

**ТЕРНОПІЛЬСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ ТЕХНІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ  
ІМЕНІ ІВАНА ПУЛЮЯ**

**Михалик Дмитро Михайлович**

УДК 519.63:533.15

**МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ДИФУЗІЙНОГО МАСОПЕРЕНОСУ В  
КАТАЛІТИЧНИХ СЕРЕДОВИЩАХ ЧАСТИНОК МІКРОПОРИСТОЇ  
СТРУКТУРИ**

*01.05.02 - математичне моделювання та обчислювальні методи*

**Автореферат**  
дисертації на здобуття наукового ступеня  
кандидата технічних наук

Тернопіль 2011

Дисертацією є рукопис.

Роботу виконано в Тернопільському національному технічному університеті імені Івана Пулюя Міністерства освіти і науки, молоді та спорту України

**Науковий керівник** кандидат технічних наук, доцент  
**Петрик Михайло Романович,**  
Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя,  
завідувач кафедри програмної інженерії.

**Офіційні опоненти:** доктор технічних наук, професор  
**Бомба Андрій Ярославович,**  
Рівненський державний гуманітарний університет,  
професор кафедри інформатики та  
прикладної математики;

доктор технічних наук, професор  
**Власюк Анатолій Павлович,**  
Національний університет водного господарства та  
природокористування, м. Рівне,  
завідувач кафедри прикладної математики.

Захист відбудеться “\_\_\_” \_\_\_\_\_ 2011 р. о “\_\_\_” год. “\_\_\_” хв. на засіданні спеціалізованої вченої ради **К 58.052.01** в Тернопільському національному технічному університеті імені Івана Пулюя, 46001, м. Тернопіль, вул. Руська 56, ауд. 79.

З дисертацією можна ознайомитись у науково-технічній бібліотеці Тернопільського національного технічного університету імені Івана Пулюя, 46001, м. Тернопіль, вул. Руська 56.

Автореферат розісланий “\_\_\_” серпня 2011 р.

Вчений секретар  
спеціалізованої вченої ради



Шелестовський Б.Г.

## ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

**Актуальність теми.** Процеси дифузійного масопереносу є одними з найпоширеніших технологічних процесів, що складають основу сучасних екологічно безпечних і ресурсозберігаючих технологій в різних галузях промисловості і народного господарства. Абсорбція дозволяє практично повністю вилучити домішки з газів та рідин і в сучасній хімічній, газовій та нафтопереробній промисловостях широко застосовується для глибокої очистки і осушки технологічних потоків, покращення якості продуктів та сировини, проведення очистки промислових газів та рідин від забруднень, захисту навколишнього середовища від шкідливих викидів, а в техніці широкого застосування набули різноманітні сорбенти з мікропористою структурою.

Проблема математичного моделювання процесів масопереносу вивчалася багатьма вченими, серед яких: В.Кафаров, М.Дубінін, А.Ликов, Ф.Федоткін, Ж.Фрессард, І.Сергієнко, В.Дейнека, Б.Лоренс, Д.Рутвен, Ж.Каргер та ін. Однак питання масопереносу в мікропористих каталізаторах, що є основою багатьох технологічних процесів в хімічній та нафтовій промисловостях і в яких використовуються сучасні мікропористі середовища типу цеоліт, потребує глибшого дослідження і зокрема врахування структури адсорбентів, розмірів частинок та впливу внутрішніх і зовнішніх градієнтів на хід протікання процесу.

Одним із перспективних напрямів інтенсифікації процесів дифузійного масопереносу стосовно їх використання для технологій очищення та розділення багатокомпонентних рідких і газоподібних сумішей є застосування багат шарових каталітичних мікропористих середовищ з різними фізико-хімічними характеристиками. Врахування чинників внутрішньої кінетики в таких середовищах дозволить суттєво інтенсифікувати технологічні процеси, повніше дослідити умови рівноваги і як результат, підвищити ступінь розділення та очищення вихідних продуктів, знизити енерговитрати, раціональніше використовувати сорбенти та здійснювати оптимальне керування технологічними режимами.

Враховуючи особливості протікання масопереносу в пористих середовищах та складність і коштовність проведення експериментальних досліджень на передній план виходять дослідження дифузійних процесів в мікропористих середовищах з використанням математичного та комп'ютерного моделювання, які дозволяють вивчати зміну кінетичних характеристик таких процесів у широкому діапазоні вхідних параметрів, що в свою чергу, вимагає побудови розв'язків математичних моделей з високою ступінню алгоритмізації обчислень для подальшого ефективного комп'ютерного моделювання кінетики процесу з використанням обчислювальної техніки.

**Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами.** Дисертаційна робота тісно пов'язана з науково-дослідними темами Тернопільського національного технічного університету імені Івана Пулюя «Моделювання та експериментальні дослідження адсорбції газів в неоднорідних нанопористих каталітичних цеолітичних середовищах», (номер

державної реєстрації №0107U000542) і «Параметрична ідентифікація систем компетитивної дифузії і адсорбції вуглеводневих сполук в нанопористих цеолітних каталізаторах», (номер державної реєстрації №0111U002585) та спрямована на раціональне використання матеріальних і енергетичних ресурсів в технологіях очищення, що відповідає Закону України "Про ресурсозбереження" та Постанові Кабінету Міністрів України від 5.02.97р. №148 "Про комплексну державну програму екології і ресурсозбереження України".

**Мета і задачі дослідження.** Мета роботи полягає у вирішенні задачі математичного моделювання технологічних процесів масопереносу в пористих каталітичних та дисперсних середовищах і спрямована головним чином на дослідження особливостей внутрішньочастинкового масопереносу та взаємовпливів на загальну кінетику процесів, виявлення механізмів їх інтенсифікації та підвищення ефективності.

У відповідності з поставленою метою були визначені наступні задачі:

– здійснити аналіз та адаптацію існуючих математичних моделей переносу в пористих середовищах для моделювання і дослідження кінетики процесів масопереносу в однорідних та багат шарових мікропористих цеолітних каталізаторах та дисперсних середовищах;

– розробити ефективні алгоритми побудови розв'язків моделей дифузійного масопереносу в середовищах частинок мікропористої структури з використанням математичного апарату класичних інтегральних перетворень та чисельних методів;

– здійснити комп'ютерне моделювання та аналіз профілів розподілу кінетичних параметрів (концентрацій і тисків) в мікро та макропорах середовища для процесів адсорбції та фільтраційного відтиску;

– здійснити оцінку адекватності та порівняння математичних моделей до реальних фізичних процесів;

– дослідити функціональні залежності зміни кінетичних параметрів в частинках та між частиковому просторі від конструктивних параметрів робочих каналів, товщини шарів, розмірів частинок, режимних характеристик та фізичних властивостей середовища.

*Об'єктом дослідження* є процеси дифузійного переносу

*Предметом дослідження* є математичні моделі процесів однокомпонентного і двокомпонентного дифузійного переносу в каталітичних та дисперсних середовищах.

*Методи дослідження.* В дисертаційній роботі для побудови аналітичних розв'язків досліджуваних моделей використовувались методи інтегральних перетворень Фур'є, Лапласа та методи функцій Коші, для побудови чисельних розв'язків використовувалися різницєва схеми Кранка-Ніколсона та алгоритм Томаса. Для реалізації алгоритмів у вигляді програмного забезпечення використовувалася мова програмування Java. Для перевірки математичних моделей на адекватність використовувались окремі результати ідентифікації на базі методів теорії оптимального керування багатоконпонентними системами,

та окремі практичні підходи розроблені і запропоновані для цього дослідження академіком НАН України, доктором фізико-математичних наук, проф. Дейнекою Василем Степановичем, за що дисертант висловлює йому щирю подяку.

**Наукова новизна одержаних результатів:**

– здійснено систематизацію та обґрунтування підходів до чисельного моделювання дифузійного переносу в каталітичних та дисперсних середовищах з використанням різних математичних моделей в лінійних і нелінійних постановках;

– вперше математичні моделі типу дифузійного переносу в середовищах мікропористих частинок адаптовані для опису технологічних процесів дифузії та адсорбції парів бензолу та гексану в мікропористих цеолітичних катализаторах;

– модифіковано чисельно-аналітичні методи розв'язання задач масопереносу та на їх основі вперше з використанням схеми Кранка-Ніколсона розроблено ефективні алгоритми числової побудови розв'язків моделей процесів адсорбції парів вуглеводневих сполук (бензолу і гексану) в мікропористих цеолітичних катализаторах в одно- та двокомпонентній постановках;

– вперше з використанням схеми Кранка-Ніколсона розроблено ефективні алгоритми числової побудови розв'язків моделей процесів фільтраційного відтиску в дисперсних середовищах частинок мікропористої структури;

– вперше виконано комп'ютерне моделювання та проведено аналіз кінетичних профілів розподілів концентрацій і тисків для міжчастинкового простору та частинок середовища в широкому діапазоні змін конструктивних та режимних параметрів;

– на основі розроблених алгоритмів та обчислювальних процедур створено комплекс програмного забезпечення для числового моделювання розподілів концентрацій та тисків в міжчастинковому просторі та частинках, перевірки моделей на адекватність даним фізичних експериментів та визначення режимних і конструктивних характеристик досліджуваних технологічних процесів.

**Практичне значення одержаних результатів.** За результатами роботи розроблено методики інженерних розрахунків та програмне забезпечення, що дозволяють проводити числове моделювання концентраційних профілів дифундованих компонентів для одно- та двокомпонентного дифузійного переносу, розподілів тисків в рідкій і твердій фазах для процесів фільтрації в дисперсних середовищах вологовмістких частинок мікропористої структури. Реалізація розрахункових алгоритмів у вигляді програмних процедур дозволяє при проведенні аналізу враховувати цілий комплекс характеристик: особливості переносу на мікро- і макрорівні та взаємозв'язків між ними, неоднорідності умов динамічної рівноваги, конструктивні параметри середовища (товщини робочих пластів, радіуси каналів, розміри зерен (частинок) адсорбентів), режимно-технологічні параметри (константи рівноваги і масообміну, тривалості технологічних стадій тощо), що є необхідним для розробки оптимальних технологічних налаштувань процесів з точки зору

отримання високих ступенів очищення вихідних продуктів, економії розхідних матеріалів та скорочення енерговитрат.

