



М.Р. ПЕТРИК, І.В. БОЙКО, О.М. ХІМІЧ, М.М. ПЕТРИК

УДК 519.6

ВИСОКОПРОДУКТИВНІ СУПЕРКОМП'ЮТЕРНІ ТЕХНОЛОГІЇ МОДЕЛЮВАННЯ ТА ІДЕНТИФІКАЦІЇ СКЛАДНИХ НАНОПОРИСТИХ КІБЕРСИСТЕМ ЗІ ЗВОРОТНИМИ ЗВ'ЯЗКАМИ ДЛЯ n -КОМПОНЕНТНОЇ КОМПЕТИТИВНОЇ АДСОРБЦІЇ

Анотація. Розроблено високопродуктивні суперкомп'ютерні технології обчислень для моделювання та ідентифікації параметрів складних процесів n -компонентної компетитивної адсорбції в нанопористих кіберсистемах зі зворотними зв'язками. Запропоновано ефективне розпаралелювання векторних складових розв'язку моделі з використанням перетворення Лапласа та операційного методу Гевісайда з декомпозицією нелінійної системи з умовами адсорбційної рівноваги типу Ленгмюра. Наведено результати числових експериментів на основі паралельних обчислень з використанням багатоядерних комп'ютерів.

Ключові слова: високопродуктивні паралельні обчислення, нанопористі кіберсистеми зі зворотними зв'язками, компетитивна адсорбція газів, функція адсорбційної рівноваги Ленгмюра, інтегральне перетворення Лапласа, операційний метод Гевісайда.

ВСТУП

Застосування новітніх технологій штучного інтелекту та кіберфізичних систем до керування процесами поглинання шкідливих газових викидів в атмосферу надасть змогу покращити стан довкілля і здоров'я людини, створити інфраструктуру безпечної енергетики і транспорту, сприяючи розв'язанню проблеми глобального потепління [1]. Якість математичних моделей складних процесів компетитивної адсорбції багатьох газів у нанопористих кіберсистемах з урахуванням зворотних впливів нанофізичних факторів кінетики цих процесів, а також високопродуктивних методів побудови їхніх розв'язків з використанням сучасних обчислювальних систем визначає ефективність розв'язання вказаних проблем.

Нині проводяться дослідження щодо створення таких кіберфізичних систем, при цьому в їхню основу покладено математичні моделі складних процесів компетитивної адсорбції газів з урахуванням впливу різних обмежувальних чинників внутрішньої кінетики у нанопористих середовищах [2–5]. Однак, ці моделі здебільшого є монсорбційними і не відображають реальної картини компетитивної адсорбції та дифузії — «змагання» багатьох газів, що взаємодіють між собою. Відсутні подібні строгі математичні моделі цих процесів з урахуванням обмежувальних взаємодій зі зворотними зв'язками для різних компонентів мікро- і макропотоків переносу та високопродуктивні методи побудови їхніх розв'язків.

У продовження досліджень [6–14] у цій праці обґрунтовано та розроблено високопродуктивні методи математичного моделювання компетитивної ад-

© М.Р. Петрик, І.В. Бойко, О.М. Хімич, М.М. Петрик, 2021

сорбції та дифузії багатьох газів у нанопористих кіберсистемах на основі узагальненої нелінійної компетитивної ізотерми Ленгмюра, яка найповніше описує взаємодії зі зворотними зв'язками і впливами та механізми адсорбційної рівноваги. Для моделювання використано високопродуктивні методи інтегрального перетворення Лапласа, операційного числення Гевісайда та декомпозиції складної моделі нанопористої кіберсистеми, еволюція якої визначається n взаємозв'язаними нелінійними умовами рівноваги. Це надало змогу отримати високошвидкісні аналітичні розв'язки, що підвищують якість розпаралелювання обчислень, моделювання та ідентифікації для багатоядерних комп'ютерів.

НЕЛІНІЙНА МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ КОМПЕТИТИВНОЇ АДСОРБЦІЇ n ГАЗІВ НА ОСНОВІ УЗАГАЛЬНЕНОГО РІВНЯННЯ КОМПЕТИТИВНОЇ АДСОРБЦІЙНОЇ РІВНОВАГИ ЛЕНГМЮРА

Вхідний потік багатокомпонентної газової суміші дифундує в макропорах (міжчастинковому просторі) нанопористої системи і в нанопорах частинок (внутрішньочастинковому просторі). У розробленні моделі за основу взято фізичну гіпотезу про наявність у системі адсорбційних взаємодій зі зворотними зв'язками, визначеними умовами компетитивної адсорбційної рівноваги, між молекулами n компонентів адсорбату (двох і більше газів) і активними центрами адсорбції на поверхні фазового розділу в нанопорах частинок. Вказані покомпонентні умови рівноваги визначаються вектор-функцією нелінійної ізотерми типу Ленгмюра, що враховує взаємовпливи усіх складових компонентів адсорбції з урахуванням фізичних припущень [4]. Пропоновану модель, що має вигляд біпористої моделі, розроблено на основі підходів [4, 5, 7]. Вона ґрунтується на таких гіпотезах і припущеннях.

1. Компетитивна адсорбція n газів ($n \geq 2$), що зумовлена дисперсійними та електростатичними силами Джона–Ленарда, включає міжмолекулярну взаємодію та дифузійну різниці компонентів адсорбату в міжчастинковому просторі в нанопорах сферичних частинок. Усі нанопористі частинки (кристаліти) мають однаковий радіус R і є рівномірно упакованими в робочій області каталізатора (рис. 1).

2. Компетитивна адсорбція відбувається в активних центрах на поверхні нанопор [4, 5], що адсорбують у різних співвідношеннях молекули різних компонентів адсорбату.

3. Під час еволюції системи до рівноваги спостерігаються градієнти концентрації різних компонентів адсорбату в макропорах та мікропорах, динаміка утворення яких визначається кількісним і якісним складом потоку дифундованого адсорбату.

4. Здійснюється взаємовплив ефектів асиметричності. Ці ефекти було виявлено і досліджено для двокомпонентної компетитивної дифузії М. Петриком, Ж. Фресаром та І. Сергієнком [8, 9]. Вони пов'язані з дифузійною та адсорбційною в нанопорах частинок двох компонентів адсорбтиву з різними властивостями, наприклад i -го компонента за наявності j -го і навпаки, коли $i \neq j$. Зокрема, одержано теоретичні та експериментальні результати дослідження окремих несиметричних потоків компетитивної адсорбції типу «бензен за наявності гексану» і навпа-

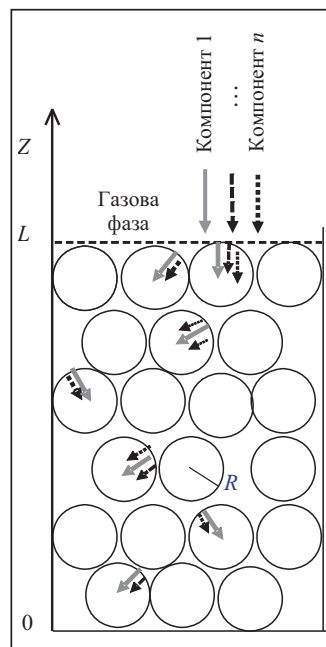


Рис. 1. Схематизація робочої області n -компонентної компетитивної адсорбції

ки — «гексан за наявності бензену» в рівних пропорціях у нанопористих цеоліт-каталізаторах [9].

