

УДК 519.6

Н. В. Бабій, здобувач,

М. Р. Петрик, канд. техн. наук

Тернопільський національний технічний університет
імені Івана Пулюя, м. Тернопіль

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ МАСОПЕРЕНОСУ ЗІ ЗМІННИМИ КОЕФІЦІЄНТАМИ ДИФУЗІЇ ДЛЯ НЕОДНОРІДНИХ ОБМЕЖЕНИХ МАГНІТНИХ СЕРЕДОВИЩ

Методами інтегрального перетворення Ганкеля 1-го роду і фундаментальних функцій Коші вперше побудований точний аналітичний розв'язок математичної моделі дифузійного масопереносу для неоднорідного циліндричного обмеженого адсорбційного середовища і системою n -інтерфейсних меж із заданими $4n+3$ нестационарними режимами масопереносу на масообмінних межах. Розроблені нові рекурентні алгоритми та обчислювальні процедури для побудови матриць функцій впливу, породжених неоднорідностями системи, крайовими умовами та системою інтерфейсних умов.

Ключові слова: *математична модель, рівняння масопереносу, початкові та крайові умови, умови спряження, інтегральне перетворення, головні розв'язки, числове моделювання.*

Вступ. Розвиток сучасних нанотехнологій та створення новітніх наноструктур і матеріалів ставить нові завдання до дослідження механізмів кінетики та інтенсифікації дифузійного масопереносу в багатошарових неоднорідних середовищах (**heterogeneous multilayer medias**) різної конфігурації, що дозволяють описувати складні механізми системи інтерфейсних взаємодій, умови рівноваги та нестационарні режими масопереносу на масообмінних поверхнях. Дослідження процесів дифузійного масопереносу в неоднорідних середовищах пористої структури на сьогоднішній день вимагає розвитку нових якісних методів моделювання, що дозволяють описувати складні механізми системи інтерфейсних взаємодій між усіма складовими переносу та нестационарних режимів масопереносу на масообмінних поверхнях [2—4].

Проблеми математичного моделювання дифузійно-дифузійного масопереносу в однорідних і неоднорідних пористих середовищах та методи побудови математичних розв'язків таких моделей були розглянуті в роботах Ликова [6], Fraissard, Springuel-Huet, N'Gokoli-Kekele Laurence, Conner [11—13], Barrer [7], Chen, Degan, Smith [8], Karger, Pfeier, Ruthven [9; 10]. Для однорідних середовищ дифузійного масопереносу застосовувались методи інтегральних перетворень

Фур'є, Лапласа, Вебера, Ганкеля і Гільберта. Для неоднорідних середовищ здебільшого застосовувались чисельні методи [16].

Математична теорія інтегральних перетворень та їх застосувань для задач масопереносу для неоднорідних і пористих середовищ з урахуванням системи механізмів інтерфейсних взаємодій між елементами переносу та нестационарних режимів масообміну на масообмінних поверхнях (врахування спектрального параметру в крайових умовах та системі умов інтерфейсу (спряження)) авторами розроблена в [4]. При найзагальніших припущеннях на структури диференціальних операторів Фур'є, Бесселя, Вебера, Ганкеля, крайових умов і умов інтерфейсу, побудовані інтегральні перетворення Фурє, Бесселя, Вебера і Ганкеля зі спектральним параметром для неоднорідних $(n+1)$ -складових обмежених, напівобмежених і необмежених областей переносу та побудовані головні розв'язки моделей переносу (фундаментальні функції Коші і Гріна) – функції впливу неоднорідностей задачі, крайових умов та системи умов інтерфейсу. У праці [2] нами розглянута математична модель дифузійного масопереносу в неоднорідному обмеженому n -інтерфейсному нанопористому середовищі, побудований точний аналітичний розв'язок моделі та виписані компоненти матриць впливу (головних) розв'язків системи. У [2—5] розглянуті задачі масопереносу для неоднорідних середовищ з урахуванням системи механізмів інтерфейсних взаємодій та нестационарних режимів масопереносу на масообмінних поверхнях.

У ряді досліджень дифузійного переносу спостерігаються концентраційні залежності, що мають складний неоднорідний характер (рис. 1) і потребують як для побудови математичного опису концентраційних розподілів та параметрів внутрішньої кінетики (коефіцієнтів дифузії) використання спеціалізованого комплексу диференціальних гібридних операторів. У пропонуваній роботі, що є логічним продовженням досліджень, проведених у [2—5], враховуються такі фактори.

Математичний опис проблеми. Розглядається масоперенос в обмеженому неоднорідному n -інтерфейсному циліндричному середовищі з різними фізико-хімічними характеристиками і дифузійними властивостями на кожному шарі. Математична модель такого процесу може бути описана у вигляді такої початково-крайової задачі: побудувати обмежений в області

$$D_n^+ = \left\{ (t, r) : t \in i_n = \bigcup_{m=1}^{n+1} (R_{m-1}, R_m); R_0 = 0; R_{n+1} \equiv R < \infty \right\},$$

розв'язок системи B -параболічних рівнянь масопереносу для обмеженого осесиметричного n -складового неоднорідного (за координатою r) середовища з нестационарним режимом масообміну на границі і поверхні контакту

$$\frac{\partial u_m}{\partial t} + \gamma_m^2 u_m - D_m B_{v_m, \alpha_m} [u_m] = f_m(t, r), r \in (R_{m-1}, R_m), \quad (1)$$

з початковими умовами

$$u_m(t, r)|_{t=0} = g_m(r), r \in (R_{m-1}, R_m); m = \overline{1, n+1}, R_0 = 0, \quad (2)$$

крайовими умовами

$$\lim_{r \rightarrow 0} \frac{\partial}{\partial r} (r^{\alpha_1 - \nu_1} u_1) = 0, (L_{22}^{n+1} [u_{n+1}(t, r)])|_{r=R_{n+1}} = \omega_{n+1}(t) \quad (3)$$