Наукові результати, отримані при виконанні дисертаційної роботи, впроваджені на ПМП „ІТ” (м. Тернопіль) де використовуються при проектуванні нанопористих мембран для сенсорів контролю загазованості середовища вуглеводневими сполуками та на ВАТ “Квантор” (м. Тернопіль) у вигляді розрахункових методик, алгоритмів і програм пов’язаних з дослідженням режимних і конструктивних параметрів пористих середовищ.

Матеріали дисертаційної роботи використовуються в навчальному процесі та науково дослідній роботі зі студентами в лабораторії математичного моделювання і дослідження масопереносу в неоднорідних і нанопористих середовищах та на кафедрі програмної інженерії Тернопільського національного технічного університету імені Івана Пулюя.

**Особистий внесок здобувача** полягає в безпосередній участі у проведенні теоретичних досліджень, розробці алгоритмів та програмного забезпечення, самостійному проведенні комп’ютерного моделювання просторово-часових залежностей кінетики процесів масопереносу, оформленні проміжних результатів роботи у вигляді публікацій і доповідей, узагальненні окремих етапів досліджень та дисертаційної роботи в цілому. Всі практичні результати, які складають основний зміст дисертаційної роботи, отримані автором самостійно.

У дослідженнях, результати яких представлені в публікаціях, написаних у співавторстві з науковим керівником, М.Р.Петрику належить фізико-математична постановка проблеми, загальні принципи побудови математичних моделей, методологія моделювання та дослідження розв’язків крайових задач переносу з системою двофазного дворівневого і  $n$ -рівноважного масопереносу в багатоінтерфейсних неоднорідних нанопористих середовищах, обґрунтування постановок та методики аналітичного розв’язання крайових задач компетитивної дифузії в багатошарових середовищах частинок пористої структури, з урахуванням механізмів багаторівноважності дворівневого переносу.

Авторові належить [6, 7, 20] - побудова і реалізація алгоритмів чисельного розв’язання моделей адсорбційного масопереносу в однорідних та неоднорідних середовищах частинок пористої структури, моделювання та аналіз часово-просторових залежностей кінетики масопереносу; [5, 12, 14, 22] - побудова та реалізація алгоритмів чисельного розв’язання моделей компетитивного масопереносу для однорідного та неоднорідного середовищ частинок мікропористої структури, моделювання та аналіз часово-просторових залежностей кінетики компетитивного масопереносу; [4, 8, 10, 11, 19, 21, 23] – побудова та реалізація алгоритмів розв’язання моделей процесу фільтраційного відтиску в лінійній та нелінійній постановках, моделювання та аналіз зміни кінетичних параметрів процесу, [1, 2, 3] – реалізація алгоритмів та проведення ідентифікації кінетичних параметрів масопереносу для перевірки адекватності математичних моделей.

**Апробація результатів дисертації.** Основні результати роботи доповідались і обговорювалися на дев'ятій, десятій, одинадцятій та дванадцятій науково-технічних конференціях Тернопільського державного технічного університету імені Івана Пулюя м. Тернопіль, 2005-2009р.р., на Міжнародній конференції по математичному моделюванню МКММ-08 м. Херсон, 2008р., на міжнародній конференції “Контроль і управління в складних системах” м. Вінниця, 2008р., на семінарі “Актуальні проблеми теоретичної та експериментальної фізики” м. Тернопіль, 2010р., на міжнародній науковій конференції “Комп’ютерне моделювання в наукоємних технологіях” м. Харків, 2010р., на міжнародній науково-технічній конференції «Фундаментальні та прикладні проблеми сучасних технологій» ТНТУ ім. І.Пулюя, м. Тернопіль, 2010р., наукових семінарах кафедри обладнання харчових технологій та кафедри програмної інженерії Тернопільського національного технічного університету імені Івана Пулюя, а також під час наукового стажування у Вищій школі індустріальної фізики та хімії Парижу (ESPCI), м. Париж (Франція), 2010р. за науковим грантом французького уряду (програма EGIDE).

Дисертація в цілому доповідалася на семінарі “з проблем математичного моделювання та обчислювальних методів” Рівненського державного гуманітарного університету (Рівне, 2010р.), на науковому семінарі факультету комп’ютерних наук Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича (Чернівці, 2011р.) та на семінарі “Математичне моделювання та обчислювальні методи” Тернопільського національного технічного університету імені Івана Пулюя (Тернопіль, 2011р.).

**Публікації.** Результати дисертаційної роботи опубліковані у 23 наукових працях (11 статей та 12 тез доповідей), з них 9 статей у фахових виданнях за обраною спеціальністю.

**Структура та обсяг дисертації.** Робота складається із вступу, трьох розділів, висновків, 3 додатків та списку використаних джерел з 131 найменування. Загальний обсяг дисертаційної роботи становить 162 сторінки, з них 142 сторінки основного тексту, який включає 44 рисунки.

## ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У **вступі** обґрунтовано актуальність роботи, сформульовано мету та основні задачі дослідження, визначено наукову новизну та зв'язок роботи з науковими програмами, планами і темами. Наведено основні отримані результати, їх практичне значення, зазначено особистий внесок здобувача та дані про апробацію результатів.

У **першому розділі** проаналізовано стан досліджень та зроблено огляд літературних джерел, що стосуються тематики дисертаційної роботи, висвітлено основні методи та підходи, що застосовуються для моделювання дифузійного масопереносу, а також здійснено загальну постановку задач дослідження.

Питання дослідження переносу вивчається вже протягом тривалого часу і до розробки основних положень теорії долучилися такі видатні вчені, як А. Фік,

А.Дарсі, І.-Ж.Ленгмюр, Н.В.Герсеванов, Я.Бер, В.І.Аравін С.М.Нумеров, А.В.Ликов, М.Шірато, А.М.Когановський. Проблеми математичного моделювання масопереносу різної природи, як в однорідних так і неоднорідних середовищах розглянуті у працях Ж.Каргера, Д.Рутвена, С.Корнера, Ж.Фрессарда, І.В.Сергієнка, В.С.Дейнеки, В.В.Скопєцького, В.М.Булавацького, А.Я.Бомби, М.Р.Петрика та інш.

Ціла низка об'єктів оточуючого середовища (мінерали, ґрунти, біологічні тканини тощо) та більшість каталітичних середовищ, що знайшли застосування в різноманітних технологічних процесах промисловості, мають мікропористу структуру у вигляді системи мікрочастинок та міжчастинкових порожнин. Характерною особливістю процесів дифузійного масопереносу в пористих середовищах як однорідної так і неоднорідної структури є те, що вони мають рівноважний характер, протікають здебільшого в режимі нестационарного масообміну на поверхнях контакту середовищ, а наявність розгалуженої системи пор потребує врахування в моделях чинників багатоструктурності та взаємовпливів переносів на макро і мікро рівнях. Умови рівноваги на різних рівнях залежать від багатьох фізичних чинників як зовнішньої так і внутрішньої природи.

Проведений аналіз сучасного стану і основних тенденцій розвитку технологічного обладнання і процесів показує, що одним із найперспективніших шляхів інтенсифікації процесів дифузійного масопереносу є застосування багатошарових адсорбційних середовищ частинок мікропористої структури з різними фізико-хімічними властивостями та врахуванням впливів двокомпонентної компетитивної дифузії на загальну кінетику процесу.

У **другому розділі** розглянуто задачі моделювання процесів адсорбції в мікропористих цеолітних каталізаторах, що використовуються в технологіях сепарації та очищення газів в хімічній та нафтопереробній галузях, в інженерній екології і т.п. Каталітичне середовище, в якому протікає процес, представляється у вигляді системи мікропористих частинок та системи міжчастинкових порожнин (макропор) і відповідно до цього перенос (рис.1) розглядається як складна система, що враховує взаємозв'язки між внутрішніми градієнтами концентрацій всередині частинок та зовнішніми градієнтами концентрацій міжчастинкового простору.

