УДК 517.958:532.72

Ю. І. Білущак[1,2*], О. Ю. Чернуха[1,2]

МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ ГЕТЕРОДИФУЗІЇ ДВОМА ШЛЯХАМИ ЗА КАСКАДНОГО РОЗПАДУ ДОМІШКОВИХ ЧАСТИНОК. I. КРАЙОВІ ЗАДАЧІ КАСКАДНОГО ТИПУ

Досліджено процеси гетеродифузії домішок за їх каскадного розпаду в тілі з двома шляхами міграції, що супроводжуються масообміном між станами. 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 допомогою функцій Гріна. Отримано формули для дифузійних потоків мігрувальних домішкових речовин крізь заданий переріз тіла та кількості розпадних речовин, що пройшли через шар, за певний часовий інтервал.

Ключові слова: *гетеродифузія, каскадний розпад, крайова задача каскадного типу, ітераційний процес, функція Гріна.*

У природі існує велика група реакцій, які складаються з кількох етапів, в де кожний елементарний пов'язаний з попередніми і без виконання якого подальша реакція неможлива. Це каскадні або ланцюгові реакції, хімічні перетворення та ядерні процеси, в яких проміжна активна частинка (вільний радикал, атом, збуджена молекула у хімічних перетвореннях, нейтрон в ядерних процесах) викликає каскад або ланцюг перетворень вихідних речовин [10, 13]. Прикладом каскадних хімічних реакцій є радикальна полімеризація, окиснення, піроліз та галогенування вуглеводнів та інших хімічних з'єднань, ядерних ланцюгових процесів – ланцюгове ділення атомних ядер [5, 12, 13]. При цьому під дією зовнішніх умов і частинки вихідної субстанції, і отримані в результаті каскадних перетворень речовини на кожному етапі каскаду беруть участь у фізико-механічних процесах, що протікають у середовищі [6, 11, 14]. Під час побудови математичних моделей фізичних процесів, зокрема масоперенесення, що супроводжуються хімічними або ядерними перетвореннями, необхідно не тільки враховувати взаємозв'язок фізичних і хімічних явищ, але й структуру середовища, якщо вона неоднорідна. Зокрема, для масоперенесення домішкових речовин у дрібнодисперсних і полікристалічних тілах, або для дифузії домішок у металах [7] характерна міграція частинок двома шляхами зі суттєво різними коефіцієнтами дифузії, яка супроводжується масообміном частинками між цими станами (сорбція-десорбція).

У праці [9] побудована математична модель гетеродифузії двома шляхами за каскадного розпаду домішкових речовин у багатокомпонентному середовищі з мікроструктурою. Отримані взаємозв'язані системи диференціальних рівнянь є основою формулювання крайових задач каскадного типу для кількісного дослідження масоперенесення в тілах з двома шляхами міграції.

У цій праці побудовано крайові задачі гетеродифузії каскадного типу, коли розв'язок задачі на одному етапі є джерелом на наступному. При цьому враховано процеси типу сорбції-десорбції. Запропоновано метод розв'язування таких задач за ітераційної процедурою з використанням функцій Гріна.

1. **Каскадні крайові задачі гетеродифузії**. Дослідимо масоперенесення домішок у шарі з двома шляхами міграції. Частинки домішкової речовини $K^{(0)}$, які потрапили у тіло, дифундують з різними коефіцієнтами дифузії у двох різних станах $j = 1, 2$, сорбуються-десорбуються (тобто відбувається

* byixx13@gmail.com

масообмін між станами) [3] і розпадаються внаслідок радіоактивного розпаду або хімічних реакцій. За розпаду речовини $K_j^{(0)}$ у стані $j = 1; 2$ утворюються частинки інших домішкових речовин $K_j^{(1)}$ і $K_j^{(N)}$, причому частинки $K^{(N)}$ вже не розпадаються. Згенерована речовина $K^{(1)}$ мігрує двома шляхами, сорбується-десорбується і розпадається, утворюючи частинки речовини $K^{(2)}$ в обох станах і нерозпадні речовини, які віднесемо до $K^{(N)}$. Такий каскадний розпад продовжується, доки на $(N-1)$-му кроці не отримаємо тільки нерозпадні частинки домішкової речовини.

Математична модель гетеродифузії двома шляхами за каскадного розпаду мігрувальних домішкових речовин побудована раніше [9] у припущенні, що радіоактивний розпад або хімічні реакції, які призвели до розпадання речовин, незворотні, а також знехтувано конвективні складники масоперенесення.

Для одновимірного за просторовою координатою випадку у природній безрозмірній формі [7] гетеродифузію двома шляхами за каскадного розпаду мігрувальних частинок описують такі системи диференціальних рівнянь:

для $i = 0$

$$\frac{\partial c_1^{(0)}}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 c_1^{(0)}}{\partial \xi^2} + d_1^{(0)} \frac{\partial^2 c_2^{(0)}}{\partial \xi^2} - a_{11}^{(0)} c_1^{(0)} + a_{12}^{(0)} c_2^{(0)},$$

$$\frac{\partial c_2^{(0)}}{\partial \tau} = d_2^{(0)} \frac{\partial^2 c_1^{(0)}}{\partial \xi^2} + d^{(0)} \frac{\partial^2 c_2^{(0)}}{\partial \xi^2} + a_{21}^{(0)} c_1^{(0)} - a_{22}^{(0)} c_2^{(0)}; \tag{1'}$$

для $i = \overline{1, N-1}$

$$\frac{\partial c_1^{(i)}}{\partial \tau} = d_0^{(i)} \frac{\partial^2 c_1^{(i)}}{\partial \xi^2} + d_1^{(i)} \frac{\partial^2 c_2^{(i)}}{\partial \xi^2} - a_{11}^{(i)} c_1^{(i)} + a_{12}^{(i)} c_2^{(i)} + a_{\lambda 1}^{(i-1)} c_1^{(i-1)},$$

$$\frac{\partial c_2^{(i)}}{\partial \tau} = d_2^{(i)} \frac{\partial^2 c_1^{(i)}}{\partial \xi^2} + d^{(i)} \frac{\partial^2 c_2^{(i)}}{\partial \xi^2} + a_{21}^{(i)} c_1^{(i)} - a_{22}^{(i)} c_2^{(i)} + a_{\lambda 2}^{(i-1)} c_2^{(i-1)}; \tag{1''}$$

