

©2016 р. М.Р. Петрик, Ж. Фресар, О.Ю. Петрик,
Д.М. Михалик

Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя

ОБЕРНЕНІ КОЕФІЦІЄНТНІ ЗАДАЧІ КОМПЕТИТИВНОЇ ДИФУЗІЇ В НЕОДНОРІДНИХ СЕРЕДОВИЩАХ НАНОПОРИСТИХ ЧАСТИНОК З ВИКОРИСТАННЯМ ГРАДІЄНТНИХ МЕТОДІВ

Розглядається обернена коефіцієнтна задача для компетитивної дифузії в неоднорідних середовищах нанопористих частинок. Здійснено постановку та обґрунтування прямої та спряженої крайових задач та побудовано їх розв'язки операційним методом Гевісайда. Отримано явні вирази градієнтів функціоналів-нев'язок для ідентифікації параметрів нанопористих середовищ, при допомозі яких відновлено розподіли коефіцієнтів дифузії для intercrystallites та intracrystallites просторів як функцій від часу для різних положень частинок в середовищі. Змодельовано розподіли концентрацій двох дифундованих компонентів в досліджуваному наносередовищі

Inverse problem for coefficients finding of competitive diffusion in heterogeneous media of nanoporous particles has been considered. Formulation and justification of direct and conjugate boundary problems has been provided. The solutions of boundary problems has been build taking advantage of Heaviside's methods. Explicit expressions for gradients functional residuals has been obtained to identify the parameters of nanoporous media in form of diffusion coefficients for intercrystallites and intracrystallites spaces as functions of time for different modes of particles along the catalyst layer. Distributions of concentrations for two defunded components in studied sample of nanoporous media has been visualized.

Вступ

Застосування математичного моделювання до дослідження процесів масопереносу в нанопористих середовищах полягає не тільки в складності побудови адекватних математичних моделей, а й в заданні їх параметрів [1-10]. Раніше в працях [11, 19-21] розглядалися питання ідентифікації параметрів задач масопереносу в нанопористих середовищах при відомих розподілах мас речовини в твердій і газоподібній фазах. В силу складності експериментального поділу цих характеристик, доцільно використовувати ефективні обчислювальні алгоритми ідентифікації параметрів при відомих сумарних масах для певних напрямків зондування досліджуваних середовищ, з використанням високошвидкісних аналітичних методів з урахуванням комплексу найсуттєвіших чинників. У цій праці розглядаються питання створення високопродуктивних ме-

тодів ідентифікації шляхом побудови мало-витратних аналітичних розв'язків прямих і спряжених задач і отримання на їх основі явних виразів градієнтів функціоналів-нев'язки для ідентифікації параметрів переносу в нанопористих середовищах при відомих сумарних розподілах маси в твердій і газоподібній фазах адсорбованих речовин.

Математична модель системи компетитивного переносу в неоднорідному середовищі

Розглядається складний компетитивний масоперенос двох компонент, що дифундують між собою в неоднорідному середовищі сферичних частинок мікро- та нанопористої структури. Дифузія розглядається при цьому як на макрорівні (в міжчастинковому просторі, interparticle space), так і на мікрорівні (в просторі мікро- та нанопорів сферичних частинок, intraparticle space).

Математична модель такого переносу з
 урахуванням вказаних фізичних чинників
 описана у вигляді змішаної крайової задачі.
 В областях $\Omega_{kT} = (0, T) \times \Omega_k, \Omega_k =$
 $l_{k-1}, l_k, k = \overline{1, n+1}, l_0 = 0 < l_1 < \dots < l_{n+1} =$
 $l < \infty$ концентрації $U_{1_k}(t, z), U_{2_k}(t, z)$, з ура-
 хуванням [3, 6, 7] задовольняють системі
 рівнянь в частинних похідних

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} U_{1_k}(t, z) \\ U_{2_k}(t, z) \end{bmatrix} = \\ \frac{\partial}{\partial z} \begin{bmatrix} D_{inter11_k} & D_{inter12_k} \\ D_{inter21_k} & D_{inter22_k} \end{bmatrix} \frac{\partial}{\partial z} \begin{bmatrix} U_{1_k} \\ U_{2_k} \end{bmatrix} - \\ \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial r} \begin{bmatrix} D_{intra11_k} & D_{intra12_k} \\ D_{intra21_k} & D_{intra22_k} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q_{1_k}(t, r, z) \\ q_{2_k}(t, r, z) \end{bmatrix} \Big|_{r=R} \end{aligned} \quad (1)$$

де $R \ll \min_k (l_k - l_{k-1}), R$ - радіус сфе-
 ричних мікропористих частинок відповід-
 ної області Ω_k . Для кожної пористої мі-
 крочастинки радіусу R з центром в то-
 чці $z \in \Omega_k$ при $t \in (0, T)$ концентрації
 $q_{1_r}(t, r, z), q_{2_r}(t, r, z)$ дифундованої двоком-
 понентної суміші справедлива система рів-
 нянь дифузії

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} q_{1_k}(t, r, z) \\ q_{2_k}(t, r, z) \end{bmatrix} = \\ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(\begin{bmatrix} D_{intra11_k} & D_{intra12_k} \\ D_{intra21_k} & D_{intra22_k} \end{bmatrix} r^2 \frac{\partial}{\partial r} \begin{bmatrix} q_{1_k} \\ q_{2_k} \end{bmatrix} \right) \end{aligned} \quad (2)$$

Початкові умови

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} U_{1_k}(t, z) \\ U_{2_k}(t, z) \end{bmatrix} \Big|_{t=0} = 0, \begin{bmatrix} q_{1_k}(t, r, z) \\ q_{2_k}(t, r, z) \end{bmatrix} \Big|_{t=0} = 0, \\ r \in (0, R), z \in \Omega_k, k = \overline{1, n+1}. \end{aligned} \quad (3)$$

Крайові умови по просторовій змінній r
 для $q = \begin{bmatrix} q_1 \\ q_2 \end{bmatrix}$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial r} \left(\begin{bmatrix} D_{intra11_k} & D_{intra12_k} \\ D_{intra21_k} & D_{intra22_k} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q_{1_k}(t, r, z) \\ q_{2_k}(t, r, z) \end{bmatrix} \right) \Big|_{r=0} = 0 \\ \begin{bmatrix} q_{1_m}(t, r, z) \\ q_{2_m}(t, r, z) \end{bmatrix} \Big|_{r=R} = \begin{bmatrix} k_1 & 0 \\ 0 & k_2 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} U_{1_m}(t, z) \\ U_{2_m}(t, z) \end{bmatrix}, \\ z \in \Omega_m, m = \overline{1, n+1}, t \in (0, T) \end{aligned}$$

де друга умова є умовою рівноваги.