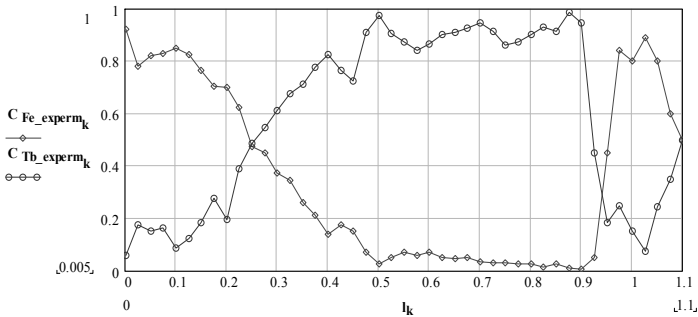
та умовами спряження

$$(L_{j1}^k [u_k(t, r)] - L_{j2}^k [u_{k+1}(t, r)])|_{r=R_k} = \omega_{jk}(t); j = 1, 2; k = \overline{1, n}, \quad (4)$$

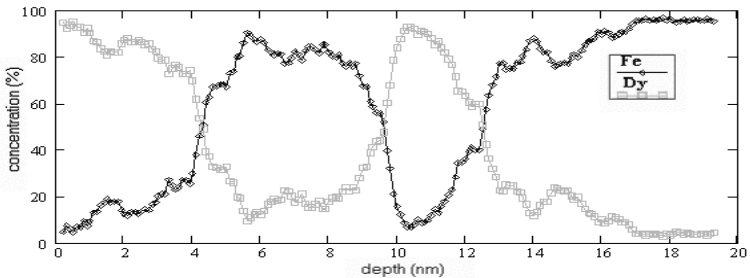
де

$$B_{(v, \alpha)} = \sum_{k=1}^{n+1} D_k \cdot \Theta(r - R_{k-1}) \cdot \Theta(R_k - r) \cdot B_{v_k, \alpha_k}; \quad (5)$$

$$B_{v \alpha_k} = \frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} (2\alpha_k + 1) \frac{d}{dr} - (v_k^2 - \alpha_k^2) r^{-2}, v_k \geq \alpha_k \geq -\frac{1}{2}.$$



a)



b)

Рис. 1. Профілі Fe - Tb та Fe - Dy концентрацій в багатошаровому дифузійному середовищі вздовж товщини зразка (Дані Лабораторії фізики матеріалів Руанського Університету, France [13])

Алгоритм побудови розв'язку. Концентраційні розподіли.
 Припустимо, що $\max\{\gamma_1^2; \gamma_2^2; \dots; \gamma_n^2; \gamma_{n+1}^2\} = \gamma_1^2$. Покладемо $k_m^2 = \gamma_1^2 -$
 $-\gamma_m^2 \geq 0$, $m = \overline{1, n+1}$. Якщо ввести до розгляду функції:

$$u(t, r) = \sum_{m=1}^{n+1} \Theta(r - R_{m-1}) \cdot \Theta(R_m - r) \cdot u_m(t, r);$$

$$\gamma^2 = \sum_{m=1}^{n+1} \Theta(r - R_{m-1}) \cdot \Theta(R_m - r) \cdot \gamma_m^2; g(r) = \sum_{m=1}^{n+1} \Theta(r - R_{m-1}) \cdot \Theta(R_m - r) \cdot q_m(r);$$

$$f(t, r) = \sum_{m=1}^{n+1} \Theta(r - R_{m-1}) \cdot \Theta(R_m - r) \cdot f_m(t, r),$$

то система (1) й початкові умови (2) набувають вигляду задачі Коші:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \gamma^2 u - B_{(v, \alpha)}[u] = f(t, r); u|_{t=0} = g(r). \quad (6)$$

Застосуємо до задачі (6) перетворення Ганкеля I-го роду для неоднорідного середовища, визначене таким інтегральним перетворенням:

- прямої дії:

$$H_{(v, \alpha), n} [q(r)] = \int_0^{R_{n+1}} q(r) \cdot V_{(v, \alpha)}(r, \beta_j) \sigma(r) =$$

$$= \sum_{k=1}^{n+1} \int_{R_{k-1}}^{R_k} q_k(r) V_{(v, \alpha), k}(r, \beta_j) \sigma_k r^{2\alpha_k + 1} dr = q_j, \quad (7)$$

- зворотної дії:

$$H_{(v, \alpha), n}^{-1} [g_j] = \sum_{j=1}^{\infty} g_j \frac{V_{(v, \alpha)}(r, \beta_j)}{\|V_{(v, \alpha)}(r, \beta_j)\|^2} \equiv g(r), \quad (8)$$

- основна тотожність інтегрального перетворення диференціального оператора Бесселя $B(v, \alpha)$:

$$H_{(v, \alpha), n} [B_{(v, \alpha)}[g(r)]] = -\beta_j^2 g_j - \sum_{m=1}^{k+1} k_m^2 \int_{R_{m-1}}^{R_m} g_m(r) V_{(v, \alpha), m} \times$$

$$\times (r, \beta_j) \sigma_m r^{2\alpha_m + 1} dr + \frac{\omega_{n+1} \cdot R_{n+1}^{(2\alpha_{n+1})+1}}{\alpha_{22}^{n+1} \gamma_{22}^{n+1} - \beta_{22}^{n+1} \delta_{22}^{n+1}} \left[\delta_{22}^{n+1} \cdot V'_{(v, \alpha), n+1}(R_{n+1}, \beta_j) + \right.$$

$$\left. + \gamma_{22}^{n+1} \cdot V_{(v, \alpha), n+1}(R_{n+1}, \beta_j) \right] + \sum_{k=1}^n c_{11, k}^{-1} a_k^2 \sigma_k R_k^{2\alpha_k + 1} \left[\tilde{a}_{12}^k \cdot V'_{(v, \alpha), k+1}(R_k, \beta_j) + \right.$$

$$\left. + \tilde{\beta}_{j1} \cdot V_{(v, \alpha), k+1}(R_k, \beta_j) \right] \cdot \omega_{2k} -$$

$$\left. - \left(\tilde{\alpha}_{22}^k \cdot V'_{(v, \alpha), k+1}(R_k, \beta_j) + \tilde{\beta}_{22}^k \cdot V_{(v, \alpha), k+1}(R_k, \beta_j) \right) \cdot \omega_{1k} \right]. \quad (9)$$

Тут:

$$V_{(v,\alpha)}(r, \beta_j) = \sum_{k=1}^{n+1} \Theta(r - R_{k-1}) \cdot \Theta(R_k - r) \cdot V_{(v,\alpha),k}(r, \beta_j), \quad (10)$$