для $i = N$

$$\frac{\partial c_1^{(N)}}{\partial \tau} = d_0^{(N)} \frac{\partial^2 c_1^{(N)}}{\partial \xi^2} + d_1^{(N)} \frac{\partial^2 c_2^{(N)}}{\partial \xi^2} - a_{11}^{(N)} c_1^{(N)} + a_{12}^{(N)} c_2^{(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 1}^{(iN)} c_1^{(i)},$$

$$\frac{\partial c_2^{(N)}}{\partial \tau} = d_2^{(N)} \frac{\partial^2 c_1^{(N)}}{\partial \xi^2} + d^{(N)} \frac{\partial^2 c_2^{(N)}}{\partial \xi^2} + a_{21}^{(N)} c_1^{(N)} - a_{22}^{(N)} c_2^{(N)} + \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 2}^{(iN)} c_2^{(i)}, \tag{1'''}$$

де $c_j^{(i)}$ – концентрація домішкових частинок $K_j^{(i)}$ на j-му шляху міграції для i-го кроку розпаду $(i = 0, \ldots, N)$; $d_0^{(i)}$, $d^{(i)}$ – приведені коефіцієнти дифузії речовини $K_j^{(i)}$ $(i = 0, \ldots, N)$ на i-му кроці розпаду у станах $j = 1$ і 2 відповідно; $d_1^{(i)}$, $d_2^{(i)}$ – приведені перехресні коефіцієнти дифузії [3]; $a_{11}^{(i)} = \left(k_1^{(i)} + \lambda_1^{(i+1)} + \lambda_1^{(iN)}\right)/k_2^{(0)}$, $a_{22}^{(i)} = \left(k_2^{(i)} + k_3^{(i)} + \lambda_2^{(i+1)} + \lambda_2^{(iN)}\right)/k_2^{(0)}$, $a_{12}^{(i)} = k_2^{(i)}/k_2^{(0)}$, $a_{21}^{(i)} = k_1^{(i)}/k_2^{(0)}$; $a_{\lambda j}^{(i-1)} = \lambda_j^{(i-1)}/k_2^{(0)}$ – коефіцієнт інтенсивності розпаду речовини $K_j^{(i-1)}$ $(i = 1, \ldots, N,\ j = 1; 2)$, $a_{\lambda 1}^{(iN)}$ – коефіцієнт, який визначає частку нерозпадної (або нешкідливої) речовини, що утворилася внаслідок розпаду на i-му кроці $K_j^{(i)}$ $(i = 1, \ldots, N-1, j = 1; 2)$; $k_1^{(i)}$, $k_2^{(i)}$ – коефіцієнти інтенсивності процесів переходу частинок між станами; $\lambda_j^{(i-1)}$, $\lambda_j^{(i+1)}$, $\lambda_j^{(iN)}$ – сталі, які визначають процес розпаду.

У системах рівнянь (1′)–(1‴) використали безрозмірні змінні $\tau = k_2^{(0)} t$; $\xi = \left(k_2^{(0)} / D_{11}^{(0)}\right)^{1/2} x$, де t – час, x – просторова декартова координата; $k_2^{(0)}$ – коефіцієнт інтенсивності переходу частинок речовини $K^{(0)}$ з другого стану у перший на нульовому етапі розпаду; $D_{11}^{(0)}$ – коефіцієнт дифузії домішки $K_1^{(0)}$ на швидкому шляху міграції $j = 1$. Надалі вважаємо, що стан $j = 1$ відповідає швидкому шляху перенесення, а $j = 2$ – повільному для всіх етапів розпаду, тобто $d_0^{(i)} < d_1^{(i)}$, $i = 1,\ldots,N$, $d_0^{(0)} = 1$.

Приймемо, що у початковий момент часу домішкові речовини відсутні в тілі, тобто

$$c_1^{(i)}(\xi,\tau)\Big|_{\tau=0} = c_2^{(i)}(\xi,\tau)\Big|_{\tau=0} = 0\,, \qquad i = 1,\ldots,N\,, \tag{2}$$

а для часів $\tau > 0$ на поверхні шару $\xi = 0$ підтримується стале значення сумарної концентрації c_0 домішкової речовини $K^{(0)}$, яка між різними шляхами міграції для $i = 0$ розподіляється так:

$$c_1^{(0)}(\xi,\tau)\Big|_{\xi=0} = \alpha c_0\,, \quad c_2^{(0)}(\xi,\tau)\Big|_{\xi=0} = (1-\alpha) c_0\,, \tag{3′}$$

де α $(0 \le \alpha \le 1)$ – параметр, який визначає частку домішкової речовини, що з поверхні тіла потрапила на швидкий шлях міграції.

Для $i = 1,\ldots,N$ на верхній поверхні шару приймаємо нульову граничну умову:

$$c_1^{(i)}(\xi,\tau)\Big|_{\xi=0} = 0\,, \quad c_2^{(i)}(\xi,\tau)\Big|_{\xi=0} = 0\,, \qquad i = 1,\ldots,N\,. \tag{3″}$$

Вважаємо, що на «нижній» межі шару $\xi = \xi_0$ концентрація частинок на всіх етапах розпаду нульова, тобто

$$c_1^{(i)}(\xi,\tau)\Big|_{\xi=\xi_0} = c_2^{(i)}(\xi,\tau)\Big|_{\xi=\xi_0} = 0\,, \qquad i = 0,\ldots,N\,. \tag{3‴}$$

Зазначимо, що нульові крайові умови для $i = 1,\ldots,N$ (3″) і (3‴) означають, що джерелом маси на i-му кроці розпаду є тільки ті частинки, що утворились внаслідок розпаду домішки на кроці $i-1$.

Зауважимо також, що коефіцієнт поверхневого розподілу домішкових частинок між станами α можна визначити, наприклад, з умови термодинамічної рівноваги переходу частинок між різними шляхами міграції [8], яка у безрозмірній формі набуває вигляду

$$a_{21}^{(0)} c_1^{(0)}(\xi,\tau) - a_{12}^{(0)} c_2^{(0)}(\xi,\tau) = 0\,.$$

Тоді, враховуючи означення сумарної концентрації $c^{(0)} = c_1^{(0)} + c_2^{(0)}$, маємо значення величини α, що відповідає рівноважному стану:

$$\alpha_{eq} = \frac{a_{12}^{(0)}}{a_{12}^{(0)} + a_{21}^{(0)}}\,.$$

Зауважимо, що у більшості випадків $\alpha_{eq} \in [0.9;1]$, тобто у рівноважному стані переважна частина домішкової речовини повинна потрапляти з поверхні на швидкий шлях дифузії, проте у реальних умовах коефіцієнт поверхневого розподілу α набуває будь-які значення з області визначення.

