



ПРОГРАМНО-ТЕХНІЧНІ КОМПЛЕКСИ

УДК 519.63; 519.64

М.Р. ПЕТРИК

Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя, Тернопіль, Україна, e-mail: mykhaylo_petryk@tntu.edu.ua.

І.В. БОЙКО

Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя, Тернопіль, Україна, e-mail: boyko.i.theory@gmail.com.

О.М. ХІМІЧ

Інститут кібернетики ім. В.М. Глушкова НАН України, Київ, Україна, e-mail: khimich505@gmail.com.

В.А. СИДОРУК

Інститут кібернетики ім. В.М. Глушкова НАН України, Київ, Україна, e-mail: wolodymyr.sydney@gmail.com.

ВИСОКОПРОДУКТИВНІ МЕТОДИ МОДЕЛЮВАННЯ НАНОАДСОРБЦІЇ ТА ДИФУЗІЇ ЗІ ЗВОРОТНИМИ ЗВ'ЯЗКАМИ В НЕОДНОРІДНИХ ЦИЛІНДРИЧНИХ БАГАТОКОМПОНЕНТНИХ НАНОПОРИСТИХ СЕРЕДОВИЩАХ

Анотація. Розроблено нові високопродуктивні аналітичні методи моделювання полів концентрацій дифундованих газів у внутрішньо- та міжчастинковому просторах у неоднорідних циліндричних n -складових нанопористих середовищах з використанням операційного методу Гевісайда та матриць впливу Коші для неоднорідних крайових задач адсорбції для систем рівнянь у частинних похідних зі зворотними зв'язками.

Ключові слова: модель багатоконпонентної наноадсорбції та дифузії, багатоконпонентні неоднорідні нанопористі середовища, операційний метод Гевісайда.

ВСТУП

Натепер особливого значення набувають експериментальні та теоретичні дослідження адсорбції і дифузії газів через мікропористе тверде тіло та розподіли адсорбованих фаз. Ці дослідження полягають у розробленні систем накопичення енергії і тепло- та масообміну на основі цеоліту [1], систем для адсорбції токсичних речовин із води [2] та виокремлення газів [3], а також каталітичних систем зменшення викидів вихлопних газів, що сприяють зменшенню глобального потепління [4] та розвитку безпечних енергетичних стратегій [5].

Якість математичних моделей для опису адсорбції газів у мікро- і нанопористих твердих тілах (зокрема, в цеолітах) особливо важлива для розроблення різноманітних ефективних технологічних рішень. Наприклад, розмір зерен цеоліту ZSM-5 зазвичай становить 0.2–2 мкм [6], а його внутрішньозернова структура може бути представлена мікропорами (радіус пор $r_p < 1$ нм), мезопорами ($1 < r_p < 25$ нм) і макропорами ($r_p > 25$ нм). Було розроблено різні математичні та обчислювальні моделі для опису тепло- та масопереносу пропану на цеоліті ZSM-5 [7]. Формалізм моделювання даних застосовувався для адсорбції сумішей CO-O_2 на цеоліті з ідентифікацією коефіцієнтів дифузії в нанопористих і мікропористих матеріалах [8, 9] та конкурентної дифузії газів у цеоліті [10, 11]. Було проведено експериментальні та теоретичні дослідження

© М.Р. Петрик, І.В. Бойко, О.М. Хімич, В.А. Сидорук, 2023

адсорбції вологи з природних газів та розподілу вологи та температури в шарах кремнезему [12]. Однак більшість із цих моделей не є універсальними і повністю не відображають складних просторово-часових варіацій тепло- та масопереносу всередині між- та внутрішньочастинкових просторів включно з кінетикою складних процесів адсорбції в неоднорідних середовищах різнорозмірних частинок нанопористої структури, сформованих у вигляді шарів, що взаємодіють. Це потребує нових підходів якісного моделювання, що дають змогу описати складні механізми системи міжфазних взаємодій усіх компонентів системи. Частково такі підходи розглянуто у [13, 14].

У запропонованій праці побудовано математичну модель складного процесу нанопористого масопереносу в неоднорідному нанопористому середовищі з обмеженою кількістю n -складових наносередовищ, що взаємодіють, отримано точний аналітичний розв'язок моделі та обчислено компоненти матриць впливу (головних) розв'язків системи. Розроблення моделі ґрунтується на застосуванні високопродуктивних методів операційного числення Гевісайда [15, 16].

МАТЕМАТИЧНИЙ ОПИС ЗАДАЧІ

Розглянемо адсорбційний масоперенос у неоднорідному обмеженому циліндричному n -складовому нанопористому середовищі за координатою r , заповненому різнорозмірними сферичними нанопористими частинками адсорбенту з різними фізико-хімічними характеристиками. Геометричну схему досліджуваної шаруватої наноструктури наведено на рис. 1.

Математичну модель такого складного процесу нанопористого перенесення з урахуванням багатокомпонентності середовища за радіальною координатою r та фізичних припущень [17, 18] можна описати у вигляді такої змішаної крайової задачі: побудувати обмежений в багат шаровій циліндричній області

$$D_n = \left\{ (t, r) : t > 0, r \in \bigcup_{j=1}^{n+1} (R_{j-1}, R_j), R_0 > 0, R_{n+1} \leq \infty \right\} \text{ багатокомпонентний роз-}$$

в'язок системи рівнянь у частинних похідних

$$\frac{\partial C_j(t, r)}{\partial t} + \frac{\partial Q_j(t, r)}{\partial t} = D_{\text{inter } j} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) C_j(t, r), \quad (1)$$

$$\frac{\partial Q_j}{\partial t} = \beta_j (C_j - \gamma_j Q_j) \quad (2)$$

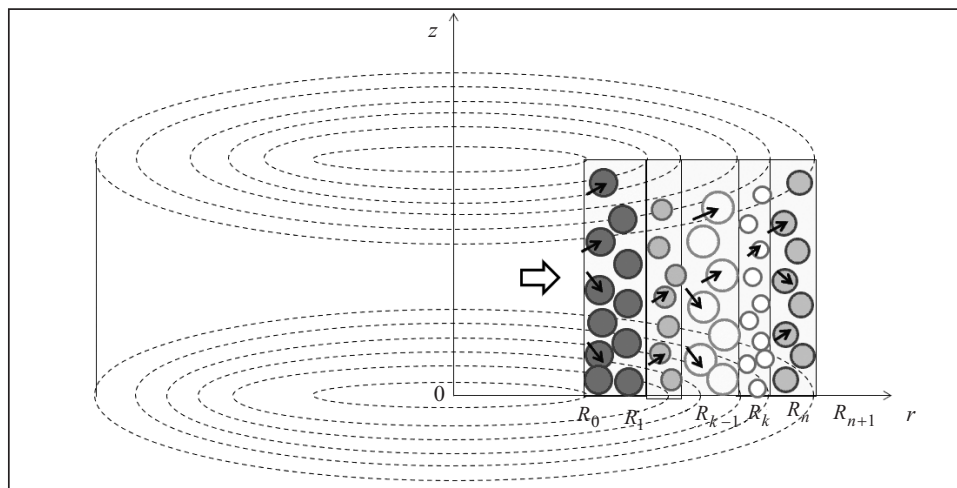


Рис. 1. Геометрична схема n -складової циліндричної наноструктури, наповненої різнорозмірними нанопористими частинками з позначеними координатами меж поділу середовища

з початковими умовами

$$C_j(t, r)_{t=0} = C_{0j}(r), \quad Q_j(t, r)_{t=0} = Q_{0j}(r), \quad (3)$$

крайовими умовами та системою інтерфейсних умов за геометричною координатою r

$$\left[\alpha_{12}^0 \frac{\partial}{\partial r} + \beta_{12}^0 \right] C_1(t, r) \Big|_{r=R_0} = C_{R_0}(t), \quad (4)$$

$$\left[\alpha_{22}^{n+1} \frac{\partial}{\partial r} + \beta_{22}^{n+1} \right] C_{n+1}(t, r) \Big|_{r=R_{n+1}} = C_{R_{n+1}}(t),$$

$$\left[\alpha_{i1}^j \frac{\partial}{\partial r} + \beta_{i1}^j \right] C_j(t, r) - \left[\alpha_{i2}^j \frac{\partial}{\partial r} + \beta_{i2}^j \right] C_{j+1}(t, r) \Big|_{r=R_j} = 0, \quad j = \overline{1, n}, \quad i = \overline{1, 2}. \quad (5)$$

Тут $B_0 = \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right)$ — диференціальний оператор Бесселя для n -інтерфейсного середовища; C_j, Q_j — концентрації адсорбтиву відповідно в міжчастинковому просторі (interparticle space) та внутрішньочастинковому просторі (intraparticle space) у нанопорах кристалітів адсорбенту для j -го шару нанопористого середовища, $j = \overline{1, n+1}$; $\alpha_{ik}^j, \beta_{ik}^j, j = \overline{1, n}, i, k = \overline{1, 2}$, — емпіричні коефіцієнти, що у загальному вигляді описують крайові та інтерфейсні умови третього роду [19].

