

УДК 519.6

**Михайло Петрик, докт. фіз.-мат. наук;
Дмитро Михалик, канд. техн. наук; Марія Петрик**

Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя

ЧИСЛОВЕ МОДЕЛЮВАННЯ СКЛАДНОГО ДВОРІВНЕВОГО МАСОПЕРЕНОСУ В СЕРЕДОВИЩАХ ЧАСТИНОК МІКРОПОРИСТОЇ СТРУКТУРИ З ВИКОРИСТАННЯМ СХЕМИ КРАНКА-НІКОЛСОН

***Резюме.** Розглянуто математичну модель складного масопереносу в середовищах частинок мікропористої структури. Виконано числову апроксимацію моделі з використанням схеми Кранка-Ніколсон та реалізовано алгоритм побудови її розв'язку. Проведено числове моделювання складного дворівневого масопереносу та отримано графічні залежності концентраційних профілів у середині частинок та в міжчастинковому проторі в часі й при різних значеннях координат положення частинок.*

***Ключові слова:** математичне моделювання, масоперенос, схема Кранка-Ніколсон, мікро- і нанопористі середовища, концентраційні профілі*

Mykhaylo Petryk, Dmytro Mykhalyk, Maria Petryk

NUMERICAL MODELING OF COMPLEX TWO-LEVEL MASSTRANSFER IN MEDIA OF MICROPOROUS PARTICLES TAKING ADVANTAGE OF THE CRANK-NICOLSON METHOD

***Summary.** Numerical solution for mathematical model of two-component diffusion in catalytic porous particles media has been proposed. The work is based on the results of previously proposed bi-porous model and considers diffusion in micro- and nano porous particles, as well as diffusion in intraparticle space of catalytic media. More over, this model takes into account diffusion of competition, when more that one component can be adsorbed. Proposed model consists of a system of two partial differential equations, the first equation deals with diffusion in intraparticle space, the second equation describes diffusion inside porous particles and the interaction between equations are described as boundary conditions. Solution for two-component competitive diffusion mathematical model was obtained taking advantage of the Crank-Nicolson approximation method. The resulting solution was the basis for calculation algorithms construction and was applied for numerical simulation of graphical dependencies of component concentrations inside particles and intraparticle space of media. Numerical simulations of two components diffusion process flow over the time depending on various characteristics of the catalytic media, including diffusion coefficients of diffusing components have been performed. The resulting model profiles of concentration in interparticle space in time allow to estimate the dynamics of concentration changes in particle for various positions in the zeolite. Thus for particles that are in the top layer of the media concentration increases more rapidly and almost immediately reaches the state of saturation. At the same time, with the movement deep into the media, concentration profiles become more gentle, but eventually also reach the state of equilibrium. Considering concentration inside the particles, it is worth noting that the lowest concentrations are observed in its center and they increase while moving from the center to the outer surface of particles. Moreover, the outer surface of the particles concentration value is equal to the concentration value in the interparticle space. Besides more rapid growth of the concentrations dynamics for the second component of a two-component diffusion was noticed, caused by the higher value of its kinetic characteristics.*

***Key words:** mathematical modeling, mass transfer, Crank-Nicolson method, catalytic media, concentration profiles.*

Постановка проблеми. Можливість числового моделювання складних процесів є важливою для багатьох галузей промисловості. Одним із прикладів є масоперенос у середовищі, що складається з пористих частинок та забезпечується двома процесами: процесом дифузії в макропорах, завдяки простору між кристалами,

та процесом дифузії в системі мікро- і нанопор всередині кристалітів. Вплив кожного із цих процесів на загальний перебіг дифузії визначається значенням ряду параметрів, що визначають адсорбційну рівновагу в середовищі, основними серед яких є коефіцієнти дифузії.

Аналіз останніх досліджень і публікацій. При дослідженнях процесів масопереносу здебільшого розглядають молекулярний транспорт окремих речовин у пористому середовищі, зумовлений масопереносом на макрорівні без урахування істотного впливу ефектів і особливостей в частинках середовища [1-3], що насправді є визначальним фактором загальної кінетики процесу адсорбції [2]. На жаль, основні питання міжмолекулярної взаємодії, що мають місце в реальних системах багатокомпонентної дифузії речовин, зважаючи на принцип Ленгмюра-Хіншенвуда [2], здебільшого залишаються поза увагою.

