МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СОРБЦИИ И ДЕСОРБЦИИ РАДИОНУКЛИДОВ В МОРСКОЙ СРЕДЕ И ДОННЫХ ОСАДКАХ

П.М. Колесников, *Г.Ф. Батраков

Научно-исследовательский центр
"Энергоинформ"
Белоруссия, Минск, 220072,
ул. П. Бровки, 15
E-mail: kpm@nsl.hmti.ac.by

*Морской гидрофизический институт
НАН Украины
г. Севастополь, ул. Капитанская 2
E-mail: oaoi@alpha.mhi.iuf.net

Введение

Процессы сорбции и десорбции играют важную роль в обмене радионуклидами между атмосферой, океаном и донными осадками. В связи с этим теоретические и экспериментальные исследования таких процессов представляют определенный интерес. В настоящее время имеется ряд теоретических работ [1, 2, 3], в которых рассмотрены различные вопросы динамики сорбции и десорбции для консервативных примесей в одномерном по координате случае при наличии диффузии и конвекции для линейных изотерм сорбции. Представляет интерес изучение процессов сорбции - десорбции радионуклидов в стратифицированной по вертикали морской среде и слоистых донных осадках.

1. Постановка задачи

Рассмотрим математическую модель сорбции-десорбции радионуклидов при наличии процессов диффузии в капиллярно-пористых донных осадках, а для морской среды — с учетом адвекции процессов распада (накопления) радионуклидов при наличии объемных и поверхностных источников (стоков) радионуклидов. Для описания процессов переноса радионуклидов в принципе можно использовать один из трех независимых подходов:

1 — кинетический, на основе кинетической теории материи;
2 — вероятностный, на основе уравнений Колмогорова - Фоккера - Планка;
3 — феноменологический, на основе законов сохранения и превращения массы, импульса, энергии, энтропии и обобщенных законов тепломассопереноса при равновесных и неравновесных физико-химических и ядерных превращениях.

Ограничиваясь пока изотермическими процессами, в качестве основных законов используем закон сохранения и превращения массы с учетом закона естественного ядерного распада радионуклидов с постоянной распада λ_i, физических законов сорбции и десорбции, диффузии и адвекции. Запишем закон сохранения массы в виде

$$\frac{\partial c_i}{\partial t}+\frac{\partial a_j}{\partial t}+\lambda_i c_i=\operatorname{div}\bar{j}_i+I_{ij}, \qquad (1)$$

обобщенный закон переноса радионуклидов

$$\bar{j}_i=-K_{ij}\operatorname{grad}\bar{c}_i-\nu-v_i c_i-\tau_{pi}\frac{\partial \bar{j}_i}{\partial t}, \qquad (2)$$

уравнение кинетики изотермической сорбции - десорбции

$$\frac{\partial a_j}{\partial t}=f(a_j,c_i), \qquad (3)$$

где a_j - концентрация адсорбируемого радионуклида, c_i - концентрация адсорбирующего и диффундирующего вещества, $\bar{j}_i$ - поток радионуклидов, $\bar{v}_i$ - адвективная скорость, k_{ij} - молекулярный и турбулентный коэффициент диффузии, I_{ij} - объемный источник (сток) радионуклидов, λ_i - коэффициент распада и поглощения радионуклида, f - уравнение изотермы сорбции (десорбции), t - время,

$\operatorname{div}=\frac{\partial}{\partial x}+\frac{\partial}{\partial y}+\frac{\partial}{\partial_z}$ - оператор дивергенции,

$\mathrm{grad} = \vec{i}\frac{\partial}{\partial x} + \vec{j}\frac{\partial}{\partial y} + \vec{k}\frac{\partial}{\partial_z}$ - оператор градиента,

x, y, z - декартовы координаты,

τ_{pi} - время релаксации.

