2018

ISSN 2522-1833

iScience™

Всеукраїнська наукова конференція

СУЧАСНІ ТЕНДЕНЦІЇ РОЗВИТКУ УКРАЇНСЬКОЇ НАУКИ

21-22 квітня

ВИПУСК 14

Переяслав-Хмельницький

ВСЕУКРАЇНСЬКА НАУКОВА КОНФЕРЕНЦІЯ

«СУЧАСНІ ТЕНДЕНЦІЇ РОЗВИТКУ УКРАЇНСЬКОЇ НАУКИ»

21-22 квітня 2018 р.

м. Переяслав-Хмельницький

ВИПУСК 4 (14)

Видається з квітня 2017
(щомісячно)

www.conferences.in.ua

УДК 001'06(471)
ББК - 72 (ч Укр)6
С 99

Сучасні тенденції розвитку української науки: Всеукр. наук. конф., 21-22 квітня 2018 р., Переяслав-Хмельницький // Матеріали наукової конференції – Переяслав-Хмельницький, 2018. – Вип. 4 (14) – 99 с.

Мови видання: українська, english, русский

УДК 001'06(471)
ББК - 72 (ч Укр)6
С 99

ЗМІСТ

СЕКЦІЯ: ЕКОЛОГІЯ

СЕКЦІЯ: ЕКОНОМІЧНІ НАУКИ

СЕКЦІЯ: ІСТОРИЧНІ НАУКИ

СЕКЦІЯ: МЕНЕДЖМЕНТ І МАРКЕТИНГ

СЕКЦІЯ: НАУКИ ПРО ЗЕМЛЮ

СЕКЦІЯ: ПЕДАГОГІКА

СЕКЦІЯ: СІЛЬСЬКОГОСПОДАРСЬКІ НАУКИ

СЕКЦІЯ: СУЧАСНІ ІНФОРМАЦІЙНІ ТЕХНОЛОГІЇ

СЕКЦІЯ: ФІЗИКО-МАТЕМАТИЧНІ НАУКИ

СЕКЦІЯ: ФІЗИЧНЕ ВИХОВАННЯ І СПОРТ

СЕКЦІЯ: ЮРИДИЧНІ НАУКИ

СЕКЦІЯ: СУЧАСНІ ІНФОРМАЦІЙНІ ТЕХНОЛОГІЇ

УДК 004.02

Чернуха О. Ю., Білущак Ю. І., Пахолок Б. Б., Ментинський С. М.
Національний університет “Львівська політехніка”,
Центр математичного моделювання ІППММ
ім.Я. С. Підстригача НАН України
(Львів)

АРХІТЕКТУРА ПАКЕТУ КОМП’ЮТЕРНИХ ПРОГРАМ “GETERPAS1” ДЛЯ КІЛЬКІСНОГО ДОСЛІДЖЕННЯ ПРОЦЕСІВ ПЕРЕНОСУ ЗА КАСКАДНИХ ХІМІЧНИХ РЕАКЦІЙ

Анотація. *Досліджено процеси гетеродифузії домішок за їх каскадного розпаду в тілі з двома шляхами міграції, що супроводжуються масообміном між станами. На основі ітера-ційно побудованих розв’язків системи зв’язаних крайових задач гетеродифузії каскадного типу розроблений пакет програм “GeterPas1” та проведено числовий аналіз функцій концентрацій домішкових частинок, що мігрують двома шляхами в шарі і сумарних дифузійних потоків домішкової речовини, та встановлено основні закономірності таких процесів.*

Ключові слова: *гетеродифузія, каскадний розпад речовини, багатокомпонентна система, крайова задача каскадного типу, функція Гріна, пакет програм*

Annotation. *The heterodiffusion processes of admixture with its cascade decay in a body with two migration ways, accompanied by mass exchange between states are investigated. On the basis of iteratively obtained solutions of the set of mutual initial-boundary value problems of heterodiffu-sion by cascade kind, software package “GeterPas1” is designed and numerical analysis of functions of decaying particles concentrations migrating in two ways in a layer is carried out as well as total diffusion fluxes, and general regularities of such processes are determined.*

Keywords: *heterodiffusion, cascade decay of substance, multicomponent system, initial-boundary value problem of cascade kind, Green function, software package*

Під час побудови математичних моделей фізичних процесів, зокрема процесів масоперенесення, що супроводжуються хімічними або ядерними перетвореннями, необхідно не тільки враховувати взаємозв’язок фізичних і хімічних процесів, але й структуру середовища, якщо вона є неоднорідною. Так, для процесу масоперенесення домішкових речовин у дрібнодисперсних і полікристалічних тілах, або для дифузії домішок у металах [1] характерна міграція частинок двома шляхами із суттєво різними коефіцієнтами дифузії, який супроводжується масообміном частинками між ними (сорбція-десорбція). У роботі для нерозгалуженого каскадного розпаду сформульовані зв’язані крайові задачі гетеродифузії каскадного типу, коли розв’язки задачі на одному етапі є джерелами на наступному. Розв’язки задач побудовані за ітераційною процедурою з використанням функцій Гріна. Розроблено пакет програм “GeterPas1” для кількісного дослідження різних характеристик гетеродифузійних процесів мігруючих домішкових речовин за каскадного розпаду частинок.