МЕТОДИКА ПОБУДОВИ АНАЛІТИЧНОГО РОЗВ'ЯЗКУ МОДЕЛІ ТА РЕКУРЕНТНІ АЛГОРИТМИ ОБЧИСЛЕННЯ МАТРИЦЬ ФУНКЦІЙ ВПЛИВУ (ОСНОВНІ РОЗВ'ЯЗКИ)

Припускаючи, що шукані вектор-функції $C(t, r), Q(t, r)$ є оригіналами Лапласа, застосовуємо інтегральне перетворення Лапласа відносно змінної часу t до крайової задачі (1)–(5). У результаті отримуємо крайову задачу: побудувати обмежений у циліндричному багатоскладовому середовищі

$$I_n = \left\{ r : r \in \bigcup_{j=1}^{n+1} (R_{j-1}, R_j), R_0 > 0, R_{n+1} < \infty \right\} \text{ розв'язок системи диференціальних}$$

рівнянь Бесселя

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) C_j^*(p, r) q_j^2(p) = -\mathcal{F}_j^*(p, r) \quad (6)$$

та крайових умов

$$\left[\alpha_{12}^0 \frac{\partial}{\partial r} + \beta_{12}^0 \right] C_1^*(p, r) \Big|_{r=R_0} = C_{R_0}^*(p), \quad (7)$$

$$\left[\alpha_{22}^{n+1} \frac{\partial}{\partial r} + \beta_{22}^{n+1} \right] C_{n+1}^*(p, r) \Big|_{r=R_{n+1}} = C_{R_{n+1}}^*(p),$$

а також інтерфейсних умов за координатою r

$$\left[\left(\alpha_{i1}^j \frac{\partial}{\partial z} + \beta_{i1}^j \right) C_j^*(p, z) - \left(\alpha_{i2}^j \frac{\partial}{\partial r} + \beta_{i2}^j \right) C_{j+1}^*(p, r) \right] \Big|_{r=R_j} = 0, \quad j = \overline{1, n}, \quad i = \overline{1, 2}. \quad (8)$$

Тут

$$\mathcal{F}_j^*(p, r) = \frac{1}{D_{\text{inter } j}} \left[C_{0j}(r) + \frac{\beta_j \gamma_j}{p + \beta_j \gamma_j} Q_{0j}(r) \right],$$

$$q_j^2(p) = \frac{1}{D_{\text{inter } j} (p + \beta_j \gamma_j)} [p^2 + p(\beta_j (1 + \gamma_j))], \quad j = \overline{1, n}.$$

У результаті компоненти функції $Q_j^*(p, r)$ матимуть вигляд

$$Q_j^*(p, r) = \frac{Q_{0j}(r)}{p + \beta_j \gamma_j} + \frac{\beta_j(r)}{p + \beta_j \gamma_j} C_j^*(p, r), \quad j = \overline{1, n+1}. \quad (9)$$

Якщо зафіксувати гілку двохлісної функції, на якій $\operatorname{Re} q_j(p) > 0$ унаслідок властивостей функцій, що утворюють фундаментальну систему розв'язків рівняння Бесселя (6), можна побудувати розв'язок неоднорідної крайової задачі (6)–(8) методом функцій впливу Коші [20]

$$C_j^*(p, r) = A_j \cdot I_{\nu \alpha_j}(q_j r) + B_j \cdot K_{\nu \alpha_j}(q_j r) + \int_{R_{j-1}}^{R_j} \mathcal{E}_{\nu \alpha_j}^*(p, r, \rho) \mathcal{F}_j^*(p, \rho) \rho^{2\alpha_j+1} d\rho, \quad j = \overline{1, n+1}, \quad (10)$$

де $\mathcal{E}_{\nu \alpha_j}^*(p, r, \rho)$, $j = \overline{1, n+1}$, — функції впливу Коші, що мають такий загальний вигляд:

$$\mathcal{E}_{\nu \alpha_j}^*(p, r, \rho) = \begin{cases} \mathcal{E}_{\nu \alpha_j}^{-*} = D_{1j} I_{\nu \alpha_j}(q_j r) + E_{1j} K_{\nu \alpha_j}(q_j r), & R_{j-1} < r < \rho < R_j, \\ \mathcal{E}_{\nu \alpha_j}^{+*} = D_{2j} I_{\nu \alpha_j}(q_j r) + E_{2j} K_{\nu \alpha_j}(q_j r), & R_{j-1} < \rho < r < R_j, \end{cases} \quad (11)$$

і задовольняють умови

$$\begin{cases} \mathcal{E}_{\nu \alpha_j}^*(p, r, \rho) \big|_{r=\rho+0} - \mathcal{E}_{\nu \alpha_j}^*(p, r, \rho) \big|_{r=\rho-0} = 0, \\ \left. \frac{d}{dr} \mathcal{E}_{\nu \alpha_j}^*(p, r, \rho) \right|_{r=\rho+0} - \left. \frac{d}{dr} \mathcal{E}_{\nu \alpha_j}^*(p, r, \rho) \right|_{r=\rho-0} = -\rho^{-(2\alpha_j+1)} \end{cases} \quad (12)$$

та додаткові однорідні умови для лівої та правої границь

$$\left(\alpha_{12}^{j-1} \frac{d}{dr} + \alpha_{12}^{j-1} \right) \mathcal{E}_{r_j}^{-*} \bigg|_{r=R_{j-1}} = 0, \quad \left(\alpha_{11}^j \frac{d}{dr} + \beta_{11}^j \right) \mathcal{E}_{\nu \alpha_j}^{+*} \bigg|_{r=R_j} = 0. \quad (13)$$

У формулах (10)–(13) використано оператор Бесселя в узагальненому вигляді

$$B_{\nu \alpha_j} = \frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r} (2\alpha_j + 1) \frac{d}{dr} - (\nu_j^2 - \alpha_j^2) r^{-2} \quad \text{для } n\text{-складового циліндричного середовища};$$

C_j , Q_j — концентрації адсорбтиву відповідно в міжчастинковому просторі та внутрішньочастинковому просторі (у нанопорах кристалітів адсорбенту) для j -го шару нанопористого середовища, $j = \overline{1, n+1}$; $I_{\nu \alpha_j}(q_j r)$, $K_{\nu \alpha_j}(q_j r)$ — модифіковані функції Бесселя.

Унаслідок підстановки розв'язку (10) в умови (11)–(13) та однозначної розв'язності, отриманої під час перетворення алгебраїчної системи, функції Коші $\mathcal{E}_k^*(p, r, \rho)$, $k = \overline{1, n+1}$, є визначеними і внаслідок симетрії відносно діагоналі $r = \rho$ мають структуру

$$\mathcal{E}_{\nu \alpha_k}^*(p, r, \rho) = \frac{q_k^{2\alpha_k}}{\Delta_{\nu \alpha_{11}}(q_k R_{k-1}, q_k R_k)} \times \begin{cases} \Phi_{\nu \alpha_{11}}^k(q_k R_k, q_k \rho) \Phi_{\nu \alpha_{12}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r), & R_{k-1} < r < \rho < R_k, \\ \Phi_{\nu \alpha_{11}}^k(q_k R_k, q_k r) \Phi_{\nu \alpha_{12}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k \rho), & R_{k-1} < \rho < r < R_k. \end{cases} \quad (14)$$

Тут

$$U_{r \alpha_{im}}^{j1}(q_s R_j) = \left(\alpha_{im}^j \frac{d}{dz} + \beta_{im}^j \right) I_0(q_s r) \big|_{r=R_j} = \beta_{im}^j I_0(q_s R_j) + \alpha_{im}^j R_j q_s^2 I_1(q_s R_j);$$

$$U_{0\alpha_{im}}^{j2}(q_s R_j) = \beta_{im}^j K_0(q_s r)|_{r=R_j} = \beta_{im}^j K_0(q_s R_j) - \alpha_{im}^j R_j q_s^2 K_1(q_s R_j),$$

$$\Phi_{\alpha_{im}}^j(q_s R_j, q_s r) = U_{\alpha_{im}}^{j1}(q_s R_j) K_{\nu_j \alpha_j}(q_s r) - U_{0\alpha_{im}}^{j2}(q_s R_j) I_0(q_s r),$$

$$\Delta_{\nu\alpha_{im}}(q_k R_{k-1}, q_k R_k) = U_{\nu\alpha_{ki_2}}^{k-1,1}(q_k R_{k-1}) U_{\nu\alpha_{km_1}}^{k,2}(q_k R_k) - U_{\nu\alpha_{ki_2}}^{k-1,2}(q_k R_{k-1}) U_{\nu\alpha_{km_1}}^{k,1}(q_k R_k),$$

$$k = \overline{2, n}, \quad i, m = \overline{1, 2},$$

$$\Delta_{\nu\alpha_{11}}(q_{n+1}R_n, q_{n+1}R_{n+1}) = U_{\nu\alpha_{n+1i_2}}^{n,1}(q_{n+1}R_n)U_{\nu\alpha_{n+122}}^{n+1,2}(q_{n+1}R_{n+1}) - U_{\nu\alpha_{n+1i_2}}^{n,2}(q_{n+1}R_n)U_{\nu\alpha_{n+122}}^{n+1,1}(q_{n+1}R_{n+1}).$$