Изотерма сорбции определяется уравнением

$$f(a_j, c_i) = 0 \tag{4}$$

В линейном случае она называется изотермой Генри и хорошо аппроксимирует кривую сорбции (десорбции) на отдельных участках, γ - постоянная Генри. В случае изотермы Генри уравнение кинетики сорбции (десорбции) имеет вид

$$\frac{\partial a_j}{\partial t} = -\beta_{ij}(a_j - \gamma_i c_i), \tag{5}$$

и оно описывает мономолекулярные взаимодействия радионуклидов. Для учета нелинейной зависимости при полимолекулярных взаимодействиях, в случае обратимых и необратимых взаимодействий, широко используются:

изотерма Лэнгмюра

$$a = \frac{k_1 c}{1 + k_2 c}, \tag{6}$$

изотерма Фрейндлиха

$$a = kc^n, \tag{7}$$

изотерма Брунауера, Эммета и Теллера

$$a = k_1 / [(1 + k_2 c)(1 + k_3 c)] \tag{8}$$

и ряд других аппроксимаций для выражения реальных изотерм сорбции - десорбции. Уравнение кинетики с изотермой Генри (5) описывает процессы сорбции - десорбции и удобно для аналитического исследования.

Запишем уравнения (1) - (4) для одномерной вертикально-стратифицированной среды, состоящей из слоев жидкой или твердой фазы

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + \frac{\partial a_j}{\partial t} + \frac{\partial c_i}{\partial z} + \lambda_i c_i = \frac{\partial}{\partial z} K_{ij} \frac{\partial c_i}{\partial z} + I_{ij}, \tag{9}$$

$$\frac{\partial a_j}{\partial t} = -\beta(a_j - \gamma_i c_i), \tag{10}$$

которые будем решать при начальных условиях

$$\text{при } t = 0, \quad c_i = c_{i0}(z), \quad a_j = a_{j0}(z). \tag{11}$$

На внешних границах зададим классические граничные условия 1-3 рода

$$1)\ c_i\big|_\Gamma = \psi_1, \tag{12}$$

$$2)\ K_{ij}\frac{\partial c_i}{\partial n}\Big|_\Gamma = \psi_2, \tag{13}$$

$$3)\ \alpha_i c_i + \delta_i K_{ij}\frac{\partial c_i}{\partial n} = \psi_3, \tag{14}$$

или их различные комбинации.

На границах раздела слоев - условия сопряжения

$$c_i\big|_{\Gamma+0} = c_j\big|_{\Gamma-0}, \quad K_{ij}\frac{\partial c_i}{\partial n}\Big|_{\Gamma+0} = K_{ji}\frac{\partial c_j}{\partial n}\Big|_{\Gamma-0}. \tag{15}$$

Представляют интерес исследования процессов переноса радионуклидов при обобщенных неклассических граничных условиях дифференциального типа

$$\left|\alpha_i c_i + \delta_i K_{ij}\frac{\partial c_i}{\partial n} + \varepsilon_i \frac{\partial c_i}{\partial t}\right|_\Gamma = \psi_4 \tag{16}$$

или интегродифференциального типа, введенных одним из авторов [3]

$$\left|\alpha_i c_i + \alpha_i' \int_0^t c_i \partial\tau + \delta_i K_{ij}\frac{\partial c_i}{\partial n} + \right.$$
$$\left. + \delta' \int K_{ij}\frac{\partial c_i}{\partial n} R(t-\tau)\partial\tau\right|_\Gamma = \psi_5 \tag{17}$$

или обобщенных граничных условиях вида

$$\begin{aligned} &\left|\alpha_i c_i + \mu_i K_{ij}\frac{\partial c_i}{\partial n} v_i \frac{\partial c_i}{\partial t}\right|_{\Gamma+0} + \\ &+ \left|\alpha_j c_j + \mu_j K_{ij}\frac{\partial c_j}{\partial n} v_j \frac{\partial c_j}{\partial t}\right|_{\Gamma-0} = \psi_6 \end{aligned} \tag{18}$$