В остаточному вигляді кінетику компетитивної адсорбції n газів ($n \geq 2$) для нанопористих систем з урахуванням нелінійної функції адсорбційної рівноваги та вказаних фізичних гіпотез можна описати такою системою нелінійних рівнянь у частинних похідних [11, 12]:

$$\frac{\partial C_j(t, Z)}{\partial t} = \frac{D_{\text{inter}_j}}{l^2} \frac{\partial^2 C_j}{\partial Z^2} - e_{\text{inter}_j} \frac{D_{\text{intra}_j}}{R^2} \left(\frac{\partial Q_j}{\partial X} \right)_{X=1}, \quad (1)$$

$$\frac{\partial Q_j(t, X, Z)}{\partial t} = \frac{D_{\text{intra}_j}}{R^2} \left(\frac{\partial^2 Q_j}{\partial X^2} + \frac{2}{X} \frac{\partial Q_j}{\partial X} \right) \quad (2)$$

з початковими умовами

$$C_j(t, Z)|_{t=0} = 0, \quad Q_j(t, X, Z)|_{t=0} = 0; \quad X \in (0, 1), \quad j = \overline{1, n}, \quad (3)$$

крайовими умовами за координатою X — радіусом частинки

$$\left. \frac{\partial}{\partial X} Q_j(t, X, Z) \right|_{X=0} = 0, \quad (4)$$

умовами компетитивної адсорбційної рівноваги Ленгмюра на межі $X = 1$

$$Q_j(t, X = 1, Z)|_{X=1} = \frac{K_j C_j(t, Z)}{1 + K_1 C_1(t, Z) + K_2 C_2(t, Z) + \dots + K_n C_n(t, Z)}, \quad j = \overline{1, n}, \quad (5)$$

крайовими умовами за координатою Z

$$C_j(t, Z)|_{Z=1} = C_j^{\text{in}}, \quad \left. \frac{\partial}{\partial Z} C_j(t, Z) \right|_{Z=0} = 0. \quad (6)$$

Тут $C_j, Q_j, j = \overline{1, n}$, — поточні значення концентрації дифундованих компонентів адсорбтиву в міжчастинковому просторі та мікропорах частинок, $C_{\infty j}, Q_{\infty j}$ — відповідні їм рівноважні значення концентрації компонентів адсорбтиву, n — сумарна кількість дифундованих компонентів адсорбтиву, $\tilde{K}_j = \frac{Q_{\infty j}}{C_{\infty j}}$ — константа адсорбції j -го компонента адсорбтиву, $K_j = 1/\tilde{K}_j, j = \overline{1, n}$, $\varepsilon_{\text{inter}}$ — макропористість середовища, $e_{\text{inter}_j} = \frac{\varepsilon_{\text{inter}} C_j}{\varepsilon_{\text{inter}} C_j + (1 - \varepsilon_{\text{inter}}) Q_j} \approx \frac{\varepsilon_{\text{inter}}}{(1 - \varepsilon_{\text{inter}}) \tilde{K}_j}, e_{\text{intra}_j} = 1 - e_{\text{inter}_j}, j = \overline{1, n}$.

ДЕКОМПОЗИЦІЯ НЕЛІНІЙНОЇ СИСТЕМИ (1)–(6)

Шляхом розвинення нелінійного виразу правих частин (5), що представляють функції багатокомпонентної компетитивної адсорбційної рівноваги Ленгмюра для j -го компонента адсорбату, в ряд Маклорена в околі точки нульових концентрацій усіх дифундованих компонентів адсорбату $C_j, j = \overline{1, n}$, обмежуючись другим порядком точності, приведемо умови рівноваги (5) до вигляду [11]:

$$Q_j(t, X = 1, Z)|_{X=1} = K_j C_j(t, Z) - K_1^2 \sum_{j_1=1}^n \frac{K_{j_1} K_j}{K_1^2} C_{j_1}(t, Z) C_j(t, Z), \quad j = \overline{1, n}. \quad (7)$$

За припущення, що $K_1 = \max \{K_j, K_j < 1\}_{j=1}^n$ та визначивши $\varepsilon = K_1^2 \ll 1$ як малий параметр, розв'язок нелінійної крайової задачі (1)–(6) з урахуванням умо-

ви (7) знайдемо у вигляді асимптотичних сум [12]:

$$C_j(t, Z) = C_{j_0}(t, Z) + \varepsilon C_{j_1}(t, Z) + \varepsilon^2 C_{j_2}(t, Z) + \dots, \quad (8)$$

$$Q_j(t, X, Z) = Q_{j_0}(t, X, Z) + \varepsilon Q_{j_1}(t, X, Z) + \varepsilon^2 Q_{j_2}(t, X, Z) + \dots, \quad j = \overline{1, n}. \quad (9)$$

Підставимо (8), (9) у рівняння (1)–(6). Тоді маємо, що початкова нелінійна крайова задача (1)–(6) з урахуванням (7) і заміни $N_j = X \cdot Q_j$ розпаралелюється на два типи лінеаризованих задач [10].

Задача A_{j_0} , $j = \overline{1, n}$: знайти в області $D = \{(t, X, Z) : t > 0, X \in (0, 1), Z \in (0, 1)\}$ розв'язок системи рівнянь у частинних похідних:

$$\frac{\partial}{\partial t} C_{j_0}(t, Z) = \frac{D_{\text{inter}_j}}{l^2} \frac{\partial^2 C_{j_0}}{\partial Z^2} - e_{\text{inter}_j} \frac{D_{\text{intra}_j}}{R^2} \left(\frac{\partial N_{j_0}}{\partial X} - N_{j_0} \right)_{X=1}, \quad (10)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} N_{j_0}(t, X, Z) = \frac{D_{\text{intra}_j}}{R^2} \frac{\partial^2 N_{j_0}}{\partial X^2}, \quad (11)$$

з початковими і крайовими умовами

$$C_{j_0}(t, Z)|_{t=0} = 0, \quad N_{j_0}(t, X, Z)|_{t=0} = 0; \quad X \in (0, 1), \quad j = \overline{1, n}, \quad (12)$$

$$N_{j_0}(t, X, Z)|_{X=0} = 0, \quad N_{j_0}(t, X, Z)|_{X=1} = K_j C_{j_0}(t, Z), \quad j = \overline{1, n}, \quad (13)$$

$$C_{j_0}(t, Z)|_{Z=1} = 1, \quad \frac{\partial}{\partial Z} C_{j_0}(t, Z) \Big|_{Z=0} = 0. \quad (14)$$

Задача A_m , $m = \overline{1, \infty}$: побудувати в області D обмежений розв'язок системи рівнянь

$$\frac{\partial C_{j_m}}{\partial t}(t, Z) = \frac{D_{\text{inter}_j}}{l^2} \frac{\partial^2 C_{j_m}}{\partial Z^2} - e_{\text{inter}_j} \frac{D_{\text{intra}_j}}{R^2} \left(\frac{\partial N_{j_m}}{\partial X} - N_{j_m} \right)_{X=1}, \quad (15)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} N_{j_m}(t, X, Z) = \frac{D_{\text{intra}_j}}{R^2} \frac{\partial^2 N_{j_m}}{\partial X^2} \quad (16)$$

