УДК 519.6

Математична модель та побудова розв’язку систем компетитивного переносу в неоднорідному середовищі нанопористих частинок

М. Р. Петрик

Тернопільський національний технічний університет ім. Івана Пулюя, Україна

Розглядається математична постановка та методика знаходження аналітичного розв’язку системи компетитивного масопереносу в неоднорідному середовищі нанопористих частинок із використанням схеми лінеаризації вихідної неоднорідної задачі, інтегральних перетворень Лапласа та функцій впливу.

Ключові слова: *математична модель, компетитивна дифузія, інтегральне перетворення Лапласа, функції впливу Коші.*

Рассматривается математическая постановка и методика нахождения аналитического решения системы компетитивного массопереноса в неоднородной среде нанопористых частиц с использованием схемы линеаризации исходной неоднородной задачи, интегральных преобразований Лапласса и функции влияния.

Ключевые слова: *математическа модель, компетитивная диффузия, интегральние преобразование Лапласа, функции влияния Коши.*

The article deals with mathematical formulation and finding of analytical solutions of system of competitive diffusion mass transfer in a heterogeneous media of nanoporous particles using the scheme of linearization original inhomogeneous problem, the Laplacer integral and the method of influence functions

Key words: *mathematical model****,*** *competitive diffusion, Laplace integral, Cauchy influence functions.*

1. Вступ

Широко використовувані в різних галузях промисловості, неоднорідні нанопористі середовища складаються з тонких шарів частинок розгалуженої пористої структури, що володіють різними фізико-хімічними властивостями. Кожен шар є багаторівневою системою пор, що включає мікро-і нанопори з високим ступенем адсорбційної місткості і низьким ступенем дифузійного проникнення (intraparticle space) та макропори між частинками з низьким рівнем місткості і високою швидкістю проникнення (interparticle space) [1].

Дослідження, що проводилися в цій галузі, стосувалися більше молекулярного транспорту окремих речовин на макрорівні без істотного впливу ефектів і особливостей мікро-і нанопереносу в частинках [1-3], що є лімітуючими чинниками. Проблема міжмолекулярної взаємодії, що має місце в реальних системах компетитивного переносу двох і більше речовин, практично є не дослідженою. Фізична картина стану системи компетитивної дифузії, як показують результати нанофізичних експериментів [4] є практично несумісною з подібними результатами для монодиффузії, тому розробка математичної теорії для опису таких систем є актуальною.

2. Фізико-математична постановка задачі

Математична модель компетитивного масопереносу в неоднорідному нанопористому середовищі з урахуванням вказаних фізичних чинників може бути описана у вигляді наступної нелінійної змішаної крайової задачі [5, 7]:

побудувати обмежений в області $D=\left\{(t,r,z): t>0,\ 0<r<R,\ z\in\bigcup_{k=1}^{n+1}(l_{k-1},l_k)\right\}$ розв'язок системи рівнянь в частинних похідних записаної у матричному вигляді:

$$\frac{\partial}{\partial t}\begin{bmatrix}U_{1_k}(t,z)\\ U_{2_k}(t,z)\end{bmatrix}=\frac{\partial}{\partial z}\begin{bmatrix}\tilde{D}_{11_k}(U_{1_k},\bar{q}_{1_k}) & \tilde{D}_{12_k}(U_{2_k},\bar{q}_{2_k})\\ \tilde{D}_{21_k}(U_{1_k},\bar{q}_{1_k}) & \tilde{D}_{22_k}(U_{2_k},\bar{q}_{2_k})\end{bmatrix}\frac{\partial}{\partial z}\begin{bmatrix}U_{1_k}\\ U_{2_k}\end{bmatrix}-\frac{1}{R}\frac{\partial}{\partial r}\begin{bmatrix}a_{11_k} & a_{12_k}\\ a_{21_k} & a_{22_k}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}q_{1_k}(t,r,z)\\ q_{2_k}(t,r,z)\end{bmatrix}_{r=R};\quad(1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\begin{bmatrix}q_{1_k}(t,r,z)\\ q_{2_k}(t,r,z)\end{bmatrix}=\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(\begin{bmatrix}\tilde{D}_{\mathrm{int}ra11_k}(U_{1_k},q_{1_k}) & \tilde{D}_{\mathrm{int}ra12_k}(U_{2_k},q_{2_k})\\ \tilde{D}_{\mathrm{int}ra21_k}(U_{1_k},q_{1_k}) & \tilde{D}_{\mathrm{int}ra22_k}(U_{2_k},q_{2_k})\end{bmatrix}r^2\frac{\partial}{\partial r}\begin{bmatrix}q_{1_k}\\ q_{2_k}\end{bmatrix}\right);\quad(2)$$