За відомих функцій Коші $\mathcal{E}_{\nu_{A_j}}^*(p, r, \rho)$ (14) крайові умови в точках $r = R_0$ і $r = R_{n+1}$ та умови інтерфейсу (7), (8) для визначення невідомих коефіцієнтів A_j , B_j , $j=1, n+2$, що фігурують у структурах (10) загального розв'язку крайової задачі (6)–(8) $C_j^*(p, r)$, дають алгебраїчну систему із $2n+2$ рівнянь:

$$\left\{ \begin{aligned} &U_{\nu\alpha_{12}}^{01}(q_1R_0)A_1 + U_{\nu\alpha_{12}}^{02}(q_1R_0)B_1 = C_{R_0}^*, \\ &U_{\nu\alpha_{11}}^{11}(q_1R_1)A_1 + U_{\nu\alpha_{11}}^{12}(q_1R_1)B_1 - U_{\nu\alpha_{12}}^{11}(q_2R_1)A_2 - U_{\nu\alpha_{12}}^{12}(q_2R_1)B_2 = 0, \\ &U_{\nu\alpha_{21}}^{11}(q_1R_1)A_1 + U_{\nu\alpha_{21}}^{12}(q_1R_1)B_1 - U_{\nu\alpha_{22}}^{11}(q_2R_1)A_2 - U_{\nu\alpha_{22}}^{12}(q_2R_1)B_2 = +G_1^*, \\ &\dots\dots\dots \\ &U_{\nu\alpha_{11}}^{k1}(q_kR_k)A_k + U_{\nu\alpha_{11}}^{k2}(q_kR_k)B_k - U_{\nu\alpha_{12}}^{k1}(q_{k+1}R_k)A_{k+1} - U_{\nu\alpha_{12}}^{k2}(q_{k+1}R_k)B_{k+1} = 0, \quad (15) \\ &U_{\nu\alpha_{21}}^{k1}(q_kR_k)A_k + U_{\nu\alpha_{21}}^{k2}(q_kR_k)B_k - U_{\nu\alpha_{22}}^{k1}(q_{k+1}R_k)A_{k+1} - U_{\nu\alpha_{22}}^{k2}(q_{k+1}R_k)B_{k+1} = G_k^*, \\ &\dots\dots\dots \\ &U_{\nu\alpha_{11}}^{n,1}(q_nR_n)(q_nI_n)A_n + U_{\nu\alpha_{11}}^{n,2}(q_nR_n)B_n - U_{\nu\alpha_{12}}^{n,1}(q_{n+1}R_n)A_{n+1} - U_{\nu\alpha_{12}}^{n,2}(q_{n+1}R_n)B_{n+1} = 0, \\ &U_{\nu\alpha_{21}}^{n,1}(q_nR_n)A_n + U_{\nu\alpha_{21}}^{n,2}(q_nR_n)B_n - U_{\nu\alpha_{22}}^{n,1}(q_{n+1}R_n)A_{n+1} - U_{\nu\alpha_{22}}^{n,2}(q_{n+1}R_n)B_{n+1} = G_n^*, \\ &U_{\nu\alpha_{22}}^{n+1,1}(q_{n+1}R_{n+1})A_{n+1} + U_{\nu\alpha_{22}}^{n+1,2}(q_{n+1}R_{n+1})B_{n+1} = C_{R_{n+1}}^*(p). \end{aligned} \right.$$

Тут G_j^* — вирази, що містять інтеграли від функцій Коші $\mathcal{E}_{\nu\alpha_j}^*(p, r, \rho)$, обчислюються за формулою

$$G_j^* = \int_{R_k}^{R_{k+1}} \left(\alpha_{22}^j \frac{d}{dr} + \beta_{22}^j \right) \mathcal{E}_{v\alpha_{j+1}}^{-*}(p, r, \rho) \Big|_{r=R_j} \mathcal{F}_{j+1}^*(p, \rho) \rho^{2\alpha_{j+1}+1} d\rho - \\ - \int_{R_{j-1}}^{R_j} \left(\alpha_{21}^j \frac{d}{dr} + \beta_{21}^j \right) \mathcal{E}_{v\alpha_j}^{+*}(p, r, \rho) \Big|_{r=R_j} \mathcal{F}_j^*(p, \rho) \rho^{2\alpha_j+1} d\rho, \quad j = \overline{1, n},$$

і мають вигляд

$$G_j^* = \frac{c_{1j}}{R_j^{2\alpha_j+1}} \int_{R_{j-1}}^{R_j} \frac{\Phi_{\nu\alpha_{12}}^{j-1}(q_j R_{j-1}, q_j \rho)}{\Delta_{\nu\alpha_{11}}(q_j R_{j-1}, q_j R_{j-1})} \mathcal{F}_j^*(p, \rho) \rho^{2\alpha_j+1} d\rho -$$

$$- \frac{c_{2j}}{R_j^{2\alpha_{j+1}+1}} \int_{R_j}^{R_{j+1}} \frac{\Phi_{\nu\alpha_{11}}^{j+1}(q_{j+1} R_{j+1}, q_{j+1} \rho)}{\Delta_{\nu\alpha_{11}}(q_{j+1} R_j, q_{j+1} R_{j+1})} \mathcal{F}_{j+1}^*(p, \rho) \rho^{2\alpha_{j+1}+1} d\rho, \quad j = \overline{1, n},$$

$$c_{j_k} = \alpha_{2j}^k \beta_{1j}^k - \alpha_{1j}^k \beta_{2j}^k, \quad k = \overline{1, n}, \quad j = \overline{1, 2},$$

$$-\frac{c_{1_k}}{q_k^{2\alpha_k} R_k^{2\alpha_k+1}} = U_{\nu\alpha_{11}}^{k1}(q_k R_k) U_{\nu\alpha_{21}}^{k2}(q_k R_k) - U_{\nu\alpha_{11}}^{k2}(q_k R_k) U_{\nu\alpha_{22}}^{k1}(q_k R_k), \quad k = \overline{1, n},$$

$$-\frac{c_{2_k}}{q_{k+1}^{2\alpha_{k+1}} R_{k+1}^{2\alpha_{k+1}+1}} = U_{\nu\alpha_{12}}^{k1}(q_{k+1} R_k) U_{\nu\alpha_{22}}^{k2}(q_{k+1} R_k) - U_{\nu\alpha_{12}}^{k2}(q_{k+1} R_k) U_{\nu\alpha_{22}}^{k1}(q_{k+1} R_k), \quad k = \overline{1, n}.$$

Запишемо тепер матрицю коефіцієнтів системи (15):

$$A_{\nu\alpha}(p) \equiv \begin{bmatrix} U_{\nu\alpha_{12}}^{01} & U_{\nu\alpha_{12}}^{02} & & & & & \\ U_{\nu\alpha_{11}}^{11} & U_{\nu\alpha_{11}}^{12} - U_{\nu\alpha_{12}}^{11} & -U_{\nu\alpha_{12}}^{12} & & & & \\ U_{\nu\alpha_{21}}^{11} & U_{\nu\alpha_{21}}^{12} - U_{\nu\alpha_{22}}^{11} & -U_{\nu\alpha_{22}}^{12} & & & & \\ & \dots & & & & 0 & \\ & & U_{\nu\alpha_{11}}^{k1} & U_{\nu\alpha_{11}}^{k2} - U_{\nu\alpha_{12}}^{k1} & -U_{\nu\alpha_{12}}^{k2} & & \\ & & U_{\nu\alpha_{21}}^{k1} & U_{\nu\alpha_{21}}^{k2} - U_{\nu\alpha_{22}}^{k1} & -U_{\nu\alpha_{22}}^{k2} & & \\ & 0 & & & \dots & & \\ & & & & & U_{\nu\alpha_{11}}^{n1} & U_{\nu\alpha_{11}}^{n2} - U_{\nu\alpha_{12}}^{n1} & -U_{\nu\alpha_{12}}^{n2} \\ & & & & & U_{\nu\alpha_{21}}^{n1} & U_{\nu\alpha_{21}}^{n2} - U_{\nu\alpha_{22}}^{n1} & -U_{\nu\alpha_{22}}^{n2} \\ & & & & & U_{\nu\alpha_{22}}^{n+1,1} & U_{\nu\alpha_{22}}^{n+1,2} & \end{bmatrix}.$$

Припустимо, що виконується умова однозначної розв'язності крайової задачі (6)–(8), тобто визначник алгебраїчної системи (15) є відмінним від нуля

$$\Delta_{\nu\alpha}^*(p) \equiv \det A_{\nu\alpha}(p) \neq 0. \quad (16)$$

Унаслідок однозначної розв'язності алгебраїчної системи (15) та підстановки одержаних значень $A_k, B_k, D_{1k}, D_{2k}, E_{1k}, E_{2k}, k = \overline{1, n+1}$, у (14) компоненти розв'язку крайової задачі (6)–(8) набудуть вигляду

$$C_1^*(p, r) = \frac{\Delta_{A_1}^*}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} I_{\nu_1\alpha_1}(q_1 r) + \frac{\Delta_{B_1}^*}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} K_{\nu_1\alpha_1}(q_1 r) + \int_{R_0}^{R_1} \mathcal{E}_{\nu\alpha_1}^*(p, r, \rho) \mathcal{F}_1^*(p, \rho) \rho^{2\alpha_1+1} d\rho =$$

$$= \frac{1}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \begin{vmatrix} C_{R_0}^* & -\Phi_{\nu\alpha_{12}}^0(q_1 R_0, q_1 r) - U_{\nu\alpha_{12}}^{11} & -U_{\nu\alpha_{12}}^{12} & & & \\ 0 & -\Phi_{\nu\alpha_{11}}^1(q_1 R_1, q_1 r) - U_{\nu\alpha_{22}}^{11} & -U_{\nu\alpha_{22}}^{12} & & & 0 \\ G_1^* & -\Phi_{\nu\alpha_{21}}^1(q_1 R_1, q_1 r) & & \dots & & \\ \dots & & & \dots & & \\ G_n^* & 0 & & \dots & -U_{\nu\alpha_{22}}^{n,1} & -U_{\nu\alpha_{22}}^{n,2} \\ C_{R_{n+1}} & 0 & & & -U_{\nu\alpha_{22}}^{n+1,1} & -U_{\nu\alpha_{22}}^{n+1,2} \end{vmatrix} +$$

$$+ \int_{R_0}^{R_1} \mathcal{E}_{\nu\alpha_1}^*(p, r, \rho) \mathcal{F}_1^*(p, \rho) \rho^{2\alpha_1+1} d\rho,$$

$$C_k^*(p, r) = \frac{1}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} (\Delta_{A_k}^* I_{\nu_k\alpha_k}(q_k r) + \Delta_{B_k}^* K_{\nu_k\alpha_k}(q_k r)) +$$