з початковими і крайовими умовами

$$C_{j_m}(t, Z)|_{t=0} = 0, \quad N_{j_m}(t, X, Z)|_{t=0} = 0, \quad j = \overline{1, n}, \quad (17)$$

$$N_{j_m}(t, X, Z)|_{X=0} = 0, \quad N_{j_m}(t, X, Z)|_{X=1} = K_j C_{j_m}(t, Z) - F_{j_m}(t, Z), \quad j = \overline{1, n}, \quad (18)$$

$$F_{j_m}(t, Z) = \sum_{s=0}^{m-1} \sum_{k=1}^n \frac{K_j K_k}{K_1^2} C_{j_s}(t, Z) C_{k_{m-1-s}}(t, Z), \quad j = \overline{1, n},$$

$$C_{j_m}(t, Z)|_{Z=1} = 0, \quad \frac{\partial}{\partial Z} C_{j_m}(t, Z) \Big|_{Z=0} = 0. \quad (19)$$

МЕТОДОЛОГІЯ ПОБУДОВИ АНАЛІТИЧНОГО РОЗВ'ЯЗКУ СИСТЕМИ

Для побудови аналітичних розв'язків крайових задач A_{j_0} , A_m , $m = \overline{1, \infty}$, $j = \overline{1, n}$, скористаємось операційним методом Гевісайда [15]. За припущення, що функції C_{j_m} і Q_{j_m} ($N_{0_m} = X \cdot Q_{j_m}$) є оригіналами за Лапласом, отримуємо такі задачі в зображеннях за Лапласом:

Задача A_0^* : побудувати в області $D^* = \{(X, Z) : X \in (0, 1), Z \in (0, 1)\}$ розв'язок системи рівнянь у частинних похідних

$$\frac{\partial^2 C_{j_0}^*}{\partial Z^2} = \frac{l^2}{D_{\text{inter}_j}} p C_{j_0}^* + \frac{3}{e_{\text{inter}_j}} \frac{l^2}{R^2} \frac{D_{\text{intra}_j}}{D_{\text{inter}_j}} \left(\frac{\partial N_{j_0}^*}{\partial X} - N_{j_0}^* \right) \Big|_{X=1}, \quad (20)$$

$$\frac{\partial^2 N_{j_0}^*}{\partial X^2} - \frac{R^2}{D_{\text{intra}_j}} p N_{j_0}^* = 0, \quad (21)$$

з крайовими умовами

$$N_{j_0}^*(p, X, Z)|_{X=0} = 0, \quad N_{j_0}^*(p, X, Z)|_{X=1} = K_j C_{j_0}^*(p, Z), \quad j = \overline{1, n}, \quad (22)$$

$$C_{j_0}^*(p, Z)|_{Z=1} = C_j^{\text{in}} / p, \quad \frac{\partial}{\partial Z} C_{j_0}^*(p, Z) \Big|_{Z=0} = 0. \quad (23)$$

Задача A_m^* , $m = \overline{1, \infty}$: побудувати в області D^* розв'язок системи

$$\frac{\partial^2 C_{j_m}^*}{\partial Z^2} = \frac{l^2}{D_{\text{inter}_j}} p C_{j_m}^* + \frac{3}{e_{\text{inter}_j}} \frac{l^2}{R^2} \frac{D_{\text{intra}_j}}{D_{\text{inter}_j}} \left(\frac{\partial N_{j_m}^*}{\partial X} - N_{j_m}^* \right) \Big|_{X=1}, \quad (24)$$

$$\frac{\partial^2 N_{j_m}^*}{\partial X^2} - \frac{R^2}{D_{\text{intra}_j}} p N_{j_m}^* = 0 \quad (25)$$

з крайовими умовами

$$N_{j_m}^*(p, X, Z)|_{X=0} = 0, \quad N_{j_m}^*(p, X, Z)|_{X=1} = K_j C_{j_m}^*(p, Z) - F_{j_m}^*(p, Z), \quad j = \overline{1, n}, \quad (26)$$

$$C_{j_m}^*(p, Z)|_{Z=1} = 0, \quad \frac{\partial}{\partial Z} C_{j_m}^*(p, Z)|_{Z=0} = 0. \quad (27)$$

Тут $C_{j_m}^*(p, Z) = \int_0^\infty C_{j_m}(t, Z) e^{-pt} dt$, $N_{j_m}^*(p, X, Z) = \int_0^\infty N_{j_m}(t, X, Z) e^{-pt} dt$, p — комплекснозначний параметр інтегрального перетворення Лапласа.

Розв'язок задачі A_0 : розв'язок задачі (20)–(23) є таким [12]:

$$C_{j_0}^*(p, Z) = C_j^{\text{in}} \frac{1}{p} \frac{\text{ch}[\gamma_j(p)Z]}{\text{ch}[\gamma_j(p)]} = C_j^{\text{in}} \frac{1}{p} \frac{\cos[\gamma_j(p)Z]}{\cos[\gamma_j(p)]}, \quad (28)$$

$$N_{j_0}^*(p, X, Z) = C_{j_0}^*(p, Z) \frac{\sin(\beta X)}{\sin(\beta)} = \frac{C_j^{\text{in}}}{p} \frac{\text{ch}[\gamma_j(p)Z]}{\text{ch}[\gamma_j(p)]} \frac{\sin(\beta X)}{\sin(\beta)}, \quad i\beta = R \sqrt{\frac{p}{D_{\text{intra}_j}}}. \quad (29)$$

Тут $\gamma_j^2(p) = \Gamma_j K_j \left(\frac{e_{\text{inter}_j}}{3K_j} \frac{R^2}{D_{\text{intra}_j}} p + R \sqrt{\frac{p}{D_{\text{intra}_j}}} \text{cth} \left(R \sqrt{\frac{p}{D_{\text{intra}_j}}} \right) - 1 \right)$, $\Gamma_j = \frac{3}{e_{\text{inter}_j}} \times \frac{l^2}{R^2} \frac{D_{\text{intra}_j}}{D_{\text{inter}_j}}$.

Використовуючи теорему Гевісайда про розвинення раціонального комплексного виразу у збіжний ряд за коренями знаменника та роблячи заміну $p = -D_{\text{intra}_j} \beta_j^2 / R^2$, отримуємо формули для оберненого переходу від зображення Лапласа до оригіналу в (28) [12, 15]:

$$C_{j_0}(t, Z) = C_j^{\text{in}} \left(1 + \sum_{s=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\text{ch}[\gamma_j(p)Z] \exp(p_k s t)}{p_{ks} \frac{d}{dp} \text{ch}[\gamma_j(p)] \Big|_{p=p_{ks} = -\frac{D_{\text{intra}_j} \beta_{ks}^2}{R^2}}} \right), \quad (30)$$

$$N_{j_0}(t, X, Z) = 1 + \sum_{s=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\sin(\beta X) \operatorname{ch}[\gamma_j(p)Z] \exp(p_{ks}t)}{p_{ks} \sin(\beta) \frac{d}{dp} \operatorname{ch}[\gamma_j(p)]} \Big|_{p=p_{ks} = -\frac{D_{\text{intra}_j} \beta_{ks}^2}{R^2}}, \quad (31)$$

де β_{ks}^j — спектри різних додатних коренів трансцендентних рівнянь

$$\beta^j \operatorname{ctg}(\beta^j) - \frac{e_{\text{inter}_j}}{3K_j} (\beta^j)^2 = 1 - \frac{1}{\Gamma_j K_j} \left(\frac{2k-1}{2} \pi \right)^2, \quad k = \overline{1, \infty}. \quad (32)$$

