Журнал обчислювальної та прикладної математики | 2015, №3(120) | Journal of Computational & Applied Mathematics

УДК 517.9
MSC 517.9

MODELING OF NONLINEAR SINGULARLY PERTURBED THREE-COMPONENT PROCESSES SUCH AS „DIFFUSION-CONVECTION MASS TRANSFER“ IN NANOPOROUS MEDIA

Andriy Bomba [1], Mykhaylo Petryk [2], Sebastien Leclerc [3], Olena Prysiazhniuk [1], Jacques Fraissard [4]

[1]Rivne State University of Humanities, Kyiv, Ukraine, E-mail: abomba@ukr.net.
[2]Ternopil Ivan Pul'uj National Technical University, Ternopil',
Ukraine, E-mail: mykhaylo_petryk@tu.edu.te.ua.
[3]Laboratory of Energetics, Theoretical and Applied Mechanics, University of Lorraine, Nancy, Lorraine, France.
[4]Pierre and Marie Curie University, Paris, France, E-mail:jfr@ccr.jusieu.fr.

МОДЕЛЮВАННЯ НЕЛІНІЙНИХ СИНГУЛЯРНО ЗБУРЕНИХ ТРИКОМПОНЕНТНИХ ПРОЦЕСІВ ТИПУ „ДИФУЗІЯ-КОНВЕКЦІЯ-МАСООБМІН“ В НАНОСЕРЕДОВИЩІ

А. Я. Бомба[1], М. Р. Петрик[2], Д. Леклерк[3], О. В. Присяжнюк[1], Ж. Фресар[4]

[1]Рівненський державний гуманітарний університет, Рівне, Україна,
E-mail: abomba@ukr.net.
[2]Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя, Тернопіль, Україна, E-mail: mykhaylo_petryk@tu.edu.te.ua.
[3]Лабораторія енергетики, теоретичної і прикладної механіки Університету Лотарінгії, Франція.
[4] Университет Пьера и Марии Кюри, Париж, Франція, E-mail: jfr@ccr.jusieu.fr.

Abstract. Nonlinear singularly perturbed convection-diffusion-adsorption process of mass transfer of two kinds soluble substances in the environment, consisting of particles of microporous structure in conditions of chemical reactions to form the third grade material is modeled. We construct the asymptotic expansion of solving of relevant model boundary problem and on this basis conducted a numerical experiment which allows to assess the impact of various components of the process of the distribution of contaminants in the area.
Keywords: convection, diffusion, mass transfer, the nanoporous media, singular perturbation, asymptotic methods.

Резюме. Змодельовано нелінійний сингулярно збурений процес конвективно-дифузійно-адсорбційного масопереносу двох сортів розчинних речовин в середовищі, що складається з частинок мікропористої структури за умови протікання хімічної реакції з утворенням третього сорту речовини. Побудовано асимптотичне

розвинення розв'язку відповідної модельної крайової задачі та на цій основі проведено числовий експеримент, що дає змогу оцінити вплив різних складових процесу на розподіл забруднень в області.
Ключові слова: конвекція, дифузія, масообмін, нанопористе середовище, сингулярні збурення, асимптотичні методи.

Вступ

Моделювання процесів масоперенесення в нанопористих середовищах є перспективним напрямком досліджень стосовно використання фільтрів з нанопористим завантаженням для очищення забруднених технологічних потоків. Нанопористі матеріали забезпечують адсорбцію та молекулярний транспорт різних компонеттів адсорбтиву через розвинуту мережу макро-, мікро- і мезопорожнин, забезпечуючи ефективне очищення технологічних потоків. Поєднання масообмінних, хімічних і теплових процесів в одному апараті дозволяє підвищити ефективність очищення, знизити кількість відходів, що потрапляють навколишнє середовище. Проведений в роботах [1–20] аналіз результатів досліджень свідчить про наявність складної структури взаємозалежностей різних факторів, що визначають процеси одно- і багатокомпонентного конвективно-дифузійного масоперенесення в пористих і нанопористих середовищах. У роботах [1–2, 5–10] розглянуто проблеми математичного моделювання масоперенесення різної природи в пористих середовищах без урахування внутрішньої структури пористого середовища, зокрема в [5, 8–10] запропоновано підхід до асимптотичного розвинення розв'язків відповідних модельних сингулярно збурених задач. Моделюванню дифузії і адсорбції в нанопористих середовищах та питанню ідентифікації кінетичних параметрів цих процесів присвячено значну кількість публікацій [3–4, 11–20]. Компететивна дифузія речовини в кристалічних середовищах частинок мікропористої структури досліджена в роботах [15–17, 19]. Актуальним залишається питання математичного моделювання процесів багатокомпонентного масоперенесення, ускладненого протіканням хімічної реакції між забруднюючими речовинами в нанопористих середовищах у випадку превалювання одних складових процесу над іншими, опираючись на базу даних новітніх фізичних експериментів для цих середовищ, що приводить до появи малого параметра при відповідних членах рівнянь.