$$\begin{aligned}
& + \int_{R_{k-1}}^{R_k} E_{\nu\alpha_k}^*(p, r, \rho) \mathcal{F}_k^*(p, \rho) \rho^{2\alpha_k+1} d\rho = \frac{1}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \times \\
& \times \left| \begin{array}{cccc} U_{\nu\alpha_{12}}^{01}(q_1 R_0) & U_{\nu\alpha_{12}}^{02}(q_1 R_0) & & \\ U_{\nu\alpha_{11}}^{11}(q_1 R_1) & -U_{\nu\alpha_{12}}^{11}(q_2 R_1) & -U_{\nu\alpha_{12}}^{12}(q_2 R_1) & C_{R_0}^* \\ U_{\nu\alpha_{21}}^{11}(q_1 R_1) & -U_{\nu\alpha_{21}}^{11}(q_2 R_1) & -U_{\nu\alpha_{22}}^{12}(q_2 R_1) & G_1^* \\ & \dots & & \\ 0 & \Phi_{\nu\alpha_{11}}^k(q_k R_k, q_k r) & -U_{\nu\alpha_{12}}^{k1} & -U_{\nu\alpha_{12}}^{k2} \\ & G_k^* & \Phi_{\nu\alpha_{21}}^k(q_k R_k, q_k r) & -U_{\nu\alpha_{22}}^{k1} & -U_{\nu\alpha_{22}}^{k2} \\ & \dots & & \dots \\ & G_n^* & & -U_{\nu\alpha_{22}}^{n,1} & -U_{\nu\alpha_{22}}^{n,2} \\ & C_{R_{n+1}}^* & & -U_{\nu\alpha_{22}}^{n+1,1} & -U_{\nu\alpha_{22}}^{n+1,2} \end{array} \right| + \\
& + \int_{R_{k-1}}^{R_k} \mathcal{E}_{\nu\alpha_k}^*(p, r, \rho) \mathcal{F}_k^*(p, \rho) \rho^{2\alpha_k+1} d\rho, \quad k = \overline{2, n},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& C_{n+1}^*(p, r) = \frac{1}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \times \\
& \times \left| \begin{array}{cccc} U_{\nu\alpha_{12}}^{01} & U_{\nu\alpha_{12}}^{02} & -U_{\nu\alpha_{12}}^{11} & -U_{\nu\alpha_{12}}^{12} & C_{R_0}^* \\ U_{\nu\alpha_{11}}^{11} & U_{\nu\alpha_{11}}^{12} & -U_{\nu\alpha_{22}}^{11} & -U_{\nu\alpha_{22}}^{12} & \\ U_{\nu\alpha_{21}}^{11} & U_{\nu\alpha_{21}}^{12} & & & \\ & \dots & & & \\ & & U_{\nu\alpha_{11}}^{n,1} & U_{\nu\alpha_{11}}^{n,2} & 0 & -\Phi_{12}^n(q_{n+1}r, q_{n+1}R_n) \\ 0 & & U_{\nu\alpha_{21}}^{n,1} & U_{\nu\alpha_{21}}^{n,2} & G_n^* & -\Phi_{21}^n(q_{n+1}r, q_{n+1}R_n) \\ & & 0 & 0 & C_{R_{n+1}}^* & \Phi_{22}^n(q_{n+1}r, q_{n+1}R_{n+1}) \end{array} \right| + \\
& + \int_{R_n}^{R_{n+1}} \mathcal{E}_{\nu\alpha_{n+1}}^*(p, r, \rho) \mathcal{F}_{n+1}^*(p, \rho) \rho^{2\alpha_{n+1}+1} d\rho.
\end{aligned}$$

Після низки перетворень (розкриваючи визначники $\Delta_{A_k}^* I_{\nu_k \alpha_k}(q_k r) + \Delta_{B_k}^* K_{\nu_k \alpha_k}(q_k r)$, $k = \overline{1, n+1}$) отримуємо рекурентні вирази для обчислення компонент $C_k^*(p, r)$ вектор-функції $C^*(p, r)$ — розв'язку крайової задачі (6)–(8) у вигляді

$$\begin{aligned}
& C_k^*(p, r) = W_{k_1}^*(p, r)_{R_0}^*(p) + W_{k_{n+1}}^*(p, r)_{R_{n+1}}^*(p) + \\
& + \sum_{j=1}^{n+1} \int_{R_{j-1}}^{R_j} \mathcal{H}_{\nu\alpha_{k,j}}^*(p, r, \rho) \mathcal{F}_j^*(p, \rho) \rho^{2\alpha_j+1} d\rho, \quad k = \overline{1, n+1}. \quad (17)
\end{aligned}$$

Тут основні розв'язки крайової задачі (6)–(8) мають вигляд:

— компоненти векторів впливу крайових умов $C_{R_0}^*(p)$, $C_{R_{n+1}}^*(p)$ на k -й сегмент нанопористого середовища

$$W_{k_1}^*(p, r) =$$

$$= \begin{cases} \frac{1}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} [\Phi_{\nu\alpha_{21}}^1(q_1 R_1, q_1 r) \Delta'_{1,2} - \Phi_{\nu\alpha_{11}}^1(q_1 R_1, q_1 r) \Delta_{1,2}], & k = 1, \\ \frac{1}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \prod_{s=1}^{k-1} \frac{-c_{1_s}}{q_s^{2\alpha_s} R_s^{2\alpha_s+1}} [\Phi_{\nu\alpha_{21}}^{k-1}(q_k R_k, q_k r) \Delta'_{1,2k} - \Phi_{\nu\alpha_{11}}^k(q_k R_k, q_k r) \Delta_{1,2k}], & k = \overline{1, n}, \\ -\frac{1}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \prod_{s=1}^n \frac{-c_{1_s}}{q_s^{2\alpha_s} R_s^{2\alpha_s+1}} \Phi_{\nu\alpha_{11}}^{n+1}(q_{n+1} r, q_{n+1} R_{n+1}), & k = n+1, \end{cases}$$

$$W_{k_{n+1}}^*(p, z) =$$

$$= \begin{cases} -\frac{1}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \prod_{s=1}^n \frac{-c_{2_s}}{q_{s+1}^{2\alpha_{s+1}} R_s^{2\alpha_{s+1}+1}} \Phi_{\nu\alpha_{12}}^0(q_1 R_0, q_1 r), & k = 1, \\ -\frac{1}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \prod_{s=k}^n \frac{-c_{2_s}}{q_{s+1}^{2\alpha_{s+1}} R_s^{2\alpha_{s+1}+1}} [\Phi_{\nu\alpha_{22}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta_{1,2k-2} - \\ - \Phi_{\nu\alpha_{12}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta'_{1,2k-2}], & k = \overline{1, n}, \\ \frac{1}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} [\Phi_{\nu\alpha_{12}}^n(q_{n+1} r, q_{n+1} R_n) \Delta'_{1,2n} - \Phi_{22}^n(q_{n+1} r, q_{n+1} R_n) \Delta_{1,2n}], & k = n+1; \end{cases}$$

— компоненти $\mathcal{H}_{\nu\alpha_{kj}}^*(p, r, \rho)$ матриці впливу j -ї неоднорідності $\mathcal{F}_j^*(p, \xi)$ (спричиненої j -ми складовими початкових концентрацій адсорбтиву у газовій фазі $C_{0_j}(z)$ та нанопорах $Q_{0_j}(r)$) на k -й сегмент нанопористого середовища

$$\mathcal{H}_{\nu\alpha_{11}}^*(p, r, \rho) = \frac{q_1^{2\alpha_1}}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \times$$

$$\times \begin{cases} \Phi_{\nu\alpha_{12}}^0(q_1 R_0, q_1 \rho) [\Phi_{\nu\alpha_{11}}^1(q_1 r, q_1 R_1) A_{1,2} - \Phi_{\nu\alpha_{21}}^1(q_1 r, q_1 R_1) A'_{1,2}], & R_0 < \rho < r < R_1, \\ \Phi_{\nu\alpha_{12}}^0(q_1 R_0, q_1 r) [\Phi_{\nu\alpha_{11}}^1(q_1 \rho, q_1 R_1) A_{1,2} - \Phi_{\nu\alpha_{21}}^1(q_1 \rho, q_1 R_1) A'_{1,2}], & R_0 < r < \rho < R_1, \end{cases}$$

$$j = \overline{2, n},$$

$$\mathcal{H}_{\nu\alpha_{1j}}^*(p, r, \rho) = \frac{q_j^{2\alpha_j} \prod_{s=1}^{j-1} \frac{-c_{2_s}}{q_{s+1}^{2\alpha_{s+1}} R_s^{2\alpha_{s+1}+1}}}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \Phi_{\nu\alpha_{12}}^0(q_1 R_0, q_1 r) \times$$

$$\times [\Phi_{\nu\alpha_{11}}^j(q_j R_j, q_j \rho) A_{1,2j} - \Phi_{\nu\alpha_{21}}^j(q_j R_j, q_j \rho) A'_{1,2j}], \quad j = \overline{2, n},$$

$$\mathcal{H}_{\nu\alpha_{1,n+1}}^*(p, r, \rho) = \frac{q_{n+1}^{2\alpha_{n+1}} \prod_{s=1}^n \frac{-c_{2_s}}{q_{s+1}^{2\alpha_{s+1}} R_s^{2\alpha_{s+1}+1}}}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \Phi_{\nu\alpha_{12}}^0(q_1 R_0, q_1 r) \Phi_{\nu\alpha_{11}}^{n+1}(q_{n+1} \rho, q_{n+1} R_{n+1}),$$

$$\mathcal{H}_{\nu\alpha_{k1}}^*(p, r, \rho) = -\frac{q_1^{2\alpha_1}}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \prod_{s=1}^{k-1} \frac{-c_{1_s}}{q_s^{2\alpha_s} R_s^{2\alpha_s+1}} \Phi_{\nu\alpha_{12}}^0(q_1 R_0, q_1 \rho) \times$$