2. **Побудова розв'язків крайових задач гетеродифузії каскадного типу**. На *нульовому* етапі розпаду розв'язок рівнянь гетеродифузії розпадної речовини (1′) з крайовими умовами (2), (3′), (3″) знаходимо з допомогою

інтегральних перетворень Лапласа за часом і скінченного sin-перетворення Фур'є за просторовою координатою [4], який можемо подати так:

концентрація розпадної домішки на швидкому шляху міграції

$$\frac{c_1^{(0)}(\tau,\xi)}{c_0} = \left\{\alpha - \frac{\tilde b_1}{ce}\right\}\left(1-\frac{\xi}{\xi_0}\right) -$$
$$- B\left[\left(\tilde a_1 + \frac{\tilde b_1}{x_1}\right)\frac{\sin(\pi - y)x_1}{\sin \pi x_1} - \left(\tilde a_1 + \frac{\tilde b_1}{x_2}\right)\frac{\sin(\pi - y)x_2}{\sin \pi x_2}\right] -$$
$$- \frac{2}{\xi_0}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\sin y_n\xi}{y_n(s_1 - s_2)}\left[\left(\alpha s_1 + p_1 + \frac{p_2}{s_1}\right)e^{s_1\tau} - \left(\alpha s_2 + p_1 + \frac{p_2}{s_2}\right)e^{s_2\tau}\right], \quad (4')$$

концентрація розпадних частинок на повільному шляху міграції

$$\frac{c_2^{(0)}(\tau,\xi)}{c_0} = \left\{1 - \alpha - \frac{\tilde b_2}{ce}\right\}\left(1-\frac{\xi}{\xi_0}\right) -$$
$$- B\left[\left(\tilde a_2 + \frac{\tilde b_2}{x_1}\right)\frac{\sin(\pi - y)x_1}{\sin \pi x_1} - \left(\tilde a_2 + \frac{\tilde b_2}{x_2}\right)\frac{\sin(\pi - y)x_2}{\sin \pi x_2}\right] -$$
$$- \frac{2}{\xi_0}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\sin y_n\xi}{y_n(s_1 - s_2)}\left[\left((1-\alpha)s_1 + p_1' + \frac{p_2'}{s_1}\right)e^{s_1\tau} - \left((1-\alpha)s_2 + p_1' + \frac{p_2'}{s_2}\right)e^{s_2\tau}\right], \quad (4'')$$

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

$$\frac{c^{(0)}(\tau,\xi)}{c_0} = \left\{1 - \frac{\tilde b}{ce}\right\}\left(1-\frac{\xi}{\xi_0}\right) -$$
$$- B\left[\left(\tilde a + \frac{\tilde b}{x_1}\right)\frac{\sin(\pi - y)x_1}{\sin \pi x_1} - \left(\tilde a + \frac{\tilde b}{x_2}\right)\frac{\sin(\pi - y)x_2}{\sin \pi x_2}\right] -$$
$$- \frac{2}{\xi_0}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\sin y_n\xi}{y_n(s_1 - s_2)}\left[\left(s_1 + \tilde p_1 + \frac{\tilde p_2}{s_1}\right)e^{s_1\tau} - \left(s_2 + \tilde p_1 + \frac{\tilde p_2}{s_2}\right)e^{s_2\tau}\right], \quad (4''')$$

де $B = \frac{1}{\sqrt{d^2 - 4ec^2}}$; $x_{1,2} = \frac{1}{2}\left(-\frac{d}{c} \pm \sqrt{\frac{d^2}{c^2} - 4e}\right)$, $\tilde a = \tilde a_1 + \tilde a_2$, $\tilde b = \tilde b_1 + \tilde b_2$, $\tilde p_l = p_l + p_l'$ $(l = 1,2)$, $\tilde a_1 = \left(d_1^{(0)}\alpha_2 + d^{(0)}\alpha_1\right)\frac{\pi^2}{\xi_0^2}$, $\tilde b_1 = \alpha_1 a_{22}^{(0)} - \alpha_2 a_{12}^{(0)}$, $\tilde a_2 = \frac{\pi^2}{\xi_0^2}(\alpha_2 + \alpha_1 d_2^{(0)})$, $\tilde b_2 = \alpha_2 a_{11}^{(0)} - \alpha_1 a_{21}^{(0)}$, $c = \left(d^{(0)} - d_1^{(0)} d_2^{(0)}\right)\frac{\pi^4}{\xi_0^4}$, $e = a_{11}^{(0)} a_{22}^{(0)} - a_{12}^{(0)} a_{21}^{(0)}$,

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

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

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

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

$p_2 = \left(d_1^{(0)}\alpha_2 + d^{(0)}\alpha_1\right) y_n^2 + \alpha_1 a_{22}^{(0)} - \alpha_2 a_{12}^{(0)}$, $p_1' = \left(1 - \alpha - \alpha d_2^{(0)}\right) y_n^2 +$

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

У стаціонарному режимі отримаємо такі асимптотичні вирази для концентрацій домішок на нульовому етапі розпаду:

$$\lim_{\tau\to\infty}\frac{1}{c_0}c_1^{(0)}(\tau,\xi) = \left\{\alpha - \frac{\tilde b_1}{ce}\right\}\left(1 - \frac{\xi}{\xi_0}\right) - B\left[\left(\tilde a_1 + \frac{\tilde b_1}{x_1}\right)\frac{\sin(\pi - y)x_1}{\sin \pi x_1} - \left(\tilde a_1 + \frac{\tilde b_1}{x_2}\right)\frac{\sin(\pi - y)x_2}{\sin \pi x_2}\right],$$

$$\lim_{\tau\to\infty}\frac{1}{c_0}c_2^{(0)}(\tau,\xi)=\left\{1-\alpha-\frac{\tilde b_2}{ce}\right\}\left(1-\frac{\xi}{\xi_0}\right)-B\left[\left(\tilde a_2+\frac{\tilde b_2}{x_1}\right)\frac{\sin(\pi-y)x_1}{\sin\pi x_1}-\left(\tilde a_2+\frac{\tilde b_2}{x_2}\right)\frac{\sin(\pi-y)x_2}{\sin\pi x_2}\right],$$

