

Міністерство освіти і науки України  
Харківський національний  
університет імені В. Н. Каразіна

# КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ В НАУКОЄМНИХ ТЕХНОЛОГІЯХ



## ПРАЦІ МІЖНАРОДНОЇ НАУКОВО-ТЕХНІЧНОЇ КОНФЕРЕНЦІЇ

Харків, 22-25 травня 2018 р.

Харків  
2018

ЛІСЯК В.С.	
ТЕСТОВА ІНФРАСТРУКТУРА ДЛЯ ОЦІНКИ ПРОДУКТИВНОСТІ ВЕБ-ДОДАТКІВ.....	182
ЛУЦЕНКО М.С., КІЯН А.С., КУЗНЕЦОВА Т.Ю., КУЗНЕЦОВ О.О.	
АНАЛІЗ КОДОВИХ СХЕМ ІНКАПСУЛЯЦІЇ КЛЮЧІВ, ПРЕДСТАВЛЕНИХ НА КОНКУРС NIST PQC.....	186
ЛЯШЕНКО В.П., КОБИЛЬСЬКА О.Б.	
МОДЕЛЮВАННЯ ТЕПЛОВОГО СТАНУ ЕЛЕКТРИЧНОЇ МАШИНИ.....	190
MALYKHINA A.I., NEMCHENKO K.E., VAISBURD A.I., VIKHTINSKAYA T.G.	
INTERPOLATION AND LOCAL AFFINE TRANSFORMATION METHOD FOR TOMOSYNTHESIS IN MEDICAL PHYSICS.....	192
МАЛЫЩЕНКО М.А., ЛАЗУРИК В.М.	
РЕПЛИКАЦІЯ И ПАРТИЦІРОВАННЯ В POSTGRESQL 10.....	196
МАРЧЕНКО И.Г., МАРЧЕНКО И.И., ТКАЧЕНКО В.И.	
КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ТЕМПЕРАТУРНО-АНОМАЛЬНОЙ ДИФФУЗИИ В ПРОСТРАНСТВЕННО-ПЕРИОДИЧЕСКИХ ПОТЕНЦІАЛАХ.....	200
МАРЧЕНКО И.Г., ПАВЛЕНКО В.И.	
МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ УГЛА ПАДЕНИЯ ИОНОВ $\text{Ti}^{+}$ НА ЭВОЛЮЦИЮ ПРОФИЛЕЙ ДЕФЕКТООБРАЗОВАНИЯ ПРИ ОБЛУЧЕНИИ НАНОСТРУКТУРНОЙ ПЛЕНКИ №.....	204
МЕНЯЙЛОВ Е.С., ЧАБАН А.С.	
МЕТОДЫ ПОСТРОЕНИЯ ПРОБНЫХ ВЫБОРОК В ЗАДАЧАХ ПРИНЯТИЯ РЕШЕНИЯ.....	208
МОСКАЛЕНКО Р.П., ЗАЙДЕНВАРГ О.Л., СТРЕЛЬНИКОВА Е.А.	
КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДОЛГОВЕЧНОСТИ ЭЛЕМЕНТОВ ГИДРОТУРБИННОГО ОБОРУДОВАНИЯ ПРИ НАЛИЧИИ ДЕФЕКТОВ ТИПА ТРЕЩИН.....	210
MURAVSKA A.S.	
ANALYSIS OF THE CMS APPLICATION IN E-COMMERCE.....	213
НАРЄЖНІЙ О.П., КРИВИЧ М.В.	
АТАКА СТОРОННІМИ КАНАЛАМИ НА ЕКСТРАКТОР КВАНТОВОГО ГЕНЕРАТОРА ВИПАДКОВИХ ЧИСЕЛ.....	217
НАУМЕНКО Д. С., ГОРБЕНКО І.Д.	
SPHINCS – ПОСТКВАНТОВИЙ ЕЛЕКТРОННИЙ ЦИФРОВИЙ ПІДПІС НА ОСНОВІ ГЕШ-ФУНКЦІЙ.....	221
НОВИКОВА О.О.	
ІНФОРМАЦІЙНА ТЕХНОЛОГІЯ ПІДТРИМКИ ПРИЙНЯТТЯ КАДРОВИХ РІШЕНЬ ДЛЯ ВИЩИХ НАВЧАЛЬНИХ ЗАКЛАДІВ УКРАЇНИ.....	225
ОМЕЛЬЧЕНКО І. В., СПОРОВ О. Є., ГУЩИН І. В.	
АПРОКСИМАЦІЯ СПЕКТРУ ЛЮМІНЕСЦЕНЦІЇ З ВИКОРИСТАННЯМ ЗГОРТКОВИХ НЕЙРОННИХ МЕРЕЖ.....	229
ПАЛЬЧИКОВ Р. Г.	
О ВЫБОРЕ ТОЧЕК КОЛЛОКАЦИИ ПРИ РЕШЕНИИ СИНГУЛЯРНОГО ИНТЕГРАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ С ЯДРОМ ТИПА КОШИ МЕТОДОМ ГРАНИЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ В ДВУМЕРНЫХ ЗАДАЧАХ.....	233
ПЕРЕДЕРИН А.В.	
МЕТОДЫ И МОДЕЛИ УПРАВЛЕНИЯ СЕТЕВЫМИ РЕСУРСАМИ В СЕТЯХ С ИНТЕГРАЦИЕЙ ТЕЛЕИНФОРМАЦИОННЫХ СЛУЖБ.....	236
ПЕТРИК М.Р., МИХАЛИК Д.М., ПЕТРИК О.Ю., БОЙКО І.В., МУДРИК І.Я.	
МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ АДСОРБІЦІЇ ТА ДЕСОРБІЦІЇ	