Крайові та інтерфейсні умови між тонки-
 ми шарами мікропористих частинок, по ко-
 ординаті (z) для $U = \begin{bmatrix} U_1 \\ U_2 \end{bmatrix}$:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial z} \left(\begin{bmatrix} D_{inter11_1} & D_{inter12_1} \\ D_{inter21_1} & D_{inter22_1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_{1_1}(t, z) \\ U_{2_1}(t, z) \end{bmatrix} \right) \Big|_{z=0} = 0, \\ \begin{bmatrix} U_{1_{n+1}}(t, z) \\ U_{2_{n+1}}(t, z) \end{bmatrix} \Big|_{z=l} = \begin{bmatrix} U_{l_1}(t) \\ U_{l_2}(t) \end{bmatrix}, t \in (0, T), \end{aligned} \quad (5)$$

$$[U_{s_k}(t, z) - U_{s_{k+1}}(t, z)] \Big|_{z=l_k} = 0, s = 1, 2$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial z} \left(D_{inter k} \begin{bmatrix} U_{1_k}(t, z) \\ U_{2_k}(t, z) \end{bmatrix} \right) \Big|_{z=l_k} \\ - \frac{\partial}{\partial z} \left(D_{inter k+1} \begin{bmatrix} U_{1_{k+1}}(t, z) \\ U_{2_{k+1}}(t, z) \end{bmatrix} \right) \Big|_{z=l_k} = 0, \\ k = \overline{1, n+1}, t \in (0, T), \end{aligned} \quad (6)$$

$$\text{де } D_{inter k} = \begin{bmatrix} D_{inter11_k} & D_{inter12_k} \\ D_{inter21_k} & D_{inter22_k} \end{bmatrix}.$$

Система (1) описує зовнішній (відносно
 частинок) компетитивний масоперенос з по-
 точними концентраціями k -го шару U_{1_k}, U_{2_k}
 в interpartical space, лімітований системи
 впливу на поверхнях сферичних частинок
 радіуса R . Система (2) описує внутрішній
 масоперенос з поточними концентраціями в
 мікро- й нанопорах для k -го шару intraparti-
 cle space q_{1_k}, q_{2_k} . Зв'язок між концентрація-
 ми для k -го шару U_{1_k}, U_{2_k} та q_{1_k}, q_{2_k} визнача-
 ється крайовими умовами адсорбційної рів-
 новаги на поверхні сферичних частинок (4).

Тут D_k та $D_{intra k}$ - матриці коефіцієн-
 тів дифузії в просторах interpartical space та
 intraparticle space, що в загальному випад-
 ку є функціями від поточних концентрацій
 $U_{j_k}, q_{j_k}; j = \overline{1, 2}$.

Вважається, що коефіцієнти дифузії
 D_{inter}, D_{intra} задачі (1)-(6) є невідомими.
 Однак на поверхнях областей $\gamma_k \subset \Omega_k, k =$

$\overline{1, n+1}$, неоднорідного середовища відомі з крайовими умовами сліди розв'язків (концентрацій):

$$[U_{s_k}(t, z) + q_{s_k}(t, z)]_{\gamma_k} = M_{s_k}(t, z)|_{\gamma_k} \\ s = \overline{1, 2}, \gamma_{s_k} \in \Omega, \quad (7)$$

де $\bar{q}_{s_k}(t, R/2, z) = \frac{1}{R} \int_0^R q_{s_k}(t, r, z) r dr$ є усереднене значення концентрації s -ї дифундованої компоненти речовини в мікропорах частинки, зосередженої в точці $r = R/2$ для k -го шару мікропористих частинок, $k = \overline{1, n+1}$.

Таким чином, отримуємо задачу (1)-(7), що полягає в знаходженні функцій $D_{\text{intra}_{sp}, k} \in D, D_{\text{inter}_{sp}, k} \in D$, де $D = \left\{ \nu(t, z) : \nu|_{\Omega_{kT}} \in C(\Omega_{kT}), \nu > 0 \right\}$.

Функціонал-нев'язку [14,22], що визначає величину відхилення шуканого розв'язку від його слідів, отриманих емпіричним шляхом на поверхнях γ_k , запишемо у вигляді

$$J_s(D_{\text{inter}_{sp}}, D_{\text{intra}_{sp}}) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{n+1} \int_0^T \|U_{s_k}(\tau, z) + \bar{q}_{s_k}(t, z) - M_{s_k}(t, z)\|_{\gamma_k}^2 d\tau \\ \gamma_k \in \Omega_k, m = \overline{1, N} \quad (8)$$

де $\|\varphi\|_{L_2(\gamma_k)}^2 = \int_{\gamma_k} \varphi^2 d\gamma_k$ - квадрат норми. В даному випадку $\|\varphi\|_{L_2(\gamma_k)} = |\varphi(t, z)|_{z=\gamma_k}$.

Побудова розв'язку задачі (1)-(6)

Внутрішньочастинковий масоперенос.

В припущенні, що задані та шукані функції є оригіналами за Лапласом стосовно t , зображені за Лапласом [17] для $q_{i_k}^*(p, r, z) \equiv L[q_{i_k}] = \int_0^\infty q_{i_k}(t, r, z) e^{-pt} dt, i = \overline{1, 2}$, використовуючи заміну $q_{i_k}^* = R \cdot r^{-1} \cdot Q_{i_k}^*$ та зводячи задачу внутрішньочастинкового переносу до системи диференціальних рівнянь

$$\begin{bmatrix} D_{\text{int ra11}_k} \frac{d^2}{dr^2} - p & D_{\text{int ra12}_k} \\ D_{\text{int ra21}_k} & D_{\text{int ra22}_k} \frac{d^2}{dr^2} - p \end{bmatrix} \begin{bmatrix} Q_{1_k}^* \\ Q_{2_k}^* \end{bmatrix} = 0 \quad (9)$$

$$D_{\text{int ras1}_k} \left[\frac{1}{r^2} \left(r \frac{d}{dr} Q_{1_k}^* - Q_{1_k}^* \right) \right]_{r=0} - D_{\text{int ras2}_k} \left[\frac{1}{r^2} \left(r \frac{d}{dr} Q_{2_k}^* - Q_{2_k}^* \right) \right]_{r=0} = 0, \\ Q_{s_k}^*(p, r, z)|_{z=1} = k_k \cdot U_{s_k}^*(p, z) \quad (10)$$

Встановлюються умови параболічності системи за Петровським ($D_{\text{int ra11}_k} D_{\text{int ra22}_k} - D_{\text{int ra12}_k} D_{\text{int ra21}_k} > 0$) [15].

Обмежений розв'язок задачі (9)-(10) на $[0, R]$ отримуємо у вигляді:

$$Q_{1_k}^*(p, r, z) = \begin{bmatrix} \frac{E_{11_k}^{\text{int ra}} E_{22}^{\text{int ra}} \text{sh } \omega_{1_k} \sqrt{pr}}{\Delta_k^{\text{int ra}}} - \frac{\text{sh } \omega_{1_k} \sqrt{pR}}{\text{sh } \omega_{1_k} \sqrt{pR}} \\ \frac{E_{12_k}^{\text{int ra}} E_{21}^{\text{int ra}} \text{sh } \omega_{2_k} \sqrt{pr}}{\Delta_k^{\text{int ra}}} - \frac{\text{sh } \omega_{2_k} \sqrt{pR}}{\text{sh } \omega_{2_k} \sqrt{pR}} \end{bmatrix} k_{1_k} U_{1_k}^* - \frac{E_{11_k}^{\text{int ra}} E_{22}^{\text{int ra}}}{\Delta_k^{\text{int ra}}} \begin{bmatrix} \frac{\text{sh } \omega_{1_k} \sqrt{pr}}{\text{sh } \omega_{1_k} \sqrt{pR}} \\ -\frac{\text{sh } \omega_{2_k} \sqrt{pr}}{\text{sh } \omega_{2_k} \sqrt{pR}} \end{bmatrix} k_{2_k} U_{2_k}^*, \quad (11)$$