В попередніх працях авторів вже запропоновано ряд підходів до моделювання процесів складної дифузії двох газів та врахування явища масопереносу при процесах масообміну, і зокрема адсорбції, не лише на макрорівні, за рахунок просторів між частинками адсорбенту, але й на мікрорівні за рахунок мікро- та нанопор частинок [4 – 7].

Мета роботи. Числове моделювання кінетичних параметрів дифузійного масопереносу на основі моделі двокомпонентної компетитивної дифузії для каталітичного середовища частинок пористої структури. Ґрунтується на результатах, отриманих у працях [8 – 10], а розв’язок моделі отримано з використання чисельних методів на основі схеми Кранка-Ніколсон.

Постановка задачі. Розглядаючи задачу складного дворівневого адсорбційного масопереносу двох компонент у середовищі частинок мікропористої структури, як і у випадку однокомпонентного масопереносу, беруться до уваги процеси дифузії як на макрорівні – в міжчастинковому просторі, так і на мікрорівні – в порах частинок. Математична модель дворівневого двокомпонентного адсорбційного масопереносу в пористому середовищі записується у вигляді системи рівнянь у частинних похідних. Модель двокомпонентного адсорбційного масопереносу в мікропористому середовищі записується як побудова розв’язками системи рівнянь в частинних похідних

$$\frac{\partial C_1}{\partial t} = D_{\text{inter}1} \frac{\partial^2 C_1}{\partial z^2} + D_{\text{inter}2} \frac{\partial^2 C_2}{\partial z^2} - \frac{\partial}{\partial x} (\theta_{\text{intra}1} Q_1 + \theta_{\text{intra}2} Q_2)_{x=R}, \quad (1)$$

$$\frac{\partial C_2}{\partial t} = D_{\text{inter}21} \frac{\partial^2 C_1}{\partial z^2} + D_{\text{inter}22} \frac{\partial^2 C_2}{\partial z^2} - \frac{\partial}{\partial x} (\theta_{\text{intra}21} Q_1 + \theta_{\text{intra}22} Q_2)_{x=R}, \quad (2)$$

$$\frac{\partial Q_1}{\partial t} = D_{\text{intra}11} \frac{\partial^2 Q_1}{\partial x^2} + D_{\text{intra}12} \frac{\partial^2 Q_2}{\partial x^2}, \quad (3)$$

$$\frac{\partial Q_2}{\partial t} = D_{\text{intra}21} \frac{\partial^2 Q_1}{\partial x^2} + D_{\text{intra}22} \frac{\partial^2 Q_2}{\partial x^2}, \quad (4)$$

в області $D = \{(t, r, z) : t > 0, 0 < x < R, 0 < z < l\}$,

з початковими умовами

$$C_1(t, z)|_{t=0} = 0, \quad C_2(t, z)|_{t=0} = 0, \quad (5)$$

$$Q_2(t, x, z)|_{t=0} = 0, \quad Q_2(t, x, z)|_{t=0} = 0, \quad (6)$$

крайовими умовами

$$C_i(t, z)|_{z=1} = C_{\infty i}, \quad \frac{\partial C_i(t, z)}{\partial z} \Big|_{z=0} = 0, \quad (7)$$

$$Q_i(t, x, z)|_{x=R} = K_i \cdot C_i(t, z), \quad \frac{\partial Q_i(t, x, z)}{\partial x} \Big|_{x=0} = 0. \quad (8)$$

Математична модель (1) – (8) складається із двох взаємопов’язаних систем рівнянь, що описують двокомпонентний масоперенос у міжчастинковому просторі пористого середовища, з поточними концентраціями компонентів $C_1(t, z)$ і $C_2(t, z)$, та масоперенос на мікрорівні (за рахунок простору в частинках), з поточними концентраціями компонентів $Q_1(t, x, z)$ і $Q_2(t, x, z)$. Взаємозв’язок між просторами і відповідними концентраціями визначається складовою правої частини рівнянь (1) та (2), а також крайовими умовами (8).