Нехай частинки одного хімічного сорту, які розпадаються, мігрують у тілі з двома шляхами міграції та масообміном між станами (дрібнодисперсне середовище, монокристали тощо) [2-5]. Причому речовини, які утворилися в наслідок розпаду, також можуть розпадатися. Приймаємо, що тіло $\mathbf{K}^*$ (дискретна сукупність матеріальних частинок) є багато компонентним твердим розчином. За термодинамічні компоненти цієї системи приймаємо взаємодіючі дискретні сукупності матеріальних частинок $\mathbf{K}_j^{*(0)}$, які утворюють основу тіла ($j=0$) та домішкові частинки у двох виділених станах ($j=1;2$). При розпаді речовини $\mathbf{K}_j^{*(0)}$ в стані $j=1;2$ утворюються частинки інших домішкових речовин $\mathbf{K}_j^{*(1)}$ і $\mathbf{K}_j^{*(N)}$, причому частинки $\mathbf{K}_j^{*(N)}$ вже не розпадаються (рис. 1). У свою чергу частинки домішки $\mathbf{K}_j^{*(1)}$ розпадаються і утворюють частинки речовини $\mathbf{K}_j^{*(2)}$ і нерозпадні (нешкідливі) речовини, які віднесемо до $\mathbf{K}_j^{*(N)}$, і т.д. доки на ($N-1$)-у кроці не отримаємо тільки нерозпадні частинки домішкової речовини. Частинки домішкової речовини одного хімічного виду у рамках виділеного фізично малого елемента тіла можуть знаходитись у різних фізичних станах, характеризуючись, зокрема, різною рухливістю (коефіцієнтами дифузії). Кожній компоненті тіла (підсистемам частинок $\mathbf{K}_0^{*(0)}$, що утворюють скелет, а також частинкам розпадної домішкової речовини в різних станах $\mathbf{K}_j^{*(0)}$ і частинкам, які уворилися в наслідок розпаду $\mathbf{K}_j^{*(i)}$ ($j=1;2$, $i=\overline{1,N}$) співставляються у відповідність континууми $\mathbf{K}_j^{(i)}$ ($i=\overline{0,N}$, $j=\overline{0,2}$).

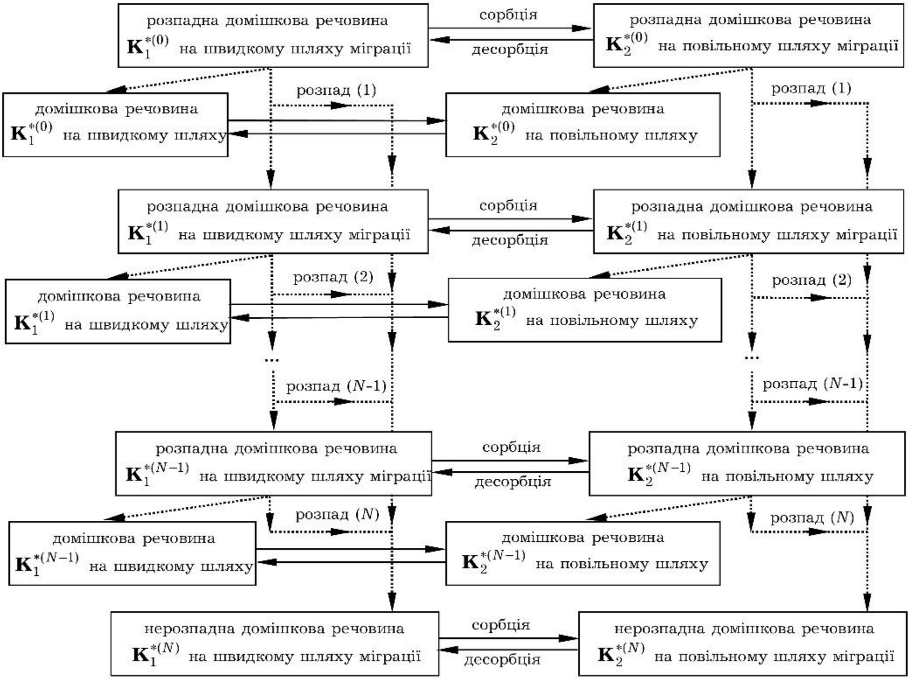

Рис. 1. Схема розпаду домішкової речовини та процесів переходу частинок між станами