$$Q_{2_k}^*(p, r, z) = \frac{E_{21_k}^{\text{int ra}} E_{22}^{\text{int ra}}}{\Delta_k^{\text{int ra}}} \begin{bmatrix} \frac{\text{sh } \omega_{1_k} \sqrt{pr}}{\text{sh } \omega_{1_k} \sqrt{pR}} - \frac{\text{sh } \omega_{2_k} \sqrt{pr}}{\text{sh } \omega_{2_k} \sqrt{pR}} \end{bmatrix} k_{1_k} U_{1_k}^* - \begin{bmatrix} \frac{E_{12_k}^{\text{int ra}} E_{21}^{\text{int ra}} \text{sh } \omega_{1_k} \sqrt{pr}}{\Delta_k^{\text{int ra}}} - \frac{\text{sh } \omega_{1_k} \sqrt{pr}}{\text{sh } \omega_{1_k} \sqrt{pR}} \\ -\frac{E_{11_k}^{\text{int ra}} E_{22}^{\text{int ra}} \text{sh } \omega_{2_k} \sqrt{pr}}{\Delta_k^{\text{int ra}}} - \frac{\text{sh } \omega_{2_k} \sqrt{pr}}{\text{sh } \omega_{2_k} \sqrt{pR}} \end{bmatrix} k_{2_k} U_{2_k}^*, \quad (12)$$

З узагальненою теоремою про розвинення Гевісайда знаходимо оригінали розподілів $q_{j_k} = \frac{R}{r} Q_{j_k}, j = \overline{1, 2}$ [17, 18]

$$q_{1_k}(t, r, z) = \int_0^t \left[\frac{E_{11_k}^{\text{int ra}} E_{22}^{\text{int ra}}}{\Delta_k^{\text{int ra}}} \Phi_{1k}(t - \tau, r) - \frac{E_{12_k}^{\text{int ra}} E_{21}^{\text{int ra}}}{\Delta_k^{\text{int ra}}} \Phi_{2k}(t - \tau, r) \right] \times k_{1_k} U_{1_k}(\tau, z) d\tau \frac{R}{r} - \int_0^t \left[\frac{E_{11_k}^{\text{int ra}} E_{22}^{\text{int ra}}}{\Delta_k^{\text{int ra}}} \Phi_{1k}(t - \tau, r) - \frac{E_{12_k}^{\text{int ra}} E_{21}^{\text{int ra}}}{\Delta_k^{\text{int ra}}} \Phi_{2k}(t - \tau, r) \right] \times k_{2_k} U_{2_k}(\tau, z) d\tau \frac{R}{r} \quad (13)$$

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

Тут $\Phi_{jk}(t, z)$ - компоненти функцій впливу концентрацій міжчастинкового простору $U_{jk}(t, z)$ на внутрішньочастинковий перенос; $\beta_{1,2k}$ - корені характеристичного многочлена матриці системи:

$$(D_{int\ ra11k} D_{int\ ra22k} - D_{int\ ra12k} D_{int\ ra21k}) \beta^4 - (D_{int\ ra11k} + D_{int\ ra22k}) p \beta^2 + p^2 = 0 \quad (14)$$

При відомих залежностях $U_{jk}(t, z)$ розподіли концентрацій в intraparticle space $q_{jk}(t, r, z)$ стають відомими.

Масоперенос в міжчастинковому просторі. У зображенні за Лапласом для функцій $U_{jk}^*(p, z) \equiv L[U_{jk}] = \int_0^\infty U_{jk}(t, z) e^{-pt} dt$; $j = \overline{1, 2}$ одержуємо задачу про побудову обмеженого в області розв'язку системи рівнянь [17]

$$\begin{bmatrix} D_{11k} \frac{d^2}{dz^2} - (p + h_{11k}^*(p)) & D_{12k} \frac{d^2}{dz^2} - h_{12k}^*(p) \\ D_{21k} \frac{d^2}{dz^2} - h_{21k}^*(p) & D_{22k} \frac{d^2}{dz^2} - (p + h_{22k}^*(p)) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} U_{1k}^*(p, z) \\ U_{2k}^*(p, z) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad (15)$$

з крайовими умовами:

$$\frac{\partial}{\partial z} [D_{s1} U_{1s}^*(p, z) + D_{s2} U_{2s}^*(p, z)]_{z=0} = 0; \quad U_{s_{n+1}}^*(p, z)|_{z=l} = U_{l_s}^*(p); \quad (16)$$

та системою n - інтерфейсних умов

$$\begin{aligned} & [U_{s_k}^*(p, z) - U_{s_{k+1}}^*(p, z)]_{z=l_k} = 0 \\ & \frac{\partial}{\partial z} \left(D_k \begin{bmatrix} U_{1k}^* \\ U_{2k}^* \end{bmatrix} - D_{k+1} \begin{bmatrix} U_{1_{k+1}}^* \\ U_{2_{k+1}}^* \end{bmatrix} \right) \Big|_{z=l_k} = 0, \\ & k = \overline{1, n}; s = \overline{1, 2} \quad (17) \end{aligned}$$

Загальним розв'язком системи (15) є:

$$\begin{aligned} U_{s_1}^*(p, z) &= A_{s_1}(p) (C_{11} \operatorname{ch} \lambda_{1_1}^* z + C_{31} \operatorname{ch} \lambda_{3_1}^* z) \\ U_{s_k}^*(p, z) &= A_{s_k}(p) (C_{1k} \operatorname{ch} \lambda_{1_k}^* z + C_{2k} \operatorname{sh} \lambda_{1_k}^* z) \\ &\quad + A_{s_k}(p) (C_{3k} \operatorname{ch} \lambda_{3_k}^* z + C_{4k} \operatorname{sh} \lambda_{4_k}^* z), \quad (18) \end{aligned}$$

Тут

$$\begin{aligned} A_{1k}(p) &= (D_{22k} - D_{12}) \lambda_{1_k}^{*2} - (p + h_{22k}^* - h_{12k}^*) \\ A_{2k}(p) &= (D_{11k} - D_{21k}) \lambda_{1_k}^{*2} - (p + h_{11k}^*(p) - h_{21k}^*(p)) \\ \lambda_{1_k}, \lambda_{2_k}, \lambda_{3_k}, \lambda_{4_k} & \text{ - корені характеристичного рівняння:} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & (D_{11k} D_{22k} - D_{12k} D_{21k}) \lambda^4 \\ & - ((D_{11k} + D_{22k}) p + h_{1k}^*(p)) \lambda^2 + h_{2k}^*(p) = 0, \end{aligned}$$

Крайові та інтерфейсні умови (16), (17) дають систему рівнянь $4n + 2$ -го порядку для визначення невідомих констант $C_{11}, C_{31}, C_{1k}, C_{2k}, C_{3k}, C_{4k}, k = \overline{1, n+1}$ в (18).

