

УДК 519.6

В. Дейнека<sup>1</sup>, докт. фіз.-мат. наук; М. Петрик<sup>2</sup>, канд. техн. наук;  
Д. Михалик<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Інститут кібернетики ім. В.М. Глушкова НАН України

<sup>2</sup>Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя

## ІДЕНТИФІКАЦІЯ КІНЕТИЧНИХ ПАРАМЕТРІВ ОДНОКОМПОНЕНТНОГО АДСОРБЦІЙНОГО МАСОПЕРЕНОСУ

**Резюме.** Побудовано алгоритм ідентифікації внутрішніх кінетичних параметрів системи адсорбційного масопереносу з використанням градієнтного методу та аналітичних і чисельних розв'язків моделі однокомпонентного масопереносу в каталітичному середовищі нанопористих частинок. З допомогою розробленого алгоритму та експериментальних даних проведено процедуру ідентифікації, в результаті чого отримано профілі коефіцієнтів дифузії для внутрішньочастинкового простору. На основі ідентифікованих значень здійснено процедуру моделювання кінетики масопереносу та виконано їх порівняння із результатами натурних експериментів.

**Ключові слова:** модель адсорбційного масопереносу, чисельні методи, дифузійні процеси, ідентифікація.

V.Deineka; M.Petryk; D.Mykhalyk

## IDENTIFICATION OF KINETIC PARAMETER FOR MONODIFFUSION ADSORPTION MASS TRANSFER

**The summary.** Algorithm of identification of inner kinetic parameters for mass transfer adsorption system has been built using gradient method and numerical and analytical solutions of mathematical model of monodiffusion in catalytic porous media. With help of this algorithm and experimental data identification procedure has been conducted. The results are profiles of diffusion coefficients for interparticle space. Modeling of mass transfer kinetic and comparison of modeling and experimental results based on identified values has been made.

**Key words:** model of adsorption mass transfer, numerical methods, diffusion processes, identification

**Вступ.** Розробки в галузі системного аналізу та математичного моделювання систем складають базу для інформаційних технологій управління науковим експериментом і аналізом стану складних фізичних об'єктів, до яких можна віднести системи адсорбційного масопереносу в нанопористих середовищах (цеолітах), вивчення кінетики яких є важливою проблемою сучасної нанофізики і нанодифузії. Цеоліти, що широко використовуються в різноманітних галузях (медицина, нафтохімія, катализ, розділення речовин тощо), являють собою багаторівневу систему пор, з яких можна виділити дві найголовніші підсистеми: систему мікро-і нанопор з високим ступенем адсорбційної місткості й низьким ступенем проникнення дифузійного (intraparticle space) та систему макропор і порожнин між частинками з низьким рівнем місткості й високою швидкістю проникнення (interparticle space) [1-5].

Питання математичного моделювання дворівневого адсорбційного масопереносу в каталітичних середовищах частинок мікропористої структури і побудова розв'язків математичних моделей, що його описують, розглядалося в попередніх працях авторів [6-12]. Також дослідження цих питань зустрічається у працях Дейнеки, Скопечького [13-15], Ленюка, Фрессарда та інших. Але важливим залишається питання ідентифікація внутрішніх кінетичних параметрів таких процесів, що є визначальними для їх перебігу, і які можуть покласти основу для розроблення нових технологій.

**Мета роботи** – на основі розробленої теорії оптимального управління станом складних систем [16-18], математичних моделей адсорбційного масопереносу в

середовищах нанопористого й отриманих для них аналітичних і чисельних розв'язків [10, 11], з використанням результатів експериментальних досліджень [5] реалізувати градієнт-процедуру ідентифікації параметрів внутрішньої кінетики переносу та отримати розподіли значень коефіцієнтів дифузії для внутрічастинкового масопереносу в пористих середовищах.

Математичну модель однокомпонентного адсорбційного масопереносу можна описати за допомогою такої крайової задачі: побудувати обмежений в області  $D = \{(t, r, z) : t > 0, 0 < r < R, 0 < z < l\}$  розв'язок системи рівнянь у частинних похідних [9, 10]

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D_{inter} \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} - \frac{3(1 - \varepsilon_{inter}) D_{intra}}{\varepsilon_{inter}} \frac{\partial}{\partial r} q \Big|_{r=R} \quad (1)$$

$$\frac{\partial q}{\partial t} = D_{intra} \frac{\partial^2 q}{\partial r^2} \quad (2)$$

з нульовими початковими умовами

$$c(t=0, z) = 0 \quad q(t=0, r, z) = 0 \quad (3)$$

та крайовими умовами:

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

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

**Аналітичний розв'язок задачі.** Розв'язок задачі (1)-(5) отримуємо з використанням операційного числення Хевісайда в зображеннях за Лапласом для функцій  $c^*(t, z) \equiv L[c_i] = \int_0^{\infty} c(t, z) e^{-pt} dt$  та  $q^*(p, r, z) \equiv L[q_i] = \int_0^{\infty} q(t, r, z) e^{-pt} dt$ . [10].

