

**Міністерство освіти і науки України
Тернопільський національний технічний університет
імені Івана Пулюя**

**ВИСОКОПРОДУКТИВНІ МЕТОДИ
МОДЕЛЮВАННЯ ТА ПРОЄКТУВАННЯ
СКЛАДНИХ РЕСУРСО-
ЕНЕРГОЗБЕРІГАЮЧИХ ПРОЦЕСІВ У
НАНОПОРИСТИХ І ДИСПЕРСНИХ
СЕРЕДОВИЩАХ**

Монографія

**Тернопіль
2022**

УДК 519.6.6+681.3
ПЗ0

Автори:

Петрик М.Р., д.ф.-м.н, професор,
Лебовка М.І., д.ф.-м.н, професор,
Бойко І.В., к. ф.-м.н, доцент

Рецензенти

Сверстюк А.С., д.т.н, професор,
Пукас А.В., д.т.н, професор

*Схвалено та рекомендовано до друку на засіданні вченої ради
Тернопільського національного технічного університету імені Івана Пулюя
(протокол №3 від 22 листопада 2022 року)*

ПЗ0 Петрик М.Р. Високопродуктивні методи моделювання та проектування складних ресурсо-енергозберігаючих процесів у нанопористих і дисперсних середовищах : монографія/ М.Р. Петрик, М.І. Лебовка, І.В. Бойко.–Тернопіль: Вид-во ТНТУ імені Івана Пулюя, 2022.–160 с.

Монографія присвячена розробці методів математичного моделювання фізичних та технологічних процесів, що відбуваються нанорозмірних та нанопористих системах різної природи. Розглядаються підходи до програмної реалізації розвинених математичних моделей.

Призначена для науковців, аспірантів, що спеціалізуються в галузі математичного моделювання, прикладної математики та інженерії програмного забезпечення.

ISBN 978-966-305-123-9

УДК 519.6.6+681.3

© М.Р. Петрик, М.І. Лебовка, І.В. Бойко2022

© Тернопільський національний технічний
університет імені Івана Пулюя,2022

ISBN 978-966-305-123-9

ЗМІСТ

РОЗДІЛ 1. ВИСОКОПРОДУКТИВНІ МЕТОДИ МОДЕЛЮВАННЯ АДСОРБЦІЇ ЗІ ЗВОРОТНИМИ ЗВ'ЯЗКАМИ ДЛЯ В НЕОДНОРІДНИХ БАГАТОКОМПОНЕНТНИХ НАНОПОРИСТИХ СЕРЕДОВИЩАХ	9
1. Аналіз стану досліджень	9
2. Підхід до декомпозиції нелінійної системи для адсорбційної моделі кінетики газів.....	12
3. Нелінійна модель адсорбції в односкладовому нанопористому середовищі.....	14
4. Крайова задача для моделі адсорбції в неоднорідних <i>n</i> -компонентних нанопористих середовищах	19
5. Матричні алгоритми обчислення визначника системи та головних розв'язків задачі.....	25
Висновки до розділу 1.....	31
Список використаної літератури.....	32
РОЗДІЛ 2. ВИСОКОПРОДУКТИВНІ МЕТОДИ МОДЕЛЮВАННЯ НАНОАДСОРБЦІЇ ТА ДИФУЗІЇ ЗІ ЗВОРОТНИМИ ЗВ'ЯЗКАМИ ДЛЯ В НЕОДНОРІДНИХ ЦИЛІНДРИЧНИХ БАГАТОКОМПОНЕНТНИХ НАНОПОРИСТИХ СЕРЕДОВИЩАХ	35
1. Аналіз стану досліджень	35
2. Математичний опис задачі.....	36
3. Методика побудови аналітичного розв'язку моделі та рекурентні алгоритми обчислення матриць функцій впливу (основні розв'язки).....	38
4. Обговорення результатів.....	47
Висновки до розділу 2.....	49
Список використаної літератури.....	49
РОЗДІЛ 3. ВИСОКОПРОДУКТИВНІ МЕТОДИ МОДЕЛЮВАННЯ ТА ІДЕНТИФІКАЦІЇ ПАРАМЕТРІВ СКЛАДНИХ ПРОЦЕСІВ НАНОФІЛЬТРАЦІЇ І ДИФУЗІЇ В СЕРЕДОВИЩАХ АСИЧЕНИХ РІЗНОРОЗМІРНИХ НАНОПОРИСТИХ ЧАСТИНОК	51
1. Аналіз стану досліджень	51
2. Математичне формулювання проблеми	52
3. Пряма задача.....	55
4. Градієнтний метод розв'язання задачі коефіцієнтної ідентифікації	56
5. Високопродуктивна технологія отримання аналітичних виразів компонентів градієнта функціоналу – нев'язки	57
6. Отримання формул виразів градієнтів функціоналу-нев'язки	63
7. Числовий аналіз	65

8. Високопродуктивні інформаційні технології для дослідження систем нанофільтрації в середовищах різнорозмірних нанопористих частинок	68
Висновки до розділу 3.....	79
Список використаної літератури.....	80
РОЗДІЛ 4. ВИСОКОПРОДУКТИВНІ ТЕХНОЛОГІЇ МОДЕЛЮВАННЯ НА СУПЕРКОМПЮТЕРІ МАКРО- І НАНОФІЛЬТРАЦІЇ І НАНОДИФУЗІЇ В ПРОСТОРИ РІЗНОРОЗМІРНИХ НАНОПРИСТИХ ЧАСТИНОК МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО	82
1. Аналіз стану досліджень	82
2. Основні визначення та методика обчислень.....	85
3. Результати і обговорення	87
Висновки до розділу 4.....	90
Список використаної літератури.....	92
РОЗДІЛ 5. ДИНАМІЧНА ПРОВІДНІСТЬ РЕЗОНАНСНО-ТУНЕЛЬНИХ СТРУКТУР З НЕПАРНОЮ (ПАРНОЮ) КІЛЬКІСТЮ КВАНТОВИХ ЯМ У АКТИВНІЙ ЗОНІ КВАНТОВИХ КАСКАДНИХ ЛАЗЕРІВ ЧИ ДЕТЕКТОРІВ	94
1. Аналіз стану досліджень	94
2. Стаціонарний електронний спектр та сили осциляторів квантових переходів у багатошарових закритих резонансно-тунельних структурах, як грубих моделях квантових каскадних детекторів	95
3. Теорія квазістаціонарного електронного спектру та активної динамічної провідності багатошарових відкритих резонансно-тунельних структур як відкритих моделей квантових каскадних детекторів	98
4. Стаціонарний електронний спектр та сили осциляторів квантових переходів у багатошарових закритих резонансно-тунельних структурах у поздовжньому постійному електричному полі, як грубих моделях квантових каскадних лазерів	104
5. Теорія квазістаціонарного електронного спектру та активної динамічної провідності багатошарових відкритих резонансно-тунельних структур у поздовжньому постійному електричному полі, як відкритих моделей квантових каскадних лазерів	108
6. Енергетичний спектр оптичних фононів у багатошаровій резонансно-тунельній структурі.....	114
7. Властивості активної електронної провідності багатошарової резонансно-тунельної структури, як основного елемента квантового каскадного детектора	120
8. Властивості активної електронної провідності багатошарової резонансно-тунельної структури у поздовжньому постійному електричному полі, як основного елемента квантового каскадного лазера.....	128

Висновки до розділу 5	134
Список використаної літератури.....	135
РОЗДІЛ 6. ВИСОКОПРОДУКТИВНІ МЕТОДИ ТА ІНФОРМАЦІЙНІ ТЕХНОЛОГІЇ МОДЕЛЮВАННЯ ТА ІДЕНТИФІКАЦІЇ ПАРАМЕТРІВ АНОРМАЛЬНИХ РУХІВ ПІД ДІЄЮ ЗВОРОТНИХ КОГНІТИВНИХ ВПЛИВІВ	138
1. Аналіз стану досліджень проблеми АНР	138
2. Пропоновані підходи до вирішення проблеми аналізу АНР під дією зворотних когнітивних впливів.....	139
3. Опис математичної моделі функціональної ідентифікації АНР.....	143
4. Метод розв'язання спряженої крайової задачі АНР	145
5. Формули аналітичних виразів градієнтів функціонала-нев'язки	146
6. Матричний алгоритм ідентифікації вектора адаптивних коефіцієнтів впливу матриці когнітивних ЕЕГ сигналів на вектор сегментів траєкторії АНР.....	147
7. Моделювання та ідентифікація параметрів сигналів АНР під впливом когнітивних feedback-впливів нейровузлів КГР.....	148
Висновки до розділу 6.....	153
Список використаної літератури.....	154
ЗАГАЛЬНІ ВИСНОВКИ.....	156

ВСТУП

Якість математичних моделей складних нанofізичних процесів та систем з урахуванням нано-факторів та зворотного зв'язку визначає їх ефективність. Через складність процесів та недосконалість підходів їх моделювання дослідження таких складних систем більше обмежені інтегральним рівнем без урахування макро- і мезо-взаємодій, спрощеним емпіричним описом механізмів рівноваги, неоднорідностей середовищ та ін. Це звужує можливість моделювання на основі паралельних обчислень, не забезпечення цілісності та повноти уявлень про внутрішні стани і поведінку систем.

В розділі 1 розроблені високопродуктивні методи і обчислювальні технології моделювання складних процесів наноадсорбції в неоднорідних багатокомпонентних нанопористих середовищах зі зворотними впливами для класів нелінійних ізотерм адсорбції типу Ленгмюра. Побудовані високошвидкісні аналітичні розв'язки математичних моделей з використанням операційного методу Гевісайда та реалізації рекурентних алгоритмів побудови матриць впливу з метою забезпечення ефективного розпаралелювання обчислювальних процесів для багатоядерних комп'ютерів та підвищення швидкодії обчислень.

У розділі 2 розроблені складні високопродуктивну моделі наноадсорбції в обмежених циліндричних багатоскладових нанопористих середовищах та отримано високошвидкісні аналітичні розв'язки, які в загальному вигляді описують вплив факторів внутрішньої кінетики переносу заряджених частинок на основі рівноваги Ленгмюра та нестационарних умов системи n -інтерфейсних зв'язків, нестационарні режими нанодифузії та наноадсорбції газів для мультикомплексних наносередовищ із різними сорбційними властивостями, розмірами частинок, товщин шарів та ін.

У розділі 3 для різномасштабних складних неklasичних моделей нанофільтрації та нанодифузії у насичених середовищах різнопористих нанопористих частинок сформульовані задачі ідентифікації кінетичних параметрів моделей з використанням функціоналів-нев'язки, що враховують

зміну сумарного потоку фільтрату на поверхні спостереження. Запропоновано високопродуктивні методи реалізації задач ідентифікації (коефіцієнтів консолідації у внутрішньо- та міжчастинковому просторах та ін.) як функцій від часу на основі аналітичних розв'язків прямих і спряжених задач, отримані явні вирази компонентів градієнтів функціоналів-нев'язки для реалізації високопродуктивних процедур ідентифікації параметрів моделі. В рамках наукоємних інформаційних технологій для дослідження складних процесів нанофільтрації в середовищах з різнорозмірними нанопористими частинками на основі запропонованої моделі побудовано спеціальний програмний комплекс, основними цілями якого, є можливість швидкого вивчення процесів нанофільтрації для науковців, можливість роботи на будь-яких сучасних платформах, високопродуктивне чисельне моделювання та дружній UI/UX.

У розділі 4 запропоновано складну 2D-модель вертикальної фільтрації бідисперсної суспензії суміші сферичних нанопористих частинок з двома різними діаметрами досліджено методом Монте-Карло на суперкомп'ютері з урахуванням одночасного броунівського руху частинок і руху поршня вниз при стискуванні. Досліджено бінарні суміші з різними параметрами (числовими концентраціями малих і великих нанопористих частинок, різними співвідношенням їх діаметрів і початковим розміром систем у вертикальному напрямку). Визначались залежності від часу коефіцієнта фільтрації як відносна частка дрібніших частинок у фільтрованій суміші та відносної висоти суспензії з метою виявлення режимів повної та неповної фільтрації. Дано пояснення та виконані оцінки явища неповної фільтрації як утворення непроникного бар'єру з нанопористих частинок більшого діаметру на дні шару.

У розділі 5 побудована теорія квазістаціонарних станів електронів та активної динамічної провідності відкритих багат шарових наносистем у постійному електричному полі та без нього з урахуванням взаємодії електронів зі слабким високочастотним електромагнітним полем. На

прикладі експериментально реалізованого квантового каскадного лазера з чотирибар'єрною активною зоною окремого каскаду показано, що лише модель відкритої наносистеми як повного каскаду дозволяє надійно оптимізувати геометричний дизайн активної зони.

У розділі 6 на основі гібридної моделі анормальних неврологічних рухів (АНР) розроблено високопродуктивну інформаційну технологію опису станів і поведінки тремор-об'єктів з урахуванням складних АНР великою кількістю внутрішніх зв'язків і когнітивних feedback впливів кори головного мозку. Методом гібридних інтегральних перетворень Фур'є побудовано аналітичний розв'язок моделі у векторному вигляді, визначає елементи траєкторій на кожному сегменті АНР. На основі цього реалізовано мало витратні матричні алгоритми ідентифікації параметрів досліджуваних систем зворотного зв'язку. Реалізовано автоматизований спосіб дизайну та візуалізації АНР-траєкторій під дією когнітивних feedback-впливів з метою оперативності введення даних і підвищення точності оцінки, якості візуалізації моделей вхідних даних 3D-зображень АНР-траєкторій, їх декомпозиції та однозначності інтерпретації результатів. Дана розробка має відношення до відновлення стану людини спричиненими різними техногенними навантаженнями та наслідками бойових дій.

РОЗДІЛ 1. ВИСОКОПРОДУКТИВНІ МЕТОДИ МОДЕЛЮВАННЯ АДСОРБЦІЇ ЗІ ЗВОРОТНИМИ ЗВ'ЯЗКАМИ ДЛЯ В НЕОДНОРІДНИХ БАГАТОКОМПОНЕНТНИХ НАНОПОРИСТИХ СЕРЕДОВИЩАХ

Розроблено нові високопродуктивні аналітичні методи моделювання полів концентрацій дифундованих газів у внутрішньо- та міжчастинковому просторах у неоднорідних n -складових нанопористих середовищах з використанням операційного методу Гевісайда та матриць впливу Коші для неоднорідних крайових задач адсорбції для систем рівнянь в частинних похідних із зворотними зв'язками.

1. Аналіз стану досліджень

Експериментальне та теоретичне вивчення адсорбції та дифузії газів у нанопористих середовищах важливе у багатьох галузях, таких як сепарація газів, гетерогенний катализ, декарбонізація і очищення атмосфери тощо. Впровадження нових кіберфізичних нанопористих систем (КФНС) для контролю поглинання газових викидів в атмосферу дає змогу поліпшити стан навколишнього середовища і зменшити вплив глобального потепління [1]. Якість математичних моделей адсорбції з урахуванням нанофізичних зворотних впливів, що обмежують кінетику адсорбції в нанопорах, та високопродуктивних методів побудови розв'язків моделей визначає ефективність таких КФНС [2]. Сьогодні проводяться численні теоретичні та експериментальні дослідження адсорбції в нанопористих середовищах, зокрема, щодо вдосконалення їхніх математичних моделей з урахуванням впливу різних обмежувальних факторів кінетики адсорбції [2–8]. Унаслідок складності процесів та недосконалості підходів до їхнього моделювання ці дослідження більшою мірою обмежуються інтегральним рівнем без комплексного врахування міро- та макровзаємодій, спрощеними емпіричними описами механізмів адсорбційної рівноваги, неоднорідностей середовищ та ін. Це звужує можливості моделювання, не забезпечує цілісності та повноти уявлень про внутрішню кінетику нанопроцесів, не дає змогу достатньо

враховувати низку визначальних факторів, зокрема, покомпонентної взаємодії мікро- і макропотоків, їхнього впливу на стани рівноваги тощо. Не існує несуперечливих моделей, які повною мірою враховують вказані фізичні чинники, а також високопродуктивні методи їхньої реалізації.

У продовження досліджень [9–17] у цьому розділі обґрунтовані і розроблені високопродуктивні матричні методи математичного моделювання адсорбції газів у неоднорідних багат шарових середовищах на основі узагальненої нелінійної адсорбційної рівноваги Ленгмюра (АРЛ), що дають змогу найповніше описувати фактори зворотних взаємодій і механізми адсорбційної рівноваги на поверхні нанопор середовищ. Ефективний підхід до декомпозиції нелінійної моделі реалізується обґрунтуванням малого параметра і декомпозиції нелінійної АРЛ у рівномірно збіжний ряд. Високопродуктивні методи операційного числення Гевісайда та матриць впливу Коші використовують для моделювання складного адсорбційного перенесення у гетерогенних середовищах. Це дає змогу отримувати векторні аналітичні розв'язки у лінеаризованих моделях, що підвищують якість розпаралелення обчислень та моделювання для архітектур обчислювальних систем багатоядерних комп'ютерів.

На ґрунті аналізу різних підходів до моделювання складних адсорбційних процесів з використанням рівнянь математичної фізики можна класифікувати такі основні математичні моделі [1, 5, 7, 11]:

- моделі адсорбції на основі концепції суцільності пористого середовища (СПС);
- дворівневі біпористі моделі адсорбції в середовищі пористих частинок на базі міжмолекулярних взаємодій міжчастинкового і внутрічастинкового просторів;
- дворівневі моделі компетитивної адсорбції з урахуванням взаємодій міжчастинкового і внутрічастинкового просторів.
- моделі адсорбції, розроблені для випадків неоднорідних та багат шарових нанопористих середовищ різної конструкції та розмірів.

Модель адсорбції СПС ґрунтується на системі диференціальних рівнянь балансу в частинних похідних [2, 6]:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial a}{\partial t} + v \frac{\partial c}{\partial z} = D_{inter} \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} \quad (1)$$

$$\frac{\partial a}{\partial t} = \beta (c - c_{eq}(a)). \quad (2)$$

Рівняння (1) описує загальний матеріальний баланс адсорбції та дифузії на макрорівні, (2) – нелінійне рівняння кінетики адсорбційного переносу в нанопорах частинок середовища. Фазовий перехід адсорбтиву із газового потоку в нанопори частинок має рівноважний характер і визначається нелінійною АРЛ [7, 8] $c_{eq}(a) = a / b(a_{full} - a)$, що встановлює зв'язок між рівноважною концентрацією c_{eq} з величиною адсорбції. Тут c , a – концентрації адсорбтиву в міжчастинковому просторі (interparticle space) та внутрічастинковому просторі (intraparticle space), β – коефіцієнт масопереносу, v – швидкість руху газового потоку, a_{full} – гранична величина адсорбції, b – константа рівноваги, D_{inter} – коефіцієнт дифузії в міжчастинковому просторі. Дворівневі моделі адсорбції характеризуються описом адсорбції у двох просторах: міжчастинковому (макрорівень) та внутрічастинковому (мікрорівень) на основі взаємодій макро- і мікропотоків [7].

Під час розроблення моделі компетитивної дифузії, яка є певним узагальненням дворівневої біпористої моделі адсорбції, як базову вибрано гіпотезу про наявність у системі адсорбційних взаємодій зі зворотними зв'язками (feedback), визначеними умовами компетитивної адсорбційної рівноваги між N компонентів адсорбату (двох і більше газів) та активними центрами адсорбції (АЦА) на поверхнях нанопор частинок. Розроблено біпористу модель на ґрунті таких підходів та визначальних гіпотез [5, 7, 15]:

– компетитивна адсорбція N газів ($N \geq 2$), зумовлена дисперсійними та електростатичними силами Джона-Ленарда, включає міжмолекулярну взаємодію різних компонентів адсорбату в міжчастинковому просторі і

нанопорах сферичних частинок радіуса R , рівномірно упакованих в робочій області середовища;

– компетитивна адсорбція відбувається в АЦА на поверхні нанопор, що адсорбують у різних співвідношеннях молекули різноманітних компонентів адсорбату. Під час еволюції системи до рівноваги спостерігаються градієнти концентрації всіляких компонентів адсорбату в макро- нанопорах, динаміка яких визначається кількісним і якісним складом потоку адсорбату;

– має місце взаємовплив ефектів асиметричності. Ці ефекти було виявлено і досліджено для двокомпонентної компетитивної дифузії М. Петриком, Ж. Фресаром і І. Сергієнком [11, 12]. Вони пов'язані з дифузією та адсорбцією в нанопорах частинок двох компонентів адсорбтиву з різними властивостями, наприклад i -го компонента за наявності j -го, і навпаки, $i \neq j$. Зокрема, одержано теоретичні та експериментальні результати дослідження окремих несиметричних потоків компетитивної адсорбції типу «бензен за наявності гексану» і навпаки – «гексан за наявності бензену» в рівних пропорціях у нанопористих каталізаторах [12].

2. Підхід до декомпозиції нелінійної системи для адсорбційної моделі кінетики газів

В остаточному вигляді кінетику компетитивної адсорбції N газів ($N \geq 2$) у середовищі нанопористих частинок з урахуванням нелінійної адсорбційної рівноваги та вказаних фізичних гіпотез описують системою рівнянь у частинних похідних [7, 15]:

$$\frac{\partial C_j(t, Z)}{\partial t} = \frac{D_{inter_j}}{l^2} \frac{\partial^2 C_j}{\partial Z^2} - e_{inter_j} \frac{D_{intra_j}}{R^2} \left(\frac{\partial Q_j}{\partial X} \right)_{X=1} \quad (3)$$

$$\frac{\partial Q_j(t, X, Z)}{\partial t} = \frac{D_{intra_j}}{R^2} \left(\frac{\partial^2 Q_j}{\partial X^2} + \frac{2}{X} \frac{\partial Q_j}{\partial X} \right). \quad (4)$$

З умовами компетитивної АРЛ на зовнішній поверхні частинки, якщо $X = 1$, маємо

$$Q_j(t, X=1, Z)_{|X=1} = \frac{K_j C_j(t, Z)}{1 + K_1 C_1(t, Z) + K_2 C_2(t, Z) + \dots + K_N C_N(t, Z)}, \quad j = \overline{1, N}. \quad (5)$$

Рівняння (3), (4) описують масоперенос у міжчастинковому просторі та у нанопорах частинок відповідно. Взаємозв'язок між ними визначається компонентом у правій частині (3) та рівнянням конкуритивної АРЛ (5). Долучивши до системи (3), (4) рівняння теплового балансу з відповідними умовами, замінивши рівняння рівноваги (5) узагальненими рівняннями неізотермічної АРЛ

$$Q_j(t, X=1, Z) = (K_j(T) C_j(t, Z)) / \left(1 + \sum_{s=1}^N K_s(T) C_s(t, Z) \right), \quad K_j(T) = k_{0j} \exp\left(-\frac{\Delta H_j}{R_g T}\right), \quad j = \overline{1, N}, \quad (6)$$

отримаємо неізотермічну модель конкуритивної адсорбції. Тут $C_j = c_j / c_{\infty j}$, $Q_j = q_j / q_{\infty j}$ – поточні значення безрозмірних концентрацій компонентів адсорбтиву в міжчастинковому та внутрічастинковому просторах; c_j , q_j , $j = \overline{1, N}$ – поточні значення відповідних мольних концентрацій; $c_{\infty j}$, $q_{\infty j}$ – рівноважні значення концентрацій, N – кількість адсорбованих компонентів; $K_j = 1 / \tilde{K}_j$, $j = \overline{1, N}$ – коефіцієнт адсорбції j -го компонента $\tilde{K}_j = q_{\infty j} / c_{\infty j}$ – константа адсорбції j -го компонента; D_{intra} – коефіцієнт дифузії в нанопорах; e_{inter} – коефіцієнт впливу внутрічастинкового переносу на міжчастинковий; k_{0j} – постійна складова коефіцієнта адсорбції j -го компонента; T – температура потоку; ΔH_j , R_g – енергія активації та універсальна газова стала відповідно.

