

## МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ ГЕТЕРОДИFUZІЇ ДВОМА ШЛЯХАМИ ЗА КАСКАДНОГО РОЗПАДУ ДОМІШКОВИХ ЧАСТИНОК. II. КІЛЬКІСНИЙ АНАЛІЗ

*Досліджено процеси гетеродифузії домішок за їх каскадного розпаду в тілі з двома шляхами міграції, що супроводжуються масообміном між станами. На основі ітераційно побудованих розв'язків системи зв'язаних крайових задач гетеродифузії каскадного типу проведено числовий аналіз функцій концентрацій домішкових частинок, що мігрують двома шляхами в шарі, на перших трьох етапах розпаду, а також сумарних дифузійних потоків домішкової речовини на першому кроці. Встановлено основні закономірності таких процесів. Показано, що для малих часів накопичення частинок домішки на другому кроці розпаду відбувається біля поверхні тіла, де діє джерело маси на нульовому етапі, а з часом домішкова речовина на другому етапі каскаду більшою мірою накопичується усередині тіла.*

**Ключові слова:** гетеродифузія, каскадний розпад, каскадна крайова задача, ітераційно побудований розв'язок, матрична функція Гріна, числовий аналіз.

**Вступ.** У роботі [6] побудовано математичну модель гетеродифузії двома шляхами домішкових речовин за їхнього каскадного розпаду з урахуванням процесів типу сорбції–десорбції, отримано ключові системи рівнянь моделі, коли джерелом маси на наступному кроці каскаду є розпад речовини на поточному етапі, і встановлено умови, яким підпорядковуються потужності виробництва маси для компонент системи. У роботі [1] для нерозгалуженого каскадного розпаду сформульовано зв'язані крайові задачі гетеродифузії каскадного типу, коли розв'язки задачі на одному етапі є джерелами на наступному. Розв'язки задач побудовано за ітераційною процедурою з використанням функцій Гріна. Отримано формули для дифузійних потоків мігруючих домішкових речовин і кількості речовин, що пройшли через заданий переріз тіла за певний проміжок часу.

У цій роботі кількісно дослідимо концентрації домішкових частинок у різних станах та їхню суму на перших трьох етапах каскадного розпаду і відповідні дифузійні потоки, а також встановлюємо основні закономірності процесів масоперенесення в умовах каскадного розпаду домішкових речовин для математичної моделі гетеродифузії двома шляхами.

**1. Розв'язки каскадних крайових задач гетеродифузії.** Процес масоперенесення двома шляхами домішкових речовин, що утворилися внаслідок каскадного розпаду, для шару описується системою зв'язаних крайових задач гетеродифузії (1)–(3) зі статті [1], де прийнято, що частинки домішкової речовини  $\mathbf{K}^{(0)}$ , які з поверхні потрапили у тіло, дифундують у двох станах  $j = 1, 2$ , при цьому відбувається масообмін між станами і радіоактивний розпад домішок або розпад внаслідок хімічних реакцій. Тоді у кожному стані утворюються частинки речовини  $\mathbf{K}_j^{(1)}$  ( $j = 1$  відповідає стану частинок на швидкому шляху міграції, а  $j = 2$  – на повільного шляху міграції) і нерозпадні частинки  $\mathbf{K}_j^{(N)}$ . У свою чергу, субстанція  $\mathbf{K}^{(1)}$  також розпадається, утворюючи частинки речовин  $\mathbf{K}^{(2)}$  і  $\mathbf{K}^{(N)}$ .

Розв'язки крайових задач гетеродифузії каскадного типу побудовано за ітераційною процедурою з використанням функції Гріна у вигляді (5) з [1] для станів  $j = 1, 2$ . Для сумарної концентрації домішкової речовини  $\mathbf{K}^{(i)}$

\* byixx13@gmail.com

на  $i$ -му етапі,  $i = 1, \dots, N$ , каскадного розпаду отримаємо

$$c^{(i)}(\xi, \tau) = a_{\lambda}^{(i-1)} \int_0^{\tau} \int_0^{\xi_0} \mathbf{G}^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') \mathbf{c}^{(i-1)}(\xi', \tau') d\xi' d\tau', \quad (18)^1$$

де

$$\mathbf{G}^{(i)} = \begin{pmatrix} G_1^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') \\ G_2^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau') \end{pmatrix}, \quad \mathbf{c}^{(i)} = \begin{pmatrix} c_1^{(i)}(\xi, \tau) \\ c_2^{(i)}(\xi, \tau) \end{pmatrix}.$$

За нульову ітерацію приймаємо вектор-функцію  $\mathbf{c}^{(0)} = \begin{pmatrix} c_1^{(0)}(\xi, \tau) \\ c_2^{(0)}(\xi, \tau) \end{pmatrix}$ , яка ви-  
значається виразами (4'), (4'') з [1].

Сумарний потік маси через переріз тіла  $\xi = \xi_*$  у природних безроз-  
мірних змінних [5] на  $i$ -му етапі каскадного розпаду можемо подати у  
вигляді

$$\frac{J_*^{(i)}(\tau)}{\sqrt{k_2^{(0)} D_{11}^{(0)}}} = a_{\lambda}^{(i-1)} \int_0^{\tau} \int_0^{\xi_0} \left. \frac{\partial \mathbf{G}^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \right|_{\xi=\xi_*} \mathbf{c}^{(i-1)}(\xi', \tau') d\xi' d\tau'. \quad (19)$$

Тут через

$$\left. \frac{\partial \mathbf{G}^{(i)}}{\partial \xi} \right|_{\xi=\xi_*} = \begin{pmatrix} \tilde{d}_1^{(i)} \left. \frac{\partial G_1^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \right|_{\xi=\xi_*} \\ \tilde{d}_2^{(i)} \left. \frac{\partial G_2^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \right|_{\xi=\xi_*} \end{pmatrix}$$

позначено вектор-функцію похідної від векторної функції Гріна в точці  
 $\xi = \xi_*$ .