У даній роботі при моделюванні сингулярно збурених процесів типу „конвекція-дифузія-адсорбція-реакція“ очищення рідини від багатокомпонентних домішок в середовищі нанопористої структури у випадку превалювання конвективних складових над дифузійними і масообмінними запропоновано підходи стосовно врахування спеціальних видів взаємовпливу його складових.

1. Постановка задачі

Розглядається процес трикомпонентного конвективно-дифузійно-адсорбційного масоперенесення забруднюючої речовини в наносередовищі за умови домінування конвективної його складової над іншими, що описується наступною модельною сингулярно збуреною задачею:

$$\sigma \frac{\partial c_j}{\partial t} = \sum_{s=1}^{3} \tilde{D}_{js} \frac{\partial^2 c_s}{\partial x^2} - v(x) \frac{\partial c_j}{\partial x} - \alpha_j \tilde{K}_j c_1^{\alpha_1} c_2^{\alpha_2} - \sum_{s=1}^{3} \tilde{S}_{js} \left(\frac{\partial q_s}{\partial \tilde{r}} \right) \Big|_{\tilde{r}=R}, \qquad (1)$$

$$\sigma^* \frac{\partial q_j}{\partial t} = \sum_{s=1}^{3} \tilde{D}_{js}^* \left(\frac{\partial^2 q_s}{\partial \tilde{r}^2} + \frac{2}{\tilde{r}} \frac{\partial q_s}{\partial \tilde{r}} \right) - \alpha_j \tilde{K}_j q_1^{\alpha_1} q_2^{\alpha_2}, j = \overline{1,3}, \qquad (2)$$

$$c_j\left(x,t\right)\big|_{t=0} = c_j^0(x),\; q_j\left(x,\tilde{r},t\right)\big|_{t=0} = q_j^0(x,\tilde{r}), \qquad (3)$$

$$c_j(0,t) = c_{j*}\left(t\right), \; \frac{\partial c_j(x,t)}{\partial x}\bigg|_{x=L} = 0,$$

$$q_j\left(x,\tilde{r},t\right)\big|_{\tilde{r}=R} = k_j c_j\left(x,t\right), \; \frac{\partial q_j(x,\tilde{r},t)}{\partial \tilde{r}}\bigg|_{\tilde{r}=0} = 0, \qquad (4)$$

$$0 \leqslant x \leqslant L = 1, 0 \leqslant \tilde{r} \leqslant R, 0 \leqslant t < \infty.$$

Тут $c_j(x,t)$ — концентрація j-того сорту розчинної речовини у міжчастинковому просторі, $q\left(x,r,t\right)$— концентрація j- того сорту розчинної речовини в мікрочастинці, $\tilde{D}_{js} = \varepsilon D_{js}$ і $\tilde{D}_{js}^* = \varepsilon^3 D_{js}^*$ — коефіцієнти дифузії в міжчастинковому просторі та в мікрочастинках відповідно, $\tilde{S}_{js} = \varepsilon^2 S_{js}$ — коефіцієнти впливу внутрішньочастинкового переносу на міжчастинковий, k_j — коефіцієнти адсорбційної рівноваги, α_j — кількість моль речовини j-го сорту, що візьме участь в реакції, $\tilde{K}_j = \varepsilon I_j K_j$ — швидкість протікання хімічної реакції, $I_1 = I_2 = 1$, $I_3 = -1$, $R = \varepsilon$ — радіус мікрочастинок, σ і σ^* — коефіцієнти пористості відповідно макро- та мікросередовища, $j = \overline{1,3}$, $s = \overline{1,3}$. Всі функції, які фігурують в умовах (3–4) є достатньо гладкими та узгодженими між собою вздовж ребер та кутових точок даної області. Зауважимо, що питання ідентифікації параметрів задач дифузії в нанопористому середовищі досліджено зокрема в [18–20].