ВУГЛЕВОДНІВ КАТАЛІТИЧНИМ СЕРЕДОВИЩЕМ ІЗ ЗАСТОСУВАННЯМ НЕЛНІЙНОЇ ФУНКЦІЇ АБСОРБЦІЙНОЇ РІВНОВАГИ ЛЕНГМЮРА.....	239
<b>ПИВЕНЬ В.Ф.</b> ОБОБЩЕННЫЙ ЗАКОН ФИЛЬТРАЦИИ ЖИДКОСТИ В АНИЗОТРОПНОЙ ПОРИСТОЙ СРЕДЕ.....	243
<b>ПОЛЯКОВ Г.А., ТОЛСТОЛУЖСКИЙ Е.Д.</b> СЕМАНТИКО – ЧИСЛОВОЙ ПОДХОД К СИНТЕЗУ МОДЕЛЕЙ ПАРАЛЛЕЛЬНЫХ ПРОЦЕССОВ ПРИ ДИНАМИЧЕСКОМ ИЗМЕНЕНИИ РЕСУРСА ЦИФРОВЫХ СИСТЕМ.....	247
<b>ПОЛЯКОВ В.А., ХАЧАПУРИДЗЕ Н.М.</b> ОЦЕНКА ДИНАМИЧЕСКИХ КАЧЕСТВ И НАГРУЖЕННОСТИ МАГНИТОЛЕВИТИРУЮЩЕГО ПОЕЗДА В НЕСТАЦІОНАРНИХ РЕЖИМАХ ДВІЖЕНИЯ.....	251
<b>ПРИЙМАК О.В., ВОЛОШИН В.Т., ЩЕРБІНІН М.О., ГЛАДУШ І.О.</b> МОДЕлювання Еволюції Популяції Стратегій з Урахуванням Географічного Чинника.....	255
<b>ПРИЙМАК , ШІРІНОВ П., МАРТИНОВ А.Ю.</b> Побудова Популяції з Нормальним Розподілом Стратегій в Моделях Кооперативної Поведінки.....	257
<b>PRYKHODKO S.B., PRYKHODKO N.V.</b> CONSTRUCTING THE NONLINEAR REGRESSION EQUATIONS TO ESTIMATE THE SOFTWARE SIZE OF INFORMATION SYSTEMS.....	259
<b>ПРОХОРЕЦЬ С.І., ХАЖМУРАДОВ М.А.</b> МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛОВАННЯ ДОСЛІДЖЕННЯ ЕЛЕМЕНТНОГО СКЛАДУ ОБ'ЄКТІВ МЕТОДОМ РЕЗОНАНСНОЇ РАДІОГРАФІЇ НА ШВІДКИХ НЕЙТРОНАХ.....	263
<b>САДРЕТДІНОВ Я.С. КУЗЬМЕНКО М.В.</b> Аналіз Еволюційних Обчислень, як методу пошукової оптимізації .....	267
<b>СВЕТЛИЧНЫЙ С.П., ВАНИН В.А.</b> Численный анализ модели косого удара мягкого тела по модельной лопатке АД .....	270
<b>СКОБ Ю. А., УГРЮМОВ М. Л.</b> МЕТОДОЛОГИЯ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ ВЕРОЯТНОСТИ ПОРАЖЕНИЯ ПЕРСОНАЛА ТЕХНОГЕННОГО ОБЪЕКТА ПРИ АВАРИЙНОМ ПРОЛИВЕ ТОКСИЧНОГО ВЕЩЕСТВА.....	274
<b>СМЕТАНКІНА Н. В., УГРІМОВ С. В., ШУПІКОВ О. М.</b> МОДЕлювання динамічного відгуку шаруватих конструкцій на імпульсне навантаження.....	278
<b>СОЛОВЬЕВА Е.Н., КИЗИЛОВА Н.Н.</b> КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ В БИОМЕХАНИКЕ КРОВООБРАЩЕНИЯ.....	282
<b>СТЕРВОЄДОВ М.Г., АРТЮХ С.О.</b> РОЗРОБКА АПАРАТНО-ПРОГРАМНИХ МОДУЛІВ СИСТЕМИ КЕРУВАННЯ ПРИСКОРЮВАЧЕМ .....	286
<b>ТИМОШЕНКО Е.С., ЛАЗУРИК В.М.</b> РЕЛЯЦИОННЫЕ ИЛИ ГРАФОВЫЕ БАЗЫ ДАННЫХ.....	289
<b>ТОЛСТОЛУЖСКАЯ Е.Г., МАРЫШЕВ П.Д.</b> МОДЕЛЬ АРХИВАЦИИ ДАННЫХ В “CLOUD COMPUTING”.....	293
<b>ТОЛСТОЛУЗЬКА О. Г., МОРОЗ О. Ю., СИНЮК Б. В., СИНЮК Т. В.</b> КОМП'ЮТЕРНА МОДЕЛЬ ВІЗУАЛІЗАЦІЇ ВЗАЄМОЗВ'ЯЗКУ МІЖ СТУДЕНТАМИ, ВИКЛАДАЧАМИ ТА ПРЕДМЕТАМИ.....	297

