



ПРОГРАМНО-ТЕХНІЧНІ КОМПЛЕКСИ

УДК 519.63; 519.64

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*.

В.А. СИДОРУК

Інститут кібернетики ім. В.М. Глушкова НАН України, Київ, Україна, e-mail: *wolodymyr.sydyryk@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–O₂ 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