Нехай вектор-функція $\mathbf{c}^{(i)}(z,t)=\begin{pmatrix} c_1^{(i)}(z,t) \\ c_2^{(i)}(z,t)\end{pmatrix}$ є такою, що її елементи $c_j^{(i)}(z,t)$, $j=1,2$, $i=0,\ldots,N$ є неперервними за змінними z, t в області $R=\{(z,t):\ z\in[0;z_0],\ t\in\Re_+\}$; задовольняють умову Ліпшиця за змінною z в області R з константою l [6, 7].

Розглянемо лінійну крайову задачу для системи зв'язаних диференціальних рівнянь в часткових похідних другого порядку

$$\mathbf{L}^{(i)}\left[\mathbf{c}^{(i)}(z,t)\right]=\mathbf{F}^{(i)}\left[(z,t);\mathbf{c}^{(i-1)}(z,t)\right] \qquad (1)$$

де $\mathbf{L}^{(i)}=\begin{pmatrix} L_1^{c_1^{(i)}}(z,t) & L_1^{c_2^{(i)}}(z,t) \\ L_2^{c_1^{(i)}}(z,t) & L_2^{c_2^{(i)}}(z,t)\end{pmatrix}$ - матричний диференціальний оператор, в якому

$$L_1^{c_1^{(i)}}(z,t)=\frac{\partial}{\partial\tau}-d_0^{(i)}\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}+a_{11}^{(i)},\ L_1^{c_2^{(i)}}(z,t)=-d_1^{(i)}\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}-a_{12}^{(i)},\ L_2^{c_1^{(i)}}(z,t)=-d_2^{(i)}\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}-a_{21}^{(i)},$$

$L_2^{c_2^{(i)}}(z,t)=\frac{\partial}{\partial\tau}-d^{(i)}\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}+a_{22}^{(i)}$ (верхні індекси елементів матриці оператора вказують на яку функцію діє даний елемент матричного оператора); $\mathbf{F}^{(i)}\left[(z,t);\mathbf{c}^{(i-1)}(z,t)\right]= =\begin{pmatrix} F_1^{(i)}\left[(z,t);c_1^{(i-1)}(z,t)\right] \\ F_2^{(i)}\left[(z,t);c_2^{(i-1)}(z,t)\right]\end{pmatrix}$- вектор-функція джерел, де $F_j^{(i)}\in L_2 \vee F_j^{(i)}\in D(\Re^2)$, $j=1,2$, $i=0,\ldots,N$.

Нехай задані крайової умови

$$\mathbf{c}^{(i)}(z,t)\Big|_{t=0}=\begin{pmatrix}0\\0\end{pmatrix},\ \mathbf{c}^{(i)}(z,t)\Big|_{z=z_0}=\begin{pmatrix}0\\0\end{pmatrix},\ i=\overline{0,N},$$

$$\mathbf{c}^{(0)}(z,t)\Big|_{z=0}=\mathbf{c}_0=\begin{pmatrix}c_{01}\\c_{02}\end{pmatrix},\ \mathbf{c}^{(i)}(z,t)\Big|_{z=0}=\begin{pmatrix}0\\0\end{pmatrix},\ i=\overline{1,N}, \tag{2}$$

де $c_{0j}\in L_2$, $j=1,2$.

Якщо $\left|\mathbf{c}^{(i)}(z,t)-\mathbf{c}_0(z,t)\right|\le b$ для $\forall t\in\Re_+$, $z\in[0,\ z_0]$ (b - відома додатна константа), тоді існує єдиний класичний розв'язок задачі (1), (2) [8].

Розв'язки крайових задач гетеродифузії каскадного типу побудовані за ітераційною процедурою з використанням функцій Гріна. Для сумарної концентрації домішкової речовини $\mathbf{K}^{(i)}$ на i-му етапі каскадного розпаду ($i=\overline{1,N}$) отримаємо:

$$c^{(i)}(\xi,\tau)=a_\lambda^{(i-1)}\int_0^\tau\int_0^{\xi_0}\mathbf{G}^{(i)}(\xi,\xi';\tau,\tau')\mathbf{c}^{(i-1)}(\xi',\tau')d\xi'd\tau', \tag{3}$$