Тут $\theta_{\text{intra}_{ij}} = 3 \frac{(1 - \varepsilon_{\text{inter}}) D_{\text{intra}_{ij}}}{\varepsilon_{\text{inter}} R}$ – коефіцієнти впливу внутрішньочастинкового переносу на міжчастинковий;

$$D_{\text{inter}} = \begin{bmatrix} D_{\text{inter}_{11}} & D_{\text{inter}_{12}} \\ D_{\text{inter}_{21}} & D_{\text{inter}_{22}} \end{bmatrix}, \quad D_{\text{intra}} = \begin{bmatrix} D_{\text{intra}_{11}} & D_{\text{intra}_{12}} \\ D_{\text{intra}_{21}} & D_{\text{intra}_{22}} \end{bmatrix} \text{ – матриці коефіцієнтів дифузії,}$$

причому коефіцієнти $D_{\text{inter}_{11}}$, $D_{\text{inter}_{22}}$ та $D_{\text{intra}_{11}}$, $D_{\text{intra}_{22}}$ визначають швидкість процесу монодифузії компонентів, а коефіцієнти $D_{\text{inter}_{12}}$, $D_{\text{inter}_{21}}$ та $D_{\text{intra}_{12}}$, $D_{\text{intra}_{21}}$ – швидкість взаємодифузії компонентів, відповідно для міжчастинкового та внутрішньочастинкового просторів [10].

Методологія побудови розв’язку моделі. Для побудови чисельного розв’язку задачі (1) – (8) застосуємо до вихідної системи рівнянь різницеву схему Кранка-Ніколсон [11], для чого введемо в області D рівномірну сітку вигляду $D^* = \{(t_k, Z_i, X_{ij}) : t_k = k \cdot \Delta t, k = \overline{1, N}; Z_i = i \cdot \Delta Z, i = \overline{1, M}; X_{ij} = j \cdot \Delta X, j = \overline{1, L}; \Delta t = \frac{t}{N}, \Delta Z = \frac{Z}{M}, \Delta X = \frac{X}{L}\}$, де $N, M, L \in \mathbb{N}$ – параметри розбиття області; $\Delta t, \Delta Z, \Delta X$ – кроки сітки по змінних t, Z, X відповідно.

Дифузія в мікропорах середовища (внутрішньочастинковий простір). Після апроксимації за обраною схемою отримаємо системи рівнянь з чотирма невідомими і парою крайових умов для кожного із рівнянь системи

$$\left. \begin{aligned} a_1^q \cdot Q_{1_{ij-1}}^{k+1} + d_1^q \cdot Q_{1_{ij}}^{k+1} + b_1^q \cdot Q_{1_{ij+1}}^{k+1} + g_1^q \cdot Q_{2_{ij}}^{k+1} &= f_{1_{ij}}^q \\ a_2^q \cdot Q_{2_{ij-1}}^{k+1} + d_2^q \cdot Q_{2_{ij}}^{k+1} + b_2^q \cdot Q_{2_{ij+1}}^{k+1} + g_2^q \cdot Q_{1_{ij}}^{k+1} &= f_{2_{ij}}^q \end{aligned} \right\} \quad (9)$$

Для знаходження невідомих значень концентрацій $Q_{1_{ij}}^{k+1}$, $Q_{2_{ij}}^{k+1}$ на наступному $(k+1)$ -му часовому шарі за значеннями концентрацій k -го шару використовується метод прогонки [11], який застосовується одночасно до двох рівнянь системи (9).

Формули для обчислення значень концентрацій в вузлах сітки дорівнюють:

$$Q_{1j}^{k+1} = \alpha_{1j}^q \cdot Q_{1j+1}^{k+1} + \beta_{1j}^q + \gamma_{1j}^q Q_{2j+1}^{k+1}, \quad (10)$$

$$Q_{2ij}^{k+1} = \alpha_{2j}^q \cdot Q_{2ij+1}^{k+1} + \beta_{2j}^q + \gamma_{2j}^q Q_{1ij+1}^{k+1}, \quad (11)$$

де $\alpha_{1j}^q, \beta_{1j}^q, \gamma_{1j}^q, \alpha_{2j}^q, \beta_{2j}^q, \gamma_{2j}^q, j = \overline{1, L}$ – коефіцієнти, що визначаються при виконанні прямого ходу методу прогонки.