$$C(t, Z) = 1 + \frac{6 \pi}{\Gamma \cdot p_{inter}} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(2n-1) \cos\left(\frac{2n-1}{2} \pi Z\right) \exp\left(-\frac{\beta_{kn}^2}{\tau_m} t\right)}{(-1)^n \beta_{kn}^2 \left[ \frac{3}{p_{inter}} \left( \frac{1}{\sin^2(\beta_{kn})} - \frac{ctg(\beta_{kn})}{\beta_{kn}} \right) + 2 \right]} \quad (6)$$

$$Q(t, X, Z) =$$

$$= 2\pi \sum_{n_1=1}^{\infty} \left[ \frac{1 - \exp\left(-\frac{n_1^2 \pi^2}{\tau_m} t\right)}{n_1 \pi^2} + \frac{6}{\Gamma p_{inter}} \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(2n-1) \cos\left(\frac{2n-1}{2} \pi Z\right) \exp\left(-\frac{\beta_{kn}^2}{\tau_m} t\right)}{(-1)^n \beta_{kn}^2 \left[ \frac{3}{p_{inter}} \left( \frac{1}{\sin^2(\beta_{kn})} - \frac{ctg(\beta_{kn})}{\beta_{kn}} \right) + 2 \right]} \cdot \frac{\sin(n_1 \pi \cdot X)}{(-1)^{n_1+1} \cdot X} \right] \quad (7)$$

Тут:  $\Gamma = \frac{3(1 - \varepsilon_{inter})K}{\varepsilon_{inter}} \frac{\tau_M}{\tau_m}$ ;  $p_{inter} = \frac{\varepsilon_{inter}}{3(1 - \varepsilon_{inter})K}$ ;  $\tau_M = \frac{\ell^2}{D_{inter}}$ ;  $\tau_m = \frac{R^2}{D_{intra}}$ ;  $K = \frac{q_{\infty}}{c_{\infty}}$ ;

$\beta_{kn} - k^{ий}$  корінь  $n^{-го}$  трансцендентного рівняння  $\beta_{kn} ctg \beta_{kn} - \frac{p_{inter}}{3} \beta_{kn}^2 = 1 - \frac{(n - \frac{1}{2})^2 \pi^2}{\Gamma}$ .

**Вибір функціонала-нев'язки.** Вважаємо, що коефіцієнти дифузії  $D_{inter}$ ,  $D_{intra}$  задачі (1)-(6) невідомі, але на поверхнях  $D$  відомі сліди розв'язків (концентрацій).

$$c(t, z)|_D = f(t, z)|_D, \quad \bar{q}(t, z)|_D = g(t, z)|_D, \quad (8)$$

де  $\bar{q}(t, 0, z) = \frac{1}{R} \int_0^R q(t, r, z) dr$  – усереднене значення концентрації дифундової компоненти в мікропорах частинки, зосереджене в її центрі  $r = 0$ .

Таким чином, отримуємо задачу (1)-(5), (8), що полягає в знаходженні функцій  $D_{\text{intra}} \in D, D_{\text{inter}} \in D$ , де  $D = \{v(t, z): v|_z \in C(z), v > 0\}$ .

Функціонал-нев'язка, що визначає величину відхилення шуканого розв'язку від слідів розв'язку на поверхні  $D$ , запишемо у вигляді [17]

$$J(D_{\text{inter}}, D_{\text{intra}}) = \frac{1}{2} \int_0^T \left( \|c(\tau, z, D_{\text{inter}}, D_{\text{intra}}) - f\|_{L_2(D)}^2 + \|\bar{q}(\tau, 0, D_{\text{inter}}, D_{\text{intra}}) - g\|_{L_2(D)}^2 \right) d\tau, \quad (9)$$

де  $\|\varphi\|_{L_2(D)}^2 = \int_D \varphi^2 dD$  – квадрат норми. В даному випадку  $\|\varphi\|_{L_2(D)} = |\varphi(t, z)|_{z=D}$ .

**Постановка початкової крайової задачі в приростах.** Надаючи приріст значенням коефіцієнтів дифузії  $D_{\text{intra}}^n + \Delta D_{\text{intra}}^n$ , отримаємо відповідні прирости для концентрацій  $q + w$ . Тоді отримаємо таку крайову задачу в прирости:

$$\frac{\partial}{\partial t} w(t, r, z) = D_{\text{intra}}^n \frac{\partial^2}{\partial r^2} w + \Delta D_{\text{intra}}^n \frac{\partial^2}{\partial r^2} w, \quad r \in (0, R), z \in (0, \ell), t \in (0, T). \quad (8)$$

Початкові умови

$$w(t, r, z)|_{t=0} = 0, \quad (9)$$

Крайові умови по змінній  $r$

$$D_{\text{intra}}^n \frac{\partial}{\partial r} w|_{r=0} = -\Delta D_{\text{intra}}^n \frac{\partial}{\partial r} w|_{r=0} = 0, \quad (D_{\text{intra}}^n + \Delta D_{\text{intra}}^n) \frac{\partial (q + \theta)}{\partial r} \Big|_{r=0} = 0, \quad \theta|_{r=R} = 0, \quad (10)$$

**Спряжена крайова задача.** Застосовуючи принцип Лагранжа до розширеного функціоналу, що включає суму функціонала-нев'язки та складових, що враховують умови балансових рівнянь і початково-крайових умов, отримуємо постановку спряженої задачі [17].