где φ_k - заданные на ограничивающих поверхностях функции (источники, стоки, потоки радионуклидов), $\alpha, \delta, \varepsilon, \mu_i, \nu_i$ - некоторые параметры, вариацией которых можно задавать различные типы краевых условий. Последнее граничное условие включает в себя линейную комбинацию искомой функции и первых производных по координате и времени. Оно включает в себя все граничные условия классического типа 1-4 рода. Полагая $\mu = 0$ и $\nu = 0$, получим граничные условия первого рода, $\alpha = 0$ и $\nu = 0$ - граничные условия второго рода, $\nu = 0$ - граничные условия третьего рода. Поэтому рассмотрим решение системы уравнений при граничном условии (18), а также при других граничных условиях. Возможны и другие обобщения граничных условий для переноса радионуклидов, например, вместо условия (18) запишем:

$$\left| K_z \frac{\partial c}{\partial z} + \omega c \right|_{z=0} = \beta c_s, \qquad (19)$$

$$\frac{\partial c_s}{\partial t} + \gamma \int K_z \frac{\partial c_s}{\partial z} \partial z + Q = 0. \qquad (20)$$

Последнее граничное условие означает изменение на поверхности суммарной концентрации за счет процессов диффузии и поверхностных источников. Если суммарное накопление не происходит, то оно может быть выражено в виде:

$$\left| \frac{\partial c(z)}{\partial t} + \alpha K_z \frac{\partial c(z)}{\partial z} \right|_{z=0} = 0, \qquad (21)$$

В этом уравнении, как и в (18), присутствуют первые производные по времени и первые производные по координате. Его можно преобразовать в другой вид граничных условий. Например, исключая первую производную по времени с помощью уравнения диффузии, получим граничные условия вида

$$\left| \alpha \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} + \beta \frac{\partial c}{\partial z} + \delta c \right|_{z=0} = 0, \qquad (22)$$

где α, β, δ - некоторые коэффициенты.

2. Равновесная сорбция

Рассмотрим решение уравнения диффузии с равновесной сорбцией при классических и обобщенных граничных условиях методом преобразования Лапласа, примененным к одномерному уравнению вида

$$a(z)\frac{\partial c}{\partial t} + v(z)\frac{\partial c}{\partial z} = \frac{1}{z^m}\frac{\partial}{\partial z}\left(z^m D(z)\frac{\partial c}{\partial z}\right) - d(z)c + I_m(z,t) \qquad (23)$$

при начальном условии

$$t = 0, \quad c(z,0) = \varphi(z) \qquad (24)$$

и обобщенных граничных условиях $z = h$

$$\alpha\frac{\partial c}{\partial t} + \beta\frac{\partial c}{\partial z} + \gamma c = \delta(t), \; c(0) = c_0, \qquad (25)$$

где $m = 0$ для пластины, $m = 1$ для цилиндра, $m = 2$ для шара, коэффициенты $a(z)$, $v(z)$, $D(z)$, $d(z)$ в общем случае являются переменными, заданными функциями координаты z и времени t, начальное условие возьмем в виде (24).

Решение уравнения проведем при классических граничных условиях вида (24), (25) методом конечных интегральных преобразований по собственным функциям ψ однородного уравнения.

$$\mu^2 a(z)\psi + v(z)\frac{\partial \psi}{\partial z} = \frac{1}{z^m}\frac{\partial}{\partial z}\left(D(z)z^m\frac{\partial \psi}{\partial z}\right) - d(z)\psi \qquad (26)$$

при однородных классических условиях вида:

$$1.\ \psi|_G = 0, \quad 2.\ D\frac{\partial \psi}{\partial z}\Big|_G = 0,$$

$$3.\ \left|\alpha\psi + D\frac{\partial \psi}{\partial z}\right|_G = 0, \qquad (27)$$

$$4.\ \left|(\mu^2 v + \alpha)\psi + D\frac{\partial \psi}{\partial z}\right|_G = 0.$$

Для начала рассмотрим решение (23) с постоянными коэффициентами $a = 1$, $V = V_0$, $D = D_0$, $\alpha = \lambda$ и граничными условиями (27).

