(l)} + \bar{\lambda}_{23}^{(il)} c_3^{(l)} \right] + \sum_{l=0}^N \left[ \bar{\lambda}_{31}^{(il)} c_1^{(l)} + \bar{\lambda}_{32}^{(il)} c_2^{(l)} + \bar{\lambda}_{33}^{(il)} c_3^{(l)} \right] + \\ & + \tilde{\lambda}_3^{(i-1)} c_3^{(i-1)} - \tilde{\lambda}_3^{(i+1)} c_3^{(i)} - \tilde{\lambda}_3^{(iN)} c_3^{(i)}, \end{aligned}$$

для  $i = N$

$$\begin{aligned} \rho \frac{dc_1^{(N)}}{dt} = & \vec{\nabla} \cdot \left[ D_1^{t(N)} \vec{\nabla} t + D_1^{\varepsilon(N)} \vec{\nabla} \varepsilon + \sum_{m=1}^4 \sum_{n=0}^N D_{1m}^{(Nn)} \vec{\nabla} c_m^{(n)} \right] + \lambda_{1t}^{(N)} t + E_1^{(N)} + \\ & + \sum_{l=0}^N \left[ \bar{\lambda}_{11}^{(Nl)} c_1^{(l)} + \bar{\lambda}_{12}^{(Nl)} c_2^{(l)} + \bar{\lambda}_{13}^{(Nl)} c_3^{(l)} \right] + \sum_{i=0}^{N-1} \tilde{\lambda}_1^{(iN)} c_1^{(i)}, \\ \rho \frac{dc_2^{(N)}}{dt} = & -\vec{\nabla} \cdot \left[ D_2^{t(N)} \vec{\nabla} t + D_2^{\varepsilon(N)} \vec{\nabla} \varepsilon + \sum_{m=1}^4 \sum_{n=0}^N D_{2m}^{(Nn)} \vec{\nabla} c_m^{(n)} \right] + \lambda_{2t}^{(N)} t + E_2^{(N)} - \\ & - \sum_{l=0}^N \left[ \bar{\lambda}_{11}^{(Nl)} c_1^{(l)} + \bar{\lambda}_{12}^{(Nl)} c_2^{(l)} + \bar{\lambda}_{13}^{(Nl)} c_3^{(l)} \right] + \\ & + \sum_{l=0}^N \left[ \bar{\lambda}_{21}^{(Nl)} c_1^{(l)} + \bar{\lambda}_{22}^{(Nl)} c_2^{(l)} + \bar{\lambda}_{23}^{(Nl)} c_3^{(l)} \right] + \sum_{i=0}^{N-1} \tilde{\lambda}_2^{(iN)} c_2^{(i)}, \\ \rho \frac{dc_3^{(N)}}{dt} = & -\vec{\nabla} \cdot \left[ D_3^{t(N)} \vec{\nabla} t + D_3^{\varepsilon(N)} \vec{\nabla} \varepsilon + \sum_{m=1}^4 \sum_{n=0}^N D_{3m}^{(Nn)} \vec{\nabla} c_m^{(n)} \right] + \lambda_{3t}^{(N)} t + E_3^{(N)} - \\ & - \sum_{l=0}^N \left[ \bar{\lambda}_{21}^{(Nl)} c_1^{(l)} + \bar{\lambda}_{22}^{(Nl)} c_2^{(l)} + \bar{\lambda}_{23}^{(Nl)} c_3^{(l)} \right] + \\ & + \sum_{l=0}^N \left[ \bar{\lambda}_{31}^{(Nl)} c_1^{(l)} + \bar{\lambda}_{32}^{(Nl)} c_2^{(l)} + \bar{\lambda}_{33}^{(Nl)} c_3^{(l)} \right] + \sum_{i=0}^{N-1} \tilde{\lambda}_3^{(iN)} c_3^{(i)}. \end{aligned} \quad (1.69)$$

**Розділ 1.** Континуально-термодинамічна модель механотермогетеродифузії за каскадного розпаду домішкової речовини при локальній зміні стану частинок

---

$$\text{Тут } D_j^{t(i)} = L_{jQ}^{(i)} + \sum_{m=1}^4 \sum_{n=0}^N L_{jm}^{(in)} d_m^{(n)}, \quad D_j^{\varepsilon(i)} = \sum_{m=1}^4 \sum_{n=0}^N L_{jm}^{(in)} d_{\sigma m}^{(n)} \frac{K}{\rho},$$

$D_{jm}^{(in)} = L_{jm}^{(in)} d_m^{(n)}$  - кінетичні коефіцієнти дифузії;

$$\lambda_{kt}^{(i)} = \sum_{l=0}^N \tilde{\lambda}_{kt}^{(il)} - \tilde{d}_{tk}^{(i)}, \quad E_k^{(i)} = \sum_{l=0}^N E_k^{(il)} - \tilde{\gamma}_k^{(i)} \varepsilon.$$

Аналогічним шляхом одержуємо рівняння дифузії частинок води

$$\rho \frac{dc_4^{(0)}}{dt} = -\vec{\nabla} \cdot \left[ D_4^t \vec{\nabla} t + D_4^\varepsilon \vec{\nabla} \varepsilon + \sum_{m=1}^4 \sum_{n=0}^N D_{4m}^{(0n)} \vec{\nabla} c_m^{(n)} \right], \quad (1.70)$$

де  $D_4^t$ ,  $D_4^\varepsilon$ ,  $D_{4m}^{(0n)}$  - коефіцієнти дифузії частинок води (записані через введені раніше коефіцієнти лінійних рівнянь стану і кінетичних співвідношень).

Зазначимо, що частинки скелету є відліковими, не змінюють свій стан та не розпадаються. Їхню концентрацію можна визначити з умови нормування (1.15). Також тут враховано, що хімічні реакції, які призвели до розпаду домішкових речовин є незворотніми.

Приймемо, що коефіцієнти рівнянь (1.69), (1.70) є незалежними від координат, і знахтуємо конвективною складовою:  $d/dt \cong \partial/\partial t$ . Врахуємо, що домішкова речовина одного хімічного сорту розпадається однаково у різних станах (рис. 1.2), тобто  $\tilde{\lambda}^{(i)} = \tilde{\lambda}_j^{(i)} = \tilde{\lambda}_j^{(i+1)} = \tilde{\lambda}_j^{(iN)} = \tilde{\lambda}_j^{(0N)}$ . Також врахуємо тільки процеси дифузії та сорбції-десорбції частинок одного хімічного виду. Тоді маємо

*рівняння гетеродифузії*

для  $i = 0$

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_1^{(0)}}{\partial t} &= D_1^{t(0)} \Delta t + D_1^{\varepsilon(0)} \Delta \varepsilon + \sum_{m=1}^3 \bar{D}_{1m}^{(0)} \Delta c_m^{(0)} - \bar{d}_{1t}^{(0)} t - \bar{\gamma}_{1\varepsilon}^{(0)} \varepsilon - \bar{k}_1^{(0)} c_1^{(0)} + \\ &\quad + \bar{k}_2^{(0)} c_2^{(0)} - \tilde{\lambda}_1^{(1)} c_1^{(0)} - \tilde{\lambda}_1^{(0N)} c_1^{(0)}, \end{aligned}$$

$$\frac{\partial c_2^{(0)}}{\partial t} = \bar{D}_2^{t(0)} \Delta t + \bar{D}_2^{\varepsilon(0)} \Delta \varepsilon + \sum_{m=1}^3 \bar{D}_{2m}^{(0)} \Delta c_m^{(0)} - \bar{d}_{2t}^{(0)} t - \bar{\gamma}_{2\varepsilon}^{(0)} \varepsilon + \bar{k}_1^{(0)} c_1^{(0)} -$$



$$\begin{aligned}
 & -\left(\bar{k}_2^{(0)} + \bar{k}_3^{(0)}\right)c_2^{(0)} + \bar{k}_4^{(0)}c_3^{(0)} - \tilde{\lambda}_2^{(1)}c_2^{(0)} - \tilde{\lambda}_2^{(0N)}c_2^{(0)}, \\
 \frac{\partial c_3^{(0)}}{\partial t} = & \bar{D}_3^{t(0)}\Delta t + \bar{D}_3^{\varepsilon(0)}\Delta \varepsilon + \sum_{m=1}^3 \bar{D}_{3m}^{(0)}\Delta c_m^{(0)} - \bar{d}_{3t}^{(0)}t - \bar{\gamma}_{3\varepsilon}^{(0)}\varepsilon + \bar{k}_3^{(0)}c_2^{(0)} - \\
 & -\bar{k}_4^{(0)}c_3^{(0)} - \tilde{\lambda}_3^{(1)}c_3^{(0)} - \tilde{\lambda}_3^{(0N)}c_3^{(0)};
 \end{aligned}$$

*для*  $i = \overline{1, N-1}$

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial c_1^{(i)}}{\partial t} = & D_1^{t(i)}\Delta t + D_1^{\varepsilon(i)}\Delta \varepsilon + \sum_{m=1}^3 \bar{D}_{1m}^{(i)}\Delta c_m^{(i)} - \bar{d}_{1t}^{(i)}t - \bar{\gamma}_{1\varepsilon}^{(i)}\varepsilon - \bar{k}_1^{(i)}c_1^{(i)} + \\
 & + \bar{k}_2^{(i)}c_2^{(i)} + \tilde{\lambda}_1^{(i-1)}c_1^{(i-1)} - \tilde{\lambda}_1^{(i+1)}c_1^{(i)} - \tilde{\lambda}_1^{(iN)}c_1^{(i)}, \\
 \frac{\partial c_2^{(i)}}{\partial t} = & \bar{D}_2^{t(i)}\Delta t + \bar{D}_2^{\varepsilon(i)}\Delta \varepsilon + \sum_{m=1}^3 \bar{D}_{2m}^{(i)}\Delta c_m^{(i)} - \bar{d}_{2t}^{(i)}t - \bar{\gamma}_{2\varepsilon}^{(i)}\varepsilon + \bar{k}_1^{(i)}c_1^{(i)} - \\
 & - \left(\bar{k}_2^{(i)} + \bar{k}_3^{(i)}\right)c_2^{(i)} + \bar{k}_4^{(i)}c_3^{(i)} + \tilde{\lambda}_2^{(i-1)}c_2^{(i-1)} - \tilde{\lambda}_2^{(i+1)}c_2^{(i)} - \tilde{\lambda}_2^{(iN)}c_2^{(i)}, \\
 \frac{\partial c_3^{(i)}}{\partial t} = & \bar{D}_3^{t(i)}\Delta t + \bar{D}_3^{\varepsilon(i)}\Delta \varepsilon + \sum_{m=1}^3 \bar{D}_{3m}^{(i)}\Delta c_m^{(i)} - \bar{d}_{3t}^{(i)}t - \bar{\gamma}_{3\varepsilon}^{(i)}\varepsilon + \bar{k}_3^{(i)}c_2^{(i)} - \\
 & - \bar{k}_4^{(i)}c_3^{(i)} + \tilde{\lambda}_3^{(i-1)}c_3^{(i-1)} - \tilde{\lambda}_3^{(i+1)}c_3^{(i)} - \tilde{\lambda}_3^{(iN)}c_3^{(i)};
 \end{aligned}$$

*для*  $i = N$

$$\begin{aligned}
 \frac{\partial c_1^{(N)}}{\partial t} = & D_1^{t(N)}\Delta t + D_1^{\varepsilon(N)}\Delta \varepsilon + \sum_{m=1}^3 \bar{D}_{1m}^{(N)}\Delta c_m^{(N)} - \bar{d}_{1t}^{(N)}t - \bar{\gamma}_{1\varepsilon}^{(N)}\varepsilon - \bar{k}_1^{(N)}c_1^{(N)} + \\
 & + \bar{k}_2^{(N)}c_2^{(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} \tilde{\lambda}_1^{(iN)}c_1^{(i)}, \\
 \frac{\partial c_2^{(N)}}{\partial t} = & \bar{D}_2^{t(N)}\Delta t + \bar{D}_2^{\varepsilon(N)}\Delta \varepsilon + \sum_{m=1}^3 \bar{D}_{2m}^{(N)}\Delta c_m^{(N)} - \bar{d}_{2t}^{(N)}t - \bar{\gamma}_{2\varepsilon}^{(N)}\varepsilon + \bar{k}_1^{(N)}c_1^{(N)} - \\
 & - \left(\bar{k}_2^{(N)} + \bar{k}_3^{(N)}\right)c_2^{(N)} + \bar{k}_4^{(N)}c_3^{(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} \tilde{\lambda}_2^{(iN)}c_2^{(i)}, \\
 \frac{\partial c_3^{(N)}}{\partial t} = & \bar{D}_3^{t(N)}\Delta t + \bar{D}_3^{\varepsilon(N)}\Delta \varepsilon + \sum_{m=1}^3 \bar{D}_{3m}^{(N)}\Delta c_m^{(N)} - \bar{d}_{3t}^{(N)}t - \bar{\gamma}_{3\varepsilon}^{(N)}\varepsilon + \bar{k}_3^{(N)}c_2^{(N)} - \\
 & - \bar{k}_4^{(N)}c_3^{(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} \tilde{\lambda}_3^{(iN)}c_3^{(i)};
 \end{aligned} \tag{1.71}$$

рівняння дифузії частинок води

$$\frac{dc_4^{(0)}}{dt} = \bar{D}_4^t \Delta t + \bar{D}_4^\varepsilon \Delta \varepsilon + \bar{D}_4^{(0)} \Delta c_4^{(0)}, \quad (1.72)$$

де  $\bar{D}_j^{(i)} = D_j^{(i)} / \rho$ ,  $\bar{D}_j^{\varepsilon(i)} = D_j^{\varepsilon(i)} / \rho$ ,  $\bar{D}_{jm}^{(i)} = D_{jm}^{(i)} / \rho$  ( $j, m = \overline{1, 3}$ ,  $i = \overline{0, N}$ ),

$\bar{D}_4^t = D_4^t / \rho$ ,  $\bar{D}_4^\varepsilon = D_4^\varepsilon / \rho$ ,  $\bar{D}_4^{(0)} = D_{44}^{(0)} / \rho$  - коефіцієнти дифузії;

$\bar{k}_1^{(i)} = -\lambda_{12}^{(ii)} / \rho$ ,  $\bar{k}_2^{(i)} = \lambda_{21}^{(ii)} / \rho$ ,  $\bar{k}_3^{(i)} = \lambda_{23}^{(ii)} / \rho$ ,  $\bar{k}_4^{(i)} = -\lambda_{32}^{(ii)} / \rho$  - коефіцієнти інтенсивності процесів переходу частинок між станами.

Рівняння тепlopровідності отримуємо з рівняння балансу ентропії (1.37), підставляючи у нього вираз для густини ентропії з рівнянь стану (1.60) і потоку тепла з кінетичних рівнянь (1.63). Приймаючи матеріальні характеристики незалежними від часу, знайдемо

$$\begin{aligned} & \frac{\rho c_V}{T_0} \frac{dT}{dt} + \rho \alpha \frac{d\varepsilon}{dt} - \rho \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N d_{ij}^{(i)} \frac{dc_j^{(i)}}{dt} = \\ & = \vec{\nabla} \cdot \left[ \kappa \vec{\nabla} T + \kappa_\varepsilon \vec{\nabla} \varepsilon + \sum_{m=1}^4 \sum_{n=0}^N \kappa_j^{(i)} \vec{\nabla} c_j^{(i)} \right] + Q_n, \end{aligned} \quad (1.73)$$

де  $\kappa = L_{QQ} / T$ ,  $\kappa_\varepsilon = \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N L_{Qj}^{(i)} d_{ij}^{(i)} \frac{K}{\rho T}$ ,  $\kappa = L_{Qj}^{(i)} d_j^{(i)} / T$  - коефіцієнти тепlopровідності;  $Q_n = \sigma_s (\vec{\nabla} T, \vec{\nabla} \varepsilon, \vec{\nabla} c_j^{(i)}) / T$  - нескомпенсоване тепло [42, 46].

Відзначиммо, що ліва сторона рівняння (1.73) відображає адіабатичну зв'язність процесів, тобто взаємозалежність шуканих функцій  $T$ ,  $\varepsilon$ ,  $c_j^{(i)}$  для просторово однорідного стану, в якому  $\vec{\nabla} T = \vec{\nabla} \varepsilon = \vec{\nabla} c_j^{(i)} = 0$  і  $Q_n = 0$ .

Якщо знехтувати адіабатичною зв'язністю процесів та прийняти  $d/dt \cong \partial/\partial t$ , то для сталих кінетичних коефіцієнтів рівняння тепlopровідності набуде вигляду

$$\frac{\rho c_V}{T_0} \frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \Delta T + \kappa_\varepsilon \Delta \varepsilon + \sum_{m=1}^4 \sum_{n=0}^N \kappa_j^{(i)} \Delta c_j^{(i)} + Q_n. \quad (1.74)$$

До цих рівнянь ще слід додати рівняння нерозривності (1.18а), яке можна записати у вигляді



$$\frac{1}{\rho} \frac{d\rho}{dt} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{v}. \quad (1.75)$$

Якщо прийняти, що сумарна густина тіла є сталою, то  $\vec{\nabla} \cdot \vec{v} = 0$ .

Рівняння для визначення вектора переміщень  $\vec{u}$  отримуємо з рівняння балансу імпульсу (1.19), рівняння стану (1.60а) та залежності  $\varepsilon_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\beta} + \frac{\partial u_\beta}{\partial x_\alpha} \right)$ . У результаті отримаємо

$$G\Delta\vec{u} + \left( K + \frac{G}{3} \right) \vec{\nabla} (\vec{\nabla} \cdot \vec{u}) - K \vec{\nabla} \left( \alpha t + \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N d_{\sigma j}^{(i)} c_j^{(i)} \right) + \vec{F} = \rho \frac{\partial^2 \vec{u}}{\partial t^2}. \quad (1.76)$$

У даній роботі це рівняння не аналізується.

Диференціальні рівняння (1.71), (1.72), (1.74)-(1.76) складають *ключову систему рівнянь моделі механотермогетеродифузії розпадної речовини*.

Результати фізико-хімічних досліджень [7, 36, 49, 72], аналітичних оцінок та числового моделювання [46] показали, що станови домішкових частинок в об'ємі скелету можна розглядати як пастки і покласті  $\overline{D}_3^{t(i)} = \overline{D}_3^{\varepsilon(i)} = \overline{D}_{3m}^{(i)} = 0$  для  $\forall i = \overline{0, N}$ ,  $\forall m = \overline{1, 3}$ . Вплив поля температури  $t$  та механічних процесів на процеси масоперенесення незначний, як несуттєвий і взаємозв'язок полів концентрацій  $c_j^{(i)}$ , незв'язаних процесами переходів частинок. Це означає, що можна покласти  $\overline{D}_j^{t(i)} = \overline{D}_j^{\varepsilon(i)} = \overline{d}_{jt}^{(i)} = \overline{\gamma}_{je}^{(i)} = 0$  для  $\forall i = \overline{0, N}$ ,  $j = 1, 2$ . Знехтуємо також впливом теплових і механічних процесів на масоперенесення частинок води:  $\overline{D}_4^t = \overline{D}_4^\varepsilon = 0$ . Тоді отримаємо *ключову систему рівнянь моделі механотермогетеродифузії розпадної речовини двома шляхами у середовищі з пастками*:

рівняння гетеродифузії  
для  $i = 0$

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_1^{(0)}}{\partial t} &= \overline{D}_{11}^{(0)} \Delta c_1^{(0)} + \overline{D}_{12}^{(0)} \Delta c_2^{(0)} - \bar{k}_1^{(0)} c_1^{(0)} + \\ &\quad \bar{k}_2^{(0)} c_2^{(0)} - \tilde{\lambda}_1^{(1)} c_1^{(0)} - \tilde{\lambda}_1^{(0N)} c_1^{(0)}, \end{aligned} \quad (1.77a)$$

**Розділ 1.** Континуально-термодинамічна модель механотермогетеродифузії за каскадного розпаду домішкової речовини при локальній зміні стану частинок

---

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_2^{(0)}}{\partial t} = & \bar{D}_{21}^{(0)} \Delta c_1^{(0)} + \bar{D}_{22}^{(0)} \Delta c_2^{(0)} + \bar{k}_1^{(0)} c_1^{(0)} - \\ & - (\bar{k}_2^{(0)} + \bar{k}_3^{(0)}) c_2^{(0)} + \bar{k}_4^{(0)} c_3^{(0)} - \tilde{\lambda}_2^{(1)} c_2^{(0)} - \tilde{\lambda}_2^{(0N)} c_2^{(0)}, \end{aligned} \quad (1.77\text{б})$$

$$\frac{\partial c_3^{(0)}}{\partial t} = \bar{k}_3^{(0)} c_2^{(0)} - \bar{k}_4^{(0)} c_3^{(0)} - \tilde{\lambda}_3^{(1)} c_3^{(0)} - \tilde{\lambda}_3^{(0N)} c_3^{(0)}; \quad (1.77\text{в})$$

для  $i = \overline{1, N-1}$

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_1^{(i)}}{\partial t} = & \bar{D}_{11}^{(i)} \Delta c_1^{(i)} + \bar{D}_{12}^{(i)} \Delta c_2^{(i)} - \bar{k}_1^{(i)} c_1^{(i)} + \\ & + \bar{k}_2^{(i)} c_2^{(i)} + \tilde{\lambda}_1^{(i-1)} c_1^{(i-1)} - \tilde{\lambda}_1^{(i+1)} c_1^{(i)} - \tilde{\lambda}_1^{(iN)} c_1^{(i)}, \end{aligned} \quad (1.78\text{а})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_2^{(i)}}{\partial t} = & \bar{D}_{21}^{(i)} \Delta c_1^{(i)} + \bar{D}_{22}^{(i)} \Delta c_2^{(i)} + \bar{k}_1^{(i)} c_1^{(i)} - \\ & - (\bar{k}_2^{(i)} + \bar{k}_3^{(i)}) c_2^{(i)} + \bar{k}_4^{(i)} c_3^{(i)} + \tilde{\lambda}_2^{(i-1)} c_2^{(i-1)} - \tilde{\lambda}_2^{(i+1)} c_2^{(i)} - \tilde{\lambda}_2^{(iN)} c_2^{(i)}, \end{aligned} \quad (1.78\text{б})$$

$$\frac{\partial c_3^{(i)}}{\partial t} = \bar{k}_3^{(i)} c_2^{(i)} - \bar{k}_4^{(i)} c_3^{(i)} + \tilde{\lambda}_3^{(i-1)} c_3^{(i-1)} - \tilde{\lambda}_3^{(i+1)} c_3^{(i)} - \tilde{\lambda}_3^{(iN)} c_3^{(i)}; \quad (1.78\text{в})$$

для  $i = N$

$$\frac{\partial c_1^{(N)}}{\partial t} = \bar{D}_{11}^{(N)} \Delta c_1^{(N)} + \bar{D}_{12}^{(N)} \Delta c_2^{(N)} - \bar{k}_1^{(N)} c_1^{(N)} + \bar{k}_2^{(N)} c_2^{(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} \tilde{\lambda}_1^{(iN)} c_1^{(i)}, \quad (1.79\text{а})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_2^{(N)}}{\partial t} = & \bar{D}_{21}^{(N)} \Delta c_1^{(N)} + \bar{D}_{22}^{(N)} \Delta c_2^{(N)} + \bar{k}_1^{(N)} c_1^{(N)} - \\ & - (\bar{k}_2^{(N)} + \bar{k}_3^{(N)}) c_2^{(N)} + \bar{k}_4^{(N)} c_3^{(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} \tilde{\lambda}_2^{(iN)} c_2^{(i)}, \end{aligned} \quad (1.79\text{б})$$

$$\frac{\partial c_3^{(N)}}{\partial t} = \bar{k}_3^{(N)} c_2^{(N)} - \bar{k}_4^{(N)} c_3^{(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} \tilde{\lambda}_3^{(iN)} c_3^{(i)}; \quad (1.79\text{в})$$

рівняння дифузії частинок води

$$\frac{dc_4^{(0)}}{dt} = \vec{\nabla} \cdot (\bar{D}_4^{(0)} \vec{\nabla} c_4^{(0)}),$$

$$C_5^{(0)} = 1 - \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N C_j^{(0)};$$



*рівняння теплопровідності*

$$\rho \frac{c_V}{T_0} \frac{\partial T}{\partial t} = \vec{\nabla} \cdot (\kappa \vec{\nabla} T) + Q_n, \quad (1.80)$$

*рівняння для визначення вектора переміщень*

$$G \Delta \vec{u} + \left( K + \frac{G}{3} \right) \vec{\nabla} (\vec{\nabla} \cdot \vec{u}) - K \vec{\nabla} \left( \alpha t + \sum_{j=1}^4 \sum_{i=0}^N d_{sj}^{(i)} c_j^{(i)} \right) + \vec{F} = \rho \frac{\partial^2 \vec{u}}{\partial t^2},$$

*рівняння нерозривності*

$$\frac{1}{\rho} \frac{d\rho}{dt} = - \vec{\nabla} \cdot \vec{v}.$$

Таким чином ми отримали  $N+1$  взаємозв'язаних систем диференціальних рівнянь гетеродифузії двома шляхами у середовищі з пастками; рівняння дифузії частинок води; рівняння нерозривності, які незалежні між собою і можуть бути розв'язані за відповідних краївих умов, та рівняння теплопровідності, яке розв'язується після знаходження відповідних величин з інших співвідношень, зокрема, концентрації домішок у ґрунті. Надалі обмежимось дослідженням гетеродифузного перенесення домішкових частинок у середовищі з пастками.

## || 1.11. Ефективні характеристики

Перед тим як перейти до формулювання і розв'язання конкретних задач математичної фізики для спрощення аналізу розв'язків введемо ефективні характеристики досліджуваної системи. Фізичною основою введення таких характеристик є умова локальної термодинамічної рівноваги щодо процесів переходу частинок одного хімічного сорту між різними станами, яка зводиться до рівності хімічних потенціалів відповідних компонент системи, тобто

$$\mu_j^{(i)} = \dots = \mu_k^{(i)} \quad (\vec{\nabla} \mu_j^{(i)} = \dots = \vec{\nabla} \mu_k^{(i)} \neq 0)$$

для кожного  $i = \overline{0, N}$ , де індекси  $j$  та  $k$  приймають одне зі своїх значень  $\overline{1, 3}$ .

**Теорема 1.7.** Якщо виконується умова локальної термодинамічної рівноваги між другим ( $j=2$ ) та третім ( $j=3$ ) станами домішкової речовини,  $\mu_2^{(i)} = \mu_3^{(i)}$  ( $i = \overline{0, N}$ ), масоперенесення розпадних частинок підпорядковується взаємозв'язаним системам рівнянь гетеродифузії

для  $i=0$

$$\frac{\partial c_1^{(0)}}{\partial t} = \bar{D}_{11}^{(0)} \Delta c_1^{(0)} + \bar{D}_{12}^{e(0)} \Delta c_2^{e(0)} - \bar{k}_1^{(0)} c_1^{(0)} + \bar{k}_2^{e(0)} c_2^{e(0)} - \tilde{\lambda}_1^{(1)} c_1^{(0)} - \tilde{\lambda}_1^{(0N)} c_1^{(0)},$$

$$\frac{\partial c_2^{e(0)}}{\partial t} = \bar{D}_{21}^{(0)} \Delta c_1^{(0)} + \bar{D}_{22}^{e(0)} \Delta c_2^{e(0)} + \bar{k}_1^{(0)} c_1^{(0)} +$$

$$- \bar{k}_2^{e(0)} c_2^{e(0)} - \tilde{\lambda}_2^{(1)} c_2^{e(0)} - \tilde{\lambda}_2^{(0N)} c_2^{e(0)},$$

для  $i = \overline{1, N-1}$

$$\frac{\partial c_1^{(i)}}{\partial t} = \bar{D}_{11}^{(i)} \Delta c_1^{(i)} + \bar{D}_{12}^{e(i)} \Delta c_2^{e(i)} - \bar{k}_1^{(i)} c_1^{(i)} +$$

$$+ \bar{k}_2^{e(i)} c_2^{e(i)} + \tilde{\lambda}_1^{(i-1)} c_1^{(i-1)} - \tilde{\lambda}_1^{(i+1)} c_1^{(i)} - \tilde{\lambda}_1^{(iN)} c_1^{(i)},$$

$$\frac{\partial c_2^{e(i)}}{\partial t} = \bar{D}_{21}^{(i)} \Delta c_1^{(i)} + \bar{D}_{22}^{e(i)} \Delta c_2^{e(i)} + \bar{k}_1^{(i)} c_1^{(i)} -$$

$$- \bar{k}_2^{e(i)} c_2^{e(i)} + \tilde{\lambda}_2^{e(i-1)} c_2^{e(i-1)} - \tilde{\lambda}_2^{e(i+1)} c_2^{e(i)} - \tilde{\lambda}_2^{e(iN)} c_2^{e(i)},$$

для  $i=N$

$$\frac{\partial c_1^{(N)}}{\partial t} = \bar{D}_{11}^{(N)} \Delta c_1^{(N)} + \bar{D}_{12}^{e(N)} \Delta c_2^{e(N)} - \bar{k}_1^{(N)} c_1^{(N)} + \bar{k}_2^{e(N)} c_2^{e(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} \tilde{\lambda}_1^{(iN)} c_1^{(i)},$$

$$\frac{\partial c_2^{e(N)}}{\partial t} = \bar{D}_{21}^{(N)} \Delta c_1^{(N)} + \bar{D}_{22}^{e(N)} \Delta c_2^{e(N)} + \bar{k}_1^{(N)} c_1^{(N)} - \bar{k}_2^{e(N)} c_2^{e(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} \tilde{\lambda}_2^{e(iN)} c_2^{e(i)}. \quad (1.81)$$

*Доведення.* Якщо підставити у рівність хімічних потенціалів частинок домішкової речовини у другому та третьому станах відповідні лінійні рівняння стану (1.60), використати введені коефіцієнти та обмеження, то рівність  $\mu_2^{(i)} = \mu_3^{(i)}$  еквівалентна формули



$$\bar{k}_3^{(i)}c_2^{(i)} - \bar{k}_4^{(i)}c_3^{(i)} = 0 \quad \text{для } \forall i = \overline{0, N}. \quad (1.82)$$

Введемо в розгляд сумарну ефективну концентрацію  $c_2^{e(i)} = c_2^{(i)} + c_3^{(i)}$ . Тоді з умови (1.82) випливає

$$c_2^{e(i)} = \frac{\bar{k}_3^{(i)} + \bar{k}_4^{(i)}}{\bar{k}_4^{(i)}} c_2^{(i)} \quad \text{для } \forall i = \overline{0, N}. \quad (1.83)$$

Додамо рівняння (1.77б) і (1.77в), (1.78б) і (1.78в), (1.79б) і (1.79в). Враховуючи вираз (1.83), отримаємо  
для  $i = 0$

$$\frac{\partial c_1^{(0)}}{\partial t} = \bar{D}_{11}^{(0)} \Delta c_1^{(0)} + \frac{\bar{D}_{12}^{(0)} \bar{k}_4^{(0)}}{\bar{k}_3^{(0)} + \bar{k}_4^{(0)}} \Delta c_2^{e(0)} - \bar{k}_1^{(0)} c_1^{(0)} +$$

$$\frac{\bar{k}_2^{(0)} \bar{k}_4^{(0)}}{\bar{k}_3^{(0)} + \bar{k}_4^{(0)}} c_2^{e(0)} - \tilde{\lambda}_1^{(1)} c_1^{(0)} - \tilde{\lambda}_1^{(0N)} c_1^{(0)},$$

$$\frac{\partial c_2^{e(0)}}{\partial t} = \bar{D}_{21}^{(0)} \Delta c_1^{(0)} + \frac{\bar{D}_{12}^{(0)} \bar{k}_4^{(0)}}{\bar{k}_3^{(0)} + \bar{k}_4^{(0)}} \Delta c_2^{e(0)} + \bar{k}_1^{(0)} c_1^{(0)} -$$

$$- \frac{\bar{k}_2^{(0)} \bar{k}_4^{(0)}}{\bar{k}_3^{(0)} + \bar{k}_4^{(0)}} c_2^{e(0)} - \frac{\tilde{\lambda}_2^{(1)} \bar{k}_4^{(0)}}{\bar{k}_3^{(0)} + \bar{k}_4^{(0)}} c_2^{e(0)} - \frac{\tilde{\lambda}_2^{(0N)} \bar{k}_4^{(0)}}{\bar{k}_3^{(0)} + \bar{k}_4^{(0)}} c_2^{e(0)},$$

для  $i = \overline{1, N-1}$

$$\frac{\partial c_1^{(i)}}{\partial t} = \bar{D}_{11}^{(i)} \Delta c_1^{(i)} + \frac{\bar{D}_{12}^{(i)} \bar{k}_4^{(i)}}{\bar{k}_3^{(i)} + \bar{k}_4^{(i)}} \Delta c_2^{e(i)} - \bar{k}_1^{(i)} c_1^{(i)} +$$

$$+ \frac{\bar{k}_2^{(i)} \bar{k}_4^{(i)}}{\bar{k}_3^{(i)} + \bar{k}_4^{(i)}} c_2^{e(i)} + \tilde{\lambda}_1^{(i-1)} c_1^{(i-1)} - \tilde{\lambda}_1^{(i+1)} c_1^{(i)} - \tilde{\lambda}_1^{(iN)} c_1^{(i)},$$

$$\frac{\partial c_2^{e(i)}}{\partial t} = \bar{D}_{21}^{(i)} \Delta c_1^{(i)} + \frac{\bar{D}_{22}^{(i)} \bar{k}_4^{(i)}}{\bar{k}_3^{(i)} + \bar{k}_4^{(i)}} \Delta c_2^{e(i)} + \bar{k}_1^{(i)} c_1^{(i)} -$$

$$- \frac{\bar{k}_2^{(i)} \bar{k}_4^{(i)}}{\bar{k}_3^{(i)} + \bar{k}_4^{(i)}} c_2^{e(i)} + \frac{\tilde{\lambda}_2^{(i-1)} \bar{k}_4^{(i)}}{\bar{k}_3^{(i)} + \bar{k}_4^{(i)}} c_2^{e(i-1)} - \frac{\tilde{\lambda}_2^{(i+1)} \bar{k}_4^{(i)}}{\bar{k}_3^{(i)} + \bar{k}_4^{(i)}} c_2^{e(i)} - \frac{\tilde{\lambda}_2^{(iN)} \bar{k}_4^{(i)}}{\bar{k}_3^{(i)} + \bar{k}_4^{(i)}} c_2^{e(i)},$$

для  $i = N$

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_1^{(N)}}{\partial t} &= \bar{D}_{11}^{(N)} \Delta c_1^{(N)} + \frac{\bar{D}_{12}^{(N)} \bar{k}_4^{(N)}}{\bar{k}_3^{(N)} + \bar{k}_4^{(N)}} \Delta c_2^{e(N)} - \bar{k}_1^{(N)} c_1^{(N)} \\ &\quad + \frac{\bar{k}_2^{(N)} \bar{k}_4^{(N)}}{\bar{k}_3^{(N)} + \bar{k}_4^{(N)}} c_2^{e(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} \tilde{\lambda}_1^{(iN)} c_1^{(i)}, \\ \frac{\partial c_2^{e(N)}}{\partial t} &= \bar{D}_{21}^{(N)} \Delta c_1^{(N)} + \frac{\bar{D}_{22}^{(N)} \bar{k}_4^{(N)}}{\bar{k}_3^{(N)} + \bar{k}_4^{(N)}} \Delta c_2^{e(N)} + \bar{k}_1^{(N)} c_1^{(N)} - \\ &\quad - \frac{\bar{k}_2^{(N)} \bar{k}_4^{(N)}}{\bar{k}_3^{(N)} + \bar{k}_4^{(N)}} c_2^{e(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} \frac{\tilde{\lambda}_2^{(iN)} \bar{k}_4^{(N)}}{\bar{k}_3^{(N)} + \bar{k}_4^{(N)}} c_2^{e(i)}. \end{aligned} \quad (1.84)$$

Позначимо

$$\begin{aligned} \bar{D}_{12}^{e(i)} &= \frac{\bar{D}_{12}^{(i)} \bar{k}_4^{(i)}}{\bar{k}_3^{(i)} + \bar{k}_4^{(i)}}, \quad \bar{D}_{22}^{e(i)} = \frac{\bar{D}_{22}^{(i)} \bar{k}_4^{(i)}}{\bar{k}_3^{(i)} + \bar{k}_4^{(i)}}, \quad \bar{k}_2^{e(i)} = \frac{\bar{D}_2^{(i)} \bar{k}_4^{(i)}}{\bar{k}_3^{(i)} + \bar{k}_4^{(i)}}, \\ \tilde{\lambda}_2^{e(i-1)} &= \frac{\tilde{\lambda}_2^{(i-1)} \bar{k}_4^{(i)}}{\bar{k}_3^{(i)} + \bar{k}_4^{(i)}}, \quad \tilde{\lambda}_2^{e(i+1)} = \frac{\tilde{\lambda}_2^{(i+1)} \bar{k}_4^{(i)}}{\bar{k}_3^{(i)} + \bar{k}_4^{(i)}}, \quad \tilde{\lambda}_2^{e(iN)} = \frac{\tilde{\lambda}_2^{(iN)} \bar{k}_4^{(i)}}{\bar{k}_3^{(i)} + \bar{k}_4^{(i)}}. \end{aligned} \quad (1.85)$$

Тоді з рівнянь (1.84) одержимо системи рівнянь гетеродифузії (1.81). І теорема доведена.

**Теорема 1.8.** Якщо виконується умова локальної термодинамічної рівноваги між першим ( $j=1$ ) та другим ( $j=2$ ) станами домішкової речовини,  $\mu_1^{(i)} = \mu_2^{(i)}$  ( $i = \overline{0, N}$ ), масоперенесення розпадних частинок підпорядковується взаємозв'язаним системам рівнянь дифузії у середовищі з пастками

для  $i = 0$

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_1^{e(0)}}{\partial t} &= \bar{D}_{11}^{e(0)} \Delta c_1^{e(0)} - \bar{k}_1^{e(0)} c_1^{e(0)} + \bar{k}_4^{(0)} c_3^{(0)} - \tilde{\lambda}_1^{e(1)} c_1^{e(0)} - \tilde{\lambda}_1^{e(0N)} c_1^{e(0)}, \\ \frac{\partial c_3^{(0)}}{\partial t} &= \bar{k}_1^{e(0)} c_1^{e(0)} - \bar{k}_4^{(0)} c_3^{(0)} - \tilde{\lambda}_3^{(1)} c_3^{(0)} - \tilde{\lambda}_3^{(0N)} c_3^{(0)}; \end{aligned}$$

для  $i = \overline{1, N-1}$

$$\frac{\partial c_1^{e(i)}}{\partial t} = \bar{D}_{11}^{e(i)} \Delta c_1^{e(i)} - \bar{k}_1^{e(i)} c_1^{e(i)} +$$



$$\begin{aligned}
& + \bar{k}_4^{(i)} c_3^{(i)} + \tilde{\lambda}_1^{e(i-1)} c_1^{e(i-1)} - \tilde{\lambda}_1^{e(i+1)} c_1^{e(i)} - \tilde{\lambda}_1^{e(iN)} c_1^{e(i)}, \\
\frac{\partial c_3^{(i)}}{\partial t} &= \bar{k}_1^{e(i)} c_1^{e(i)} - \bar{k}_4^{(i)} c_3^{(i)} + \tilde{\lambda}_3^{(i-1)} c_3^{(i-1)} - \tilde{\lambda}_3^{(i+1)} c_3^{(i)} - \tilde{\lambda}_3^{(iN)} c_3^{(i)}; \\
\text{для } i &= N \\
\frac{\partial c_1^{e(N)}}{\partial t} &= \bar{D}_{11}^{e(N)} \Delta c_1^{e(N)} - \bar{k}_1^{e(N)} c_1^{e(N)} + \bar{k}_4^{(N)} c_3^{(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} \tilde{\lambda}_1^{e(iN)} c_1^{e(i)}, \\
\frac{\partial c_3^{(N)}}{\partial t} &= \bar{k}_1^{e(N)} c_1^{e(N)} - \bar{k}_4^{(N)} c_3^{(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} \tilde{\lambda}_3^{(iN)} c_3^{(i)}. \tag{1.86}
\end{aligned}$$

*Доведення.* Доводити теорему будемо тим же шляхом, що і попередню. Рівність  $\mu_1^{(i)} = \mu_2^{(i)}$  є еквівалентною формулі

$$\bar{k}_1^{(i)} c_1^{(i)} - \bar{k}_2^{(i)} c_2^{(i)} = 0 \quad \text{для } \forall i = \overline{0, N}. \tag{1.87}$$

Вводимо в розгляд сумарну ефективну концентрацію  $c_1^{e(i)} = c_1^{(i)} + c_2^{(i)}$ . Тоді з умови (1.87) випливає

$$c_1^{e(i)} = \frac{\bar{k}_1^{(i)} + \bar{k}_2^{(i)}}{\bar{k}_2^{(i)}} c_1^{(i)} \quad \text{для } \forall i = \overline{0, N}. \tag{1.88}$$

Додаємо рівняння (1.77а) і (1.77б), (1.78а) і (1.78б), (1.79а) і (1.79б) і враховуємо вираз (1.88), отримаємо

для  $i = 0$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial c_1^{e(0)}}{\partial t} &= \frac{\bar{k}_2^{(0)} (\bar{D}_{11}^{(0)} + \bar{D}_{21}^{(0)}) + \bar{k}_1^{(0)} (\bar{D}_{12}^{(0)} + \bar{D}_{22}^{(0)})}{\bar{k}_1^{(0)} + \bar{k}_2^{(0)}} \Delta c_1^{e(0)} - \frac{\bar{k}_1^{(0)} \bar{k}_3^{(0)}}{\bar{k}_1^{(0)} + \bar{k}_2^{(0)}} c_1^{e(0)} + \\
& \bar{k}_4^{(0)} c_3^{(0)} - \frac{\tilde{\lambda}_1^{(1)} \bar{k}_2^{(0)}}{\bar{k}_1^{(0)} + \bar{k}_2^{(0)}} c_1^{e(0)} - \frac{\tilde{\lambda}_1^{(0N)} \bar{k}_2^{(0)}}{\bar{k}_1^{(0)} + \bar{k}_2^{(0)}} c_1^{e(0)}, \\
\frac{\partial c_3^{(0)}}{\partial t} &= \frac{\bar{k}_1^{(0)} \bar{k}_3^{(0)}}{\bar{k}_1^{(0)} + \bar{k}_2^{(0)}} c_1^{e(0)} - \bar{k}_4^{(0)} c_3^{(0)} - \tilde{\lambda}_3^{(1)} c_3^{(0)} - \tilde{\lambda}_3^{(0N)} c_3^{(0)};
\end{aligned}$$

для  $i = \overline{1, N-1}$

$$\frac{\partial c_1^{e(i)}}{\partial t} = \frac{\bar{k}_2^{(i)} (\bar{D}_{11}^{(i)} + \bar{D}_{21}^{(i)}) + \bar{k}_1^{(i)} (\bar{D}_{12}^{(i)} + \bar{D}_{22}^{(i)})}{\bar{k}_1^{(i)} + \bar{k}_2^{(i)}} \Delta c_1^{e(i)} - \frac{\bar{k}_1^{(i)} \bar{k}_3^{(i)}}{\bar{k}_1^{(i)} + \bar{k}_2^{(i)}} c_1^{e(i)} +$$

$$+ \bar{k}_4^{(i)} c_3^{(i)} + \frac{\tilde{\lambda}_1^{(i-1)} \bar{k}_2^{(i)}}{\bar{k}_1^{(i)} + \bar{k}_2^{(i)}} c_1^{e(i-1)} - \frac{\tilde{\lambda}_1^{(i+1)} \bar{k}_2^{(i)}}{\bar{k}_1^{(i)} + \bar{k}_2^{(i)}} c_1^{e(i)} - \frac{\tilde{\lambda}_1^{(iN)} \bar{k}_2^{(i)}}{\bar{k}_1^{(i)} + \bar{k}_2^{(i)}} c_1^{e(i)},$$

$$\frac{\partial c_3^{(i)}}{\partial t} = \frac{\bar{k}_1^{(i)} \bar{k}_3^{(i)}}{\bar{k}_1^{(i)} + \bar{k}_2^{(i)}} c_1^{e(i)} - \bar{k}_4^{(i)} c_3^{(i)} + \tilde{\lambda}_3^{(i-1)} c_3^{(i-1)} - \tilde{\lambda}_3^{(i+1)} c_3^{(i)} - \tilde{\lambda}_3^{(iN)} c_3^{(i)};$$

для  $i = N$

$$\frac{\partial c_1^{e(N)}}{\partial t} = \frac{\bar{k}_2^{(N)} (\bar{D}_{11}^{(N)} + \bar{D}_{21}^{(N)}) + \bar{k}_1^{(N)} (\bar{D}_{12}^{(N)} + \bar{D}_{22}^{(N)})}{\bar{k}_1^{(N)} + \bar{k}_2^{(N)}} \Delta c_1^{e(N)} -$$

$$- \frac{\bar{k}_1^{(N)} \bar{k}_3^{(N)}}{\bar{k}_1^{(N)} + \bar{k}_2^{(N)}} c_1^{e(N)} + \bar{k}_4^{(N)} c_3^{(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} \frac{\tilde{\lambda}_1^{(iN)} \bar{k}_2^{(i)}}{\bar{k}_1^{(i)} + \bar{k}_2^{(i)}} c_1^{e(i)},$$

$$\frac{\partial c_3^{(N)}}{\partial t} = \frac{\bar{k}_1^{(N)} \bar{k}_3^{(N)}}{\bar{k}_1^{(N)} + \bar{k}_2^{(N)}} c_1^{e(N)} - \bar{k}_4^{(N)} c_3^{(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} \tilde{\lambda}_3^{(iN)} c_3^{(i)}. \quad (1.89)$$

Позначимо

$$\bar{D}_{11}^{e(i)} = \frac{\bar{k}_2^{(i)} (\bar{D}_{11}^{(i)} + \bar{D}_{21}^{(i)}) + \bar{k}_1^{(i)} (\bar{D}_{12}^{(i)} + \bar{D}_{22}^{(i)})}{\bar{k}_1^{(i)} + \bar{k}_2^{(i)}}, \quad \bar{k}_1^{e(i)} = \frac{\bar{k}_1^{(i)} \bar{k}_3^{(i)}}{\bar{k}_1^{(i)} + \bar{k}_2^{(i)}},$$

$$\tilde{\lambda}_1^{e(i-1)} = \frac{\tilde{\lambda}_1^{(i-1)} \bar{k}_2^{(i)}}{\bar{k}_1^{(i)} + \bar{k}_2^{(i)}}, \quad \tilde{\lambda}_1^{e(i+1)} = \frac{\tilde{\lambda}_1^{(i+1)} \bar{k}_2^{(i)}}{\bar{k}_1^{(i)} + \bar{k}_2^{(i)}}, \quad \tilde{\lambda}_1^{e(iN)} = \frac{\tilde{\lambda}_1^{(iN)} \bar{k}_2^{(i)}}{\bar{k}_1^{(i)} + \bar{k}_2^{(i)}} \text{ для } \forall i = \overline{0, N}. \quad (1.90)$$

Підставимо введені ефективні коефіцієнти (1.90) у формули (1.89) і одержимо системи рівнянь дифузії у середовищі з пастками (1.86), що і треба було довести.

**Теорема 1.9.** Якщо виконується умова локальної термодинамічної рівноваги між усіма станами домішки, тобто  $\mu_1^{(i)} = \mu_2^{(i)} = \mu_3^{(i)}$  ( $i = \overline{0, N}$ ), то міграція розпадних домішкових частинок підпорядковується взаємозв'язаним рівнянням дифузії для  $i = 0$

$$\frac{\partial c_{ef}^{(0)}}{\partial t} = \bar{D}_{ef}^{(0)} \Delta c_{ef}^{(0)} - \tilde{\lambda}_{ef}^{(1)} c_{ef}^{(0)} - \tilde{\lambda}_{ef}^{(0N)} c_{ef}^{(0)},$$



для  $i = \overline{1, N-1}$

$$\frac{\partial c_{ef}^{(i)}}{\partial t} = \bar{D}_{ef}^{(i)} \Delta c_{ef}^{(i)} + \tilde{\lambda}_{ef}^{(i-1)} c_{ef}^{(i-1)} - \tilde{\lambda}_{ef}^{(i+1)} c_{ef}^{(i)} - \tilde{\lambda}_{ef}^{(iN)} c_{ef}^{(i)},$$

для  $i = N$

$$\frac{\partial c_{ef}^{(N)}}{\partial t} = \bar{D}_{ef}^{(N)} \Delta c_{ef}^{(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} \tilde{\lambda}_{ef}^{(iN)} c_{ef}^{(i)}. \quad (1.91)$$

*Доведення.* Оскільки виконується рівність  $\mu_2^{(i)} = \mu_3^{(i)}$ , то справедлива Теорема 1.7 (можна виходити з рівності  $\mu_1^{(i)} = \mu_2^{(i)}$  і Теореми 1.8). Тоді рівність  $\mu_1^{(i)} = \mu_2^{(i)} = \mu_3^{(i)}$  є еквівалентною

$$\bar{k}_1^{(i)} c_1^{(i)} - \bar{k}_2^{e(i)} c_2^{e(i)} = 0 \quad \text{для } \forall i = \overline{0, N}. \quad (1.92)$$

Вводимо в розгляд сумарну ефективну концентрацію  $c_{ef}^{(i)} = c_1^{(i)} + c_2^{e(i)} = c_1^{(i)} + c_2^{(i)} + c_3^{(i)}$ . Додаючи для кожного  $i = \overline{0, N}$  рівняння (1.81) і враховуючи (1.92), одержимо

для  $i = 0$

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_{ef}^{(0)}}{\partial t} &= \frac{\bar{k}_2^{e(0)} (\bar{D}_{11}^{(0)} + \bar{D}_{21}^{e(0)}) + \bar{k}_1^{(0)} (\bar{D}_{12}^{(0)} + \bar{D}_{22}^{e(0)})}{\bar{k}_1^{(0)} + \bar{k}_2^{e(0)}} \Delta c_{ef}^{(0)} - \\ &- \frac{\tilde{\lambda}_1^{(1)} \bar{k}_2^{e(0)}}{\bar{k}_1^{(0)} + \bar{k}_2^{e(0)}} c_{ef}^{(0)} - \frac{\tilde{\lambda}_1^{(0N)} \bar{k}_2^{e(0)}}{\bar{k}_1^{(0)} + \bar{k}_2^{e(0)}} c_{ef}^{(0)}, \end{aligned}$$

для  $i = \overline{1, N-1}$

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_{ef}^{(i)}}{\partial t} &= \frac{\bar{k}_2^{e(i)} (\bar{D}_{11}^{(i)} + \bar{D}_{21}^{e(i)}) + \bar{k}_1^{(i)} (\bar{D}_{12}^{(i)} + \bar{D}_{22}^{e(i)})}{\bar{k}_1^{(i)} + \bar{k}_2^{e(i)}} \Delta c_{ef}^{(i)} + \\ &+ \frac{\tilde{\lambda}_1^{(i-1)} \bar{k}_2^{e(i)}}{\bar{k}_1^{(i)} + \bar{k}_2^{e(i)}} c_1^{(i-1)} - \frac{\tilde{\lambda}_1^{(i+1)} \bar{k}_2^{e(i)}}{\bar{k}_1^{(i)} + \bar{k}_2^{e(i)}} c_1^{(i)} - \frac{\tilde{\lambda}_1^{(iN)} \bar{k}_2^{e(i)}}{\bar{k}_1^{(i)} + \bar{k}_2^{e(i)}} c_1^{(i)}, \end{aligned}$$

для  $i = N$

$$\frac{\partial c_{ef}^{(N)}}{\partial t} = \frac{\bar{k}_2^{e(N)} (\bar{D}_{11}^{(N)} + \bar{D}_{21}^{e(N)}) + \bar{k}_1^{(N)} (\bar{D}_{12}^{(N)} + \bar{D}_{22}^{e(N)})}{\bar{k}_1^{(N)} + \bar{k}_2^{e(N)}} \Delta c_{ef}^{(N)} +$$

$$+ \sum_{i=0}^{N-1} \frac{\tilde{\lambda}_1^{(iN)} \bar{k}_2^{e(N)}}{\bar{k}_1^{(N)} + \bar{k}_2^{e(N)}} c_{ef}^{(i)}.$$

Позначимо

$$\begin{aligned} \bar{D}_{ef}^{(i)} &= \frac{\bar{k}_2^{e(i)} (\bar{D}_{11}^{(i)} + \bar{D}_{21}^{e(i)}) + \bar{k}_1^{(i)} (\bar{D}_{12}^{(i)} + \bar{D}_{22}^{e(i)})}{\bar{k}_1^{(i)} + \bar{k}_2^{e(i)}}; \\ \tilde{\lambda}_{ef}^{(i-1)} &= \frac{\tilde{\lambda}_1^{(i-1)} \bar{k}_2^{e(i)}}{\bar{k}_1^{(i)} + \bar{k}_2^{e(i)}}, \quad \tilde{\lambda}_{ef}^{(i+1)} = \frac{\tilde{\lambda}_1^{(i+1)} \bar{k}_2^{e(i)}}{\bar{k}_1^{(i)} + \bar{k}_2^{e(i)}}, \quad \tilde{\lambda}_{ef}^{(iN)} = \frac{\tilde{\lambda}_1^{(iN)} \bar{k}_2^{e(i)}}{\bar{k}_1^{(i)} + \bar{k}_2^{e(i)}}. \end{aligned} \quad (1.93)$$

Отже отримаємо рівняння (1.91). І теорема доведена.

Зауважимо, що система рівнянь, наведена в праці [47] є частковим випадком системи рівнянь (1.79), зокрема (1.81), без урахування розпаду мігруючої речовини, якщо однією з компонент, яка приймає участь у процесах переходу, вважати сам різний розчин.



## РОЗДІЛ 2

*Крайові задачі моделей дифузії,  
невзаємодіючих потоків і дифузії в  
тілі з пастками за каскадного розпаду  
домішкових речовин*

### 2.1. Математичні моделі гетеродифузії за каскадного розпаду домішкових частинок у безрозмірній формі

Розглянемо спочатку гетеродифузію розпадних домішкових частинок у середовищі з пастками на одному зі шляхів міграції. Будемо виходити з систем диференціальних рівнянь (1.77)-(1.79), отриманих для опису такого типу процесів переносу домішки у попередньому розділі. Приведемо системи рівнянь (1.77)-(1.79) до безрозмірного вигляду. З цією метою введемо нові змінні [76]

$$t = \bar{k}_2^{(0)}\tau; \quad \xi^{(\alpha)} = (\bar{k}_2^{(0)} / \bar{D}_{11}^{(0)})^{1/2} x^{(\alpha)}, \quad \alpha = \overline{1, 3}. \quad (2.1)$$

Тоді отримаємо

для  $i = 0$

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_1^{(0)}}{\partial \tau} &= \Delta_\xi c_1^{(0)} + d_1^{(0)} \Delta_\xi c_2^{(0)} - a_{11}^{(0)} c_1^{(0)} + a_{12}^{(0)} c_2^{(0)}, \\ \frac{\partial c_2^{(0)}}{\partial \tau} &= d_2^{(0)} \Delta_\xi c_1^{(0)} + d^{(0)} \Delta_\xi c_2^{(0)} + a_{21}^{(0)} c_1^{(0)} - a_{22}^{(0)} c_2^{(0)} + a_{23}^{(0)} c_3^{(0)}, \\ \frac{\partial c_3^{(0)}}{\partial \tau} &= a_{32}^{(0)} c_2^{(0)} - a_{33}^{(0)} c_3^{(0)}; \end{aligned} \quad (2.2a)$$

для  $i = \overline{1, N-1}$

$$\frac{\partial c_1^{(i)}}{\partial \tau} = d_0^{(i)} \Delta_\xi c_1^{(i)} + d_1^{(i)} \Delta_\xi c_2^{(i)} - a_{11}^{(i)} c_1^{(i)} + a_{12}^{(i)} c_2^{(i)} + a_{11}^{(i-1)} c_1^{(i-1)},$$

**Розділ 2.** Крайові задачі моделей дифузії, невзаємодіючих потоків і дифузії у тілі з пастками за каскадного розпаду домішкових речовин

---

$$\begin{aligned}\frac{\partial c_2^{(i)}}{\partial \tau} &= d_2^{(i)} \Delta_\xi c_1^{(i)} + d^{(i)} \Delta_\xi c_2^{(i)} + a_{21}^{(i)} c_1^{(i)} - a_{22}^{(i)} c_2^{(i)} + a_{23}^{(i)} c_3^{(i)} + a_{\lambda 2}^{(i-1)} c_2^{(i-1)}, \\ \frac{\partial c_3^{(i)}}{\partial \tau} &= a_{32}^{(i)} c_2^{(i)} - a_{33}^{(i)} c_3^{(i)} + a_{\lambda 3}^{(i-1)} c_3^{(i-1)};\end{aligned}\quad (2.2\delta)$$

для  $i = N$

$$\begin{aligned}\frac{\partial c_1^{(N)}}{\partial \tau} &= d_0^{(N)} \Delta_\xi c_1^{(N)} + d_1^{(N)} \Delta_\xi c_2^{(N)} - a_{11}^{(N)} c_1^{(N)} + a_{12}^{(N)} c_2^{(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 1}^{(iN)} c_1^{(i)}, \\ \frac{\partial c_2^{(N)}}{\partial \tau} &= d_2^{(N)} \Delta_\xi c_1^{(N)} + d^{(N)} \Delta_\xi c_2^{(N)} + a_{21}^{(N)} c_1^{(N)} - \\ &- a_{22}^{(N)} c_2^{(N)} + a_{23}^{(N)} c_3^{(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 2}^{(iN)} c_2^{(i)}, \\ \frac{\partial c_3^{(N)}}{\partial \tau} &= a_{32}^{(N)} c_2^{(N)} - a_{33}^{(N)} c_3^{(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 3}^{(iN)} c_3^{(i)};\end{aligned}\quad (2.2\text{B})$$

$$\begin{aligned}\text{де } \Delta_\xi &= \vec{\nabla}_\xi \cdot \vec{\nabla}_\xi, \quad \vec{\nabla}_\xi = \vec{i}^{(\alpha)} \partial/\partial \xi^{(\alpha)}; \quad d_0^{(i)} = \overline{D}_{11}^{(i)} / \overline{D}_{11}^{(0)}, \quad d_1^{(i)} = \overline{D}_{12}^{(i)} / \overline{D}_{11}^{(0)}, \\ d_2^{(i)} &= \overline{D}_{21}^{(i)} / \overline{D}_{11}^{(0)}, \quad d^{(i)} = \overline{D}_{22}^{(i)} / \overline{D}_{11}^{(0)}, \quad i = \overline{0, N}; \quad a_{11}^{(i)} = \left( \bar{k}_1^{(i)} + \tilde{\lambda}_1^{(i+1)} + \tilde{\lambda}_1^{(iN)} \right) / \bar{k}_2^{(0)}, \\ a_{22}^{(i)} &= \left( \bar{k}_2^{(i)} + \bar{k}_3^{(i)} + \tilde{\lambda}_2^{(i+1)} + \tilde{\lambda}_2^{(iN)} \right) / \bar{k}_2^{(0)}, \quad a_{33}^{(i)} = \left( \bar{k}_4^{(i)} + \tilde{\lambda}_3^{(i+1)} + \tilde{\lambda}_3^{(iN)} \right) / \bar{k}_2^{(0)}, \\ a_{12}^{(i)} &= \bar{k}_2^{(i)} / \bar{k}_2^{(0)}, \quad a_{21}^{(i)} = \bar{k}_1^{(i)} / \bar{k}_2^{(0)}, \quad a_{23}^{(i)} = \bar{k}_4^{(i)} / \bar{k}_2^{(0)}, \quad a_{32}^{(i)} = \bar{k}_3^{(i)} / \bar{k}_2^{(0)}, \quad i = \overline{0, N}; \\ a_{\lambda j}^{(i-1)} &= \tilde{\lambda}_j^{(i-1)} / \bar{k}_2^{(0)}, \quad i = \overline{1, N}, \quad j = \overline{1, 3}.\end{aligned}$$

Взаємозв'язані системи рівнянь гетеродифузії домішкової речовини двома шляхами з урахуванням каскадного розпаду мігруючих частинок (1.81) та введених ефективних коефіцієнтів (1.85) у безрозмірних змінних (2.1) набудуть вигляду

для  $i = 0$

$$\begin{aligned}\frac{\partial c_1^{(0)}}{\partial \tau} &= \Delta_\xi c_1^{(0)} + d_1^{e(0)} \Delta_\xi c_2^{e(0)} - a_{11}^{(0)} c_1^{(0)} + a_{12}^{e(0)} c_2^{e(0)}, \\ \frac{\partial c_2^{e(0)}}{\partial \tau} &= d_2^{(0)} \Delta_\xi c_1^{(0)} + d^{e(0)} \Delta_\xi c_2^{e(0)} + a_{21}^{(0)} c_1^{(0)} - a_{22}^{e(0)} c_2^{e(0)},\end{aligned}\quad (2.3\text{a})$$



для  $i = \overline{1, N-1}$

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_1^{(i)}}{\partial \tau} &= d_0^{(i)} \Delta_\xi c_1^{(i)} + d_1^{e(i)} \Delta_\xi c_2^{e(i)} - a_{11}^{(i)} c_1^{(i)} + a_{12}^{e(i)} c_2^{e(i)} + a_{\lambda 1}^{(i-1)} c_1^{(i-1)}, \\ \frac{\partial c_2^{e(i)}}{\partial \tau} &= d_2^{(i)} \Delta_\xi c_1^{(i)} + d^{e(i)} \Delta_\xi c_2^{e(i)} + a_{21}^{(i)} c_1^{(i)} - a_{22}^{e(i)} c_2^{e(i)} + a_{\lambda 2}^{e(i-1)} c_2^{e(i-1)}; \end{aligned} \quad (2.3б)$$

для  $i = N$

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_1^{(N)}}{\partial \tau} &= d_0^{(N)} \Delta_\xi c_1^{(N)} + d_1^{e(N)} \Delta_\xi c_2^{e(N)} - a_{11}^{(N)} c_1^{(N)} + a_{12}^{e(N)} c_2^{e(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 1}^{(iN)} c_1^{(i)}, \\ \frac{\partial c_2^{e(N)}}{\partial \tau} &= d_2^{(N)} \Delta_\xi c_1^{(N)} + d^{e(N)} \Delta_\xi c_2^{e(N)} + a_{21}^{(N)} c_1^{(N)} - a_{22}^{e(N)} c_2^{e(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 2}^{e(iN)} c_2^{e(i)}, \end{aligned} \quad (2.3в)$$

$$\text{де } d_1^{e(i)} = \overline{D}_{12}^{e(i)} / \overline{D}_{11}^{(0)}, \quad d^{e(i)} = \overline{D}_{22}^{e(i)} / \overline{D}_{11}^{(0)}, \quad i = \overline{0, N}; \quad a_{12}^{e(i)} = \overline{k}_2^{e(i)} / \overline{k}_2^{(0)}, \\ a_{22}^{(i)} = \left( \overline{k}_2^{e(i)} + \tilde{\lambda}_2^{e(i+1)} + \tilde{\lambda}_2^{e(iN)} \right) / \overline{k}_2^{(0)}, \quad i = \overline{0, N}; \quad a_{\lambda 2}^{e(i-1)} = \tilde{\lambda}_2^{e(i-1)} / \overline{k}_2^{(0)}, \quad i = \overline{1, N}.$$

Системи рівнянь ефективної дифузії у середовищі з пастками (1.86) з урахуванням отриманих ефективних коефіцієнтів (1.90) у безрозмірних змінних (2.1) зведемо до вигляду

для  $i = 0$

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_1^{e(0)}}{\partial \tau} &= d_0^{e(0)} \Delta_\xi c_1^{e(0)} - a_{11}^{e(0)} c_1^{e(0)} + a_{23}^{(0)} c_3^{(0)}, \\ \frac{\partial c_3^{(0)}}{\partial \tau} &= a_{31}^{e(0)} c_1^{e(0)} - a_{33}^{(0)} c_3^{(0)}; \end{aligned} \quad (2.4а)$$

для  $i = \overline{1, N-1}$

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_1^{e(i)}}{\partial \tau} &= d_0^{e(i)} \Delta_\xi c_1^{e(i)} - a_{11}^{e(i)} c_1^{e(i)} + a_{23}^{(i)} c_3^{(i)} + a_{\lambda 1}^{e(i-1)} c_1^{e(i-1)}, \\ \frac{\partial c_3^{(i)}}{\partial \tau} &= a_{31}^{e(i)} c_1^{e(i)} - a_{33}^{(i)} c_3^{(i)} + a_{\lambda 3}^{(i-1)} c_3^{(i-1)}; \end{aligned} \quad (2.4б)$$

**Розділ 2. Крайові задачі моделей дифузії, невзаємодіючих потоків і дифузії у тілі з пастками за каскадного розпаду домішкових речовин**

---

для  $i = N$

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_1^{e(N)}}{\partial \tau} &= d_0^{e(N)} \Delta_\xi c_1^{e(N)} - a_{11}^{e(N)} c_1^{e(N)} + a_{23}^{(N)} c_3^{(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 1}^{(iN)} c_1^{(i)}, \\ \frac{\partial c_3^{(N)}}{\partial \tau} &= a_{31}^{e(N)} c_1^{e(N)} - a_{33}^{(N)} c_3^{(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 3}^{(iN)} c_3^{(i)}, \end{aligned} \quad (2.4\text{в})$$

$$\text{де } d_0^{e(i)} = \bar{D}_{11}^{e(i)} / \bar{D}_{11}^{(0)}, \quad a_{11}^{e(i)} = \left( \bar{k}_1^{e(i)} + \tilde{\lambda}_1^{e(i+1)} + \tilde{\lambda}_1^{e(iN)} \right) / \bar{k}_2^{(0)}, \\ a_{31}^{e(i)} = \bar{k}_1^{e(i)} / \bar{k}_2^{(0)}, \quad a_{\lambda 1}^{e(i-1)} = \tilde{\lambda}_j^{e(i-1)} / \bar{k}_2^{(0)}, \quad a_{\lambda 1}^{e(iN)} = \tilde{\lambda}_1^{e(iN)} / \bar{k}_2^{(0)}, \quad i = \overline{0, N}.$$

Рівняння дифузії у середовищі з ефективними характеристиками (1.91) з одержаними ефективними коефіцієнтами (1.93), враховуючи каскадний розпад мігруючих частинок, в безрозмірних змінних (2.1) набувають вигляду

для  $i = 0$

$$\frac{\partial c_{ef}^{(0)}}{\partial \tau} = d_{ef}^{(0)} \Delta_\xi c_{ef}^{(0)} - a_{ef}^{(0)} c_{ef}^{(0)}, \quad (2.5\text{а})$$

для  $i = \overline{1, N-1}$

$$\frac{\partial c_{ef}^{(i)}}{\partial \tau} = d_{ef}^{(i)} \Delta_\xi c_{ef}^{(i)} + a_{\lambda e}^{(i-1)} c_{ef}^{(i-1)} - a_{ef}^{(i)} c_{ef}^{(i)}, \quad (2.5\text{б})$$

для  $i = N$

$$\frac{\partial c_{ef}^{(N)}}{\partial \tau} = d_{ef}^{(N)} \Delta_\xi c_{ef}^{(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda e}^{(iN)} c_{ef}^{(i)}. \quad (2.5\text{в})$$

$$\text{Тут } d_{ef}^{(i)} = \bar{D}_{ef}^{(i)} / \bar{D}_{11}^{(0)}, \quad a_{ef}^{(i)} = \left( \tilde{\lambda}_{ef}^{(i+1)} + \tilde{\lambda}_{ef}^{(iN)} \right) / \bar{k}_2^{(0)}, \quad a_{\lambda e}^{(i-1)} = \tilde{\lambda}_{ef}^{(i-1)} / \bar{k}_2^{(0)}, \\ a_{\lambda e}^{(iN)} = \tilde{\lambda}_{ef}^{(iN)} / \bar{k}_2^{(0)}, \quad i = \overline{0, N}.$$

Зазначимо, що безрозмірні змінні (2.1) стискають часову вісь і розтягають просторові. При цьому не залежать від геометричних розмірів тіла або характерних розмірів структурних неноднорідностей.



## 2.2. Математична модель дифузії за каскадного розпаду домішкових частинок у тілі з ефективними характеристиками

### 2.2.1. Концентрації розпадних речовин

Розглянемо дифузію розпадної домішкової речовини в шарі безрозмірної товщини  $\xi_0$  (рис. 2.1) за крайових умов I-го роду. Вважаємо, що у нульовий момент часу у тілі відсутня домішкова речовина. В подальшому (для часів  $\tau > 0$ ) на «верхній» поверхні шару діє стало джерело маси для речовини  $K^{*(1)}$ , а на нижній границі – концентрація частинок дорівнює нулю.

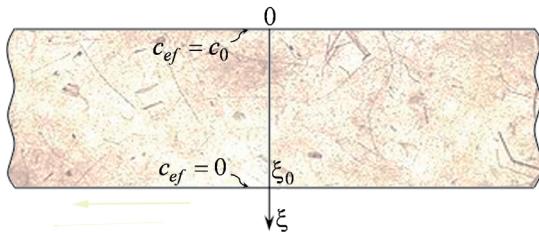


Рис. 2.1. Шар товщини  $\xi_0$ , в якому мігрує домішкова речовина

Для одновимірного за просторовою координатою випадку рівняння (2.5) зводяться до наступного вигляду  
для  $i = 0$

$$\frac{\partial c_{ef}^{(0)}}{\partial \tau} = d_{ef}^{(0)} \frac{\partial^2 c_{ef}^{(0)}}{\partial \xi^2} - a_{ef}^{(0)} c_{ef}^{(0)}, \quad (2.6a)$$

для  $i = \overline{1, N-1}$

$$\frac{\partial c_{ef}^{(i)}}{\partial \tau} = d_{ef}^{(i)} \frac{\partial^2 c_{ef}^{(i)}}{\partial \xi^2} + a_{\lambda e}^{(i-1)} c_{ef}^{(i-1)} - a_{ef}^{(i)} c_{ef}^{(i)}, \quad (2.6b)$$

для  $i = N$

$$\frac{\partial c_{ef}^{(N)}}{\partial \tau} = d_{ef}^{(N)} \frac{\partial^2 c_{ef}^{(N)}}{\partial \xi^2} + \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda e}^{(iN)} c_{ef}^{(i)} \quad (2.6b)$$

за нульових початкових

$$c_{ef}^{(i)}(\xi, \tau) \Big|_{\tau=0} = 0, \quad i = \overline{0; N} \quad (2.7)$$

і таких граничних умов

$$c_{ef}^{(0)}(\xi, \tau) \Big|_{\xi=0} = c_0 \equiv const, \quad c_{ef}^{(0)}(\xi, \tau) \Big|_{\xi=\xi_0} = 0; \quad (2.8a)$$

$$c_{ef}^{(i)}(\xi, \tau) \Big|_{\xi=0} = 0, \quad c_{ef}^{(i)}(\xi, \tau) \Big|_{\xi=\xi_0} = 0, \quad i = \overline{1; N}. \quad (2.8b)$$

Зазначимо, що така постановка крайової задачі (2.6)-(2.8) може використовуватись не тільки як частковий випадок моделі гетеродифузії з пастками за умов локальної термодинамічної рівноваги щодо процесу масообміну між трьома різними станами домішкових частинок, але й розглянатись як окрема задача дифузії з урахуванням каскадного розпаду мігруючої речовини. Тоді схема розпаду частинок спрощується, що показано на рис. 2.2.

Розв'язок крайової задачі (2.6a), (2.7), (2.8a) для  $i = 0$  знайдений з допомогою інтегральних перетворень Лапласа за часом і  $\sin$ -перетворення Фур'є за просторовою координатою [65]. В результаті маємо

$$\begin{aligned} \frac{1}{c_0} c_{ef}^{(0)}(\xi, \tau) &= 1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \left[ 1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\operatorname{sh} \eta(\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \eta \xi_0} \right] - \\ &- \frac{2}{\xi_0} \sum_{k=1}^{\infty} y_k^2 \frac{\sin y_k \xi}{y_k^2 + \eta^2} e^{-\left(d_{ef}^{(0)} y_k^2 + a_{ef}^{(0)}\right) \tau}, \end{aligned} \quad (2.9)$$

де  $\eta = \sqrt{a_{ef}^{(0)} / d_{ef}^{(0)}}$ ,  $y_k = k\pi/\xi_0$ .

В стаціонарному випадку при  $\tau \rightarrow \infty$  формула для концентрації розпадної домішки запишеться так

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{c_0} c_{ef}^{(0)}(\xi, \tau) = 1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \left[ 1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\operatorname{sh} \eta(\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \eta \xi_0} \right].$$

Зазначимо, що врахування розпаду дифундуючої речовини призводить до появи нелінійного доданку  $\operatorname{sh} \eta(\xi_0 - \xi)/\operatorname{sh} \eta \xi_0$  в асимптотиці функції концентрації. При цьому, якщо покласти  $a_{ef}^{(0)} = 0$  (нерозпадна речовина), то одержимо відомий вираз [76, 95].