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

Зазначимо, що для моделі гетеродифузії двома шляхами асимптотичні доданки одержаних розв'язків є суттєво нелінійними і складаються в різних комбінаційних відношеннях типу $\dfrac{\sin(\pi-y)x}{\sin\pi x}$. При цьому кожне з таких відношень менше за одиницю. Також зауважимо, що лінійні частини асимптотичних доданків розв'язків відповідної задачі гетеродифузії нерозпадної речовини, тобто $1-\xi/\xi_0$, пропорційні коефіцієнту, який визначає частку домішки, що потрапила з поверхні на відповідний шлях міграції (α, $1-\alpha$ і 1). Водночас, якщо врахувати розпад мігрувальної речовини, в таких коефіцієнтах з'являється деяка «поправка» ($\tilde b_1/ce$, $\tilde b_2/ce$ і $\tilde b/ce$). Враховуючи, що ці «поправки» невід'ємні, то лінійні частини асимптот функцій (4) є не більші за аналогічні доданки концентрацій нерозпадної речовини, причому у кожному стані зокрема.

Для інших кроків каскадного розпаду $i=1,\ldots,N-1$ розв'язки крайових задач подамо через відповідні функції Гріна, розглядаючи розпад речовини на попередньому кроці каскаду як джерело маси на етапі i. Тоді

$$c_j^{(i)}(\xi,\tau)=a_{\lambda j}^{(i-1)}\int_0^{\tau}\int_0^{\xi_0}G_j^{(i)}(\xi,\xi';\tau,\tau')\,c_j^{(i-1)}(\xi',\tau')\,d\xi'd\tau',\quad j=1,2. \tag{5}$$

Тут $G_j^{(i)}(\tau,\tau';\xi,\xi')$ - функції Гріна задач (1″), (2), (3″), (3‴) для $i=1,\ldots,N-1$, тобто є розв'язками крайових задач

$$\frac{\partial G_1^{(i)}(\tau,\tau';\xi,\xi')}{\partial\tau}-d_0^{(i)}\frac{\partial^2G_1^{(i)}(\tau,\tau';\xi,\xi')}{\partial\xi^2}-d_1^{(i)}\frac{\partial^2G_2^{(i)}(\tau,\tau';\xi,\xi')}{\partial\xi^2}+$$

$$+a_{11}^{(i)}G_1^{(i)}(\tau,\tau';\xi,\xi')-a_{12}^{(i)}G_2^{(i)}(\tau,\tau';\xi,\xi')=\delta(\tau-\tau')\delta(\xi-\xi'),$$

$$\frac{\partial G_2^{(i)}(\tau,\tau';\xi,\xi')}{\partial\tau}-d_2^{(i)}\frac{\partial^2G_1^{(i)}(\tau,\tau';\xi,\xi')}{\partial\xi^2}-d^{(i)}\frac{\partial^2G_2^{(i)}(\tau,\tau';\xi,\xi')}{\partial\xi^2}-$$

$$-a_{21}^{(i)}G_1^{(i)}(\tau,\tau';\xi,\xi')+a_{22}^{(i)}G_2^{(i)}(\tau,\tau';\xi,\xi')=\delta(\tau-\tau')\delta(\xi-\xi') \tag{6}$$

за нульових крайових умов

$$G_j^{(i)}(\tau,\tau';\xi,\xi')\Big|_{\tau=0}=0,\ j=1,2; \tag{7′}$$

$$G_j^{(i)}(\tau,\tau';\xi,\xi')\Big|_{\xi=0}=0,\ i=1,\ldots,N-1,\ j=1,2; \tag{7″}$$

$$G_j^{(i)}(\tau,\tau';\xi,\xi')\Big|_{\xi=\xi_0}=0. \tag{7‴}$$

Розв'язок задачі (6), (7) отримали за допомогою інтегральних перетворень у вигляді

$$G_j^{(i)}=\frac{2}{\xi_0}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\sin y_n\xi\sin y_n\xi'}{s_1^{(i)}-s_2^{(i)}}\left[\left(s_1^{(i)}+A_j\right)e^{s_1^{(i)}(\tau-\tau')}-\left(s_2^{(i)}+A_j\right)e^{s_2^{(i)}(\tau-\tau')}\right],\ i=1,..,N-1, j=1,2, \tag{8}$$

де $A_1=y_n^2(d^{(i)}-d_1^{(i)})+a_{22}^{(i)}+a_{12}^{(i)}$; $A_2=y_n^2(d_0^{(i)}-d_2^{(i)})+a_{11}^{(i)}+a_{21}^{(i)}$, $s_{1,2}^{(i)}=-\eta_1'^{(i)}/2\pm$ $\pm\sqrt{\left(\eta_1'^{(i)}/2\right)^2-\eta_2'^{(i)}}$, $\eta_1'^{(i)}=y_n^2(d_0^{(i)}+d^{(i)})+a_{11}^{(i)}+a_{22}^{(i)}$, $\eta_2'^{(i)}=y_n^4\left(d_0^{(i)}d^{(i)}-d_1^{(i)}d_2^{(i)}\right)+$

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

Тепер, знайшовши функцію Гріна за формулою (8) і визначивши концентрацію розпадних домішкових частинок на кроці $i-1$, за співвідношенням (5) знайдемо концентрацію розпадної речовини на i-му етапі.

Якщо $i=N$ (нерозпадні домішки), гетеродифузію описує крайова задача $(1')$, (2), $(3')$, $(3'')$. Її розв'язок також подамо через відповідні функції Гріна, як у формулі (5) для $i=\overline{1,N-1}$:

$$c_j^{(N)}(\xi,\tau)=\int_0^{\tau}\int_0^{\xi_0}G_j^{(N)}(\xi,\xi';\tau,\tau')\sum_{i=0}^{N-1}a_{\lambda j}^{(iN)}c_j^{(i)}(\xi',\tau')\,d\xi'd\tau',\quad j=1,2, \tag{9}$$