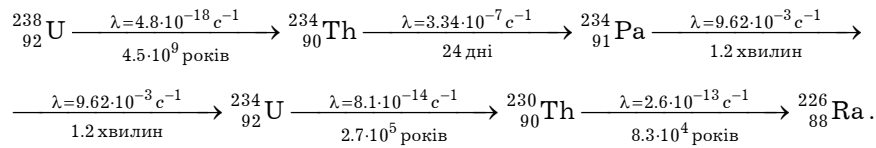
**2. Числовий аналіз концентрацій домішкових частинок на нульовому  
етапі розпаду.** На основі формули (18) і формул (4), (5), (9) з [1], а також  
розв'язків задач (5), (8), (9), (12) з [1] для концентрацій розпадних домішко-  
вих компонент і на останньому етапі каскадного розпаду розроблено пакет  
програм для комп'ютерного моделювання процесів гетеродифузії двома  
шляхами за каскадного розпаду мігруючих частинок. Числовий аналіз кон-  
центрацій домішкових речовин на різних етапах каскадного розпаду час-  
тинок проведено для таких базових значень:

$$\begin{aligned} \alpha &= 0.25, \\ d^{(0)} &= 0.1, \quad d^{(1)} = 0.3, \quad d_0^{(1)} = 0.2, \quad d^{(1)} = 0.2, \quad d_0^{(1)} = 0.1, \\ a_{11}^{(0)} &= 4, \quad a_{12}^{(0)} = 1, \quad a_{21}^{(0)} = 2.2, \quad a_{22}^{(0)} = 2.6, \\ a_{11}^{(1)} &= 2, \quad a_{12}^{(1)} = 1, \quad a_{21}^{(1)} = 0.5, \quad a_{22}^{(1)} = 1.2, \\ a_{\lambda 1}^{(0)} &= 0.5, \quad a_{\lambda 2}^{(0)} = 0.5, \quad a_{\lambda 1}^{(1)} = 0.3, \quad a_{\lambda 2}^{(1)} = 0.3, \quad \tau = 0.8. \end{aligned}$$

При цьому при проведенні обчислень приймаємо, що перехресні коефі-  
цієнти дифузії завжди дорівнюють нулеві:  $d_1^{(i)} = d_2^{(i)} = 0$ ,  $i = 0, \dots, N$ . Ос-  
кільки при побудові моделі і в постановках крайових задач стан домішко-  
вих речовин  $j=1$  розглядаємо як швидкий шлях дифузії, то для коефіцієн-  
тів дифузії повинна виконуватись умова  $d_0^{(i)} > d^{(i)}$ ,  $i = 0, \dots, N$ .

<sup>1</sup> Для зручності викладу матеріалу продовжуємо наскрізну нумерацію формул,  
розпочату в [1].

Коефіцієнти  $a_{kl}^{(i)}$  визначають зміну станів частинок і зміну етапу каскадного розпаду [6]. При цьому стосовно коефіцієнтів сорбції обмежимося випадком, коли процеси сорбції є інтенсивнішими, ніж процеси десорбції, тобто  $\bar{k}_1^{(i)} > \bar{k}_2^{(i)}$ ,  $i = 0, \dots, N$  [6]. Зазначимо, що така ситуація є характерною, наприклад, для ґрунтів [4], проте відомі експериментальні дані і для протилежного випадку [3], зокрема для гетеродифузії домішки у кристалах. Коефіцієнти  $\lambda_j^{(i)}$  – константи розпаду [1, 6], які характеризують ймовірність (радіоактивного) розпаду за одиницю часу і визначаються формулою  $\lambda = \ln 2/T_{1/2}$ , де  $T_{1/2}$  – період піврозпаду [2, 7]. При цьому молекули (атоми) речовини, що виникають у складних ланцюгах розпаду, можуть мати періоди піврозпаду в широкій області значень: від  $3 \cdot 10^{-7}$  с для  $^{212}\text{Ra}$  до  $1.4 \cdot 10^{10}$  років для  $^{232}\text{Th}$  у радіоактивному розпаді [9]. Як приклад наведемо каскадний розпад з відомими коефіцієнтами інтенсивності розпаду [8]:



Отже, і коефіцієнти інтенсивності процесів типу сорбції–десорбції, і коефіцієнти інтенсивності розпаду можуть вносити домінуючий вклад у коефіцієнти  $a_{kl}^{(i)}$  або вони можуть 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  $a_{21}^{(i)} > a_{12}^{(i)}$ ,  $i = 0, \dots, N$ .

Розподіли концентрацій на швидкому  $c_1^{(0)}(\xi, \tau)$  і на повільному  $c_2^{(0)}(\xi, \tau)$  шляхах міграції та їх сумарної концентрації  $c^{(0)}(\xi, \tau)$  подано на рис. 1 у різні моменти безрозмірного часу  $\tau = 0.8, 2, 20$  (криві **1, 1', 1''–3, 3', 3''** відповідно) для значень коефіцієнтів поверхневого розподілу домішкових частинок між станами  $\alpha = 0.25$  (рис. 1а) та  $\alpha = 0.91$  (рівноважне значення, рис. 1б). Тут штриховими лініями позначено концентрацію  $c_1^{(0)}(\xi, \tau)$  на швидкому шляху (криві **1'–3'**), штрихпунктирними лініями – концентрацію  $c_2^{(0)}(\xi, \tau)$  на повільному шляху (криві **1''–3''**), а суцільними – сумарну концентрацію  $c^{(0)}(\xi, \tau)$  домішкових частинок (криві **1–3**).