Значення шуканих коефіцієнтів для випадку $j=L$ знаходимо, використовуючи крайові умови моделі, відповідно до яких $Q_{1l0}^{k+1} = Q_{1l2}^{k+1}$ та $Q_{2l0}^{k+1} = Q_{2l2}^{k+1}$, а, отже, після відповідних перетворень отримаємо, що

$$\left. \begin{aligned} \alpha_{1l}^q &= -\frac{(a_1^q + b_1^q)d_2^q}{d_1^q d_2^q - g_1^q g_2^q} & \beta_{1l}^q &= \frac{f_{1lj}^q d_2^q - f_{2lj}^q g_1^q}{d_1^q d_2^q - g_1^q g_2^q} & \gamma_{1l}^q &= \frac{g_1^q (a_2^q + b_2^q)}{d_1^q d_2^q - g_1^q g_2^q} \\ \alpha_{2l}^q &= -\frac{(a_2^q + b_2^q)d_1^q}{d_2^q d_1^q - g_2^q g_1^q} & \beta_{2l}^q &= \frac{f_{2lj}^q d_1^q - g_2^q f_{1lj}^q}{d_2^q d_1^q - g_2^q g_1^q} & \gamma_{2l}^q &= \frac{g_2^q (a_1^q + b_1^q)}{d_2^q d_1^q - g_2^q g_1^q} \end{aligned} \right\} \quad (12)$$

У загальному випадку значення коефіцієнтів визначаються

$$\alpha_{1j}^q = \frac{1}{\psi} \cdot \frac{-b_1^q}{a_1^q \alpha_{1j-1}^q + d_1^q}, \quad \beta_{1j}^q = \frac{1}{\psi} \cdot \left(\frac{f_{1ij}^q - \alpha_{1j-1}^q \beta_{1j-1}^q}{a_1^q \alpha_{1j-1}^q + d_1^q} - \frac{a_1^q \gamma_{1j-1}^q + g_1^q}{a_1^q \alpha_{1j-1}^q + d_1^q} \cdot \frac{f_{2ij}^q - a_2^q \beta_{2j-1}^q}{a_2^q \alpha_{2j-1}^q + d_2^q} \right),$$

$$\gamma_{1j}^q = \frac{1}{\psi} \cdot \frac{a_1^q \gamma_{1j-1}^q + g_1^q}{a_1^q \alpha_{1j-1}^q + d_1^q} \cdot \frac{b_2^q}{a_2^q \alpha_{2j-1}^q + d_2^q}, \quad \psi = \left(1 - \frac{a_2^q \gamma_{2j-1}^q + g_2^q}{a_2^q \alpha_{2j-1}^q + d_2^q} \cdot \frac{a_1^q \gamma_{1j-1}^q + g_1^q}{a_1^q \alpha_{1j-1}^q + d_1^q} \right), \quad (13)$$

$$\alpha_{2j}^q = \frac{1}{\psi} \cdot \frac{-b_2^q}{a_2^q \alpha_{2j-1}^q + d_2^q}, \quad \beta_{2j}^q = \frac{1}{\psi} \cdot \left(\frac{f_{2ij}^q - a_2^q \beta_{2j-1}^q}{a_2^q \alpha_{2j-1}^q + d_2^q} - \frac{a_2^q \gamma_{2j-1}^q + g_2^q}{a_2^q \alpha_{2j-1}^q + d_2^q} \cdot \frac{f_{1ij}^q - \alpha_{1j-1}^q \beta_{1j-1}^q}{a_1^q \alpha_{1j-1}^q + d_1^q} \right),$$

$$\gamma_{2j}^q = \frac{1}{\psi} \cdot \frac{a_2^q \gamma_{2j-1}^q + g_2^q}{a_2^q \alpha_{2j-1}^q + d_2^q} \cdot \frac{-b_1^q}{a_1^q \alpha_{1j-1}^q + d_1^q}.$$

