

Саркисян Грачья Паргевович

## **АНАЛИЗ МЕХАНИЗМОВ МНОГОКОМПОНЕНТНОЙ НЕЛИНЕЙНОЙ ДИФФУЗИИ: ЦЕННОСТНЫЙ ПОДХОД**

Статья посвящена проблеме анализа механизмов нелинейной многокомпонентной диффузии в сложных системах. Предложен ценностный подход, заимствованный из нейтронной физики. Рассмотрена задача ценностной оценки кинетической значимости отдельных стадий и компонентов сложного диффузионного процесса для выделения базового механизма диффузии и определения ценностного вклада каждой стадии и каждого компонента в общий процесс диффузионного переноса.

Адрес статьи: [www.gramota.net/materials/1/2015/10/30.html](http://www.gramota.net/materials/1/2015/10/30.html)

**Статья опубликована в авторской редакции и отражает точку зрения автора(ов) по рассматриваемому вопросу.**

Источник

### **Альманах современной науки и образования**

Тамбов: Грамота, 2015. № 10 (100). С. 117-121. ISSN 1993-5552.

Адрес журнала: [www.gramota.net/editions/1.html](http://www.gramota.net/editions/1.html)

Содержание данного номера журнала: [www.gramota.net/materials/1/2015/10/](http://www.gramota.net/materials/1/2015/10/)

### **© Издательство "Грамота"**

Информация о возможности публикации статей в журнале размещена на Интернет сайте издательства: [www.gramota.net](http://www.gramota.net)

Вопросы, связанные с публикациями научных материалов, редакция просит направлять на адрес: [almanac@gramota.net](mailto:almanac@gramota.net)

студентов в школе, насторожили учителей базовой школы и побудили их задуматься о скором приходе в учебные заведения молодых педагогов с такими конкурентными преимуществами, которыми они сами не обладают.

Большая доля нагрузки в решении рассматриваемой проблемы в настоящее время ложится на плечи преподавателя вуза. В перспективе она может быть снижена, если в школы придут подготовленные к исследовательской и экспериментальной деятельности молодые учителя, или если на курсах повышения квалификации подготовить уже работающих учителей к данному направлению их профессиональной деятельности.

#### Список литературы

1. **Новый Федеральный закон «Об образовании в Российской Федерации».** СПб.: Питер, 2014. 240 с.

### PROBLEM OF NETWORK INTERACTION OF AN INSTITUTION OF HIGHER EDUCATION AND A SECONDARY SCHOOL IN TRAINING FUTURE TEACHERS FOR RESEARCH AND EXPERIMENTAL ACTIVITY

Savina Nadezhda Nikolaevna, Ph. D. in Pedagogy, Associate Professor  
Elabuga Institute of Kazan (Volga Region) Federal University  
nanikosavina@mail.ru

The article considers the problem of the network interaction of institutions of higher education and schools in the process of the formation of future teachers' readiness for research and experimental activity. The experience of its organization suggests that the modern secondary school is able to have a positive impact on the formation of only motivational component of students' readiness for research and experimental activity. Institutions of higher education are responsible for the formation of the cognitive, gnostic, technological and reflexive components of future teachers' readiness for this activity.

*Key words and phrases:* network interaction; research and experimental activity; student; teacher; institution of higher education; school.

УДК 538.93+544.034

#### Химические науки

*Статья посвящена проблеме анализа механизмов нелинейной многокомпонентной диффузии в сложных системах. Предложен ценностный подход, заимствованный из нейтронной физики. Рассмотрена задача ценностной оценки кинетической значимости отдельных стадий и компонентов сложного диффузионного процесса для выделения базового механизма диффузии и определения ценностного вклада каждой стадии и каждого компонента в общий процесс диффузионного переноса.*

*Ключевые слова и фразы:* механизмы диффузии; ценностный анализ; ценностный вклад стадии; сложные системы; стехиометрия диффузионного скачка.