де $\mathbf{G}^{(i)}=\begin{pmatrix}G_1^{(i)}(\xi,\xi';\tau,\tau')\\G_2^{(i)}(\xi,\xi';\tau,\tau')\end{pmatrix}$, $\mathbf{c}^{(i)}=\begin{pmatrix}c_1^{(i)}(\xi,\tau)\\c_2^{(i)}(\xi,\tau)\end{pmatrix}$. За нульову ітерацію прийнято вектор-функцію $\mathbf{c}^{(0)}=\begin{pmatrix}c_1^{(0)}(\xi,\tau)\\c_2^{(0)}(\xi,\tau)\end{pmatrix}$, яку знайдено у вигляді:

концентрація розпадної домішки на швидкому шляху міграції

$$\frac{c_1^{(0)}(\tau,\xi)}{c_0}=\left\{\alpha-\frac{\widetilde{b}_1}{ce}\right\}\left(1-\frac{\xi}{\xi_0}\right)-B\left[\left(\widetilde{a}_1+\frac{\widetilde{b}_1}{x_1}\right)\frac{\sin(\pi-y)x_1}{\sin\pi x_1}-\left(\widetilde{a}_1+\frac{\widetilde{b}_1}{x_2}\right)\frac{\sin(\pi-y)x_2}{\sin\pi x_2}\right]-$$

$$-\frac{2}{\xi_0}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\sin y_n\xi}{y_n(s_1-s_2)}\left[\left(\alpha s_1+p_1+\frac{p_2}{s_1}\right)e^{s_1\tau}-\left(\alpha s_2+p_1+\frac{p_2}{s_2}\right)e^{s_2\tau}\right], \qquad (4a)$$

концентрація розпадних частинок на повільному шляху міграції

$$\frac{c_2^{(0)}(\tau,\xi)}{c_0}=\left\{1-\alpha-\frac{\tilde{b}_2}{ce}\right\}\left(1-\frac{\xi}{\xi_0}\right)-B\left[\left(\tilde{a}_2+\frac{\tilde{b}_2}{x_1}\right)\frac{\sin(\pi-y)x_1}{\sin\pi x_1}-\left(\tilde{a}_2+\frac{\tilde{b}_2}{x_2}\right)\frac{\sin(\pi-y)x_2}{\sin\pi x_2}\right]-$$

$$-\frac{2}{\xi_0}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\sin y_n\xi}{y_n(s_1-s_2)}\left[\left((1-\alpha)s_1+p_1'+\frac{p_2'}{s_1}\right)e^{s_1\tau}-\left((1-\alpha)s_2+p_1'+\frac{p_2'}{s_2}\right)e^{s_2\tau}\right]; \qquad (4b)$$

при цьому сумарна концентрація розпадної речовини
$c^{(0)}(\tau,\xi)=c_1^{(0)}(\tau,\xi)+c_2^{(0)}(\tau,\xi)$ одержуємо у вигляді

$$\frac{c^{(0)}(\tau,\xi)}{c_0}=\left\{1-\frac{\tilde{b}}{ce}\right\}\left(1-\frac{\xi}{\xi_0}\right)-B\left[\left(\tilde{a}+\frac{\tilde{b}}{x_1}\right)\frac{\sin(\pi-y)x_1}{\sin\pi x_1}-\left(\tilde{a}+\frac{\tilde{b}}{x_2}\right)\frac{\sin(\pi-y)x_2}{\sin\pi x_2}\right]-$$

$$-\frac{2}{\xi_0}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\sin y_n\xi}{y_n(s_1-s_2)}\left[\left(s_1+\tilde{p}_1+\frac{\tilde{p}_2}{s_1}\right)e^{s_1\tau}-\left(s_2+\tilde{p}_1+\frac{\tilde{p}_2}{s_2}\right)e^{s_2\tau}\right], \qquad (4c)$$

де $B=\frac{1}{\sqrt{d^2-4ec^2}}$, $x_{1,2}=\frac{1}{2}\left(-\frac{d}{c}\pm\sqrt{\frac{d^2}{c^2}-4e}\right)$, $\tilde{a}=\tilde{a}_1+\tilde{a}_2$, $\tilde{b}=\tilde{b}_1+\tilde{b}_2$, $\tilde{p}_l=p_l+p_l'$

($l=1,2$), $\tilde{a}_1=\left(d_1^{(0)}\alpha_2+d^{(0)}\alpha_1\right)\frac{\pi^2}{\xi_0^2}$, $\tilde{b}_1=\alpha_1 a_{22}^{(0)}-\alpha_2 a_{12}^{(0)}$, $\tilde{a}_2=\frac{\pi^2}{\xi_0^2}\left(\alpha_2+\right.$