Розвиненням нелінійних правих частин (5), що представляють вирази конкуритивної АРЛ для j -го компонента адсорбату, в ряд Маклорена в околі точки нульових концентрацій дифундованих компонентів C_j , $j = \overline{1, N}$, обмежуючись другим порядком точності, приводимо умови рівноваги (5) до вигляду [7, 8,]

$$Q_j(t, X=1, Z)_{|X=1} = K_j C_j(t, Z) - K_1^2 \sum_{j_i=1}^N \frac{K_{j_i} K_j}{K_1^2} C_{j_i}(t, Z) C_j(t, Z), \quad j = \overline{1, N}. \quad (7)$$

За припущення, що $K_1 = \max \{K_j, K_j < 1\}_{j=1}^N$, та визначивши $\varepsilon = K_1^2 \ll 1$ як малий параметр, розв'язки нелінійних крайових задач на основі системи рівнянь (3), (5) з урахуванням (7) побудуємо у вигляді асимптотичних сум [14, 15]

$$\begin{aligned} C_j(t, Z) &= C_{j_0}(t, Z) + \varepsilon C_{j_1}(t, Z) + \varepsilon^2 C_{j_2}(t, Z) + \dots, \\ Q_j(t, X, Z) &= Q_{j_0}(t, X, Z) + \varepsilon Q_{j_1}(t, X, Z) + \varepsilon^2 Q_{j_2}(t, X, Z) + \dots, \quad j = \overline{1, N} \end{aligned} \quad (8)$$

Виконано на основі (8) декомпозицію низки нелінійних моделей адсорбції, розглядуваних з урахуванням наведеної класифікації та отримано аналітичні розв'язки лінеаризованих моделей [10–17, 20].

3. Нелінійна модель адсорбції в односкладовому нанопористому середовищі

Розклавши $c_{eq}(a)$ у ряд Тейлора та обмежившись членами не вище другого порядку, умову АРЛ-рівноваги можна записати у вигляді

$$c_{eq}(a) = \gamma a + \varepsilon a^2, \quad (9)$$

де $\gamma = 1 / (ba_{full})$ – константа адсорбції, що описує лінійну складову адсорбційної рівноваги (згідно з законом Генрі), $\varepsilon = 1 / ba_{full}^2 < 1$ – малий параметр. З урахуванням цих припущень та (9) кінетика адсорбції в напівобмеженому однорідному середовищі можна описати системою рівнянь у частинних похідних [3, 7]

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial a}{\partial t} + v \frac{\partial c}{\partial z} = D_{inter} \frac{\partial^2 c}{\partial z^2}, \quad (10)$$

$$\frac{\partial a}{\partial t} = \beta (\gamma a + \varepsilon a^2) \quad (11)$$

з початковими умовами

$$c(t, z)|_{t=0} = C_s, \quad a(t, z)|_{t=0} = a_s \quad (12)$$

та крайовими умовами

$$c(t, z)|_{z=0} = \omega_0(t) = \omega_0, \quad \frac{\partial c}{\partial z}|_{z=\infty} = 0. \quad (13)$$

Розв'язок нелінійної крайової задачі (3)–(6) шукатимемо у вигляді асимптотичних сум [15]

$$\begin{aligned} c(t, z) &= c_0(t, z) + \varepsilon c_1(t, z) + \varepsilon^2 c_2(t, z) + \dots \\ a(t, z) &= a_0(t, z) + \varepsilon a_1(t, z) + \varepsilon^2 a_2(t, z) + \dots \end{aligned} \quad (14)$$

У результаті підстановки (14) нелінійна крайова задача (10)–(13) розпаралелюється на два типи лінеаризованих задач A_0 і A_m .

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

$$\frac{\partial c_0}{\partial t} + \frac{\partial a_0}{\partial t} + v \frac{\partial c_0}{\partial z} = D_{inter} \frac{\partial^2 c_0}{\partial z^2}, \quad (15)$$

$$\frac{\partial a_0}{\partial t} = \beta(c_0 - \gamma a_0) \quad (16)$$

з початковими умовами

$$c_0(t, z)|_{t=0} = C_s, \quad a_0(t, z)|_{t=0} = a_s \quad (17)$$

та крайовими умовами

$$c_0(t, z)|_{z=0} = \omega_0, \quad \left. \frac{\partial C_0}{\partial z} \right|_{z=\infty} = 0. \quad (18)$$

Задача A_m ; $m = \overline{1, \infty}$ (m -наближення з нульовими початковими і крайовими умовами): побудувати в області D обмежений розв'язок системи рівнянь

$$\frac{\partial c_m}{\partial t} + \frac{\partial a_m}{\partial t} + v \frac{\partial c_m}{\partial z} = D_{inter} \frac{\partial^2 c_m}{\partial z^2}, \quad (19)$$

$$\frac{\partial a_m}{\partial t} = \beta \left(c_m - \gamma a_m - \sum_{i=0}^{m-1} a_i a_{m-1-i} \right). \quad (20)$$

Задачі A_0 (15)–(18) і A_m (19), (20) розв'язуємо операційним методом Гевісайда з використанням інтегрального перетворення Лапласа по змінній t

$$[18, 19]: L[c(t, z)] \equiv c^*(p, z) = \int_0^{\infty} c(t, z) e^{-pt} dt, \quad L[a(t, z)] \equiv a^*(p, z) = \int_0^{\infty} a(t, z) e^{-pt} dt.$$

У зображеннях за Лапласом одержимо задачі A_0^* і A_n^* .

Задача A_0^* : побудувати обмежений в області $D^* = \{z \in (0, \infty)\}$ розв'язок системи рівнянь

$$\frac{d^2 c_0^*}{dz^2} - v_1 \frac{dc_0^*}{dz} - q^2 c_0^* = -F^*(p), \quad (21)$$

$$a_0^*(p, z) = \frac{\beta}{p + \gamma\beta} c^*(p, z) + \frac{a_s}{p + \gamma\beta} \quad (22)$$

з крайовими умовами

$$c_0^* \Big|_{z=0} = \frac{\omega_0}{p}, \quad \frac{dc_0^*}{dz} \Big|_{z=\infty} = 0. \quad (23)$$

Тут

$$v_1 = \frac{v}{D_{inter}}, \quad q^2(p) = \frac{p(p + \gamma\beta + \beta)}{D_{inter}(p + \gamma\beta)}, \quad F^* = \frac{C_s}{D_{inter}} + \frac{a_s}{D_{inter}} \frac{\beta\gamma}{p + \gamma\beta}$$

$$c_0^*(p, z) = \int_0^\infty c_0(t, z) e^{-pt} dt, \quad a_0^*(p, z) = \int_0^\infty a_0(t, z) e^{-pt} dt.$$

Фундаментальну систему розв'язків крайової задачі (21)–(23) складають

функції $e^{\left(\frac{v_1 + \zeta(p)}{2}\right)z}$, $e^{\left(\frac{v_1 - \zeta(p)}{2}\right)z}$, де $\zeta(p) = \sqrt{\frac{1}{4}v_1^2 + q(p)^2}$, $\text{Re}\zeta > 0$. Зафіксувавши гілку

$\text{Re}\zeta(p) > 0$, побудуємо методом функцій Коші [19]

$$c_0^*(p, z) = \frac{\omega_0}{p} e^{\left(\frac{v_1 - \zeta(p)}{2}\right)z} + \int_0^\infty E^*(p, z, \xi) F^*(p, \xi) d\xi, \quad (24)$$

де $E^*(p, z, \xi)$ – функція Коші визначена у вигляді

$$E^*(p, z, \xi) = \frac{1}{2\zeta(p)} e^{\frac{1}{2}v_1(z-\xi)} \left(e^{-|z-\xi|\zeta(p)} - e^{-(z-\xi)\zeta(p)} \right). \quad (25)$$

Виконавши інтегрування в (24) з урахуванням (25), після низки перетворень і застосування оберненого оператора Лапласа $L^{-1}[\dots]$ отримаємо формулу для переходу до оригіналу [18]:

$$c_0(t, z) = (C_s + a_s) \frac{\gamma}{1 + \gamma} L^{-1} \left[\frac{1}{p} \right] + \frac{C_s - \gamma a_s}{1 + \gamma} L^{-1} \left[\frac{1}{p + \beta(1 + \gamma)} \right] + (\omega_0 - C_s) e^{\frac{u_1 z}{2}} L^{-1} \left[\frac{e^{-\zeta(p)z}}{p} \right] + \beta(C_s - \gamma a_s) L^{-1} \left[\frac{1}{p + \beta(\gamma + 1)} \right] * L^{-1} \left[\frac{e^{-\zeta(p)z}}{p} \right] e^{\frac{u_1 z}{2}} \quad (26)$$

Обчислимо оригінал виразу $e^{-\zeta(p)z} / p$:

$$L^{-1} \left[\frac{e^{-\zeta(p)z}}{p} \right] = \frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma_0 - i\infty}^{\sigma_0 + i\infty} \frac{e^{-\zeta(p)z}}{p} e^{pt} dp \equiv W_c(t, z). \quad (27)$$

Особливими точками виразу $e^{-\zeta(p)z} / p$ є полюс першого порядку $p = 0$, точка галуження $p = \infty i$

$$p_{1,2} = -\frac{1}{2} \left[\beta(\gamma + 1) + \frac{1}{4} \frac{u^2}{D_{inter}} \pm \sqrt{\left(\beta(\gamma + 1) + \frac{1}{4} \frac{u^2}{D_{inter}} \right)^2 - \beta\gamma \frac{u^2}{D_{inter}}} \right] < 0,$$

де $\zeta(p) = 0$ або $p^2 + \left[\frac{u^2}{4D_{inter}} + \beta(\gamma + 1) \right] p + \frac{u^2}{4D_{inter}} \beta\gamma = 0$. Це дає змогу в (27)

замінити інтегрування на прямій $\text{Re } p = \sigma_0 > 0$ інтегруванням по уявній осі ($\text{Re } p = 0$) [13, 15]:

$$W_c(t, z) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-\zeta(iv)z}}{iv} e^{ivt} dv = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \text{Re} \left[\frac{e^{-(\varphi_1(v) + i\varphi_2(v))z}}{iv} e^{ivt} \right] dv + e^{-\frac{u}{2D_{inter}}z}.$$

Після низки перетворень отримуємо оригінал

$$W_c(t, z) = L^{-1} \left[\frac{e^{-\omega(p)z}}{p} \right] = \frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma_0 - i\infty}^{\sigma_0 + i\infty} \frac{e^{-\zeta(p)z}}{p} e^{pt} dp = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} e^{-\varphi_1(v)z} \frac{\sin(vt - z\varphi_2(v)^2)}{v} dv + e^{-\frac{u}{2D_{inter}}z}$$

де

$$\varphi_1(v) = \left[\frac{(\Gamma_1^2(v) + \Gamma_2^2(v))^{1/2} + \Gamma_1(v)}{2} \right]^{1/2}, \quad \varphi_2(v) = \left[\frac{(\Gamma_1^2(v) + \Gamma_2^2(v))^{1/2} - \Gamma_1(v)}{2} \right]^{1/2},$$

$$\Gamma_1(v) = \frac{u^2}{4D_{inter}^2} + \frac{v^2\beta}{D_{inter}^2(v^2 + \beta^2\gamma^2)}, \quad \Gamma_2(v) = \frac{v^3 + v\beta^2(\gamma + 1)\gamma}{D_{inter}(v^2 + \beta^2\gamma^2)}.$$

Повертаючись у (22), (26) до оригіналів, отримуємо аналітичні вирази

$$c_0(t, z) = \frac{\gamma(C_s + a_s)}{1 + \gamma} + \frac{C_s - \gamma a_s}{1 + \gamma} e^{-\beta(1+\gamma)t} + (\omega_0 - C_s) e^{\frac{1}{2}v_1 z} W_c(t, z) + \beta(C_s - \gamma a_s) e^{\frac{1}{2}v_1 z} \int_0^t e^{-\beta(1+\gamma)(t-s)} G_0(s, z) ds, \quad (28)$$

$$a_0(t, z) = a_s e^{-\gamma\beta t} + \beta \int_0^t e^{-\gamma\beta(t-s)} c_0(s, z) ds. \quad (29)$$

Формули (28), (29) складають розв'язок задачі A_0 .

Задача A^* , $m = \overline{1, \infty}$: побудувати обмежений в області $D^* = \{z \in (0, \infty)\}$

розв'язок системи рівнянь

$$\frac{d^2 c_m^*}{dz^2} - \frac{v}{D_{inter}} \frac{dc_m^*}{dz} - \frac{p}{D_{inter}} (C_s^* + a_s^*) = 0, \quad (30)$$

$$\beta c_m^* - (p + \gamma\beta) a_m^* = \beta \left(\sum_{i=0}^{m-1} a_i a_{m-1-i} \right)^* \quad (31)$$

за нульовими крайовими умовами.

Безпосередньо перевіряється, що розв'язком системи рівнянь (30), (31)

$$c_m^*(p, z) = \frac{p\beta}{D_{inter}(p + \gamma\beta)} \int_0^\infty E^*(p, z, \xi) \left(\sum_{i=0}^{m-1} a_i a_{m-1-i} \right)^* (p, \xi) d\xi, \quad (32)$$

$$a_m^*(p, z) = \frac{\beta}{p + \gamma\beta} c_m^*(p, z) - \frac{\beta}{p + \gamma\beta} \left(\sum_{i=0}^{m-1} a_i a_{m-1-i} \right)^* (p, z). \quad (33)$$

Обчислимо оригінал

$$E(t, z, \xi) \equiv L^{-1} [E^*(p, z, \xi)] = \frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma_0 - i\infty}^{\sigma_0 + i\infty} E^*(p, z, \xi) e^{pt} = e^{\frac{1}{2}v_1(z-\xi)} [G(t, |z - \xi|) - G(t, z + \xi)]$$

Повертаючись в (32), (33) до оригіналів, отримуємо вирази

$$C_m(t, z) = \frac{\beta}{D_{inter}} \int_0^t \int_0^\infty [E(t-s, z, \xi) - \gamma\beta E_1(t-s, z, \xi)] \sum_{i=0}^{m-1} a_i(s, \xi) a_{m-1-i}(s, \xi) d\xi ds, \quad (35)$$

$$a_m(t, z) = \beta \int_0^t e^{-\gamma\beta(t-s)} [c_m(s, z) - a_0^2(s, z)] ds, \quad m = \overline{1, \infty}, \quad (36)$$

де

$$G(t, z) = \frac{1}{2\sqrt{2\pi}} \int_0^{\infty} \frac{q_1 \cos\left(\eta t - \frac{z}{\sqrt{2}} q_2\right) + q_2 \sin\left(\eta t - \frac{z}{\sqrt{2}} q_2\right)}{\sqrt{a^2 + \eta^2 b^2}} e^{-\frac{z}{\sqrt{2}} q_1} d\eta; E_1(t, z, \xi) = \int_0^t e^{-\gamma\beta(t-s)} E(s, z, \xi) ds.$$

Формули (35), (36) є розв'язком задачі $A_m; m = \overline{1, \infty}$.

4. Крайова задача для моделі адсорбції в неоднорідних n -компонентних нанопористих середовищах

Розглядається адсорбція в напівобмеженому неоднорідному по координаті z нанопористому середовищі з n -складовому шарі (n – довільне натуральне число) адсорбентів з різними фізичними характеристиками. Математична модель такого переносу може описуватись нелінійною крайовою задачею: побудувати обмежений в області

$$D_n = \left\{ (t, z) : t > 0, z \in \bigcup_{k=1}^{n+1} (l_{k-1}, l_k), l_0 \geq 0, l_{n+1} = \infty \right\}$$

розв'язок системи рівнянь у [15, 19]

$$\frac{\partial}{\partial t} c_k(t, z) + \frac{\partial}{\partial t} a_k(t, z) + \eta_k c_k = D_{inter_k} \frac{\partial^2}{\partial z^2} c_k, \quad (37)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} a_k(t, z) = \beta_k (c_k(t, z) - \gamma_k a_k(t, z)(1 + \varepsilon a_k)), \quad k = \overline{1, n+1}, \quad (38)$$

за початковими умовами

$$c_k(t, z)|_{t=0} = c_{0_k}(z); \quad a_k(t, z)|_{t=0} = a_{0_k}(z), \quad (39)$$

крайовими умовами по геометричній змінній z

$$\left(\alpha_{11}^0 \frac{\partial}{\partial z} + \delta_{11}^0\right) c_1(t, z)|_{z=l_0} = \omega_0(t), \quad \left(\alpha_{22}^{n+1} \frac{\partial}{\partial z} + \delta_{22}^{n+1}\right) c_{n+1}(t, z)|_{z=l_{n+1}} = \omega_{n+1}(t) \quad (40)$$

та системою n -інтерфейсних умов третього роду по змінній z

$$\left(\alpha_{j1}^k \frac{\partial}{\partial z} + \delta_{j1}^k\right) c_k(t, z)|_{z=l_k} = \left(\alpha_{j2}^k \frac{\partial}{\partial z} + \delta_{j2}^k\right) c_{k+1}(t, z)|_{z=l_k} \quad k = \overline{1, n} \quad (41)$$

З урахуванням нестационарності масообміну на масообмінних межах ($z = l_{k-1}, k = \overline{1, n+1}$) замість умов (40), (41) можуть бути використані умови типу

$$\begin{aligned} & [(\alpha_{12}^0 + \delta_{12}^0 \frac{\partial}{\partial t}) \frac{\partial}{\partial z} + (\beta_{12}^0 + \gamma_{12}^0 \frac{\partial}{\partial t})] C_1(t, z) \Big|_{z=l_0} = \omega_0(t); \frac{\partial C_{n+1}(t, z)}{\partial t} \Big|_{z=\infty} = 0, \\ & \left[[(\alpha_{j1}^k + \delta_{j1}^k \frac{\partial}{\partial t}) \frac{\partial}{\partial z} + (\beta_{j1}^k + \gamma_{j1}^k \frac{\partial}{\partial t})] C_k(t, z) - [(\alpha_{j2}^k + \delta_{j2}^k \frac{\partial}{\partial t}) \frac{\partial}{\partial z} + (\beta_{j2}^k + \gamma_{j2}^k \frac{\partial}{\partial t})] C_{k+1}(t, z) \right] \Big|_{z=l_k} = 0; \\ & k = \overline{1, n}; j = \overline{1, 2}. \end{aligned}$$

Застосувавши до задачі (37)–(41) інтегральне перетворення Лапласа по змінній t [18], отримаємо крайову задачу в зображеннях: побудувати обмежений

на множині $I_n = \left\{ z : z \in \bigcup_{k=1}^{n+1} (l_{k-1}, l_k), l_0 \geq 0, l_{n+1} = \infty \right\}$ розв'язок системи рівнянь

$$\frac{d^2 C_k^*}{dz^2} - q_k^2(p) c_k^*(p, z) = -F_k^*(p, z), \quad k = \overline{1, n+1}, \quad (42)$$

з крайовими умовами

$$[\alpha_{12}^0 \frac{d}{dz} + \delta_{12}^0] c_1^*(p, z) \Big|_{z=l_0} = \omega_1^*(p); \frac{dc_{n+1}^*(t, z)}{dt} \Big|_{z=\infty} = 0 \quad (43)$$

та інтерфейсними умовами по координаті z

$$\left[(\alpha_{j1}^k \frac{d}{dz} + \delta_{j1}^k) c_k^*(p, z) - (\alpha_{j2}^k \frac{d}{dz} + \delta_{j2}^k) c_{k+1}^*(p, z) \right] \Big|_{z=l_k} = 0; \quad k = \overline{1, n}, \quad j = \overline{1, 2}, \quad (44)$$

де

$$\begin{aligned} F_k^*(p, z) &= \frac{1}{D_{inter_k}} [C_{o_k}(z) + \frac{\beta_k \gamma_k}{p + \beta_k \gamma_k} a_{o_k}(z)], \quad \omega_1^*(p) = \omega_0^*(p) \\ q_k^2(p) &= \frac{1}{D_{inter_k} (p + \beta_k \gamma_k)} \left[p^2 + p (\beta_k (1 + \gamma_k) + \beta_k \gamma_k \eta_k) \right], \quad k = \overline{1, n}; j, m = \overline{1, 2} \\ a_k^*(p, z) &= \frac{a_{o_k}(z)}{p + \beta_k \gamma_k} + \frac{\beta_k}{p + \beta_k \gamma_k} c_k^*(p, z), \quad k = \overline{1, n+1}. \end{aligned} \quad (45)$$

Зафіксувавши гілку $\text{Re } q_k(p) > 0$, розв'язок неоднорідної крайової задачі (42)–(44) побудуємо методом функцій Коші [19]

$$c_k^*(p, z) = A_k \cdot chq_k z + B_k \cdot shq_k z + \int_{l_{k-1}}^{l_k} E_k^*(p, z, \xi) F_k^*(p, \xi) d\xi; k = \overline{1, n}, \quad (46)$$

$$c_{n+1}^*(p, z) = B_{n+1} e^{-q_{n+1}(z-l_n)} + \int_{l_n}^{\infty} E_{n+1}^*(p, z, \xi) F_{n+1}^*(p, \xi) d\xi, \quad (47)$$