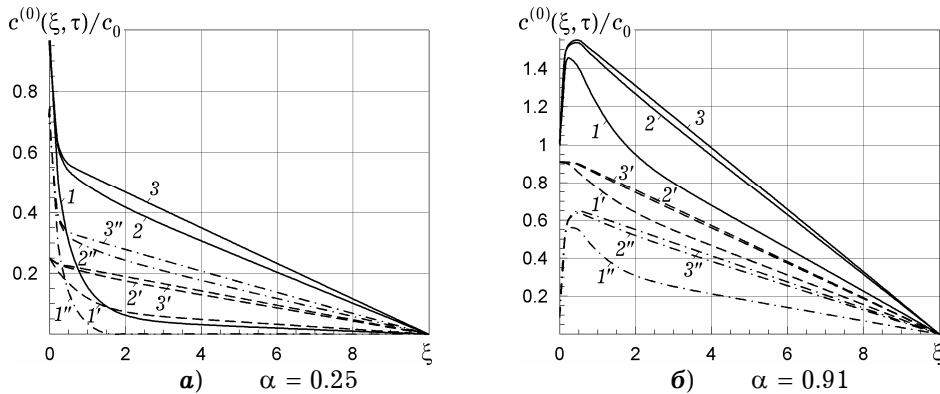


Рис. 1

Зазначимо, що для нульового етапу розпаду коефіцієнт  $\alpha$  поверхневого розподілу домішкових частинок між станами суттєво впливає на поведінку і значення як сумарної концентрації розпадної домішкової речовини, так і концентрацій на кожному з шляхів міграції зокрема (рис. 1). При цьому для переважного попадання домішкової речовини з поверхні на повільний шлях міграції ( $\alpha = 0.25$ ) характерною є монотонно спадна поведінка функції сумарної концентрації (рис. 1а), значення якої з часом зростає на всьому проміжку, доки не вийде на усталений режим (криві 3, 3', 3'', рис. 1а). Для  $\alpha = 0.25$  поведінка функції  $c^{(0)}(\xi, \tau)$  в усталеному режимі є близькою до лінійної на інтервалі  $[0, 0.03 \xi_0]$ . Якщо в системі переважаючим є надходження частинок з поверхні на швидкий шлях міграції ( $\alpha = 0.91$ ), то спостерігаємо характерне приповерхнєве зростання сумарної концентрації (криві 1, 1', 1''-3, 3', 3'', рис. 1б). Формування максимуму сумарної концентрації  $c^{(0)}(\xi, \tau)$  у приповерхневій області тіла відбувається за рахунок аналогічної поведінки функції концентрації домішкової речовини на повільному шляху міграції  $c_2^{(0)}(\xi, \tau)$  (криві 1''-3'', рис. 1б).

Сумарна концентрація домішки  $c^{(0)}(\xi, \tau)$  з часом зростає у всій області тіла (рис. 1), доки не вийде на усталений режим. При цьому в околі границі шару, де діє джерело маси, наявна область  $\xi \in [0, 0.035 \xi_0]$  різкого спадання функції  $c^{(0)}(\xi, \tau)$  для малих  $\alpha$  і область  $\xi \in [0, 0.05 \xi_0]$  різкого зростання для великих  $\alpha$ . В іншій частині області тіла для малих часів функція концентрації має істотно нелінійний характер, з часом наближаючись до лінійного, що характерно для усталеного режиму.

Зменшення різниці між коефіцієнтами дифузії на повільному та швидкому шляхах міграції призводить до істотного зростання сумарної концентрації розпадних частинок на всьому проміжку для малих  $\alpha$ . У той же час для великих  $\alpha$  зі зростанням відношення коефіцієнтів дифузії  $d^{(0)}$  на проміжку  $\xi \in [0, 0.1 \xi_0]$  відбувається зменшення функції концентрації  $c^{(0)}(\xi, \tau)$ , згладження пікових значень і незначний зсув її максимуму від поверхні тіла. На решті проміжку ( $\xi \in [0.1 \xi_0, \xi_0]$ ) сумарна концентрація зростає, проте неістотно. Так, для базових значень параметрів задачі максимальна різниця складає 6%. Зазначимо, що зростання коефіцієнта  $a_{11}^{(1)}$ , який характеризує інтенсивність процесів переходу частинок речовини  $\mathbf{K}^{(0)}$  зі швидкого шляху міграції на повільний, призводить до зростання сумарної концентрації в усій області тіла. При цьому для малих  $\alpha$  таке зростання є набагато більшим, ніж для великих.

**3. Основні закономірності поведінки концентрацій домішкових частинок на першому етапі розпаду.** На рис. 2 подано залежності від  $\xi$  концентрацій домішкової речовини  $c_1^{(1)}(\xi, \tau)$  на швидкому шляху міграції (криві 1'-3', штрихові лінії),  $c_2^{(1)}(\xi, \tau)$  - на повільному (криві 1''-3'', штрихпунктирні лінії) та їхня сума  $c^{(1)}(\xi, \tau)$  (суцільні лінії) на першому етапі каскадного розпаду у моменти безрозмірного часу  $\tau = 0.8, 2, 20$  (криві 1, 1', 1''-3, 3', 3'' відповідно). Графіки на рис. 2а відповідають малому значенню коефіцієнта  $\alpha = 0.25$  поверхневого розподілу домішкових частинок між станами на попередньому (нульовому) етапі розпаду, а на рис. 2б - переважаючому попаданню речовини  $\mathbf{K}^{(0)}$  з поверхні на швидкий шлях дифузії (значення  $\alpha = 0.91$ ).

Зазначимо, що на першому кроці каскадного розпаду для речовини, що утворилась внаслідок розпаду домішкової речовини  $\mathbf{K}^{(0)}$ , джерело якої діє на поверхні  $\xi = 0$ , сумарна концентрація частинок  $\mathbf{K}^{(1)}$  з ростом часу протікання процесу гетеродифузії спочатку зростає, досягаючи максимальних значень у верхній половині тіла, а потім спадає на всьому проміжку. При цьому для малих часів характерне приповерхнєве накопичення частинок домішки, максимум концентрації якої з часом зростає і зсувається вглиб тіла. Для безрозмірного часу  $\tau = 2$  зафіксовано максимальні значення сумарної концентрації  $c^{(1)}(\xi, \tau)$  як для малих, так і для великих значень  $\alpha$ . Проте, якщо для великих  $\alpha$  сумарна концентрація, досягнувши максимуму, відразу починає спадати, то для  $\alpha = 0.25$  максимальні значення концентрації  $c^{(1)}(\xi, \tau)$  зберігаються в околі максимально досяжних значень ще упродовж деякого часу.

