

УДК 519.6

Д. М. Михалик¹, канд. техн. наук, доц.; М.М.Петрик, аспірант
Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя, Україна

ЧИСЛОВЕ МОДЕЛЮВАННЯ ДВОРІВНЕВОГО МАСОПЕРЕНОСУ В МІКРОПОРИСТИХ СЕРЕДОВИЩАХ

D. Mykhalyk¹, Ph.D, Assoc. Prof.; M.Petryk

NUMERICAL MODELING OF TWO-LEVEL MASS TRANSFER IN MICROPOROUS MEDIA

Можливість числового моделювання складних процесів є важливою для багатьох галузей промисловості. Одним з прикладів є масоперенос в середовищі, що складається з пористих частинок та забезпечується двома процесами: процесом дифузії в макропорах, завдяки простору між кристалами та процесом дифузії в системі мікро- і нанопор всередині кристалітів. Вплив кожного із цих процесів на загальний перебіг дифузії визначається значенням ряду параметрів, що визначають адсорбційну рівновагу в середовищі, основними серед яких є коефіцієнти дифузії.

Математична модель дворівневого двокомпонентного адсорбційного масопереносу в пористому середовищі записується у вигляді системи рівнянь в частинних похідних. Модель двокомпонентного адсорбційного масопереносу в мікропористому середовищі записується як: побудувати розв'язками системи рівнянь в частинних похідних

$$\frac{\partial C_1}{\partial t} = D_{\text{inter}11} \frac{\partial^2 C_1}{\partial z^2} + D_{\text{inter}12} \frac{\partial^2 C_2}{\partial z^2} - \frac{\partial}{\partial x} (\theta_{\text{intra}11} Q_1 + \theta_{\text{intra}12} Q_2)_{x=R}, \quad (1)$$

$$\frac{\partial C_2}{\partial t} = D_{\text{inter}21} \frac{\partial^2 C_1}{\partial z^2} + D_{\text{inter}22} \frac{\partial^2 C_2}{\partial z^2} - \frac{\partial}{\partial x} (\theta_{\text{intra}21} Q_1 + \theta_{\text{intra}22} Q_2)_{x=R}, \quad (2)$$

$$\frac{\partial Q_1}{\partial t} = D_{\text{intra}11} \frac{\partial^2 Q_1}{\partial x^2} + D_{\text{intra}12} \frac{\partial^2 Q_2}{\partial x^2}, \quad (3)$$

$$\frac{\partial Q_2}{\partial t} = D_{\text{intra}21} \frac{\partial^2 Q_1}{\partial x^2} + D_{\text{intra}22} \frac{\partial^2 Q_2}{\partial x^2}, \quad (4)$$

в області $D = \{(t, r, z) : t > 0, 0 < x < R, 0 < z < l\}$,

Математична модель (1) – (8) складається із двох взаємозв'язаних систем рівнянь, що описують двокомпонентний масоперенос в міжчастинковому просторі пористого середовища, з поточними концентраціями компонентів $C_1(t, z)$ і $C_2(t, z)$, та масоперенос на мікрорівні (за рахунок простору в частинках), з поточними концентрації компонентів $Q_1(t, x, z)$ і $Q_2(t, x, z)$. Взаємозв'язок між просторами і відповідними концентраціями визначається складовою правої частиною рівнянь (1) та (2), а також крайовими умовами.

Для побудови чисельного розв'язку задачі застосуємо до вихідної системи рівнянь різницеву схему Кранка-Ніколсон і використовуючи отримані чисельні розв'язки задачі виконано числове моделювання перебігу процесу дифузії двох речовин в часі в залежності від різних характеристик середовища, в тому числі і значень коефіцієнтів дифузії для дифундуючих компонентів, які саме і визначають динаміку процесу. Розглянуто характерні випадки співвідношення коефіцієнтів дифузії речовин, що приймають участь у процесі двокомпонентного масопереносу.