з початковими нульовими умовами:

$$U_{s_k}(t,z)\big|_{t=0}=0;\qquad q_{s_k}(t,r,z)\big|_{t=0}=0;\quad(3)$$

крайовими та інтерфейсними умовами по просторових змінній z і r

$$\frac{\partial}{\partial z}\left[D_{s1_1}U_{1_1}(t,z)+D_{s2_1}U_{2_1}(t,z)\right]_{z=0}=0;\qquad U_{s_{n+1}}(t,z)\big|_{z=l}=U_{l_s}(t);\quad(4)$$

$$\left[U_{s_k}(t,z)-U_{s_{k+1}}(t,z)\right]_{z=l_k}=0,\ \frac{\partial}{\partial z}\left(D_k\begin{bmatrix}U_{1_k}\\ U_{2_k}\end{bmatrix}-D_{k+1}\begin{bmatrix}U_{1_{k+1}}\\ U_{2_{k+1}}\end{bmatrix}\right)\Bigg|_{z=l_k}=0,\ k=\overline{1,n};\quad(5)$$

$$\left[D_{\mathrm{intra}_{s1k}}\frac{\partial}{\partial r}q_{1_k}(t,r,z)+D_{\mathrm{intra}_{s2k}}\frac{\partial}{\partial r}q_{2_k}(t,r,z)\right]_{r=0}=0,\ q_{s_k}(t,r,z)\big|_{r=R}=k_{s_k}\cdot U_{s_k}(t,z);\ i,s=\overline{1,2}.\quad(6)$$

Система (1) описує компетитивний масоперенос з поточними концентраціями для *к*-го щару U_{1_k}, U_{2_k} в міжчастинковому просторі, що лімітований правими частинами рівнянь, заданими у вигляді системи впливу на зовнішніх поверхнях сферичних частинок радіуса *R*. Система (2) описує внутрішньочастинковий (*intraparticle space*) масоперенос компонентів з поточними концентраціями в мікро- й нанопорах для *к*-го щару q_{1_k}, q_{2_k}. Зв'язок між концентраціями для *к*-го щару U_1, U_2 в *interpartical space* та концентраціями q_{1_k}, q_{2_k} в *intraparticle space* визначається правими крайовими умовами (6), що описують умови адсорбційної рівноваги на поверхні сферичних частинок.

Тут $\tilde{D}_k=\left[\tilde{D}_{ij_k}(U_j,\bar{q}_j)\right]$, $\tilde{D}_{\mathrm{int}ra_k}=\left[\tilde{D}_{\mathrm{int}ra_{ij_k}}(U_j,q_j)\right]$ - матриці коефіцієнтів дифузії в міжчастинковому просторі та мікропорах частинок, що є функціями від поточних концентрацій U_{j_k}, q_{j_k}; $j=\overline{1,2}$ і відповідно визначаються залежностями $\tilde{D}_{ij_k}(q_{j_k})=D_{ij_k}\left(1+\varepsilon\cdot U_{j_k}(t,z)\bar{q}_{j_k}(t,z)\right)$, $\tilde{D}_{\mathrm{intra}_{ij_k}}(q_j)=D_{\mathrm{intra}_{ij_k}}\left(1+\varepsilon\cdot U_{j_k}(t,z)q_{j_k}(t,r,z)\right)$; $_{i,j=\overline{1,2}}$

- $\overline{q}_{j_k}(t,z)=\frac{1}{R^2}\int_0^R q_{j_k}(t,x,z)rdr$, $D_k=\left[D_{ij_k}\right]$, $D_{\text{int}ra_k}=[D_{\text{int}ra_{ij_k}}]$, $i,j=\overline{1,2}$ - матриці постійних складових коефіцієнтів дифузії в міжчастинковому просторі та мікропорах частинок; ε - малий параметр; $a_k=[a_{ij_k}], a_{ij}=3(1-\varepsilon_{\text{int}er})D_{\text{int}ra_{ij_k}}$; $i,j=\overline{1,2}$; $\varepsilon_{\text{int}er}$ - коефіцієнт пористості в *interpartical space*; $K=\left[K_i\right]$, $_{i=\overline{1,2}}$ - вектор констант адсорбції для кожної із дифундованих компонент.

3. Схема лінеаризації нелійної моделі

Розв'язок нелінійної крайової задачі (1)-(2) шукатимемо у вигляді асимптотичних сум [6]:

$$U_{j_k}(t,z)=\sum_{m=0}^{\infty}\varepsilon^m U_{j_{k,m}}(t,z); \qquad q_{j_k}(t,r,z)=\sum_{m=0}^{\infty}\varepsilon^m q_{j_{k,m}}(t,r,z). \tag{7}$$

В результаті підстановки асимптотичних сум (7) вихідна крайова задача (1)-(6) розщеплюється на два типи лінеаризованих підзадач:

Задача A_0 (нульове наближення з умовами вихідної задачі): Знайти обмежений в області D розв'язок системи рівнянь в частинних похідних:

$$\frac{\partial}{\partial t}\begin{bmatrix}U_{1_{k,0}}(t,z)\\ U_{2_{k,0}}(t,z)\end{bmatrix}=\frac{\partial^2}{\partial z^2}\begin{bmatrix}D_{11_k} & D_{12_k}\\ D_{21_k} & D_{22_k}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}U_{1_{k,0}}\\ U_{2_{k,0}}\end{bmatrix}-\frac{1}{R}\frac{\partial}{\partial r}\begin{bmatrix}a_{11_k} & a_{12_k}\\ a_{21_k} & a_{22_k}\end{bmatrix}\left.\begin{bmatrix}q_{1_{k,0}}(t,r,z)\\ q_{2_{k,0}}(t,r,z)\end{bmatrix}\right|_{r=R};\tag{8}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\begin{bmatrix}q_{1_{k,0}}(t,r,z)\\ q_{2_{k,0}}(t,r,z)\end{bmatrix}=\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)\begin{bmatrix}D_{\text{int}ra11_k} & D_{\text{int}ra12_k}\\ D_{\text{int}ra21_k} & D_{\text{int}ra22_k}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}q_{1_{k,0}}\\ q_{2_{k,0}}\end{bmatrix};\tag{9}$$