Використовуючи підхід щодо визначення елементів матриці впливу Коші та методику праць [8, 18], вирази для обчислення компонентів вектор-функцій $U_{s_k}^*(p, z)$ зводяться до класичного вигляду

$$\begin{bmatrix} U_{1k}^*(p, z) \\ U_{2k}^*(p, z) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathcal{H}_{11k}^*(p, z) & \mathcal{H}_{12k}^*(p, z) \\ \mathcal{H}_{21k}^*(p, z) & \mathcal{H}_{22k}^*(p, z) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} U_{l_1}^*(p) \\ U_{l_2}^*(p) \end{bmatrix} \quad (19)$$

Тут компоненти матриць впливу $[\mathcal{H}_{ijk}^*(p, z)]$ - ієрархічної структури одержуються рекурентним способом шляхом обчислення визначників алгебраїчної системи, побудованої на основі умов (16)-(17). Згідно методики описаної в [18, 22], здійснюється перехід до оригіналів за Лапласом, заміною інтегралу по контуру Бромвіча інтегралом по уявній осі

$$\mathcal{H}_{ijk}(t, z) \equiv L^{-1} [\mathcal{H}_{ijk}^*(p, z)] = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \operatorname{Re} [\mathcal{H}_{ijk}^*(is, z) e^{ist}] ds, \quad i, j = \overline{1, 2}; k = \overline{1, n+1} \quad (20)$$

З врахуванням одержаних головних розв'язків задачі (15)-(17) та формул (20), отримуємо єдиний розв'язок що описує масоперенос у міжчастинковому просторі:

$$\begin{bmatrix} U_{1k}(t, z) \\ U_{2k}(t, z) \end{bmatrix} = \int_0^t \begin{bmatrix} \mathcal{H}_{11k}(t-\tau, z) & \mathcal{H}_{12k}(t-\tau, z) \\ \mathcal{H}_{21k}(t-\tau, z) & \mathcal{H}_{22k}(t-\tau, z) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} U_{1k}(\tau) \\ U_{2k}(\tau) \end{bmatrix} d\tau \quad (21)$$

Викладене вище дає підстави сформулювати наступну теорему.

Теорема (про розв'язність прямої крайової задачі): якщо виконується умова однозначної розв'язності неоднорідної змішаної крайової задачі, задані і шукані функції є оригіналами за Лапласом, то розв'язок змішаної крайової задачі (1)-(6) існує і єдиний та визначається формулами (13) і (21).

Пряма задача функціональної ідентифікації

З метою ідентифікації параметрів компетитивної дифузії (коефіцієнтів $D_{\text{intrasm}}, D_{\text{interasm}}$) як функцій від часу, використовуючи об'ємну базу експериментальних даних пошарового RNM-сканування [3,6], розглянемо трансформування задачі (1) - (6) у вигляді системи $N-1$ - крайових задач ідентифікації $D_{\text{intrasm}}, D_{\text{interasm}}$ в кожній точці Z для кожного фрагмента $\Omega_m, m = \overline{1, N+1}$ [3,9]:

$$\frac{\partial C_{sm}(t, Z)}{\partial t} = \frac{D_{\text{interasm}}}{l^2} \frac{\partial^2 s_m}{\partial Z^2} - e_{\text{inter}m} K_{sm} \frac{D_{\text{intrasm}}}{R^2} \left(\frac{1}{X} \frac{\partial N_{sm}}{\partial X} - \frac{1}{X^2} N_{sm} \right)_{X=1} \quad (22)$$

$$\frac{\partial N_{sm}(t, X, Z)}{\partial t} = \frac{D_{\text{intrasm}}}{R^2} \frac{\partial^2 N_{sm}}{\partial X^2} \quad (23)$$

з початковими умовами

$$\begin{aligned} C_{sm}(t=0, Z) &= 0, \\ N_{sm}(t=0, X, Z) &= 0, \\ X \in (0, 1), Z \in \Omega_m, m &= \overline{1, N+1}, \end{aligned} \quad (24)$$

крайовими умовами для кожного m -го шару

$$\begin{aligned} C_{sm}(t, Z=L_m) &= \theta_{sm}, \\ C_{s_{m-1}}(t, Z=L_{m-1}) &= \theta_{s_{m-1}}, \end{aligned} \quad (25)$$

$$\begin{aligned} C_{s_1}(t, L_1) &= \theta_{s_1}, \\ \frac{\partial C_{s_1}}{\partial Z}(t, Z=0) &= 0, \\ s &= \overline{1, 2}, m = \overline{N+1, 2}, \theta_{s_{N+1}} = 1. \end{aligned} \quad (26)$$

Крайові умови для окремої частинки

$$\begin{aligned} N_{sm}(t, X=0, Z) &= 0, \\ N_{sm}(t, X=1, Z) &= C_{sm}(t, Z), \\ Z \in \Omega_m, m &= \overline{1, N+1} \end{aligned} \quad (27)$$

де $\Delta = L_m - L_{m-1}, m = \overline{1, N+1}$, θ_m - експериментальний слід, $C_{sm}(t)$ на m -му сегменті, $\Delta\theta_m = \theta_m - \theta_{m-1}, m = \overline{1, N+1}$.

Єдиний розв'язк C_{sm} і N_{sm} прямої задачі побудований операційним методом Гевісайда на основі теореми про розклад в ряд зображень за Лапласом за коренями знаменника [17, 18].

$$\begin{aligned} C_{sm}(t, Z) &= 1 + \frac{2\pi}{\Delta L} \frac{R^2}{D_{\text{intrasm}}} \frac{D_{\text{interasm}}}{\Delta L^2} \times \\ &\sum_{n=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\omega_{sm}(n, Z) \exp\left(-\frac{D_{\text{intrasm}} \beta_{knm}^2 t}{R^2}\right)}{(-1)^n \beta_{knm}^2 \Theta(\beta_{knm})} \end{aligned} \quad (28)$$

$$\begin{aligned} N_{sm}(t, X, Z) &= \\ &1 + \frac{2\pi}{\Delta L} \frac{R^2}{D_{\text{intrasm}}} \frac{D_{\text{interasm}}}{\Delta L^2} \times \\ &\sum_{n=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\omega_{sm}(n, Z) \exp\left(-\frac{D_{\text{intrasm}} \beta_{knm}^2 t}{R^2}\right)}{(-1)^n \beta_{knm}^2 \sin(\beta_{knm}) \Theta(\beta_{knm})} \end{aligned}$$

(29) space $D_{intra_{sm}}$ і intercrystallite space $D_{inter_{sm}}$ як функції від часу для s-ї дифундованої компоненти, отримуємо регуляризаційні вирази $n + 1$ -го кроку ідентифікації [9,21]:

$$\Theta = \left(\frac{3}{e_{inter_m}} \left(\frac{1}{\sin^2(\beta_{kn_m})} - \frac{ctg(\beta_{kn_m})}{\beta_{kn_m}} \right) + 2 \right)$$

де $\beta_{kn_1}, \beta_{kn_m}, m = \overline{2, \infty}$ - корені відповідних трансцендентних рівнянь:

$$\gamma_{s1}^2(\beta) \equiv \frac{3}{e_{inter_1}} \frac{\Delta L^2}{R^2} \frac{D_{intra_{s1}}}{D_{inter_{s1}}} \left(\frac{e_{inter_1}}{3} \beta^2 - \beta ctg \beta + 1 \right) = \frac{2n-1}{2\Delta L} \pi,$$

$$\gamma_{sm}^2(\beta) \equiv \frac{3}{e_{inter_m}} \frac{\Delta L^2}{R^2} \frac{D_{intra_{sm}}}{D_{inter_{sm}}} \left(\frac{e_{inter_{sm}}}{3} \beta^2 - \beta ctg \beta + 1 \right) = \frac{n\pi}{\Delta L},$$

$$n, \overline{0, \infty}, k = \overline{1, \infty}, m = \overline{2, N+1}$$

$$\omega_{sm}(n, Z) =$$

$$\begin{cases} (2n-1) \cos\left(\frac{2n-1}{2}\pi Z\right) & m=1 \\ n \begin{pmatrix} \theta_{sm} \sin\left[\frac{n\pi}{\Delta L}(Z-L_{m-1})\right] \\ +\theta_{s_{m-1}} \sin\left[\frac{n\pi}{\Delta L}(L_m-Z)\right] \end{pmatrix} & m>1 \end{cases}$$

