

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ СИНГУЛЯРНО ЗБУРЕНИХ ПРОЦЕСІВ ОДНОКОМПОНЕНТНОЇ КОНВЕКТИВНОЇ ДИФУЗІЇ В РІЗНОПОРИСТИХ СЕРЕДОВИЩАХ

Бомба А.Я.¹⁾, Присяжнюк І.М.²⁾, Присяжнюк О.В.³⁾, Гомон К.О.⁴⁾

Рівненський державний гуманітарний університет

¹⁾ д.т.н., професор; ²⁾ к.т.н., доцент; ³⁾ пошукувач; ⁴⁾ студентка

I. Постановка проблеми

В кінці ХХ на початку ХХІ століття у зв'язку з інтенсивним розвитком науково-технічного прогресу однією із важливих проблем стає ефективне впровадження надсучасних нанотехнологій і наноматеріалів у різних галузях науки та техніки. Зокрема, сьогодні важливим є питання інтенсифікації процесів конвективно-дифузійного масопереносу з метою розробки нових, більш ефективних технологій очищення та розділення багатоконпонентних рідких сумішей. Для цього, очевидно, необхідно провести ґрунтовні дослідження багатошарових каталітичних мікропористих середовищ з різними фізико-хімічними характеристиками. Для інтенсифікації технологічних процесів, підвищення ступеню розділення та очищення вихідних продуктів, раціональнішого використання сорбентів необхідно врахувати чинники внутрішньої кінетики в таких середовищах. Так, зокрема, задачі моделювання процесів адсорбції в мікропористих цеолітних каталізаторах використовуються в технологіях сепарації та очищення газів в хімічній та нафтопереробній галузях, в інженерній екології і т.п. Каталітичне середовище, в якому протікає процес, представляється у вигляді системи мікропористих частинок та системи міжчастинкових порожнин (макропор) і відповідно до цього перенос розглядається як складна система, що враховує взаємозв'язки між внутрішніми градієнтами концентрацій всередині частинок та зовнішніми градієнтами міжчастинкового простору.

У роботах [1-3], з метою врахування впливу дифузійного масопереносу на макрорівні, використано лінійні і нелінійні моделі, які побудовані на частковому врахуванні дифузії в частинках або на інтегральному підході і не враховують структуру середовища. На сьогодні розроблено чимало підходів до моделювання процесів масопереносу в пористих каталітичних середовищах, які дозволяють в достатній мірі враховувати вплив масопереносу на рівні частинок. Зокрема, в [4-6] розглянуто масоперенос забрудненої речовини в кристалічних середовищах частинок мікропористої структури. Актуальною залишається проблема 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.

II. Мета роботи

Метою дослідження є розроблення математичної моделі сингулярно збуреного процесу однокомпонентної конвективної дифузії в двопористому наносередовищі з урахуванням масообміну між мікропористими частинками та міжчастинковим простором [5] та побудова асимптотичного наближення розв'язку відповідної задачі, проведення та аналіз результатів комп'ютерного експерименту.

III. Постановка задачі

В області $G = \{(x, r, t) : 0 < x < l < \infty, 0 < r < R < \infty, 0 < t < \infty\}$ (рис. 1.) розглядається наступна модельна задача процесу конвективно-дифузійного переносу забруднюючої речовини:

$$\varepsilon a(x, t) u_{xx} - \varepsilon v(x) u_x = a_0(x, t) q'_r(x, R, t) + u_t, \quad (1)$$

$$\varepsilon a_*(x, t) q_{rr} = q_t, \quad (2)$$

$$q(x, r, 0) = q_0^0(x, r), \quad u(x, 0) = u_0^0(x),$$

$$u(0, t) = u_*(t), \quad u'_x(l, t) = 0, \quad q'_r(x, 0, t) = 0, \quad q(x, R, t) = ku(x, t), \quad (3)$$

де l - довжина наносередовища (фільтра), R - радіус наночастинки, $\varepsilon v(x)$ - швидкість конвективного перенесення, ε - малий параметр, $v(x) \geq v_* \gg \varepsilon$. Рівняння (1) описує масоперенос у міжчастинковому просторі з поточною концентрацією $u(x, t)$ і містить у правій частині функцію впливу концентрації в пористих частинках на концентрацію в міжчастинковому просторі. Рівняння (2) описує внутрішньочастинковий масоперенос з поточною концентрацією $q(x, r, t)$. Коефіцієнти

