Михайло Петрик [1], Микола Шинкарик [2], Оксана Петрик [1], Іван Мудрик [1]

Обернені коефіцієнтні задачі компетитивної дифузії в середовищах частинок нанопористої структури з використанням високопродуктивних градієнтних методів

[1] *Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя, Тернопіль, Україна*
E-mail: mykhaylo_petryk@tu.edu.te.ua
[2] *Тернопільський національний економічний університет, Тернопіль, Україна*

Застосування методів математичного моделювання для дослідження процесів масопереносу в нанопористих серередовищах полягає не тільки в складності побудови адекватних математичних моделей, але і в заданні їх параметрів. Розглядається складна система компетитивної дифузії двох газів в неоднорідному середовищі нанопористих частинок. В областях $\Omega_{m_T} = (0,T) \times \Omega_m,\ (\Omega_m = (L_{m-1}, L_m)\,,$ $m = \overline{1, N+1}, L_0 = 0 < L_1 < ... < L_{N+1} = 1\big)$ концентрації $C_{sm}\,(t, Z)\,,$ $Q_{sm}\,(t, X, Z)\,,$ задовольняють системі рівнянь в частинних похідних [1]:

$$\frac{dC_{s_m}(t,Z)}{dt} = \frac{D_{inter_{s_m}}}{l^2}\frac{\partial^2 C_{s_m}}{\partial Z^2} - e_{\mathrm{inter}_m} K_{s_m}\frac{D_{intra_{s_m}}}{R^2}\left(\frac{\partial Q_{s_m}}{\partial X}\right)_{X=1} \quad (1)$$

$$\frac{dQ_{s_m}(t,X,Z)}{dt} = \frac{D_{intra_{s_m}}}{R^2}\frac{\partial^2 Q_{s_m}}{\partial X^2} \quad (2)$$

Початкові умови:

$$C_{s_m}(t=0,Z) = 0; Q_{s_m}(t=0,X,Z) = 0; \\ X \in (0,1)\,,\ Z \in \Omega_m, m = \overline{1, N+1} \quad (3)$$

Крайові та інтерфейсні умови для концентрації C:

$$C_{s_1}(t, L_1) = 1, \frac{dC_{s_1}}{dZ}(t, Z = 0) = 0, t \in (0, T), \tag{4}$$

$$\frac{\partial}{\partial Z}\left[D_{inter_{s_{m-1}}} C_{s_{m-1}}(t, Z) - D_{inter_{s_m}} C_{s_m}(t, Z)\right]_{Z=L_m} = 0,$$
$$m = \overline{1, N}, t \in (0, T) \tag{5}$$

Крайові умови в кожній точці $(Z, t) \subset \Omega_{m_T}$ для концентрації Q по радіусу частинки:

$$\frac{\partial}{\partial X} Q_{s_m}(t, X = 0, Z) = 0, Q_{s_m}(t, X = 1, Z) = C_{s_m}(t, Z)$$
$$t \in (0, T), Z \in \Omega_m, m = \overline{1, N+1} \tag{6}$$

Рівняння (1) описує перенос в просторі макропор, рівняння (2) - дифузію речовин в просторі мікропорів сферичних частинок радіусом R з центром в точці $Z \in \Omega_m, m = \overline{1, N+1}$.

На поверхнях спостережень відомі сумарні розподіли мас

$$\left[C_{s_m}(t, Z) + \bar{Q}_{s_m}(t, Z)\right]\Big|_{\gamma_m} = M_{s_m}(t, Z)\big|_{\gamma_m},$$
$$s = \overline{1, 2}; \gamma_m \in \Omega_m, t \in (0, T) \tag{7}$$

Функціонал-невязка, що мінімізує відхилення модельного розв'язку від значень експериметального сліду на $\gamma_m \in \Omega_m$:

$$J_s\left(D_{\mathrm{inter}_{s_m}}, D_{\mathrm{intra}_{s_m}}\right) = \frac{1}{2}\int_0^T \Big[C_{s_m}\left(\tau, Z, D_{\mathrm{inter}_{s_m}}, D_{\mathrm{intra}_{s_m}}\right)$$
$$+\bar{Q}_{s_m}\left(\tau, Z, D_{\mathrm{inter}_{s_m}}, D_{\mathrm{intra}_{s_m}}\right) - M_{s_m}(t, Z)\Big]^2_{\gamma_m} d\tau,$$
$$\gamma_m \in \Omega_m, m = \overline{1, N+1} \tag{8}$$

В результаті отримана задача ідентифікації (1)-(7), що полягає в знаходженні невідомих функцій $D_{\mathrm{intra}_s} \in \Omega_T$, $D_{\mathrm{inter}_s} \in \Omega_T$ ($D_{\mathrm{intra}_s} > 0, D_{\mathrm{inter}_s} > 0$,$s = \overline{1, 2}$), де адсорбовавані маси $C_{s_m}(t, Z) + \bar{Q}_{s_m}(t, Z)$ задовольняють умовам (7) для кожної поверхні спостереження $\gamma_m \subset \Omega_m$ для кожного m-го сеґмента нанопористого середовища.

[1] Petryk M., Leclerc S., Canet D., Sergienko I., Deineka V., Fraissard J., *Competitive Diffusion of Gases in a Zeolite Bed: NMR and Slice Selection Procedure, Modelling and Parameter Identification.*, J. Phys. Chem. C. ACS (USA), **119(47)**, (2015), pp. 26519–26525.