$$\frac{\partial}{\partial t} \psi(t, r, z) + \frac{\partial^2}{\partial r^2} D_{\text{intra}}^n \psi = (q|_{r=R} - f) \cdot \delta(r - R), \quad r \in (0, R), z \in (0, \ell), t \in (0, T). \quad (11)$$

Часова умова

$$\psi(t, r, z)|_{t=T} = 0. \quad (12)$$

Крайові умови по змінній  $r$

$$-D_{\text{intra}}^n \frac{\partial}{\partial r} \psi|_{r=0} = 0; \quad \psi|_{r=R} = 0, \quad r \in (0, R). \quad (13)$$

Розв'язок спряженої крайової задачі будуюмо з використанням різницевої схеми Кранка-Ніколсона та, застосовуючи метод прогонки, ввівши в області  $D$  рівномірну ортогональну сітку:

$$D^* = \left\{ (t_k, z_i, r_{ij}) : t_k = k \cdot \Delta t, k = \overline{1, N}; z_i = i \cdot \Delta z, i = \overline{1, M}; r_{ij} = j \cdot \Delta r, j = \overline{1, L}; \Delta t = \frac{t}{N}, \Delta z = \frac{z}{M}, \Delta r = \frac{r}{L} \right\},$$

де  $N, M, L \in \mathbb{N}$  – параметри розбиття області,  $\Delta t, \Delta z, \Delta r$  – кроки сітки по змінних  $t, z, r$  відповідно. Алгоритм побудови аналогічний до представленого в [11].

Значення  $\Psi_j^{k+1}$  для  $(k+1)$ -го часового шару визначаємо за відомими значеннями  $k$ -го часового шару за формулою

$$\Psi_j^{k+1} = \alpha_j^\Psi \cdot \Psi_{j+1}^{k+1} + \beta_j^\Psi. \quad (14)$$

Значення коефіцієнтів  $\alpha_j^\Psi$  та  $\beta_j^\Psi$  визначаємо за формулами

$$\alpha_j^\psi = -\frac{b^\psi + a^\psi}{d^\psi}; \quad \beta_j^\psi = \frac{g_j^\psi}{a^\psi}. \quad (\text{при } j = 1);$$

$$\alpha_j^\psi = -\frac{b^\psi}{a^\psi \cdot \alpha_{j-1}^\psi + d^\psi}, \quad \beta_j^\psi = \frac{f_j^\psi + \beta_{j-1}^\psi}{a^\psi \cdot \alpha_{j-1}^\psi + d^\psi}. \quad (\text{при } 1 < j < M);$$

$$\Psi_{L-1}^{k+1} = \frac{\mu_{L-1}^{\psi,k} - a^\psi \cdot \beta_{L-2}^\psi}{a^\psi \cdot \alpha_{L-2}^\psi + d^\psi} \quad (\text{при } j = L - 1),$$

де

$$a^\psi = b^\psi = \sigma; \quad d^\psi = -(1 + 2 \cdot \sigma); \quad \sigma = -\frac{D_{\text{intra}}}{R^2} \frac{\Delta t}{2(\Delta X)^2}.$$

$$\mu_j^{\psi,k} = \sigma \cdot (2 \cdot \Psi_j^k - \Psi_{j+1}^k - \Psi_{j-1}^k) - \Psi_j^k - F_j^k; \quad F_j^k = (q|_{r=R} - f) \cdot \delta(j \cdot \Delta r - R).$$

**Визначення аналітичного виду градієнта функціонала.** Запишемо основні рівняння крайової задачі в приростах (з нульовими умовами) в операторній формі

$$Lw(t, r, z) = \chi, \quad w \in (0, R) \cup \Omega_T, \quad (15)$$

де

$$L = \frac{\partial}{\partial t} - D_{\text{intra}} \frac{\partial^2}{\partial r^2}, \quad \chi(t, z) = \Delta D_{\text{intra}}^n \frac{\partial}{\partial r} q(t, r, z).$$

Розглянемо  $L$  як оператора, що відображає  $D$  у простір  $L_2$ . Визначимо скалярні добутки елементів:

$$(Lw, \psi) = \iint_{(0,R) \cup \Omega_T} \psi Lw(t, r, z) dr dt, \quad (16)$$

де  $\psi(t, r, z)$  – є достатньо гладкі функції.

Для співвідношення (16) має місце тотожність Лагранжа

$$(Lw, \psi) = (w, L^* \psi). \quad (17)$$

Перетворимо приріст функціонала-нев'язки  $\Delta J(D_{\text{intra}})$

$$\Delta J(D_{\text{intra}}) = \int_0^T \int_0^R w(t, z) \cdot e(t) \cdot \delta(r - R/2) dr dt + O(|\Delta u|). \quad (18)$$

Зробивши в останньому рівнянні заміну  $w = L^{-1} \chi$ , отримаємо

$$\Delta J(D_{\text{intra}}) = \int_0^T \int_0^R L^{-1} \chi(t, r, z) \cdot e(t) \delta(r - R/2) dr dt + O(|\Delta u|).$$

Вводячи спряжений оператор  $L^{-1*}$ ,

$$\Delta J(D_{\text{intra}}) = (\chi(t, r, z), L^{-1*} [e(t) \delta(r - R/2)]) \quad (19)$$

Відповідно до тотожності Лагранжа (17) має місце рівність

$$L^{-1*} [e(t) \delta(r - R/2)] = \psi, \quad (20)$$

де функція  $\psi = \psi(t, r, z)$  є розв'язком спряженої задачі.