## 2.2. Математична модель дифузії за каскадного розпаду домішкових частинок у тілі з ефективними характеристиками

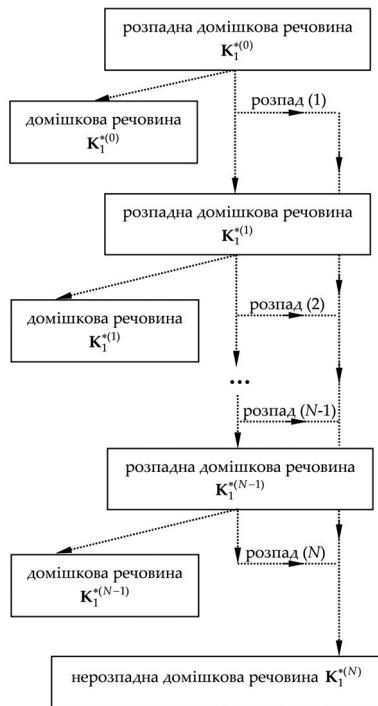


Рис. 2.2. Схема розпаду домішкової речовини, яка дифундує в середовищі з ефективними характеристиками

Знайдемо розв'язок крайової задачі дифузії (2.6б), (2.7), (2.8б) для  $i=1$ . Запишемо вираз для концентрації  $c_{ef}^{(1)}(\xi, \tau)$  у вигляді розкладу в ряд Фур'є:

$$c_{ef}^{(1)}(\xi, \tau) = \sum_{k=1}^{\infty} \tilde{f}_k(k, \tau) \sin y_k \xi. \quad (2.10)$$

Оскільки рівняння (2.6б) містить функцію  $c_{ef}^{(0)}(\xi, \tau)$ , запишемо її розклад в ряд по  $\sin y_k \xi$ :

$$c_{ef}^{(0)}(\xi, \tau) = 2c_0 \sum_{k=1}^{\infty} \sin y_k \xi \left[ \frac{1}{k\pi} - \frac{a_{ef}^{(0)}}{k\pi(d_{ef}^{(0)}y_k^2 + a_{ef}^{(0)})} - \frac{y_k^2 e^{-\left(a_{ef}^{(0)}y_k^2 + a_{ef}^{(0)}\right)\tau}}{y_k^2 + \eta^2} \right]$$

і підставимо в рівняння дифузії (2.6б). Тоді отримаємо

$$\begin{aligned} \frac{d\tilde{f}_k}{d\tau} &= -\left(d_{ef}^{(1)}y_k^2 + a_{ef}^{(1)}\right)\tilde{f}_k + \\ &+ 2c_0a_{\lambda e}^{(0)}\left[\frac{1}{k\pi} - \frac{a_{ef}^{(0)}}{k\pi(d_{ef}^{(0)}y_k^2 + a_{ef}^{(0)})} - \frac{y_k^2 e^{-\left(d_{ef}^{(0)}y_k^2 + a_{ef}^{(0)}\right)\tau}}{y_k^2 + \eta^2}\right], \\ \tilde{f}_k(\tau) \Big|_{\tau=0} &= 0. \end{aligned}$$

До отриманої задачі застосуємо інтегральне перетворення Лапласа  $\tilde{f}_k(s) = L[\tilde{f}_k(\tau)]$ , де  $s$  - параметр перетворення Лапласа [65]. Тоді в зображеннях одержимо алгебраїчне рівняння

$$\begin{aligned} \left(s + d_{ef}^{(1)}y_k^2 + a_{ef}^{(1)}\right)\bar{f}_k &= 2c_0a_{\lambda e}^{(0)}\left\{\left[\frac{1}{k\pi} - \frac{a_{ef}^{(0)}}{k\pi(d_{ef}^{(0)}y_k^2 + a_{ef}^{(0)})}\right]\frac{1}{s} - \right. \\ &\left. - \frac{y_k^2}{(y_k^2 + \eta^2)(s + d_{ef}^{(0)}y_k^2 + a_{ef}^{(0)})}\right\}. \end{aligned}$$

Звідси знаходимо

$$\begin{aligned} \bar{f}_k &= \frac{2c_0a_{\lambda e}^{(0)}}{s + d_{ef}^{(1)}y_k^2 + a_{ef}^{(1)}}\left\{\left[\frac{1}{k\pi} - \frac{a_{ef}^{(0)}}{k\pi(d_{ef}^{(0)}y_k^2 + a_{ef}^{(0)})}\right]\frac{1}{s} - \right. \\ &\left. - \frac{y_k^2}{(y_k^2 + \eta^2)(s + d_{ef}^{(0)}y_k^2 + a_{ef}^{(0)})}\right\}. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Знайдемо обернене перетворення Лапласа виразу (2.11). Використовуючи відомі формули [66]

$$L^{-1}\left[\frac{1}{s(s+a)}\right] = \frac{1}{a}\{e^{-a\tau} - 1\},$$

$$L^{-1}\left[\frac{1}{(s+a)(s+b)}\right] = \frac{1}{b-a}\{e^{-a\tau} - e^{-b\tau}\}, \quad (2.12)$$



одержимо

$$\tilde{f}_k = 2c_0 a_{\lambda e}^{(0)} \left\{ \frac{1}{k\pi} \left[ 1 - \frac{a_{ef}^{(0)}}{d_{ef}^{(0)} y_k^2 + a_{ef}^{(0)}} \right] e^{-\left(d_{ef}^{(1)} y_k^2 + a_{ef}^{(1)}\right)\tau} - 1 - \frac{y_k^2}{y_k^2 + \eta^2} \frac{e^{-\left(d_{ef}^{(1)} y_k^2 + a_{ef}^{(1)}\right)\tau} - e^{-\left(d_{ef}^{(0)} y_k^2 + a_{ef}^{(0)}\right)\tau}}{(d_{ef}^{(0)} - d_{ef}^{(1)}) y_k^2 + a_{ef}^{(0)} - a_{ef}^{(1)}} \right\}.$$

За формулою (2.10) знайдемо концентрацію  $c_{ef}^{(1)}(\xi, \tau)$ :

$$c_{ef}^{(1)}(\xi, \tau) = 2c_0 a_{\lambda e}^{(0)} \sum_{k=1}^{\infty} \sin y_k \xi \left\{ \frac{1}{k\pi} \left[ 1 - \frac{a_{ef}^{(0)}}{d_{ef}^{(0)} y_k^2 + a_{ef}^{(0)}} \right] e^{-\left(d_{ef}^{(1)} y_k^2 + a_{ef}^{(1)}\right)\tau} - 1 - \frac{y_k^2}{y_k^2 + \eta^2} \frac{e^{-\left(d_{ef}^{(1)} y_k^2 + a_{ef}^{(1)}\right)\tau} - e^{-\left(d_{ef}^{(0)} y_k^2 + a_{ef}^{(0)}\right)\tau}}{(d_{ef}^{(0)} - d_{ef}^{(1)}) y_k^2 + a_{ef}^{(0)} - a_{ef}^{(1)}} \right\}.$$

Підсумуємо асимптотичні доданки отриманої формулі

$$S = \sum_{k=1}^{\infty} \sin y_k \xi \frac{1}{k\pi} \left[ 1 - \frac{a_{ef}^{(0)}}{d_{ef}^{(0)} y_k^2 + a_{ef}^{(0)}} \right] \frac{1}{d_{ef}^{(1)} y_k^2 + a_{ef}^{(1)}}. \quad (2.13)$$

Суму першого з них знайдемо, використавши відому формулу [53]

$$S_1 = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k\pi} \frac{\sin y_k \xi}{d_{ef}^{(1)} y_k^2 + a_{ef}^{(1)}} = \frac{a_{ef}^{(1)}}{2d_{ef}^{(1)}} \left[ 1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\operatorname{sh} \eta_1 (\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \eta_1 \xi_0} \right],$$

де  $\eta_1 = \sqrt{a_{ef}^{(1)} / d_{ef}^{(1)}}$ .

У другому доданку (2.13)

$$S_2 = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k\pi} \frac{a_{ef}^{(0)} \sin y_k \xi}{\left(d_{ef}^{(1)} y_k^2 + a_{ef}^{(1)}\right) \left(d_{ef}^{(0)} y_k^2 + a_{ef}^{(0)}\right)},$$

розвкладемо вираз типу  $\frac{1}{(k^2 + \bar{\eta}_1^2)(k^2 + \bar{\eta}^2)}$  на прості дроби:

**Розділ 2.** Крайові задачі моделей дифузії, невзаємодіючих потоків і дифузії у тілі з пастками за каскадного розпаду домішкових речовин

---

$$\begin{aligned} \frac{1}{(k^2 + \bar{\eta}_1^2)(k^2 + \bar{\eta}^2)} &= \frac{Ak + B}{k^2 + \bar{\eta}_1^2} + \frac{Ck + D}{k^2 + \bar{\eta}^2} = \\ &= \frac{(A + C)k^3 + (B + D)k^2 + (A\bar{\eta}^2 + C\bar{\eta}_1^2)k + B\bar{\eta}^2 + D\bar{\eta}_1^2}{(k^2 + \bar{\eta}_1^2)(k^2 + \bar{\eta}^2)}. \end{aligned}$$

Звідси маємо  $A + C = 0$ ;  $B + D = 0$ ;  $A\bar{\eta}^2 + C\bar{\eta}_1^2 = 0$ ;  $B\bar{\eta}^2 + D\bar{\eta}_1^2 = 1$ .

Тоді знаходимо

$$A = C = 0; \quad B = \frac{1}{\bar{\eta}^2 - \bar{\eta}_1^2}; \quad D = \frac{-1}{\bar{\eta}^2 - \bar{\eta}_1^2}.$$

Вираз для  $S_2$  запишемо у вигляді

$$S_2 = \frac{a_{ef}^{(0)}}{d_{ef}^{(0)} d_{ef}^{(1)} (\bar{\eta}^2 - \bar{\eta}_1^2)} \left\{ \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\sin y_k \xi}{k(k^2 + \bar{\eta}_1^2)} - \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\sin y_k \xi}{k(k^2 + \bar{\eta}^2)} \right\},$$

$$\text{де } \bar{\eta} = \frac{\xi_0}{\pi} \eta, \quad \bar{\eta}_1 = \frac{\xi_0}{\pi} \eta_1.$$

Використовуючи відомі формули для сумування рядів [53], маємо

$$S_2 = \frac{a_{ef}^{(0)}}{2d_{ef}^{(0)} d_{ef}^{(1)} (\eta^2 - \eta_1^2)} \left\{ \frac{\operatorname{sh} \eta(\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \eta \xi_0} - \frac{\operatorname{sh} \eta_1(\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \eta_1 \xi_0} \right\}.$$

І остаточно отримаємо вираз для концентрації частинок для етапу  $i = 1$

$$\begin{aligned} \frac{1}{c_0} c_{ef}^{(1)}(\xi, \tau) &= a_{ef}^{(1)} \left[ \frac{a_{ef}^{(0)}}{2d_{ef}^{(0)} d_{ef}^{(1)} (\eta^2 - \eta_1^2)} \left\{ \frac{\operatorname{sh} \eta(\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \eta \xi_0} - \frac{\operatorname{sh} \eta_1(\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \eta_1 \xi_0} \right\} - \right. \\ &\quad \left. - \eta_1^2 \left\{ 1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\operatorname{sh} \eta_1(\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \eta_1 \xi_0} \right\} + \frac{2}{\xi_0} \sum_{k=1}^{\infty} \sin y_k \xi \left\{ \left( 1 - \frac{a_{ef}^{(0)}}{b_k^{(0)}} \right) \frac{1 - e^{-b_k^{(1)} \tau}}{y_k b_k^{(1)}} - \right. \right. \\ &\quad \left. \left. - \frac{y_k^2}{y_k^2 + \eta^2} \frac{e^{-b_k^{(1)} \tau} - e^{-b_k^{(0)} \tau}}{b_k^{(0)} - b_k^{(1)}} \right\} \right], \end{aligned} \tag{2.14}$$

$$\text{де } b_k^{(0)} = d_{ef}^{(0)} y_k^2 + a_{ef}^{(0)}, \quad b_k^{(1)} = d_{ef}^{(1)} y_k^2 + a_{ef}^{(1)}.$$



В стаціонарному режимі вираз для концентрації частинок (2.14) зводиться до наступного

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{c_0} c_{ef}^{(1)}(\xi, \tau) = \frac{a_{ef}^{(0)} a_{ef}^{(1)}}{2d_{ef}^{(0)} d_{ef}^{(1)}(\eta^2 - \eta_1^2)} \left\{ \frac{\operatorname{sh} \eta(\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \eta \xi_0} - \frac{\operatorname{sh} \eta_1(\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \eta_1 \xi_0} \right\} - \\ - a_{ef}^{(1)} \eta_1^2 \left\{ 1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\operatorname{sh} \eta_1(\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \eta_1 \xi_0} \right\}. \quad (2.14a)$$

У загальному випадку для  $i = 2, \dots, N-1$  розв'язок крайової задачі (2.6б), (2.7), (2.8б) подамо через функцію Гріна [13]

$$c_{ef}^{(i)}(\xi, \tau) = a_{\lambda e}^{(i)} \int_0^{\xi_0} G^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') c_{ef}^{(i-1)}(\xi', \tau') d\xi' d\tau', \quad (2.15)$$

де  $G^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')$  - функція Гріна задачі (2.6б), (2.7), (2.8б) для  $i = 2, \dots, N-1$ , тобто є розв'язком відповідної задачі дифузії з точкового джерела на  $i$ -му кроці розпаду за нульових крайових умов, а саме

$$\frac{\partial G^{(i)}}{\partial \tau} - d_{ef}^{(i)} \frac{\partial^2 G^{(i)}}{\partial \xi^2} + a_{ef}^{(i)} G^{(i)} = \delta(\tau - \tau') (\xi - \xi'); \quad (2.16)$$

$$G^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') \Big|_{\tau=0} = G^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') \Big|_{\xi=0} = G^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') \Big|_{\xi=\xi_0} = 0, \quad i = \overline{2, N-1}. \quad (2.17)$$

Тут  $\delta(x)$  - дельта-функція Дірака [35].

Для знаходження розв'язку задачі (2.16), (2.17) застосуємо перетворення Лапласа за часом  $g^{(i)}(\xi, \xi'; s, \tau) = L[G^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')] :$

$$\left( s + a_{ef}^{(1)} \right) g^{(i)} - d_{ef}^{(i)} \frac{\partial^2 g^{(i)}}{\partial \xi^2} = e^{-s\tau} \delta(\xi - \xi');$$

$$g^{(i)}(\xi, \xi'; s, \tau) \Big|_{\xi=0} = g^{(i)}(\xi, \xi'; s, \tau) \Big|_{\xi=\xi_0} = 0, \quad i = \overline{2, N-1}.$$

Якщо до одержаної задачі застосувати скінченне інтегральне sin-перетворення Фур'є [65]  $\bar{g}^{(i)}(y_n, \xi'; s, \tau) = F[g^{(i)}(\xi, \xi'; s, \tau)]$ ,  $y_n = n\pi/\xi_0$ , то в зображеннях отримаємо рівняння

$$\left( s + d_{ef}^{(i)} y_n^2 + a_{ef}^{(i)} \right) \bar{g}^{(i)}(y_n, \xi'; s, \tau') = e^{-s\tau'} \sin y_n \xi'.$$

Звідси

$$\bar{g}^{(i)}(y_n, \xi'; s, \tau') = \frac{e^{-s\tau'} \sin y_n \xi'}{s + d_{ef}^{(i)} y_n^2 + a_{ef}^{(i)}}.$$

Для оберненого перетворення Лапласа використаємо формулу

$$L^{-1}\left[ \frac{1}{s+a} \right] = e^{-a\tau} \quad (2.18)$$

і теорему запізнювання [66]. Тоді одержимо

$$g^{(i)}(y_n, \xi'; \tau, \tau') = \theta(\tau - \tau') \sin(y_n \xi') e^{-(d_{ef}^{(i)} y_n^2 + a_{ef}^{(i)}) (\tau - \tau')}.$$

Тут  $\theta(\tau - \tau')$  - одинична сходинкова функція Хевісайда [35].

Після застосування оберненого sin-перетворення Фур'є отримаємо формулу для визначення функції Гріна на  $i$ -му кроці розпаду ( $i=2, \dots, N-1$ ):

$$G^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') = \theta(\tau - \tau') \sum_{n=1}^{\infty} \sin(y_n \xi) \sin(y_n \xi') e^{-(d_{ef}^{(i)} y_n^2 + a_{ef}^{(i)}) (\tau - \tau')} \quad (2.19)$$

Отже, знайшовши функцію Гріна за формулою (2.19) і визначивши концентрацію розпадних домішкових частинок на кроці  $i-1$ , за співвідношенням (2.15) ми знайдемо концентрацію розпадної речовини на  $i$ -му етапі.

Для випадку  $i=N$  (нерозпадні або нешкідливі домішки) процес масоперенесення описується крайовою задачею (2.6в), (2.7), (2.8б). Її розв'язок також подамо через відповідну функцію Гріна аналогічно до (2.15)

$$c_{ef}^{(N)}(\xi, \tau) = \int_0^{\tau} \int_0^{\xi_0} G^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda e}^{(iN)} c_{ef}^{(i)}(\xi', \tau') d\xi' d\tau', \quad (2.20)$$

де  $G^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')$  - функція Гріна задачі (2.6в), (2.7), (2.8б) і задовільняє відповідну крайову задачу з точковим джерелом



$$\frac{\partial G^{(N)}}{\partial \tau} - d_{ef}^{(N)} \frac{\partial^2 G^{(N)}}{\partial \xi^2} = \delta(\tau - \tau') (\xi - \xi'); \quad (2.21)$$

$$G^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') \Big|_{\tau=0} = G^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') \Big|_{\xi=0} = G^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') \Big|_{\xi=\xi_0} = 0. \quad (2.22)$$

Розв'язок крайової задачі (2.21), (2.22) має вигляд

$$G^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') = \theta(\tau - \tau') \sum_{n=1}^{\infty} \sin(y_n \xi) \sin(y_n \xi') e^{-d_{ef}^{(N)} y_n^2 (\tau - \tau')}. \quad (2.23)$$

Тоді, послідовно визначивши концентрації  $c_{ef}^{(0)}(\xi, \tau)$ ,  $c_{ef}^{(1)}(\xi, \tau)$ , ...,  $c_{ef}^{(N-1)}(\xi, \tau)$ , за формулою (2.20) з урахуванням виразу (2.23) знайдемо концентрацію нерозпадних або нешкідливих домішкових частинок у тілі.

### 2.2.2. Потоки маси розпадних домішкових речовин

В одновимірному за просторовою координатою випадку потоки маси частинок, що розпадаються, через переріз тіла  $\xi = \xi_*$  знайдемо за формулою

$$J_{*e}^{(i)}(\tau) = -d_{ef}^{(i)} \frac{\partial c_{ef}^{(i)}(\xi, \tau)}{\partial \xi} \Bigg|_{\xi=\xi_*}, \quad i = \overline{0; N}. \quad (2.24)$$

Підставляємо вирази для концентрацій  $c_{ef}^{(i)}(\xi, \tau)$  (2.9), (2.14), (2.15), (2.20) у співвідношення (2.24). Тоді отримаємо для  $i = 0$

$$\frac{1}{c_0 d_{ef}^{(0)}} J_{*e}^{(0)}(\tau) = \frac{1}{\xi_0} + \eta^2 \left[ \frac{1}{\xi_0} - \eta \frac{\operatorname{ch} \eta(\xi_0 - \xi_*)}{\operatorname{sh} \eta \xi_0} \right] + \frac{2}{\xi_0} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\cos y_k \xi_*}{y_k^2 + \eta^2} y_k^2 e^{-b_k^{(0)} \tau}; \quad (2.25a)$$

для  $i = 1$

$$\begin{aligned} \frac{1}{c_0 d_{ef}^{(1)} a_{ef}^{(1)}} J_{*e}^{(1)}(\tau) &= \frac{a_{ef}^{(0)}}{d_{ef}^{(0)} d_{ef}^{(1)} (\eta^2 - \eta_1^2)} \left[ \eta \frac{\operatorname{ch} \eta(\xi_0 - \xi_*)}{\operatorname{sh} \eta \xi_0} - \eta_1 \frac{\operatorname{ch} \eta_1(\xi_0 - \xi_*)}{\operatorname{sh} \eta_1 \xi_0} \right] - \\ &- \eta_1^2 \left[ \frac{1}{\xi_0} - \eta_1 \frac{\operatorname{ch} \eta_1(\xi_0 - \xi_*)}{\operatorname{sh} \eta_1 \xi_0} \right] + \frac{2}{\xi_0} \sum_{k=1}^{\infty} \cos y_k \xi_* \left[ \left( 1 + \frac{a_{ef}^{(0)}}{b_k^{(0)}} \right) \frac{1 - e^{-b_k^{(1)} \tau}}{b_k^{(1)}} + \right. \end{aligned}$$

**Розділ 2. Крайові задачі моделей дифузії, невзаємодіючих потоків і дифузії у тілі з пастками за каскадного розпаду домішкових речовин**

---

$$+ \frac{1}{b_k^{(0)} - b_k^{(1)}} \frac{y_k^2}{y_k^2 + \eta^2} \left( e^{-b_k^{(1)}\tau} - e^{-b_k^{(0)}\tau} \right) \Bigg] \Bigg\}; \quad (2.25\delta)$$

для  $i = 2, \dots, N-1$

$$J_{*e}^{(i)}(\tau) = -a_{ef}^{(i)} d_{ef}^{(i)} \int_0^\tau \int_0^{\xi_0} \frac{\partial G^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Bigg|_{\xi=\xi_*} c_{ef}^{(i-1)}(\xi', \tau') d\xi' d\tau', \quad (2.25\text{в})$$

$$\frac{\partial G^{(i)}}{\partial \xi} \Bigg|_{\xi=\xi_*} = \theta(\tau - \tau') \sum_{n=1}^{\infty} y_n \cos(y_n \xi_*) \sin(y_n \xi') e^{-(d_{ef}^{(i)} y_n^2 + a_{ef}^{(i)}) (\tau - \tau')};$$

для  $i = N$

$$J_{*e}^{(N)}(\tau) = -d_{ef}^{(N)} \int_0^\tau \int_0^{\xi_0} \frac{\partial G^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Bigg|_{\xi=\xi_*} \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda e}^{(iN)} c_{ef}^{(i)}(\xi', \tau') d\xi' d\tau', \quad (2.25\text{г})$$

$$\frac{\partial G^{(N)}}{\partial \xi} \Bigg|_{\xi=\xi_*} = \theta(\tau - \tau') \sum_{n=1}^{\infty} y_n \cos(y_n \xi_*) \sin(y_n \xi') e^{-d_{ef}^{(N)} y_n^2 (\tau - \tau')}.$$

Запишемо також вирази для потоків розпадних речовин через нижню границю шару  $\xi = \xi_0$  як частковий випадок формул (2.25):

для  $i = 0$

$$\frac{J_{0e}^{(0)}(\tau)}{c_0 d_{ef}^{(0)}} = \frac{1}{\xi_0} + \eta^2 \left[ \frac{1}{\xi_0} - \frac{\eta}{\operatorname{sh} \eta \xi_0} \right] + \frac{2}{\xi_0} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k y_k^2}{y_k^2 + \eta^2} e^{-b_k^{(0)} \tau}; \quad (2.26\text{а})$$

для  $i = 1$

$$\begin{aligned} \frac{J_{0e}^{(1)}(\tau)}{c_0 d_{ef}^{(1)} a_{ef}^{(1)}} &= \frac{a_{ef}^{(0)}}{d_{ef}^{(0)} d_{ef}^{(1)} (\eta^2 - \eta_1^2)} \left\{ \left[ \frac{\eta}{\operatorname{sh} \eta \xi_0} - \frac{\eta_1}{\operatorname{sh} \eta_1 \xi_0} \right] - \eta_1^2 \left[ \frac{1}{\xi_0} - \frac{\eta_1}{\operatorname{sh} \eta_1 \xi_0} \right] + \right. \\ &+ \left. \frac{2}{\xi_0} \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \left[ \left( 1 + \frac{a_{ef}^{(0)}}{b_k^{(0)}} \right) \frac{1 - e^{-b_k^{(1)} \tau}}{b_k^{(1)}} + \frac{1}{b_k^{(0)} - b_k^{(1)}} \frac{y_k^2}{y_k^2 + \eta^2} \left( e^{-b_k^{(1)} \tau} - e^{-b_k^{(0)} \tau} \right) \right] \right\}; \end{aligned} \quad (2.26\delta)$$



для  $i = 2, \dots, N - 1$  справджується формула (2.25в), в якій

$$\left. \frac{\partial G^{(i)}}{\partial \xi} \right|_{\xi=\xi_0} = \theta(\tau - \tau') \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n y_n \sin(y_n \xi') e^{-\left(d_{ef}^{(i)} y_n^2 + a_{ef}^{(i)}\right)(\tau - \tau')} ; \quad (2.26v)$$

для  $i = N$  справджується формула (2.25г), в якій

$$\left. \frac{\partial G^{(N)}}{\partial \xi} \right|_{\xi=\xi_0} = \theta(\tau - \tau') \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n y_n \sin(y_n \xi') e^{-d_{ef}^{(N)} y_n^2 (\tau - \tau')} . \quad (2.26g)$$

### 2.2.3. Кількість розпадних речовин, що пройшли через нижню границю шару за час $\tau_*$

Певний інтерес представляють величини

$$Q_{0e}^{(i)} = \int_0^{\tau_*} J_{0e}^{(i)}(\tau) d\tau, \quad i = \overline{0, N}, \quad (2.27)$$

які визначають кількість розпадної домішкової речовини, що за час  $\tau_*$  пройшла через одиницю площини поверхні  $\xi = \xi_0$ . Підставляючи вирази для потоків (2.26) у формули (2.27), відповідно отримаємо

для  $i = 0$

$$\frac{Q_{0e}^{(0)}}{c_0 d_{ef}^{(0)}} = \left( \frac{1}{\xi_0} + \eta^2 \left[ \frac{1}{\xi_0} - \frac{\eta}{\operatorname{sh} \eta \xi_0} \right] \right) \tau_* + \frac{2}{\xi_0} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k y_k^2}{(y_k^2 + \eta^2) b_k^{(0)}} \left[ 1 - e^{-b_k^{(0)} \tau_*} \right]; \quad (2.28a)$$

для  $i = 1$

$$\begin{aligned} \frac{Q_{0e}^{(1)}}{c_0 d_{ef}^{(1)} a_{ef}^{(1)}} &= \frac{a_{ef}^{(0)}}{d_{ef}^{(0)} d_{ef}^{(1)} (\eta^2 - \eta_1^2)} \left\{ \left[ \frac{\eta}{\operatorname{sh} \eta \xi_0} - \frac{\eta_1}{\operatorname{sh} \eta_1 \xi_0} \right] \tau_* - \eta_1^2 \left[ \frac{1}{\xi_0} - \frac{\eta_1}{\operatorname{sh} \eta_1 \xi_0} \right] \tau_* + \right. \\ &+ \frac{2}{\xi_0} \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \left[ \left( 1 + \frac{a_{ef}^{(0)}}{b_k^{(0)}} \right) \frac{b_k^{(1)} \tau_* - 1 + e^{-b_k^{(1)} \tau_*}}{b_k^{(1)2}} + \right. \\ &\left. \left. + \frac{1}{b_k^{(0)} b_k^{(1)}} \frac{y_k^2}{y_k^2 + \eta^2} \left( 1 + \frac{b_k^{(1)} e^{-b_k^{(0)} \tau_*} - b_k^{(0)} e^{-b_k^{(1)} \tau_*}}{b_k^{(0)} - b_k^{(1)}} \right) \right] \right\}; \quad (2.28b) \end{aligned}$$

для  $i = 2, \dots, N - 1$

$$Q_{0e}^{(i)} = -a_{ef}^{(i)} d_{ef}^{(i)} \int_0^{\tau_*} \left( \int_0^\tau \int_0^{\xi_0} \frac{\partial G^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \right|_{\xi=\xi_0} c_{ef}^{(i-1)}(\xi', \tau') d\xi' d\tau' \right) d\tau, \quad (2.28\text{в})$$

для  $i = N$

$$Q_{0e}^{(N)}(\tau) = -d_{ef}^{(N)} \int_0^{\tau_*} \left( \int_0^\tau \int_0^{\xi_0} \frac{\partial G^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \right|_{\xi=\xi_0} \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda e}^{(iN)} c_{ef}^{(i)}(\xi', \tau') d\xi' d\tau' \right) d\tau. \quad (2.28\text{г})$$

#### 2.2.4. Числовий аналіз дифузії у середовищі з пастками

На основі формул (2.9), (2.15), (2.20), а також розв'язків крайових задач (2.16), (2.17) і (2.21), (2.22), тобто співвідношень (2.19) і (2.23), розроблений програмний комплекс для комп'ютерного моделювання процесів дифузії за каскадного розпаду мігруючих частинок.

Зазначимо, що підінтегральні функції (2.15) і (2.20) не мають стрибків та нескінченностей, і інтегрування відбувається по обмеженій області. Приклади поверхонь, які утворює функція Гріна (2.19) на кроці  $i = 1$ , наведені на рис. 2.3 в точках  $(\xi, \tau) = (0.125; 0.125)$  (рис. а),  $(\xi, \tau) = (1.375; 5.375)$  (рис. б),  $(\xi, \tau) = (2.375; 9.875)$  (рис. с) при таких значеннях параметрів задачі  $d^{(1)} = 0.3$ ,  $a^{(1)} = 0.2$ ,  $a_{\lambda e} = 0.8$ ,  $\xi_0 = 10$ . Вздовж осі абсцис відкладена просторова координата  $\xi'$ , вздовж осі ординат – часова  $\tau'$ . Підінтегральна функція (2.15) має подібні до функції Гріна (2.19) розподіли, незначно відрізняючись характером спадання.

На рис. 2.4-2.8 наведено характерні розподіли концентрацій домішкової речовини за товщиною та поверхні  $c^{(1)}(\xi, \tau)/c_0$  на площині  $O\xi\tau$ . За базові параметри прийнято  $a^{(1)} = 0.2$ ,  $a_{\lambda}^{(0)} = 0.8$ ,  $\xi_0 = 10$ , при цьому  $d^{(0)} \equiv 1$ ,  $a^{(0)} \equiv 1$ .



## 2.2. Математична модель дифузії за каскадного розпаду домінкових частинок у тілі з ефективними характеристиками

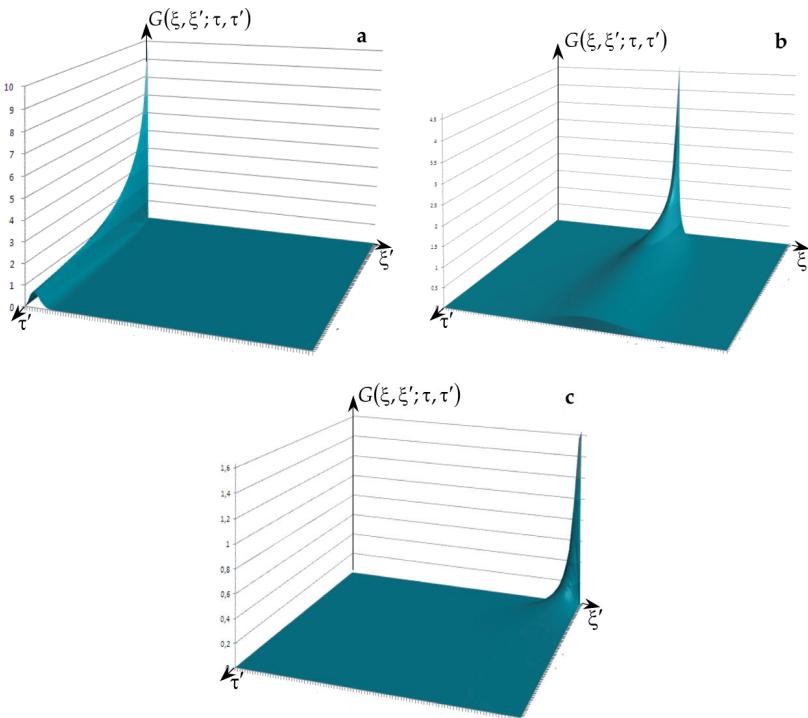


Рис. 2.3. Функція Гріна на кроці  $i=1$

Рис. 2.4 показує розподіли концентрацій розпадних частинок на кроці  $i=0$ , обчисленої за формулою (2.9),  $c^{(0)}(\xi, \tau)/c_0$  (рис. а) і на кроці  $i=1$ , розрахованої за формулою (2.15),  $c^{(1)}(\xi, \tau)/c_0$  (рис. б) в різні моменти безрозмірного часу. Криві 1-6 на рис. а відповідають моментам часу  $\tau = 0.05; 0.125; 0.6; 0.9; 2.5; 5$ , криві 1-8 на рис. б -  $\tau = 0.125; 0.6; 0.9; 2.5; 18; 25; 300; 400$ . На рис. 2.5 наведені порівняльні розподіли концентрації  $c^{(1)}(\xi, \tau)/c_0$  для різних значень відношення коефіцієнтів дифузії  $d^{(1)} = 0.01; 0.1; 0.5; 2; 5; 10$  (криві 1-6), а на рис. 2.6 – для різних значень  $a^{(1)} = 0.1; 0.2; 0.4; 0.5; 0.7$  в момент часу  $\tau = 0.125$ . На рис. 2.7 показані графіки функції  $c^{(1)}(\xi, \tau)/c_0$  в залежності від значення безрозмірного коефіцієнта  $a_\lambda^{(0)}$ , який визначає частку речовини  $K^{(0)}$ ,

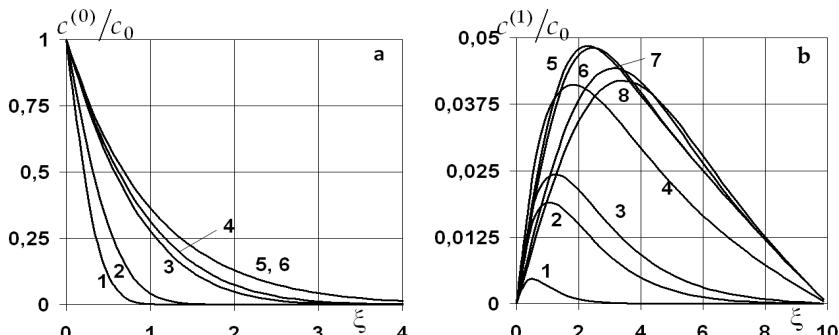


Рис. 2.4. Розподіли концентрацій  $c^{(0)}(\xi, \tau)/c_0$  (рис. а) та  $c^{(1)}(\xi, \tau)/c_0$  (рис. б)

яка розпалась і потрапила на крок  $i=1$ . Тут криві 1-5 відповідають значенням  $a_{\lambda e} = 0.25; 0.4; 0.6; 0.8; 0.95$  для малих (рис. а) і великих (рис. б) значень відношень коефіцієнтів дифузії.

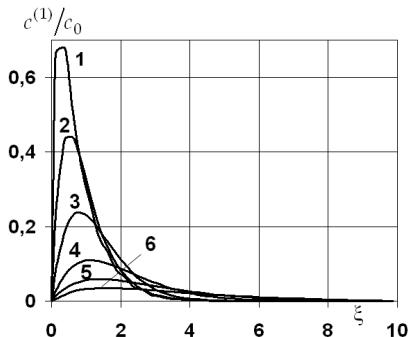


Рис. 2.5. Розподіли концентрацій  $c^{(1)}(\xi, \tau)/c_0$  для різних значень відношення коефіцієнтів дифузії  $a^{(1)}$

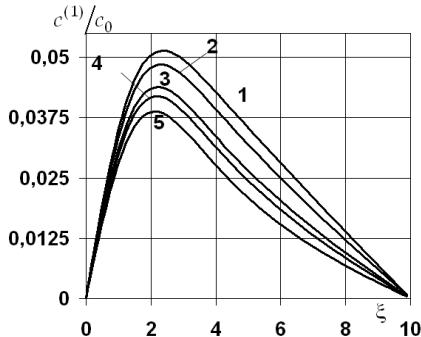


Рис. 2.6. Розподіли концентрацій  $c^{(1)}(\xi, \tau)/c_0$  для різних значень  $a^{(1)}$

Зауважимо, що функція концентрації  $c^{(0)}(\xi, \tau)/c_0$  є монотонно спадною на всьому проміжку (рис. 2.4а), зростаючи з часом доки не вийде на усталений режим (криві 5, 6 на рис. 2.4а). Стационарний розподіл концентрації на 0-му кроці розпаду суттєво відрізняється від лінійного, що характерно для нерозпадної мігруючої речовини. У випадку розподілів  $c^{(1)}(\xi, \tau)/c_0$  спостерігається приповерхневе зростання функції (крива 1 на рис. 2.4б), максимум якої з часом зростає і зсувається вглиб тіла (криві 1-5



на рис. 2.4б). З подальшим збільшенням часу протікання процесу дифузії концентрація  $c^{(1)}(\xi, \tau)/c_0$  зменшується, що обумовлюється розпадом вже речовини  $\mathbf{K}^{(1)}$  (криві 6-8 на рис. 2.4б). При цьому максимум функції продовжує зсуватись у глиб тіла. Така поведінка функції  $c^{(1)}(\xi, \tau)/c_0$  характерна до її виходу на усталений режим (безрозмірний час  $\tau = 400$ , крива 8 на рис. 2.4б, є близьким до стаціонарного). Відзначимо, що часи виходу на стаціонарний режим функції концентрацій на 0-му і 1-му кроках розпаду різняться на 2 порядки.

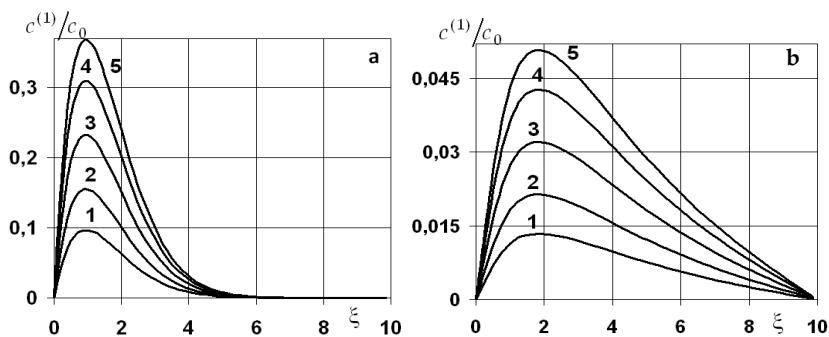


Рис. 2.7. Розподіли концентрації  $c^{(1)}(\xi, \tau)/c_0$  для різних значень  $a_\lambda^{(0)}$  при  $d^{(1)} = 0,5$  (рис. а) та  $d^{(1)} = 10$  (рис. б)

Коефіцієнт дифузії речовини  $\mathbf{K}^{(1)}$  може бути як більшим, так і меншим за коефіцієнт дифузії домішки  $\mathbf{K}^{(0)}$ , тобто можливі випадки  $d^{(1)} > 1$  і  $d^{(1)} < 1$ . При цьому чим менше відношення коефіцієнтів дифузії  $d^{(1)}$ , тим більшого максимуму досягає концентрація частинок на кроці  $i = 1$  (крива 1 на рис. 2.5а) і тим більше до поверхні шару, де діє джерело маси речовини  $\mathbf{K}^{(0)}$ , відбувається локалізація розпадних частинок речовини  $\mathbf{K}^{(1)}$ . Зміна безрозмірних коефіцієнтів розпаду  $a_\lambda^{(0)}$ ,  $a^{(1)}$  впливає тільки на значення функції концентрації  $c^{(1)}(\xi, \tau)/c_0$ , не змінюючи її поведінку (рис. 2.6, 2.7). При цьому її значення зростають пропорційно до збільшення коефіцієнта  $a_\lambda^{(0)}$  (рис. 2.7) і зменшуються при зростанні коефіцієнта  $a^{(1)}$ , який характеризує інтенсивність розпаду речовини  $\mathbf{K}^{(1)}$  по відношенню до інтенсивності розпаду частинок  $\mathbf{K}^{(0)}$  (рис. 2.6).

Рис. 2.8 ілюструють характерні 3D-розподіли концентрації  $c^{(1)}(\xi, \tau)/c_0$  на площині  $O\xi\tau$  на малому  $\tau \in [0; 10]$  і великому  $[0; 200]$  часових проміжках протікання процесу розпадної дифузії домішки  $K^{(1)}$ , джерелом якої є розпад речовини  $K^{(0)}$ .

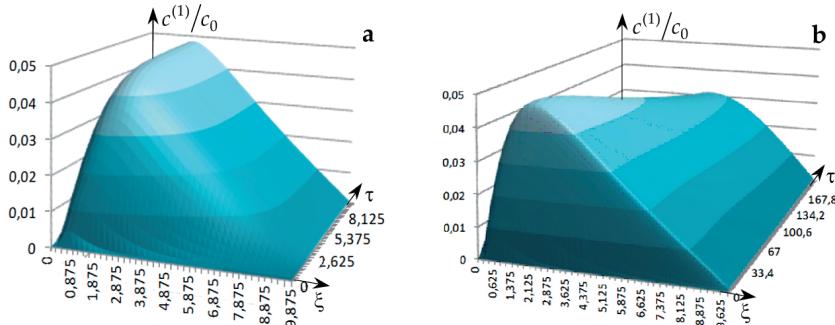


Рис. 2.8. Поверхні розподілів концентрації  $c^{(1)}(\xi, \tau)/c_0$  на різних часових проміжках протікання процесу дифузії  $\tau_{\max} = 10$  (рис.а) та  $\tau_{\max} = 200$  (рис.б)

На наступному  $i = 2$  і на подальших кроках каскадного розпаду концентрації  $c^{(i)}(\xi, \tau)$  приймають дедалі менші значення. Проте поведінка цих функцій аналогічна до  $c^{(1)}(\xi, \tau)$ , продемонстрована на рис. 2.4б, 2.5-2.9.

На рис. 2.9 подані розподіли потоків розпадних частинок  $J_*^{(0)}(\tau)$  на кроці розпаду  $i = 0$  (рис. а) і  $J_*^{(1)}(\tau)$  на етапі  $i = 1$  (рис. б) через різні перерізи  $\xi_* = 0.75; 1; 1.5; 2; 3; 5; 10$  (криві 1-7, відповідно).

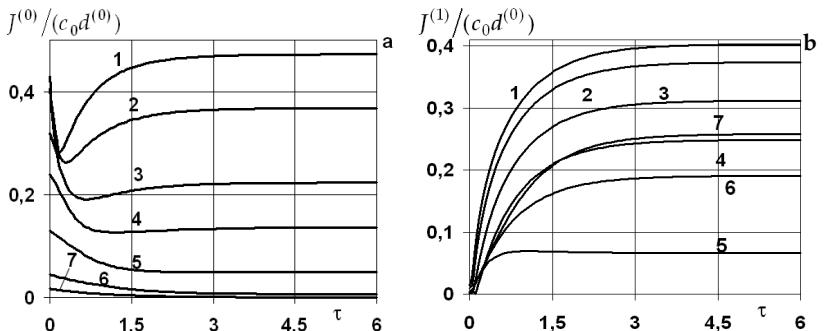


Рис. 2.9. Розподіли потоків розпадних частинок  $J_*^{(0)}(\tau)$  (рис.а) і  $J_*^{(1)}(\tau)$  (рис.б)



Зазначимо, що для  $i = 0$  чим даліше від поверхні тіла, де діє джерело маси, знаходиться поверхня  $\xi = \xi_*$ , тим менших значень досягають дифузійні потоки  $J_*^{(0)}(\tau)$  через цей переріз (рис. 2.9а). На кроці розпаду  $i = 0$  від початку процесу дифузії відбувається суттєве зниження інтенсивності потоків маси (рис. 2.9а) в усьому тілі. Проте в околі поверхні  $\xi = 0$  функція  $J_*^{(0)}(\tau)$ , досягши свого мінімуму, починає зростати доки на вийде на стаціонарний режим (криві 1-3, рис. 2.9а). На більших глибинах досягнення мінімальних значень відбувається пізніше, причому цей мінімум відповідає стаціональному значенню потоку  $J_*^{(0)}(\tau)$  (криві 5-7, рис. 2.9а).

Для кроку розпаду  $i = 1$  характерне значне зростання значень потоку розпадної речовини до досягнення усталеного режиму (рис. 2.9б). Проте на відміну від попереднього випадку з віддаленням від поверхні  $\xi = 0$  дії джерела маси речовини  $\mathbf{K}^{(0)}$  величина  $J_*^{(1)}(\tau)$  спочатку зменшується (криві 1-5, рис. 2.9б), а потім зростає (криві 5-7, рис. 2.9б). Найменші значення дифузійного потоку спостерігаються через поверхню  $\xi_* = 3$  (крива 5, рис. 2.9б), причому функція  $J_*^{(1)}(\tau)$  у цьому випадку найшвидше виходить на стаціонарний режим.

### || 2.3. Математична модель невзаємодіючих потоків

#### 2.3.1. Концентрації розпадних частинок

Математична модель невзаємодіючих потоків описує процес масоперенесення речовини двома шляхами з різними коефіцієнтами дифузії за відсутності масообміну між ними, тобто в моделі не враховуються процеси типу сорбції-десорбції. Такий процес масоперенесення описується сукупністю двох незв'язаних рівнянь дифузії. Для цього випадку схема каскадного розпаду мігруючої речовини подана на рис. 2.10.

**Розділ 2. Крайові задачі моделей дифузії, невзаємодіючих потоків і дифузії у тілі з пастками за каскадного розпаду домішкових речовин**

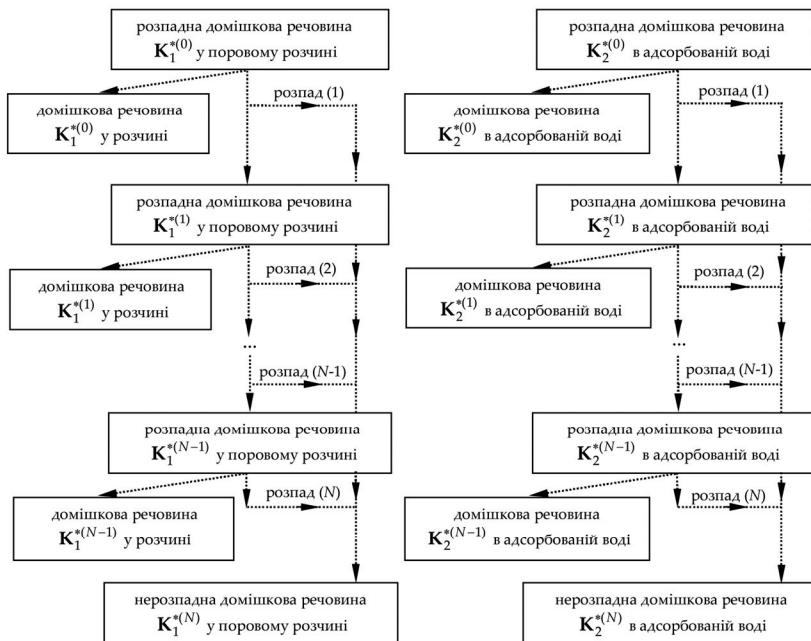


Рис. 2.10. Схема розпаду дифундуючої домішкової речовини за моделлю невзаємодіючих потоків

Для одновимірного за просторовою координатою випадку у безрозмірних змінних (2.1) міграція домішкових речовин за їх каскадного розпаду для моделі невзаємодіючих потоків описується такими сукупностями рівнянь

для  $i = 0$

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_1^{(0)}}{\partial \tau} &= d_1^{(0)} \frac{\partial^2 c_1^{(0)}}{\partial \xi^2} - a_1^{(0)} c_1^{(0)}, \\ \frac{\partial c_2^{(0)}}{\partial \tau} &= d_2^{(0)} \frac{\partial^2 c_2^{(0)}}{\partial \xi^2} - a_2^{(0)} c_2^{(0)}; \end{aligned} \quad (2.30a)$$

для  $i = \overline{1, N-1}$

$$\frac{\partial c_1^{(i)}}{\partial \tau} = d_1^{(i)} \frac{\partial^2 c_1^{(i)}}{\partial \xi^2} + a_{\lambda 1}^{(i-1)} c_1^{(i-1)} - a_1^{(i)} c_1^{(i)},$$



$$\frac{\partial c_2^{(i)}}{\partial \tau} = d_2^{(i)} \frac{\partial^2 c_2^{(i)}}{\partial \xi^2} + a_{\lambda 2}^{(i-1)} c_2^{(i-1)} - a_2^{(i)} c_2^{(i)}, \quad (2.30\text{б})$$

для  $i = N$

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_1^{(N)}}{\partial \tau} &= d_1^{(N)} \frac{\partial^2 c_1^{(N)}}{\partial \xi^2} + \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 1}^{(iN)} c_1^{(i)}, \\ \frac{\partial c_2^{(N)}}{\partial \tau} &= d_2^{(N)} \frac{\partial^2 c_2^{(N)}}{\partial \xi^2} + \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 2}^{(iN)} c_2^{(i)} \end{aligned} \quad (2.30\text{в})$$

за нульових початкових

$$c_1^{(i)}(\xi, \tau) \Big|_{\tau=0} = 0, \quad c_2^{(i)}(\xi, \tau) \Big|_{\tau=0} = 0, \quad i = \overline{0; N} \quad (2.31)$$

і таких граничних умов

$$c_1^{(0)}(\xi, \tau) \Big|_{\xi=0} = \alpha c_0, \quad c_2^{(0)}(\xi, \tau) \Big|_{\xi=0} = (1-\alpha)c_0; \quad (2.32\text{а})$$

$$c_1^{(i)}(\xi, \tau) \Big|_{\xi=0} = c_2^{(i)}(\xi, \tau) \Big|_{\xi=0} = 0, \quad i = \overline{1; N}. \quad (2.32\text{б})$$

Тут  $\alpha$  ( $0 \leq \alpha \leq 1$ ) - параметр, який визначає частину домішкової речовини, що з поверхні тіла потрапила на швидкий шлях дифузії (стан 1, 0-й етап розпаду).

Оскільки рівняння дифузії розпадної речовини (2.30) і країові умови (2.31), (2.32) є нез'язними, то можемо використати побудову розв'язків країових задач (2.6)-(2.8), тобто формули (2.9), (2.15), (2.16), (2.21). У результаті одержимо вирази для концентрації на швидкому  $c_1^{(i)}$  та повільному  $c_2^{(i)}$  шляхах міграції, а також сумарну концентрацію  $c_{non}^{(i)}(\xi, \tau) = c_1^{(i)}(\xi, \tau) + c_2^{(i)}(\xi, \tau)$  в тілі

для  $i = 0$

$$\begin{aligned} \frac{c_1^{(0)}}{c_0} &= \alpha \left\{ 1 - \frac{\xi}{\xi_0} + \frac{a_1^{(0)}}{d_1^{(0)}} \left[ 1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\operatorname{sh} \bar{\eta}_1^{(0)} (\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \bar{\eta}_1^{(0)} \xi_0} \right] - \right. \\ &\quad \left. \frac{2}{\xi_0} \sum_{k=1}^{\infty} y_k \frac{\sin y_k \xi}{y_k^2 + \bar{\eta}_1^{(0)2}} e^{-\beta_{1k}^{(0)} \tau} \right\}, \end{aligned}$$

**Розділ 2.** Крайові задачі моделей дифузії, невзаємодіючих потоків і дифузії у тілі з пастками за каскадного розпаду домішкових речовин

$$\begin{aligned} \frac{c_2^{(0)}}{c_0} = & (1-\alpha) \left\{ 1 - \frac{\xi}{\xi_0} + \frac{a_2^{(0)}}{d_2^{(0)}} \left[ 1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\operatorname{sh} \bar{\eta}_2^{(0)} (\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \bar{\eta}_2^{(0)} \xi_0} \right] - \right. \\ & \left. - \frac{2}{\xi_0} \sum_{k=1}^{\infty} y_k \frac{\sin y_k \xi}{y_k^2 + \bar{\eta}_2^{(0)2}} e^{-\beta_{2k}^{(0)} \tau} \right\}, \\ \frac{c_{non}^{(0)}}{c_0} = & A_d^{(0)} \left( 1 - \frac{\xi}{\xi_0} \right) - \alpha \frac{a_1^{(0)}}{d_1^{(0)}} \frac{\operatorname{sh} \bar{\eta}_1^{(0)} (\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \bar{\eta}_1^{(0)} \xi_0} - (1-\alpha) \frac{a_2^{(0)}}{d_2^{(0)}} \frac{\operatorname{sh} \bar{\eta}_2^{(0)} (\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \bar{\eta}_2^{(0)} \xi_0} - \\ & - \frac{2}{\xi_0} \sum_{k=1}^{\infty} y_k \sin y_k \xi \left[ \frac{\alpha}{y_k^2 + \bar{\eta}_1^{(0)2}} e^{-\beta_{1k}^{(0)} \tau} + \frac{(1-\alpha)}{y_k^2 + \bar{\eta}_2^{(0)2}} e^{-\beta_{2k}^{(0)} \tau} \right]; \quad (2.33) \end{aligned}$$

для  $i = 1$

$$\begin{aligned} \frac{c_1^{(1)}(\xi, \tau)}{c_0} = & \alpha a_1^{(1)} \left[ \bar{a}_1 \left\{ \frac{\operatorname{sh} \eta_1^{(0)} (\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \eta_1^{(0)} \xi_0} - \frac{\operatorname{sh} \eta_1^{(1)} (\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \eta_1^{(0)} \xi_0} \right\} - \right. \\ & - \eta_1^{(1)2} \left\{ 1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\operatorname{sh} \eta_1^{(1)} (\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \eta_1^{(0)} \xi_0} \right\} - \frac{2}{\xi_0} \sum_{k=1}^{\infty} \sin y_k \xi \left[ \left( 1 + \frac{a_1^{(0)}}{\beta_{1k}^{(0)}} \right) \frac{1 - e^{-\beta_{1k}^{(1)} \tau}}{y_k \beta_{1k}^{(1)}} + \right. \\ & \left. \left. + \frac{y_k}{y_k^2 + \eta_1^{(0)2}} \frac{e^{-\beta_{1k}^{(1)} \tau} - e^{-\beta_{1k}^{(0)} \tau}}{\beta_{1k}^{(0)} - \beta_{1k}^{(1)}} \right] \right], \\ \frac{c_2^{(1)}(\xi, \tau)}{c_0} = & (1-\alpha) a_2^{(1)} \left[ \bar{a}_2 \left\{ \frac{\operatorname{sh} \eta_2^{(0)} (\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \eta_2^{(0)} \xi_0} - \frac{\operatorname{sh} \eta_2^{(1)} (\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \eta_2^{(0)} \xi_0} \right\} - \right. \\ & - \eta_2^{(1)2} \left\{ 1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\operatorname{sh} \eta_2^{(1)} (\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \eta_2^{(0)} \xi_0} \right\} - \frac{2}{\xi_0} \sum_{k=1}^{\infty} \sin y_k \xi \left[ \left( 1 + \frac{a_2^{(0)}}{\beta_{2k}^{(0)}} \right) \frac{1 - e^{-\beta_{2k}^{(1)} \tau}}{y_k \beta_{2k}^{(1)}} + \right. \\ & \left. \left. + \frac{y_k}{y_k^2 + \eta_2^{(0)2}} \frac{e^{-\beta_{2k}^{(1)} \tau} - e^{-\beta_{2k}^{(0)} \tau}}{\beta_{2k}^{(0)} - \beta_{2k}^{(1)}} \right] \right]; \end{aligned}$$

для  $i = \overline{2, N-1}$

$$c_j^{(i)}(\xi, \tau) = a_j^{(i)} \int_0^{\tau} \int_0^{\xi_0} G_j^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') c_j^{(i-1)}(\xi', \tau') d\xi' d\tau', \quad (2.34)$$



для  $i = N$

$$c_j^{(N)}(\xi, \tau) = \int_0^{\tau} \int_0^{\xi_0} G_j^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda j}^{(iN)} c_j^{(i)}(\xi', \tau') d\xi' d\tau'; \quad (2.35)$$

тут

$$G_j^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') = \theta(\tau - \tau') \sum_{n=1}^{\infty} \sin(y_n \xi) \sin(y_n \xi') e^{-\beta_{jk}^{(i)} (\tau - \tau')}, \quad j = 1; 2, \quad i = \overline{2, N};$$

$$c_{non}^{(1)}(\xi, \tau) = c_1^{(1)}(\xi, \tau) + c_2^{(1)}(\xi, \tau), \quad (2.36)$$

$$\text{де } \bar{\eta}_j^{(i)} = \sqrt{a_j^{(i)} / d_j^{(i)}}, \quad \beta_{jk}^{(i)} = d_j^{(i)} y_k^2 + a_j^{(i)}, \quad j = 1; 2, \quad i = \overline{0, N};$$

$$A_d^{(i)} = 1 + \alpha \frac{a_1^{(i)}}{d_1^{(i)}} + (1 - \alpha) \frac{a_2^{(i)}}{d_2^{(i)}}, \quad \bar{a}_j = \frac{a_j^{(0)}}{2d_j^{(0)} d_j^{(1)} (\eta_j^{(0)2} - \eta_j^{(1)2})},$$

$$a_{\lambda j}^{(iN)} = a_j^{(i)} - a_{\lambda j}^{(i-1)}.$$

### 2.3.2. Потоки розпадних частинок за моделлю невзаємодіючих потоків

Для моделі, яка розглядається, потоки маси на швидкому та повільному шляхах міграції визначаються за формулою (2.25) з відповідним коефіцієнтом дифузії. Тоді, враховуючи вирази для концентрацій (2.33)-(2.35), для сумарного потоку маси через поверхню  $\xi = \xi_*$   $J_{*non}^{(i)}(\tau) = J_{*1}^{(i)}(\tau) + J_{*2}^{(i)}(\tau)$  отримаємо

для  $i = 0$

$$\frac{J_{*non}^{(0)}(\tau)}{c_0} = \frac{B_d}{\xi_0} - \alpha a_1^{(0)} \bar{\eta}_1^{(0)} \frac{\operatorname{ch} \bar{\eta}_1^{(0)} (\xi_0 - \xi_*)}{\operatorname{sh} \bar{\eta}_1^{(0)} \xi_0} - (1 - \alpha) a_2^{(0)} \bar{\eta}_2^{(0)} \frac{\operatorname{ch} \bar{\eta}_2^{(0)} (\xi_0 - \xi_*)}{\operatorname{sh} \bar{\eta}_2^{(0)} \xi_0} +$$

$$+ \frac{2}{\xi_0} \sum_{k=1}^{\infty} y_k^2 \cos y_k \xi_* \left[ \frac{d_1^{(0)} \alpha}{y_k^2 + \bar{\eta}_1^{(0)2}} e^{-\beta_{1k}^{(0)} \tau} + \frac{d_2^{(0)} (1 - \alpha)}{y_k^2 + \bar{\eta}_2^{(0)2}} e^{-\beta_{2k}^{(0)} \tau} \right]; \quad (2.37a)$$

для  $i = 1$

$$\frac{J_{*non}^{(1)}}{c_0} = \sum_{j=1}^2 d_j^{(1)} a_j^{(1)} \alpha_j \left\{ \frac{a_j^{(0)}}{d_j^{(0)} d_j^{(1)} (\bar{\eta}_j^{(0)2} - \bar{\eta}_j^{(1)2})} \left[ \bar{\eta}_j^{(0)} \frac{\operatorname{ch} \bar{\eta}_j^{(0)} (\xi_0 - \xi_*)}{\operatorname{sh} \bar{\eta}_j^{(0)} \xi_0} - \right. \right.$$

**Розділ 2. Крайові задачі моделей дифузії, невзаємодіючих потоків і дифузії у тілі з пастками за каскадного розпаду домішкових речовин**

---

$$-\bar{\eta}_j^{(1)} \frac{\operatorname{ch} \bar{\eta}_j^{(1)}(\xi_0 - \xi_*)}{\operatorname{sh} \bar{\eta}_j^{(1)} \xi_0} \Bigg] - \bar{\eta}_j^{(1)2} \left[ \frac{1}{\xi_0} - \bar{\eta}_j^{(1)} \frac{\operatorname{ch} \bar{\eta}_j^{(1)}(\xi_0 - \xi_*)}{\operatorname{sh} \bar{\eta}_j^{(1)} \xi_0} \right] + \frac{2}{\xi_0} \sum_{k=1}^{\infty} \cos y_k \xi_* \times \\ \times \left[ \left( 1 + \frac{a_j^{(0)}}{\beta_{jk}^{(0)}} \right) \frac{1 - e^{-\beta_{jk}^{(1)} \tau}}{\beta_{jk}^{(1)}} + \frac{1}{\beta_{jk}^{(0)} - \beta_{jk}^{(1)}} \frac{y_k^2}{y_k^2 + \eta^2} \left( e^{-\beta_{jk}^{(1)} \tau} - e^{-\beta_{jk}^{(0)} \tau} \right) \right] \right\}; \quad (2.376)$$

для  $i = 2, \dots, N-1$

$$J_{*j}^{(i)}(\tau) = -a_j^{(i)} d_j^{(i)} \int_0^{\tau} \int_0^{\xi_0} \frac{\partial G_j^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Bigg|_{\xi=\xi_*} c_j^{(i-1)}(\xi', \tau') d\xi' d\tau', \quad (2.37\text{B})$$

$$\frac{\partial G_j^{(i)}}{\partial \xi} \Bigg|_{\xi=\xi_*} = \theta(\tau - \tau') \sum_{n=1}^{\infty} y_n \cos(y_n \xi_*) \sin(y_n \xi') e^{-(d_j^{(i)} y_n^2 + a_j^{(i)}) (\tau - \tau')};$$

для  $i = N$

$$J_{*j}^{(N)}(\tau) = -d_j^{(N)} \int_0^{\tau} \int_0^{\xi_0} \frac{\partial G_j^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Bigg|_{\xi=\xi_*} \sum_{i=0}^{N-1} a_j^{(i)} c_j^{(iN)}(\xi', \tau') d\xi' d\tau', \quad (2.37\text{Г})$$

$$\frac{\partial G_j^{(N)}}{\partial \xi} \Bigg|_{\xi=\xi_*} = \theta(\tau - \tau') \sum_{n=1}^{\infty} y_n \cos(y_n \xi_*) \sin(y_n \xi') e^{-d_j^{(N)} y_n^2 (\tau - \tau')}.$$

Тут  $B_d = d_1^{(0)} \alpha (1 + \bar{\eta}_1^{(0)}) + d_2^{(0)} (1 - \alpha) (1 + \bar{\eta}_2^{(0)})$ ,  $\alpha_1 = \alpha$ ,  $\alpha_2 = 1 - \alpha$ .

Після підстановки у формулах (2.37)  $\xi_* = \xi_0$  одержимо вирази для сумарних потоків розпадних речовин  $J_{0non}^{(i)}$  через нижню границю шару  $\xi = \xi_0$

для  $i = 0$

$$\frac{J_{0non}^{(0)}(\tau)}{c_0} = \frac{B_d}{\xi_0} - \frac{\alpha a_1^{(0)} \bar{\eta}_1^{(0)}}{\operatorname{sh} \bar{\eta}_1^{(0)} \xi_0} - \frac{(1 - \alpha) a_2^{(0)} \bar{\eta}_2^{(0)}}{\operatorname{sh} \bar{\eta}_2^{(0)} \xi_0} +$$

$$+ \frac{2}{\xi_0} \sum_{k=1}^{\infty} y_k^2 (-1)^k \left[ \frac{d_1^{(0)} \alpha}{y_k^2 + \bar{\eta}_1^{(0)2}} e^{-\beta_{1k}^{(0)} \tau} + \frac{d_2^{(0)} (1 - \alpha)}{y_k^2 + \bar{\eta}_2^{(0)2}} e^{-\beta_{2k}^{(0)} \tau} \right]; \quad (2.38\text{a})$$



для  $i = 1$

$$\frac{J_{0non}^{(1)}}{c_0} = \sum_{j=1}^2 d_j^{(1)} a_j^{(1)} \alpha_j \left\{ \frac{a_j^{(0)}}{d_j^{(0)} d_j^{(1)} (\bar{\eta}_j^{(0)2} - \bar{\eta}_j^{(1)2})} \left[ \frac{\operatorname{ch} \bar{\eta}_j^{(0)} (\xi_0 - \xi_*)}{\operatorname{sh} \bar{\eta}_j^{(0)} \xi_0} - \right. \right. \\ \left. \left. - \bar{\eta}_j^{(1)} \frac{\operatorname{ch} \bar{\eta}_j^{(1)} (\xi_0 - \xi_*)}{\operatorname{sh} \bar{\eta}_j^{(1)} \xi_0} \right] - \bar{\eta}_j^{(1)2} \left[ \frac{1}{\xi_0} - \bar{\eta}_j^{(1)} \frac{\operatorname{ch} \bar{\eta}_j^{(1)} (\xi_0 - \xi_*)}{\operatorname{sh} \bar{\eta}_j^{(1)} \xi_0} \right] + \frac{2}{\xi_0} \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \times \right. \\ \left. \times \left[ \left( 1 + \frac{a_j^{(0)}}{\beta_{jk}^{(0)}} \right) \frac{1 - e^{-\beta_{jk}^{(1)} \tau}}{\beta_{jk}^{(1)}} + \frac{1}{\beta_{jk}^{(0)} - \beta_{jk}^{(1)}} \frac{y_k^2}{y_k^2 + \eta^2} \left( e^{-\beta_{jk}^{(1)} \tau} - e^{-\beta_{jk}^{(0)} \tau} \right) \right] \right\}; \quad (2.38б)$$

для  $i = 2, \dots, N-1$  справдіжується формула (2.37в), в якій

$$\left. \frac{\partial G_j^{(i)}}{\partial \xi} \right|_{\xi=\xi_0} = \theta(\tau - \tau') \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n y_n \sin(y_n \xi') e^{-(d_j^{(i)} y_n^2 + a_j^{(i)}) (\tau - \tau')}; \quad (2.38в)$$

для  $i = N$  справдіжується формула (2.37г), в якій

$$\left. \frac{\partial G_j^{(N)}}{\partial \xi} \right|_{\xi=\xi_0} = \theta(\tau - \tau') \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n y_n \sin(y_n \xi') e^{-d_j^{(N)} y_n^2 (\tau - \tau')}. \quad (2.38г)$$

### 2.3.3. Кількість розпадних речовин, що пройшли через нижню поверхню шару

Для моделі невзаємодіючих потоків кількість домішкових речовин, що за час  $\tau_*$  пройшли через поверхню тіла  $\xi = \xi_0$ , також визначається за формулою (2.28). Підставляючи вирази для сумарних потоків розпадних домішкових речовин (2.38) у співвідношення (2.28), одержимо

для  $i = 0$

$$\frac{Q_{0non}^{(0)}}{c_0} = \sum_{j=1}^2 \alpha_j d_j^{(0)} \left( \frac{1}{\xi_0} + \bar{\eta}_j^{(0)2} \left[ \frac{1}{\xi_0} - \frac{\bar{\eta}_j^{(0)}}{\operatorname{sh} \bar{\eta}_j^{(0)} \xi_0} \right] \right) \tau_* + \\ + \frac{2}{\xi_0} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k y_k^2}{(y_k^2 + \bar{\eta}_j^{(0)2}) \beta_{jk}^{(0)}} \left[ 1 - e^{-\beta_{jk}^{(0)} \tau_*} \right]; \quad (2.39а)$$

для  $i = 1$

$$\frac{Q_{0non}^{(1)}}{c_0} = \sum_{j=1}^2 \alpha_j d_j^{(1)} a_j^{(1)} \left( \frac{a_j^{(0)}}{d_j^{(0)} d_j^{(1)} (\eta^2 - \eta_1^2)} \left[ \left\{ \frac{\bar{\eta}_j^{(0)}}{\operatorname{sh} \bar{\eta}_j^{(0)} \xi_0} - \frac{\bar{\eta}_j^{(1)}}{\operatorname{sh} \bar{\eta}_j^{(1)} \xi_0} \right\} \tau_* - \right. \right.$$

$$- \bar{\eta}_j^{(1)2} \left[ \frac{1}{\xi_0} - \frac{\bar{\eta}_j^{(1)}}{\operatorname{sh} \bar{\eta}_j^{(1)} \xi_0} \right] \tau_* + \frac{2}{\xi_0} \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \left[ \left( 1 + \frac{a_j^{(0)}}{\beta_{jk}^{(0)}} \right) \frac{\beta_{jk}^{(1)} \tau_* - 1 + e^{-\beta_{jk}^{(1)} \tau_*}}{\beta_{jk}^{(1)2}} + \right.$$

$$\left. \left. + \frac{1}{\beta_{jk}^{(0)} \beta_{jk}^{(1)}} \frac{y_k^2}{y_k^2 + \bar{\eta}_j^{(0)2}} \left( 1 + \frac{\beta_{jk}^{(1)} e^{-\beta_{jk}^{(0)} \tau_*} - \beta_{jk}^{(0)} e^{-\beta_{jk}^{(1)} \tau_*}}{\beta_{jk}^{(0)} - \beta_{jk}^{(1)}} \right) \right] \right\}; \quad (2.39б)$$

для  $i = 2, \dots, N-1$

$$Q_{*non}^{(i)} = - \sum_{j=1}^2 a_j^{(i)} d_j^{(i)} \int_0^{\tau_*} \left[ \int_0^{\tau} \int_0^{\xi_0} \frac{\partial G_j^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \right|_{\xi=\xi_*} c_j^{(i-1)}(\xi', \tau') d\xi' d\tau' \right] d\tau; \quad (2.39в)$$

$$Q_{*non}^{(N)}(\tau) = - \sum_{j=1}^2 d_j^{(N)} \int_0^{\tau_*} \left[ \int_0^{\tau} \int_0^{\xi_0} \frac{\partial G_j^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \right|_{\xi=\xi_*} \sum_{i=0}^{N-1} a_j^{(i)} c_{\lambda j}^{(iN)}(\xi', \tau') d\xi' d\tau' \right] d\tau. \quad (2.39г)$$

Таким чином ми отримали формули для обчислення на кожному кроці каскадного розпаду кількості домішкової речовини, яка за час  $\tau_*$  пройшла через нижню поверхню шару.

### 2.3.4. Числовий аналіз дифузії двома шляхами за моделлю невзаємодіючих потоків

Для моделі невзаємодіючих потоків на основі формул (2.33)-(2.36) розроблений програмний комплекс для комп’ютерного моделювання процесів дифузії домішок двома шляхами за каскадного розпаду мігруючих частинок без врахування процесів типу сорбції-десорбції.

На рис. 2.13 проілюстровано графіки сумарної концентрації  $c^{(0)}/c_0$  залежно від значення параметра поверхневого розподілу домішки між станами  $\alpha = 0.1; 0.3; 0.5; 0.7; 0.9$  (криві 1-5 в моменти часу  $\tau = 0,125$  (рис. а) та  $\tau = 10$  (рис. б) для  $d_1^{(0)} = 1$ , та  $d_2^{(0)} = 0.125$ . Тут прийнято, що  $\xi_0 = 10$ .

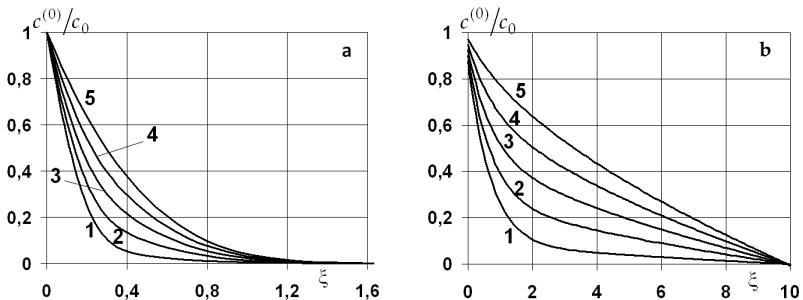


Рис. 2.13. Розподіли концентрації  $c^{(0)}/c_0$  для різних значень  $\alpha$  в моменти часу  $\tau = 0.125$  (рис. а) та  $\tau = 10$  (рис. б)

Зазначимо, що функція сумарної концентрації  $c^{(0)}(\xi, \tau)$  на нульовому кроці розпаду є монотонно спадною для всіх фізично обґрунтованих параметрів задачі. При цьому чим більше розпадної речовини з поверхні потрапило на швидкий шлях дифузії, тим більшими є значення сумарної концентрації в тілі (рис. 2.13) і тим швидше вона виходить на усталений режим.

Рис. 2.14-2.16 ілюструють розподіли сумарної концентрації домішкових частинок в шарі на кроці розпаду  $i=1$ . Тут рис. а наведені для  $\tau = 0.125$ , рис. б -  $\tau = 10$  для  $d_1^{(1)} = 10$  та  $d_2^{(1)} = 0.125$  при  $a_1^{(1)} = a_2^{(1)} = 0.2$ . На рис. 2.14 показані розподіли сумарної концентрації  $c^{(1)}/c_0$  залежно від значення параметра поверхневого розподілу домішки між станами на нульовому етапі каскадного розпаду. Криві 1-5 відповідають значенням  $\alpha = 0.1; 0.3; 0.5; 0.7; 0.9$  для  $a_\lambda^{(0)} = 0.8$ .

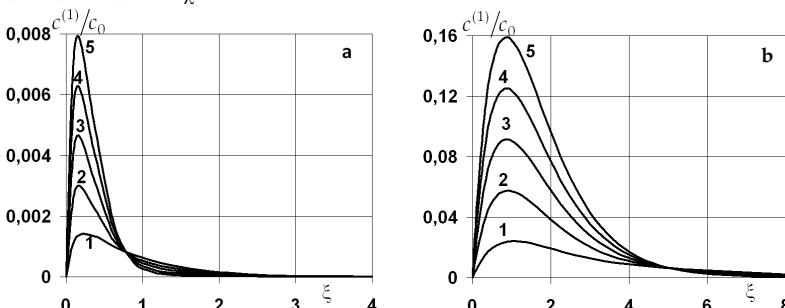


Рис. 2.14. Розподіли концентрації  $c^{(1)}/c_0$  для різних значень  $\alpha$  в моменти часу  $\tau = 0.125$  (рис. а) та  $\tau = 10$  (рис. б)

На рис. 2.15 і 2.16 показані графіки функції  $c^{(1)}/c_0$  залежно від значення параметра  $a_\lambda^{(0)} = 0.25; 0.4; 0.6; 0.8; 0.95$  (криві 1-5) для  $\alpha = 0.9$  (рис. 2.15) і  $\alpha = 0.1$  (рис. 2.16).