Після низки перетворень у (30), (31) отримуємо аналітичні вирази функцій $C_{j_0}(t, Z)$, $Q_{j_0}(t, X, Z)$, що описують лінійні складові розподілів концентрацій j -го компонента адсорбату у міжчастинковому та внутрішньочастинковому просторах:

$$C_{j_0}(t, Z) = C_j^{\text{in}} \left(1 + 2 \left(\frac{R}{l} \right)^2 \frac{D_{\text{inter}_j}}{D_{\text{intra}_j}} \sum_{s=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(2k-1)\pi \cos\left(\frac{2k-1}{2}\pi Z\right) \exp\left(-\frac{D_{\text{intra}_j}}{R^2} (\beta_{ks}^j)^2 t\right)}{(-1)^s (\beta_{ks}^j)^2 \left[\frac{3K_j}{e_{\text{inter}_j}} \left(\frac{1}{\sin^2(\beta_{ks}^j)} - \frac{\operatorname{ctg}(\beta_{ks}^j)}{\beta_{ks}^j} \right) + 2 \right]} \right), \quad (33)$$

$$Q_{j_0}(t, Z) = C_j^{\text{in}} \times \left(1 + 2 \left(\frac{R}{l} \right)^2 \frac{D_{\text{inter}_j}}{D_{\text{intra}_j}} \sum_{s=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(2k-1)\pi \sin(\beta_{ks}^j X) \cos\left(\frac{2k-1}{2}\pi Z\right) \exp\left(-\frac{D_{\text{intra}_j}}{R^2} \beta_{ks}^j t\right)}{(-1)^n \beta_{ks}^j X \sin(\beta_{ks}^j) \left[\frac{3K_j}{e_{\text{inter}_j}} \left(\frac{1}{\sin^2(\beta_{ks}^j)} - \frac{\operatorname{ctg}(\beta_{ks}^j)}{\beta_{ks}^j} \right) + 2 \right]} \right). \quad (34)$$

Розв'язок задач A_m . Розв'язок задачі (25), (26) є таким [12]:

$$N_{j_m}^*(p, X, Z) = (K_j C_{j_m}^*(p, Z) - F_{j_m}^*(p, Z)) \frac{\operatorname{sh}\left(R \sqrt{\frac{p}{D_{\text{intra}_j}}} X\right)}{\operatorname{sh}\left(R \sqrt{\frac{p}{D_{\text{intra}_j}}}\right)}, \quad j = \overline{1, n}. \quad (35)$$

У результаті обчислення похідної від (35) по X та підстановки $N_{j_m}^*|_{X=1}$ і $\frac{\partial N_{j_m}^*}{\partial X}|_{X=1}$ у рівняння (24) отримаємо

$$\frac{d^2 C_{j_m}^*}{dZ^2} - \gamma_j^2(p) C_{j_m}^* = -\Phi_{j_m}^*(p, Z), \quad (36)$$

де $\Phi_{j_m}^*(p, Z) = \Gamma_j \left(R \sqrt{\frac{p}{D_{\text{intra}_i}}} \operatorname{cth}\left(R \sqrt{\frac{p}{D_{\text{intra}_i}}}\right) - 1 \right) F_{j_m}^*(p, Z)$, $m = \overline{1, \infty}$.

Розв'язком неоднорідної крайової задачі (36), (27) є

$$C_{j_m}^*(p, X, Z) = -\Gamma_j \int_0^1 (\mathcal{H}_j^*(p, Z, \xi) - \mathcal{K}_j^*(p, Z, \xi)) F_{j_m}^*(p, \xi) d\xi. \quad (37)$$

де $\mathcal{K}_j^*(p, Z, \xi)$, $\mathcal{H}_j^*(p, Z, \xi)$ — фундаментальні функції впливу Коші, що мають такий вигляд [12, 16]:

$$\mathcal{K}_j^*(p, Z, \xi) = -\frac{1}{\gamma_j} \begin{cases} \frac{\text{sh}(\gamma_j(1-\xi)) \cdot \text{ch}(\gamma_j Z)}{\text{ch}(\gamma_j)}, & 0 < Z < \xi < 1, \\ \frac{\text{sh}(\gamma_j(1-Z)) \cdot \text{ch}(\gamma_j \xi)}{\text{ch}(\gamma_j)}, & 0 < \xi < Z < 1, \end{cases} \quad (38)$$

$$\mathcal{H}_j^*(p, Z, \xi) = -\frac{R \sqrt{\frac{p}{D_{\text{intra}_i}}} \text{cth}\left(R \sqrt{\frac{p}{D_{\text{intra}_i}}}\right)}{\gamma_j} \mathcal{K}_j^*(p, Z, \xi). \quad (39)$$

Перехід до оригіналів $C_{j_m}(t, Z)$, $N_{j_m}(t, X, Z)$ здійснюємо за формулами [15]

$$C_{j_m}(t, X, Z) = -\Gamma_j \int_0^1 L^{-1}[\mathcal{H}_j^*(p, Z, \xi) - \mathcal{K}_j^*(p, Z, \xi)] * F_{j_m}(t, \xi) d\xi, \quad (40)$$

$$Q_{j_m}(p, X, Z) = L^{-1}[K_j C_{j_m}^*(p, Z) - F_{j_m}^*(p, Z)] * L^{-1} \left[\frac{\text{sh}\left(R \sqrt{\frac{p}{D_{\text{intra}_j}} X}\right)}{X \text{sh}\left(R \sqrt{\frac{p}{D_{\text{intra}_j}}}\right)} \right], \quad (41)$$

де $L^{-1}[\dots]$ — символ оператора оберненого інтегрального перетворення Лапласа, $*$ — оператор згортки. В остаточному вигляді після обчислень компонентів оригіналів отримуємо

$$C_{j_m}(t, Z) = -\frac{3}{e_{\text{inter}_j}} \frac{l^2}{R^2} \frac{D_{\text{intra}_j}}{D_{\text{inter}_j}} \int_0^t \left(\int_Z^1 (\mathcal{H}_j^-(t-\tau, Z, \xi) - \mathcal{K}_j^-(t-\tau, Z, \xi)) F_{j_m}(t, \xi) d\xi + \int_0^Z (\mathcal{H}_j^+(t-\tau, Z, \xi) - \mathcal{K}_j^+(t-\tau, Z, \xi)) F_{j_m}(\tau, \xi) d\xi \right) d\tau, \quad j = \overline{1, n}, \quad (42)$$

$$Q_{j_m}(t, X, Z) = \int_0^t \left(K_j C_{j_m}(t-\tau, Z) - \sum_{k=1}^n \sum_{i=0}^{m-1} \frac{K_j K_k}{K_1^2} C_{j_s}(t-\tau, Z) C_{k_{m-1-s}}(t-\tau, Z) \right) \times \left(2 \frac{D_{\text{intra}_j}}{R^2} \sum_{k_2=0}^{\infty} \frac{\pi k_2 \cdot \sin(k_2 \pi X)}{(-1)^{k_2+1} X} \exp\left(-\frac{D_{\text{intra}_j}}{R^2} k_2^2 \pi^2 \tau\right) \right) d\tau, \quad j = \overline{1, n}, \quad (43)$$

де $\mathcal{H}_j^-(t-\tau, Z, \xi)$, $\mathcal{K}_j^-(t-\tau, Z, \xi)$, $\mathcal{H}_j^+(t-\tau, Z, \xi)$, $\mathcal{K}_j^+(t-\tau, Z, \xi)$ — компоненти функції впливу Коші $\mathcal{H}_j(t, Z, \xi)$, $\mathcal{K}_j(t, Z, \xi)$, алгоритм обчислення яких наведено нижче, $p_{k_2}^j = -D_{\text{intra}_j} \frac{\pi^2 k_2^2}{R^2}$, $k_2 = \overline{0, \infty}$, — корені рівняння $\text{sh}\left(R \sqrt{\frac{p}{D_{\text{intra}_j}}}\right) = 0$.