УДК 519.6

ПЕТРИК М.Р., МИХАЛИК Д.М., ПЕТРИК О.Ю., БОЙКО І.В., МУДРИК І.Я.

## МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ АДСОРБЦІЇ ТА ДЕСОРБЦІЇ ВУГЛЕВОДНІВ КАТАЛІТИЧНИМ СЕРЕДОВИЩЕМ ІЗ ЗАСТОСУВАННЯМ НЕЛІНІЙНОЇ ФУНКЦІЇ АБСОРБЦІЙНОЇ РІВНОВАГИ ЛЕНГМЮРА

### Вступ

Якість математичних моделей процесів адсорбції та десорбції вуглеводнів у нанопористих каталітичних середовищах визначає ефективність технологічних рішень для нейтралізації та зменшення шкідливих викидів двигунами внутрішнього згоряння, кількість яких невпинно зростає, що сприяє кризі глобального потепління. [1, 2].

В даний час проводяться численні експериментальні та теоретичні дослідження таких процесів, зокрема, дослідження з удосконалення математичних моделей з урахуванням впливу різних чинників, що обмежують внутрішню кінетику адсорбції та десорбції каталітичних середовищ. В цьому дослідженні приведено результати моделювання неізотермічних адсорбції та десорбції в нанопористих каталізаторах для нелінійної ізотерми Ленгмюра яка найбільш повно визначає механізм адсорбційного рівноваги в каталітичних середовищах з одержанням високошвидкісних аналітичних рішень оперативним методом Хевісайда.

### Математична модель

Опис взаємодії дифундувального газового потоку в біпористому каталітичному середовищі нанопористих частинок з урахуванням основних факторів, що лімітують внутрішню кінетику масопереносу, включаючи взаємодію мікро- і макропереносу наведено в роботі [3].

Основною гіпотезою, прийнятої при розробці моделі було те, що адсорбційна взаємодія між молекулами адсорбтиву і активними центрами адсорбції на поверхні поділу фаз в мікро- і нанопорах кристалітів визначається на основі нелінійної функції адсорбційної рівноваги (adsorption equilibrium) Ленгмюра з урахуванням певних фізичних передумов, описаних в [4-6]. Виходячи з цього, функція адсорбційної рівноваги (ізотерма адсорбції) Ленгмюра, що описує фазовий перехід адсорбтиву з середовища рухомого газового потоку в мікро- і нанопори шару, визначається нелінійною залежністю, яка встановлює зв'язок між рівноважною концентрацією  $c_{eq}$  і величиною адсорбції  $a$ , концентрацією адсорбтиву в мікро- і нанопорах середовища) [5].

$$a = f(c_{eq}) = a_{full} \frac{bc_{eq}}{1 + bc_{eq}}. \quad (1)$$

Тут  $a_{full}$ ,  $0 < b < 1$  - емпіричні коефіцієнти, що залежать від властивостей каталітичного середовища і дифундувальної речовини:  $a_{full}$  - концентрація (кількість) адсорбтиву в мікро- і нанопорах цеоліту при повному заповненні центрів адсорбції,  $b$  - відношення констант швидкостей десорбції та адсорбції в середовищі.