$$\times [\Phi_{\nu\alpha_{21}}^k(q_k R_k, q_k r) A'_{1,2k} - \Phi_{\nu\alpha_{11}}^k(q_k R_k, q_k r) A_{1,2k}],$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{\nu\alpha_{kj}}^*(p, r, \rho) &= - \frac{q_j^{2\alpha_j} \prod_{s=j}^{k-1} \frac{-c_{1_s}}{q_s^{2\alpha_s} R_s^{2\alpha_s+1}}}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \times \\
&\times [\Phi_{\nu\alpha_{21}}^k(q_k R_k, q_k r) A'_{\overline{1,2k}} - \Phi_{\nu\alpha_{11}}^k(q_k R_k, q_k r) A_{\overline{1,2k}}] \times \\
&\times [\Phi_{\nu\alpha_{22}}^{j-1}(q_j R_{j-1}, q_j \rho) \Delta_{\overline{1,2j-2}} - \Phi_{\nu\alpha_{12}}^{j-1}(q_j R_{j-1}, q_j \rho) \Delta'_{\overline{1,2j-2}}], \quad j = \overline{2, k-1}, \quad k = \overline{2, n}, \\
\mathcal{H}_{\nu\alpha_{kj}}^*(p, r, \rho) &= \frac{q_j^{2\alpha_j} \prod_{s=k}^{j-1} \frac{-c_{2_s}}{q_{s+1}^{2\alpha_{s+1}} R_s^{2\alpha_{s+1}+1}}}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} [\Phi_{\nu\alpha_{22}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta_{\overline{1,2k-2}} - \\
&- \Phi_{\nu\alpha_{12}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta_{\overline{1,2k-2}}] [\Phi_{\nu\alpha_{21}}^j(q_j R_j, q_j \rho) A'_{\overline{1,2j}} - \Phi_{\nu\alpha_{11}}^j(q_j R_j, q_j \rho) A_{\overline{1,2j}}], \\
&j = \overline{k+1, n}, \quad k = \overline{2, n}, \\
\mathcal{H}_{\nu\alpha_{kk}}^*(p, r, \rho) &= \frac{q_k^{2\alpha_k}}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \times \\
&\times \begin{cases} [\Phi_{\nu\alpha_{22}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k \rho) \Delta_{\overline{1,2k-2}} - \Phi_{\nu\alpha_{12}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k \rho) \Delta'_{\overline{1,2k-2}}] \times \\ \times [\Phi_{\nu\alpha_{21}}^k(q_k R_k, q_k r) A'_{\overline{1,2k}} - \Phi_{\nu\alpha_{11}}^k(q_k R_k, q_k r) A_{\overline{1,2k}}], & R_{k-1} < \rho < r < R_k, \\ [\Phi_{\nu\alpha_{22}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta_{\overline{1,2k-2}} - \Phi_{\nu\alpha_{12}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta'_{\overline{1,2k-2}}] \times \\ \times [\Phi_{\nu\alpha_{21}}^k(q_k R_k, q_k \rho) A'_{\overline{1,2k}} - \Phi_{\nu\alpha_{11}}^k(q_k R_k, q_k \rho) A_{\overline{1,2k}}], & R_{k-1} < r < \rho < R_k, \end{cases} \\
\mathcal{H}_{\nu\alpha_{k,n+1}}^*(p, r, \rho) &= - \frac{q_{n+1}^{2\alpha_{n+1}}}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p) \Delta_{\nu\alpha_{11}}^*} \prod_{s=k}^n \frac{-c_{2_s}}{q_{s+1}^{2\alpha_{s+1}} R_s^{2\alpha_{s+1}+1}} \Phi_{\nu\alpha_{11}}^{n+1}(q_{n+1} \rho, q_{n+1} R_{n+1}) \times \\
&\times [\Phi_{\nu\alpha_{22}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta_{\overline{1,2k-2}} - \Phi_{12}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta'_{\overline{1,2k-2}}], \quad k = \overline{2, n}, \\
\mathcal{H}_{\nu\alpha_{n+1,1}}^*(p, r, \rho) &= \frac{q_1^{2\alpha_1}}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \prod_{s=1}^n \frac{-c_{1_s}}{q_s^{2\alpha_s} R_s^{2\alpha_s+1}} \Phi_{12}^0(q_1 R_0, q_1 \rho) \Phi_{11}^{n+1}(q_{n+1} r, q_{n+1} R_{n+1}), \\
\mathcal{H}_{\nu\alpha_{n+1,j}}^*(p, r, \rho) &= \frac{q_j^{2\alpha_j} \prod_{s=j}^n \frac{-c_{1_s}}{q_s^{2\alpha_s} R_s^{2\alpha_s+1}}}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \Phi_{11}^{n+1}(q_{n+1} r, q_{n+1} R_{n+1}) \times \\
&\times [\Phi_{12}^{j-1}(q_j R_{j-1}, q_j \rho) \Delta'_{\overline{1,2j-2}} - \Phi_{22}^{j-1}(q_j R_{j-1}, q_j \rho) \Delta_{\overline{1,2j-2}}], \quad j = \overline{2, n}, \\
\mathcal{H}_{n+1,n+1}^*(p, r, \rho) &= \frac{q_{n+1}^{2\alpha_{n+1}}}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \times \\
&\times \begin{cases} \Phi_{11}^{n+1}(q_{n+1} \rho, q_{n+1} R_{n+1}) [\Phi_{12}^n(q_{n+1} R_n, q_{n+1} r) \Delta'_{\overline{1,2n}} - \\ - \Phi_{22}^n(q_{n+1} R_n, q_{n+1} r) \Delta_{\overline{1,2n}}], & R_n < \rho < r < R_{n+1}, \\ \Phi_{11}^{n+1}(q_{n+1} r, q_{n+1} R_{n+1}) [\Phi_{12}^n(q_{n+1} R_n, q_{n+1} \rho) \Delta'_{\overline{1,2n}} - \\ - \Phi_{22}^n(q_{n+1} R_n, q_{n+1} \rho) \Delta_{\overline{1,2n}}], & R_n < r < \rho < R_{n+1}. \end{cases}
\end{aligned}$$

Перехід до оригіналів. Особливими точками головних розв'язків крайової задачі (6)–(8) $W_{1_k}^*(p, r)$, $W_{n+1_k}^*(p, r)$, $\mathcal{H}_{\nu\alpha_{k,k_1}}^*(p, r, \rho) \in$ точки галузження $p = \infty$ та $p_{1,2} = -\frac{1}{2}[S_1 \pm \sqrt{S_2}] < 0$, $S_1 = \beta_k(1 + \gamma_k) + \eta_k^2$, $S_2 = (\eta_k - \beta_k\gamma_k)^2 = \beta_k[\beta_k(1 + 2\gamma_k) + 2\eta_k^2] > 0$. Тому під час переходу до оригіналів за Лапласом інтеграл по контуру Бромвіча можна замінити інтегралом по уявній осі [16]:

$$\begin{aligned} W_{1_k}(t, r) &= L^{-1}[W_{1_k}^*(p, r)] = \frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma-i\infty}^{\sigma+i\infty} W_{1_k}^*(p, r) e^{pt} dp = \frac{1}{2\pi i} \int_{-i\infty}^{i\infty} W_{1_k}^*(p, r) e^{pt} dp = \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} W_{1_k}^*(is, r) e^{ist} ds = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \operatorname{Re}[W_{1_k}^*(is, r) e^{ist}] ds, \end{aligned} \quad (18)$$

$$W_{n+1_k}(t, r) = L^{-1}[W_{n+1_k}^*(p, r)] = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \operatorname{Re}[W_{n+1_k}^*(is, r) e^{ist}] ds,$$

$$\mathcal{H}_{k,k_1}^*(t, r, \rho) = L^{-1}[\mathcal{H}_{k,k_1}^*(p, r, \rho)] = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \operatorname{Re}[\mathcal{H}_{k,k_1}^*(is, r, \rho) e^{ist}] ds.$$

Унаслідок однозначної розв'язності алгебраїчної системи (15) з урахуванням одержаних головних розв'язків задачі (6)–(8) та формул (9), (17), (18) отримуємо єдиний розв'язок вихідної крайової задачі (1)–(5):

$$\begin{aligned} C_k(t, r) &= \int_0^t W_{1_k}(t - \tau, r) C_{R_0}(t) d\tau + \int_0^t W_{n+1_k}(t - \tau, r) C_{R_{n+1}}(t) d\tau + \\ &+ \int_0^t \sum_{k_1=1}^{n+1} \int_{R_{k_1-1}}^{R_{k_1}} \mathcal{H}_{k,k_1}^*(t - \tau, r, \rho) [f_{k_1}(\tau, \rho) + C_{0_{k_1}}(\rho) \delta_+(\tau)] \rho^{2a_{k_1}} d\rho d\tau + \\ &+ \int_0^t \sum_{k_1=1}^{n+1} \int_{R_{k_1-1}}^{R_{k_1}} \frac{\beta_{k_1} \gamma_{k_1}}{D_{z_{k_1}}} \mathcal{H}_{k,k_1}(t - \tau, r, \rho) e^{-\beta_{k_1} \gamma_{k_1} \tau} Q_{0_{k_1}}(\rho) \rho^{2a_{k_1}} d\rho d\tau, \end{aligned} \quad (19)$$

$$Q_k(t, z) = \beta_k \int_0^t e^{-\beta_k \gamma_k(t-\tau)} C_k(\tau, z) d\tau + e^{-\beta_k \gamma_k t} Q_{0_k}(z). \quad (20)$$

Теорема 1 (про розв'язність). Якщо виконується умова однозначної розв'язності вихідної крайової задачі та шукані і задані функції є оригіналами за Лапласом, то розв'язок крайової задачі (1)–(5) існує і єдиний та визначається формулами (19), (20).

