

РОЗДІЛ 3

МАТЕМАТИЧНЕ ТА КОМПЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ, ОБЧИСЛЮВАЛЬНІ МЕТОДИ

УДК 004.043

**Бомба А. Я., д.т.н., професор, Присяжнюк І. М., к.т.н., доцент,
Присяжнюк О. В., аспірант** (Рівненський державний гуманітарний
університет)

НЕЛІНІЙНІ СИНГУЛЯРНО ЗБУРЕНІ ПРОЦЕСИ МАСОПЕРЕНОСУ В НАНОПОРИСТИХ СЕРЕДОВИЩАХ

***Анотація.** Одержано розв'язки одного класу модельних нелінійних сингулярно збурених крайових задач однокомпонентного конвективно-адсорбційно-дифузійного масопереносу в нанопористих середовищах у випадку, коли інтенсивність проникнення розчинної речовини залежить від шуканої концентрації і описується многочленною залежністю. Наведено результати комп'ютерних розрахунків.*

***Ключові слова:** конвективно-дифузійний масоперенос, нанопористе середовище.*

***Аннотация.** Получены решения одного класса модельных нелинейных сингулярно возмущенных краевых задач однокомпонентного конвективно-адсорбционно-диффузионного массопереноса в нанопористых средах в случае, когда интенсивность проникновения растворимого вещества зависит от искомой концентрации и описывается многочленной зависимостью. Приведены результаты компьютерных расчетов.*

***Ключевые слова:** конвективно-диффузионный массоперенос, нанопористая среда.*

***Annotation.** The solutions of one class of the model nonlinear singularly perturbed boundary-value problems of single-component convection-diffusion-adsorption mass transfer in nanoporous medium in the case when intensity of the soluble substance penetration depends on required concentration are received. These solutions are described by polynomial dependence. The results of computer calculations are given.*

***Key words:** convection-diffusion mass transfer, nanoporous medium.*

На сьогоднішній день важливим напрямом ресурсозбереження є застосування екологічно безпечних методів очистки технологічних потоків, що потрапляють до водоносного горизонту. Серед таких методів є використання сорбентів з мікропористою структурою, наприклад

вуглеводних адсорбентів, унікальність властивостей яких забезпечується за рахунок величезної сукупної поверхні таких структур [1]. Це в свою чергу вимагає розробки і застосування нових методів і підходів до моделювання процесів масопереносу в неоднорідних нанопористих середовищах з метою дослідження їхньої внутрішньої кінетики.

В роботах вчених розглянуто масоперенос забрудненої речовини в кристалічних середовищах частинок мікропористої структури [2-4]. Питання математичного моделювання процесів масопереносу в різнопористих середовищах у випадку превалювання одних складових процесу над іншими, що приводить до появи малого параметра при відповідних членах рівняння розглянуто в роботі [5]. В цій роботі досліджено модель нелінійного однокомпонентного конвективно дифузійного масопереносу забруднюючої речовини в середовищі частинок нанопористої структури у випадку, коли коефіцієнт дифузії залежить від шуканої концентрації і описується многочленною залежністю.

Для області $G = (0, l) \times (0, \infty)$ відповідну модельну задачу конвективної дифузії запишемо так:

$$\varepsilon \frac{\partial}{\partial x} \left(D_*(u) \frac{\partial u}{\partial x} \right) - v(x) \frac{\partial u}{\partial x} - \varepsilon D_* \left(\frac{\partial q}{\partial r} \right) \Big|_{r=R} = \sigma_1 \frac{\partial u}{\partial t}, \quad (1)$$

$$\varepsilon \left(\frac{\partial}{\partial r} \left(D^*(q) \frac{\partial q}{\partial r} \right) + \frac{2}{r} D^*(q) \frac{\partial q}{\partial r} \right) = \sigma_2 \frac{\partial q}{\partial t}, \quad (2)$$

$$u(x, t) \Big|_{t=0} = u_0^0(x), \quad q(x, r, t) \Big|_{t=0} = q_0^0(x, r), \quad (3)$$

$$u(0, t) = u_*(t), \quad u'_x(l, t) = 0,$$

$$q'_r(x, 0, t) = 0, \quad q(x, R, t) = ku(x, t), \quad (4)$$

$$0 \leq x \leq l, \quad 0 \leq r \leq R, \quad 0 \leq t \leq \infty.$$

Тут $u(x, t)$ – концентрація розчинної речовини у міжчастинковому просторі в точці x в момент часу t , $q(x, r, t)$ – концентрація розчинної речовини в точці r мікрочастинки з координатами x [2], l – довжина фільтра, R – радіус наночастинки, σ_1, σ_2 – коефіцієнти пористості відповідно макро- та мікросередовища, $k > 0$ – константа адсорбційної рівноваги, $v(x)$ – швидкість конвективного масопереносу, функції $D^*(u) = a_0 + \sum_{\lambda} \varepsilon^s a_s u^s(x, t)$ та $D_*(q) = b_0 + \sum_{\lambda} \varepsilon^s b_s q^s(x, r, t)$ відповідно характеризують швидкість протікання процесів дифузійного масопереносу в міжчастинковому просторі та в порах частинок, а