$\left.\alpha_1 d_2^{(0)}\right)$, $\tilde{b}_2=\alpha_2 a_{11}^{(0)}-\alpha_1 a_{21}^{(0)}$, $c=\left(d^{(0)}-d_1^{(0)}d_2^{(0)}\right)\frac{\pi^4}{\xi_0^4}$, $e=a_{11}^{(0)}a_{22}^{(0)}-a_{12}^{(0)}a_{21}^{(0)}$,

$d=a_{22}^{(0)}+a_{11}^{(0)}d^{(0)}+$ $\left.+d_1^{(0)}a_{21}^{(0)}+d_2^{(0)}a_{12}^{(0)}\right)\frac{\pi^2}{\xi_0^2}$, $s_{1,2}=-\eta_1/2\pm\sqrt{(\eta_1/2)^2-\eta_2}$,

$\eta_1=y_n\left(d^{(0)}+1\right)+a_{22}^{(0)}+$ $+a_{11}^{(0)}$;

$\eta_2=\left(d^{(0)}-d_1^{(0)}d_2^{(0)}\right)y_n^4+\left(a_{22}^{(0)}+a_{11}^{(0)}d_2^{(0)}+d_1^{(0)}a_{21}^{(0)}+d_2^{(0)}a_{12}^{(0)}\right)y_n^2+a_{11}^{(0)}a_{22}^{(0)}-a_{12}^{(0)}a_{21}^{(0)}$;

$p_1=\left(\alpha d^{(0)}-d_1^{(0)}(1-\alpha)\right)y_n^2+\alpha a_{22}^{(0)}+\alpha_1+(1-\alpha)a_{12}^{(0)}$,

$p_2=\left(d_1^{(0)}\alpha_2+d^{(0)}\alpha_1\right)y_n^2+\alpha_1 a_{22}^{(0)}-$ $-\alpha_2 a_{12}^{(0)}$,

$p_1' = \left(1-\alpha-\alpha d_2^{(0)}\right) y_n^2 + a(1-\alpha)_{11}^{(0)} + \alpha a_{21}^{(0)} + \alpha_2$; $\quad p_2' = \left(\alpha_2 + \alpha_1 d_2^{(0)}\right) y_n^2 +$
$+\alpha_2 a_{11}^{(0)} - \alpha_1 a_{21}^{(0)}$, $y = \pi\xi/\xi_0$.

Функції Гріна отримані за допомогою інтегральних перетворень у вигляді

$$G_j^{(i)} = \frac{2}{\xi_0}\sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin y_n\xi \sin y_n\xi'}{s_1^{(i)} - s_2^{(i)}}\left[\left(s_1^{(i)} + A_j\right)e^{s_1^{(i)}(\tau-\tau')} - \left(s_2^{(i)} + A_j\right)e^{s_2^{(i)}(\tau-\tau')}\right],\ i = \overline{1, N-1},\ j = 1,2, \tag{5}$$

де $A_1 = y_n^2(d^{(i)} - d_1^{(i)}) + a_{22}^{(i)} + a_{12}^{(i)}$; $A_2 = y_n^2(d_0^{(i)} - d_2^{(i)}) + a_{11}^{(i)} + a_{21}^{(i)}$,

$s_{1,2}^{(i)} = -\eta_1'^{(i)}/2 \pm \pm\sqrt{\left(\eta_1'^{(i)}/2\right)^2 - \eta_2'^{(i)}}$, $\eta_1'^{(i)} = y_n^2(d_0^{(i)} + d^{(i)}) + a_{11}^{(i)} + a_{22}^{(i)}$,

$\eta_2'^{(i)} = y_n^4\left(d_0^{(i)}d^{(i)} - d_1^{(i)}d_2^{(i)}\right) + + y_n^2\left(a_{11}^{(i)}d^{(i)} + d_0^{(i)}a_{22}^{(i)} + a_{12}^{(i)}d_2^{(i)} + d_1^{(i)}a_{21}^{(i)}\right) + a_{11}^{(i)}a_{22}^{(i)} - a_{12}^{(i)}a_{21}^{(i)}$.

Сумарний потік маси через переріз тіла $\xi = \xi_*$ у природних без розмірних змінних [1] на i-му етапі каскадного розпаду можна подати у вигляді

$$\frac{J_*^{(i)}(\tau)}{\sqrt{\bar{k}_2^{(0)}\bar{D}_{11}^{(0)}}} = a_\lambda^{(i-1)}\int_0^{\tau}\int_0^{\xi_0} \left.\frac{\partial \mathbf{G}^{(i)}(\xi,\xi';\tau,\tau')}{\partial\xi}\right|_{\xi=\xi_*} \mathbf{c}^{(i-1)}(\xi',\tau')d\xi' d\tau'. \tag{6}$$

Тут позначено $\left.\frac{\partial \mathbf{G}^{(i)}}{\partial\xi}\right|_{\xi=\xi_*} = \begin{pmatrix} \tilde{d}_1^{(i)} \left.\frac{\partial G_1^{(i)}(\xi,\xi';\tau,\tau')}{\partial\xi}\right|_{\xi=\xi_*} \\ \tilde{d}_2^{(i)} \left.\frac{\partial G_2^{(i)}(\xi,\xi';\tau,\tau')}{\partial\xi}\right|_{\xi=\xi_*} \end{pmatrix}$ - вектор-функція похідної векторної функції Гріна в точці $\xi = \xi_*$.

