

## МОДЕЛЮВАННЯ КОМПЕТИТИВНОГО ПЕРЕНОСУ В НЕОДНОРІДНОМУ СЕРЕДОВИЩІ МІКРОПОРИСТОЇ СТРУКТУРИ

Розглядається задача конкуритивного масопереносу двох компонент в неоднорідному середовищі частинок мікропористої структури. При моделювання процесу розглядаються дифузійні процеси на різних рівнях: на макрорівні, за рахунок простору в міжчастинками (*intracrystallite space*), на мікрорівні, з рахунок мікро- та нанопор частинок середовища (*intercrystallite space*). Відповідно, молекулярний транспорт викликає в такій системі два види спільного (конкуритивного) масопереносу: конкуритивну дифузію в макропорах, за рахунок простору між частинками та конкуритивну дифузію в нанопорах самих частинок.

Математична модель процесу:

$$\frac{\partial C_{1m}}{\partial t} = D_{\text{inter}1m} \frac{\partial^2 C_{1m}}{\partial z^2} + D_{\text{inter}2m} \frac{\partial^2 C_{2m}}{\partial z^2} - \frac{\partial}{\partial x} (\theta_{\text{intra}1m} Q_{1m} + \theta_{\text{intra}2m} Q_{2m})_{x=R}; \quad (1)$$

$$\frac{\partial C_{2m}}{\partial t} = D_{\text{inter}21m} \frac{\partial^2 C_{1m}}{\partial z^2} + D_{\text{inter}22m} \frac{\partial^2 C_{2m}}{\partial z^2} - \frac{\partial}{\partial x} (\theta_{\text{intra}21m} Q_{1m} + \theta_{\text{intra}22m} Q_{2m})_{x=R}; \quad (2)$$

$$\frac{\partial Q_{1m}}{\partial t} = D_{\text{intra}1m} \frac{\partial^2 Q_{1m}}{\partial x^2} + D_{\text{intra}12m} \frac{\partial^2 Q_{2m}}{\partial x^2}; \quad (3) \quad \frac{\partial Q_{2m}}{\partial t} = D_{\text{intra}21m} \frac{\partial^2 Q_{1m}}{\partial x^2} + D_{\text{intra}22m} \frac{\partial^2 Q_{2m}}{\partial x^2} \quad (4)$$

З нульовими початковими умовами, та крайовими умовами, що враховують стан адсорбційної рівноваги на поверхні контакту частинки, та інтерфейсними умовами, що описують неперервність функції концентрації на границях сегментів середовища.

Шляхом введення в області  $I_m = \left\{ t > 0, r \in (0, R), z \in \bigcup_{m=1}^{n+1} (l_{m-1}, l_m); l_0 = 0; l_{m+1} \equiv l < \infty \right\}$

рівномірної ортогональної сітки та апроксимації вихідної системи рівнянь (1)-(4) при допомозі шести точкової різницевої схеми Кранка-Ніколсона вихідна система рівнянь зводиться до систем вигляду:

$$\left. \begin{aligned} a_{1m}^c \cdot C_{1m_{i-1}}^{k+1} + d_{1m}^c \cdot C_{1m_i}^{k+1} + b_{1m}^c \cdot C_{1m_{i+1}}^{k+1} + g_{1m}^c \cdot C_{2m_i}^{k+1} &= f_{1m_i}^c \\ a_{2m}^c \cdot C_{2m_{i-1}}^{k+1} + d_{2m}^c \cdot C_{2m_i}^{k+1} + b_{2m}^c \cdot C_{2m_{i+1}}^{k+1} + g_{2m}^c \cdot C_{1m_i}^{k+1} &= f_{2m_i}^c \end{aligned} \right\}, \quad (5)$$

$$\left. \begin{aligned} a_{1m}^q \cdot Q_{1m_{ij-1}}^{k+1} + d_{1m}^q \cdot Q_{1m_{ij}}^{k+1} + b_{1m}^q \cdot Q_{1m_{ij+1}}^{k+1} + g_{1m}^q \cdot Q_{2m_{ij}}^{k+1} &= f_{1m_{ij}}^q \\ a_{2m}^q \cdot Q_{2m_{ij-1}}^{k+1} + d_{2m}^q \cdot Q_{2m_{ij}}^{k+1} + b_{2m}^q \cdot Q_{2m_{ij+1}}^{k+1} + g_{2m}^q \cdot Q_{1m_{ij}}^{k+1} &= f_{2m_{ij}}^q \end{aligned} \right\}. \quad (6)$$

Оскільки отримані системи (5)-(6) є системами рівнянь з матрицями три діагонального вигляду, то для знаходження значень концентрацій  $C$ ,  $Q$  застосовується алгоритм Томаса (метод прогонки), який має час виконання  $O(n)$ . Відповідно до цього, значення концентрацій на  $(k+1)$  часовому шарі визначаються за відомими значеннями на попередньому  $k$ -му часовому шарі за формулами:

$$\left. \begin{aligned} C_{1m_i}^{k+1} &= \alpha_{1m_i}^c \cdot C_{1m_{i+1}}^{k+1} + \beta_{1m_i}^c + \gamma_{1m_i}^c C_{2m_{i+1}}^{k+1} \\ C_{2m_i}^{k+1} &= \alpha_{2m_i}^q \cdot C_{2m_{i+1}}^{k+1} + \beta_{2m_i}^q + \gamma_{2m_i}^q C_{1m_{i+1}}^{k+1} \end{aligned} \right\}; \quad (7) \quad \left. \begin{aligned} Q_{1m_{ij}}^{k+1} &= \alpha_{1m_{ij}}^q \cdot Q_{1m_{ij+1}}^{k+1} + \beta_{1m_{ij}}^q + \gamma_{1m_{ij}}^q Q_{2m_{ij+1}}^{k+1} \\ Q_{2m_{ij}}^{k+1} &= \alpha_{2m_{ij}}^q \cdot Q_{2m_{ij+1}}^{k+1} + \beta_{2m_{ij}}^q + \gamma_{2m_{ij}}^q Q_{1m_{ij+1}}^{k+1} \end{aligned} \right\}. \quad (8)$$