де $E_k^*(p, z, \xi)$, $k = \overline{1, n+1}$ – функції Коші, що визначені у вигляді

$$E_k^*(p, z, \xi) = -\frac{1}{q_k \Delta_{11}(q_k l_{k-1}, q_k l_k)} \begin{cases} \Phi_{12}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k z) \Phi_{11}^k(q_k l_k, q_k \xi), & l_{k-1} < z < \xi < l_k \\ \Phi_{12}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k \xi) \Phi_{11}^k(q_k l_k, q_k z), & l_{k-1} < \xi < z < l_k \end{cases}, \quad (48)$$

$$E_{n+1}^*(p, z, \xi) = \frac{1}{q_{n+1}(\alpha_{12}^n q_{n+1} - \delta_{12}^n)} \begin{cases} \Phi_{12}^n(q_{n+1} l_n, q_{n+1} z) e^{-q_{n+1}(\xi-l_n)}, & l_n < z < \xi < \infty \\ \Phi_{12}^n(q_{n+1} l_n, q_{n+1} \xi) e^{-q_{n+1}(z-l_n)}, & l_n < \xi < z < \infty \end{cases},$$

Тут

$$V_{ij}^{k1}(q_s l_k) = (\alpha_{ij}^k \frac{d}{dz} + \delta_{ij}^k) ch(q_s z) \Big|_{z=l_k} = \alpha_{ij}^k q_s sh(q_s l_k) + \delta_{ij}^k ch(q_s l_k);$$

$$V_{ij}^{k2}(q_s l_k) = (\alpha_{ij}^k \frac{d}{dz} + \delta_{ij}^k) sh(q_s z) \Big|_{z=l_k} = \alpha_{ij}^k q_s ch(q_s l_k) + \delta_{ij}^k sh(q_s l_k),$$

$$\Phi_{ij}^k(q_s l_k, q_s z) = V_{ij}^{k2}(q_s l_k) ch(q_s z) - V_{ij}^{k1}(q_s l_k) sh(q_s z),$$

$$\Delta_{11}(q_k l_{k-1}, q_k l_k) = V_{12}^{k-1,1}(q_k l_{k-1}) V_{11}^{k2}(q_k l_k) - V_{11}^{k1}(q_k l_k) V_{12}^{k-1,2}(q_k l_{k-1}).$$

Умови (43), (44) дають алгебраїчну систему з $(2n+1)$ рівнянь для визначення коефіцієнтів A_k, B_k та B_{n+1} у формулах (46), (47) з урахуванням (48) загального розв'язку задачі (42)–(44):

$$\left\{ \begin{array}{l} V_{12}^{01}(q_1 l_0) A_1 + V_{12}^{02}(q_1 l_0) B_1 = \omega_1^*(p) \\ V_{11}^{11}(q_1 l_1) A_1 + V_{11}^{12}(q_1 l_1) B_1 - V_{12}^{11}(q_2 l_1) A_2 - V_{12}^{12}(q_2 l_1) B_2 = \omega_1 \\ V_{21}^{11}(q_1 l_1) A_1 + V_{21}^{12}(q_1 l_1) B_1 - V_{22}^{11}(q_2 l_1) A_2 - V_{22}^{12}(q_2 l_1) B_2 = G_1^* \\ \dots \\ V_{11}^{k1}(q_k l_k) A_k + V_{11}^{k2}(q_k l_k) B_k - V_{12}^{k1}(q_{k+1} l_k) A_{k+1} - V_{12}^{k2}(q_{k+1} l_k) B_{k+1} = 0 \\ V_{21}^{k1}(q_k l_k) A_k + V_{21}^{k2}(q_k l_k) B_k - V_{22}^{k1}(q_{k+1} l_k) A_{k+1} - V_{22}^{k2}(q_{k+1} l_k) B_{k+1} = G_k^* \\ \dots \\ V_{11}^{n,1}(q_n l_n) A_n + V_{11}^{n,2}(q_n l_n) B_n - (\bar{\beta}_{12}^n - \bar{\alpha}_{12}^n q_{n+1}) B_{n+1} = 0 \\ V_{21}^{n,1}(q_n l_n) A_n + V_{21}^{n,2}(q_n l_n) B_n - (\bar{\beta}_{22}^n - \bar{\alpha}_{22}^n q_{n+1}) B_{n+1} = G_n^* \end{array} \right. \quad (49)$$

$$= \frac{1}{\Delta^*(p)} \begin{vmatrix} \omega_1^* & \Phi_{12}^0(q_1 z, q_1 l_0) & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \Phi_{11}^1(q_1 z_1, q_1 l_1) & -V_{12}^{11} & -V_{12}^{12} & \dots \\ G_1^* & \Phi_{21}^1(q_1 z_1, q_1 l_1) & -V_{22}^{11} & -V_{22}^{12} & \dots \\ 0 & 0 & V_{11}^{21} & V_{12}^{21} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \dots & \dots \\ G_n^* & 0 & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix} + \int_{l_0}^{l_1} E_1^*(p, z, \xi) F_1^*(p, \xi) d\xi;$$

$$c_k^*(p, z) = \frac{1}{\Delta^*(p)} (\Delta_{A_k}^* chq_k z + \Delta_{B_k}^* shq_k z) + \int_{l_{k-1}}^{l_k} E_k^*(p, z, \xi) F_k^*(p, \xi) d\xi = \frac{1}{\Delta^*(p)}.$$

$$\begin{vmatrix} V_{12}^{01} & V_{12}^{02} & 0 & \dots & 0 & \omega_1^* & 0 & \dots & 0 \\ V_{11}^{11} & V_{11}^{12} & -V_{12}^{11} & \dots & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ V_{21}^{11} & V_{21}^{12} & -V_{22}^{11} & \dots & 0 & G_1^* & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & V_{11}^{21} & V_{11}^{22} & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots & V_{11}^{k-1,1} & -V_{11}^{k-1,2} & 0 & -\Phi_{12}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k z) & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & V_{21}^{k-1,1} & V_{21}^{k-1,2} & G_{k-1}^* & -\Phi_{22}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k z) & 0 & \dots \\ 0 & \dots & \dots & 0 & 0 & 0 & \Phi_{11}^k(q_k l_k, q_k z) & -V_{12}^{k1} & \dots \\ 0 & \dots & \dots & 0 & 0 & G_k^* & \Phi_{21}^k(q_k l_k, q_k z) & -V_{22}^{k1} & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 & \dots & V_{11}^{n,1} & V_{11}^{n,2} & -(\delta_{12}^n - \alpha_{12}^n q_{n+1}) \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & G_n^* & 0 & V_{21}^{n,1} & V_{21}^{n,2} & -(\delta_{22}^n - \alpha_{22}^n q_{n+1}) \end{vmatrix} +$$

$$+ \int_{l_{k-1}}^{l_k} E_k^*(p, z, \xi) F_k^*(p, \xi) d\xi; \quad k = \overline{2, n};$$

$$c_{n+1}^*(p, z) = \frac{1}{\Delta^*(p)} \begin{vmatrix} V_{12}^{01} & V_{12}^{02} & 0 & 0 & 0 & \dots & \omega_1^* \\ V_{11}^{11} & V_{11}^{12} & -V_{12}^{11} & -V_{12}^{12} & 0 & \dots & 0 \\ V_{21}^{11} & V_{21}^{12} & -V_{22}^{11} & -V_{22}^{12} & 0 & \dots & G_1^* \\ 0 & 0 & V_{11}^{21} & V_{11}^{22} & -V_{12}^{21} & \dots & 0 \\ 0 & 0 & V_{21}^{21} & V_{21}^{22} & -V_{22}^{21} & \dots & G_2^* \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots & \dots & -V_{12}^{n-1,1} & -V_{12}^{n-1,2} & 0 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & -V_{22}^{n-1,1} & -V_{22}^{n-1,2} & G_{n-1}^* \\ 0 & \dots & \dots & \dots & V_{11}^{n1} & V_{11}^{n2} & 0 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & V_{21}^{n2} & V_{21}^{n2} & G_n^* \end{vmatrix}.$$

$$\cdot e^{q_{n+1}(z-l_n)} + \int_{l_n}^{\infty} E_{n+1}^*(p, z, \xi) F_{n+1}^*(p, \xi) d\xi.$$

Розкриваючи визначники $\Delta_{A_k}^* chq_k z + \Delta_{B_k}^* shq_k z$, $k = \overline{1, n+1}$, після перетворень отримуємо вирази для отримання компонентів $c_k^*(p, z)$ векторного розв'язку неоднорідної крайової задачі

$$c_k^*(p, z) = W_{1_k}^*(p, z)\omega_1^*(p) + \sum_{j=1}^{n+1} \int_{l_{j-1}}^{l_j} H_{kj}^*(p, z, \xi) F_j^*(p, \xi) d\xi; \quad k = \overline{1, n+1}, \quad l_{n+1} = \infty. \quad (51)$$

Компоненти вектора впливу крайової умови $\omega_1^*(p)$ на k -й сегмент середовища мають вигляд

$$W_{1_k}^*(p, z) = \begin{cases} \Phi_{11}^1(q_1 l_1, q_1 z) A_{1,2} - \Phi_{21}^1(q_1 l_1, q_1 z) A'_{1,2} & ; k = 1 \\ \frac{1}{\Delta^*(p)} \prod_{s=1}^{k-1} q_s h_{1_s} \left[\Phi_{11}^k(q_k l_k, q_k z) A_{1,2k} - \Phi_{21}^k(q_k l_k, q_k z) A'_{1,2k} \right] & ; k = \overline{1, n} \\ \frac{1}{\Delta^*(p)} \prod_{s=1}^n q_s h_{1_s} \cdot e^{-q_{n+1}(z-l_n)} & k = n+1 \end{cases} \quad (52)$$

Компоненти матриці впливу j -ї неоднорідності $F_j^*(p, \xi)$ (спричиненою j -ми складовими початкових концентрацій адсорбтиву у газовій фазі $C_{0_j}(z)$ та нанопорах $a_{0_j}(z)$ на k -й сегмент нанопористого середовища $H_{kj}^*(p, z, \xi)$ мають вигляд

$$H_{n+1,j}^*(p, z, \xi) = \frac{1}{\Delta^*(p)} \begin{cases} \frac{\prod_{s=1}^n h_{1_s} q_s}{q_1} \Phi_{12}^0(q_1 l_0, q_1 \xi) e^{-q_{n+1}(z-l_n)} & ; j = 1 \\ \frac{\prod_{s=j}^n h_{1_s} q_s}{q_j} \left[\Phi_{22}^{j-1}(q_j l_{j-1}, q_j \xi) \Delta_{1,2j-2} - \Phi_{12}^{j-1}(q_j l_{j-1}, q_j \xi) \Delta'_{1,2j-2} \right] e^{-q_{n+1}(z-l_n)} & ; j = \overline{2, n} \\ -\frac{e^{-q_{n+1}(\xi-l_n)}}{q_{n+1}} \left[\Phi_{22}^n(q_{n+1} l_n, q_{n+1} z) \Delta_{1,2n} - \Phi_{12}^n(q_{n+1} l_n, q_{n+1} z) \Delta'_{1,2n} \right] & ; j = n+1 \end{cases} \quad (53)$$

Особливими точками головних розв'язків крайової задачі

$$W_{1_k}^*(p, z), H_{k,k_1}^*(p, z, \xi) \in \text{точки галуження } p = \infty \text{ та } p_{1,2} = -\frac{1}{2} \left[S_1 \pm \sqrt{S_2} \right] < 0;$$

$S_1 = \beta_k(1 + \gamma_k) + \eta_k$, $S_2 = (\eta_k - \beta_k\gamma_k)^2 > 0$. Тому, в процесі переходу до оригіналів за Лапласом інтеграл по контуру Бромвіча можна замінити інтегралом по уявній осі [17, 20]:

$$\begin{aligned} W_{1_k}(t, z) &= L^{-1}\left[W_{1_k}^*(p, z)\right] = \frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma-i\infty}^{\sigma+i\infty} W_{1_k}^*(p, z) \cdot e^{pt} dp = \frac{1}{2\pi i} \int_{-i\infty}^{i\infty} W_{1_k}^*(p, z) e^{pt} dp = \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} W_{1_k}^*(iv, z) e^{ivt} dv = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \operatorname{Re}\left[W_{1_k}^*(iv, z) e^{ivt}\right] dv; \end{aligned} \quad (54)$$

$$H_{k,k_1}^*(t, z, \xi) = L^{-1}\left[H_{k,k_1}^*(p, z, \xi)\right] = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \operatorname{Re}\left[H_{k,k_1}^*(iv, z, \xi) e^{ivt}\right] dv.$$

У результаті однозначної розв'язності алгебраїчної системи (49) з урахуванням одержаних головних розв'язків задачі (52), (53) та формул (45) та (54) отримуємо єдиний векторний розв'язок вихідної крайової задачі (37)–(41) у векторній формі:

$$\begin{aligned} c_k(t, z) &= \int_0^t W_{1_k}(t-\tau, z) \omega_1(t) d\tau + \sum_{k_1=1}^{n+1} \int_{l_{k_1-1}}^{l_{k_1}} H_{k,k_1}(t-\tau, z, \xi) C_{0_{k_1}}(\xi) d\xi + \\ &+ \int_0^t \sum_{k_1=1}^{n+1} \int_{l_{k_1-1}}^{l_{k_1}} \frac{\beta_{k_1} \gamma_{k_1}}{D_{inter_{k_1}}} H_{k,k_1}(t-\tau, z, \xi) e^{-\beta_{k_1} \gamma_{k_1} \tau} a_{0_{k_1}}(\xi) d\xi d\tau \end{aligned} \quad (55)$$

$$a_k(t, z) = \beta_k \int_0^t e^{-\beta_k \gamma_k (t-\tau)} c_k(\tau, z) d\tau + e^{-\beta_k \gamma_k t} a_{0_k}(z). \quad (56)$$

Теорема 1 (про розв'язність). Якщо виконується умова однозначної розв'язності крайової задачі та шукані і задані функції є оригіналами за Лапласом, то розв'язок крайової задачі (37)–(41) існує, є єдиним і визначається формулами (55), (56).

5. Матричні алгоритми обчислення визначника системи та головних розв'язків задачі

Схема алгоритму обчислення визначника системи $\Delta^*(p)$ є такою. Розклавши визначник системи по останньому $(2n+1)$ -му стовпчику, одержимо:

$$\begin{aligned}\Delta^*(p) &= (\alpha_{22}^n q_{n+1} - \delta_{22}^n) \Delta_{1,2n} - (\alpha_{12}^n q_{n+1} - \delta_{12}^n) \Delta'_{1,2n}; \\ \Delta(iv) &= \bar{\Delta}(v) + i\tilde{\Delta}(v); \\ \bar{\Delta}(v) &= ((\alpha_{22}^n \varphi_{1_{n+1}} - \delta_{22}^n) \bar{\Delta}_{1,2n} - \varphi_{2_{n+1}} \tilde{\Delta}_{1,2n}) - (\alpha_{12}^n \varphi_{1_{n+1}} - \delta_{12}^n) \bar{\Delta}'_{1,2n} - \varphi_{2_{n+1}} \tilde{\Delta}'_{1,2n}); \\ \tilde{\Delta}(v) &= ((\varphi_{2_{n+1}} \bar{\Delta}_{1,2n} + (\alpha_{22}^n \varphi_{1_{n+1}} - \delta_{22}^n) \tilde{\Delta}_{1,2n}) - (\varphi_{2_{n+1}} \bar{\Delta}'_{1,2n} + (\alpha_{12}^n \varphi_{1_{n+1}} - \delta_{12}^n) \tilde{\Delta}'_{1,2n})).\end{aligned}$$

Тут

$$\begin{aligned}\Delta_{11}(q_k l_{k-1}, q_k l_k) &= V_{12}^{k-1,1} \cdot V_{11}^{k2} - V_{12}^{k-1,2} \cdot V_{11}^{k1}, \quad \Delta_{22}(q_k l_{k-1}, q_k l_k) = V_{22}^{k-1,1} \cdot V_{21}^{k2} - V_{22}^{k-1,2} \cdot V_{21}^{k1}, \\ \Delta_{12}(q_k l_{k-1}, q_k l_k) &= V_{12}^{k-1,1} \cdot V_{21}^{k2} - V_{12}^{k-1,2} \cdot V_{21}^{k1}, \quad \Delta_{21}(q_k l_{k-1}, q_k l_k) = V_{22}^{k-1,1} \cdot V_{11}^{k2} - V_{22}^{k-1,2} \cdot V_{11}^{k1}.\end{aligned}$$

Рекурсивна процедура обчислення визначників $\Delta_{1,2k}, \Delta'_{1,2k}$ є такою. Покладемо

$$\Delta_{1,2} = \begin{vmatrix} V_{12}^{01} & V_{11}^{11} \\ V_{12}^{02} & V_{11}^{12} \end{vmatrix} \equiv \Delta_{11}^1(q_1 l_0, q_1 l_1), \quad \Delta'_{1,2} = \begin{vmatrix} V_{12}^{01} & V_{21}^{11} \\ V_{12}^{02} & V_{21}^{12} \end{vmatrix} \equiv \Delta_{21}^1(q_1 l_0, q_1 l_1),$$

де

$$\begin{aligned}V_{ij}^{k1}(q_s(iv)l_k) &= \bar{V}_{ij}^{k1}(v) + i\tilde{V}_{ij}^{k1}(v), \quad V_{ij}^{k2}(q_s(iv)l_k) = \bar{V}_{ij}^{k2}(v) + i\tilde{V}_{ij}^{k2}(v), \\ \Delta_{1,2}^1(iv) &= \bar{\Delta}_{11}^1(v, l_0, l_1) - i\tilde{\Delta}_{11}^1(v, l_0, l_1), \quad \Delta'_{1,2}^1(iv) = \bar{\Delta}_{21}^1(v, l_0, l_1) - i\tilde{\Delta}_{21}^1(v, l_0, l_1), \\ \bar{\Delta}_{11}^1(v, l_0, l_1) &= \bar{V}_{12}^{01} \bar{V}_{11}^{12} - \tilde{V}_{12}^{01} \tilde{V}_{11}^{12} - (\bar{V}_{12}^{02} \bar{V}_{11}^{11} - \tilde{V}_{12}^{02} \tilde{V}_{11}^{11}), \\ \tilde{\Delta}_{11}^1(v, l_0, l_1) &= \bar{V}_{12}^{01} \tilde{V}_{11}^{12} + \tilde{V}_{12}^{01} \bar{V}_{11}^{12} - (\bar{V}_{12}^{02} \tilde{V}_{11}^{11} - \tilde{V}_{12}^{02} \bar{V}_{11}^{11}).\end{aligned}$$

Відповідно визначники $\Delta_{1,2k}$ і $\Delta'_{1,2k}$ обчислюються:

$$\begin{aligned}\Delta_{1,2k} &= \Delta_{11}^k(q_k l_{k-1}, q_k l_k) \Delta'_{1,2k-2} - \Delta_{21}^k(q_k l_{k-1}, q_k l_k) \Delta_{1,2k-2}; \\ \Delta'_{1,2k} &= \Delta_{12}^k(q_k l_{k-1}, q_k l_k) \Delta'_{1,2k-2} - \Delta_{22}^k(q_k l_{k-1}, q_k l_k) \Delta_{1,2k-2}; k = \overline{2, n}.\end{aligned}$$

Рекурсивна процедура обчислення визначників $A_{1,2j}, A'_{1,2j}$ (за аналогією обчислення визначників $\Delta_{1,2k}, \Delta'_{1,2k}$) така:

$$\begin{aligned}A_{1,2n} &= \alpha_{22}^n q_{n+1} - \delta_{22}^n, \quad A'_{1,2n} = \alpha_{12}^n q_{n+1} - \delta_{12}^n, \\ A_{1,2n} &= \alpha_{22}^n (\varphi_{1_{n+1}} + i\varphi_{2_{n+1}}) - \delta_{22}^n \equiv \bar{A}_{1,2n} + i\tilde{A}_{1,2n}, \quad A'_{1,2n} = \alpha_{12}^n (\varphi_{1_{n+1}} + i\varphi_{2_{n+1}}) - \delta_{12}^n \equiv \bar{A}'_{1,2n} + i\tilde{A}'_{1,2n}\end{aligned}$$

Відповідно визначники $A_{1,2n-2}, A'_{1,2n-2}$ обчислюються:

$$A_{\overline{1,2n-2}} = \begin{vmatrix} -V_{22}^{n-1,1}(q_n l_{n-1}) & -V_{22}^{n-1,2}(q_n l_{n-1}) \\ V_{11}^{n,1}(q_n l_n) & V_{11}^{n,2}(q_n l_n) \end{vmatrix} (\alpha_{22}^n q_{n+1} - \delta_{22}^n) - \begin{vmatrix} -V_{22}^{n-1,1}(q_n l_{n-1}) & -V_{22}^{n-1,2}(q_n l_{n-1}) \\ V_{21}^{n,1}(q_n l_n) & V_{21}^{n,2}(q_n l_n) \end{vmatrix} (\alpha_{12}^n q_{n+1} - \delta_{12}^n)$$

$$A'_{\overline{1,2n-2}} = \begin{vmatrix} -V_{12}^{n-1,1}(q_n l_{n-1}) & -V_{12}^{n-1,2}(q_n l_{n-1}) \\ V_{11}^{n,1}(q_n l_n) & V_{11}^{n,2}(q_n l_n) \end{vmatrix} (\alpha_{22}^n q_{n+1} - \beta_{22}^n) - \begin{vmatrix} -V_{12}^{n-1,1}(q_n l_{n-1}) & -V_{12}^{n-1,2}(q_n l_{n-1}) \\ V_{21}^{n,1}(q_n l_n) & V_{21}^{n,2}(q_n l_n) \end{vmatrix} (\alpha_{12}^n q_{n+1} - \delta_{12}^n)$$