Градiєнтний метод розв'язування задач коефіцієнтної ідентифікації. Розв'язок задач ідентифікації (23)-(27) зводиться до задачі оптимізації функціоналу-нев'язки поступово удосконалюючи розв'язок шляхом спеціальної процедури регуляризації з використанням високоефективних градієнтних методів. Градієнтні методи в задачах ідентифікації на основі середньоквадратичного функціоналу-нев'язки знайшли своє практичне застосування в роботах Ж.-Л.Ліонса [20], пізніше цей підхід був розвинутий О.М.Аліфановим (розрахунок температурних полів літальних апаратів)[19], працях авторів (задачі гідромеханіки, фільтрації, дифузії і адсорбції та інш.) [3,10,12,13,22].

Використовуючи градієнтний метод мінімізації похибок для ідентифікації розподілів коефіцієнтів дифузії в intracrystallite

$$\begin{aligned} D_{intra_{sm}}^{n+1}(t) &= D_{intra_{sm}}^n - \nabla J_{D_{intra_{sm}}}^n(t) \times \\ &\quad \frac{\left[C_{sm} + \left(\frac{1}{X}\right)_{X=\frac{1}{2}} N_{sm} - M_{sm} \right]^2}{\left\| \nabla J_{D_{intra_{sm}}}^n(t) \right\|^2 + \left\| \nabla J_{D_{inter_{sm}}}^n(t) \right\|^2} \\ D_{inter_{sm}}^{n+1}(t) &= D_{inter_{sm}}^n - \nabla J_{D_{inter_{sm}}}^n(t) \times \\ &\quad \frac{\left[C_{sm} + \left(\frac{1}{X}\right)_{X=\frac{1}{2}} N_{sm} - M_{sm} \right]^2}{\left\| \nabla J_{D_{intra_{sm}}}^n(t) \right\|^2 + \left\| \nabla J_{D_{inter_{sm}}}^n(t) \right\|^2} \end{aligned} \quad (30)$$

де $J_s(D_{inter_{sm}}, D_{intra_{sm}})$ модифікований функціонал-нев'язки на поверхні $\gamma_s \in \Omega_m$:

$$J_s(D_{inter_{sm}}, D_{intra_{sm}}) = \frac{1}{2} \int_0^T [C_{sm} + \overline{Q}_{sm} - M_{sm}]^2 d\tau \quad (31)$$

$\nabla J_{D_{inter_{sm}}}^n(t), \nabla J_{D_{intra_{sm}}}^n(t)$ - компоненти градієнту функціоналу-нев'язки $J_s(D_{inter_{sm}}, D_{intra_{sm}})$ по функціях $D_{inter_{sm}}^n \in \Omega_T, D_{intra_{sm}}^n \in \Omega_T. \left\| \nabla J_{D_u}^n(t) \right\|^2 = \int_0^T \left[\nabla J_{D_{intra_{sm}}}^n(t) \right]^2 dt$ - квадрат норми градієнту функціоналу-нев'язки $\overline{Q}_{sm}(t, z) = \int_0^1 Q_{sm}(t, X, Z) dX$.

Побудова розширеного функціоналу. Перейдемо до безумовної екстремальної форми розглядуваної задачі ідентифікації, вводячи розширений функціонал [19,20]

$$\Phi(D_{inter_{sm}}, D_{intra_{sm}}) = J_s + I_{s1} + I_{s2}, \quad (32)$$

в якому I_{s1}, I_{s2} - складові, що враховують специфіку основних рівнянь балансу (22) і (23) відповідно для вихідної задачі ідентифікації (22)-(27):

$$I_{s1} = \int_0^T \int_{L_{m-1}}^{L_m} \phi_{sm}(t, Z) \times$$

$$\left(\begin{array}{c} \frac{\partial C_{sm}}{\partial t} - \frac{D_{inter_{sm}}}{l^2} \frac{\partial^2 C_{sm}}{\partial Z^2} + \\ e_{inter_{sm}} K_{sm} \frac{D_{intra_{sm}}}{R} \left(\frac{\partial Q_{sm}}{\partial X} \right)_{X=1} \end{array} \right) dZ dt \quad (33)$$

$$I_{s_2} = \int_0^T \int_0^1 \int_{L_{m-1}}^{L_m} \psi_{sm}(t, Z) \times \left(\begin{array}{c} \frac{\partial Q_{sm}}{\partial t} - \frac{D_{intra_{sm}}}{R^2} Q_{sm} \\ \left(\frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{2}{X} \frac{\partial}{\partial X} \right) \end{array} \right) X dX dZ dt \quad (34)$$

де J_s - функціонал-нев'язки, $\phi_{sm}, \psi_{sm}, s=\overline{1,2}$ - невідомі множники Лагранжа, що підлягають визначенню, з умови стаціонарності функціоналу $\Phi(D_{inter_{sm}}, D_{intra_{sm}})$:

$$\Delta \Phi(D_{inter_{sm}}, D_{intra_{sm}}) \equiv \Delta J_s + \Delta I_{s_1} + \Delta I_{s_2} = 0, \quad (35)$$

Постановка спряженої крайової задачі. У відповідності з вихідною початково-крайовою задачею для кожного наближення $D_{intra_{sm}}^n, D_{inter_{sm}}^n$ розв'язок $D_{intra_{sm}}, D_{inter_{sm}}$ отримуємо спряжену крайову задачу в операторній формі [9,22]:

$$\mathcal{L}^* \Psi_{sm}(t, X, Z) = E_{sm}(t) \delta(Z - \gamma_m), \quad \Psi_{sm} \in (0, 1) \bigcup \Omega_{mT}, m = \overline{1, n+1}, \quad (36)$$

$$\frac{\partial}{\partial X} \psi_{sm}(t, X, Z)|_{X=0} = 0; \quad (37)$$

$$\frac{\partial}{\partial X} \psi_{sm}(t, X, Z)|_{X=0} = 0; \quad (38)$$

$$\psi_{sm}(t, X, Z)|_{X=1} = \varphi_{sm}(t, Z) \quad (39)$$

$$\phi_{sm}(t, Z = L_m) = 0, \phi_{s_{m-1}}(t, Z = L_{m-1}) = 0;$$

$$\phi_{s_1}(t, L_1) = 0, \frac{\partial \phi_{s_1}}{\partial Z}(t, Z = 0) = 0 \\ s = \overline{1, 2}, m = \overline{N+1, 2} \quad (40)$$

$$\psi_{sm}(t, X, Z)|_{X=1} = \varphi_{sm}(t, Z) \quad (41)$$

$$\phi_{sm}(t, Z = L_m) = 0, \phi_{s_{m-1}}(t, Z = L_{m-1}) = 0;$$

$$\phi_{s_1}(t, L_1) = 0, \frac{\partial \phi_{s_1}}{\partial Z}(t, Z = 0) = 0 \\ s = \overline{1, 2}, m = \overline{N+1, 2} \quad (42)$$

Єдиний розв'язок ϕ_{sm}, ψ_{sm} спряженої крайової задачі побудовано операційним методом Гевісайда [17,18].