з початковими нульовими умовами:

$$U_{s_{k,0}}(t,z)\big|_{t=0}=0; \qquad q_{s_{k,0}}(t,r,z)\big|_{t=0}=0;\tag{10}$$

крайовими та n-інтерфейсними умовами по змінній z

крайовими та інтерфейсними умовами по просторових змінній z і r

$$\left[D_{s1_1}\frac{\partial}{\partial z}U_{1_{1,0}}(t,z)+D_{s2_1}\frac{\partial}{\partial z}U_{2_{1,0}}(t,z)\right]_{z=0}=0; \qquad U_{s_{n+1,0}}(t,z)\big|_{z=l}=U_{l_s}(t);\tag{11}$$

$$\left[U_{s_{k,0}}(t,z)-U_{s_{k+1,0}}(t,z)\right]_{z=l_k}=0, \left.\frac{\partial}{\partial z}\left(D_k\begin{bmatrix}U_{1_{k,0}}\\ U_{2_{k,0}}\end{bmatrix}\right)\right|_{z=l_k}-\left.\frac{\partial}{\partial z}\left(D_{k+1}\begin{bmatrix}U_{1_{k+1,0}}\\ U_{2_{k+1,0}}\end{bmatrix}\right)\right|_{z=l_k}=0,\ k=\overline{1,n};\tag{12}$$

крайовими умовами по радіальній змінній r

$$\left[\frac{\partial}{\partial r}\left(D_{\text{intra}_{s1_k}}q_{1_{k,0}}\right)+\frac{\partial}{\partial r}\left(D_{\text{intra}_{s2_k}}q_{2_{k,0}}\right)\right]_{r=0}=0,\ q_{s_{k,0}}(t,r,z)\big|_{r=R}=k_{s_k}\cdot U_{s_{k,0}}(t,z);\ i,s=\overline{1,2}.\tag{13}$$

Задача $A_m; m=\overline{1,\infty}$ (m-те *наближення*): побудувати в області D обмежений розв'язок системи рівнянь

$$\frac{\partial}{\partial t}\begin{bmatrix} U_{1_{k,m}}(t,z) \\ U_{2_{k,m}}(t,z)\end{bmatrix} = \frac{\partial^2}{\partial z^2}\begin{bmatrix} D_{11_k} & D_{12_k} \\ D_{21_k} & D_{22_k}\end{bmatrix}\begin{bmatrix} U_{1_{k,m}} \\ U_{2_{k,m}}\end{bmatrix} - \frac{1}{R}\frac{\partial}{\partial r}\begin{bmatrix} a_{11_k} & a_{12_k} \\ a_{21_k} & a_{22_k}\end{bmatrix}\begin{bmatrix} q_{1_{k,m}}(t,r,z) \\ q_{2_{k,m}}(t,r,z)\end{bmatrix}\Bigg|_{r=R} + \begin{bmatrix} f_{1_{m-1}} \\ f_{2_{m-1}}\end{bmatrix} \quad (14)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\begin{bmatrix} q_{1_{k,m}}(t,r,z) \\ q_{2_{k,m}}(t,r,z)\end{bmatrix} = \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)\begin{bmatrix} D_{\mathrm{int}ra11_k} & D_{\mathrm{int}ra12_k} \\ D_{\mathrm{int}ra21_k} & D_{\mathrm{int}ra22_k}\end{bmatrix}\begin{bmatrix} q_{1_{k,m}} \\ q_{2_{k,m}}\end{bmatrix} + \begin{bmatrix} g_{1_{m-1}} \\ g_{2_{m-1}}\end{bmatrix} \quad (15)$$

з нульовими початковими і крайовими умовами та інтерфейсними умовами по змінній z типу (11)-(12) і крайовими умовами по радіальній змінній r

$$\left[\frac{\partial}{\partial r}\left(D_{\mathrm{intra}_{s1_k}} q_{1_{k,m}}\right) + \frac{\partial}{\partial r}\left(D_{\mathrm{intra}_{s2_k}} q_{2_{k,m}}\right)\right]_{r=0} = 0,\ q_{s_{k,m}}(t,r,z)\Big|_{r=R} = k_{s_k}\cdot U_{s_{k,m}}(t,z);\, i,s=\overline{1,2}. \quad (16)$$