Визначники $A_{\overline{1,2k}}$, $A'_{\overline{1,2k}}$ відповідно обчислюються:

$$A_{\overline{1,2k}} = \Delta_{22}(q_{k+2} l_{k+1}, q_{k+2} l_{k+2}) A'_{\overline{1,2k+2}} - \Delta_{21}(q_{k+2} l_{k+1}, q_{k+2} l_{k+2}) A_{\overline{1,2k+2}},$$

$$A'_{\overline{1,2k}} = \Delta_{12}(q_{k+2} l_{k+1}, q_{k+2} l_{k+2}) A'_{\overline{1,2k+2}} - \Delta_{11}(q_{k+2} l_{k+1}, q_{k+2} l_{k+2}) A_{\overline{1,2k+2}}, \quad k = \overline{2, n-2},$$

$$A_{\overline{1,2k}}(i\nu) = \bar{A}_{\overline{1,2k}}(\nu) + i\tilde{A}_{\overline{1,2k}}(\nu);$$

$$\bar{A}_{\overline{1,2k}}(\nu) = \bar{\Delta}_{22}^k \bar{A}'_{\overline{1,2k+2}} - \tilde{\Delta}_{22}^k \tilde{A}'_{\overline{1,2k+2}} - (\bar{\Delta}_{21}^k \bar{A}_{\overline{1,2k+2}} - \tilde{\Delta}_{21}^k \tilde{A}_{\overline{1,2k+2}}),$$

$$\tilde{A}_{\overline{1,2k}}(\nu) = \bar{\Delta}_{22}^k \tilde{A}'_{\overline{1,2k+2}} + \tilde{\Delta}_{22}^k \bar{A}'_{\overline{1,2k+2}} - (\bar{\Delta}_{21}^k \tilde{A}_{\overline{1,2k+2}} + \tilde{\Delta}_{21}^k \bar{A}_{\overline{1,2k+2}}),$$

$$A'_{\overline{1,2k}}(i\nu) = \bar{A}'_{\overline{1,2k}}(\nu) + i\tilde{A}'_{\overline{1,2k}}(\nu),$$

$$\bar{A}'_{\overline{1,2k}}(\nu) = \bar{\Delta}_{12}^k \bar{A}'_{\overline{1,2k+2}} - \tilde{\Delta}_{12}^k \tilde{A}'_{\overline{1,2k+2}} - (\bar{\Delta}_{11}^k \bar{A}_{\overline{1,2k+2}} - \tilde{\Delta}_{11}^k \tilde{A}_{\overline{1,2k+2}}),$$

$$\tilde{A}'_{\overline{1,2k}}(\nu) = \bar{\Delta}_{12}^k \tilde{A}'_{\overline{1,2k+2}} + \tilde{\Delta}_{12}^k \bar{A}'_{\overline{1,2k+2}} - (\bar{\Delta}_{11}^k \tilde{A}_{\overline{1,2k+2}} + \tilde{\Delta}_{11}^k \bar{A}_{\overline{1,2k+2}}).$$

Обчислення компонента $H_{11}^*(p, z, \xi)$ таке. Розкривши визначник $\Delta^*(p)$

за першими двома стовпчиками та з урахуванням співвідношень

$$h_1 q_1 = \begin{vmatrix} V_{11}^{11}(q_1 l_1) & V_{11}^{12}(q_1 l_1) \\ V_{21}^{11}(q_1 l_1) & V_{21}^{12}(q_1 l_1) \end{vmatrix},$$

$$\begin{aligned} & \left[h_1 q_1 \Phi_{12}^0(q_1 l_0, q_1 \xi) A'_{\overline{1,2}} - \Delta^*(p) \Phi_{11}^1(q_1 l_1, q_1 \xi) \right] \\ & = \Delta_{11}(q_1 l_0, q_1 l_1) \left[\Phi_{11}^1(q_1 l_1, q_1 \xi) A_{\overline{1,2}} - \Phi_{21}^1(q_1 l_1, q_1 \xi) A'_{\overline{1,2}} \right], \end{aligned}$$

отримаємо

$$H_{11}(i\nu, z, \xi) = -\frac{1}{(\varphi_{1_k} + i\varphi_{2_k})(\bar{\Delta}(\nu) - i\tilde{\Delta}(\nu))} \Phi_{12}^0(q_1 l_0, q_1 z) \left[\Phi_{11}^1(q_1 l_1, q_1 \xi) A_{\overline{1,2}} - \Phi_{21}^1(q_1 l_1, q_1 \xi) A'_{\overline{1,2}} \right].$$

Після перетворення отримуємо оригінал

$$H_{11}(v, z, \xi) \equiv \operatorname{Re}(H_{11}^*(iv, z, \xi)) = \frac{\left(\begin{array}{l} \left(((\varphi_{1_k}(v)\bar{\Delta}(v) - \varphi_{2_k}(v)\tilde{\Delta}(v))\bar{\Phi}_{12}^0(v, l_k, z) - (\varphi_{1_k}(v)\tilde{\Delta}(v) + \varphi_{2_k}(v)\bar{\Delta}(v))\tilde{\Phi}_{12}^0(v, l_k, z)) \cdot \right. \\ \left. \cdot (\bar{\Phi}_{11}^1(v, l_k, \xi)\bar{A}_{1,2} - \tilde{\Phi}_{11}^1(v, l_k, \xi)\tilde{A}_{1,2} + \bar{\Phi}_{21}^1(v, l_k, \xi)\bar{A}'_{1,2} - \tilde{\Phi}_{21}^1(v, l_k, \xi)\tilde{A}'_{1,2}) \right) \\ - \left(((\varphi_{1_k}(v)\bar{\Delta}(v) - \varphi_{2_k}(v)\tilde{\Delta}(v))\tilde{\Phi}_{12}^0(v, l_k, z) + (\varphi_{1_k}(v)\tilde{\Delta}(v) + \varphi_{2_k}(v)\bar{\Delta}(v))\bar{\Phi}_{12}^0(v, l_k, z)) \cdot \right. \\ \left. \cdot (\bar{\Phi}_{11}^1(v, l_k, \xi)\tilde{A}_{1,2} + \tilde{\Phi}_{11}^2(v, l_k, \xi)\bar{A}_{1,2} + \bar{\Phi}_{21}^1(v, l_k, \xi)\tilde{A}'_{1,2} + \tilde{\Phi}_{21}^1(v, l_k, \xi)\bar{A}'_{1,2}) \right) \end{array} \right)}{(\varphi_{1_k}^2(v) - \varphi_{2_k}^2(v))(\bar{\Delta}^2(v) - \tilde{\Delta}^2(v))}$$

Обчислення компонентів $H_{1j}^*(p, z, \xi)$, $j = \overline{2, n}$. Використовуючи умови

$$\Phi_{11}^j(q_j l_j, q_j \xi) h_{2_j} A'_{1,2j-2} - \Phi_{12}^{j-1}(q_j l_{j-1}, q_j \xi) q_j h_{2_{j-1}} A'_{1,2j} h_{1_j} = h_{2_{j-1}} \Delta_{11}(q_j l_{j-1}, q_j l_j) \left[\Phi_{21}^j(q_j l_j, q_j \xi) A'_{1,2j} - \Phi_{11}^j(q_j l_j, q_j \xi) A_{1,2j} \right], \quad (57)$$

отримуємо

$$H_{1j}^*(p, z, \xi) = \frac{\prod_{s=1}^{j-1} q_s h_{2_s}}{q_1 \Delta^*(p)} \left[\Phi_{21}^j(q_j l_j, q_j \xi) A'_{1,2j} - \Phi_{11}^j(q_j l_j, q_j \xi) A_{1,2j} \right].$$

Обчислення компонентів $H_{kj}^*(p, z, \xi)$, $k = \overline{2, n}$; $j = \overline{2, k-1}$. Враховуючи

$$\text{розклад } \Delta_{1,2j} = \Delta_{11} \left[\Phi_{22}^{j-1}(q_j l_{j-1}, q_j \xi) \Delta_{1,2j-2} - \Phi_{12}^{j-1}(q_j l_{j-1}, q_j \xi) \Delta'_{1,2j-2} \right] \text{ та умову (57),}$$

отримуємо

$$H_{kj}^*(p, z, \xi) = \frac{\prod_{s=j}^{k-1} q_s h_{1_s}}{q_j \Delta^*(p)} \left[\Phi_{11}^k(q_k l_k, q_k z) A_{1,2k} - \Phi_{21}^k(q_k l_k, q_k z) A'_{1,2k} \right] \cdot \left[\Phi_{22}^{j-1}(q_j l_j, q_j \xi) \Delta_{1,2j-2} - \Phi_{12}^{j-1}(q_j l_{j-1}, q_j \xi) \Delta'_{1,2j-2} \right], \quad j = \overline{2, k-1}.$$

Обчислення компонентів $H_{kj}^*(p, z, \xi)$, $k = \overline{2, n}$; $j = \overline{k+1, n}$. З урахуванням

розкладів

$$A_{1,2j-2} = \begin{vmatrix} V_{12}^{j-1,1} & V_{12}^{j-1,2} \\ V_{21}^{j1} & V_{21}^{j2} \end{vmatrix} A'_{1,2j} - \Delta_{11}(q_j l_{j-1}, q_j l_j) A_{1,2j},$$

$$\begin{aligned} & \left[h_{2_{j-1}} \Phi_{11}^j(q_j l_j, q_j \xi) A_{1,2j-2} - h_{1_j} h_{2_{j-1}} q_j \Phi_{12}^{j-1}(q_j l_j, q_j \xi) A'_{1,2j} \right] \\ & = h_{2_{j-1}} \Delta_{11} \left[\Phi_{21}^j(q_j l_j, q_j \xi) A'_{1,2j} - \Phi_{11}^j(q_j l_j, q_j \xi) A_{1,2j} \right] \end{aligned}$$

одержуємо

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_{kj}^* (p, z, \xi) &= \frac{\prod_{s=k+1, n}^{j-1} q_s h_{2_s}}{q_k \Delta^*(p)} \left[\Phi_{12}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k z) \Delta'_{1,2k-2} - \Phi_{22}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k z) \Delta_{1,2k-2} \right] \times \\ &\times \left[\Phi_{21}^j(q_j l_j, q_j \xi) A'_{1,2j} - \Phi_{11}^j(q_j l_j, q_j \xi) A_{1,2j} \right]. \end{aligned}$$

Обчислення компонента $\mathbf{H}_{kk}^*(p, z, \xi)$, $k = \overline{2, n}$. Розкривши визначник $\Delta^*(p)$ за $(2k-1)$ -м і $2k$ -м стовпчиками та врахувавши вирази

$$\begin{aligned} &\left[q_k h_{2_{k-1}} \Phi_{11}^k(q_k l_k, q_k z) + \Delta_{21}(q_k l_{k-1}, q_k l_k) \Phi_{12}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k z) \right] = \Delta_{11}(q_k l_{k-1}, q_k l_k) \Phi_{22}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k z), \\ &\left[q_k h_{2_{k-1}} \Phi_{21}^k(q_k l_k, q_k z) + \Delta_{22}(q_k l_{k-1}, q_k l_k) \Phi_{12}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k z) \right] = \Phi_{22}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k \xi) \begin{vmatrix} V_{12}^{k-1,1} & V_{12}^{k-1,2} \\ V_{21}^{k1} & V_{21}^{k2} \end{vmatrix} \\ &\left[q_k h_{1_k} \Phi_{12}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k \xi) - \Phi_{11}^k(q_k l_k, q_k \xi) \right]_{12}^{k-1,1} \begin{vmatrix} V_{12}^{k-1,1}(q_k l_{k-1}) & V_{12}^{k-1,2}(q_k l_{k-1}) \\ V_{21}^{k1}(q_k l_k) & V_{21}^{k2}(q_k l_k) \end{vmatrix} \Phi_{22}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k z) \Delta'_{1,2k-2} A'_{1,2k} = \\ &= -\Delta_{11}(q_k l_{k-1}, q_k l_k) \Phi_{21}^k(q_k l_k, q_k \xi) \Phi_{22}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k z) \Delta'_{1,2k-2} A'_{1,2k}, \\ &\left[\Delta_{12}(q_k l_{k-1}, q_k l_k) \Phi_{11}^k(q_k l_k, q_k \xi) - q_k h_{1_k} \Phi_{12}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k \xi) \right] \Phi_{12}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k z) \Delta'_{1,2k-2} A'_{1,2k} = \\ &= \Delta_{11}(q_k l_{k-1}, q_k l_k) \Phi_{21}^k(q_k l_k, q_k \xi) \Phi_{12}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k z) \Delta'_{1,2k-2} A'_{1,2k}, \end{aligned}$$

отримуємо

$$\begin{aligned} \mathbf{H}_{kk}^*(p, z, \xi) &= \frac{1}{q_k \Delta^*(p)} \left[\Phi_{22}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k z) \Delta'_{1,2k-2} - \Phi_{12}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k z) \Delta_{1,2k-2} \right] \cdot \\ &\cdot \left[\Phi_{11}^k(q_k l_k, q_k \xi) A_{1,2k} - \Phi_{21}^k(q_k l_k, q_k \xi) A'_{1,2k} \right]. \end{aligned}$$

Обчислення компонентів $\mathbf{H}_{n+1,j}^*(p, z, \xi)$, $j = \overline{2, n}$. Враховуючи розклад

$$\Delta_{1,2j} = \Delta_{11}(q_j l_{j-1}, q_j l_j) \cdot \Delta'_{1,2j-2} - \Delta_{21}(q_j l_{j-1}, q_j l_j) \cdot \Delta_{1,2j-2}$$

та рівність

$$\left[h_{2_{j-1}} q_j \Phi_{11}^j(q_j l_j, q_j \xi) - \Delta_{21}(q_j l_{j-1}, q_j l_j) \Phi_{12}^{j-1}(q_j l_{j-1}, q_j \xi) \right] = \Phi_{22}^{j-1}(q_j l_{j-1}, q_j \xi) \Delta_{11}(q_j l_{j-1}, q_j l_j)$$

отримуємо

$$H_{n+1,j}^*(p, z, \xi) = \frac{\prod_{s=j}^n h_{1_s} q_s}{q_j \Delta^*(p)} e^{-q_{n+1}(z-l_n)} \left[\Phi_{22}^{j-1}(q_j l_{j-1}, q_j \xi) \Delta_{1,2j-2} - \Phi_{12}^{j-1}(q_j l_{j-1}, q_j \xi) \Delta'_{1,2j-2} \right], \quad j = \overline{2, n}.$$

Обчислення компонента $H_{n+1,n+1}^*(p, z, \xi)$. Враховуючи розклад

$$\Delta^*(p) = (\alpha_{22}^n q_{n+1} - \delta_{22}^n) \Delta_{1,2n} - (\alpha_{12}^n q_{n+1} - \delta_{12}^n) \Delta'_{1,2n}$$

та рівність

$$V_{22}^{n2}(q_{n+1} l_n) - V_{22}^{n1}(q_{n+1} l_n) = -\frac{e^{-q_{n+1}(\xi-l_n)}}{\alpha_{22}^n q_{n+1} - \delta_{22}^n},$$

отримуємо

$$H_{n+1,n+1}^*(p, z, \xi) = -\frac{1}{q_{n+1} \Delta^*(p)} e^{-q_{n+1}(\xi-l_n)} \left[\Phi_{22}^n(q_{n+1} l_n, q_{n+1} z) \Delta_{1,2n} - \Phi_{12}^n(q_{n+1} l_n, q_{n+1} z) \Delta'_{1,2n} \right].$$

Перехід до оригіналів за Лапасом в обчислених компонентах матриці впливу здійснюється аналогічно схемі обчислення оригіналу компонента $H_{11}^*(p, z, \xi)$.

У цьому розділі використані такі позначення: $A_{1,2k}$ – визначник, утворений з визначника системи $\Delta^*(p)$ вилученням перших $2k$ рядків і стовпчиків (з номерами $\overline{1, 2k}$, $k = \overline{1, n}$); $A'_{1,2k}$ – визначник, утворений з визначника системи $\Delta^*(p)$ вилученням перших $2k+1$ рядків, окрім $2k$ -го (з номерами $\overline{1, 2k-1, 2k+1}$; $k = \overline{1, n}$), і перших $2k$ стовпчиків (з номерами $\overline{1, 2k}$, $k = \overline{1, n}$); $\Delta_{1,2k}$ – визначник, утворений з перших $2k$ рядків і стовпчиків (з номерами $\overline{1, 2k}$, $k = \overline{1, n}$) визначника системи $\Delta^*(p)$; $\Delta'_{1,2k}$ – визначник, утворений з перших $2k+1$ рядків, окрім $2k$ -го (з номерами $\overline{1, 2k-1, 2k+1}$; $k = \overline{1, n}$) і перших $2k$ стовпчиків (з номерами $\overline{1, 2k}$, $k = \overline{1, n}$) визначника системи;

$$V_{ij}^{k1}(q_s(iv)l_k) = \bar{V}_{ij}^{k1}(v) + i\tilde{V}_{ij}^{k1}(v), \quad V_{ij}^{k2}(q_s(iv)l_k) = \bar{V}_{ij}^{k2}(v) + i\tilde{V}_{ij}^{k2}(v);$$

$$\bar{V}_{ij}^{k1}(v) = \alpha_{ij}^k \left(\varphi_{1_s} \sin(\Gamma_{1_s} l_k) \cos(\Gamma_{2_s} l_k) - \varphi_{2_s} \cos(\Gamma_{1_s} l_k) \sin(\Gamma_{2_s} l_k) \right) + \delta_{ij}^k \cos(\Gamma_{1_s} l_k) \sin(\Gamma_{2_s} l_k),$$

$$\begin{aligned}
\tilde{V}_{ij}^{k1}(\nu) &= \alpha_{ij}^k \varphi_{1_s} \sin(\Gamma_{1_s} l_k) \cos(\Gamma_{2_s} l_k) + \delta_{ij}^k \sin(\Gamma_{1_s} l_k) \sin(\Gamma_{2_s} l_k), \\
\bar{V}_{ij}^{k2}(\nu) &= \alpha_{ij}^k \left(\varphi_{1_s} \cos(\Gamma_{1_s} l_k) \cos(\Gamma_{2_s} l_k) - \varphi_{2_s} \sin(\Gamma_{1_s} l_k) \sin(\Gamma_{2_s} l_k) \right) + \delta_{ij}^k \cos(\Gamma_{1_s} l_k) \sin(\Gamma_{2_s} l_k), \\
\tilde{V}_{ij}^{k2}(\nu) &= \alpha_{ij}^k \varphi_{1_s} \cos(\Gamma_{1_s} l_k) \cos(\Gamma_{2_s} l_k) + \delta_{ij}^k \cos(\Gamma_{1_s} l_k) \sin(\Gamma_{2_s} l_k), \\
ch(q_k(iv)z) &\equiv ch(\Gamma_{1_k}(\nu)z + i\Gamma_{2_k}(\nu)z) = \cos(\Gamma_{1_k}(\nu)z) \cos(\Gamma_{2_k}(\nu)z) + i \sin(\Gamma_{1_k}(\nu)z) \sin(\Gamma_{2_k}(\nu)z), \\
sh(q_k(iv)z) &= \sin(\Gamma_{1_k}(\nu)z) \cos(\Gamma_{2_k}(\nu)z) + i \cos(\Gamma_{1_k}(\nu)z) \sin(\Gamma_{2_k}(\nu)z), \\
q_k(iv) &= \varphi_{1_k}(\nu) + i\varphi_{2_k}(\nu), \quad q_k^2(iv) = \Gamma_{1_k}(\nu) + i\Gamma_{2_k}(\nu), \\
\varphi_{1_k}(\nu) &= \left[\frac{(\Gamma_{1_k}^2(\nu) + \Gamma_{2_k}^2(\nu)) + \Gamma_{1_k}(\nu)}{2} \right]^{1/2}, \quad \varphi_{2_k}(\nu) = \left[\frac{(\Gamma_{1_k}^2(\nu) + \Gamma_{2_k}^2(\nu))^{1/2} - \Gamma_{1_k}(\nu)}{2} \right]^{1/2}, \\
\Gamma_{1_k}(\nu) &= \frac{\nu^2 \beta_k^2 (\gamma_k \eta_k + 1)}{D_{inter_k} (\beta_k^2 \gamma_k^2 + \nu^2)}, \quad \Gamma_{2_k}(\nu) = \frac{\nu(\nu^2 + \beta_k^2 \gamma_k + \beta_k^2 \gamma_k^2 (\eta_k + 1))}{D_{inter_k} (\beta_k^2 \gamma_k^2 + \nu^2)}, \\
q_k^m(iv) &= (\varphi_{1_k}(\nu) + \varphi_{2_k}(\nu))^{n/2} (\cos n\psi_k + i \sin n\psi_k) = \Upsilon_{1_k}(\nu) + i\Upsilon_{2_k}(\nu), \\
\Upsilon_{1_k}(\nu) &= (\varphi_{1_k}(\nu) + \varphi_{2_k}(\nu))^{n/2} \cos n\psi_k, \quad \Upsilon_{2_k}(\nu) = (\varphi_{1_k}(\nu) + \varphi_{2_k}(\nu))^{n/2} \sin n\psi_k, \\
\psi_k &= \arg(q_k(iv)) = \arctg\left(\frac{\varphi_{2_k}}{\varphi_{1_k}}\right), \quad \varphi_{1_k} > 0, \varphi_{2_k} > 0, \\
q_k^m(iv) &= (\varphi_{1_k}(\nu) + \varphi_{2_k}(\nu))^{n/2} (\cos n\psi_k + i \sin n\psi_k), \\
\Phi_{ij}^k(q_s(iv)l_k, z) &= \bar{\Phi}_{ij}^k(\nu, l_k, z) + i\tilde{\Phi}_{ij}^k(\nu, l_k, z), \\
\bar{\Phi}_{ij}^k(\nu, l_k, z) &= A_{ij}^{k2}(\nu) \cos(\Gamma_{1_k}(\nu)z) \cos(\Gamma_{2_k}(\nu)z) - B_{ij}^{k2}(\nu) \sin(\Gamma_{1_k}(\nu)z) \sin(\Gamma_{2_k}(\nu)z) - \\
&- A_{ij}^{k1}(\nu) \sin(\Gamma_{1_k}(\nu)z) \cos(\Gamma_{2_k}(\nu)z) - B_{ij}^{k1}(\nu) \cos(\Gamma_{1_k}(\nu)z) \sin(\Gamma_{2_k}(\nu)z) \\
\tilde{\Phi}_{ij}^k(\nu, l_k, z) &= B_{ij}^{k2}(\nu) \cos(\Gamma_{1_k}(\nu)z) \cos(\Gamma_{2_k}(\nu)z) - A_{ij}^{k2}(\nu) \sin(\Gamma_{1_k}(\nu)z) \sin(\Gamma_{2_k}(\nu)z) - \\
&- B_{ij}^{k1}(\nu) \sin(\Gamma_{1_k}(\nu)z) \cos(\Gamma_{2_k}(\nu)z) + A_{ij}^{k1}(\nu) \cos(\Gamma_{1_k}(\nu)z) \sin(\Gamma_{2_k}(\nu)z)
\end{aligned}$$

Висновки до розділу 1

Розроблені високопродуктивні методи і обчислювальні технології моделювання адсорбції газів в неоднорідних багатокомпонентних нанопористих середовищах зі зворотними впливами для класів нелінійних ізотерм адсорбції типу Ленгмюра. Обґрунтовані і розвинуті підходи побудови

узагальнених нелінійних рівнянь рівноваги адсорбції Ленгмюра. Реалізовані ефективні схеми розпаралелювання та декомпозиції нелінійних моделей.

Запропоновані математичні моделі адсорбції в напівобмеженому неоднорідному нанопористому середовищі і отриманий аналітичний розв'язок в узагальненому вигляді описують впливи неоднорідностей, спричинених розподіленими складовими початкових та граничних концентрацій адсорбтиву у газовій фазі та нанопорах на кожен окремий шар середовища. Побудовані високошвидкісні аналітичні розв'язки математичних моделей з використанням операційного методу Гевісайда та реалізації рекурентних алгоритмів побудови матриць впливу Коші, що забезпечує ефективне розпаралелювання обчислювальних процесів для багатоядерних комп'ютерів та підвищення швидкодії обчислень.