На основі формул (3)-(6) для концентрацій розпадних домішкових компонент, потоків та кількостей розпадних речовин, що пройшли через шар, розроблений пакет програм GeterPas1 для комп'ютерного моделювання процесів гетеродифузії двома шляхами за каскадного розпаду мігруючих частинок. Архітектуру пакету програм для моделювання процесів дифузії за каскадного розпаду частинок для моделі гетеродифузії двома шляхами наведено на рис.2. Схема модулів для обчислення дифузійних потоків та кількості речовини, що пройшла через шар, подано на рис.3 та рис.4. При цьому зауважимо, що програмні модулі для потоків і кількості речовини для моделі гетеродифузії на містить по два циклічні процеси і на кожному етапі взаємодіють з модулем для концентрації на попередньому етапі розпад.

Розроблений пакет GeterPas1 застосовано до числового аналізу концентрацій та потоків домішкових речовин за каскадного розпаду частинок, міграція яких описується в рамках моделі гетеродифузії двома шляхами. Розрахунки 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, $a_{21}^{(0)} = 2.2$, $a_{22}^{(0)} = 2.6$, $a_{11}^{(1)} = 2$, $a_{12}^{(1)} = 1$, $a_{21}^{(1)} = 0.5$, $a_{22}^{(1)} = 1.2$; $a_{\lambda 1}^{(0)} = 0.5$, $a_{\lambda 2}^{(0)} = 0.5$, $a_{\lambda 1}^{(1)} = 0.3$, $a_{\lambda 2}^{(1)} = 0.3$; $\tau = 0.8$.

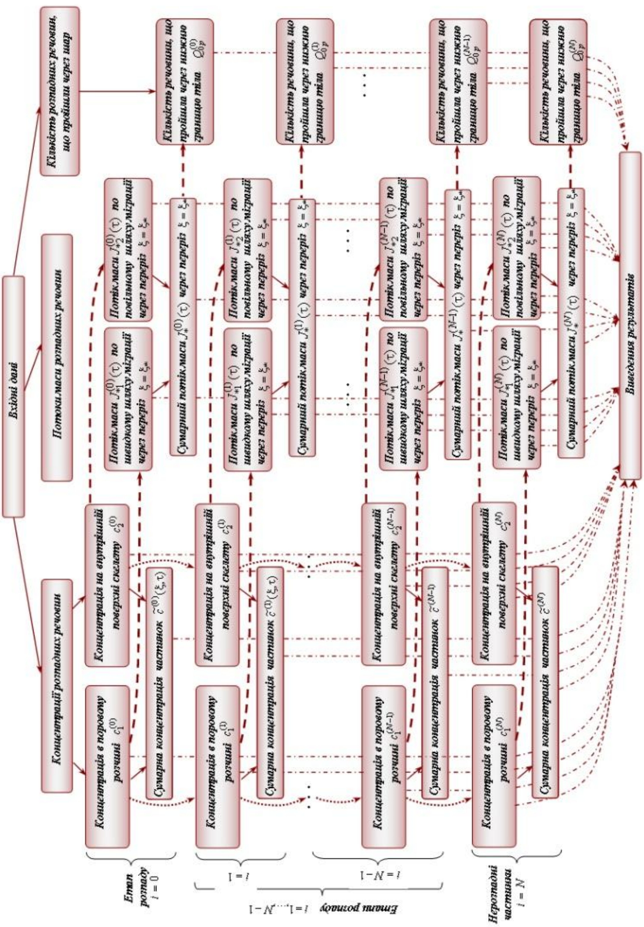

Рис.2 Архітектура комплекса модулів програм пакету GeterPas1 моделі гетеродифузії двома шляхами за каскадного розпаду частинок