власна вектор-функція яка відповідає власному числу β_j ;

$$\begin{aligned} V_{(v,\alpha);1}(r, \beta_j) &= \Delta_{(v,\alpha)}^{(n)}(\beta_j) J_{v_1, \alpha_1}(b_{1j} r), \\ V_{(v,\alpha);k}(r, \beta_j) &= \left(\prod_{m=k}^n \Delta_{\alpha_{m+1}}^m \right) [\omega_{(v,\alpha)_k;2}^{(k-1)}(\beta_j) J_{v_k, \alpha_k}(b_{kj} r) - \\ &\quad - \omega_{(v,\alpha)_k;1}^{(k-1)}(\beta_j) N_{v_k, \alpha_k}(b_{kj} r), k = \overline{2, n}, \\ V_{(v,\alpha);n+1}(r, \beta_j) &= \omega_{(v,\alpha)_{n+1};2}^{(n)}(\beta_j) J_{v_{n+1}, \alpha_{n+1}}(b_{n+1,j} r) - \\ &\quad - \omega_{(v,\alpha)_{n+1};1}^{(n)}(\beta_j) N_{v_{n+1}, \alpha_{n+1}}(b_{n+1,j} r). \\ b_j^2 &= \frac{1}{D_j} (\beta^2 + k_j^2); D > 0, \end{aligned} \quad (11)$$

$\{\beta_j\}_1^\infty$ — спектр власних чисел інтегрального перетворення, що є коренями трансцендентного рівняння

$$\begin{aligned} \delta_{(v,\alpha)}^{(n)}(\beta) &\equiv u_{v_{n+1}, \alpha_{n+1};22}^{n+1,1}(b_{n+1} R_{n+1}) \omega_{(v,\alpha)_{n+1};2}^{(n)}(\beta) - \\ &\quad - u_{v_{n+1}, \alpha_{n+1};22}^{n+1,2}(b_{n+1} R_{n+1}) \omega_{(v,\alpha)_{n+1};1}^{(n)}(\beta) = 0, \end{aligned} \quad (12)$$

де

$$\begin{aligned} \Psi_{v_k, \alpha_k; v_{k+1}; ij}^k(b_k R_k, b_{k+1} R_k) &= u_{v_k, \alpha_k; 11}^{ki}(b_k R_k) \cdot u_{v_{k+1}, \alpha_{k+1}; 22}^{kj}(b_{k+1} R_k) - \\ &\quad - u_{v_k, \alpha_k; 21}^{ki}(b_k R_k) \cdot u_{v_{k+1}, \alpha_{k+1}; 12}^{kj}(b_{k+1} R_k); \\ \omega_{(v,\alpha)_2; m}^{(1)}(\beta) &= \Psi_{v_1, \alpha_1; v_2, \alpha_2; 1m}^1(b_1 R_1, b_2 R_1) \equiv \omega_{(v,\alpha)_2; m}^{(1)}(b_1 R_1, b_2 R_1); \\ \omega_{(v,\alpha)_3; j}^{(2)}(\beta) &= \omega_{(v,\alpha)_2; 2}^{(1)}(\beta) \cdot \Psi_{v_2, \alpha_2; v_3, \alpha_3; 1j}^2(b_2 R_2, b_3 R_2) - \\ - \omega_{(v,\alpha)_2; 1}^{(1)}(\beta) \cdot \Psi_{v_2, \alpha_2; v_3, \alpha_3; 2j}^2(b_2 R_2, b_3 R_2) &\equiv \omega_{(v,\alpha)_3; j}^{(2)}(b_1 R_1, b_2 R_1; b_2 R_2, b_3 R_2); \\ \omega_{(v,\alpha)_{k+1}; j}^{(k)}(\beta) &\equiv \omega_{(v,\alpha)_{k+1}; j}^{(k)}(b_1 R_1, b_2 R_1; b_2 R_2, b_3 R_2; \dots; b_k R_k, b_{k+1} R_k) = \\ &= \omega_{(v,\alpha)_k; 2}^{(k-1)}(\beta) \cdot \Psi_{v_k, \alpha_k; v_{k+1}, \alpha_{k+1}; 1j}^k(b_k R_k, b_{k+1} R_k) - \omega_{(v,\alpha)_k; 1}^{(k-1)}(\beta) \times \\ &\quad \times \Psi_{v_k, \alpha_k; v_{k+1}, \alpha_{k+1}; 2j}^k(b_k R_k, b_{k+1} R_k); k = \overline{2, n}; \\ j &= \overline{1, 2}; (k) = 123 \dots k; (v, \alpha)_k = \{v_1, \alpha_1; v_2, \alpha_2; \dots; v_k, \alpha_k\}. \end{aligned}$$

Квадрат норми власної вектор-функції

$$\begin{aligned} \left\| V_{(v,\alpha)}(r, \beta_j) \right\|_{\parallel}^2 &= \left\| V_{(v,\alpha)}(r, \beta_j) \right\|^2 + G_{(v,\alpha);n}(\beta_j, \beta_j) \equiv \\ &\equiv \int_0^R \left[V_{(v,\alpha)}(r, \beta_j) \right]^2 \sigma(r) dr + G_{(v,\alpha);n}(\beta_j, \beta_j). \end{aligned} \quad (13)$$

Вагова функція

$$\sigma_r = \sum_{k=1}^{n+1} \Theta(r - R_{k-1}) \cdot \Theta(R_k - r) \cdot \sigma_k \cdot r^{2\alpha_k + 1}, \quad (14)$$

де

$$\sigma_k = \frac{1}{D_k} \frac{c_{11,k} c_{11,k+1} \dots c_{11,n}}{c_{21,k} c_{21,k+1} \dots c_{21,n}} \frac{R_k^{2\alpha_{k+1} + 1} \dots R_n^{2\alpha_{n+1} + 1}}{R_k^{2\alpha_k + 1} \dots R_n^{2\alpha_{n+1} + 1}}, \quad \sigma_{n+1} = \frac{1}{D_{n+1}},$$