де $G_j^{(N)}(\xi,\xi';\tau,\tau')$ $(j=1,2)$ – функції Гріна задачі $(1')$, (2), $(3')$, $(3'')$, тобто задовольняють відповідну систему диференціальних рівнянь у частинних похідних з точковим джерелом

$$\frac{\partial G_1^{(N)}(\tau,\tau';\xi,\xi')}{\partial\tau}-d_0^{(N)}\frac{\partial^2G_1^{(N)}(\tau,\tau';\xi,\xi')}{\partial\xi^2}-d_1^{(N)}\frac{\partial^2G_2^{(N)}(\tau,\tau';\xi,\xi')}{\partial\xi^2}+$$

$$+a_{11}^{(N)}G_1^{(N)}(\tau,\tau';\xi,\xi')-a_{12}^{(N)}G_2^{(N)}(\tau,\tau';\xi,\xi')=\delta(\tau-\tau')\delta(\xi-\xi'),$$

$$\frac{\partial G_2^{(N)}(\tau,\tau';\xi,\xi')}{\partial\tau}-d_2^{(N)}\frac{\partial^2G_1^{(N)}(\tau,\tau';\xi,\xi')}{\partial\xi^2}-d^{(N)}\frac{\partial^2G_2^{(N)}(\tau,\tau';\xi,\xi')}{\partial\xi^2}-$$

$$-a_{21}^{(N)}G_1^{(N)}(\tau,\tau';\xi,\xi')+a_{22}^{(N)}G_2^{(N)}(\tau,\tau';\xi,\xi')=\delta(\tau-\tau')\delta(\xi-\xi') \tag{10}$$

за нульових крайових умов

$$G_1^{(N)}\Big|_{\tau=0}=G_2^{(N)}\Big|_{\tau=0}=G_1^{(N)}\Big|_{\xi=0}=G_2^{(N)}\Big|_{\xi=0}=G_1^{(N)}\Big|_{\xi=\xi_0}=G_2^{(N)}\Big|_{\xi=\xi_0}=0. \tag{11}$$

Розв'язок крайової задачі (10), (11) має вигляд

$$G_j^{(N)}=\frac{2}{\xi_0}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\sin(y_n\xi)\sin(y_n\xi')}{s_1^{(N)}-s_2^{(N)}}\left[\left(s_1^{(N)}+A_j^{(N)}\right)e^{s_1^{(N)}(\tau-\tau')}-\left(s_2^{(N)}+A_j^{(N)}\right)e^{s_2^{(N)}(\tau-\tau')}\right], \tag{12}$$

де $s_1^{(N)}$, $s_2^{(N)}$ - розв'язки квадратного рівняння $s^2+s\eta_1'^{(N)}+\eta_2'^{(N)}=0$ з коефіцієнтами $\eta_1'^{(N)}=y_n^2\left(d_0^{(N)}+d^{(N)}\right)+a_{11}^{(N)}+a_{22}^{(N)}$; $\eta_2'^{(N)}=y_n^4\left(d_0^{(N)}d^{(N)}-d_1^{(N)}d_2^{(N)}\right)+$
$+y_n^2\left(a_{11}^{(N)}d^{(N)}+d_0^{(N)}a_{22}^{(N)}+a_{12}^{(N)}d_2^{(N)}+d_1^{(N)}a_{21}^{(N)}\right)+a_{11}^{(N)}a_{22}^{(N)}-a_{12}^{(N)}a_{21}^{(N)}$,
$A_1^{(N)}=y_n^2\left(d^{(N)}-d_1^{(N)}\right)+a_{22}^{(N)}+a_{12}^{(N)}$; $A_2^{(N)}=y_n^2(d_0^{(N)}-d_2^{(N)})+a_{11}^{(N)}+a_{21}^{(N)}$.

Послідовно визначивши концентрації на кожному кроці $i=0,\mathbf{K},N-1$ за формулами (4) і (5), з урахуванням виразів для функцій Гріна (8) і (12) знайдемо концентрації нерозпадних частинок за каскадного розпаду домішкових речовин.

3. **Потоки розпадних домішкових частинок через задану поверхню**. Згідно з моделлю гетеродифузії двома шляхами [9], знайдемо вирази для потоків речовин на різних етапах їх каскадного розпаду через одиницю площі поверхні $\xi=\xi_*$. Враховуючи лінійні кінетичні співвідношення [9], масові потоки у безрозмірних змінних визначимо за формулами

$$J_{*1}^{(i)}(\tau)=-\sqrt{k_2^{(0)}D_{11}^{(0)}}\left[d_0^{(i)}\frac{\partial c_1^{(i)}(\xi,\tau)}{\partial\xi}+d_1^{(i)}\frac{\partial c_2^{(i)}(\xi,\tau)}{\partial\xi}\right]\Bigg|_{\xi=\xi_*},$$

$$J_{*2}^{(i)}(\tau)=-\sqrt{k_2^{(0)}D_{11}^{(0)}}\left[d_2^{(i)}\frac{\partial c_1^{(i)}(\xi,\tau)}{\partial\xi}+d^{(i)}\frac{\partial c_2^{(i)}(\xi,\tau)}{\partial\xi}\right]\Bigg|_{\xi=\xi_*},\quad i=0,\dots,N,$$

при цьому сумарний потік крізь поверхню $\xi = \xi_*$ $J_*^{(i)}(\tau) = J_{*1}^{(i)}\Big|_{\xi=\xi_*} + J_{*2}^{(i)}\Big|_{\xi=\xi_*}$ для всіх $i = 0,\ldots,N$ набуде вигляду

$$J_*^{(i)}(\tau) = -\sqrt{k_2^{(0)}D_{11}^{(0)}}\left[\left(d_0^{(i)} + d_2^{(i)}\right)\frac{\partial c_1^{(i)}(\xi,\tau)}{\partial\xi} + \left(d_1^{(i)} + d^{(i)}\right)\frac{\partial c_2^{(i)}(\xi,\tau)}{\partial\xi}\right]\Bigg|_{\xi=\xi_*} . \quad (13)$$

Підставляємо вирази для концентрацій $c_1^{(i)}(\xi,\tau)$ і $c_2^{(i)}(\xi,\tau)$ $(4')$ і $(4'')$, (5), (9) на відповідних етапах розпаду у співвідношення (13). Тоді отримаємо для $i = 0$

$$\frac{\xi_0 J_*^{(0)}(\tau)}{c_0\sqrt{\bar{k}_2^{(0)}\bar{D}_{11}^{(0)}}} = R - B\pi\left[\frac{R_1}{\sin(\pi x_1)}\cos\left(\frac{\pi x_1}{\xi_0}(\xi_0 - \xi_*)\right) - \frac{R_2}{\sin(\pi x_2)}\cos\left(\frac{\pi x_2}{\xi_0}(\xi_0 - \xi_*)\right)\right] -$$

$$-2\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\cos y_n\xi_*}{s_1 - s_2}\left[\left(\bar{p}s_1 + \bar{p}_1 + \frac{\bar{p}_2}{s_1}\right)e^{s_1\tau} - \left(\bar{p}s_2 + \bar{p}_1 + \frac{\bar{p}_2}{s_2}\right)e^{s_2\tau}\right], \quad (14')$$