Виразивши з (1) функцію рівноважної концентрації  $c_{eq}$  щодо величини адсорбції  $a$  на поверхні розділу фаз, отримаємо:

$$c_{eq}(a) = \frac{1}{b} \frac{a}{a_{full} - a}. \quad (2)$$

Таким чином, кінетика неізотермічної адсорбції і десорбції для систем нейтралізації газів в нанопористих каталізаторах з урахуванням нелінійної функції адсорбційної рівноваги і фізичних обґрунтувань можна описати системою нелінійних диференціальних рівнянь в частинних похідних [5, 6]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial c(t, z)}{\partial t} + \frac{\partial a(t, z)}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial z} &= D_{\text{inter}} \frac{\partial^2 c}{\partial z^2}, \\ -H \frac{\partial T(t, z)}{\partial t} - u h_g \frac{\partial T}{\partial z} - Q \frac{\partial a}{\partial t} - X^2 T + \Lambda \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} &= 0, \\ \frac{\partial a}{\partial t} &= \beta \left( c - \frac{1}{b} \frac{a}{a_{full} - a} \right). \end{aligned} \quad (3)$$

З початковими умовами вигляду для процесу адсорбції:

$$c(t, z)|_{t=0} = 0, \quad T(t, z)|_{t=0} = T_0 \quad (4)$$

процесу десорбції:

$$c(t, z)|_{t=0} = c_0, \quad T(t, z)|_{t=0} = T_0, \quad (5)$$

та крайовими умовами:

процесу адсорбції:

$$c(t, z)|_{z=0} = c_{in}, \quad \frac{\partial}{\partial z} c(t, z)|_{z=\infty} = 0, \quad T(t, z)|_{z=0} = T_{in}, \quad T(t, z)|_{z=0} = T_{in}(t) \quad (6)$$

процесу десорбції:

$$c(t, z)|_{z=0} = c_{in}(t), \quad \frac{\partial}{\partial z} c(t, z)|_{z=\infty} = 0, \quad \frac{\partial}{\partial z} T(t, z)|_{z=\infty} = 0, \quad \frac{\partial}{\partial z} T(t, z)|_{z=\infty} = 0. \quad (7)$$

Тут  $c, a$  - концентрації адсорбтива в газовій фазі і адсорбтиву в мікропорах адсорбенту;  $T$ ,  $u$  - температура і швидкість газового потоку. Позначення інших параметрів наведені в [3].

### Схема лінеаризації нелінійної моделі

Задача (3) - (7) з урахуванням апроксимації кінетичного рівняння фазового перетворення, що містить малий параметр, є змішаною крайової завданням для нелінійної системи диференціальних рівнянь другого порядку в частинних похідних, а тому розв'язок задача (3) - (7) будемо шукати за допомогою асимптотичних розкладів у вигляді наступних статечних рядів [7]:

$$\begin{aligned} c(t, z) &= c_0(t, z) + \varepsilon c_1(t, z) + \varepsilon^2 c_2(t, z) + \dots, \\ T(t, z) &= T_0(t, z) + \varepsilon T_1(t, z) + \varepsilon^2 T_2(t, z) + \dots, \\ a(t, z) &= a_0(t, z) + \varepsilon a_1(t, z) + \varepsilon^2 a_2(t, z) + \dots \end{aligned} \quad (8)$$

У результаті підстановки асимптотичних сум в рівняння (3) вихідна нелінійна крайова задача (3) - (7) розділяється на два типу лінеаризованих крайових задач [8]:

*Задача  $A_0$*  (нульове наближення з початковими і крайовими умовами вихідної задачі) - знайти обмежений в області  $D = \{(t, z) : t > 0, z \in (0, \infty)\}$  розв'язок системи рівнянь в частинних похідних:

$$\begin{aligned} \frac{\partial c_0(t, z)}{\partial t} + \frac{\partial a_0(t, z)}{\partial t} + u \frac{\partial c_0}{\partial z} &= D_{\text{inter}} \frac{\partial^2 c_0}{\partial z^2}, \\ -H \frac{\partial T_0(t, z)}{\partial t} - u h_g \frac{\partial T_0}{\partial z} - Q \frac{\partial a_0}{\partial t} - X^2 T_0 + \Lambda \frac{\partial^2 T_0}{\partial z^2} &= 0, \\ \frac{\partial a_0}{\partial t} &= \beta(c_0 - \gamma a_0) \end{aligned} \quad (9)$$