та функція

$$\begin{aligned} G_{(v,\alpha);n}(\beta_j, \beta_s) &= \sum_{k=1}^n c_{11,k}^{-2} a_k^2 \sigma_k R_k^{2\alpha_k + 1} \left\{ [\sqrt{a_{11}^k} Z_{(v,\alpha);2k}(R_k \beta_j) + \right. \\ &+ \sqrt{a_{22}^k} Z_{(v,\alpha);1k}(R_k \beta_j)] [\sqrt{a_{11}^k} Z_{(v,\alpha);2k}(R_k \beta_s) + \sqrt{a_{22}^k} Z_{(v,\alpha);1k}(R_k \beta_s)] + \\ &+ c_{11,k} [\sqrt{c_{21,22}^{-11,k}} V'_{(v,\alpha);k+1}(R_k \beta_j) + \sqrt{c_{21,22}^{-22,k}} V_{(v,\alpha);k+1}(R_k \beta_j)] \times \\ &\times [\sqrt{c_{21,22}^{-11,k}} V'_{(v,\alpha);k+1}(R_k \beta_s) + \sqrt{c_{21,22}^{-22,k}} V_{(v,\alpha);k+1}(R_k \beta_s)] \left. \right\} + \\ &+ \frac{a_{n+1}^2 \sigma_{n+1} R_{n+1}^{2\alpha_{n+1} + 1}}{\alpha_{22}^{n+1} \gamma_{22}^{n+1} - \beta_{22}^{n+1} \delta_{22}^{n+1}} \left(\delta_{22}^{n+1} V'_{(v,\alpha);n+1}(R_{n+1}, \beta_j) + \gamma_{22}^{n+1} V_{(v,\alpha);n+1}(R_{n+1}, \beta_j) \right) \times \\ &\times \left(\delta_{22}^{n+1} V'_{(v,\alpha);n+1}(R_{n+1}, \beta_s) + \gamma_{22}^{n+1} V_{(v,\alpha);n+1}(R_{n+1}, \beta_s) \right); \\ &a_{22}^k = \alpha_{21}^k \gamma_{21}^k - \beta_{21}^k \delta_{21}^k \geq 0; \quad a_{j1}^k = \alpha_{j1}^k \gamma_{j1}^k - \beta_{j1}^k \delta_{j1}^k \geq 0; \\ &c_{21,22}^{-11,k} = \alpha_{22}^k \delta_{12}^k - \alpha_{12}^k \delta_{22}^k \geq 0, \quad c_{21,22}^{-22,k} = \beta_{22}^k \gamma_{12}^k - \beta_{12}^k \gamma_{22}^k \geq 0. \end{aligned} \quad (15)$$

Внаслідок тотожності (9) одержуємо задачу Коші для звичайного диференціального рівняння 1-го порядку

$$\left(\frac{d}{dt} + \beta_j^2 + \gamma_1^2 \right) u_j(t) = F_j(t), \quad u_j(t) \Big|_{t=0} = g_j, \quad (16)$$

де

$$\begin{aligned} F_j(t) &= f_j(t) + R_{n+1}^{2\alpha_{n+1} + 1} \left(\alpha_{22}^{n+1} \gamma_{22}^{n+1} - \beta_{22}^{n+1} \delta_{22}^{n+1} \right)^{-1} \left(\delta_{22}^{n+1} V'_{(v,\alpha);n+1}(R_{n+1}, \beta_j) + \right. \\ &+ \gamma_{22}^{n+1} V_{(v,\alpha);n+1}(R_{n+1}, \beta_j) \left. \right) \left(\omega_{n+1}(t) + \Psi_{n+1} \cdot \delta_+(t) \right) + \\ &+ \sum_{k=1}^n \frac{D_k \sigma_k}{c_{11,k}} R_k^{2\alpha_k + 1} \left[\left(\tilde{\alpha}_{12}^k \frac{d}{dr} + \tilde{\beta}_{12}^k \right) V_{(v,\alpha);k+1}(r, \beta_j) \Big|_{r=R_k} \left(\omega_{2k}(t) + \Psi_{2k} \cdot \delta_+(t) \right) - \right. \end{aligned}$$

$$-\left(\tilde{\alpha}_{22}^k \frac{d}{dr} + \tilde{\beta}_{22}^k\right) V_{(v,\alpha);k+1}(r, \beta_j) \Big|_{r=R_k} \left(\omega_k(t) + \Psi_{1k} \delta_+(t)\right) \Big];$$

$$\Psi_{n+1} = \delta_{22}^{n+1} g'_{n+1}(R_{n+1}) + \gamma_{22}^{n+1} g_{n+1}(R_{n+1}); \Psi_{jk} = \delta_{j1}^k g'_k(R_k) + \gamma_{j1}^k q_k(R_k) -$$

$$-\delta_{j2}^k g'_{k+1}(R_k) - \gamma_{j2}^k g_{k+1}(R_k); j=1, 2, k=1, n.$$

Безпосередньо перевіряється, що розв'язком задачі Коші (16) є функція

$$u_j(t) = e^{-(\beta_j^2 + \gamma_1^2)t} g_j + \int_0^t e^{-(\beta_j^2 + \gamma_1^2)(t-\tau)} F_j(\tau) d\tau \equiv$$

$$\equiv \int_0^t e^{-(\beta_j^2 + \gamma_1^2)(t-\tau)} [F_j(\tau) + g_j \cdot \delta_+(\tau)] d\tau. \quad (17)$$

Визначимо головні розв'язки параболічної крайової задачі (1)–(4):

а) функції впливу

$$H_{(v,\alpha);jk}(t, r, \rho) = \sum_{j=1}^{\infty} e^{-(\beta_j^2 + \gamma_1^2)t} \frac{V_{(v,\alpha);i}(r, \beta_j) V_{(v,\alpha);k}(\rho, \beta_j)}{\|V_{(v,\alpha)}(r, \beta_j)\|_2^2}; \quad (18)$$

$$j, k = \overline{1, n+1},$$

породжені неоднорідністю системи (початкових умов);

б) функції Гріна

$$W_{(v,\alpha);n+1,i}(t, r) =$$

$$= \sum_{j=1}^{\infty} e^{-(\beta_j^2 + \gamma_1^2)t} [R_{n+1}^{2\alpha_{n+1}+1} (\alpha_{22}^{n+1} \gamma_{22}^{n+1} - \beta_{22}^{n+1} \delta_{22}^{n+1})^{-1} \times$$

$$\times (\delta_{22}^{n+1} V'_{(v,\alpha);n+1}(R_{n+1}, \beta_j) + \gamma_{22}^{n+1} V_{(v,\alpha);n+1}(R_{n+1}, \beta_j))] \times \quad (19)$$

$$\times \frac{V_{(v,\alpha);i}(r, \beta_j)}{\|V_{(v,\alpha)}(r, \beta_j)\|_2^2}; \quad i = \overline{1, n+1},$$