де $\tilde{d}_1^{(i)} = d_0^{(i)} + d_2^{(i)}$, $\tilde{d}_2^{(i)} = d_1^{(i)} + d^{(i)}$; $R = \alpha\tilde{d}_1^{(i)} + (1-\alpha)\tilde{d}_2^{(i)} - \frac{1}{ce}\left(\tilde{b}_1\tilde{d}_1^{(i)} + \tilde{b}_2\tilde{d}_2^{(i)}\right)$,

$R_1 = \tilde{d}_1^{(i)}\left(\tilde{a}_1 x_1 + \tilde{b}_1\right) - \tilde{d}_2^{(i)}\left(\tilde{a}_2 x_1 + \tilde{b}_2\right)$, $\qquad R_2 = \tilde{d}_1^{(i)}\left(\tilde{a}_1 x_2 + \tilde{b}_1\right) - \tilde{d}_2^{(i)}\left(\tilde{a}_2 x_2 + \tilde{b}_2\right)$;

$\bar{p} = \alpha\tilde{d}_1^{(i)} + {} + (1-\alpha)\tilde{d}_2^{(i)}$, $\bar{p}_1 = \tilde{d}_1^{(i)}\tilde{A}_1 + \tilde{d}_2^{(i)}\tilde{A}_2$, $\bar{p}_2 = \tilde{d}_1^{(i)}\tilde{B}_1 + \tilde{d}_2^{(i)}\tilde{B}_2$.

Також тут взяли до уваги, що $\frac{\partial}{\partial\xi}\left[\sin\left((\pi - y)x_{1,2}\right)\right] = -\frac{\pi x_{1,2}}{\xi_0}\cos\left(\frac{\pi x_{1,2}}{\xi_0}(\xi_0 - \xi)\right)$.

Для $i = 1,\ldots,N-1$ маємо:

$$\frac{J_*^{(i)}(\tau)}{\sqrt{\bar{k}_2^{(0)}\bar{D}_{11}^{(0)}}} = \int_0^{\tau}\int_0^{\xi_0}\left\{a_{\lambda 1}^{(i-1)}\tilde{d}_1^{(i)}\frac{\partial G_1^{(i)}(\xi,\xi';\tau,\tau')}{\partial\xi}\Bigg|_{\xi=\xi_*} c_1^{(i-1)}(\xi',\tau') + \right.$$

$$\left. + a_{\lambda 2}^{(i-1)}\tilde{d}_2^{(i)}\frac{\partial G_2^{(i)}(\xi,\xi';\tau,\tau')}{\partial\xi}\Bigg|_{\xi=\xi_*} c_2^{(i-1)}(\xi',\tau')\right\}d\xi' d\tau', \quad (14'')$$

$$\frac{\partial G_1^{(i)}}{\partial\xi}\Bigg|_{\xi=\xi_*} = \frac{2}{\xi_0}\sum_{n=1}^{\infty} y_n \frac{\cos(y_n\xi_*)\sin(y_n\xi')}{s_1^{(i)} - s_2^{(i)}}\left[\left(s_1^{(i)} + A_1^{(i)}\right)e^{s_1^{(i)}(\tau-\tau')} - \left(s_2^{(i)} + A_1^{(i)}\right)e^{s_2^{(i)}(\tau-\tau')}\right],$$

$$\frac{\partial G_2^{(i)}}{\partial\xi}\Bigg|_{\xi=\xi_*} = \frac{2}{\xi_0}\sum_{n=1}^{\infty} y_n \frac{\cos(y_n\xi_*)\sin(y_n\xi')}{s_1^{(i)} - s_2^{(i)}}\left[\left(s_1^{(i)} + A_2^{(i)}\right)e^{s_1^{(i)}(\tau-\tau')} - \left(s_2^{(i)} + A_2^{(i)}\right)e^{s_2^{(i)}(\tau-\tau')}\right];$$

для $i = N$

$$\frac{J_*^{(N)}(\tau)}{\sqrt{\bar{k}_2^{(0)}\bar{D}_{11}^{(0)}}} = \int_0^{\tau}\int_0^{\xi_0}\left\{\tilde{d}_1^{(N)}\frac{\partial G_1^{(N)}(\xi,\xi';\tau,\tau')}{\partial\xi}\Bigg|_{\xi=\xi_*}\sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 1}^{(iN)} c_1^{(i)}(\xi',\tau') + \right.$$

$$\left. + \tilde{d}_2^{(N)}\frac{\partial G_2^{(N)}(\xi,\xi';\tau,\tau')}{\partial\xi}\Bigg|_{\xi=\xi_*}\sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 2}^{(iN)} c_2^{(i)}(\xi',\tau')\right\}d\xi' d\tau', \quad (14''')$$

$$\frac{\partial G_1^{(N)}}{\partial\xi}\Bigg|_{\xi=\xi_*} = \frac{2}{\xi_0}\sum_{n=1}^{\infty} y_n \frac{\cos(y_n\xi_*)\sin(y_n\xi')}{s_1^{(N)} - s_2^{(N)}} \times$$

$$\times\left[\left(s_1^{(N)} + A_1^{(N)}\right)e^{s_1^{(N)}(\tau-\tau')} - \left(s_2^{(N)} + A_1^{(N)}\right)e^{s_2^{(N)}(\tau-\tau')}\right],$$

$$\left.\frac{\partial G_2^{(N)}}{\partial \xi}\right|_{\xi=\xi_*} = \frac{2}{\xi_0}\sum_{n=1}^{\infty} y_n \frac{\cos(y_n\xi_*)\sin(y_n\xi')}{s_1^{(N)}-s_2^{(N)}}\times$$
$$\times\left[\left(s_1^{(N)}+A_2^{(N)}\right)e^{s_1^{(N)}(\tau-\tau')}-\left(s_2^{(N)}+A_2^{(N)}\right)e^{s_2^{(N)}(\tau-\tau')}\right].$$

Запишемо також вирази для потоків розпадних речовин через нижню межу шару $\xi=\xi_0$ як частковий випадок формул (14):

