УДК 519.6

М. Петрик
(Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя)

МАТЕМАТИЧНА ІДЕНТИФІКАЦІЯ КІНЕТИЧНИХ ПАРАМЕТРІВ МАСОПЕРЕНОСУ

Важливим питання при моделюванні масопереносу залишається ідентифікація внутрішніх кінетичних параметрів процесу, що є визначальними для кінетики їх перебігу. Пропонується для математичної моделі однокомпонентного адсорбційного масопереносу, що описується за допомогою крайової задачі в області $D=\{(t,r,z): t>0,\ 0<r<R,\ 0<z<l\}$:

$$\frac{\partial c}{\partial t}=D_{\text{inter}}\frac{\partial^2 c}{\partial z^2}-\frac{3(1-\varepsilon_{\text{inter}})}{\varepsilon_{\text{inter}}}\frac{D_{\text{intra}}}{R}\frac{\partial}{\partial r}q\Big|_{r=R}. \qquad (1)$$

$$\frac{\partial q}{\partial t}=D_{\text{intra}}\frac{\partial^2}{\partial r}q. \qquad (2)$$

на основі теорії оптимального управління станом складних систем, математичних моделей адсорбційного масопереносу в середовищах нанопористого і одержаних для них аналітичних та чисельних розв’язків, побудувати градієнт-процедуру ідентифікації параметрів внутрішньої кінетики переносу (коефіцієнти дифузії D_{inter}, D_{intra}).

Функціонал-нев’язки, що визначає величину відхилення шуканого розв’язку від слідів розв’язку записується у вигляді:

$$J\left(D_{\text{inter}},D_{\text{intra}}\right)==\frac{1}{2}\int_0^T\left(\left\|c\left(\tau,z,D_{\text{inter}},D_{\text{intra}}\right)-f\right\|^2_{L_2(D)}+\left\|\bar{q}\left(\tau,0,D_{\text{inter}},D_{\text{intra}}\right)-g\right\|^2_{L_2(D)}\right)d\tau, \qquad (3)$$

Застосовуючи принцип Лагранжа до розширеного функціоналу, що включає суму функціоналу-нев'язки та складових, що враховують умови балансових рівнянь і початково-крайових умов, отримуємо постановку спряженої задачі.

$$\frac{\partial}{\partial t}\psi(t,r,z)+\frac{\partial^2}{\partial r^2}D^n_{\text{intra}}\psi=\left(q|_{r=R}-f\right)\cdot\delta(r-R),\ r\in(0,R),\ z\in(0,\ell),\ t\in(0,T). \quad (4)$$

Часова умова

$$\psi(t,r,z)\big|_{t=T}=0 \qquad (5)$$

Крайові умови по змінній r

$$-D^n_{\text{intra}}\frac{\partial}{\partial r}\psi\Big|_{r=0}=0;\quad \psi|_{r=R}=0,\ r\in(0,R), \qquad (6)$$

Основні рівняння крайової задачі в приростах (з нульовими умовами) в операторній формі:

$$\mathcal{L}w(t,r,z)=\chi,\ \ w\in(0,R)\cup\Omega_T \qquad (7)$$

Де $\mathcal{L}=\dfrac{\partial}{\partial t}-D_{\text{intra}}\dfrac{\partial^2}{\partial r^2}$, $\chi(t,z)=\Delta D^n_{\text{intra}}\dfrac{\partial}{\partial r}q(t,r,z)$.

Аналітичний вираз градієнта функціоналу по компоненті D_{intra}.

$$\nabla J_{D_{\text{int}\,ra}}=\int_0^T\int_0^R\psi(t,r,z)\cdot\frac{\partial^2}{\partial r^2}q(t,r,z)\,drdt, \qquad (8)$$