породжені нестационарним режимом масообміну на крайовій поверхні $r = R_{n+1} \equiv R$;

в) функції Гріна системи інтерфейсних умов

$$R_{(v,\alpha);jk}^{(1)}(t, r) = -\frac{D_k \sigma_k}{c_{1,k}} R_k^{2\alpha_k+1} \sum_{j=1}^{\infty} e^{-(\beta_j^2 + \gamma_1^2)t} \times$$

$$\times \left\{ \left(\tilde{\alpha}_{22}^k \frac{d}{dr} + \tilde{\beta}_{22}^k \right) V_{(v,\alpha);k+1}(r, \beta_j) \Big|_{r=R_k} \right\} \times \quad (20)$$

$$\begin{aligned}
 & \times V_{(v,\alpha);i}(r, \beta_j) \left(\left\| V_{(v,\alpha)}(r, \beta_j) \right\|_1^2 \right)^{-1}, \\
 R_{(v,\alpha);jk}^{(2)}(t, r) &= -\frac{D_k \sigma_k}{c_{11,k}} R_k^{2\alpha_k+1} \sum_{j=1}^{\infty} e^{-(\beta_j^2 + \gamma_j^2)t} \times \\
 & \times \left\{ \left(\tilde{\alpha}_{12}^k \frac{d}{dr} + \tilde{\beta}_{12}^k \right) V_{(v,\alpha);k+1}(r, \beta_j) \Big|_{r=R_k} \right\} \times \\
 & \times V_{(v,\alpha);i}(r, \beta_j) \left(\left\| V_{(v,\alpha)}(r, \beta_j) \right\|_1^2 \right)^{-1}, \quad i = \overline{1, n+1}.
 \end{aligned} \tag{21}$$

У результаті застосування до функції $u_j(t)$, визначеної формулою (17), оператора $H_{(v,\alpha);n}^{-1}$ за правилом (8), одержуємо функції

$$\begin{aligned}
 u_i(t, r) &= \sum_{k=1}^{n+1} \int_0^t \int_{R_{k-1}}^{R_k} H_{(v,\alpha);jk}(t-\tau, r, \rho) \left[f_k(\tau, \rho) + g_k(\rho) \delta_+(\tau) \right] \times \\
 & \times \sigma_k \rho^{2\alpha_k+1} d\rho d\tau + \int_0^t W_{(v,\alpha);n+1,i}(t-\tau, r) \left[\omega_{n+1}(\tau) + \psi_{n+1} \delta_+(\tau) \right] d\tau + \\
 & + \sum_{k=1}^n \int_0^t \left[R_{(v,\alpha);jk}^{(1)}(t-\tau, r) \times (\omega_{1k}(\tau) + \psi_{1k} \delta_+(\tau)) + \right. \\
 & \left. + R_{(v,\alpha);jk}^{(2)}(t-\tau, r) (\omega_{2k}(\tau) + \psi_{2k} \delta_+(\tau)) \right] d\tau, \quad i = \overline{1, n+1},
 \end{aligned}$$

які повністю описують єдиний розв'язок крайової задачі масопереносу (1)–(4).

Числове моделювання: Концентраційні профілі

1. Розв'язання зворотної проблеми дифузійного переносу в багаточаровому FeTb-середовищі (по компоненті Fe).

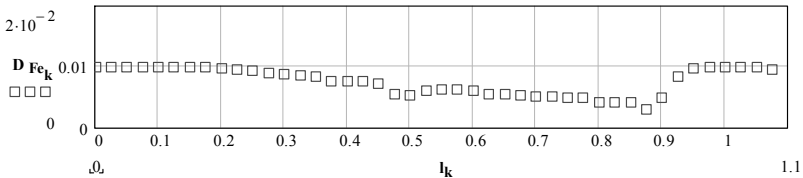


Рис. 2. Профіль коефіцієнту дифузії Fe, [nm²/s]

На рис. 2 подано профіль розподілу коефіцієнту дифузії для Fe, одержані в результаті розв'язання зворотної задачі на основі аналітичного розв'язку математичної моделі та експериментальних даних.

2. Розв'язання прямої проблеми дифузійного переносу в багатошаровому FeTb-середовищі, перевірка моделі на адекватність, аналіз концентраційних полів (по компоненті Fe).

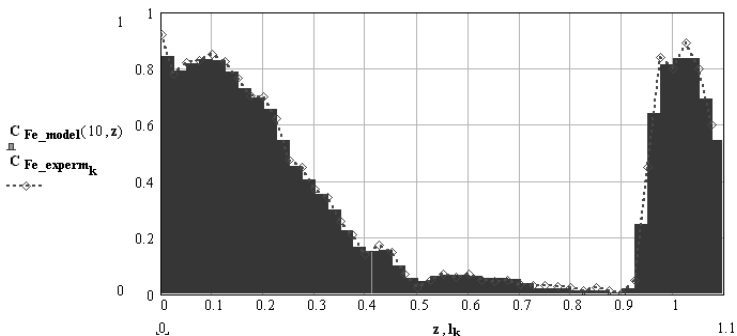


Рис. 3. Моделний та експериментальний профілі концентрацій для Fe (швидкість вхідного потоку маси $u = 0.00237$ nm/s)

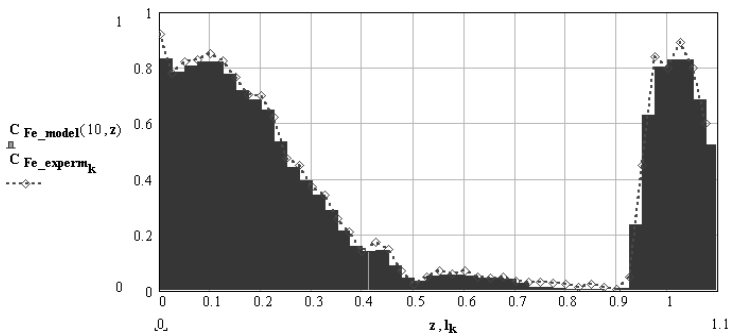


Рис. 4. Моделний та експериментальний профілі концентрацій для Fe (швидкість вхідного потоку маси $u = 0.00137$ nm/s)

На рис. 4—8 подано порівняльну картину модельних і експериментальних профілів розподілів концентрації для Fe для різних швидкостей вхідного потоку маси u [nm/s]. Як видно з наведених рисунків, модельні профілі досить добре узгоджуються з експериментальними даними. При швидкості вхідного потоку маси $u = 0.00237$ nm/s (рис. 3) та $u = 0.0039$ nm/s (рис. 5) спостерігаємо практично повне співпадання модельного та експериментально профілів концентрацій. Для швидкостей $u = 0.00137$ nm/s (рис. 4) та $u = 0.0539$ nm/s (рис. 6) спостерігаємо досить добре узгодження, відхилення модельного профілю від експериментального не перевищує 2%. Для швидкостей $u = 0.00837$ nm/s (рис. 7) та $u = 0.0137$ nm/s (рис. 8) видно деякі відхилення модельного профілю від експериментального, проте похибка знаходиться в межах 5—10%.