Розкриваючи в (19) значення функції  $\chi(t, r, z)$  приходимо до формули, яка встановлює взаємозв'язок між прямою та спряженою задачами, що дозволяє записати вираз для градієнта функціонала

$$\Delta J(D_{\text{intra}}) = (\psi(t, r, z), \chi(t, r, z)) + O(|\Delta u|) = \left( \psi(t, r, z), \Delta D_{\text{intra}} \frac{\partial^2}{\partial r^2} q \right). \quad (21)$$

Продиференціювавши отримане співвідношення по  $\Delta D_{intra}$  і розкривши скалярний добуток, отримуємо аналітичний вираз градієнта функціонала по компоненті  $D_{intra}$ .

$$\nabla J_{D_{intra}} = \int_0^{TR} \int_0^R \psi(t, r, z) \cdot \frac{\partial^2}{\partial r^2} q(t, r, z) dr dt, \quad (22)$$

**Алгоритм реалізації градієнтного методу ідентифікації коефіцієнта дифузії.** Процедура реалізації градієнтного методу ідентифікації коефіцієнтів внутрішньочастинкового масопереносу  $D_{intra}$  базується на використанні матриці стану системи  $M(t_k, z_i, D_{intra}^\theta)$ , яка відповідає сумарній накопиченій масі дифундованого компонента в пораз частинок [5].

Експериментальні дослідження, результати яких представлені на рис. 1, проводила в лабораторії університету П'єра та Марії Кюрі група французьких експериментаторів із використанням методу ядерно-магнітного резонансу (NMR) для процесів адсорбції бензолу та гексану в середовищі цеоліту ZSM-5. Результатами експерименту є профілі зміни сумарної накопиченої маси дифундованого компонента (бензолу чи гексану) вздовж досліджуваного експериментального зразка. Для отримання картини еволюції профілів у часі, заміри проводили для різних часових відтинків з моменту початку процесу адсорбції (на рис. 1 в годинах).

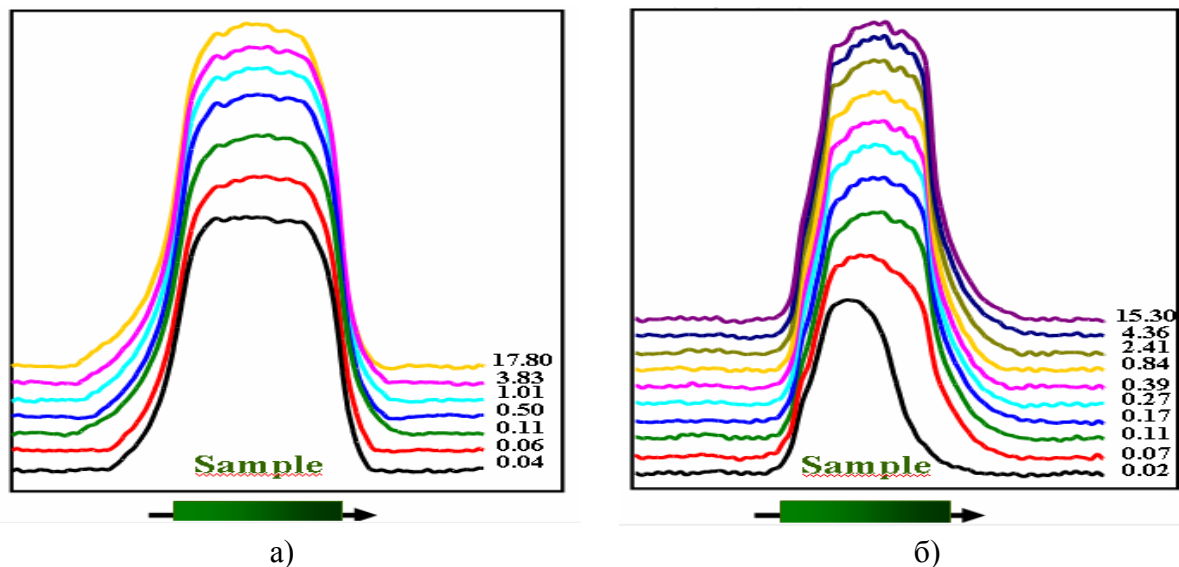


Рис. 1. Експериментальні дані досліджень масопереносу в каталітичному середовищі нанопористої структури: а) гексан; б) бензол

У матриці  $M(t_k, z_i, D_{intra}^\theta)$  часові й просторові змінні  $t$  та  $z$  визначають конкретні стани системи адсорбційного переносу в нанопористому каталітичному середовищі, для якого здійснюється ідентифікація кінетичних параметрів-коефіцієнтів внутрішньочастинкової дифузії.