В качестве примера рассмотрим решение первой краевой задачи для (23) с условиями (24), (25) для объемных и поверхностных источников радионуклидов

$$I = I_0 \exp(-kt), \quad \psi_1 = \psi_{10}\exp(-mt), \quad \psi_2 = \psi_{20}\exp(-nt) \qquad (28)$$

Собственными функциями $Z_n(z)$ для уравнения (26) являются решения

$$\frac{d^2 Z}{dz^2} - \frac{V_0}{D_0}\frac{dZ}{dz} + \mu^2 Z = 0, \qquad (29)$$

которые имеют вид

$$Z(z) = \exp\left(\frac{V_0 z}{2D_0}\right)\left[A_1 \cos pz + A_2 \sin pz\right], \qquad (30)$$

$p^2 = \mu^2 - \frac{V_0}{4D_0}$, A_1, A_2 - постоянные интегрирования.

С учетом граничных условий первой краевой задачи собственными функциями являются:

$$Z_n(z) = \exp\left(\frac{V_0 z}{2D_0}\right)\sin\frac{\pi_n}{l}z, n = 1,2,\ldots \qquad (31)$$

со спектром и нормой

$$\mu^2 = \frac{V_0^2}{4D_0^2} + \left(\frac{\pi n}{l}\right)^2, \; n = 1,2,\ldots \|Z_n\| = \tfrac{1}{2}. \qquad (32)$$

Решение неоднородной краевой задачи в этом случае построим с помощью конечного интегрального преобразования

$$\bar{c}=\int_0^l c\exp\left(-\frac{V_z}{2D_0}\right)\sin\frac{\pi_n}{l}z\,dz \qquad (33)$$

в виде разложения по собственным функциям задачи

$$c=\sum_{n=1}^{S}\frac{Z_n(m,\nu,z)}{|Z_n|^2}\bar{c}(\mu_n\,t)= \\ =\frac{2}{l}\sum_{m=1}^{S}c\exp\left(-\frac{V_0 z}{2D_0}\right)\sin\frac{\pi\nu}{l}z \qquad (34)$$

а $\bar{c}$ определяется из решения неоднородного уравнения первого порядка, включающего произвольные объемные и поверхностные источники радионуклидов

$$\frac{d\bar{c}}{dt}+\left(D_0\left(\frac{\pi n}{l}\right)^2+\frac{V_0^2}{4D_0}\right)\bar{c}= \\ =\bar{I}+\frac{D_0\pi n}{l}\left[\psi_0(t)-(-1)^n\exp\left(\frac{V_l}{2D_0}\right)\psi_l(t)\right], \qquad (35)$$

интегрирование которого дает в общем виде

$$c=\exp\left[-\left(\lambda+D_0\left(\frac{\pi n}{l}\right)^2\right)t\right]\cdot \\ \cdot\left\{\int_0^t\left(\bar{I}+\frac{\pi n}{l}\right)\left[\psi_0(t)-(-1)^n\exp\left(-\frac{V_l}{2D_0}\right)\psi_l(t)\right]\cdot\right. \qquad (36) \\ \left.\cdot\exp\left[\left(\lambda+D_0\left(\frac{\pi n}{l}\right)^2+\frac{V_0^2}{4D_0}\right)t'\right]dt'+\overline{c_0}\right\}$$

Рассмотрим случай диффузии и равновесной сорбции радионуклидов в телах классической формы. Задачи решены как операционным методом, так и с помощью конечных интегральных преобразований. Здесь в качестве примера приведем решение только одной задачи операционным методом в сочетании с методами теории вычетов при $a=1$, $V=V_0$, $D=D_0$, $d=\lambda$, $I_m=0$, $\psi=0$ в слое с граничными условиями $z=0$, $c=0$, $z=1$, $c=c_1$.