Зауважимо, що для сумарної концентрації домішкової речовини  $K^{(1)}$ , що утворилася внаслідок розпаду речовини  $K^{(0)}$ , характерне приповерхневе зростання в околі границі шару, де діє джерело маси речовини  $K^{(0)}$  (рис. 2.14-2.16). Причому з часом максимум концентрації  $c^{(1)}(\xi, \tau)$  зростає на порядки і дещо

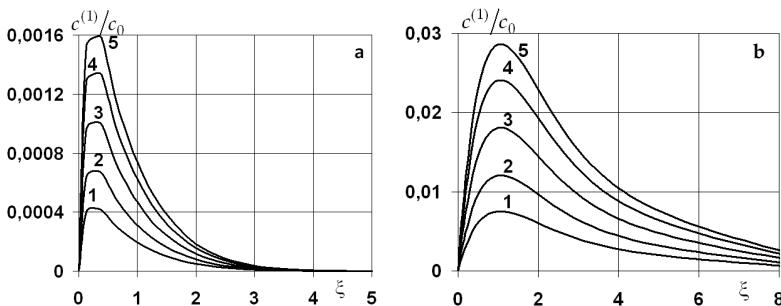


Рис. 2.15. Розподіли концентрації  $c^{(1)}/c_0$  для різних значень  $a_\lambda^{(0)}$  при  $\alpha = 0.9$  в моменти часу  $\tau = 0.125$  (рис. а) та  $\tau = 10$  (рис. б)

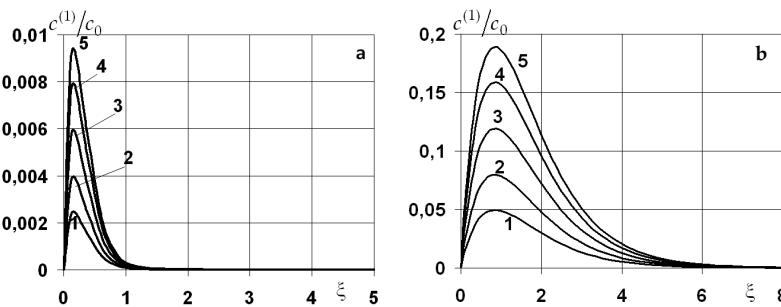


Рис. 2.16. Розподіли концентрації  $c^{(1)}/c_0$  в залежності від різних значень  $a_\lambda^{(0)}$  при  $\alpha = 0.1$  в моменти часу  $\tau = 0.125$  (рис. а) та  $\tau = 10$  (рис. б)

зсувається вглиб тіла (рис. 2.14a-2.16a і 2.14b-2.16b). Збільшення частини речовини  $K^{(0)}$ , яка з поверхні потрапляє на швидкий шлях міграції, тобто збільшення коефіцієнта  $\alpha$ , приводить до зростання значень функції  $c^{(1)}(\xi, \tau)$  у приповерхневій області в рази (рис. 2.14). Зміна коефіцієнтів інтенсивності розпаду  $a_j^{(0)}$ ,



$a_j^{(1)}$  впливає тільки на значення сумарної концентрації на кроці розпаду  $i = 1$ , не змінюючи її поведінку. Збільшення коефіцієнта  $a_\lambda^{(0)}$ , який визначає частину речовини  $K^{(0)}$ , яка внаслідок розпаду є джерелом маси для речовини  $K^{(1)}$ , спричинює зростання значень сумарної концентрації на всьому проміжку (рис. 2.15, 2.16). Зазначимо, що зменшення коефіцієнтів дифузії як на швидкому так і на повільному шляхах міграції на етапі розпаду  $i = 1$  приводить до зменшення сумарної концентрації речовини  $K^{(1)}$  у приповерхневій області шару і більшого проникнення в глиб тіла.

На рис. 2.17 показані 3D-розподіли концентрації на швидкому  $c_1^{(1)}(\xi, \tau)/c_0$  (рис. а) та повільному  $c_2^{(1)}(\xi, \tau)/c_0$  (рис. б) шляхах міграції, а також їхньої суми  $c^{(1)}(\xi, \tau)/c_0$  (рис. с) на площині  $O\xi\tau$  для значень коефіцієнта інтенсивності розпаду речовини  $a_\lambda^{(0)} = 0,95$  та параметра поверхневого розподілу речовини між станами  $\alpha = 0,9$  при  $d_1^{(1)} = 10$ , та  $d_2^{(1)} = 0.125$ ,  $a_1^{(1)} = a_2^{(1)} = 0.2$ .

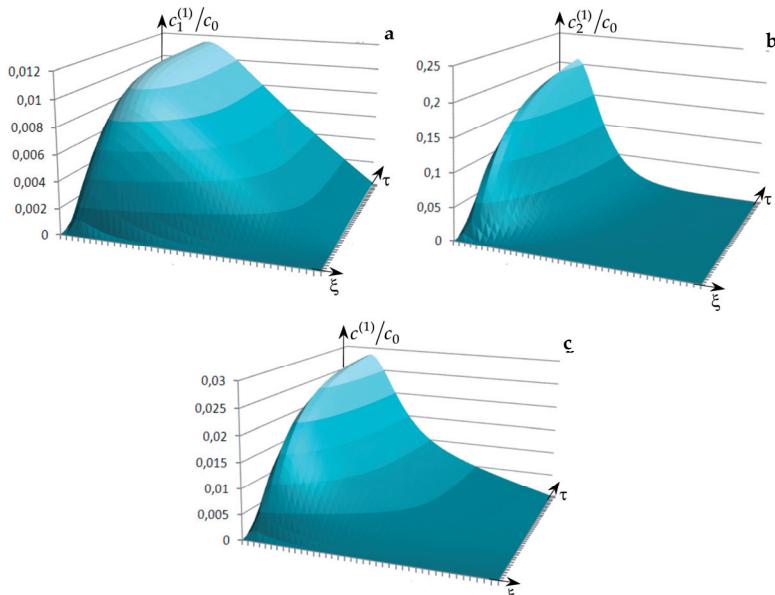


Рис.2.17. Поверхні розподілів концентрації  $c_1^{(1)}(\xi, \tau)/c_0$  (рис. а),  $c_2^{(1)}(\xi, \tau)/c_0$  (рис. б) та  $c^{(1)}(\xi, \tau)/c_0$  (рис. с)

Зауважимо, що поведінка функцій концентрацій на швидкому  $c_1^{(1)}(\xi, \tau)$  і повільному  $c_2^{(1)}(\xi, \tau)$  шляхах міграції на етапі  $i = 1$  відрізняється значним накопиченням речовини  $\mathbf{K}^{(1)}$  в околі поверхні  $\xi = 0$  на повільному шляху  $j = 2$  (рис. 2.17b) і суттєвим поширенням цієї речовини вглиб тіла швидким шляхом  $j = 1$  (рис. 2.17a). Причому обидві концентрації  $c_1^{(1)}(\xi, \tau)$  і  $c_2^{(1)}(\xi, \tau)$  є значимими для сумарної концентрації  $c^{(1)}(\xi, \tau)$  (рис. 2.17c).

На наступному  $i = 2$  і на подальших кроках каскадного розпаду сумарної концентрації домішок  $c^{(i)}(\xi, \tau)$  приймають дедалі менші значення. Проте поведінка цих функцій аналогічна до  $c^{(1)}(\xi, \tau)$ , продемонстрована на рис. 2.14-2.17.

## ||| 2.4. Математична модель ефективної дифузії розпадних речовин у середовищі з пастками

### 2.4.1. Концентрації розпадних мігруючих частинок

Нехай в системі виконується умова локальної термодинамічної рівноваги між першим та другим станами домішкових частинок, тобто виконуються умови Теореми 1.8. Тоді процес масоперенесення за каскадного розпаду речовини у загальному випадку описується системами рівнянь (1.86), які у безрозмірних змінних (2.1) набувають вигляду (2.4). При цьому схема каскадного розпаду мігруючих частинок з урахуванням процесів типу сорбції-десорбції для даної часткової математичної моделі наведена на рис. 2.18.

Для одновимірного за просторовою координатою випадку зв'язані системи рівнянь (2.4) зводяться до наступного вигляду для  $i = 0$

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_1^{e(0)}}{\partial \tau} &= d_0^{e(0)} \frac{\partial^2 c_1^{e(0)}}{\partial \xi^2} - a_{11}^{e(0)} c_1^{e(0)} + a_{23}^{(0)} c_3^{(0)}, \\ \frac{\partial c_3^{(0)}}{\partial \tau} &= a_{31}^{e(0)} c_1^{e(0)} - a_{33}^{(0)} c_3^{(0)}; \end{aligned} \quad (2.40a)$$



для  $i = \overline{1, N-1}$

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_1^{e(i)}}{\partial \tau} &= d_0^{e(i)} \frac{\partial^2 c_1^{e(i)}}{\partial \xi^2} - a_{11}^{e(i)} c_1^{e(i)} + a_{23}^{(i)} c_3^{(i)} + a_{\lambda 1}^{e(i-1)} c_1^{e(i-1)}, \\ \frac{\partial c_3^{(i)}}{\partial \tau} &= a_{31}^{e(i)} c_1^{e(i)} - a_{33}^{(i)} c_3^{(i)} + a_{\lambda 3}^{(i-1)} c_3^{(i-1)}; \end{aligned} \quad (2.40\text{б})$$

для  $i = N$

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_1^{e(N)}}{\partial \tau} &= d_0^{e(N)} \frac{\partial^2 c_1^{e(N)}}{\partial \xi^2} - a_{11}^{e(N)} c_1^{e(N)} + a_{23}^{(N)} c_3^{(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 1}^{e(iN)} c_1^{e(i)}, \\ \frac{\partial c_3^{(N)}}{\partial \tau} &= a_{31}^{e(N)} c_1^{e(N)} - a_{33}^{(N)} c_3^{(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 3}^{(iN)} c_3^{(i)} \end{aligned} \quad (2.40\text{в})$$

за нульових початкових

$$c_1^{e(i)}(\xi, \tau) \Big|_{\tau=0} = c_3^{(i)}(\xi, \tau) \Big|_{\tau=0} = 0, \quad i = \overline{0; N} \quad (2.41)$$

і граничних умов

$$c_1^{e(0)}(\xi, \tau) \Big|_{\xi=0} = c_0 \equiv const, \quad c_1^{e(0)}(\xi, \tau) \Big|_{\xi=\xi_0} = 0; \quad (2.42\text{а})$$

$$c_1^{e(i)}(\xi, \tau) \Big|_{\xi=0} = 0, \quad c_1^{e(i)}(\xi, \tau) \Big|_{\xi=\xi_0} = 0, \quad i = \overline{1; N}. \quad (2.42\text{б})$$

Постановки краївих задач (2.40)-(2.42) можуть використовуватись не тільки як частковий випадок загальної моделі гетеродифузії з пастками за умов локальної термодинамічної рівноваги щодо процесу масообміну між першим та другим станами домішкових частинок, але й розглядається як окрема задача дифузії у тілі з пастками з урахуванням каскадного розпаду мігруючої речовини. Тоді схема каскадного розпаду частинок та процеси сорбції-десорбції показані на рис. 2.18. Математична модель дифузії частинок у середовищі з пастками описує процес масоперенесення речовини двома шляхами з різними коефіцієнтами дифузії, який супроводжується масообміном частинками між ними. Проте коефіцієнт дифузії домішок на одному з шляхів настільки малий, що ним можна знехтувати, і тоді розглядаємо цей стан як пастки для домішкових частинок.

**Розділ 2. Крайові задачі моделей дифузії, невзаємодіючих потоків і дифузії у тілі з пастками за каскадного розпаду домішкових речовин**

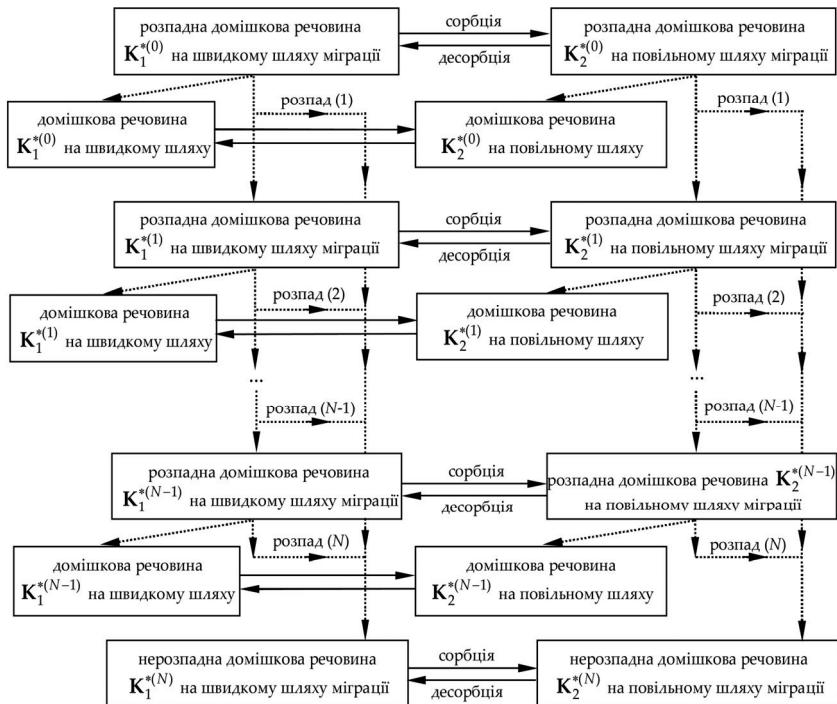


Рис.2.18. Схема процесів каскадного розпаду домішкових компонент термодинамічної системи та процесів сорбції-десорбції

Знайдемо спочатку розв'язок крайової задачі для кроку  $i=0$  розпаду дифундуючої речовини, тобто задачі (2.40a), (2.41), (2.42a). Для цього введемо нові функції, які задовольняють нульові граничні умови

$$f_1(\xi, \tau) = c_1^{e(0)}(\xi, \tau) - c_0 \left( 1 - \frac{\xi}{\xi_0} \right), \quad f_2(\xi, \tau) = c_3^{(0)}(\xi, \tau). \quad (2.43)$$

Тоді крайова задача (2.40a), (2.41), (2.42a) зведеться до форми

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_1}{\partial \tau} &= d_0^{e(0)} \frac{\partial^2 f_1}{\partial \xi^2} - a_{11}^{e(0)} f_1 + a_{23}^{(0)} f_2 - a_{11}^{e(0)} c_0 \left( 1 - \frac{\xi}{\xi_0} \right), \\ \frac{\partial f_2}{\partial \tau} &= a_{31}^{e(0)} f_1 - a_{33}^{(0)} f_2 + a_{31}^{e(0)} c_0 \left( 1 - \frac{\xi}{\xi_0} \right); \end{aligned} \quad (2.44)$$



$$f_1(\xi, \tau) \Big|_{\tau=0} = -c_0 \left( 1 - \frac{\xi}{\xi_0} \right), \quad f_2(\xi, \tau) \Big|_{\tau=0} = 0; \\ f_1(\xi, \tau) \Big|_{\xi=0} = f_1(\xi, \tau) \Big|_{\xi=\xi_0} = 0. \quad (2.45)$$

Розв'язок задачі (2.44), (2.45) шукаємо у вигляді розкладу в ряді Фур'є по  $\sin y_k \xi$ :

$$f_j(\xi, \tau) = \frac{2}{\xi_0} \sum_{k=1}^{\infty} \tilde{f}_{jk}(k, \tau) \sin y_k \xi, \quad j = 1, 2. \quad (2.46)$$

Для функцій  $\tilde{f}_{jk}$  отримаємо наступну крайову задачу

$$\begin{aligned} \frac{d\tilde{f}_{1k}}{d\tau} &= -\left(d_0^{e(0)} y_k^2 + a_{11}^{e(0)}\right) \tilde{f}_{1k} + a_{23}^{(0)} \tilde{f}_{2k} - a_{11}^{e(0)} \frac{2c_0}{k\pi}, \\ \frac{d\tilde{f}_{2k}}{d\tau} &= a_{31}^{e(0)} \tilde{f}_{1k} - a_{33}^{(0)} \tilde{f}_{2k} + a_{31}^{e(0)} \frac{2c_0}{k\pi}; \end{aligned} \quad (2.47)$$

$$\tilde{f}_{1k}(k, \tau) \Big|_{\tau=0} = -\frac{2c_0}{k\pi}, \quad \tilde{f}_{2k}(k, \tau) \Big|_{\tau=0} = 0. \quad (2.48)$$

Тут врахований розклад [53]

$$1 - \frac{\xi}{\xi_0} = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{2}{k\pi} \sin y_k \xi. \quad (2.49)$$

До задачі (2.47), (2.48) застосуємо інтегральне перетворення Лапласа за часом [65]:  $\bar{f}_{jk}(k, s) = L[\tilde{f}_{jk}(k, \tau)]$ ,  $s$  - параметр перетворення Лапласа. Тоді маємо

$$\left(s + d_0^{e(0)} y_k^2 + a_{11}^{e(0)}\right) \bar{f}_{1k} - a_{23}^{(0)} \bar{f}_{2k} = -a_{11}^{e(0)} \frac{2c_0}{k\pi s} - \frac{2c_0}{k\pi}, \quad (2.40\bar{b})$$

$$-a_{31}^{e(0)} \bar{f}_{1k} + \left(s + a_{33}^{(0)}\right) \bar{f}_{2k} = a_{31}^{e(0)} \frac{2c_0}{k\pi s}. \quad (2.50)$$

Основний визначник системи рівнянь (2.50)

$$\Delta = \begin{vmatrix} s + d_0^{e(0)} y_k^2 + a_{11}^{e(0)} & -a_{23}^{(0)} \\ -a_{31}^{e(0)} & s + a_{33}^{(0)} \end{vmatrix} = (s - s_1)(s - s_2), \quad (2.51))$$

**Розділ 2. Крайові задачі моделей дифузії, невзаємодіючих потоків і дифузії у тілі з пастками за каскадного розпаду домішкових речовин**

---

де  $s_1, s_2$  - корені квадратного рівняння  $s^2 + \zeta_1 s + \zeta_2 = 0$ , в якому коефіцієнти мають вигляд

$$\zeta_1 = d_0^{e(0)} y_k^2 + a_{11}^{e(0)} + a_{33}^{(0)},$$

$$\zeta_2 = a_{11}^{e(0)} a_{33}^{(0)} - a_{31}^{e(0)} a_{23}^{(0)} + a_{33}^{(0)} d_0^{e(0)} y_k^2,$$

а саме

$$s_{1,2} = \left[ -\zeta_1 \pm \sqrt{\zeta_1^2 - 4\zeta_2} \right] / 2. \quad (2.52)$$

Знайдемо допоміжні визначники системи (2.50)

$$\Delta_1 = \frac{2c_0}{k\pi} \begin{vmatrix} -1 - a_{11}^{e(0)} \frac{1}{s} & -a_{23}^{(0)} \\ a_{31}^{e(0)} \frac{1}{s} & s + a_{33}^{(0)} \end{vmatrix} = -\frac{2c_0}{k\pi} \left\{ s + \tilde{A}_1 + \tilde{B}_1 \frac{1}{s} \right\},$$

$$\Delta_2 = \frac{2c_0}{k\pi} \begin{vmatrix} s + d_0^{e(0)} y_k^2 + a_{11}^{e(0)} & -1 - a_{11}^{e(0)} \frac{1}{s} \\ -a_{31}^{e(0)} & a_{31}^{e(0)} \frac{1}{s} \end{vmatrix} = \frac{2c_0}{k\pi} a_{31}^{e(0)} \left\{ \tilde{B}_2 \frac{1}{s} \right\},$$

де  $\tilde{A}_1 = a_{11}^{e(0)} + a_{33}^{e(0)}$ ,  $\tilde{B}_1 = a_{11}^{e(0)} a_{33}^{(0)} - a_{31}^{e(0)} a_{23}^{(0)}$ ,  $\tilde{B}_2 = d_0^{e(0)} y_k^2$ .

Тоді маємо

$$\bar{f}_{1k} = \frac{\Delta_1}{\Delta} = -\frac{2c_0}{k\pi} \frac{s + \tilde{A}_1 + \tilde{B}_1/s}{(s-s_1)(s-s_2)}, \quad \bar{f}_{2k} = \frac{\Delta_2}{\Delta} = a_{31}^{e(0)} \frac{2c_0}{k\pi} \frac{\tilde{B}_2/s}{(s-s_1)(s-s_2)}.$$

Виконаємо обернене перетворення Лапласа. Врахуємо, що [66]

$$L^{-1} \left[ \frac{s}{(s-s_1)(s-s_2)} \right] = \frac{1}{s_1 - s_2} \left\{ s_1 e^{s_1 \tau} - s_2 e^{s_2 \tau} \right\}, \quad (2.53a)$$

$$L^{-1} \left[ \frac{1}{s(s-s_1)(s-s_2)} \right] = \frac{1}{s_1 - s_2} \left\{ \frac{1}{s_1} e^{s_1 \tau} - \frac{1}{s_2} e^{s_2 \tau} \right\} + \frac{1}{s_1 s_2}, \quad (2.53b)$$

а також формулу (2.12б). Зauważимо, що  $s_1 s_2 = \zeta_2 = a_{33}^{(0)} d_0^{e(0)} y_k^2 + a_{11}^{e(0)} a_{33}^{(0)} - a_{31}^{e(0)} a_{23}^{(0)}$ . Тоді одержимо



$$\tilde{f}_{1k} = -\frac{2c_0}{k\pi} \left\{ \frac{1}{s_1 - s_2} \left[ \left( s_1 + \tilde{A}_1 + \frac{\tilde{B}_1}{s_1} \right) e^{s_1 \tau} - \left( s_2 + \tilde{A}_1 + \frac{\tilde{B}_1}{s_2} \right) e^{s_2 \tau} \right] + \frac{\tilde{B}_1}{s_1 s_2} \right\},$$

$$\tilde{f}_{2k} = a_{31}^{e(0)} \frac{2c_0}{k\pi} \left\{ \frac{1}{s_1 - s_2} \left[ \frac{\tilde{B}_2}{s_1} e^{s_1 \tau} - \frac{\tilde{B}_2}{s_2} e^{s_2 \tau} \right] + \frac{\tilde{B}_2}{s_1 s_2} \right\}.$$

За формулою (2.46) отримаємо

$$f_1(\xi, \tau) = -\frac{2}{\xi_0} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{2c_0}{k\pi} \sin y_k \xi \left\{ \frac{1}{s_1 - s_2} \left[ \left( s_1 + \tilde{A}_1 + \frac{\tilde{B}_1}{s_1} \right) e^{s_1 \tau} - \left( s_2 + \tilde{A}_1 + \frac{\tilde{B}_1}{s_2} \right) e^{s_2 \tau} \right] + \frac{\tilde{B}_1}{s_1 s_2} \right\},$$

$$f_2(\xi, \tau) = a_{31}^{e(0)} \frac{2}{\xi_0} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{2c_0}{k\pi} \sin y_k \xi \left\{ \frac{1}{s_1 - s_2} \left[ \frac{\tilde{B}_2}{s_1} e^{s_1 \tau} - \frac{\tilde{B}_2}{s_2} e^{s_2 \tau} \right] + \frac{\tilde{B}_2}{s_1 s_2} \right\}. \quad (2.54)$$

Підсумуємо асимптотичні доданки у співвідношеннях (2.54). Використовуючи (2.14), для такого доданку у першому співвідношенні отримаємо

$$S'_1 = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{2c_0}{k\pi} \tilde{B}_1 \frac{\sin y_k \xi}{a_{33}^{(0)} d_0^{e(0)} y_k^2 + \tilde{B}_1} = c_0 \frac{\tilde{B}_1^2}{a_{33}^{(0)} d_0^{e(0)}} \left[ 1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\operatorname{sh} \eta^{(0)}(\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \eta^{(0)} \xi_0} \right],$$

$$\text{де } \eta^{(0)} = \sqrt{\tilde{B}_1 / a_{33}^{(0)} d_0^{e(0)}}.$$

Суму асимптотичного доданку у другому співвідношенні (2.54)

$$S'_2 = a_{31}^{e(0)} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{2c_0}{k\pi} \frac{d_0^{e(0)} y_k^2}{a_{33}^{(0)} d_0^{e(0)} y_k^2 + \tilde{B}_1} \sin y_k \xi$$

можна знайти, двічі продиференціювавши ряд для  $S'_1$  по  $\xi$  і домноживши отриманий вираз на  $(-1)$ . Маємо

$$S'_2 = a_{31}^{e(0)} c_0 \frac{\tilde{B}_1}{a_{33}^{(0)2} d_0^{e(0)2}} \frac{\operatorname{sh} \eta^{(0)}(\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \eta^{(0)} \xi_0}.$$

І, враховуючи заміну (2.43), отримаємо остаточні вирази для концентрацій розпадних частинок на кроці розпаду  $i = 0$ :

концентрація домішок у водному поровому розчині

$$\frac{1}{c_0} c_1^{e(0)}(\xi, \tau) = 1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\tilde{B}_1^2}{a_{33}^{(0)} d_0^{e(0)}} \frac{2}{\xi_0} \left[ 1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\operatorname{sh} \eta^{(0)}(\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \eta^{(0)} \xi_0} \right] - \\ - \frac{2}{\xi_0} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\sin y_k \xi}{y_k (s_1 - s_2)} \left\{ \left( s_1 + \tilde{A}_1 + \frac{\tilde{B}_1}{s_1} \right) e^{s_1 \tau} - \left( s_2 + \tilde{A}_1 + \frac{\tilde{B}_1}{s_2} \right) e^{s_2 \tau} \right\}; \quad (2.55a)$$

концентрація частинок у пастках

$$\frac{1}{c_0} c_3^{(0)}(\xi, \tau) = \frac{a_{31}^{e(0)} \tilde{B}_1}{a_{33}^{(0)2} d_0^{e(0)2}} \frac{2}{\xi_0} \frac{\operatorname{sh} \eta^{(0)}(\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \eta^{(0)} \xi_0} + \\ + \frac{2}{\xi_0} a_{31}^{e(0)} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\sin y_k \xi}{y_k (s_1 - s_2)} \left\{ \frac{\tilde{B}_2}{s_1} e^{s_1 \tau} - \frac{\tilde{B}_2}{s_2} e^{s_2 \tau} \right\}; \quad (2.55b)$$

сумарна концентрація дифундуючих частинок  $\tilde{c}^{(0)}(\xi, \tau) = c_1^{e(0)}(\xi, \tau) + c_3^{(0)}(\xi, \tau)$  у тілі з пастками

$$\frac{1}{c_0} \tilde{c}^{(0)}(\xi, \tau) = 1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\tilde{B}_1^2}{a_{33}^{(0)} d_0^{e(0)}} \frac{2}{\xi_0} \left[ 1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \left( 1 - \frac{a_{31}^{e(0)}}{\tilde{B}_1 a_{33}^{(0)}} \right) \frac{\operatorname{sh} \eta^{(0)}(\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \eta^{(0)} \xi_0} \right] - \\ - \frac{2}{\xi_0} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\sin y_k \xi}{y_k (s_1 - s_2)} \times \\ \times \left\{ \left( s_1 + \tilde{A}^{(0)} + \frac{\tilde{B}^{(0)}}{s_1} \right) e^{s_1 \tau} - \left( s_2 + \tilde{A}^{(0)} + \frac{\tilde{B}^{(0)}}{s_2} \right) e^{s_2 \tau} \right\}, \quad (2.55b)$$

де  $\tilde{A}^{(0)} = \tilde{A}_1$ ,  $\tilde{B}^{(0)} = \tilde{B}_1 - a_{31}^{e(0)} \tilde{B}_2$ .

Зазначимо, що концентрація в пастках є пропорційною не тільки значенню концентрації частинок на граници шару  $c_0$ , але й коефіцієнту інтенсивності сорбції  $a_{31}^{e(0)}$ . Асимптотичні складові концентрацій  $c_1^{e(0)}(\xi, \tau)$ ,  $c_3^{(0)}(\xi, \tau)$ ,  $\tilde{c}^{(0)}(\xi, \tau)$ , як і в попередніх випадках, є суттєво нелінійними.

Зауважимо, що в рамках моделі, яка розглядається, концентрація частинок у пастках на граници шару  $\xi = 0$  не дорівнює нулю, і, відповідно, сумарна концентрація дифундуючої речовини на цій межі не дорівнює  $c_0$ :



$$\left. \frac{1}{c_0} c_3^{(0)}(\xi, \tau) \right|_{\xi=0} = \frac{2}{\xi_0} \frac{a_{31}^{e(0)} \tilde{B}_1}{a_{33}^{(0)2} d_0^{e(0)2}}; \quad \left. \frac{1}{c_0} \tilde{c}^{(0)}(\xi, \tau) \right|_{\xi=0} = 1 + \frac{2}{\xi_0} \frac{\tilde{B}_1 a_{31}^{e(0)}}{a_{33}^{(0)2} d_0^{e(0)2}}.$$

Це означає, що домішкова речовина може накопичуватись у пастках і на границі шару  $\xi=0$ . У той же час на границі  $\xi=\xi_0$  концентрації розпадних частинок (2.55а)-(2.55в) дорівнюють нулю.

Для інших кроків каскадного розпаду мігруючих речовин ( $i=1, \dots, N-1$ ) розв'язок краївих задач (2.40б), (2.41), (2.42б) подамо через відповідні функції Гріна (аналогічно до моделей дифузії в ефективному середовищі та невзаємодіючих потоків):

$$c_1^{e(i)}(\xi, \tau) = a_{\lambda 1}^{e(i-1)} \int_0^{\tau} \int_0^{\xi_0} G_1^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') c_1^{e(i-1)}(\xi', \tau') d\xi' d\tau',$$

$$c_3^{(i)}(\xi, \tau) = a_{\lambda 3}^{(i-1)} \int_0^{\tau} \int_0^{\xi_0} G_3^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') c_3^{(i-1)}(\xi', \tau') d\xi' d\tau', \quad (2.56)$$

де  $G_1^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')$ ,  $G_3^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')$  - функції Гріна задачі (2.40б), (2.41), (2.42б) для  $i=1, \dots, N-1$ , тобто є розв'язками наступних краївих задач

$$\frac{\partial G_1^{(i)}}{\partial \tau} - d_0^{e(i)} \frac{\partial^2 G_1^{(i)}}{\partial \xi^2} + a_{11}^{e(i)} G_1^{(i)} - a_{23}^{(i)} G_3^{(i)} = \delta(\tau - \tau') (\xi - \xi'),$$

$$\frac{\partial G_3^{(i)}}{\partial \tau} - a_{31}^{e(i)} G_1^{(i)} + a_{33}^{(i)} G_3^{(i)} = \delta(\tau - \tau') (\xi - \xi') \quad (2.57)$$

за нульових краївих умов

$$G_1^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') \Big|_{\tau=0} = G_3^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') \Big|_{\tau=0} = 0,$$

$$G_1^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') \Big|_{\xi=0} = G_1^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') \Big|_{\xi=\xi_0} = 0, \quad i = \overline{1, N-1}. \quad (2.58)$$

Розв'язок країової задачі (2.57), (2.58) також шукатимемо з допомогою інтегральних перетворень Лапласа і Фур'є [65]. Отже, застосуємо інтегральне перетворення Лапласа за часом

$$g_j^{(i)}(\xi, \xi'; s, \tau) = L[G_j^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')], \quad j = 1, 3.$$

Маємо

$$\left(s + a_{11}^{e(i)}\right)g_1^{(i)} - d_0^{e(i)} \frac{d^2 g_1^{(i)}}{d\xi^2} - a_{23}^{(i)} g_3^{(i)} = e^{-s\tau'} \delta(\xi - \xi'),$$

$$-a_{31}^{e(i)} g_1^{(i)} + \left(s + a_{33}^{(i)}\right)g_3^{(i)} = e^{-s\tau'} \delta(\xi - \xi');$$

$$g_1^{(i)}(\xi, \xi'; s, \tau') \Big|_{\xi=0} = g_1^{(i)}(\xi, \xi'; s, \tau') \Big|_{\xi=\xi_0} = 0, \quad i = \overline{1, N-1}.$$

Якщо до одержаної задачі застосувати скінченне інтегральне sin-перетворення Фур'є  $\bar{g}_j^{(i)}(y_n, \xi'; s, \tau') = F[g_j^{(i)}(\xi, \xi'; s, \tau')]$ ,  $j = 1, 3$ , тоді в зображеннях отримаємо таку систему рівнянь

$$\begin{aligned} \left(s + d_0^{e(i)} y_n^2 + a_{11}^{e(i)}\right) \bar{g}_1^{(i)} - a_{23}^{(i)} \bar{g}_3^{(i)} &= e^{-s\tau'} \sin y_n \xi', \\ -a_{31}^{e(i)} \bar{g}_1^{(i)} + \left(s + a_{33}^{(i)}\right) \bar{g}_3^{(i)} &= e^{-s\tau'} \sin y_n \xi'. \end{aligned}$$

Основний визначник цієї системи рівнянь є ідентичним (2.51), тобто розв'язки відповідного квадратного рівняння  $s_{1n}, s_{2n}$  мають вигляд (2.52), в яких  $k$  замінено на  $n$ . Тепер запишемо допоміжні визначники

$$\begin{aligned} \Delta_1 &= e^{-s\tau'} \sin y_n \xi' \left[ s + a_{33}^{(i)} + a_{23}^{(i)} \right], \\ \Delta_2 &= e^{-s\tau'} \sin y_n \xi' \left[ s + d_0^{e(i)} y_n^2 + a_{11}^{e(i)} + a_{31}^{e(i)} \right]. \end{aligned}$$

Тоді

$$\begin{aligned} \bar{g}_1^{(i)}(y_n, \xi'; s, \tau') &= \frac{(s + \bar{A}_1^{(i)}) e^{-s\tau'} \sin y_n \xi'}{(s - s_{1n})(s - s_{2n})}, \\ \bar{g}_3^{(i)}(y_n, \xi'; s, \tau') &= \frac{(s + \bar{A}_2^{(i)}) e^{-s\tau'} \sin y_n \xi'}{(s - s_{1n})(s - s_{2n})}, \end{aligned}$$

де  $\bar{A}_1^{(i)} = a_{33}^{(i)} + a_{23}^{(i)}$ ,  $\bar{A}_2^{(i)} = d_0^{e(i)} y_n^2 + a_{11}^{e(i)} + a_{31}^{e(i)}$ .

Для оберненого перетворення Лапласа скористаємося формулами (2.12б), (2.53а) і теоремою запізнювання [66]. Маємо

$$g_1^{(i)}(y_n, \xi'; \tau, \tau') = \theta(\tau - \tau') \frac{\sin(y_n \xi')}{s_{1n} - s_{2n}} \left[ (s_{1n} + \bar{A}_1^{(i)}) e^{s_{1n}(\tau - \tau')} - (s_{2n} + \bar{A}_1^{(i)}) e^{s_{2n}(\tau - \tau')} \right],$$



$$g_3^{(i)}(y_n, \xi'; \tau, \tau') = \theta(\tau - \tau') \frac{\sin(y_n \xi')}{s_{1n} - s_{2n}} \left[ (s_{1n} + \bar{A}_2^{(i)}) e^{s_{1n}(\tau - \tau')} - (s_{2n} + \bar{A}_2^{(i)}) e^{s_{2n}(\tau - \tau')} \right].$$

Застосовуючи обернене sin-перетворення Фур'є, одержимо формули для визначення функцій Гріна  $G_j^{(i)}$  на  $i$ -му кроці розпаду ( $i = 1, \dots, N-1$ ):

$$\begin{aligned} G_1^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') &= \theta(\tau - \tau') \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin(y_n \xi) \sin(y_n \xi')}{s_{1n} - s_{2n}} \times \\ &\quad \times \left[ (s_{1n} + \bar{A}_1^{(i)}) e^{s_{1n}(\tau - \tau')} - (s_{2n} + \bar{A}_1^{(i)}) e^{s_{2n}(\tau - \tau')} \right]; \\ G_3^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') &= \theta(\tau - \tau') \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin(y_n \xi) \sin(y_n \xi')}{s_{1n} - s_{2n}} \times \\ &\quad \times \left[ (s_{1n} + \bar{A}_2^{(i)}) e^{s_{1n}(\tau - \tau')} - (s_{2n} + \bar{A}_2^{(i)}) e^{s_{2n}(\tau - \tau')} \right]. \end{aligned} \quad (2.59)$$

Отже, знайшовши функції Гріна за формулою (2.59) і визначивши концентрації розпадних домішкових частинок на кроці  $i-1$ , за співвідношеннями (2.56) ми знайдемо концентрації розпадної речовини для  $i = 1, \dots, N-1$ .

Для випадку  $i = N$  (нерозпадні домішки) процес масоперенесення для даної моделі описується крайовою задачею (2.40в), (2.41), (2.42б). Її розв'язок також подамо через відповідні функції Гріна аналогічно до (2.56), а саме

$$\begin{aligned} c_1^{e(N)}(\xi, \tau) &= \int_0^{\tau} \int_0^{\xi_0} G_1^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 1}^{e(iN)} c_1^{e(i)}(\xi', \tau') d\xi' d\tau', \\ c_3^{(N)}(\xi, \tau) &= \int_0^{\tau} \int_0^{\xi_0} G_3^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 3}^{(iN)} c_3^{(i)}(\xi', \tau') d\xi' d\tau', \end{aligned} \quad (2.60)$$

де  $G_j^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')$  ( $j = 1, 3$ ) - функції Гріна задачі (2.40в), (2.41), (2.42б) і задоволяють відповідну крайову з точковим джерелом:

$$\frac{\partial G_1^{(N)}}{\partial \tau} - d_0^{e(N)} \frac{\partial^2 G_1^{(N)}}{\partial \xi^2} + a_{11}^{e(N)} G_1^{(N)} - a_{23}^{(N)} G_3^{(N)} = \delta(\tau - \tau') (\xi - \xi'),$$

**Розділ 2. Крайові задачі моделей дифузії, невзаємодіючих потоків і дифузії у тілі з пастками за каскадного розпаду домішкових речовин**

---

$$\frac{\partial G_3^{(N)}}{\partial \tau} - a_{31}^{e(N)} G_1^{(N)} + a_{33}^{(N)} G_3^{(N)} = \delta(\tau - \tau') (\xi - \xi'); \quad (2.61)$$

$$G_1^{(N)} \Big|_{\tau=0} = G_3^{(N)} \Big|_{\tau=0} = G_1^{(N)} \Big|_{\xi=0} = G_1^{(N)} \Big|_{\xi=\xi_0} = 0. \quad (2.62)$$

Розв'язок крайової задачі (2.61), (2.62) має вигляд

$$\begin{aligned} G_1^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') &= \theta(\tau - \tau') \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin(y_n \xi) \sin(y_n \xi')}{s_{1n} - s_{2n}} \times \\ &\times \left[ (s_{1n} + \bar{A}_1^{(N)}) e^{s_{1n}(\tau - \tau')} - (s_{2n} + \bar{A}_1^{(N)}) e^{s_{2n}(\tau - \tau')} \right], \\ G_3^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') &= \theta(\tau - \tau') \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin(y_n \xi) \sin(y_n \xi')}{s_{1n} - s_{2n}} \times \\ &\times \left[ (s_{1n} + \bar{A}_2^{(N)}) e^{s_{1n}(\tau - \tau')} - (s_{2n} + \bar{A}_2^{(N)}) e^{s_{2n}(\tau - \tau')} \right]. \end{aligned} \quad (2.63)$$

Тоді, послідовно визначивши концентрації на кожному кроці  $i = 0, \dots, N-1$  за формулами (2.60) з урахуванням виразів (2.63) знайдемо концентрації нерозпадних або нешкідливих домішкових частинок у тілі за моделлю дифузії у середовищі з пастками.

#### 2.4.2. Потоки розпадних домішкових частинок через задану поверхню

У рамках моделі дифузії у середовищі з пастками потік маси враховується лише у стані 1. В об'ємі скелету (пастках) приймається, що дифузійний потік є нехтовою малим. Тому сумарний потік частинок за даною моделлю визначається потоком у поровому розчині. В одновимірному за просторовою координатою випадку, враховуючи Теорему 1.8, потік частинок, що розпадаються, через переріз тіла  $\xi = \xi_*$  знайдемо за формулою (2.25), яку для даного випадку запишемо у вигляді

$$J_{*p}^{(i)}(\tau) = -d_0^{e(i)} \frac{\partial c_1^{e(i)}(\xi, \tau)}{\partial \xi} \Bigg|_{\xi=\xi_*}, \quad i = \overline{0; N}. \quad (2.64)$$

Підставляємо вирази для концентрацій  $c_1^{e(i)}(\xi, \tau)$  (2.55a), (2.36), (2.60) у співвідношення (2.64). Тоді отримаємо



для  $i = 0$

$$\begin{aligned} \frac{\xi_0}{c_0 d_0^{e(0)}} J_{*p}^{(0)}(\tau) &= 1 + \frac{\tilde{B}_1^2 \eta^{(0)}}{a_{33}^{(0)} d_0^{e(0)}} \left[ \frac{1}{\xi_0} - \eta^{(0)} \frac{\operatorname{ch} \eta^{(0)}(\xi_0 - \xi_*)}{\operatorname{sh} \eta^{(0)} \xi_0} \right] - \\ &- 2 \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\cos y_k \xi_*}{(s_1 - s_2)} \left\{ \left( s_1 + \tilde{A}_1 + \frac{\tilde{B}_1}{s_1} \right) e^{s_1 \tau} - \left( s_2 + \tilde{A}_1 + \frac{\tilde{B}_1}{s_2} \right) e^{s_2 \tau} \right\}; \quad (2.65a) \end{aligned}$$

для  $i = 1, \dots, N-1$

$$J_{*p}^{(i)}(\tau) = -a_{\lambda 1}^{e(i-1)} d_0^{e(i)} \int_0^{\tau} \int_0^{\xi_0} \frac{\partial G_1^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Bigg|_{\xi=\xi_*} c_1^{e(i-1)}(\xi', \tau') d\xi' d\tau', \quad (2.65b)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial G_1^{(i)}}{\partial \xi} \Bigg|_{\xi=\xi_*} &= \theta(\tau - \tau') \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} y_n \frac{\cos(y_n \xi_*) \sin(y_n \xi')}{s_{1n} - s_{2n}} \times \\ &\times \left[ (s_{1n} + \bar{A}_1^{(i)}) e^{s_{1n}(\tau - \tau')} - (s_{2n} + \bar{A}_1^{(i)}) e^{s_{2n}(\tau - \tau')} \right]; \end{aligned}$$

для  $i = N$

$$J_{*p}^{(N)}(\tau) = -d_0^{e(N)} \int_0^{\tau} \int_0^{\xi_0} \frac{\partial G_1^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Bigg|_{\xi=\xi_*} \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 1}^{e(iN)} c_1^{e(i)}(\xi', \tau') d\xi' d\tau', \quad (2.65b)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial G_1^{(N)}}{\partial \xi} \Bigg|_{\xi=\xi_*} &= \theta(\tau - \tau') \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} y_n \cos(y_n \xi_*) \frac{\sin(y_n \xi')}{s_{1n} - s_{2n}} \times \\ &\times \left[ (s_{1n} + \bar{A}_1^{(i)}) e^{s_{1n}(\tau - \tau')} - (s_{2n} + \bar{A}_1^{(i)}) e^{s_{2n}(\tau - \tau')} \right]. \end{aligned}$$

Запишемо також вирази для потоків розпадних речовин через нижню границю шару  $\xi = \xi_0$  як частковий випадок формул (2.65):

для  $i = 0$

$$\begin{aligned} \frac{\xi_0}{c_0 d_0^{e(0)}} J_{0p}^{(0)}(\tau) &= 1 + \frac{\tilde{B}_1^2 \eta^{(0)}}{a_{33}^{(0)} d_0^{e(0)}} \left[ \frac{1}{\xi_0} - \frac{\eta^{(0)}}{\operatorname{sh} \eta^{(0)} \xi_0} \right] - \\ &- 2 \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(s_1 - s_2)} \left\{ \left( s_1 + \tilde{A}_1 + \frac{\tilde{B}_1}{s_1} \right) e^{s_1 \tau} - \left( s_2 + \tilde{A}_1 + \frac{\tilde{B}_1}{s_2} \right) e^{s_2 \tau} \right\}; \quad (2.66a) \end{aligned}$$

для  $i = 1, \dots, N - 1$  справджується формула (2.65б), в якій

$$\left. \frac{\partial G_1^{(i)}}{\partial \xi} \right|_{\xi=\xi_0} = \theta(\tau - \tau') \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n y_n \frac{\sin(y_n \xi')}{s_{1n} - s_{2n}} \times \\ \times \left[ (s_{1n} + \bar{A}_1^{(i)}) e^{s_{1n}(\tau - \tau')} - (s_{2n} + \bar{A}_1^{(i)}) e^{s_{2n}(\tau - \tau')} \right]; \quad (2.66\bar{b})$$

для  $i = N$  справджується формула (2.65в), в якій

$$\left. \frac{\partial G_1^{(N)}}{\partial \xi} \right|_{\xi=\xi_0} = \theta(\tau - \tau') \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n y_n \frac{\sin(y_n \xi')}{s_{1n} - s_{2n}} \times \\ \times \left[ (s_{1n} + \bar{A}_1^{(i)}) e^{s_{1n}(\tau - \tau')} - (s_{2n} + \bar{A}_1^{(i)}) e^{s_{2n}(\tau - \tau')} \right]. \quad (2.66\bar{v})$$

Зазначимо, що асимптотична частина виразів для потоків (2.65), зокрема і (2.66), є нелінійною, причому структура цих доданків є подібною до потоків домішки, знайдених за моделлю дифузії в середовищі з ефективними характеристиками (2.26), (2.27) відповідно.

#### 2.4.3. Кількість розпадних речовин, що пройшли через нижню границю шару за заданий час

Знайдемо кількість розпадної домішкової речовини, що за час  $\tau_*$  пройшла через одиницю площини поверхні  $\xi = \xi_0$  - нижню поверхню шару, за співвідношенням (2.28), піставляючи відповідні вирази для потоків маси (2.66). У результаті отримаємо для  $i = 0$

$$\frac{\xi_0 Q_{0p}^{(0)}}{c_0 d_0^{e(0)}} = \left( 1 + \frac{\tilde{B}_1^2 \eta^{(0)}}{a_{33}^{(0)} d_0^{e(0)}} \left[ \frac{1}{\xi_0} - \frac{\eta^{(0)}}{\operatorname{sh} \eta^{(0)} \xi_0} \right] \right)_{\tau_*} + \\ + 2 \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(s_1 - s_2)} \left\{ \left( s_1 + \tilde{A}_1 + \frac{\tilde{B}_1}{s_1} \right) \left( 1 - e^{s_1 \tau_*} \right) - \left( s_2 + \tilde{A}_1 + \frac{\tilde{B}_1}{s_2} \right) \left( 1 - e^{s_2 \tau_*} \right) \right\}; \quad (2.67\bar{a})$$

для  $i = 1, \dots, N - 1$

$$Q_{0p}^{(i)} = -a_{\lambda 1}^{e(i-1)} d_0^{e(i)} \int_0^{\tau_*} \int_0^{\xi_0} \int_0^{\tau'} \frac{\partial G_1^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Bigg|_{\xi=\xi_0} c_1^{e(i-1)}(\xi', \tau') d\xi' d\tau' d\tau; \quad (2.67\bar{b})$$



для  $i = N$

$$Q_{0e}^{(N)} = -d_0^{e(N)} \int_0^{\tau_*} \left| \int_0^\tau \int_0^{\xi_0} \frac{\partial G_1^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 1}^{(iN)} c_1^{e(i)}(\xi', \tau') d\xi' d\tau' \right| d\tau . \quad (2.67\text{в})$$

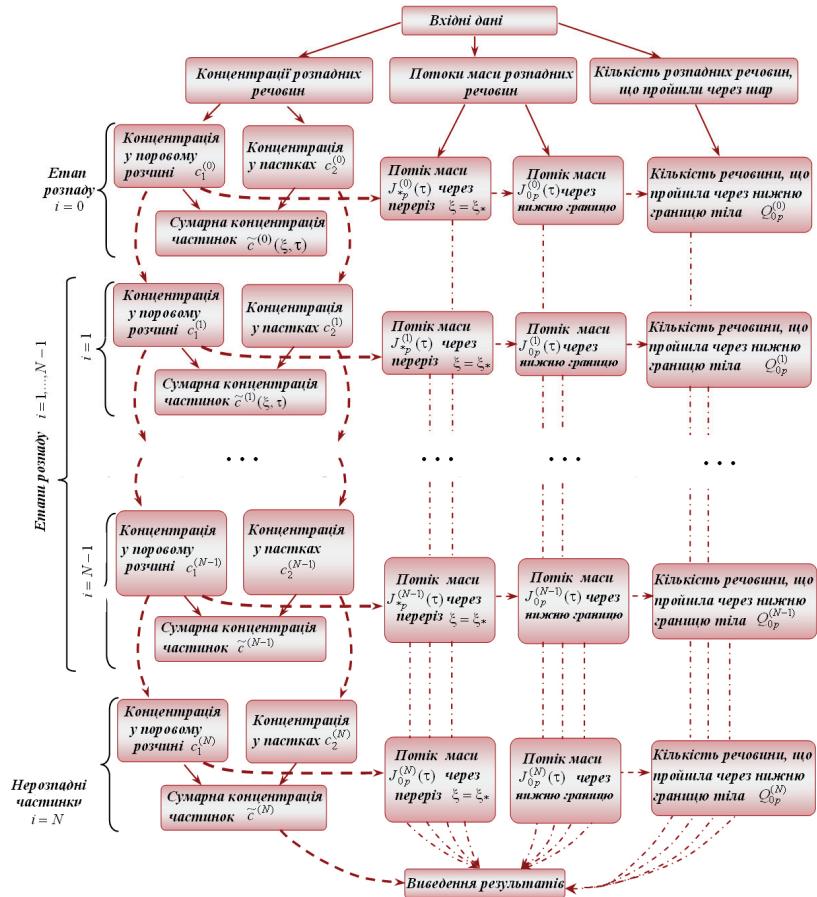
Зауважимо, що як і в попередніх випадках для  $i = \overline{1, N}$  вирази для потоків і кількості речовини, які за певний проміжок часу пройшло через шар, отримані в інтегральній формі.

#### 2.4.4. Схема модулів комплекса програм пакету *GeterPas* для моделі дифузії у тілі з пастками. Числовий аналіз

На основі формул (2.55), (2.56), (2.59), а також розв'язків задач (2.60) і (2.63) для концентрацій розпадних домішкових компонент, а також (2.65) і (2.66) для відповідних потоків маси і (2.67) для кількості речовин, що пройшли через нижню границю шару за певний проміжок часу, розроблений програмний комплекс для комп'ютерного моделювання процесів дифузії у тілі з пастками за каскадного розпаду мігруючих частинок. Даний комплекс увійшов до пакету програм *GeterPas*. Архітектуру комплекса модулів програм для моделювання процесів дифузії за каскадного розпаду частинок для моделі ефективної дифузії у тілі з пастками наведено на рис. 2.19. На рис. 2.20 продемонстрована схема алгоритму модуля пакету для розрахунку концентрацій домішкових речовин за їх каскадного розпаду для всіх етапів  $i = \overline{0, N}$ . Модулі для обчислення дифузійних потоків та кількості речовини, що пройшла через шар, наведені на рис. 2.21 та рис. 2.22 відповідно. При цьому зауважимо, що програмні модулі для потоків і кількості речовини містять тільки по одному циклічному процесу.

Зазначимо, що алгоритми модуля програми для розрахунку концентрацій розпадних домішок співпадає для моделей невзаємодіючих потоків та ефективної дифузії у тілі з пастками. У той же час алгоритми модулів програм для обчислення потоків маси мігруючих частинок і кількості речовини, що пройшла через нижню поверхню шару за певний проміжок часу для моделі ефективної дифузії у середовищі з пастками співпадають з відповідними алгоритмами для моделі дифузії в ефективному середовищі.

**Розділ 2. Крайові задачі моделей дифузії, невзаємодіючих потоків і дифузії у тілі з пастками за каскадного розпаду домішкових речовин**



**Рис.2.19. Архітектура комплексу модулів програм для моделювання процесів дифузії за каскадного розпаду частинок для моделі ефективної дифузії у тілі з пастками**

На рис. 2.23 і 2.24 показано розподіли концентрації домішок на етапах  $i = 0$  (рис. 2.23а і 2.24б) та  $i = 1$  (рис. 2.24а і 2.24б) у поровому просторі, де дифундує домішкова речовина (криві а), у пастках (криві б) та сумарна концентрація частинок. Рис. 2.23а для  $a_3^{(0)} = 5$  та рис. 2.23б для  $a_3^{(0)} = 10$  ілюструють поведінку концентрації розпадної речовини у різні моменти безрозмірного часу  $\tau = 0.01; 2; 20$  (криві – 1-3 відповідно).



## 2.4. Математична модель ефективної дифузії розпадних речовин у середовищі з пастками

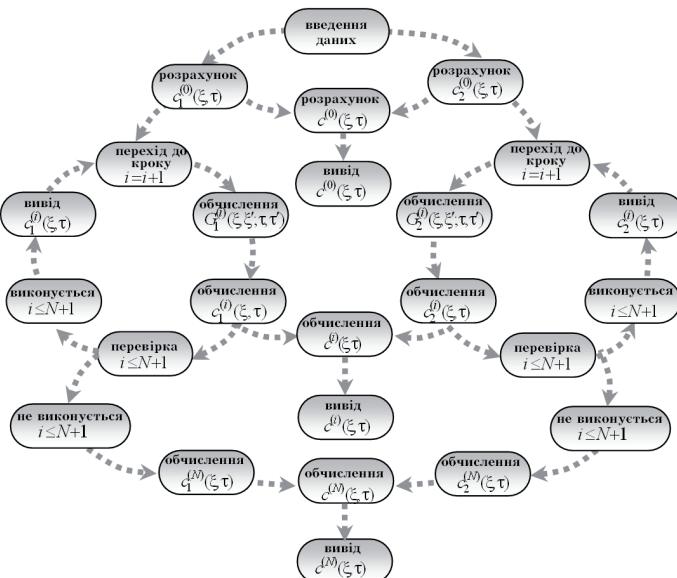


Рис.2.20. Схема алгоритму модуля пакету для розрахунку концентрацій домішкових речовин за їх каскадного розпаду у тілі з пастками

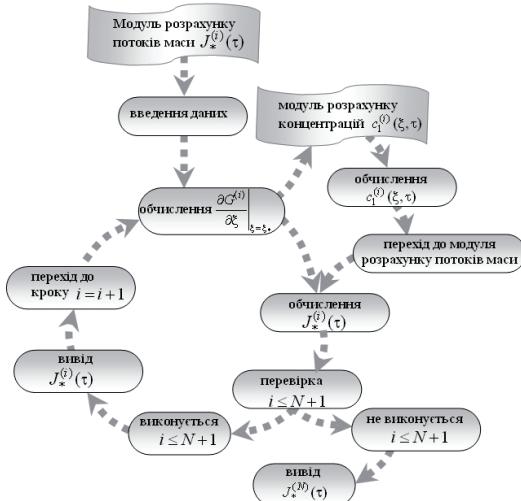


Рис.2.21. Схема алгоритму модуля пакету для розрахунку дифузійного потоку домішкових речовин за каскадного розпаду частинок для моделі ефективної дифузії у тілі з пастками

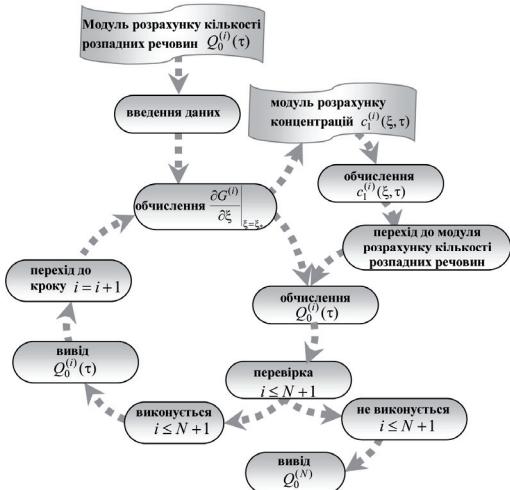


Рис.2.22. Схема алгоритму модуля пакету для розрахунку кількості розпавдних речовин, що пройшли через нижню границю шару за заданий час для моделі ефективної дифузії у тілі з пастками

Рис. 2.24а для коефіцента дифузії речовини  $K^{(1)}$   $d_0^{(1)} = 0.05$  та рис. 2.24б для  $d_0^{(1)} = 20$  демонструють залежність сумарної концентрації, утвореної після розпаду домішки  $K^{(0)}$  (тобто на етапі  $i = 1$ ), від різних значень коефіцієнта інтенсивності сорбції  $a_3^{(1)} = 2; 3; 4$  (криві – 1-3).

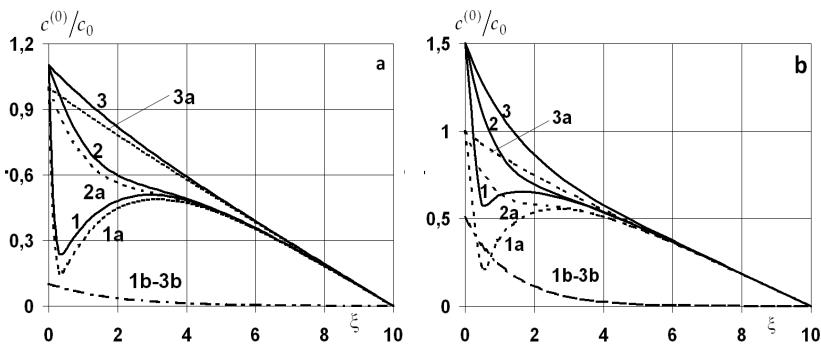


Рис.2.23. Розподіли концентрацій  $c_1^{(0)}, c_2^{(0)}$  та  $c^{(0)}$  в різні моменти часу



#### 2.4. Математична модель ефективної дифузії розпадних речовин у середовищі з пастками

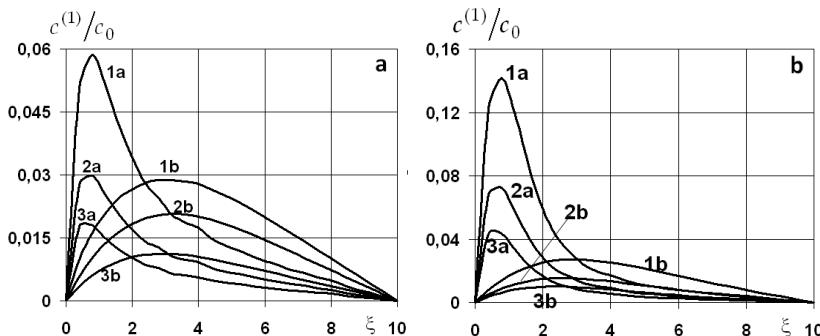


Рис.2.24. Розподіли концентрації домішок  $\tilde{c}^{(1)}$  при різних значеннях  $a_3^{(1)}$

На рис. 2.25 показано розподіли потоків маси  $\xi_0 J_{0p}^{(0)}(\tau)/c_0 d_0^{(0)}$  (рис. а) та кількість розпадної домішкової речовини  $\xi_0 Q_{0p}^{(0)}(\tau)/c_0 d_0^{(0)}$ , що за час  $\tau_*$  пройшла через одиницю площині поверхні  $\xi = \xi_0$  (рис. б) на 0-му етапі розпаду; на рис. 2.26 - дифузійних потоків  $\xi_0 J_{0p}^{(1)}(\tau)/c_0 d_0^{(0)}$  на 1-му етапі розпаду. На рис. 2.25а криві 1-6 відповідають потокам розпадної домішки через переріз тіла  $\xi_* = 0.5, 1, 1.5, 2, 4, 6$ . На рис. 2.25б криві 1-4 для функції  $\xi_0 Q_{0p}^{(0)}(\tau)/c_0 d_0^{(0)}$  наведені при різних значеннях коефіцієнта інтенсивності сорбції  $a_3^{(0)} = 1, 5, 10, 20$ .

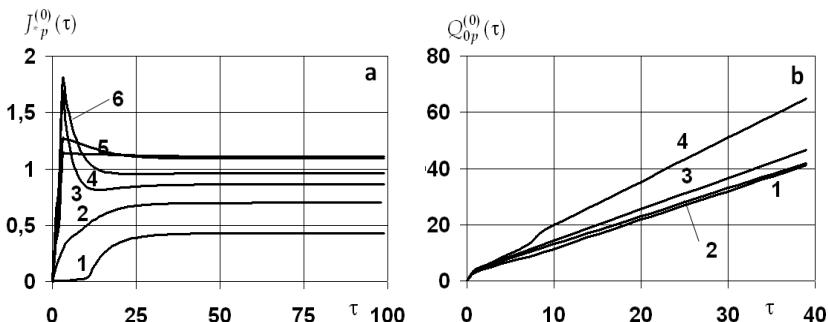


Рис.2.25. Розподіли потоків маси на 0-му етапі розпаду через переріз тіла  $\xi = \xi_*$  (рис.а) та кількість розпадної домішкової речовини, що за час  $\tau_*$  пройшла через одиницю площині поверхні  $\xi = \xi_0$  (рис.б)

Рис. 2.26а, б ілюструють поведінку функції  $\xi_0 J_{0p}^{(1)}(\tau) / c_0 d_0^{(0)}$  на 1-му етапі розпаду залежно від інтенсивності проходження домішки через перерізи  $\xi_* = 6, 7, 8, 9$  (криві 1-4, відповідно) при значеннях коефіцієнта інтенсивності сорбції  $a_3^{(0)} = 5$  (рис. а) та  $a_3^{(0)} = 20$  (рис. б).

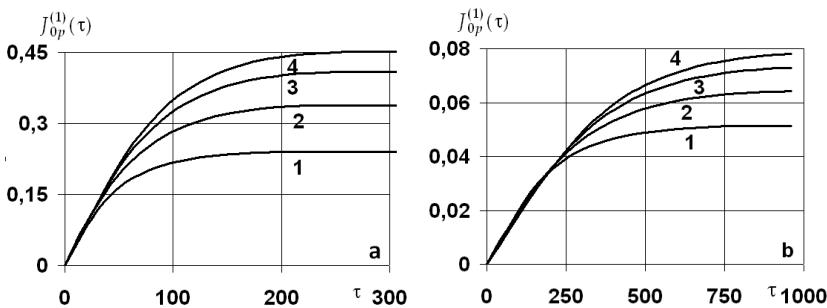


Рис.2.26. Розподіли потоків маси на 1-му етапі розпаду через переріз тіла  $\xi = \xi_*$  при значеннях коефіцієнта інтенсивності сорбції  $a_3^{(0)}=5$  (рис.а) та 20 (рис.б)

Зазначимо, що для етапу  $i = 0$  характерне суттєве приповерхневе зменшення сумарної концентрації  $\tilde{c}^{(0)}$  для малих часів (криві 1, рис. 2.23). З часом сумарна концентрація у приповерхневій області зростає (криві 2, рис. 2.23) і виходить на усталений режим (криві 3, рис. 2.23), набуваючи монотонно спадного характеру.

Найбільше накопичення частинок у пастках спостерігається в околі границі шару  $\xi = 0$  (криві 2b, рис. 2.23a,b). Причому функція  $c_2^{(0)}$  є монотонно спадною, на її значення суттєво впливає коефіцієнт інтенсивності сорбції  $a_3^{(0)}$ , проте зміна концентрації в часі є незначною, оскільки задіюється механізм розпаду речовини.

Поведінка функції сумарної концентрації домішкової компоненти на етапі розпаду  $i = 1$  суттєво залежить від значення відносного коефіцієнта дифузії речовини  $K^{(1)}$   $d_0^{(1)} = D_1 / D_0^{(0)}$  (рис. 2.24a). При цьому для великих  $d_0^{(1)}$  характерно повільне



зростання концентрації  $\tilde{c}^{(1)}$  від поверхні з виходом на максимальне значення в середині тіла (криві b, рис. 2.24а). У той же час для  $D_1 < D_0$  спостерігається значне накопичення домішкової речовини  $K^{(1)}$  в околі поверхні тіла  $\xi = 0$ , де діє максимальне джерело маси для речовини  $K^{(0)}$  (криві а, рис. 2.23, 2.24), що спричинене поведінкою функції концентрації розпадних частинок, які мігрують у поровому просторі. Далі відбувається зростання функцій  $c_1^{(1)}$  і  $\tilde{c}^{(1)}$ , які досягають локального максимуму на проміжку  $\xi \in [2; 4]$ .

Зазначимо, що для етапу  $i = 0$  характерне суттєве зростання потоку розпадної речовини (крива 4-6, рис. 2.25а) для малих часів  $\tau \in [5; 10]$ , причому в середині тіла спостерігається різке зменшення функції  $\xi_0 J_{0p}^{(0)}(\tau) / c_0 d_0^{e(0)}$  (криві 3-4, рис. 2.25а). Час виходу на усталений режим потоку маси для різних перерізів є приблизно однаковим, хоча значення функції  $\xi_0 J_{0p}^{(0)}(\tau) / c_0 d_0^{e(0)}$  в стаціонарному режимі різняться від 0,42 для  $\xi_* = 2$  до 1,11 для  $\xi_* = 6$  (рис. 2.25а). Кількість розпадної домішкової речовини, що за час  $\tau_* = 30$  пройшла через нижню поверхню шару  $\xi = \xi_0$ , при значеннях коефіцієнта інтенсивності сорбції на першому етапі розпаду  $a_3^{(0)} = 1$  в порівнянні з  $a_3^{(0)} = 20$  (криві 1 та 5, рис. 2.25б) зростає на 65 %.

Зазначимо, що поведінка функції дифузійного потоку речовини  $K^{(1)}$  є монотонно зростаючою в часі для всіх перерізів  $\xi = \xi_*$  і фізично обґрунтованих параметрів задачі. При цьому чим ближче до нижньої границі тим більшого значення на буває потік маси на 1-му етапі розпаду і час виходу на усталений режим є пропорційний коефіцієнту інтенсивності сорбції (рис. 2.26а і 2.26б). Тобто, якщо значення коефіцієнта інтенсивності сорбції збільшується в чотири рази, то і час виходу потоку маси на 1-му етапі розпаду на усталений режим збільшується в стільки ж разів. Причому значення функції потоку у стаціонарному режимі тим більші, чим далі від джерела маси знаходиться переріз тіла, через який проходить потік, що обчислюється.

## РОЗДІЛ 3

### Математична модель процесів гетеродифузії розпадних речовин двоюма шляхами

#### 3.1. Крайова задача каскадного типу для знаходження концентрацій мігруючих компонент

##### 3.1.1. Постановка крайових задач гетеродифузії каскадного типу

Розглянемо тепер випадок реалізації в термодинамічній системі умови локальної термодинамічної рівноваги між станами мігруючих частинок в адсорбованих шарах води та в об'ємі скелету. Тоді виконуються умови Теореми 1.7, і процес масоперенесення за каскадного розпаду частинок описується в загальному випадку системами рівнянь (1.81), а в безрозмірних змінних (2.1) – рівняннями (2.3). Розглянемо масоперенесення розпадних частинок у шарі (рис.2.1) за крайових умов I-го роду. Тоді для одновимірного за просторовими координатами випадку системи рівнянь гетеродифузії (2.3) зведуться до такого вигляду: для  $i = 0$

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_1^{(0)}}{\partial \tau} &= \frac{\partial^2 c_1^{(0)}}{\partial \xi^2} + d_1^{(0)} \frac{\partial^2 c_2^{e(0)}}{\partial \xi^2} - a_{11}^{(0)} c_1^{(0)} + a_{12}^{(0)} c_2^{e(0)}, \\ \frac{\partial c_2^{e(0)}}{\partial \tau} &= d_2^{(0)} \frac{\partial^2 c_1^{(0)}}{\partial \xi^2} + d^{e(0)} \frac{\partial^2 c_2^{e(0)}}{\partial \xi^2} + a_{21}^{(0)} c_1^{(0)} - a_{22}^{(0)} c_2^{e(0)}; \end{aligned} \quad (3.1a)$$

для  $i = \overline{1, N-1}$

$$\frac{\partial c_1^{(i)}}{\partial \tau} = d_0^{(i)} \frac{\partial^2 c_1^{(i)}}{\partial \xi^2} + d_1^{e(i)} \frac{\partial^2 c_2^{e(i)}}{\partial \xi^2} - a_{11}^{(i)} c_1^{(i)} + a_{12}^{(i)} c_2^{e(i)} + a_{\lambda 1}^{(i-1)} c_1^{(i-1)},$$



$$\frac{\partial c_2^{e(i)}}{\partial \tau} = d_2^{(i)} \frac{\partial^2 c_1^{(i)}}{\partial \xi^2} + d^{e(i)} \frac{\partial^2 c_2^{e(i)}}{\partial \xi^2} + a_{21}^{(i)} c_1^{(i)} - a_{22}^{(i)} c_2^{e(i)} + a_{\lambda 2}^{e(i-1)} c_2^{e(i-1)}; \quad (3.1б)$$

для  $i = N$

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_1^{(N)}}{\partial \tau} &= d_0^{(N)} \frac{\partial^2 c_1^{(N)}}{\partial \xi^2} + d_1^{e(N)} \frac{\partial^2 c_2^{e(N)}}{\partial \xi^2} - a_{11}^{(N)} c_1^{(N)} + a_{12}^{e(N)} c_2^{e(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 1}^{(iN)} c_1^{(i)}, \\ \frac{\partial c_2^{e(N)}}{\partial \tau} &= d_2^{(N)} \frac{\partial^2 c_1^{(N)}}{\partial \xi^2} + d^{e(N)} \frac{\partial^2 c_2^{e(N)}}{\partial \xi^2} + a_{21}^{(N)} c_1^{(N)} - \\ &- a_{22}^{(N)} c_2^{e(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 2}^{(iN)} c_2^{e(i)}. \end{aligned} \quad (3.1в)$$

Приймемо, що у початковий момент часу домішкові речовини були відсутні в тілі, тобто

$$c_1^{(i)}(\xi, \tau) \Big|_{\tau=0} = c_2^{e(i)}(\xi, \tau) \Big|_{\tau=0} = 0, \quad i = \overline{0, N}, \quad (3.2)$$

а для часів  $\tau > 0$  на поверхні шару  $\xi = 0$  підтримується стало значення сумарної концентрації  $c_0$ , яке між різними шляхами міграції для  $i = 0$  розподіляється так

$$c_1^{(0)}(\xi, \tau) \Big|_{\xi=0} = \alpha c_0, \quad c_2^{e(0)}(\xi, \tau) \Big|_{\xi=0} = (1 - \alpha) c_0, \quad (3.3а)$$

де  $\alpha$  ( $0 \leq \alpha \leq 1$ ) – параметр, який визначає частку домішкової речовини, що з поверхні тіла потрапила на швидкий шлях міграції (у водний поровий розчин).

Для  $i = 1, \dots, N$  приймаємо нульову граничну умову:

$$c_1^{(i)}(\xi, \tau) \Big|_{\xi=0} = 0, \quad c_2^{e(i)}(\xi, \tau) \Big|_{\xi=0} = 0, \quad i = \overline{1, N}. \quad (3.3б)$$

Вважаємо, що на «нижній» границі шару  $\xi = \xi_0$  концентрація частинок на всіх етапах розпаду дорівнює нулю, тобто

$$c_1^{(i)}(\xi, \tau) \Big|_{\xi=\xi_0} = c_2^{e(i)}(\xi, \tau) \Big|_{\xi=\xi_0} = 0, \quad i = \overline{0, N}. \quad (3.3в)$$

Зазначимо, що нульові крайові умови для  $i = \overline{1, N}$  означають, що джерелом маси на  $i$ -му кроці розпаду є тільки ті частинки, що утворились внаслідок розпаду на кроці  $i - 1$ .

Зауважимо також, що коефіцієнт поверхневого розподілу домішкових частинок між станами  $\alpha$  можна визначити, наприклад, з умови термодинамічної рівноваги щодо процесу переходу частинок між різними шляхами міграції [80], тобто з умови (1.87), яка у безрозмірній формі прийме вигляд

$$a_{21}^{(0)}c_1^{(0)}(\xi, \tau) - a_{12}^{(0)}c_2^{(0)}(\xi, \tau) = 0.$$

Тоді, враховуючи означення сумарної концентрації  $c^{(0)} = c_1^{(0)} + c_2^{(0)}$ , маємо значення величини  $\alpha$ , що відповідає рівноважному стану

$$\alpha_{eq} = \frac{a_{12}^{(0)}}{a_{12}^{(0)} + a_{21}^{(0)}}.$$

Як і для розглянутих у попередньому розділі часткових моделей, крайові задачі (3.1)-(3.3) можуть використовуватись не тільки як частковий випадок загальної моделі гетеродифузії з пастками за умов локальної термодинамічної рівноваги щодо процесу масообміну між другим та третім станами розпадних домішкових частинок, наприклад, для спрощення постановки задачі та відповідних обчислень, але й розглянатись як окрема задача гетеродифузії двома шляхами за каскадного розпаду мігруючої речовини. У цьому випадку схема каскадного розпаду частинок та процеси сорбції-десорбції співпадає зі схемою для моделі ефективної дифузії у середовищі з пастками (рис. 2.18). Тоді математична модель гетеродифузії описує процес масоперенесення двома шляхами із суттєво різними коефіцієнтами дифузії, який супроводжується масообміном частинками між ними (сорбція-десорбція). Такий процес масоперенесення характерний для дрібнодисперсних і полікристалічних тіл, або для дифузії домішок у металах [76].

### 3.1.2. Побудова розв'язків крайових задач гетеродифузії каскадного типу

Розв'язок крайової задачі (3.1a), (3.2), (3.3a), (3.3b) для кроку  $i = 0$  розпаду речовини знайдемо з допомогою інтегральних перетворень у введених тут позначеннях аналогічно до простіших випадків, отриманих у працях [76, 80].



Для цього перейдемо до нових функцій, які задовольняють нульовим граничним умовам:

$$f_1(\tau, \xi) = c_1^{(0)}(\tau, \xi) - \alpha c_0 \left( 1 - \frac{\xi}{\xi_0} \right); \quad (3.4)$$

$$f_2(\tau, \xi) = c_2^{(0)}(\tau, \xi) - (1 - \alpha)c_0 \left( 1 - \frac{\xi}{\xi_0} \right) \quad (3.4)$$

і підставимо їх у крайову задачу (3.1а), (3.2), (3.3а), (3.3в). Тоді отримаємо наступну задачу на функції  $f_l(\tau, \xi)$ ,  $l=1,2$ :

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_1(\tau, \xi)}{\partial \tau} &= \frac{\partial^2 f_1(\tau, \xi)}{\partial \xi^2} + d_1^{(0)} \frac{\partial^2 f_2(\tau, \xi)}{\partial \xi^2} - a_{11}^{(0)} f_1(\tau, \xi) + \\ &\quad + a_{12}^{(0)} f_2(\tau, \xi) - \alpha_1 c_0 \left( 1 - \frac{\xi}{\xi_0} \right), \\ \frac{\partial f_2(\tau, \xi)}{\partial \tau} &= d_2^{(0)} \frac{\partial^2 f_1(\tau, \xi)}{\partial \xi^2} + d^{(0)} \frac{\partial^2 f_2(\tau, \xi)}{\partial \xi^2} + a_{21}^{(0)} f_1(\tau, \xi) - \\ &\quad - a_{22}^{(0)} f_2(\tau, \xi) + \alpha_2 c_0 \left( 1 - \frac{\xi}{\xi_0} \right); \end{aligned} \quad (3.5)$$

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

$$f_1(\tau, \xi)|_{\xi=0} = f_2(\tau, \xi)|_{\xi=0} = f_1(\tau, \xi)|_{\xi=\xi_0} = f_2(\tau, \xi)|_{\xi=\xi_0}, \quad (3.6)$$

де  $\alpha_1 = a_{12}^{(0)}(1 - \alpha) - a_{11}^{(0)}\alpha$ ,  $\alpha_2 = a_{22}^{(0)}(1 - \alpha) - a_{21}^{(0)}\alpha$ .