Дана модель описує процес руху частинок трьох сортів розчинних речовин у адсорбційному середовищі, що складається з нанопористих мікрочастинок. Дві речовини вступають в хімічну реакцію типу $\alpha_1 c_1 + \alpha_2 c_2 = \alpha_3 c_3$ (для спрощення викладу розглядається випадок $\alpha_j = 1,\; j = \overline{1,3}$). Відмітимо, що в залежності від конкретного виду речовин, можливі різні випадки протікання процесу, наприклад дві речовини-забруднювачі адсорбуються мікрочастинками, а утворена третя речовина — ні, чи навпаки.

Роль малого параметра в даному випадку грає радіус мікрочастинки, а коефіцієнти дифузії на мікро- та макрорівнях і коефіцієнти масообміну виражаються через цей параметр. Після заміни змінної $\tilde{r} = \varepsilon r$ [5], рівняння (1)–(2) зведемо до вигляду:

$$\sigma \frac{\partial c_j}{\partial t} = \varepsilon \sum_{s=1}^{3} D_{js} \frac{\partial^2 c_s}{\partial x^2} - v(x) \frac{\partial c_j}{\partial x} - \varepsilon I_j K_j c_1 c_2 - \varepsilon \sum_{s=1}^{3} S_{js} \left(\frac{\partial q_s}{\partial r} \right) \bigg|_{r=1}, \qquad (5)$$

$$\sigma^* \frac{\partial q_j}{\partial t} = \varepsilon \sum_{s=1}^{3} D_{js}^* \left(\frac{\partial^2 q_s}{\partial r^2} + \frac{2\varepsilon}{r} \frac{\partial q_s}{\partial r} \right) - \varepsilon I_j K_j q_1 q_2, \tag{6}$$
$$0 \leqslant x \leqslant 1, 0 \leqslant \ r \leqslant 1, 0 \leqslant t < \infty.$$

2. Асимптотика розв'язку

Асимптотичне наближення розв'язку системи (5)-(6) за умов (3)-(4) матиме вигляд [10]:

$$c_j(x,t) = c_{j,0}\,(x,t) + \varepsilon c_{j,1}\,(x,t) + ... + \varepsilon^n c_{j,n}\,(x,t) + P_{j,0}\,(\xi,t) +$$
$$+\varepsilon P_{j,1}\,(\xi,t) + ... + \varepsilon^{n+1} P_{j,n+1}\,(\xi,t) + R_{j,n}^1(x,t,\varepsilon), \tag{7}$$
$$q_j(x,r,t) = q_{j,0}(x,r,t) + \varepsilon q_{j,1}(x,r,t) + ... + \varepsilon^n q_{j,n}(x,r,t) + F_{j,0}(x,\rho,t) +$$
$$+ ... + \varepsilon^{i/2} F_{j,i/2}(x,\rho,t) + ... + \varepsilon^{n+1} F_{j,n+1}(x,\rho,t) + R_{j,n}^2(x,r,t,\varepsilon), \tag{8}$$

де $c_{j,i}\,(x,t)$, $q_{j,i}\,(x,r,t)$ ($i = \overline{0,n}$, $j = \overline{1,3}$) — члени відповідних регулярних частин асимптотики, $P_{j,i}\,(\xi,t)$ $(i = \overline{0,n+1})$ — функції типу примежового шару в околі $x = 1$, $F_{j,i/2}\,(x,\rho,t)$ $(i = \overline{0,2n+1})$ — функції типу примежового шару в околі $r = 1$, $\xi = (1-x)\cdot\varepsilon^{-1}$, $\rho = (1-r)\cdot\varepsilon^{-1/2}$ — відповідні регуляризуючі перетворення, $R_{j,n}^1$, $R_{j,n}^2$ — залишкові члени.