Список використаної літератури

1. Puertolas B., Navarro M. V., Lopez J. M., Murillo R., Mastral A. M., Garcia T. Modelling the heat and mass transfers of propane onto a ZSM-5 zeolite. *Separation and Purification Technology*. 2012. Vol. 86. P. 127–136. URL: <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2011.10.036>.
2. Barrer R. M., *Diffusion and Flow in Porous Zeolite, Carbon or Ceramic Media, Characterization of Porous Solids*, Society of Chemical Industry, London, 1979. URL: [https://doi.org/10.1016/S0167-2991\(09\)60728-X](https://doi.org/10.1016/S0167-2991(09)60728-X).
3. R. de Boer, Contemporary progress in porous theory. *Apl. Mech. Rev.* 53 (12). P. 323–369. 2000. URL: <https://doi.org/10.1115/1.3097333>.
4. Krishna R., Van Baten J. M. Investigating the non-idealities in adsorption of CO₂-bearing mixtures in cation-exchanged zeolites. *Separation and Purification Technology*. 2018. Vol. 206. P. 208–217. URL: <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2018.06.009>.
5. Krishna R. Thermodynamically Consistent Methodology for Estimation of Diffusivities of Mixtures of Guest Molecules in Microporous Materials. *ACS Omega* 2019, Vol. 4 (8). P. 13520–13529. URL: <https://doi.org/10.1021/acsomega.9b01873>.

6. Kärger J., Ruthven D. Diffusion in Zeolites and Other Microporous Solids. Hoboken: Wiley, New York, 1992.
7. Kärger J., Ruthven D., Theodorou D. Diffusion in Nanoporous Materials. Hoboken: Wiley, 2012. 902 p.
8. Langmuir I.-J. Vapor pressures, evaporation, condensation and adsorption. J. Am. Chem. Soc. 1932. Vol. 54. P. 2798–2832. DOI: 10.1021/ja01346a022.
9. Leclerc S., Petryk M., Canet D., Fraissard J. Competitive diffusion of gases in a zeolite using proton NMR and slice selection procedure. Catalysis Today, 2012. Vol. 187. No. 1. P. 104–107. URL: <https://doi.org/10.1016/j.cattod.2011.09.007>.
10. Petryk M., Leclerc S., Canet D., Fraissard J. Modeling of gas transport in a microporous solid using a slice selection procedure: Application to the diffusion of benzene in ZSM5. Catalysis Today. 2008. Vol. 139 (3). P. 234–240. URL: <https://doi.org/10.1016/j.cattod.2008.05.034>.
11. Petryk M., Leclerc S., D. Canet, Sergienko I.V., Deineka V.S., Fraissard J. Competitive diffusion of gases in a zeolite bed: NMR and slice procedure, modelling and identification of parameters. J. Phys. Chem. C. 2015. Vol. 119 (47). P. 26519–26525. URL: <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.5b07974>.
12. Sergienko I. V., Peryk M. R., Leclerc S., Fraissard J. Highly efficient methods of the identification of competitive diffusion parameters in heterogeneous media of nanoporous particles. Cybernetics and Systems Analysis. 2015. Vol. 51 (4). P. 529–546. URL: <https://doi.org/10.1007/s10559-015-9744-7>.
13. Petryk M. R., Boyko I. V., Khimich O. M., Petryk M. M. High-Performance Supercomputer Technologies of Simulation of Nanoporous Feedback Systems for Adsorption Gas Purification. Cybernetics and Systems Analysis. 2020. Vol. 56. No. 5. P. 835–847. URL: <https://doi.org/10.1007/s10559-020-00304-y>.
14. Petryk M., Ivanchov M., Leclerc S., Canet D., Fraissard J. Competitive Adsorption and Diffusion of Gases in a Microporous Solid. In the book "Zeolites – New Challenges". Margeta K., Farkas. (Eds). London: IntechOpen, UK. P. 13–31. 2020. URL: <https://doi.org/10.5772/intechopen.88138>.
15. Хіміч О. М., Петрик М. Р., Михалик Д. М., Бойко І. В., Попов О. В., Сидорук В. А. Методи математичного моделювання та ідентифікації

складних процесів і систем на основі високопродуктивних обчислень. Київ: Вид-во НАН України, 2019. 190 с.

16. Petryk M., Khimich A., Petryk M.M., Fraissard J. Experimental and computer simulation studies of dehydration on microporous adsorbent of natural gas used as motor fuel. *Fuel*. 2019. Vol. 239. P. 1324–1330. URL: <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2018.10.134>.
17. Petryk M., Khimitch A., Petryk M. M. Simulation of Adsorption and Desorption of Hydrocarbons in Nanoporous Catalysts of Neutralization Systems of Exhaust Gases Using Nonlinear Langmuir Isotherm. *Journal of Automation and Information Sciences*, Vol. 50 (10),. P. 18–33. 2018. URL: <https://doi.org/10.1615/JAutomatInfScien.v50.i10.20>.
18. Doetsch G. *Handbuch der Laplace-Transformation: Band I: Theorie der Laplace-Transformation*. Springer Basel AG, 2013. 581 p.
19. Ленюк М. П., Петрик М. Р. Інтегральні перетворення Фур'є, Бесселя із спектральним параметром в задачах математичного моделювання масопереносу в неоднорідних середовищах. Київ: Наукова думка, 2000. 372 с.
20. Petryk M., Gancarczyk T., Khimich O. *Methods of Mathematical Modeling and Identification of Complex Processes and Systems on the basis of High-performance Calculations (neuro- and nanoporous feedback cyber systems, models with sparse structure data, parallel computations)*. Scientific Publishing University of Bielsko-Biala. Bielsko-Biala, Poland (Wydawnictwo Naukowe Akademia Techniczno-Humanistyczna:Bielsko-Biała, Polska), 2021, 194 p. URL: <https://www.sbc.org.pl/dlibra/publication/584139/edition/549297>.
21. Petryk M. R., Boyko I. V., Khimich O. M., Petryk O. Y. High-Performance Methods of Modeling the Adsorption with Feedback in Heterogeneous Multicomponent NanoporousMedia. *Cybernetics and System Analysis*, Springer New York, Vol. 58 (5). P. 787–805. 2022. DOI: 10.1007/s10559-022-00512-8.

РОЗДІЛ 2. ВИСОКОПРОДУКТИВНІ МЕТОДИ МОДЕЛЮВАННЯ НАНОАДСОРБЦІЇ ТА ДИФУЗІЇ ЗІ ЗВОРТНИМИ ЗВ'ЯЗКАМИ ДЛЯ В НЕОДНОРІДНИХ ЦИЛІНДРИЧНИХ БАГАТОКОМПОНЕНТНИХ НАНОПОРИСТИХ СЕРЕДОВИЩАХ

Розроблено нові високопродуктивні аналітичні методи моделювання полів концентрацій дифундованих газів у внутрішньо- та міжчастинковому просторах у неоднорідних циліндричних n -складових нанопористих середовищах з використанням операційного методу Гевісайда та матриць впливу Коші для неоднорідних крайових задач адсорбції для систем рівнянь в частинних похідних із зворотними зв'язками.

1. Аналіз стану досліджень

Дослідження складних процесів наноадсорбційного переносу в неоднорідних середовищах із комірковою структурою, що містять нанопористі елементи, що взаємодіють між собою, потребує розробки нових методів якісного моделювання, які дають змогу описати складні механізми системи міжфазних взаємодій між усіма компонентами переносу та нестационарних таких систем і процесів в однорідних і неоднорідних пористих середовищах різної конструкції та методи побудови математичних рішень таких моделей розглядалися в [1–3].

Для однорідних середовищ адсорбційного масопереносу використовували методи інтегральних перетворень Фур'є, Лапласа, Вебера, Ганкеля та Гільберта. Для неоднорідних середовищ в основному використовували численні методи [4–6]. Математична теорія інтегральних перетворень та їх застосування для задач масопереносу для неоднорідних і пористих середовищ з урахуванням системи механізмів міжфазних взаємодій між елементами переносу та нестационарних режимів масопереносу на поверхнях масопереносу (з урахуванням спектрального параметра) у

граничних умовах та системі умов розділу (спряження) нами розроблена в припущенні щодо структури диференціальних операторів Фур'є, Бесселя, Вебера, Ганкеля, граничні та інтерфейсні умови інтегральні перетворення Фур'є, Бесселя, Вебера та Ганкеля зі спектральним параметром [5].

Для неоднорідних $n+1$ -компонентних циліндричних обмежених, напівобмежених та необмежених нанопористих середовищ будуються основні розв'язки наносорбційних моделей (фундаментальні функції Коші та Гріна) – функції впливу неоднорідностей задачі, граничних та інтерфейсних умов системи. У цьому розділі нами розглядалась математична модель складного процесу адсорбційного масопереносу в неоднорідному нанопористому середовищі з обмеженою кількістю n складових наносередовищ, що взаємодіють між собою, побудовано точний аналітичний розв'язок моделі та виписано компоненти матриць впливу (головних) розв'язків системи.

2. Математичний опис задачі

Розглянуто адсорбційний масоперенос в неоднорідному обмеженому циліндричному адсорбційному середовищі з n -інтерфейсом за координатою r , заповненому n адсорбентами з різними фізико-хімічними характеристиками. Геометрична схема досліджуваної шаруватої наноструктури подана на Рис. 1.

Математичну модель такого складного процесу наноадсорбційного перенесення, враховуючи нестационарність масообміну на циліндричних масообмінних поверхнях (крайових та інтерфейсних) і фізичні припущення, наведені в [2–4], можна описати у вигляді такої змішаної крайової задачі: побудувати обмежений в циліндричній області

$$D_n = \left\{ (t, r) : t > 0, r \in \bigcup_{j=1}^{n+1} (R_{j-1}, R_j), R_0 > 0, R_{n+1} \leq \infty \right\} \quad \text{багатокомпонентній}$$

розв'язок системи рівнянь у частинних похідних:

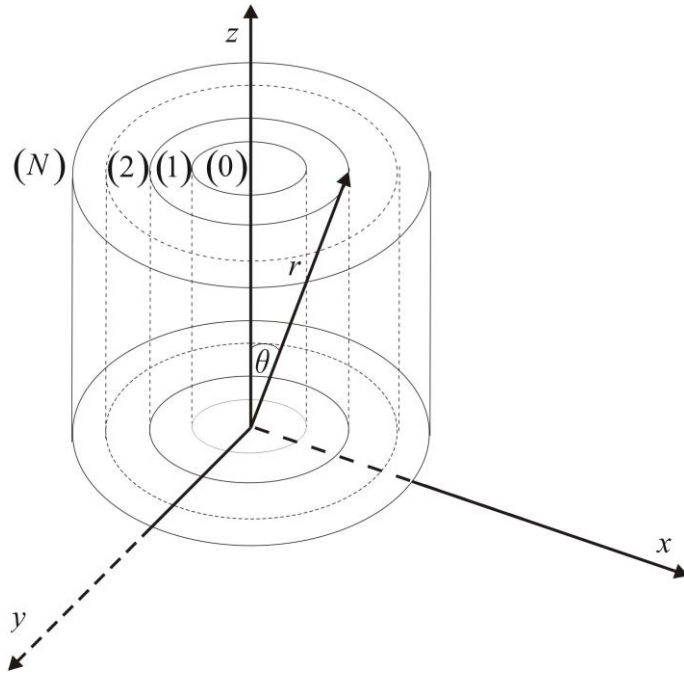


Рис. 1. Геометрична схема шаруватої наноструктури циліндричної конструкції з позначеними координатами меж поділу складових середовищ

$$\frac{\partial C_j(t,r)}{\partial t} + \frac{\partial a_j(t,r)}{\partial t} + \eta_j^2 C_j = D_{r_j} B_{v\alpha_j} [C_j] + f_j(t,r) \quad (1)$$

$$\frac{\partial a_j}{\partial t} = \beta_j (C_j - \gamma_j a_j) \quad (2)$$

з такими початковими умовами:

$$C_j(t,r)_{t=0} = C_{0_j}(r); a_j(t,r)_{t=0} = a_{0_j}(r); \quad (2)$$

а такими граничні умови та системою інтерфейсних (спряжених) умов за геометричною координатою r :

$$\left[(\alpha_{12}^0 + \delta_{12}^0 \frac{\partial}{\partial t}) \frac{\partial}{\partial r} + (\beta_{12}^0 + \gamma_{12}^0 \frac{\partial}{\partial t}) \right] C_1(t,r) \Big|_{r=R_0} = \omega_1(t); \quad (3)$$

$$\left[(\alpha_{22}^{n+1} + \delta_{22}^{n+1} \frac{\partial}{\partial t}) \frac{\partial}{\partial r} + (\beta_{22}^{n+1} + \gamma_{22}^{n+1} \frac{\partial}{\partial t}) \right] C_{n+1}(t,r) \Big|_{r=R_{n+1}} = \omega_{n+1}(t)$$

$$\left[\left[(\alpha_{i1}^j + \delta_{i1}^j \frac{\partial}{\partial t}) \frac{\partial}{\partial r} + (\beta_{i1}^j + \gamma_{i1}^j \frac{\partial}{\partial t}) \right] C_j(t,r) - \left[(\alpha_{i2}^j + \delta_{i2}^j \frac{\partial}{\partial t}) \frac{\partial}{\partial r} + (\beta_{i2}^j + \gamma_{i2}^j \frac{\partial}{\partial t}) \right] C_{j+1}(t,r) \right] \Big|_{r=R_j} = 0; \quad (4)$$

$$j = \overline{1, n}; i = \overline{1, 2}$$

Тут $B_{\nu\alpha_j} = \frac{d^2}{dr^2} + \frac{1}{r}(2\alpha_j + 1)\frac{d}{dr} - (\nu_j^2 - \alpha_j^2)r^{-2}$ це оператор Бесселя для n - інтерфейсу середовище, C_j, a_j – масові концентрації адсорбенту відповідно в рідкій фазі (міжчастковому просторі) та твердій фазі (у мікро- та нанопорах зерен адсорбенту) для j -го шару адсорбційного середовища, $j = \overline{1, n+1}$.

3. Методика побудови аналітичного розв'язку моделі та рекурентні алгоритми обчислення матриць функцій впливу (основні розв'язки)

Припускаючи, що шукані вектор-функції $C(t, r), a(t, r)$ є оригіналами Лапласа, ми застосовуємо інтегральне перетворення Лапласа відносно змінної часу t до крайової задачі (1)–(5). В результаті отримуємо крайову задачу:

побудувати обмежений на множині $I_n = \left\{ r : r \in \bigcup_{j=1}^{n+1} (R_{j-1}, R_j), R_0 > 0, R_{n+1} < \infty \right\}$

розв'язок системи диференціальних рівнянь Бесселя для модифікованих функцій:

$$\left[B_{\nu\alpha_j} - q_j^2(p) \right] C_j^*(p, r) = -F_j^*(p, r) \quad (6)$$

та граничних умов

$$\left[\bar{\alpha}_{12}^0 \frac{\partial}{\partial r} + \bar{\beta}_{12}^0 \right] C_1^*(p, r) \Big|_{r=R_0} = \omega_{R_0}^*(p); \left[\bar{\alpha}_{22}^{n+1} \frac{\partial}{\partial r} + \bar{\beta}_{22}^{n+1} \right] C_{n+1}^*(p, r) \Big|_{r=R_{n+1}} = \omega_{R_{n+1}}^*(p) \quad (7)$$

та інтерфейсних умов за координатою r :

$$\left[\left[(\bar{\alpha}_{i1}^j \frac{d}{dz} + \bar{\beta}_{i1}^j) C_j^*(p, z) - (\bar{\alpha}_{i2}^k \frac{d}{dz} + \bar{\beta}_{i2}^k) C_{j+1}^*(p, r) \right] \right]_{r=R_j} = \omega_{ij}; j = \overline{1, n}; i = \overline{1, 2} \quad (8)$$

Тут

$$F_j^*(p, r) = \frac{1}{D_{r_j}} [f_j^*(p, r) + C_{o_j}(r) + \frac{\beta_j \gamma_j}{p + \beta_j \gamma_j} a_{o_j}(r)] \quad (9)$$

$$\omega_{R_0}^*(p) = \omega_1^*(p) + \left(\delta_{12}^0 \frac{d}{dr} + \gamma_{12}^0 \right) C_{0_1}(R_0) \equiv \omega_1^*(p) + \omega_{1,1}; \quad (10)$$

$$\omega_{R_{n+1}}^*(p) = \omega_{n+1}^*(p) + \left(\delta_{22}^{n+1} \frac{d}{dr} + \gamma_{22}^{n+1} \right) C_{0_{n+1}}(R_{n+1}) \equiv \omega_{n+1}^*(p) + \omega_{n+1,1};$$

$$\omega_{ij} = \left[\left(\delta_{i1}^j \frac{d}{dr} + \gamma_{i1}^j \right) C_{0_i}(r) - \left(\delta_{i2}^j \frac{d}{dr} + \gamma_{i2}^j \right) C_{0_{j+1}}(r) \right] \Big|_{r=R_j} \quad (11)$$

$$q_j^2(p) = \frac{1}{D_{r_j}(p + \beta_j \gamma_j)} \left[p^2 + p(\beta_j(1 + \gamma_j) + \beta_j \gamma_j \cdot \eta_j^2) \right] \quad (12)$$

$$\bar{\alpha}_{im}^j = \alpha_{im}^j + \delta_{im}^j \cdot p; \bar{\beta}_{im}^j = \beta_{im}^j + \gamma_{im}^j \cdot p; j = \overline{1, n}; i, m = \overline{1, 2}$$

Тоді маємо

$$a_j^*(p, r) = \frac{a_{0_j}(r)}{p + \beta_j \gamma_j} + \frac{\beta_j(r)}{p + \beta_j \gamma_j} C_j^*(p, r); j = \overline{1, n+1} \quad (13)$$

Якщо зафіксувати гілку дволистової функції, на якій $\operatorname{Re} q_j(p) > 0$ в силу властивостей функцій, що утворюють фундаментальну систему розв'язків рівняння Бесселя (6), побудуємо розв'язання неоднорідного крайового завдання (6)–(8) методом функцій Коші [3]:

$$C_j^*(p, r) = A_j \cdot I_{\nu_{\alpha_j}}(q_j r) + B_j \cdot K_{\nu_{\alpha_j}}(q_j r) + \int_{R_{j-1}}^{R_j} E_{\nu_{\alpha_j}}^*(p, r, \rho) F_j^*(p, \rho) \rho^{2\alpha_j+1} d\rho; j = \overline{1, n+1} \quad (14)$$

де $E_{\nu_{\alpha_j}}^*(p, r, \rho)$, $j = \overline{1, n+1}$ функції впливу Коші, що задовольняють такі умови:

$$\begin{cases} E_{\nu_{\alpha_j}}^*(p, r, \rho) \Big|_{r=\rho+0} - E_{\nu_{\alpha_j}}^*(p, r, \rho) \Big|_{r=\rho-0} = 0; \\ \frac{d}{dr} E_{\nu_{\alpha_j}}^*(p, r, \rho) \Big|_{r=\rho+0} - \frac{d}{dr} E_{\nu_{\alpha_j}}^*(p, r, \rho) \Big|_{r=\rho-0} = -\rho^{-(2\alpha_j+1)}. \end{cases} \quad (15)$$

Функції впливу Коші $E_{\nu_{\alpha_j}}^*(p, r, \rho)$, $j = \overline{1, n+1}$ отримуються у такому вигляді:

$$E_{\nu_{\alpha_j}}^*(p, r, \rho) = \begin{cases} E_{\nu_{\alpha_j}}^{-*} = D_{1_j} I_{\nu_{\alpha_j}}(q_j r) + E_{1_j} K_{\nu_{\alpha_j}}(q_j r); R_{j-1} < r < \rho < R_j \\ E_{\nu_{\alpha_j}}^{+*} = D_{2_j} I_{\nu_{\alpha_j}}(q_j r) + E_{2_j} K_{\nu_{\alpha_j}}(q_j r); R_{j-1} < \rho < r < R_j \end{cases} \quad (16)$$

в той же час вони повинні задовольняти додатковим умовам однорідності для лівої та правої границь

$$\left(\bar{\alpha}_{12}^{j-1} \frac{d}{dr} + \bar{\beta}_{12}^{j-1} \right) E_{v\alpha_j}^{-*} \Big|_{r=R_{j-1}} = 0. \quad (17)$$

$$\left(\bar{\alpha}_{11}^j \frac{d}{dr} + \bar{\beta}_{11}^j \right) E_{v\alpha_j}^{+*} \Big|_{r=l_j} = 0. \quad (18)$$

Розглянемо наступні функції:

$$\begin{aligned} U_{v\alpha_{im}}^{j1}(q_s R_j) &= \left(\bar{\alpha}_{im}^j \frac{d}{dz} + \bar{\beta}_{im}^j \right) I_{v_j \alpha_j}(q_s r) \Big|_{r=R_j} = \\ &= \left(\bar{\alpha}_{im}^j \frac{v_j - \alpha_j}{R_j} + \bar{\beta}_{im}^j \right) I_{v_j \alpha_j}(q_s R_j) + \bar{\alpha}_{im}^j R_j q_s^2 I_{v_j+1, \alpha_j+1}(q_s R_j) \end{aligned} \quad (19)$$

$$\begin{aligned} U_{v\alpha_{im}}^{j2}(q_s R_j) &= \left(\bar{\alpha}_{im}^j \frac{d}{dr} + \bar{\beta}_{im}^j \right) K_{v_j \alpha_j}(q_s r) \Big|_{r=R_j} = \\ &= \left(\bar{\alpha}_{im}^j \frac{v_j - \alpha_j}{R_j} + \bar{\beta}_{im}^j \right) K_{v_j \alpha_j}(q_s R_j) - \bar{\alpha}_{im}^j R_j q_s^2 K_{v_j+1, \alpha_j+1}(q_s R_j) \end{aligned}$$

$$\Phi_{v\alpha_{im}}^j(q_s R_j, q_s r) = U_{v\alpha_{im}}^{j1}(q_s R_j) \cdot K_{v_j \alpha_j}(q_s r) - U_{v\alpha_{im}}^{j2}(q_s R_j) \cdot I_{v_j \alpha_j}(q_s r). \quad (20)$$