Обчислення оригіналів складових функцій впливу. Застосовуючи до складових функцій впливу (38), (39) теорему Гевісайда, отримуємо [15]

$$L^{-1} \left[\frac{f_j^h(p)}{\gamma_j(p) \operatorname{sh}[\gamma_j(p)] \operatorname{ch}[\gamma_j(p)]} \right] = \sum_{s=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{f_j^h(\beta_{ks}^j) \exp\left(\frac{D_{\text{intra}_j}}{R^2} (\beta_{ks}^j)^2 t\right)}{\omega_j^1(\beta_{ks}^j)} +$$

$$+ \sum_{s_1=1}^{\infty} \frac{f_j^h(\mu_{s_1}^j) \exp\left(\frac{D_{\text{intra}_j}}{R^2} (\mu_{s_1}^j)^2 t\right)}{\nu_j^2(\mu_{s_1}^j)} + \sum_{k_1=1}^{\infty} \frac{f_j^h(\eta_{k_1}^j) \exp\left(\frac{D_{\text{intra}_j}}{R^2} (\eta_{k_1}^j)^2 t\right)}{\omega_j^2(\eta_{k_1}^j)}, \quad (44)$$

де f_j^h , $h=1, 4$, означають відповідні чисельники складових $\mathcal{H}_j^-(t-\tau, Z, \xi)$, $\mathcal{H}_j^+(t-\tau, Z, \xi)$,

$$\omega_j^1(\beta_{ks}^j) = -\gamma_j(\beta_{ks}^j) \sin(\beta_{ks}^j) \frac{(-1)^k \beta_{ks}^{j2}}{2k-1} \left[\frac{3K_j}{e_{\text{inter}_j}} \left(\frac{1}{\sin^2(\beta_{ks}^j)} - \frac{\operatorname{ctg}(\beta_{ks}^j)}{\beta_{ks}^j} \right) + 2 \right],$$

$$\nu_j^1(\mu_{s_1}^j) = \gamma_j(\mu_{s_1}^j) \cos[\gamma_j(\mu_{s_1}^j)] (-1)^{s_1} \frac{R^2}{2D_{\text{intra}_j} \mu_{s_1}^j} \Big|_{\mu_{s_1}^j = \pi s_1},$$

$$\omega_j^2(\eta_{k_1}^j) = -\frac{l}{2R} \sqrt{\frac{3K_j}{e_{\text{inter}_j}} \frac{D_{\text{intra}_j}}{D_{\text{inter}_j}}} \frac{\operatorname{ctg}(\eta_{k_1}^j) - \frac{1}{\sin^2 \eta_{k_1}^j} + \frac{2e_{\text{inter}_j}}{3}}{\sqrt{\frac{e_{\text{inter}_j}}{3K_j} + \frac{\operatorname{ctg}(\eta_{k_1}^j)}{\eta_{k_1}^j} - \frac{1}{(\eta_{k_1}^j)^2}}} \sin(\eta_{k_1}^j) \cos[\gamma_j(\eta_{k_1}^j)],$$

$\{\eta_{k_2}^j\}_{k_2=1, \infty}^{j=1, 3}$ — множина додатних коренів рівняння $\frac{e_{\text{inter}_j}}{3K_j} (\mu^j)^2 - \mu^j \operatorname{ctg}(\mu^j) + 1 = 0$.

У результаті одержуємо вирази оригіналів [12, 15]

$$\mathcal{H}_j^-(t, Z, \xi) = \sum_{s=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\phi_j(\beta_{ks}^j, 1-\xi, Z) \exp\left(\frac{D_{\text{intra}_j}}{R^2} (\beta_{ks}^j)^2 t\right)}{\omega_j^1(\beta_{ks}^j) / \beta_{ks}^j} +$$

$$+ \sum_{s_1=1}^{\infty} \frac{\phi_j(\mu_{s_1}^j, 1-\xi, Z) \exp\left(\frac{D_{\text{intra}_j}}{R^2} (\mu_{s_1}^j)^2 t\right)}{\nu_j^2(\mu_{s_1}^j) / \mu_{s_1}^j} + \sum_{k_1=1}^{\infty} \frac{\phi_j(\eta_{k_1}^j, 1-\xi, Z) \exp\left(\frac{D_{\text{intra}_j}}{R^2} (\eta_{k_1}^j)^2 t\right)}{\omega_j^2(\eta_{k_1}^j) \eta_{k_1}^j},$$

$$\mathcal{H}_j^+(t, Z, \xi) = \sum_{s=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\phi_j(\beta_{ks}^j, 1-Z, \xi) \exp\left(\frac{D_{\text{intra}_j}}{R^2} (\beta_{ks}^j)^2 t\right)}{\omega_j^1(\beta_{ks}^j) / \beta_{ks}^j} +$$

$$+ \sum_{s_1=1}^{\infty} \frac{\phi_j(\mu_{s_1}^j, 1-Z, \xi) \exp\left(\frac{D_{\text{intra}_j}}{R^2} (\mu_{s_1}^j)^2 t\right)}{\nu_j^2(\mu_{s_1}^j) / \mu_{s_1}^j} + \sum_{k_1=1}^{\infty} \frac{\phi_j(\eta_{k_1}^j, 1-Z, \xi) \exp\left(\frac{D_{\text{intra}_j}}{R^2} (\eta_{k_1}^j)^2 t\right)}{\omega_j^2(\eta_{k_1}^j) / \eta_{k_1}^j},$$

$$\begin{aligned} \mathcal{K}_j^-(t, Z, \xi) &= -\sum_{s=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\sigma_j(\beta_{ks}^j, 1-\xi, Z) \exp\left(-\frac{D_{\text{intra}_j}}{R^2} (\beta_{ks}^j)^2 t\right)}{\tilde{\omega}_j^1(\beta_{ks}^j)} \\ &\quad - \sum_{k_1=1}^{\infty} \frac{\sigma_j(\eta_{k_1}^j, 1-\xi, Z) \exp\left(-\frac{D_{\text{intra}_j}}{R^2} (\eta_{k_1}^j)^2 t\right)}{\tilde{\omega}_j^2(\eta_{k_1}^j)}, \\ \mathcal{K}_j^+(t, Z, \xi) &= -\sum_{s=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\sigma_j(\beta_{ks}^j, 1-Z, \xi) \exp\left(-\frac{D_{\text{intra}_j}}{R^2} (\beta_{ks}^j)^2 t\right)}{\tilde{\omega}_j^1(\beta_{ks}^j)} \\ &\quad - \sum_{k_1=1}^{\infty} \frac{\sigma_j(\eta_{k_1}^j, 1-Z, \xi) \exp\left(-\frac{D_{\text{intra}_j}}{R^2} (\eta_{k_1}^j)^2 t\right)}{\tilde{\omega}_j^2(\eta_{k_1}^j)}, \end{aligned}$$