Після застосування процедури підстановки рядів (7)–(8) в рівняння (5)–(6) та прирівняння коефіцієнтів при однакових степенях ε [5, 8–10], отримано такі задачі для знаходження регулярних частин асимптотики:

$$\begin{cases} v(x)\dfrac{\partial c_{j,i}(x,t)}{\partial x} + \sigma_1 \dfrac{\partial c_{j,i}(x,t)}{\partial t} = g_{j,i}^1(x,t), \\ c_{j,i}(x,0) = w_{j,i}^1(x), \ \ c_{j,i}(0,t) = w_{j,i}^2(t), \end{cases} \tag{9}$$

$$\begin{cases} \sigma_2 \dfrac{\partial q_{j,i}(x,r,t)}{\partial t} = g_{j,i}^2(x,r,t), \\ q_{j,i}(x,r,0) = w_{j,i}^3(x,r), \end{cases} \tag{10}$$

де $g_{j,0}^1(x,t) = 0$, $w_{j,0}^1(x) = c_j^0(x)$, $w_{j,0}^2(t) = c_{j*}(t)$, $g_{j,0}^2(x,r,t) = 0$, $w_{j,0}^3(x,r) = q_j^0(x,r)$, $g_{j,i}^1(x,t) = \sum\limits_{s=1}^{3} D_{js} \dfrac{\partial^2 c_{s,i-1}(x,t)}{\partial x^2} - I_j K_j \sum\limits_{s=0}^{i-1} c_{1,s}(x,t) c_{2,i-1-s}(x,t) - \sum\limits_{s=1}^{3} S_{js} (\dfrac{\partial q_{s,\,i-1}\,(x,r,t)}{\partial r} + \dfrac{\partial F_{s,\,i-1}\,(x,r,t)}{\partial r} + \varepsilon^{\frac{1}{2}} \dfrac{\partial F_{s,\,i-1/2}\,(x,r,t)}{\partial r}) \Big|_{r=1}$,
$w_{j,i}^1(x) = 0$, $w_{j,i}^2(t) = 0$, $g_{j,1}^2(x,r,t) = \sum\limits_{s=1}^{3} D_{js}^* \dfrac{\partial^2 q_{s,0}(x,r,t)}{\partial r^2} - I_j K_j q_{1,0}(x,r,t) \times q_{2,0}(x,r,t)$, $g_{j,i}^2(x,r,t) = \sum\limits_{s=1}^{3} D_{js}^* (\dfrac{\partial^2 q_{s,i-1}(x,r,t)}{\partial r^2} + \dfrac{2}{r} \dfrac{\partial q_{s,i-2}(x,r,t)}{\partial r}) - I_j K_j \times q_{1,i-1}(x,r,t) q_{2,i-1}(x,r,t)$, $w_{j,i}^3(x,r) = 0$ ($i = \overline{1,n}$, $j = \overline{1,3}$).

Розв'язки наведених задач знайдено методом характеристик:

$$c_{j,0}(x,t) = \left[\begin{array}{l} c_j^0(f^{-1}(\sigma f(x) - t))\,, \ t < \sigma f(x), \\ \qquad c_{j*}(t - \sigma f(x))\,, \ t \geqslant \sigma f(x), \end{array} \right.$$

$$q_{j,0}(x,r,t)=q_j^0(x,r), q_{j,i}(x,r,t)=\frac{1}{\sigma^*}\int\limits_0^t g_{j,i}^2(x,r,\tilde{t})d\tilde{t}, i=\overline{1,n},$$

$$c_{j,i}(x,t)=\left[\begin{array}{l}\dfrac{1}{\sigma}\int\limits_0^t g_{j,i}^1(f^{-1}(\sigma f(x)-t+\tilde{t}),\tilde{t})d\tilde{t},\ t<\sigma f(x),\\ \int\limits_0^x \dfrac{g_{j,i}^1(\tilde{x},\sigma f(\tilde{x})+t-\sigma f(x))}{v^2(\tilde{x})}d\tilde{x},\ t\geqslant\sigma f(x),\end{array}\right.$$