Уравнение (23) в изображениях по Лапласу примет вид

$$D_0\frac{d^2\bar{c}}{dz^2}-(p+\lambda)\bar{c}-V_0\frac{d\bar{c}}{dz}=0\,. \qquad (37)$$

Решением (37) в изображениях является

$$\bar{c}=\exp\left(\frac{V_0(z-l)}{2D_0}\right)\cdot \\ \frac{c_l\,\mathrm{sh}\left[z\left(V_0^2+4D_0(p+\lambda)\right)^{1/2}\Big/2D_0\right]}{p\,\mathrm{sh}\left[l\left(V_0^2+4D_0(p+\lambda)\right)^{1/2}\Big/2D_0\right]} \qquad (38)$$

Полюсами являются

$$p=0 \text{ и } p_i=-\lambda-\frac{V_0^2}{4D_0}-\frac{n^2\pi^2}{l^2}\,. \qquad (39)$$

Тогда по теореме о вычетах имеем

$$\bar{c}=c_l\frac{\mathrm{sh}\left[z\left(V_0^2+4D_0\lambda\right)^{1/2}\big/2D_0\right]}{\mathrm{sh}\left[l\left(V_0^2+4D_0\lambda\right)^{1/2}\big/2D_0\right]}\exp\left(\frac{V_0(z-l)}{2D_0}\right)+ \\ +\frac{2c_l\pi}{l^2}\exp\left(\frac{V_0(z-l)}{2D_0}\right)\sum_{n=1}^{\infty}\frac{(-1)^n n\sin(n\pi z/l)}{\lambda/D_0+V^2/4D^2+n^2\pi^2/l^2}\cdot \\ \cdot\exp\left\{-\left[\lambda+\frac{V_0^2}{4D_0}+D_0\frac{\pi^2 n}{l^2}\right]t\right\}$$

(40)

3. Неравновесная сорбция

Систему линейных уравнений неравновесной адсорбции можно решить различными методами. Например, методом преобразования Лапласа, методом интегральных преобразований, численными и приближенными методами. Метод разделения переменных к этой системе неприменим, Покажем это. Возьмем уравнения кинетики и диффузии (22) - (23) и, исключая a, получим уравнение третьего порядка:

$$\frac{\partial^2 c}{\partial t^2}+\beta\frac{\partial c}{\partial t}+\gamma\left(\frac{\partial c}{\partial z}-\frac{\partial^2 c}{\partial z^2}+\lambda c-I(z,t)\right)+V\frac{\partial^2 c}{\partial z\partial t}= \\ =D\frac{\partial^3 c}{\partial z^3\partial t}-\lambda\frac{\partial c}{\partial t}+\frac{\partial I}{\partial t} \qquad (41)$$

Это уравнение не допускает разделения переменных даже при $D=\text{const}$, $I(z,t)=0$.

Будем искать решение системы уравнений при начальных условиях (24) и граничном условии (25). Введем изображение функции по Лапласу:

$$\bar{a}=\int_0^\infty e^{-pt}a\,dt;\quad \bar{c}=\int_0^\infty ce^{-pt}dt; \\ \bar{I}=\int_0^\infty e^{-pt}I(z,t)dt;\quad \overline{\psi}=\int_0^\infty\psi(t)e^{-pt}dt \qquad (42)$$

Преобразуя по Лапласу уравнение и граничные условия с учетом начальных условий, получим систему уравнений

$$p\bar{a}-\psi_2(z)=\beta\bar{c}-\gamma\bar{a}$$

$$p\bar{c}-\psi_1(z)+p\bar{a}-\psi_2(z)+V\frac{\partial\bar{c}}{\partial z}=D\frac{\partial^2\bar{c}}{\partial z^2}-\lambda\bar{c}+\bar{I} \quad (43)$$

и граничные условия

$$\alpha\bar{c}+\mu D\frac{\partial\bar{c}}{\partial z}+\nu p\bar{c}=\bar{\psi}.$$

Тогда имеем

$$D\frac{d^2\bar{c}}{dz^2}-V\frac{d\bar{c}}{dz}-\left(p+\frac{p\beta}{p+\gamma}+\lambda\right)\bar{c}= =\psi_1(z)-\bar{I}(z,t)+\frac{p\psi_2(z)}{p+\gamma} \quad (44)$$