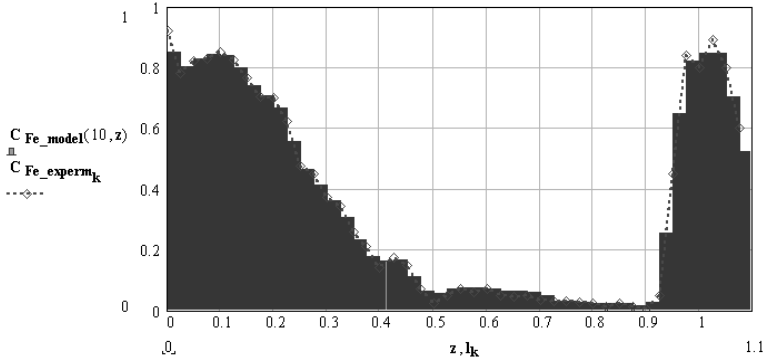


Рис. 5. Модельний та експериментальний профілі концентрацій для Fe (швидкість вхідного потоку маси $u = 0.0039 \text{ m/s}$)

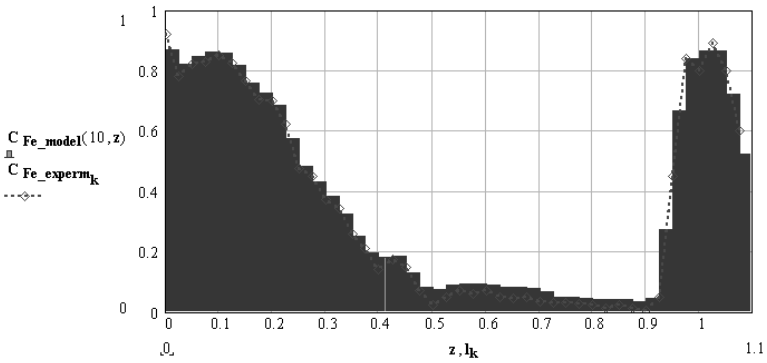


Рис. 6. Модельний та експериментальний профілі концентрацій для Fe (швидкість вхідного потоку маси $u = 0.00537 \text{ m/s}$)

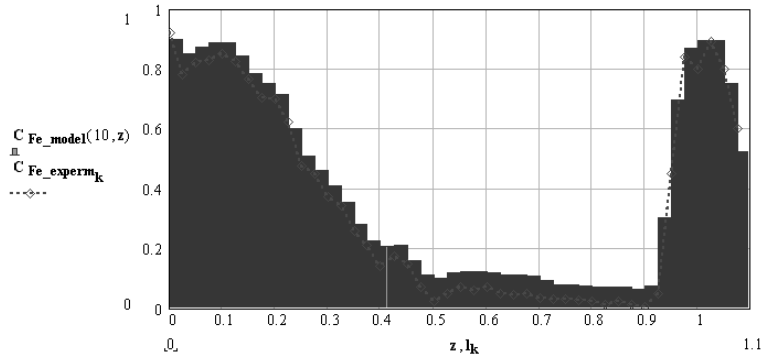


Рис. 7. Модельний та експериментальний профілі концентрацій для Fe (швидкість вхідного потоку маси $u = 0.00837 \text{ m/s}$)

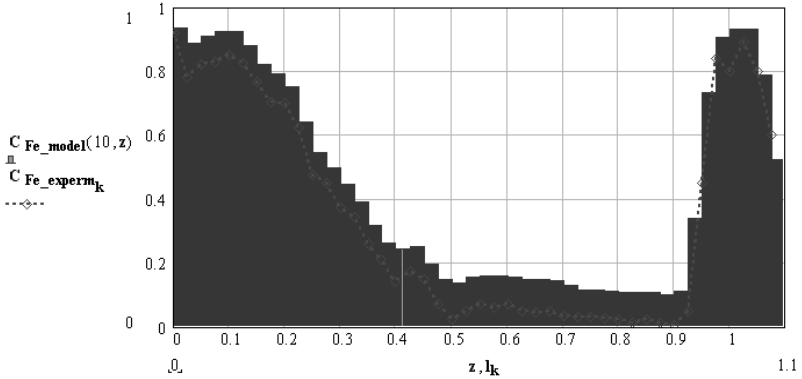


Рис. 8. Модельний та експериментальний профілі концентрацій для Fe (швидкість вхідного потоку маси $u = 0.0137 \text{ nm/s}$)

3. Розв’язання зворотної проблеми дифузійного переносу в багатшаровому FeTb-середовищі (по компоненті Tb).

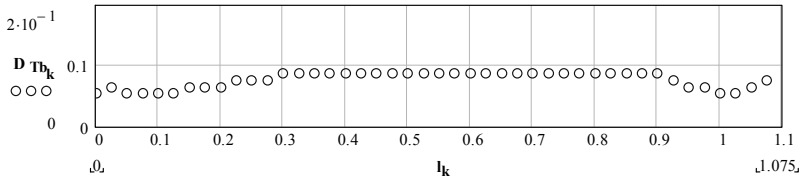


Рис. 9. Профіль коефіцієнту дифузії для Tb, $[\text{nm}^2/\text{s}]$

4. Розв’язання прямої проблеми дифузійного переносу в багатшаровому FeTb-середовищі, перевірка моделі на адекватність, аналіз концентраційних полів (по компоненті Tb).