Значення концентрацій у вузлах нульового шару, виходячи із початкової умови (5) задачі рівні:

$$Q_{1ij}^0 = 0, \quad Q_{2ij}^0 = 0, \quad i = \overline{1, M}, \quad j = \overline{1, L}. \quad (14)$$

Дифузія в макропорах середовища (міжчастинковий простір). Аналогічним чином, апроксимуючи за схемою Кранка-Ніколсон рівняння дифузії в мікропорах, отримаємо систему

$$\left. \begin{aligned} a_1^c \cdot C_{l_{i-1}}^{k+1} + d_1^c \cdot C_{l_i}^{k+1} + b_1^c \cdot C_{l_{i+1}}^{k+1} + g_1^c \cdot C_{2_i}^{k+1} &= f_{l_i}^c \\ a_2^c \cdot C_{2_{i-1}}^{k+1} + d_2^c \cdot C_{2_i}^{k+1} + b_2^c \cdot C_{2_{i+1}}^{k+1} + g_2^c \cdot C_{l_i}^{k+1} &= f_{2_i}^c \end{aligned} \right\} \quad (15)$$

Формули для обчислення концентрацій у вузлах на $(k+1)$ – му часовому шарі за значеннями концентрацій на k -му шарі, для випадку міжчастинкового простору мають вигляд

$$\left. \begin{aligned} C_{l_i}^{k+1} &= \alpha_{l_i}^c \cdot C_{l_{i+1}}^{k+1} + \beta_{l_i}^c + \gamma_{l_i}^c C_{2_{i+1}}^{k+1} \\ C_{2_i}^{k+1} &= \alpha_{2_i}^c \cdot C_{2_{i+1}}^{k+1} + \beta_{2_i}^c + \gamma_{2_i}^c C_{l_{i+1}}^{k+1} \end{aligned} \right\} \quad (16)$$

де $\alpha_{l_i}^c, \beta_{l_i}^c, \gamma_{l_i}^c, \alpha_{2_i}^c, \beta_{2_i}^c, \gamma_{2_i}^c, i = \overline{1, M}$ – коефіцієнти, значення яких визначаються

$$\alpha_{l_i}^c = \frac{1}{\varphi} \cdot \frac{-b_1^c}{a_1^c \alpha_{l_{i-1}}^c + d_1^c}, \quad \beta_{l_i}^c = \frac{1}{\varphi} \cdot \left(\frac{f_{l_i}^c - \alpha_{l_{i-1}}^c \beta_{l_{i-1}}^c}{a_1^c \alpha_{l_{i-1}}^c + d_1^c} - \frac{a_1^c \gamma_{l_{i-1}}^c + g_1^c}{a_1^c \alpha_{l_{i-1}}^c + d_1^c} \cdot \frac{f_{2_i}^c - a_2^c \beta_{2_{i-1}}^c}{a_2^c \alpha_{2_{i-1}}^c + d_2^c} \right),$$

$$\gamma_{l_i}^c = \frac{1}{\varphi} \cdot \frac{a_1^c \gamma_{l_{i-1}}^c + g_1^c}{a_1^c \alpha_{l_{i-1}}^c + d_1^c} \cdot \frac{b_2^c}{a_2^c \alpha_{2_{i-1}}^c + d_2^c}, \quad \varphi = \left(1 - \frac{a_2^c \gamma_{2_{i-1}}^c + g_2^c}{a_2^c \alpha_{2_{i-1}}^c + d_2^c} \cdot \frac{a_1^c \gamma_{l_{i-1}}^c + g_1^c}{a_1^c \alpha_{l_{i-1}}^c + d_1^c} \right); \quad (17)$$