коефіцієнт D_*^* характеризує вплив внутрішньочастинкового дифузійного переносу на міжчастинковий, λ – довільне натуральне число, a_s, b_s – дійсні числа, ε – малий параметр ($v(x, y) > v_* \gg \varepsilon > 0$). Вважаємо, що всі функції, які фігурують в умовах (3) – (4) є достатньо гладкими та узгодженими між собою вздовж кутових точок даної області. Питання ідентифікації параметрів задач дифузії в нанопористому середовищі досліджено зокрема в [4].

Розв'язок цієї задачі одержано у вигляді асимптотичних рядів [5]:

$$u(x, t) = u_0(x, t) + \sum_{i=1}^n \varepsilon^i u_i(x, t) + \sum_{p=0}^{n+1} \varepsilon^p \Pi_p(\xi, t) + R_{nu}(x, t, \varepsilon), \quad (5)$$

$$q(x, r, t) = q_0(x, r, t) + \sum_{j=0}^n \varepsilon^j q_j(x, r, t) + \sum_{j=0}^{2j+2} \varepsilon^{j/2} F_{j/2}(x, \rho, t) + R_{nq}(x, r, t, \varepsilon), \quad (6)$$

де $u_i(x, t), q_i(x, r, t)$ ($i = \overline{0, n}$) – члени регулярних частин асимптотики, а $\Pi_p(\xi, t)$, ($p = \overline{0, n+1}$), $F_{j/2}(x, \rho, t)$, ($j = \overline{0, 2n+2}$) – функції типу примежового шару, $\xi = (l-x)/\varepsilon$, $\rho = (R-r)/\sqrt{\varepsilon}$ – регуляризуючі розтяги, $R_{nu}(x, t, \varepsilon), R_{nq}(x, r, t, \varepsilon)$ – залишкові члени.

Підставивши (5) – (6) в (1)-(4) та застосувавши стандартну процедуру порівнювання, аналогічно до [6], для знаходження функцій приходимо до таких задач:

$$\begin{cases} v(x) \cdot u_{0x}(x, t) + \sigma_1 u_{0t}(x, t) = 0, & \left\{ \begin{array}{l} \sigma_2 q_{0t}(x, r, t) = 0, \\ q_0(x, r, 0) = q_0^0(x, r), \end{array} \right. \\ u_0(x, 0) = u_0^0(x), \quad u_0(0, t) = u_*(t), \end{cases}$$

$$\begin{cases} v(x) \cdot u_{1x}(x, t) + \sigma_1 u_{1t}(x, t) = g(x, t), & \left\{ \begin{array}{l} \sigma_2 q_{1t}(x, r, t) = h(x, r, t), \\ q_1(x, r, 0) = 0, \end{array} \right. \\ u_1(x, 0) = 0, \quad u_1(0, t) = 0, \end{cases}$$

$$g(x, t) = a_0 u_{0xx}(x, t) - D_*^*(q_{0r}(x, R, t) + F_{0r}(x, R, t)),$$

$$h(x, r, t) = b_0 q_{0rr}(x, r, t) + \frac{2}{r} b_0 q_{0r}(x, r, t),$$

В результаті їх розв'язання отримаємо:

$$u_0(x, t) = \begin{cases} u_*(\sigma_1(\frac{t}{\sigma_1} - f(x)), t \geq \sigma_1 f(x), \\ u_0^0(f^{-1}(f(x) - \frac{t}{\sigma_1})), t < \sigma_1 f(x), \end{cases}$$

$$u_1(x, t) = \begin{cases} \int_0^x \frac{g(\tilde{x}, (t - \sigma_1 f(x) + \sigma_1 f(\tilde{x})))}{v(\tilde{x})} d\tilde{x}, t \geq \sigma_1 f(x), \\ \frac{1}{\sigma_1} \int_0^t g(f^{-1}(\frac{\tilde{t}}{\sigma_1} - \frac{t}{\sigma_1} + f(x)), \tilde{t}) d\tilde{t}, t < \sigma_1 f(x), \end{cases}$$

$$q_0(x, r, t) = q_0^0(x, r), \quad q_1(x, r, t) = \frac{b_0}{\sigma_2} \int_0^t (q_{0rr}(x, r, \tilde{t}) + \frac{2}{r} q_{0r}(x, r, \tilde{t})) d\tilde{t},$$

де $f(x) = \int_0^x \frac{d\tilde{x}}{v(\tilde{x})}$ [6].