Для ідентифікації цього розподілу використовується один із градієнтних методів, математичне обґрунтування застосування якого до задач параметричної ідентифікації мультикомпонентних розподілених систем представлено в [16, 17]. Виходячи зі специфіки задачі, найбільш придатним є метод мінімальних похибок, відповідно до якого, для визначення  $(\theta + 1)$ -го наближення коефіцієнта дифузії в внутрішньочастинковому просторі, застосовуємо таку градієнт-процедуру ідентифікації:

$$D_{\text{intra}}^{\theta+1} = D_{\text{intra}}^{\theta} - \nabla J(D_{\text{intra}}^{\theta}) \frac{\|e^{\theta}\|^2}{\|\nabla J(D_{\text{intra}}^{\theta})\|^2}; \quad (25)$$

Алгоритм проведення процедури ідентифікації зображено на рис. 2.

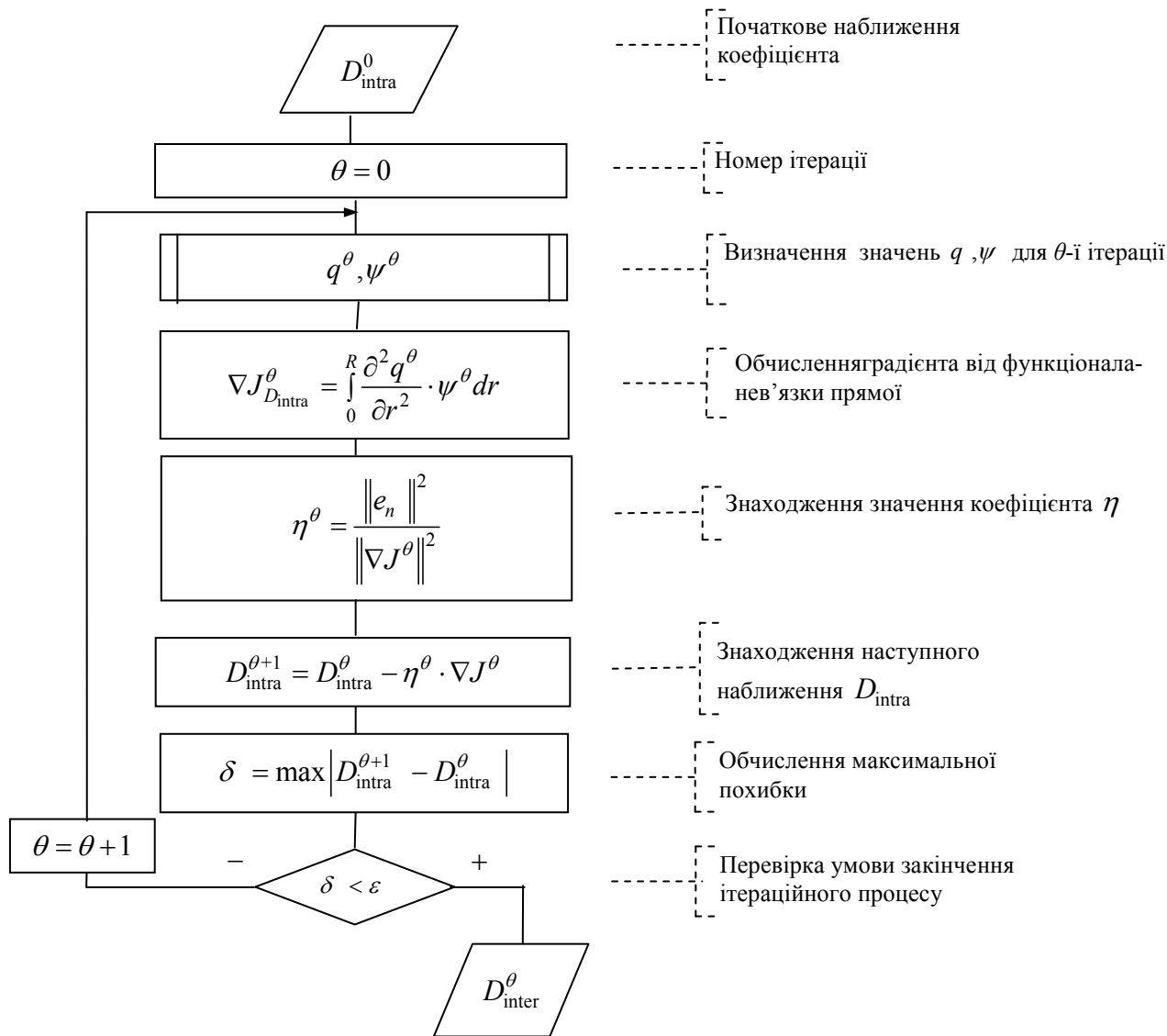


Рис. 2. Блок-схема алгоритму ідентифікації коефіцієнтів дифузії

**Чисельне моделювання та ідентифікація кінетичних параметрів системи.**

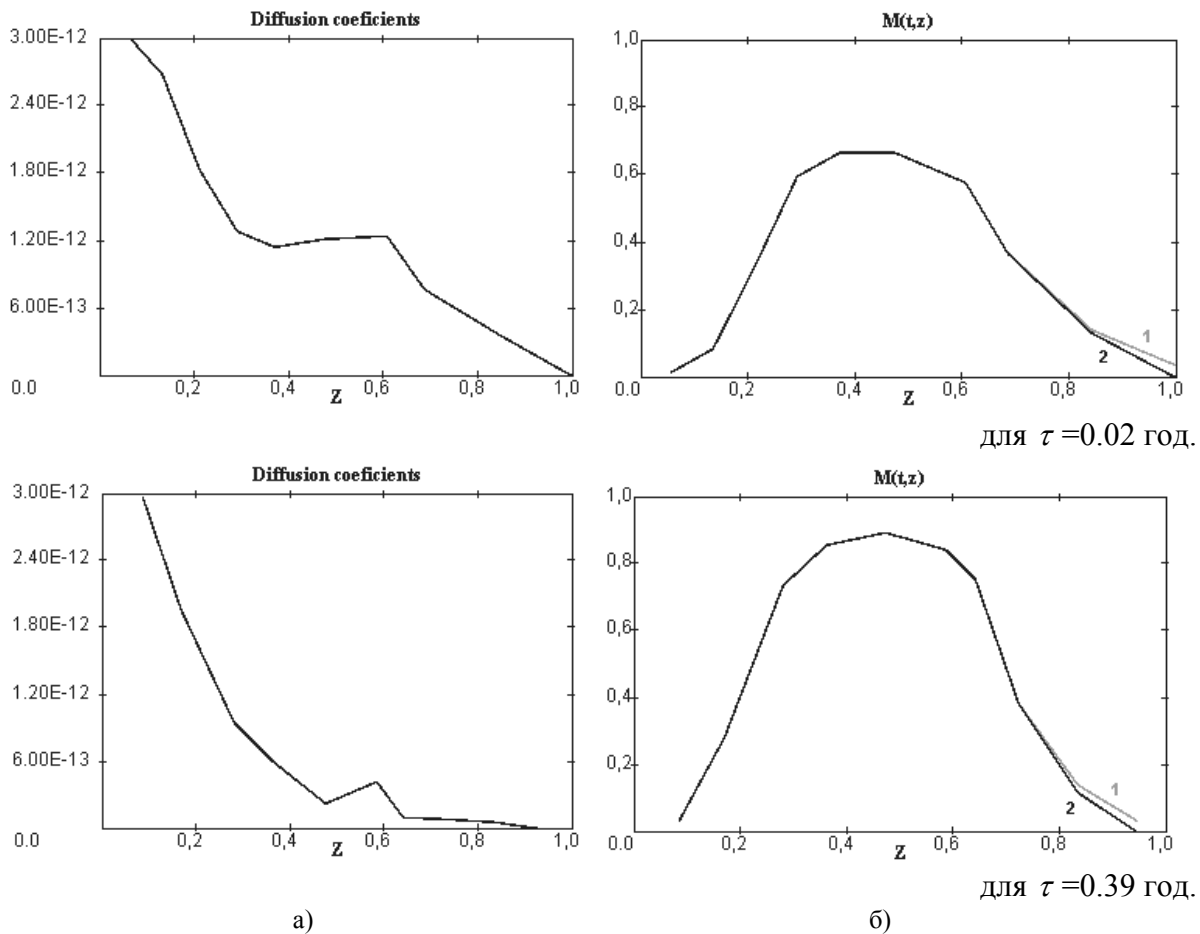
Виконувана процедура ідентифікації полягає у визначенні коефіцієнтів дифузії  $D_{\text{intra}}$  для процесу монодифузії з використанням описаного градієнтного методу.

При проведенні ідентифікації матриця експериментальних даних  $\left[ M_{\text{exp}k_i} \right]_{k=1, \overline{N}}^{i=1, \overline{M}}$

заповнювалась значенням розподілу сумарної поглиненої маси вздовж координати  $z$  для різних часових відрізків протікання процесу адсорбції, для чого використовувалися криві адсорбції (бензолу і гексану) у пористих цеолітних каталізаторах (рис. 1) [5].