Технологія отримання аналітичних виразів компонентів градієнта функціоналу-нев'язки. Розглядаючи \mathcal{L} як оператор, що відображає Ω_{mT} в просторі L_2 , для елементів $\mathcal{L}w, \Psi \in L_2$ визначимо скалярний добуток

$$(\mathcal{L}w_{sm}(t, X, Z), \Psi_{sm}(t, X, Z)) = \left[\begin{array}{c} \iint_{\Omega_{mT}} \mathcal{L} \Delta C_{sm} \phi_{sm} X dX dZ dt \\ \iiint_{(0,R) \cup \Omega_{mT}} \mathcal{L} \Delta Q_{sm} \psi_{sm} X dX dZ dt \end{array} \right] \quad (43)$$

де $\phi_{sm}(t, Z)$ і $\psi_{sm}(t, X, Z)$ належить $\bar{\Omega}_{mT}$ і $[0, R] \cup \bar{\Omega}_{mT}$ відповідно.

Для скалярного добутку має місце тотожність Лагранжа [19,21]:

$$(\mathcal{L}w_{sm}(t, X, Z), \Psi_{sm}(t, X, Z)) = (w_{sm}(t, X, Z), \mathcal{L}^* \Psi_{sm}(t, X, Z)) \quad (44)$$

Записавши приріст функціоналу-нев'язки $\Delta J_s(D_{inter_{sm}}, D_{intra_{sm}})$ в скалярній формі, використовуючи заміну $w_{sm} = \mathcal{L}^{-1} \xi_{sm}$, де \mathcal{L}^{-1} - обернений оператор до оператора \mathcal{L} , отримаємо

$$\Delta J_s(D_{intra_{sm}}, D_{inter_{sm}}) \equiv (w_{sm}(t, X, Z), E_{sm}(t)) = \int_0^T \int_{L_{m-1}}^{L_m} \mathcal{L}^{-1} X_{s_{m,1}} \cdot E_{sm}(t) \delta(Z - \gamma_m) dZ d\tau + \int_0^T \int_{L_{m-1}}^{L_m} \int_0^1 \mathcal{L}^{-1} X_{s_{m,2}} \cdot E_{sm}(t) \delta(Z - \gamma_m) dX dZ d\tau + O(\max |\Delta C_{sm}, \Delta Q_{sm}|) \quad (45)$$

Нехтуючи нескінченно малими другого порядку, з врахуванням

$\mathcal{L}^{-1*} [E_{s_m}(t)\delta(Z - \gamma_m)] = \Psi_{s_m}$, отримаємо прирости функціоналу-нев'язки, вираженого через розв'язок спряженої задачі:

$$\Delta J_s(D_{inter_{sm}}, D_{intra_{sm}}) = (\xi_{s_m}(t, Z), \mathcal{L}^{-1*} [E_{s_m}(t)\delta(Z - \gamma_m)]) = (\Psi_{s_m}(t, X, Z), \xi_{s_m}(t, X, Z)) \quad (46)$$

де \mathcal{L}^{-1*} - оператор спряжений з оберненим оператором \mathcal{L}^{-1} , Ψ_{s_m} - вектор розв'язку спряженої задачі.

Формула взаємозв'язку між прямою і спряженою задачами. Розкриваючи в рівнянні (44) компоненти $X_{s_m}(t, X, Z)$, отримуємо важливу формулу для встановлення взаємозв'язку між прямою і спряженою задачами, що в кінцевому рахунку дає можливість отримати явні аналітичні вирази компонентів градієнту функціоналу-нев'язки:

$$\Delta J_s(D_{intra_{sm}}, D_{inter_{sm}}) = \left(\begin{array}{c} \phi_{s_m}(t, Z), \frac{\partial}{\partial Z} (\Delta D_{inter_{sm}} \frac{\partial}{\partial Z} C_{s_m}) - \\ e_{inter_{sm}} \frac{\Delta D_{intra_{sm}}}{R} \frac{\partial}{\partial X} Q_{s_m}(t, X, Z_{X=1}) \end{array} \right) + \left(\begin{array}{c} \psi_{s_m}(t, X, Z) \frac{D_{intra_{sm}}}{R^2} \times \\ \left(\frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{2}{X} \frac{\partial}{\partial X} \right) Q_{s_m}(t, X, Z) \end{array} \right) \quad (47)$$

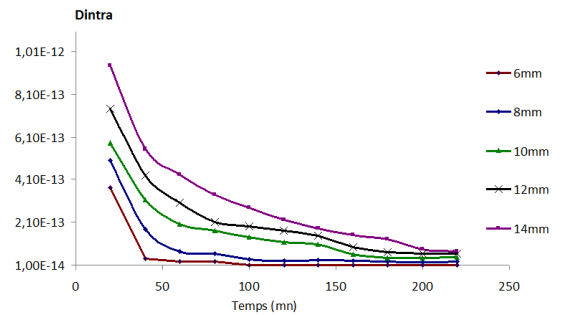
Вирази градієнтів функціоналу-нев'язки. Продиференціювавши вирази приростів (45) відповідно по $\Delta D_{intra_{sm}}$ і $\Delta D_{inter_{sm}}$ і розкриваючи скалярні добутки, отримаємо шукані аналітичні вирази градієнтів функціоналу-нев'язки за необхідними компонентами коефіцієнтів компетитивної дифузії, як функції від часу в intraparticle space та interparticle space відповідно:

$$\nabla J_{D_{intra_{sm}}}(t) = - \frac{e_{inter_{sm}}}{R} \int_{L_{m-1}}^{L_m} \frac{\partial}{\partial X} Q_{s_m}(t, 1, Z) \phi_{s_m} dZ + \frac{1}{R^2} \int_{L_{m-1}}^{L_m} \int_0^1 \left(\frac{\partial^2}{\partial X^2} + \frac{2}{X} \frac{\partial}{\partial X} \right) Q_{s_m} \psi_{s_m} X dXdZ \quad (48)$$

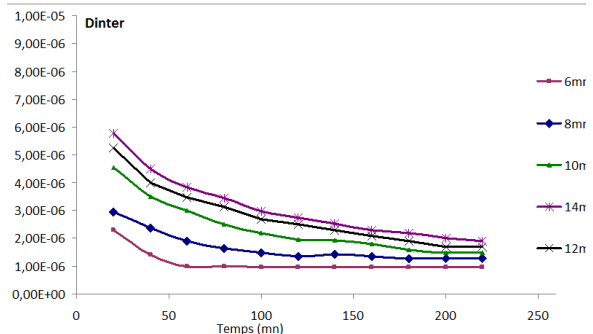
$$\nabla J_{D_{inter_{sm}}}(t) = \int_{L_{m-1}}^{L_m} \frac{\partial^2 C_{s_m}}{\partial Z^2} \phi_{s_m}(t, Z) dZ \quad (49)$$

Ідентифікація параметрів, числове моделювання та аналіз

Відновлення профілів коефіцієнтів дифузії. На рис. 1 та 2 подані ідентифіковані згідно регуляризаційних формул ідентифікації за даними RNM-спектроскопії [6] розподіли коефіцієнтів компетитивної дифузії бензолу та гексану, як функції від часу для різних положень координати товщини шару: 6, 8, 10, 12, 14 мм. Криві коефіцієнтів дифузії мають псевдоекспоненційний характер і змінюються в діапазоні від $7,0 \cdot 10^{-12}$ до $5,0 \cdot 10^{-13}$. Для часу дифузії більше 125-150 хв. спостерігається відносно стабільна картина масообміну, що супроводжується плавним наближенням профілів коефіцієнтів дифузії $D_{intra_{1,k}}$ до значень, відповідних положенням їх рівноваги.