**Саркисян Грачья Паргевович**, к. ф.-м. н.

*Институт химической физики имени А. Б. Налбандяна Национальной академии наук Республики Армения  
hrachya\_sargsyan@mail.ru*

### АНАЛИЗ МЕХАНИЗМОВ МНОГОКОМПОНЕНТНОЙ НЕЛИНЕЙНОЙ ДИФФУЗИИ: ЦЕННОСТНЫЙ ПОДХОД<sup>©</sup>

В настоящее время разработан новый, достаточно общий формализм для описания нелинейной многокомпонентной диффузии, который основан на идее о кооперативном характере элементарного акта диффузии – скачка частицы из одного места в другое [6]. Формализация понятия «механизм диффузии» проведена с помощью математической схемы, заимствованной из химической кинетики [1]. Согласно такому подходу, механизм диффузии задается в виде совокупности элементарных актов диффузионного скачка частиц, каждый из которых записывается своим стехиометрическим уравнением. Число стадий и стехиометрия каждого элементарного акта зависят от физико-химических характеристик изучаемой системы [3; 4].

Приведем краткое содержание разработанного нами общего формализма для описания нелинейной диффузии в многокомпонентной среде [1; 3; 4; 6].

Представим, что физическое пространство разбито на ячейки с однородным химическим составом и опишем элементарные процессы переноса между ними. Пронумеруем эти ячейки римскими цифрами I и II и пометим все компоненты и величины, связанные с ними, верхними индексами I и II соответственно. Списки компонентов ячеек отличаются только верхним индексом:  $A_1^I, \dots, A_n^I, A_1^{II}, \dots, A_n^{II}$ .

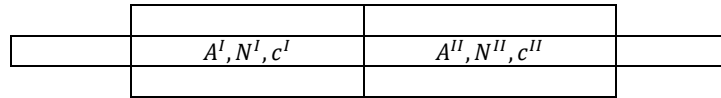


Рис. 1. Модель ячеечного перескока с участием ближайших соседей

Механизм диффузии определяется как список элементарных переходов между ячейками, описываемых своими стехиометрическими уравнениями:

$$\sum_i \alpha_{ri}^I A_i^I + \sum_i \alpha_{ri}^{II} A_i^{II} \rightarrow \sum_i \beta_{ri}^I A_i^I + \sum_i \beta_{ri}^{II} A_i^{II}. \quad (1)$$

Коэффициенты  $\alpha_{ri}^{I,II}$  и  $\beta_{ri}^{I,II}$  являются неотрицательными. Обычно предполагают, что они являются целыми числами, но в специальных случаях необходимы и достаточны действительные числа. Элементарные акты (1) описывают диффузию и не включают химическое превращение компонент. Общее количество каждой компоненты совпадает с левой и с правой стороны (1):

$$\alpha_{ri}^I + \alpha_{ri}^{II} = \beta_{ri}^I + \beta_{ri}^{II}. \quad (2)$$

Каждый элементарный процесс (1) имеет два вектора потерь  $\alpha_r^{I,II}$  с координатами  $\alpha_{ri}^{I,II}$  и два вектора на выходе  $\beta_r^{I,II}$  с координатами  $\beta_{ri}^{I,II}$ ,  $r$  – номер элементарного акта (стадии). Совокупность всех элементарных актов (перескоков между соседними ячейками) составляет механизм диффузии для данной системы при заданных внутренних и внешних условиях. Вследствие сохранения количества частиц всех типов (2), стехиометрические векторы процессов для ячеек отличаются только знаком координат:

$$\gamma_r = \gamma_r^I = -\gamma_r^{II} = \beta_r^I - \alpha_r^I = -(\beta_r^{II} - \alpha_r^{II}). \quad (3)$$

Для скорости элементарного акта диффузии по механизму (1) в рамках закона действия масс (ЗДМ) записывается выражение:

$$w_r(c^I, c^{II}) = k_r \prod_i (c_i^I)^{\alpha_{ri}^I} \prod_i (c_i^{II})^{\alpha_{ri}^{II}}. \quad (4)$$

Например, для диффузии Фика мы имеем два элементарных процесса:  $A_i^I \rightarrow A_i^{II}$  и  $A_i^{II} \rightarrow A_i^I$ . Соответствующие скорости реакции равняются  $k_1 c_i^I$  и  $k_2 c_i^{II}$ .