для $i=0$

$$\frac{\xi_0}{c_0\sqrt{\bar{k}_2^{(0)}\bar{D}_{11}^{(0)}}}J_*^{(0)}(\tau)=R-B\pi\left[\frac{R_1}{\sin(\pi x_1)}-\frac{R_2}{\sin(\pi x_2)}\right]-$$
$$-2\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-1)^n}{s_1-s_2}\left[\left(\bar{p}s_1+\bar{p}_1+\frac{\bar{p}_2}{s_1}\right)e^{s_1\tau}-\left(\bar{p}s_2+\bar{p}_1+\frac{\bar{p}_2}{s_2}\right)e^{s_2\tau}\right]; \quad (15¢)$$

для $i=1,\dots,N-1$ справджується формула (14²), в якій

$$\left.\frac{\partial G_1^{(i)}}{\partial \xi}\right|_{\xi=\xi_0} = \frac{2}{\xi_0}\sum_{n=1}^{\infty} y_n \frac{(-1)^n\sin(y_n\xi')}{s_1^{(i)}-s_2^{(i)}}\times$$
$$\times\left[\left(s_1^{(i)}+A_1^{(i)}\right)e^{s_1^{(i)}(\tau-\tau')}-\left(s_2^{(i)}+A_1^{(i)}\right)e^{s_2^{(i)}(\tau-\tau')}\right],$$

$$\left.\frac{\partial G_2^{(i)}}{\partial \xi}\right|_{\xi=\xi_0} = \frac{2}{\xi_0}\sum_{n=1}^{\infty} y_n \frac{(-1)^n\sin(y_n\xi')}{s_1^{(i)}-s_2^{(i)}}\times \quad (15^2)$$
$$\times\left[\left(s_1^{(i)}+A_2^{(i)}\right)e^{s_1^{(i)}(\tau-\tau')}-\left(s_2^{(i)}+A_2^{(i)}\right)e^{s_2^{(i)}(\tau-\tau')}\right],$$

а для $i=N$ – формула (14²¢), де

$$\left.\frac{\partial G_1^{(N)}(\xi,\xi',\tau,\tau')}{\partial \xi}\right|_{\xi=\xi_0} = \frac{2}{\xi_0}\sum_{n=1}^{\infty} y_n \frac{(-1)^n\sin(y_n\xi')}{s_1^{(N)}-s_2^{(N)}}\times$$
$$\times\left[\left(s_1^{(N)}+A_1^{(N)}\right)e^{s_1^{(N)}(\tau-\tau')}-\left(s_2^{(N)}+A_1^{(N)}\right)e^{s_2^{(N)}(\tau-\tau')}\right],$$

$$\left.\frac{\partial G_2^{(N)}(\xi,\xi',\tau,\tau')}{\partial \xi}\right|_{\xi=\xi_0} = \frac{2}{\xi_0}\sum_{n=1}^{\infty} y_n \frac{(-1)^n\sin(y_n\xi')}{s_1^{(N)}-s_2^{(N)}}\times \quad)$$
$$\times\left[\left(s_1^{(N)}+A_2^{(N)}\right)e^{s_1^{(N)}(\tau-\tau')}-\left(s_2^{(N)}+A_2^{(N)}\right)e^{s_2^{(N)}(\tau-\tau')}\right]. \quad (15^2¢)$$

Зазначимо, що асимптотична частина виразів для потоків (14), зокрема і (15), для моделі гетеродифузії є нелінійна. Проте структура цих доданків відрізняється від асимптот потоків домішки, знайдених за простішими моделями масоперенесення [1, 2].

4. **Кількість розпадних речовин**, **що пройшли через нижню мужу шару за час** τ_*. Зацікавлюють величини [7]

$$Q_0^{(i)} = \int_0^{\tau_*} J_0^{(i)}(\tau)d\tau, \quad i=\overline{0,N}, \quad (16)$$

які визначають кількість розпадних домішкових речовин $Q_0^{(i)}(\tau)$, що за час τ_* пройшли через одиницю площі поверхні $\xi=\xi_0$ – нижню поверхню шару. Підставимо співвідношення (16) у відповідні вирази для сумарних потоків маси (14) та проінтегруємо. У результаті отримаємо:

для $i=0$

$$\frac{\xi_0 Q_0^{(0)}}{c_0 d_0^{(0)}} = \left(R - B\pi \left[\frac{R_1}{\sin(\pi x_1)} - \frac{R_2}{\sin(\pi x_2)} \right] \right) \tau_* +$$

$$+2\sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{s_1 - s_2} \left[\left(\bar{p} s_1 + \bar{p}_1 + \frac{\bar{p}_2}{s_1} \right) \left(1 - e^{s_1 \tau_*}\right) - \left(\bar{p} s_2 + \bar{p}_1 + \frac{\bar{p}_2}{s_2} \right) \left(1 - e^{s_2 \tau_*}\right) \right]; \quad (17¢)$$

для $i = 1, \ldots, N-1$

$$\frac{Q_0^{(i)}}{\sqrt{\bar{k}_2^{(0)} \bar{D}_{11}^{(0)}}} = \int_0^{\tau_*} \int_0^{\tau} \int_0^{\xi_0} \left\{ a_{\lambda 1}^{(i-1)} \tilde{d}_1^{(i)} \left. \frac{\partial G_1^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \right|_{\xi = \xi_0} c_1^{(i-1)}(\xi', \tau') + \right.$$

$$\left. + a_{\lambda 2}^{(i-1)} \tilde{d}_2^{(i)} \left. \frac{\partial G_2^{(i)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \right|_{\xi = \xi_0} c_2^{(i-1)}(\xi', \tau') \right\} d\xi' d\tau' d\tau; \quad (17^{2})$$

для $i = N$

$$\frac{Q_0^{(N)}}{\sqrt{\bar{k}_2^{(0)} \bar{D}_{11}^{(0)}}} = \int_0^{\tau_*} \int_0^{\tau} \int_0^{\xi_0} \left\{ \tilde{d}_1^{(N)} \left. \frac{\partial G_1^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \right|_{\xi = \xi_*} \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 1}^{(iN)} c_1^{(i)}(\xi', \tau') + \right.$$

$$\left. + \tilde{d}_2^{(N)} \left. \frac{\partial G_2^{(N)}(\xi, \xi'; \tau, \tau')}{\partial \xi} \right|_{\xi = \xi_*} \sum_{i=0}^{N-1} a_{\lambda 2}^{(iN)} c_2^{(i)}(\xi', \tau') \right\} d\xi' d\tau' d\tau. \quad (17^{2}¢)$$

Зауважимо, що для $i = 1, \ldots, N$ вирази для потоків і кількості речовин, що за певний проміжок часу пройшли через шар, отриманли інтегрально. Проте порівняно з аналогічними формулами для простіших модельних варіантів [1, 2] два шляхи міграції чітко відображені у достатньо загальних формулах (17^{2}) і $(17^{2}¢)$ для функцій $Q_0^{(i)}(\tau_*)$.