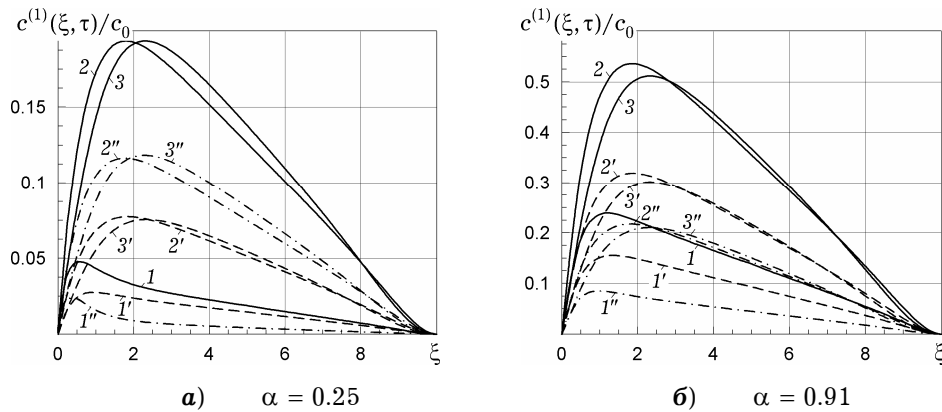


Рис. 2

Для малих значень коефіцієнта поверхневого розподілу домішки на нульовому етапі сумарна концентрація частинок  $\mathbf{K}^{(1)}$  приблизно вдвічі менша від концентрації для великих значень  $\alpha$  (рис. 2а і рис. 2б). При цьому поведінка сумарної концентрації, а також концентрацій домішки на швидкому та повільному шляхах залишається тією самою при зміні параметра  $\alpha$ . Зауважимо, що для малих значень коефіцієнта поверхневого розподілу домішки на нульовому етапі більший (у 1.5 рази) вклад у сумарну концентрацію частинок на першому кроці вносить концентрація домішки, що мігрує на повільному шляху для середніх і великих часів протікання процесу (криві 2, 3, рис. 2а). У той же час для великих  $\alpha$  спостерігаємо протилежну ситуацію – більший вклад вносить концентрація розпадних частинок на швидкому шляху незалежно від часу протікання процесу (криві 1–3, рис. 2б). Для малих значень  $\alpha$  і малих часів концентрації в обох станах вносять сумірний вклад у функцію  $c^{(1)}(\xi, \tau)$  (криві 1, рис. 2а).

Рис. 3 ілюструє розподіли сумарної концентрації  $c^{(1)}(\xi, \tau)$  домішкової речовини  $\mathbf{K}^{(1)}$  для значень параметра  $a_{11}^{(1)} = 2, 4, 6, 8, 20$  (криві 1–5).

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 величину сумарної концентрації. Так, збільшення параметра  $a_{11}^{(1)}$  на порядок призводить до зменшення сумарної концентрації у 4.5 разів для малих значень коефіцієнта поверхневого розподілу  $\alpha$  (рис. 3а) і в 6 разів – для великих значень  $\alpha$  (рис. 3б).

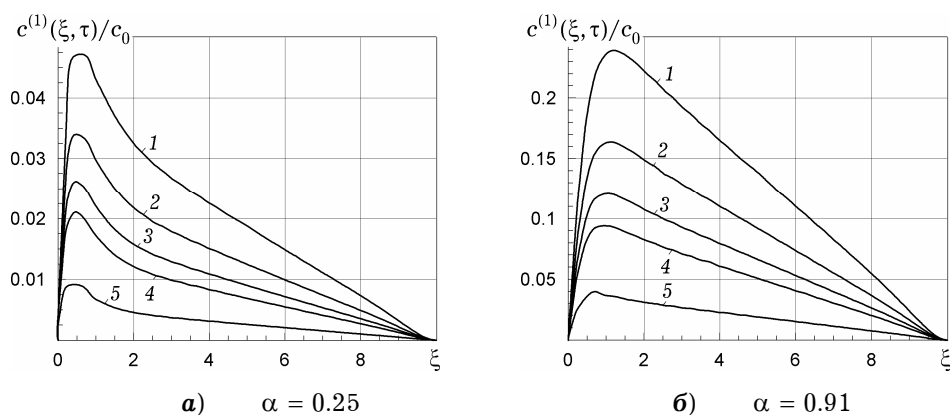


Рис. 3

**4. Закономірності розподілів концентрацій домішкових частинок на другому етапі розпаду.** На рис. 4 подано залежності концентрацій  $c^{(2)}(\xi, \tau)$  домішкової речовини  $\mathbf{K}_1^{(2)}$  на швидкому (криві 1'–4', штрихові лінії),  $\mathbf{K}_2^{(2)}$  на повільному шляхах міграції (криві 1''–4'', штрихпунктирні лінії) та їхня сума  $\mathbf{K}^{(2)}$  (криві 1–4, суцільні лінії) на першому етапі каскадного розпаду відповідно для моментів безрозмірного часу  $\tau = 0.8, 2, 20, 50$  при значеннях коефіцієнтів поверхневого розподілу домішкових частинок  $\mathbf{K}^{(0)}$  між станами  $\alpha = 0.25$  (рис. 4а) та  $\alpha = 0.91$  (рис. 4б).

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 другому етапі каскадного розпаду приблизно у 2.5 рази менша, ніж для великих значень  $\alpha$  (рис. 4а і рис. 4б), незалежно від часу протікання процесу. При цьому для малих  $\alpha$  вклад концентрації  $c_2^{(2)}(\xi, \tau)$  на повільному шляху міграції значно більший, ніж вклад концентрації  $c_1^{(2)}(\xi, \tau)$  на швидкому шляху. Так,

$$\frac{\max_{\xi \in [0, \xi_0]} c_2^{(2)}(\xi, \tau)}{\max_{\xi \in [0, \xi_0]} c_1^{(2)}(\xi, \tau)} \approx 2$$

для моменту часу  $\tau = 20$  (криві 3' і 3'', рис. 4а). Зауважимо, 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 3' і 3'', рис. 4б), а потім збільшується до 23% для  $\tau = 50$  (криві 4' і 4'', рис. 4б) при зменшенні значень концентрацій на обох шляхах міграції. При цьому при зростанні концентрацій ( $0 < \tau < 20$ ) функція  $c_1^{(2)}(\xi, \tau)$  є більшою від  $c_2^{(2)}(\xi, \tau)$  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. 4б).