Розглянемо рекурентні алгоритми обчислення визначника $\Delta_{\nu\alpha}^*(p)$ системи (15) та визначників $\Delta_{1,2k}$, $\Delta'_{1,2k}$, $A_{1,2k}$, $A'_{1,2k}$.

Процедура обчислення визначників $\Delta_{1,2k}$, $\Delta'_{1,2k}$. Поклавши

$$\Delta_{1,2} = U_{\nu\alpha_{12}}^{01}(q_1 R_0) U_{\nu\alpha_{11}}^{12}(q_1 R_1) - U_{\nu\alpha_{12}}^{02}(q_1 R_0) U_{\nu\alpha_{11}}^{11}(q_1 R_1) \equiv \Delta_{\nu\alpha_{11}}(q_1 R_0, q_1 R_1),$$

$$\Delta'_{1,2} = U_{\nu\alpha_{12}}^{01}(q_1 R_0) U_{\nu\alpha_{21}}^{12}(q_1 R_1) - U_{\nu\alpha_{12}}^{02}(q_1 R_0) U_{\nu\alpha_{21}}^{11}(q_1 R_1) \equiv \Delta_{\nu\alpha_{12}}(q_1 R_0, q_1 R_1),$$

отримаємо

$$\Delta_{1,2k} = \begin{vmatrix} -U_{\nu\alpha_{12}}^{k-1,1}(q_k R_{k-1}) & -U_{\nu\alpha_{12}}^{k-1,2}(q_k R_{k-1}) \\ U_{\nu\alpha_{11}}^{k1}(q_k R_k) & U_{\nu\alpha_{11}}^{k2}(q_k R_k) \end{vmatrix} \Delta_{1,2k-2} -$$

$$\begin{aligned}
& - \begin{vmatrix} U_{\nu\alpha_{22}}^{k-1,1}(q_k R_{k-1}) & -U_{\nu\alpha_{22}}^{k-1,2}(q_k R_{k-1}) \\ U_{\nu\alpha_{11}}^{k1}(q_k R_k) & U_{\nu\alpha_{11}}^{k2}(q_k R_k) \end{vmatrix} \Delta'_{1,2k-2} = \\
& = (U_{\nu\alpha_{22}}^{k-1,1} U_{\nu\alpha_{11}}^{k2} - U_{\nu\alpha_{22}}^{k-1,2} U_{\nu\alpha_{11}}^{k1}) \Delta'_{1,2k-2} - (U_{\nu\alpha_{12}}^{k-1,1} U_{\nu\alpha_{11}}^{k2} - U_{\nu\alpha_{12}}^{k-1,2} U_{\nu\alpha_{11}}^{k1}) \Delta_{1,2k-2}.
\end{aligned}$$

Відповідно визначник $\Delta'_{1,2k}$ обчислюється так:

$$\begin{aligned}
\Delta'_{1,2k} &= \begin{vmatrix} -U_{\nu\alpha_{22}}^{k-1,1}(q_k R_{k-1}) & -U_{\nu\alpha_{22}}^{k-1,2}(q_k R_{k-1}) \\ U_{21}^{k1}(q_k R_k) & U_{21}^{k2}(q_k R_k) \end{vmatrix} \Delta_{1,2k-2} - \\
& - \begin{vmatrix} -U_{\nu\alpha_{12}}^{k-1,1}(q_k R_{k-1}) & -U_{\nu\alpha_{12}}^{k-1,2}(q_k R_{k-1}) \\ U_{\nu\alpha_{21}}^{k1}(q_k R_k) & -U_{\nu\alpha_{21}}^{k2}(q_k R_k) \end{vmatrix} \Delta'_{1,2k-2} = \\
& = (U_{\nu\alpha_{12}}^{k-1,1} U_{\nu\alpha_{21}}^{k2} - U_{\nu\alpha_{12}}^{k-1,2} U_{\nu\alpha_{21}}^{k1}) \Delta'_{1,2k-2} - (U_{\nu\alpha_{22}}^{k-1,1} U_{\nu\alpha_{21}}^{k2} - U_{\nu\alpha_{22}}^{k-1,2} U_{\nu\alpha_{21}}^{k1}) \Delta_{1,2k-2},
\end{aligned}$$

звідси отримуємо

$$\Delta_{1,2k} = \Delta_{\nu\alpha_{11}}(q_k R_{k-1}, q_k R_k) \Delta'_{1,2k-2} - \Delta_{\nu\alpha_{21}}(q_k R_{k-1}, q_k R_k) \Delta_{1,2k-2},$$

$$\Delta'_{1,2k} = \Delta_{\nu\alpha_{12}}(q_k R_{k-1}, q_k R_k) \Delta'_{1,2k-2} - \Delta_{\nu\alpha_{22}}(q_k R_{k-1}, q_k R_k) \Delta_{1,2k-2}, \quad k = \overline{2, n}.$$

Рекурсивний алгоритм обчислення визначника системи $\Delta_{\nu\alpha}^*(p)$. Розклавши визначник системи за останнім $(2n+2)$ -м рядком, одержимо

$$\begin{aligned}
\Delta_{\nu\alpha}^*(p) &= \begin{vmatrix} -U_{\nu\alpha_{12}}^{n,1}(q_n R_n) & -U_{\nu\alpha_{12}}^{n,2}(q_n R_n) \\ U_{\nu\alpha_{22}}^{n+1,1}(q_{n+1} R_{n+1}) & U_{\nu\alpha_{22}}^{n+1,2}(q_{n+1} R_{n+1}) \end{vmatrix} \Delta_{1,2n} - \\
& - \begin{vmatrix} -U_{\nu\alpha_{22}}^{n,1}(q_n R_n) & -U_{22}^{n,2}(q_n R_n) \\ U_{\nu\alpha_{22}}^{n+1,1}(q_{n+1} R_{n+1}) & U_{\nu\alpha_{22}}^{n+1,2}(q_{n+1} R_{n+1}) \end{vmatrix} \Delta'_{1,2n} = \\
& = [U_{\nu\alpha_{12}}^{n,1}(q_n R_n) U_{\nu\alpha_{22}}^{n+1,2}(q_{n+1} R_{n+1}) - U_{\nu\alpha_{12}}^{n,2}(q_n R_n) U_{\nu\alpha_{22}}^{n+1,1}(q_{n+1} R_{n+1})] \Delta'_{1,2n} - \\
& - [U_{\nu\alpha_{22}}^{n,1}(q_n R_n) U_{\nu\alpha_{22}}^{n+1,2}(q_{n+1} R_{n+1}) - U_{22}^{n,2}(q_n R_n) \cdot U_{\nu\alpha_{22}}^{n+1,1}(q_{n+1} R_{n+1})] \Delta_{1,2n} = \\
& = \Delta_{\nu\alpha_{12}}(q_{n+1} R_{n+1}, q_{n+1} R_{n+1}) \Delta'_{1,2n} - \Delta_{\nu\alpha_{11}}(q_{n+1} R_n, q_{n+1} R_{n+1}) \Delta_{1,2n}, \quad (21)
\end{aligned}$$

де визначники $\Delta_{1,2n}$, $\Delta'_{1,2n}$ обчислюються за формулами (21) для $k = n$. Тут

$$\Delta_{\nu\alpha_{11}}(q_k R_{k-1}, q_k R_k) = U_{\nu\alpha_{12}}^{k-1,1}(q_k R_{k-1}) U_{\nu\alpha_{11}}^{k2}(q_k R_k) - U_{\nu\alpha_{12}}^{k-1,2}(q_k R_{k-1}) U_{\nu\alpha_{11}}^{k1}(q_k R_k),$$

$$\Delta_{\nu\alpha_{22}}(q_k R_{k-1}, q_k R_k) = U_{\nu\alpha_{22}}^{k-1,1}(q_k R_{k-1}) U_{\nu\alpha_{21}}^{k2}(q_k R_k) - U_{\nu\alpha_{22}}^{k-1,2}(q_k R_{k-1}) U_{\nu\alpha_{21}}^{k1}(q_k R_k),$$

$$\Delta_{\nu\alpha_{12}}(q_k R_{k-1}, q_k R_k) = U_{\nu\alpha_{12}}^{k-1,1}(q_k R_{k-1}) U_{\nu\alpha_{21}}^{k2}(q_k R_k) - U_{\nu\alpha_{12}}^{k-1,2}(q_k R_{k-1}) U_{\nu\alpha_{21}}^{k1}(q_k R_k),$$

$$\Delta_{\nu\alpha_{21}}(q_k R_{k-1}, q_k R_k) = U_{\nu\alpha_{22}}^{k-1,1}(q_k R_{k-1}) U_{\nu\alpha_{11}}^{k2}(q_k R_k) - U_{\nu\alpha_{22}}^{k-1,2}(q_k R_{k-1}) U_{\nu\alpha_{11}}^{k1}(q_k R_k).$$

Процедура обчислення визначників $\Delta_{1,2j}$, $\Delta'_{1,2j}$. Покладемо

$$\Delta_{1,2n} = \begin{vmatrix} -U_{\nu\alpha_{22}}^{n1}(q_{n+1} R_n) & -U_{\nu\alpha_{22}}^{n2}(q_{n+1} R_n) \\ U_{\nu\alpha_{22}}^{n+1,1}(q_{n+1} R_{n+1}) & U_{\nu\alpha_{22}}^{n+1,2}(q_{n+1} R_{n+1}) \end{vmatrix} = -\Delta_{\nu\alpha_{11}}(q_{n+1} l_n, q_{n+1} l_{n+1}),$$

$$A'_{1,2n} = \begin{vmatrix} -U_{\nu\alpha_{12}}^{n1}(q_{n+1}R_n) & -U_{\nu\alpha_{12}}^{n2}(q_{n+1}R_n) \\ U_{\nu\alpha_{22}}^{n+1,1}(q_{n+1}R_{n+1}) & U_{\nu\alpha_{22}}^{n+1,2}(q_{n+1}R_{n+1}) \end{vmatrix} = -\Delta_{\nu\alpha_{12}}(q_{n+1}l_n, q_{n+1}l_{n+1}).$$