Модель однокомпонентного адсорбційного масопереносу в каталітичному середовищі частинок мікропористої структури представляється у вигляді системи диференціальних рівнянь вигляду:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D_{\text{inter}} \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} - \theta_{\text{intra}} \left( \frac{\partial q}{\partial r} \right)_{r=R}, \quad (1)$$

$$\frac{\partial q}{\partial t} = D_{\text{intra}} \left( \frac{\partial^2 q}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial q}{\partial r} \right), \quad (2)$$

з початковими та крайовими умовами

$$c(t, z)|_{t=0} = 0, \quad q(t, r, z)|_{t=0} = 0, \quad (3)$$



$$c(t, z)|_{z=l} = c_{\infty}, \quad q(t, r, z)|_{r=R} = k \cdot c(t, z), \quad (4)$$

$$\frac{\partial c(t, z)}{\partial z} \Big|_{z=0} = 0, \quad \frac{\partial q(t, r, z)}{\partial r} \Big|_{r=0} = 0. \quad (5)$$

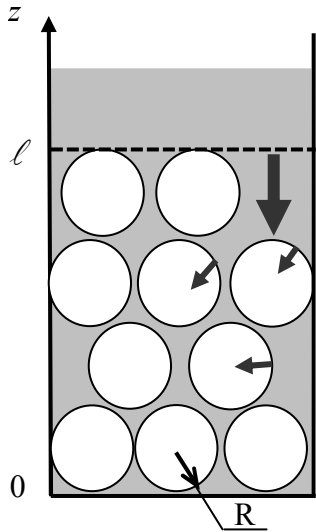


Рис. 1. Схема процесу однокомпонентної адсорбції

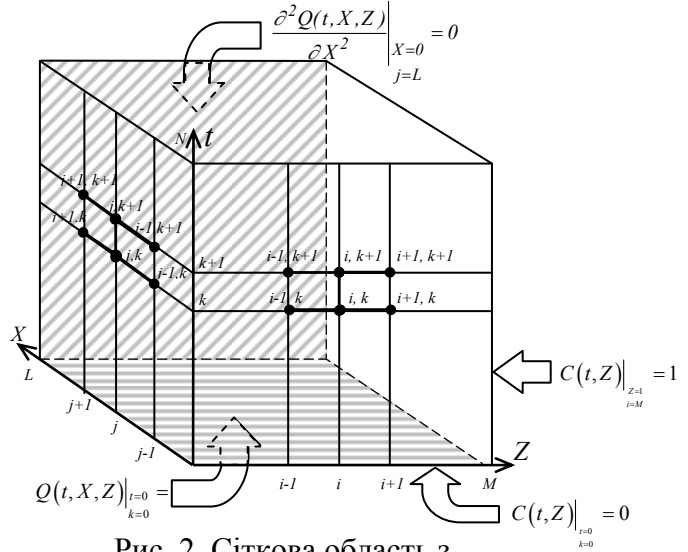


Рис. 2. Сіткова область з шаблоном різницевої схеми

Рівняння (1) цієї системи описує масоперенос у міжчастинковому просторі і містить у правій частині функцію впливу дифузії в пористих частинках на дифузію в міжчастинковому просторі. Рівняння (2) описує внутрішньочастинковий масоперенос з поточною концентрацією  $q(t, x, z)$ , що пов'язана з концентрацією в міжчастинковому просторі  $c(t, z)$  крайовою умовою (4) - умовою рівноваги на поверхні частинок. Коефіцієнти  $D_{\text{inter}}$  та  $D_{\text{intra}}$  відповідно характеризують швидкість протікання процесів масопереносу в міжчастинковому просторі та в порах частинок, а коефіцієнт  $\theta_{\text{intra}}$  характеризує вплив внутрішньочастинкового переносу на міжчастинковий.

Для зручності обчислень і узагальнення отриманих результатів в моделі здійснено перехід до безрозмірних величин параметрів середовища  $Z = z/\ell$ ,  $X = r/R$  та концентрацій  $C = c/c_{\infty}$ ,  $Q = q/q_{\infty}$ , де  $c_{\infty}, q_{\infty}$  рівноважні концентрації.

При побудові числового розв'язку цієї моделі в області  $D = \{(t, Z, X) : t > 0, 0 < X < 1, 0 < Z < 1\}$  вводиться рівномірна ортогональна сітка (рис. 2) з кроками  $\Delta t = t/N$ ,  $\Delta Z = Z/M$ ,  $\Delta X = X/L$ , де  $k = \overline{1, N}$ ,  $i = \overline{1, M}$ ,  $j = \overline{1, L}$ ,  $N, M, L \in \mathbb{N}$ . Рівняння (1) – (2) апроксимуються за шеститочковою різницевою схемою Кранка-Ніколсона, після застосування якої до вихідної задачі та ряду перетворень приходимо до систем рівнянь вигляду:

$$a^{c,k} \cdot C_{i-1}^{k+1} + d^{c,k} \cdot C_i^{k+1} + b^{c,k} \cdot C_{i+1}^{k+1} = f_i^{c,k}, \quad (6)$$

$$a^{q,k} \cdot Q_{ij-1}^{k+1} + d^{q,k} \cdot Q_{ij}^{k+1} + b^{q,k} \cdot Q_{ij+1}^{k+1} = f_{ij}^{q,k}, \quad (7)$$

що дозволяють відшукати значення концентрацій для вузлів міжчастинкового простору  $C_i^{k+1}$  та внутрішньочастинкового простору  $Q_{ij}^{k+1}$  на наступному ( $k+1$ -му) часовому шарі за відомими значеннями концентрації в вузлах попереднього ( $k$ -го) часового шару.

Оскільки (6) та (7) є системами з тридіагональними матрицями, то для їх розв'язання ефективно застосовувати алгоритм Томаса, на основі якого, значення концентрацій в вузлах визначаються з наступних співвідношень:

$$C_i^{k+1} = \alpha_i^{c,k} \cdot C_{i+1}^{k+1} + \beta_i^{c,k}, \quad Q_{ij}^{k+1} = \alpha_{ij}^{q,k} \cdot Q_{ij+1}^{k+1} + \beta_{ij}^{q,k}. \quad (8)$$

Значення коефіцієнтів  $\alpha_i^{c,k}$ ,  $\beta_i^{c,k}$ ,  $\alpha_{ij}^{q,k}$ ,  $\beta_{ij}^{q,k}$  для вузлів  $1 < i < M$ ,  $1 < j < L$  визначаються за рекурентними формулами:

$$\alpha_i^{c,k} = \frac{b^{c,k}}{a^{c,k} \cdot \alpha_{i-1}^{c,k} + d^{c,k}}, \beta_i^{c,k} = \frac{f_i^{c,k} + \beta_{i-1}^{c,k}}{a^{c,k} \cdot \alpha_{i-1}^{c,k} + d^{c,k}}, \alpha_{ij}^{q,k} = -\frac{b^{q,k}}{a^{q,k} \cdot \alpha_{ij-1}^{q,k} + d^{q,k}}, \beta_{ij}^{q,k} = \frac{f_j^{q,k} + \beta_{ij-1}^{q,k}}{a^{q,k} \cdot \alpha_{ij-1}^{q,k} + d^{q,k}}. \quad (9)$$

Значення коефіцієнтів для перших вузлів часових шарів виходячи із крайових умов задачі рівні:

$$\alpha_1^{c,k} = -\frac{b^{c,k} + a^{c,k}}{d^{c,k}}, \beta_1^{c,k} = \frac{f_1^{c,k}}{a^{c,k}}, \alpha_{i1}^{q,k} = -\frac{b^{q,k} + a^{q,k}}{d^{q,k}}, \beta_{i1}^{q,k} = \frac{f_{i1}^{q,k}}{a^{q,k}}. \quad (10)$$

Відшукавши значення  $\alpha_i^{c,k}$ ,  $\beta_i^{c,k}$ ,  $\alpha_{ij}^{q,k}$ ,  $\beta_{ij}^{q,k}$  та концентрації в вузлах  $C_{M-1}^{k+1}$  і  $Q_{iL-1}^{k+1}$  при допомозі виразів (відповідно до крайових умов (4)):

$$C_{M-1}^{k+1} = \frac{f_{M-1}^{c,k} - a^{c,k} \cdot \beta_{M-2}^{c,k} - b^{c,k}}{a^{c,k} \cdot \alpha_{M-2}^{c,k} + d^{c,k}}, \quad Q_{iL-1}^{k+1} = \frac{f_{iL-1}^{q,k} - a^{q,k} \cdot \beta_{iL-2}^{q,k} - b^{q,k} \cdot C_i^{k+1}}{a^{q,k} \cdot \alpha_{iL-2}^{q,k} + d^{q,k}}. \quad (11)$$

За рекурентними формулами (8) обчислюються значення  $C_i^{k+1}$  і  $Q_{ij}^{k+1}$ . Така послідовність дій повторюється на кожному наступному часовому шарі, окрім нульового (для якого значення концентрацій визначаються початковими умовами (3)), а весь алгоритм застосовується ітераційно.

В п.2.2 розроблений алгоритм поширено на випадок, коли коефіцієнти дифузії  $D_{inter}$  та  $D_{intra}$  залежать від поточного значення концентрації  $D_{inter}(c) = \tilde{D}_{inter} \cdot f(c)$ ,  $D_{intra}(q) = \tilde{D}_{intra} \cdot g(q)$ .

В п.2.3 розглядається задача моделювання процесу адсорбції в неоднорідному (багатошарового) каталітичному середовищі, при цьому припускається, що середовище складається з деякої скінченної кількості  $n$  ( $n < \infty$ ) тонких шарів твердого тіла товщиною  $\Delta l_k = l_{k+1} - l_k$ , розташованих перпендикулярно до напрямку поширення газу. Математична модель масопереносу в неоднорідному середовищі частинок мікропористої структури представлена у вигляді  $m$  систем рівнянь ( $m = 1, n + 1$ ) типу (1) – (5), записаних для кожного шару такого середовища і пов'язаних між собою умовами контакту:

$$\left[ c_k(t, z) - c_{k+1}(t, z) \right]_{z=l_k} = 0, \quad \left[ D_{interk} \frac{\partial}{\partial z} c_k(t, z) - D_{interk+1} \frac{\partial}{\partial z} c_{k+1}(t, z) \right]_{z=l_k} = 0. \quad (12)$$

Для побудови числового розв'язку такої моделі, при обчислення значень концентрацій в міжчастинковому просторі для вузлів  $k+1$  часового шару, метод прогонки застосовується одночасно до систем рівнянь усіх  $n$  сегментів неоднорідного середовища, що пов'язані між собою співвідношеннями:

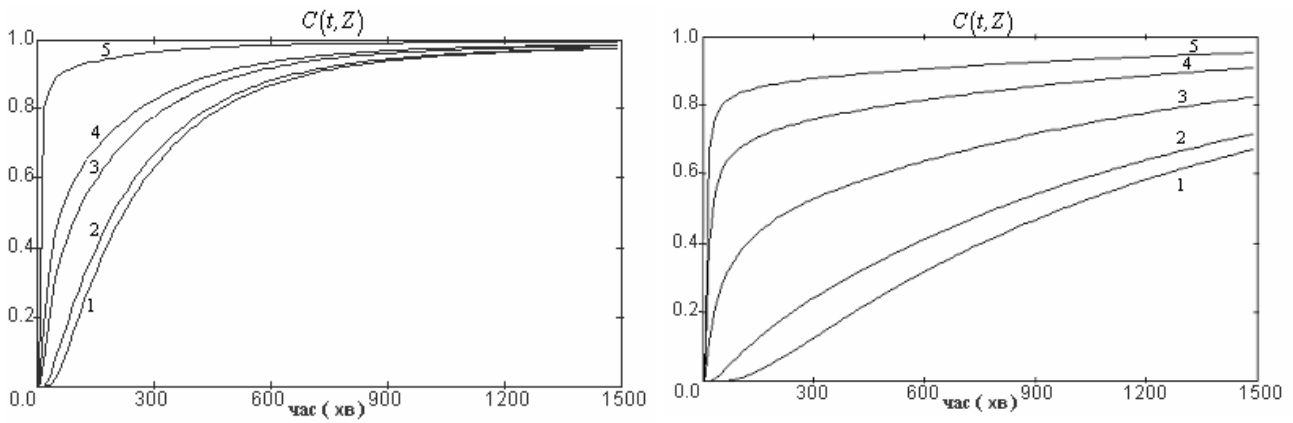
$$\alpha_{m+1}^{c,k} = \frac{b_{m+1}^{c,k} + a_{m+1}^{c,k}}{a_{m+1}^{c,k} \Theta_m^k + d_{m+1}^{c,k}}, \quad \beta_{m+1}^{c,k} = \frac{f_{m+1}^{c,k} - a_{m+1}^{c,k} \Psi_m^k}{a_{m+1}^{c,k} \Theta_m^k + d_{m+1}^{c,k}}. \quad (13)$$

Для моделі однокомпонентного адсорбційного масопереносу в каталітичному середовищі частинок мікропористої структури представлено алгоритм побудови аналітичного розв'язку з використанням інтегральних перетворення Лапласа, який використовується для перевірки числових розв'язків.

На основі отриманих алгоритмів створене програмне забезпечення для комп'ютерного моделювання кінетики процесів однокомпонентної адсорбції газів в мікропористих цеолітних каталізаторах. Результатами проведеного комп'ютерного моделювання є просторово-часові залежності зміни концентраційних профілів для міжчастинкового простору  $C(t, Z)$  та простору в частинці  $Q(t, X, Z)$  (рис.3 – 5).

На основі комп'ютерного моделювання проведено аналіз отриманих профілів. Так, розглядаючи динаміку зміни концентраційних профілів в часі, на кожній із отриманих модельних кривих можна виділити три характерні ділянки – для верхньої частини середовища ( $Z=0.95$ ), перша ділянка лежить у часовому проміжку  $t=0..50$ хв. і характеризується стрімким ростом значення концентрації, далі на проміжку  $t=50..300$ хв. відбувається плавний перехід до пологого зростання профілю, а на третій ділянці  $t=300..1500$ хв. спостерігаємо незначне лінійне зростання концентраційної кривої, що вказує на повну насиченість та наближення системи до стану рівноваги. Аналізуючи профілі концентрацій в частинках, варто відмітити, що величина максимального градієнту змінюється із плином процесу від частинок в верхній ділянці середовища до частинок в нижньої ділянки, при досягненні положення рівноваги.

Розроблені алгоритми використані при розв'язанні задач ідентифікації внутрішніх кінетичних параметрів масопереносу, що проводилися з використанням експериментальних даних, отриманих французькими науковцями під спільним керівництвом Ж. Фрессарда та М. Петрика і за методикою параметричної ідентифікації внутрішньої кінетики системи дифузійного переносу, розробленої В.Дейнекою та М.Петриком. В результаті виконання процедури ідентифікації, на основі ідентифікованих коефіцієнтів дифузії здійснено побудову модельних профілів сукупної поглинутої маси  $M(t, z)$  та їх порівняння із експериментальними, і отримано досить добре їх узгодження (рис.6), що підтверджує адекватність математичної моделі та достовірність побудованих розв'язків.



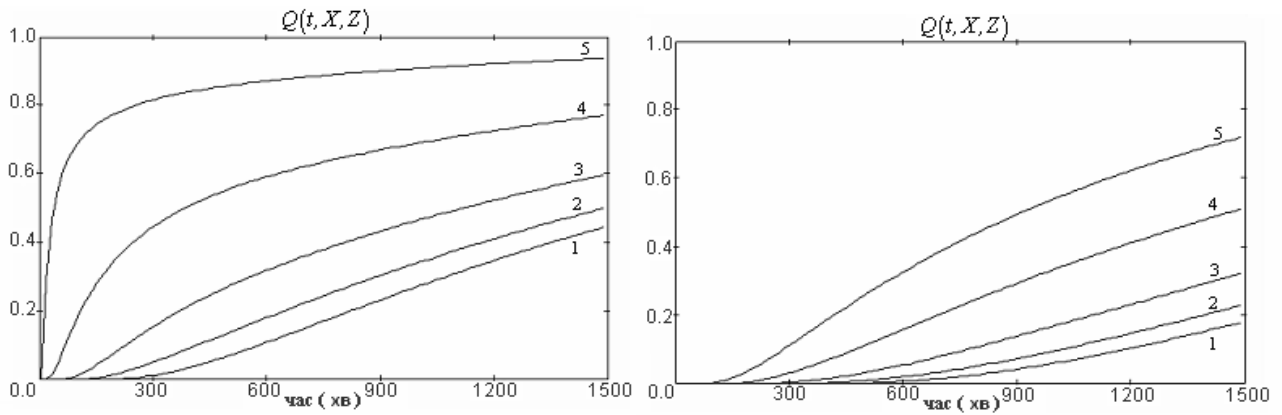
а) однорідне середовище

б) неоднорідне середовище

Рис. 3. Профілі залежності безрозмірних концентрацій в міжчастинковому просторі

від часу  $t, [\text{хв}]$  для різних значень  $Z$  товщини пласту середовища

1)  $Z=0.05$ ; 2)  $Z=0.3$ ; 3)  $Z=0.6$ ; 4)  $Z=0.75$ ; 5)  $Z=0.95$

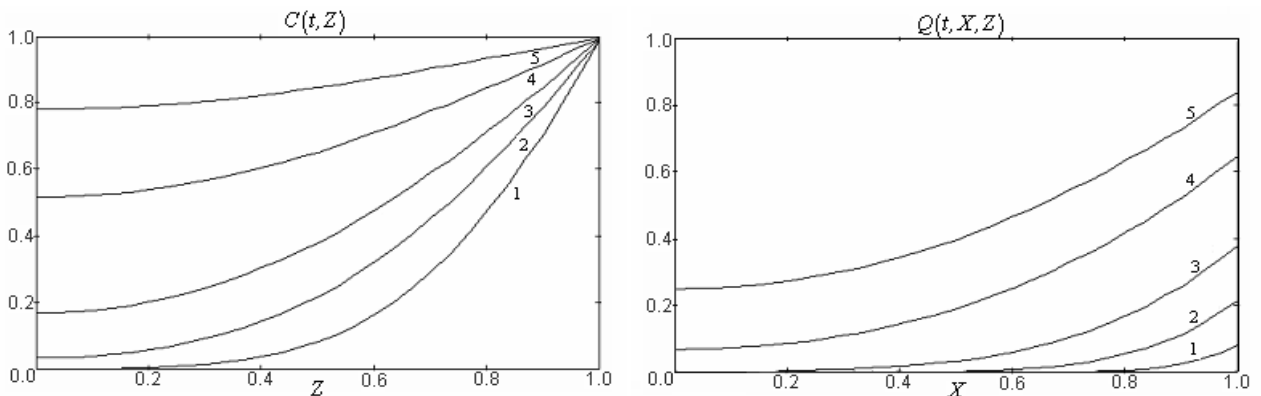


а) частинка вершини пласту  
середовища ( $Z=0.95$ )

б) частинка низу пласту  
середовища ( $Z=0.05$ )

Рис. 4. Профілі залежності безрозмірних концентрацій в часинці  
від часу  $t, [\text{хв}]$  для різних значень  $X$  радіусу частинки

1)  $X=0.05$ ; 2)  $X=0.3$ ; 3)  $X=0.5$ ; 4)  $X=0.75$ ; 5)  $X=0.95$



а) міжчастинковий простір

б) внутрішньочастинковий простір

Рис. 5. Градієнти зміни безрозмірних концентрацій

1)  $t=1.3$  год.; 2)  $t=2.8$  год.; 3)  $t=5.5$  год.; 4)  $t=14$  год.; 5)  $t=25$  год.