де $f(x)=\sigma\int\limits_0^x\dfrac{d\tilde{x}}{v^2(\tilde{x})}$ — час проходження відповідними часточками розчинної речовини від початку фільтру до точки з координатою x, $f^{-1}(x)$ — функція, обернена до функції $f(x)$ (така функція існує, оскільки $v(x)$ — неперервно диференційована, обмежена, додатньо-визначенк функція, $\sigma>0$ — стала).

Врахувавши співвідношення $\dfrac{\partial}{\partial x}=\dfrac{\partial}{\partial\xi}(-\dfrac{1}{\varepsilon})$, $\dfrac{\partial^2}{\partial x^2}=\dfrac{1}{\varepsilon^2}\dfrac{\partial^2}{\partial\xi^2}$ та розклавши функцію $v(L-\xi\varepsilon)$ в ряд Тейлора в околі $x=L=1$, одержано систему рівнянянь із відповідними умовами для визначення примежових функцій $P_{j,i}$ ($i=\overline{0,n+1}$, $j=\overline{1,3}$):

$$\begin{cases}\sum\limits_{s=1}^3 D_{js}\dfrac{\partial^2 P_{s,i}(\xi,t)}{\partial\xi}+v(L)\dfrac{\partial P_{j,i}(\xi,t)}{\partial\xi}=g_{j,i}^3(\xi,t),\\ \left.\dfrac{\partial P_{j,i}(\xi,t)}{\partial\xi}\right|_{\xi\to0}=\upsilon_{j,i}(t),\ \left.P_{j,i}(\xi,t)\right|_{\xi\to\infty}\to0,\end{cases}$$

де $g_0^3(\xi,t)=0$, $g_{j,1}^3(\xi,t)=\sigma\dfrac{\partial P_{j,0}(\xi,t)}{\partial t}-\sum\limits_{s=1}^3 D_{js}\dfrac{\partial^2 P_{j,0}(\xi,t)}{\partial\xi^2}+v'(L)\xi\dfrac{\partial P_{j,0}(\xi,t)}{\partial\xi}$, $g_{j,i}^5(\xi,t)=\sigma\dfrac{\partial P_{j,i-1}(\xi,t)}{\partial t}-\sum\limits_{s=1}^3 D_{js}\dfrac{\partial^2 P_{j,i-1}(\xi,t)}{\partial\xi^2}+\sum\limits_{s=0}^{i-1}\dfrac{(-1)^s}{s!}v^{(s)}(L)\xi^s\times$ $\times\dfrac{\partial P_{j,i-1-s}(\xi,t)}{\partial\xi}-I_jK_j\sum\limits_{s=0}^{i-1}\sum\limits_{l=0}^{i-1-s}P_{1,i-1-s-l}(\xi,t)P_{2,l}(\xi,t)$ $(i=\overline{2,n+1})$, $\upsilon_{j,i}(t)=-\dfrac{\partial c_{j,i-1}(L,t)}{\partial\xi}$ $(i=\overline{0,n})$, $\upsilon_{j,n}(t)=0$.

Аналогічно [10] отримуємо задачі для поправок $F_{j,i/2}(x,\rho,t)$:

$$\begin{cases}\sigma^*\dfrac{\partial F_{j,i/2}(x,\rho,t)}{\partial t}=\sum\limits_{s=1}^3 D_{js}^*\dfrac{\partial^2 F_{s,i/2}(x,\rho,t)}{\partial\rho^2}+\gamma_{j,i/2}(x,\rho,t),\\ F_{j,i/2}(x,\rho,0)=0, F_{j,i/2}(x,0,t)=\vartheta_{j,i/2}(x,t),\ \left.\dfrac{\partial F_{j,i/2}(x,\rho,t)}{\partial\rho}\right|_{\rho\to\infty}=0,\end{cases}$$