Тут

$$f_{j_{k,n-1}}(t,z) = \sum_{s=0}^{n-1}\left(D_{j1_k} Y_{1_{k,s}} \frac{\partial}{\partial z} U_{1_{k,m-1-s}} + D_{j2_k} Y_{2_{k,s}}(t,z)\frac{\partial}{\partial z} U_{2_{k,m-1-s}}\right)(t,z);$$

$$g_{j_{k,m-1}}(t,r,z) = \sum_{m=1}^{2}\sum_{s=0}^{n-1} D_{\mathrm{int}ra_{m1_k}}\left(A_{m_{k,s}}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right)q_{m_{k,n-1-s}} + B_{m_{k,s}}\frac{\partial}{\partial r} q_{m_{k,n-1-s}}\right)(t,r,z);$$

$$A_{j_{k,s}}(t,r,z) = \sum_{i=0}^{s} U_{j_{k,i}}(t,z) q_{j_{k,s-i}}(t,r,z);\ B_{j_{k,s}}(t,r,z) = \sum_{i=0}^{s}\left(\frac{\partial}{\partial z} U_{j_{k,i}} q_{j_{k,s-i}} + U_{j_i}\frac{\partial}{\partial z} q_{j_{k,s-i}}\right)(t,r,z)$$

Задача A_0 є лінійною відносно нульового наближення a_0, задача A_m; $m=\overline{1,\infty}$ є лінійною відносно *n*-го наближення a_1 і нелінійною відносно усіх попередніх *m-1* наближень. Рівняння (8), (9), (14), (15) одержані шляхом лінеаризації системи нелінійних диференціальних рівнянь компетитивної дифузії (1), (2) з допомогою асимптотичних сум (7), ґрупуючи доданки у рівняннях та умовах вихідної нелінійної крайової задачі при однакових степенях параметра ε.

4. Побудова розв'язку лінеаризованої системи

Внутрічастинковий массоперенос. Застосувавши інтегральне перетворення Лапласа для $q^*_{i_k}(p,r,z) \equiv L\left[q_{i_k}\right] = \int_0^\infty q_{i_k}(t,r,z)e^{-pt}dt, i=\overline{1,2}$ та здійснивши заміну $q^*_{i_k} = R\cdot r^{-1}\cdot Q^*_{i_k}$, отримаємо рівняння для внутрічастинкового переносу **[**10**]:**

$$\begin{bmatrix} D_{\mathrm{int}ra11_k}\dfrac{d^2}{dr^2} - p & D_{\mathrm{int}ra12_k} \\ D_{\mathrm{int}ra21_k} & D_{\mathrm{int}ra22_k}\dfrac{d^2}{dr^2} - p\end{bmatrix}\begin{bmatrix} Q^*_{1_k} \\ Q^*_{2_k}\end{bmatrix} = 0 \quad (17)$$

з умовами

$$D_{\mathrm{int}ras1_k}\left[\frac{1}{r^2}\left(r\frac{d}{dr}Q^*_{1k} - Q^*_{1k}\right)\right]_{r=0} - D_{\mathrm{int}ras2_k}\left[\frac{1}{r^2}\left(r\frac{d}{dr}Q^*_{2k} - Q^*_{2k}\right)\right]_{r=0} = 0,\ Q^*_{sk}(p,r,z)\Big|_{z=1} = k_s\cdot U^*_s(p,z) \quad (18)$$

Фундаментальну систему розв'язків для рівнянь (17) утворюють функції $\mathrm{ch}\,\omega_{1_k}\sqrt{pr}$, $\mathrm{sh}\,\omega_{1_k}\sqrt{pr}$, $\mathrm{ch}\,\omega_{2_k}\sqrt{pr}$, $\mathrm{sh}\,\omega_{2_k}\sqrt{pr}$, де

$$\beta_{1,2_k}=\sqrt{\frac{\left(D_{\text{int}ra11_k}+D_{\text{int}ra22_k}\right)\pm\sqrt{\left(D_{\text{int}ra11_k}-D_{\text{int}ra22_k}\right)^2+4D_{\text{int}ra12_k}D_{\text{int}ra21_k}}}{2d_{1_k}}}\sqrt{p}\equiv\omega_{1,2_k}\sqrt{p}$$

- корені характеристичного многочлена матриці системи (19)

$$\left(D_{\text{int}ra11_k}D_{\text{int}ra22_k}-D_{\text{int}ra12_k}D_{\text{int}ra21_k}\right)\beta^4-\left(D_{\text{int}ra11_k}+D_{\text{int}ra22_k}\right)p\beta^2+p^2=0. \quad (19)$$

Тут $\quad d_{1_k}\equiv D_{\text{int}ra11_k}D_{\text{int}ra22_k}-D_{\text{int}ra12_k}D_{\text{int}ra21_k}>0$.

Безпосередньо встановлюється, що єдиний розв'язок системи (17) з урахуванням крайових умов (18) має вигляд:

$$Q_k^*(p,r,z)=\left[\frac{E_{11_k}^{\text{int}ra}E_{22}^{\text{int}ra}}{\Delta_k^{\text{int}ra}}\frac{\text{sh}\omega_{1_k}\sqrt{pr}}{\text{sh}\omega_{1_k}\sqrt{pR}}-\frac{E_{12_k}^{\text{int}ra}E_{21}^{\text{int}ra}}{\Delta_k^{\text{int}ra}}\frac{\text{sh}\omega_{2_k}\sqrt{pr}}{\text{sh}\omega_{2_k}\sqrt{pR}}\right]k_{1_k}U_{1_k}^*-\frac{E_{11_k}^{\text{int}ra}E_{22}^{\text{int}ra}}{\Delta_k^{\text{int}ra}}\left[\frac{\text{sh}\omega_{1_k}\sqrt{pr}}{\text{sh}\omega_{1_k}\sqrt{pR}}-\frac{\text{sh}\omega_{2_k}\sqrt{pr}}{\text{sh}\omega_{2_k}\sqrt{pR}}\right]k_{2_k}U_{2_k}^*,$$

