

Матеріали XIX наукової конференції ТНТУ ім. І. Пулюя, 2016

УДК 519.6

М.Р. Петрик¹, докт.фіз.-мат.наук, проф.; Д. М. Михалик¹, канд. техн. наук, доц.;
Ж.Фрессар², докт. наук, проф.

¹ Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя, Україна

² Університет П'єра та Марії Кюрі, Франція

ІДЕНТИФІКАЦІЯ КІНЕТИЧНИХ ПАРАМЕТРІВ ДЛЯ ПРОЦЕСІВ ДВОКОМПОНЕНТНОЇ ДИФУЗІЇ В ЦЕОЛІТАХ

M. Petryk¹, Dr., Prof; D. Mykhalyk¹, Ph.D, Assoc. Prof.; J. Fraissard² Dr., Prof

KINETIC PARAMETERS IDENTIFICATION FOR TWO-COMPONENT DIFFUSION PROCESS IN ZEOLITES

Вивчається задача ідентифікації внутрішніх кінетичних параметрів масопереносу і зокрема розподілів коефіцієнтів двокомпонентної дифузії в цеолітних середовищах, беручи до уваги теорію оптимального керування багатокомпонентними системами, математичні моделі двокомпонентного сумісного масопереносу в неоднорідних нанопористих цеолітних середовищах та результати експериментальних досліджень сумісного дифузійного масопереносу.

Математична модель двокомпонентного сумісного дифузійного масопереносу в цеолітному середовищі може бути описана змішаною системою диференціальних рівнянь в частинних похідних в матричній формі:

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} U_{1m}(t, z) \\ U_{2m}(t, z) \end{bmatrix} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\begin{bmatrix} D_{inter12m} & D_{inter21m} \\ D_{inter21m} & D_{inter12m} \end{bmatrix} \frac{\partial}{\partial z} \begin{bmatrix} U_{1m} \\ U_{2m} \end{bmatrix} \right) - \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left(\begin{bmatrix} D_{intra12m} & D_{intra21m} \\ D_{intra21m} & D_{intra12m} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q_{1m}(t, r, z) \\ q_{2m}(t, r, z) \end{bmatrix} \right) \Big|_{r=R}; \quad (1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} q_{1m}(t, r, z) \\ q_{2m}(t, r, z) \end{bmatrix} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(\begin{bmatrix} D_{intra12m} & D_{intra21m} \\ D_{intra21m} & D_{intra12m} \end{bmatrix} r^2 \frac{\partial}{\partial r} \begin{bmatrix} q_{1m} \\ q_{2m} \end{bmatrix} \right); \quad (2)$$

в області $D \in \bigcup_{m=1}^{n+1} \Omega_m$, $\Omega_m = \{(t, r, z): t > 0, 0 < r < R, z \in (l_{m-1}, l_m)\}$

Системи (1)-(2) складаються з двох взаємопов'язаних підсистем. Так система (1) описує двокомпонентний масопереносу в міжчастинковому просторі з концентраціями U_1, U_2 . Підсистема (2) описує міжчастинковий масоперенос в мікро і нанопорах з концентраціями q_1, q_2 . Взаємозв'язок між концентраціями визначається правою частиною рівняння (1), що описує умови рівноваги на поверхні частинок.

Для ідентифікації розподілів коефіцієнтів дифузії $D_{intra_{sp}}$ розроблено метод ідентифікації для багатокомпонентних систем, у відповідності з яким для визначення $(\theta+1)$ -го наближення коефіцієнтів дифузії $D_{intra_{sp}}$ використовується матричний вираз вигляду

$$D_{intra_{sp}, m}^{\theta+1} = D_{intra_{sp}, m}^{\theta} - \nabla J_s \left(D_{intra_{sp}}^{\theta} \right) \frac{\|M_s^{\theta} - M_{exp}\|^2}{\|\nabla J_s \left(D_{intra_{sp}}^{\theta} \right)\|^2}; \quad s, p = \overline{1, 2}, m = \overline{1, n+1}. \quad (3)$$

В якості експериментальних даних використано матриці розподілів поглинутої маси вздовж координати z в часі для процесів двокомпонентної дифузії в цеоліті ZSM5.