$$\alpha_{2_i}^c = \frac{1}{\varphi} \cdot \frac{-b_2^c}{a_2^c \alpha_{2_{i-1}}^c + d_2^c}, \quad \beta_{2_i}^c = \frac{1}{\varphi} \cdot \left(\frac{f_{2_i}^c - a_2^c \beta_{2_{i-1}}^c}{a_2^c \alpha_{2_{i-1}}^c + d_2^c} - \frac{a_2^c \gamma_{2_{i-1}}^c + g_2^c}{a_2^c \alpha_{2_{i-1}}^c + d_2^c} \cdot \frac{f_{l_i}^c - \alpha_{l_{i-1}}^c \beta_{l_{i-1}}^c}{a_1^c \alpha_{l_{i-1}}^c + d_1^c} \right),$$

$$\gamma_{2_i}^c = \frac{1}{\varphi} \cdot \frac{a_2^c \gamma_{2_{i-1}}^c + g_2^c}{a_2^c \alpha_{2_{i-1}}^c + d_2^c} \cdot \frac{-b_1^c}{a_1^c \alpha_{l_{i-1}}^c + d_1^c}.$$

Значення концентрацій в вузлах нульового шару знаходимо, виходячи із початкової умови

$$C_{l_i}^0 = 0, \quad C_{2_i}^0 = 0, \quad i = \overline{1, M}. \quad (18)$$

Результати досліджень. Використовуючи отримані чисельні розв’язки задачі, виконано числове моделювання перебігу процесу дифузії двох речовин у часі залежно від різних характеристик середовища, в тому числі й значень коефіцієнтів дифузії для дифундуючих компонентів, які саме й визначають динаміку процесу. Розглянуто характерні випадки співвідношення коефіцієнтів дифузії речовин, що беруть участь у процесі двокомпонентного масопереносу.

Отримані модельні профілі зміни концентрації у міжчастинковому просторі у часі представлено на рис. 1. Вони дозволяють оцінити динаміку зміни значень концентрації в частинці для різних положень у цеоліті. Як бачимо з рисунка, для частинок, що знаходяться у верхній частині шару середовища ($Z = 0.95$), концентрація зростає більш стрімко і майже відразу досягає стану насиченості. У той же час, із рухом у глиб пласту середовища (зменшенням значення Z), профілі концентрації стають більш пологими, але з часом також досягають стану рівноваги.

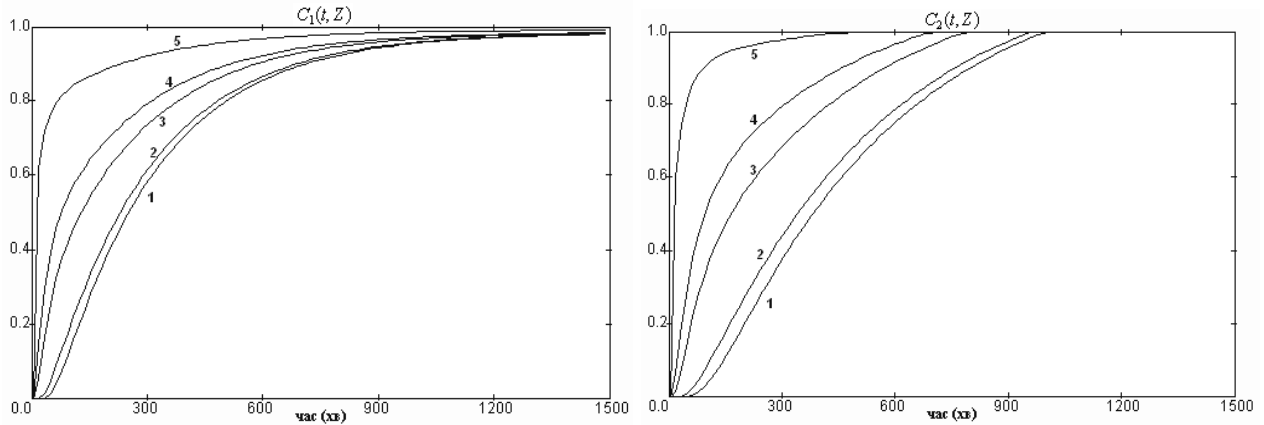


Рисунок 1. Профілі залежності безрозмірних концентрацій в міжчастинковому просторі $C_1(t, z)$ і

$C_2(t, z)$ від часу $t, [xв]$

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

Figure 1. Dimensionless concentration profiles in intraparticles space

$C_1(t, z)$ and $C_2(t, z)$ in time t [min]