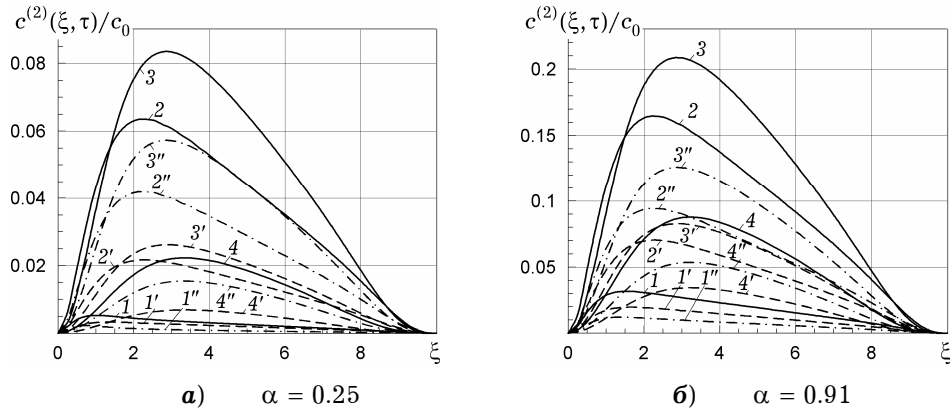


Рис. 4

Розподіли сумарної концентрації домішкової речовини  $\mathbf{K}^{(2)}$  для різних значень параметра інтенсивності сорбції  $a_{11}^{(2)} = 2, 4, 6, 8, 12$  зображено на рис. 5а (криві 1–5), а для коефіцієнта  $a_{12}^{(2)} = 0.1, 0.5, 0.8, 1, 1.6$ , що визначає інтенсивність процесу десорбції, – на рис. 5б, при  $\alpha = 0.25$  і базових значеннях решти параметрів задачі,  $\tau = 0.8$ .

Рис. 6 ілюструє залежність сумарної концентрації частинок речовини  $\mathbf{K}^{(2)}$  від коефіцієнтів інтенсивності сорбції на попередніх етапах каскадного розпаду. На рис. 6а криві 1–5 відповідають значенням параметрів сорбції на нульовому етапі розпаду  $a_{11}^{(0)} = 4, 6, 8, 10, 20$ , а на рис. 6б криві 1–5 описують функцію  $c^{(2)}(\xi, \tau)$  для значень коефіцієнта сорбції на першому етапі  $a_{11}^{(1)} = 2, 4, 6, 8, 20$  (криві 1–5), при  $\alpha = 0.25$ .

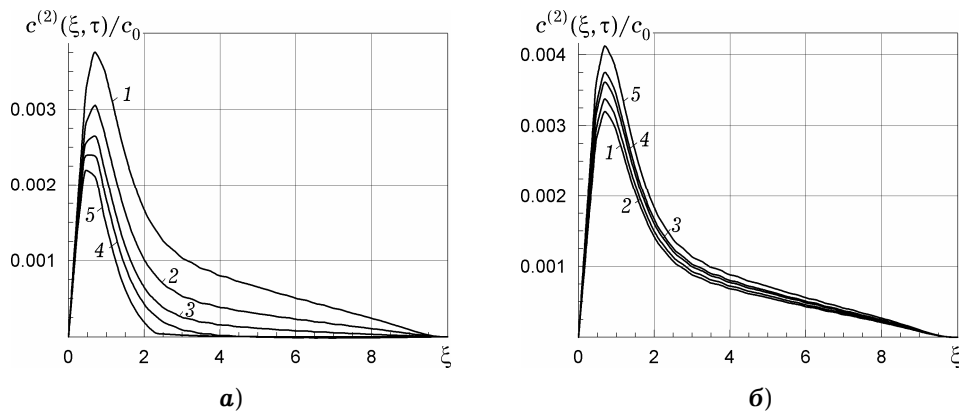


Рис. 5

Зауважимо, що зі збільшенням інтенсивності сорбції (тобто зростання 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. 5а). 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 нульовою в межах точності проведення розрахунків ( $\varepsilon = 10^{-6}$ ), зокрема,  $c^{(2)}(\xi, \tau)|_{a_{11}^{(2)}=8} = 0$  в точці  $\xi = 0.44 \xi_0$  (крива 4, рис. 5а),

$c^{(2)}(\xi, \tau)|_{a_{11}^{(2)}=12} = 0$  в точці  $\xi = 0.39 \xi_0$  (крива 5, рис. 5а). У той же час збільшення коефіцієнта інтенсивності десорбції  $a_{12}^{(2)}$  призводить до зростання сумарної концентрації речовини  $\mathbf{K}^{(2)}$  в усій області тіла, при цьому поведінка функції  $c^{(2)}(\xi, \tau)$  залишається такою самою (рис. 5б). 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 (для розглядуваного випадку  $\xi_{\max} = 0.078 \xi_0$  (рис. 5б)).

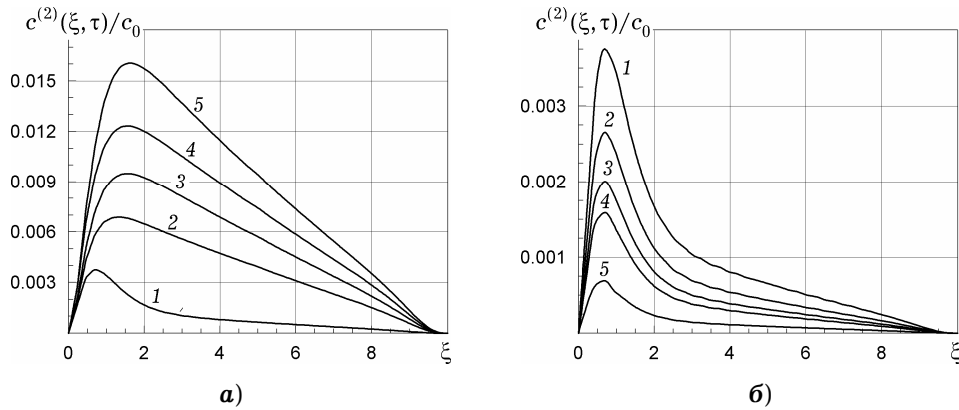


Рис. 6

Зазначимо, що коефіцієнти інтенсивності сорбції і десорбції на попередніх етапах каскадного розпаду суттєво впливають на поведінку і значення сумарної концентрації домішки на етапі  $i = 2$  (рис. 6). Наприклад, при збільшенні коефіцієнта інтенсивності сорбції на нульовому етапі розпаду в 5 разів значення сумарної концентрації  $c^{(2)}(\xi, \tau)$  зростає на порядок (рис. 6а). При цьому для малих значень коефіцієнта  $a_{11}^{(0)}$  спостерігається накопичення сумарної концентрації речовини  $\mathbf{K}^{(2)}$  у приповерхневій області тіла (крива 1, рис. 6а). При зміні коефіцієнта інтенсивності сорбції на етапі  $i = 1$  спостерігаємо протилежну ситуацію – концентрація  $c^{(2)}(\xi, \tau)$  зростає в рази при зменшенні на порядок значень коефіцієнта  $a_{11}^{(1)}$  (рис. 6б). При цьому функція  $c^{(2)}(\xi, \tau)$  досягає свого максимуму в тій самій точці. Для вибраних базових значень параметрів задачі  $\xi_{\max} = 0.069 \xi_0$  (рис. 6б).