Рассмотрим однородное уравнение.

$$D\frac{d^2\bar{c}}{dz^2}-V\frac{d\bar{c}}{dz}-\left(\frac{p^2+(\gamma+\beta+\lambda)p+\gamma\lambda}{p+\gamma}\right)\bar{c}=0. \quad (45)$$

Решение уравнения (45) возьмем в виде:

$$\bar{c}_{0g}=e^{Vz/2D}\left\{\left(C_1\mathrm{ch}\sqrt{\frac{-4\left(p^2+(\gamma+\beta+\lambda)p+\gamma\lambda\right)}{(p+\gamma)}-\frac{V^2}{D^2}}\cdot\frac{z}{2}+\right.\right.$$

$$\left.\left.+C_2\mathrm{sh}\sqrt{\frac{-4\left(p^2+(\gamma+\beta+\lambda)p+\gamma\lambda\right)}{D(p+\gamma)}-\frac{V^2}{D^2}}\cdot\frac{z}{2}\right)\right\} \quad (46)$$

Частное решение неоднородного уравнения (44) запишем

$$\bar{c}_2=\frac{2}{\sqrt{\frac{-4\left(p^2+(\gamma+\beta+\lambda)p+\gamma\lambda\right)}{D(p+\gamma)}-\frac{V^2}{D^2}}}\int f(t)e^{-V(t-z)/2D}\cdot$$

$$\cdot\sqrt{\frac{-4\left(p^2+(\gamma+\beta+\lambda)p+\gamma\lambda\right)}{D(p+\gamma)}-\frac{V^2}{D^2}}\cdot\frac{z-t}{2}dt. \quad (47)$$

Используя (46) и (47) $\bar{c}=\bar{c}_z+\bar{c}_{0g}$ и граничное условие

$$z=0:\ \alpha\bar{c}+\mu D\frac{\partial c}{\partial z}+\nu p\bar{c}=\bar{\psi}_1,$$

$$z=l:\ \alpha\bar{c}+\mu D\frac{\partial c}{\partial z}+\nu p\bar{c}=\bar{\psi}_2 \quad (48)$$

найдем постоянные C_1 и C_2.

Рассмотрим частный пример, когда

$$I=0,\ V=0,\ \lambda=0,$$
$$t=0,\ a=0,\ c=0, \quad (49)$$
$$\nu=b,\ \alpha=0,\ \mu=1.$$

В этом случае уравнения кинетики и диффузии принимают вид

$$\frac{\partial a}{\partial t}=\beta c-\gamma a,$$

$$\frac{\partial c}{\partial t}+\frac{\partial a}{\partial t}=D\frac{\partial^2 c}{\partial z^2};$$

$$t=0:\ a=0,\ c=0; \quad (50)$$

$$z=l:\ b=\frac{\partial c}{\partial t}=-D\frac{\partial c}{\partial z};$$

$$z=-l:\ b\frac{\partial c}{\partial t}=D\frac{\partial c}{\partial z}$$

и для изображений получаем уравнения

$$p\bar{c}=-p\bar{a}+D\frac{\partial^2\bar{c}}{\partial z^2}, \quad (51)$$

$$p\bar{a}=\beta\bar{c}-\gamma\bar{a}$$

при условии

$$-bc_0-pb\bar{c}=-D\frac{\partial\bar{c}}{\partial z},\quad z=l$$

$$-bc_0+pb\bar{c}=-D\frac{\partial\bar{c}}{\partial z},\quad z=-l \quad (52)$$

Исключая a, для c получим уравнение

$$\frac{\partial^2\bar{c}}{\partial z^2}+\lambda^2\bar{c}=0,\quad \lambda^2=-\frac{p}{D}\frac{p+\gamma+\beta}{p+\gamma}. \quad (53)$$