$$Q_k^*(p,r,z)=\frac{E_{21_k}^{\text{int}ra}E_{22}^{\text{int}ra}}{\Delta_k^{\text{int}ra}}\left[\frac{\text{sh}\omega_{1_k}\sqrt{pr}}{\text{sh}\omega_{1_k}\sqrt{pR}}-\frac{\text{sh}\omega_{2_k}\sqrt{pr}}{\text{sh}\omega_{2_k}\sqrt{pR}}\right]k_{1_k}U_{1_k}^*-\left[\frac{E_{12_k}^{\text{int}ra}E_{21}^{\text{int}ra}}{\Delta_k^{\text{int}ra}}\frac{\text{sh}\omega_{1_k}\sqrt{pr}}{\text{sh}\omega_{1_k}\sqrt{pR}}-\frac{E_{11_k}^{\text{int}ra}E_{22}^{\text{int}ra}}{\Delta_k^{\text{int}ra}}\frac{\text{sh}\omega_{2_k}\sqrt{pr}}{\text{sh}\omega_{2_k}\sqrt{pR}}\right]k_{2_k}U_{2_k}^*. \quad (20)$$

Тут: $E_{ij_k}^{\text{int}ra}=\left(D_{\text{int}ra2s_k}-D_{\text{int}ra1s_k}\right)\omega_{j_k}^2-1,\ i=\begin{cases}1 & ,s=2\\ 2 & ,s=1\end{cases},j=\overline{1,2}$

$$\Delta_k^{\text{int}ra}=\frac{\left(D_{\text{int}ra11_k}-D_{\text{int}ra22_k}\right)+\left(D_{\text{int}ra12_k}-D_{\text{int}ra21_k}\right)}{D_{\text{int}ra11_k}D_{\text{int}ra22_k}-D_{\text{int}ra12_k}D_{\text{int}ra21_k}}\sqrt{\left(D_{\text{int}ra11_k}-D_{\text{int}ra22_k}\right)^2+4D_{\text{int}ra12_k}D_{\text{int}ra21_k}}\neq 0.$$

В припущенні, що функції $U_{j_k}(t,z)$ відомі, за узагальненою теоремою про розвинення Гевісайда знаходимо оригінали функцій $q_{j_k}=\frac{R}{r}Q_{j_k},\ j=\overline{1,2}$ [10, 11]:

$$q_{1_k}(t,r,z)=\int_0^t\left(\begin{array}{l}\left[\frac{E_{11_k}^{\text{int}ra}E_{22}^{\text{int}ra}}{\Delta_k^{\text{int}ra}}\Phi_{1k}(t-\tau,r)-\frac{E_{12_k}^{\text{int}ra}E_{21}^{\text{int}ra}}{\Delta_k^{\text{int}ra}}\Phi_{2k}(t-\tau,r)\right]k_{1_k}U_{1_k}(\tau,z)-\\ -\frac{E_{11_k}^{\text{int}ra}E_{22}^{\text{int}ra}}{\Delta_k^{\text{int}ra}}\left[\Phi_{1k}(t-\tau,r)-\Phi_{2k}(t-\tau,r)\right]k_{2_k}U_{2_k}(\tau,z)\end{array}\right)d\tau\frac{R}{r},$$

$$q_{2_k}(t,r,z)=\int_0^t\left(\begin{array}{l}\frac{E_{12_k}^{\text{int}ra}E_{22}^{\text{int}ra}}{\Delta_k^{\text{int}ra}}\left[\Phi_{1k}(t-\tau,r)-\Phi_{2k}(t-\tau,r)\right]k_{1_k}U_{1_k}(\tau,z)-\\ -\left[\frac{E_{12_k}^{\text{int}ra}E_{21}^{\text{int}ra}}{\Delta_k^{\text{int}ra}}\Phi_{1k}(t-\tau,r)-\frac{E_{11_k}^{\text{int}ra}E_{22}^{\text{int}ra}}{\Delta_k^{\text{int}ra}}\Phi_{2k}(t-\tau,r)\right]k_{2_k}U_{2_k}(\tau,z)\end{array}\right)d\tau\frac{R}{r}. \quad (21)$$

Тут $\Phi_{j_k}(t,z)\equiv L^{-1}\left[\frac{\text{sh}\,\omega_{j_k}\sqrt{pr}}{\text{sh}\,\omega_{j_k}\sqrt{pR}}\right]=\frac{2\pi}{\omega_{j_k}^2R^2}\sum_{n=1}^{\infty}(-1)^n\cdot n\cdot e^{-\frac{\pi^2n^2}{\omega_{j_k}^2R^2}t}\sin\left(\pi n\frac{r}{R}\right),\ i=\overline{1,2}$.