Також зазначимо, що якщо для знаходження концентрацій домішкових речовин за їх каскадного розпаду побудований прямий (безпосередній) ітераційний процес, то для визначення потоків маси і кількості домішкових речовин, що пройшли крізь шар, наявне горизонтальне галуження ітераційного процесу, в якому основою залишаються ітерації для розрахунку концентрацій.

Висновки. Для опису процесів масоперенесення двома шляхами домішкових речовин за їх каскадного розпаду з урахуванням сорбції-десорбції за моделлю гетеродифузії двома шляхами сформульовані зв'язані крайові задачі гетеродифузії, коли концентрація частинок на певному кроці розпаду є джерелом маси розпадної речовини, яка дифундує, на наступному. Розв'язки відповідних крайових задач каскадного типу побудовані за ітераційною процедурою з використанням функцій Гріна. За таким поданням розв'язків вдається не тільки кількісно та якісно оцінити концентрацію розпадних домішок на швидкому і повільному шляхах міграції та їхню суму, а й отримати формули для їхніх потоків маси, а також кількістей відповідних речовин, що за певний проміжок часу пройшли через одиницю площі деякої поверхні, наприклад, через нижню межу шару.

1. *Білущак Ю. І, Гончарук В. Є., Чернуха О. Ю.* Математична модель невзаємодіючих потоків для опису процесів масопереносу двома шляхами за каскадного розпаду частинок // Прикл. проблеми механіки і математики. – 2014. – Вип. 12. – С. 137–145.
2. *Білущак Ю., Гончарук В , Чапля Є., Чернуха О.* Математичне моделювання дифузії домішкових компонент за їх каскадного розпаду // Матем. машини і системи. – 2015. – № 1. – С. 146–155.
3. *Бурак Я. Й., Чапля Є. Я., Чернуха О. Ю.* Континуально-термодинамічні моделі механіки твердих розчинів. – Київ: Наук. думка, 2006. – 272 с.

4. *Владимиров В. С.* Уравнения математической физики. – Москва: Наука, 1976. – 528 с.
5. *Климов А. Н.* Ядерная физика и ядерные реакторы. – Москва: Энергоатомиздат, 2002. – 464 с.
6. *Прохоров В. М.* Миграция радиоактивных загрязнений в почвах. – Москва: Энергоатомиздат, 1981. – 106 с.
7. *Чапля Є. Я., Чернуха О. Ю.* Фізико-математичне моделювання гетеродифузного масопереносу. - Львів: СПОЛОМ, 2003. – 128 с.
8. *Чапля Є., Чернуха О., Гончарук В., Торський А.* Процеси переносу розпадної речовини в гетерогенних середовищах. – Львів: Євросвіт, 2009. – 262 с.
9. *Чернуха О. Ю., Білущак Ю. І.* Математична модель процесів гетеродифузії двома шляхами за каскадного розпаду мігруючих частинок // Матем. методи і фіз.-мех. поля. – 2018. – 61, № 2. - С. 141–149.
10. *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. – 45. – P. 1557–1569 DOI: 10.1039/c5cs00105f.
11. *Chen J., Dong T., Ren Z.* Cross sections of proton- and neutron-induced reactions by the liège intranuclear cascade model // Physical review C. – 2016. – 93, Iss. 6. DOI:https://doi.org/10.1103/PhysRevC.93.064608.
12. *Lu L.-Q., Chen J.-R., Xiao W.-J.* Development of Cascade Reactions for the Concise Construction of Diverse Heterocyclic Architectures // Accounts. Chemical Research. – 2012. – 45, Iss. 8. – P. 1278–1293 DOI: 10.1021/ar200338s.
13. *Vallance C.* An Introduction to Chemical Kinetics. – San Rafael, CA, USA, Morgan & Claypool Publishers, 2017. - DOI:10.1088/978-1-6817-4664-7.
14. *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. – 8. – P. 299–309 DOI:10.1038/nchem.2459

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ГЕТЕРОДИФФУЗИИ ДВУМЯ ПУТЯМИ ПРИ КАСКАДНОМ РАСПАДЕ ПРИМЕСНЫХ ЧАСТИЦ. I. КРАЕВЫЕ ЗАДАЧИ КАСКАДНОГО ТИПА

Исследованы процессы гетеродиффузии примесей при их каскадном распаде в теле с двумя путями миграции, сопровождающиеся массообменом между состояниями. Для неразветвленного каскадного распада сформулированы связанные краевые задачи гетеродиффузии каскадного типа, когда решения задачи на одном этапе являются источниками на следующем. Решения задач получены по итерационной процедуре с использованием функций Грина. Найдены формулы для диффузионных потоков мигрирующих примесных веществ через заданное сечение тела и количество распадающихся веществ, прошедших через слой, за некоторый временной интервал.

***Ключевые слова**: гетеродиффузия, каскадный распад, краевая задача каскадного типа, итерационный процесс, функция Грина*

MODELLING OF HETERODIFFUSION PROCESSES IN TWO WAYS WITH CASCADE DECAY OF ADMIXTURE PARTICLES. I. INITIAL-BOUNDARY VALUE PROBLEM BY CASCADE KIND

The heterodiffusion processes of admixture with its cascade decay in a body with two migration ways, accompanied by mass exchange between states, are investigated. For the case of unramified cascade decay, associated initial-boundary value heterodiffusion problems by cascade kind, when the problem solutions at one stage are sources on the next, are formulated. Solutions of the problems are obtained by iterative procedure with using Green functions. The expressions for diffusion fluxes of migrating admixture substances through the given section of the body and amount of decaying substances that passed through the layer in a certain time interval.

Key words: heterodiffusion, cascade decay, initial-boundary value problem of cascade type, iterative process, Green's function.

[1]Центр математичного моделювання
Ін-ту прикл. проблем механіки і математики
ім. Я. С. Підстригача НАН України, Львів
[2]Нац. ун-т «Львівська політехніка», Львів

Одержано
07.03.18