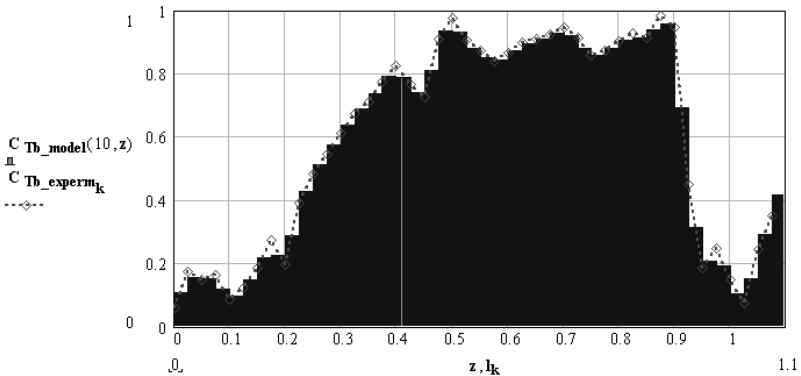


Рис. 10. Модельний та експериментальний профілі концентрацій для Tb (швидкість вхідного потоку маси $u = 0.00237 \text{ nm/s}$)

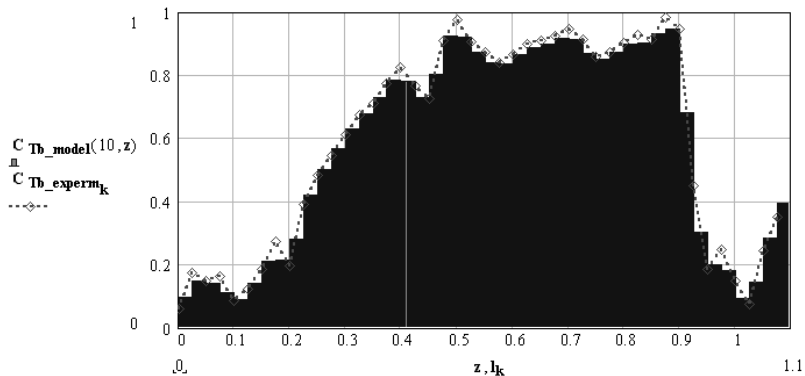


Рис. 11. Модельний та експериментальний профілі концентрацій для T_b (швидкість вхідного потоку маси $u = 0.00137 \text{ m/s}$)

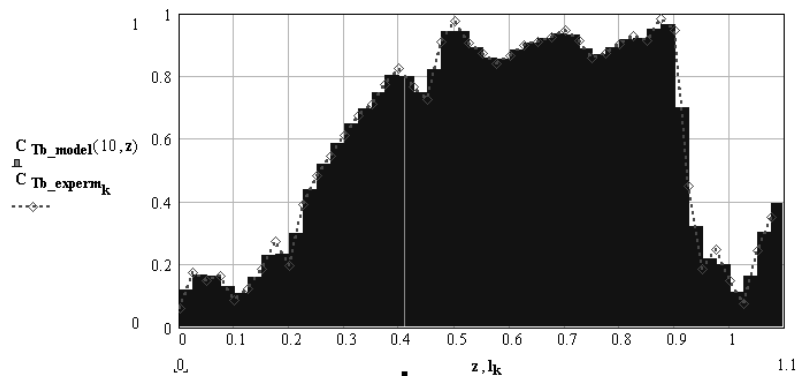


Рис. 12. Модельний та експериментальний профілі концентрацій для T_b (швидкість вхідного потоку маси $u = 0.00337 \text{ m/s}$)

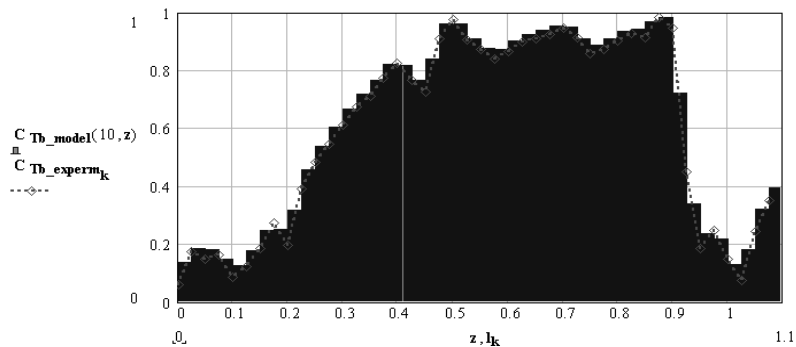


Рис. 13. Модельний та експериментальний профілі концентрацій для T_b (швидкість вхідного потоку маси $u = 0.00537 \text{ m/s}$)

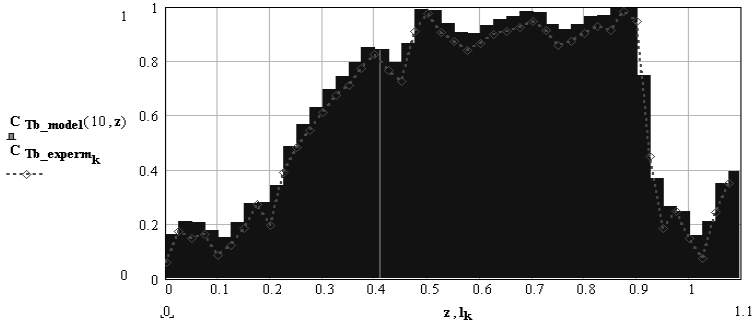


Рис. 14. Модельний та експериментальний профілі концентрацій для **Tb** (швидкість вхідного потоку маси $u = 0.00837 \text{ nm/s}$)

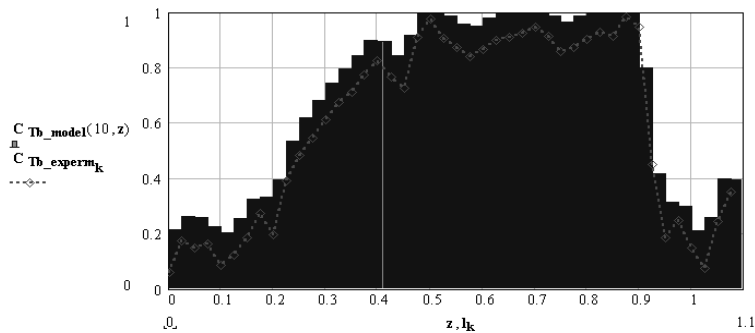


Рис. 15. Модельний та експериментальний профілі концентрацій для **Tb** (швидкість вхідного потоку маси $u = 0.00237 \text{ nm/s}$)