При відомих функціях $U_{j_k}(t,z)$ функції $q_{j_k}(t,r,z)$ стають відомими.

Масоперенос в міжчастинковому просторі . У зображені за Лапласом для функцій $U_{j_k}^*(p,z)\equiv L\left[U_{j_k}\right]=\int_0^\infty U_{j_k}(t,z)e^{-pt}dt;\ j=\overline{1,2}$ одержуємо задачу про конструкцію обмеженого на сеґменті [0, l] розв'язку системи рівнянь [10]

$$\begin{bmatrix} D_{11_k}\dfrac{d^2}{dz^2}-\left(p+h^*_{11_k}(p)\right) & D_{12_k}\dfrac{d^2}{dz^2}-h^*_{12_k}(p) \\ D_{21_k}\dfrac{d^2}{dz^2}-h^*_{21_k}(p) & D_{22_k}\dfrac{d^2}{dz^2}-\left(p+h^*_{22_k}(p)\right)\end{bmatrix}\begin{bmatrix}U^*_{1_k}(p,z)\\ U^*_{2_k}(p,z)\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\0\end{bmatrix} \tag{22}$$

з крайовими умовами:

$$\frac{\partial}{\partial z}\left[D_{s1_1}U^*_{1_1}(p,z)+D_{s2_1}U^*_{2_1}(p,z)\right]_{z=0}=0; \qquad U^*_{s_{n+1}}(p,z)\Big|_{z=l}=U^*_{l_s}(p); \tag{23}$$

та системою n- інтерфейсних умов:

$$\left[U^*_{s_k}(p,z)-U^*_{s_{k+1}}(p,z)\right]_{z=l_k}=0,\ \ \frac{\partial}{\partial z}\left(D_{\mathrm{k}}\begin{bmatrix}U^*_{1_k}\\U^*_{2_k}\end{bmatrix}-D_{\mathrm{k+1}}\begin{bmatrix}U^*_{1_{k+1}}\\U^*_{2_{k+1}}\end{bmatrix}\right)\Bigg|_{z=l_k}=0,\ k=\overline{1,n};\ s=\overline{1,2}; \tag{24}$$

Загальним розв’язком рівняння (22) є

$$U^*_{s_k}(p,z)=A_{s_k}(p)\left(C_{1_k}\operatorname{ch}\lambda^*_{1_k}z+C_{2_k}\operatorname{sh}\lambda^*_{1_k}z+C_{3_k}\operatorname{ch}\lambda^*_{3_k}z+C_{4_k}\operatorname{sh}\lambda^*_{4_k}z\right). \tag{25}$$

Тут $A_{1_k}(p)=\left(D_{22_k}-D_{12}\right)\lambda^{*2}_{1_k}-\left(p+h^*_{22_k}-h^*_{12_k}\right)$; $A_{2_k}(p)=\left(D_{11_k}-D_{21_k}\right)\lambda^{*2}_{1_k}-\left(p+h^*_{11_k}(p)-h^*_{21_k}(p)\right)$.

$\lambda_{1_k},\lambda_{2_k},\lambda_{3_k},\lambda_{4_k}$ - корені характеристичного рівняння $d_{1_k}\lambda^4-\left(d_{2_k}p+h^*_{1_k}(p)\right)\lambda^2+h^*_{2_k}(p)=0$,

$$\lambda^*_{1_k}(p)=\left[\frac{1}{2d_{1_k}}\left(d_{2_k}p+h^*_{1_k}(p)+\sqrt{\left(d_{2_k}p+h^*_{1_k}(p)\right)^2-4d_{1_k}h^*_{2_k}(p)}\right)\right]^{\frac{1}{2}};\ \lambda^*_{2_k}(p)=-\lambda^*_{1_k}(p);$$

$$\lambda^*_{3_k}(p)=\left[\frac{1}{2d_{1_k}}\left(d_{2_k}p+h^*_{1_k}(p)-\sqrt{\left(d_{2_k}p+h^*_{1_k}(p)\right)^2-4d_{1_k}h^*_{2_k}(p)}\right)\right]^{\frac{1}{2}};\ \lambda^*_{4_k}(p)=-\lambda^*_{3_k}(p).$$

$$h^*_{1_k}(p)=D_{11_k}h^*_{22_k}(p)+D_{22_k}h^*_{11_k}(p)-D_{12_k}h^*_{21_k}(p)-D_{21_k}h^*_{12_k}(p),$$

$$h^*_{2_k}(p)=p^2+\left(h^*_{11_k}(p)+h^*_{22_k}(p)\right)p+h^*_{11_k}(p)h^*_{22_k}(p)-h^*_{12_k}(p)h^*_{21_k}(p),$$

$$d_{1_k}=D_{11_k}D_{22_k}-D_{12_k}D_{21_k}>0,\ d_{2_k}=D_{11_k}+D_{22_k}.$$

Крайові та інтерфейсні умови (23), (24) дають систему рівнянь $(4n+2)$-го порядку для визначення невідомих констант $C_{2_1},C_{4_1},C_{1_k},C_{2_k},C_{3_k},C_{4_k},k=\overline{1,n+1}$ в (25),