Состав каждой ячейки можно представлять в виде вектора  $N^{I,II}$ . Компоненты этого вектора  $N_i^{I,II} = V^{I,II} c^{I,II}$  составляют количество веществ  $A_i$  в соответствующей ячейке. В рамках модели ячеечного перескока с участием ближайших соседей уравнение кинетики будет иметь вид:

$$\frac{dN^I}{dt} = -\frac{dN^{II}}{dt} = \sum_J S^{I,J} \sum_r \gamma_r w_r(c^I, c^J), \quad (5)$$

где  $S^{I,J}$  является площадью границы между ячейками I и J. Суммирование осуществляется по всем взаимодействующим парам (I, J).

Вектор потоков для компонента  $A_l$  до первого порядка по  $l$  имеет вид:

$$J_{ri} = -\gamma_{ri} [w_r(c(x), c(x+l)) - w_r(c(x+l), c(x))] = -d \gamma_{ri} \left( \prod_q c_q^{\alpha_{rq}^I + \alpha_{rq}^{II}} \right) \sum_j \frac{\alpha_{rj}^{II} - \alpha_{rj}^I}{c_j} \nabla c_j(x), \quad (6)$$

где  $d = const (= kl)$ ,  $l$  – размер элементарной ячейки.

По аналогии с законом Фика, матрица коэффициентов диффузии по механизму (1), согласно выражению (6), имеет вид:

$$D_{rij}(c) = d \left( \prod_q c_q^{\alpha_{rq}^I + \alpha_{rq}^{II}} \right) \frac{\gamma_{ri} (\alpha_{rj}^{II} - \alpha_{rj}^I)}{c_j}. \quad (7)$$

Соответствующее уравнение диффузии имеет форму дивергенции:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \text{div}(D(c) \nabla c), \quad (8)$$

где  $c$  – вектор концентраций,  $D$  – матрица коэффициентов диффузии в виде (7).

Характер общности данного математического аппарата *не позволяет* точно установить роль отдельной стадии и отдельного компонента в процессе диффузии. Необходима оценка *ценности* каждой стадии и каждого компонента в сложном процессе диффузии. Аналогичные задачи для сложных химических реакционных систем были решены путем применения ценностного подхода, заимствованного из нейтронной физики [2; 5; 7]. Задача *ценностного анализа* сложного диффузионного процесса – это определение *ценностного вклада* каждой *стадии* и каждого *компонента* для выделения базового механизма диффузии, для целенаправленного воздействия на диффузионный перенос, для выявления и исследования аномальных явлений («восходящая диффузия», спиноподальный распад и др.), для планирования диффузионно-лимитированного эксперимента (см. Рис. 2).



Рис. 2. Схема решения ключевых вопросов ценностного анализа сложного диффузионного процесса

В ценностном подходе кинетическая значимость отдельных стадий определяется посредством ценностных величин. Характерная особенность этих величин заключается в том, что они нацелены на выявление влияния вариаций скоростей стадий или же скоростей изменения состава компонентов в диффузионной зоне на величину выходного параметра сложного процесса диффузии. Варьированием скоростей стадий в большей степени выявляется системная связь между отдельными стадиями. Ценностное выявление значимости отдельной стадии учитывает взаимосвязь этой стадии с другими как посредством значения константы скорости стадии, так и непосредственно с помощью концентраций компонентов, участвующих в стадии.

**Ценностные величины.** Ценность отдельной стадии определяется как отношение отклика выбранной характерной динамической величины диффузионной системы в некий момент времени  $t$  на малое возмущение скорости  $r$ -й стадии в начальный момент времени  $t_0$ . При этом скорость стадии варьируется путем изменения начальных условий (концентрации компонентов, константы скорости элементарных актов и т.д.). В этом случае для ценности  $r$ -й стадии  $G_r(t)$  справедливо следующее выражение:

$$G_r(t) = \left. \frac{\partial F[w_1(t), \dots, w_n(t)]}{\partial w_r} \right|_{w_r = w_r(t_0)}, \quad (9)$$

где  $w_r(t)$  – скорость  $r$ -й стадии,  $F(t)$  – динамический параметр, интегральное поведение которого характеризует выбранную величину диффузионного процесса, например, концентрацию компонентов в диффузионной зоне, критичность диффузионной системы и др.