де

$$\begin{aligned} \phi_j(x_1, x_2, x_3) &= \cos(x_1) \sin(\gamma_j(x_1)x_2) \cos(\gamma_j(x_1)x_3), \\ \sigma_j(x_1, x_2, x_3) &= \sin(\gamma_j(x_1)x_2) \cos(\gamma_j(x_1)x_3), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \tilde{\omega}_j^1(\beta_{ks}^j) &\equiv i\gamma_j(\beta_{ks}^j) \frac{(-1)^k \beta_{ks}^{j2}}{2k-1} \left[\frac{3K_j}{e_{\text{inter}_j}} \left(\frac{1}{\sin^2(\beta_{ks}^j)} - \frac{\text{ctg}(\beta_{ks}^j)}{\beta_{ks}^j} \right) + 2 \right], \\ \tilde{\omega}_j^2(\eta_{k_1}^j) &= i \frac{l}{2R} \sqrt{\frac{3K_j}{e_{\text{inter}_j}} \frac{D_{\text{intra}_j}}{D_{\text{inter}_j}}} \cdot \frac{\frac{\text{ctg}(\eta_{k_1}^j)}{\eta_{k_1}^j} - \frac{1}{\sin^2 \eta_{k_1}^j} + \frac{2e_{\text{inter}_j}}{3}}{\sqrt{\frac{e_{\text{inter}_j}}{3K_j} + \frac{\text{ctg}(\eta_{k_1}^j)}{\eta_{k_1}^j} - \frac{1}{(\eta_{k_1}^j)^2}}} \cos[\gamma_j(\eta_{k_1}^j)]. \end{aligned}$$

АЛГОРИТМИ ПАРАЛЕЛЬНИХ ОБЧИСЛЕНЬ, МОДЕЛЮВАННЯ ТА АНАЛІЗ

Отримані у вигляді вектор-функцій розмірністю $2n \times 2M$ розв'язки (30), (31), (42), (43) компетитивної моделі кіберсистеми надають змогу з достатньою ефективністю розпаралелювати обчислювальний процес. Тут M — максимальна кількість апроксимаційних елементів нелінійних складових розв'язку. Для реальних систем компетитивної адсорбції з сумішю газів у декілька десятків компонентів спостерігатиметься суттєвий вигреш розпаралелювання, де швидкість паралелізму є пропорційною $2n \times 2M$ порівняно з монопроцесом обчислення. Розроблені алгоритми паралельних обчислень реалізовано у вигляді програмного забезпечення в Microsoft Visual Studio C++ 2019 за допомогою бібліотеки паралельних шаблонів (PPL) [17]. З використанням цього програмного забезпечення виконано моделювання системи.

Загальну схему алгоритму розпаралелювання побудованих векторних розв'язків моделі(1)–(6) у вигляді діаграми діяльності UML наведено на рис. 2.

Для реалізації паралельних обчислень на основі запропонованої математичної моделі використано обчислювальні шаблони класу `concurrent_vector` PPL та алгоритми `concurrency::parallel_invoke` і `concurrency::parallel_for_each`, фрагменти імплементації яких в програмному коді наведено нижче.

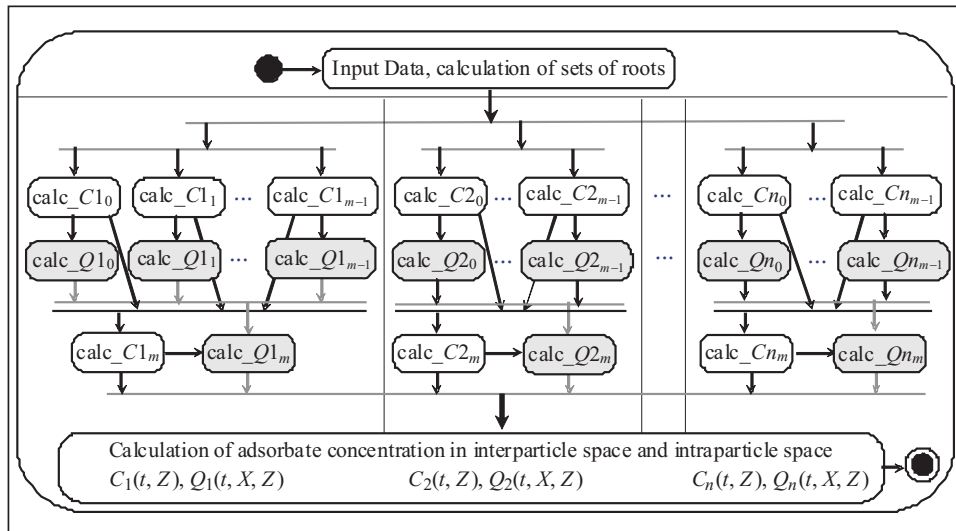


Рис. 2. UML-діаграма діяльності паралельного обчислювального процесу для моделі компетитивної адсорбції (1)–(6)

Обчислювальні шаблони PPL:

```
vector<float> a_t; // vector of time values
vector<float> a_Z; // vector of particle position values in nanolayer
vector<float> a_X; // vector of values of dimensionless radius of nanoporous
```

Окрім класи заголовків та імена об'єктів предметної області мають такий опис:

```
Macro_Pores_Concentration oC1, oC2; // distribution of concentrations of
components
// (1,2) in interparticle space
Nano_Pores_Concentration oQ1, oQ2; // distribution of concentrations of
components
// (1,2) in intraparticle space
```

Паралельні структури даних на основі класу `concurrent_vector` PPL, що використовується в алгоритмах паралельних обчислень:

```
concurrent_vector<Macro_Pores_Concentration> v_cZ;
concurrent_vector<tuple<int, concurrent_vector
<Macro_Pores_Concentration_C> > > v_c_t_Z;
concurrent_vector<concurrent_vector<Macro_Pores_Concentration> >,
concurrent_vector<Nano_Pores_Concentration> > > mass_flow;
```

Блок паралельних обчислень розподілу концентрацій компетитивної адсорбції (на прикладі компонента 1 у міжчастинковому просторі (interparticle space) у коді C++/ PPL Microsoft VS 2019:

```
parallel_for_each (begin(a_t), end(a_t),
[&] (int n, float t){
    parallel_for_each (begin(a_Z), end(a_Z), [&] (float Z){
        oC1.Computing_C1 (n, t, Z);
        v_c_Z.push_back (oC1);
    });
    v_c_t_Z.push_back (make_tuple (n, v_c_Z.));
});
```

Фрагмент блоку паралельних обчислень розподілу концентрацій компетитивної адсорбції (на прикладі компонента 1 у внутрішньочастинковому просторі (intraparticle space)):

```

parallel_for_each (begin(a_t), end(a_t), [&] (int n, float t) {
    parallel_for_each (begin(aZ), end(aZ), [&] (float Z){
        parallel_for_each (begin(aX), end(aX), [&] (float X){
            oQ1.Computing_Q1 (n, t, Z, X);
            v_Q_X.push_back (oQ1);
        });
        v_Q_Z.push_back (v_Q_X);
    });
    v_c_t_Z.push_back (make_tuple (n, v_Q_Z.));
});

```

Ідентифікатор з префіксом `calc1_`, наведений на діаграмі та у фрагментах програмного коду, використовується для реалізації паралельних рівнів обчислень компонентів розв'язку моделі. Обчислення з використанням бібліотеки PPL Visual Studio Microsoft C 2019 проведено на 64-ядерному університетському (ГНТУ ім. І. Пулюя) обчислювальному кластері зі спільною пам'яттю.