Результати проведеної ідентифікації кінетики внутрішньочастинкової дифузії з використанням описаної вище методики ідентифікації, зображені на рис. 3 - 4 для різних часових зрізів по координаті товщини шару нанопористого середовища  $z$ , відповідають різним тривалостям дифузії згідно з програмою проведених фізичних

експериментів. Прийняті величини інших параметрів:  $l = 0.1\bar{i}$ ,  $R = 0.001\bar{i}$ ,  $\varepsilon_{\text{inter}} = 0.8$ ,  $K = 0.8$ .



а) б)  
Рис. 3. Результати ідентифікації коефіцієнтів дифузії  
для часу  $\tau = 0.02$  і  $\tau = 0.39$  для дифузії бензолу:

а) розподіл коефіцієнтів дифузії  $D_{\text{intra}}$ ;

б) порівняння модельної (2) й експериментальної (1) кривих

На рис. 3а зображено ідентифіковані розподіли коефіцієнта дифузії  $D_{\text{intra}}$  уздовж координати  $z$  (уздовж основного напрямку) системи для процесу адсорбції бензолу. Розглянуто два часові відтинки від початку процесу  $\tau = 0.02$  год. та  $\tau = 0.39$  год. Як бачимо, профілі мають характерне спадання значення коефіцієнта при русі вздовж досліджуваного зразка, причому профіль для випадку  $\tau = 0.39$  год. володіє більшою крутизною. Загалом значення коефіцієнта змінюється в діапазоні від  $3.5 \cdot 10^{-12} \div 5 \cdot 10^{-14} \bar{i} / \bar{n}^2$ .