$\gamma_{j,0}(x,\rho,t) = \gamma_{j,1/2}(x,\rho,t) = 0$, $\gamma_{j,1}(x,\rho,t) = -I_j K_j F_{1,0}(x,\rho,t) F_{2,0}(x,\rho,t)$, $\gamma_{j,i/2}(x,\rho,t) = 2\sum\limits_{s=1}^{3}\sum\limits_{l=0}^{i-3} D^*_{js}\rho^l \dfrac{\partial F_{s,(l-i+3)/2}(x,\rho,t)}{\partial\rho} - I_j K_j \sum\limits_{s=0}^{i-3} F_{1,s}(x,\rho,t)\times$ $\times F_{2,i-3-s}(x,\rho,t)$ $(i=\overline{3,n})$, $\vartheta_{j,i/2}(x,t) = k(c_{j,\frac{i}{2}}(x,t) + P_{j,\frac{i}{2}}(x,t))$, для парних i, для непарних дана умова рівна 0.

Розв'язання останньої задачі вимагає застосування чисельних методів (наприклад, методу сіток, методу кінцевих елементів).

Оцінка залишкових членів проводиться аналогічно [5, 8] на основі принципу максимуму для параболічних рівнянь.

3. Результати числових експериментів

Наведемо деякі модельні результати розрахунку описаних вище сингулярно збурених процесів типу „конвекція-дифузія-масообмін“ нанопористому однорідному середовищі. Обчислення проводились для адсорбційного середовища довжиною $L = 1$ *м*, що складається з нанопористих мікрочастинок радіусом $R = 10^{-5}$ *м*, при швидкості конвективного перенесення 5*м/добу*. Для числового експерименту використовувались імовірні дані, прогнозовані на основі аналізу [3, 4]: $D_{11} = 1.8$ *м*^{2}*/добу*, $D_{12} = 0.1$ *м*^{2}*/добу*, $D_{21} = 0.65$ *м*^{2}*/добу*, $D_{22} = 1.03$ *м*^{2}*/добу*, $D_{31} = 0.7$ *м*^{2}*/добу*, $D_{32} = 0.9$ *м*^{2}*/добу*, $D_{33} = 2.45$ *м*^{2}*/добу*, $D^*_{11} = 1.5$ *м*^{2}*/добу*, $D^*_{12} = 0.001$ *м*^{2}*/добу*, $D^*_{21} = 0.006$ *м*^{2}*/добу*, $D^*_{22} = 1.98$ *м*^{2}*/добу*, $D^*_{31} = 0.006$ *м*^{2}*/добу*, $D^*_{32} = 0.008$ *м*^{2}*/добу*, $D^*_{33} = 1.58$ *м*^{2}*/добу*, $K_1 = 5$ *м*^{3}*/кг* $\cdot$ *добу*, $K_2 = 7.5$ *м*^{3}*/кг* $\cdot$ *добу*, $K_3 = 4$ *м*^{3}*/кг* $\cdot$ *добу*, $\sigma = 0.7$, $\sigma^* = 0.8$, $k_1 = 0.87$, $k_2 = 0.94$, $k_3 = 0.87$.

В початковий момент часу концентрації усіх трох речовин рівні 0, а на вході задано розподіли:

$$c_{1*}(t) = \begin{cases} 0.02(1+\cos(5t+\pi)), & t \le \dfrac{\pi}{5}, \\ 0.04, & t > \dfrac{\pi}{5}, \end{cases}$$

$$c_{2*}(t) = \begin{cases} 0.017(1+\cos(10t+\pi)), & t \le \dfrac{\pi}{10}, \\ 0.034, & t > \dfrac{\pi}{10}, \end{cases}$$

$$c_{3*}(t) = 0.$$

На рис. 1 показано ефект від хімічної реакції та адсорбції мікрочастинками, а саме наведені графіки розподілу концентрацій трьох сортів розчинних речовини за умови відсутності масообміну (крива 1) (розв'язок відповідної незбуреної задачі), за умови лише адсорбції забруднень мікрочастинками (крива 2), за умови лише протікання хімічної реакції, тобто у випадку аналогічного процесу у пористому середовищі (мікрочастинки не є нанопористими [9]) (крива 3) та за умови і протікання реакції і адсорбції мікрочастинками (крива 4).