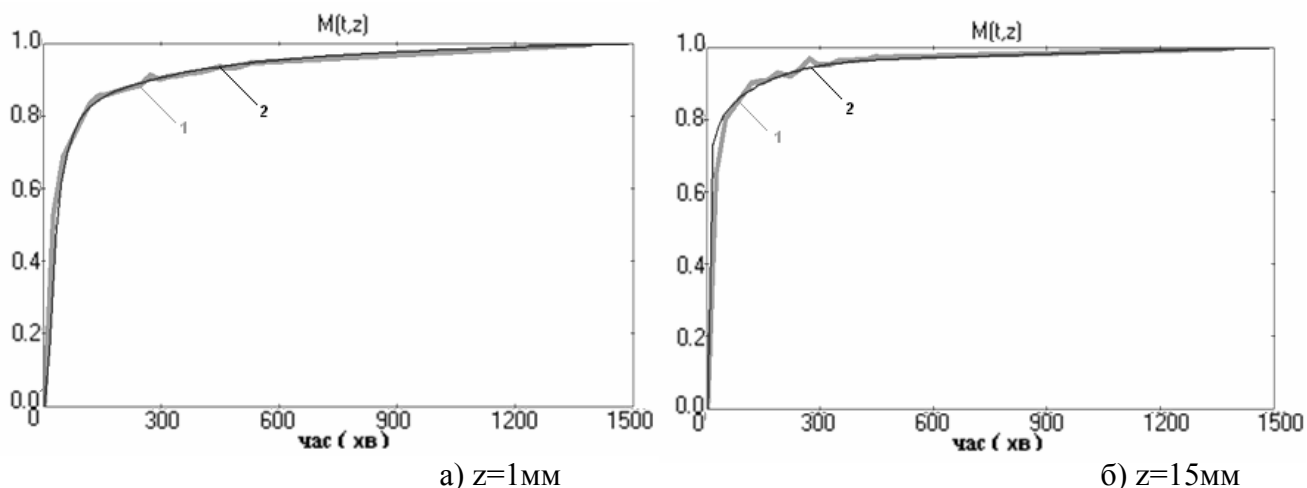


Рис. 6. Порівняння експериментальних (1) та модельних (2) профілів поглинутої маси для процесу адсорбції гексану

У п.2.4 розглядається задача математичного моделювання двокомпонентного дифузійного масопереносу в однорідному та неоднорідному середовищах частинок мікропористої структури. В цьому випадку, окрім процесів дифузії на макрорівні, за рахунок простору між частинками середовища, та дифузії на макрорівні, за рахунок мікропор частинок, враховується ще взаємовплив процесу дифузії одного компонента на процес дифузії іншого. Математична модель, що описує двокомпонентний масоперенос має вигляд:

$$\frac{\partial c_1}{\partial t} = D_{\text{inter}_{11}} \frac{\partial^2 c_1}{\partial z^2} + D_{\text{inter}_{12}} \frac{\partial^2 c_2}{\partial z^2} - \frac{\partial}{\partial r} (\theta_{\text{intra}_{11}} q_1 + \theta_{\text{intra}_{12}} q_2)_{r=R}, \quad (15)$$

$$\frac{\partial c_2}{\partial t} = D_{\text{inter}_{21}} \frac{\partial^2 c_1}{\partial z^2} + D_{\text{inter}_{22}} \frac{\partial^2 c_2}{\partial z^2} - \frac{\partial}{\partial r} (\theta_{\text{intra}_{21}} q_1 + \theta_{\text{intra}_{22}} q_2)_{r=R}, \quad (16)$$

$$\frac{\partial q_1}{\partial t} = D_{\text{intra}_{11}} \frac{\partial^2 q_1}{\partial r^2} + D_{\text{intra}_{12}} \frac{\partial^2 q_2}{\partial r^2}, \quad (17)$$

$$\frac{\partial q_2}{\partial t} = D_{\text{intra}_{21}} \frac{\partial^2 q_1}{\partial r^2} + D_{\text{intra}_{22}} \frac{\partial^2 q_2}{\partial r^2}, \quad (18)$$

з крайовими та початковими умовами аналогічними моделям однокомпонентного масопереносу.

Кінетика такого процесу характеризується чотирма коефіцієнтами: коефіцієнти  $D_{\text{inter}_{11}}$  та  $D_{\text{inter}_{22}}$  визначають швидкість монодифузії (дифузії компонента в присутності самого себе), а коефіцієнти  $D_{\text{inter}_{12}}$  та  $D_{\text{inter}_{21}}$  визначають швидкість взаємодифузії (швидкість дифузії одного компонента в присутності іншого).

Після апроксимації рівнянь (15) – (18) вихідної задачі з використанням різницевої схеми Кранка-Ніколсона отримаємо:

$$\left. \begin{aligned} \alpha_1^{c,k} \cdot C_{l_{i-1}}^{k+1} + d_1^{c,k} \cdot C_{l_i}^{k+1} + b_1^{c,k} \cdot C_{l_{i+1}}^{k+1} + g_1^{c,k} \cdot C_{2_i}^{k+1} = f_{l_i}^{c,k} \\ \alpha_2^{c,k} \cdot C_{2_{i-1}}^{k+1} + d_2^{c,k} \cdot C_{2_i}^{k+1} + b_2^{c,k} \cdot C_{2_{i+1}}^{k+1} + g_2^{c,k} \cdot C_{l_i}^{k+1} = f_{2_i}^{c,k} \end{aligned} \right\} \left. \begin{aligned} a_1^{q,k} \cdot Q_{l_{ij-1}}^{k+1} + d_1^{q,k} \cdot Q_{l_{ij}}^{k+1} + b_1^{q,k} \cdot Q_{l_{ij+1}}^{k+1} + g_1^{q,k} \cdot Q_{2_{ij}}^{k+1} = f_{l_{ij}}^{q,k} \\ a_2^{q,k} \cdot Q_{2_{ij-1}}^{k+1} + d_2^{q,k} \cdot Q_{2_{ij}}^{k+1} + b_2^{q,k} \cdot Q_{2_{ij+1}}^{k+1} + g_2^{q,k} \cdot Q_{l_{ij}}^{k+1} = f_{2_{ij}}^{q,k} \end{aligned} \right\}. \quad (19)$$

Розв'язання цих систем виконується шляхом застосування алгоритму Томаса одночасно до двох рівнянь систем. Формули обчислення концентрацій в міжчастинковому просторі та в частинці для випадку двокомпонентної дифузії мають вигляд:

$$\left. \begin{aligned} C_{l_i}^{k+1} = \alpha_{l_i}^{c,k} \cdot C_{l_{i+1}}^{k+1} + \beta_{l_i}^{c,k} + \gamma_{l_i}^{c,k} \cdot C_{2_{i+1}}^{k+1} \\ C_{2_i}^{k+1} = \alpha_{2_i}^{c,k} \cdot C_{2_{i+1}}^{k+1} + \beta_{2_i}^{c,k} + \gamma_{2_i}^{c,k} \cdot C_{l_{i+1}}^{k+1} \end{aligned} \right\}, \quad \left. \begin{aligned} Q_{l_{ij}}^{k+1} = \alpha_{l_{ij}}^{q,k} \cdot Q_{l_{ij+1}}^{k+1} + \beta_{l_{ij}}^{q,k} + \gamma_{l_{ij}}^{q,k} \cdot Q_{2_{ij+1}}^{k+1} \\ Q_{2_{ij}}^{k+1} = \alpha_{2_{ij}}^{q,k} \cdot Q_{2_{ij+1}}^{k+1} + \beta_{2_{ij}}^{q,k} + \gamma_{2_{ij}}^{q,k} \cdot Q_{l_{ij+1}}^{k+1} \end{aligned} \right\}. \quad (20)$$

Значення коефіцієнтів  $\alpha_i^c, \beta_i^c, \gamma_i^c, \alpha_j^q, \beta_j^q, \gamma_j^q$  для  $i$ -го та  $j$ -го вузлів отриманих співвідношень визначаються з систем (19) за рекурентними формулами:

$$\alpha_{s_{l_i}}^{c,k} = \frac{1}{\phi^k} \frac{-b_{s_{l_i}}^{c,k}}{a_{s_{l_i}}^{c,k} \alpha_{s_{l_{i-1}}}^{c,k} + d_{s_{l_i}}^{c,k}}, \quad \beta_{s_{l_i}}^{c,k} = \frac{1}{\phi^k} \left( \frac{f_{s_{l_i}}^{c,k} - \alpha_{s_{l_{i-1}}}^{c,k} \beta_{s_{l_{i-1}}}^{c,k}}{a_{s_{l_i}}^{c,k} \alpha_{s_{l_{i-1}}}^{c,k} + d_{s_{l_i}}^{c,k}} - \frac{a_{s_{l_i}}^{c,k} \gamma_{s_{l_{i-1}}}^{c,k} + g_{s_{l_i}}^{c,k}}{a_{s_{l_i}}^{c,k} \alpha_{s_{l_{i-1}}}^{c,k} + d_{s_{l_i}}^{c,k}} \cdot \frac{f_{s_{2_i}}^{c,k} - \alpha_{s_{2_i}}^{c,k} \beta_{s_{2_{i-1}}}^{c,k}}{a_{s_{2_i}}^{c,k} \alpha_{s_{2_{i-1}}}^{c,k} + d_{s_{2_i}}^{c,k}} \right),$$

$$\gamma_{s_{l_i}}^{c,k} = \frac{1}{\phi^k} \frac{a_{s_{l_i}}^{c,k} \gamma_{s_{l_{i-1}}}^{c,k} + g_{s_{l_i}}^{c,k}}{a_{s_{l_i}}^{c,k} \alpha_{s_{l_{i-1}}}^{c,k} + d_{s_{l_i}}^{c,k}} \cdot \frac{b_{s_{2_i}}^{c,k}}{a_{s_{2_i}}^{c,k} \alpha_{s_{2_{i-1}}}^{c,k} + d_{s_{2_i}}^{c,k}}, \quad \gamma_{s_{l_j}}^{q,k} = \frac{1}{\psi^k} \cdot \frac{a_{s_{l_j}}^{q,k} \gamma_{s_{l_{j-1}}}^{q,k} + g_{s_{l_j}}^{q,k}}{a_{s_{l_j}}^{q,k} \alpha_{s_{l_{j-1}}}^{q,k} + d_{s_{l_j}}^{q,k}} \cdot \frac{b_{s_{2_j}}^{q,k}}{a_{s_{2_j}}^{q,k} \alpha_{s_{2_{j-1}}}^{q,k} + d_{s_{2_j}}^{q,k}},$$

