Петрик М.Р.[1], Сергієнко І.В.[2], Фресар Ж.[3], Петрик О.Ю.[1]
Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя[1]
Інститут кібернетики імені В.М. Глушкова НАН України[2]
l'Université Pierre et Marie Curie Paris 6 – Sorbone, l'ESPSI Paris Tech[3]
Mykhaylo_Petryk@tu.edu.te.ua

ІДЕНТИФІКАЦІЯ КОЕФІЦІЄНТІВ КОМПЕТИТИВНОЇ ДИФУЗІЇ В СЕРЕДОВИЩАХ ЧАСТИНОК НАНОПОРИСТОЇ СТРУКТУРИ З ВИКОРИСТАННЯМ ВИСОКОПРОДУКТИВНИХ ГРАДІЄНТНИХ МЕТОДІВ

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

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

$$\frac{\partial Q_{s_m}\left(t,X,Z\right)}{\partial t} = \frac{D_{intra_{s_m}}}{R^2}\left(\frac{\partial^2 Q_{s_m}}{\partial X^2} + \frac{2}{X}\frac{\partial Q_{s_m}}{\partial X}\right). \tag{2}$$

Початкові умови

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

Крайові та інтерфейсні умови для концентрації С:

$$C_{s_1}\left(t,L_1\right)=1,\; \frac{\partial C_{s_1}}{\partial Z}\left(t,Z=0\right)=0,\quad t\in\left(0,T\right); \tag{4}$$

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

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

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

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

На поверхнях спостережень відомі сумарні розподіли мас

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

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

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

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 сегмента нанопористого середовища.

Використовуючи градієнтний метод мінімізації похибки для ідентифікації розподілів коефіцієнтів дифузії в intracrystallite space $D_{\mathrm{intra}_{s_m}}$ і intercrystallite space $D_{\mathrm{inter}_{s_m}}$ як функцій від часу для s-ої дифундованої компоненти, отримуємо регуляризаційні вирази для $n+1$-го кроку ідентифікації:

$$D^{n+1}_{\mathrm{intra}_{s_m}}(t)=D^{n}_{\mathrm{intra}_{s_m}}(t)-\nabla J^n_{D_{\mathrm{intra}_{s_m}}}(t)\frac{\left[C_{s_m}\left(D^n_{\mathrm{inter}_{s_m}},D^n_{\mathrm{intra}_{s_m}};t,\gamma_m\right)+\left(\frac{1}{X}\right)_{X=\frac{1}{2}}N_{s_m}\left(D^n_{\mathrm{inter}_{s_m}},D^n_{\mathrm{intra}_{s_m}};t,\frac{1}{2},\gamma_m\right)-M_{s_m}(t)\right]^2}{\left\|\nabla J^n_{D_{\mathrm{intra}_{s_m}}}(t)\right\|^2+\left\|\nabla J^n_{D_{\mathrm{inter}_{s_m}}}(t)\right\|^2},\ t\in(0,T),$$

$$D^{n+1}_{\mathrm{inter}_{s_m}}(t)=D^{n}_{\mathrm{inter}_{s_m}}(t)-\nabla J^n_{D_{\mathrm{inter}_{s_m}}}(t)\frac{\left[C_{s_m}\left(D^n_{\mathrm{inter}_{s_m}},D^n_{\mathrm{intra}_{s_m}};t,\gamma_m\right)+\left(\frac{1}{X}\right)_{X=\frac{1}{2}}N_{s_m}\left(D^n_{\mathrm{inter}_{s_m}},D^n_{\mathrm{intra}_{s_m}};t,\frac{1}{2},\gamma_m\right)-M_{s_m}(t)\right]^2}{\left\|\nabla J^n_{D_{\mathrm{intra}_{s_m}}}(t)\right\|^2+\left\|\nabla J^n_{D_{\mathrm{inter}_{sm}}}(t)\right\|^2},\ t\in(0,T) \tag{9}$$

Шукані аналітичні вирази градієнтів функціоналу-нев'язки по необхідним компонентам коефіцієнтів компетитивної дифузії як функцій від часу в просторах intraparticle space і interparticle space шляхом побудови аналітичних розв'язків прямої і спряженої задачі ($\phi_{s_m}(t,Z),\ \psi_{s_m}(t,X,Z)$) операційним методом Гевісайда мають вигляд:

$$\nabla J_{D_{\mathrm{intra_{sm}}}}(t)=-\frac{e_{\mathrm{inter}_m}}{R}\int_{L_{m-1}}^{L_m}\frac{\partial}{\partial X}Q_{s_m}(t,1,Z)\phi_{s_m}(t,Z)dZ+\frac{1}{R^2}\int_{L_{m-1}}^{L_m}\int_0^1\left(\frac{\partial^2}{\partial X^2}+\frac{2}{X}\frac{\partial}{\partial X}\right)Q_{s_m}(t,X)\psi_{s_m}(t,X,Z)XdXdZ$$

,

$$\nabla J_{D_{\mathrm{inter_{sm}}}}(t)=\int_{L_{m-1}}^{L_m}\frac{\partial^2 C_{s_m}(t,Z)}{\partial Z^2}\phi_{s_m}(t,Z)dZ\ . \tag{10}$$

Література

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). 2015, 119(47), 26519–26525.