Решение этого уравнения имеет вид:

$$\bar{c}=A_1\cos kz+B_1\sin kz. \quad (54)$$

Подставляя граничное условие, найдем

$$\bar{c}=A_1\cos\lambda z, \quad (55)$$

где

$$A_1=\frac{bc_0}{pb\cos\lambda l-\lambda D\sin\lambda l}.$$

По этому решению в изображениях находим решение для оригинала в виде

$$c=\frac{bc_0}{b+\left(\frac{\beta}{\gamma}+1\right)l}+$$

$$+\sum_{n=1}^{\infty}\frac{c_0e^K}{1+\left\{1+\frac{\beta\gamma}{(p_n+\gamma)^2}\right\}\left\{\frac{l}{2b}+\frac{p_n}{2D\lambda_n^2}+\frac{\lambda_n^2bl}{2D^2\lambda_n^2}\right\}}\cdot \quad (56)$$

$$\cdot\frac{\cos\lambda_n z}{\cos\lambda_n l},\quad K=p_n t$$

где b, λ_n, p_n - корни уравнения

$$\frac{bp_n}{D}=\lambda_n\mathrm{tg}\lambda_n l;\quad \lambda_n^2=-\frac{p_n}{D}\cdot\frac{p_n+\beta+\gamma}{p_n+\gamma}. \quad (57)$$

Корни p_n определяются графически.

$$z=\lambda^2l^2,\quad y=\frac{pl}{D},\quad \xi=l^2(\beta+\gamma)/D,\quad \eta=l^2\gamma/D,$$

тогда

$$\frac{by}{l}=\sqrt{z}\,\mathrm{tg}\sqrt{z},\quad z=\frac{-y(y+\xi)}{y+\eta}. \quad (58)$$

Вводя безразмерные переменные и параметры

$$\xi=\frac{z}{l},\quad \tau\frac{(D+K)t}{l^2},\quad K_1=\frac{\beta l^2}{K+D},\quad K_2=\frac{\gamma l^2}{D+K},$$

$$K_3=\frac{l}{b},\quad a=c_2,\quad c=c_1, \quad (59)$$

перепишем систему уравнений (50) в виде:

$$\frac{\partial C_1}{\partial \tau}+\frac{\partial C_2}{\partial \tau}=\frac{\partial^2 C_1}{\partial \xi^2},\quad \frac{\partial C_2}{\partial \tau}=K_1C_1-K_2C_2,$$

$$\frac{\partial C_1}{\partial}=0\quad \xi=\infty,\quad K_3\frac{\partial C_1}{\partial}+\frac{\partial C_2}{\partial}=0,\quad \xi=,$$

$$C_1(\tau,0)=0,\quad C_2=(\xi,0)=0\,. \tag{60}$$

Решение этой системы имеет вид (33)

$$C_k-\frac{(K_1/K_2)^{n-1}}{1+(1+K_1/K_2)K_3}-$$

$$-\frac{2\lambda^x\mu_k^2\left[K_1/\left(K_2-\mu^2\right)\right]^{n-1}e^{-\mu^2\tau}}{\left(1+K_1K_2/\left(K_2-\mu^2\right)^2\right)\left(\mu^4-\mu^2K_3-\lambda^2K_3^2\right)-2\lambda K_3}\cdot$$

$$\frac{\cos 2\tau}{\sin\lambda_x}-2\sum_{i=1}^{\infty}\frac{\lambda_i\mu_i\left[K_1/\left(K_2-\mu_i^2\right)\right]^{n-1}e^{-KF}}{\left[1+K_1K_2\left(K_2-\mu^2\right)^2\right]\left(\mu_i^4-\mu_i^2K_3\right)+2\lambda_iK_3}\cdot$$

$$\cdot\frac{\cos\lambda_i\xi}{\sin\lambda_i},\quad KF=\mu_i^2\tau\,, \tag{61}$$

где корни характеристического уравнения (57) определяются по соотношениям

$$y=\frac{1}{2}\left[(K_1+K_2+X)\pm\sqrt{(K_1+K_2+X)^2-4K_2X}\right], \tag{62}$$

$$\mu=\sqrt{y},\quad \lambda=\sqrt{|x|},\quad X=\lambda^2,\quad y=-\mu^2.$$

Интегральное изменение во времени концентрации радионуклидов определяется выражением