Відповідно визначники $A_{1,2k}$, $A'_{1,2k}$ обчислюються так:

$$A_{1,2k} = \begin{vmatrix} -U_{\nu\alpha_{22}}^{k+1,1}(q_{k+2}R_{k+1}) & -U_{\nu\alpha_{22}}^{k+1,2}(q_{k+2}R_{k+1}) \\ U_{\nu\alpha_{11}}^{k+2,1}(q_{k+2}R_{k+2}) & U_{\nu\alpha_{11}}^{k+2,2}(q_{k+2}R_{k+2}) \end{vmatrix} A_{1,2k+2} -$$

$$- \begin{vmatrix} -U_{\nu\alpha_{22}}^{k+1,1}(q_{k+2}R_{k+1}) & -U_{\nu\alpha_{22}}^{k+1,2}(q_{k+2}R_{k+1}) \\ U_{\nu\alpha_{21}}^{k+2,1}(q_{k+2}R_{k+2}) & -U_{\nu\alpha_{21}}^{k+1,2}(q_{k+2}R_{k+2}) \end{vmatrix} A'_{1,2k+2}.$$

$$A'_{1,2k} = \begin{vmatrix} -U_{\nu\alpha_{12}}^{k+1,1}(q_{k+2}R_{k+1}) & -U_{\nu\alpha_{12}}^{k+1,2}(q_{k+2}R_{k+1}) \\ U_{\nu\alpha_{11}}^{k+2,1}(q_{k+2}R_{k+2}) & U_{\nu\alpha_{11}}^{k+2,2}(q_{k+2}R_{k+2}) \end{vmatrix} A_{1,2k+2} -$$

$$- \begin{vmatrix} -U_{\nu\alpha_{12}}^{k+1,1}(q_{k+2}R_{k+1}) & -U_{\nu\alpha_{12}}^{k+1,2}(q_{k+2}R_{k+1}) \\ U_{\nu\alpha_{21}}^{k+2,1}(q_{k+2}R_{k+2}) & -U_{\nu\alpha_{21}}^{k+1,2}(q_{k+2}R_{k+2}) \end{vmatrix} A'_{1,2k+2}$$

або

$$A_{1,2k} = \Delta_{\nu\alpha_{22}}(q_{k+2}R_{k+1}, q_{k+2}R_{k+2}) A'_{1,2k+2} - \Delta_{\nu\alpha_{21}}(q_{k+2}R_{k+1}, q_{k+2}R_{k+2}) A_{1,2k+2},$$

$$A'_{1,2k} = \Delta_{\nu\alpha_{12}}(q_{k+2}R_{k+1}, q_{k+2}R_{k+2}) A'_{1,2k+2} - \Delta_{\nu\alpha_{11}}(q_{k+2}R_{k+1}, q_{k+2}R_{k+2}) A_{1,2k+2},$$

$$k = 2, n-2.$$

Зауважимо, що рекурентний алгоритм обчислення визначника $\Delta_{\nu\alpha}^*(p)$ системи (15) може бути побудований з використанням системи визначників $A_{1,2k}$, $A'_{1,2k}$, $k = 2, n$.

ЧИСЕЛЬНЕ МОДЕЛЮВАННЯ РАДІАЛЬНОГО РОЗПОДІЛУ ЕЛЕКТРИЧНОГО ПОЛЯ ЗАРЯДЖЕНХ ЧАСТИНОК У n -КОМПОНЕНТНОМУ НАНОПОРИСТОМУ СЕРЕДОВИЩІ

Профілі розподілу електричного поля, створюваного зарядженими частинками, що формуються всередині досліджуваної n -компонентної нанопористої структури, побудовані на основі рівняння Пуассона з використанням одержаних розподілів концентрацій адсорбтиву (19), (20):

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} [r\varphi_j(t, r)] = -\frac{\tilde{Q}_j(t, r)}{4\pi\epsilon_0\epsilon(r)}, \quad (22)$$

де $\tilde{Q}_j(t, r)$ — радіальний розподіл заряду в j -му шарі нанопористої структури

$$\tilde{Q}_j(t, r) = e[C_j(t, r) - Q_j(t, r)] \quad (23)$$

і діелектрична проникність системи тепер визначається

$$\epsilon(r) = \sum_{i=0}^N \epsilon_{(i)} [\theta(r - r_{(i)}) - \theta(r - r_{(i+1)})], \quad r_{(n+1)} \rightarrow +\infty. \quad (24)$$

Розв'язання рівняння електричного поля частинок нанопористого композиту (22) згідно з (23), (24) з урахуванням отриманих векторних аналітичних розподілів концентрацій адсорбату (19), (20) виконано на багатовимірній сітці [20].

Для чисельного моделювання використовувались технологічні параметри наноструктури, експериментально досліджені в [21, 22]. Ця наноструктура створена з плівок матеріалів $\text{Al}_2\text{O}_3 / \text{SiO}_2$. Товщина плівки Al_2O_3 становить 0.1 мкм, а плівки SiO_2 — 0.09 мкм.

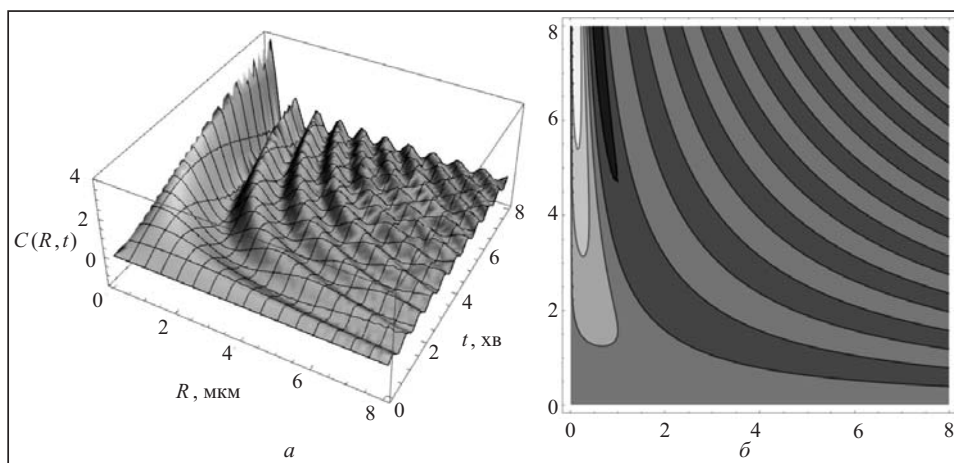


Рис. 2. Просторово-часова залежність концентрації заряджених частинок у міжкристалітному просторі (а) та переріз цієї залежності (б)

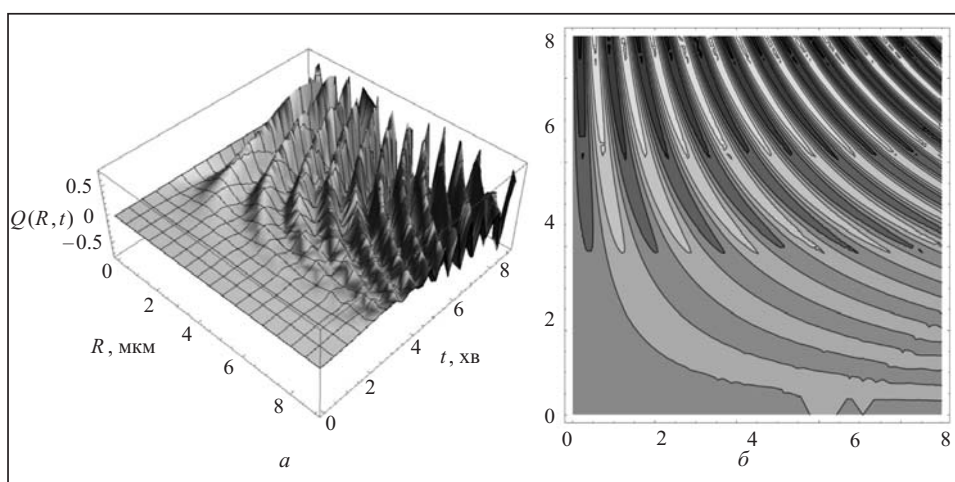


Рис. 3. Просторово-часова залежність концентрації заряджених частинок у внутрішньокристалітному нанопористому просторі (а) та переріз цієї залежності (б)

На рис. 2 наведено результати розрахунків концентрації $C(t, r)$ заряджених частинок адсорбату у досліджуваному зразку, а також переріз просторової залежності площиною, який наглядніше демонструє радіальний розподіл частинок у шарах нанопористої структури. Наведені на рис. 2 залежності демонструють розподіл концентрації заряджених частинок адсорбату в наноструктурі, яка утворена 15 шарами Al_2O_3 та 16 шарами SiO_2 . Як видно з рис. 2, протягом заданого інтервалу часу (до 30 хв) заряджені частинки накопичуються в шарах мікросистеми так, що вони переважно заповнюють шари матеріалу Al_2O_3 (світлі смуги), на відміну від шарів SiO_2 , де частинки адсорбату фактично не накопичуються.