$$\left.\begin{array}{c}
v_{s_{11}}^{3,0}\left(p,\lambda_{1_1}\right)C_{2_1}+v_{s_{11}}^{4,0}\left(p,\lambda_{3_1}\right)C_{4_1}=0\\
\ldots\\
\sum_{i=1}^{4}v_{s_{1m}}^{i,k}\left(p,\lambda_{j_k}\right)C_{i_k}-\sum_{i=1}^{4}v_{s_{1m}}^{i,k+1}\left(p,\lambda_{j_{k+1}}\right)C_{i_{k+1}}=0\\
\sum_{i=1}^{4}v_{s_{2m}}^{i,k}\left(p,\lambda_{j_k}\right)C_{i_k}-\sum_{i=1}^{4}v_{s_{2m}}^{i,k+1}\left(p,\lambda_{j_{k+1}}\right)C_{i_{k+1}}=0\\
\ldots\\
\sum_{i=1}^{4}v_{s_{22}}^{i,n+1}\left(p,\lambda_{j_{n+1}}\right)C_{i_{n+1}}=U_{l_s}^{*}(p),\ s,j=\overline{1,2},\ m=\begin{cases}1 & ;i=1,3\\ 2 & ;i=2,4\end{cases}
\end{array}\right\}\tag{26}$$

Тут - $v_{s_{11}}^{j,0}\left(p,\lambda_{j_1}\right)=\left(D_{s1_s}A_{1_1}(p)+D_{s1_s}A_{1_1}(p)\right)\lambda_{j_1},\ i=\begin{cases}2 & ;j=1\\ 4 & ;j=3\end{cases}$,

$v_{s_{11}}^{i,k}\left(p,\lambda_{j_k}\right)=A_{s_k}(p)ch\lambda_{j_k}l_k,\ v_{s_{12}}^{i,k}\left(p,\lambda_{j_k}\right)=A_{s_k}(p)ch\lambda_{j_k}l_k,i=\begin{cases}1,2 & ;j=1\\ 3,4 & ;j=3\end{cases}$

$v_{s_{21}}^{i,0}\left(p,\lambda_{j_k}\right)=\left(D_{s1_k}A_{1_k}(p)+D_{s1_k}A_{1_k}(p)\right)\lambda_{j_k}sh\lambda_{j_k}l_k,$

$v_{s_{22}}^{i,0}\left(p,\lambda_{j_k}\right)=\left(D_{s1_k}A_{1_k}(p)+D_{s1_k}A_{1_k}(p)\right)\lambda_{j_k}ch\lambda_{j_k}l_k,\ i=\begin{cases}1,2 & ;j=1\\ 3,4 & ;j=3\end{cases}$

$v_{s_{21}}^{i,n+1}\left(p,\lambda_{jn+1}\right)=A_{s_{n+1}}(p)ch\lambda_{j_k}l_k,\ v_{s_{22}}^{i,n+1}\left(p,\lambda_{jn+1}\right)=A_{s_{n+1}}(p)sh\lambda_{j_k}l_k,i=\begin{cases}1,2 & ;j=1\\ 3,4 & ;j=3\end{cases}.$

В припущенні виконання умов однозначної розв'язності алгебраїчної системи (26) - визначник системи $\Delta_{n+1}\left(p\right)\neq 0$, шляхом безпосереднього розв'язання (26) та використовуючи підхід щодо визначення елементів матриці впливу Коші, отримаємо аналітичні вирази для обчислення компонентів $U_{s_k}^{*}(p,z)$ вектор-функції $U_s^{*}(p,z)$ - розв'язку крайової задачі (22) – (24) [6, 9]:

$$\begin{bmatrix}U_{1_k}^{*}\left(p,z\right)\\ U_{2_k}^{*}\left(p,z\right)\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\mathrm{H}_{11_k}^{*}(p,z) & \mathrm{H}_{12_k}^{*}(p,z)\\ \mathrm{H}_{21_k}^{*}(p,z) & \mathrm{H}_{22_k}^{*}(p,z)\end{bmatrix}\cdot\begin{bmatrix}U_{l_1}^{*}\left(p\right)\\ U_{l_2}^{*}\left(p\right)\end{bmatrix},k=\overline{1,n+1}.\tag{27}$$

Тут елементи матриць впливу $\left[\mathrm{H}_{ij_k}^{*}(p,z)\right]$, обчислюються за методикою описаної нами в праці [9]. Також, згідно методики описаної в [8, 9], виконуємо перехід до оригіналів за Лапласом, заміною інтеґралу по контуру Бромвіча інтеґралом по уявній вісі:

$$\begin{aligned}\mathrm{H}_{ij_k}(t,z)&=L^{-1}\left[\mathrm{H}_{ij_k}^{*}(p,z)\right]=\frac{1}{2\pi i}\int_{\sigma-i\infty}^{\sigma+i\infty}\mathrm{H}_{ij_k}^{*}(p,z)e^{pt}dp=\frac{1}{2\pi i}\int_{-i\infty}^{i\infty}\mathrm{H}_{ij_k}^{*}(p,z)e^{pt}dp=\\&=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{H}_{ij_k}^{*}(is,z)e^{ist}ds=\frac{1}{\pi}\int_{0}^{\infty}\mathrm{Re}\left[\mathrm{H}_{ij_k}^{*}(is,z)e^{ist}\right]ds,\ i,j=\overline{1,2};k=\overline{1,n+1}\end{aligned}\tag{28}$$

Теорема 1 (*про існування і обчислення оригіналів елементів матриці впливу*). При обмеженнях на коефіцієнти матриці $D=\left[D_{ij}\right]$, $D_{\mathrm{int}ra}=[D_{\mathrm{int}ra,ij}]$ $i,j=\overline{1,2}$ (є постійними величинами, які не перетворюються в нуль), то елементи матриці впливу при $p \to \infty$ прямують до нуля і існують оригінали за Лапласом елементів матриці впливу (28).