МОДЕЛЮВАННЯ ТА АНАЛІЗ

Моделювання компетитивної адсорбції сумішей газів виконано з використанням типових геометричних параметрів адсорбційної колони: $L = 0.3$, $R = 0.1$. Фактично це відповідає граничним умовам для $z \rightarrow L$, $x \rightarrow R$. Фізичні параметри газів, що використовувались у безпосередніх розрахунках та моделюванні, взято з [5, 6].

На рис. 3, *a*, *б*, *в* наведено залежності концентрацій трьох компонентів адсорбату (метану, етану та пропану) у міжчастинковому просторі, розраховані для різних значень їхніх масових часток у вхідній суміші за нормальних умов ($T = 300$ K). Першою розраховано залежність (рис. 3, *a*), що є близькою до компетитивної адсорбції основних складових природного газу. Як видно з наведених залежностей, концентраційні криві для метану мало змінюються у випадку зміни масових часток газів у суміші (рис. 3, *a*, *б*). Лише за значного зменшення масової частки метану (рис. 3, *в*) залежність $C_1(t)/C_0$ частково деформується, проте концентраційний розподіл набуває рівноважного стану фактично в той самий момент часу ($t \sim 1300$ с), що і залежності на рис. 3, *a*, *б*.

Зовсім інакше відбувається адсорбція етану та пропану. Попри те, що у випадку малих масових часток цих газів їхня адсорбція відбувається так само, як і адсорбція метану (див. рис. 3, *a*), а при збільшенні масових часток етану та пропану їхня адсорбція досягає насичення фактично за такий самий проміжок часу, залежності $C_2(t)/C_0$ і $C_3(t)/C_0$ значно змінюються — утворюються додаткові максимуми та зближуються один з одним. При цьому спостерігаються випадки, коли в межах певних інтервалів часу адсорбція пропану в суміші за рахунок компетитивних молекулярних взаємодій відбувається швидше, ніж адсорбція менш летких молекул етану. Цей ефект пов'язаний з переважанням величини константи адсорбції пропану над константою адсорбції метану, що враховує статичний розподіл молекул газу в суміші за залежністю Максвелла–Больцана. Це призводить до появи компетитивних ефектів, наведених на рис. 3, *б*, *в*.

На рис. 4 наведено залежності десорбції в нанопорах цеоліту для суміші метану, етану і пропану, взятих у різних масових співвідношеннях. Як видно з аналізу наведених на рис. 4 концентраційних залежностей у внутрішньочастинковому просторі, їхні графіки мають спільну характерну особливість: у кожному з них зі зміною часу формується похиле плато, зумовлене зростанням концентрацій адсорбованих компонентів у нанопорах адсорбенту. Після досягнення максимуму в кожній концентраційній залежності формується псевдовертикальна

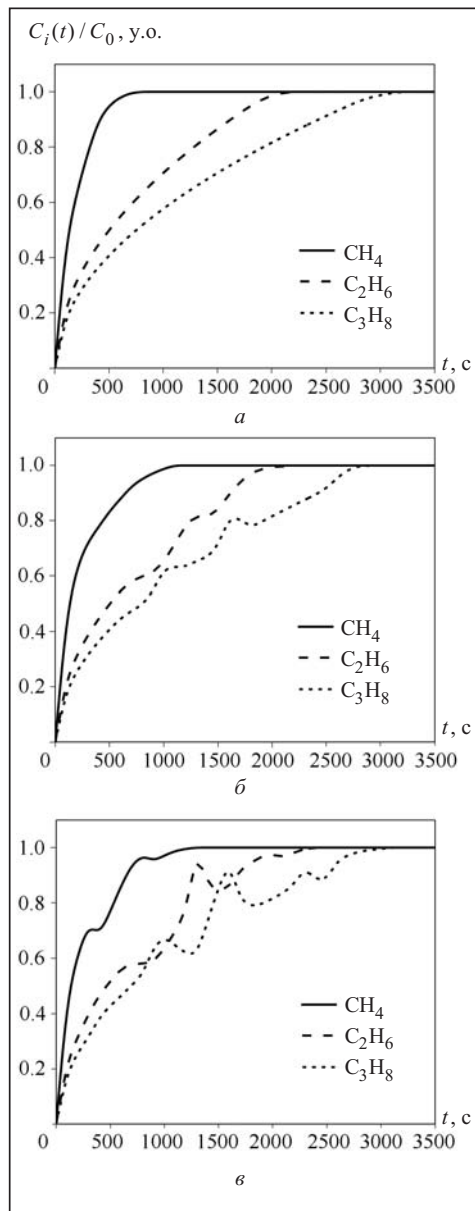


Рис. 3. Криві прориву ($C_i(t)/C_0, i = 1, 2, 3$) адсорбції для суміші метану ($\text{CH}_4, i = 1$), етану ($\text{C}_2\text{H}_6, i = 2$), пропану ($\text{C}_3\text{H}_8, i = 3$), взятих у різних масових співвідношеннях у вхідній суміші: (80 %, 15 %, 5 %) (а), (35 %, 35 %, 30 %) (б), (10 %, 45 %, 45 %) (в)

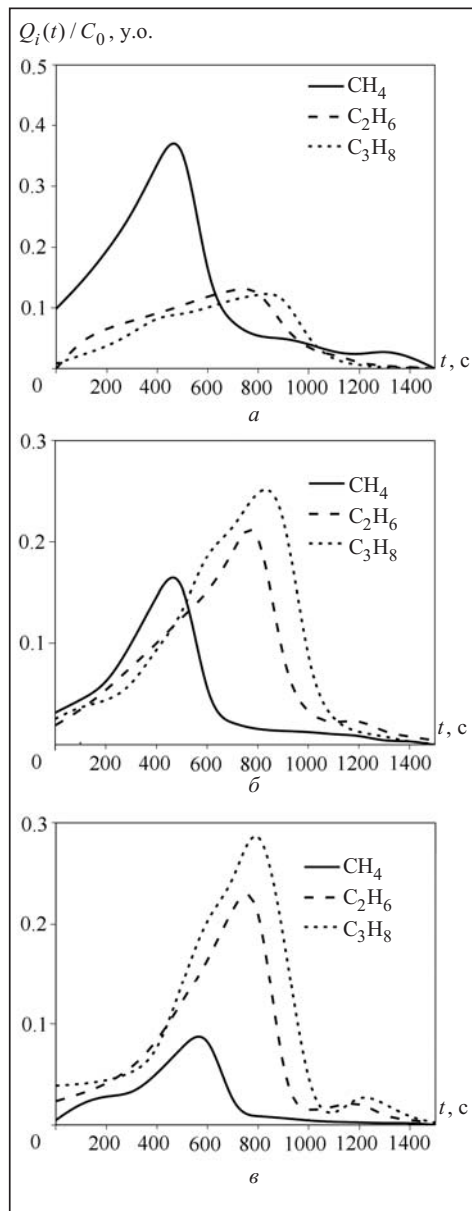


Рис. 4. Криві десорбції в нанопорах цеоліту ($Q_i(t)/C_0, i = 1, 2, 3$) для суміші метану ($\text{CH}_4, i = 1$), етану ($\text{C}_2\text{H}_6, i = 2$), пропану ($\text{C}_3\text{H}_8, i = 3$), взятих у різних масових співвідношеннях у вхідній суміші: (80 %, 15 %, 5 %) (а), (35 %, 35 %, 30 %) (б), (10 %, 45 %, 45 %) (в)

стінка, що з фізичного погляду визначає діапазон часу, за який нанопори досягають стану насичення за відповідними компонентами адсорбату, втрачаючи здатність до їхнього подальшого поглинання.