На рис. 10—15 подано порівняльну картину модельних і експериментальних профілів розподілів концентрації для **Tb** для різних швидкостей вхідного потоку маси u [nm/s]. Як видно з наведених рисунків, модельні профілі досить добре узгоджуються з експериментальними даними. При швидкості вхідного потоку маси $u = 0.00237 \text{ nm/s}$ (рис. 10) та $u = 0.0039 \text{ nm/s}$ (рис. 12) спостерігаємо практично повне співпадання модельного та експериментально профілів концентрації. Для швидкостей $u = 0.00137 \text{ nm/s}$ (рис. 11) та $u = 0.0539 \text{ nm/s}$ (рис. 13) спостерігаємо досить добре узгодження, відхилення модельного профілю від експериментального не перевищує 2%. Для швидкостей $u = 0.00837 \text{ nm/s}$ (рис. 14) та $u = 0.0137 \text{ nm/s}$ (рис. 15) видно деякі відхилення модельного профілю від експериментального, проте похибка знаходиться в межах 5—10%.

Висновки. Запропоновано математичну модель дифузійного масопереносу в обмеженому неоднорідному нанопористому середо-

вищі, що описується складним гібридним диференціальним оператором, обґрунтовано її розв'язність та отримано аналітичний розв'язок, що в узагальненому вигляді описують вплив цілого ряду важливих фізичних чинників внутрішньої кінетики переносу, головними серед яких є вплив нестационарних умов системи $(4n + 3)$ -інтерфейсних взаємодій на масообмінних межах середовищ. Це дозволяє моделювати концентраційні профілі дифузтиву в макро- та нанопорах, здійснювати комплексний аналіз внутрішньої кінетики масопереносу як на макрорівні, так і на рівні нанопорів частинок, проектувати оптимальні технологічні схеми масопереносу для багатоскладових середовищ з різними фізико-хімічними характеристиками. Аналітичний розв'язок моделі та ефективні рекурентні алгоритми побудови матриць функцій впливу крайової задачі масопереносу дозволяють формувувати та розв'язувати зворотні задачі масопереносу – визначення кінетичних параметрів за експериментальними розподілами. Це дає можливість здійснювати перевірки на адекватність параметрів моделювання і фізичного експерименту і є одним із визначальних і перспективних напрямків подальшого дослідження.

Список використаних джерел:

1. Ленюк М. П. Інтегральні перетворення Фур'є, Бесселя із спектральним параметром в задачах математичного моделювання масопереносу в неоднорідних середовищах / М. П. Ленюк, М. Р. Петрик. — К. : Наук. думка, 2000. — 372 с.
2. Ленюк М. П. Математичне моделювання дифузійного масопереносу зі спектральним параметром для неоднорідних n -інтерфейсних обмежених мікропористих середовищ / М. П. Ленюк, М. Р. Петрик // Волинський математичний вісник. — 2003. — Вип. 10. — С. 161—185.
3. Петрик М. Р. Математичне моделювання дифузійного масопереносу зі спектральним параметром для n -інтерфейсних неоднорідних і нанопористих обмежених середовищ / М. Р. Петрик // Науковий вісник Чернівецького університету: зб. наук. пр. — Чернівці : Рута, 2006. — Вип. 288. — С. 90—99.
4. Петрик М. Р. Математичне моделювання нелінійних динамічних задач дифузії та дифузії для нерухомого шару дифузенту / М. Р. Петрик // Інтегральні перетворення та їх застосування до крайових задач: зб. наук. пр. — К. : Ін-т математики НАНУ, 1993. — Вип. 5. — С. 201—215.
5. Петрик М. Р. Двовимірна осесиметрична модель двофазного сорбційного масопереносу із спектральним параметром для напівобмеженого двоскладового (по вісі z) середовища / М. Р. Петрик, М. Баб'юк // Математическое моделирование в образовании, науке и промышленности: сб. науч. тр. — Санкт-Петербург : Санкт-Петербургское отделение МАН ВШ, 2000. — С. 133—137.
6. Лыков А. В. Теплообмен: справочник / А. В. Лыков. — М. : Энергия, 1971. — 560 с.
7. Barrer R. M. Diffusion and Flow in Porous Zeolite, Carbon or Ceramic Media, Characterization of Porous Solids, Society of Chemical Industry / R. M. Barrer. — London, 1979.

8. Chen, N. Y. Molecular Transport and Reaction in Zeolites: Design and Application of Shape Selective Catalysis, V.C.H. Weinheim / N. Y. Chen, T. F. Degnan, M. C. Smith. — New York, 1994.
9. Kärger J. Advances in Magnetic Resonance, J.S. Waugh (Ed.) / J. Kärger, H. Pfeifer, W. Heink. — San Diego : Academic Press, 1988. — Vol. 12. — P. 1.
10. Kärger J. Diffusion in Zeolites and Other Microporous Solids / J. Kärger, D. Ruthven. — New York : John Wiley & Sons, 1992.
11. Magalhaes F. D. Study of molecular transport in beds of zeolite crystallites: semi-quantitative modeling of ^{129}Xe NMR experiments / F. D. Magalhaes, R. L. Laurence, W. C. Conner, M. A. Springuel-Huet, A. Nosov, J. Fraissard. — 1997. — P. 2277—2284.
12. Springuel-Huet M. A. NMR study of bed resistance to molecular transport in assemblages of zeolite crystallites / M. A. Springuel-Huet, A. Nosov, J. Kärger, J. Fraissard. — 1996. — P. 7200—7203.
13. N'Gokoli-Kekele P. An Analytical Study of Molecular Transport in Zeolite Bed. Adsorption.(Kluwer) / P. N'Gokoli-Kekele, M. A. Springuel-Huet, J. Fraissard. — 2002. — P. 35—44.

The problem of mass transfer by diffusion in materials is described by systems of differential equations with boundary conditions and contact conditions. The exact analytical solution of adsorption mass transfer mathematical model for heterogeneous cylindrical adsorption media and n -interface surfaces system and non stationary $4n+3$ regimes of mass exchange by the Hankel of the first sort integral transforms and the method of Cauchy fundamental functions is executed. The algorithms and calculation procedures for the fluid functions matrix construction of heterogeneous systems, of the boundary conditions and interface conditions system are described.

Key words: *mathematical model, mass transfer equation, initial and boundary conditions, matching, integral transformation, the main solution, numerical simulator.*

Отримано 23.10.2010