

ПАРАМЕТРИЧНА ІДЕНТИФІКАЦІЯ КІНЕТИЧНИХ ПАРАМЕТРІВ МАСОПЕРЕНОСУ В НЕОДНОРІДНИХ НАНОПОРИСТИХ СЕРЕДОВИЩАХ

Михалик Д.М.

Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя
e-mail: d.mykhalyk@gmail.com

Молекулярний транспорт в неоднорідному нанопористому середовищі викликає два процеси: дифузію в макропорах, завдяки простору між кристалітами і дифузію в системі мікро- і нанопор в середині кристалітів. Для визначення внеску кожного з цих процесів в загальний процес дифузії, необхідно знати значення певних кінетичних параметрів процесу, таких як концентрації в міжчастинковому просторі та в частинці, коефіцієнти дифузії, розміри цеоліт ложа, адсорбційні ізотерми та інші.

Математична модель кінетики дифузії газу в середовищі, яке, як ми припускаємо, є різномірним і нанопористим, визначають розв'язки системи диференціальних рівнянь вигляду:

$$\varepsilon_{interk} \frac{\partial c_k}{\partial t} = D_{interk} \cdot \varepsilon_{interk} \frac{\partial^2 c_k}{\partial z^2} - \frac{3(1 - \varepsilon_{interk})}{R} \cdot (D_{int rak} \frac{\partial q_k}{\partial r})|_{r=R} \quad (1)$$

$$\frac{\partial q_k}{\partial t} = D_{int rak} \left(\frac{\partial^2 q_k}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial q_k}{\partial r} \right) \quad (2)$$

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

які описують баланс маси в макропорах (c_k) і мікропорах (q_k) для кожного k -го шару неоднорідного середовища при початкових умовах

$$c_k(t=0, z) = 0, \quad q_k(t=0, r, z) = 0, \quad (3)$$

крайових умовах

$$c_{n+1}(t, z=l) = c_{\infty n+1}, \quad q_k(t, r=R, z) = K_k \cdot c_k(z, t); \quad (4)$$

$$\frac{\partial c_l}{\partial z}(t, z=0) = 0, \quad \frac{\partial q_k}{\partial r}(t, r=0, z) = 0, \quad (5)$$

та з системою умов інтерфейсних взаємодій по координаті z :

$$\left[c_k(t, z) - c_{k+1}(t, z) \right]_{z=l_k} = 0; \quad \left[\frac{\partial}{\partial z} c_k(t, z) - \frac{\partial}{\partial z} c_{k+1}(t, z) \right]_{z=l_k} = 0, \quad k = \overline{1, n} \quad (6)$$

Розв'язок моделі (1) – (6) отримуємо, апроксимувавши вихідну задачу за схемою Кранка-Ніколсона та розв'язавши отриману систему алгебраїчних рівнянь застосовуючи метод прогонки.

Отримавши, таким чином, чисельний розв'язок моделі масоперееносу в неоднорідному нанопористому середовищі та розробивши на його основі

комплекс програмного забезпечення на мові Java, вдалося побудувати просторово-часові залежності кінетичних параметрів процесу масопереносу.

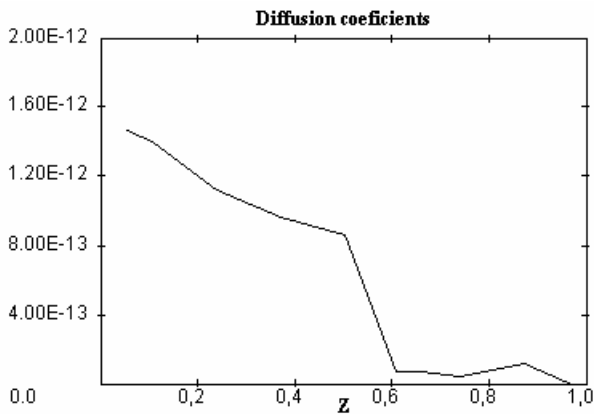


Рис. 1 – Розподіл коефіцієнту дифузії в макропорах D_{inter} .

Зокрема, використавши експериментальні дані по кінетиці адсорбції бензолу в цеоліті, здійснено параметричну ідентифікацію коефіцієнтів дифузії в макропорах середовища D_{inter} уздовж координати z неоднорідного шару каталітичного середовища.

Далі, використовуючи профілі ідентифікованих коефіцієнтів дифузії, здійснено процедуру визначення часово-просторових розподілів концентрацій для міжчастинкового простору $C(t, Z)$ та простору в частинці $Q(t, X, Z)$.

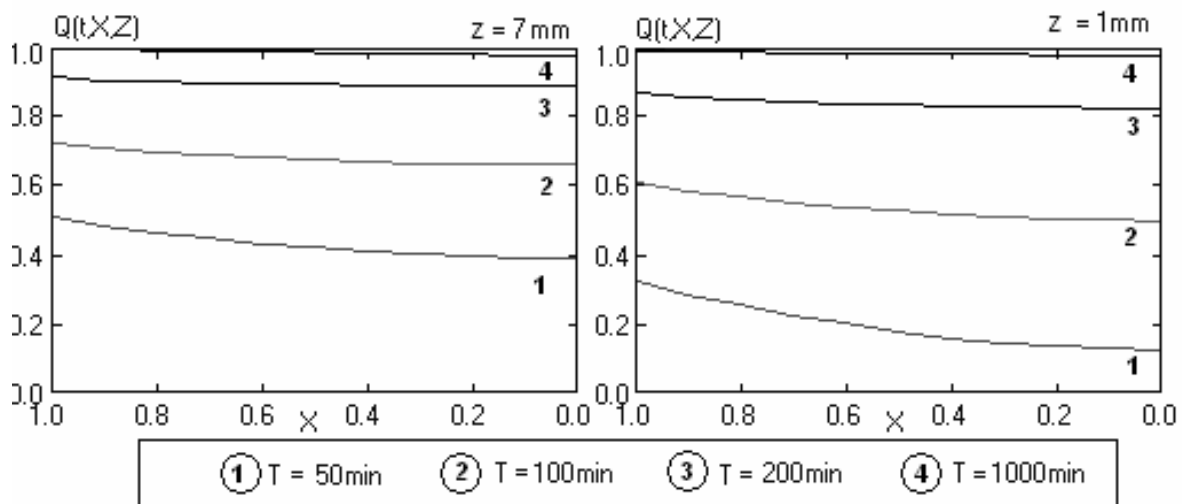


Рис. 2 - Розподіли концентрації газу для простору в частинці неоднорідного середовища для різних положень частинки в цеоліті z і для різних моментів часу t

Отриманий чисельний розв’язок представленої моделі дворівневого масопереносу в неоднорідному нанопористому середовищі та розроблене на її основі програмне забезпечення дозволило здійснити параметричну ідентифікацію ряду кінетичних параметрів процесу дифузійного масопереносу, зокрема визначити значення коефіцієнтів дифузії для макро та нанопросторів середовища, а також змоделювати розподіли концентраційних градієнтів і інших параметрів процесу дифузії.