



ПРОГРАМНО-ТЕХНІЧНІ КОМПЛЕКСИ

УДК 519.6

М.Р. ПЕТРИК

Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя, Тернопіль, Україна, e-mail: *mykhaylo_petryk@ntu.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*.

О.Ю. ПЕТРИК

Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя, Тернопіль, Україна, e-mail: *oopp3@ukr.net*.

ВИСОКОПРОДУКТИВНІ МЕТОДИ МОДЕЛЮВАННЯ АДСОРБЦІЇ ЗІ ЗВОРОТНИМИ ЗВ'ЯЗКАМИ В НЕОДНОРІДНИХ БАГАТОКОМПОНЕНТНИХ НАНОПОРИСТИХ СЕРЕДОВИЩАХ

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

Ключові слова: адсорбція і дифузія газів, математичне моделювання, умова рівноваги Ленгмюра, операційний метод Гевісайда, матриці впливу Коші, неоднорідні нанопористі середовища.

ВСТУП

Експериментальне та теоретичне вивчення адсорбції та дифузії газів у нанопористих середовищах важливе у багатьох галузях, таких як сепарація газів, гетерогенний каталіз, декарбонізація і очищення атмосфери тощо. Впровадження нових кіберфізичних нанопористих систем (КФНС) для контролю поглинання газових викидів в атмосферу дає змогу поліпшити стан навколишнього середовища і зменшити вплив глобального потепління [1]. Якість математичних моделей адсорбції з урахуванням нанофізичних зворотних впливів, що обмежують кінетику адсорбції в нанопорах, та високопродуктивних методів побудови розв'язків моделей визначає ефективність таких КФНС [2]. Сьогодні проводяться численні теоретичні та експериментальні дослідження адсорбції в нанопористих середовищах, зокрема, щодо вдосконалення їхніх математичних моделей з урахуванням впливу різних обмежувальних факторів кінетики адсорбції [2–8]. Унаслідок складності процесів та недосконалості підходів до їхнього моделювання ці дослідження більшою мірою обмежуються інтегральним рівнем без комплексного врахування мікро- та макровзаємодій, спрощеними емпіричними описами механізмів адсорбційної рівноваги, неоднорідностей середовищ та ін. Це звужує можливості моделювання, не забезпечує цілісності

© М.Р. Петрик, І.В. Бойко, О.М. Хімич, О.Ю. Петрик, 2022