Ефект на рис. 3, рис. 5а і рис. 6б, пов'язаний зі зростанням сумарних концентрацій домішок як на першому, так і на другому етапах розпаду (речовини  $\mathbf{K}^{(1)}$  і  $\mathbf{K}^{(2)}$ ) при збільшенні інтенсивності переходів відповідних частинок зі швидкого шляху на повільний, можемо пояснити 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  $\mathbf{K}^{(0)}$ , потрапивши у тіло, концентруються на повільному шляху міграції і там розпадаються, генеруючи більшу кількість частинок речовини  $\mathbf{K}^{(1)}$  саме на повільному шляху. Крім цього, за рахунок інтенсивнішого процесу сорбції і на першому етапі розпаду істотно збільшується потужність джерела маси для речовини  $\mathbf{K}^{(2)}$  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).



**5. Числовий аналіз дифузійних потоків домішкових частинок на першому етапі розпаду.** Кількісне дослідження потоків маси проведено на основі формул (19), а також формул (4'), (4''), (5), і (14'') з [1]. 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. 7 проілюстровано зміну в часі 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. 7а) та  $\alpha = 0.91$  (рис. 7б).

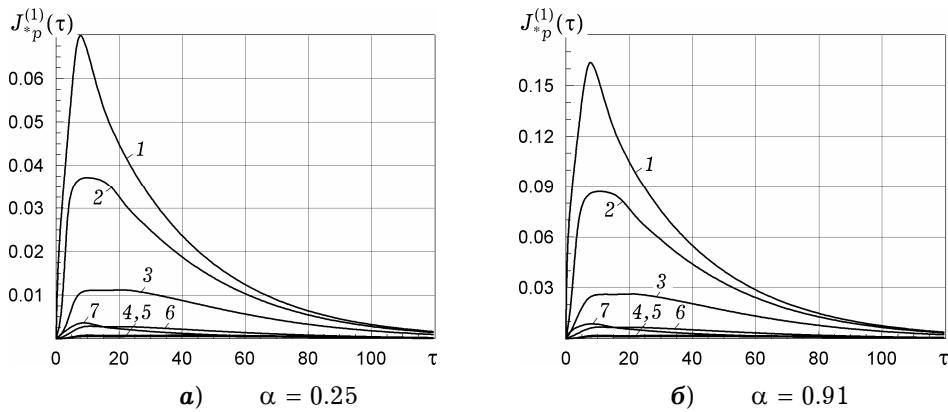


Рис. 7

Рис. 8 ілюструє зміну в часі функції потоку  $\xi_0 J_{*p}^{(1)}(\tau)/c_0 d_0^{(0)}$  через переріз  $\xi_* = 1$  (рис. 8а) і через нижню границю тіла  $\xi_* = \xi_0$  (рис. 8б) при  $d^{(1)} = 0.3$ ,  $d_0^{(1)} = 0.2$  для значень коефіцієнта поверхневого розподілу між станами  $\alpha = 0.1, 0.25, 0.5, 0.75, 0.91$  речовини  $\mathbf{K}^{(0)}$  (криві 1-5).

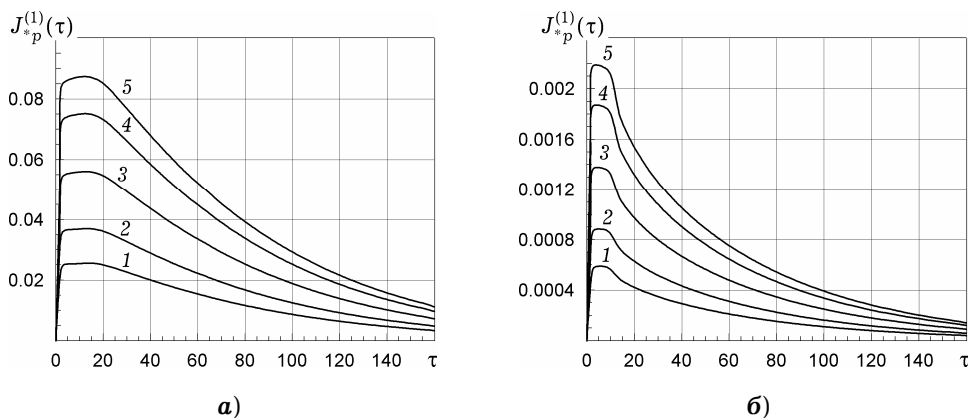


Рис. 8

На рис. 9 і рис. 10 показано вплив відносних коефіцієнтів дифузії у різних станах на розподіли сумарних дифузійних потоків частинок домішки  $\mathbf{K}^{(1)}$  через нижню границю шару  $\xi_* = \xi_0$  для значення  $\alpha = 0.91$  параметра поверхневого розподілу речовини  $\mathbf{K}^{(0)}$ .

Криві на рис. 9 обчислено для різних значень коефіцієнта дифузії  $d_0^{(1)}$  речовини  $\mathbf{K}^{(1)}$  на швидкому шляху міграції, віднесеного до коефіцієнта

дифузії домішки у стані  $j = 1$  (на повільному шляху) на нульовому етапі. Криві 1–7 відповідають значенням  $d_0^{(1)} = 0.3, 0.9, 1.5, 2, 4, 8, 10$  при  $d^{(1)} = 0.2$ .

Рис. 10 ілюструє зміну в часі потоків маси  $J_{*p}^{(1)}(\tau)$  для різних значень коефіцієнта дифузії  $d^{(1)}$  домішки  $\mathbf{K}^{(1)}$  на повільному шляху міграції, віднесеного до коефіцієнта дифузії на швидкому шляху на нульовому етапі. Криві 1–7 відповідають значенням  $d^{(1)} = 0.2, 0.9, 1.5, 2, 4, 8, 10$  при  $d_0^{(1)} = 10$ .