*Задача  $A_n$  ( $n = 1, \infty$ )* (n-е наближення з нульовими початковими і крайовими умовами) - побудувати в області  $D$  обмежений розв'язок системи рівнянь:

## ЛІТЕРАТУРА

1. Barrer R.M. Diffusion and Flow in Porous Zeolite, Carbon or Ceramic Media, Characterization of Porous Solids / Barrer R.M. - Society of Chemical Industry, London, 1979
2. Modelling the heat and mass transfers of propane onto a ZSM-5 zeolite. / B. Puertolas, M.V. Navarro, J.M. Lopez, R.Murillo, A.M. Mastral, T.Garcia // Separation and Purification Technology. –2012. –86. – P. 127-136.
3. Петрик, М.Р. Моделювання нелінійних неізотермічних динамічних задач адсорбції та дифузії для стиснутого шару адсорбенту / М.Р. Петрик // Інтегральні перетворення та їх застосування до крайових задач: Зб. наук. пр. – К.: Ін-т. математики АН України, 1993. – Вип.4. – С.239–242.
4. Kärger J. Diffusion in Zeolites and Other Microporous Solids / J. Kärger, D. Ruthven – New York, John Wiley & Sons. –, 1992. – 605 p.
5. Kärger J. Diffusion in Nanoporous Materials / J.Kärger, D.Ruthven, D.Theodorou – Hoboken, John Wiley & Sons. – 2012. – 660 p.
6. Chen N.Y. Molecular Transport and Reaction in Zeolites: Design and Application of Shape Selective Catalysis / N.Y. Chen, T.F. Degnan, M.C. Smith – New York, Wiley-VCH. – 1994. – 510 p.
7. Прудников А.П. Интегралы и ряды. Дополнительные главы / А.П. Прудников, Ю.А. Бричков, О.И. Марычев – М.: Наука, 1986. –800 с.
8. Сергіенко І. Математичне моделювання масопереносу в середовищах частинок нанопористої структури / І.В. Сергіенко, М.Р.Петрик, О.М.Хіміч, Д.Кане, Д.М.Михалик, Д.Леклерк, Ж.Фрессар - Київ, Національні академія наук України. – 2014. – 196 с.
9. Лаврентьев М.А. Методы теории функций комплексного переменного / М.А. Лаврентьев, Б.В. Шабат – М.: Наука, 1973. – 736 с.
10. Petryk M. The Competitive Diffusion of Gases in a zeolite bed: NMR and Slice Procedure, Modelling anmd Identification of Parameters. / M. Petryk, S. Leclerc, D. Canet, I.V. Sergienko, V.S. Deineka, J. Fraissard // The Journal of Physical Chemistry C. ACS (USA). – 2015. – 119 (47). – P. 26519-26525.

**ПЕТРИК Михайло Романович** - д.ф.-м.н., професор, завідувач кафедри програмної інженерії Тернопільського національного технічного університету імені Івана Пуллюя  
Наукові інтереси:

- моделювання кінетики процесів масопереносу на мікро- і макро- рівнях, ідентифікації кінетичних параметрів складних систем, інженерія програмного забезпечення

**МИХАЛИК Дмитро Михайлович** - к.т.н., доцент, доцент кафедри програмної інженерії Тернопільського національного технічного університету імені Івана Пуллюя  
Наукові інтереси:

- математичне моделювання, обчислювальні методи та алгоритми, архітектура програмних систем, інженерія даних

**ПЕТРИК Оксана Юліанівна** – старший викладач кафедри комп’ютерних мереж та систем Тернопільського національного технічного університету імені Івана Пуллюя  
Наукові інтереси:

- математичне моделювання, інженерія програмного забезпечення

**БОЙКО Ігор Володимирович** – к.ф.-м.н, доцент кафедри програмної інженерії Тернопільського національного технічного університету імені Івана Пуллюя  
Наукові інтереси:

- математичне моделювання, фізика напівпровідників

**МУДРИК Іван Ярославович** – аспірант кафедри програмної інженерії Тернопільського національного технічного університету імені Івана Пуллюя  
Наукові інтереси:

- інженерія програмного забезпечення