Аналогично, ценность компонента реакционной системы определяется как отклик выбранного параметра в момент времени  $t$  на малое возмущение скорости изменения концентрации компонента в момент времени  $t_0$ :

$$\psi_i(t) = \left. \frac{\partial F[f_1(t), \dots, f_n(t)]}{\partial f_i} \right|_{f_i = f_i(t_0)}, \quad (10)$$

где  $f_i(t) = dc_i/dt$  – скорость изменения концентрации  $i$ -го компонента.

Из (9) и (10) следует, что ценность  $r$ -й стадии равна сумме произведений ценностей компонентов и отклика скорости изменения концентраций компонентов в диффузионной зоне на малое возмущение изменения скорости стадии:

$$G_r(t) = \sum_{i=1}^m \psi_i(t) \frac{\partial f_i}{\partial w_r}. \quad (11)$$

Определим *ценностный вклад*  $r$ -й стадии при выбранном параметре сложного процесса диффузии следующим образом:

$$\begin{aligned} h_r(t) &= G_r(t) \cdot w_r(t), \\ r &= 1, 2, \dots, n. \end{aligned} \quad (12)$$

При определении вклада отдельной стадии мы предполагаем, что в ее кинетической значимости существенную роль играет ценность стадии.

Аналогичным образом определим *ценностный вклад*  $i$ -го компонента:

$$\begin{aligned} b_i(t) &= \psi_i(t) \cdot f_i(t), \\ i &= 1, 2, \dots, m. \end{aligned} \quad (13)$$

**Расчет ценностных величин.** Примем методику определения ценностных величин путем нахождения сопряженных функций [2] с использованием подхода *гамильтоновской систематизации динамических систем*.

Представим выбранное свойство или, иначе говоря, *целевой функционал* сложного процесса диффузии в интегральной форме:

$$I(t) = \int_{t_0}^t F(t) dt. \quad (14)$$

Очевидно, что вклад стадии зависит от того, какое свойство сложной диффузионной стадии выбирается в качестве приоритетного. Если ставится цель выявить роль стадий в кинетике изменений концентрации  $i$ -го компонента, то целевой функционал представляется в виде:

$$I(t) = c_i(t) = \int_{t_0}^t f_i(t) dt. \quad (15)$$

Выявление вклада отдельных стадий в кинетике изменения концентраций нескольких компонентов будем осуществлять целевым функционалом вида:

$$I(t) = \sum_i c_i(t) = \sum_i \int_{t_0}^t f_i(t) dt. \quad (16)$$

Если в диффузионной системе число компонентов равно  $m$ , то (10) запишется в виде:

$$\psi_i(t) = \frac{\partial F}{\partial f_i}, \quad i = 1, 2, \dots, m \quad (17)$$

или, в интегральной форме:

$$F = \sum_{i=1}^m \psi_i f_i + \text{const}. \quad (18)$$

Обозначим

$$H = -F + \sum_{i=1}^m \psi_i f_i. \quad (19)$$

Сравнивая (18) и (19), получим  $H = \text{const}$  и, соответственно,

$$\frac{dH}{dt} = \sum_i \left( \frac{\partial H}{\partial c_i} \frac{\partial c_i}{\partial t} + \frac{\partial H}{\partial \psi_i} \frac{\partial \psi_i}{\partial t} \right) = 0. \quad (20)$$

Согласно (19), систему кинетических уравнений (8) можно представить в виде:

$$\frac{dc_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial \psi_i}, \quad i = 1, 2, \dots, m. \quad (21)$$

Тогда из (20) получается:

$$\frac{dH}{dt} = \sum_i \left( \frac{\partial H}{\partial c_i} + \frac{d\psi_i}{dt} \right) \frac{dc_i}{dt} = 0. \quad (22)$$

Условие (22) должно выполняться для любых концентраций  $c_i$ . Тогда:

$$\frac{d\psi_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial c_i}. \quad (23)$$

Таким образом, из выражений (19), (21) и (23) следует, что  $H$  представляет собой *гамильтониан* системы.

Ценности компонентов  $\psi_i(t)$  определяются решением системы уравнений (23) совместно с кинетическими уравнениями (21). Необходимые для расчета ценностных величин начальные значения  $\psi_i(t)$  определяются, учитывая выбранный параметр  $F$  в целевом функционале (14).