$$\alpha_{s_{l_j}}^{q,k} = \frac{1}{\psi^k} \cdot \frac{-b_{s_{l_j}}^{q,k}}{a_{s_{l_j}}^{q,k} \alpha_{s_{l_{j-1}}}^{q,k} + d_{s_{l_j}}^{q,k}}, \quad \beta_{s_{l_j}}^{q,k} = \frac{1}{\psi^k} \cdot \left( \frac{f_{s_{l_j}}^{q,k} - \alpha_{s_{l_{j-1}}}^{q,k} \beta_{s_{l_{j-1}}}^{q,k}}{a_{s_{l_j}}^{q,k} \alpha_{s_{l_{j-1}}}^{q,k} + d_{s_{l_j}}^{q,k}} - \frac{a_{s_{l_j}}^{q,k} \gamma_{s_{l_{j-1}}}^{q,k} + g_{s_{l_j}}^{q,k}}{a_{s_{l_j}}^{q,k} \alpha_{s_{l_{j-1}}}^{q,k} + d_{s_{l_j}}^{q,k}} \cdot \frac{f_{s_{2_j}}^{q,k} - \alpha_{s_{2_{j-1}}}^{q,k} \beta_{s_{2_{j-1}}}^{q,k}}{a_{s_{2_j}}^{q,k} \alpha_{s_{2_{j-1}}}^{q,k} + d_{s_{2_j}}^{q,k}} \right),$$

$$\phi^k = \left( 1 - \frac{a_2^{c,k} \gamma_{2_{i-1}}^{c,k} + g_2^{c,k}}{a_2^{c,k} \alpha_{2_{i-1}}^{c,k} + d_2^{c,k}} \cdot \frac{a_1^{c,k} \gamma_{l_{i-1}}^{c,k} + g_1^{c,k}}{a_1^{c,k} \alpha_{l_{i-1}}^{c,k} + d_1^{c,k}} \right), \quad \psi^k = \left( 1 - \frac{a_2^{q,k} \gamma_{2_{j-1}}^{q,k} + g_2^{q,k}}{a_2^{q,k} \alpha_{2_{j-1}}^{q,k} + d_2^{q,k}} \cdot \frac{a_1^{q,k} \gamma_{l_{j-1}}^{q,k} + g_1^{q,k}}{a_1^{q,k} \alpha_{l_{j-1}}^{q,k} + d_1^{q,k}} \right), \quad s_1, s_2 = \overline{1, 2}.$$

Отриманий алгоритм поширено на випадок моделі процесу двокомпонентної адсорбції в неоднорідному (багат шаровому) середовищі частинок мікропористої структури.

В п.2.4.3 представлені результати комп'ютерного моделювання та аналіз кінетики процесу двокомпонентної адсорбції парів бензолу та гексану в однорідному та неоднорідному середовищах.

У **третьому розділі** розглядається задача моделювання дифузійного масопереносу для процесу фільтраційного відстиску в дисперсному середовищі частинок мікропористої структури. При цьому вважається, що при відстиску пласту такого середовища, виникають внутрішні і зовнішні градієнти тисків відповідно в частинках і міжчастинковому просторі, спричиняючи відтоки рідини з міжчастинкового простору та частинок. Внутрішні потоки спрямовані від середини мікропор частинок до їх поверхонь, далі формуються проміжні потоки, спрямовані від зовнішніх поверхонь частинок у макропори міжчастинкового простору, де виникають зовнішні відтоки рідини назовні пласту середовища.

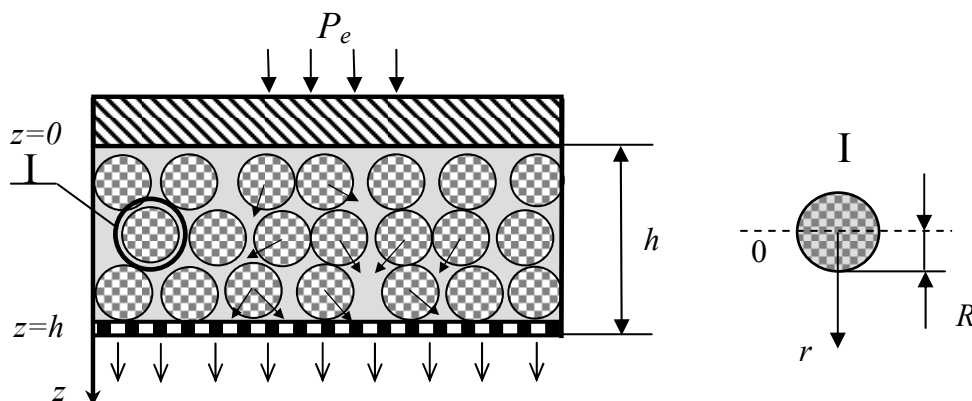


Рис. 7. Схема процесу фільтраційного відтиску

Математична модель фільтраційного відтиску дисперсного середовища з дворівневою структурою пор (рис.7) представляється крайовою задачею вигляду: побудувати обмежений розв'язок рівняння консолідації для пласту дисперсного середовища:

$$\frac{\partial P_1}{\partial t} = b_1 \frac{\partial^2 P_1}{\partial z^2} + \beta_2 \frac{\partial \bar{P}_2}{\partial t}, \quad (t > 0, 0 < z < h), \quad (21)$$

з початковими та крайовими умовами

$$P_1(t, z)|_{t=0} = P_E, \quad P_1(t, z)|_{z=0} = 0, \quad \frac{\partial P_1(t, z)}{\partial z}|_{z=h} = 0 \quad (22)$$

та побудувати обмежений розв'язок рівняння консолідації для частинки

$$\frac{\partial P_2}{\partial t} = b_2 \left( \frac{\partial^2 P_2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial P_2}{\partial r} \right), \quad (t > 0, 0 < z < h, 0 < r < R), \quad (23)$$

з початковими та крайовими умовами

$$P_2(t, r, z)|_{t=0} = P_E, \quad P_2(t, r, z)|_{r=R} = P_1(t, z), \quad \frac{\partial P_2(t, r, z)}{\partial r}|_{r=0} = 0. \quad (24)$$

Рівняння (21) описує зміну тиску  $P_1(t, z)$  в міжчастинковому просторі і в правій частині містить компоненту впливу зміни усередненого тиску в частинці на тиск у міжчастинковому просторі. Рівняння (23) описує зміну тиску  $P_2(t, r, z)$  в мікропорах та пов'язане з тиском  $P_1(t, z)$  крайовою умовою рівноваги між тисками з зовнішньої та внутрішньої сторін поверхні частинки.

Побудовано аналітичний розв'язок цієї задачі з використанням методів операційного числення шляхом застосування до рівнянь моделі перетворень Лапласа та Фур'є.

Для побудови числового розв'язку, в області визначення функцій  $P_1(t, z)$  і  $P_2(t, r, z)$  вводиться рівномірна ортогональна сітка, а рівняння (21), (23) апроксимуються за схемою Кранка-Ніколсона, в результаті чого, як і для моделей адсорбції, отримано систему різницевих рівнянь для відшукування значень тисків в вузлах сітки на  $n+l$ -му часовому шарі:

$$a^1 \cdot P_{li-1}^{k+1} + d^1 \cdot P_{li}^{k+1} + b^1 \cdot P_{li+1}^{k+1} = f_i^1, \quad a^2 \cdot P_{2ij-1}^{k+1} + d^2 \cdot P_{2ij}^{k+1} + b^2 \cdot P_{2ij+1}^{k+1} = f_{ij}^2. \quad (22)$$

В п. 3.2 та п.3.3 методика побудови розв'язків поширена на дисперсні середовища частинок прямокутної форми, та на середовища з нелінійними коефіцієнтами консолідації.

Проведено комп'ютерне моделювання кінетики масопереносу для процесу фільтраційного відтиску оліємістких матеріалів. Так, на рис.8–9 представлено профілі зміни безрозмірних тисків  $P_1(t,Z)$  для макропор та  $P_2(t,X,Z)$  мікропор дисперсного середовища в часі для різних значень  $Z$  (безрозмірної товщини пласту середовища,  $Z = z/h$ ) та  $X$  (безрозмірного радіусу частинки,  $X = r/R$ ).

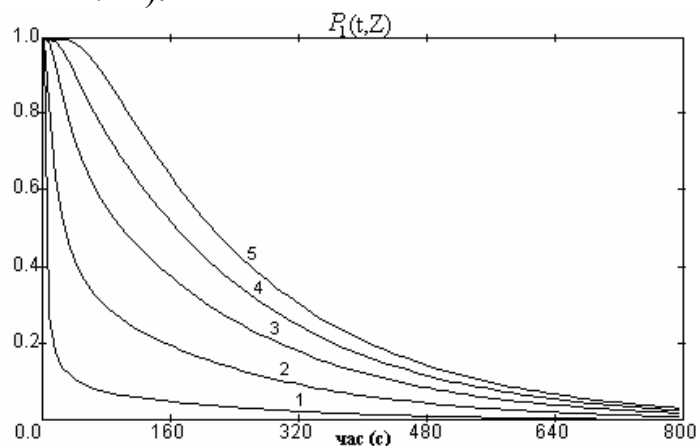


Рис.8. Профілі залежності безрозмірних тисків  $P_1(t,Z)$  в макропорах міжчастинкового простору від часу  $t, [с]$  для різних положень  $Z$  частинки в товщині пласту середовища  
1)  $Z=0.05$ ; 2)  $Z=0.2$ ; 3)  $Z=0.4$ ; 4)  $Z=0.6$ ; 5)  $Z=0.95$