Функції $\Pi = \sum_{p=0}^2 \Pi_p \varepsilon^p$ та $F = \sum_{j=0}^4 F_{j/2} \varepsilon^{j/2}$ призначені для усунення неув'язок, внесених побудованою регулярною частиною $\bar{u} = \sum_{i=0}^1 u_i \varepsilon^i$ та $\bar{q} = \sum_{i=0}^1 q_i \varepsilon^i$ відповідно в околах $x=l$ та $r=R$. Для їх знаходження маємо задачу:

$$\begin{cases} a_0 \Pi_{p\xi\xi}(\xi, t) + v(l) \Pi_{p\xi}(\xi, t) = \mu_p(\xi, t), \\ \Pi_p(0, t) = \nu_p(t), \Pi_p(\xi, t) \Big|_{\xi \rightarrow \infty} \rightarrow 0, \end{cases}$$

$$\begin{aligned} \mu_0(\xi, t) = 0, \quad \nu_0(t) = -c_0(l, t), \quad \mu_1(\xi, t) = \sigma_1 \Pi_{0t} + v'(l) \xi \Pi_{0\xi} - \\ - a_1 (\Pi_0 \Pi_{0\xi\xi} - \Pi_{0\xi}^2), \quad \nu_1(t) = -c_1(l, t), \quad \mu_2(\xi, t) = \sigma_1 \Pi_{1t} + v'(l) \xi \Pi_{1\xi} - \\ - a_1 (\Pi_0 \Pi_{1\xi\xi} + \Pi_1 \Pi_{0\xi\xi} + \Pi_{0\xi} \Pi_{1\xi}) - \frac{1}{2} v''(l) \xi^2 \Pi_{0\xi}, \quad \nu_2(t) = 0. \end{aligned}$$

$$\begin{cases} \sigma_2 F_{\frac{j}{2}t}(x, \rho, t) = b_0 F_{\frac{j}{2}\rho\rho}(x, \rho, t) + \gamma_{\frac{j}{2}}(x, \rho, t), \\ F_{\frac{j}{2}}(x, \rho, 0) = 0, F_{\frac{j}{2}}(x, 0, t) = \lambda_{\frac{j}{2}}(x, t), F_{\frac{j}{2}\rho}(x, \rho, t) \Big|_{\rho \rightarrow \infty} = 0, \end{cases}$$

$$\begin{aligned} \gamma_0(x, \rho, t) &= 0, \quad \lambda_0(x, t) = k(u_0(x, t) + \Pi_0(\xi, t)), \quad \gamma_{\frac{1}{2}} = -\frac{2b_0}{R} F_{0\rho}, \\ \lambda_{\frac{1}{2}}(x, t) &= \lambda_{\frac{3}{2}}(x, t) = 0, \quad \gamma_1 = b_1 F_{0\rho}^2 - \sum_{j=0}^1 \frac{2b_0}{R^{j+1}} \rho^j F_{1-\frac{j}{2}\rho}, \quad \lambda_1(x, t) = \\ &= k(u_1(x, t) + \Pi_1(\xi, t)), \quad \gamma_{\frac{3}{2}} = b_1 F_{0\rho} F_{\frac{1}{2}\rho} - \sum_{j=0}^2 \frac{2b_0}{R^{j+1}} \rho^j F_{2-\frac{j}{2}\rho} - \frac{2b_1}{R} F_0 F_{0\rho}, \\ \gamma_2 &= b_1 (F_{\frac{1}{2}\rho}^2 + F_{0\rho} F_{1\rho}) - \sum_{j=0}^3 \frac{2b_0}{R^{j+1}} \rho^j F_{3-\frac{j}{2}\rho} - \frac{2b_1}{R} F_0 F_{\frac{1}{2}\rho} - \frac{2b_1 \rho}{R^2} F_0 F_{0\rho}, \\ \lambda_2(x, t) &= k\Pi_2(\xi, t). \end{aligned}$$

Розв'язки цих задач отримуємо аналогічно [5].