У результаті з врахуванням одержаних головних розв'язків задачі (22)-(24) та формул (27), отримуємо єдиний розв'язок що описує масоперенос у міжчастинковому просторі:

$$\begin{bmatrix} U_{1_k}(t,z) \\ U_{2_k}(t,z) \end{bmatrix} = \int_0^t \begin{bmatrix} H_{j11_k}(t-\tau,z) & H_{j12_k}(t-\tau,z) \\ H_{j21_k}(t-\tau,z) & H_{j22_k}(t-\tau,z) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} U_{l_1}(\tau) \\ U_{l_2}(\tau) \end{bmatrix} d\tau \qquad (28)$$

Викладене вище дає підстави сформулювати наступну теорему.

Теорема 2 (*про розв'язність)*. Якщо виконується умова однозначної розв'язності лінеаризованої змішаної крайової задачі, задані і шукані функції є оригіналами за Лапласом, то розв'язок змішаної крайової задачі (8)–(13) існує і єдиний та визначається формулами (21) і (28).

5. Висновки

Використовуючи методи операційного числення Гевісайда та матриць впливу Коші побудовано аналітичний розв'язок математичної моделі системи компетитивного дифузійного переносу для неоднорідного нанопористого середовища пористих частинок, з врахуванням процесів масопереносу як на макро- так і на мікрорівнях. Отримані інтегральні зображення зображення головних розв'язків задачі – матриці функції впливу є методологічною основою для подальшого формулювання та розв'язання зворотніх задач ідентифікації параметрів внутрішньої кінетики D_{inter}, D_{intra} (задачі коефіцієнтної ідентифікації).

ЛИТЕРАТУРА

1. Kärger J. Diffusion and Adsorption in Porous Solids //Handbouk of Porous Solids // Kärger J. Ruthven D. Ed. by . F. Shuth, K.W. Sing and J.Weitkamp. Wiely-VCH Wenheim (Germeny). – 2002. – P. 2089-2173.
2. Kärger, J. Diffusion fundamentals / Kärger, J., Grinberg F., Heitjans P. – Leipziger Unviersite, Leipzig, 2005. – 615p.
3. Mehrer H. Diffusion in Solids / Mehrer H. – Springer, 2007. – 650p.
4. Springuel-Huet M.-A. 129Xe NMR study of bed resistance to molecular transport in assemblages of zeolite crystallites / Springuel-Huet M.-A., Nosov A., Kärger J., Fraissard J. // J. Phys. Chem. – 1996. – v.100. – P. 7200-7203.
5. Petryk M. Mathematical Modeling of Nonlinear Competitive Two-Component Diffusion in Media of Nanoporous Particles / Petryk M., Fraissard J. // Journal of Automation and Information Sciences, Begell House USA. – 2009. – Vol. 41, Issue 3. – p.37-55.
6. Боголюбов Н.Н. Асимптотические методы в теории нелинейных колебаний / Боголюбов Н.Н. Митропольский Ю.А. — М.: Физматгиз. — 1958. — 408 с.
7. Ленюк М.П. Інтегральні перетворення Фур'є, Бесселя із спектральним параметром в задачах математичного моделювання масопереносу в

неоднорідних середовищах / Ленюк М.П., Петрик М.Р. — К: Наук. думка, – 2000. — 372с.

8. Петрик М. Математическое моделирование массопереноса в симетрических неоднородных и нанопористых средах с системой n-интерфейсных взаимодействий // Кибернетика и системный анализ. − 2007.− № 1.− С. 114-134.
9. Петрик М.Р., Ленюк М.П, Математичне моделювання дифузійного масопереносу зі спектральним параметром для *n*−інтерфейсних неоднорідних і нанопористих обмежених середовищ // Волинський математичний вісник. Серія прикладна математика .− 2004. – Вип.2. − С. 59−84.
10. Лаврентьєв М.А., Шабат Б.В. Методы теории функций комплексной переменной.- М. Наука, 1973.-736.
11. Лыков А.В. Теория теплопроводности. – М.: Высшая школа, 1967.
12. Freund Y, Schapire R.E. A decision-theoretic generalization of on-line learning and an application to boosting //Journal of Computer and System Sciences. – 1997. 55(1). - 119--139.
13. Биштави Тарек Юсеф Бади, Жолткевич Г.Н., Соляник Ю.В. Многокритериальное обучение предиктора в задаче прогнозирования телетрафика // Системи обробки інформації.– 2010. т. 2, №83. – 163-165.12.

Надійшла у першій редакції 12.05.2010, в останній - 27.10.2010.