Ідентифіковані розподіли коефіцієнтів дифузії для міжчастинкового простору дозволяють з достатнім ступенем точності моделювати концентраційні поля й інтегральні розподіли маси в каталітичному нанопористому шарі. Як бачимо з концентраційних розподілів (рис. 3б), значення модельних (2) та експериментальних (1) профілів для отриманих графіків інтегральної маси при адсорбції бензолу достатньою мірою узгоджуються між собою і повністю співпадають.

На рис. 4а зображено ідентифіковані розподіли коефіцієнта дифузії  $D_{\text{intra}}$  процесу адсорбції гексану. Тут також представлено два часових відтинки, при  $\tau = 0.04$  год. та  $\tau = 0.50$  год. Як і для розподілів коефіцієнтів для бензолу, бачимо характерне спадання значення коефіцієнта при русі уздовж пласти середовища і профіль для випадку більшого часу  $\tau = 0.50$  год. спадає швидше. Також варто зауважити, що

динаміка спадання профілю для гексану є більшою, ніж для бензолу. Значення коефіцієнта змінюється в діапазоні від  $2.7 \cdot 10^{-12} \div 3 \cdot 10^{-14}$  і  $/\tilde{n}^2$ .

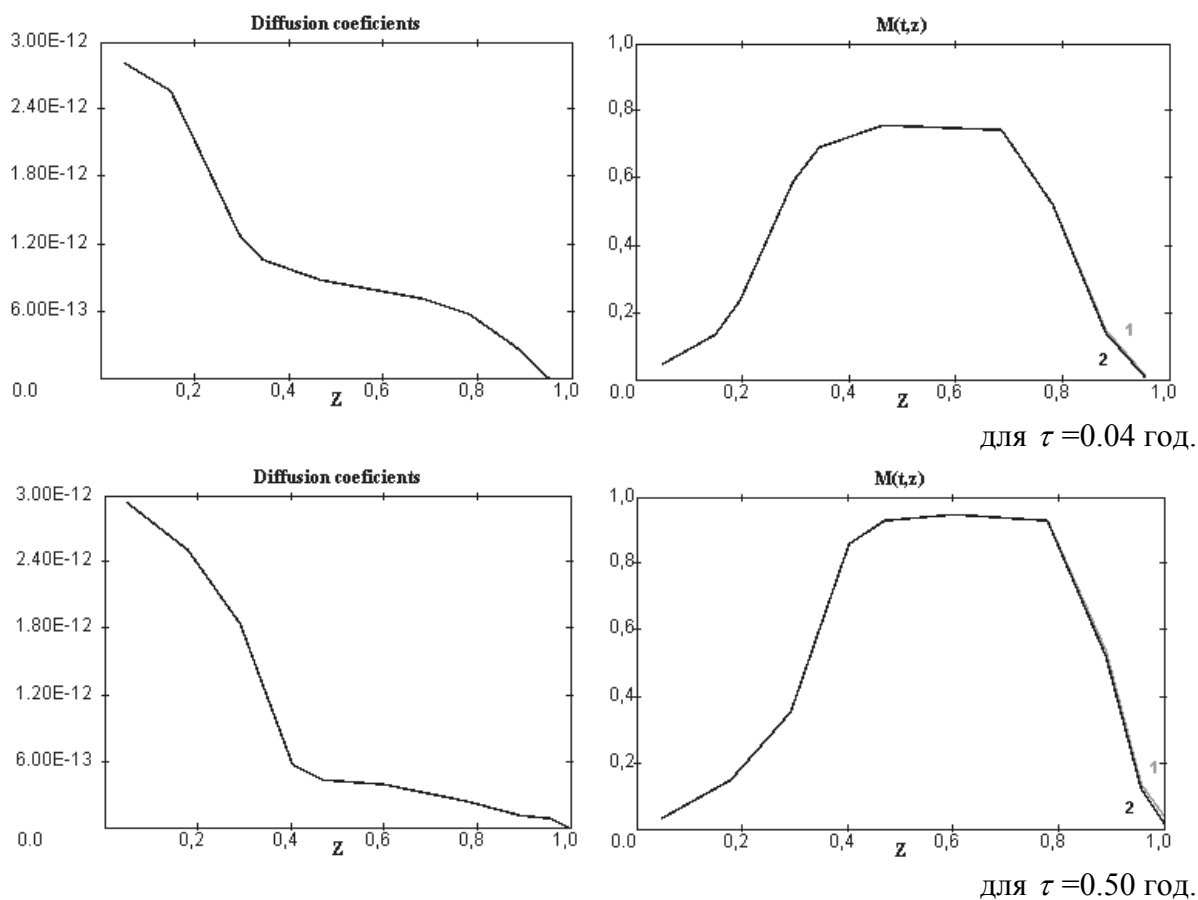


Рис. 4. Результати ідентифікації коефіцієнтів дифузії для часу  $\tau = 0.04$  і  $\tau = 0.50$  для дифузії гексану:

- а) розподіл коефіцієнтів дифузії  $D_{\text{intra}}$ ;
- б) порівняння модельної (2) й експериментальної (1) кривих

Порівняння модельних інтегральних розподілів маси, побудованих із використанням ідентифікованих значень коефіцієнта дифузії та експериментальних на випадок адсорбції гексану зображено на рис. 4б. Як і для випадку бензолу, практично повністю співпадають значення модельних (2) та експериментальних (1) профілів.