Розв'язок одержаної задачі (3.5)-(3.6) шукаємо у вигляді розкладів у тригонометричні ряди:

$$f_i(\tau, \xi) = \sum_{n=1}^{\infty} f_{in}(\tau, n) \sin y_n \xi, \quad i = 1, 2. \quad (3.7)$$

Тут, як і у попередніх випадках,  $y_n = n\pi/\xi_0$ .

Врахуємо відомий розклад [76] у ряд за  $\sin y_n \xi$

$$1 - \frac{\xi}{\xi_0} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2}{n\pi} \sin(y_n \xi). \quad (3.8)$$

Підставляємо функції (3.7) в задачу (3.5)-(3.6), і з використанням співвідношення (3.8) одержимо систему звичайних диференціальних рівнянь

$$\begin{aligned}\frac{\partial f_{1n}(\tau, n)}{\partial \tau} &= -\left(y_n^2 + a_{11}^{(0)}\right)f_{1n}(\tau, n) - \left(d_1^{(0)}y_n^2 - a_{12}^{(0)}\right)f_{2n}(\tau, n) - \alpha_1 \frac{2c_0}{n\pi}; \\ \frac{\partial f_{2n}(\tau, n)}{\partial \tau} &= -\left(d_2^{(0)}y_n^2 - a_{21}^{(0)}\right)f_{1n}(\tau, n) - \left(d_2^{(0)}y_n^2 + a_{22}^{(0)}\right)f_{2n}(\tau, n) + \alpha_2 \frac{2c_0}{n\pi} \quad (3.9)\end{aligned}$$

з початковими умовами

$$f_1(\tau, n)|_{\tau=0} = -\alpha \frac{2c_0}{n\pi}; \quad f_2(\tau, \xi)|_{\tau=0} = -(1-\alpha) \frac{2c_0}{n\pi}. \quad (3.10)$$

Застосуємо до задачі (3.9), (3.10) перетворення Лапласа за часом ( $\tau \rightarrow s$ ;  $f_{in}(\tau, n) \rightarrow \bar{f}_{in}(s, n)$ ). Тоді в зображеннях отримаємо систему алгебраїчних рівнянь, а саме:

$$\begin{aligned}(s + y_n^2 + a_{11}^{(0)})\bar{f}_{1n}(s, n) + \left(d_1^{(0)}y_n^2 - a_{12}^{(0)}\right)\bar{f}_{2n}(s, n) &= -\frac{2c_0}{n\pi} \left(\alpha + \frac{\alpha_1}{s}\right), \\ \left(d_2^{(0)}y_n^2 - a_{21}^{(0)}\right)\bar{f}_{1n}(s, n) + \left(s + d_2^{(0)}y_n^2 + a_{22}^{(0)}\right)\bar{f}_{2n}(s, n) &= -\frac{2c_0}{n\pi} \left((1-\alpha) - \frac{\alpha_2}{s}\right). \quad (3.11)\end{aligned}$$

Шукаємо головний визначник системи рівнянь (3.11)

$$\Delta = \begin{vmatrix} s + y_n^2 + a_{11}^{(0)} & d_1^{(0)}y_n^2 - a_{12}^{(0)} \\ d_2^{(0)}y_n^2 - a_{21}^{(0)} & s + d_2^{(0)}y_n^2 + a_{22}^{(0)} \end{vmatrix} = s^2 + \eta_1 s + \eta_2 = (s - s_1)(s - s_2),$$

де  $\eta_1 = (d^{(0)} + 1)y_n^2 + a_{22}^{(0)} + a_{11}^{(0)}$ ;  $\eta_2 = (d^{(0)} - d_1^{(0)}d_2^{(0)})y_n^4 + (a_{22}^{(0)} + a_{11}^{(0)}d_2^{(0)} + d_1^{(0)}a_{21}^{(0)} + d_2^{(0)}a_{12}^{(0)})y_n^2 + a_{11}^{(0)}a_{22}^{(0)} - a_{12}^{(0)}a_{21}^{(0)}$ ;  $s_{1,2}$  - корені квадратного рівняння  $s^2 + \eta_1 s + \eta_2 = 0$ , тобто

$$s_{1,2} = -\frac{\eta_1}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\eta_1}{2}\right)^2 - \eta_2}.$$

Знайдемо допоміжні визначники

$$\Delta_1 = \frac{2c_0}{n\pi} \begin{vmatrix} -\left(\alpha + \frac{\alpha_1}{s}\right) & d_1^{(0)}y_n^2 - a_{12}^{(0)} \\ -(1-\alpha) + \frac{\alpha_2}{s} & s + d_2^{(0)}y_n^2 + a_{22}^{(0)} \end{vmatrix} = -\frac{2c_0}{n\pi} \left(\alpha s + p_1 + \frac{p_2}{s}\right);$$



$$\Delta_2 = \frac{2c_0}{n\pi} \begin{vmatrix} s + y_n^2 + a_{11}^{(0)} & -\left(\alpha + \frac{\alpha_1}{s}\right) \\ d_2^{(0)}y_n^2 - a_{21}^{(0)} & -(1-\alpha) + \frac{\alpha_2}{s} \end{vmatrix} = -\frac{2c_0}{n\pi} \left( (1-\alpha)s + p'_1 + \frac{p'_2}{s} \right);$$

де  $p_1 = (\alpha d^{(0)} - d_1^{(0)}(1-\alpha))y_n^2 + \alpha a_{22}^{(0)} + \alpha_1 + (1-\alpha)a_{12}^{(0)}$ ,  $p_2 = (d_1^{(0)}\alpha_2 + d^{(0)}\alpha_1)y_n^2 + \alpha_1 a_{22}^{(0)} - \alpha_2 a_{12}^{(0)}$ ,  $p'_1 = (1-\alpha - \alpha d_2^{(0)})y_n^2 + a(1-\alpha)_{11}^{(0)} + \alpha a_{21}^{(0)} + \alpha_2$ ;  $p'_2 = (\alpha_2 + \alpha_1 d_2^{(0)})y_n^2 + \alpha_2 a_{11}^{(0)} - \alpha_1 a_{21}^{(0)}$ .

Таким чином розв'язок системи (3.5) знаходимо у вигляді

$$\bar{f}_{1n}(s, n) = \frac{\Delta_1}{\Delta} = -\frac{2c_0}{n\pi} \frac{\alpha s + p_1 + p_2/s}{(s-s_1)(s-s_2)},$$

$$\bar{f}_{2n}(s, n) = \frac{\Delta_2}{\Delta} = -\frac{2c_0}{n\pi} \frac{(1-\alpha)s + p'_1 + p'_2/s}{(s-s_1)(s-s_2)}.$$

До отриманих виразів застосуємо обернене перетворення Лапласа

$$f_{1n}(\tau, n) = -\frac{2c_0}{n\pi} \left\{ \frac{1}{(s_1-s_2)} \left[ \left( \alpha s_1 + p_1 + \frac{p_2}{s_1} \right) e^{s_1\tau} - \left( \alpha s_2 + p_1 + \frac{p_2}{s_2} \right) e^{s_2\tau} \right] + \frac{p_2}{s_1 s_2} \right\};$$

$$f_{2n}(\tau, n) = -\frac{2c_0}{n\pi} \left\{ \frac{1}{(s_1-s_2)} \left[ \left( (1-\alpha)s_1 + p'_1 + \frac{p'_2}{s_1} \right) e^{s_1\tau} - \left( (1-\alpha)s_2 + p'_1 + \frac{p'_2}{s_2} \right) e^{s_2\tau} \right] + \frac{p'_2}{s_1 s_2} \right\}. \quad (3.12)$$

Виконаємо обернене  $\sin$ -перетворення Фур'є виразів (3.12) за формулою (3.7). Тоді маємо

$$f_1(\tau, \xi) = -\frac{2c_0}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin y_n \xi}{n} \left\{ \frac{1}{s_1-s_2} \left[ \left( \alpha s_1 + p_1 + \frac{p_2}{s_1} \right) e^{s_1\tau} - \left( \alpha s_2 + p_1 + \frac{p_2}{s_2} \right) e^{s_2\tau} \right] + \frac{p_2}{s_1 s_2} \right\};$$

$$f_2(\tau, \xi) = -\frac{2c_0}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin y_n \xi}{n} \left\{ \frac{1}{s_1 - s_2} \left[ \left( (1-\alpha)s_1 + p'_1 + \frac{p'_2}{s_1} \right) e^{s_1 \tau} - \left( (1-\alpha)s_2 + p'_1 + \frac{p'_2}{s_2} \right) e^{s_2 \tau} \right] + \frac{p'_2}{s_1 s_2} \right\}.$$

Просумуємо останні (асимптотичні) доданки отриманих тригонометричних рядів. Зауважимо, що

$$s_1 s_2 = \left( d^{(0)} - d_1^{(0)} d_2^{(0)} \right) y_n^4 + \left( a_{22}^{(0)} + a_{11}^{(0)} d^{(0)} + d_1^{(0)} a_{21}^{(0)} + d_2^{(0)} a_{12}^{(0)} \right) y_n^2 + a_{11}^{(0)} a_{22}^{(0)} - a_{12}^{(0)} a_{21}^{(0)}.$$

Розглянемо ряд

$$I_0^{(1)} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{p_2 \sin(y_n \xi)}{ns_1 s_2} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin(y_n \xi)}{n} \frac{an^2 + b}{cn^4 + dn^2 + e}, \quad (3.13)$$

$$\text{де } a = \left( d_1^{(0)} \alpha_2 + d^{(0)} \alpha_1 \right) \frac{\pi^2}{\xi_0^2}, \quad b = \alpha \alpha_1 a_{22}^{(0)} - \alpha_2 a_{12}^{(0)}, \quad c = \left( d^{(0)} - d_1^{(0)} d_2^{(0)} \right) \frac{\pi^4}{\xi_0^4},$$

$$d = \left( a_{22}^{(0)} + a_{11}^{(0)} d^{(0)} + d_1^{(0)} a_{21}^{(0)} + d_2^{(0)} a_{12}^{(0)} \right) \frac{\pi^2}{\xi_0^2}, \quad e = a_{11}^{(0)} a_{22}^{(0)} - a_{12}^{(0)} a_{21}^{(0)}.$$

Розкладемо останній множник виразу під знаком суми у формулі (3.13) на прості дроби:

$$\frac{ax^2 + b}{cx^4 + dx^2 + e} = \frac{A'}{x^2 - x_1^2} + \frac{B'}{x^2 - x_2^2}.$$

Розглянемо ряд

$$I_0^{(1)} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(an^2 + b) \sin(ny)}{n(cn^4 + dn^2 + e)} = a \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n \sin(ny)}{cn^4 + dn^2 + e} + b \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin(ny)}{n(cn^4 + dn^2 + e)}. \quad (3.14)$$

Тут  $y = \pi \xi / \xi_0$ .

Подамо знаменник у формулі (3.14) у вигляді  $cn^4 + dn^2 + e = c(n^2 - x_1^2)(n^2 - x_2^2)$ , де  $x_{1,2} = \frac{1}{2} \left( -\frac{d}{c} \pm \sqrt{\frac{d^2}{c^2} - 4e} \right)$ . Тоді розклад на прості дроби має вигляд:



$$\frac{1}{c(n^2 - x_1^2)(n^2 - x_2^2)} = \frac{1}{c} \left( \frac{A'}{n^2 - x_1^2} + \frac{B'}{n^2 - x_2^2} \right).$$

Звідси знаходимо  $A' + B' = 0$ ;  $A'x_2^2 + B'x_1^2 = -1$ . Тоді коефіцієнти розкладу на прості дроби мають вигляд

$$A' = \frac{1}{x_1^2 - x_2^2}; \quad B' = \frac{-1}{x_1^2 - x_2^2} = \frac{-c}{\sqrt{d^2 - 4ec^2}},$$

а отже маємо

$$\begin{aligned} \frac{1}{c(n^2 - x_1^2)(n^2 - x_2^2)} &= \frac{1}{c(x_1^2 - x_2^2)} \left( \frac{1}{n^2 - x_1^2} - \frac{1}{n^2 - x_2^2} \right) = \\ &= \frac{-c}{\sqrt{d^2 - 4ec^2}} \left( \frac{1}{n^2 - x_1^2} - \frac{1}{n^2 - x_2^2} \right). \end{aligned}$$

Тоді формулу (3.14) подамо наступним чином

$$\begin{aligned} I_0^{(1)} &= \frac{-c}{\sqrt{d^2 - 4ec^2}} \left( a \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n \sin(ny)}{n^2 - x_1^2} - a \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n \sin(ny)}{n^2 - x_2^2} + \right. \\ &\quad \left. + b \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin(ny)}{n(n^2 - x_1^2)} - b \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin(ny)}{n(n^2 - x_2^2)} \right). \end{aligned}$$

Для підсумовування одержаного виразу використаємо відомий ряд [53]:

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

обидві частини якого двічі проінтегруємо:

$$-\sum_{k=1}^{\infty} \frac{\sin kx}{k(k^2 - a^2)} = \frac{\pi}{2a^2} \left[ -\frac{\sin(\pi - x)a}{\sin \pi a} - k_1 x - k_2 \right]. \quad (3.15)$$

Тут  $k_1, k_2$  - стали інтегрування.

Ліва частина рівності (3.15) дорівнює нулю, якщо  $x = 0$  і  $x = \pi$  ( $\forall x \in [0; \pi]$ ). Тоді з правої частини (3.15) знаходимо:

$$1 + k_2 = 0 \Rightarrow k_2 = -1;$$

$$k_1\pi - 1 = 0 \Rightarrow k_1 = \frac{1}{\pi}.$$

В результаті отримаємо:

$$\sum_{k=1}^{\infty} \frac{\sin kx}{k(k^2 - a^2)} = \frac{\pi}{2a^2} \left[ \frac{x}{\pi} - 1 + \frac{\sin(\pi - x)a}{\sin \pi a} \right].$$

І остаточно знаходимо вираз для  $I_0^{(1)}$ :

$$\begin{aligned} I_0^{(1)} &= \frac{\pi}{2\sqrt{d^2 - 4ec^2}} \left( a \frac{\sin(\pi - y)x_1}{\sin \pi x_1} - a \frac{\sin(\pi - y)x_2}{\sin \pi x_2} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{b}{x_1^2} \left( \frac{y}{\pi} - 1 + \frac{\sin(\pi - y)x_1}{\sin \pi x_1} \right) - \frac{b}{x_2^2} \left( \frac{y}{\pi} - 1 + \frac{\sin(\pi - y)x_2}{\sin \pi x_2} \right) \right) = \\ &= \frac{\pi}{2\sqrt{d^2 - 4ec^2}} \left[ b \left( \frac{y}{\pi} - 1 \right) \frac{x_2^2 - x_1^2}{x_2^2 x_1^2} + \left( a + \frac{b}{x_1^2} \right) \frac{\sin(\pi - y)x_1}{\sin \pi x_1} - \right. \\ &\quad \left. - \left( a + \frac{b}{x_2^2} \right) \frac{\sin(\pi - y)x_2}{\sin \pi x_2} \right] = \frac{\pi}{2} \left[ \frac{b}{ce} \left( -\frac{y}{\pi} - 1 \right) + \frac{\pi}{\sqrt{d^2 - 4ec^2}} \times \right. \\ &\quad \left. \times \left( \left( a + \frac{b}{x_1^2} \right) \frac{\sin(\pi - y)x_1}{\sin \pi x_1} - \left( a + \frac{b}{x_2^2} \right) \frac{\sin(\pi - y)x_2}{\sin \pi x_2} \right) \right], \end{aligned}$$

оскільки  $x_1^2 x_2^2 = e$ .

Розглянемо тепер підсумування асимптотичного доданку у тригонометричному ряді для  $f_{2n}(\tau, n)$ :

$$I_0^{(2)} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{p'_2 \sin(y_n \xi)}{ns_1 s_2} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin(y_n \xi)}{n} \frac{a'n^2 + b'}{cn^4 + dn^2 + e},$$

$$\text{де } a' = (\alpha_2 + \alpha_1 d_2^{(0)}) \frac{\pi^2}{\xi^2}, \quad b' = \alpha_2 a_{11}^{(0)} - \alpha_1 a_{21}^{(0)}.$$

Аналогічно до  $f_{2n}(\tau, n)$  отримаємо асимптотичний доданок у вигляді

$$I_0^{(2)} = \frac{\pi}{2} \left[ -\frac{b'}{ce} \left( \frac{y}{\pi} + 1 \right) + \frac{\pi}{\sqrt{d^2 - 4ec^2}} \left( \left( a' + \frac{b'}{x_1^2} \right) \frac{\sin(\pi - y)x_1}{\sin \pi x_1} - \right. \right.$$



$$-\left( a' + \frac{b'}{x_2^2} \right) \frac{\sin(\pi - y)x_2}{\sin \pi x_2} \Bigg] .$$

Зазначимо, що  $\sin(\pi - y)x_{1,2} = \sin\left(\frac{\pi x_{1,2}}{\xi_0}(\xi_0 - \xi)\right)$ ,  $1 - \frac{y}{\pi} = 1 - \frac{\xi}{\xi_0}$ .

Тоді отримаємо наступні вирази для функцій  $f_j(\tau, \xi)$ :

$$\begin{aligned} f_1(\tau, \xi) = & -c_0 \left\{ \frac{\tilde{b}_1}{ce} \left( 1 - \frac{\xi}{\xi_0} \right) + \frac{1}{\sqrt{d^2 - 4ec^2}} \left[ \left( \tilde{a}_1 + \frac{\tilde{b}_1}{x_1} \right) \frac{\sin(\pi - y)x_1}{\sin \pi x_1} - \right. \right. \\ & \left. \left. - \left( \tilde{a}_1 + \frac{\tilde{b}_1}{x_2} \right) \frac{\sin(\pi - y)x_2}{\sin \pi x_2} \right] + \frac{2c_0}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin y_n \xi}{y_n(s_1 - s_2)} \left[ \left( \alpha s_1 + p_1 + \frac{p_2}{s_1} \right) e^{s_1 \tau} - \right. \right. \\ & \left. \left. - \left( \alpha s_2 + p_1 + \frac{p_2}{s_2} \right) e^{s_2 \tau} \right] \right\}; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} f_1(\tau, \xi) = & -c_0 \left\{ \frac{\tilde{b}}{ce} \left( 1 - \frac{\xi}{\xi_0} \right) + \frac{1}{\sqrt{d^2 - 4ec^2}} \left[ \left( \tilde{a}_1 + \frac{\tilde{b}_1}{x_1} \right) \frac{\sin(\pi - y)x_1}{\sin \pi x_1} - \right. \right. \\ & \left. \left. - \left( \tilde{a}_2 + \frac{\tilde{b}_2}{x_2} \right) \frac{\sin(\pi - y)x_2}{\sin \pi x_2} \right] + \frac{2c_0}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin y_n \xi}{y_n(s_1 - s_2)} \times \right. \\ & \left. \times \left[ \left( (1 - \alpha)s_1 + p'_1 + \frac{p'_2}{s_1} \right) e^{s_1 \tau} - \left( (1 - \alpha)s_2 + p'_1 + \frac{p'_2}{s_2} \right) e^{s_2 \tau} \right] \right\}, \end{aligned}$$

$$\text{де } \tilde{a}_1 = \left( d_1^{(0)} \alpha_2 + d^{(0)} \alpha_1 \right) \frac{\pi^2}{\xi_0^2}, \quad \tilde{b}_1 = \alpha_1 a_{22}^{(0)} - \alpha_2 a_{12}^{(0)}, \quad \tilde{a}_2 = \left( \alpha_2 + \alpha_1 d_2^{(0)} \right) \frac{\pi^2}{\xi_0^2},$$

$$\tilde{b}_2 = \alpha_2 a_{11}^{(0)} - \alpha_1 a_{21}^{(0)}.$$

Враховуючи заміну (3.4), остаточно одержимо концентрація розпадної домішки на швидкому шляху міграції

$$\frac{c_1^{(0)}(\tau, \xi)}{c_0} = \left\{ \alpha - \frac{\tilde{b}_1}{ce} \left( 1 - \frac{\xi}{\xi_0} \right) - B \left[ \left( \tilde{a}_1 + \frac{\tilde{b}_1}{x_1} \right) \frac{\sin(\pi - y)x_1}{\sin \pi x_1} - \right. \right. \\$$

$$\begin{aligned} & - \left( \tilde{a}_1 + \frac{\tilde{b}_1}{x_2} \right) \frac{\sin(\pi - y)x_2}{\sin \pi x_2} \Bigg] - \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin y_n \xi}{y_n(s_1 - s_2)} \times \\ & \times \left[ \left( \alpha s_1 + p_1 + \frac{p_2}{s_1} \right) e^{s_1 \tau} - \left( \alpha s_2 + p_1 + \frac{p_2}{s_2} \right) e^{s_2 \tau} \right], \end{aligned} \quad (3.16a)$$

концентрація розідливих частинок на повільному шляху міграції

$$\begin{aligned} \frac{c_2^{(0)}(\tau, \xi)}{c_0} = & \left\{ 1 - \alpha - \frac{\tilde{b}_2}{ce} \right\} \left( 1 - \frac{\xi}{\xi_0} \right) - B \left[ \left( \tilde{a}_2 + \frac{\tilde{b}_2}{x_1} \right) \frac{\sin(\pi - y)x_1}{\sin \pi x_1} - \right. \\ & \left. - \left( \tilde{a}_2 + \frac{\tilde{b}_2}{x_2} \right) \frac{\sin(\pi - y)x_2}{\sin \pi x_2} \right] - \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin y_n \xi}{y_n(s_1 - s_2)} \times \\ & \times \left[ \left( (1 - \alpha)s_1 + p'_1 + \frac{p'_2}{s_1} \right) e^{s_1 \tau} - \left( (1 - \alpha)s_2 + p'_1 + \frac{p'_2}{s_2} \right) e^{s_2 \tau} \right], \end{aligned} \quad (3.16b)$$

сумарна концентрація розідливої речовини  $c(\tau, \xi) = c_1(\tau, \xi) + c_2(\tau, \xi)$

$$\begin{aligned} \frac{c^{(0)}(\tau, \xi)}{c_0} = & \left\{ 1 - \frac{\tilde{b}}{ce} \right\} \left( 1 - \frac{\xi}{\xi_0} \right) - B \left[ \left( \tilde{a} + \frac{\tilde{b}}{x_1} \right) \frac{\sin(\pi - y)x_1}{\sin \pi x_1} - \right. \\ & \left. - \left( \tilde{a} + \frac{\tilde{b}}{x_2} \right) \frac{\sin(\pi - y)x_2}{\sin \pi x_2} \right] - \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin y_n \xi}{y_n(s_1 - s_2)} \times \\ & \times \left[ \left( s_1 + \tilde{p}_1 + \frac{\tilde{p}_2}{s_1} \right) e^{s_1 \tau} - \left( s_2 + \tilde{p}_1 + \frac{\tilde{p}_2}{s_2} \right) e^{s_2 \tau} \right], \end{aligned} \quad (3.16b)$$

де  $B = \frac{1}{\sqrt{d^2 - 4ec^2}}$ ,  $\tilde{a} = \tilde{a}_1 + \tilde{a}_2$ ,  $\tilde{b} = \tilde{b}_1 + \tilde{b}_2$ ,  $\tilde{p}_1 = p_1 + p'_1$ ,  $\tilde{p}_2 = p_2 + p'_2$ .

Зазначимо, що отримані формули для концентрацій розідливої домішкової речовини задовільняють крайові умови задачі. Зокрема співвідношення (3.16a) і (3.16b), задовільняють умови (3.2), (3.3a) і (3.3b). В свою чергу формула (3.16b) для сумарної концентрації розідливих частинок задовільняє суму двох умов (3.3a) та нульові умови при  $\tau = 0$  і  $\xi = \xi_0$ .

У стаціонарному режимі отримаємо наступні асимптотичні вирази для концентрацій домішок на нульовому етапі розпаду



$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{c_0} c_1^{(0)}(\tau, \xi) = \left\{ \alpha - \frac{\tilde{b}_1}{ce} \right\} \left( 1 - \frac{\xi}{\xi_0} \right) - B \left[ \left( \tilde{a}_1 + \frac{\tilde{b}_1}{x_1} \right) \frac{\sin(\pi - y)x_1}{\sin \pi x_1} - \right.$$

$$\left. - \left( \tilde{a}_1 + \frac{\tilde{b}_1}{x_2} \right) \frac{\sin(\pi - y)x_2}{\sin \pi x_2} \right],$$

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{c_0} c_2^{(0)}(\tau, \xi) = \left\{ 1 - \alpha - \frac{\tilde{b}_2}{ce} \right\} \left( 1 - \frac{\xi}{\xi_0} \right) - B \left[ \left( \tilde{a}_2 + \frac{\tilde{b}_2}{x_1} \right) \frac{\sin(\pi - y)x_1}{\sin \pi x_1} - \right.$$

$$\left. - \left( \tilde{a}_2 + \frac{\tilde{b}_2}{x_2} \right) \frac{\sin(\pi - y)x_2}{\sin \pi x_2} \right],$$

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{c^{(0)}(\tau, \xi)}{c_0} = \left\{ 1 - \frac{\tilde{b}}{ce} \right\} \left( 1 - \frac{\xi}{\xi_0} \right) - B \left[ \left( \tilde{a} + \frac{\tilde{b}}{x_1} \right) \frac{\sin(\pi - y)x_1}{\sin \pi x_1} - \right.$$

$$\left. - \left( \tilde{a} + \frac{\tilde{b}}{x_2} \right) \frac{\sin(\pi - y)x_2}{\sin \pi x_2} \right].$$

Зазначимо, що і для моделі гетеродифузії двома шляхами асимптотичні доданки отриманих розв'язків є суттєво нелінійними. Проте на відміну від попередніх випадків тут фігурують відношення типу  $\frac{\sin(\pi - y)x}{\sin \pi x}$ , а не різні комбінації відношень гіперболічних синусів. При цьому кожне з таких відношень є меншим ніж 1.

Також зауважимо, що лінійні частини асимптотичних доданків розв'язків відповідної задачі гетеродифузії нерозпадної речовини, тобто  $1 - \xi/\xi_0$ , пропорційні коефіцієнту, який визначає долю домішки, що потрапила з поверхні на відповідний шлях міграції ( $\alpha$ ,  $1 - \alpha$  і 1). В той же час урахування розпаду мігруючої речовини призводить до появи в таких коефіцієнтах деякої «поправки» ( $\tilde{b}_1/ce$ ,  $\tilde{b}_2/ce$  і  $\tilde{b}/ce$ ). Враховуючи, що ці «поправки» є невід'ємними, то лінійні частини асимптот функцій (3.16) є не більшими аналогічних доданків концентрацій нерозпадної речовини, причому у кожному стані зокрема.

Для інших кроків каскадного розпаду  $i = 1, N - 1$  розв'язки

крайових задач (3.1б), (3.2), (3.3б), (3.3в) як і для попередніх модельних варіантів подаємо через відповідні функції Гріна.

$$c_1^{(i)}(\tau, \xi) = a_{\lambda 1}^{(i-1)} \int_0^{\tau} \int_0^{\xi} G_1^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') c_1^{(i-1)}(\tau', \xi') d\xi' d\tau'; \quad (3.17a)$$

$$c_2^{e(i)}(\tau, \xi) = a_{\lambda 2}^{e(i-1)} \int_0^{\tau} \int_0^{\xi} G_2^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') c_2^{e(i-1)}(\tau', \xi') d\xi' d\tau'. \quad (3.17b)$$

Тут  $G_1^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')$ ,  $G_2^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')$  - функції Гріна задачі (3.1б), (3.2), (3.3б), (3.3в) для  $i = \overline{1, N-1}$ .

Тоді, знайшовши функції Гріна і визначивши концентрації розпадних домішкових частинок на кроці  $i-1$ , за співвідношеннями (3.17) знайдемо відповідні концентрації розпадної речовини для  $i = \overline{1, N-1}$ .

Для випадку  $i = N$  (нерозпадні домішки) процес масоперенесення для даної моделі гетеродифузії описується крайовою задачею (3.1в), (3.2), (3.3б), (3.3в). Її розв'язок також подамо через відповідні функції Гріна аналогічно до (3.17) для  $i = \overline{1, N-1}$ , а саме

$$c_1^{(N)}(\xi, \tau) = \int_0^{\tau} \int_0^{\xi_0} G_1^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 1}^{(iN)} c_1^{(i)}(\xi', \tau') d\xi' d\tau'; \quad (3.18a)$$

$$c_2^{e(N)}(\xi, \tau) = \int_0^{\tau} \int_0^{\xi_0} G_2^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 2}^{e(iN)} c_2^{e(i)}(\xi', \tau') d\xi' d\tau', \quad (3.18b)$$

де  $G_j^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')$  ( $j = 1, 2$ ) - функції Гріна задачі (3.1в), (3.2), (3.3б), (3.3в).

### 3.1.3. Функції Гріна крайових задач гетеродифузії двома шляхами

Нехай вектор-функція  $\mathbf{c}(\xi, \tau) = \begin{pmatrix} c_1(\xi, \tau) \\ c_2(\xi, \tau) \end{pmatrix}$  є такою, що її елементи  $c_i(\xi, \tau)$ ,  $i = 1, 2$ , є неперервними за змінними  $\xi$ ,  $\tau$  в області  $R = \{(\xi, \tau) : \xi \in [0; \xi_0], \tau \in \mathbb{R}_+\}$ ; задовільняють умову Ліпшиця за



змінною  $\xi$  в області  $R$  з константою  $l$  [54, 57].

Розглянемо лінійну крайову задачу для системи зв'язаних диференціальних рівнянь в часткових похідних другого порядку

$$L[c(\xi, \tau)] = F(\xi, \tau), \quad (3.19)$$

де  $L = \begin{pmatrix} L_1^{c_1}(\xi, \tau) & L_1^{c_2}(\xi, \tau) \\ L_2^{c_1}(\xi, \tau) & L_2^{c_2}(\xi, \tau) \end{pmatrix}$  - матричний диференціальний оператор, в

якому  $L_1^{c_1}(\xi, \tau) = \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + a_{11}$ ,  $L_1^{c_2}(\xi, \tau) \equiv L_1^{c_2}(\xi) = -d_1 \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} - a_{12}$ ,  $L_2^{c_1}(\xi, \tau) \equiv L_2^{c_1}(\xi) = -d_2 \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} - a_{21}$ ,  $L_2^{c_2}(\xi, \tau) = \frac{\partial}{\partial \tau} - d \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + a_{22}$  (верхні індекси елементів матриці оператора вказують на яку функцію діє даний елемент матричного оператора);  $F(\xi, \tau) = \begin{pmatrix} F_1(\xi, \tau) \\ F_2(\xi, \tau) \end{pmatrix}$  - вектор-функція джерел, де  $F_i(z, t) \in L_2 \vee F_i \in D(\mathfrak{H}^2) \vee F_i \in \langle \Omega, \sigma, P \rangle$ .

Нехай задані крайової умови

$$c(\xi, \tau) \Big|_{\tau=0} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad c(\xi, \tau) \Big|_{\xi=0} = c_0 = \begin{pmatrix} c_0^{(1)} \\ c_0^{(2)} \end{pmatrix}; \quad c(\xi, \tau) \Big|_{\xi=\xi_0} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (3.20)$$

де  $c_0^{(i)} \in L_2$ .

Якщо  $|c(z, t) - c_0(z, t)| \leq \beta$  для  $\forall t \in \mathfrak{R}_+$ ,  $z \in [0, z_0]$  ( $\beta$  - відома додатна константа), тоді існує єдиний класичний розв'язок задачі (3.19), (3.20) [4].

**Означення 3.1.** Функцією Гріна задачі (3.19), (3.20) називається матрична функція

$$G(\xi, \xi'; \tau, \tau') = \begin{pmatrix} G_1(\xi, \xi'; \tau, \tau') & 0 \\ 0 & G_2(\xi, \xi'; \tau, \tau') \end{pmatrix},$$

яка визначена в чотиривимірній області  $K = K_1 \times K_2 =$

$= \{(\xi, \xi'; \tau, \tau') | \xi, \xi' \in [0, \xi_0]; \tau, \tau' \in \mathfrak{R}_+ : \tau' < \tau\}$  і задоволяє такі умови:

1) в  $K$  матрична функція  $G(\xi, \xi'; \tau, \tau')$  є неперервною і має неперервні похідні за змінною  $\tau$ ;

2) для довільних  $\xi' \in [0, \xi_0]$ ,  $\tau' \in \mathfrak{R}_+$  має неперервні похідні

першого і другого порядку за змінною  $\xi$  в кожному з інтервалів  $[0, \xi']$  і  $(\xi', \xi_0]$ , причому похідна першого порядку за змінною  $\xi$  в точці  $\xi = \xi'$  має стрибок, що дорівнює одиниці:

$$\frac{\partial}{\partial \xi} \mathbf{G}(\xi + 0, \xi'; \tau, \tau') - \frac{\partial}{\partial \xi} \mathbf{G}(\xi - 0, \xi'; \tau, \tau') = 1;$$

3)  $\mathbf{G}(\xi, \xi'; \tau, \tau') = 0$  при  $\tau \leq \tau'$ ;

4) в кожному з інтервалів  $[0, \xi']$  і  $(\xi', \xi_0]$  для  $\tau' \leq \tau$  функція  $\mathbf{G}(\xi, \xi'; \tau, \tau')$  як функція змінної  $\xi$  є розв'язком однорідного рівняння

$$\mathbf{L}[\mathbf{G}(\xi, \xi'; \tau, \tau')] = 0;$$

5)  $\mathbf{G}(\xi, \xi'; \tau, \tau')$  як функція змінних  $\xi, \tau$  задовільняє нульові крайові умови типу (2).

Зазначимо, що в банаховому просторі  $\overline{C}^{(n,q)}(D^p)$  вектор-функції  $\mathbf{c}(\xi, \tau)$  з нормою

$$\|\mathbf{c}\|_{\overline{C}^{(\bar{n},2)}(D^p)} = \sum_{j=1}^2 \|c_j\|_{\overline{C}^{(n_j,2)}(D^p)},$$

де  $D^p \equiv K' = \{(\xi, \xi'; \tau, \tau') | \xi, \xi' \in [0, z_0]; \tau, \tau' \in [0, T]; \tau' < \tau\}$ ,  $\bar{n} = (n_1, n_2)$  і  $n_1 = n_2 = 1$ , для єдиноті розв'язку крайової задачі (3.19), (3.20) необхідно і достатньо, щоб фундаментальна система розв'язків не мала б розв'язків у цілих числах [54].

Крайові задачі гетеродифузії каскадного типу (3.1)-(3.3) є еквівалентними постановці задачі (3.18), (3.19) для кожного  $i = 0, \dots, N$  зокрема, якщо  $\mathbf{c}(\xi, \tau) = \mathbf{c}^{(i)}(\xi, \tau)$ ,  $\mathbf{F}(\xi, \tau) = \mathbf{F}[\xi, \tau; \mathbf{c}^{(i-1)}(\xi, \tau)]$ ,  $\mathbf{c}^{(i)}(\xi, \tau)|_{\xi=0} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$  для  $i = \overline{1, N}$ .

Для знаходження матричних функцій Гріна  $\mathbf{G}(\xi, \xi'; \tau, \tau') = \mathbf{G}^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')$ ,  $i = \overline{1, N-1}$ , сформулюємо крайову задачу з точковим джерелом для елементів матриці:

$$\frac{\partial G_1^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')}{\partial \tau} - d_0^{(i)} \frac{\partial^2 G_1^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')}{\partial \xi^2} - d_1^{(i)} \frac{\partial^2 G_2^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')}{\partial \xi^2} +$$



3.1. Крайова задача каскадного типу для знаходження концентрацій лігуючих компонент

$$+ a_{11}^{(i)} G_1^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') - a_{12}^{(i)} G_2^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') = \delta(\tau - \tau') \delta(\xi - \xi'),$$

$$\frac{\partial G_2^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')}{\partial \tau} - d_2^{(i)} \frac{\partial^2 G_1^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')}{\partial \xi^2} - d^{e(i)} \frac{\partial^2 G_2^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')}{\partial \xi^2} -$$

$$- a_{21}^{(i)} G_1^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') + a_{22}^{(i)} G_2^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') = \delta(\tau - \tau') \delta(\xi - \xi') \quad (3.21)$$

за нульових крайових умов

$$G_1^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') \Big|_{\tau=0} = G_2^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') \Big|_{\tau=0} = 0; \quad (3.22a)$$

$$G_1^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') \Big|_{\xi=0} = G_2^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') \Big|_{\xi=0} = 0, \quad i = \overline{1, N-1}; \quad (3.22b)$$

$$G_1^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') \Big|_{\xi=\xi_0} = G_2^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') \Big|_{\xi=\xi_0} = 0, \quad i = \overline{1, N-1}. \quad (3.22b)$$

Застосуємо до крайових задач (3.21), (3.22) інтегральне перетворення Лапласа за часовою змінною ( $\tau \rightarrow s$ ,  $G_j^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') \rightarrow \bar{g}_j^{(i)}(s, \tau'; \xi, \xi')$ ,  $j = 1, 2$ ).

Тоді в зображеннях отримаємо систему звичайних диференціальних рівнянь:

$$(s + a_{11}^{(i)}) \bar{g}_1^{(i)}(s, \tau'; \xi, \xi') - a_{12}^{(i)} \bar{g}_2^{(i)}(s, \tau'; \xi, \xi') - d_0^{(i)} \frac{\partial^2 \bar{g}_2^{(i)}(s, \tau'; \xi, \xi')}{\partial \xi^2} -$$

$$- d_1^{e(i)} \frac{\partial^2 \bar{g}_2^{(i)}(s, \tau'; \xi, \xi')}{\partial \xi^2} = \delta(\xi - \xi') e^{-s\tau},$$

$$(s + a_{22}^{(i)}) \bar{g}_2^{(i)}(s, \tau'; \xi, \xi') - a_{21}^{(i)} \bar{g}_1^{(i)}(s, \tau'; \xi, \xi') - d_2^{(i)} \frac{\partial^2 \bar{g}_1^{(i)}(s, \tau'; \xi, \xi')}{\partial \xi^2} -$$

$$- d^{e(i)} \frac{\partial^2 \bar{g}_1^{(i)}(s, \tau'; \xi, \xi')}{\partial \xi^2} = \delta(\xi - \xi') e^{-s\tau} \quad (3.23)$$

з нульовими граничними умовами

$$\bar{g}_1^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') \Big|_{\xi=0} = \bar{g}_2^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') \Big|_{\xi=0} = 0;$$

$$\bar{g}_1^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') \Big|_{\xi=\xi_0} = \bar{g}_2^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') \Big|_{\xi=\xi_0} = 0, \quad i = \overline{1, N-1}. \quad (3.24)$$

До отриманої задачі застосуємо sin-перетворенні Фур'є [65]

$(\xi \rightarrow y_n, \bar{g}_j^{(i)}(s, \tau'; \xi, \xi') \rightarrow g_j^{(i)}(s, \tau'; y_n, \xi'), j = 1, 2)$ . При цьому врахуємо sin-перетворення від  $\delta$ -функції Дірака

$$\int_0^{\xi_0} \delta(\xi - \xi') \sin y_n \xi d\xi = \sin y_n \xi'. \quad (3.25)$$

Тоді в зображеннях задача (3.23), (3.24) зведеться системи алгебраїчних рівнянь

$$\begin{aligned} [s + a_{11}^{(i)} + d_0^{(i)} y_n^2] g_1^{(i)}(y_n, \xi; s, \tau') + [d_1^{(i)} y_n^2 - a_{12}^{(i)}] g_2^{(i)}(y_n, \xi; s, \tau') = \\ = \sin(y_n \xi') e^{-s\tau'}, \\ [d_2^{(i)} y_n^2 - a_{21}^{(i)}] g_1^{(i)}(y_n, \xi; s, \tau') + [s + a_{22}^{(i)} + d^{e(i)} y_n^2] g_2^{(i)}(y_n, \xi; s, \tau') = \\ = \sin(y_n \xi') e^{-s\tau'}. \end{aligned} \quad (3.26)$$

Для отримання розв'язку системи рівнянь (3.26) знайдемо її головний визначник

$$\Delta = \begin{vmatrix} s + a_{11}^{(i)} + d_0^{(i)} y_n^2 & d_1^{(i)} y_n^2 - a_{12}^{(i)} \\ d_2^{(i)} y_n^2 - a_{21}^{(i)} & s + a_{22}^{(i)} + d^{e(i)} y_n^2 \end{vmatrix} = \\ = s^2 + s \eta_1'^{(i)} + \eta_2'^{(i)} = (s - s_1^{(i)})(s - s_2^{(i)}),$$

$$\text{де } \eta_1'^{(i)} = y_n^2(d_0^{(i)} + d^{e(i)}) + a_{11}^{(i)} + a_{22}^{(i)}; \eta_2'^{(i)} = y_n^4(d_0^{(i)} d^{e(i)} - d_1^{(i)} d_2^{(i)}) + \\ + y_n^2(a_{11}^{(i)} d^{e(i)} + d_0^{(i)} a_{22}^{(i)} + a_{12}^{(i)} d_2^{(i)} + d_1^{(i)} a_{21}^{(i)}) + a_{11}^{(i)} a_{22}^{(i)} - a_{12}^{(i)} a_{21}^{(i)}.$$

Знаходимо допоміжні визначники

$$\begin{aligned} \Delta_1 = \sin(y_n \xi') e^{-s\tau'} \begin{vmatrix} 1 & d_1^{(i)} y_n^2 - a_{12}^{(i)} \\ 1 & s + a_{22}^{(i)} + d^{e(i)} y_n^2 \end{vmatrix} = \\ = \sin(y_n \xi') e^{-s\tau'} [s + y_n^2(d^{e(i)} - d_1^{(i)}) + a_{22}^{(i)} + a_{12}^{(i)}], \\ \Delta_2 = \sin(y_n \xi') e^{-s\tau'} \begin{vmatrix} s + a_{11}^{(i)} + d_0^{(i)} y_n^2 & 1 \\ d_2^{(i)} y_n^2 - a_{21}^{(i)} & 1 \end{vmatrix} = \\ = \sin(y_n \xi') e^{-s\tau'} [s + y_n^2(d_0^{(i)} - d_2^{(i)}) + a_{11}^{(i)} + a_{21}^{(i)}]. \end{aligned}$$

Введемо позначення

$$A_1 = y_n^2(d^{e(i)} - d_1^{(i)}) + a_{22}^{(i)} + a_{12}^{(i)};$$



$$A_2 = y_n^2(d_0^{(i)} - d_2^{(i)}) + a_{11}^{(i)} + a_{21}^{(i)}.$$

Тоді розв'язок системи рівнянь (3.26) має вигляд

$$g_1^{(i)}(y_n, \xi; s, \tau') = \frac{\Delta_1}{\Delta} = \frac{\sin(y_n \xi') e^{-s\tau'} (s - A_1)}{(s - s_1^{(i)})(s - s_2^{(i)})},$$

$$g_2^{(i)}(y_n, \xi; s, \tau') = \frac{\Delta_2}{\Delta} = \frac{\sin(y_n \xi') e^{-s\tau'} (s - A_2)}{(s - s_1^{(i)})(s - s_2^{(i)})}.$$

Тепер використаємо формули оберненого перетворення Лапласа [80].

$$\begin{aligned} L^{-1}\left[\frac{s}{(s - s_1^{(i)})(s - s_2^{(i)})}\right] &= \frac{1}{s_1^{(i)} - s_2^{(i)}} \left[ e^{s_1^{(i)}\tau} - e^{s_2^{(i)}\tau} \right], \\ L^{-1}\left[\frac{s}{(s - s_1^{(i)})(s - s_2^{(i)})}\right] &= \frac{1}{s_1^{(i)} - s_2^{(i)}} \left[ s_1^{(i)} e^{s_1^{(i)}\tau} - s_2^{(i)} e^{s_2^{(i)}\tau} \right]. \end{aligned}$$

Крім цього використаємо теорему запізнювання [66]

$$L^{-1}[e^{-bs} f(s)] = F(t-b)\theta(t-b), \quad b > 0.$$

Тоді маємо

$$\begin{aligned} \bar{g}_1^{(i)}(s, \tau'; \xi, \xi') &= \frac{\Theta(\tau - \tau') \sin y_n \xi'}{(s_1^{(i)} - s_2^{(i)})} \left( (s_1^{(i)} + A_1) e^{s_1^{(i)}\tau} - (s_2^{(i)} + A_1) e^{s_2^{(i)}\tau} \right); \\ \bar{g}_2^{(i)}(s, \tau'; \xi, \xi') &= \frac{\Theta(\tau - \tau') \sin y_n \xi'}{(s_1^{(i)} - s_2^{(i)})} \left( (s_1^{(i)} + A_2) e^{s_1^{(i)}\tau} - (s_2^{(i)} + A_2) e^{s_2^{(i)}\tau} \right). \end{aligned}$$

Тепер застосуємо обернене перетворення Фур'є [65]. Тоді одержимо

$$\begin{aligned} G_1^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') &= \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin y_n \xi \sin y_n \xi'}{(s_1^{(i)} - s_2^{(i)})} \left[ (s_1^{(i)} + A_1) e^{s_1^{(i)}(\tau-\tau')} - (s_2^{(i)} + A_1) e^{s_2^{(i)}(\tau-\tau')} \right], \\ G_2^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') &= \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin y_n \xi \sin y_n \xi'}{(s_1^{(i)} - s_2^{(i)})} \left[ (s_1^{(i)} + A_2) e^{s_1^{(i)}(\tau-\tau')} - (s_2^{(i)} + A_2) e^{s_2^{(i)}(\tau-\tau')} \right]. \end{aligned} \tag{3.27}$$

Таким чином ми знайшли функції Гріна задачі гетеродифузії двома шляхами розпадної речовини у шарі для етапів  $i = \overline{1, N-1}$  каскадного розпаду домішкових частинок.

Для останнього етапу каскадного розпаду  $i = N$  також шукаємо матричну функцію Гріна  $\mathbf{G}(\xi, \xi'; \tau, \tau') = \mathbf{G}^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')$  з крайової задачі з точковим джерелом, сформульованої на елементи матриці:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial G_1^{(N)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')}{\partial \tau} - d_0^{(N)} \frac{\partial^2 G_1^{(N)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')}{\partial \xi^2} - d_1^{e(N)} \frac{\partial^2 G_2^{(N)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')}{\partial \xi^2} + \\ & + a_{11}^{(N)} G_1^{(N)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') - a_{12}^{(N)} G_2^{(N)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') = \delta(\tau - \tau') \delta(\xi - \xi'), \\ & \frac{\partial G_2^{(N)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')}{\partial \tau} - d_2^{(N)} \frac{\partial^2 G_1^{(N)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')}{\partial \xi^2} - d_1^{e(N)} \frac{\partial^2 G_2^{(N)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')}{\partial \xi^2} - \\ & - a_{21}^{(N)} G_1^{(N)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') + a_{22}^{(N)} G_2^{(N)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') = \delta(\tau - \tau') \delta(\xi - \xi') \quad (3.28) \end{aligned}$$

за нульових краївих умов

$$G_1^{(N)} \Big|_{\tau=0} = G_2^{(N)} \Big|_{\tau=0} = G_1^{(N)} \Big|_{\xi=0} = G_2^{(N)} \Big|_{\xi=0} = G_1^{(N)} \Big|_{\xi=\xi_0} = G_2^{(N)} \Big|_{\xi=\xi_0} = 0. \quad (3.29)$$

Розв'язок крайової задачі (3.28), (3.29) має вигляд

$$\begin{aligned} G_1^{(N)} &= \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin(y_n \xi) \sin(y_n \xi')}{s_1^{(N)} - s_2^{(N)}} \left[ (s_1^{(N)} + A_1^{(N)}) e^{s_1^{(N)}(\tau - \tau')} - (s_2^{(N)} + A_1^{(N)}) e^{s_2^{(N)}(\tau - \tau')} \right], \\ G_2^{(N)} &= \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin(y_n \xi) \sin(y_n \xi')}{s_1^{(N)} - s_2^{(N)}} \left[ (s_1^{(N)} + A_2^{(N)}) e^{s_1^{(N)}(\tau - \tau')} - (s_2^{(N)} + A_2^{(N)}) e^{s_2^{(N)}(\tau - \tau')} \right], \end{aligned} \quad (3.30)$$

де  $s_1^{(N)}, s_2^{(N)}$  - розв'язки квадратного рівняння  $s^2 + s\eta_1^{(N)} + \eta_2^{(N)} = 0$  з коефіцієнтами  $\eta_1^{(N)} = y_n^2(d_0^{(N)} + d_1^{e(N)}) + a_{11}^{(N)} + a_{22}^{(N)}$ ;  $\eta_2^{(N)} = y_n^4(d_0^{(N)}d^{e(N)} - d_1^{e(N)}d_2^{(N)}) + y_n^2(a_{11}^{(N)}d^{e(N)} + d_0^{(N)}a_{22}^{(N)} + a_{12}^{e(N)}d_2^{(N)} + d_1^{e(N)}a_{21}^{(N)}) + a_{11}^{(N)}a_{22}^{e(N)} - a_{12}^{e(N)}a_{21}^{(N)}$ ; а також  $A_1^{(N)} = y_n^2(d^{e(N)} - d_1^{e(N)}) + a_{22}^{e(N)} + a_{12}^{(N)}$ ;  $A_2^{(N)} = y_n^2(d_0^{(N)} - d_2^{(N)}) + a_{11}^{(N)} + a_{21}^{(N)}$ .

Зазначимо, що для того, щоб при  $\tau \rightarrow \infty$  отримані ряди у співвідношеннях, одержаних для функцій Гріна (3.26), (3.27) були збіжними, повинні виконуватися умови  $s_1^{(i)} < 0$  та  $s_2^{(i)} < 0$  для  $\forall i = 1, N$



### 3.1. Крайова задача каскадного типу для знаходження концентрацій мігруючих компонент

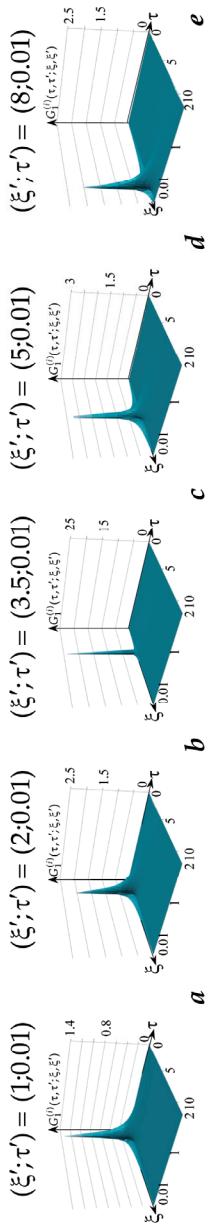


Рис 3.1. Поверхні функції Гріна  $G_1^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')$  в точках  $(\xi', \tau')$

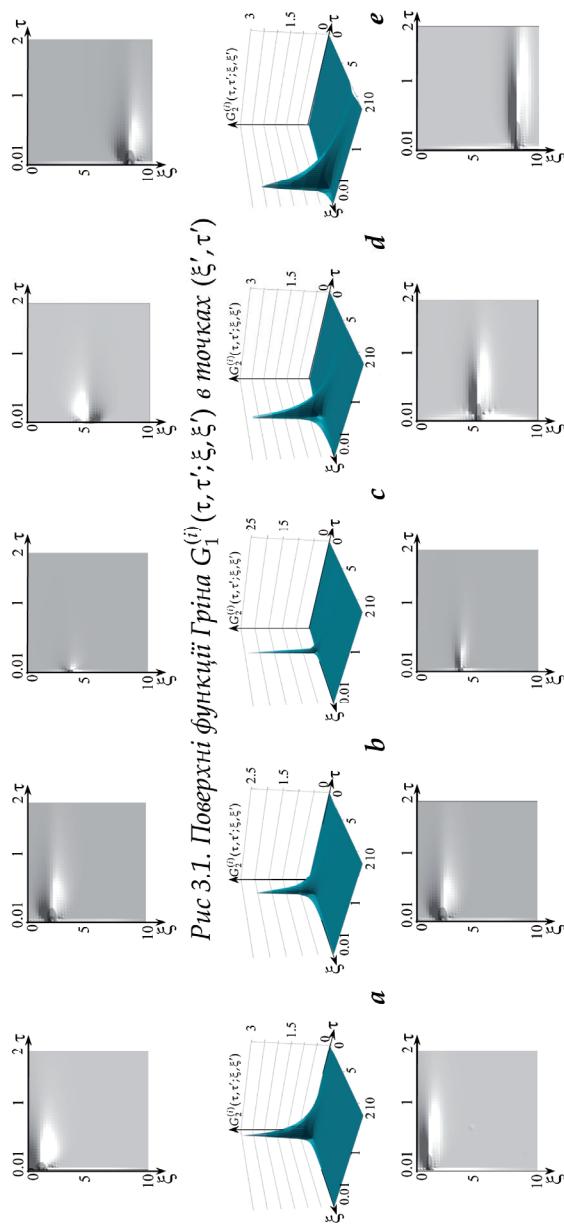


Рис 3.2. Поверхні функції Гріна  $G_2^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')$  в точках  $(\xi', \tau')$

[12]. Враховуючи структуру виразів  $s_1^{(i)}$  та  $s_2^{(i)}$  і що  $\eta_1^{(i)} > 0$ , одержимо  $s_1^{(i)} < 0$ . Дослідивши умови, за яких  $s_2^{(i)}$  набуває від'ємних значень, отримаємо обмеження [12]

$$d_1^{e(i)} d_2^{e(i)} < d_0^{(i)} d_2^{(i)}.$$

Числовий аналіз функцій Гріна  $G_1^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')$  і  $G_2^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')$  проведено для таких базових значень параметрів задачі:  $d^{e(i)} = 0.1$ ,  $d_0^{(i)} = 1$ ;  $d_1^{e(i)} = d_2^{(i)} = 0$ ,  $a_{11}^{(i)} = 4$ ,  $a_{12}^{e(i)} = 1$ ,  $a_{21}^{(i)} = 2.2$ ,  $a_{22}^{e(i)} = 2.6$ . На рис. 3.1, 3.2 проілюстровано характерні поверхні, які утворюють функції Гріна, обчислені за формулами (3.26). На рис. 3.1, 3.2 наведено функції  $G_1^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')$  та  $G_2^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')$  в точках  $(\xi', \tau') = (1; 0.01)$  (рис.а),  $(\xi', \tau') = (2; 0.01)$  (рис.б),  $(\xi', \tau') = (3.5; 0.01)$  (рис.с),  $(\xi', \tau') = (5; 0.01)$  (рис.д) та  $(\xi', \tau') = (8; 0.01)$  (рис.е). Вздовж осі абсцис відкладена просторова координата  $\xi$ , вздовж осі ординат – часова  $\tau$ , вздовж осі аплікат – значення функцій  $G_j^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')$ ,  $j = 1, 2$ .

Зазначимо, що поверхні, які утворюють функції Гріна (3.26), мають характерний гострий пік в околі точки  $(\xi, \tau) = (\xi', \tau')$  (рис. 3.1, 3.2). При цьому для тих самих значень коефіцієнтів задачі в околі границі шару  $\xi = 0$  значення функції  $G_2^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')$  в рази більші ніж  $G_1^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')$ , наприклад,  $\max_{\xi, \tau \in K'} G_2^{(i)} / \max_{\xi, \tau \in K'} G_1^{(i)} \Big|_{(\xi', \tau') = (1; 0.01)} = 2.14$  (рис. 3.1б і 3.2б), а в околі границі  $\xi = \xi_0$  різниця сягає 30%:  $\max_{\xi, \tau \in K'} G_2^{(i)} / \max_{\xi, \tau \in K'} G_1^{(i)} \Big|_{(\xi', \tau') = (8; 0.01)} = 1.29$ , що пояснюється значно більшим коефіцієнтом сорбції  $a_{11}^{(i)}$ , ніж інші «сорбційні» коефіцієнти. Зауважимо, що при зсуві координати джерела  $\xi'$  до середини шару суттєво збільшуються значення  $G_1^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')$  і  $G_2^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')$ , а поверхні стають більш пологими. При цьому для функції  $G_1^{(i)}$  пологіше спадання спостерігається біля границі тіла  $\xi = 0$  (рис. 3.1а), тоді як для функції  $G_2^{(i)}$  - в околі границі  $\xi = \xi_0$  (рис. 3.2е).



Зростання коефіцієнта  $a_{11}^{(i)}$  майже не змінює пікові значення функцій  $G_1^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')$  і  $G_2^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')$ , проте дещо сповільнює спадання функцій Гріна вздовж часової осі  $\Omega t$ .

Варіація коефіцієнта  $a_{21}^{(i)}$  в широких межах майже не змінює значення функції  $G_1^{(i)}$  і для малих  $a_{11}^{(i)} - G_2^{(i)}$  (у цьому випадку звужується інтервал варіації через фізичні обмеження на коефіцієнти, коли розглядаються сорбційні процеси). Для великих значень  $a_{11}^{(i)}$  зростання коефіцієнта  $a_{21}^{(i)}$  веде до збільшення значень і більш похилого спадання поверхні  $G_2^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')$ , тобто збільшення часового інтервалу ненульових значень функції Гріна.

Для великих значень коефіцієнта  $a_{22}^{(i)}$  ( $a_{22}^{(i)} > 10$ ) для обох функцій Гріна наявна невелика область локалізації ненульових значень в околі джерела. Зменшення значень  $a_{22}^{(i)}$  приводить до розширення цієї області, причому суттєво для функції  $G_1^{(i)}$  при малих коефіцієнтах  $a_{21}^{(i)}$  і  $G_2^{(i)}$  - при великих. Зазначимо, що пікові значення функції  $G_1^{(i)}$  практично не міняються зі зміною коефіцієнта  $a_{21}^{(i)}$ , а для функції  $G_2^{(i)}$  характерне збільшення значень з ростом величини  $a_{21}^{(i)}$ , наприклад, для розташування джерела в точці  $(\xi'; t') = (5; 0.01)$   $\max_{\xi, \tau \in K'} G_1^{(i)} \Big|_{a_{21}^{(i)}=79} / \max_{\xi, \tau \in K'} G_1^{(i)} \Big|_{a_{21}^{(i)}=2.2} = 1.07$  і  $\max_{\xi, \tau \in K'} G_2^{(i)} \Big|_{a_{21}^{(i)}=79} / \max_{\xi, \tau \in K'} G_2^{(i)} \Big|_{a_{21}^{(i)}=2.2} = 1.52$  при  $a_{22}^{(i)}=1.1$ .

### || 3.2. Потоки розпадних домішкових частинок через задану поверхню

Відповідно до моделі гетеродифузії двома шляхами, враховуючи Теорему 1.7, знайдемо вирази для потоків розпадних речовин на різних етапах каскадного розпаду через одиницю площину поверхні  $\xi = \xi_*$ . Виходячи з лінійних кінетичних співвідношень (1.63) (Теорема 1.6) масові потоки визначаються формулами

$$J_{*1}^{(i)}(t) = - \left[ d_0^{(i)} \frac{\partial c_1^{(i)}(x, t)}{\partial x} + d_1^{e(i)} \frac{\partial c_2^{e(i)}(x, t)}{\partial x} \right]_{x=x_*},$$

$$J_{*2}^{(i)}(t) = - \left[ d_2^{(i)} \frac{\partial c_1^{(i)}(x, t)}{\partial x} + d_1^{e(i)} \frac{\partial c_2^{e(i)}(x, t)}{\partial x} \right]_{x=x_*}, \quad i = \overline{0; N}.$$

Використовуючи формули (2.1), запишемо ці співвідношення у безрозмірній формі:

$$J_{*1}^{(i)}(\tau) = -\sqrt{k_2^{(0)} D_{11}^{(0)}} \left[ d_0^{(i)} \frac{\partial c_1^{(i)}(\xi, \tau)}{\partial \xi} + d_1^{e(i)} \frac{\partial c_2^{e(i)}(\xi, \tau)}{\partial \xi} \right]_{\xi=\xi_*},$$

$$J_{*2}^{(i)}(\tau) = -\sqrt{k_2^{(0)} D_{11}^{(0)}} \left[ d_2^{(i)} \frac{\partial c_1^{(i)}(\xi, \tau)}{\partial \xi} + d_1^{e(i)} \frac{\partial c_2^{e(i)}(\xi, \tau)}{\partial \xi} \right]_{\xi=\xi_*}, \quad i = \overline{0; N},$$

при цьому сумарний потік через поверхню  $\xi = \xi_*$   $J_*^{(i)}(\tau) = J_{*1}^{(i)}|_{\xi=\xi_*} + J_{*2}^{(i)}|_{\xi=\xi_*}$  для всіх  $i = \overline{0; N}$  приймає вигляд

$$J_*^{(i)}(\tau) = -\sqrt{k_2^{(0)} D_{11}^{(0)}} \left[ (d_0^{(i)} + d_2^{(i)}) \frac{\partial c_1^{(i)}(\xi, \tau)}{\partial \xi} + (d_1^{e(i)} + d_1^{e(i)}) \frac{\partial c_2^{e(i)}(\xi, \tau)}{\partial \xi} \right]_{\xi=\xi_*}. \quad (3.31)$$

Підставляємо вирази для концентрацій домішок  $c_1^{(i)}(\xi, \tau)$  (3.16a), (3.17a), (3.18a) і  $c_2^{e(i)}(\xi, \tau)$  (3.16б), (3.17б), (3.18б) на відповідних етапах розпаду у співвідношення (3.31). Тоді отримаємо для  $i = 0$

$$\frac{\xi_0}{c_0 \sqrt{k_2^{(0)} D_{11}^{(0)}}} J_*^{(0)}(\tau) = R - B\pi \left[ \frac{R_1}{\sin(\pi x_1)} \cos\left(\frac{\pi x_1}{\xi_0} (\xi_0 - \xi_*)\right) - \frac{R_2}{\sin(\pi x_2)} \cos\left(\frac{\pi x_2}{\xi_0} (\xi_0 - \xi_*)\right) \right] - 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\cos y_n \xi_*}{s_1 - s_2} \left[ \left( \bar{p}s_1 + \bar{p}_1 + \frac{\bar{p}_2}{s_1} \right) e^{s_1 \tau} - \left( \bar{p}s_2 + \bar{p}_1 + \frac{\bar{p}_2}{s_2} \right) e^{s_2 \tau} \right], \quad (3.32a)$$



де  $\tilde{d}_1^{(i)} = d_0^{(i)} + d_2^{(i)}$ ,  $\tilde{d}_2^{(i)} = d_1^{e(i)} + d^{e(i)}$ ;  $R = \alpha \tilde{d}_1^{(i)} + (1-\alpha) \tilde{d}_2^{(i)} - \frac{1}{ce} (\tilde{b}_1 \tilde{d}_1^{(i)} + \tilde{b}_2 \tilde{d}_2^{(i)})$ ,  
 $R_1 = \tilde{d}_1^{(i)} (\tilde{a}_1 x_1 + \tilde{b}_1) - \tilde{d}_2^{(i)} (\tilde{a}_2 x_1 + \tilde{b}_2)$ ,  $R_2 = \tilde{d}_1^{(i)} (\tilde{a}_1 x_2 + \tilde{b}_1) - \tilde{d}_2^{(i)} (\tilde{a}_2 x_2 + \tilde{b}_2)$ ;  
 $\bar{p} = \alpha \tilde{d}_1^{(i)} + (1-\alpha) \tilde{d}_2^{(i)}$ ,  $\bar{p}_1 = \tilde{d}_1^{(i)} \tilde{A}_1 + \tilde{d}_2^{(i)} \tilde{A}_2$ ,  $\bar{p}_2 = \tilde{d}_1^{(i)} \tilde{B}_1 + \tilde{d}_2^{(i)} \tilde{B}_2$ . Також тут використано, що  $\frac{\partial}{\partial \xi} [\sin((\pi - y)x_{1,2})] = -\frac{\pi x_{1,2}}{\xi_0} \cos\left(\frac{\pi x_{1,2}}{\xi_0}(\xi_0 - \xi)\right)$ .

Для  $i = 1, \dots, N-1$  маємо

$$\begin{aligned} \frac{J_*^{(i)}(\tau)}{\sqrt{\bar{k}_2^{(0)} D_{11}^{(0)}}} &= \int_0^{\tau} \int_0^{\xi_0} \left\{ a_{\lambda 1}^{(i-1)} \tilde{d}_1^{(i)} \frac{\partial G_1^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_*} c_1^{(i-1)}(\xi', \tau') + \right. \\ &\quad \left. + a_{\lambda 2}^{(i-1)} \tilde{d}_2^{e(i)} \frac{\partial G_2^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_*} c_2^{e(i-1)}(\xi', \tau') \right\} d\xi' d\tau', \quad (3.32\delta) \\ \frac{\partial G_1^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_*} &= \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} y_n \frac{\cos(y_n \xi_*) \sin(y_n \xi')}{s_1^{(i)} - s_2^{(i)}} \times \\ &\quad \times \left[ (s_1^{(i)} + A_1^{(i)}) e^{s_1^{(i)}(\tau-\tau')} - (s_2^{(i)} + A_1^{(i)}) e^{s_2^{(i)}(\tau-\tau')} \right], \\ \frac{\partial G_2^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_*} &= \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} y_n \frac{\cos(y_n \xi_*) \sin(y_n \xi')}{s_1^{(i)} - s_2^{(i)}} \times \\ &\quad \times \left[ (s_1^{(i)} + A_2^{(i)}) e^{s_1^{(i)}(\tau-\tau')} - (s_2^{(i)} + A_2^{(i)}) e^{s_2^{(i)}(\tau-\tau')} \right]; \end{aligned}$$

для  $i = N$

$$\begin{aligned} \frac{J_*^{(N)}(\tau)}{\sqrt{\bar{k}_2^{(0)} D_{11}^{(0)}}} &= \int_0^{\tau} \int_0^{\xi_0} \left\{ \tilde{d}_1^{(N)} \frac{\partial G_1^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_*} \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 1}^{(iN)} c_1^{(i)}(\xi', \tau') + \right. \\ &\quad \left. + \tilde{d}_2^{(N)} \frac{\partial G_2^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_*} \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 2}^{(iN)} c_2^{e(i)}(\xi', \tau') \right\} d\xi' d\tau', \quad (3.32\text{B}) \end{aligned}$$

$$\frac{\partial G_1^{(N)}(\xi, \xi', \tau, \tau')}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_*} = \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} y_n \frac{\cos(y_n \xi_*) \sin(y_n \xi')}{s_1^{(N)} - s_2^{(N)}} \times$$

$$\begin{aligned} & \times \left[ (s_1^{(N)} + A_1^{(N)}) e^{s_1^{(N)}(\tau - \tau')} - (s_2^{(N)} + A_1^{(N)}) e^{s_2^{(N)}(\tau - \tau')} \right], \\ & \frac{\partial G_2^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Bigg|_{\xi=\xi_0} = \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} y_n \frac{\cos(y_n \xi) \sin(y_n \xi')}{s_1^{(N)} - s_2^{(N)}} \times \\ & \times \left[ (s_1^{(N)} + A_2^{(N)}) e^{s_1^{(N)}(\tau - \tau')} - (s_2^{(N)} + A_2^{(N)}) e^{s_2^{(N)}(\tau - \tau')} \right]. \end{aligned}$$

Запишемо також вирази для потоків розпадних речовин через нижню границю шару  $\xi = \xi_0$  як частковий випадок формул (3.32):

для  $i = 0$

$$\begin{aligned} & \frac{\xi_0}{c_0 \sqrt{\bar{k}_2^{(0)} D_{11}^{(0)}}} J_*^{(0)}(\tau) = R - B\pi \left[ \frac{R_1}{\sin(\pi x_1)} - \frac{R_2}{\sin(\pi x_2)} \right] - \\ & - 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{s_1 - s_2} \left[ \left( \bar{p}s_1 + \bar{p}_1 + \frac{\bar{p}_2}{s_1} \right) e^{s_1 \tau} - \left( \bar{p}s_2 + \bar{p}_1 + \frac{\bar{p}_2}{s_2} \right) e^{s_2 \tau} \right], \quad (3.33a) \end{aligned}$$

для  $i = 1, \dots, N-1$  справдіжується формула (3.32б), в якій

$$\begin{aligned} & \frac{\partial G_1^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Bigg|_{\xi=\xi_0} = \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} y_n \frac{(-1)^n \sin(y_n \xi)}{s_1^{(i)} - s_2^{(i)}} \times \\ & \times \left[ (s_1^{(i)} + A_1^{(i)}) e^{s_1^{(i)}(\tau - \tau')} - (s_2^{(i)} + A_1^{(i)}) e^{s_2^{(i)}(\tau - \tau')} \right], \\ & \frac{\partial G_2^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Bigg|_{\xi=\xi_0} = \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} y_n \frac{(-1)^n \sin(y_n \xi')}{s_1^{(i)} - s_2^{(i)}} \times \\ & \times \left[ (s_1^{(i)} + A_2^{(i)}) e^{s_1^{(i)}(\tau - \tau')} - (s_2^{(i)} + A_2^{(i)}) e^{s_2^{(i)}(\tau - \tau')} \right]; \quad (3.33б) \end{aligned}$$

для  $i = N$  справдіжується формула (3.32в), в якій

$$\begin{aligned} & \frac{\partial G_1^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Bigg|_{\xi=\xi_0} = \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} y_n \frac{(-1)^n \sin(y_n \xi)}{s_1^{(N)} - s_2^{(N)}} \times \\ & \times \left[ (s_1^{(N)} + A_1^{(N)}) e^{s_1^{(N)}(\tau - \tau')} - (s_2^{(N)} + A_1^{(N)}) e^{s_2^{(N)}(\tau - \tau')} \right], \end{aligned}$$



### 3.3. Кількість розпадних речовин, що пройшли через нижню границю шару за час

$$\left. \frac{\partial G_2^{(N)}(\xi, \xi', \tau, \tau')}{\partial \xi} \right|_{\xi=\xi_0} = \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} y_n \frac{(-1)^n \sin(y_n \xi)}{s_1^{(N)} - s_2^{(N)}} \times \\ \times \left[ \left( s_1^{(N)} + A_2^{(N)} \right) e^{s_1^{(N)}(\tau-\tau')} - \left( s_2^{(N)} + A_2^{(N)} \right) e^{s_2^{(N)}(\tau-\tau')} \right]. \quad (3.33\text{в})$$

Зазначимо, що асимптотична частина виразів для потоків (3.32), зокрема і (3.33), для моделі гетеродифузії також є нелінійною. Проте структура цих доданків відрізняється від асимптом потоків домішки, знайдених в рамках простіших моделей масоперенесення у п.п.2.2.2, 2.3.2 і 2.4.2.

### 3.3. Кількість розпадних речовин, що пройшли через нижню границю шару за час $\tau_*$

Знайдемо кількість розпадної домішкової речовини  $Q_0^{(i)}(\tau)$ , що за час  $\tau_*$  пройшла через одиницю площі поверхні  $\xi = \xi_0$  - нижню поверхню шару, за моделлю гетеродифузії двома шляхами, використовуючи формулу (2.27). Підставимо в дане співвідношення відповідні вирази для сумарних потоків маси (3.33) та проінтегруємо. У результаті отримаємо

для  $i = 0$

$$\frac{\xi_0 Q_0^{(0)}}{c_0 d_0^{e(0)}} = \left( R - B\pi \left[ \frac{R_1}{\sin(\pi x_1)} - \frac{R_2}{\sin(\pi x_2)} \right] \right) \tau_* + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{s_1 - s_2} \times \\ \times \left[ \left( \bar{p}s_1 + \bar{p}_1 + \frac{\bar{p}_2}{s_1} \right) \left( 1 - e^{s_1 \tau_*} \right) - \left( \bar{p}s_2 + \bar{p}_1 + \frac{\bar{p}_2}{s_2} \right) \left( 1 - e^{s_2 \tau_*} \right) \right]; \quad (3.34\text{a})$$

для  $i = 1, \dots, N-1$

$$\frac{Q_0^{(i)}}{\sqrt{\bar{k}_2^{(0)} \bar{D}_{11}^{(0)}}} = \int_0^{\tau_*} \int_0^\tau \int_{\xi_0}^\xi \left\{ a_{\lambda 1}^{(i-1)} \tilde{d}_1^{(i)} \frac{\partial G_1^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_0} c_1^{(i-1)}(\xi', \tau') + \right. \\ \left. + a_{\lambda 2}^{e(i-1)} \tilde{d}_2^{(i)} \frac{\partial G_2^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_0} c_2^{e(i-1)}(\xi', \tau') \right\} d\xi' d\tau' d\tau; \quad (3.34\text{б})$$

для  $i = N$

$$\frac{Q_0^{(N)}}{\sqrt{\bar{k}_2^{(0)} \bar{D}_{11}^{(0)}}} = \int_0^{\tau_*} \int_0^\tau \int_0^{\xi_0} \left\{ \tilde{d}_1^{(N)} \frac{\partial G_1^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Bigg|_{\xi=\xi_*} \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 1}^{(iN)} c_1^{(i)}(\xi', \tau') + \right. \\ \left. + \tilde{d}_2^{(N)} \frac{\partial G_2^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Bigg|_{\xi=\xi_*} \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 2}^{(iN)} c_2^{(i)}(\xi', \tau') \right\} d\xi' d\tau' d\tau. \quad (3.34\text{в})$$

Зауважимо, що як і для попередніх модельних випадків для  $i = \overline{1, N}$  вирази для потоків і кількості речовини, що за певний проміжок часу пройшла через шар, отримані в інтегральній формі. Проте у порівнянні з простішими модельними варіантами зазначимо, що наявність двох шляхів міграції явно відображені у достатньо загальних формулах (3.34б) і (3.34в) для функцій  $Q_0^{(i)}(\tau_*)$  (як і у моделі невзаємодіючих потоків та на відміну від інших часткових моделей).

### || 3.4. Схема модулів комплекса програм пакету GeterPas для моделі гетеродифузії двома шляхами. Числовий аналіз

#### 3.4.1. Архітектура комплексу модулів програм для моделі гетеродифузії

На основі формул (3.16), (3.17), (3.18), а також розв'язків задач (3.27), (3.30), для концентрацій розпадних домішкових компонент, а також (3.32) і (3.33) для відповідних потоків маси і (3.34) для кількості речовин, що пройшли через нижню границю шару за певний проміжок часу, розроблений пакет програм для комп'ютерного моделювання процесів дифузії у тілі з пастками також увійшов до комплексу програм GeterPas. Архітектуру комплекса модулів програм для моделювання процесів дифузії за каскадного розпаду частинок для моделі гетеродифузії двома шляхами наведено на рис. 3.3.