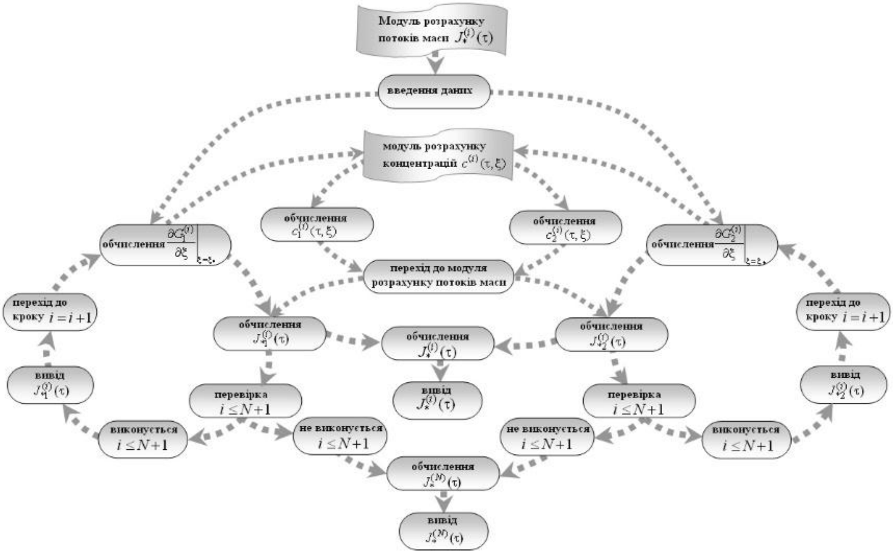

Рис. 3. Схема алгоритму модуля пакету для розрахунку дифузійного потоку домішкових речовин за каскадного розпаду частинок для моделі гетеродифузії двома шляхами

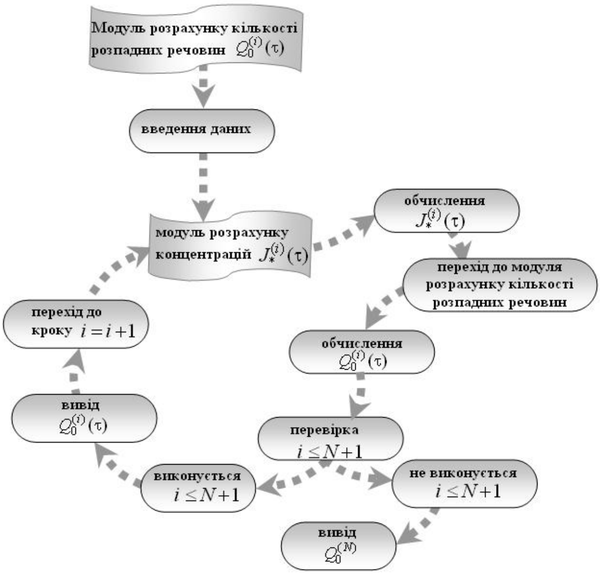

Рис. 4 Схема алгоритму модуля пакету для розрахунку кількості розпадних речовин, що пройшли через нижню границю шару за заданий час для моделі гетеродифузії двома шляхами

Рис. 5 ілюструє розподіли сумарної концентрації домішкової речовини для різних значень параметра 2, 4, 6, 8, 20 (криві 1-5).

Коефіцієнти , які визначають інтенсивність процесів переходу частинок між станами та інтенсивність розпаду домішкової речовини на першому

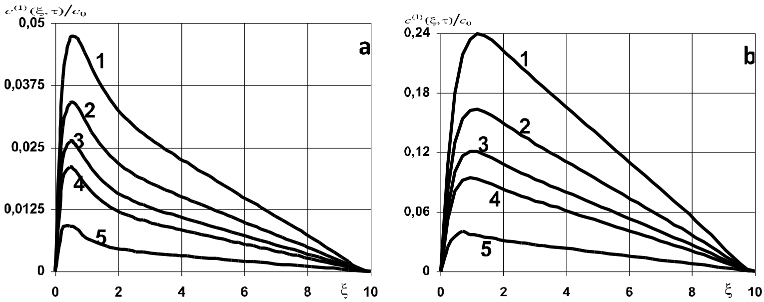

Рис. 5

етапі каскадного розпаду, впливають лише на значення сумарної концентрації $c^{(1)}(\xi,\tau)$ (рис. 5). Так збільшення параметра $a_{11}^{(1)}$ на порядок приводить до зменшення сумарної концентрації в 4.5 разів для малих значень коефіцієнта поверхневого розподілу α (рис. 5a) і в 6 разів для великих значень α (рис. 5b).

На рис. 6 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. a) та $\alpha = 0.91$ (рис. b).