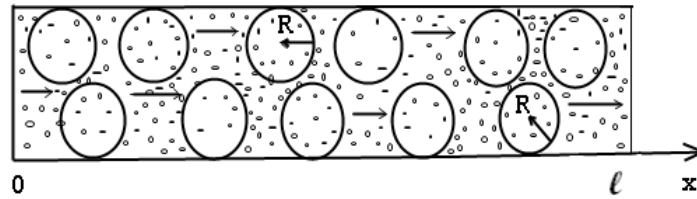


Рисунок 1 - Схема процесу однокомпонентної дифузії

$\varepsilon a(x, t)$ ($a(x, t) > a_* \gg \varepsilon$) та $\varepsilon a_*(x, t)$ ($a_*(x, t) > a_* \gg \varepsilon$) відповідно характеризують швидкість протікання процесів дифузійного масопереносу в міжчастинковому просторі та в порах частинок, а коефіцієнт $a_0(x, t)$ ($a_0(x, t) > a_0 \gg \varepsilon$) характеризує вплив внутрішньо-частинкового переносу на міжчастинковий, $u_*(t)$, $u_0^0(x)$, $q_0^0(x, r)$ - достатньо гладкі функції, узгоджені між собою вздовж ребер та кутових точок даної області. Остання з умов (3) - умова рівноваги на поверхні частинок, $k > 0$ - константа адсорбційної рівноваги [5].

Розв'язок даної задачі одержано у вигляді асимптотичних рядів [1]:

$$u(x, t) = u_0(x, t) + \varepsilon u_1(x, t) + \dots + \varepsilon^n u_n(x, t) + \sum_{j=0}^{2n} \varepsilon^{j/2} P_{j/2}(\underline{x}, t) + \sum_{j=0}^{2n} \varepsilon^{j/2} E_{j/2}(\bar{x}, t) + R_{nu}(x, t, \varepsilon) \quad (4)$$

$$q(x, r, t) = \sum_{i=0}^n \varepsilon^i q_i(x, r, t) + \sum_{j=0}^{2n} \varepsilon^{j/2} F_{j/2}(x, \underline{r}, t) + \sum_{j=0}^{2n} \varepsilon^{j/2} G_{j/2}(x, \bar{r}, t) + R_{nq}(x, r, t, \varepsilon), \quad (5)$$

де $u_i(x, t)$, $q_i(x, r, t)$ ($i = \overline{0, n}$) - члени регулярних частин асимптотики, а $P_{j/2}(\underline{x}, t)$, $E_{j/2}(\bar{x}, t)$,

$F_{j/2}(x, \underline{r}, t)$, $G_{j/2}(x, \bar{r}, t)$ ($j = \overline{0, 2n}$) - функції типу примежового шару, $\underline{x} = \frac{x}{\sqrt{\varepsilon}}$, $\bar{x} = \frac{l-x}{\sqrt{\varepsilon}}$, $\underline{r} = \frac{r}{\sqrt{\varepsilon}}$,

$\bar{r} = \frac{R-r}{\sqrt{\varepsilon}}$ - регуляризуючі розтяги, $R_{nu}(x, t, \varepsilon)$, $R_{nq}(x, r, t, \varepsilon)$ - залишкові члени, шляхом їх

підстановки в (1) - (3) та виконання стандартної процедури прирівнювання коефіцієнтів при однакових степенях ε .

Висновок

У випадку переважання масообмінної компоненти (внутрішньо-частинкового переносу на міжчастинковий) над конвективними та дифузійними (в міжчастинковому просторі та в порах частинок) побудовано асимптотичне наближення розв'язку відповідної модельної сингулярно збуреної задачі для процесу типу дифузія-конвекція-масообмін в двопористому середовищі.

Список використаних джерел

1. Бомба А.Я. Нелінійні сингулярно збурені задачі типу «конвекція-дифузія» / А.Я. Бомба, С.В. Барановський І.М. Присяжнюк-Рівне: НУВГП, 2008. - 254 с.
2. Бомба А.Я. Нелінійні задачі типу фільтрація-конвекція-дифузія-масообмін за умов неповних даних / А.Я. Бомба, В.І. Гаврилюк, А.П. Сафоник, О.А. Фурсачик // - Монографія - Рівне: НУВГП, 2011. - 275 с.
3. Власюк А.П. Чисельне моделювання процесу переносу сольових розчинів в основах гідротехнічних об'єктів / А.П. Власюк, В.О. Самсонюк, П.М. Зінько // Вісник "Кібернетика". - 2002. - Вип.3. - С. 30-34.
4. Петрик М. Р. Математична модель процесу фільтраційного масопереносу неоднорідних середовищ у сферично-конічних необмежених каналах / М. Р. Петрик // Нелинейные задачи математической физики и их применение: 36. наук. пр. - К.: Ін - т. математики НАН України, 1999. - С. 184 - 188.
5. 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.
6. 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.