Алгоритми модуля програми для розрахунку концентрацій розпадних домішок співпадає з алгоритмами для моделей



3.4. Схема модулів комплекса програм пакету GeterPas для моделі гетеродифузії двома шляхами. Числовий аналіз

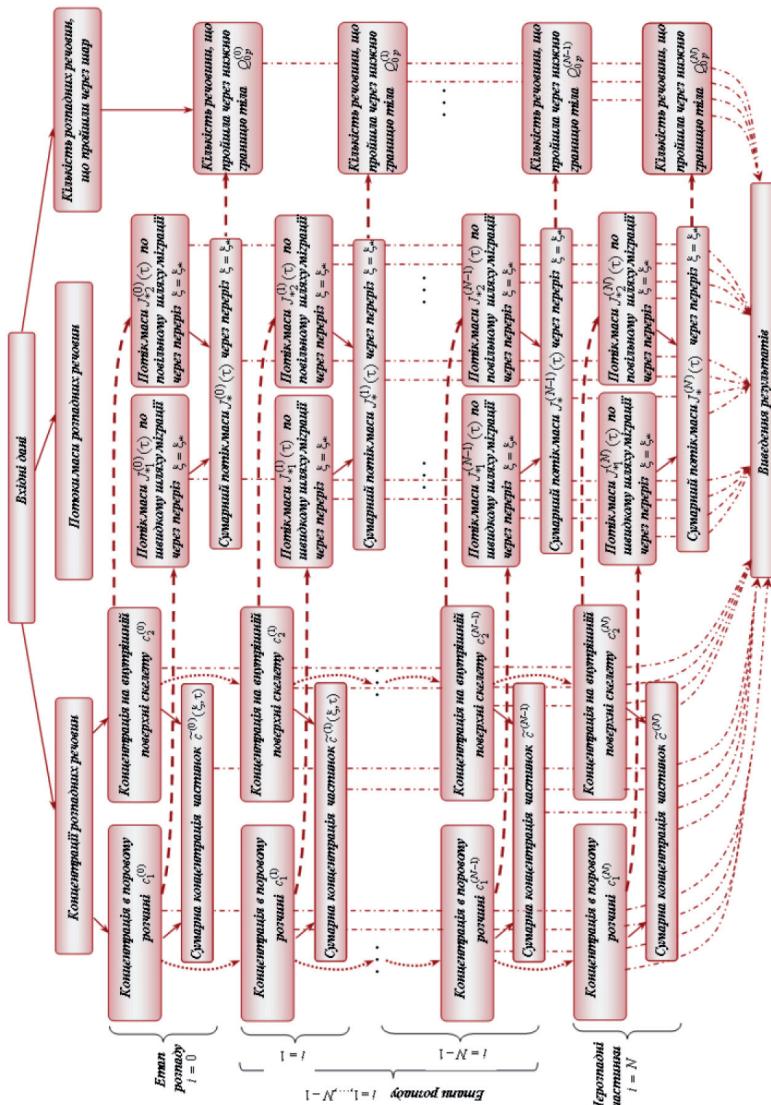


Рис.3.3. -Архітектура комплекса модулів програмного пакету GeterPas моделі гетеро дифузії десома тиллягами за каскадного розподілу частинок

**Розділ 3. Математична модель процесів гетеродифузії розпадних речовин двома шляхами**

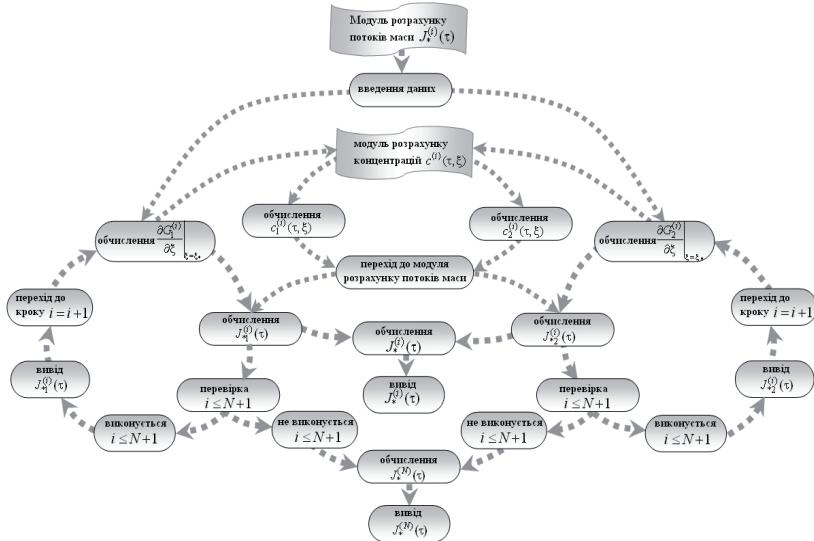


Рис.3.4. Схема алгоритму модулю пакету для розрахунку дифузійного потоку домішкових речовин за каскадного розпаду частинок для моделі гетеродифузії двома шляхами

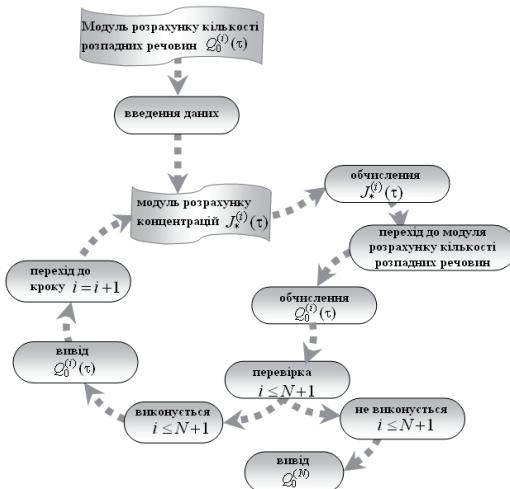


Рис.3.5. Схема алгоритму модуля пакету для розрахунку кількості розпадних речовин, що пройшли через нижню границю шару за заданий час для моделі гетеродифузії двома шляхами



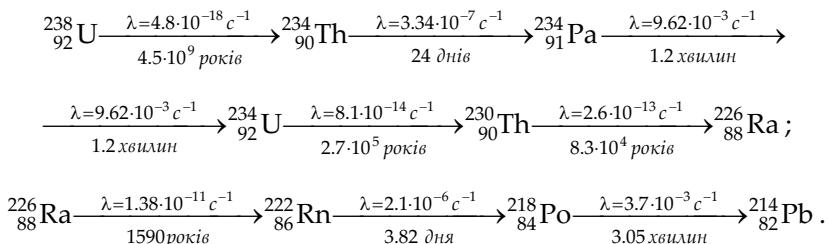
невзаємодіючих потоків та ефективної дифузії у тілі з пастками (рис. 2.20). Схема модулів для обчислення дифузійних потоків та кількості речовини, що пройшла через шар, подано на рис. 3.4 та рис. 3.5. При цьому зауважимо, що програмні модулі для потоків маси для моделі гетеродифузії на відміну від попередніх модельних варіантів містить по два циклічні процеси і на кожному етапі взаємодіють з модулем для концентрації на попередньому етапі розпаду.

### **3.4.2. Числовий експеримент для встановлення закономірностей концентрації частинок на нульовому етапі розпаду**

Числовий аналіз концентрації домішкової речовини за каскадного розпаду частинок для моделі гетеродифузії двома шляхами проведено для таких базових значень числового дослідження  $\alpha = 0.25$ ;  $d^{e(0)} = 0.1$ ,  $d^{e(1)} = 0.3$ ,  $d_0^{(1)} = 0.2$ ,  $d^{e(1)} = 0.2$ ,  $d_0^{(1)} = 0.1$ ;  $a_{11}^{(0)} = 4$ ,  $a_{12}^{(0)} = 1$ ,  $a_{21}^{(0)} = 2.2$ ,  $a_{22}^{(0)} = 2.6$ ,  $a_{11}^{(1)} = 2$ ,  $a_{12}^{(1)} = 1$ ,  $a_{21}^{(1)} = 0.5$ ,  $a_{22}^{(1)} = 1.2$ ;  $a_{\lambda 1}^{(0)} = 0.5$ ,  $a_{\lambda 2}^{(0)} = 0.5$ ,  $a_{\lambda 1}^{(1)} = 0.3$ ,  $a_{\lambda 2}^{(1)} = 0.3$ ;  $\tau = 0.8$ .

При цьому при проведенні обчислень ми прийняли, що перехресні коефіцієнти дифузії завжди рівні нулю, тобто  $d_1^{e(i)} = d_2^{e(i)} = 0$ ,  $i = \overline{0, N}$ . Оскільки ми при побудові моделей і постановках крайових задач розглядали стан домішкових речовин  $j = 1$  як швидкий шлях дифузії (для ґрунтів – водний поровий розчин), то для коефіцієнтів дифузії має виконуватись умова  $d_0^{(i)} > d^{e(i)}$ ,  $\forall i = 0, N$ . Коефіцієнти  $a_{kl}^{(i)}$  визначають зміну станів частинок та зміну етапу каскадного розпаду (2.3). При цьому стосовно коефіцієнтів сорбції ми обмежимося випадком, коли процеси сорбції є інтенсивнішими ніж десорбції, тобто  $\bar{k}_1^{(i)} > \bar{k}_2^{e(i)}$ ,  $\forall i = \overline{0, N}$ . Зазначимо, що така ситуація є характерною, наприклад, для ґрунтів [52], проте відомі експериментальні дані і для протилежного випадку [37], зокрема для гетеродифузії домішки у кристалах. В свою чергу коефіцієнти  $\lambda_j^{(i)}$  - сталі розпаду, які характеризують ймовірність (радіоактивного) розпаду за одиницю часу і визначаються формулою  $\lambda = \ln 2 / T_{1/2}$ , де  $T_{1/2}$  - період

піврозпаду [29]. При цьому молекули (атоми) речовини, що виникають у складних ланцюгах розпаду можуть мати періоди піврозпаду в дуже широкій області значень: від  $3 \cdot 10^{-7}$  с для  $^{212}Ra$  до  $1.4 \cdot 10^{10}$  років для  $^{232}Th$  у радіоактивному розпаді. Як приклад [89] наведемо каскадні розпади з відомими коефіцієнтами інтенсивності розпаду:



Тоді, і коефіцієнти інтенсивності процесів типу сорбції-десорбції, і коефіцієнти інтенсивності розпаду можуть вносити переважаючий вклад у коефіцієнти  $a_{kl}^{(i)}$ , або бути співвимірними. У той же час оскільки частинки на кожному кроці розпадаються з однаковою інтенсивністю незалежно від їхнього стану, тобто  $\lambda_1^{(i)} = \lambda_2^{(i)}$ , то для коефіцієнтів  $a_{kl}^{(i)}$  зберігається обмеження, накладене на коефіцієнти інтенсивності сорбції, тобто  $a_{21}^{(i)} > a_{12}^{(i)}, \forall i = 0, N$ .

Розподіли концентрацій на швидкому  $c_1^{(0)}(\xi, \tau)$ , на повільному  $c_2^{(0)}(\xi, \tau)$  шляхах міграції та їх сумарної концентрації  $c^{(0)}(\xi, \tau)$  подано на рис. 3.6 у різні моменти безрозмірного часу  $\tau = 0.8, 2, 20$  (криві – 1-3 відповідно) для наступних значень коефіцієнтів поверхневого розподілу домішкових частинок між станами  $\alpha = 0.25$  (рис.а),  $\alpha = 0.5$  (рис.б),  $\alpha = 0.75$  (рис.с) та  $\alpha = 0.91$  (рис.д). Тут штриховими лініями позначено концентрацію на швидкому шляху (криві а), шрих-пунктирними лініями - концентрацію на повільному шляху (криві б), а суцільними – сумарну концентрацію домішкових частинок. На рис. 3.7 наведено розподіли сумарної концентрації розпадної домішкової речовини  $K^{(0)}$  у різні моменти безрозмірного часу  $\tau = 0.6; 0.8; 1.2; 2; 20$



3.4. Схема модулів комплексу програм пакету GeterPas для моделі гетеродифузії двома шляхами. Числовий аналіз

(криві – 1-5 відповідно). Тут і надалі рис.а наведено для малих ( $\alpha = 0.25$ ), а рис.б – для великих ( $\alpha = 0.91$ ) значень коефіцієнта  $\alpha$ , який визначає частку домішкової речовини на нульовому етапі розпаду, що з поверхні тіла  $\xi = 0$  потрапила на швидкий шлях дифузії. На рис. 3.8 проілюстровано розподіли сумарної концентрації домішкової речовини  $c^{(0)}(\xi, \tau)$  при різних значеннях відношення коефіцієнтів дифузії на повільному і швидкому шляхах  $d^{(0)} = \bar{D}_{22}^{(0)} / \bar{D}_{11}^{(0)} = 0.01, 0.05, 0.1, 0.25, 0.5, 0.9$  (криві – 1-6 відповідно). На рис. 3.9 наведено розподіли сумарної концентрації домішкової речовини  $K^{(0)}$  при різних значеннях параметра  $a_{11}^{(0)} = 4, 6, 8, 10, 20$  (криві – 1-5 відповідно).

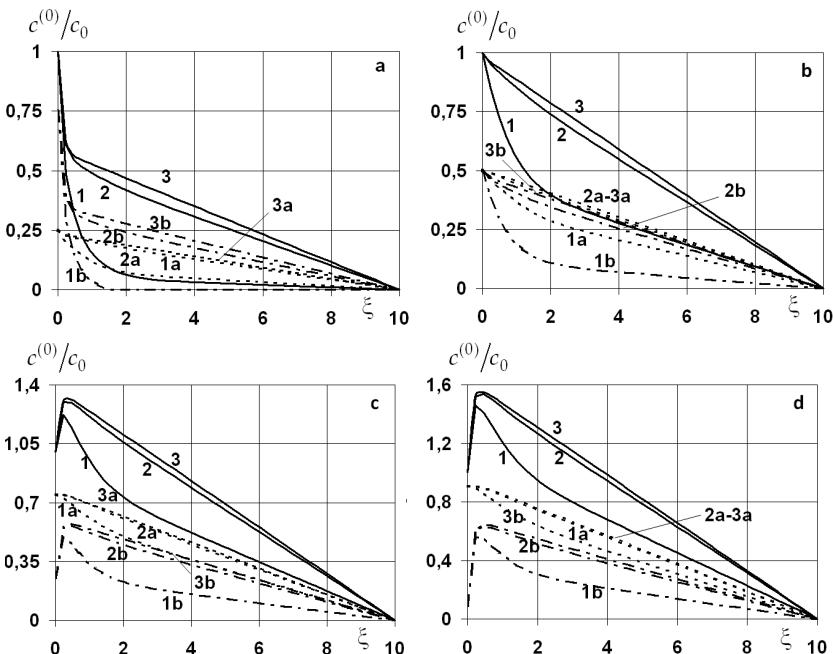


Рис.3.6. Розподіли концентрацій домішкової речовини  $K_1^{(0)}$  на швидкому,  $K_2^{(0)}$  на повільному шляхах міграції та їхня сума  $K^{(0)}$  на нульовому етапі каскадного розпаду у різні моменти часу для  $\alpha = 0.25$  (рис.а),  $\alpha = 0.5$  (рис.б),  $\alpha = 0.75$  (рис.с) та  $\alpha = 0.91$  (рис.д)

**Розділ 3. Математична модель процесів гетеродифузії розпадних речовин двома шляхами**

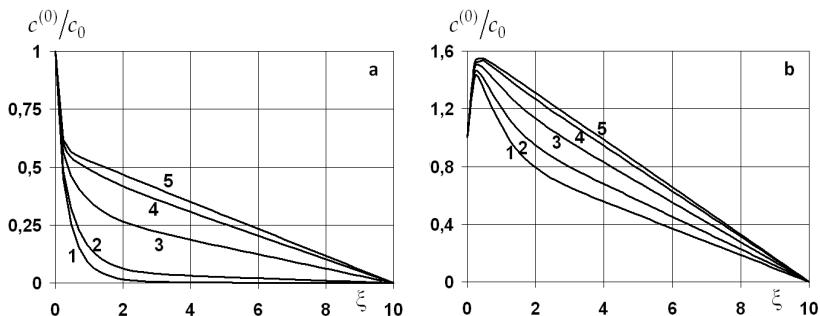


Рис.3.7. Розподіли сумарної концентрації домішкової речовини  $\mathbf{K}^{(0)}$  на нульовому етапі каскадного розпаду у різний момент часу для  $\alpha = 0.25$  (рис.а) і  $\alpha = 0.91$  (рис.б)

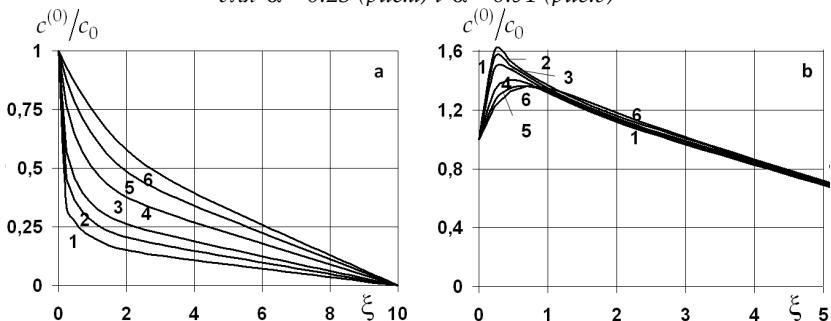


Рис.3.8. Розподіли концентрацій домішкової речовини сума  $\mathbf{K}^{(0)}$  на нульовому етапі каскадного розпаду при різних значеннях коефіцієнта дифузії  $d^{e(0)}$  для  $\alpha = 0.25$  (рис.а), та  $\alpha = 0.91$  (рис.б)

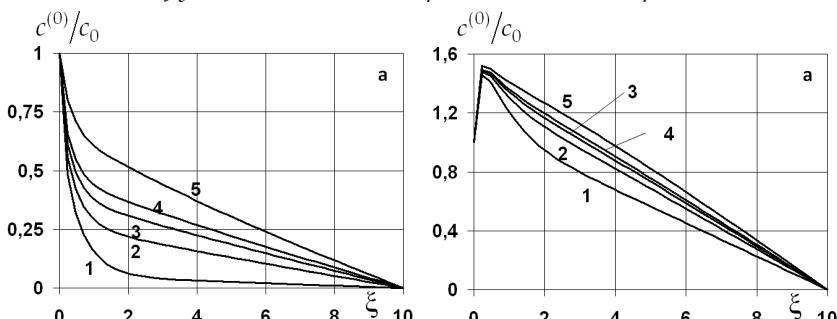


Рис.3.9. - Розподіли концентрацій домішкової речовини  $\mathbf{K}^{(0)}$  на нульовому етапі каскадного розпаду при різних значеннях коефіцієнта  $a_{11}^{(0)}$  для  $\alpha = 0.25$  (рис.а), та  $\alpha = 0.91$  (рис.б)



Зазначимо, що для нульового етапу розпаду коефіцієнт поверхневого розподілу домішкових частинок між станами  $\alpha$  суттєво впливає на поведінку і значення як сумарної концентрації домішкої речовини, так і концентрацій на кожному зі шляхів міграції зокрема (рис. 3.6). При цьому для переважного попадання домішкової речовини з поверхні на повільний шлях міграції ( $\alpha \leq 0.5$ ) характерна монотонно спадна поведінка функції сумарної концентрації (рис. 3.6a, b), значення якої з часом зростає на всьому проміжку доки не вийде на усталений режим (криві 3, рис. 3.6a і b). І якщо для  $\alpha = 0.5$  поведінка функції  $c^{(0)}(\xi, \tau)$  в установленому режимі близька до лінійної, то для малих  $\alpha$  залишається приповерхнева область різкого спадання значень сумарної концентрації. Так, для  $\alpha = 0.25$  цей інтервал складає  $[0; 0.03\xi_0]$  (рис. 3.6a). Якщо в системі превалює надходження частинок з поверхні на швидкий шлях міграції ( $\alpha > 0.5$ ), то спотворігається характерніше приповерхневе зростання сумарної концентрації (криві 1-3, рис. 3.6c і d). При цьому формування максимуму сумарної концентрації  $c^{(0)}(\xi, \tau)$  в приповерхневій області тіла відбувається за рахунок аналогічної поведінки функції концентрації домішкової речовини на повільному шляху міграції  $c_2^{e(0)}(\xi, \tau)$  (криві 1b-3b, рис. 3.6c і d). Зазначимо, що зі зростанням коефіцієнта  $\alpha$  величина максимуму сумарної концентрації зростає, зокрема для базових значень параметрів задачі збільшення значення від 0.75 до 0.91 приводить до зростання  $\max_{\xi \in [0; \xi_0]} c^{(0)}(\xi, \tau)$

на 16% для  $\forall \tau > 0$  (рис. 3.7c і d).

Зазначимо, що з часом сумарна концентрація домішки росте у всій області тіла (рис. 3.7) доки не вийде на усталений режим (криві 5, рис. 3.7). При цьому в околі границі шару, де діє джерело маси, наявна область різкого падіння функції  $c^{(0)}(\xi, \tau)$  для малих  $\alpha$  ( $\xi \in [0; 0.035\xi_0]$ , рис. 3.7a) і різкого зростання для великих  $\alpha$  ( $\xi \in [0; 0.05\xi_0]$ , рис. 3.7b). В іншій області тіла для малих часів функція концентрації має суттєво нелінійних характер (криві 1, 2, рис. 3.7), з ростом часу наближаючись до лінійного (криві 4, 5, рис. 3.7), що характерно для усталеного режиму.

Зменшення різниці між коефіцієнтами дифузії на повільному  $\bar{D}_{22}^{e(0)}$  та швидкому шляхах міграції  $\bar{D}_{11}^{(0)}$  приводить до суттєвого зростання сумарної концентрації розпадних частинок на всьому проміжку для малих  $\alpha$  (рис. 3.8a). У той же час для великих  $\alpha$  зі зростанням відношення  $d^{e(0)}$  на проміжку  $\xi \in [0; 0.1\xi_0]$  відбувається зменшення функції концентрації  $c^{(0)}(\xi, \tau)$ , згладження пікових значень та незначний зсув її максимуму від поверхні тіла (рис. 3.8b). На решті проміжку  $\xi \in [0.1\xi_0; \xi_0]$  сумарна концентрація зростає, проте несуттєво (рис. 3.8b). Так для базових значень параметрів задачі максимальна різниця складає 6%. Зазначимо, що зростання коефіцієнта  $a_{11}^{(1)}$ , який характеризує інтенсивність процесів переходу частинок речовини  $K^{(0)}$  зі швидкого шляху міграції на повільний, призводить до зростання сумарної концентрації в усій області тіла (рис. 3.9). Причому для малих  $\alpha$  (рис. 3.9a) таке зростання є набагато більшим, ніж для великих (рис. 3.9b).

### 3.4.3. Числовий аналіз концентрацій домішкових частинок на першому кроці каскадного розпаду

Проведемо симуляцію концентрації домішкової речовини  $K^{(1)}$ , яка утворилася внаслідок розпаду домішкової речовини  $K^{(0)}$ , за формулами (3.17). Оскільки вирази для концентрацій  $c_1^{(1)}(\xi, \tau)$ ,  $c_2^{(1)}(\xi, \tau)$  пропорційні коефіцієнтам  $a_{\lambda 1}^{(0)}$ ,  $a_{\lambda 2}^{(0)}$  (які рівні між собою) спочатку дослідимо вплив цих параметрів на поведінку сумарної концентрації  $c^{(1)}(\xi, \tau)$ . Для моменту безрозмірного часу  $\tau = 0.8$  на рис. 3.10 і для моменту  $\tau = 20$  на рис. 3.11 наведено розподіли сумарної концентрації домішкової речовини  $K^{(1)}$  на 1-му етапі каскадного розпаду для різних значень параметра  $a_{\lambda 1}^{(0)} = a_{\lambda 2}^{(0)} = 0.1, 0.3, 0.5, 0.7, 1.1$  (криві 1-5 відповідно). Тут і надалі рис. а наведено для малих ( $\alpha = 0.25$ ), а рис. б – для великих ( $\alpha = 0.91$ ) значень коефіцієнта поверхневого розподілу домішкової речовини  $K^{(0)}$  між станами  $\alpha$ .



3.4. Схема модулів комплекса програм пакету GeterPas для моделі гетеродифузії двома шляхами. Числовий аналіз

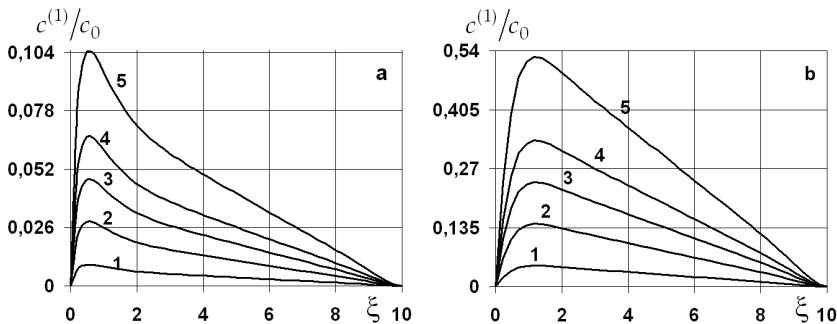


Рис.3.10. Розподіли сумарної концентрації речовини  $\mathbf{K}^{(1)}$  на першому етапі каскадного розпаду у момент часу  $\tau = 0.8$  залежно від параметра  $a_{\lambda 1}^{(0)}$  для  $\alpha = 0.25$  (рис.а) і  $\alpha = 0.91$  (рис.б)

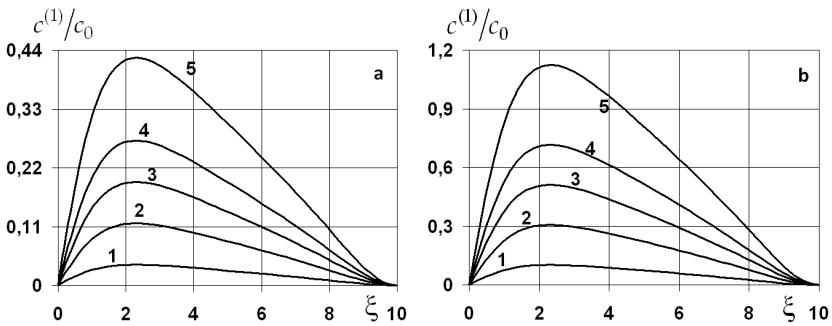


Рис.3.11. Розподіли сумарної концентрації речовини  $\mathbf{K}^{(1)}$  на першому етапі каскадного розпаду у момент часу  $\tau = 20$  залежно від параметра  $a_{\lambda 1}^{(0)}$  для  $\alpha = 0.25$  (рис.а) і  $\alpha = 0.91$  (рис.б)

Зазначимо, що для всіх моментів часу і будь-якого  $\alpha \in [0;1]$  збільшення коефіцієнта інтенсивності розпаду  $a_{\lambda 1}^{(0)}$  приводить до пропорційного зростання сумарної концентрації в усій області тіла (рис. 3.10, 3.11). Якщо при розрахунках сумарної концентрації вилучити множник  $a_{\lambda 1}^{(0)}$ , то при значеннях  $a_{\lambda 1}^{(0)} = q_1$ ,  $a_{\lambda 1}^{(0)} = q_2$  різниця між відношеннями

$$\left( \frac{1}{a_{\lambda 1}^{(0)}} c^{(1)}(\xi, \tau) \right)_{a_{\lambda 1}^{(0)} = q_1} \Bigg/ \left( \frac{1}{a_{\lambda 1}^{(0)}} c^{(1)}(\xi, \tau) \right)_{a_{\lambda 1}^{(0)} = q_2} \quad \text{i} \quad \frac{q_1}{q_2} \in$$

вкрай незначною. Наприклад, при  $q_1 = 0.3$ ,  $q_2 = 0.7$  (криві 2 і 4 на рис. 3.10, 3.11) така різниця досягає шостої значимої цифри для  $\alpha = 0.25$ ,  $\tau = 0.8$  (рис. 3.10а),  $\alpha = 0.25$ ,  $\tau = 20$  (рис. 3.11а),  $\alpha = 0.91$ ,

$\tau = 20$  (рис. 3.11b) та найбільшої відмінності – у четвертій значимій цифрі, ця різниця досягає для  $\alpha = 0.91$ ,  $\tau = 0.8$  (рис. 3.10b).

На рис. 3.12 подано залежності концентрацій домішкової речовини  $c_1^{(1)}(\xi, \tau)$  на швидкому (криві a, штрихові лінії),  $c_2^{e(1)}(\xi, \tau)$  на повільному (криві b, штрих-пунктирні лінії) шляхах міграції та їхня сума  $c^{(1)}(\xi, \tau)$  (суцільні лінії) на першому етапі каскадного розпаду у різні моменти безрозмірного часу  $\tau = 0.8, 2, 20$  (криві 1-3 відповідно). Тут і надалі рис. а відповідають малому значенню коефіцієнта поверхневого розподілу домішкових частинок між станами на попередньому (нульовому) етапі розпаду  $\alpha = 0.25$ , а рис. б – превалюючому попаданню речовини  $K^{(0)}$  з поверхні на швидкий шлях дифузії, а саме  $\alpha = 0.91$ . На рис. 3.13 наведено розподіли сумарної концентрації розпадних частинок речовини  $K^{(1)}$  у різні моменти безрозмірного часу  $\tau = 0.8, 1.2, 1.5, 2, 20, 50, 100$  (криві 1-7 відповідно). Рис. 3.14 ілюструє розподіл сумарної концентрації домішки  $K^{(1)}$  на 1-му етапі каскадного розпаду для різних значень коефіцієнта поверхневого розподілу  $\alpha$  речовини  $K^{(0)}$  між швидким та повільним шляхами міграції на нульовому етапі. Тут криві 1-5 відповідають значенням  $\alpha = 0.09, 0.25, 0.5, 0.75, 0.91$  у моменти безрозмірного часу  $\tau = 0.6$  (рис. а),  $\tau = 1$  (рис. б),  $\tau = 2$  (рис. в) та  $\tau = 50$  (рис. д).

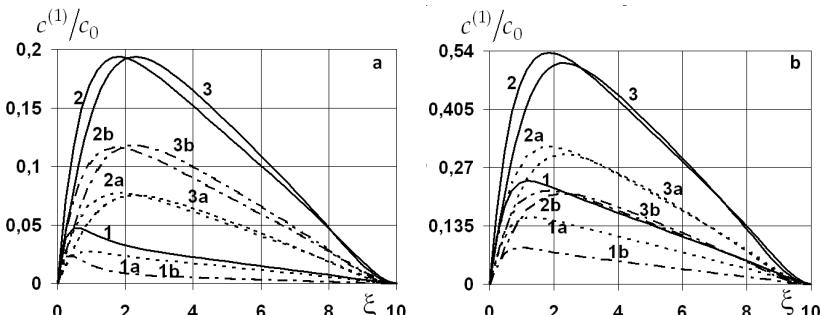


Рис.3.12. Розподіли концентрацій домішкової речовини на швидкому, на повільному шляхах міграції та їхня сума на першому етапі каскадного розпаду у різні моменти часу для  $\alpha = 0.25$  (рис.а) і  $\alpha = 0.91$  (рис.б)



3.4. Схема модулів комплексу програм пакету GeterPas для моделі гетеродифузії двома шляхами. Числовий аналіз

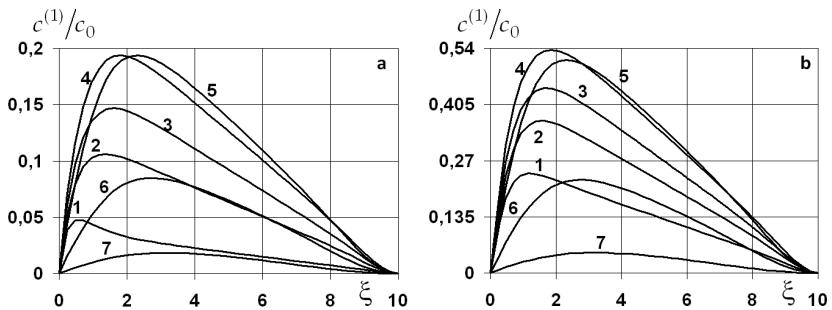


Рис.3.13 Розподіли сумарної концентрації домішкової речовини  $K^{(1)}$  на першому етапі каскадного розпаду у різні моменти часу для  $\alpha = 0.25$  (рис.а) і  $\alpha = 0.91$  (рис.б)

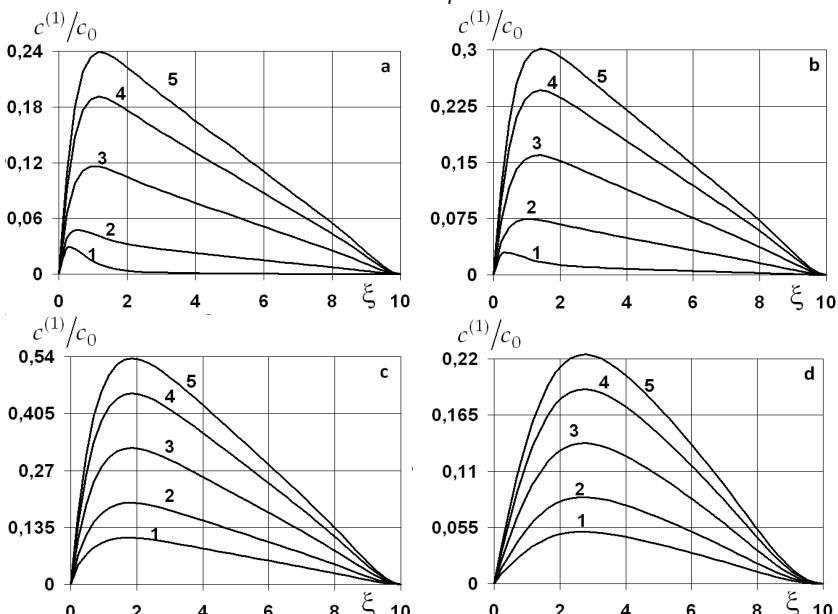


Рис.3.14. Розподіли сумарної концентрації домішки  $c^{(1)}(\xi, \tau)$  на першому етапі розпаду при різних значеннях коефіцієнта  $\alpha$  для малих (рис.а), середніх (рис.б, с) і великих (рис.д) часів

На рис. 3.15 подано розподіли сумарної концентрації домішкової речовини  $c^{(1)}(\xi, \tau)$  на етапі  $i = 1$  каскадного розпаду при різних значеннях нормованого коефіцієнта дифузії на повільному шляху міграції  $d^{e(1)} = \bar{D}_{22}^{e(1)} / \bar{D}_{11}^{(0)} = 0.01, 0.05, 0.1, 0.5, 1.1, 5, 20$  (криві –

1-7 відповідно). Рис. 3.16 ілюструє розподіли сумарної концентрації домішкової речовини  $K^{(1)}$  для різних значень параметра  $a_{11}^{(1)} = 2, 4, 6, 8, 20$  (криві 1-5). Поведінку сумарної концентрації домішкової речовини  $c^{(1)}(\xi, \tau)$  продемонстровано у залежності від величин параметрів  $a_{12}^{e(1)} = 0,1, 0,5, 0,8, 1, 2$  (криві 1-5 відповідно) на рис. 3.17; від  $a_{21}^{(1)} = 0,1, 0,5, 0,8, 1, 1,5$  (криві 1-5) на рис. 3.18а та від  $a_{22}^{e(1)} = 0,5, 0,8, 1, 1,5, 2$  (криві 1-5) на рис. 3.18б при  $\alpha = 0,91$ . На рис. 3.19 наведено розподіли сумарної концентрації домішкової речовини  $c^{(1)}(\xi, \tau)$  на 1-му етапі каскадного розпаду для різних значень параметра  $a_{11}^{(0)}$ , який визначає інтенсивність сорбційних процесів та розпаду мігруючої речовини на нульовому етапі каскадного розпаду. Тут криві 1-5 відповідають значенням  $a_{11}^{(0)} = 4, 6, 8, 10, 20$ .

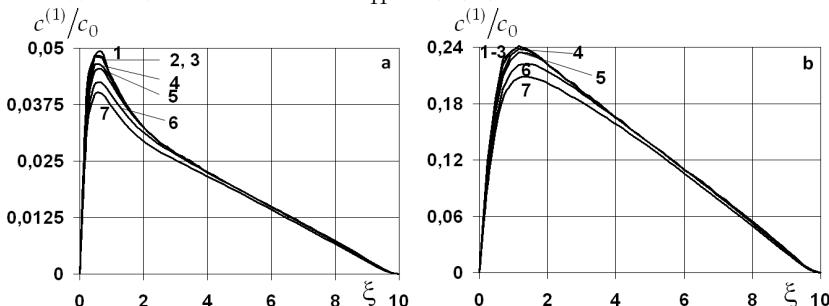


Рис.3.15. Розподіли сумарної концентрації домішки  $c^{(1)}(\xi, \tau)$  на першому етапі розпаду при різних значеннях коефіцієнта  $a^{e(1)}$   
для  $\alpha = 0,25$  (рис.а) і  $\alpha = 0,91$  (рис.б)

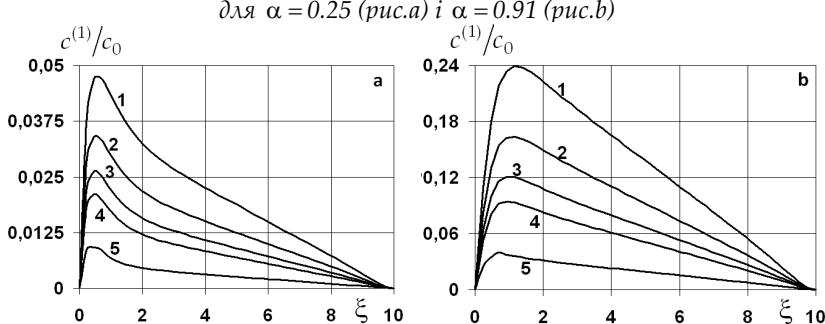


Рис.3.16. Розподіли концентрації домішкової речовини  $K^{(1)}$  на першому етапі каскадного розпаду при різних  $a_{11}^{(1)}$  для  $\alpha = 0,25$  (рис.а), та  $\alpha = 0,91$  (рис.б)



3.4. Схема модулів комплексу програм пакету GeterPas для моделі гетеродифузії двома шляхами. Числовий аналіз

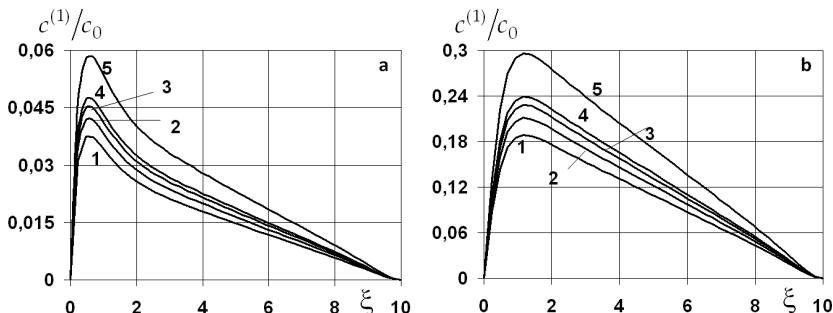


Рис.3.17 Розподіли концентрацій домішкової речовини  $\mathbf{K}^{(1)}$  на першому етапі каскадного розпаду при різних  $a_{12}^{e(1)}$  для  $\alpha = 0.25$  (рис.а) та  $\alpha = 0.91$  (рис.б)

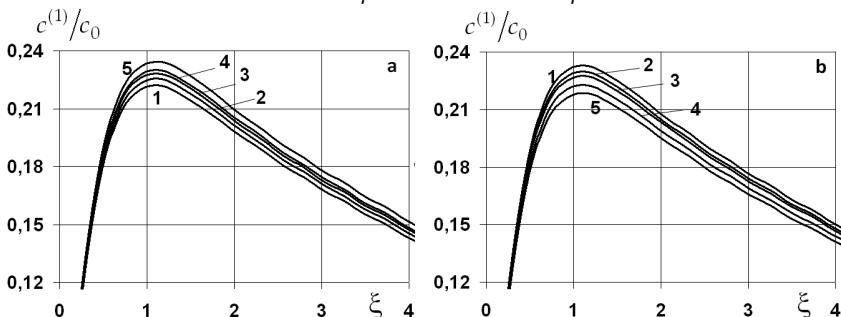


Рис.3.18. Розподіли концентрацій домішкової речовини  $\mathbf{K}^{(1)}$  на першому етапі каскадного розпаду при різних  $a_{21}^{(1)}$  (рис.а) та  $a_{22}^{e(1)}$  (рис.б) для  $\alpha = 0.91$

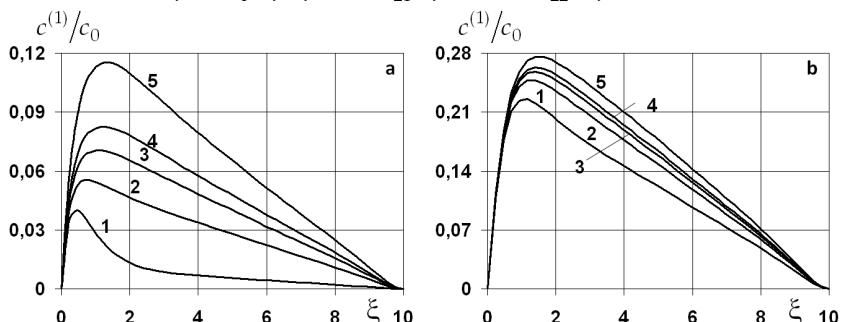


Рис.3.19 Розподіли концентрацій домішкової речовини  $\mathbf{K}^{(1)}$  на першому етапі каскадного розпаду при різних  $a_{11}^{(0)}$  для  $\alpha = 0.25$  (рис.а), та  $\alpha = 0.91$  (рис.б)

Зазначимо, що на першому кроці каскадного розпаду речовини, що утворилася внаслідок розпаду домішкової речовини  $K^{(0)}$ , джерело якої діє на поверхні  $\xi = 0$ , сумарна концентрація частинок  $K^{(1)}$  з ростом часу протікання процесу гетеродифузії спочатку зростає, досягаючи максимальних значень у верхній половині тіла, а потім спадає на всьому проміжку (рис. 3.13). При цьому для малих часів характерне приповерхневе накопичення частинок домішки, максимум якої зростає та зсувається в глиб тіла. Для безрозмірного часу  $\tau = 2$  зафіксовано максимальні значення сумарної концентрації  $c^{(1)}(\xi, \tau)$ , як для малих (рис. 3.13a), так і для великих (рис. 3.13b) значень  $\alpha$ . Проте, якщо для великих  $\alpha$  сумарна концентрація, досягнувши максимуму, зразу ж починає спадати (криві 4, 5, рис. 3.13b), то для малих  $\alpha$   $\max_{\xi \in [0; \xi_0]} c^{(1)}(\xi, \tau)$  тримається в околі максимально досяжених значень ще деякий час (криві 4, 5, рис. 3.13a).

Для малих значень коефіцієнта поверхневого розподілу домішки на нульовому етапі сумарна концентрація частинок приблизно вдвічі менша за концентрацію для великих значень  $\alpha$  (рис. 3.12a і b). При цьому поведінка сумарної концентрації, концентрацій домішки на швидкому та повільному шляхах залишається тією самою при зміні параметра  $\alpha$ . Зазначимо, що для малих значень коефіцієнта поверхневого розподілу домішки на нульовому етапі більший (у 1.5 разів) вклад у сумарну концентрацію частинок на першому кроці вносить концентрація домішки, що мігрує на повільному шляху для середніх та великих часів протікання процесу (криві 2, 3, рис. 3.12a). У той же час для великих  $\alpha$  наявна протилежна ситуація – більший вклад вносить концентрація розпадних частинок на швидкому шляху незалежно від часу протікання процесу (криві 1-3, рис. 3.12b). Для малих значень  $\alpha$  і малих часів концентрації в обох станах вносять сумірних вклад у функцію  $c^{(1)}(\xi, \tau)$  (криві 1, рис. 3.12a).

На першому етапі каскадного розпаду, на відміну від нульового етапу, зміна параметра  $\alpha$  впливає лише на значення сумарної концентрації домішки  $K^{(1)}$  (рис. 3.14) для  $\forall \tau$ . Проте з



ростом  $\alpha$  від 0.09 до 0.91 значення сумарної концентрації  $c^{(1)}(\xi, \tau)$  зростають на порядок (рис. 3.14). При цьому чим менше  $\alpha$  тим близче до поверхні концентруються частинки  $\mathbf{K}^{(1)}$  (крива 1, рис. 3.14a). Зі збільшенням коефіцієнта  $\alpha$  максимум функції сумарної концентрації суттєво зростає і незначно зсувається вглиб тіла (рис. 3.14), зокрема, для часів  $\tau = 0.6$  цей зсув відбувається від точки  $\xi_{\max} = 0.023\xi_0$  до  $\xi_{\max} = 0.116\xi_0$ . Проте для великих часів (рис. 3.14c i d) максимальна різниця між значеннями функції  $c^{(1)}(\xi, \tau)$  для  $\alpha = 0.09$  і  $\alpha = 0.91$  досягається близче до середини тіла, де значення сумарної концентрації зростають у 4.3 рази при рості параметра  $\alpha$ .

Щодо коефіцієнтів дифузії зауважимо, що коефіцієнт  $d_0^{(1)}$  практично не впливає на функцію  $c^{(1)}(\xi, \tau)$  (при варіюванні коефіцієнта  $d_0^{(1)}$  у широких межах величина сумарної концентрації змінюється у п'ятій значимій цифрі). Зміна коефіцієнта  $d^{e(1)}$  впливає лише на значення сумарної концентрації домішкової речовини на першому кроці розпаду, не змінюючи її поведінки. При цьому досліджувались випадки, коли значення цього коефіцієнта є як меншими (криві 1-4, рис. 3.15), так і більшими (криві 5-7, рис. 3.15) ніж аналогічний коефіцієнт дифузії речовини  $\mathbf{K}^{(0)}$  на нульовому кроці розпаду на повільному шляху міграції. Зазначимо, що збільшення коефіцієнта  $d^{e(1)}$  призводить до зменшення сумарної концентрації  $c^{(1)}(\xi, \tau)$  на всьому проміжку, причому при зміні цього параметра від 0.01 до 20 максимум функції концентрації зменшується на 23%.

Коефіцієнти  $a_{kl}^{(1)}$ , які визначають інтенсивність процесів переходу частинок  $\mathbf{K}^{(1)}$  між станами та інтенсивність розпаду домішкової речовини на першому етапі каскадного розпаду, впливають лише на значення сумарної концентрації  $c^{(1)}(\xi, \tau)$  (рис. 3.16-3.18). Так збільшення параметра  $a_{11}^{(1)}$  на порядок приводить до зменшення сумарної концентрації в 4.5 разів для малих значень коефіцієнта поверхневого розподілу  $\alpha$  (рис. 3.16a) і в 6 разів для великих значень  $\alpha$  (рис. 3.16b). Зростання коефі-

цієнтів  $a_{12}^{e(1)}$  і  $a_{21}^{(1)}$  веде до збільшення сумарної концентрації  $c^{(1)}(\xi, \tau)$  в тілі (рис. 3.17, 3.18a). При цьому зростання параметра  $a_{12}^{e(1)}$  на порядок збільшує максимум  $c^{(1)}(\xi, \tau)$  у 1.5-1.6 разів як для малих так і для великих  $\alpha$  (рис. 3.17a, b). В той же час для великих  $\alpha$  зі зростанням коефіцієнта  $a_{21}^{(1)}$  на порядок максимум сумарної концентрації незначно збільшується до 6% (рис. 3.18a). Зміна на порядок коефіцієнта  $a_{22}^{e(1)}$  при  $\alpha = 0.91$  також змінює максимум функції  $c^{(1)}(\xi, \tau)$  до 6%, проте сумарна концентрація зменшується (рис. 3.18b). Для малих значень  $\alpha$  числові значення сумарної концентрації  $c^{(1)}(\xi, \tau)$  змінюються несуттєво (до 2%) при зміні на порядок як коефіцієнта  $a_{21}^{(1)}$ , так і коефіцієнта  $a_{22}^{e(1)}$ .

Зауважимо, що на відміну від коефіцієнтів  $a_{kl}^{(1)}$ , які не сильно впливають значення функції  $c^{(1)}(\xi, \tau)$ , параметр  $a_{11}^{(0)}$ , який визначає інтенсивність процесів переходу частинок  $\mathbf{K}^{(0)}$  між станами та інтенсивність розпаду домішкової речовини на нульовому етапі каскадного розпаду, суттєво впливає на сумарну концентрацію  $c^{(1)}(\xi, \tau)$  на етапі  $i=1$  (рис. 3.19). Для малих значень  $\alpha$  з ростом коефіцієнта  $a_{11}^{(0)}$  у 5 разів сумарна концентрація зростає на всьому проміжку, причому в середині тіла - до 6 разів. Для великих значень  $a_{11}^{(0)}$  при  $\alpha = 0.25$  спостерігається приповерхнева концентрація частинок  $\mathbf{K}^{(1)}$  (крива 1, рис. 3.19a), тоді як для більших значень  $\max_{\xi \in [0; \xi_0]} c^{(1)}(\xi, \tau)$  зростає,

зсувається вглиб тіла і спадання функції стає близьким до лінійного (криві 3-5, рис. 3.19a). Зазначимо, що для великих значень  $\alpha$  при базових значеннях параметрів задачі інтервал можливих значень  $\max_{\xi \in [0; \xi_0]} c^{(1)}(\xi, \tau)$  досягає 22% на інтервалі

$\xi_{\max} \in [0.11\xi_0; 0.18\xi_0]$ , при тому для  $\xi > 0.18\xi_0$  різниця між значеннями функції  $c^{(1)}(\xi, \tau)$  збільшується і досягає 30% (рис. 3.19b).



### 3.4.4. Числовий аналіз концентрацій домішкової речовини на другому кроці каскадного розпаду

В цьому пункті проілюструємо та проаналізуємо характерні розподіли концентрацій домішкової речовини на другому етапі каскадного розпаду, тобто частинок, які утворилися внаслідок ланцюга з двох (хімічних або ядерних) реакцій. На рис. 3.20 подано залежності концентрацій домішкової речовини  $K_1^{(2)}$  на швидкому (криві a, штрихові лінії),  $K_2^{(2)}$  на повільному шляхах міграції (криві b, штрих-пунктирні лінії) та їхня сума  $K^{(2)}$  (суцільні лінії) на першому етапі каскадного розпаду в різні моменти безрозмірного часу  $\tau = 0,8; 2; 20, 50$  (криві – 1-4 відповідно) для наступних значень коефіцієнтів поверхневого розподілу домішкових частинок  $K^{(0)}$  між станами  $\alpha = 0.25$  (рис.а) та  $\alpha = 0.91$  (рис.б). На рис. 3.21 наведено розподіли сумарної концентрації домішкової речовини  $K^{(2)}$ , що утворилася внаслідок розпаду речовини  $K^{(1)}$ , у різні моменти безрозмірного часу  $\tau = 0.8; 1.2; 2; 20; 30; 40; 100$  (криві – 1-7) для малих ( $\alpha = 0.25$ , рис. 3.21а) та великих ( $\alpha = 0.91$  рис. 3.21б) значень коефіцієнта  $\alpha$ .

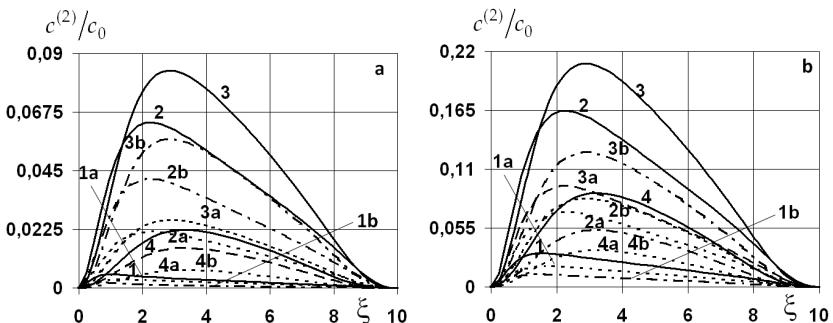


Рис.3.20 Розподіли концентрацій домішкової речовини на швидкому  $K_1^{(2)}$ , на повільному  $K_2^{(2)}$  шляхах міграції та їхня сума  $K^{(2)}$  на другому етапі каскадного розпаду у різні моменти часу для  $\alpha = 0.25$  (рис.а) і  $\alpha = 0.91$  (рис.б)

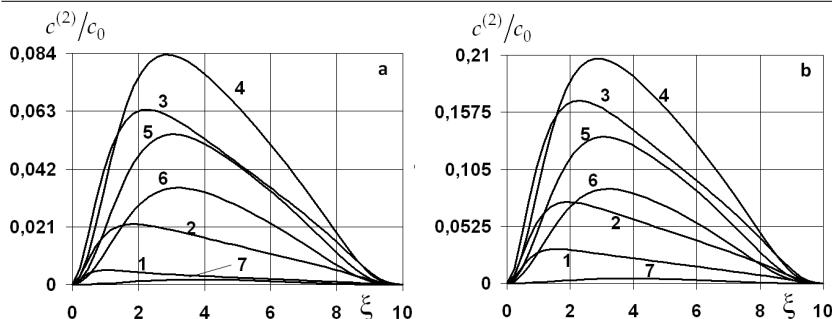


Рис.3.21 Розподіли сумарної концентрації домішкової речовини  $\mathbf{K}^{(2)}$  на другому етапі каскадного розпаду у різні моменти часу для  $\alpha = 0.25$  (рис.а) і  $\alpha = 0.91$  (рис.б)

Зазначимо, що для малих значень коефіцієнта  $\alpha$ , який визначає частку домішкової речовини на нульовому етапі розпаду, що з поверхні тіла  $\xi = 0$  потрапила на швидкий шлях дифузії, сумарна концентрація речовини  $\mathbf{K}^{(2)}$  на 2 етапі каскадного розпаду приблизно у 2.5 рази менша ніж для великих значень  $\alpha$  (рис. 3.20а і б) незалежно від часу протікання процесу. При цьому для малих  $\alpha$  вклад концентрацій  $c_2^{(2)}(\xi, \tau)$  на повільному шляху міграції значно більший ніж концентрації  $c_1^{(2)}(\xi, \tau)$  на швидкому шляху. Так в момент часу  $\tau = 20$

$$\max_{\xi \in [0; \xi_0]} c_2^{(2)}(\xi, \tau) / \max_{\xi \in [0; \xi_0]} c_1^{(2)}(\xi, \tau) \approx 2 \quad (\text{криві } 3\text{а} \text{ і } 3\text{б} \text{ на рис. 3.20а}).$$

Зазначимо, що така різниця між значеннями концентрацій домішки  $\mathbf{K}^{(2)}$  на різних шляхах міграції зберігається і для інших моментів безрозмірного часу. У той же час для великих значень  $\alpha$  ситуація дещо інша – спочатку різниця між концентраціями в різних станах зменшується до 3% при  $\tau = 20$  (криві 3а і 3б на рис. 3.20б), а потім збільшується до 23% для  $\tau = 50$  (криві 4а і 4б на рис. 3.20б) при зменшенні значень концентрацій на обох шляхах міграції. При цьому при зростанні концентрацій ( $\tau \in [0; 20]$ ) функція  $c_1^{(2)}(\xi, \tau)$  є більшою ніж  $c_2^{(2)}(\xi, \tau)$  на всьому проміжку, а при їхньому спаданні ( $\tau > 20$ ) концентрація на швидкому шляху  $\mathbf{K}_1^{(2)}$  завжди є меншою ніж концентрація на повільному шляху міграції  $\mathbf{K}_2^{(2)}$  (рис. 3.20б).



Зауважимо, що сумарна концентрація  $K^{(2)}$  на другому етапі розпаду спочатку зростає, а її максимум зсувався вглиб тіла, зокрема, від точки  $\xi_{\max} = 0.093\xi_0$  до  $\xi_{\max} = 0.28\xi_0$  для малих (рис. 3.21a) так і для великих (рис. 3.21b) значень коефіцієнта  $\alpha$ . Для часів  $\tau > 20$  сумарна концентрація домішки  $c^{(2)}(\xi, \tau)$  зменшується, проте її максимум продовжує зсуватись вглиб тіла, а саме від точки  $\xi_{\max} = 0.28\xi_0$  до точки  $\xi_{\max} = 0.372\xi_0$  для моменту  $\tau = 100$ .

Рис. 3.22 ілюструє розподіл сумарної концентрації домішки  $K^{(2)}$  на 2-му етапі каскадного розпаду для різних значень коефіцієнта поверхневого розподілу  $\alpha$  речовини  $K^{(0)}$  між швидким та повільним шляхами міграції. Тут криві 1-5 відповідають значенням  $\alpha = 0.09, 0.25, 0.5, 0.75, 0.91$  у моменти безрозмірного часу  $\tau = 0.8$  (рис. a)  $\tau = 2$  (рис. b)  $\tau = 20$  (рис. c)  $\tau = 100$  (рис. d).

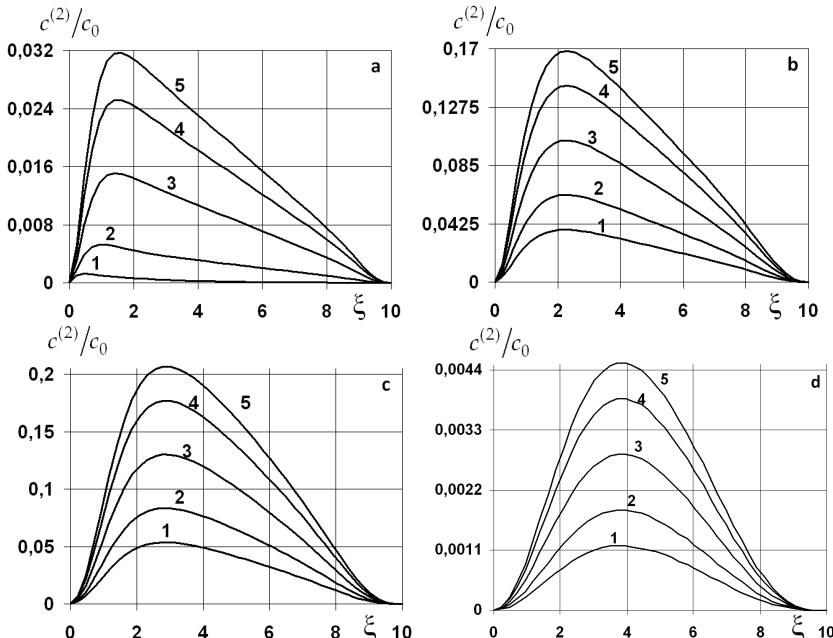


Рис.3.22 Розподіли сумарної концентрації домішки  $c^{(2)}(\xi, \tau)$  на першому етапі розпаду при різних значеннях коефіцієнта  $\alpha$  для малих (рис.a), середніх (рис.b, c) і великих (рис.d) часів

Зазначимо, що якщо для малих часів накопичення сумарної концентрації  $c^{(2)}(\xi, \tau)$  відбувається біля поверхні тіла  $\xi = 0$  для  $\forall \alpha$  (рис. 3.22a), то з ростом часу протікання процесу гетеродифузії речовина  $K^{(2)}$  у більшій мірі накопичується у середині тіла (рис. 3.22d). На нашу думку, цьому сприяє певний зсув джерела маси від поверхні (рис. 3.13), а також розпад частинок, що накопичились або їхня міграція вглиб шару.

Розподіли сумарної концентрації домішкової речовини  $K^{(2)}$  для різних значень параметра інтенсивності сорбції  $a_{11}^{(2)} = 2, 4, 6, 8, 12$  продемонстровані на рис. 3.23a, а для коефіцієнта, що визначає інтенсивність процесу десорбції  $a_{12}^{e(2)} = 0.1, 0.5, 0.8, 1, 1.6$  (криві 1-5) , - на рис. 3.23b при  $\alpha = 0.25$  за базових значень решти параметрів задачі.

Рис. 3.23 ілюструє залежність сумарної концентрації частинок речовини  $K^{(2)}$  від коефіцієнтів інтенсивності сорбції на по-передніх етапах каскадного розпаду на рис. 3.24a криві 1-5 відповідають значенням параметрів сорбції на нульовому етапі розпаду  $a_{11}^{(0)} = 4, 6, 8, 10, 20$ , а на рис. 3.24b криві 1-5 описують функцію  $c^{(2)}(\xi, \tau)$  для різних значень коефіцієнта сорбції на етапі  $i = 1$   $a_{11}^{(1)} = 2, 4, 6, 8, 20$  (криві 1-5), при  $\alpha = 0.25$ .

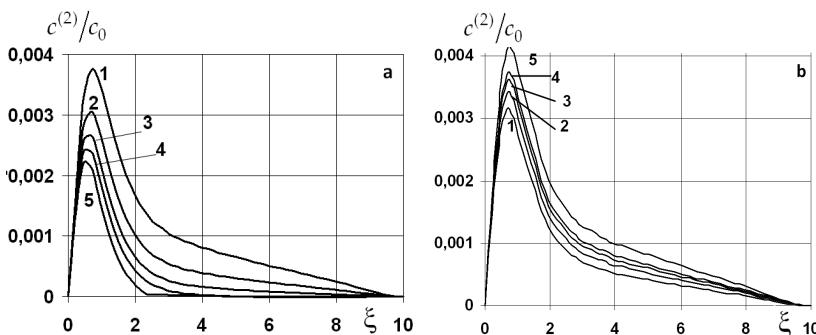


Рис.3.23 Розподіли концентрацій домішкової речовини  $K^{(2)}$  на другому етапі каскадного розпаду при різних  $a_{11}^{(2)}$  (рис.а), та  $a_{12}^{e(2)}$  (рис.б)

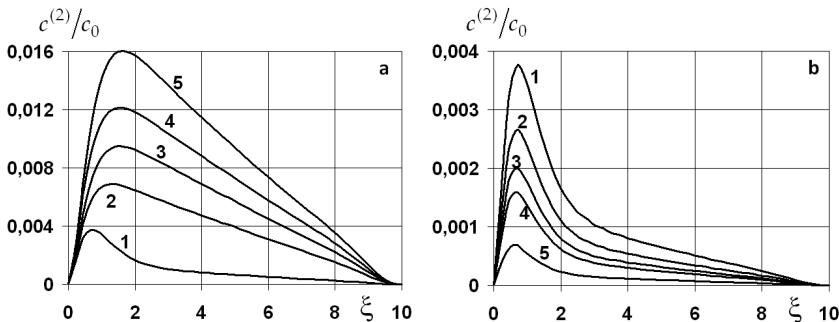


Рис.3.24 Розподіли концентрацій домішкової речовини  $\mathbf{K}^{(2)}$  на другому етапі каскадного розпаду при різних  $a_{11}^{(0)}$  (рис.а), та  $a_{11}^{(1)}$  (рис.б)

Зауважимо, що зі збільшенням інтенсивності сорбції (тобто зростанням коефіцієнта  $a_{11}^{(2)}$ ) на другому етапі каскадного розпаду сумарна концентрація домішкових частинок, утворених внаслідок розпаду на попередньому етапі, зменшується в усій області тіла, причому максимум концентрації незначно зсувається до поверхні  $\xi = 0$  (рис. 3.23а). Крім цього  $\max_{\xi \in [0; \xi_0]} c^{(2)}(\xi, \tau)$  зменшується у 1.7 разів зі зростанням коефіцієнта  $a_{11}^{(2)}$  у 6 разів. Зазначимо, що чим більшим є коефіцієнт сорбції тим на меншій глибині сумарна концентрація стає нулем в межах точності проведення розрахунків ( $\epsilon = 10^{-6}$ ), зокрема,  $c^{(2)}(\xi, \tau)|_{a_{11}^{(2)}=8} = 0$  в точці  $\xi = 0.44\xi_0$  (крива 4, рис. 3.23а),  $c^{(2)}(\xi, \tau)|_{a_{11}^{(2)}=12} = 0$  в точці  $\xi = 0.39\xi_0$  (крива 5, рис. 3.23а). В той же час збільшення коефіцієнта інтенсивності десорбції (коефіцієнт  $a_{12}^{(2)}$ ) призводить до зростання сумарної концентрації речовини  $\mathbf{K}^{(2)}$  в усій області тіла, при цьому поведінка функції  $c^{(2)}(\xi, \tau)$  залишається тою самою (рис. 3.23б). Так зі зростанням значення коефіцієнта  $a_{12}^{(2)}$  від 0.1 до 1.6 максимум сумарної концентрації збільшується на 31%. При цьому функція  $c^{(2)}(\xi, \tau)$  досягає свого максимуму в тій самій точці, зокрема, для даного випадку  $\xi_{\max} = 0.078\xi_0$  (рис. 3.23б).

Відзначимо, що коефіцієнти інтенсивності сорбції та десорбції на попередніх етапах каскадного розпаду суттєво впливають на поведінку і значення сумарної концентрації домішки на етапі  $i = 2$  (рис. 3.24). Наприклад, при збільшенні коефіцієнта інтенсивності сорбції на нульовому етапі розпаду в 5 разів значення сумарної концентрації  $c^{(2)}(\xi, \tau)$  зростає на порядок (рис. 3.24a). При цьому для малих значень коефіцієнта  $a_{11}^{(0)}$  спостерігається накопичення сумарної концентрації речовини  $K^{(2)}$  у приповерхневій області тіла (крива 1, рис. 3.24a). При зміні коефіцієнта інтенсивності сорбції на етапі  $i = 1$  спостерігається протилежна ситуація – концентрація  $c^{(2)}(\xi, \tau)$  зростає в рази при зменшенні на порядок значень коефіцієнта  $a_{11}^{(1)}$  (рис. 3.24b). При цьому функція  $c^{(2)}(\xi, \tau)$  досягає свого максимуму в тій самій точці, зокрема,  $\xi_{\max} = 0.069\xi_0$  для базових значень параметрів задачі (рис. 3.24b).

Ми вважаємо, що ефект (рис. 3.16, рис. 3.23a та рис. 3.24b) пов'язаний зі зростанням сумарних концентрацій домішок, як на першому так і на другому етапах розпаду (речовини  $K^{(1)}$  і  $K^{(2)}$ ) при збільшенні інтенсивності переходів відповідних частинок зі швидкого шляху на повільний, викликаний значно більшою потужністю джерела маси на повільному шляху міграції за рахунок інтенсивнішого процесу сорбції ніж десорбції ще на нульовому етапі каскадного розпаду. Тобто частинки речовини  $K^{(0)}$ , потрапивши у тіло концентруються на повільному шляху міграції і там розпадаються, генеруючи більшу кількість частинок речовини  $K^{(1)}$  саме на повільному шляху. Крім цього за рахунок інтенсивнішого процесу сорбції і на першому етапі розпаду суттєво збільшується потужність джерела маси для речовини  $K^{(2)}$  у другому стані. Отже інтенсивність процесів сорбції–десорбції впливає на розподіл джерел маси речовин, які утворюються внаслідок процесу розпаду між різними станами (різними шляхами міграції).



### 3.4.5. Числовий аналіз дифузійних потоків домішкових частинок на першому етапі розпаду

Кількісне дослідження потоків маси проведено на основі формул (3.32), (3.33). Побудований ітераційний процес знаходження дифузійних потоків від етапу  $i = 0$  до етапу  $i = N - 1$  базується на прямому (безпосередньому) ітераційному процесі для розрахунку концентрації з горизонтальним галуженням на кожному кроці  $i$ .

На рис. 3.25 проілюстровано поведінку функції потоку  $\xi_0 J_{*p}^{(1)}(\tau)/c_0 d_0^{(0)}$  на першому етапі розпаду через різні перерізи тіла  $\xi_* = 0.5, 1, 2, 4, 6, 8, 9.5$  (криві 1-7) для  $\alpha = 0.25$  (рис. а) та  $\alpha = 0.91$  (рис. б).

Рис. 3.26 ілюструє поведінку функції  $\xi_0 J_{*p}^{(1)}(\tau)/c_0 d_0^{(0)}$  через переріз  $\xi_* = 1$  (рис. 3.26а) та нижню границю тіла (рис. 3.26б) при  $d^{(1)} = 0.3, d_0^{(1)} = 0.2$  залежно від значень коефіцієнта поверхневого розподілу між станами речовини  $K^{(0)}$ . Тут криві 1-5 відповідають значенням  $\alpha = 0.1, 0.25, 0.5, 0.75, 0.91$ .

На рис. 3.27 показаний вплив приведених коефіцієнтів дифузії у різних станах на розподіли сумарних дифузійних потоків частинок домішки  $K^{(1)}$  через нижню границю шару  $\xi = \xi_0$  для значення параметра поверхневого розподілу речовини  $K^{(0)}$   $\alpha = 0.91$ . Графіки на рис. 3.27а обчислені для різних значень коефіцієнта дифузії речовини  $K^{(1)}$  на швидкому шляху міграції по відношенню до коефіцієнта дифузії домішки у стані 1 на нульовому етапі, а саме криві 1-7 відповідають  $d_0^{(1)} = 0.3, 0.9, 1.5, 2, 4, 8, 10$  при  $d^{(1)} = 0.2$ . Рис. 3.27б ілюструє потоки маси  $J_{*p}^{(1)}(\tau)$  залежно від значення коефіцієнта дифузії домішки  $K^{(1)}$  на повільному шляху міграції по відношенню до коефіцієнта дифузії на швидкому шляху на 0-му етапі, а саме криві 1-7 відповідають значенням  $d^{(1)} = 0.2, 0.9, 1.5, 2, 4, 8, 10$  при  $d_0^{(1)} = 10$ .

**Розділ 3. Математична модель процесів гетеродифузії  
роздільних речовин двома шляхами**

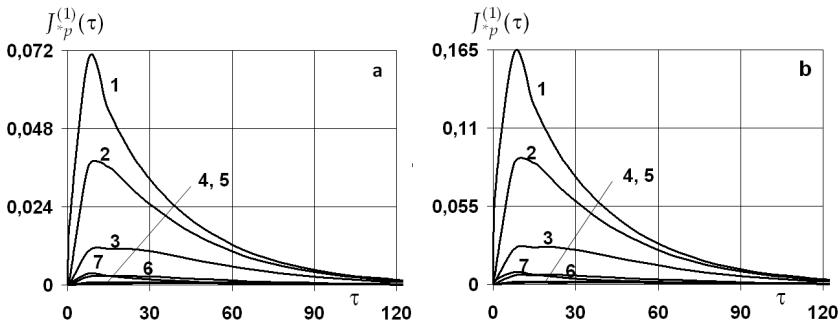


Рис.3.25. Потік маси на першому етапі розпаду через різні перерізи тіла для  $\alpha = 0.25$  (рис.а) та  $\alpha = 0.91$  (рис.б)

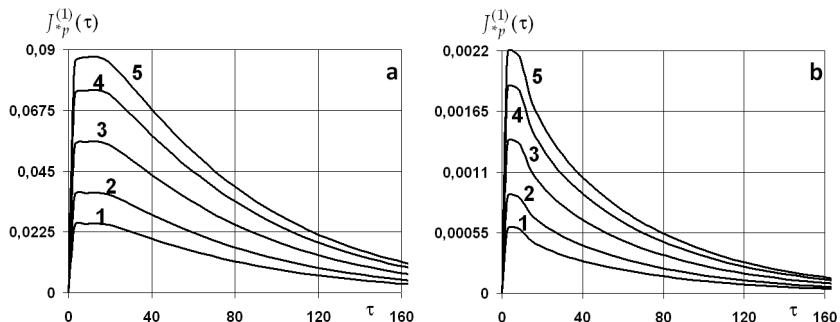


Рис.3.26. Потік маси на першому етапі розпаду через переріз  $\xi_* = 1$  (рис.а)  
та нижню границю тіла (рис.б) для різних значень  $\alpha$

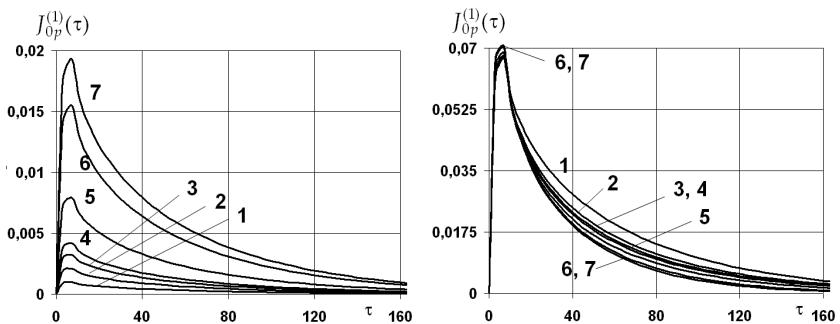


Рис.3.27. Потоки домішки  $\mathbf{K}^{(1)}$  для різних значень  
коєфіцієнта дифузії  $d_0^{(1)}$  та  $d^{(1)}$



Характерною особливістю поведінки сумарних дифузійних потоків домішкової речовини  $K^{(1)}$ , що утворилася в наслідок розпаду речовини  $K^{(0)}$ , є різке зростання  $J_{*p}^{(1)}(\tau)$  від початку процесу гетеродифузії за каскадного розпаду мігруючих речовин (рис. 3.25), швидке досягнення свого максимуму ( $\tau_{\max} \in [8;15]$ ) і подальше повільне монотонне падіння значень сумарного потоку. Проте для перерізів – поверхонь тіла, через які обчислюється дифузійний потік, біля верхньої границі тіла, наприклад,  $\xi = \xi_* = 1$ , після проміжку різкого зростання функції наявний проміжок подальшого повільного зростання (рис. 3.26а) для коефіцієнтів дифузії  $d^{(1)}$  і  $d_0^{(1)}$ , на етапі  $i = 1$  менших ніж відповідні коефіцієнти на нульовому етапі (рис. 3.26а).

Найінтенсивнішими є потоки домішки  $K^{(1)}$  через перерізи біля поверхні тіла, де діє джерело маси речовини  $K^{(0)}$  (рис. 3.25). З віддаленням поверхні  $\xi = \xi_*$  від джерела інтенсивність потоку падає, досягаючи свого мінімуму в околі  $\xi_{*min} \in [3.8;5.5]$ , при цьому максимальні значення  $J_{*p}^{(1)}(\tau)$  зменшуються на порядки  $J_{*p\max}^{(1)}(\tau)|_{\xi=5} / J_{*p\max}^{(1)}(\tau)|_{\xi=0.5} = 0.0073$  для  $\alpha = 0.25$  і  $J_{*p\max}^{(1)}(\tau)|_{\xi=5} / J_{*p\max}^{(1)}(\tau)|_{\xi=0.5} = 0.0074$  для  $\alpha = 0.91$ . Подальший зсув поверхні  $\xi = \xi_*$  до нижньої границі шару веде до збільшення інтенсивності сумарного потоку домішки, проте максимальні значення  $J_{*p}^{(1)}(\tau)$  зростають лише в рази:  $J_{*p\max}^{(1)}(\tau)|_{\xi=9.5} / J_{*p\max}^{(1)}(\tau)|_{\xi=5} = 6.9$  для  $\alpha = 0.25$  і  $J_{*p\max}^{(1)}(\tau)|_{\xi=9.5} / J_{*p\max}^{(1)}(\tau)|_{\xi=5} = 7.1$  для  $\alpha = 0.91$ .