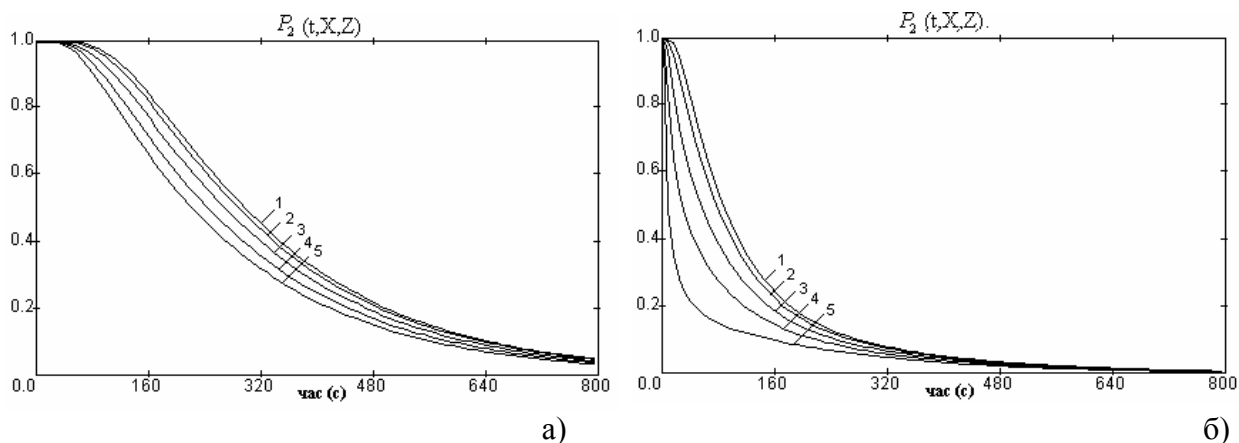


Рис. 9. Профілі залежності безрозмірних тисків  $P_2(t,X,Z)$  в мікропорах частинки від часу  $t, [с]$  для частинок верхньої (а) та нижньої (б) частин пласту середовища  
1)  $X=0.005$ ; 2)  $X=0.3$ ; 3)  $X=0.5$ ; 4)  $X=0.8$ ; 5)  $X=1.0$

Аналізуючи отримані профілі бачимо: що для всіх положень  $Z$  в середовищі, значення тисків тиски  $P_1(t,Z)$  майже експоненціально спадають в часі до нуля; що в міру наближення до положення фільтрувальної мембрани, кривизна профілів тисків тиски  $P_1(t,Z)$  збільшується; що тиски  $P_2(t,X,Z)$  для мікропор частинок досягають найбільшого значення поблизу центрів частинок ( $X = 0$ ) і спадають у напрямках їх країв; що значення тиску спадає швидше на



поверхні частинок, а градієнти є більшими для частинок у верхній частині пласту дисперсного середовища.

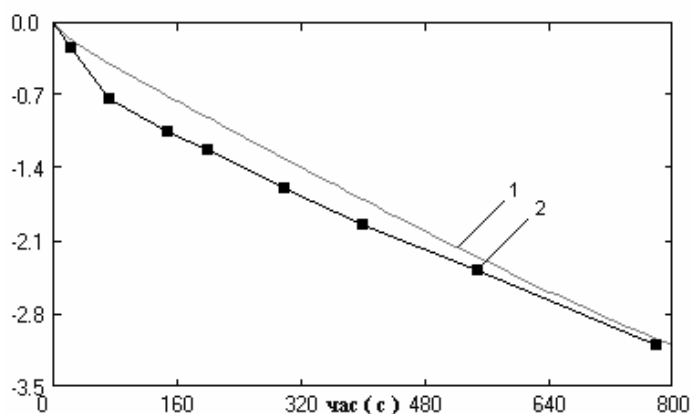


Рис.10. Модельний (1) та експериментальний (2) профілі інтегральної сухості матеріалу colza05

Для перевірки математичних моделей та отриманих розв'язків на адекватність використано результати натурних експериментів, отримані Ж.-Л. Ланоузлем та Є.Воробьовим для матеріалу colza05. На основі цих даних здійснено ідентифікацію приведених коефіцієнтів консолідації  $b_2/b_1$  і побудовано модельний розподіл інтегральної сухості (рис.10).

## ОСНОВНІ РЕЗУЛЬТАТИ РОБОТИ ТА ВИСНОВКИ

У дисертаційній роботі вирішено важливу науково-технічну задачу математичного моделювання технологічних процесів масопереносу в пористих каталітичних та дисперсних середовищах і дослідження особливостей внутрішньочастинкового масопереносу та взаємовпливів на загальну кінетику процесів, виявлення механізмів їх інтенсифікації та підвищення ефективності.

При цьому отримані такі результати:

1. Виконано систематизацію та обґрунтування підходів до числового моделювання адсорбційного масопереносу в каталітичних і дисперсних середовищах з використанням різних математичних моделей в лінійних і нелінійних постановках.

2. Проведено адаптацію математичних моделей типу дифузійного переносу в середовищах мікропористих частинок для опису технологічних процесів дифузії та адсорбції парів бензолу та гексану в мікропористих цеолітних катализаторах.

3. Розроблено нові ефективні алгоритми числової побудови розв'язків моделей процесів одно- та двокомпонентної адсорбції в мікропористих цеолітних катализаторах, що дало змогу здійснити комп'ютерне моделювання та дослідити характер зміни концентраційних профілів в міжчастинковому та внутрішньочастинковому просторах каталітичного середовища.

4. Розроблено з використанням схеми Кранка-Ніколсона нові ефективні алгоритми числової побудови розв'язків моделей процесів фільтраційного віджиму в дисперсних середовищах частинок мікропористої, що дозволило

провести комп'ютерне моделювання та аналіз розподілів тисків для однорідних та неоднорідних середовищ вологонасичених частинок, дослідити їх характер та залежність від характеристик середовища та режимних параметрів.

5. З використанням окремих результатів ідентифікації градієнтними методами параметрів масопереносу в нанопористих системах виконана перевірка досліджуваних моделей на адекватність за даними натурних експериментів адсорбції парів вуглеводневих сполук в цеолітних катализаторах та фільтраційного віджиму оліємістких матеріалів.

6. Практичне значення дисертації полягає у наступному: розроблено новий комплекс програмного забезпечення для комп'ютерного (числового) моделювання та аналізу кінетики процесів адсорбції та дифузії вуглеводневих сполук в пористих катализаторах та фільтраційного віджиму в дисперсних середовищах, що включає побудову розподілів концентрацій та тисків в міжчастинковому просторі та частинках, величин інтегральної поглинутої маси та сухості, оцінки умов рівноваги та перевірки моделей на адекватність експериментальним даним, оптимізації технологічних операцій. Отримані розподіли концентрацій та тисків в частинках дають можливість відслідковувати роботу пор в часі для різних положень робочих областей катализатора та фільтрувального середовища, що може забезпечити на 3-5% більшу ефективність їх роботи в цілому. Частина отриманих результатів теоретичного характеру включена до навчального процесу в Тернопільському національному технічному університеті імені Івана Пулюя.

## **СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ**

1. Дейнека В. С. Идентификация кинетических параметров однокомпонентного адсорбционного массопереноса в микропористых каталитических средах / В. С. Дейнека, М. Р. Петрик, Д. М. Михалик // Проблемы управления и информатики. – 2011. – № 2. – С. 12-25.
2. Дейнека В. С. Моделювання та коефіцієнтна ідентифікація адсорбційного масопереносу в неоднорідному каталітичному середовищі з використанням схеми Кранка-Ніколсона / В. С. Дейнека, М. Р. Петрик, Д. М. Михалик // Вісник ТНТУ. – 2011. – Том 16. – № 1. – С.186-194.
3. Дейнека В. С. Идентификация кинетических параметров однокомпонентного адсорбционного массопереноса / В. С. Дейнека, М. Р. Петрик, Д. М. Михалик // Вісник ТНТУ. – 2010. - №3 – С. 141-149.
4. Петрик М. Р. Нелинейная математическая модель двух-уровневого переноса типа "фильтрация-консолидация"/ М. Р. Петрик, Д. М. Михалик // Проблемы управления и информатики. – 2010. – № 2. – С. 74-85.
5. Петрик М. Р. Моделирование и анализ концентрационных полей нелинейной конкурентивной двухкомпонентной диффузии в среде нанопористых частей / М. Р. Петрик, Ж. Фрессард, Д. М. Михалик // Проблемы управления и информатики. – 2009. – № 4. – С. 73-82.

6. Петрик М. Р. Математичне моделювання адсорбційного нелінійного масопереносу в каталітичних пористих середовищах / М. Р. Петрик, Д. М. Михалик // Вісник ТДТУ ім. І.Пулюя. – 2009. – № 4. – С. 193-198.
7. Михалик Д. М. Математичне моделювання сорбційного масопереносу для одно- та двоскладових обмежених середовищ / Д. М. Михалик, М.Р. Петрик, М. П. Бабюк // Вісник ТДТУ ім. І.Пулюя. – 2009. – №3. – С.157-165.
8. Петрик М. Р. Нелінійна модель і аналіз фільтраційного відтиску з урахуванням перетоків між вологомісткими частинками і порами середовища / М. Р. Петрик, Д. М. Михалик // Волинський математичний вісник. Серія прикладна математика випуск 6 (15). – 2009. – С. 96-110.
9. Михалик Д. М. Математичне моделювання неоднорідного дифузійного масопереносу в середовищі нанопористих частинок / Д. М. Михалик, О. Ю. Петрик // Вісник Херсонського національного технічного університету. – випуск 2(31). – 2008. – С. 326 – 332.
10. Петрик М. Р. Математичне моделювання і аналіз фільтраційного відтиску з урахуванням перетоків між сферичними вологомісткими частинками і порами середовища / М. Р. Петрик, К. М. Дабула, Д. М. Михалик // Вісник ТДТУ ім. Ів.Пулюя. – №4. – 2006. – С.170-183.
11. Петрик М. Р. Математичне моделювання і дослідження фільтраційного відтиску з урахуванням перетоків між вологомісткими частинками і порами дисперсного середовища / М. Р. Петрик, К. М. Дабула, Д. М. Михалик // Вісник ТДТУ ім. Ів.Пулюя. – №4. – 2005. – С. 166-176.
12. Петрик М. Р. Моделювання і параметрична ідентифікація в системі компетитивного переносу в неоднорідному середовищі пористих частинок / М. Р. Петрик, Д. М. Михалик // Харьковский национальный университет им. В. Н. Каразина. Труды научно-технической конференции с международным участием. – Харьков, 2010. – ч.2 – С. 180-183.
13. Михалик Д. М. Моделювання компетитивного переносу в неоднорідному середовищі мікропористої структури / Д. Михалик // Збірник тез доповідей XIV наукової конференції ТНТУ ім. І.Пулюя “Природничі науки та інформаційні технології”. – Тернопіль, 2010. – С.9.
14. Петрик М. Р. Математичне моделювання компетитивного адсорбційного масопереносу в каталітичному середовищі / М. Р. Петрик, Ж. Фрессард, Д. М. Михалик // Матеріали міжнародної науково-технічної конференції „Фундаментальні та прикладні проблеми сучасних технологій”, присвяченої 50-річчю заснування ТНТУ та 165-річчю з дня народження Івана Пулюя, 19-21 травня 2010 р.: тези доповідей. – Тернопіль, 2010. – С. 396.
15. Михалик Д. М. Параметрична ідентифікація кінетичних параметрів масопереносу в нанопористих середовищах / Д. М. Михалик // Матеріали наукового семінару “Актуальні проблеми теоретичної та експериментальної фізики”. – Тернопіль, 2010 – С.28-29.
16. Михалик Д. М. Моделювання та візуалізація компетитивної двокомпонентної дифузії в пористому каталітичному середовищі / Д. М. Михалик // Матеріали всеукраїнської наукової конференції ТДТУ ім. Ів.Пулюя. – Тернопіль, 2009. – С.301.