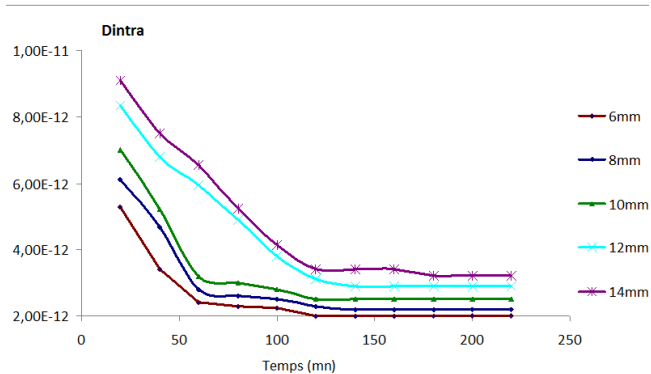


(a) intraparticle space (бензол)

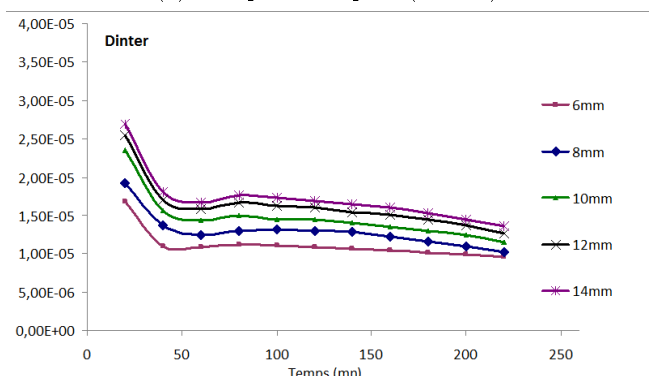


(b) interparticle space (бензол)

Рис. 1: Профілі коефіцієнтів дифузії бензолу



(a) intraparticle space (гексан)



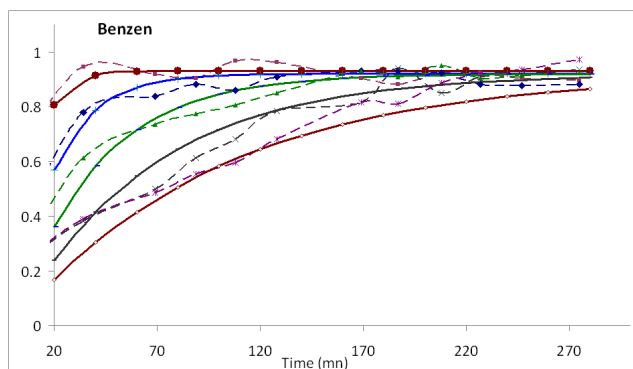
(b) interparticelles space (гексан)

Рис. 2: Профілі коефіцієнтів дифузії гексану

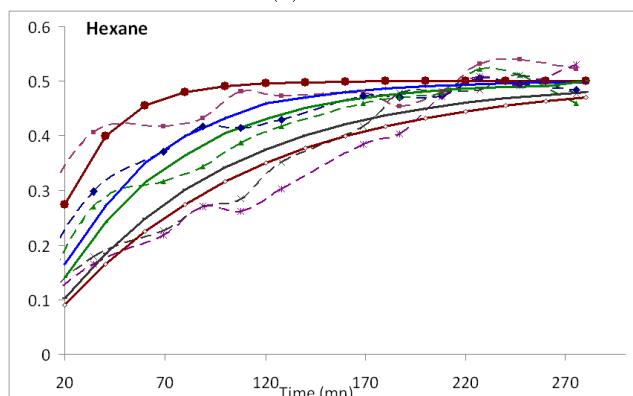
Розподіли коефіцієнтів дифузії $D_{inter,k}$ мають більш пологий вигляд і змінюються в діапазоні від 6.0 E-6 до 1.0 E-6 .

Концентрації і градієнти концентрацій в мікро- і нанопорах частинок. Рис. 3 демонструє результати моделювання концентраційних кривих бензолу і гексану в intercrystallites space, за результатами ідентифікації коефіцієнтів дифузії (рис. 1 та рис. 2).

Графіки на рис. 4 та рис. 5 демонструють зміну градієнтів концентрації поглинутих компонентів адсорбату (бензолу і гексану) в мікро- і нанопорах intracrystallites space уздовж радіуса частинки (кристаліта). Рис. 4 показує зміну градієнтів концентрації уздовж радіуса кристаліта для бензолу в intracrystallites space для двох координат товщини: 8 і 14 мм при дифузійних періодах в $a - t = 25 \text{ mn}$, $b - t = 50 \text{ mn}$, $c - t = 100 \text{ mn}$, $d - t = 200$, а рис. 5 - для гексану. Як видно з графіків, значні градієнти концентрацій мають



(a) бензол



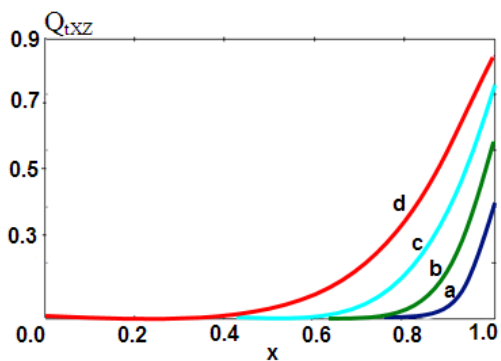
(b) гексан

Рис. 3: Розподіли концентрацій дифузії в просторі intercrystallites від часу і різних положень каталітичного шару

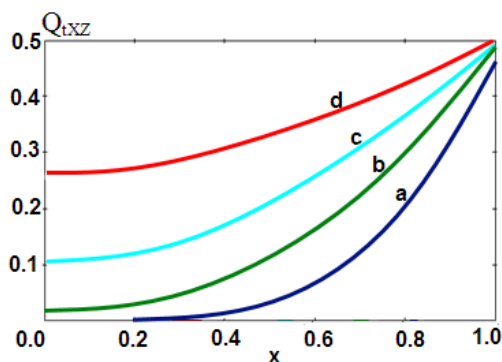
місце для частинок, розмішених в вихідних шарах (8 мм), значення яких на фінальній стадії дифузії досягають в центрі кристаліту $0,8-0,9$ одиниць. Для гексану (рис.5), спостерігається менша ступінь поглинання. Так для частинок вихідного шару (8 мм) значення концентрації на фінальній стадії дифузії досягає $0,3 - 0,1$ одиниці (в центрі кристаліту).