Для різних значень коефіцієнта  $\alpha$  поведінка функції  $J_{*p}^{(1)}(\tau)$  не міняється, проте значення потоку зростає в рази на всьому часовому проміжку і для всіх перерізів для великих  $\alpha$  (рис. 3.25а і 3.25б, рис. 3.26). Так,  $J_{*p\max}^{(1)}(\tau)|_{\alpha=0.91} / J_{*p\max}^{(1)}(\tau)|_{\alpha=0.25} = 2.3$  для  $\xi_* = 0.5$  і  $J_{*p\max}^{(1)}(\tau)|_{\alpha=0.91} / J_{*p\max}^{(1)}(\tau)|_{\alpha=0.25} = 2.4$  для  $\xi_* = 9.5$  при базових значеннях параметрів задачі. Поведінка функції потоку через

нижню границю шару речовини  $K^{(1)}$  є аналогічною – чим більше речовини  $K^{(0)}$  з поверхні потрапляє на швидкий шлях дифузії, тим інтенсивніший потік речовини  $K^{(1)}$  через границю  $\xi = \xi_0$  (рис. 3.26b). При цьому максимальні значення потоку різняться в рази:  $J_{0p\max}^{(1)}(\tau) \Big|_{\alpha=0.91} / J_{0p\max}^{(1)}(\tau) \Big|_{\alpha=0.25} = 2.5$ .

Зазначимо, що зміна коефіцієнта дифузії на швидкому шляху міграції на етапі  $i = 1$  найбільше впливає для малих часових інтервалів процесу гетеродифузії (рис. 3.27a), в той же час зміна коефіцієнта дифузії на повільному шляху найбільше впливає на функцію  $J_{0p}^{(1)}(\tau)$  для середніх часів, зокрема, для базових значень параметрів задачі  $\Delta\tau_m = [20; 110]$  (рис. 3.27b). При цьому збільшення коефіцієнта дифузії на швидкому шляху веде до зростання значення сумарного потоку розпадної речовини (рис. 3.27a), а зростання коефіцієнта дифузії на повільному шляху – до зменшення значень  $J_{0p}^{(1)}(\tau)$  на проміжку  $\Delta\tau_m$  (рис. 3.27b).



## РОЗДІЛ 4

### *Математична модель гетеродифузії двома шляхами у тілі з пастками за каскадного розпаду домішкових речовин*

#### 4.1. Крайова задача каскадного типу для знаходження концентрацій мігруючих компонент

Розглянемо тепер найзагальніший модельний випадок процесів масоперенесення домішкових частинок у середовищі з пастками за каскадного розпаду мігруючих речовин. Якщо знахтуємо перехресними ефектами в системі рівнянь гетеродифузії у тілі з пастками для розпадних домішкових частинок (1.77), то в одновимірному за просторовою координатою випадку отримаємо наступну систему диференціальних рівнянь у безрозмірних змінних:

для  $i = 0$

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_1^{(0)}}{\partial \tau} &= d_1^{(0)} \frac{\partial^2 c_1^{(0)}}{\partial \xi^2} + d_1^{(0)} \frac{\partial^2 c_2^{(0)}}{\partial \xi^2} c_2^{(0)} - a_{11}^{(0)} c_1^{(0)} + a_{12}^{(0)} c_2^{(0)}, \\ \frac{\partial c_2^{(0)}}{\partial \tau} &= d_2^{(0)} \frac{\partial^2 c_1^{(0)}}{\partial \xi^2} + d^{(0)} \frac{\partial^2 c_2^{(0)}}{\partial \xi^2} + a_{21}^{(0)} c_1^{(0)} - a_{22}^{(0)} c_2^{(0)} + a_{23}^{(0)} c_3^{(0)}, \\ \frac{\partial c_3^{(0)}}{\partial \tau} &= a_{32}^{(0)} c_2^{(0)} - a_{33}^{(0)} c_3^{(0)}; \end{aligned} \quad (4.1a)$$

для  $i = \overline{1, N-1}$

$$\frac{\partial c_1^{(i)}}{\partial \tau} = d_0^{(i)} \frac{\partial^2 c_1^{(i)}}{\partial \xi^2} + d_1^{(i)} \frac{\partial^2 c_2^{(i)}}{\partial \xi^2} - a_{11}^{(i)} c_1^{(i)} + a_{12}^{(i)} c_2^{(i)} + a_{\lambda 1}^{(i-1)} c_1^{(i-1)},$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_2^{(i)}}{\partial \tau} &= d_2^{(i)} \frac{\partial^2 c_1^{(i)}}{\partial \xi^2} + d^{(i)} \frac{\partial^2 c_2^{(i)}}{\partial \xi^2} + a_{21}^{(i)} c_1^{(i)} - a_{22}^{(i)} c_2^{(i)} + a_{23}^{(i)} c_3^{(i)} + a_{\lambda 2}^{(i-1)} c_2^{(i-1)}, \\ \frac{\partial c_3^{(i)}}{\partial \tau} &= a_{32}^{(i)} c_2^{(i)} - a_{33}^{(i)} c_3^{(i)} + a_{\lambda 3}^{(i-1)} c_3^{(i-1)}; \end{aligned} \quad (4.1\sigma)$$

для  $i = N$

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_1^{(N)}}{\partial \tau} &= d_0^{(N)} \frac{\partial^2 c_1^{(N)}}{\partial \xi^2} + d_1^{(N)} \frac{\partial^2 c_2^{(N)}}{\partial \xi^2} - a_{11}^{(N)} c_1^{(N)} + a_{12}^{(N)} c_2^{(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 1}^{(iN)} c_1^{(i)}, \\ \frac{\partial c_2^{(N)}}{\partial \tau} &= d_2^{(N)} \frac{\partial^2 c_1^{(N)}}{\partial \xi^2} + d^{(N)} \frac{\partial^2 c_2^{(N)}}{\partial \xi^2} + a_{21}^{(N)} c_1^{(N)} - \\ &- a_{22}^{(N)} c_2^{(N)} + a_{23}^{(N)} c_3^{(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 2}^{(iN)} c_2^{(i)}, \\ \frac{\partial c_3^{(N)}}{\partial \tau} &= a_{32}^{(N)} c_2^{(N)} - a_{33}^{(N)} c_3^{(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 3}^{(iN)} c_3^{(i)}. \end{aligned} \quad (4.1\beta)$$

Як і в попередніх часткових модельних випадках розглянемо шар безрозмірної товщини  $\xi_0$  (рис. 2.1), в якому початкові значення шуканих функцій концентрацій приймемо нульовими, а на границях  $\xi = 0$  і  $\xi = \xi_0$  вважаємо відомими їхні фіксовані значення і розподіл частинок між станами  $\alpha$ , тобто початкові умови для всіх етапів розпаду  $i = \overline{0, N}$

$$c_1^{(i)}(\xi, \tau) \Big|_{\tau=0} = c_2^{(i)}(\xi, \tau) \Big|_{\tau=0} = c_3^{(i)}(\xi, \tau) \Big|_{\tau=0} = 0; \quad (4.2)$$

граничні умови на поверхні тіла  $\xi = 0$  для етапу  $i = 0$

$$c_1^{(i)}(\xi, \tau) \Big|_{\xi=0} = \alpha c_0, \quad c_2^{(i)}(\xi, \tau) \Big|_{\xi=0} = (1 - \alpha) c_0; \quad (4.3a)$$

граничні умови на поверхні  $\xi = 0$  для етапів  $i = \overline{1, N}$

$$c_1^{(i)}(\xi, \tau) \Big|_{\xi=\xi_0} = c_2^{(i)}(\xi, \tau) \Big|_{\xi=\xi_0} = 0; \quad (4.3\beta)$$

граничні умови на поверхні  $\xi = \xi_0$  для всіх етапів розпаду  $i = \overline{0, N}$

$$c_1^{(i)}(\xi, \tau) \Big|_{\xi=\xi_0} = c_2^{(i)}(\xi, \tau) \Big|_{\xi=\xi_0} = 0. \quad (4.4)$$



Параметр  $\alpha$ , що визначає поверхневий розподіл домішкових частинок між станами, означений у п.2.3.1., 3.1.1.

Розглянемо крайову задачу гетеродифузії розпадної речовини у тілі з пастками на нульовому етапі розпаду частинок  $i = 0$ , а саме задачу (4.1а), (4.2), (4.3а), (4.4). Для побудови розв'язків такої задачі перейдемо до нових функцій, які задовольняють нульовим граничним умовам

$$\begin{aligned} f_1(\xi, t) &= c_1^{(0)}(\xi, \tau) - \alpha c_0 \left( 1 - \frac{\xi}{\xi_0} \right), \\ f_2(\xi, t) &= c_2^{(0)}(\xi, \tau) - (1 - \alpha) c_0 \left( 1 - \frac{\xi}{\xi_0} \right), \\ f_3(\xi, t) &= c_3^{(0)}(\xi, \tau). \end{aligned} \quad (4.5)$$

Тоді крайова задача (4.1а), (4.2), (4.3а), (4.4) запишеться у вигляді

$$\begin{aligned} \frac{\partial f_1}{\partial \tau} &= \frac{\partial^2 f_1}{\partial \xi^2} + d_1 \frac{\partial^2 f_2}{\partial \xi^2} - a_{11} f_1 + a_{12} f_2 - \alpha_a c_0 \left( 1 - \frac{\xi}{\xi_0} \right), \\ \frac{\partial f_2}{\partial \tau} &= d_2 \frac{\partial^2 f_1}{\partial \xi^2} + d \frac{\partial^2 f_2}{\partial \xi^2} + a_{21} f_1 - a_{22} f_2 + a_{23} f_3 + \alpha_b c_0 \left( 1 - \frac{\xi}{\xi_0} \right), \\ \frac{\partial f_3}{\partial \tau} &= a_{32} f_2 - a_{33} f_3 + a_{32} (1 - \alpha) c_0 \left( 1 - \frac{\xi}{\xi_0} \right) \end{aligned} \quad (4.6)$$

з нульовими граничними і такими початковими умовами

$$\begin{aligned} f_1(\xi, \tau) \Big|_{\tau=0} &= -\alpha c_0 \left( 1 - \frac{\xi}{\xi_0} \right), \\ f_2(\xi, \tau) \Big|_{\tau=0} &= -(1 - \alpha) c_0 \left( 1 - \frac{\xi}{\xi_0} \right), \quad f_3(\xi, \tau) \Big|_{\tau=0} = 0, \end{aligned} \quad (4.7)$$

де  $\alpha_a = a_{11}\alpha - a_{12}(1 - \alpha)$ ,  $\alpha_b = a_{21}\alpha - a_{22}(1 - \alpha)$ .

Введемо допоміжні позначення

$$A = -\alpha_a c_0 \left( 1 - \frac{\xi}{\xi_0} \right), \quad B = \alpha_b c_0 \left( 1 - \frac{\xi}{\xi_0} \right), \quad H = a_{32}(1 - \alpha) c_0 \left( 1 - \frac{\xi}{\xi_0} \right) \quad (4.8)$$

і, враховуючи розклад

$$1 - \frac{\xi}{\xi_0} = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{2}{k\pi} \sin y_k \xi, \quad y_k = k\pi/\xi_0,$$

подамо функції (4.8) у вигляді

$$A = \sum_{k=1}^{\infty} A_k \sin y_k \xi, \quad B = \sum_{k=1}^{\infty} B_k \sin y_k \xi, \quad H = \sum_{k=1}^{\infty} H_k \sin y_k \xi, \quad (4.9)$$

де

$$A_k = c_0 \alpha_a \frac{2}{k\pi}, \quad B_k = c_0 \alpha_b \frac{2}{k\pi}, \quad H_k = c_0 a_{32} (1-\alpha) \frac{2}{k\pi}. \quad (4.10)$$

Підставляючи в систему рівнянь (4.6) і умови (4.7) розклади функцій  $f_j(\xi, \tau) = \sum_{k=1}^{\infty} f_{jk}(\tau) \sin y_k \xi$ , а також використовуючи вирази (4.9) і (4.10), отримаємо систему звичайних диференціальних рівнянь для знаходження коефіцієнтів розкладів  $f_{jk}(\tau)$ :

$$\begin{aligned} \frac{df_{1k}}{d\tau} &= -y_k^2 f_{1k} - d_1 y_k^2 f_{2k} - a_{11} f_{1k} + a_{12} f_{2k} + A_k, \\ \frac{df_{2k}}{d\tau} &= -d_2 y_k^2 f_{1k} - dy_k^2 f_{2k} + a_{21} f_{1k} - a_{22} f_{2k} + a_{23} f_{3k} + B_k, \\ \frac{df_3}{d\tau} &= a_{32} f_{2k} - a_{33} f_{3k} + H_k \end{aligned} \quad (4.11)$$

за початкових умов

$$f_{1k}(\tau)|_{\tau=0} = -\alpha c_0 \frac{2}{k\pi}, \quad f_{2k}(\tau)|_{\tau=0} = -(1-\alpha) c_0 \frac{2}{k\pi}, \quad f_{3k}(\tau)|_{\tau=0} = 0. \quad (4.12)$$

Застосовуючи до системи диференціальних рівнянь (4.11) перетворення Лапласа ( $\bar{f}_{jk}(s) = L[f_{jk}(\tau)]$ ,  $j = \overline{1, 3}$ ) і враховуючи умови (4.12), знайдемо

$$\begin{aligned} (s + y_k^2 + a_{11}) \bar{f}_{1k} + (d_1 y_k^2 - a_{12}) \bar{f}_{2k} &= \bar{A}, \\ (d_2 y_k^2 - a_{21}) \bar{f}_{1k} + (s + dy_k^2 + a_{22}) \bar{f}_{2k} - a_{23} \bar{f}_{3k} &= \bar{B}, \end{aligned}$$



$$-a_{32}\bar{f}_{2k} + (s + a_{33})\bar{f}_{3k} = \bar{H}, \quad (4.13)$$

де

$$\bar{A} = \frac{2c_0}{k\pi} \left[ \frac{1}{s} \alpha_a + \alpha \right], \quad \bar{B} = \frac{2c_0}{k\pi} \left[ \frac{1}{s} \alpha_b + 1 - \alpha \right], \quad \bar{H} = a_{32}(1-\alpha) \frac{2c_0}{k\pi s}.$$

Для визначення функцій  $f_{jk}(\tau)$  ( $j = \overline{1,3}$ ,  $k = 1, 2, \dots$ ) дослідимо основний визначник отриманої системи. Він має структуру

$$\Delta = s^3 + \eta_1 s^2 + \eta_2 s + \eta_3 = (s - s_1)(s - s_2)(s - s_3), \quad (4.14)$$

$$\begin{aligned} \text{де } \eta_1 &= (1+d)y_k^2 + a_{11} + a_{22} + a_{33}, \quad \eta_2 = d^* y_k^4 + [d(a_{11} + a_{33}) + d_1 a_{21} + \\ &+ d_2 a_{12} + a_{22} + a_{33}]y_k^2 + a_{11}a_{22} + a_{11}a_{33} + a_{22}a_{33} - a_{12}a_{21} - a_{23}a_{32}, \\ \eta_3 &= a_{33}d^* y_k^4 + a_{33}(da_{11} + d_1 a_{21} + d_2 a_{12} + a_{22})y_k^2 - a_{23}a_{32}y_k^2 + a_{11}a_{22}a_{33} - \\ &- a_{11}a_{23}a_{32} - a_{33}a_{12}a_{21}; \quad d^* = d - d_1 d_2. \end{aligned} \quad (4.15)$$

Для знаходження коренів рівняння  $s^3 + \eta_1 s^2 + \eta_2 s + \eta_3 = 0$  зведемо його до неповного кубічного вигляду з допомогою заміни  $s = y - \eta_1/3$ , тоді

$$y^3 + py + q = 0, \quad (4.16)$$

$$\text{де } p = \eta_2 - \frac{\eta_1^2}{3}, \quad q = 2\left(\frac{\eta_1}{3}\right)^3 - \frac{\eta_1 \eta_2}{3} + \eta_3.$$

Розглянемо величину  $Q = \left(\frac{p}{3}\right)^3 + \left(\frac{q}{2}\right)^2$ . Якщо  $Q < 0$ ,  $p < 0$  (інші випадки розглянуті в довіднику [35]), то корені рівняння (4.16) є дійсними і визначаються формулами

$$y_1 = 2\sqrt{-p/3} \cos(\beta/3), \quad y_{2,3} = -2\sqrt{-p/3} \cos\left(\frac{\beta}{3} \pm \frac{\pi}{3}\right),$$

i, відповідно для коренів  $s_i$  ( $i = \overline{1,3}$ )

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

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

Запишемо допоміжні визначники

$$\Delta_1 = \frac{2c_0}{k\pi} \left\{ \alpha s^2 + P_1 s + P_2 + \frac{P_3}{s} \right\}, \quad \Delta_2 = -\frac{2c_0}{k\pi} \left\{ (1-\alpha)s^2 + P'_1 s + P'_2 + \frac{P'_3}{s} \right\},$$

$$\Delta_3 = \frac{2c_0}{k\pi} a_{32} \left\{ 2(1-\alpha)s + P''_2 + \frac{P''_3}{s} \right\}.$$

Тут використані позначення

$$\begin{aligned} P_1 &= y_k^2 (\alpha d_1^* - d_1) + \alpha (a_{22} + a_{33} - a_{12} + 1) + \alpha_a + a_{12}, \\ P_2 &= y_k^2 (\alpha_a - (\alpha_b + a_{33})d_1 + a_{33}\alpha d_1^*) + \alpha (a_{22}a_{33} - a_{12}a_{33} - a_{23}a_{32}) + \\ &+ \alpha_a (a_{33} + a_{22}) + a_{12}(\alpha_b + a_{33}), \\ P_3 &= y_k^2 (a_{33}d_a - a_{23}a_{32}(1-\alpha)d_1) + \alpha_a (a_{22}a_{33} - a_{23}a_{32}) + \alpha_b a_{12}a_{33} + \\ &+ a_{23}a_{32}(a_{12} - \alpha); \\ P'_1 &= y_k^2 (\alpha d_2 + \alpha a_{11} - (1-\alpha)) - a_{11} - \alpha a_{21} - \alpha_b - (1-\alpha)a_{33}, \\ P'_2 &= y_k^2 ((\alpha_a + \alpha a_{33})d_2 - \alpha_b - (1-\alpha)a_{33}) + \alpha (a_{11}a_{33} + a_{23}a_{32} - a_{21}a_{33}) - \\ &- \alpha_b (a_{11} + a_{33}) - (1-\alpha)(a_{11}a_{33} + a_{23}a_{32}) - a_{21}(\alpha_a + \alpha a_{33}), \\ P'_3 &= y_k^2 (a_{33}\alpha_a d_2 - a_{23}a_{32}(1-\alpha)) - (1-\alpha)a_{11}a_{23}a_{32} - a_{33}(a_{11}\alpha_b + a_{21}\alpha_a); \\ P''_2 &= y_k^2 (2(1-\alpha) + d - \alpha d_2^*) - \alpha (a_{22} - a_{21} + 2a_{11}) + a_{22} + 2a_{11} + \alpha_b, \\ P''_3 &= y_k^4 (1-\alpha)d^* + y_k^2 ((1-\alpha)[a_{11}d + a_{21}d_1] - (1+\alpha)a_{12}d_2 + (1-\alpha)a_{22} - \alpha_b) + \\ &+ (1-\alpha)[a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}] + \alpha_b a_{11} + \alpha_a a_{21}; \\ d_1^* &= d + d_1, \quad d_2^* = d + d_2, \quad d_a = \alpha_a d - \alpha_b d_1. \end{aligned} \tag{4.17}$$

Таким чином розв'язок системи рівнянь (4.13) запишеться у вигляді

$$\begin{aligned} \bar{f}_{1k} &= \frac{\Delta_1}{\Delta} = \frac{2c_0}{k\pi(s-s_1)(s-s_2)(s-s_3)} \left\{ \alpha s^2 + P_1 s + P_2 + \frac{P_3}{s} \right\}, \\ \bar{f}_{2k} &= \frac{\Delta_2}{\Delta} = -\frac{2c_0}{k\pi(s-s_1)(s-s_2)(s-s_3)} \left\{ (1-\alpha)s^2 + P'_1 s + P'_2 + \frac{P'_3}{s} \right\}, \\ \bar{f}_{3k} &= \frac{\Delta_3}{\Delta} = \frac{2c_0 a_{32}}{k\pi(s-s_1)(s-s_2)(s-s_3)} \left\{ 2(1-\alpha)s + P''_2 + \frac{P''_3}{s} \right\}. \end{aligned} \tag{4.18}$$



До отриманих виразів (4.18) застосуємо обернене перетворення Лапласа. Використовуючи наступні співвідношення [66]

$$\begin{aligned}
 L^{-1}\left[\frac{1}{(s-s_1)(s-s_2)(s-s_3)}\right] &= -\frac{1}{s^*} \left\{ (s_2 - s_3)e^{s_1\tau} + (s_3 - s_1)e^{s_2\tau} + (s_1 - s_2)e^{s_3\tau} \right\}, \\
 L^{-1}\left[\frac{s}{(s-s_1)(s-s_2)(s-s_3)}\right] &= -\frac{1}{s^*} \left\{ s_1(s_2 - s_3)e^{s_1\tau} + s_2(s_3 - s_1)e^{s_2\tau} + \right. \\
 &\quad \left. + s_3(s_1 - s_2)e^{s_3\tau} \right\}, \\
 L^{-1}\left[\frac{s^2}{(s-s_1)(s-s_2)(s-s_3)}\right] &= -\frac{1}{s^*} \left\{ s_1^2(s_2 - s_3)e^{s_1\tau} + s_2^2(s_3 - s_1)e^{s_2\tau} + \right. \\
 &\quad \left. + s_3^2(s_1 - s_2)e^{s_3\tau} \right\}, \\
 L^{-1}\left[\frac{1}{s(s-s_1)(s-s_2)(s-s_3)}\right] &= -\frac{1}{s_1 s_2 s_3} - \\
 &\quad -\frac{1}{s^*} \left\{ \frac{1}{s_1}(s_2 - s_3)e^{s_1\tau} + \frac{1}{s_2}(s_3 - s_1)e^{s_2\tau} + \frac{1}{s_3}(s_1 - s_2)e^{s_3\tau} \right\}, \quad (4.19)
 \end{aligned}$$

де  $s^* = (s_1 - s_2)(s_2 - s_3)(s_3 - s_1)$ , знаходимо вирази для коефіцієнтів розкладу  $f_{jk}(k, \tau)$ ,  $j = \overline{1, 3}$

$$\begin{aligned}
 f_{1k} &= \frac{2c_0}{k\pi s^*} \left\{ (s_2 - s_3) \left[ \alpha s_1^2 + P_1 s_1 + P_2 + \frac{P_3}{s_1} \right] e^{s_1\tau} + (s_3 - s_1) \left[ \alpha s_2^2 + P_1 s_2 + P_2 + \frac{P_3}{s_2} \right] e^{s_2\tau} + \right. \\
 &\quad \left. + (s_1 - s_2) \left[ \alpha s_3^2 + P_1 s_3 + P_2 + \frac{P_3}{s_3} \right] e^{s_3\tau} \right\} + \frac{2c_0 P_3}{k\pi s_1 s_2 s_3}, \\
 f_{2k} &= \frac{2c_0}{k\pi s^*} \left\{ (s_2 - s_3) \left[ (1-\alpha)s_1^2 + P'_1 s_1 + P'_2 + \frac{P'_3}{s_1} \right] e^{s_1\tau} + (s_3 - s_1) \left[ (1-\alpha)s_2^2 + P'_1 s_2 + \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + P'_2 + \frac{P'_3}{s_2} \right] e^{s_2\tau} + (s_1 - s_2) \left[ (1-\alpha)s_3^2 + P'_1 s_3 + P'_2 + \frac{P'_3}{s_3} \right] e^{s_3\tau} \right\} + \frac{2c_0 P'_3}{k\pi s_1 s_2 s_3}, \\
 f_{3k} &= \frac{2c_0 a_{32}}{k\pi s^*} \left\{ (s_2 - s_3) \left[ 2(1-\alpha)s_1 + P''_2 + \frac{P''_3}{s_1} \right] e^{s_1\tau} + (s_3 - s_1) \left[ 2(1-\alpha)s_2 + \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + P''_2 + \frac{P''_3}{s_2} \right] e^{s_2\tau} + (s_1 - s_2) \left[ 2(1-\alpha)s_3 + P''_1 s_3 + P''_2 + \frac{P''_3}{s_3} \right] e^{s_3\tau} \right\} + \frac{2c_0 P''_3}{k\pi s_1 s_2 s_3},
 \end{aligned}$$

$$+ P_2'' + \frac{P_3''}{s_2} \Big] e^{s_2 \tau} + (s_1 - s_2) \left[ 2(1-\alpha)s_3 + P_2'' + \frac{P_3''}{s_3} \right] e^{s_3 \tau} \Big\} + \frac{2c_0 a_{32} P_3''}{k\pi s_1 s_2 s_3}.$$

Тоді з використанням формул (4.5) для шуканих концентрацій  $c_j^{(0)}(\xi, \tau)$ ,  $j = \overline{1, 3}$  отримаємо

$$\begin{aligned} \frac{c_1^{(0)}(\xi, \tau)}{c_0} &= \alpha \left( 1 - \frac{\xi}{\xi_0} \right) + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{2}{k\pi} \sin y_k \xi \left\{ \frac{P_3}{s_1 s_2 s_3} + \frac{1}{s} \left( (s_2 - s_3) \left[ \alpha s_1^2 + P_1 s_1 + \right. \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \left. + P_2 + \frac{P_3}{s_1} \right] e^{s_1 \tau} + (s_3 - s_1) \left[ \alpha s_2^2 + P_1 s_2 + P_2 + \frac{P_3}{s_2} \right] e^{s_2 \tau} + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \left. + (s_1 - s_2) \left[ \alpha s_3^2 + P_1 s_3 + P_2 + \frac{P_3}{s_3} \right] e^{s_3 \tau} \right] \right\}, \\ \frac{c_2^{(0)}(\xi, \tau)}{c_0} &= (1-\alpha) \left( 1 - \frac{\xi}{\xi_0} \right) + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{2}{k\pi} \sin y_k \xi \left\{ \frac{P'_3}{s_1 s_2 s_3} + \right. \\ &\quad \left. \frac{1}{s} \left( (s_2 - s_3) \left[ (1-\alpha)s_1^2 + P'_1 s_1 + P'_2 + \frac{P'_3}{s_1} \right] e^{s_1 \tau} + (s_3 - s_1) \left[ (1-\alpha)s_2^2 + P'_1 s_2 + \right. \right. \right. \\ &\quad \left. \left. \left. + P'_2 + \frac{P'_3}{s_2} \right] e^{s_2 \tau} + (s_1 - s_2) \left[ (1-\alpha)s_3^2 + P'_1 s_3 + P'_2 + \frac{P'_3}{s_3} \right] e^{s_3 \tau} \right] \right\}, \\ \frac{c_3^{(0)}(\xi, \tau)}{c_0} &= \sum_{k=1}^{\infty} \frac{2a_{32}}{k\pi} \sin y_k \xi \left\{ \frac{P''_3}{s_1 s_2 s_3} + \frac{1}{s} \left( (s_2 - s_3) \left[ 2(1-\alpha)s_1 + P''_2 + \frac{P''_3}{s_1} \right] e^{s_1 \tau} + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + (s_3 - s_1) \left[ 2(1-\alpha)s_2 + P''_2 + \frac{P''_3}{s_2} \right] e^{s_2 \tau} + (s_1 - s_2) \left[ 2(1-\alpha)s_3 + P''_2 + \frac{P''_3}{s_3} \right] e^{s_3 \tau} \right] \right\}. \end{aligned} \tag{4.20}$$

У записаних формулах присутні доданки, що погано збігаються, а саме ті, які задають асимптотику розв'язку при  $\tau \rightarrow \infty$ . Просумуємо їх окремо. У виразі для концентрації  $c_1^{(0)}(\xi, \tau)$  маємо член



$$I_1 = \frac{2}{\pi} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{P_3}{ks_1 s_2 s_3} \sin y_k \xi = \frac{2}{\pi} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{P_3}{k \eta_3} \sin y_k \xi.$$

Після перетворень з використанням формул (4.15), (4.17) його можна представити наступним чином

$$\begin{aligned} I_1 &= \frac{2}{\pi} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{P_3}{ks_1 s_2 s_3} \sin y_k \xi = \frac{2}{\pi} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{P_3}{k \eta_3} \sin y_k \xi = \\ &= \frac{2}{\pi} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{A_{d1} y_k^2 + A_{\alpha 1}}{k [a_{33} d^* y_k^4 + d_{a1} y_k^2 + a_{1\lambda}]} \sin y_k \xi, \end{aligned} \quad (4.21)$$

де  $A_{d1} = a_{33} d_a - a_{23} a_{32} (1-\alpha) d_1$ ,  $A_{\alpha 1} = \alpha_a (a_{22} a_{33} - a_{23} a_{32}) + \alpha_b a_{12} a_{33} + a_{23} a_{32} (\alpha_{12} - \alpha)$ ,  $d_{a1} = a_{33} (da_{11} + d_1 a_{21} + d_2 a_{12} + a_{22}) - a_{23} a_{32}$ ,  
 $a_{1\lambda} = a_{11} a_{22} a_{33} - a_{11} a_{23} a_{32} - a_{33} a_{12} a_{21}$ .

Спочатку розглянемо вираз

$$I_{11} = \frac{2}{\pi} A_{\alpha 1} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\sin y_k \xi}{k [a_{33} d^* y_k^4 + d_{a1} y_k^2 + a_{1\lambda}]}.$$

Знаменник цього ряду подамо у вигляді

$$k \left[ a_{33} d^* \frac{\pi^4}{\xi_0^4} k^4 + d_{a1} \frac{\pi^2}{\xi_0^2} k^2 + a_{1\lambda} \right] = k(k^2 - b'_1)(k^2 - b'_2),$$

де  $b'_{1,2} = \frac{\xi_0^2}{2a_{33} d^*} \left\{ -d_{a1} \pm \sqrt{d_{a1}^2 - 4a_{33} a_{1\lambda} d^*} \right\}$ , причому  $b'_1, b'_2 \leq 0$ . Тому позначимо  $b_1 = -b'_1$ ,  $b_2 = -b'_2$  і перепишемо  $I_{11}$  так

$$I_{11} = \frac{2}{\pi} A_{\alpha 1} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\sin y_k \xi}{k(k^2 + b_1)(k^2 + b_2)}.$$

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

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

Звідси маємо

$$A + B = 0; \quad Ab_2 + Bb_1 = 1.$$

Тоді знаходимо

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

Вираз для  $I_{11}$  запишемо у вигляді

$$I_{11} = \frac{2}{\pi} \frac{A_{a1}}{b_2 - b_1} \sum_{k=1}^{\infty} \left[ \frac{\sin y_k \xi}{k(k^2 + b_1)} - \frac{\sin y_k \xi}{k(k^2 + b_2)} \right].$$

Враховуючи формулу (2.14), одержимо

$$\begin{aligned} I_{11} = 2a_{33}d^* \frac{A_{a1}}{b_2 - b_1} & \left( \frac{1}{b_1} \left[ 1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\operatorname{sh} \bar{a}_1(\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \bar{a}_1 \xi_0} \right] - \right. \\ & \left. - \frac{1}{b_2} \left[ 1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\operatorname{sh} \bar{a}_2(\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \bar{a}_2 \xi_0} \right] \right). \end{aligned}$$

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

Тепер розглянемо другу частину ряду (4.21):

$$I_{12} = \frac{2\pi}{\xi_0^2} A_{d1} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{k \sin y_k \xi}{a_{33}d^* y_k^4 + d_{a1}y_k^2 + a_{1\lambda}}.$$

Як і для  $I_{11}$ , розкладемо вираз під знаком суми на прості дроби:

$$I_{12} = \frac{2\pi}{\xi_0^2} \frac{A_{d1}}{b_2 - b_1} \sum_{k=1}^{\infty} \left[ \frac{k \sin y_k \xi}{k^2 + b_1} - \frac{k \sin y_k \xi}{k^2 + b_2} \right].$$

Використаємо відомий ряд [53]

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

Тоді одержимо

$$I_{12} = 2a_{33}d^* \frac{A_{d1}}{b_2 - b_1} \left( \frac{\operatorname{sh} \bar{a}_1(\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \bar{a}_1 \xi_0} - \frac{\operatorname{sh} \bar{a}_2(\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \bar{a}_2 \xi_0} \right).$$

І остаточно для  $I_1$  отримаємо



$$I_1 = 2 \frac{a_{33}d^*}{b_2 - b_1} \left( \frac{A_{\alpha 1}}{b_1} \left[ 1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\operatorname{sh} \bar{a}_1(\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \bar{a}_1 \xi_0} \right] - \frac{A_{\alpha 1}}{b_2} \left[ 1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\operatorname{sh} \bar{a}_2(\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \bar{a}_2 \xi_0} \right] + A_{d1} \left[ \frac{\operatorname{sh} \bar{a}_1(\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \bar{a}_1 \xi_0} - \frac{\operatorname{sh} \bar{a}_2(\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \bar{a}_2 \xi_0} \right] \right). \quad (4.22)$$

Зазначимо, що асимптотичний доданок у виразі для  $c_2^{(0)}(\xi, \tau)$  (4.20) має структуру, аналогічну асимптотичному доданку  $I_1$  (4.22) в  $c_1^{(0)}(\xi, \tau)$ , відрізняючись лише коефіцієнтом  $P'_3$ . Тому ми можемо записати

$$I_2 = \frac{2}{\pi} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{P'_3}{ks_1 s_2 s_3} \sin y_k \xi = \frac{2}{\pi} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{A_{d2} y_k^2 - A_{\alpha 2}}{k [a_{33} d^* y_k^4 + d_{a1} y_k^2 + a_{1\lambda}]} \sin y_k \xi,$$

де  $A_{d2} = a_{33} \alpha_a d - a_{23} a_{32} (1 - \alpha)$ ,  $A_{\alpha 2} = (1 - \alpha) a_{11} a_{23} a_{32} + a_{33} a_{11} \alpha_b + a_{33} a_{21} \alpha_a$ .

І в результаті маємо

$$I_2 = 2 \frac{a_{33}d^*}{b_2 - b_1} \left( - \frac{A_{\alpha 2}}{b_1} \left[ 1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\operatorname{sh} \bar{a}_1(\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \bar{a}_1 \xi_0} \right] + \frac{A_{\alpha 2}}{b_2} \left[ 1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\operatorname{sh} \bar{a}_2(\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \bar{a}_2 \xi_0} \right] + A_{d2} \left[ \frac{\operatorname{sh} \bar{a}_1(\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \bar{a}_1 \xi_0} - \frac{\operatorname{sh} \bar{a}_2(\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \bar{a}_2 \xi_0} \right] \right). \quad (4.23)$$

Оскільки при  $\tau \rightarrow \infty$  з третього рівняння системи (4.1a) випливає, що  $c_{3\infty}^{(0)}(\xi) = (a_{32}/a_{33}) c_{2\infty}^{(0)}(\xi)$ , тоді враховуючи, що  $c_{2\infty}^{(0)}(\xi) = (1 - \alpha) \left( 1 - \frac{\xi}{\xi_0} \right) + I_2$  та використовуючи вираз (4.23), отримаємо

$$c_{3\infty}^{(0)}(\xi) = \frac{a_{32}}{a_{33}} \left( (1 - \alpha) \left( 1 - \frac{\xi}{\xi_0} \right) + I_3 \right); \\ I_3 = 2 \frac{d^* a_{33}}{b_2 - b_1} \left( - \frac{A_{\alpha 2}}{b_1} \left[ 1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\operatorname{sh} \bar{a}_1(\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \bar{a}_1 \xi_0} \right] + \frac{A_{\alpha 2}}{b_2} \left[ 1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\operatorname{sh} \bar{a}_2(\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \bar{a}_2 \xi_0} \right] + A_{d2} \left[ \frac{\operatorname{sh} \bar{a}_1(\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \bar{a}_1 \xi_0} - \frac{\operatorname{sh} \bar{a}_2(\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \bar{a}_2 \xi_0} \right] \right). \quad (4.24)$$

З урахуванням формул (4.22)-(4.22) вирази для розподілів концентрацій  $c_j^{(0)}(\xi, \tau)$  на етапі розпаду  $i=0$  запишемо у вигляді концентрація домішок у поровому розчині

$$\begin{aligned} \frac{c_1^{(0)}(\xi, \tau)}{c_0} = & \alpha \left( 1 - \frac{\xi}{\xi_0} \right) + 2 \frac{a_{33}d^*}{b_2 - b_1} \left( \frac{A_{\alpha 1}}{b_1} \left[ 1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\operatorname{sh} \bar{a}_1(\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \bar{a}_1 \xi_0} \right] - \right. \\ & \left. - \frac{A_{\alpha 1}}{b_2} \left[ 1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\operatorname{sh} \bar{a}_2(\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \bar{a}_2 \xi_0} \right] + A_{d1} \left[ \frac{\operatorname{sh} \bar{a}_1(\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \bar{a}_1 \xi_0} - \frac{\operatorname{sh} \bar{a}_2(\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \bar{a}_2 \xi_0} \right] \right) + \\ & + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{2}{k\pi s^*} \sin y_k \xi \left\{ (s_2 - s_3) \left[ \alpha s_1^2 + P_1 s_1 + P_2 + \frac{P_3}{s_1} \right] e^{s_1 \tau} + \right. \\ & \left. + (s_3 - s_1) \left[ \alpha s_2^2 + P_1 s_2 + P_2 + \frac{P_3}{s_2} \right] e^{s_2 \tau} + (s_1 - s_2) \left[ \alpha s_3^2 + P_1 s_3 + P_2 + \frac{P_3}{s_3} \right] e^{s_3 \tau} \right\}, \end{aligned} \quad (4.25a)$$

концентрація домішок на внутрішній поверхні скелету

$$\begin{aligned} \frac{c_2^{(0)}(\xi, \tau)}{c_0} = & (1 - \alpha) \left( 1 - \frac{\xi}{\xi_0} \right) + 2 \frac{a_{33}d^*}{b_2 - b_1} \left( - \frac{A_{\alpha 2}}{b_1} \left[ 1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\operatorname{sh} \bar{a}_1(\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \bar{a}_1 \xi_0} \right] + \right. \\ & \left. + \frac{A_{\alpha 2}}{b_2} \left[ 1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\operatorname{sh} \bar{a}_2(\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \bar{a}_2 \xi_0} \right] + A_{d2} \left[ \frac{\operatorname{sh} \bar{a}_1(\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \bar{a}_1 \xi_0} - \frac{\operatorname{sh} \bar{a}_2(\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \bar{a}_2 \xi_0} \right] \right) + \\ & + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{2}{k\pi s^*} \sin y_k \xi \left\{ (s_2 - s_3) \left[ (1 - \alpha) s_1^2 + P'_1 s_1 + P'_2 + \frac{P'_3}{s_1} \right] e^{s_1 \tau} + \right. \\ & \left. + (s_3 - s_1) \left[ (1 - \alpha) s_2^2 + P'_1 s_2 + P'_2 + \frac{P'_3}{s_2} \right] e^{s_2 \tau} + \right. \\ & \left. + (s_1 - s_2) \left[ (1 - \alpha) s_3^2 + P'_1 s_3 + P'_2 + \frac{P'_3}{s_3} \right] e^{s_3 \tau} \right\}, \end{aligned} \quad (4.25b)$$

концентрація частинок у «пастках»

$$\frac{c_3^{(0)}(\xi, \tau)}{c_0} = \frac{a_{32}}{a_{33}} \left( (1 - \alpha) \left( 1 - \frac{\xi}{\xi_0} \right) + 2 \frac{a_{33}d^*}{b_2 - b_1} \left( - \frac{A_{\alpha 2}}{b_1} \left[ 1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\operatorname{sh} \bar{a}_1(\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \bar{a}_1 \xi_0} \right] + \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{A_{\alpha 2}}{b_2} \left[ 1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\operatorname{sh} \bar{a}_2(\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \bar{a}_2 \xi_0} \right] + A_{d2} \left[ \frac{\operatorname{sh} \bar{a}_1(\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \bar{a}_1 \xi_0} - \frac{\operatorname{sh} \bar{a}_2(\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \bar{a}_2 \xi_0} \right] \right) \right) +$$



$$\begin{aligned}
 & + \frac{A_{a2}}{b_2} \left[ 1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\operatorname{sh} \bar{a}_2(\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \bar{a}_2 \xi_0} \right] + A_{d2} \left[ \frac{\operatorname{sh} \bar{a}_1(\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \bar{a}_1 \xi_0} - \frac{\operatorname{sh} \bar{a}_2(\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \bar{a}_2 \xi_0} \right] \Bigg) + \\
 & + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{2}{k\pi s^*} \sin y_k \xi \left\{ (s_2 - s_3) \left[ 2(1-\alpha)s_1 + P_2'' + \frac{P_3''}{s_1} \right] e^{s_1 \tau} + \right. \\
 & \left. (s_3 - s_1) \left[ 2(1-\alpha)s_2 + P_2'' + \frac{P_3''}{s_2} \right] e^{s_2 \tau} + (s_1 - s_2) \left[ 2(1-\alpha)s_3 + P_2'' + \frac{P_3''}{s_3} \right] e^{s_3 \tau} \right\}, \\
 \end{aligned} \tag{4.25в}$$

сумарна концентрація домішкових частинок у середовищі

$$\begin{aligned}
 \frac{c^{(0)}(\xi, \tau)}{c_0} = & \left( 1 + \frac{a_{32}}{a_{33}}(1-\alpha) \right) \left( 1 - \frac{\xi}{\xi_0} \right) + \frac{2d^*}{b_2 - b_1} \left( \frac{B^*}{b_1} \left[ 1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\operatorname{sh} \bar{a}_1(\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \bar{a}_1 \xi_0} \right] - \right. \\
 & - \frac{B^*}{b_2} \left[ 1 - \frac{\xi}{\xi_0} - \frac{\operatorname{sh} \bar{a}_2(\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \bar{a}_2 \xi_0} \right] + B_d \left[ \frac{\operatorname{sh} \bar{a}_1(\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \bar{a}_1 \xi_0} - \frac{\operatorname{sh} \bar{a}_2(\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \bar{a}_2 \xi_0} \right] \Bigg) + \\
 & + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{2}{k\pi s^*} \sin y_k \xi \left\{ (s_2 - s_3) \left[ s_1^2 + B_1 s_1 + B_2 + \frac{B_3}{s_1} \right] e^{s_1 \tau} + \right. \\
 & \left. + (s_3 - s_1) \left[ s_2^2 + B_1 s_2 + B_2 + \frac{B_3}{s_2} \right] e^{s_2 \tau} + (s_1 - s_2) \left[ s_3^2 + B_1 s_3 + B_2 + \frac{B_3}{s_3} \right] e^{s_3 \tau} \right\}. \\
 \end{aligned} \tag{4.25г}$$

Тут  $B^* = a_{33}A_{a1} - (a_{33} + a_{32}/a_{33})A_{a2}$ ,  $B_d = a_{33}A_{d1} + (a_{33} + a_{32}/a_{33})A_{d2}$ ,  
 $B_1 = P_1 + P'_1 + 2a_{32}(1-\alpha)/a_{33}$ ,  $B_j = P_j + P'_j + P''_j/a_{33}$ ,  $j = 2, 3$ .

Якщо в системі рівнянь гетеродифузії розпадної речовини (4.1а) знехтуємо перехресними ефектами, тобто покладемо  $d_1^{(0)} = d_2^{(0)} = 0$ , то одержимо розв'язок задачі у вигляді (4.25), в якому коефіцієнти набудуть вигляду

$$\begin{aligned}
 A_{a1} & = a_{33}\alpha_a d, \quad A_{a2} = a_{23}a_{32}(1-\alpha), \quad d_{a1} = a_{33}(da_{11} + a_{22}) - a_{23}a_{32}, \quad d^* = d, \\
 b_{1,2} & = \frac{\xi_0^2}{2a_{33}d} \left\{ d_{a1} \mp \sqrt{d_{a1}^2 - 4a_{33}a_{11}d} \right\}; \\
 P_1 & = \alpha dy_k^2 + \alpha(a_{22} + a_{33} - a_{12} + 1) + \alpha_a + a_{12},
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 P_2 &= y_k^2(a_a + a_{33}ad) + \alpha(a_{22}a_{33} - a_{12}a_{33} - a_{23}a_{32}) + \\
 &+ \alpha_a(a_{33} + a_{22}) + a_{12}(a_b + a_{33}), \\
 P_3 &= a_{33}\alpha_a dy_k^2 + \alpha_a(a_{22}a_{33} - a_{23}a_{32}) + \alpha_b a_{12}a_{33} + a_{23}a_{32}(a_{12} - \alpha); \\
 P'_1 &= y_k^2(\alpha a_{11} - (1 - \alpha)) - a_{11} - \alpha a_{21} - a_b - (1 - \alpha)a_{33}, \\
 P'_2 &= -y_k^2(a_b + (1 - \alpha)a_{33}) + \alpha(a_{11}a_{33} + a_{23}a_{32} - a_{21}a_{33}) - \\
 &- \alpha_b(a_{11} + a_{33}) - (1 - \alpha)(a_{11}a_{33} + a_{23}a_{32}) - a_{21}(\alpha_a + \alpha a_{33}), \\
 P'_3 &= -a_{23}a_{32}(1 - \alpha)y_k^2 - (1 - \alpha)a_{11}a_{23}a_{32} - a_{33}(a_{11}\alpha_b + a_{21}\alpha_a); \\
 P''_2 &= (1 - \alpha)(2 + d)y_k^2 - \alpha(a_{22} - a_{21} + 2a_{11}) + a_{22} + 2a_{11} + \alpha_b, \\
 P''_3 &= y_k^4(1 - \alpha)d + y_k^2((1 - \alpha)a_{11}d + (1 - \alpha)a_{22} - a_b) + \\
 &+ (1 - \alpha)[a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21}] + \alpha_b a_{11} + \alpha_a a_{21}; \\
 \eta_2 &= dy_k^4 + [d(a_{11} + a_{33}) + a_{22} + a_{33}]y_k^2 + a_{11}a_{22} + a_{11}a_{33} + \\
 &+ a_{22}a_{33} - a_{12}a_{21} - a_{23}a_{32}, \\
 \eta_3 &= a_{33}dy_k^4 + a_{33}(da_{11} + a_{22})y_k^2 - a_{23}a_{32}y_k^2 + a_{11}a_{22}a_{33} - \\
 &- a_{11}a_{23}a_{32} - a_{33}a_{12}a_{21}.
 \end{aligned}$$

Отже, отримано формули для знаходження концентрацій розпадних домішок на етапі розпаду  $i = 0$  у трьох станах та їхня сума і виділено асимптотичні складові концентрацій. Зазначимо, що отримані залежності суттєво відрізняються від класичних (лінійних), які знаходяться з розв'язків незв'язаної системи рівнянь гетеродифузії або з поодинокого рівняння з ефективними характеристиками, не враховуючи розпад домішкової речовини. Причому доданки типу  $\frac{\operatorname{sh} \bar{a}_j(\xi_0 - \xi)}{\operatorname{sh} \bar{a}_j \xi_0}$  вносять суттєвий вклад в розподіл концентрацій у приповерхневому шарі і показують збільшення концентрації домішкових частинок в околі верхньої границі тіла. 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.

Для наступних кроків каскадного розпаду  $i = \overline{1, N-1}$  розв'язки краївих задач (4.1б), (4.2), (4.3б), (4.4) як і для попередніх модельних варіантів подаємо через відповідні функції Гріна:



$$c_1^{(i)}(\tau, \xi) = a_{\lambda 1}^{(i-1)} \int_0^{\tau} \int_0^{\xi} G_1^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') c_1^{(i-1)}(\tau', \xi') d\xi' d\tau'; \quad (4.26a)$$

$$c_2^{(i)}(\tau, \xi) = a_{\lambda 2}^{(i-1)} \int_0^{\tau} \int_0^{\xi} G_2^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') c_2^{(i-1)}(\tau', \xi') d\xi' d\tau'; \quad (4.26b)$$

$$c_3^{(i)}(\tau, \xi) = a_{\lambda 3}^{(i-1)} \int_0^{\tau} \int_0^{\xi} G_3^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') c_3^{(i-1)}(\tau', \xi') d\xi' d\tau'. \quad (4.26b)$$

Тут  $G_1^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')$ ,  $G_2^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')$  і  $G_3^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')$  - функції Гріна задачі (4.1б), (4.2), (4.3б), (4.4) для кожного з етапів розпаду  $i = \overline{1, N-1}$ .

Для випадку  $i = N$  (нерозпадні домішки) процес масоперенесення для даної моделі гетеродифузії у тілі з пастками описується крайовою задачею (4.1в), (4.2), (4.3б), (4.4). Її розв'язок також подамо через відповідні функції Гріна аналогічно до (4.26) для  $i = \overline{1, N-1}$ , а саме

$$c_1^{(N)}(\xi, \tau) = \int_0^{\tau} \int_0^{\xi_0} G_1^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 1}^{(iN)} c_1^{(i)}(\xi', \tau') d\xi' d\tau', \quad (4.27a)$$

$$c_2^{(N)}(\xi, \tau) = \int_0^{\tau} \int_0^{\xi_0} G_2^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 2}^{(iN)} c_2^{(i)}(\xi', \tau') d\xi' d\tau', \quad (4.27b)$$

$$c_3^{(N)}(\xi, \tau) = \int_0^{\tau} \int_0^{\xi_0} G_3^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 3}^{(iN)} c_3^{(i)}(\xi', \tau') d\xi' d\tau'. \quad (4.27b)$$

Тоді почергово визначивши концентрації  $c_j^{(i)}(\xi, \tau)$  через відповідні значення функцій на попередньому етапі каскаду, а також знайшовши функції Гріна, за співвідношеннями (4.26), (4.27) визначимо повний розв'язок вихідної крайової задачі гетеродифузії у середовищі з пастками.

Означимо функції Гріна аналогічно до моделі гетеродифузії у п.3.1.3.

## 4.2. Функції Гріна крайових задач гетеродифузії у тілі з пастками каскадного типу для знаходження концентрацій мігруючих компонент

Для узагальнення визначення функцій Гріна математичних моделей, що описують процеси з урахуванням трьох фізично різних станів, подамо вихідні крайові задачі у матричному вигляді.

Нехай вектор-функція  $\mathbf{c}(\xi, \tau) = \begin{pmatrix} c_1(\xi, \tau) \\ c_2(\xi, \tau) \\ c_3(\xi, \tau) \end{pmatrix}$  є такою, що її елементи

ти  $c_i(\xi, \tau)$ ,  $i = \overline{1, 3}$ , є неперервними за змінними  $\xi$ ,  $\tau$  в області  $R = \{(\xi, \tau) : \xi \in [0; \xi_0], \tau \in \mathbb{R}_+\}$ ; задовольняють умову Ліпшиця за змінною  $\xi$  в області  $R$  з константою  $l$  [54, 57].

Розглянемо лінійну крайову задачу для системи трьох зв'язаних диференціальних рівнянь в часткових похідних другого порядку

$$\mathbf{L}[\mathbf{c}(\xi, \tau)] = \mathbf{F}(\xi, \tau), \quad (4.28)$$

де  $\mathbf{L} = \begin{pmatrix} L_1^{c_1}(\xi, \tau) & L_1^{c_2}(\xi, \tau) & 0 \\ L_2^{c_1}(\xi, \tau) & L_2^{c_2}(\xi, \tau) & L_2^{c_3}(\xi, \tau) \\ 0 & L_3^{c_2}(\xi, \tau) & L_3^{c_3}(\xi, \tau) \end{pmatrix}$  - матричний диференціальний

оператор, в якому  $L_1^{c_1}(\xi, \tau) = \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + a_{11}$ ,  $L_1^{c_2}(\xi, \tau) \equiv L_1^{c_3}(\xi) = -d_1 \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} -$

$-a_{12}$ ,  $L_2^{c_1}(\xi, \tau) \equiv L_2^{c_2}(\xi) = -d_2 \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} - a_{21}$ ,  $L_2^{c_3}(\xi, \tau) = \frac{\partial}{\partial \tau} - d \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + a_{22}$ ,

$L_2^{c_3}(\xi, \tau) \equiv L_2^{c_1} = a_{23}$ ,  $L_3^{c_2}(\xi, \tau) \equiv L_3^{c_1} = -a_{32}$ ,  $L_3^{c_3}(\xi, \tau) = \frac{\partial}{\partial \tau} - a_{33}$  (верхні індекси елементів матриці оператора вказують на яку функцію

діє даний елемент  $\mathbf{L}$ );  $\mathbf{F}(\xi, \tau) = \begin{pmatrix} F_1(\xi, \tau) \\ F_2(\xi, \tau) \\ F_3(\xi, \tau) \end{pmatrix}$  - вектор-функція джерел,

де  $F_i(z, t) \in L_2 \vee F_i \in D(\mathfrak{R}^2)$ .



Нехай задані країові умови

$$\mathbf{c}(\xi, \tau)|_{\tau=0} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad \mathbf{c}(\xi, \tau)|_{\xi=0} = \mathbf{c}_0 = \begin{pmatrix} c_0^{(1)} \\ c_0^{(2)} \\ 0 \end{pmatrix}; \quad \mathbf{c}(\xi, \tau)|_{\xi=\xi_0} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (4.29)$$

де  $c_0^{(i)} \in L_2$ ,  $i=1,2$ .

Якщо  $|\mathbf{c}(z, t) - \mathbf{c}_0(z, t)| \leq \beta$  для  $\forall t \in \mathfrak{R}_+$ ,  $z \in [0, z_0]$  ( $\beta$  - відома додатна константа), тоді існує єдиний класичний розв'язок задачі (4.28), (4.29) [57].

**Означення 4.1.** Функцією Гріна задачі (4.28), (4.29) називається матрична функція

$$\mathbf{G}(\xi, \xi'; \tau, \tau') = \begin{pmatrix} G_1(\xi, \xi'; \tau, \tau') & 0 & 0 \\ 0 & G_2(\xi, \xi'; \tau, \tau') & 0 \\ 0 & 0 & G_3(\xi, \xi'; \tau, \tau') \end{pmatrix} = \quad (4.30)$$

$$= \begin{pmatrix} \overline{\mathbf{G}}(\xi, \xi'; \tau, \tau') & 0 \\ 0 & G_3(\xi, \xi'; \tau, \tau') \end{pmatrix}, \quad \overline{\mathbf{G}} = \begin{pmatrix} G_1(\xi, \xi'; \tau, \tau') & 0 \\ 0 & G_2(\xi, \xi'; \tau, \tau') \end{pmatrix},$$

яка визначена в чотиривимірній області  $K = K_1 \times K_2 = \{(\xi, \xi'; \tau, \tau') | \xi, \xi' \in [0, \xi_0]; \tau, \tau' \in \mathfrak{R}_+ : \tau' < \tau\}$  і задоволяє такі умови:

- 1) в  $K$  матрична функція  $\mathbf{G}(\xi, \xi'; \tau, \tau')$  є неперервною і має неперервні похідні за змінною  $\tau$ ;
- 2) для довільних  $\xi' \in [0, \xi_0]$ ,  $\tau' \in \mathfrak{R}_+$  функція  $\overline{\mathbf{G}}(\xi, \xi'; \tau, \tau')$  має неперервні похідні першого і другого порядку за змінною  $\xi$  в кожному з інтервалів  $[0, \xi']$  і  $(\xi', \xi_0]$ , причому похідна першого порядку за змінною  $\xi$  у точці  $\xi = \xi'$  має стрибок, що дорівнює одиниці:

$$\frac{\partial}{\partial \xi} \overline{\mathbf{G}}(\xi + 0, \xi'; \tau, \tau') - \frac{\partial}{\partial \xi} \overline{\mathbf{G}}(\xi - 0, \xi'; \tau, \tau') = 1;$$

- 3)  $\mathbf{G}(\xi, \xi'; \tau, \tau') = 0$  при  $\tau \leq \tau'$ ;
- 4) в кожному з інтервалів  $[0, \xi']$  і  $(\xi', \xi_0]$  для  $\tau' \leq \tau$  функція  $\mathbf{G}(\xi, \xi'; \tau, \tau')$  як функція змінної  $\xi$  є розв'язком однорідного рівняння

$$\mathbf{L}[\mathbf{G}(\xi, \xi'; \tau, \tau')] = 0;$$

5)  $\mathbf{G}(\xi, \xi'; \tau, \tau')$  як функція змінних  $\xi, \tau$  задовольняє нульові крайові умови типу (4.29).

Зазначимо, що в банаховому просторі  $\bar{C}^{(n,q)}(D^p)$  вектор-функцій  $\mathbf{c}(\xi, \tau)$  з нормою

$$\|\mathbf{c}\|_{\bar{C}^{(\bar{n},2)}(D^p)} = \sum_{j=1}^2 \left\| c_j \right\|_{\bar{C}^{(n_j,2)}(D^p)},$$

де  $D^p \equiv K' = \{(\xi, \xi'; \tau, \tau') | \xi, \xi' \in [0, z_0]; \tau, \tau' \in [0, T]; \tau' < \tau\}$ ,  $\bar{n} = (n_1, n_2)$  і  $n_1 = n_2 = 1$ , для єдності розв'язку крайової задачі (4.28), (4.29) необхідно і достатньо, щоб фундаментальна система розв'язків не мала б розв'язків у цілих числах [54].

Крайові задачі гетеродифузії каскадного типу (4.1)-(4.4) є еквівалентними постановці задачі (4.28), (4.29) для кожного  $i = 0, \dots, N$  зокрема, якщо  $\mathbf{c}(\xi, \tau) = \mathbf{c}^{(i)}(\xi, \tau)$ ,  $\mathbf{F}(\xi, \tau) = \mathbf{F}[\mathbf{c}^{(i-1)}(\xi, \tau); \mathbf{c}^{(i-1)}(\xi, \tau)]$ ,

$$\mathbf{c}^{(i)}(\xi, \tau) \Big|_{\xi=0} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \text{ для } i = \overline{1, N}.$$

Для знаходження матричних функцій Гріна  $\mathbf{G}(\xi, \xi'; \tau, \tau') = \mathbf{G}^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')$ ,  $i = \overline{1, N-1}$ , сформулюємо крайову задачу з точковим джерелом для елементів матриці (4.30):

$$\begin{aligned} & \frac{\partial G_1^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')}{\partial \tau} - d_0^{(i)} \frac{\partial^2 G_1^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')}{\partial \xi^2} - d_1^{(i)} \frac{\partial^2 G_2^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')}{\partial \xi^2} + \\ & + a_{11}^{(i)} G_1^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') - a_{12}^{(i)} G_2^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') = \delta(\tau - \tau') \delta(\xi - \xi'), \\ & \frac{\partial G_2^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')}{\partial \tau} - d_2^{(i)} \frac{\partial^2 G_1^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')}{\partial \xi^2} - d^{(i)} \frac{\partial^2 G_2^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')}{\partial \xi^2} - a_{21}^{(i)} G_1^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') + \\ & + a_{22}^{(i)} G_2^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') - a_{23}^{(i)} G_3^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') = \delta(\tau - \tau') \delta(\xi - \xi'), \\ & \frac{\partial G_3^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')}{\partial \tau} - a_{32}^{(i)} G_2^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') + a_{33}^{(i)} G_3^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') = \delta(\tau - \tau') \delta(\xi - \xi') \end{aligned} \tag{4.31}$$

за нульових крайових умов

$$G_1^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') \Big|_{\tau=0} = G_2^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') \Big|_{\tau=0} = G_3^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') \Big|_{\tau=0} = 0;$$



$$G_1^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') \Big|_{\xi=0} = G_2^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') \Big|_{\xi=0} = 0, \quad i = \overline{1, N-1};$$

$$G_1^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') \Big|_{\xi=\xi_0} = G_2^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') \Big|_{\xi=\xi_0} = 0, \quad i = \overline{1, N-1}. \quad (4.32)$$

Застосуємо до краївих задач (4.31), (4.32) інтегральне перетворення Лапласа за часовою змінною ( $\tau \rightarrow s$ ,  $G_j^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') \rightarrow \bar{g}_j^{(i)}(s, \tau'; \xi, \xi')$ ,  $j = \overline{1, 3}$ ). Тоді в зображеннях отримаємо систему диференціально-алгебраїчних рівнянь:

$$\left( s + a_{11}^{(i)} \right) \bar{g}_1^{(i)}(s, \tau'; \xi, \xi') - a_{12}^{(i)} \bar{g}_2^{(i)}(s, \tau'; \xi, \xi') - d_0^{(i)} \frac{\partial^2 \bar{g}_2^{(i)}(s, \tau'; \xi, \xi')}{\partial \xi^2} -$$

$$- d_1^{(i)} \frac{\partial^2 \bar{g}_2^{(i)}(s, \tau'; \xi, \xi')}{\partial \xi^2} = \delta(\xi - \xi') e^{-st},$$

$$\left( s + a_{22}^{(i)} \right) \bar{g}_2^{(i)}(s, \tau'; \xi, \xi') - a_{21}^{(i)} \bar{g}_1^{(i)}(s, \tau'; \xi, \xi') - a_{23}^{(i)} \bar{g}_3^{(i)}(s, \tau'; \xi, \xi') -$$

$$- d_2^{(i)} \frac{\partial^2 \bar{g}_1^{(i)}(s, \tau'; \xi, \xi')}{\partial \xi^2} - d^{(i)} \frac{\partial^2 \bar{g}_2^{(i)}(s, \tau'; \xi, \xi')}{\partial \xi^2} = \delta(\xi - \xi') e^{-st},$$

$$\left( s + a_{33}^{(i)} \right) \bar{g}_3^{(i)}(s, \tau'; \xi, \xi') - a_{32}^{(i)} \bar{g}_2^{(i)}(s, \tau'; \xi, \xi') = \delta(\xi - \xi') e^{-st} \quad (4.33)$$

з нульовими граничними умовами

$$\bar{g}_1^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') \Big|_{\xi=0} = \bar{g}_2^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') \Big|_{\xi=0} = 0;$$

$$\bar{g}_1^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') \Big|_{\xi=\xi_0} = \bar{g}_2^{(i)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') \Big|_{\xi=\xi_0} = 0, \quad i = \overline{1, N-1}. \quad (4.34)$$

До отриманої задачі застосуємо sin -перетворення Фур'є [65] ( $\xi \rightarrow y_n$ ,  $\bar{g}_j^{(i)}(s, \tau'; \xi, \xi') \rightarrow g_j^{(i)}(s, \tau'; y_n, \xi')$ ,  $j = 1, 2$ ). При цьому врахуємо sin -перетворення від  $\delta$ -функції Дірака (3.25). Тоді в зображеннях задача (4.33), (4.34) зведеться до системи алгебраїчних рівнянь

$$\left[ s + a_{11}^{(i)} + d_0^{(i)} y_n^2 \right] g_1^{(i)}(y_n, \xi; s, \tau') + \left[ d_1^{(i)} y_n^2 - a_{12}^{(i)} \right] g_2^{(i)}(y_n, \xi; s, \tau') = \sin(y_n \xi) e^{-st'},$$

$$\left[ d_2^{(i)} y_n^2 - a_{21}^{(i)} \right] g_1^{(i)}(y_n, \xi; s, \tau') + \left[ s + a_{22}^{(i)} + d_1^{(i)} y_n^2 \right] g_2^{(i)}(y_n, \xi; s, \tau') -$$

$$-a_{23}^{(i)}g_3^{(i)}(y_n, \xi; s, \tau') = \sin(y_n \xi') e^{-s\tau'},$$

$$-a_{32}^{(i)}g_2^{(i)}(y_n, \xi; s, \tau') + [s + a_{33}^{(i)}] g_3^{(i)}(y_n, \xi; s, \tau') = \sin(y_n \xi') e^{-s\tau'}. \quad (4.35)$$

Для отримання розв'язку системи рівнянь (4.35) знайдемо її головний визначник

$$\Delta = \begin{vmatrix} s + a_{11}^{(i)} + d_0^{(i)} y_n^2 & d_1^{(i)} y_n^2 - a_{12}^{(i)} & 0 \\ d_2^{(i)} y_n^2 - a_{21}^{(i)} & s + a_{22}^{(i)} + d_1^{(i)} y_n^2 & a_{23}^{(i)} \\ 0 & -a_{32}^{(i)} & s + a_{33}^{(i)} \end{vmatrix} =$$

$$= s^3 + \bar{\eta}_1 s^2 + \bar{\eta}_2 s + \bar{\eta}_3 = (s - s_1^{(i)}) (s - s_2^{(i)}) (s - s_3^{(i)}),$$

де  $\bar{\eta}_1 = (d_0^{(i)} + d^{(i)}) y_n^2 + a_{11}^{(i)} + a_{22}^{(i)} + a_{33}^{(i)}$ ,  $\bar{\eta}_2 = (d_0^{(i)} d^{(i)} - d_2^{(i)} d_1^{(i)}) y_n^4 +$   
 $+ [d^{(i)} (a_{33}^{(i)} + a_{11}^{(i)}) + d_0^{(i)} (a_{33}^{(i)} + a_{11}^{(i)}) + d_1^{(i)} a_{21}^{(i)} + d_2^{(i)} a_{12}^{(i)}] y_n^2 + a_{33}^{(i)} (a_{11}^{(i)} + a_{22}^{(i)}) +$   
 $+ d_1^{(i)} a_{21}^{(i)} + d_2^{(i)} a_{12}^{(i)}] y_n^2 + a_{33}^{(i)} (a_{11}^{(i)} + a_{22}^{(i)}) + a_{11}^{(i)} a_{22}^{(i)} - a_{23}^{(i)} a_{32}^{(i)} - a_{21}^{(i)} a_{12}^{(i)},$   
 $\bar{\eta}_3 = y_n^2 a_{33}^{(i)} [(d_0^{(i)} d^{(i)} - d_2^{(i)} d_1^{(i)}) y_n^2 + d^{(i)} a_{11}^{(i)} + d_0^{(i)} (a_{22}^{(i)} - a_{23}^{(i)}) + d_1^{(i)} a_{21}^{(i)} +$   
 $+ d_2^{(i)} a_{12}^{(i)}] + a_{11}^{(i)} a_{22}^{(i)} a_{33}^{(i)} - a_{11}^{(i)} a_{23}^{(i)} a_{32}^{(i)} - a_{12}^{(i)} a_{21}^{(i)} a_{33}^{(i)}.$

Визначаємо корені кубічного рівняння  $s^3 + \bar{\eta}_1 s^2 + \bar{\eta}_2 s + \bar{\eta}_3 = 0$  аналогічно до визначення коренів рівняння (4.14) з урахуванням відповідних виразів для коефіцієнтів  $\bar{\eta}_1$ ,  $\bar{\eta}_2$ ,  $\bar{\eta}_3$ . Тобто маємо

$$s_1^{(i)} = -\frac{\bar{\eta}_1}{3} + 2\sqrt{-\bar{p}/3} \cos(\bar{\beta}/3), \quad s_{2,3}^{(i)} = -\frac{\bar{\eta}_1}{3} - 2\sqrt{-\bar{p}/3} \cos\left(\frac{\bar{\beta}}{3} \pm \frac{\pi}{3}\right),$$

$$\text{де } \bar{p} = \bar{\eta}_2 - \frac{\bar{\eta}_1^2}{3}, \quad \bar{q} = 2\left(\frac{\bar{\eta}_1}{3}\right)^3 - \frac{\bar{\eta}_1 \bar{\eta}_2}{3} + \bar{\eta}_3; \quad \cos \bar{\beta} = -\frac{\bar{q}}{2\sqrt{-(\bar{p}/3)^3}}.$$

Знаходимо допоміжні визначники системи рівнянь (4.35)

$$\Delta_1 = \sin(y_n \xi') e^{-s\tau'} \begin{vmatrix} 1 & d_1^{(i)} y_n^2 - a_{12}^{(i)} & 0 \\ 1 & s + a_{22}^{(i)} + d^{(i)} y_n^2 & a_{23}^{(i)} \\ 1 & -a_{32}^{(i)} & s + a_{33}^{(i)} \end{vmatrix} =$$

$$= \sin(y_n \xi') e^{-s\tau'} (s^2 + s\bar{A}_1 + \bar{A}_2),$$



$$\Delta_2 = \sin(y_n \xi') e^{-s\tau'} \begin{vmatrix} s + a_{11}^{(i)} + d_0^{(i)} y_n^2 & 1 & 0 \\ d_2^{(i)} y_n^2 - a_{21}^{(i)} & 1 & a_{23}^{(i)} \\ 0 & 1 & s + a_{32}^{(i)} \end{vmatrix} =$$

$$= \sin(y_n \xi') e^{-s\tau'} (s^2 + s\bar{A}_1 + \bar{A}_2),$$

$$\Delta_3 = \sin(y_n \xi') e^{-s\tau'} \begin{vmatrix} s + a_{11}^{(i)} + d_0^{(i)} y_n^2 & d_1^{(i)} y_n^2 - a_{12}^{(i)} & 1 \\ d_2^{(i)} y_n^2 - a_{21}^{(i)} & s + a_{22}^{(i)} + d^{(i)} y_n^2 & 1 \\ 0 & -a_{32}^{(i)} & 1 \end{vmatrix} =$$

$$= \sin(y_n \xi') e^{-s\tau'} (s^2 + \bar{\bar{A}}_1 + \bar{\bar{A}}_2),$$

$$\text{де } \bar{A}_1 = (d^{(i)} - d_1^{(i)}) y_n^2 + a_{33}^{(i)} + a_{22}^{(i)} + a_{12}^{(i)};$$

$$\bar{A}_2 = (a_{33}^{(i)} (d^{(i)} - d_1^{(i)}) - d_1^{(i)} a_{23}^{(i)}) y_n^2 + a_{22}^{(i)} a_{33}^{(i)} - a_{23}^{(i)} a_{32}^{(i)} + a_{12}^{(i)} a_{33}^{(i)} + a_{23}^{(i)} a_{12}^{(i)}.$$

$$\bar{\bar{A}}_1 = (d_0^{(i)} - d_2^{(i)}) y_n^2 + a_{33}^{(i)} + a_{23}^{(i)} + a_{11}^{(i)} + a_{21}^{(i)};$$

$$\bar{\bar{A}}_2 = (a_{33}^{(i)} (d_0^{(i)} - d_2^{(i)}) + d_0^{(i)} a_{23}^{(i)}) y_n^2 + a_{11}^{(i)} a_{33}^{(i)} + a_{11}^{(i)} a_{23}^{(i)} + a_{21}^{(i)} a_{33}^{(i)};$$

$$\bar{\bar{\bar{A}}}_1 = a_{22}^{(i)} + a_{32}^{(i)} + a_{11}^{(i)} + y_n^2 (d_0^{(i)} + d^{(i)});$$

$$\bar{\bar{\bar{A}}}_2 = (d_0^{(i)} d^{(i)} - d_1^{(i)} d_2^{(i)}) y_n^4 + (a_{32}^{(i)} (d_0^{(i)} - d_2^{(i)}) + d_0^{(i)} a_{22}^{(i)} + d_1^{(i)} a_{21}^{(i)} + d_1^{(i)} a_{12}^{(i)}) y_n^2 +$$

$$+ a_{11}^{(i)} (a_{22}^{(i)} + d^{(i)} y_n^2 + a_{32}^{(i)}) + a_{21}^{(i)} (a_{32}^{(i)} - a_{12}^{(i)}).$$

Тоді розв'язок системи рівнянь (4.35) набуде вигляду

$$g_1^{(i)}(y_n, \xi; s, \tau') = \frac{\Delta_1}{\Delta} = \sin(y_2 \xi') e^{-s\tau'} \frac{s^2 + s\bar{A}_1 + \bar{A}_2}{(s - s_1^{(i)})(s - s_2^{(i)})(s - s_3^{(i)})},$$

$$g_2^{(i)}(y_n, \xi; s, \tau') = \frac{\Delta_2}{\Delta} = \sin(y_n \xi') e^{-s\tau'} \frac{s^2 + s\bar{\bar{A}}_1 + \bar{\bar{A}}_2}{(s - s_1^{(i)})(s - s_2^{(i)})(s - s_3^{(i)})},$$

$$g_3^{(i)}(y_n, \xi; s, \tau') = \frac{\Delta_3}{\Delta} = \sin(y_n \xi') e^{-s\tau'} \frac{s^2 + s\bar{\bar{\bar{A}}}_1 + \bar{\bar{\bar{A}}}_2}{(s - s_1^{(i)})(s - s_2^{(i)})(s - s_3^{(i)})}. \quad (4.36)$$

До отриманих виразів (4.36) застосуємо обернене перетворення Лапласа, використаємо співвідношення (4.19), а також теорему запізнення [66]. Тоді маємо

$$\begin{aligned} \bar{g}_1^{(i)}(s, \tau'; \xi, \xi') &= \theta(\tau - \tau') \frac{\sin y_n \xi'}{s_i^*} \left\{ \left[ s_2^{(i)} - s_3^{(i)} \right] s_1^{(i)2} + \bar{A}_1 s_1^{(i)} + \bar{A}_2 \right\} e^{s_1^{(i)}(\tau - \tau')} + \\ &+ \left[ s_3^{(i)} - s_1^{(i)} \right] \left[ s_2^{(i)2} + \bar{A}_1 s_2^{(i)} + \bar{A}_2 \right] e^{s_2^{(i)}(\tau - \tau')} + \left[ s_1^{(i)} - s_2^{(i)} \right] \left[ s_3^{(i)2} + \bar{A}_1 s_3^{(i)} + \bar{A}_2 \right] e^{s_3^{(i)}(\tau - \tau')} \Big\}, \\ \bar{g}_2^{(i)}(s, \tau'; \xi, \xi') &= \theta(\tau - \tau') \frac{\sin y_n \xi'}{s_i^*} \left\{ \left[ s_2^{(i)} - s_3^{(i)} \right] s_1^{(i)2} + \bar{\bar{A}}_1 s_1^{(i)} + \bar{\bar{A}}_2 \right\} e^{s_1^{(i)}(\tau - \tau')} + \\ &+ \left[ s_3^{(i)} - s_1^{(i)} \right] \left[ s_2^{(i)2} + \bar{\bar{A}}_1 s_2^{(i)} + \bar{\bar{A}}_2 \right] e^{s_2^{(i)}(\tau - \tau')} + \left[ s_1^{(i)} - s_2^{(i)} \right] \left[ s_3^{(i)2} + \bar{\bar{A}}_1 s_3^{(i)} + \bar{\bar{A}}_2 \right] e^{s_3^{(i)}(\tau - \tau')} \Big\}, \\ \bar{g}_3^{(i)}(s, \tau'; \xi, \xi') &= \theta(\tau - \tau') \frac{\sin y_n \xi'}{s_i^*} \left\{ \left[ s_2^{(i)} - s_3^{(i)} \right] s_1^{(i)2} + \bar{\bar{\bar{A}}}_1 s_1^{(i)} + \bar{\bar{\bar{A}}}_2 \right\} e^{s_1^{(i)}(\tau - \tau')} + \\ &+ \left[ s_3^{(i)} - s_1^{(i)} \right] \left[ s_2^{(i)2} + \bar{\bar{\bar{A}}}_1 s_2^{(i)} + \bar{\bar{\bar{A}}}_2 \right] e^{s_2^{(i)}(\tau - \tau')} + \left[ s_1^{(i)} - s_2^{(i)} \right] \left[ s_3^{(i)2} + \bar{\bar{\bar{A}}}_1 s_3^{(i)} + \bar{\bar{\bar{A}}}_2 \right] e^{s_3^{(i)}(\tau - \tau')} \Big\}. \end{aligned}$$

Тепер застосуємо обернене перетворення Фур'є [65]. Одержано

$$\begin{aligned} G_1^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') &= \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin y_n \xi \sin y_n \xi'}{s_i^*} \left\{ \left[ s_2^{(i)} - s_3^{(i)} \right] s_1^{(i)2} + \bar{A}_1 s_1^{(i)} + \bar{A}_2 \right\} e^{s_1^{(i)}(\tau - \tau')} + \\ &+ \left[ s_3^{(i)} - s_1^{(i)} \right] \left[ s_2^{(i)2} + \bar{A}_1 s_2^{(i)} + \bar{A}_2 \right] e^{s_2^{(i)}(\tau - \tau')} + \left[ s_1^{(i)} - s_2^{(i)} \right] \left[ s_3^{(i)2} + \bar{A}_1 s_3^{(i)} + \bar{A}_2 \right] e^{s_3^{(i)}(\tau - \tau')} \Big\}, \\ G_2^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') &= \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin y_n \xi \sin y_n \xi'}{s_i^*} \left\{ \left[ s_2^{(i)} - s_3^{(i)} \right] s_1^{(i)2} + \bar{\bar{A}}_1 s_1^{(i)} + \bar{\bar{A}}_2 \right\} e^{s_1^{(i)}(\tau - \tau')} + \\ &+ \left[ s_3^{(i)} - s_1^{(i)} \right] \left[ s_2^{(i)2} + \bar{\bar{A}}_1 s_2^{(i)} + \bar{\bar{A}}_2 \right] e^{s_2^{(i)}(\tau - \tau')} + \left[ s_1^{(i)} - s_2^{(i)} \right] \left[ s_3^{(i)2} + \bar{\bar{A}}_1 s_3^{(i)} + \bar{\bar{A}}_2 \right] e^{s_3^{(i)}(\tau - \tau')} \Big\}, \\ G_3^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') &= \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin y_n \xi \sin y_n \xi'}{s_i^*} \left\{ \left[ s_2^{(i)} - s_3^{(i)} \right] s_1^{(i)2} + \bar{\bar{\bar{A}}}_1 s_1^{(i)} + \bar{\bar{\bar{A}}}_2 \right\} e^{s_1^{(i)}(\tau - \tau')} + \\ &+ \left[ s_3^{(i)} - s_1^{(i)} \right] \left[ s_2^{(i)2} + \bar{\bar{\bar{A}}}_1 s_2^{(i)} + \bar{\bar{\bar{A}}}_2 \right] e^{s_2^{(i)}(\tau - \tau')} + \left[ s_1^{(i)} - s_2^{(i)} \right] \left[ s_3^{(i)2} + \bar{\bar{\bar{A}}}_1 s_3^{(i)} + \bar{\bar{\bar{A}}}_2 \right] e^{s_3^{(i)}(\tau - \tau')} \Big\}. \end{aligned} \tag{4.37}$$

Таким чином ми знайшли функції Гріна задачі гетеродифузії розпадної речовини для шару, коли домішкові речовини перебувають у трьох станах, для етапів  $i = \overline{1, N-1}$  каскадного розпаду мігруючих частинок.