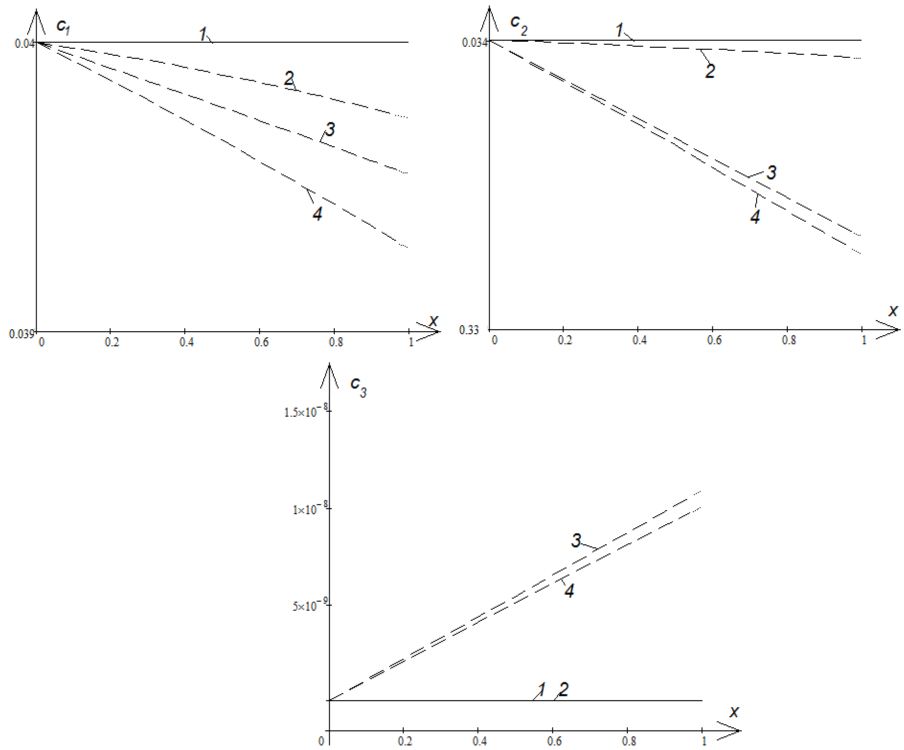

Рис 1. Розподіл концентрації забруднюючої речовини в міжчастинковому просторі

Висновки

Сформована математична модель сингулярно збуреного процесу конвективно-диффузионно-адсорбційного масопереносу трьох сортів забруднюючої речовини, дві з яких вступають в хімічну реакцію в нанопористому середовищі. Побудовано асимптотичне розвинення розв'язку відповідної одновимірної нелінійної сингулярно збуреної крайової задачі, на основі чого проведено комп'ютерний експеримент та графічно зображено просторово-часовий розподіл концентрацій трьох сортів забруднюючих речовин при різних значеннях параметрів процесу. На основі аналізу отриманих результатів можна говорити про значний вплив адсорбції та реакції, не зважаючи на те, що вони є малими в порівнянні з конвекцією. У перспективі — ідентифікація параметрів такого роду процесів та дослідження масопереносу багатопонентного забруднення в багатошарових нанопористих середовищаха також дослідження дифузійного потоку в околі частинок, що омиваються потоком [6].