ВИСНОВКИ

Створено на основі паралельних обчислень високопродуктивні суперкомп'ютерні технології моделювання та ідентифікації параметрів n -компонентної конкурентивної адсорбції в нанопористих кіберсистемах, що включають зворотні зв'язки. Запропоновано ефективне розпаралелювання векторних складо-

вих розв'язку моделі шляхом декомпозиції нелінійної системи з умовами адсорбційної рівноваги Ленгмюра і застосуванням інтегрального перетворення Лапласа та операційного методу Гевісайда. Отримано результати чисельних експериментів, що ґрунтуються на високошвидкісних паралельних обчисленнях з використанням багатоядерних комп'ютерів. Упровадження розроблених алгоритмів паралельних обчислень забезпечило підвищення ефективності прямих обчислень у 10–12 разів. Для порівняння, непаралельна схема обчислень потребує від 4 до 6 годин машинного часу для розв'язання таких проблем.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. 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 and Purification Technology*. 2012. Vol. 86. P. 127–136. <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2011.10.036>.
2. Kanellopoulos N.K. Nanoporous materials: advanced techniques for characterization, modeling, and processing. London: CRC Press, 2011. 564 p.
3. Hammond K.D., Conner W.C. Chapter one – analysis of catalyst surface structure by physical sorption. *Advances in Catalysis*. 2013. Vol. 56. P. 1–101. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-420173-6.00001-2>.
4. Kärger J., Ruthven D., Theodorou D. Diffusion in nanoporous materials. Hoboken: John Wiley & Sons, 2012. 902 p.
5. Krishna R., Van Baten J.M. Investigating the non-idealities in adsorption of CO₂-bearing mixtures in cation-exchanged zeolites. *Separation and Purification Technology*. 2018. Vol. 206. P. 208–217. <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2018.06.009>.
6. Leclerc S., Petryk M., Canet D., Fraissard J. Competitive diffusion of gases in a zeolite using proton NMR and slice selection procedure. *Catalysis Today*. 2012. Vol. 187, N 1. P. 104–107. <https://doi.org/10.1016/j.cattod.2011.09.007>.
7. 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*. 2008. Vol. 139, N 3. P. 234–240. <https://doi.org/10.1016/j.cattod.2008.05.034>.
8. Petryk M., Leclerc S., Canet D., Sergienko I.V., Deineka V.S., Fraissard J. Competitive diffusion of gases in a zeolite bed: NMR and slice procedure, modelling and identification of parameters. *J. Phys. Chem. C*. 2015. Vol. 119, N 47. P. 26519–26525. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.5b07974>.
9. Sergienko I.V., Petryk M.R., Leclerc S., Fraissard J. 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>.
10. 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>.
11. Petryk M., Ivanchov M., Leclerc S., Canet D., Fraissard J. Competitive adsorption and diffusion of gases in a microporous solid. *Zeolites — New Challenges*. Margeta K., Farkas A. (Eds.). London: IntechOpen, 2019. P. 1–23. <https://doi.org/10.5772/intechopen.77482>.
12. Хімич О.М., Петрик М.Р., Михалик 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: Вид-во НАН України, 2019. 190 с.
13. Petryk M., 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>.
14. Mykhalyk D., Petryk M., Petryk M.M., Petryk O., Mudryk I. Mathematical modeling of hydrocarbons adsorption in nanoporous catalyst media using nonlinear Langmuir's isotherm using activation energy. *Proc. 9th International Conference on Advanced Computer Information Technologies (ACIT'2019)* (5–7 June 2019, Budejovice, Czech Republic). Budejovice, 2019. P. 72–75.
15. Лаврентьев М.А., Шабат Б.В. Методы теории функций комплексного переменного. Москва: Наука, 1973. 749 с.

16. Nemytskii V.V., Stepanov V.V. Qualitative theory of differential equations (New Edition). New York: Dover Publications, Inc., 1990. 552 p.
17. Microsoft Visual Studio C++ documentation. URL: <https://docs.microsoft.com/en-us/cpp/parallel/parallel-programming-in-visual-cpp?view=vs-2019> [Accessed Nov. 12, 2019].

Надійшла до редакції 02.11.2020

М.Р. Петрик, И.В. Бойко, А.Н. Химич, М.М. Петрик
ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫЕ СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫЕ ТЕХНОЛОГИИ
МОДЕЛИРОВАНИЯ И ИДЕНТИФИКАЦИИ СЛОЖНЫХ НАНОПОРИСТЫХ КИБЕРСИСТЕМ
С ОБРАТНЫМИ СВЯЗЯМИ ДЛЯ n -КОМПОНЕНТНОЙ КОМПЕТИТИВНОЙ АДсорбЦИИ

Аннотация. Разработаны высокопроизводительные суперкомпьютерные технологии вычислений для моделирования и идентификации параметров сложных процессов n -компонентной конкуритивной адсорбции в нанопористых киберсистемах с обратными связями. Предложено эффективное распараллеливание векторных составляющих решения модели с использованием преобразования Лапласа и операционного метода Хевисайда и декомпозицией нелинейной системы с условиями адсорбционного равновесия типа Ленгмюра. Представлены результаты численных экспериментов на основе параллельных вычислений с использованием многоядерных компьютеров.

Ключевые слова: высокопроизводительные параллельные вычисления, нанопористые киберсистемы с обратными связями, конкуритивна адсорбция газов, функция адсорбционного равновесия Ленгмюра, интегральное преобразование Лапласа, операционный метод Хевисайда.

M.R. Petryk, I.V. Boyko, O.M. Khimich, M.M. Petryk
HIGH-PERFORMANCE SUPERCOMPUTER TECHNOLOGIES OF SIMULATION AND IDENTIFICATION OF NANOPOROUS SYSTEMS WITH FEEDBACK FOR n -COMPONENT COMPETITIVE ADSORPTION

Abstract. High-performance supercomputer computing technologies have been developed to model and identify the parameters of complex n -component competitive adsorption processes in nanoporous cybersystems with feedback. Using the Laplace transform and the Heaviside operating method with the decomposition of a nonlinear system with Langmuir-type adsorption equilibrium conditions, an effective parallelization of the vector components of the model solution is proposed. The results of numerical experiments based on parallel computations using multi-core computers are presented.

Keywords: high-performance parallel computations, nanoporous cybersystems with feedback, competent gas adsorption, Langmuir adsorption equilibrium function, Laplace integral transformation, Heaviside operating method.

Петрик Михайло Романович,
доктор фіз.-мат. наук, професор, завідувач кафедри Тернопільського національного технічного університету імені Івана Пулюя, e-mail: mykhaylo_petryk@tntu.edu.ua.

Бойко Ігор Володимирович,
кандидат фіз.-мат. наук, доцент, доцент кафедри Тернопільського національного технічного університету імені Івана Пулюя, e-mail: boyko.i.theory@gmail.com.

Хімич Олександр Миколайович,
чл.-кор. НАН України, доктор фіз.-мат. наук, професор, заступник директора Інституту кібернетики імені В.М. Глушкова НАН України, Київ, e-mail: khimich505@gmail.com.

Петрик Марія Михайлівна,
аспірантка Тернопільського національного технічного університету імені Івана Пулюя, e-mail: mashapetryk@gmail.com.