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

На рис. 2 представлені профілі концентрації в частинках пористого середовища в часі залежно від значення координати радіуса частинки X та положення частинки в середовищі. Як бачимо з наведених рисунків, найменше значення концентрації в частинці спостерігається в її центрі, а при русі від центру до зовнішньої поверхні значення концентрації збільшується, при цьому збільшення не пропорційні між собою. Причому, на зовнішній поверхні частинки ($X = 1$) значення концентрації максимальне й дорівнює значенню концентрації в міжчастинковому просторі. Більш стрімка динаміка зростання значення концентрацій у частинці для другої компоненти процесу двокомпонентної дифузії зумовлена вищими значеннями її кінетичних характеристик – коефіцієнтів дифузії.

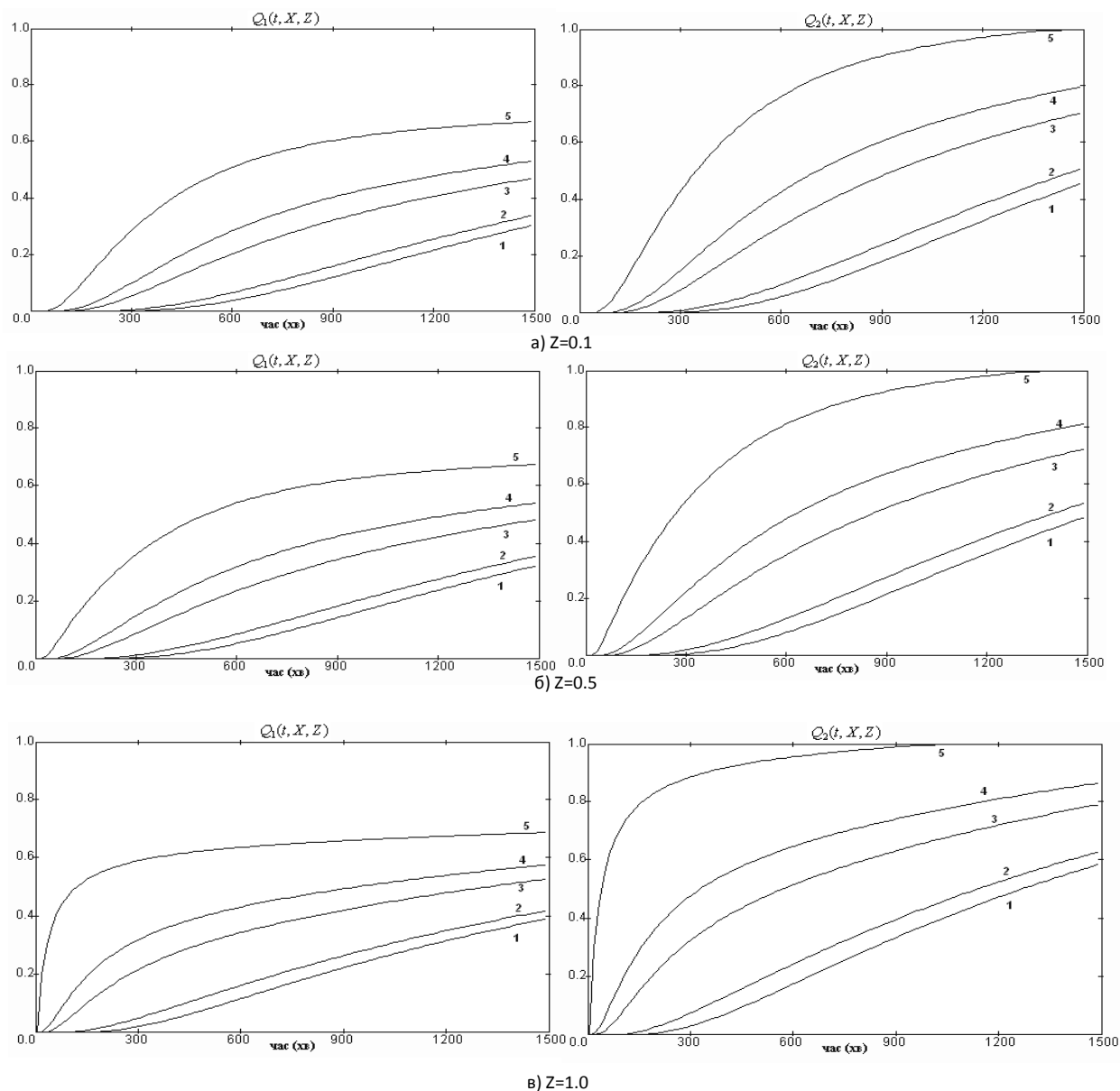


Рисунок 2. Профілі залежності безрозмірних концентрацій у частинці

$Q_1(t, x, z)$ і $Q_2(t, x, z)$ від часу $t, [хв]$

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

Figure 2. Dimensionless concentration profiles in particles

$Q_1(t, x, z)$ and $Q_2(t, x, z)$ in time $t [min]$

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

Висновки. Для математичної моделі складної дворівневої дифузії в середовищі частинок мікропористої структури запропоновано числовий розв'язок, побудований за схемою Кранка-Ніколсон. Отриманий розв'язок покладено в основу побудови алгоритмів розрахунку кінетичних параметрів дифузійного масопереносу та використано для числового моделювання графічних залежностей концентрацій компонентів у міжчастинковому просторі та в частинках середовища. Отримані графічні розподіли дозволяють оцінити ефективні режими роботи адсорбентів та

прогнозувати їх максимальний поріг адсорбування для випадків двокомпонентної дифузії.

Conclusions. The paper contains numerical solution for mathematical model of two-component competitive diffusion in catalytic porous particles media based on the Crank-Nicolson method. The resulting solution was the basis for calculation algorithms construction and was applied for numerical simulation of graphical dependencies of component concentrations inside particles and intraparticle space of media. The resulting distribution allows to estimate effective regimes of adsorptions and to predict maximum adsorption threshold during competitive diffusion processes.