Для визначення констант $D_{1_k}, E_{1_k}, D_{2_k}, E_{2_k}$ і функцій Коші $E_k^*(p, r, \rho), k = \overline{1, n}$ як результату їх властивостей, визначених умовами (19), (20), отримаємо алгебраїчну систему рівнянь:

$$\begin{aligned} (D_{2_k} - D_{1_k}) I_{v_k \alpha_k}(q_k \rho) + (E_{2_k} - E_{1_k}) K_{v_k \alpha_k}(q_k \rho) &= 0 \\ (D_{2_k} - D_{1_k}) \left(\frac{v_k - \alpha_k}{\rho} I_{v_k \alpha_k}(q_k \rho) + R_k q_k^2 I_{v_k+1, \alpha_k+1}(q_k \rho) \right) + \\ + (E_{2_k} - E_{1_k}) \left(\frac{v_k - \alpha_k}{\rho} K_{v_k \alpha_k}(q_k \rho) - R_k q_k^2 K_{v_k+1, \alpha_k+1}(q_k \rho) \right) &= -\frac{1}{q_k \cdot \rho^{2\alpha_k+1}}; \end{aligned} \quad (21)$$

$$D_{1_k} \cdot U_{v\alpha_{12}}^{k-1,1}(q_k R_{k-1}) + E_{1_k} \cdot U_{v\alpha_{12}}^{k-1,2}(q_k R_{k-1}) = 0$$

$$D_{2_k} \cdot U_{v\alpha_{11}}^{k1}(q_k R_k) + E_{2_k} \cdot U_{v\alpha_{11}}^{k,2}(q_k R_k) = 0$$

З системи алгебраїчних рівнянь (21) ми отримуємо:

$$D_{2_k} - D_{1_k} = -q_k^{2\alpha_k} K_{v_k \alpha_k}(q_k \rho); \quad E_{2_k} - E_{1_k} = q_k^{2\alpha_k} I_{v_k \alpha_k}(q_k \rho). \quad (22)$$

Внаслідок однозначної відкритості алгебраїчної системи (21) функції Коші $E_k^*(p, r, \rho); k = \overline{1, n+1}$ визначені і внаслідок симетрії відносно діагоналі мають таку структуру:

$$E_{v\alpha_k}^*(p, r, \rho) = \frac{q_k^{2\alpha_k}}{\Delta_{v\alpha_{11}}(q_k R_{k-1}, q_k R_k)} \times \begin{cases} \Phi_{v\alpha_{11}}^k(q_k R_k, q_k \rho) \cdot \Phi_{v\alpha_{12}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r), R_{k-1} < r < \rho < R_k \\ \Phi_{v\alpha_{11}}^k(q_k R_k, q_k r) \cdot \Phi_{v\alpha_{12}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k \rho), R_{k-1} < \rho < r < R_k \end{cases} \quad (23)$$

де

$$\Delta_{v\alpha_{im}}(q_k R_{k-1}, q_k R_k) = U_{v\alpha_{k_2}}^{k-1,1}(q_k R_{k-1}) U_{v\alpha_{k_m}}^{k,2}(q_k R_k) - U_{v\alpha_{k_2}}^{k-1,2}(q_k R_{k-1}) U_{v\alpha_{k_m}}^{k,1}(q_k R_k) \\ k = \overline{2, n}; i, m = \overline{1, 2}, i = \overline{1, 2} \quad (24)$$

$$\Delta_{v\alpha_{11}}(q_{n+1} R_n, q_{n+1} R_{n+1}) = U_{v\alpha_{n+1_2}}^{n,1}(q_{n+1} R_n) U_{v\alpha_{n+1_2}}^{n+1,2}(q_{n+1} R_{n+1}) - U_{v\alpha_{n+1_2}}^{n,2}(q_{n+1} R_n) U_{v\alpha_{n+1_2}}^{n+1,1}(q_{n+1} R_{n+1}).$$

З відомими функціями Коші $E_{v\alpha_j}^*(p, r, \rho)$, граничні умови в точках $r = R_0$ і $r = R_{n+1}$ інтерфейсні умови (7) для визначення невідомих коефіцієнтів $A_j, B_j, j = \overline{1, n+2}$ входять до структури (14) загального розв'язку крайової задачі (6)–(8) $C_j^*(p, r)$ дають алгебраїчну систему з $2n+2$ рівнянь:

$$\begin{cases} U_{v\alpha_{11}}^{n,1}(q_n R_n)(q_n l_n) A_n + U_{v\alpha_{11}}^{n,2}(q_n R_n) B_n - U_{v\alpha_{12}}^{n,1}(q_{n+1} R_n) A_{n+1} - U_{v\alpha_{12}}^{n,2}(q_{n+1} R_n) B_{n+1} = \omega_{1_n} \\ U_{v\alpha_{21}}^{n,1}(q_n R_n) A_n + U_{v\alpha_{21}}^{n,2}(q_n R_n) B_n - U_{v\alpha_{22}}^{n,1}(q_{n+1} R_n) A_{n+1} - U_{v\alpha_{22}}^{n,2}(q_{n+1} R_n) B_{n+1} = \omega_{2_n} + G_n^* \\ U_{v\alpha_{22}}^{n+1,1}(q_{n+1} R_{n+1}) A_{n+1} + U_{v\alpha_{22}}^{n+1,2}(q_{n+1} R_{n+1}) B_{n+1} = \omega_{R_{n+1}}^*(p) \end{cases} \quad (25)$$

Тут, вирази, що містять інтеграли від функцій впливу Коші $E_{v\alpha_j}^*(p, r, \rho)$ в (25) розраховуються за формулами:

$$G_j^* = \frac{c_{1j}}{R_j^{2\alpha_j+1}} \int_{R_{j-1}}^{R_j} \frac{\Phi_{v\alpha_{12}}^{j-1}(q_j R_{j-1}, q_j \rho)}{\Delta_{v\alpha_{11}}(q_j R_{j-1}, q_j R_{j-1})} F_j^*(p, \rho) \rho^{2\alpha_j+1} d\rho - \\ - \frac{c_{2j}}{R_j^{2\alpha_{j+1}+1}} \int_{R_j}^{R_{j+1}} \frac{\Phi_{v\alpha_{11}}^{j+1}(q_{j+1} R_{j+1}, q_{j+1} \rho)}{\Delta_{v\alpha_{11}}(q_{j+1} R_j, q_{j+1} R_{j+1})} F_{j+1}^*(p, \rho) \rho^{2\alpha_{j+1}+1} d\rho \quad (26)$$

Далі будемо вважати, що виконується умова однозначної розв'язності крайової задачі (6)–(8), тобто визначник алгебраїчної системи (25) відмінний від нуля:

$$\Delta_{v\alpha}^*(p) \equiv \det A_{v\alpha}(p) \neq 0. \quad (27)$$

Внаслідок однозначної розв'язності алгебраїчної системи (25) і підстановки отриманих значень $A_k, B_k, D_{1_k}, D_{2_k}, E_{1_k}, E_{2_k}, k = \overline{1, n+1}$ в (14) можна отримати компоненти розв'язку крайової задачі (6)–(8). Після ряду перетворень (розклад визначників $\Delta_{A_k}^* I_{v_k \alpha_k}(q_k r) + \Delta_{B_k}^* K_{v_k \alpha_k}(q_k r), k = \overline{1, n+1}$) отримуємо рекурсивні вирази для обчислення компонентів $C_k^*(p, r)$ вектор-функції $C^*(p, r)$ – розв'язок крайової задачі (6)–(8) у вигляді:

$$C_k^*(p, r) = W_{k_1}^*(p, r) \cdot \omega_{R_0}^*(p) + W_{k_{n+1}}^*(p, r) \cdot \omega_{R_{n+1}}^*(p) + \sum_{j=1}^n \left[R_{1_{k,j}}^*(p, r) \cdot \omega_{1_j} + R_{2_{k,j}}^*(p, r) \cdot \omega_{2_j} \right] + \sum_{j=1}^{n+1} \int_{R_{j-1}}^{R_j} H_{v\alpha_{k,j}}^*(p, r, \rho) \cdot F_j^*(p, \rho) \rho^{2\alpha_j+1} d\rho; k = \overline{1, n+1}. \quad (28)$$

Тут основні розв'язки крайової задачі (6)–(8) отримані наступним чином. Функції впливу лівої граничної умови $\omega_{R_0}^*(p)$ на k -ту ділянку адсорбційного середовища $W_{k_1}^*(p, r)$:

$$W_{k_1}^*(p, r) = \begin{cases} \frac{1}{\Delta_{v\alpha}^*(p)} \left[\Phi_{v\alpha_{21}}^1(q_1 R_1, q_1 r) \Delta'_{1,2} - \Phi_{v\alpha_{11}}^1(q_1 R_1, q_1 r) \Delta_{1,2} \right] & ; k = 1 \\ \frac{1}{\Delta_{v\alpha}^*(p)} \prod_{s=1}^{k-1} \frac{-c_{1_s}}{q_s^{2\alpha_s} R_s^{2\alpha_s+1}} \left[\Phi_{v\alpha_{21}}^{k-1}(q_k R_k, q_k r) \cdot \Delta'_{1,2k} - \Phi_{v\alpha_{11}}^k(q_k R_k, q_k r) \cdot \Delta_{1,2k} \right] & ; k = \overline{1, n} \\ - \frac{1}{\Delta_{v\alpha}^*(p)} \prod_{s=1}^n \frac{-c_{1_s}}{q_s^{2\alpha_s} R_s^{2\alpha_s+1}} \Phi_{v\alpha_{11}}^{n+1}(q_{n+1} r, q_{n+1} R_{n+1}) \cdot & k = n+1 \end{cases} \quad (29)$$

Функції впливу правої крайової умови на k -ий сегмент адсорбційного середовища $W_{n+1_k}^*(p, r)$:

$$W_{k_{n+1}}^*(p, z) = \begin{cases} -\frac{1}{\Delta_{v\alpha}^*(p)} \prod_{s=1}^n \frac{-c_{2s}}{q_{s+1}^{2\alpha_{s+1}} R_s^{2\alpha_{s+1}+1}} \Phi_{v\alpha_{12}}^0(q_1 R_0, q_1 r) & ; k = 1 \\ -\frac{1}{\Delta_{v\alpha}^*(p)} \prod_{s=k}^n \frac{-c_{2s}}{q_{s+1}^{2\alpha_{s+1}} R_s^{2\alpha_{s+1}+1}} \left[\Phi_{v\alpha_{22}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r) \cdot \Delta_{1,2k-2} - \Phi_{v\alpha_{12}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r) \cdot \Delta'_{1,2k-2} \right] & ; k = \overline{1, n} \\ \frac{1}{\Delta_{v\alpha}^*(p)} \left[\Phi_{v\alpha_{12}}^n(q_{n+1} r, q_{n+1} R_n) \cdot \Delta'_{1,2n} - \Phi_{v\alpha_{22}}^n(q_{n+1} r, q_{n+1} R_n) \cdot \Delta_{1,2n} \right] & ; k = n+1 \end{cases} \quad (30)$$

Функції впливу j -го джерела на k -ий сегмент адсорбційного середовища отримуються такими:

$$H_{v\alpha_{11}}^*(p, r, \rho) = \frac{q_1^{2\alpha_1}}{\Delta_{v\alpha}^*(p)} \begin{cases} \Phi_{v\alpha_{12}}^0(q_1 R_0, q_1 \rho) \cdot \left[\Phi_{v\alpha_{11}}^1(q_1 r, q_1 R_1) A_{1,2} - \Phi_{v\alpha_{21}}^1(q_1 r, q_1 R_1) A'_{1,2} \right], R_0 < \rho < r < R_1 \\ \Phi_{v\alpha_{12}}^0(q_1 R_0, q_1 r) \cdot \left[\Phi_{v\alpha_{11}}^1(q_1 \rho, q_1 R_1) A_{1,2} - \Phi_{v\alpha_{21}}^1(q_1 \rho, q_1 R_1) A'_{1,2} \right], R_0 < r < \rho < R_1 \end{cases} \quad (31)$$

$j = \overline{2, n}$

$$H_{v\alpha_{1j}}^*(p, r, \rho) = \frac{q_j^{2\alpha_j} \cdot \prod_{s=1}^{j-1} \frac{-c_{2s}}{q_{s+1}^{2\alpha_{s+1}} R_s^{2\alpha_{s+1}+1}}}{\Delta_{v\alpha}^*(p)} \times \quad (32)$$

$$\times \Phi_{v\alpha_{12}}^0(q_1 R_0, q_1 r) \left[\Phi_{v\alpha_{11}}^j(q_j R_j, q_j \rho) A_{1,2j} - \Phi_{v\alpha_{21}}^j(q_j R_j, q_j \rho) A'_{1,2j} \right]$$

$j = \overline{2, n}$

$$H_{v\alpha_{1, n+1}}^*(p, r, \rho) = \frac{q_{n+1}^{2\alpha_{n+1}} \prod_{s=1}^n \frac{-c_{2s}}{q_{s+1}^{2\alpha_{s+1}} R_s^{2\alpha_{s+1}+1}}}{\Delta_{v\alpha}^*(p)} \cdot \Phi_{v\alpha_{12}}^0(q_1 R_0, q_1 r) \Phi_{v\alpha_{11}}^{n+1}(q_{n+1} \rho, q_{n+1} R_{n+1}) \quad (33)$$

вплив j -го джерела ($j = \overline{2, k-1}$) на k -й сегмент ($k = \overline{2, n}$) адсорбційного середовища:

$$H_{v\alpha_{kj}}^*(p, r, \rho) = -\frac{q_j^{2\alpha_j} \prod_{s=j}^{k-1} \frac{-c_{1s}}{q_s^{2\alpha_s} R_s^{2\alpha_s+1}}}{\Delta_{v\alpha}^*(p)} \left[\Phi_{v\alpha_{21}}^k(q_k R_k, q_k r) A'_{1,2k} - \Phi_{v\alpha_{11}}^k(q_k R_k, q_k r) A_{1,2k} \right] \cdot \quad (34)$$

$$\cdot \left[\Phi_{v\alpha_{22}}^{j-1}(q_j R_{j-1}, q_j \rho) \cdot \Delta_{1,2j-2} - \Phi_{v\alpha_{12}}^{j-1}(q_j R_{j-1}, q_j \rho) \cdot \Delta'_{1,2j-2} \right]; j = \overline{2, k-1}; k = \overline{2, n}$$

Тоді, в загальному випадку, функції впливу такі:

$$\begin{aligned}
H_{\nu\alpha_{kk}}^*(p, r, \rho) &= \frac{q_k^{2\alpha_k}}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \left\{ [\Phi_{\nu\alpha_{22}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k \rho) \cdot \Delta_{1,2k-2} - \Phi_{\nu\alpha_{12}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k \rho) \cdot \Delta'_{1,2k-2}] \cdot \right. \\
&\quad \cdot [\Phi_{\nu\alpha_{22}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r) \cdot \Delta_{1,2k-2} - \Phi_{\nu\alpha_{12}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r) \cdot \Delta'_{1,2k-2}] \cdot \\
&\quad \cdot [\Phi_{\nu\alpha_{21}}^k(q_k R_k, q_k r) \cdot A'_{1,2k} - \Phi_{\nu\alpha_{11}}^k(q_k R_k, q_k r) \cdot A_{1,2k}], R_{k-1} < \rho < r < R_k \\
&\quad \cdot [\Phi_{\nu\alpha_{21}}^k(q_k R_k, q_k \rho) \cdot A'_{1,2k} - \Phi_{\nu\alpha_{11}}^k(q_k R_k, q_k \rho) \cdot A_{1,2k}], R_{k-1} < r < \rho < R_k \\
H_{\nu\alpha_{k,n+1}}^*(p, r, \rho) &= -\frac{q_{n+1}^{2\alpha_{n+1}}}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p) \cdot \Delta_{\nu\alpha_{11}}} \prod_{s=k}^n \frac{-c_{2_s}}{q_{s+1}^{2\alpha_{s+1}} R_s^{2\alpha_{s+1}+1}} \Phi_{\nu\alpha_{11}}^{n+1}(q_{n+1} \rho; q_{n+1} R_{n+1}) \times \\
&\quad \times \left[\Phi_{\nu\alpha_{22}}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta_{1,2k-2} - \Phi_{12}^{k-1}(q_k R_{k-1}, q_k r) \Delta'_{1,2k-2} \right] \\
H_{n+1,n+1}^*(p, r, \rho) &= \\
&\quad \frac{q_{n+1}^{2\alpha_{n+1}}}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \left\{ \Phi_{11}^{n+1}(q_{n+1} \rho, q_{n+1} R_{n+1}) \left[\Phi_{12}^n(q_{n+1} R_n, q_{n+1} r) \Delta'_{1,2n} - \Phi_{22}^n(q_{n+1} R_n, q_{n+1} r) \Delta_{1,2n} \right], R_n < \rho < r < R_{n+1} \right. \\
&\quad \left. \Phi_{11}^{n+1}(q_{n+1} r, q_{n+1} R_{n+1}) \left[\Phi_{12}^n(q_{n+1} R_n, q_{n+1} \rho) \Delta'_{1,2n} - \Phi_{22}^n(q_{n+1} R_n, q_{n+1} \rho) \Delta_{1,2n} \right], R_n < r < \rho < R_{n+1} \right\}.
\end{aligned} \tag{35}$$

Функції $R_{1,k,j}^*(p, z); k = \overline{1, n+1}; j = \overline{1, n}$ впливу неоднорідностей першої умови j -ї межі розділу $\omega_{1,j}, j = \overline{1, n}$ на k -му сегменті адсорбційного середовища такі:

$$R_{1,j}^*(p, r) = -\frac{1}{\Delta_{\nu\alpha}^*(p)} \begin{cases} \Phi_{\nu\alpha_{12}}^0(q_1 R_0, q_1 r) A_{1,2}; & j = 1 \\ \prod_{s=1}^{j-1} \frac{-c_{2_s}}{q_{s+1}^{2\alpha_{s+1}} R_s^{2\alpha_{s+1}+1}} \Phi_{\nu\alpha_{12}}^0(q_1 R_0, q_1 r) A_{1,2j}; & j = \overline{2, n-1} \\ \prod_{s=1}^{n-1} \frac{-c_{2_s}}{q_{s+1}^{2\alpha_{s+1}} R_s^{2\alpha_{s+1}+1}} \Phi_{\nu\alpha_{12}}^0(q_1 R_0, q_1 r) \Delta_{\nu\alpha_{11}}(q_{n+1} R_n, q_{n+1} R_{n+1}); & j = n \end{cases} \tag{36}$$

Для отримання остаточних аналітичних розв'язків, що визначають детальну математичну модель, необхідно здійснити перехід від зображень до оригіналів. Робиться це наступним чином. Особливі точки основних розв'язків крайової задачі (6)–(8) $W_{1,k}^*(p, r), W_{n+1,k}^*(p, r), R_{1,kj}^*(p, r), R_{2,kj}^*(p, r), H_{\nu\alpha_{k,k_1}}^*(p, r, \rho) \in$ точками розгалуження $p = \infty$ і

$$\begin{aligned}
p_{1,2} &= -\frac{1}{2} \left[S_1 \pm \sqrt{S_2} \right] < 0; \\
S_1 &= \beta_k (1 + \gamma_k) + \eta_k^2; S_2 = (\eta_k - \beta_k \gamma_k)^2 = \beta_k \left[\beta_k (1 + 2\gamma_k) + 2\eta_k^2 \right] > 0
\end{aligned} \tag{37}$$

Так, при переході до оригіналів Лапласа інтеграл по контуру Бромвіча можна замінити інтегралом по уявній осі

$$\begin{aligned}
W_{1_k}(t, r) &= L^{-1} \left[W_{1_k}^*(p, r) \right] = \frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma-i\infty}^{\sigma+i\infty} W_{1_k}^*(p, r) \cdot e^{pt} dp = \frac{1}{2\pi i} \int_{-i\infty}^{i\infty} W_{1_k}^*(p, r) \cdot e^{pt} dp = \\
&= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} W_{1_k}^*(is, r) \cdot e^{ist} ds = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \operatorname{Re} \left[W_{1_k}^*(is, r) \cdot e^{ist} \right] ds; \\
W_{n+1_k}(t, r) &= L^{-1} \left[W_{n+1_k}^*(p, r) \right] = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \operatorname{Re} \left[W_{n+1_k}^*(is, r) \cdot e^{ist} \right] ds; \\
R_{1_{kj}}(t, r) &= L^{-1} \left[R_{1_{kj}}^*(p, r) \right] = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \operatorname{Re} \left[R_{1_{kj}}^*(is, r) \cdot e^{ist} \right] ds; \\
R_{2_{kj}}(t, r) &= L^{-1} \left[R_{2_{kj}}^*(p, r) \right] = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \operatorname{Re} \left[R_{2_{kj}}^*(is, r) \cdot e^{ist} \right] ds; \\
H_{k, k_1}^*(t, r, \rho) &= L^{-1} \left[H_{k, k_1}^*(p, r, \rho) \right] = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \operatorname{Re} \left[H_{k, k_1}^*(is, r, \rho) \cdot e^{ist} \right] ds.
\end{aligned} \tag{38}$$

У результаті єдиного розв'язку алгебраїчної системи (25) з урахуванням отриманих основних розв'язків задачі (6)–(8) та формул (38) отримуємо єдиний розв'язок вихідної крайової задачі (1)–(5):

$$\begin{aligned}
C_k(t, r) &= \int_0^t W_{1_k}(t-\tau, r) \cdot \omega_{R_0}(t) d\tau + \int_0^t W_{n+1_k}(t-\tau, r) \cdot \omega_{R_{n+1}}(t) d\tau + \\
&+ \sum_{j=1}^n \int_0^t \left[R_{1_{kj}}(t-\tau, r) \cdot \omega_{1_j}(\tau) + R_{2_{kj}}(t-\tau, r) \cdot \omega_{2_j}(\tau) \right] d\tau + \\
&+ \int_0^t \sum_{k_1=1}^{n+1} \int_{R_{k_1-1}}^{R_{k_1}} H_{k, k_1}(t-\tau; r, \rho) \cdot \left[f_{k_1}(\tau, \rho) + C_{0_{k_1}}(\rho) \cdot \delta_+(\tau) \right] \rho^{2a_{k_1}} d\rho d\tau + \\
&+ \int_0^t \sum_{k_1=1}^{n+1} \int_{R_{k_1-1}}^{R_{k_1}} \frac{\beta_{k_1} \gamma_{k_1}}{D_{z_{k_1}}} H_{k, k_1}(t-\tau; r, \rho) \cdot e^{-\beta_{k_1} \cdot \gamma_{k_1} \cdot \tau} \cdot a_{0_{k_1}}(\rho) \rho^{2a_{k_1}} d\rho d\tau; \\
a_k(t, z) &= \beta_k \int_0^t e^{-\beta_k \gamma_k (t-\tau)} \cdot C_k(\tau, z) d\tau + e^{-\beta_k \gamma_k t} \cdot a_{0_k}(z).
\end{aligned} \tag{39}$$