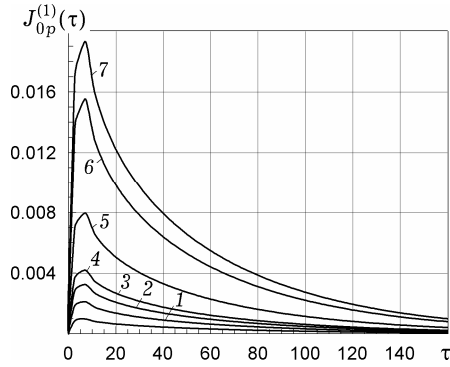


Рис. 9

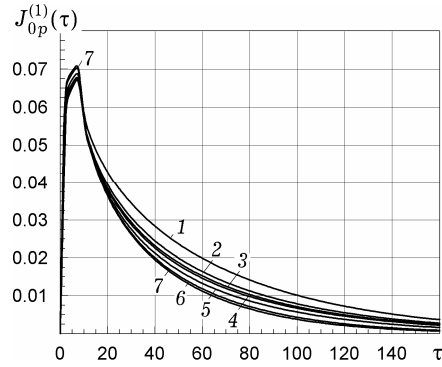


Рис. 10

Характерною особливістю поведінки сумарних дифузійних потоків домішкової речовини  $\mathbf{K}^{(1)}$ , що утворилася внаслідок розпаду речовини  $\mathbf{K}^{(0)}$ , є різке зростання  $J_{*p}^{(1)}(\tau)$  від початку процесу гетеродифузії за каскадного розпаду мігруючих речовин (рис. 7), швидке досягнення свого максимуму ( $\tau_{\max} \in [8, 15]$ ) і подальше повільне монотонне спадання значень сумарного потоку. Проте для перерізів – поверхонь тіла, через які обчислюємо дифузійний потік, біля верхньої границі тіла, наприклад,  $\xi = \xi_* = 1$ , після проміжку різкого зростання функції потоку  $J_{*p}^{(1)}(\tau)$  наявний проміжок подальшого повільного зростання (рис. 8a) для коефіцієнтів дифузії  $d^{(1)}$  і  $d_0^{(1)}$ , які на етапі  $i = 1$  є меншими, ніж відповідні коефіцієнти на нульовому етапі (рис. 8a).

Найінтенсивнішими є потоки домішки  $\mathbf{K}^{(1)}$  через перерізи біля поверхні тіла, де діє джерело маси речовини  $\mathbf{K}^{(0)}$  (рис. 7). З віддаленням поверхні  $\xi = \xi_*$  від джерела інтенсивність потоку спадає, досягаючи свого мінімуму в околі  $3.8 < \xi_* < 5.5$ , при цьому максимальні значення  $J_{*p}^{(1)}(\tau)$  зменшуються на порядки:

$$\frac{J_{*p \max}^{(1)}(\tau)|_{\xi=5}}{J_{*p \max}^{(1)}(\tau)|_{\xi=0.5}} = 0.0073 \quad \text{для} \quad \alpha = 0.25$$

і

$$\frac{J_{*p \max}^{(1)}(\tau)|_{\xi=5}}{J_{*p \max}^{(1)}(\tau)|_{\xi=0.5}} = 0.0074 \quad \text{для} \quad \alpha = 0.91.$$

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:

$$\frac{J_{*p \max}^{(1)}(\tau)|_{\xi=9.5}}{J_{*p \max}^{(1)}(\tau)|_{\xi=5}} = 6.9 \quad \text{для} \quad \alpha = 0.25$$

i

$$\frac{J_{*p \max}^{(1)}(\tau)|_{\xi=9.5}}{J_{*p \max}^{(1)}(\tau)|_{\xi=5}} = 7.1 \quad \text{для} \quad \alpha = 0.91.$$

Для різних значень коефіцієнта  $\alpha$  поведінка функції потоку  $J_{*p}^{(1)}(\tau)$  не міняється, проте значення потоку зростає в рази на всьому часовому проміжку і для всіх перерізів для великих  $\alpha$  (рис. 7а і рис. 7б, рис. 8). Так,

$$\frac{J_{*p \max}^{(1)}(\tau)|_{\alpha=0.91}}{J_{*p \max}^{(1)}(\tau)|_{\alpha=0.25}} = 2.3 \quad \text{для} \quad \xi_* = 0.5$$

i

$$\frac{J_{*p \max}^{(1)}(\tau)|_{\alpha=0.91}}{J_{*p \max}^{(1)}(\tau)|_{\alpha=0.25}} = 2.4 \quad \text{для} \quad \xi_* = 9.5$$

при базових значеннях параметрів задачі. Поведінка функції потоку  $J_{*p}^{(1)}(\tau)$  через нижню границю  $\xi = \xi_0$  шару речовини  $\mathbf{K}^{(1)}$  є аналогічною: чим більше речовини  $\mathbf{K}^{(0)}$  з поверхні потрапляє на швидкий шлях дифузії, тим інтенсивніший потік речовини  $\mathbf{K}^{(1)}$  через границю  $\xi = \xi_0$  (рис. 8б). При цьому максимальні значення потоку відрізняються в рази:

$$\frac{J_{*p \max}^{(1)}(\tau)|_{\alpha=0.91}}{J_{0p \max}^{(1)}(\tau)|_{\alpha=0.25}} = 2.5.$$

Зазначимо, що зміна коефіцієнта дифузії на швидкому шляху міграції на етапі  $i = 1$  найбільше впливає для малих часових інтервалів процесу гетеродифузії (рис. 9), водночас 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. 10). При цьому збільшення коефіцієнта дифузії на швидкому шляху веде до зростання значення сумарного потоку розпадної речовини (рис. 9), а зростання коефіцієнта дифузії на повільному шляху – до зменшення значень  $J_{0p}^{(1)}(\tau)$  на проміжку  $\Delta\tau_m$  (рис. 10).

**Висновки.** У рамках моделі гетеродифузії двома шляхами досліджено процеси масоперенесення двома шляхами домішкових речовин за їхнього каскадного розпаду з урахуванням процесів сорбції–десорбції на основі розв’язків зв’язаних крайових задач гетеродифузії каскадного типу, коли концентрація частинок на певному кроці розпаду є джерелом маси розпадної речовини, яка дифундує, на наступному кроці. На основі отриманих формул розроблено пакет програм для комп’ютерного моделювання процесів дифузії–гетеродифузії і встановлено вплив вхідних даних на поведінку і значення концентрацій розпадних частинок на швидкому і повільному шляхах міграції та їхньої суми на перших трьох етапах розпаду. Проаналізовано поведінку сумарних дифузійних потоків домішки на першому етапі каскаду.