Тепер знайдемо матричну функцію Гріна  $\mathbf{G}(\xi, \xi'; \tau, \tau') =$



4.2. Функції Гріна краївих задач гетеродифузії у тілі з пастками каскадного типу для знаходження концентрацій мігруючих...

$= \mathbf{G}^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')$ , яка є розв'язком країової задачі з точковим джерелом, також сформульованої для елементів матриці  $G_j^{(N)}$ :

$$\begin{aligned}
 & \frac{\partial G_1^{(N)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')}{\partial \tau} - d_0^{(N)} \frac{\partial^2 G_1^{(N)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')}{\partial \xi^2} - d_1^{(N)} \frac{\partial^2 G_2^{(N)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')}{\partial \xi^2} + \\
 & + a_{11}^{(N)} G_1^{(N)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') - a_{12}^{(N)} G_2^{(N)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') = \delta(\tau - \tau') \delta(\xi - \xi'), \\
 & \frac{\partial G_2^{(N)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')}{\partial \tau} - d_2^{(N)} \frac{\partial^2 G_1^{(N)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')}{\partial \xi^2} - d^{(N)} \frac{\partial^2 G_2^{(N)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')}{\partial \xi^2} - \\
 & - a_{21}^{(N)} G_1^{(N)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') + a_{22}^{(N)} G_2^{(N)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') - a_{23}^{(N)} G_3^{(N)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') = \\
 & = \delta(\tau - \tau') \delta(\xi - \xi'), \\
 & \frac{\partial G_3^{(N)}(\tau, \tau'; \xi, \xi')}{\partial \tau} - a_{32}^{(N)} G_2^{(N)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') + a_{33}^{(N)} G_3^{(N)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') = \\
 & = \delta(\tau - \tau') \delta(\xi - \xi'), \tag{4.38}
 \end{aligned}$$

за нульових краївих умов

$$\begin{aligned}
 G_1^{(N)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') \Big|_{\tau=0} &= G_2^{(N)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') \Big|_{\tau=0} = G_3^{(N)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') \Big|_{\tau=0} = 0; \\
 G_1^{(N)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') \Big|_{\xi=0} &= G_2^{(N)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') \Big|_{\xi=0} = 0; \\
 G_1^{(N)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') \Big|_{\xi=\xi_0} &= G_2^{(N)}(\tau, \tau'; \xi, \xi') \Big|_{\xi=\xi_0} = 0. \tag{4.39}
 \end{aligned}$$

Розв'язок краївої задачі (4.38), (4.39) має вигляд

$$\begin{aligned}
 G_1^{(N)} &= \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin y_n \xi \sin y_n \xi'}{s_N^*} \left\{ \left( s_2^{(N)} - s_3^{(N)} \right) \left[ s_1^{(N)2} + \bar{A}_1^{(N)} s_1^{(N)} + \bar{A}_2^{(N)} \right] e^{s_1^{(N)}(\tau-\tau')} + \right. \\
 &\quad + \left( s_3^{(N)} - s_1^{(N)} \right) \left[ s_2^{(N)2} + \bar{A}_1^{(N)} s_2^{(N)} + \bar{A}_2^{(N)} \right] e^{s_2^{(N)}(\tau-\tau')} + \\
 &\quad \left. + \left( s_1^{(N)} - s_2^{(N)} \right) \left[ s_3^{(N)2} + \bar{A}_1^{(N)} s_3^{(N)} + \bar{A}_2^{(N)} \right] e^{s_3^{(N)}(\tau-\tau')} \right\}, \\
 G_2^{(N)} &= \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin y_n \xi \sin y_n \xi'}{s_N^*} \left\{ \left( s_2^{(N)} - s_3^{(N)} \right) \left[ s_1^{(N)2} + \bar{A}_1^{(N)} s_1^{(N)} + \bar{A}_2^{(N)} \right] e^{s_1^{(N)}(\tau-\tau')} + \right. \\
 &\quad + \left( s_3^{(N)} - s_1^{(N)} \right) \left[ s_2^{(N)2} + \bar{A}_1^{(N)} s_2^{(N)} + \bar{A}_2^{(N)} \right] e^{s_2^{(N)}(\tau-\tau')} + \\
 &\quad \left. + \left( s_1^{(N)} - s_2^{(N)} \right) \left[ s_3^{(N)2} + \bar{A}_1^{(N)} s_3^{(N)} + \bar{A}_2^{(N)} \right] e^{s_3^{(N)}(\tau-\tau')} \right\},
 \end{aligned}$$

$$G_3^{(N)} = \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin y_n \xi \sin y_n \xi'}{s_N^*} \left\{ \left( s_2^{(N)} - s_3^{(N)} \right) \left[ s_1^{(N)2} + \overline{\overline{A}}_1^{(N)} s_1^{(N)} + \overline{\overline{A}}_2^{(N)} \right] e^{s_1^{(N)}(\tau-\tau')} + \right. \\ + \left( s_3^{(N)} - s_1^{(N)} \right) \left[ s_2^{(N)2} + \overline{\overline{A}}_1^{(N)} s_2^{(N)} + \overline{\overline{A}}_2^{(N)} \right] e^{s_2^{(N)}(\tau-\tau')} + \\ \left. + \left( s_1^{(N)} - s_2^{(N)} \right) \left[ s_3^{(i)2} + \overline{\overline{A}}_1^{(N)} s_3^{(N)} + \overline{\overline{A}}_2^{(N)} \right] e^{s_3^{(iN)}(\tau-\tau')} \right\}, \quad (4.40)$$

де  $s_N^* = (s_1^{(N)} - s_2^{(N)}) (s_2^{(N)} - s_3^{(N)}) (s_3^{(N)} - s_1^{(N)})$ ,  $s_1^{(N)}$ ,  $s_2^{(N)}$ ,  $s_3^{(N)}$  - розв'язки кубічного рівняння  $s^3 + \bar{\eta}_1^{(N)} s^2 + \bar{\eta}_2^{(N)} s + \bar{\eta}_3^{(N)} = 0$ , які знаходимо аналогічно до визначення коренів рівняння (4.14) з урахуванням відповідних виразів для коефіцієнтів  $\bar{\eta}_1^{(N)}$ ,  $\bar{\eta}_2^{(N)}$ ,  $\bar{\eta}_3^{(N)}$ . Тобто маємо

$$s_1^{(N)} = -\frac{\bar{\eta}_1^{(N)}}{3} + 2\sqrt{-\bar{p}_N/3} \cos(\bar{\beta}_N/3), \\ s_{2,3}^{(N)} = -\frac{\bar{\eta}_1^{(N)}}{3} - 2\sqrt{-\bar{p}_N/3} \cos\left(\frac{\bar{\beta}_N}{3} \pm \frac{\pi}{3}\right),$$

де  $\bar{p}_N = \bar{\eta}_2^{(N)} - \frac{\bar{\eta}_1^{(N)2}}{3}$ ,  $\bar{q}_N = 2\left(\frac{\bar{\eta}_1^{(N)}}{3}\right)^3 - \frac{\bar{\eta}_1^{(N)}\bar{\eta}_2^{(N)}}{3} + \bar{\eta}_3^{(N)}$ ;

$$\cos \bar{\beta}_N = -\frac{\bar{q}_N}{2\sqrt{-(\bar{p}_N/3)^3}}; \quad \bar{\eta}_1^{(N)} = (d_0^{(N)} + d^{(N)}) y_k^2 + a_{11}^{(N)} + a_{22}^{(N)} + a_{33}^{(N)},$$

$$\bar{\eta}_2^{(N)} = d_N^* y_k^4 + [d^{(N)}(a_{11}^{(N)} + a_{33}^{(N)}) + d_1^{(N)} a_{21}^{(N)} + d_2^{(N)} a_{12}^{(N)} + a_{22}^{(N)} + a_{33}^{(N)}] y_k^2 + \\ + a_{11}^{(N)} a_{22}^{(N)} + a_{11}^{(N)} a_{33}^{(N)} + a_{22}^{(N)} a_{33}^{(N)} - a_{12}^{(N)} a_{21}^{(N)} - a_{23}^{(N)} a_{32}^{(N)},$$

$$\bar{\eta}_3^{(N)} = a_{33}^{(N)} d_N^* y_k^4 + a_{33}^{(N)} [d^{(N)} a_{11}^{(N)} + d_1^{(N)} a_{21}^{(N)} + d_2^{(N)} a_{12}^{(N)} + a_{22}^{(N)}] y_k^2 - \\ - a_{23}^{(N)} a_{32}^{(N)} y_k^2 + a_{11}^{(N)} a_{22}^{(N)} a_{33}^{(N)} - a_{11}^{(N)} a_{23}^{(N)} a_{32}^{(N)} - a_{33}^{(N)} a_{12}^{(N)} a_{21}^{(N)};$$

$$d_N^* = d^{(N)} - d_1^{(N)} d_1^{(N)}; \quad \bar{A}_1^{(N)} = (d^{(N)} - d_1^{(N)}) y_n^2 + a_{33}^{(N)} + a_{22}^{(N)} + a_{12}^{(N)},$$

$$\bar{A}_2^{(N)} = (a_{33}^{(N)} (d^{(N)} - d_1^{(N)}) - d_1^{(N)} a_{23}^{(N)}) y_n^2 + a_{22}^{(N)} a_{33}^{(N)} - a_{23}^{(N)} a_{32}^{(N)} + a_{12}^{(N)} a_{33}^{(N)} + \\ + a_{23}^{(N)} a_{12}^{(N)}, \quad \bar{\overline{A}}_1^{(N)} = (d_0^{(N)} - d_2^{(N)}) y_n^2 + a_{33}^{(N)} + a_{23}^{(N)} + a_{11}^{(N)} + a_{21}^{(N)};$$

$$\bar{\overline{A}}_2^{(N)} = (a_{33}^{(N)} (d_0^{(N)} - d_2^{(N)}) + d_0^{(N)} a_{23}^{(N)}) y_n^2 + a_{11}^{(N)} a_{33}^{(N)} + a_{11}^{(N)} a_{23}^{(N)} + a_{21}^{(N)} a_{33}^{(N)};$$

$$\overline{\overline{A}}_1^{(N)} = a_{22}^{(N)} + a_{32}^{(N)} + a_{11}^{(N)} + y_n^2 (d_0^{(N)} + d^{(N)});$$



$$\overline{\overline{A}}_2^{(N)} = \left( d_0^{(N)} d^{(N)} - d_1^{(N)} d_2^{(N)} \right) y_n^4 + \left( a_{32}^{(N)} \left( d_0^{(N)} - d_2^{(N)} \right) + d_0^{(N)} a_{22}^{(N)} + \right. \\ \left. + d_1^{(N)} a_{21}^{(N)} + d_1^{(N)} a_{12}^{(N)} \right) y_n^2 + a_{11}^{(N)} \left( a_{22}^{(N)} + d^{(N)} y_n^2 + a_{32}^{(N)} \right) + a_{21}^{(N)} \left( a_{32}^{(N)} - a_{12}^{(N)} \right).$$

Проілюструємо поведінку отриманих функцій Гріна (4.40). Нехай такого типу функції в просторі  $O\xi\tau z$  утворюють поверхні  $G_j^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')$ , як показано на рис. 4.1. Зробимо переріз цієї поверхні площиною  $\tau = \tau' + \Delta\tau$ , перпендикулярно до осі  $O\tau$ , в момент часу на віддалі  $\Delta\tau$  від моменту дії точкового джерела  $\tau'$  (рис. 4.1). І позначимо отриману криву  $\hat{G}_j^{(i)}(\xi, \xi') \Big|_{\text{задане } \xi'} \Big|_{\text{задані } \tau', \xi'}$ , тобто

$$\hat{G}_j^{(i)}(\xi, \xi') \Big|_{\text{задане } \xi'} = G_j^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') \Big|_{\tau=\tau'+\Delta\tau} \Big|_{\text{задані } \tau', \xi'}.$$

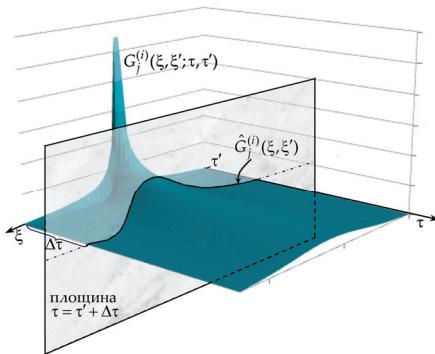


Рис. 4.1. Переріз поверхні  $G_j^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')$  площиною  $\tau = \tau' + \Delta\tau$

Рис. 4.2-4.4 показують розподіли функцій  $\hat{G}_j^{(i)}(\xi, \xi')$  за товщиною шару при фіксованому  $\xi'$ . При цьому обчислення функцій  $\hat{G}_1^{(i)}(\xi, \xi')$  (рис. 4.2),  $\hat{G}_2^{(i)}(\xi, \xi')$  (рис. 4.3) і  $\hat{G}_3^{(i)}(\xi, \xi')$  (рис. 4.4) проведені для  $\Delta\tau = 0.01$  і таких значень числового дослідження:  $d = 0.1$ ,  $d_0 = 0.7$ ,  $a_{11} = 10.5$ ,  $a_{12} = 1$ ,  $a_{21} = 10$ ,  $a_{22} = 5.5$ ,  $a_{23} = 2$ ,  $a_{32} = 4$ ,  $a_{33} = 2.5$ ;  $\tau = 2$ ,  $z_0 = 10$ ,  $\varepsilon = 10^{-6}$ . На рис. а наведені графіки функцій  $\hat{G}_j^{(i)}(\xi, \xi')$  залежно від координати точкового миттєвого джерела  $\xi' = 1; 3; 5; 7; 9$  (криві 1-5 відповідно), на рис. б – вплив коефіцієнта  $a_{21}$  на поведінку  $\hat{G}_j^{(i)}(\xi, \xi')$  в точці  $\xi' = 3$ , де криві 1-5 відповідають значенням  $a_{21} = 6; 10; 20; 30; 50$ .

**Розділ 4. Математична модель гетеродифузії двома шляхами у тілі з пастками за каскадного розпаду домішкових речовин**

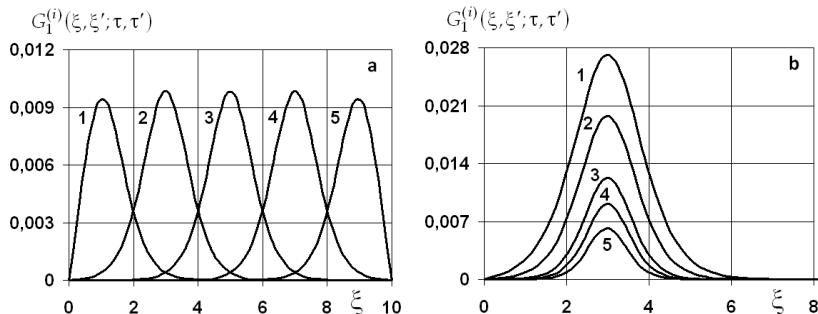


Рис. 4.2. Залежність функції  $\hat{G}_1^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')$  від координати розташування джерела (рис. а) і від коефіцієнта  $a_{21}$  (рис. б)

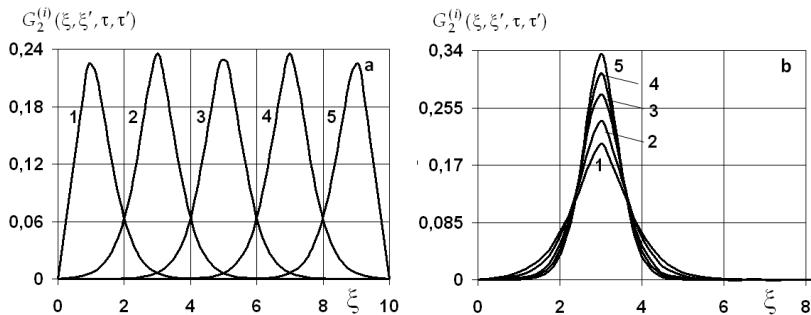


Рис. 4.3. Залежність функції  $\hat{G}_2^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')$  від координати розташування джерела (рис. а) і від коефіцієнта  $a_{21}$  (рис. б)

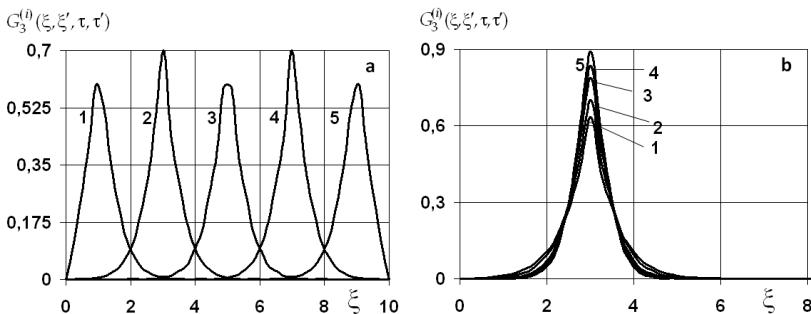


Рис. 4.4. Залежність функції  $\hat{G}_3^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')$  від координати розташування джерела (рис. а) і від коефіцієнта  $a_{21}$  (рис. б)



Зазначимо, що функції Гріна  $G_j^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')$  за рахунок миттєвої дії точкового джерела формують характерні поверхні (рис. 4.1) в момент  $\tau = \tau'$ , які з часом різко зменшують свої максимальні значення, проте спадання функцій стає більш пологим (рис. 4.2a-4.4a). Зсув координати точкового джерела  $\xi'$  від однієї границі тіла до іншої приводить спочатку до зростання максимальних значень  $\hat{G}_j^{(i)}(\xi, \xi')$  то точки  $\xi' = \xi_0/4$ , далі відбувається зменшення  $\max_{\xi \in [0; \xi_0]} \hat{G}_j^{(i)}(\xi, \xi')$  до координати  $\xi' = \xi_0/2$ , а потім зростання - до  $\xi' = 3\xi_0/4$  і знову зменшення на інтервалі  $\xi' \in [3\xi_0/4; \xi_0]$ .

Зауважимо, що значення функції  $\hat{G}_1^{(i)}$  на порядок менші значень функції  $\hat{G}_2^{(i)}$ , яка у свою чергу в рази менша ніж  $\hat{G}_3^{(i)}$ . Зокрема, для максимальних значень маємо співвідношення

$$\max_{\xi \in [0; \xi_0]} \hat{G}_1^{(i)}(\xi, \xi') \Big|_{\xi' = 3} : \max_{\xi \in [0; \xi_0]} \hat{G}_2^{(i)}(\xi, \xi') \Big|_{\xi' = 3} : \max_{\xi \in [0; \xi_0]} \hat{G}_3^{(i)}(\xi, \xi') \Big|_{\xi' = 3} = 1:24:71$$

(рис. 4.2a-4.4a).

Зміна коефіцієнтів дифузії приводить до несуттєвих змін функцій  $\hat{G}_j^{(i)}(\xi, \xi')$ . Варіація «сорбційних» коефіцієнтів не змінює поведінку  $\hat{G}_j^{(i)}(\xi, \xi')$ , проте значно впливає на їхні значення. При цьому зростання коефіцієнта  $a_{21}$  на порядок приводить до зменшення в рази функції  $\hat{G}_1^{(i)}$  (рис. 4.2b) і збільшення значень функцій  $\hat{G}_2^{(i)}$  (рис. 4.3b) та  $\hat{G}_3^{(i)}$  (рис. 4.4b).

Отже, одержавши значення функцій концентрацій домішки на нульовому кроці розпаду за співвідношеннями (4.25) і послідовно визначивши концентрації частинок на кожному кроці  $i = 1, \dots, N - 1$  за формулами (4.26) з урахуванням виразів для функцій Гріна (4.37), (4.40), знайдемо концентрації нерозподілених домішкових частинок у тілі за моделлю гетеродифузії двома шляхами з пастками.

Таким чином ми побудували розв'язок країової задачі Гетеродифузії у тілі з пастками каскадного типу за ітераційною процедурою з використанням функцій Гріна на кожному етапі розпаду домішкових речовин.

### 4.3. Потоки домішкових компонент через заданий переріз тіла

При оцінці інтенсивності забруднення домішковими частинками водоносних горизонтів важливими характеристиками є потоки в рідкій фазі, по внутрішній поверхні скелету та їхня сума. Як випливає з кінетичних співвідношень (1.63), доведених за Теоремою 1.6, для даної моделі гетеродифузії у середовищі з пастками з урахуванням каскадного розпаду домішкових компонент потоки маси у станах  $j=1$  і  $j=2$  визначаються, як і для математичної моделі гетеродифузії двома шляхами (або формулами (3.31) у безрозмірних змінних (2.1)). Зазначимо, що третій стан домішкових частинок  $j=3$  ми означили як «пастки», тобто потік маси є відсутній у цьому стані, хоча домішкові речовини можуть сорбуватися і десорбуватися, ланцюгово розпадатися на дві нові речовини, або не розпадатися.

Отже, сумарний потік маси для даної моделі на кожному з етапів розпаду домішкових речовин  $i=0, \dots, N$  у безрозмірних змінних (2.1) визначається за формулою (3.31).

Знайдемо співвідношення для потоків маси, підставляючи концентрації домішкових частинок (4.25) для  $i=0$ , (4.26) для  $i=\overline{1, N-1}$  та (4.27) для  $i=N$  у формулу (2.96). Тоді маємо

для  $i=0$

потік домішок у поровому розчині

$$\begin{aligned} \frac{J_{*1}^{(0)}(\tau)}{c_0 \sqrt{k_2^{(0)} D_{11}^{(0)}}} = & \left( d_{\alpha 1}^{(0)} + a_{d1}^{(0)} \right) \frac{1}{\xi_0} - a_{d1}^{(0)} \left[ \frac{\bar{a}_1 \operatorname{ch} \bar{a}_1 (\xi_0 - \xi_*)}{b_1 \operatorname{sh} \bar{a}_1 \xi_0} - \frac{\bar{a}_2 \operatorname{ch} \bar{a}_2 (\xi_0 - \xi_*)}{b_2 \operatorname{sh} \bar{a}_2 \xi_0} \right] + \\ & + \left( d_0^{(0)} A_{d1} + d_1^{(0)} A_{d2} \right) \left[ \frac{\bar{a}_1 \operatorname{ch} \bar{a}_1 (\xi_0 - \xi_*)}{\operatorname{sh} \bar{a}_1 \xi_0} - \frac{\bar{a}_2 \operatorname{ch} \bar{a}_2 (\xi_0 - \xi_*)}{\operatorname{sh} \bar{a}_2 \xi_0} \right] - \\ & - \frac{2}{\xi_0} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\cos y_k \xi_*}{s^*} \left\{ (s_2 - s_3) \left[ d_{\alpha 1}^{(0)} s_1^2 + \tilde{P}_1 s_1 + \tilde{P}_2 + \frac{\tilde{P}_3}{s_1} \right] e^{s_1 \tau} + \right. \\ & \left. + (s_3 - s_1) \left[ d_{\alpha 1}^{(0)} s_2^2 + \tilde{P}_1 s_2 + \tilde{P}_2 + \frac{\tilde{P}_3}{s_2} \right] e^{s_2 \tau} + (s_1 - s_2) \left[ d_{\alpha 1}^{(0)} s_3^2 + \tilde{P}_1 s_3 + \tilde{P}_2 + \frac{\tilde{P}_3}{s_3} \right] e^{s_3 \tau} \right\}, \end{aligned} \quad (4.41a)$$



потік домішок по внутрішній поверхні скелету

$$\begin{aligned}
 \frac{J_{*2}^{(0)}(\tau)}{c_0 \sqrt{\bar{k}_2^{(0)} \bar{D}_{11}^{(0)}}} = & \left( d_{\alpha 2}^{(0)} + a_{d2}^{(0)} \right) \frac{1}{\xi_0} - a_{d2}^{(0)} \left[ \frac{\bar{a}_1 \operatorname{ch} \bar{a}_1 (\xi_0 - \xi_*)}{b_1 \operatorname{sh} \bar{a}_1 \xi_0} - \frac{\bar{a}_2 \operatorname{ch} \bar{a}_2 (\xi_0 - \xi_*)}{b_2 \operatorname{sh} \bar{a}_2 \xi_0} \right] + \\
 & + \left( d_0^{(0)} A_{d1} + d_1^{(0)} A_{d2} \right) \left[ \frac{\bar{a}_1 \operatorname{ch} \bar{a}_1 (\xi_0 - \xi_*)}{\operatorname{sh} \bar{a}_1 \xi_0} - \frac{\bar{a}_2 \operatorname{ch} \bar{a}_2 (\xi_0 - \xi_*)}{\operatorname{sh} \bar{a}_2 \xi_0} \right] - \\
 & - \frac{2}{\xi_0} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\cos y_k \xi_*}{s^*} \left\{ (s_2 - s_3) \left[ d_{\alpha 2}^{(0)} s_1^2 + \tilde{\tilde{P}}_1 s_1 + \tilde{\tilde{P}}_2 + \frac{\tilde{\tilde{P}}_3}{s_1} \right] e^{s_1 \tau} + \right. \\
 & \left. + (s_3 - s_1) \left[ d_{\alpha 2}^{(0)} s_2^2 + \tilde{\tilde{P}}_1 s_2 + \tilde{\tilde{P}}_2 + \frac{\tilde{\tilde{P}}_3}{s_2} \right] e^{s_2 \tau} + (s_1 - s_2) \left[ d_{\alpha 2}^{(0)} s_3^2 + \tilde{\tilde{P}}_1 s_3 + \tilde{\tilde{P}}_2 + \frac{\tilde{\tilde{P}}_3}{s_3} \right] e^{s_3 \tau} \right\}, \tag{4.41б}
 \end{aligned}$$

сумарний потік домішкових частинок

$$\begin{aligned}
 \frac{J_*^{(0)}(\tau)}{c_0 \sqrt{\bar{k}_2^{(0)} \bar{D}_{11}^{(0)}}} = & \left( d_{\alpha 2}^{(0)} + a_{d2}^{(0)} \right) \frac{1}{\xi_0} - a_d^{(0)} \left[ \frac{\bar{a}_1 \operatorname{ch} \bar{a}_1 (\xi_0 - \xi_*)}{b_1 \operatorname{sh} \bar{a}_1 \xi_0} - \frac{\bar{a}_2 \operatorname{ch} \bar{a}_2 (\xi_0 - \xi_*)}{b_2 \operatorname{sh} \bar{a}_2 \xi_0} \right] + \\
 & + \left[ (d_0^{(0)} + d_2^{(0)}) A_{d1} + (d_1^{(0)} + d^{(0)}) A_{d2} \right] \left[ \frac{\bar{a}_1 \operatorname{ch} \bar{a}_1 (\xi_0 - \xi_*)}{\operatorname{sh} \bar{a}_1 \xi_0} - \frac{\bar{a}_2 \operatorname{ch} \bar{a}_2 (\xi_0 - \xi_*)}{\operatorname{sh} \bar{a}_2 \xi_0} \right] - \\
 & - \frac{2}{\xi_0} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\cos y_k \xi_*}{s^*} \left\{ (s_2 - s_3) \left[ d_{\alpha}^{(0)} s_1^2 + \tilde{\tilde{P}}_1 s_1 + \tilde{\tilde{P}}_2 + \frac{\tilde{\tilde{P}}_3}{s_1} \right] e^{s_1 \tau} + \right. \\
 & \left. + (s_3 - s_1) \left[ d_{\alpha}^{(0)} s_2^2 + \tilde{\tilde{P}}_1 s_2 + \tilde{\tilde{P}}_2 + \frac{\tilde{\tilde{P}}_3}{s_2} \right] e^{s_2 \tau} + (s_1 - s_2) \left[ d_{\alpha}^{(0)} s_3^2 + \tilde{\tilde{P}}_1 s_3 + \tilde{\tilde{P}}_2 + \frac{\tilde{\tilde{P}}_3}{s_3} \right] e^{s_3 \tau} \right\}, \tag{4.41в}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \text{де } d_{\alpha 1}^{(0)} &= \alpha d_0^{(0)} + (1-\alpha) d_1^{(0)}, \quad d_{\alpha 2}^{(0)} = \alpha d_2^{(0)} + (1-\alpha) d^{(0)}, \quad d_{\alpha}^{(0)} = d_{\alpha 1}^{(0)} + d_{\alpha 2}^{(0)}, \\
 a_{d1}^{(0)} &= 2 \frac{a_{33} d^*}{b_2 - b_1} [d_0^{(0)} A_{\alpha 1} - d_1^{(0)} A_{\alpha 2}], \quad a_{d2}^{(0)} = 2 \frac{a_{33} d^*}{b_2 - b_1} [d_2^{(0)} A_{\alpha 1} - d^{(0)} A_{\alpha 2}],
 \end{aligned}$$

$$\tilde{P}_i = d_0^{(0)} P_i + d_1^{(0)} P'_i, \quad \tilde{\tilde{P}}_i = d_2^{(0)} P_i + d^{(0)} P'_i, \quad \tilde{\tilde{\tilde{P}}}_i = \tilde{P}_i + \tilde{\tilde{P}}_i, \quad i = \overline{1,3};$$

$$a_d^{(0)} = a_{d1}^{(0)} + a_{d2}^{(0)}, \quad \bar{R} = d_{\alpha 1}^{(0)} + d_{\alpha 2}^{(0)} + a_{d1}^{(0)} + a_{d2}^{(0)}$$

для  $i = 1, \dots, N - 1$  маємо

потік домішок у поровому розчині

$$\frac{J_{*1}^{(i)}(\tau)}{\sqrt{k_2^{(0)}} D_{11}^{(0)}} = \int_0^{\tau} \int_0^{\xi_0} \left\{ a_{\lambda 1}^{(i-1)} d_0^{(i)} \frac{\partial G_1^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_*} c_1^{(i-1)}(\xi', \tau') + \right. \\ \left. + a_{\lambda 2}^{(i-1)} d_1^{(i)} \frac{\partial G_2^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_*} c_2^{(i-1)}(\xi', \tau') \right\} d\xi' d\tau', \quad (4.42a)$$

потік домішок по внутрішній поверхні скелету

$$\frac{J_{*2}^{(i)}(\tau)}{\sqrt{k_2^{(0)}} D_{11}^{(0)}} = \int_0^{\tau} \int_0^{\xi_0} \left\{ a_{\lambda 1}^{(i-1)} d_2^{(i)} \frac{\partial G_1^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_*} c_1^{(i-1)}(\xi', \tau') + \right. \\ \left. + a_{\lambda 2}^{(i-1)} d^{(i)} \frac{\partial G_2^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_*} c_2^{(i-1)}(\xi', \tau') \right\} d\xi' d\tau', \quad (4.42b)$$

сумарний потік домішкових частинок

$$\frac{J_*^{(i)}(\tau)}{\sqrt{k_2^{(0)}} D_{11}^{(0)}} = \int_0^{\tau} \int_0^{\xi_0} \left\{ [a_{\lambda 1}^{(i-1)} d_0^{(i)} + a_{\lambda 1}^{(i-1)} d_2^{(i)}] \frac{\partial G_1^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_*} c_1^{(i-1)}(\xi', \tau') + \right. \\ \left. + [a_{\lambda 2}^{(i-1)} d_1^{(i)} + a_{\lambda 2}^{(i-1)} d^{(i)}] \frac{\partial G_2^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_*} c_2^{(i-1)}(\xi', \tau') \right\} d\xi' d\tau'. \quad (4.42b)$$

Для даної математичної моделі похідні від функцій Гріна набудуть вигляду

$$\frac{\partial G_1^{(i)}}{\partial \xi} \Bigg|_{\xi=\xi_*} = \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} y_n \frac{\cos(y_n \xi_*) \sin(y_n \xi')}{s_i^*} \left[ (s_2^{(i)} - s_3^{(i)}) [s_1^{(i)2} + \bar{A}_1 s_1^{(i)} + \bar{A}_2] e^{s_1^{(i)}(\tau-\tau')} + \right. \\ \left. + (s_3^{(i)} - s_1^{(i)}) [s_2^{(i)2} + \bar{A}_1 s_2^{(i)} + \bar{A}_2] e^{s_2^{(i)}(\tau-\tau')} + (s_1^{(i)} - s_2^{(i)}) [s_3^{(i)2} + \bar{A}_1 s_3^{(i)} + \bar{A}_2] e^{s_3^{(i)}(\tau-\tau')} \right],$$



### 4.3. Потоки домішкових компонент через заданий переріз тіла

$$\left. \frac{\partial G_2^{(i)}}{\partial \xi} \right|_{\xi=\xi_*} = \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} y_n \frac{\cos(y_n \xi_*) \sin(y_n \xi')}{s_i^*} \left[ (s_2^{(i)} - s_3^{(i)}) [s_1^{(i)2} + \bar{A}_1 s_1^{(i)} + \bar{A}_2] e^{s_1^{(i)}(\tau-\tau')} + \right. \\ \left. + (s_3^{(i)} - s_1^{(i)}) [s_2^{(i)2} + \bar{A}_1 s_2^{(i)} + \bar{A}_2] e^{s_2^{(i)}(\tau-\tau')} + (s_1^{(i)} - s_2^{(i)}) [s_3^{(i)2} + \bar{A}_1 s_3^{(i)} + \bar{A}_2] e^{s_3^{(i)}(\tau-\tau')} \right],$$

для  $i = N$

потік нерозпадних домішок у поровому розчині

$$\frac{J_{*1}^{(N)}(\tau)}{\sqrt{\bar{k}_2^{(0)} D_{11}^{(0)}}} = \int_0^\tau \int_0^{\xi_0} \left\{ d_0^{(N)} \frac{\partial G_1^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \right\}_{\xi=\xi_*} \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 1}^{(iN)} c_1^{(i)}(\xi', \tau') + \\ + d_1^{(N)} \frac{\partial G_2^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Bigg|_{\xi=\xi_*} \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 2}^{(iN)} c_2^{(i)}(\xi', \tau') \Bigg\} d\xi' d\tau', \quad (4.43a)$$

потік нерозпадних домішок по внутрішній поверхні скелету

$$\frac{J_{*2}^{(N)}(\tau)}{\sqrt{\bar{k}_2^{(0)} D_{11}^{(0)}}} = \int_0^\tau \int_0^{\xi_0} \left\{ d_2^{(N)} \frac{\partial G_1^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \right\}_{\xi=\xi_*} \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 1}^{(iN)} c_1^{(i)}(\xi', \tau') + \\ + d^{(N)} \frac{\partial G_2^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Bigg|_{\xi=\xi_*} \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 2}^{(iN)} c_2^{(i)}(\xi', \tau') \Bigg\} d\xi' d\tau', \quad (4.43b)$$

сумарний потік домішкових частинок

$$\frac{J_*^{(N)}(\tau)}{\sqrt{\bar{k}_2^{(0)} D_{11}^{(0)}}} = \int_0^\tau \int_0^{\xi_0} \left\{ (d_0^{(N)} + d_2^{(N)}) \frac{\partial G_1^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \right\}_{\xi=\xi_*} \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 1}^{(iN)} c_1^{(i)}(\xi', \tau') + \\ + (d_1^{(N)} + d^{(N)}) \frac{\partial G_2^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Bigg|_{\xi=\xi_*} \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 2}^{(iN)} c_2^{(i)}(\xi', \tau') \Bigg\} d\xi' d\tau'; \quad (4.43b)$$

$$\left. \frac{\partial G_1^{(N)}(\xi, \xi', \tau, \tau')}{\partial \xi} \right|_{\xi=\xi_*} = \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} y_n \frac{\cos(y_n \xi_*) \sin(y_n \xi')}{s_N^*} \left[ (s_2^{(N)} - s_3^{(N)}) [s_1^{(N)2} + \bar{A}_1 s_1^{(N)} + \bar{A}_2] e^{s_1^{(N)}(\tau-\tau')} + \right. \\ \left. + \bar{A}_1 s_1^{(N)} + \bar{A}_2] e^{s_1^{(N)}(\tau-\tau')} + (s_3^{(N)} - s_1^{(N)}) [s_2^{(N)2} + \bar{A}_1 s_2^{(N)} + \bar{A}_2] e^{s_2^{(N)}(\tau-\tau')} + \right. \\ \left. + (s_1^{(N)} - s_2^{(N)}) [s_3^{(N)2} + \bar{A}_1 s_3^{(N)} + \bar{A}_2] e^{s_3^{(N)}(\tau-\tau')} \right],$$

**Розділ 4.** Математична модель гетеродифузії двома шляхами у тілі з пастками за каскадного розпаду домішкових речовин

$$\left. \frac{\partial G_2^{(N)}(\xi, \xi', \tau, \tau')}{\partial \xi} \right|_{\xi=\xi_*} = \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} y_n \frac{\cos(y_n \xi_*) \sin(y_n \xi')}{s_N^*} \left[ (s_2^{(N)} - s_3^{(N)}) [s_1^{(N)2} + \right. \\ \left. + \bar{A}_1 s_1^{(N)} + \bar{A}_2 e^{s_1^{(N)}(\tau-\tau')} + (s_3^{(N)} - s_1^{(N)}) [s_2^{(N)2} + \bar{A}_1 s_2^{(N)} + \bar{A}_2 e^{s_2^{(N)}(\tau-\tau')} + \right. \\ \left. + (s_1^{(N)} - s_2^{(N)}) [s_3^{(N)2} + \bar{A}_1 s_3^{(N)} + \bar{A}_2 e^{s_3^{(N)}(\tau-\tau')} \right] \right].$$

Потоки розпадних домішкових речовин через нижню границю шару  $\xi = \xi_0$  знаходимо як частковий випадок формул (4.41)-(4.43):

для  $i = 0$

потік домішок у поровому розчині

$$\frac{J_{01}^{(0)}(\tau)}{c_0 \sqrt{k_2^{(0)} D_{11}^{(0)}}} = \left( d_{\alpha 1}^{(0)} + a_{d1}^{(0)} \right) \frac{1}{\xi_0} + a_{d1}^{(0)} \left[ \frac{\bar{a}_1}{\operatorname{sh} \bar{a}_1 \xi_0} - \frac{\bar{a}_2}{b_2 \operatorname{sh} \bar{a}_2 \xi_0} \right] + \\ + \left( d_0^{(0)} A_{d1} + d_1^{(0)} A_{d2} \right) \left[ \frac{\bar{a}_1}{\operatorname{sh} \bar{a}_1 \xi_0} - \frac{\bar{a}_2}{\operatorname{sh} \bar{a}_2 \xi_0} \right] - \frac{2}{\xi_0} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{s^*} \left\{ (s_2 - s_3) \left[ d_{\alpha 1}^{(0)} s_1^{(0)2} + \right. \right. \\ \left. \left. + \tilde{P}_1 s_1 + \tilde{P}_2 + \frac{\tilde{P}_3}{s_1} \right] e^{s_1 \tau} + (s_3 - s_1) \left[ d_{\alpha 1}^{(0)} s_2^{(0)2} + \tilde{P}_1 s_2 + \tilde{P}_2 + \frac{\tilde{P}_3}{s_2} \right] e^{s_2 \tau} + \right. \\ \left. + (s_1 - s_2) \left[ d_{\alpha 1}^{(0)} s_3^{(0)2} + \tilde{P}_1 s_3 + \tilde{P}_2 + \frac{\tilde{P}_3}{s_3} \right] e^{s_3 \tau} \right\}, \quad (4.44a)$$

потік домішок по внутрішній поверхні скелету

$$\frac{J_{02}^{(0)}(\tau)}{c_0 \sqrt{k_2^{(0)} D_{11}^{(0)}}} = \left( d_{\alpha 2}^{(0)} + a_{d2}^{(0)} \right) \frac{1}{\xi_0} - a_{d2}^{(0)} \left[ \frac{\bar{a}_1}{b_1 \operatorname{sh} \bar{a}_1 \xi_0} - \frac{\bar{a}_2}{b_2 \operatorname{sh} \bar{a}_2 \xi_0} \right] + \\ + \left( d_0^{(0)} A_{d1} + d_1^{(0)} A_{d2} \right) \left[ \frac{\bar{a}_1}{\operatorname{sh} \bar{a}_1 \xi_0} - \frac{\bar{a}_2}{\operatorname{sh} \bar{a}_2 \xi_0} \right] - \frac{2}{\xi_0} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{s^*} \left\{ (s_2 - s_3) \left[ d_{\alpha 2}^{(0)} s_1^{(0)2} + \right. \right. \\ \left. \left. + \tilde{\tilde{P}}_1 s_1 + \tilde{\tilde{P}}_2 + \frac{\tilde{\tilde{P}}_3}{s_1} \right] e^{s_1 \tau} + (s_3 - s_1) \left[ d_{\alpha 2}^{(0)} s_2^{(0)2} + \tilde{\tilde{P}}_1 s_2 + \tilde{\tilde{P}}_2 + \frac{\tilde{\tilde{P}}_3}{s_2} \right] e^{s_2 \tau} + \right. \\ \left. + (s_1 - s_2) \left[ d_{\alpha 2}^{(0)} s_3^{(0)2} + \tilde{\tilde{P}}_1 s_3 + \tilde{\tilde{P}}_2 + \frac{\tilde{\tilde{P}}_3}{s_3} \right] e^{s_3 \tau} \right\}, \quad (4.44b)$$



сумарний потік домішкових частинок

$$\begin{aligned}
 \frac{J_0^{(0)}(\tau)}{c_0 \sqrt{\bar{k}_2^{(0)} \bar{D}_{11}^{(0)}}} = & \left( d_{\alpha 2}^{(0)} + a_{d2}^{(0)} \right) \frac{1}{\xi_0} - a_d^{(0)} \left[ \frac{\bar{a}_1}{b_1 \operatorname{sh} \bar{a}_1 \xi_0} - \frac{\bar{a}_2}{b_2 \operatorname{sh} \bar{a}_2 \xi_0} \right] + \\
 & + \left[ \left[ d_0^{(0)} + d_2^{(0)} \right] A_{d1} + \left[ d_1^{(0)} + d^{(0)} \right] A_{d2} \right] \left[ \frac{\bar{a}_1}{\operatorname{sh} \bar{a}_1 \xi_0} - \frac{\bar{a}_2}{\operatorname{sh} \bar{a}_2 \xi_0} \right] - \\
 & - \frac{2}{\xi_0} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{s_*^k} \left\{ (s_2 - s_3) \left[ d_{\alpha}^{(0)} s_1^{(2)} + \tilde{\tilde{P}}_1 s_1 + \tilde{\tilde{P}}_2 + \frac{\tilde{\tilde{P}}_3}{s_1} \right] e^{s_1 \tau} + (s_2 - s_3) \left[ d_{\alpha}^{(0)} s_2^{(2)} + \tilde{\tilde{P}}_1 s_2 + \right. \right. \\
 & \left. \left. + \tilde{\tilde{P}}_2 + \frac{\tilde{\tilde{P}}_3}{s_2} \right] e^{s_2 \tau} + (s_1 - s_2) \left[ d_{\alpha}^{(0)} s_3^{(2)} + \tilde{\tilde{P}}_1 s_3 + \tilde{\tilde{P}}_2 + \frac{\tilde{\tilde{P}}_3}{s_3} \right] e^{s_3 \tau} \right\}. \quad (4.44в)
 \end{aligned}$$

Для інших етапів каскадного розпаду домішкових речовин спрощуються формули (4.42) для  $i = 1, \dots, N-1$  та (4.43) для  $i = N$ , в яких

$$\begin{aligned}
 \left. \frac{\partial G_1^{(i)}}{\partial \xi} \right|_{\xi=\xi_0} = & \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} y_n \frac{(-1)^n \sin(y_n \xi')}{s_i^*} \left[ (s_2^{(i)} - s_3^{(i)}) [s_1^{(i)2} + \bar{A}_1 s_1^{(i)} + \bar{A}_2] e^{s_1^{(i)}(\tau-\tau')} + \right. \\
 & \left. + (s_3^{(i)} - s_1^{(i)}) [s_2^{(i)2} + \bar{A}_1 s_2^{(i)} + \bar{A}_2] e^{s_2^{(i)}(\tau-\tau')} + (s_1^{(i)} - s_2^{(i)}) [s_3^{(i)2} + \bar{A}_1 s_3^{(i)} + \bar{A}_2] e^{s_3^{(i)}(\tau-\tau')} \right], \\
 \left. \frac{\partial G_2^{(i)}}{\partial \xi} \right|_{\xi=\xi_0} = & \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} y_n \frac{(-1)^n \sin(y_n \xi')}{s_i^*} \left[ (s_2^{(i)} - s_3^{(i)}) [s_1^{(i)2} + \bar{\bar{A}}_1 s_1^{(i)} + \bar{\bar{A}}_2] e^{s_1^{(i)}(\tau-\tau')} + \right. \\
 & \left. + (s_3^{(i)} - s_1^{(i)}) [s_2^{(i)2} + \bar{\bar{A}}_1 s_2^{(i)} + \bar{\bar{A}}_2] e^{s_2^{(i)}(\tau-\tau')} + (s_1^{(i)} - s_2^{(i)}) [s_3^{(i)2} + \bar{\bar{A}}_1 s_3^{(i)} + \bar{\bar{A}}_2] e^{s_3^{(i)}(\tau-\tau')} \right], \\
 \left. \frac{\partial G_1^{(N)}}{\partial \xi} (\xi, \xi', \tau, \tau') \right|_{\xi=\xi_0} = & \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} y_n \frac{(-1)^n \sin(y_n \xi')}{s_N^*} \left[ (s_2^{(N)} - s_3^{(N)}) [s_1^{(N)2} + \right. \\
 & \left. + \bar{A}_1 s_1^{(N)} + \bar{A}_2] e^{s_1^{(N)}(\tau-\tau')} + (s_3^{(N)} - s_1^{(N)}) [s_2^{(N)2} + \bar{A}_1 s_2^{(N)} + \bar{A}_2] e^{s_2^{(N)}(\tau-\tau')} + \right. \\
 & \left. + (s_1^{(N)} - s_2^{(N)}) [s_3^{(N)2} + \bar{A}_1 s_3^{(N)} + \bar{A}_2] e^{s_3^{(N)}(\tau-\tau')} \right],
 \end{aligned}$$

$$\left. \frac{\partial G_2^{(N)}(\xi, \xi', \tau, \tau')}{\partial \xi} \right|_{\xi=\xi_0} = \frac{2}{\xi_0} \sum_{n=1}^{\infty} y_n \frac{(-1)^n \sin(y_n \xi')}{s_N^*} \left[ (s_2^{(N)} - s_3^{(N)}) \left[ s_1^{(N)2} + \right. \right. \\ \left. \left. + \bar{A}_1 s_1^{(N)} + \bar{A}_2 \left[ e^{s_1^{(N)}(\tau-\tau')} + (s_3^{(N)} - s_1^{(N)}) \right] s_2^{(N)2} + \bar{A}_1 s_2^{(N)} + \bar{A}_2 \left[ e^{s_2^{(N)}(\tau-\tau')} + \right. \right. \right. \\ \left. \left. \left. + (s_1^{(N)} - s_2^{(N)}) \left[ s_3^{(N)2} + \bar{A}_1 s_3^{(N)} + \bar{A}_2 \right] e^{s_3^{(N)}(\tau-\tau')} \right] \right]. \quad (4.45)$$

Зазначимо, що, хоча потоки розпадних речовин визначаються лише процесами масоперенесення у поровому розчині та по внутрішній поверхні скелету (як і у моделі гетеродифузії двома шляхами), наявність у моделі третього стану для домішкових частинок (тобто пасток) значно ускладнює як асимптотичні доданки для кроку розпаду  $i=0$  у формулах (4.41), так і ті, що залежать від часової змінної для всіх етапів каскадного розпаду домішкових компонент, тобто співвідношення (4.42), (4.43).

#### 4.4. Кількість розпадних речовин, що пройшла через нижню границю шару за час $\tau_*$

Кількість розпадних домішкових речовин  $Q_0^{(i)}(\tau)$ , що за час  $\tau_*$  пройшли через одиницю площини поверхні шару  $\xi=\xi_0$ , для кожного етапу каскадного розпаду можемо знайти, проінтегрувавши за часом відповідні вирази для сумарних потоків (4.44в), (4.45). Після інтегрування від 0 до  $\tau_*$  отримаємо

для  $i=0$

$$\frac{Q_0^{(0)}(\tau)}{c_0 \sqrt{k_2^{(0)} D_{11}^{(0)}}} = \left\{ \left( d_{\alpha 2}^{(0)} + a_{d2}^{(0)} \right) \frac{1}{\xi_0} - a_d^{(0)} \left[ \frac{\bar{a}_1}{b_1 \operatorname{sh} \bar{a}_1 \xi_0} - \frac{\bar{a}_2}{b_2 \operatorname{sh} \bar{a}_2 \xi_0} \right] + \right. \\ \left. + \left[ (d_0^{(0)} + d_2^{(0)}) A_{d1} + (d_1^{(0)} + d^{(0)}) A_{d2} \right] \left[ \frac{\bar{a}_1}{\operatorname{sh} \bar{a}_1 \xi_0} - \frac{\bar{a}_2}{\operatorname{sh} \bar{a}_2 \xi_0} \right] \right\} \tau_* - \\ - \frac{2}{\xi_0} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(-1)^k}{s^*} \left\{ (s_2 - s_3) \left[ d_{\alpha}^{(0)} s_1^2 + \tilde{\tilde{P}}_1 s_1 + \tilde{\tilde{P}}_2 + \frac{\tilde{\tilde{P}}_3}{s_1} \right] \left( 1 - e^{s_1 \tau} \right) + (s_2 - s_3) \left[ d_{\alpha}^{(0)} s_2^2 + \right. \right. \\ \left. \left. + \tilde{\tilde{P}}_1 s_2 + \tilde{\tilde{P}}_2 + \frac{\tilde{\tilde{P}}_3}{s_2} \right] \left( 1 - e^{s_2 \tau} \right) \right\}$$



$$+ \tilde{\tilde{P}}_1 s_2 + \tilde{\tilde{P}}_2 + \frac{\tilde{\tilde{P}}_3}{s_2} \left[ (1 - e^{s_2 \tau}) + (s_1 - s_2) \left[ d_{\alpha}^{(0)} s_3^2 + \tilde{\tilde{P}}_1 s_3 + \tilde{\tilde{P}}_2 + \frac{\tilde{\tilde{P}}_3}{s_3} \right] (1 - e^{s_3 \tau}) \right], \quad (4.46a)$$

для  $i = 1, \dots, N - 1$

$$\begin{aligned} \frac{Q_0^{(i)}(\tau)}{\sqrt{k_2^{(0)}} D_{11}^{(0)}} = & \int_0^{\tau_*} \int_0^\tau \int_0^{\xi_0} \left\{ \left[ a_{\lambda 1}^{(i-1)} d_0^{(i)} + a_{\lambda 1}^{(i-1)} d_2^{(i)} \right] \frac{\partial G_1^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_*} c_1^{(i-1)}(\xi', \tau') + \right. \\ & \left. + \left[ a_{\lambda 2}^{(i-1)} d_1^{(i)} + a_{\lambda 2}^{(i-1)} d_2^{(i)} \right] \frac{\partial G_2^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_*} c_2^{(i-1)}(\xi', \tau') \right\} d\xi' d\tau' d\tau, \quad (4.46\bar{b}) \end{aligned}$$

для  $i = N$

$$\begin{aligned} \frac{Q_0^{(i)}(\tau)}{\sqrt{k_2^{(0)}} D_{11}^{(0)}} = & \int_0^{\tau_*} \int_0^\tau \int_0^{\xi_0} \left\{ \left[ a_{\lambda 1}^{(i-1)} d_0^{(i)} + a_{\lambda 1}^{(i-1)} d_2^{(i)} \right] \frac{\partial G_1^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_*} c_1^{(i-1)}(\xi', \tau') + \right. \\ & \left. + \left[ a_{\lambda 2}^{(i-1)} d_1^{(i)} + a_{\lambda 2}^{(i-1)} d_2^{(i)} \right] \frac{\partial G_2^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \Big|_{\xi=\xi_*} c_2^{(i-1)}(\xi', \tau') \right\} d\xi' d\tau' d\tau. \quad (4.46\bar{b}) \end{aligned}$$

Зазначимо, що для  $i = 0$  ми отримали формулу (4.46a) для знаходження кількісних значень  $Q_0^{(0)}(\tau_*)$ . У той же час для обчислення функцій  $Q_0^{(i)}(\tau_*)$  ми побудували ітераційний процес, який для кожного кроку вимагає звертання до функцій концентрацій, знайдених на попередньому кроці та похідних від функцій Гріна, визначених для даного етапу.

## 4.5. Схема модулів комплексу програм пакету GeterPas для моделі гетеродифузії двома шляхами у тілі з пастками

Для розрахунку і аналізу концентрацій розпадних домішкових компонент, у тому числі в різних станах знаходження частинок – дифузія у водному поровому розчині, переміщення по внутрішній поверхні скелету та потрапляння і перебування у пастках,

на всіх ( $i = \overline{0, N}$ ) етапах каскадного розпаду розроблено програмний модуль комплексу програм моделі гетеродифузії двома шляхами з пастками пакету GeterPas. Комп'ютерні програми створені на мовах Fortran та Pascal на основі формул (4.25a)-(4.25g) для концентрацій частинок у трьох станах та їхньої суми на нульовому етапі розпаду, співвідношень (4.26a)-(4.26b) для концентрацій на  $i$ -му ( $i = \overline{1, N-1}$ ) етапі з використанням формул (4.37) для знаходження відповідних функцій Гріна, а також виразів (4.27a)-(4.27b) для концентрацій нерозпадних домішкових речовин ( $i = N$ ) разом з формулами (4.40) для функцій Гріна на останньому етапі каскадного розпаду.

Розроблено окремі програмні модулі для розрахунку потоків маси за формулами (4.41a)-(4.41b), (4.42a)-(4.42b) і (4.43a)-(4.43b) для кількості речовин, що пройшли через нижню границю шару за певний проміжок часу, на основі співвідношень (4.46a)-(4.46b).

Архітектуру комплекса модулів програм для моделювання процесів масоперенесення домішкових речовин, що супроводжується взаємними переходами частинок між їхніми станами, за каскадного розпаду мігруючих речовин в рамках моделі гетеродифузії двома шляхами у середовищі з пастками наведено на рис. 4.5. Зазначимо, що програмний модуль для концентрацій є базовим (і незалежним) в даній реалізації комплекса, а модулі для розрахунку потоків маси та кількості речовини, що пройшли через шар, функціонують лише у взаємодії з програмним модулем для концентрацій (рис. 4.5), при цьому в рамках кожного етапу каскадного розпаду – «горизонтальна» взаємодія модулів.

На рис. 4.6 наведена схема алгоритму модуля комплексу для розрахунку концентрацій домішкових речовин за їх каскадного розпаду для всіх етапів  $i = \overline{0, N}$ . В той же час алгоритми модуля програм для розрахунку потоків розпадних домішок співпадають з відповідними алгоритмами для моделі гетеродифузії двома шляхами, тобто їх схема відповідає зображеній на рис. 3.4. На рис. 4.7 проілюстрована схема алгоритму модуля комплексу для розрахунку кількостей домішкових речовин, що за заданий проміжок часу пройшли через шар, за каскадного розпаду мігруючих домішкових частинок для всіх етапів  $i = \overline{0, N}$ .



4.5. Схема модулів комплексу програм пакету GeterPas для моделі гетеродифузії двома шляхами у тілі з пастками

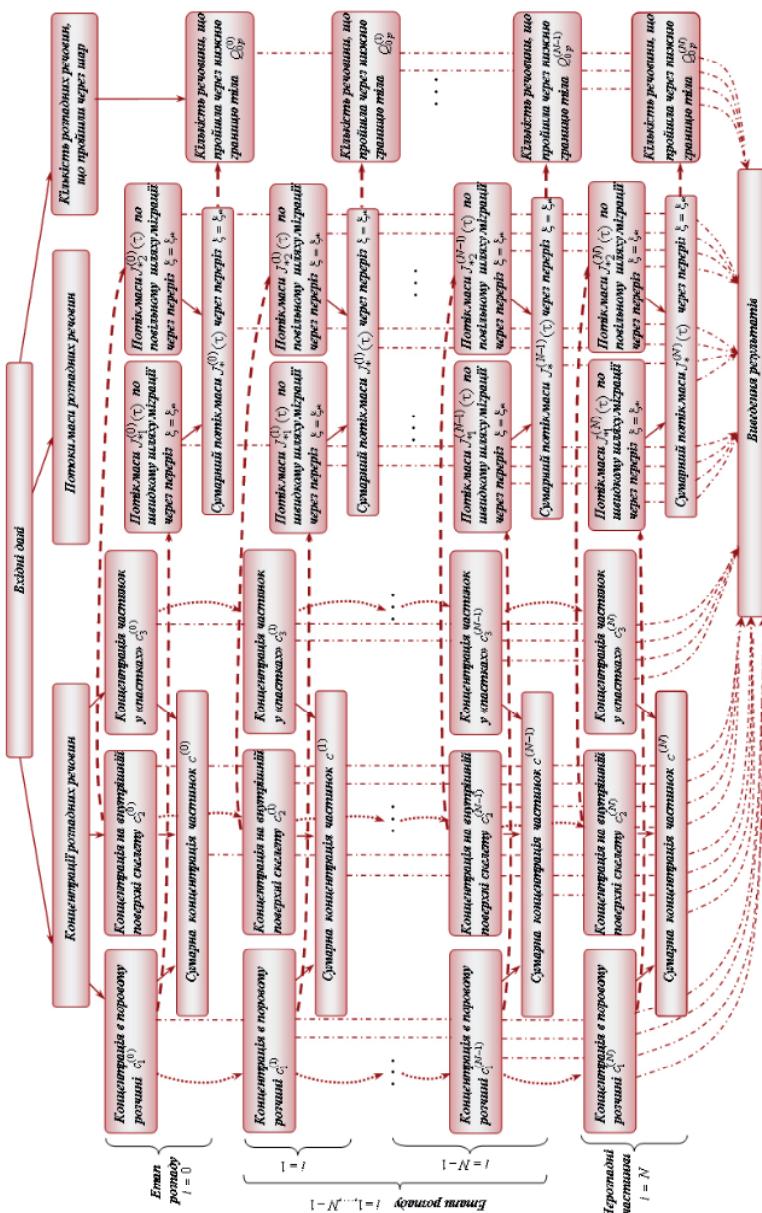
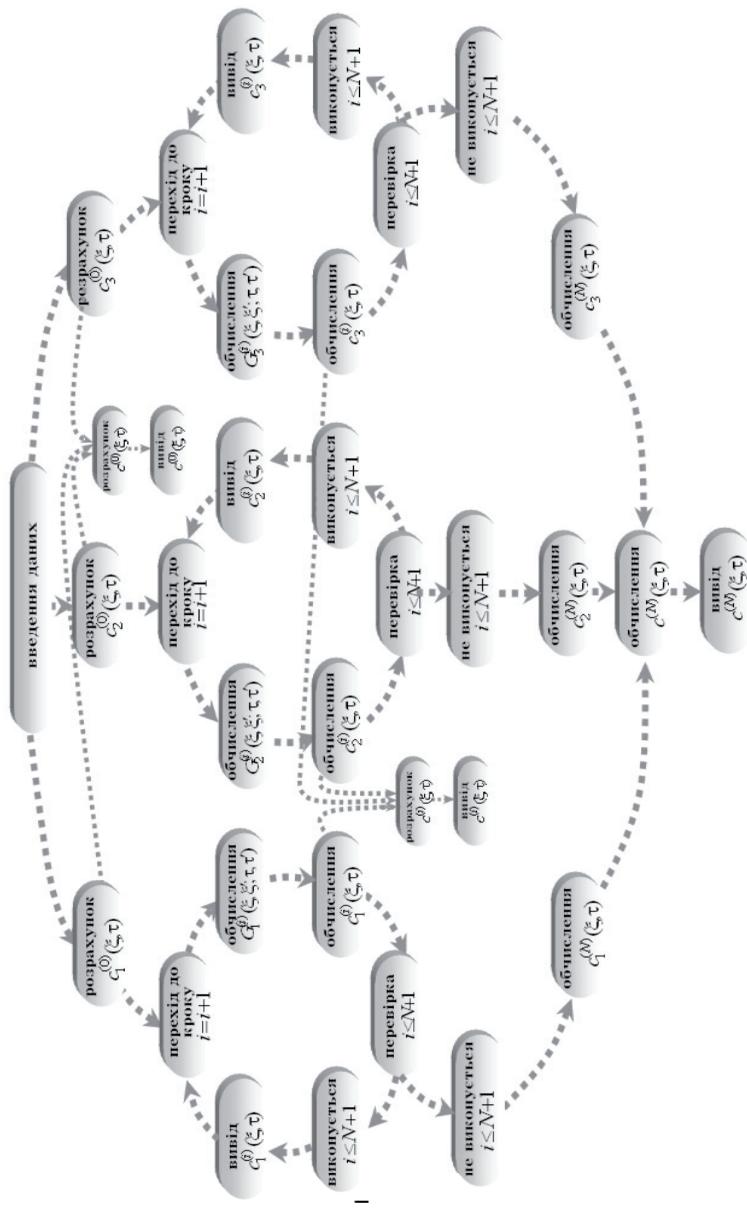


Рис.4.5. Архітектура комплексу модулів програм пакету GeterPas моделі гетеродифузії у тілі з пастками за каскадного розподілу частинок



*Рис. 4.6. Схема модуля комплексу програм на заміну GeterPas для моделі гетеродифузії двома шляхами у тілі з пастками*



#### 4.5. Схема модулів комплексу програм пакету GeterPas для моделі гетеродифузії двома шляхами у тілі з пастками

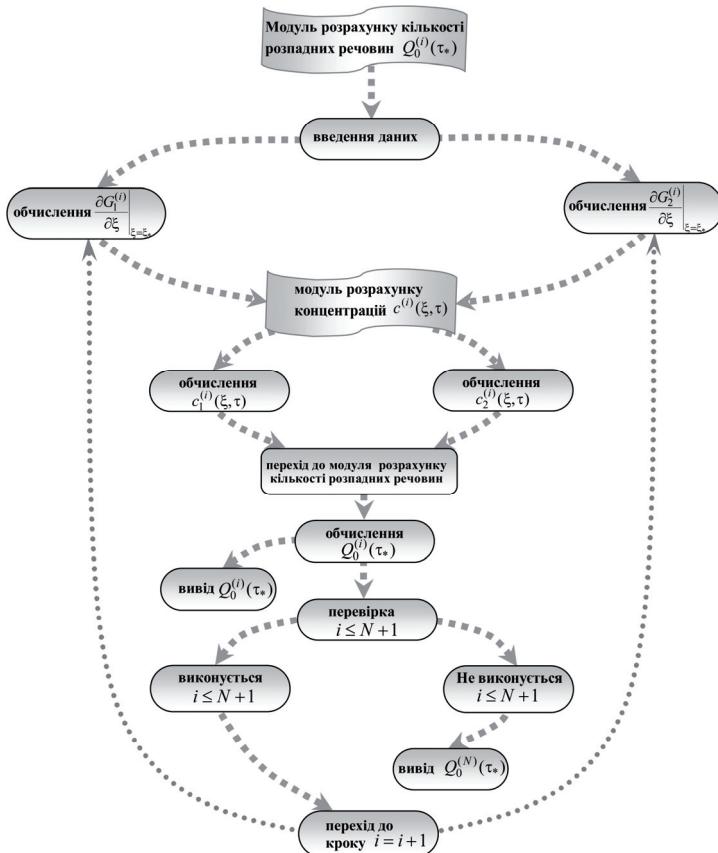
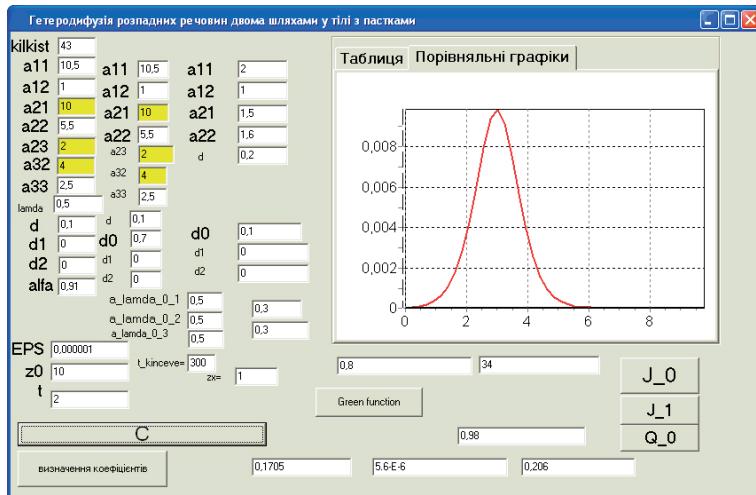


Рис. 4.7. Схема модуля комплексу програм пакету GeterPas для розрахунку кількості домішкових речовин, що пройшли через шар, за моделлю гетеродифузії двома шляхами у тілі з пастками

Зауважимо, що програмний модуль для розрахунку концентрацій домішкових компонент, які мігрують у тілі, містить три циклічні процеси, які запускаються на виконання, наприклад, для знаходження сумарних концентрацій (рис. 4.5) на різних етапах розпаду. Проте за необхідності розрахунку концентрацій домішкових частинок в окремих станах запускається на виконання і виконується тільки відповідні окремі програми модуля. Програмний модуль для обчислення кількостей домішкових речовин, що пройшли через шар, розроблений з викорис-

танням циклічного процесу з галуженням у взаємодії з модулем розрахунку концентрацій на кожному етапі розпаду.

На рис. 4.8 наведений приклад роботи програмного модуля для розрахунку концентрацій з введенням параметрів задачі на нульовому і першому етапах каскадного розпаду.



*Рис. 4.8. Приклад роботи програмного модуля для розрахунку концентрацій за моделлю гетеродифузії з пастками*

Отримані у даному розділі вирази для концентрацій домішок, потоків маси та кількостей речовин, що за певний проміжок часу пройшли через шар містять ряд нових невідомих характеристик середовища, зокрема таких як  $\bar{k}_j^{(0)}$ , що визначають інтенсивність переходу частинок між різними шляхами міграції. Ці величини можна знаходити шляхом числового експерименту з підгонки розрахункових профілів концентрацій до знайдених експериментально [47] або реалізуючи цільові експериментальні дослідження. Ідея таких експериментів наведена, зокрема, в роботі [37]. Для встановлення основних закономірностей гетеродифузії розпадної речовини у середовищі з пастками, зважаючи на введену безрозмірну форму, наведено залежності розподілів концентрацій, потоків і кількості речовини від відповідних характеристик у широких межах.



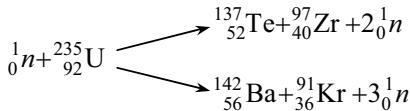
## ДОДАТКИ

### || Д.1. Каскадний радіоактивний розпад

Катастрофічні аварії на атомних станціях у Чорнобилі в 1986 р. та Фукусімі у 2011 р. поставили завдання всебічного вивчення поведінки та поширення техногенного забруднення, і в першу чергу радіонуклідів, в об'єктах природного середовища. При цьому відповідні фізико-механічні процеси супроводжуються каскадними (ланцюговими) ядерними реакціями, які часто є послідовністю поодиноких ядерних реакцій для елементів, що з'явилася як продукти реакції на попередньому кроці [5].

Радіоактивний розпад речовини – це зміна складу нестабільних атомних ядер. Ядра спонтанно розпадаються на ядерні фрагменти та елементарні частинки (продукти розпаду). Частина елементів має хоча би один стабільний (не радіоактивний) ізотоп. У свою чергу радіоактивними є всі елементи з порядковим номером після 82 і нестабільні ізотопи легших елементів (від  $^{12}\text{C}$  до  $^{32}\text{S}$ ) [82]. Ядра, які виникають в наслідок радіоактивних перетворень, самі можуть виявитись радіоактивними, вони розпадаються зі швидкістю, яка характеризується їхньою сталою розпаду. Нові продукти розпаду, в свою чергу, можуть бути радіоактивними тощо. В результаті виникає цілий ряд (каскад) радіоактивних перетворень.

В загальному випадку ядро урану-235 можна розщепити багатьма способами. Зокрема два різні способи розщеплення ядра наведені нижче



Серед продуктів ділення урана-235 виявлено більше 200 різних ізотопів 35 хімічних елементів, причому більшість з цих ізотопів

## Додатки

є радіоактивними і є небезпечними для людини та навколошнього середовища.

Як приклад (рис. Д.1) можна навести варіант ділення ядра урана-235.

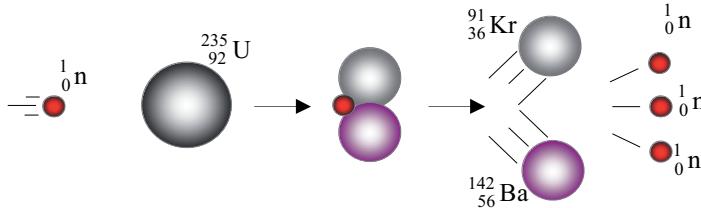


Рис. Д.1. Варіант ділення ядра урана-235

При діленні ядра урану утворюється 2-3 нових нейтрони, які у свою чергу можуть приймати участь у взаємодії з ядрами, викликаючи їхнє ділення, що призводить до ланцюгових реакцій (рис. Д.2) [39].

Ще одним прикладом ділення хімічних елементів можна навести схему отримання промислового плутонію. Для цього уран-238 опромінюють в ядерних реакторах, де він послідовно перетворюється в уран-239, далі нептуній-239 і плутоній-239 [5]:

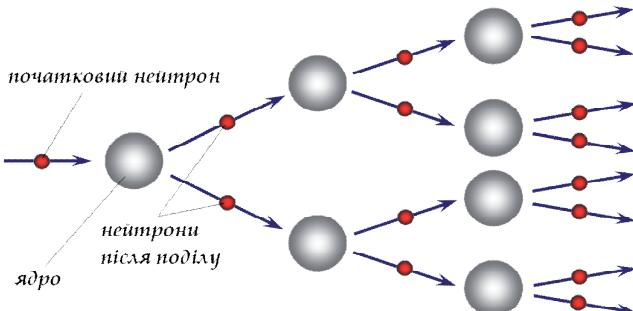
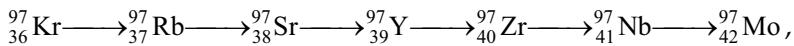


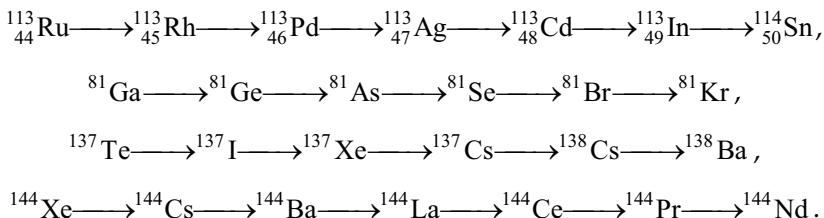
Рис. Д.2. Ланцюгова реакція ядерного ділення, в якій при кожному етапі ділення утворюються 2 нейтрони

У випадку інших радіонуклідів відомі, зокрема, такі схеми їхнього каскадного розпаду [31]:





## Д.2. Каскадні хімічні реакції



Радіоактивний розпад можливий, коли він є енергетично вигідним, тобто повинен супроводжуватися виділенням енергії. Умовою цього є перевищення маси  $M$  вихідного ядра суми мас  $m_i$  продуктів розпаду:  $M > \sum m_i$ . Ця умова є необхідною, проте не завжди достатньою. Розпад може бути заборонений іншими законами збереження – закон збереження імпульсу, електричного заряду, баріонного заряду тощо [25].