$$\frac{M(\tau)}{l}=\frac{1+K_1/K_2}{1+(1+K_1/K_2)K_3}+$$

$$+\frac{2\lambda^2e^{-KF'}}{\left[1+K_1K_2/\left(K_3-\mu^2\right)^2\right]\left(\mu^4-\mu^2K_3-\lambda^2K_3^2\right)-2\lambda_i^2K_3}-$$

$$-\frac{2\lambda^2e^{-KF'}}{\left[1+K_1K_2/\left(K_3-\mu^2\right)^2\right]\left(\mu_i^4-\mu_i^2K_3-\lambda_i^2K_3^2\right)+2\lambda_iK_3}$$

$$KF'=\mu^2\tau\,. \tag{63}$$

Заключение

Рассмотренные выше методы интегральных преобразований с конечными и бесконечными пределами и метод разделения переменных широко применяются для исследования процессов диффузии, фильтрации в однородных и неоднородных средах при определенных ограничениях. Для применения метода Фурье необходимо, чтобы рассматриваемое уравнение и граничные условия допускали разделение переменных. Если переменные в рассматриваемой задаче разделены, то задача исследования уравнений в частных производных при заданных начальных и граничных условиях сводится к граничным задачам для обыкновенных дифференциальных уравнений и состоит в определении собственных значений, собственных функций, с помощью которых решение строится в виде ряда по собственным функциям в случае дискретного спектра или в виде интегралов по собственным функциям в случае непрерывного спектра. В некоторых неоднородных средах материальные характеристики изменяются в пространстве или во времени таким образом, что разделение переменных в таких уравнениях приводит к хорошо изученным специальным функциям, например, если в уравнении (23) $a=1$, $v(z)=1/z$, $b=0$, то уравнение оказывается уравнением Бесселя, решение которого хорошо изучено, поэтому удается для таких сред без особого труда решить и основные краевые задачи. Ряд аппроксимаций функциональной зависимости характеристик неоднородной среды приводит к другим хорошо изученным типам уравнений. Поскольку все характеристики неоднородных сред в эксперименте определяются с погрешностями, то весьма эффективно для решения конкретной задачи применять метод аппроксимаций характеристик неоднородных сред с такими функциями, который позволяет свести исходное уравнение к такому уравнению, структура которого весьма близка к исходному, но решения которого можно получить значительно проще или они уже известны. Из различных возможных уравнений следует отдать предпочтение тому, решение которого наиболее адекватно данной конкретной задаче, Такой метод широко применяется для приближенного решения линейных и нелинейных уравнений в частных и обыкновенных производных.

Обычно для аппроксимации характеристик неоднородных сред широко применяются степенные, экспоненциальные, полиномиальные и другие функции. Но даже в случае произвольной аналитической зависимости материальной характеристики от координат или времени ее всегда можно разложить в ряд Тейлора по степеням аргумента, поскольку любая аналитическая функция разложима в ряд Тейлора.

$$f(z)=\sum_{n=0}^{\infty}a_n z^n$$

или в многомерном случае

$$f(x,y,z)=\sum_{i,j,k=0}^{\infty}a_{ijk}x^i y^j z^k\ .$$

Обычно уже несколько первых членов ряда хорошо аппроксимируют свойства экспериментально определенной характеристики неоднородной среды, поэтому оказывается достаточным вместо ряда ограничиться полиномом.

ЛИТЕРАТУРА

1. Кельцев Н.Н. Основы адсорбционной техники / М.: Химия. – 1984. 592 с.

2. Колесников П.М. Энергоперенос в неоднородных средах (математическая теория) / Минск: Наука и техника. – 1974. – 286 с.

3. Колесников П.М. Методы теории переноса в неоднородных средах / Минск: Наука и техника. – 1981. – 324 с.