Висновки

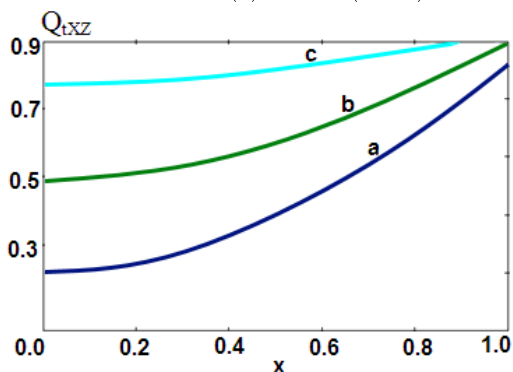
Реалізовано моделі ідентифікації параметрів компетитивної дифузії в неоднорідних середовищах нанопористих частинок з обґрунтуванням постановок та розв'язання прямої та спряженої крайових задач. Операційним методом Гевісайда отримані їх точні аналітичні розв'язки. На підставі теорії оптимального управління станом багатоконпонентних систем і зазначених висо-



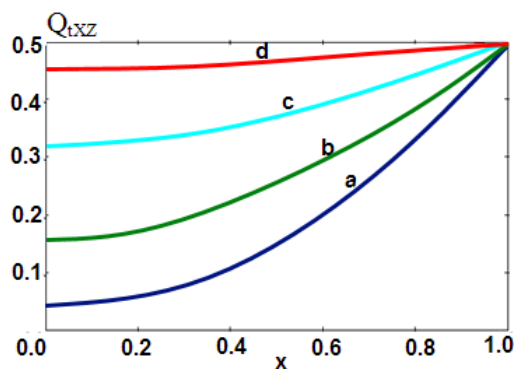
(a) бензол (14мм)



(a) гексан(14мм)



(b) бензол(8мм)



(b) гексан(8мм)

Рис. 4: Розподіли градієнтів концентрації дифузії уздовж радіусу частинки для бензолу

Рис. 5: Розподіли градієнтів концентрації дифузії уздовж радіусу частинки для гексану

кошвидкісних аналітичних розв'язків прямих і спряжених задач отримано явні вирази градієнтів функціоналів-нев'язок для ідентифікації параметрів нанопористих середовищ, при допомозі яких відновлено розподіли коефіцієнтів дифузії в просторах intercrystallites space і intracrystallites space як функцій від часу для різних положень частинок вздовж шару каталізатора та побудовано розподіли концентрацій дифундованих компонент.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Fernandez M., Karger J., Freude D., Freude, D., Pampel, , Van Baten J.M. and Krishna R Mixture diffusion in zeolites studied by MAS PFG NMR and molecular simulation. Microporous and Mesoporous Materials. - 2007. - 105. - P.124-131.
2. Karger J., Grinberg F., Heitjans P. Diffusion fundamentals. Leipziger Unviersite, Leipzig, 2005. - 615 p.
3. 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.

The Journal of Physical Chem. C. ACS (USA). – 2015. – Vol. 119. – Issue 47. – P. 26519–26525

4. Petryk M., Vorobiev E. Numerical and Analytical Modeling of Solid-Liquid Expression from Soft Plant Materials. AIChE Journal. Wiley (USA). - 2013. - Volume 59, Issue 12. - P. 4762–4771

5. Petryk M., Leclerc S., Canet D., Fraissard J. Modeling of gas transport in a microporous solid using a slice selection procedure: Application to the diffusion of benzene in ZSM5 // Catalysis Today, Elsevier. – 2008 – 139(3). – P. 234–240.

6. Leclerc S., Petryk M., Canet D., Fraissard J. Competitive Diffusion of Gases in a Zeolite Using Proton NMR and Sclice Selection Procedure // Catalysis Today, Elsevier B.V. - 2012. – Vol. 187, Issue 1. – P. 104-107.

7. Petryk M., Leclerc S., Canet D., Fraissard J. Mathematical modeling and visualization of gas transport in a zeolite bed using a slice selection procedure // Diffusion Fundamentals. – 2007. – 4. – P. 11.1–11.23.

8. Петрик М.Р. Математическое моделирование массопереноса в симметрических неоднородных и нанопористых средах с системой п-интерфейсных взаимодействий // Кибернетика и систем. анализ. – 2007. – № 1. – С. 114–134.

9. *Sergienko I.V., Petryk M.R., Leclerc S., Fraissard J.* Highly Efficient Methods of the Identification of Competitive Diffusion Parameters in Inhomogeneous Media of Nanoporous Particles. *Cybernetics and Systems Analysis*. Springer (USA). - 2015 - Volume 51, Issue 4, P.529-546

10. *Дейнека В.С., Петрик М.Р., Фрескард Ж.* Идентификация кинетических параметров массопереноса в многокомпонентных системах конкурентивной диффузии в неоднородных нанопористых средах // *Кибернетика и системный анализ*. - 2011. - № 5. - С. 46-64.

11. *Дейнека В.С.* Идентификация параметров задач массопереноса в нанопористых средах при известных суммарных распределениях массы // *Доп. НАН України*.- 2013.- № 4.- С. 26-32.

12. *Дейнека В.С., Петрик М.Р., Михалик Д.М.* Идентификация кинетических параметров однокомпонентного адсорбционного массопереноса в микропористых каталитических средах // *Пробл. управления и информатики*. - 2011. - №12. - С.12-25.

13. *Петрик М.Р., Ж. Фрескард.* Математическое моделирование нелинейной конкурентивной двухкомпонентной диффузии в среде нанопористых частиц // *Проблемы управления и информатики*. - 2009.-№2.-С.48-65.

14. *Sergienko I.V., Deineka V.S.* Optimal Control of Distributed Systems with Conjugation Conditions. New York: Kluwer Academic Publishers (2005). 400p.

15. *Степанов В.В.* Курс дифференциальных уравнений –М.: Физматгиз, 1959 – 468 с.

16. *Тихонов А.Н., Арсенин В.Я.* Методы решения некорректных задач, – М.:Наука,1979.– 288с.

17. *Лаврентьев М. А., Шабат Б.В.* Методы теории функций комплексного переменного. – М.: Наука, 1973. – 736 с.

18. *Ленюк М.П., Петрик М.Р.* Інтегральні перетворення Фур'є, Бесселя із спектральним параметром в задачах математичного моделювання масопереносу в неоднорідних і нанопористих середовищах. К. Наукова думка. - 2000. - 372с.

19. *Алифанов О.М.* Обратные задачи теплообмена. – М.: Машиностроение, 1988. – 280 с.

20. *Lions J.-L.* Perturbations Singulieres dans les Problemes aux Linutes et en Controle Optimal // New York: Springer. Lecture Notes in Math. Ser., 2008.

21. *Сергиенко И.В., Дейнека В.С.* Системный анализ многокомпонентных распределенных систем. – Киев, Наукова думка, 2009. – 638 с.

22. *Дейнека В.С., Петрик М.Р., Кане Д., Фрескар Ж.* Математичне моделювання та ідентифікація параметрів масопереносу в неоднорідному, нанопористому середовищі (адсорбція, конкурентивна дифузія) К.: Національна академія наук України, Інститут Кібернетики ім.В.М.Глушкова. - 2014. - 166с.

23 *Сергиенко И.В. , Петрик М.Р. , Хіміч О.М., Кане Д., Михалик Д.М., Леклерк С., Фрескар Ж.* Математичне моделювання масопереносу в середовищах частинок нанопористої структури / Національна академія наук України, Інститут кібернетики імені В.М. Глушкова – 2014 –209с.