Преобразуем уравнение (19) к виду

$$F = -H + \sum_r^n G_r w_r = -H + \sum_r^n h_r = -H + \sum_i^m \psi_i f_i = -H + \sum_i^m b_i. \quad (24)$$

Из (24) следует, что уравнения (12) и (13) с точностью до постоянной величины характеризуют относительный вклад отдельной стадии и компонента в выбранном параметре  $F$  диффузионной системы.

Процедура расчета ценностных величин сводится к следующим этапам:

- 1) запись целевого функционала сложного процесса диффузии (уравнение (14)) и соответствующего гамильтониана системы (уравнение (19));
- 2) составление системы кинетических уравнений (8) и системы дифференциальных уравнений для функций  $\psi_i(t)$  (ценностей компонентов), сопряженных концентрациям компонентов, согласно уравнению (23);
- 3) определение из целевого функционала (14) сопряженных функций  $\psi_i(t_0)$  соответствующих компонентов для начального момента времени;
- 4) вычисление динамики величин  $\psi_i(t)$  совместным решением системы кинетических уравнений (8) и дифференциальных уравнений сопряженных функций (23);
- 5) расчет временной зависимости ценностей и ценностных вкладов стадий и компонентов по уравнениям (11)-(13), соответственно.

В представленной интерпретации ценностный подход является методом локального анализа. Вместе с тем, ценностной метод используется как аппарат нахождения оптимального протекания диффузии. Это одновременно позволяет вычислять ценностные вклады стадий и компонентов диффузионной системы, соответствующие оптимальному значению целевой функции. Причем, оптимальное значение целевой функции диффузионной системы может быть найдено в широком интервале изменений параметров диффузионной зоны.

В заключение отметим, что ценностный метод выявления значимости стадий и компонентов в сложном процессе диффузии дает определенные преимущества при анализе кинетических моделей многокомпонентной нелинейной диффузии благодаря простоте расчетов и наглядности полученных результатов.

#### Список литературы

1. Горбань А. Н., Саркисян Г. П. Закон действия масс для нелинейной многокомпонентной диффузии и соотношения между ее коэффициентами // Кинетика и катализ. 1986. Т. 27. Вып. 2.
2. Льюинс Дж. Ценность. Сопряженная функция / пер. с англ. М.: Атомиздат, 1972. 174 с.
3. Саркисян Г. П. Анализ механизмов нелинейной многокомпонентной диффузии в неразбавленных твердых растворах: дисс. ... к. ф.-м. н. Красноярск: ВЦ СО АН СССР, 1988. 136 с.
4. Саркисян Г. П. Математическая модель для обработки данных диффузионного эксперимента // Приволжский научный вестник. 2015. № 8 (48). С. 4-7.
5. Тавадян Л. А., Мартоян Г. А. Анализ кинетических моделей химических реакционных систем. Ценностный подход. Ереван: Гитутюн, 2005. 247 с.
6. Alexander N. Gorban, Hrachya P. Sargsyan and Hafiz A. Wahab. Quasichemical Models of Multicomponent Nonlinear Diffusion // Mathematical Modelling of Natural Phenomena. 2011. Vol. 6. No. 5. P. 184-262.
7. Tavadyan L. A., Martoyan G. A. Analysis of Kinetic Models of Chemical Reaction Systems. Value Approach. N. Y.: Nova Publishers, Inc., 2014. 223 p.

#### ANALYSIS OF MECHANISMS OF MULTI-COMPONENT NON-LINEAR DIFFUSION: VALUE APPROACH

Sarkisyan Grach'ya Pargevovich, Ph. D. in Physical-Mathematical Sciences

A. B. Nalbandyan Institute of Chemical Physics of the National Academy of Sciences of the Republic of Armenia  
hrachya\_sargsyan@mail.ru

The article is devoted to analyzing the mechanisms of non-linear multi-component diffusion in complex systems. The author introduces a value approach borrowed from neutron physics. The paper addresses the task of the value estimation of the kinetic importance of certain stages and components of complex diffusion process to identify the basic mechanism of diffusion and evaluate the value contribution of each stage and each component to the general process of diffusion transfer.

*Key words and phrases:* diffusion mechanisms; value analysis; value contribution of stage; complex systems; diffusion jump stoichiometry.