Розглянемо процес конвективно-дифузійного масоперенесення забруднюючої речовини в нанопористому середовищі при таких вхідних даних: $l = 1$, $R = 10^{-5}$, $a_0 = 0.4$, $D_*^* = 0.3$,

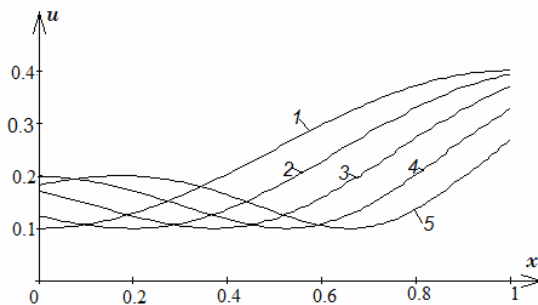


Рис.1. Розподіл концентрації $u(x, t)$.

$$\begin{aligned} b_0 &= 0.09, \quad \sigma_1 = 0.7, \quad \sigma_2 = 0.8, \quad v(x) = 0.2 \sin(x + \pi) + 0.3, \quad k = 0.8, \\ c_0^0(x) &= 0.025 + 0.015 \cos(\pi x + \pi), \quad c_*(t) = 0.005 \cos(2t + \pi) + \\ &+ 0.015, \quad q_0^0(x, r) = \left(\frac{2}{\pi} \operatorname{arctg}\left(\frac{10(r-R)}{R} \right) + 1 \right) k c_0^0(x), \quad \varepsilon = 10^{-10}. \end{aligned}$$

На рис. 1 зображено розподіл концентрації забруднюючої речовини в міжчастинковому просторі в моменти часу $t = 0.5$, $t = 1$, $t = 1.5$, $t = 2$,

$t = 2.5$ (криві 1 – 5 відповідно). Концентрація забруднюючої речовини в мікропорі з координатою $x = 0.1$ в ті ж моменти часу проілюстровано на рис. 2.

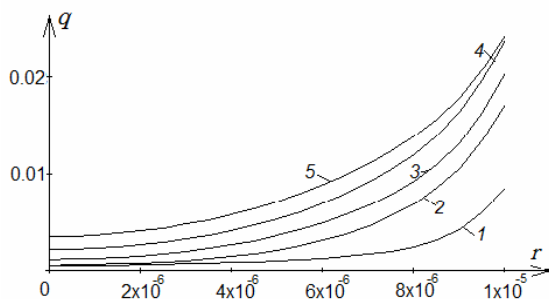


Рис. 2. Розподіл концентрації $q(0.1, r, t)$.

Узагальнюючи, слід зазначити, що в процесі розрахунків отримано розв'язки сингулярно збурених крайових задач однокомпонентної конвективної дифузії в нанопористому середовищі у випадку, коли інтенсивність проникнення розчинної речовини залежить від шуканої концентрації і описується многочленною залежністю. Перспективою досліджень є поширення запропонованої методики розв'язання такого роду задач на відповідні задачі для двовимірних та просторових областей, а також на випадок багатоконпонентного масопереносу.

1. Rolando M. A. Roque-Malherbe. Adsorption and Diffusion in Nanoporous Materials. –Taylor & Francis CRC Press, 2007. – 269 p. **2.** Chen, N. Y., T. F. Degnan and M. C. Smith, Molecular Transport and Reaction in Zeolites: Design and Application of Shape Selective Catalysis, V. C. H. Weinheim, New York, 1994. **3.** Петрик М. Р. Моделирование и анализ концентрационных полей нелинейной конкурентивной двухкомпонентной диффузии в среде нанопористых частей / М. Р. Петрик, Ж. Фрессард, Д. М. Михалик // Проблемы управления и информатики. – 2009. – № 4. – С. 73-83. **4.** Сергиенко И. В. Идентификация градиентными методами параметров задач диффузии вещества в нанопористой среде [Текст] / И. В. Сергиенко, В. С. Дейнека // Пробл. управления и информатики. – 2010. – № 6. – С. 5–18. **5.** Бомба А. Я. Асимптотичний метод розв'язання одного класу модельних сингулярно збурених задач процесу масопереносу в різнопористих середовищах / А. Я. Бомба, І. М. Присяжнюк, О. В. Присяжнюк // Доповіді НАН України. – 2013. – № 3. – С. 28-34. **6.** Бомба А. Я. Нелінійні сингулярно збурені задачі типу «конвекція-дифузія» / А. Я. Бомба, С. В. Барановський, І. М. Присяжнюк – Рівне: НУВГП, 2008. – 254 с.

Рецензент: д.т.н., професор Власюк А. П.