На рис. 3 наведено результати розрахунку концентрації адсорбату у внутрішньокристалітному просторі, а саме в нанопорах шарів досліджуваного композиту. Як видно з розрахункових залежностей, концентрація заряджених частинок (молекул адсорбату) у нанопорах менша ніж у міжкристалітному просторі, що свідчить про насичення адсорбатом нанопор композиту. Це є ознакою досягнення фазової рівноваги між дифундованим адсорбатом у міжкристалітному просторі шарів нанопористої структури та адсорбатом у нанопорах. Слід зазначити, що переріз просторової залежності площиною для цієї залежності фактично подібний до залежності, зображеної на рис. 2, б.

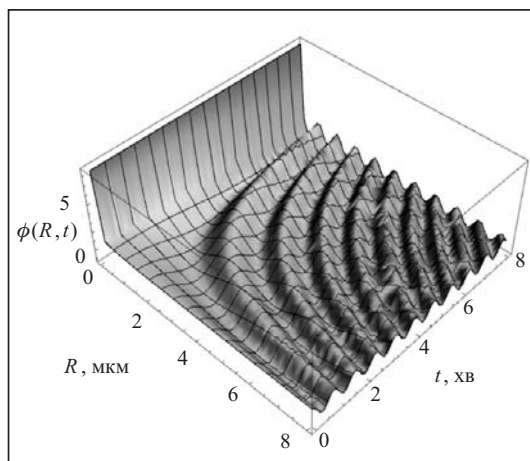


Рис. 4. Просторово-часова залежність потенціалу електричного поля всередині досліджуваної наноструктури

ричному неоднорідному багатшаровому нанопористому середовищі та отримано високопродуктивні векторні аналітичні розв'язки, що в загальному випадку описують вплив внутрішньокінетичних чинників перенесення заряджених частинок адсорбату, основними серед яких є багатокомпонентність наноструктури за радіальною координатою r та відповідно системи n -інтерфейсних поверхневих взаємодій між шарами. Реалізація таких векторних аналітичних розв'язків є маловитратною і не потребує великих обсягів обчислень порівняно з суто чисельними методами, а також дає змогу ефективно розпаралелювати обчислення за рахунок впровадження нових матричних рекурентних процедур обчислення функцій неоднорідних і зворотних взаємодій (впливів) мікро- і макропроцесів та елементів наноструктури, включаючи умови рівноваги на кожному із них. Це дає можливість ефективно моделювати та якісно графічно візуалізувати профілі концентрацій адсорбату у просторах макро- і нанопор, розподіляти електричний потенціал, проводити комплексний аналіз інтегрального переносу для неоднорідних багатоскладових нанопористих структур з різними фізичними властивостями.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Van Assche T.R.C., Baron G.V., Denayer J.F.M. An explicit multicomponent adsorption isotherm model: Accounting for the size-effect for components with Langmuir adsorption behavior. *Adsorption*. 2018. Vol. 24. P. 517–530. <https://doi.org/10.1007/s10450-018-9962-1>.
2. Rad L.R., Anbia M. Zeolite-based composites for the adsorption of toxic matters from water: A review. *Journal of Environmental Chemical Engineering*. 2021. Vol. 9, Iss. 5. 106088. <https://doi.org/10.1016/j.jece.2021.106088>.
3. Nandanwar S.U., Corbin D.R., Shiflett M.B. A review of porous adsorbents for the separation of nitrogen from natural gas. *Industrial & Engineering Chemistry Research*. 2020. Vol. 59, N 30. P. 13355–13369. <https://doi.org/10.1021/acs.iecr.0c02730>.
4. Feng C., Jiaqiang E., Han W., Deng Y., Zhang B., Zhao X., Han D. Key technology and application analysis of zeolite adsorption for energy storage and heat-mass transfer process: A review. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*. 2021. Vol. 144, 110954. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2021.110954>.
5. Unger N., Bond T.C., Wang J.S., Koch D.M., Menon S., Shindell D.T., Bauer S. Attribution of climate forcing to economic sectors. *Proc. Natl. Acad. Sci.* 2010. Vol. 107, N 8. P. 3382–3387. <https://doi.org/10.1073/pnas.0906548107>.
6. Niu X., Bai Y., Du Y., Qi H., Chen Y. Size controllable synthesis of ZSM-5 zeolite and its catalytic performance in the reaction of methanol conversion to aromatics. *Royal Society Open Science*. 2022. Vol. 9, Iss. 3. 211284. <https://doi.org/10.1098/rsos.211284>.

На рис. 4 проілюстровано результат чисельного моделювання просторово-часового розподілу електростатичного потенціалу, створюваного всередині наноструктури накопиченими в ній зарядами. Як видно з розрахункової залежності, електричне поле фактично існує лише всередині шарів, які переважно заповнені зарядженими частинками адсорбату. На межі утворених шарів Al_2O_3 і SiO_2 потенціал електричного поля значно і швидко зменшується.

ВИСНОВКИ

Розроблено математичну модель адсорбції в обмеженому цилінд-

7. Puertolas B., Navarro M.V., Lopez J.M., Murillo R., Mastral A.M., Garcia T. Modelling the heat and mass transfers of propane onto a ZSM-5 zeolite. *Separation Purification Technology*. 2012. Vol. 86. P. 127–136. <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2011.10.036>.
8. Kärger J., Ruthven D.M., Theodorou D.N. Diffusion in nanoporous materials. Hoboken, USA: John Wiley & Sons, 2012.
9. Krishna R. Thermodynamically consistent methodology for estimation of diffusivities of mixtures of guest molecules in microporous materials. *ACS Omega*. 2019. Vol. 4, N 8. P. 13520–13529. <https://doi.org/10.1021/acsomega.9b01873>.
10. Petryk M., Leclerc S., Canet D., Sergienko I., Deineka V., Fraissard J. Competitive diffusion of gases in a zeolite bed: NMR and slice procedure, modelling and parameter identification. *The Journal Physical Chemistry C*. 2015. Vol. 119, N 47. P. 26519–26525. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.5b07974>.
11. Petryk M., Gancarczyk T., Khimich O. Methods of mathematical modeling and identification of complex processes and systems on the basis of high-performance calculations (Neuro- and nanoporous feedback cyber systems, models with sparse structure data, parallel computations). Bielsko-Biala: Wydawnictwo Naukowe Akademii Techniczno-Humanistycznej, 2021. 195 p.
12. Petryk M.R., Khimich A., Petryk M.M., Fraissard J. Experimental and computer simulation studies of dehydration on microporous adsorbent of natural gas used as motor fuel. *Fuel*. 2019. Vol. 239. P. 1324–1330. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2018.10.134>.
13. Хіміч О.М., Петрик М.Р., Михалік Д. М., Бойко І.В., Попов О.В., Сидорук В.А. Методи математичного моделювання та ідентифікації складних процесів і систем на основі високопродуктивних обчислень. Київ: Ін-т кібернетики ім. В.М. Глушкова, 2019. 190 с.
14. Sergienko I.V., Peryk M.R., Fraissard J., Leclerc S. Highly efficient methods of the identification of competitive diffusion parameters in heterogeneous media of nanoporous particles. *Cybernetics and Systems Analysis*. 2015. Vol. 51, N 4. P. 529–546. <https://doi.org/10.1007/s10559-015-9744-7>.
15. Doetsch G. Handbuch der Laplace-transformation: Band I: Theorie der Laplace-transformation. Springer Basel AG, 2013. 581 p.
16. Staines J. The Heaviside operational calculus: The Laplace transform for electrical engineers. California: Amazon, 2013.
17. Ленюк М.П., Петрик М.Р. Інтегральні перетворення Фур'є, Бесселя із спектральним параметром в задачах математичного моделювання масопереносу в неоднорідних середовищах. Київ: Наук. думка, 2000. 372 с.
18. Petryk M.R., Boyko I.V., Khimich O.M., Petryk O.Yu. High-performance methods of modeling the adsorption with feedback in heterogeneous multicomponent nanoporous media. *Cybernetics and Systems Analysis*. 2022. Vol. 58, N 5. P. 787–805. <https://doi.org/10.1007/s10559-022-00512-8>.
19. Petryk M.R., Boyko I.V., Khimich O.M., Petryk M.M. High-performance supercomputer technologies of simulation of nanoporous feedback systems for adsorption gas purification. *Cybernetics and Systems Analysis*. 2020. Vol. 56, N 5. P. 835–847. <https://doi.org/10.1007/s10559-020-00304-y>.
20. Deng H. A Heaviside function-based density representation algorithm for truss-like buckling-induced mechanism design. *J. Numer. Methods Eng.* 2019. Vol. 119. P. 1069–1097.
21. Broas M., Kanninen O., Vuorinen V., Tilli M., Paulasto-Kröckel M. Chemically stable atomic-layer-deposited Al₂O₃ films for processability. *ACS Omega*. 2017. Vol. 7. P. 3390–3398.
22. Arl D., Rogé V., Adjeroud N., Pistillo B.R., Sarr M., Bahlawane N., Lenoble D. SiO₂ thin film growth through a pure atomic layer deposition technique at room temperature. *RSC Adv.* 2020. Vol. 10(31). P. 18073–18081.

M.R. Petryk, I.V. Boyko, O.M. Khimich, V.A. Sydoruk
HIGH-PERFORMANCE METHODS OF MODELING THE NANO-ADSORPTION
AND DIFFUSION WITH FEEDBACK IN HETEROGENEOUS
CYLINDRICAL MULTICOMPONENT NANOPOROUS MEDIA

Abstract. New high-performance analytical methods are developed for modeling the fields of diffused gas concentrations in intra- and interparticle spaces in inhomogeneous cylindrical *n*-component nanoporous media. The proposed approach is based on the Heaviside operational method and Cauchy influence matrices for inhomogeneous adsorption boundary-value problems arising from systems of partial differential equations.

Keywords: multicomponent nanoadsorption and diffusion model, heterogeneous nanoporous media, Heaviside operational method.

Надійшла до редакції 16.05.2023