У співвідношеннях (39) зроблено такі позначення:

$$\begin{aligned}
\omega_1(t) &= L \left[\omega_1^*(p) \right] = \omega_0(t) + \left(\delta_{11}^0 \frac{d}{dr} + \gamma_{11}^0 \right) C_{0_1}(r) \Big|_{r=R_0} \cdot \delta_+(t); \\
\omega_{n+1}(t) &= L \left[\omega_{n+1}^*(p) \right] = \omega_{n+1}(t) + \left(\delta_{22}^{n+1} \frac{d}{dr} + \gamma_{22}^{n+1} \right) C_{0_{n+1}}(r) \Big|_{r=R_0} \cdot \delta_+(t); \\
\omega_{mj} &= \left[\left(\delta_{m1}^j \frac{d}{dr} + \gamma_{m1}^j \right) \cdot C_{0_j}(r) - \left(\delta_{m2}^j \frac{d}{dr} + \gamma_{m2}^j \right) C_{0_{j+1}}(r) \right] \Big|_{r=R_j} \cdot \delta_+(t); m = \overline{1, 2}; j = \overline{1, n}.
\end{aligned} \tag{40}$$

Для опису розподілу електричного поля, створюваного зарядженими частинками, яке формується всередині досліджуваної шаруватої структури, скористаємося рівнянням Пуассона, яке має вигляд:

$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} [r\varphi(r, z, t)] + \frac{\partial^2 \varphi(r, z, t)}{\partial z^2} = -\frac{Q(r, z, t)}{4\pi\epsilon_0\epsilon(r)} \quad (41)$$

де розподіл заряду в структурі:

$$Q(r, z) = e[C_k(t, r) - a_k(t, z)] \quad (42)$$

і діелектрична проникність системи тепер визначається наступним чином:

$$\epsilon(r) = \sum_{i=0}^N \epsilon_{(i)} [\theta(r - r_{(i)}) - \theta(r - r_{(i+1)})], \quad r_{(N+1)} \rightarrow +\infty. \quad (43)$$

Розв'язок рівняння (41) шукають на багатовимірній сітці, яка задається у вигляді [7, 8]:

$$\Omega_{klm} = \{(r, t, z) : r_k = k\Delta r_k, z_l = l\Delta z_l, t_m = m\Delta t_m, k, l, m \in Z\}. \quad (44)$$

Врахування граничних умов розділу для потенціалу $\varphi(r, z, t)$ та складових електричного поля:

$$\begin{aligned} \varphi_{(p)}(r, z, t) \Big|_{r=r_{(p)}-0} &= \varphi_{(p+1)}(r, z, t) \Big|_{r=r_{(p)}+0}; \\ \epsilon_{(p)} \frac{\partial \varphi_{(p)}(r, z, t)}{\partial r} \Big|_{r=r_{(p)}-0} &= \epsilon_{(p+1)} \frac{\partial \varphi_{(p+1)}(r, z, t)}{\partial r} \Big|_{r=r_{(p)}+0}. \end{aligned} \quad (45)$$

Крім того, враховується відсутність електричного поля поза мікроструктурою, що дає наступну умову:

$$\varphi(r, z, t) \Big|_{z \rightarrow 0} = \varphi(r, z, t) \Big|_{z \rightarrow +\infty} = 0. \quad (46)$$

Таким чином, різницева схема для знаходження розв'язків рівняння Пуассона набуває наступного вигляду:

$$\begin{aligned}
\varphi_{k,l,m} - \varphi_{k+1,l,m} &= 0; \\
\frac{2\varphi_{k,l,m} - \varphi_{k+1,l,m}}{\Delta r_k} + \frac{\varphi_{k,l-1,m} - 2\varphi_{k,l,m} + \varphi_{k,l+1,m}}{\Delta z_l} - \frac{Q_{k,l,m}}{4\pi\varepsilon_0\varepsilon_k} &= 0; \\
\varepsilon_k \varphi_{k-1,l,m} - (\varepsilon_k + \varepsilon_{k+1})\varphi_{k,l,m} + \varepsilon_{k+1}\varphi_{k+1,l,m} &= 0; \\
\varphi_{0,l,m} = \varphi_{N+1,l,m} &= 0; \\
Q_{0,l,m} = Q_{N+1,l,m} &= 0.
\end{aligned} \tag{47}$$

4. Обговорення результатів.

Для реалізації розробленої математичної моделі було розраховано розподіли концентрацій за допомогою співвідношень (39). Для цього використовували технологічні параметри мікроструктури, експериментально досліджені в роботах [9, 10]. Досліджувана мікроструктура створена з плівок матеріалів $\text{Al}_2\text{O}_3/\text{SiO}_2$. У наших розрахунках було прийнято, що товщина плівки Al_2O_3 становить 0,1 мкм, а для товщини SiO_2 – 0,09 мкм.

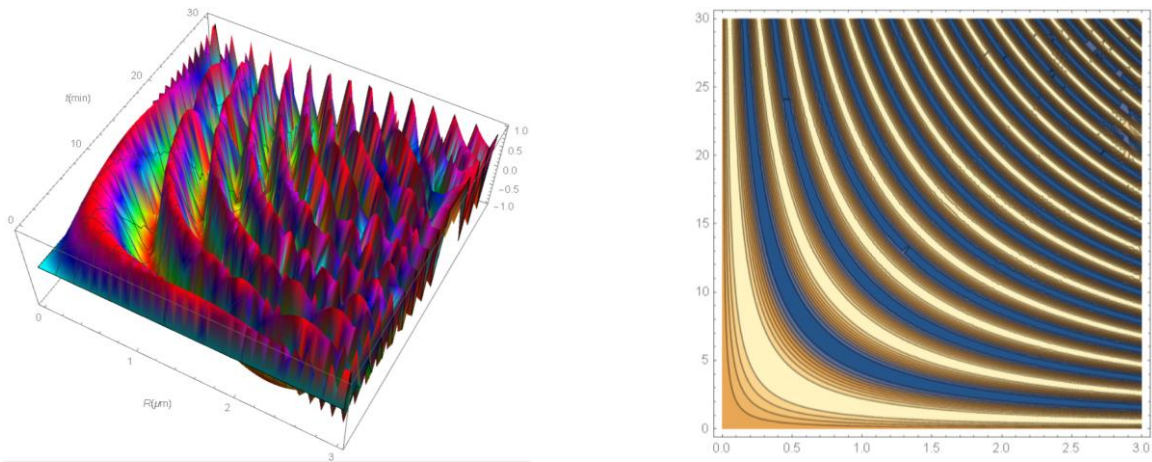


Рис. 2. Просторова залежність концентрації заряджених частинок у міжкристалітному просторі та переріз цієї залежності

На Рис. 2 наведено результати розрахунків концентрації $C(t,r)$ заряджених частинок у досліджуваному зразку, а також переріз просторової залежності площиною, який більшою мірою демонструє радіальний розподіл частинок у шарах мікроструктури.

Наведені на Рис. 2 залежності демонструють розподіл концентрації заряджених частинок у мікроструктурі, яка утворена 15 шарами Al_2O_3 т

16 шарами SiO_2 . Як видно з рисунку, протягом заданого інтервалу часу (до 30 хвилин) заряджені частинки накопичуються в шарах мікросистеми таким чином, що вони містяться переважно в шарах матеріалу Al_2O_3 (світлі смуги), на відміну від шарів SiO_2 , де частинки фактично не накопичуються.

Далі на Рис. 3 наведено результати розрахунку концентрації в мікропорах шарів досліджуваного мікроскопічного зразка. Як видно з розрахункових залежностей, концентрація заряджених частот у мікропорах менша, ніж у міжкристалітному просторі, що свідчить про неможливість подальшого заповнення пор частинками. Це є ознакою досягнення фазової рівноваги між речовиною в міжкристалітному просторі шарів мікроструктури та речовиною в порах. Слід зазначити, що переріз просторової залежності площиною для цієї залежності фактично подібний до залежності, зображеної на Рис. 2 процес.

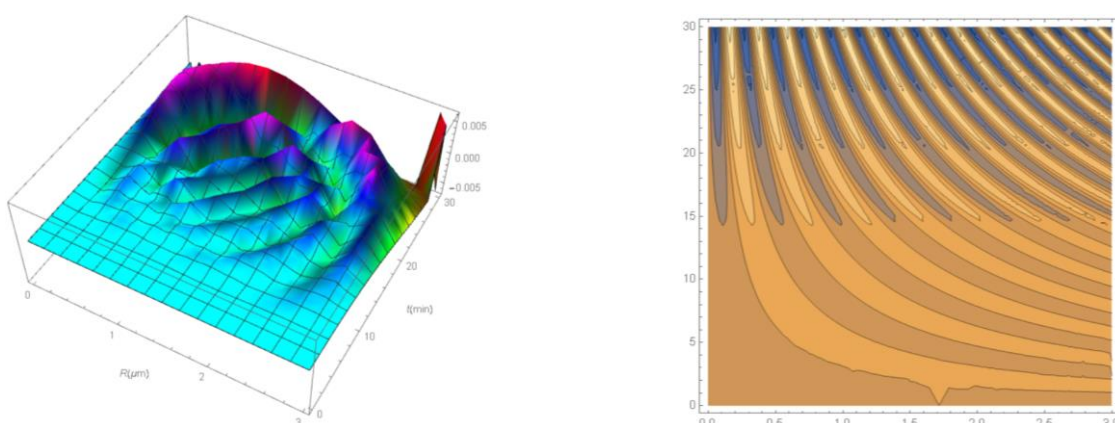


Рис. 3. Просторова залежність концентрації заряджених частинок у пористому просторі та переріз цієї залежності

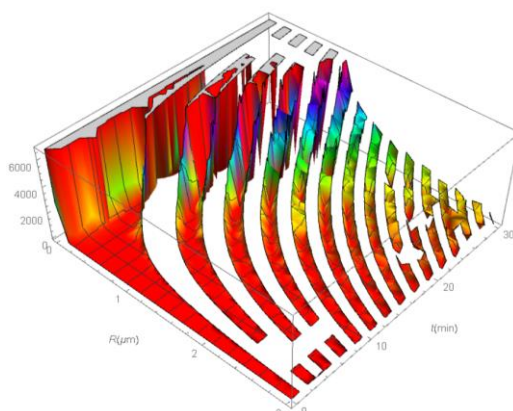


Рис. 4. Просторова залежність потенціалу електричного поля всередині досліджуваної мікроструктури

Далі на Рис. 4 показано результат розрахунку просторового електростатичного потенціалу, створюваного всередині мікроструктури накопиченими в ній зарядами. Як видно з розрахункової залежності, електричне поле фактично існує лише всередині шарів, які в основному заповнені зарядженими частинками. На межі утворених шарів Al_2O_3 і SiO_2 потенціал електричного поля значно і швидко падає.

Висновки до розділу 2

У даному розділі розроблена математична модель адсорбційного масопереносу в обмеженому циліндричному багат шаровому мікропористому середовищі і вперше отримані аналітичні рішення, що в загальному випадку описують вплив факторів внутрішньої кінетики перенесення заряджених частинок, основних серед яких є впливом нестационарних умов системи п-поверхневих відносин. Це дає можливість моделювати та будувати графічні профілі концентрації адсорбату в макро- та мікропорах, розраховувати розподіл електричного потенціалу всередині досліджуваного зразка, проводити комплексний аналіз внутрішньої кінетики масопереносу як на макро-, так і на макрорівні. рівні та на рівні мікро- та нанопор частинок адсорбенту розробити оптимальні технологічні схеми та дослідити на оптимальність різні нестационарні режими дифузійно-адсорбційного масопереносу для багатоскладних адсорбційних середовищ з різними фізико-хімічними умовами. Отримані модельні рішення та ефективні рекурентні матричні алгоритми побудови матриць функцій впливу граничного завдання масообміну важливі при постановці та вирішенні обернених задач масообміну – для визначення кінетичних параметрів процесу, що дозволяє перевірити адекватність параметрів моделювання та фізичний експеримент.

Список використаної літератури

1. R. Krishna, J. M. van Baten, Investigating the non-idealities in adsorption of CO₂-bearing mixtures in cation-exchanged zeolites, Sep. Purif. Technol. 206. 2018. P. 208–217.

2. M. R. Petryk, I. V. Boyko, O. M. Khimich, M. M. Petryk, High-Performance Supercomputer Technologies of Simulation of Nanoporous Feedback Systems for Adsorption Gas Purification. *Cybern. Syst. Anal.* 56. 2020. P. 835–847.
3. M. R. Petryk, A. Khimich, M. M. Petryk, J. Fraissard. Experimental and computer simulation studies of dehydration on microporous adsorbent of natural gas used as motor fuel, *Fuel*. 239. 2019. P. 1324–1330.
4. B. Puértolas, M. V. Navarro, J. M. Lopez, R. Murillo, A. M. Mastral, T. Garcia. Modelling the heat and mass transfers of propane onto a ZSM-5 zeolite, *Sep. Purif. Technol.* 86. 2012. P. 127–136.
5. Sergienko I. V., Petryk M. R., Khimich O. M., Canet D., Mykhalyk D. M., Leclerc S, Fraissard J. The Mathematical Modelling of Mass-transfer in Media of Nano-porous Structure. Kyiv: National Academy of Sciences of Ukraine. Institute V.M. Glushkov of Cybernetic. 2014. 210 p. ISBN 978-966-02-7098-5.
6. B. Puértolas, M. Comesaña-Hermo, L. V. Besteir, M. Vázquez-González, M. A. Correa-Duarte. Challenges and Opportunities for Renewable Ammonia Production via Plasmon-Assisted Photocatalysis, *Adv. Energy Mater.* 12. 2022. 2103909-1– 2103909-23.
7. H. Deng. A Heaviside function-based density representation algorithm for truss-like buckling-induced mechanism design, *Int J Numer. Methods Eng.* 119. 2019. P. 1069–1097.
- A. Z. Khurshudyan. An identity for the Heaviside function and its application in representation of nonlinear Green's function, *Comput. Appl. Math.* 12. 2019. 32-1–32-12.
8. M. Broas, O. Kanninen, V. Vuorinen, M Tilli, M. Paulasto-Kröckel. Chemically Stable Atomic-Layer-Deposited Al₂O₃ Films for Processability, *ACS Omega*. 7. 2017. P. 3390–3398.
9. D. Arl, V. Rogé, N. Adjeroud, B. R. Pistillo, M. Sarr, N. Bahlawane, D. Lenoble. SiO₂ thin film growth through a pure atomic layer deposition technique at room temperature, *RSC Adv.* 31. 2020. P. 18073–18081.

РОЗДІЛ 3. ВИСОКОПРОДУКТИВНІ МЕТОДИ МОДЕЛЮВАННЯ ТА ІДЕНТИФІКАЦІЇ ПАРАМЕТРІВ СКЛАДНИХ ПРОЦЕСІВ НАНОФІЛЬТРАЦІЇ І ДИФУЗІЇ В СЕРЕДОВИЩАХ АСИЧЕНИХ РІЗНОРОЗМІРНИХ НАНОПОРИСТИХ ЧАСТИНОК

1. Аналіз стану досліджень

Застосування математичного моделювання до дослідження складних фізичних процесів екстрагування рідини з нанопористих матеріалів у хімічній, переробній, фармакологічній та інших галузях полягає не тільки в побудові їх адекватних моделей, а й у завданні їх кінетичних параметрів. Робочі середовища досліджуваних процесів складаються з мережі частинок, клітин, міжчастинкових та міжклітинних просторів, що утворюють шляхи для транспортування рідини. Механізми фільтрації-консолідації залежать від комплексу складних факторів: розміру частинок [1–4], структури біологічних тканин, проникності міжчастинкових та внутрічастинкових шляхів, що суттєво впливає на поведінку твердої та рідкої фаз. Ці агломерати та канали є сильно стисливими та можуть бути повністю або частинково закритими протягом процесу фільтраційного відтиску. Механізми поділу твердої та рідкої фази з біопористих біологічних матеріалів є мало вивченими. В даний час більшість статей з моделювання таких процесів ґрунтуються на фільтрації/консолідації ґрунтів [5, 6] та мінеральних фільтрів [7], що описує рух макропотоків рідини в пористих середовищах на основі аналогії з дифузією Фіка. Однак, коли зовнішній тиск прикладається до шару мікро- і нанопористих частинок, останні, що складаються з «м'яких» тканин, починають стискатися і спостерігається зменшення простору каналів у міжчастинковому та внутрішньочастинковому просторах, що впливає на сумарну проникність. У [8] для оцінки консолідації та повзучості компонентів шару запропонована модель, ґрунтована на припущенні, що інтенсивність потоку з частинки в міжчастинковий простір пропорційна різниці тисків: тиску всередині частинки, усередненого за координатою розміру та тиску зовні частинки, що є дуже наближеною. Більш реалістичними є моделі твердої та рідкої фази в біпористому шарі

мікропористих частинок і каналів транспорту, що враховують вплив зміни проникності частинок на загальну проникність шару [9, 10].

У [11] з використанням запропонованих і лінеаризованих нами моделей фільтрації-консолідації [12] виконані постановки окремих задач ідентифікації та чисельні методи їх дискретизації з отриманням виразів градієнтів функціоналів-нев'язок для ідентифікації параметрів. Проте запропоновані [11] підходи мають у певному сенсі вузький діапазон застосування. По-перше, аналізовані тут критерії ідентифікації як розподілів тисків у пласті і частинці не зовсім задовольняють умовам реальних спостережень. Зокрема, неможливо фізично спостерігати зміну тиску рідини для окремо взятих частинок. Іншим лімітуючим чинником є обмеження на швидкість ідентифікації за рахунок великої кількості внутрішніх ітерацій при побудові модельних розв'язків, що є істотним обмеженням для ідентифікації великого числа параметрів.

У цій праці для лінеаризованих моделей фільтрації-консолідацій у середовищах мікропористих частинок сформульовані задачі ідентифікації параметрів моделей з використанням функціоналу-нев'язки, що враховує зміну сумарного потоку рідини на поверхні спостереження. Запропоновано високопродуктивні методи реалізації задач коефіцієнтної ідентифікації на основі аналітичних розв'язків прямих та спряжених задач, отримано явні вирази компонентів градієнтів функціоналів-нев'язки для ідентифікації параметрів моделі.

2. Математичне формулювання проблеми

Вважається, клітинні частинки, що містять рідину, як нанопористий шар багаторівневої структури, що піддається стиску. Рідина тече у внутрішньочастинковому просторі (intraparticle space), міжчастинковому просторі (interparticle space) і між цими двома просторами. Шар частинок сприймається як біпористе середовище. Мережа макропор у interparticle space утворює область першої пористості з низькою ємністю та високою

гідравлічною проникністю. Частинки, що містять рідину, утворюють область другої пористості – з високою ємністю та низькою гідравлічною проникністю. Потoki рідини виникають як окремо в кожній із двох областей пористості, так і між ними. Дискретна і continuum-концептуалізація подвійної пористості середовища добре описується в механіці гірських порід, що застосовуються в мережі тріщин у природно тріщинуватих колекторів [4].

Основні припущення. Задача ставиться на основі рівнянь нерозривності та закону фільтрації Дарсі для міжчастинкового та внутрішньочастинкового просторів. Рівняння консолідації сформульовані з розглядом початкових та граничних рівнянь системи з подвійною пористістю. Тут прийнято такі припущення [9]:

Рівняння нерозривності для рідкої фази у міжчастинковому та внутрішньочастинковому просторі відповідно:

$$\frac{\partial \varepsilon_1}{\partial t} + \frac{\partial \varepsilon_2}{\partial t} + \frac{\partial q_1}{\partial z} = 0, \quad \frac{\partial(1 - \varepsilon_1)}{\partial t} + \frac{\partial(1 - \bar{\varepsilon}_2)}{\partial t} + \frac{\partial v_1}{\partial z} = 0 \quad (1)$$

Рівняння неперервності для рідкої і твердої фази у частинковому просторі

$$\frac{\partial \varepsilon_2}{\partial t} + \frac{\partial q_2}{\partial x} = 0; \quad \frac{\partial(1 - \varepsilon_2)}{\partial t} + \frac{\partial v_2}{\partial x} = 0 \quad (2)$$

де ε_1 , ε_2 – відповідно міжчастинкова і внутрішньочастинкова пористості,

$\bar{\varepsilon}_2$ – середня внутрішньочастинкова пористість, $\bar{\varepsilon}_2 = \frac{1}{R} \int_0^R \varepsilon_2(t, x, z) dx$, q_1 , q_2 и v_1 ,

v_2 – локальні швидкості руху рідини і твердої фази в міжчастинковому і внутрішньочастинковому просторах.

Відносні швидкості потоків рідкої фази по відношенню до твердої (liquid to solid flow) у міжчастинковому (u_1) та внутрішньочастинковому (u_2) просторах підпорядковуються закону фільтрації Дарсі:

$$u_1 = q_1 - \frac{\varepsilon_1}{1 - \varepsilon_1} v_1 = -\frac{1}{\mu r_1} \frac{\partial P_1}{\partial z}, \quad u_2 = q_2 - \frac{\varepsilon_2}{1 - \varepsilon_2} v_2 = -\frac{1}{\mu r_2} \frac{\partial P_2}{\partial z}; \quad (3)$$

де P_1 , P_2 і $k_1 = 1/r_1$, $k_2 = 1/r_2$ – тиски в рідкій фазі і проникності міжчастинковому і внутрішньочастинковому просторах відповідно, μ – в'язкість рідини.

Контакти між вологонасиченими частинками є пружними. Загальні зовнішні напруги у міжчастинковому та внутрічастинковому просторах відповідно:

$$\sigma = (1 - \varepsilon_1)\sigma_1 + \varepsilon_1 P_1, \quad \sigma_1 = (1 - \varepsilon_2)\sigma_2 + \varepsilon_2 P_2 \quad (4)$$

де σ_2 – напруга на твердій матриці частинки, що містять рідину.

Ефективний тиск на частинки для біпористої системи (різниця між загальною напругою і тиском рідини в порах) на скелет (P_{s1}) і частинку (P_{s2}) відповідно [4, 8]:

$$P_{s1} = \sigma - P_1 = (1 - \varepsilon_1)(\sigma_1 - P_1), \quad P_{s2} = \sigma_1 - P_2 = P_1 + \frac{\sigma - P_1}{1 - \varepsilon_1} - P_2 \approx \sigma - P_2; \quad (5)$$

де $\sigma = P_E$ (напруга, що спричинена зовнішнім тиском), $P_{s1} = P_E - P_1$ і $P_{s2} = P_E - P_2$.

Середня внутрішньочастинкова пористість є функцією середнього ефективного тиску $\bar{P}_{s2} = P_E - \bar{P}_2$, де $\bar{P}_2 = \frac{1}{R} \int_0^R P_2(t, x, z) dx$ – усереднений по координаті радіусу тиск рідини у внутрічастинковому просторі.