Література

1. Ruthven D. M. Principles of adsorption and adsorption processes — New York: Wiley-Interscience, 1984. — 464 p.

2. Karger J., Grinberg F., Heitjans P. Diffusion fundamentals — Leipziger Unviersite, Leipzig, 2005. — 615 p.
3. Quirke N. Adsorption and Transport at the Nanoscale —Taylor and Francis, 2006. — 186 p.
4. Rolando M. A. Roque-Malherbe. Adsorption and Diffusion in Nanoporous Materials — CRC Press, 2012. — 288 p.
5. Vasil'eva A. B., Butuzov V. F., Kalachevl.L. V. Boundary Function Method for Singular Perturbed Problems — SIAM, 1995. — 221 p.
6. Ахметов Р. Г. Асимптотика решения задачи конвективной диффузии с объемной химической реакцией в следе за частицей // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. — 2006. — Т. 46, № 5. — С. 834–847.
7. Стеля О. Б. Сплайнова схема розв'язання нестаціонарного рівняння конвекції-дифузії // Журнал обчислювальної та прикладної математики. — 2011. — № 1(104). — С. 136–142.
8. Бомба А. Я., Барановський С. В., Присяжнюк I. М. Нелінійні сингулярно збурені задачі типу „конвекція-дифузія"— Рівне: НУВГП, 2008. — 254 с.
9. Бомба А. Я., Климюк Ю. Є. Математичне моделювання просторових сингулярно-збурених процесів типу фільтрація-конвекція-дифузія — Рівне: „Асоль", 2014. — 273 с.
10. Бомба А. Я., Присяжнюк I. М., Присяжнюк О. В. Асимптотичний метод розв'язання одного класу модельних сингулярно збурених задач процесу масоперенесення в різнопористих середовищах // Доповіді НАН України. — 2013. — № 3. — С. 28–34.
11. Петрик М.Р. Математическое моделирование масопереноса в симметрических неоднородных и нанопористых средах с системой n-интерфейсных взаимодействий // Кибернетика и систем. анализ. — 2007.— № 1. — С. 114–134.
12. I. В. Сергиенко, М. Р. Петрик, О. М. Хіміч та ін. Математичне моделювання масоперенесення в середовищах частинок нанопористої структури — К.: Національна академія наук України. Інститут кібернетики імені В.М. Глушкова, 2014.— 210 с.
13. Petryk M., Fraissard J., Leclerc S., Canet D. Modeling of gas transport in a microporous solid using a slice selection procedure: Application to the diffusion of benzene in ZSM5 // Catalysis Today, Elsevier. — 2008.— 139(3). — P. 234–240. http://dx.doi.org/ 10.1016/j.cattod.2008.05.034.
14. Petryk M., Leclerc S., Canet D., Fraissard J. Mathematical modeling and visualization of gas transport in a zeolite bed using a slice selection procedure // Diffusion Fundamentals. — 2007.— № 4. — P. 11.1–11.23.
15. Lecler S., Petryk M., Canet D., Fraissard J. Competitive Diffusion of Gases in a Zeolite Using Proton NMR and Sclice Selection Procedure // Catalysis Today, Elsevier. — 2012.— 187(1). — P. 104–107. http://dx.doi.org/ 10.1021/acs.jpcc.5b07974.
16. Петрик М. Р., Фрессард Ж., Михалик Д. М. Моделирование и анализ концентрационных полей нелинейной компетитивной двухкомпонентной диффузии в среде нанопористых частиц // Проблемы управления и информатики. — 20079.— № 8. — С. 73–83.
17. Петрик М. Р., Фрессард Ж. Математическое моделирование нелинейной компетитивной двухкомпонентной диффузии в среде нанопористых частиц // Проблемы управления и информатики. — 2009.— № 2. — С. 48–65.

18. Deineka V. S., Petryk M. R., Fraissard J. Identifying kinetic parameters of mass transfer in components of multicomponent heterogeneous nanoporous media of a competitive diffusion system // Cybernetics and System Analysis. — 2011.— Vol. 47, № 5. — P. 705–723. http://dx.doi.org/ 10.1007/s10559-011-9350-2.
19. Дейнека В.С., Петрик М.Р., Фрессард Ж. Идентификация кинетических праметров массопереноса в многокомпонетных системах компетитивной диффузии в неоднородных нанопористых середах // Кибернетика и систем. анализ. — 2011.— № 5. — С. 46–64.
20. Дейнека В. С., Петрик М. Р., Михалик Д. М. Идентификация кинетических параметров однокомпонентного адсорбционного массопереноса в микропористых каталитических средах // Пробл. управления и информатики. — 2011.— № 2. — С. 12–25.

Надійшла 16.11.2015