Отримані результати дозволяють проводити ефективне моделювання кінетики процесу дифузії, що підтверджується проведеним порівнянням модельних та експериментальних розподілів, їх можна застосовувати для дослідження умов рівноваги в каталітичних системах при дії різних факторів, для розроблення нових адсорбційних матеріалів з наперед заданими характеристиками, для сепарації та каталітичного розділення технологічних сумішей в нафтовій та хімічній галузях промисловості й т.д.

**Висновок.** Для моделі адсорбційного масопереносу в каталітичних пористих середовищах розроблено алгоритм градієнт-процедури ідентифікації параметрів внутрішньої кінетики системи дифузійного масопереносу та отримано чисельні розподіли значень коефіцієнтів дифузії для внутрішньочастинкового переносу вздовж координати товщини середовища (головного напрямку перенесення) для різних часових зрізів. За результатами ідентифікації перевірено моделі на адекватність, виконано чисельне моделювання й аналіз концентраційних і градієнтних полів масопереносу.

#### Література



1. Kärger J. Diffusion and Adsorption in Porous Solids //Handbook of Porous Solids // Kärger J. Ruthven D. Ed. by . F. Shuth, K.W. Sing and J.Weitkamp. Wiley-VCH Weinheim (Germany). – 2002. – P. 2089-2173.
2. Ruthven D. Principles of Adsorption and Adsorption Processes. – New York: Wiley-Interscience, 1984. – 464 p.
3. N’Gokoli-Kekele P. An analytical study of molecular transport in a zeolite crystallite bed / N’Gokoli-Kekele P., Springuel-Huet, M.-A., Fraissard J. // Adsorption.– 2002. – 8(3). – P. 35-44.
4. Kärger, J. Diffusion fundamentals / Kärger, J., Grinberg F., Heitjans P. – Leipziger Unviersite, Leipzig, 2005. – 615p.
5. F.D. Magalhães Study of molecular transport in beds of zeolite crystallites: semi-quantitative modeling of  $^{129}\text{Xe}$  NMR experiments / F.D. Magalhães , R.L. Laurence , W.C. Conner ,M.-A. Springuel-Huet, F. Nosov, J.Fraissard // J. Phys. Chem. B. – 1997. – v.101. – P. 2277-2284.
6. Petryk M. Mathematical modeling and visualization of gas transport in a zeolite bed using a slice selection procedure / Petryk M., Leclerc S., Canet D., Fraissard J. // Diffusion Fundamentals. – 2007. – 4. – P. 11.1-11.23.
7. Petryk M. Modeling of gas transport in a microporous solid using a slice selection procedure: Application to the diffusion of benzene in ZSM5 / Petryk M., Fraissard J., Leclerc S., Canet D. // Catalysis Today, Elsevier. – 2008 – 139(3). – P. 234–240.
8. Petryk. M. Liquid Flowing from Porous particles During the Pressing of Biological Materials / Petryk. M., Vorobiev E. // Computer and Chem. Eng. Elsevier (Ireland), – 2007. – 31. – P. 1336-1345.
9. Петрик М.Р. Математическое моделирование и визуализация системы многоуровневого массопереноса в неоднородных каталитических средах нанопористых частиц / М.Р. Петрик, Ж. Фрессард // Проблемы управления и информатики. – 2008. – №5.
10. Ленюк М.П. Математичне моделювання дифузійного масопереносу зі спектральним параметром для n-інтерфейсних неоднорідних і нанопористих напівобмежених середовищ // М.П. Ленюк, М.Р. Петрик // Волинський математичний вісник. Серія «Прикладна математика». – 2003. – Вип.1. – С. 69–95.
11. 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.
12. Петрик М.Р. Математическое моделирование массопереноса в симметрических неоднородных и нанопористых средах с системой n-интерфейсных взаимодействий // Кибернетика и системный анализ. – 2007. – №1, – С. 114–134.
13. Дейнека В.С. Численное решение обратных задач нестационарной теплопроводности для пласта / В.С. Дейнека, Н.А. Вещунова // Компьютерная математика. – 2008. – №2. – С.32–43.
14. Дейнека В.С. Модификация схемы Кранка-Николсона для решения уравнений конвективно-диффузионного переноса / В.С. Дейнека, Е.А. Евдин // Компьютерная математика. – 2006. – №3. – С.15–26.
15. Сергиенко И. В. Математическое моделирование и исследование процессов в неоднородных средах // И.В. Сергиенко, В.В.Скопеецкий, В.С. Дейнека. – К.: Наукова думка, 1991. – 432 с.
16. Дейнека В.С. Оптимальное управление неоднородными распределенными системами // В.С.Дейнека, И.В. Сергиенко. – К.: Наукова думка, 2003. – 506 с.
17. Сергиенко И.В. Системный анализ многокомпонентных распределенных систем / И.В. Сергиенко, В.С. Дейнека– К.: Наукова думка, 2009. – 638с.
18. Алифанов О.М. Обратные задачи теплообмена / О.М. Алифанов. – М.: Машиностроение, 1988. – 280с.

Отримано 10.09.2010 р.