17. Михалик Д. М. Розв'язування задачі по знаходженню розподілів коефіцієнтів дифузії для мікро- і макро пор цеолітного середовища / Д. М. Михалик // Матеріали Дванадцятої наукової конференції ТДТУ ім. Ів.Пулюя. – Тернопіль, 2008. – С. 243.
18. Михалик Д. М. Моделювання і візуалізація молекулярного транспорту газу в неоднорідних нанопористих каталітичних середовищах / Д. М. Михалик // Матеріали Одинадцятої наукової конференції ТДТУ ім. Ів.Пулюя – Тернопіль, 2007 – С. 274.
19. Петрик М. Р. Моделювання і візуалізація потоків рідини при фільтраційному відтиску біологічних матеріалів / М. Р. Петрик, К. М. Дабула, Д. М. Михалик // Матеріали Одинадцятої наукової конференції ТДТУ ім. Ів.Пулюя. – Тернопіль, 2007 – С. 278.
20. Петрик М. Р. Математичне моделювання кінетики дифузії benzene в неоднорідному zeolite-середовищі з врахуванням системи інтерфейсних взаємодій / М. Р. Петрик, Д. М. Михалик // Матеріали Десятої наукової конференції ТДТУ ім. Ів.Пулюя. – Тернопіль, 2006. – С. 285.
21. Петрик М. Р. Математичне моделювання процесу фільтраційного віджиму з урахуванням волого перетоків між пористими частинками сферичної форми / М. Р. Петрик, Д. М. Михалик // Матеріали Десятої наукової конференції ТДТУ ім. Ів.Пулюя. – Тернопіль, 2006. – С. 284.
22. Петрик М. Р. Математичне моделювання сумісного benzene-hexane переносу в неоднорідних нанопористих zeolite середовищах / М. Р. Петрик, Ж. Фрессард, Д. М. Михалик // Матеріали Дев'ятої наукової конференції ТДТУ ім. Ів.Пулюя. – Тернопіль, 2005. – С. 8.
23. Петрик М. Р. Математичне моделювання процесу фільтраційного віджиму з урахуванням волого перетоків між пористими частинками середовища / М. Р. Петрик, К. М. Дабула, Д. М. Михалик // Матеріали Дев'ятої наукової конференції ТДТУ ім. Ів.Пулюя. – Тернопіль, 2005. – С. 141.

## АНОТАЦІЇ

**Михалик Д.М. Математичне моделювання дифузійного масопереносу в каталітичних середовищах частинок мікропористої структури.** – Рукопис.

*Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата технічних наук за спеціальністю 01.05.02 – математичне моделювання та обчислювальні методи.* – Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя, 2011р.

Дисертаційна робота присвячена питанню математичного моделювання технологічних процесів масопереносу в пористих каталітичних та дисперсних середовищах частинок мікропористої структури і зокрема дослідженню особливостей внутрішньочастинкового масопереносу та взаємовпливів на загальну кінетику процесів, виявлення механізмів їх інтенсифікації та підвищення ефективності.

В роботі здійснено адаптацію моделі типу дифузійного переносу в середовищах мікропористих частинок для опису технологічних процесів

дифузії та адсорбції парів бензолу та гексану в мікропористих цеолітних катализаторах; розроблено на базі різницевої схеми Кранка-Ніколсона, алгоритми числової побудови розв'язків крайових задач дифузійного масопереносу з врахуванням мікропористої структури середовища; виконано комп'ютерне моделювання та проведено аналіз кінетичних профілів розподілів концентрацій і тисків для міжчастинкового простору та частинок середовища в широкому діапазоні змін конструктивних та режимних параметрів; із використанням результатів ідентифікації градієнтними методами параметрів масопереносу в нанопористих системах виконана перевірка досліджуваних моделей на адекватність за даними натурних експериментів адсорбції парів бензолу та гексану в цеолітних катализаторах та фільтраційного віджиму оліємістких матеріалів.

Ключові слова: математичне моделювання, масоперенос, дифузія, мікропориста структура, каталітичні середовища, схема Кранка-Ніколсона, комп'ютерне моделювання.

**Михалик Д.М. Математическое моделирование диффузионного массопереноса в каталитических средах частиц микропористой структуры.** – Рукопис.

*Диссертация на соискание ученой степени кандидата технических наук по специальности 01.05.02 - математическое моделирование и вычислительные методы. - Тернопольский национальный технический университет имени Ивана Пулюя, 2011г.*

Диссертация посвящена вопросу математического моделирования технологических процессов массопереноса в пористых каталитических и дисперсных средах частиц микропористой структуры и в частности исследованию особенностей внутришнъочастичного массопереноса и их взаимовлияния на общую кинетику процессов, выявления механизмов их интенсификации и повышения эффективности.

В работе осуществлена адаптация моделей типа диффузионного переноса в средах микропористых частиц для описания технологических процессов диффузии и адсорбции паров бензола и гексана в микропористых цеолитных катализаторах; разработаны на базе разностной схемы Кранка-Ніколсона алгоритмы числового построения решений краевых задач диффузионного массопереноса с учетом микропористой структуры среды. Для учета особенностей массопереноса в каталитических и дисперсных средах частиц микропористой структуры, используется математическая модель, состоящая из системы двух уравнений, первое из которых описывает массоперенос в междучастичном пространстве и содержит в правой части функцию влияния процесса диффузии в порах частиц среды, а второе описывает внутрочастичный массоперенос, и связано с междучастичным условием равновесия на поверхности частиц.

Для процесса однокомпонентного адсорбционного массопереноса в однородной и неоднородной среде частиц микропористой структуры разработаны алгоритмы построения их численного решения с использованием

разностной схемы Кранка-Николсона и осуществлена процедура моделирования распределений концентраций адсорбционного массопереноса в каталитической среде и их сравнительный анализ по аналитическим и численным решениями линейной и нелинейной моделей.

Для процесса двокомпонентного адсорбционного массопереноса в однородной и неоднородной каталитической среде, разработан алгоритм построения численного решения с использованием схемы Кранка-Николсона и выполнено компьютерное моделирование распределений концентраций и сделан анализ взаимовлияние компонентов в процессе адсорбции.

Для процессов фильтрационного оттиска в среде влагонасыщенных частиц плоской и сферической формы разработаны алгоритмы построения аналитического и численного решения с использованием разностной схемы Кранка-Николсона и осуществлена процедура компьютерного моделирования и анализа распределений концентраций для однородной и неоднородной сред влагонасыщенных частиц, проведен их сравнительный анализ с концентрационными профилями для двухуровневого массопереноса в однородной среде.

Ключевые слова: математическое моделирование, массоперенос, диффузия, микропористая структура, каталитические среды, схема Кранка-Николсона, компьютерное моделирование.

**Mykhalyk D.M. Mathematical modeling of diffusion mass transfer in catalytic medium of particles of the microporous structure – Manuscript.**

*The thesis for a Technical Sciences Candidate's Degree by speciality 01.05.02 – mathematical modeling and computational methods. – Ternopil National Ivan Pulu'y Technical University. – Ternopil, 2011.*

The thesis is devoted to mathematical modeling of mass transfer processes in porous catalytic and dispersed medium with particles of microporous structure and accentuated on study of intra-particles mass transfer and interference on the overall kinetics of processes, identifying the mechanisms of their intensification and efficiency increase.

Adaptation of model of diffusion mass transfer in medium of microporous particles type for describing of diffusion and adsorption processes of vapors benzene and hexane in microporous zeolite catalysts has been done; on the basis of difference Crank-Nicholson scheme, numerical algorithms for constructing solutions of boundary value problems of diffusion mass transfer with taking into account microporous structure of medium has been developed; computer simulation and analysis of kinetic profiles of pressure and concentration distributions for inter-particle spaces and particles of medium has been obtained for a wide range of construction's parameters and operating conditions; using identification results of mass transfer parameters, the models adequacy checks with use of experiments of adsorption of vapors of benzene and hexane in zeolite catalysts and filtration streak of oil materials has been performed.

Keywords: mathematical modeling, mass transfer, diffusion, microporous structure, catalytic medium, Crank-Nicholson scheme, computer simulation.