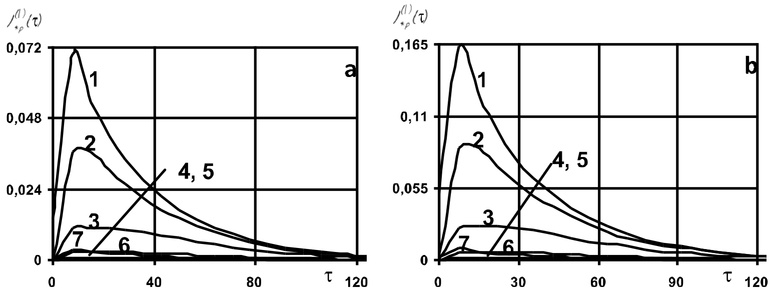

Рис. 6

Найінтенсивнішими є потоки домішки $\mathbf{K}^{(1)}$ через перерізи біля поверхні тіла, де діє джерело маси речовини $\mathbf{K}^{(0)}$ (рис. 6). З віддаленням поверхні $\xi = \xi_*$ від джерела інтенсивність потоку подає, досягаючи свого мінімуму в околі $\xi_{*\min} \in [3.8;5.5]$, при цьому максимальні значення $J_{*p}^{(1)}(\tau)$ зменшуються на порядки $J_{*p\max}^{(1)}(\tau)\Big|_{\xi=5} \Big/ J_{*p\max}^{(1)}(\tau)\Big|_{\xi=0.5} = 0.0073$ для $\alpha = 0.25$ і $J_{*p\max}^{(1)}(\tau)\Big|_{\xi=5} \Big/ J_{*p\max}^{(1)}(\tau)\Big|_{\xi=0.5} =$

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: $J_{*p\max}^{(1)}(\tau)\Big|_{\xi=9.5} \Big/ J_{*p\max}^{(1)}(\tau)\Big|_{\xi=5} = 6.9$ для $\alpha = 0.25$ і $J_{*p\max}^{(1)}(\tau)\Big|_{\xi=9.5} \Big/ J_{*p\max}^{(1)}(\tau)\Big|_{\xi=5} = 7.1$ для $\alpha = 0.91$.

Отже, на основі розвинених моделей сформульовано нові постановки крайових задач каскадного типу, коли концентрація частинок на певному кроці розпаду є джерелом маси розпадної речовини на наступному кроці, яка теж дифундує, сорбується, десорбується і розпадається. Для конкретної схеми розпаду (лінійних хімічних реакцій) розв'язки крайових задач каскадного типу для зазначених математичних моделей побудовані за ітераційною процедурою з використанням функцій Гріна. Знайдено потоки маси мігруючих компонент і визначено кількість відповідних речовин, що за певний проміжок часу пройшли через одиницю площі деякої поверхні, наприклад, через нижню границю шару.

На основі отриманих формул розроблений пакет програм «GeterPas1» для комп'ютерного моделювання процесів масоперенесення у тілі з пастками за каскадного розпаду домішкових речовин та проведено числовий аналіз функцій концентрацій розпадних частинок та потоків маси розпадних речовин.

Робота виконана в рамках НДР № ДР 0117U001850 і ДР 0117U006866.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ ТА ЛІТЕРАТУРИ

1. Чапля Є. Я., Чернуха О. Ю. Фізико-математичне моделювання гетеродифузного масо пере-носу. – Львів: СПОЛОМ, 2003. – 128 с.
2. Бурак Я. И., Галапац Б. П., Чапля Е. Я. Деформация электропроводных тел с учетом гетеро-диффузии заряженых примесных частиц // Физ.-хим. мех. материалов. – 1980. – №5. – С. 8-14.
3. Бурак Я. И., Галапац Б. П., Чапля Е. Я. Исходные уравнения процессов деформации электропроводных твердых растворов с учетом различных путей диффузии примесных частиц // Мат. методы и физ.-мех. поля. – 1980. – Вып.11. – С. 60-66.
4. Бурак Я. Й., Чапля Є. Я., Чернуха О.Ю. Континуально-термодинамічні моделі механіки твердих розчинів. – К.: Наукова думка, 2006. – 272 с.
5. Aifantis E. C., Hill J.M. On the theory of diffusion in media with double diffusivity. I. Basic mathematical results // [Q.J.] Mech. appl. Math. – 1980. – V.33. – Pt.1. – P. 1-21. (17)
6. Неймарк М.А. Линейные дифференциальные операторы. – Москва: Наука, 1969. – 526 с.
7. Пташник Б. Й., Ільків В. С., Кміть І. Я., Полішук В. М. Нелокальні крайові задачі для рівнянь із частинними похідними. – Київ: Наукова думка. – 2002. – 416 с.
8. Свешников А. Г., Боголюбов А. Н., Кравцов В. В. Лекции по математической физике. – Москва: Изд-во МГУ. – 1993. – 352 с.