Радіоактивний розпад характеризується часом життя радіоактивного ізотопу, типом випромінювання частинок та їх енергіями. Основними типами радіоактивного розпаду є  $\alpha$ -розпад (випромінювання атомним ядром  $\alpha$ -частинки);  $\beta$ -розпад (випромінювання атомним ядром електрона та антineйтрино, по-зитрона і нейтрино, поглинання ядром атомного електрона з випроміненням нейтрино);  $\gamma$ -розпад (випромінювання атомним ядром  $\gamma$ -квантів); спонтанне ділення (розпад атомного ядра на два уламки) [25].

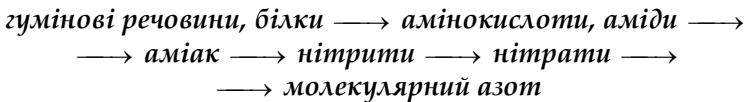
У результаті розпаду радіоактивних речовин можуть мігнути виникати як більш, так і менш радіоактивні речовини. Так в результаті розпаду плутонію-241 з періодом піврозпаду 14,4 роки утворюється дуже токсичний америцій-241 з періодом піврозпаду 432,6 роки. В той же час результатом розпаду дуже шкідливого стронцію-90 з періодом піврозпаду 28,8 років є радіоактивний ітрій-90 з періодом піврозпаду 64 години.

### || Д.2. Каскадні хімічні реакції

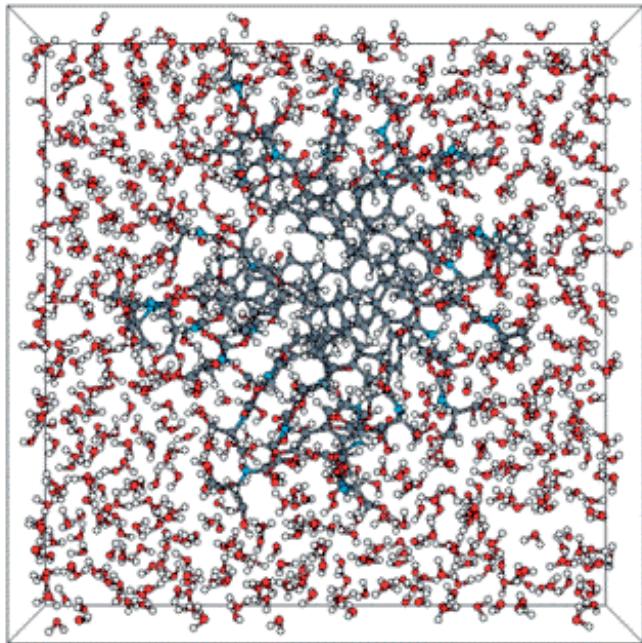
Каскадні перетворення достатньо поширені серед звичайних хімічних реакцій, часто деградації техногенних забруднень, де в якості частинок з невикористаними зв'язками виступають

## Додатки

вільні атоми або радикали. Поява в середовищі необхідної частинки викликає каскад відповідних реакцій, який продовжується до втрати частинки-носія реакції [4, 59]. За таким механізмом протікають реакції крекінга, горіння, полімеризації та низка інших. Наприклад, розпад органічних азотовмісних речовин у ґрунтах в загальному вигляді подається наступною схемою [59]:

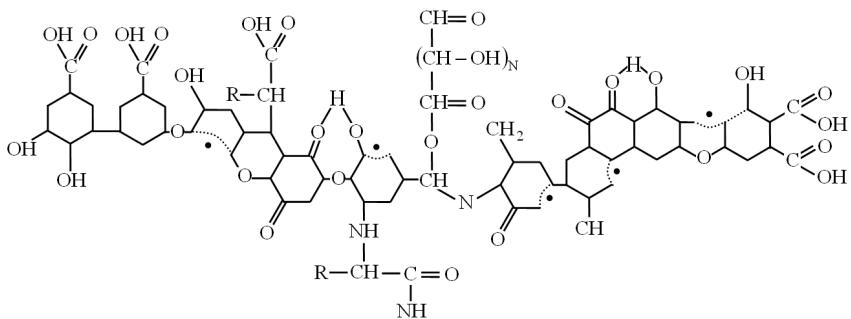
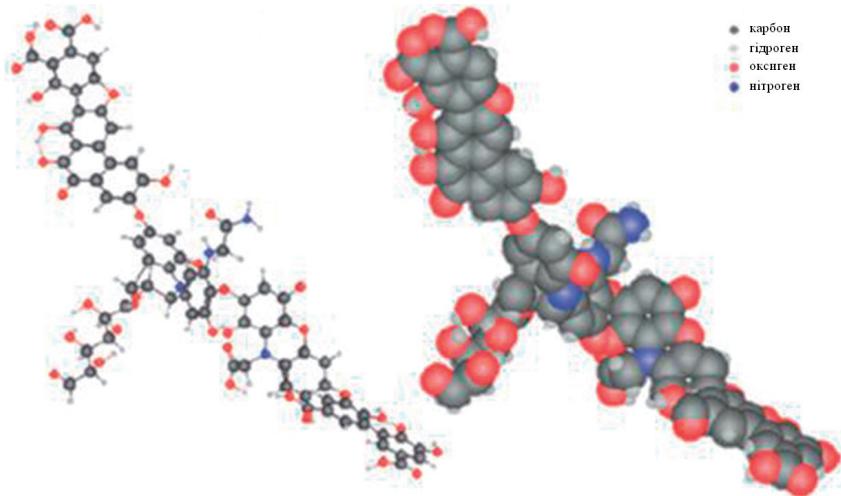


Приклад розрахункової тривимірної моделі гумінової кислоти наведено на рис. Д.3 [62].

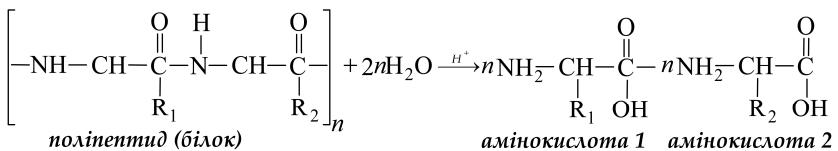


*Рис. Д.3. Модель гумінової кислоти*

При цьому гіпотетична структура фрагменту гумінової кислоти  $C_{308}H_{335}O_{90}N_5$  має вигляд [97, 106]

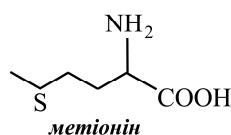
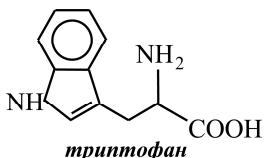
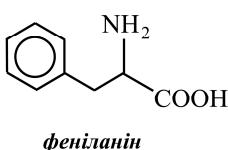
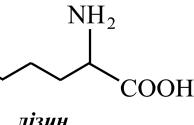
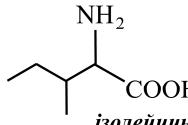
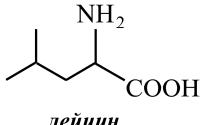
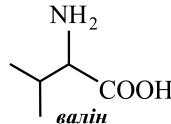
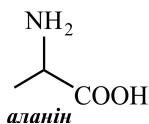
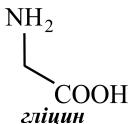


Атомну формулу хімічної реакції перетворення білків на прикладі поліпептидів у амінокислоти можна записати наступним чином [51]

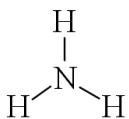


В складі будь-якої амінокислоти знаходяться аміно група  $\text{NH}_2$  та карбоксильна група  $\text{COON}$ . Приклади амінокислот – структурних блоків білків схематично можна подати так [1]

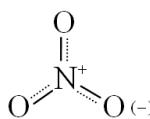
## Додатки



Нижче наведено молекули та структурні формули аміака, нітрату, нітриту і молекулярного азоту [63]



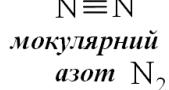
аміак  $\text{NH}_3$



нітрат  $\text{NO}_3$

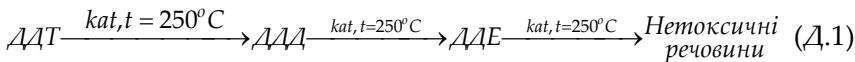


нітрит  $\text{NO}_2$



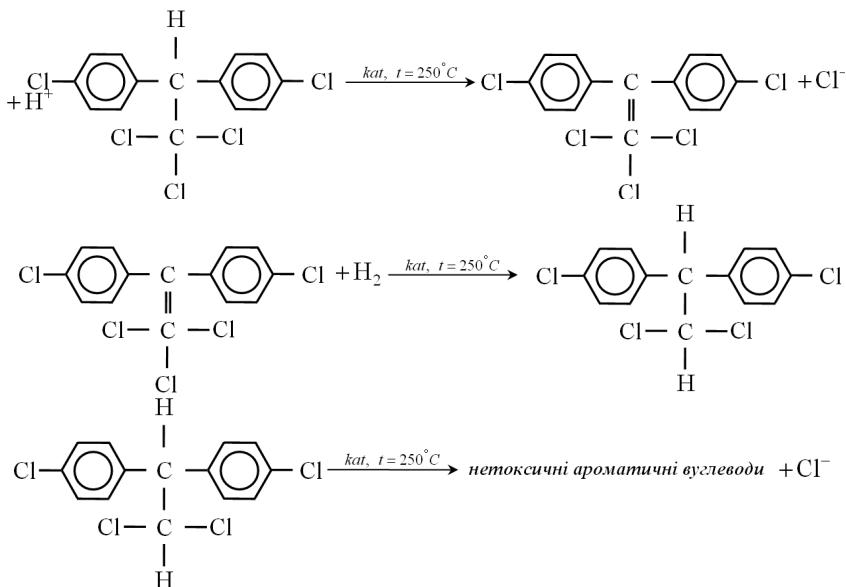
молекулярний  
азот  $\text{N}_2$

Прикладом розпадних токсичних забруднень у природному середовищі можуть бути пестициди, гербіциди, інсектициди, а також радіонукліди. Так, наприклад, ДДТ розкладається з відщепленням  $\text{HCl}$  і утворенням речовини, що володіє менш вираженими інсектицидними властивостями – ДДЕ – дихлордифенілдихлоретилену [84]. Схема термокатаалітичного розпаду дихлордифенілтрихлорметану (ДДТ) є такою [40, 73]:



тут ДД – дихлордифенілдихлоретан, ДДЕ – дихлордифенілдихлоретилен.

З використанням класичних хімічних формул схема (Д.1) має вигляд



Зазначимо, що за одними даними період піврозпаду ДДТ у ґрунтах складає 12–16 років [40], а за іншими – 15–20 років [56].

### || Д.3. Каскадний механізм та його стадії хімічних реакцій

Каскадні реакції відносяться до складних реакцій і можуть складатися з багатьох елементарних стадій. При цьому каскадні реакції завжди мають три стадії: зародження ланцюга (каскаду); продовження (розвиток) ланцюга; обрив ланцюга. Зародження ланцюга у тепловій реакції відбувається в результаті диссоціації молекул при нагріванні. У фотохімічних реакціях зародження ланцюга відбувається при поглинанні кванта світла. На стадії розвитку ланцюга утворюються молекули продуктів реакції і одночасно з'являється нова активна частинка, яка здатна продовжити ланцюг. На стадії обриву відбувається зникнення (деактивація) активної частинки.

М. Боденштейн запропонував принцип стаціонарної концентрації проміжних продуктів ланцюгових реакцій, за яким швидкість генерування активних частинок на стадії зародження дорівнює швидкості їх зникнення на стадії обриву [21]. Тобто,

якби швидкість обриву була більшою швидкості зародження ланцюгів, кількість активних частинок зменшилася би до нуля, і реакція сама би зупинилася. У випадку превалювання швидкості зародження, кількість активних частинок зростала би з часом, що у певний момент призвело би до вибуху [22].

Найбільш енергомісткою стадією ланцюгового процесу є реакція ініціювання, тобто первинного утворення активних частинок. При цьому при радіаційно-хімічному або фото ініціюванні ланцюгова реакція може протікати при відносно низьких температурах, оскільки енергії активації реакцій продовження ланцюга зазвичай є невеликими. У випадку термічного ініціювання, тобто реакції гомолітичного розриву зв'язку необхідно підвищення температури на десятки або сотні градусів [55].

Основною ознакою ланцюгових реакцій є перевищенння швидкості реакцій над швидкістю ініціювання. Їх відношення характеризує середню довжину ланцюга  $v$ . Середній час розвитку ланцюга, тобто характерний час виходу реакції на стаціонарний режим, визначається як  $\tau_{\text{ланцюга}} = v\tau_{\text{ланки}}$ , де  $\tau_{\text{ланки}}$  - час розвитку ланки ланцюга [55]. Цей час дорівнює сумі характерних часів всіх реакцій циклу продовження ланцюга (ланки ланцюга). Час нестаціонарного протікання реакції зазвичай складає долі секунди, тобто набагато менше характерного часу реакції [55].

Каскадні реакції поділяються на аніонні, катіонні, радикальні, перициклічні, фотохімічні, каталіз переходними металами, окислювальні та відновлювальні, а також ферментативні. У такій градації за основу взятий механізм кожної стадії, на якій виникають нові зв'язки [16, 31].

Так, наприклад, початковою стадією аніонної каскадної реакції є атака аніона (карбаніон, алкоголят або алкоксид) або незарядженого нуклеофіла (амін, спирт) на електрофільний центр. Утворення хімічного зв'язку відбувається з виникненням нової аніонної функції, яка може піддаватися поодальшим перетворенням. Типові представники – це аннелювання за Робінсоном, подвійна реакція Міхаеля, циклізація Пікте-Шпенглера, реакція Кневенагеля [61, 110, 112].

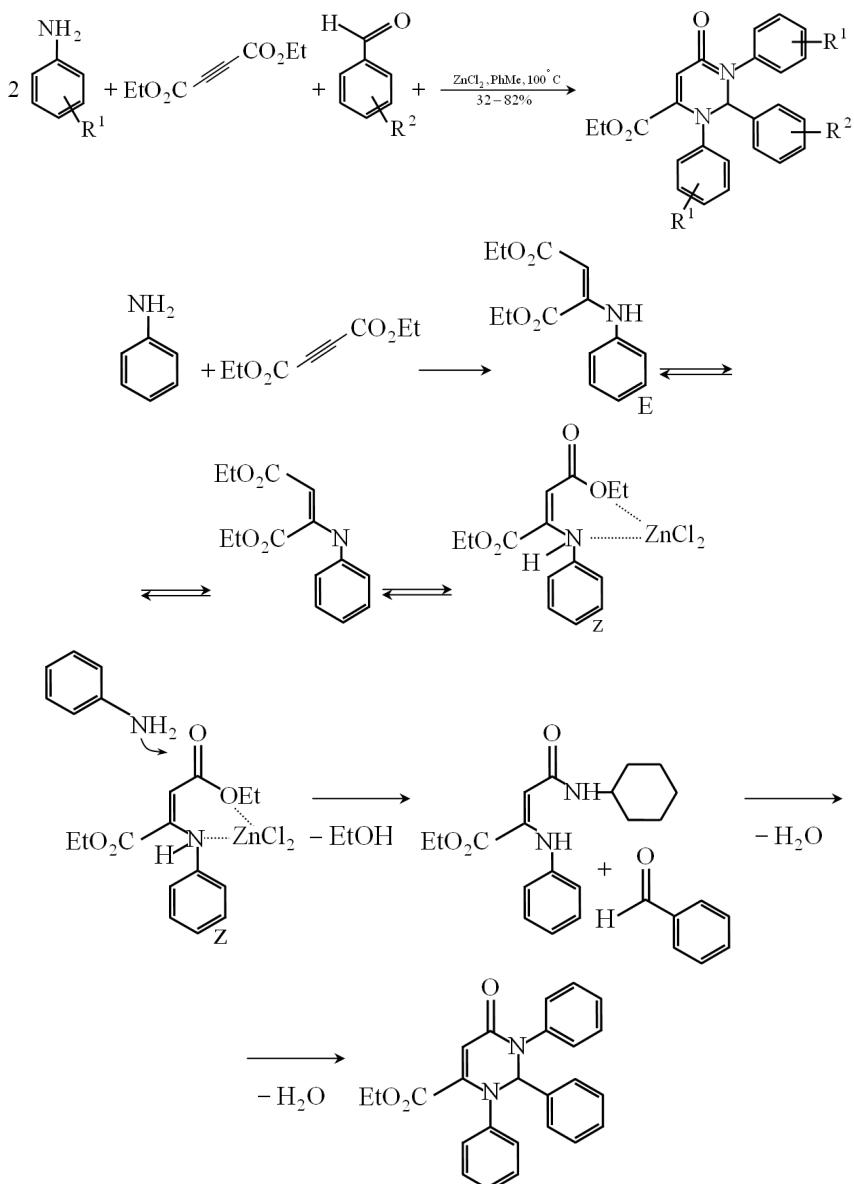
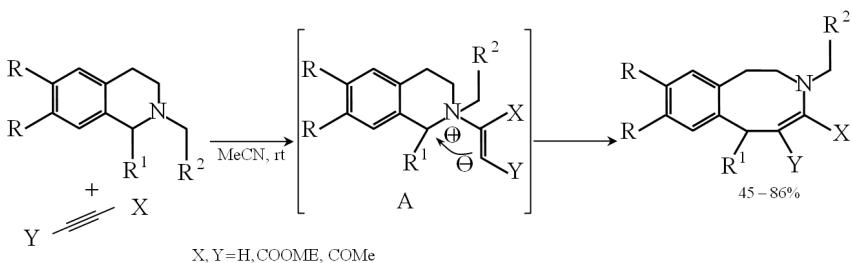


Схема синтезу (гетеро) аннельованих азоцинів з відповідних тетрагідропірідинів та активованих алкінів має вигляд [110]



До типу катіонних каскадних реакцій відносять реакції, в яких на ініційованій стадії утворюються карбокатіони. Типовим прикладом є реакція алкена, циклоалкану або оксирана з протонною кислотою або кислотою Льюїса, відщеплення молекули води від спирту або молекули спирта від ацетала, а також приєднання протону до карбонільних з'єднань [101].

До радикального типу відносять реакції, в яких на ініційованій стадії утворюються радикали. Для радикальних процесів характерна толерантність до активних функціональних груп (наприклад, вільних підроксильних та аміно-груп), а також складно ефірних та кетонних функцій. Як правило, вільнорадикальні доміно-процеси характеризуються послідовністю внутрішньо молекулярних стадій. Основна вимога для ефективного протікання реакції – швидкість кожної індивідуальної стадії повинна бути вищою ніж швидкість обриву ланцюга [104].

Зазначимо, що каскадні реакції використовуються у нафтопереробній галузі. Так, для переробки важких наftових залишків і дистиляційної сировини використовують обладнання термічного крекінгу. На відміну від атмосферної та вакуумної перегонки, за яких наftопродукти отримують фізичним розділенням наftи на відповідні фракції, котрі відрізняються за температурами кипіння, термічний крекінг є хімічним процесом, що відбувається під впливом високої температури і тиску. При термічному крекінгу одночасно протікають реакції розпаду, ущільнення і перегрупування.

В органічному синтезі широко розповсюджені реакції, які протікають за ланцюговим механізмом. Ланцюговий автокаталітичний характер цих реакцій пояснюється тим, що в їх ході здійснюється стала регенерація активних частинок процесу – вільних радикалів, концентрація яких визначає його швидкість.



Реакції полімеризації молекул ненасичених або циклічних мономерів зазвичай підпорядковуються законам ланцюгових процесів і називаються ланцюговою полімеризацією. У результаті ланцюгової полімеризації енергія, що вивільняється в результаті одного акту реакції, не розсіюється в оточуюче середовище, а передається іншій молекулі і збуджує новий акт реакції.

Іншим прикладом ланцюгового процесу є процес ланцюгової поліконденсації. Високомолекулярні продукти поліконденсації, які утворилися, можуть вступати в реакції з радикалами так само, як асфальтени. Продуктом реакції в основному є зшитий тривимірний полімер – карбоїди. Незшиті макромолекули речовини, що екстрагуються сірководнем з коксу – карбени. Різниця у кінетиці розкладу наftових нативних асфальтенів і асфальтенів вторинного походження викликана різними механізмами обриву ланцюгів.

Каскадні реакції зустрічаються і у газофазних системах [88]. До ланцюгових реакцій відносяться багато атмосферних та стратосферних процесів, наприклад, окислення метана та  $\text{NO}$ , утворення  $\text{H}_2\text{SO}_4$  у хмарних каплях, які містять  $\text{HSO}_3^-$  (кислотні дощі), розклад озону під дією  $\text{OH}$ ,  $\text{HO}_2$ ,  $\text{NO}$ ,  $\text{NO}_2$ ,  $\text{Cl}$ ,  $\text{ClO}$ . Зокрема,  $\text{Cl}$  і  $\text{ClO}$  утворюються з хладонів, і їх наявність вражається одним з основних факторів, які призводять до зменшення концентрації стратосферного озону.

Якщо на кожній стадії реакції утворюється лише одна частинка-носій, то така ланцюгова реакції є нерозгалуженою. При цьому нерозгалужена ланцюгова реакція не може привести до значного енерговиділення.

#### || Д.4. Кінетичні закономірності нерозгалужених ланцюгових реакцій

У початковий момент часу концентрація носіїв ланцюга в реагуючій хімічній системі дорівнює нулю. При введенні ініціатора або при енергетичному впливі на систему починається утворення носіїв ланцюга зі швидкістю ініціювання  $w_i$ . Одночасно відбуваються реакції продовження ланцюга, які характеризуються відносно невеликими енергіями активації, і практич-

но безактиваційним процесом обриву ланцюга на стінці або в об'ємі ємності. Якщо реакції на стінці є основним каналом ініціювання та обриву ланцюга, то швидкість ланцюгової реакції не залежить від відношення площин поверхні ємності  $S$  до його об'єму  $V$ , як і у тому випадку, якщо ініціювання та обрив ланцюга відбувається в об'ємі. В інших випадках швидкість ланцюгової реакції залежить від відношення  $S/V$ . Зазвичай одна з ланок-реакцій ланцюга характеризується більшою (у порівнянні з іншими ланками) енергією активації і є швидкістю визначальною (лімітуюча стадія) [73]. Її швидкість дорівнює швидкостям всіх інших реакцій циклу продовження ланцюга  $w_{pr}$ , проте концентрація радикалів, що беруть участь у лімітучій стадії є найбільшою.

Участь носіїв ланцюга у циклі його продовження не впливає на їх концентрацію у системі, оскільки у циклі продовження ланцюга відбувається їх регенерація. Кількість носіїв ланцюга  $n$  в одиниці об'єму у кожний момент часу  $t$  в найпростішому випадку обриву на стінці можна подати звичайним диференціальним рівнянням

$$\frac{dn}{dt} = w_i - gn, \quad (D.2)$$

де  $g$  - так званий фактор обриву ланцюга, який дорівнює константі швидкості  $k_0$  обриву ланцюга на стінці.

З рівняння (D.2) випливає:

$$n = (w_i/g) [1 - e^{-gt}] . \quad (D.3)$$

З отриманого співвідношення (D.3) випливає, що  $n = 0$  при  $t = 0$  і з часом  $n$  досягає значення  $w_i/k_0$  (стаціонарний режим). Швидкість ланцюгової реакції  $w$  пропорційна  $n$  і зростає від  $w = 0$  до значення, яке визначається виразом:

$$w = k_{pr}[A]w_i/k_0 , \quad (D.4)$$

де  $[A]$  - концентрація реагенту, що піддається перетворенню за каскадним механізмом,  $k_{pr}$  - константа швидкості продовження ланцюга.



Як правило, розрізняють два режими протікання процесу: нестаціонарний, що відповідає зростанню швидкості  $w$ , і стаціонарний, за якого величини  $n$  і  $w$  мають сталі значення. Характерні значення константи швидкості обриву ланцюга  $k_0$  - десятки  $s^{-1}$ , тому згідно з (Д.3) період нестаціонарності зазвичай характеризується долями секунди. Якщо довжина ланцюга  $v$  є малою, у виразі для швидкості реакції необхідно врахувати швидкість витрати реагентів на стадії ініціювання та швидкість можливого утворення продуктів на стадії обриву ланцюга. Проте, як правило, число  $v$  складає  $10 \div 10^3$ , і швидкість ланцюгової реакції практично дорівнює швидкості кожній з реакцій продовження ланцюга, згідно з виразом (Д.4).

При введенні інгібітору  $In$  виникає додатковий канал знищення носіїв ланцюга (константа швидкості  $k_{In}$ ). Тоді швидкість ланцюгової реакції приймає значення  $\bar{w}$ :

$$\begin{aligned}\bar{w} &= k_{pr}[A]w_i/(k_0 + k_{In}[In]), \\ w/\bar{w} &= 1 + k_{In}[In]/k_0,\end{aligned}\tag{Д.5}$$

де  $[In]$  - концентрація інгібітору.

Якщо швидкість  $k_{In}$  невелика, то для помітного уповільнення ланцюгової реакції необхідне додавання інгібітору в такій концентрації  $[In]$ , щоб значення  $k_{In}[In]$  і  $k_0$  були співвимірні. Витрата інгібітору буде відбуватися зі швидкістю, меншою ніж  $w_i$ , а оскільки початкова концентрація  $[In]_0$  є суттєвою величиною, то її зменшення у процесі реакції може бути невеликим. Відповідно реакція буде протікати тривалий час зі швидкістю рівною або близькою до значення, яке визначається виразом (Д.5), де  $[In] \approx [In]_0$ . Якщо ж константа швидкості  $k_{In}$  є настільки великою, що вже при малих  $[In]$  справджується нерівність  $k_{In}[In] \gg k_0$ , тоді на протязі деякого часу (поки виконується ця нерівність) швидкість утворення продукту буде нехтовно малою у порівнянні зі швидкістю ланцюгової реакції  $w$  за відсутності

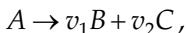
інгібітору. По мірі витрачання  $In$ , що протікає практично зі швидкістю ініціювання  $w_i$ , швидкість ланцюгової реакції у присутності інгібітору  $\bar{w}$  достатньо швидко досягне значення  $w$ .

Розрахунок швидкості ланцюгових реакцій у загальному випадку виконується з допомогою метода квазістанціонарних концентрацій [88]. Цей метод застосовний до частинок, концентрація яких через високу реакційну здатність є на багато порядків меншою ніж концентрація реагентів. Для кожного з носіїв ланцюга  $R^*$  складають диференціальне рівняння, яке прирівнюють похідну  $d[R^*]/dt$  до суми швидкостей усіх реакцій, в яких  $R^*$  утворюється і знищується.

Інший метод розрахунку швидкості використовують для ланцюгових реакцій з довжинами ланцюга  $v \gg 10$ , коли можна знехтувати можливим вкладом швидкостей ініціювання та обриву ланцюга у загальну швидкість реакції, тобто у тих випадках, коли загальна швидкість  $w$  дорівнює швидкості  $w_{pr}$  реакцій циклу продовження ланцюга (вини всі мають однакову швидкість) і  $w_i = w_0$ . Станціонарну концентрацію носіїв ланцюга, які приймають участь в реакціях обриву, визначають з кінетичного рівняння  $w_i = w_0$  і потім розраховують  $w$  [88].

Щодо швидкості радіоактивного розпаду, то радіоактивний розпад є результатом внутрішньоядерних процесів і не пов'язаний із взаємодією між різними ядрами. Тому реакція радіоактивного розпаду описується кінетичним рівнянням першого порядку [60].

Для рівняння реакції першого порядку в загальному вигляді



де  $v_i$  ( $i = 1, 2$ ) – стехіометричні коефіцієнти відповідних речовин, кінетичне рівняння згідно з основним постулатом хімічної кінетики [60] має вигляд

$$\frac{dx}{dt} = k(a - x), \quad (4.6)$$



де  $a$  - кількість молів речовини  $A$  у початковий момент часу,  $x$  - кількість молів речовини  $A$ , що перетворилася до моменту часу  $t$ ,  $k$  - константа швидкості реакції першого порядку розмірності  $[c^{-1}]$ .

Розділюючи змінні у рівнянні (Д.6) та інтегруючи в межах від 0 до  $x$  і від 0 до  $t$ , одержимо

$$\int_0^x \frac{d\xi}{a-\xi} = k \int_0^t d\tau.$$

Звідки знаходимо

$$\ln \frac{a}{a-x} = kt \quad \text{або} \quad k = \frac{1}{t} \ln \frac{a}{a-x}. \quad (\text{Д.7})$$

Оскільки формула (Д.7) містить відношення кількостей (або концентрацій)  $a$  та  $(a-x)$ , значення  $k$  не зміниться, якщо це відношення замінити відношенням числа молекул або інших величин, пропорційних числу молей. Отже, формулу (Д.7) можна записати у вигляді

$$k = \frac{1}{t} \ln \frac{a}{a-x} = \frac{1}{t} \ln \frac{N_0}{N} = \frac{1}{t} \ln \frac{c_0}{c}. \quad (\text{Д.8})$$

Тут  $c_0$ ,  $c$  - початкова і біжуча концентрації речовини  $A$ ,  $N_0$ ,  $N$  - початкове і біжуче число молекул речовини  $A$ .

Потенціювання рівняння (Д.8) призводить до експонент-ціальної залежності від часу кількостей речовини  $A$ , що прореагувала і не прореагувала:

$$x = a(1 - e^{-kt}), \quad a - x = e^{-kt}. \quad (\text{Д.9})$$

Ці дві криві мають точку перетину  $x = a/2$ . Час  $\tau_{1/2}$ , за який прореагує половина вихідної кількості речовини  $A$ , називається часом напівперетворення або часом піврозпаду речовини  $A$  у випадку реакцій першого порядку.

Якщо в рівнянні (Д.9) покласти  $t = \tau_{1/2}$  і  $c = c_0/2$ , то одержимо  $\tau_{1/2} = \ln 2/k$ . Звідки випливає, що в реакціях першого порядку час піврозпаду не залежить від кількості (концентрації) вихідної речовини.

### ||| Д.5. Радіоактивні елементи в ґрунтах

Радіоактивність ґрунтів обумовлена вмістом у них радіонуклідів. При цьому розрізняють природну і штучну (техногенну) радіоактивності.

Природна радіоактивність викликана природними радіоактивними ізотопами, які завжди у тих чи інших кількостях знаходяться в ґрунтах та ґрунтоутворюючих породах. Значна частина природних первинних радіонуклідів представлена важкими елементами з порядковими номерами  $Z > 82$ . Вони утворюють 3 радіоактивні сімейства (табл. Д.1).

*Таблиця Д.1. Природна радіоактивність деяких елементів*

Назва сімейства	Родонаочальник сімейства	Період напіврозпаду (роки)	Число радіоактивних ізотопів, що послідовно розпадаються	Кінцевий елемент (стабільний ізотоп свинцю)
Урана	$^{238}\text{U}$	$4.5 \cdot 10^9$	14	$^{206}\text{Pb}$
Актиноурана (актинія)	$^{235}\text{U}$ ( $^{235}\text{Ac}$ )	$7.13 \cdot 10^8$	11	$^{207}\text{Pb}$
Торія	$^{232}\text{Th}$	$1.39 \cdot 10^{10}$	11	$^{208}\text{Pb}$

Природні радіонукліди розділяють на 3 групи. Перша група включає радіоактивні елементи, всі ізотопи яких теж є радіоактивними: уран ( $^{238}\text{U}$ ,  $^{235}\text{U}$ ), торій ( $^{232}\text{Th}$ ), радій ( $^{226}\text{Ra}$ ) і радон ( $^{222}\text{Rn}$ ,  $^{220}\text{Rn}$ ). До другої групи належать ізотопи «звичайних» елементів, які володіють радіоактивними властивостями: калій ( $^{40}\text{K}$ ), рубідій ( $^{87}\text{Rb}$ ), кальцій ( $^{48}\text{Ca}$ ), цирконій ( $^{96}\text{Zr}$ ) та інші. Третю групу складають радіоактивні ізотопи, які утворюються в атмосфері під дією космічних променів: тритій ( $^{3}\text{H}$ ), берилій ( $^{7}\text{Be}$ ,  $^{10}\text{Be}$ ) та вуглець ( $^{14}\text{C}$ ).

Сумарний вміст природних радіоактивних ізотопів в основному залежить від ґрунтоутворюючих порід. При цьому ґрунти, що сформувалися на продуктах вивітрювання кислих порід, містять більше радіоактивних ізотопів, ніж ті, що утворилися на основних та ультра основних породах, а важкі ґрунти їх містять більше ніж легкі (табл. Д.2, Д.3) [59].



Таблиця Д.2. Вміст важких металів в кислих та основних породах, мг/кг [26]

Елемент	Середній граніт	Середній базальт	Елемент	Середній граніт	Середній базальт
Ti	2400	6700	Ni	4	150
Mn	400	1500	Sn	3	1
Sr	285	465	Co	2	48
Zr	140	110	Mo	2	1
V	40	250	As	1.5	2
Pb	30	5	Tl	1	0.1
Cr	10	200	Cd	0.2	0.2
Cu	10	100	Ag	0.04	0.1

Таблиця Д.3. Оцінка середнього вмісту (кларки) важких металів, мг/кг [26, 59]

Елемент	У гранітному шарі	У земній корі в цілому	
		за А.П. Виноградовим	за Тейлором
Hg	0.033	0.08	0.08
Se	0.14	0.05	0.05
Cd	0.16	0.13	0.2
Sb	0.2	0.5	0.2
Mo	1.3	1.1	1.5
Tl	1.8	1.0	0.43
As	1.9	1.7	1.8
Sn	2.7	2.5	2.0
Co	7.3	18	25
Pb	16	16	12.5
Cu	22	47	55
Ni	26	58	75
Zn	51	83	70
V	76	90	135
Sr	230	340	375
Cr	340	83	100
Mn	700	1000	950
Ti	3300	4500	5700

Граніти у порівнянні з базальтами збіднені більшістю важких металів. Виключення складають свинець, молібден, сурма і телур [59]. Різні автори наводять неоднакові оцінки середнього вмісту (кларків) тих самих елементів (табл. Д.3), що пояснюється наслідком різниці в об'ємі і складі вибірки.

Природні радіоактивні елементи розподіляються по профілю ґрунтів, як правило, рівномірно, проте у деяких випадках во-

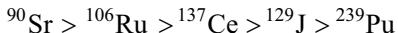
## Додатки

ни акумулюються в ілювіальних та глеєвих горизонтах. Природні радіоактивні елементи у ґрунтах та породах переважно присутні у міцнозв'язаній формі.

Штучна (техногенна) радіоактивність ґрунтів обумовлена надходженням у ґрунт радіоактивних ізотопів, які утворюються в результаті атомних і термоядерних вибухів; у вигляді відходів атомної промисловості або в результаті аварій на атомних підприємствах. Відомо більше 1000 видів штучних радіонуклідів (тоді як природних – більше 300). Найбільш небезпечними вважаються штучні радіонукліди  $^{239}\text{Pu}$ ,  $^{137}\text{Cs}$ ,  $^{90}\text{Sr}$ ,  $^{131}\text{I}$ .

Основними джерелами випромінювання при ядерних вибухах і низки аварій є продукти ділення, наведена нейтронами активність, трансуранові елементи і тритій. При ядерних вибухах широко поширюється  $^{89}\text{Sr}$  і  $^{90}\text{Sr}$ , а при аваріях –  $^{137}\text{Cs}$ . У перші місяці після ядерного вибуху основну небезпеку складають у суміші уламків ділення ізотопи  $^{131}\text{I}$ ,  $^{140}\text{Ba}$  і  $^{89}\text{Sr}$ , а в подальшому –  $^{90}\text{Sr}$  і  $^{137}\text{Cs}$ . Більшість радіонуклідів, які утворюються, є бета- та гама-випромінювачами ( $^{131}\text{I}$ ,  $^{137}\text{Cs}$ ,  $^{140}\text{Ba}$  тощо), інші випромінюють тільки бета- і альфа-частинки ( $^{144}\text{Nd}$ ,  $^{147}\text{Sm}$ ).

Штучні радіонукліди закріплюються в основному (до 80-90%) у верхньому шарі ґрунту: на цілині – в шарі 0-10 см, на ріллі – в орному горизонті. Найбільшою сорбцією володіють ґрунти з високим вмістом гумусу, важким гранулометричним складом, багаті монтморилонітом і гідрослюдами, а також з непромивним типом водного режиму. За ступенем рухливості в ґрунтах радіонукліди утворюють ряд



При випадінні в невеликих кількостях більшість штучних радіонуклідів міцно сорбуються поглинаючим комплексом і майже не включаються у біологічний кругообіг. Виключення складають  $^{65}\text{Zn}$ ,  $^{89}\text{Sr}$  і  $^{90}\text{Sr}$  з найбільшою рухливістю в системі «ґрунт-рослина». Наприклад, коефіцієнт накопичення  $^{65}\text{Zn}$  при переході з води у ґрунт дорівнює 440 (мкКі/г сирої речовини)/(мкКі/мл води), цезію, кобальту і церію – лише 0.19; 0.07 і 0.03 відповідно. З більшості типів ґрунтів поступлення  $^{137}\text{Cs}$  в рослини, як правило є меншим або співвимірним до надходо-



дження  $^{90}\text{Sr}$ . Проте у певних ґрунтово-кліматичних умовах перенесення  $^{137}\text{Cs}$  в рослині може значно перевищувати перенесення  $^{90}\text{Sr}$ , наприклад, у ґрунтах Україно-Білоруського Полісся. На легких за гранулометричним складом пісканих ґрунтах накопичення  $^{137}\text{Cs}$  рослинами у 40-50 разів більше, ніж  $^{90}\text{Sr}$ .

До основних джерел надходження радіонуклідів в оточуюче середовище при спаленні вугілля на електростанціях відносять винос частинок вугілля з відкритих майданчиків вуглексової (вуглевиніс) і золовідвал. При згорянні більша частина мінеральної фракції вугілля плавиться і утворює зольний залишок, значна частка якого залишається у вигляді шлаку. Важки частинки при цьому попадають в золу, однак найлегша частина золи («летюча зола») разом з потоком газу виносиється в трубу електростанції, забруднюючи навколошні райони у тому числі радіонуклідами.

Сумарний викид радіонуклідів на вугільних електростанціях складає в середньому біля  $1.33 \cdot 10^{10}$  Бк на 1 ГВт·г. В табл. Д.4 наведені середньорічні викиди радіонуклідів ТЕС США з розрахунку на 1 ГВт·г. Основну частку вносять ізотопи радона, які сумарно складають  $1.2 \cdot 10^{10}$  Бк на кожний ГВт·г електроенергії.

Таблиця Д.4. Середньорічні викиди радіонуклідів теплової станції

Радіонуклід	Бк/ГВт·г	Період піврозпаду
$^{220}\text{Rn}$	$4.07 \cdot 10^9$	55.6 с
$^{222}\text{Rn}$	$8.14 \cdot 10^9$	3.8 діб
$^{238}\text{U}$	$5.55 \cdot 10^7$	4.5 млрд. років
$^{234}\text{U}$	$5.55 \cdot 10^7$	245 тис. років
$^{226}\text{Ra}$	$4.44 \cdot 10^7$	1600 років
$^{218}\text{Po}$	$1.41 \cdot 10^8$	3 хв.
$^{214}\text{Pb}$	$1.41 \cdot 10^8$	27 хв.
$^{214}\text{Po}$	$1.41 \cdot 10^8$	0.00016 с
$^{210}\text{Pb}$	$1.41 \cdot 10^8$	22 роки
$^{210}\text{Po}$	$1.41 \cdot 10^8$	138 діб
$^{216}\text{Po}$	$8.88 \cdot 10^7$	0.15 с
$^{212}\text{Pb}$	$8.88 \cdot 10^7$	11 годин
$^{40}\text{K}$	$1.96 \cdot 10^8$	1.3 млрд. років

У продуктах згоряння відбувається концентрація мікроелементів, в тому числі радіонуклідів. Ступінь такої концентрації залежить від багатьох факторів: первісна концентрація радіонуклідів у вугіллі, зольність, способи спалювання тощо. За рахунок термохімічних процесів особливо інтенсивно накопичується в золі ізотоп  $^{210}\text{Pb}$ , збільшуючи його концентрацію у 5-10 разів. Відомо, що свинець та його сполуки токсичні. Зокрема, потрапляючи в організм, свинець накопичується в кістках і викликає їх руйнування.

Тонкі фракції летючої золи збагачені різними шкідливими речовинами: крім радіонуклідів вони містять важкі метали та мікроелементи Co, V, Cu, Zn, Cr, Ni, Cd, As, Be.

До основних джерел забруднення радіацією, що впливають на значне забруднення біосфери відносять такі чинники, як [45]:

- видобуток і переробка радіоактивного мінеральної сировини;
- вугілля як джерело природної радіації;
- ядерна енергетика;
- теплові електростанції;
- полігони для випробування ядерної зброї;
- ядерні вибухи в мирних цілях;
- забруднення морів атомними кораблями;
- аварій штучних супутників землі і літаків;
- боєприпаси зі збідненим ураном;
- радіоактивні відходи;
- «космічне сміття».

У радіаційному відношенні теплові електростанції є шкідливіші ніж атомні, оскільки вугілля, торф і газ, які на них спалюються, містять природні радіонукліди сімейств урана і торія. Середні індивідуальні дози опромінення в районах розташування теплових електростанцій потужністю 1ГВ/рік складають від 6 до 60 мкЗв/рік, а від викидів АЕС – від 0.004 до 0.13 мкЗв/рік. При цьому найбільшу небезпеку становлять ТЕС, що працюють на вугіллі. Під час спалення вугілля більша частина урану, торію та



продуктів їхнього розпаду виділяються з вихідної матриці вугілля і розподіляються між газовою і твердою фракціями. Майже 100% присутнього радону переходить у газову фазу і виходить разом з димовими газами.

### || Д.6. Хімічне забруднення ґрунтів

Хімічне забруднення – це надходження в оточуюче середовище забруднювачів у вигляді хімічних речовин, які утворюються безпосередньо під час природно-антропогенних та антропогенних процесів (первинне забруднення) або утворення шкідливих та небезпечних забруднювачів під час фізико-хімічних процесів у середовищі (вторинне забруднення).

Джерела техногенно-хімічного забруднення поділяють умовно на 4 групи:

- технічні установки та прилади для викидів в оточуюче середовище газоподібних, рідких та твердих виробничих відходів;
- господарські об'єкти, що виробляють забруднюючі речовини або накопичують та зберігають відходи (полігони відходів);
- регіони, з якого надходять забруднюючі речовини (при трансграничному перенесенні);
- планетарне забруднення, забруднені атмосферні опади, побутові, промислові і сільськогосподарські стічні води.

За джерелами надходження в оточуюче середовище виділяють такі групи хімічних речовин: промислові, енергетичні, транспортні (наприклад, від автомобілів), сільськогосподарські, побутові та інші.

Для природних екосистем та людини найнебезпечнішим є антропогенне забруднення ґрунтів, особливо техногенного походження. До характерних забруднювачів відносяться пестициди, добрива, важкі метали та інші речовини промислового походження.

## *Додатки*

---

До основних джерел забруднення ґрунтів відносять наступні:

» Атмосферні опади у вигляді дощу, снігу тощо. Атмосферні опади, вимиваючи з атмосфери газоподібні забруднюючі речовини, призводять до зростання концентрації сірчаної, азотної та інших кислот в ґрунті, що супроводжується її закисленням та пониженням врожайності. Атмосферні аерозолі у рідкій та твердій фазах, які поступають в ґрунт з опадами, мають, як правило, складний хімічний склад і сприяють накопиченню у ґрунтах важких металів та різноманітних органічних речовин, включаючи небезпечні вуглеводні.

» Скидання твердих та рідких відходів промислового і побутового походження. Промислові та побутові відходи сприяють накопиченню у ґрунтах важких металів, вуглеводнів, включаючи небезпечні токсичні хлор-, фтор-, фосфоровмісні сполуки, які володіють канцерогенною дією.

» Використання пестицидів та добрив у сільськогосподарському виробництві. Масоване застосування добрив, інсектицидів та хімічних отрут для знищення шкідників призводить до потрапляння в ґрунт неприродніх для нього токсичних сполук. Вапнування також є джерелом забруднення важкими металами (табл. Д.5) [8, 27].

*Таблиця Д.5. Агротехнічні джерела забруднення ґрунтів важкими металами, мг/кг сухої речовини [27]*

Елемент	Зрошення стічними водами	Фосфорні добрива	Вапно	Азотні добрива	Органіка	Пестициди
Cd	2-1500	0.1-170	0.04-0.1	0.05-8.5	0.3-0.8	-
Cu	50-3300	1-300	2-125	1-15	2-60	12-50
Cr	20-40600	66-245	10-15	3.2-19	5.2-55	-
Pb	50-3000	7-225	20-1250	2-27	6.6-15	60
Ni	16-5300	7-38	10-20	7-34	7.8-30	-
Zn	700-4900	50-1450	10-450	1-42	15-250	1.3-25



Важкі метали залежно від їх властивостей та властивостей ґрунтів мають різну тенденцію до перерозподілу та закріпленню у ґрутовому профілі та ґрунтах в цілому. В табл. Д.6 наведені дані щодо вмісту деяких мікроелементів у ґрунтах [59].

Таблиця Д.6. Середній вміст мікроелементів в ґрунтах, мг/кг [59]

Грунти	Cu	Zn	Co	Mn	V	Cr	Mo	B	J
Середні дані для всіх типів ґрунтів	20	50	10	850	90	70	2	10	5
Підзолісти	13	40	6	920	60	50	1.4	8	1.9
Чорноземи	29	56	9.5	800	100	90	2.5	13	3
Каштанові	35	60	9	700	70	60	3.1	50	4

Важливим фактором, від якого залежать наслідки забруднення, є форма знаходження хімічної сполуки металу-забруднювача. В роботі [32] зазначено, що вільні іони металів є більш токсичними, ніж їхні недисоційовані солі або майже нерозчинні оксиди. Крім того, в якій формі метал надходить у ґрунт, потрібно враховувати його подальшу геохімічну поведінку. Наприклад, дія важких металів залежить від того, чи утворює даний елемент органічні чи неорганічні сполуки, оскільки утворення металом хелатних комплексів знижує його токсичність. Окси迪 як практично нерозчинні сполуки важких металів чинять менш токсичну дію, ніж водорозчинні солі металів. Серед розчинних форм найменшу дію чинять нітрати, що, мабуть, пов'язано з деяким позитивним впливом на ґрутову біоту нітрат-іонів як джерела мінерального живлення рослин. В загальному можна виділити наступний ряд токсичності форм хімічних сполук важких металів:



Отже, для адекватного математичного опису фізичних, фізико-хімічних фізико-біологічних процесів тощо, прогнозування їх протікання, оптимального керування тощо під час побудови математичних моделей таких процесів, зокрема процесів масо-перенесення, що супроводжуються хімічними або ядерними пе-

ретвореннями, враховувати структуру неоднорідного середовища, взаємозв'язок фізичних і хімічних процесів, структуру складних реакцій. Оскільки в природі існує велика група реакцій, які складаються з кількох етапів, в яких кожний елементарний етап зв'язаний з попередніми і без виконання якого подальша реакція неможлива. Це каскадні або ланцюгові реакції, хімічні перетворення та ядерні процеси, в яких появляє проміжної активної частинки (вільного радикала, атома, збудженої молекули у хімічних перетвореннях, нейтрона в ядерних процесах) викликає каскад або ланцюг перетворень вихідних речовин [87, 109]. При цьому під дією зовнішніх умов і частинки вихідної субстанції, і отримані в результаті каскадних перетворень речовини на кожному етапі каскаду приймають участь у фізико-механічних процесах, що протікають у середовищі [92, 111].

## ЛІТЕРАТУРА

1. Аминокислоты. Белки: [Електрон. ресурс]. - Режим доступу: [https://www.e-reading.club/chapter.php/1016231/77/Lidin\\_Himiya.\\_Polnyy\\_spravochnik\\_dlya\\_podgotovki\\_k\\_EGE.html](https://www.e-reading.club/chapter.php/1016231/77/Lidin_Himiya._Polnyy_spravochnik_dlya_podgotovki_k_EGE.html).
2. 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.
3. Баренблат Г.И., Ентов В.М., Рыжик В.М. Теория нестационарной фильтрации жидкости и газа. – М.: Недра, 1972. – 288 с.
4. Бекман И.Н. Радиоактивность и радиация. Радиохимия. Т. 1. – МО, Щёлково: Издатель Мархотин П.Ю. 2011. – 398 с.
5. Бекман И.Н. Ядерная физика. – М.: Изд-во МГУ им. М.В.Ломоносова, 2010. – 511 с.
6. Белотухов С.Л., Слюняев Н.К., Тютюнькова М.В. Химия окружающей среды. – М.: ОО «Проспект», 2015. – 148 с.
7. Бобовникова Ц.И., Махонько К.П., Сиверина А.А., Работникова Ф.А., Гутарева В.П., Волокитин А.А. Физико-химические формы радионуклидов в атмосферных выпадениях после аварии на Чернобыльской АЭС // Атомная энергия. – 1991. – Т. 71. – Вып. 5. – С. 449-454.
8. Большов А., Головизнин В., Дыхне А., Киселев В., Кондратенко П., Семенов В. Новые подходы к оценке безопасности захоронений радиоактивных отходов // Извест. РАН. Энергетика. – 2004. – № 4. – С. 99-108.
9. Бондаренко Н.Ф. Физика движения подземных вод. – Л.: Гидрометеоиздат, 1973. - 214 с.
10. Борзилов В.А. Физико-математическое моделирование поведения радионуклидов // Природа. – 1991. – № 6. – С. 42-51.
11. 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.
12. Бурак Я.Й., Чапля Є.Я., Чернуха О.Ю. Континуально-термодинамічні моделі механіки твердих розчинів. – К.: Наукова думка, 2006. – 272 с.
13. Владимириов В.С. Уравнения математической физики. – М.: Наука, 1976. – 527 с.

## *Література*

---

14. Гіббс Д.В. Термодинаміка. Статистична фізика. – М.: Наука, 1982. – 584 с.
15. Головізний В., Киселев В., Короткін І., Юрков Ю. Прямі задачі не- класичного переноса радіонуклідів в геологіческих формаци- ях // *Ізвестия РАН. Енергетика*. – 2004. – № 4. – С. 121-130.
16. Гончаров А.І., Середа І.П. Хімічна технологія. – К.: Вища школа, 1979. – Т.1. – 288 с.
17. Гуров К.П. Феноменологическая термодинамика необратимых про- цессов: физические основы. – М.: Мир, 1978. – 128 с.
18. Грунтоведение / Под ред. акад. Е.С.Сергеева. - М.: Изд-во Московско- го ун-та, 1983. - 389 с.
19. де Гроот С.П., Мазур П. Неравновесная термодинамика. – М.: Мир, 1964. – 456 с.
20. Дей У.А. Термодинамика простых сред с памятью. – М.: Мир, 1984. – 456 с.
21. Денисов Т. Кинетика гомогенных химических реакций. – М.: Выс- шая школа, 1988. – 391 с.
22. Денисов Е.Т., Саркисов О.М., Лихтенштейн Г.И. Химическая кинети- ка. –М.: Химия, 2000. – 568 с.
23. Дъярмати И. Неравновесная термодинамика. – М.: Мир, 1974. – 304 с.
24. Жиляев А.П., Пищеничнюк А.И. Сверхпластичность и границы зерен в ультрамелкозернистых материалах. – М.: Физматлит, 2008. – 320 с.
25. Замиралов В.С., Ишханов Б.С., Капитонов И.М., Черняев А.П. Физика частиц. Законы сохранения и симметрии. – М.: Изд-во Московского ун-та, 1995. – 82 с.
26. Ильин В.Б. Тяжелые металлы в системе почва-растение. – М.: Наука, 1991. – 152 с.
27. Кабата-Пендіас А., Пендіас Х. Мікроелементи в почвах і растени- ях. – М.: Мир, 1989. - 440 с.
28. Каур И., Густ В. Диффузия по границам зерен и фаз. - М.: Машино- строение, 1991. – 448 с.
29. Климов А.Н. Ядерная физика и ядерные реакторы. – М.: Энерго- атомиздат, 2002. – 464 с.
30. Ковда В.А. Биогеохимические циклы и их нарушение челове- ком. - М.: Наука, 1976. - 355 с.
31. Колесников И.М. Катализ и производство катализаторов. – М.: Тех-ника, 2004. – 399 с.

32. Колесников С.И., Казеев К.Ш., Вальков В.Ф. Экологическое состояние и функции почв в условиях химического загрязнения. – Ростов на Дону: Ростиздат, 2006. - 385 с.
33. Колобашкин В., Рубцов П., Ружанский П., Сидоренко В. Радиационные характеристики облученного ядерного топлива. – М.: Энергоатомиздат, 1983. – 384 с.
34. Коноплев А.В., Голубенков А.В. Моделирование вертикальной миграции радионуклидов в почве (по результатам ядерной аварии) // Метеорология и гидрология. – 1991. – № 10. – С. 62-68.
35. Корн Г., Корн Т. Справочник по математике для научных работников и инженеров. – М.: Наука, 1984. – 831 с.
36. Кривохатский А.С., Смирнова Е.А., Рогозин Ю.М., Савоненков В.Г., Бирюков Е.И., Авдеев В.А., Куксов А.А., Селифонов В.Н. Радионуклиды в почве 30-км зоны Чернобыльской АЭС // Радиохимия. – 1991. – Т. 33, Вып. 1. – С. 101-107.
37. Купряжкин А.Я., Волобуев П.В., Суетин П.Е. Механизмы диффузии неона в хлориде калия // Журн. техн. физики. – 1975. – Т. 45, № 2. – С. 431-432.
38. Лариков Л.Н. Залечивание дефектов в металлах. – Киев: Наук. думка, 1980. – 279 с.
39. Левин В.Е. Ядерная физика и ядерные реакторы. – М.: Атомиздат, 1979. – 288 с.
40. Мельников Н.Н. Пестициды. Химия, технология и применение. – М.: Химия, 1987. – 712 с.
41. Мусеев М., Завершинский И. Диффузия в среде со случайно распределенными ловушками // Матем. моделирование и краевые задачи. - 2005, часть 2. – СамГТУ, Самара, 2005. - С. 185–187.
42. Мюнстер А. Химическая термодинамика. – М.: Мир, 1971. – 295 с.
43. Микитин Д.П., Новиков Ю.В. Окружающая среда и человек. - М.: Высшая школа, 1980. - 424 с.
44. Одум Ю. Экология. - М.: Мир, 1975. - 740 с.
45. Основные источники радиационного загрязнения биосферы: [Електрон. ресурс]. - Режим доступу:  
<http://nuclphys.sinp.msu.ru/ecology/ecol/ecol04.htm>.
46. Подстригач Я.С. Диффузационная теория деформации изотропной сплошной среды // Вопр. мех. реал. твердого тела. – 1964. – Вып. 2. – С. 77-99.

## *Література*

---

47. Подстригач Я.С., Каравеев А.В., Гера Б.В., Жук П.А., Чапля Е.Я. Модели тепловлагопереноса в почве и задачи идентификации их параметров по наземным измерениям и дистанционным данным в ИК-диапазоне. - Львов. - 1988. - 53 с. (Препринт АН УССР, Ин-т прикл. пробл. мех. и математики, № 19).
48. Подстригач Я.С., Шевчук П.Р. Температурные поля и напряжения в телах с тонкими покрытиями // Тепловые напряжения в элементах конструкций. - 1967. - Вып. 7. - С. 227-233.
49. Полубаринова-Кочинова П.Я. Теория движения грунтовых вод. - М.: Недра, 1977. - 664 с.
50. Пригожин И. Введение в термодинамику необратимых процессов. - М.: Изд-во иностр. литературы, 1960. - 127 с.
51. Применение гуминовых кислот: [Електрон. ресурс]. - Режим доступу: <http://www.myshared.ru/slide/396883/>.
52. Прохоров В.М. Миграция радиоактивных загрязнений в почвах. - М.: Энергоатомиздат, 1981. - 106 с.
53. Прудников А.П., Брычков Ю.А., Маричев О.И. Интегралы и ряды. Элементарные функции. - М.: Наука, 1981. - 798 с.
54. Пташник Б.Й., Ільків В.С., Кмітів І.Я., Поліщук В.М. Нелокальні країові задачі для рівнянь із частинними похідними. - Київ: Наукова думка, 2002. - 416 с.
55. Пурмаль А.П. Простая кинетика сложных реакций. - М.: Изд-во МФТИ, 2011. - 109 с.
56. Саенко О.Е., Трущина Т.П. Экологические основы природопользования. - М.: КНОРУС, 2017. - 214 с.
57. Свешников А.Г., Боголюбов А.Н., Кравцов В.В. Лекции по математической физике. - М.: Изд-во МГУ, 1993. - 352 с.
58. Седов Л.И. Механика сплошной среды. В 2-х т. - М.: Наука, 1976. - Т.1. - 526 с. - Т.2. - 576 с.
59. Середина В.П. Загрязнение почв. - Томск : Издательский Дом Томского государственного университета, 2015. - 346 с.
60. Семиохин И.А., Страхов Б.В., Осипов А.И. Кинетика химических реакций. - М.: Изд-во Московского ун-та, 1995. - 347 с.
61. Серрей А. Справочник по органическим реакциям. М.: ГХИ, 1962. - 300 с.
62. Органическое вещество: [Електрон. ресурс]. - Режим доступу: [http://zilant.kpfu.ru/kek/gidrogeo/organ\\_1.php](http://zilant.kpfu.ru/kek/gidrogeo/organ_1.php).

63. Орлова Т.Н., Дмитрий Б.А., Орлов В.Ю. Химия природных и промышленных вод. – Ярославль: Ярославский государственный универ. им. П.Г. Демидова, 2013. – 120 с.
64. Скороход В.В., Солонин Ю.М., Уваров И.Д. Химические, диффузионные и реологические процессы в технологии порошковых материалов. - Киев: Наук. думка, 1990. – 248 с.
65. Снеддон И. Преобразования Фурье. - М.: Изд-во иностр. литературы, 1955. – 667 с.
66. Справочник по специальным функциям / Под ред. М. Абрамовича и И. Стигана. – М.: Мир, 1979. – 830 с.
67. Тинсли П. Поведение химических загрязнителей в окружающей среде. - М.: Мир, 1982 . – 281 с.
68. Трудзел К. Первоначальный курс рациональной механики сплошной среды. – М.: Мир, 1975. - 592 с.
69. Углов В.В. Радиационные процессы и явления в твердых телах. – Минск: Вышэйшая школа, 2016. – 188 с.
70. Физико-химия и технология дисперсных порошков / Ред. В.В.Скороход; ИГМ АН УССР. – Киев, 1984. – 190 с.
71. Физическое металловедение. В 3-х т. / Под ред. Р.Кана. – М.: Мир, 1967. – Вып. 1. – 333 с.; 1968. – Вып. 2. – 490 с.; . – Вып. 3. – 484 с.
72. Фрид Ж. Загрязнение подземных вод. - М.: Недра, 1981. – 304 с.
73. Целищев А.Б., Лория М.Г. Термофотокатализитический способ обезвреживания хлорсодержащих органических соединений // Интегрированные технологии и энергосбережение. – 2008. – № 3. – С. 109-113.
74. Цепные реакции: [Електрон. ресурс]. - Режим доступу:  
[http://www.xumuk.ru/encyklopedia/2/серпне\\_reakcii.html](http://www.xumuk.ru/encyklopedia/2/серпне_reakcii.html).
75. Чапля Є.Я. Континуально-термодинамічний опис відкритих деформівних систем. Вихідні положення. – Львів, 1995. – 56 с. – (Препрінт/ НАН України. Центр математичного моделювання ППІММ, №12-95).
76. Чапля Є.Я., Чернуха О.Ю. Фізико-математичне моделювання гетеродифузного масопереносу. – Львів: СПОЛОМ, 2003. – 125 с.
77. Чапля Є.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 ППІММ; № 3-93).
78. Чапля Є.Я., Чернуха О.Ю. Кінетика переносу домішок при локальній зміні стану частинок (2. Гетеродифузія двома шляхами у тілі з

## *Література*

---

- пастками). – Львів, 1993. – 28 с. (Препрінт/АН України. Центр мат. моделювання ППММ; № 5-93).
79. Чапля Є., Чернуха О. Математичне моделювання дифузійних процесів у випадкових і регулярних структурах. – Київ: Наук. думка, 2009. – 302 с.
80. Чапля Є., Чернуха О., Гончарук В., Торський А. Процеси переносу розпадної речовини в гетерогенних середовищах. – Львів: Євросвіт, 2009. – 261с.
81. Чернуха О., Білуцак Ю., Чучвара А. Моделювання дифузійних процесів у стохастично неоднорідних шаруватих структурах. – Львів: Растр-7, 2016. – 262 с.
82. Широков Ю.М., Юдин Н.П. Ядерная физика. – М.: Наука, 1980. – 728 с.
83. Шоршоров М.Х., Манохин А.И. Теория неравновесной кристаллизации плоского слитка.– М.: Наука, 1992. – 105 с.
84. Шумейко В.М., Глухівський І.В., Овруцький В.М. та інш. Екологічна токсикологія. – Київ: АТ „Столиця”, 1996. – 204 с.
85. Achter M.R., Smoluchowski R. Diffusion in grain boundaries and their structure // J. Appl-Phys. – 1951. - V. 22, N 10. - P. 1260-1264.
86. Aifantis E.C., Hill J.M. On the theory of diffusion in media with double diffusivity. I. Basic mathematical results // Mech. Appl. Math. – 1980. – V. 33, Pt. 1. – P. 1-21.
87. Ardkhean R., Caputo D.F.J., Morrow S.M., Shi H., Xiong Y., Anderson E.A. Cascade polycyclizations in natural product synthesis // Chem. soc. rev. - 2016. - V. 45. - P. 1557-1569.
88. Atkins P., de Paula J. Physical Chemistry. 8<sup>th</sup> edition. - Oxford: Oxford Univ. Press, 2006. – 1064 p.
89. Audi G., Wapstra A., Thibault C. The Am2003 atomic mass evaluation: (II). Tables, graphs and references // Nuclear Physics A . – V. 729, Iss. 1. – P. 337-676.
90. Balluffi R.W. Grain boundary diffusion mechanisms in metals // Diffusion in crystalline solids / Eds. G.E. Murch, A.S. Nowick. – New-York-London: Academic Press, 1984. - P. 319377.
91. Chaplya Y., Chernukha O., Bilushchak Y. Contact initial boundary-value problem of the diffusion of admixture particles in a two-phase stochastically inhomogeneous stratified strip // J. of Mathematical Sciences. – 2012. – V. 183, N 1. – P. 83-99.

92. Chen J., Dong T., Ren Z. Cross sections of proton- and neutron-induced reactions by the liège intranuclear cascade model // Physical review C. - 2016. – V. 93, Iss. 6.  
DOI:<https://doi.org/10.1103/PhysRevC.93.064608>.
93. Chernukha O.Y., Bilushchak Yu. I. Mathematical modeling of random concentration field and its second moments in a semispace with erlangian distribution of layered inclusions // Task Quarterly. – 2016. – V. 20, N 3. – P. 295-334.
94. Chitimis A.-D., Nedeff V., Mosnegutu E., Barsan N. Influence of liquid pollutants' leaching speed in the soil on the process of cleaning and self-cleaning // Int. Journal of Applied Microbiology and Biotechnology Research. – 2016. - V. 4 (5). - P. 66-74.
95. Crank J. The mathematics of diffusion. - Oxford: Claredon Press, 1956. – 575 p.
96. Coleman B.D, Dill E.H. Thermodynamics of electromagnetic fields in materials with memory // Arch. Rationnal Mech. Anal. – 1971. – V. 41, № 2. – P. 132-162.
97. Definition, genesis and benefits: [Електрон. ресурс]. - Режим доступу: <http://www.huminetech.com/agriculture/information/what-are-humic-acids.html>
98. Fisher J.C. Concentration of diffusion penetration curves for surface and grain boundary diffusion // J. Appl. Phys. – 1951. - V. 22, № 1. - P. 74-77.
99. Garbuio F.J., Howard J.L., Macedo dos Santos L. Impact of Human Activities on Soil Contamination // Applied and Environmental Soil Science. – 2012. –V. 2012. - Article ID 619548, 2 p.
100. Interatomic potentials and simulation of lattice defects / Eds. P.C. Gehlen, J.R. Beeler, R.I. Laffee. - New-York: Plenum Press, 1972. – 509 p.
101. Nandy S., Syam Kumar U.K., Ilia H. Junjappa Domino Carbocationic Cyclization of Functionalized Cyclopropyl Ketones: Facile One-Pot Access to Peri- and Angularly Fused Polycyclic Aromatic and Heteroaromatic Frameworks // The Journal of organic chemistry. –2002. - V. 67, Iss. 14. – P. 4916–4923.
102. Nicolet M-A., Bartur M. Diffusion barriers in layered contact structure // J. of Vacuum Science and Tech. - 1981. – V. 19, Iss. 3. - P. 786-793.
103. Lal R. Restoring Soil Quality to Mitigate Soil Degradation // Sustainability. – 2015. – V. 7. – P. 5875-5895.

104. *Tietze L., Brasche G., Gericke K.* Domino Reactions in Organic Synthesis. – Weinheim: WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2006. – 617 p.
105. *Tan K.H.* Principles of Soil Chemistry. - Athens (Georgia, USA): Taylor and Francis Group, LLS, 2011. – 362 p.
106. *Taylor S.A., Cary J.W.* Linear equations for the simultaneous flow of matter and energy in a continuous system // Proc. Soil Sci. Soc. Am. – 1964 – V. 28. – P. 167-172.
107. *Savula Y.H., Koukharskiy V.M., Chaplia Y.Y.* Numerical analysis of advection diffusion in the continuum with thin canal // Numerical Heat Transfer. Part A. – 1998. – V. 36, № 3. – P. 657-679.
108. *Smith M., March J.* Advanced Organic Chemistry: Reactions, Mechanisms, and Structure, 6th Edition. – Hoboken, New Jersey: John Wiley & Sons, Inc., 2007. – 2357 p.
109. *Vallance C.* An Introduction to Chemical Kinetics. – San Rafael, CA, USA: Morgan & Claypool Publishers, 2017. - DOI:10.1088/978-1-6817-4664-7.
110. *Voskressensky L.G., Listratova A.V., Borisova T.N., Alexandrov G.G., Varlamov A.V.* Synthesis of Benzoazocines from Substituted Tetrahydroisoquinolines and Activated Alkynes in a Tetrahydropyridine Ring Expansion // European Journal of Organic Chemistry. – 2007. - Iss. 36. – P. 6106–6117.
111. *Wheeldon I., Minteer S.D., Banta S., Barton S.C., Atanassov P., Sigman M.* Substrate channelling as an approach to cascade reactions // Nature Chemistry. – 2016. – V. 8. – P. 299-309.
112. *Zhang M., Jiang H.-F.* A New Multicomponent Reaction Catalyzed by a Lewis Acid Catalyst: Convenient Synthesis of Polyfunctional Tetrahydropyrimidines // European Journal of Organic Chemistry. – 2008. - Iss. 20. – P. 3519- 3523.



## 3 МІСТ

<b>Передмова</b>	<b>3</b>
<b>Розділ 1. Континуально-термодинамічна модель механо-термогетеродифузії за каскадного розпаду домішкової речовини при локальній зміні стану частинок</b>	<b>9</b>
1.1. Об'єкт дослідження. Конфігураційні та кінематичні характеристики	9
1.2. Балансові співвідношення	17
1.3. Гіпотеза локальної термодинамічної рівноваги.	
Рівняння Гіббса	25
1.4. Рівняння стану	28
1.5. Рівняння балансу питомої енергії	29
1.6. Кінетичні співвідношення	33
1.7. Лінійні рівняння стану	34
1.8. Лінійні кінетичні співвідношення	37
1.9. Повна система рівнянь моделі	40
1.10. Ключова система рівнянь гетеродифузії домішок за їх каскадного розпаду	44
1.11. Ефективні характеристики	53
<b>Розділ 2. Крайові задачі моделей дифузії, невзаємодіючих потоків і дифузії в тілі з пастками за каскадного розпаду домішкових речовин</b>	<b>61</b>
2.1. Математичні моделі гетеродифузії за каскадного розпаду домішкових частинок у безрозмірній формі	61
2.2. Математична модель дифузії за каскадного розпаду домішкових частинок у тілі з ефективними характеристиками	65
2.2.1. Концентрації розпадних речовин	65
2.2.2. Потоки маси розпадних домішкових речовин	73
2.2.3. Кількість розпадних речовин, що пройшли через нижню границю шару за час $\tau_*$	75
2.2.4. Числовий аналіз дифузії у середовищі з пастками	76
2.3. Математична модель невзаємодіючих потоків	81
2.3.1. Концентрації розпадних частинок	81

2.3.2. Потоки розпадних частинок за моделлю невзаємодіючих потоків	85
2.3.3. Кількість розпадних речовин, що пройшли через нижню поверхню шару	87
2.3.4. Числовий аналіз дифузії двома шляхами за моделлю невзаємодіючих потоків	88
2.4. Математична модель ефективної дифузії розпадних речовин у середовищі з пастками	92
2.4.1. Концентрації розпадних мігруючих частинок	92
2.4.2. Потоки розпадних домішкових частинок через задану поверхню	102
2.4.3. Кількість розпадних речовин, що пройшли через нижню границю шару за заданий час	104
2.4.4. Схема модулів комплекса програм пакету GeterPas для моделі дифузії у тілі з пастками. Числовий аналіз	105
<b>Розділ 3. Математична модель процесів гетеродифузії розпадних речовин двома шляхами</b>	<b>112</b>
3.1. Крайова задача каскадного типу для знаходження концентрацій мігруючих компонент	112
3.1.1. Постановка крайових задач гетеродифузії каскадного типу	112
3.1.2. Побудова розв'язків крайових задач гетеродифузії каскадного типу	114
3.1.3. Функції Гріна крайових задач гетеродифузії двома шляхами	124
3.2. Потоки розпадних домішкових частинок через задану поверхню	133
3.3. Кількість розпадних речовин, що пройшли через нижню границю шару за час $\tau_*$	137
3.4. Схема модулів комплекса програм пакету GeterPas для моделі гетеродифузії двома шляхами. Числовий аналіз	138
3.4.1. Архітектура комплексу модулів програм для моделі гетеродифузії	138
3.4.2. Числовий експеримент для встановлення закономірностей концентрації частинок на нульовому етапі розпаду	142
3.4.3. Числовий аналіз концентрацій домішкових частинок на першому кроці каскадного розпаду	146

3.4.4. Числовий аналіз концентрацій домішкової речовини на другому кроці каскадного розпаду	155
3.4.5. Числовий аналіз дифузійних потоків домішкових частинок на першому етапі розпаду	160
<b>Розділ 4. Математична модель гетеродифузії двома шляхами у тілі з пастками за каскадного розпаду домішкових речовин</b>	<b>165</b>
4.1. Крайова задача каскадного типу для знаходження концентрацій мігруючих компонент	165
4.2. Функції Гріна крайових задач гетеродифузії у тілі з пастками каскадного типу для знаходження концентрацій мігруючих компонент	180
4.3. Потоки домішкових компонент через заданий переріз тіла	192
4.4. Кількість розпадних речовин, що пройшла через нижню границю шару за час $\tau_*$	198
4.5. Схема модулів комплексу програм пакету GeterPas для моделі гетеродифузії двома шляхами у тілі з пастками	199
<b>Додатки</b>	<b>205</b>
Д.1. Каскадний радіоактивний розпад	205
Д.2. Каскадні хімічні реакції	207
Д.3. Каскадний механізм та його стадії хімічних реакцій	211
Д.4. Кінетичні закономірності нерозгалужених ланцюгових реакцій	215
Д.5. Радіоактивні елементи в ґрунтах	220
Д.6. Хімічне забруднення ґрунтів	225
<b>Література</b>	<b>229</b>

## **Наукове видання**

**НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ**

**Центр математичного моделювання**

**Інституту прикладних проблем механіки і математики  
ім. Я.С. Підстригача**

**Чапля Євген Ярославович,  
Чернуха Ольга Юріївна,  
Білущак Юрій Ігорович**

# **Математичне моделювання гетеродифузійних процесів при розпаді частинок**

Підписано до друку 17.07.2018 р.

Формат 60×84/16. Папір офсетний.

Друк цифровий. Гарнітура «Palatino Linotype».

Ум. друк. арк. 13,95. Обл-вид. арк. 12,67.

Наклад 300 прим.

**Видавець:** ТзОВ «Растр-7»

79005, м. Львів, вул. Кн. Романа 9/1

тел./факс (032) 235-52-05, 235 72 13

e-mail: [rastr.sim@gmail.com](mailto:rastr.sim@gmail.com) [www.rastr-7.com.ua](http://www.rastr-7.com.ua)

Свідоцтво суб'єкта видавничої справи

ЛВ №22 від 19.11.2002 р.

---

**Чапля Є.Я., Чернуха О.Ю., Білущак Ю.І. Математичне моделювання  
гетеродифузійних процесів при розпаді частинок. – Львів: Растр-7,  
2018. – 240 с.**

**ISBN 978-617-7497-92-8**

У монографії запропоновано підходи і методи дослідження гетеродифузійних процесів, які супроводжуються розпадом мігруючих речовин. Методами термодинаміки нерівноважних процесів побудована математична модель термомеханогетеродифузії за каскадного розпаду домішкових частинок. Зроблено постановки і розв'язано низку країлових задач гетеродифузії для знаходження концентрацій мігруючої речовини, потоків маси та кількості речовини, що пройшла через шар.

Для фахівців у галузі математичного і комп'ютерного моделювання, математичної фізики тощо. Може бути корисною механікам, фізикам, інженерам, студентам і аспірантам відповідних спеціальностей.

**УДК 532.72:517.958:004.2:004.942**

**Ч19**