Список використаної літератури

1. Kärger, J. Diffusion and Adsorption in Porous Solids // Handboubk of Porous Solids // Kärger J. Ruthven D. Ed. by. F. Shuth, K.W. Sing and J.Weitkamp. Wiely-VCH Wenheim (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. 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.
5. 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.
6. Математичне моделювання та ідентифікація параметрів масопереносу в неоднорідних і нанопористих середовищах (компетитивна дифузія, адсорбція) [Текст] / В.С. Дейнека, М.Р. Петрик, Д. Кане та Ж. Фресар – К.: Національна академія наук України. Інститут кібернетики імені В.М. Глушкова, 2014. – 182 с.
7. Математичне моделювання масопереносу в середовищах частинок нанопористої структури [Текст] / І.В. Сергієнко, М.Р. Петрик, О.М. Хіміч, Д. Кане, Д.М. Михалик, С. Леклерк, Ж. Фресар // Національна академія наук України, Інститут кібернетики імені В.М. Глушкова – 2014 – 209 с.
8. Петрик, М.Р. Математичне моделювання нелінійних сумісних процесів адсорбції та дифузії в потоці рідини або газу [Текст] / М.Р. Петрик // Інтегральні перетворення та їх застосування до крайових задач: Зб. наук. праць. – Київ.: Ін-т. матем. НАНУ, 1993. – Вип. 3. – С. 220 – 233.
9. Петрик, М.Р. Математична модель та побудова розв’язку систем компетитивного переносу в неоднорідному середовищі нанопористих частинок [Текст] / М.Р. Петрик // Вісник Харківського національного університету. – 2010. – № 926. – Серія «Математичне моделювання. Інформаційні технології. Автоматизовані системи управління». – Вип. 15. – С. 195 – 203.
10. Петрик, М.Р. Моделювання і параметрична ідентифікація в системі компетитивного переносу в неоднорідному середовищі пористих частинок [Текст] / 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.
11. Бахвалов, Н.С. Численне методи / Н.С. Бахвалов. – М.: Главная редакция физико-математической литературы издательства «Наука», 1973. – 632 с.

Отримано 28.09.2015