Показано, що на нульовому етапі каскадного розпаду з часом сумарна концентрація домішки зростає в усій області тіла, доки не вийде на установлений режим. При цьому в околі границі шару, де діє джерело маси, наявна область різкого спадання функції концентрації для малих значень коефіцієнта поверхневого розподілу частинок між станами та її різкого зростання для великих значень цього коефіцієнта.

На першому кроці каскадного розпаду для речовини, що утворилась внаслідок розпаду домішкової речовини на нульовому етапі розпаду, джерело якої діє на одній із поверхонь шару, сумарна концентрація частинок на першому етапі з ростом часу протікання процесу гетеродифузії спочатку зростає, досягаючи максимальних значень у верхній половині тіла, а потім спадає на всьому проміжку. При цьому для малих часів характерне приповерхнєве накопичення частинок, максимум концентрації яких зростає і зсувається вглиб тіла.

Для малих значень коефіцієнта поверхневого розподілу домішки на нульовому етапі сумарна концентрація частинок на першому етапі приблизно вдвічі менша від концентрації для великих значень коефіцієнта поверхневого розподілу. Для малих значень цього коефіцієнта на нульовому етапі більший (у 1.5 разів) вклад у сумарну концентрацію на першому кроці вносить концентрація домішки, що мігрує на повільному шляху, для середніх і великих часів протікання процесу. Проте для великих значень поверхневого розподілу наявна протилежна ситуація: більший вклад вносить концентрація розпадних частинок на швидкому шляху незалежно від часу протікання процесу.

Встановлено, що сумарна концентрація на другому етапі розпаду спочатку зростає, а її максимум зсувається вглиб тіла і для малих, і для великих значень коефіцієнта поверхневого розподілу на нульовому етапі. Показано, що якщо для малих часів накопичення сумарної концентрації на другому кроці розпаду відбувається біля поверхні тіла, де діє джерело маси на нульовому етапі розпаду, то з ростом часу протікання процесу гетеродифузії речовина на другому кроці більшою мірою накопичується всередині тіла, чому сприяє певний зсув джерела маси цієї речовини від поверхні, а також розпад частинок, що накопичились, та їхня міграція вглиб шару.

1. Білуцак Ю. І., Чернуха О. Ю. Моделювання процесів гетеродифузії двома шляхами за каскадного розпаду домішкових частинок. I. Крайові задачі каскадного типу // *Мат. методи та фіз.-мех. поля.* – 2018. – **61**, № 3. – С. 122–132.
2. Климов А. Н. Ядерная физика и ядерные реакторы. – Москва: Энергоатомиздат, 2002. – 464 с.
3. Купряжкин А. Я., Волобуев П. В., Суетин П. Е. Механизмы диффузии неона в хлориде калия // *Журн. техн. физики.* – 1975. – **45**, № 2. – С. 431–432.
4. Прохоров В. М. Миграция радиоактивных загрязнений в почвах. – Москва: Энергоиздат, 1981. – 98 с.
5. Чапля Є. Я., Чернуха О. Ю. Фізико-математичне моделювання гетеродифузного масопереносу. – Львів: Сполом, 2003. – 128 с.
6. Чернуха О. Ю., Білуцак Ю. І. Математична модель процесів гетеродифузії двома шляхами за каскадного розпаду мігруючих частинок // *Мат. методи та фіз.-мех. поля.* – 2018. – **61**, № 2. – С. 141–149.
7. Andreo P., Burns D. T., Nahum A. E., Seuntjens J. Fundamentals of ionizing radiation dosimetry: solutions to the exercises. – Weinheim: Wiley-VCH, 2017. – 184 p.
8. Audi G., Wapstra A. H., Thibault C. The Ame2003 atomic mass evaluation: (II). Tables, graphs and references // *Nucl. Phys. A.* – 2003. – **729**, No. 1. – P. 337–676. <https://doi.org/10.1016/j.nuclphysa.2003.11.003>.
9. Bé M.-M., Chisté V., Dulieu C. etc. Table of radionuclides (Comments on evaluation). – Bureau International des Poids et Mesures, 2008. – 829 p.

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ГЕТЕРОДИФФУЗИИ ДВУМЯ ПУТЯМИ ПРИ КАСКАДНОМ РАСПАДЕ ПРИМЕСНЫХ ЧАСТИЦ. II. КОЛИЧЕСТВЕННЫЙ АНАЛИЗ

*Исследованы процессы гетеродиффузии примесей при их каскадном распаде в теле с двумя путями миграции, сопровождающиеся массообменом между состояниями. На основе итерационно построенных решений системы связанных краевых задач гетеродиффузии каскадного типа проведен численный анализ функций концентраций примесных частиц, мигрирующих двумя путями в слое, на первых трех этапах распада, а также суммарных диффузионных потоков примесного вещества на первом шаге. Установлены основные закономерности таких процессов. Показано, что для малых времен накопление примесных частиц на втором этапе распада происходит вблизи поверхности тела, где действует источник массы на нулевом шаге, а со временем примесное вещество на втором этапе каскада в большей степени накапливается внутри тела.*

**Ключевые слова:** гетеродиффузия, каскадный распад, каскадная краевая задача, итерационно построенное решение, матричная функция Грина, численный анализ.

## MODELING OF PROCESSES OF HETERODIFFUSION IN TWO WAYS WITH CASCADE DECAY OF ADMIXTURE PARTICLES. II. QUANTITATIVE ANALYSIS

*The processes of heterodiffusion of admixture particles with its cascade decay in a body with two migration ways accompanied by mass exchange between states are investigated. On the basis of iteratively constructed solutions of the system of coupled boundary-value problems of heterodiffusion by cascade kind, the numerical analysis of functions of concentrations of admixture particles migrating in two ways in a layer is carried out on the first three stages of decay as well as total diffusion fluxes of admixture substance on the first step. The general regularities of such processes are determined. It is shown that for small times accumulation of admixture particles on the second stage of decay occurs near the body surface where the mass source on zero stage acts, and with time, admixture substance on the second stage of cascade accumulates mostly in the interior of the body.*

**Key words:** heterodiffusion, cascade decay, cascade boundary-value problem, iteratively constructed solution, matrix Green's function, numerical analysis.

<sup>1</sup> Центр мат. моделювання  
Ін-ту прикл. проблем механіки і математики  
ім. Я. С. Підстригача НАН України, Львів,

Одержано  
21.04.18

<sup>2</sup> Нац. ун-т «Львів. політехніка», Львів