Рівняння неперервності (1), (2) з урахуванням (3) використанням координат на основі об'єму вологомістких частинок (liquid containing particles –

LCP) $dz_m = \frac{dz}{1 + e_1}$ і нерозчинної твердої фази (insoluble solids – IS) $dx_m = \frac{dx}{1 + e_2}$

мають вигляд:

$$\frac{\partial e_1}{\partial t} + \frac{1}{(1 + \bar{e}_2)^2} \frac{\partial \bar{e}_2}{\partial t} + \frac{\partial u_1}{\partial z_m} = 0; \quad \frac{\partial e_2}{\partial t} + \frac{\partial u_2}{\partial x_m} = 0; \quad (6)$$

де модулі стиску:

$$\frac{\partial e_1}{\partial t} = \frac{1}{G_1} \frac{\partial P_1}{\partial t}, \quad \frac{\partial e_2}{\partial t} = \frac{1}{G_2} \frac{\partial P_2}{\partial t}, \quad \frac{\partial \bar{e}_2}{\partial t} = \frac{1}{G_2} \frac{\partial \bar{P}_2}{\partial t}, \quad G_1 = -\frac{\partial P_{s1}}{\partial e_1}, \quad G_2 = -\frac{\partial P_{s2}}{\partial e_1},$$

$$e_1 = \frac{\varepsilon_1}{1 - \varepsilon_1}, \quad e_2 = \frac{\varepsilon_2}{1 - \varepsilon_2}, \quad \bar{e}_2 = \frac{\bar{\varepsilon}_2}{1 - \bar{\varepsilon}_2}.$$

Лінеаризація залежностей (6) згідно схем запропонованих в [10, 12] приводить до рівнянь консолідації в міжчастинковому і внутрішньо-частинковому просторах.

3. Пряма задача

В областях $\Omega_T = (0, T) \times (0, h)$ і $\Omega_T \times (0, R)$ розподіли тисків в рідкій $P_1(t, z)$ і $P_2(t, x, z)$ відповідно задовольняють системі рівнянь консолідації в частинних похідних:

$$\frac{\partial P_1(t, z)}{\partial t} = b_1 \frac{\partial^2 P_1}{\partial z^2} - \beta \frac{\partial \bar{P}_2(t, z)}{\partial t}, \quad z \in (0, h), \quad (7)$$

$$\frac{\partial P_2(t, x, z)}{\partial t} = b_2 \frac{\partial^2 P_2}{\partial x^2}, \quad x \in (0, R), \quad z \in (0, h), \quad t \in (0, T), \quad (8)$$

початкові умови:

$$P_1(t, z)|_{t=0} = P_E, \quad P_2(t, z)|_{t=0} = P_E \quad (9)$$

крайові умови:

$$P_1(t, z)|_{z=0} = 0, \quad \frac{\partial P_1}{\partial z}|_{z=h} = 0; \quad (10)$$

$$\frac{\partial P_2}{\partial x}|_{x=0} = 0, \quad P_2(t, x, z)|_{x=R} = P_1(t, z), \quad (11)$$

де $b_1 = \frac{G_1}{\mu r_1(1 + e_1)}$, $b_2 = \frac{G_2}{\mu r_2(1 + e_2)}$ – коефіцієнти консолідації в міжчастинковому

і внутрішньочастинковому просторах відповідно, $\beta = \frac{1}{(1 + \bar{e}_2)^2} \frac{G_1}{G_2}$ – фактор

пружності, h – товщина шару, R – напівтовщина (радіус) частинки.

Умова спостереження. Вважається, що на поверхні замірів $z = \gamma$, $\gamma \subset \Omega = [0, h]$, відомий потік рідини:

$$u(t, z) \Big|_{z=\gamma} \equiv - \left(\frac{1}{\mu r_1} \frac{\partial}{\partial z} P_1(t, z; b_1, b_2, \beta) + \frac{1}{\mu r_2} \frac{\partial}{\partial z} \bar{P}_2(t, z; b_1, b_2, \beta) \right) \Big|_{z=\gamma} = M_{\text{exper}}(t) \Big|_{z=\gamma}. \quad (12)$$

Вибір функціоналу-нев'язки. Функціонал-нев'язка, що мінімізує відхилення модельного розв'язку від значень експериментального сліду на $\gamma \in \Omega$, що використовується для реалізації процедури ідентифікації невідомих кінетичних параметрів переносу в міжчастковому та внутрічастинковому просторах (коефіцієнтів консолідації та фактора пружності) запишеться у вигляді [15]:

$$J(b_1, b_2, \beta) = \frac{1}{2} \int_0^T [E_{\text{error}}(b_1, b_2, \beta, t, \gamma)]^2 dt, \quad (13)$$

Тут $E_{\text{error}}(b_1, b_2, \beta, t, \gamma)$ – вираз невідповідності між модельними та експериментальними значеннями параметрів ідентифікації:

$$E_{\text{error}}(b_1, b_2, \beta, t, \gamma) = \left[- \left(\frac{1}{\mu r_1} \frac{\partial}{\partial z} P_1(t, z; b_1, b_2, \beta) + \frac{1}{\mu r_2} \frac{\partial}{\partial z} \bar{P}_2(t, z; b_1, b_2, \beta) \right) - M_{\text{exper}}(t) \right] \Big|_{z=\gamma} \quad (14)$$

$M_{\text{exper}}(t)$ – вектор експериментальних даних на поверхні спостережень $\gamma \in \Omega$.

У результаті отримана задача ідентифікації (7)–(12), що полягає у знаходженні невідомих функцій $b_1 \in \Omega_T$, $b_2 \in \Omega_T$, $\beta \in \Omega_T$, $\Omega_T = D_1$ ($b_1 > 0, b_2 > 0, \beta > 0$), де функції $P_1(t, z) + \bar{P}_2(t, z)$ задовольняють умовам (10) на поверхні спостереження $\gamma \subset \Omega$ нанопористого середовища [15].

4. Градієнтний метод розв'язання задачі коефіцієнтної ідентифікації

Розв'язання задачі ідентифікації (7)–(12) зводиться до задачі оптимізації функціоналу-нев'язки (13), поступово вдосконалюючи розв'язок за допомогою особливої процедури регулювання з використанням градієнтних методів. Згідно [15, 16] і використовуючи градієнтний метод мінімізації похибки для

ідентифікації розподілів коефіцієнтів консолідації в intraparticle space b_2 та interparticle space b_1 і коефіцієнта пружності β , отримаємо такі регуляризаційні вирази для $n+1$ -го

$$\begin{aligned}
 b_1^{n+1}(t) &= b_1^n(t) - \nabla J_{b_1}^n(t) \frac{E_{error}(b_1^n, b_2^n, \beta; t, \gamma)^2}{\|\nabla J_{b_1}^n(t)\|^2 + \|\nabla J_{b_2}^n(t)\|^2 + \|\nabla J_{\beta}^n(t)\|^2}, \quad t \in (0, T) \\
 b_2^{n+1}(t) &= b_2^n(t) - \nabla J_{b_2}^n(t) \frac{E_{error}(b_1^n, b_2^n, \beta; t, \gamma)^2}{\|\nabla J_{b_1}^n(t)\|^2 + \|\nabla J_{b_2}^n(t)\|^2 + \|\nabla J_{\beta}^n(t)\|^2}, \\
 \beta^{n+1}(t) &= \beta^n(t) - \nabla J_{\beta}^n(t) \frac{E_{error}(b_1^n, b_2^n, \beta; t, \gamma)^2}{\|\nabla J_{b_1}^n(t)\|^2 + \|\nabla J_{b_2}^n(t)\|^2 + \|\nabla J_{\beta}^n(t)\|^2}.
 \end{aligned} \tag{15}$$

де $J(b_1, b_2, \beta, \dots)$ – функціонал-нев'язка на поверхні замірів $\gamma \in \Omega_T$ (13), $\nabla J_{b_1}^n(t)$, $\nabla J_{b_2}^n(t)$, $\nabla J_{\beta}^n(t)$ – компоненти градієнта функціонала-нев'язки $J(b_1, b_2, \beta, \dots)$ за

шуканими функціями $b_1 \in \Omega_T, b_2 \in \Omega_T, \beta \in \Omega_T$, $\|\nabla J_n^n(t)\|^2 = \int_0^T [\nabla J_n^n(t)]^2 dt$,

$u \in \{b_1, b_2, \beta, \dots\}$ – квадрат норми u -компонента градієнта функціонала-нев'язки.

Точний аналітичний розв'язок прямої задачі (7)–(11) (для моделювання розподілів тисків без урахування умови спостереження (12), у припущенні що відомі коефіцієнти консолідації b_1, b_2 , фактор пружності β та ін. параметри, нами побудовано з використанням інтегральних перетворень Фур'є та операційного методу Гевісайда у [10, 13].

5. Високопродуктивна технологія отримання аналітичних виразів компонентів градієнта функціоналу – невязки

Побудова розширеного функціоналу. Перейдемо до безумовної екстремальної форми розглядуваної задачі ідентифікації, вводячи розширений функціонал [14, 16]

$$\Phi(b_1, b_2, \beta, \dots) = J + I_1 + I_2, \tag{16}$$

в якому I_1, I_2 – складові, що враховують специфіку основних рівнянь консолідації (7), (8) відповідно для вихідної задачі ідентифікації (7)–(12):

$$I_1 = \int_0^T \int_0^h \varphi(t, z) \left(\frac{\partial P_1}{\partial t} - b_1 \frac{\partial^2 P_1}{\partial z^2} + \beta \frac{\partial \bar{P}_2}{\partial t} \right) dz dt, \quad (17)$$

$$I_2 = \frac{1}{R} \int_0^T \int_0^h \int_0^R \psi(t, x, z) \left(\frac{\partial P_2}{\partial t} - b_2 \frac{\partial^2 P_2}{\partial x^2} \right) dx dz dt \quad (18)$$

де J – функціонал-нев'язка, визначений (13), φ, ψ – невідомі множники Лагранжа, що підлягають визначенню із умови стаціонарності функціонала $\Phi(b_1, b_2)$ (рівності нулю його повної варіації) [14, 16]:

$$\Delta \Phi(b_1, b_2, \beta) \equiv \Delta J + \Delta I_1 + \Delta I_2 = 0, \quad (19)$$

Обчислення окремих членів в (16) здійснюється у припущенні, що величини b_1, b_2, β отримали прирости $\Delta b_1, \Delta b_2, \Delta \beta$. В результаті тиск $P_1(t, z)$ зміниться на деякий приріст $\Delta P_1(t, z)$, а тиск $P_2(t, x, z)$ на $\Delta P_2(t, x, z)$.

Початково-крайова задача в приростах. Підставляючи у вихідну початково-крайову задачу (7)–(12) замість b_1, b_2, β і $P_1(t, z)$, $P_2(t, x, z)$, $P_1(t, z) + \Delta P_1(t, z)$ відповідні величини з приростами $b_1 + \Delta b_1$, $b_2 + \Delta b_2$, $\beta + \Delta \beta$ і $P_2(t, x, z) + \Delta P_2(t, x, z)$ та обчислюючи з перетворених рівнянь і умов задачі відповідні компоненти рівнянь і умов задачі (7)–(12), нехтуючи членами другого порядку малості, отримуємо постановку початково-крайової задачі в приростах для визначення величин $\Delta P_1(t, z)$ і $\Delta P_2(t, x, z)$ (яка буде далі використовуватися для визначення аналітичних виразів компонентів градієнтів функціоналу-нев'язки $\Delta J_{b_1}^n(t)$, $\Delta J_{b_2}^n(t)$, $\Delta J_{\beta}^n(t)$):

$$\frac{\partial}{\partial t} \Delta P_1(t, z) = \frac{\partial}{\partial z} \left(b_1 \frac{\partial}{\partial z} \Delta P_1 \right) - \beta \frac{\partial \Delta \bar{P}_2}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z} \left(\Delta b_1 \frac{\partial}{\partial z} P_1 \right) - \Delta \beta \frac{\partial \bar{P}_2}{\partial t}, \quad (20)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \Delta P_2(t, x, z) = \frac{\partial}{\partial x} \left(b_2 \frac{\partial}{\partial x} \Delta P_2 \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\Delta b_2 \frac{\partial}{\partial x} P_2 \right), \quad (21)$$

$$\Delta P_1(t, z)|_{t=0} = 0, \quad \Delta P_2(t, x, z)|_{t=0} = 0, \quad (22)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \Delta P_2(t, x, z)|_{x=0} = 0, \quad \Delta P_2(t, x, z)|_{x=R} = \Delta P_1(t, z), \quad (23)$$

$$\Delta P_1(t, z = h) = 0, \quad \frac{\partial}{\partial z} \Delta P_1(t, z = 0) = 0. \quad (24)$$

Обчислення приростів розширеного функціонала Лагранжа. В припущенні, що шукані вектор-функції $(P_1(t, z) + \Delta P_1(t, z), P_2(t, x, z) + \Delta P_2(t, x, z))$ отримали прирости по всім складовим компонентах розширеного функціоналу $\Phi(b_1, b_2, \beta)$, нехтуючи членами другого порядку малості, отримуємо:

- приріст функціоналу-нев'язки (14):

$$\Delta J(b_1, b_2, \beta) = \int_0^T \int_0^h E_{error}(t) \delta(z - \gamma) \left(-\frac{1}{\mu r_1} \frac{\partial}{\partial z} \Delta P_1(t, z) - \frac{1}{\mu r_2} \frac{\partial}{\partial z} \Delta \bar{P}_2(t, z) \right) dz dt \quad (25)$$

де

$$E_{error}(b_1, b_2, \beta; t, \gamma) = \left[-\left(\frac{1}{\mu r_1} \frac{\partial}{\partial z} P_1(t, z; b_1, b_2, \beta) + \frac{1}{\mu r_2} \frac{\partial}{\partial z} \bar{P}_2(t, z; b_1, b_2, \beta) \right) - M_{exper}(t) \right]_{z=\gamma}.$$

Адаптуючи загальну формулу для обчислення приросту функціоналу-нев'язки [14] до (25)

$$\Delta J(u + \Delta u) - \Delta J(u) = 2(Au - q, A\Delta u)_\gamma + O\|A\Delta u\|_\gamma^2 = (2A^*(Au - q), \Delta u)_\gamma + O\|\Delta u\|_\gamma,$$

де A^* – оператор спряжений з оператором A , одержимо:

$$\Delta J(b_1, b_2, \beta) = \int_0^T \int_0^h \frac{\partial}{\partial z} E_{error}(t, \gamma) \delta(z - \gamma) \left(-\frac{1}{\mu r_1} \Delta P_1(t, z) - \frac{1}{\mu r_2} \Delta \bar{P}_2(t, z) \right) dz dt. \quad (26)$$

- приріст складових функціоналу I_1, I_2 (в результаті інтегрування частинами з використанням початкових і крайових умов прямої задачі (7)–(11)):

$$\Delta I_1 = \int_0^T \int_0^h \left(\left(\frac{\partial \varphi(t, z)}{\partial t} + b_1 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} \right) \Delta P_1 + \beta \frac{\partial \bar{\psi}(t, z)}{\partial t} \Delta \bar{P}_2 \right) dz dt, \quad (27)$$

$$\Delta I_2 = \frac{1}{R} \int_0^T \int_0^h \int_0^R \left(\frac{\partial \psi(t, x, z)}{\partial t} + b_2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right) \Delta P_2 dx dz dt. \quad (28)$$

Постановка спряженої крайової задачі. У відповідності з вихідною початково-крайовою задачею (7)–(12) і з урахуванням (26)–(28), для кожного наближення b_1^n, b_2^n, β^n розв'язку b_1, b_2, β отримуємо постановку спряженої крайової задачі:

$$\frac{\partial \varphi(t, z)}{\partial t} + b_1 \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} + \beta \frac{\partial \bar{\psi}(t, z)}{\partial t} = -\frac{1}{\mu r_1} \frac{\partial}{\partial z} E_{error}^n(t, \gamma) \delta(z - \gamma), \quad (29)$$

$$\frac{\partial \psi(t, x, z)}{\partial t} + b_2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\frac{1}{\mu r_1} \frac{\partial}{\partial z} E_{error}^n(t, \gamma) \delta(z - \gamma), \quad (30)$$

$$\varphi(t, z)|_{t=T} = 0; \quad \psi(t, x, z)|_{t=T} = 0 \quad (\text{часові умови при } t = T), \quad (31)$$

$$\frac{\partial}{\partial z} \varphi(t, z = h) = 0, \quad \varphi(t, z = 0), \quad (32)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \psi(t, x, z)|_{x=0} = 0, \quad \psi(t, x, z)|_{x=R} = \varphi(t, z), \quad (33)$$

де $E_{error}^n(t)$ – n -е наближення нев'язки (11) (що мінімізується на кожному кроці

регуляризації $\bar{\psi}(t, z) = \frac{1}{R} \int_0^R \psi(t, x, z) dx$, $\delta(z)$ – дельта-функція Дірака.

Побудова аналітичного розв'язку спряженої задачі. Аналітичний розв'язок спряженої крайової задачі по визначенню множників Лагранжа $\varphi(t, z)$, $\psi(t, x, z)$ виконано з використанням операційного методу Гевісайда, подібно побудові розв'язку прямої задачі [9]. Застосовуючи до задачі (30), (31), (33) інтегральне перетворення Фур'є (cos) по координаті x , отримаємо [13, 17]:

$$\varphi(t, x, z) = \frac{2}{R} \sum_{m=0}^{\infty} \left[-(-1)^m b_2 \eta_m \int_t^T e^{b_2 \eta_m^2 (t-\tau)} \varphi(\tau, z) d\tau - \frac{1}{\mu r_2} \frac{(-1)^m}{\eta_m} \int_t^T e^{b_2 \eta_m^2 (t-\tau)} F(\tau) d\tau \right] \cos \eta_m x. \quad (34)$$

Припускається, що шукані функції $\varphi(t, z)$ і $\psi(t, x, z)$ є оригіналами за Лапласом по часовій змінній t . Підставляючи (34) в рівняння (29), виконуючи заміну $t = t - T$ в задачі (29)–(32) та застосовуючи до неї інтегральне перетворення Лапласа, отримуємо задачу Коші:

$$b_1 \frac{d^2 \varphi^*(s, z)}{dz^2} + s(\varphi^*(s, z) + \beta \bar{\psi}^*(s, z)) = -\frac{1}{\mu r_1} F^*(\tau), \quad (35)$$

$$\varphi^*(s, z)|_{z=0} = 0; \quad \frac{d}{dz} \varphi^*(s, z)|_{z=h} = 0, \quad (36)$$

Тут зображення $\bar{\psi}^*(s, z)$ має вигляд:

$$\bar{\psi}^*(s, z) = \frac{2}{R^2} \sum_{m=0}^{\infty} \left[-\frac{1}{\frac{s}{b_2} + \eta_m^2} \varphi^*(s, z) - \frac{1}{\mu r_2 b_2} \frac{(-1)^m}{\eta_m \left(\frac{s}{b_2} + \eta_m^2 \right)} F^*(s) \right]. \quad (37)$$

Знаходячи границі рядів $\sum_{m=0}^{\infty} \frac{1}{\frac{s}{b_2} + \eta_m^2}$ і $\sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m}{\frac{s}{b_2} + \eta_m^2}$ та підставляючи

перетворений вираз (37) у (35), отримуємо [18]:

$$b_1 \frac{d^2 \varphi^*(s, Z)}{dZ^2} + \left(s - \frac{\beta}{R} \sqrt{b_2} \sqrt{s} \cdot th \sqrt{\frac{s}{b_2} R} \right) \varphi^*(s, Z) = -\frac{1}{\mu r_1} \left(1 - \frac{r_1}{r_2} \frac{\beta}{R} \left(1 - \frac{1}{ch \sqrt{\frac{s}{b_2} R}} \right) \right) F^*(\tau). \quad (38)$$

Застосовуючи до (38) скінченне інтегральне перетворення Фур'є по геометричній змінній z з урахуванням крайових умов [9, 13], одержуємо вираз:

$$\varphi_n^*(s) = -\frac{1}{\mu r_1} \frac{1}{\omega(s)} \left(1 - \frac{r_1}{r_2} \frac{\beta}{R} \left(1 - \frac{1}{ch \sqrt{\frac{s}{b_2} R}} \right) \right) F_n^*(s), \quad (39)$$

де $\omega_n(s) = s - b_1 \lambda_n^2 - \frac{\beta}{R} \sqrt{b_2} \sqrt{s} \cdot th \sqrt{\frac{s}{b_2} R}$, $\lambda_n = \frac{2n+1}{2h} \pi$, $\eta_m = \frac{2m+1}{2R} \pi$,

$\tilde{\eta}_m = \frac{2m+1}{2R} \sqrt{b_2} \pi$, $n, m = \overline{0, \infty}$, $\{v_{jn}\}$, $j = \overline{1, \infty}$, $n = \overline{0, \infty}$ – корені трансцендентного

рівняння:

$$v^2 + b_1 \lambda_n^2 - \beta \cdot v \frac{\sqrt{b_2}}{R} \operatorname{tg} \frac{v}{\sqrt{b_2}} R = 0. \quad (40)$$

Обернений перехід до оригіналу за Лапласом в (39) здійснюємо згідно формули

$$\varphi_n^*(t) = -\frac{1}{\mu r_1} \left(L^{-1} \left[\frac{1}{\omega(s)} \right] - \frac{r_1}{r_2} \frac{\beta}{R} \left(L^{-1} \left[\frac{1}{\omega(s)} \right] - L^{-1} \left[\frac{1}{\omega(s) \operatorname{ch} \sqrt{\frac{s}{b_2}} R} \right] \right) \right) * F(\tau), \quad (41)$$

де

$$L^{-1} \left[\frac{1}{\omega(s)} \right] = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{e^{-v_{jn}^2 t}}{1 - \frac{\beta_2}{2} \left(\frac{\sqrt{b_2}}{v_{jn} R} \operatorname{tg} \frac{v_{jn} R}{\sqrt{b_2}} + \frac{1}{\cos^2 \frac{v_{jn} R}{\sqrt{b_2}}} \right)} = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{e^{-v_{jn}^2 t}}{\varpi(v_{jn})}; \quad (42)$$

$$L^{-1} \left[\frac{1}{\omega(s) \operatorname{ch} \sqrt{\frac{s}{b_2}} R} \right] = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{e^{-v_{jn}^2 t}}{\operatorname{ch} \frac{v_{jn} R}{\sqrt{b_2}} \varpi(v_{jn})} - \sum_{k=0}^{\infty} \frac{e^{-\eta_{kn}^2 t}}{\frac{R}{\sqrt{b_2}} \sin \frac{\eta_{kn} R}{\sqrt{b_2}} \varpi(\eta_{kn})}, \quad (43)$$

$$\varpi(v) = 1 - \frac{\beta}{2} \left(\frac{\sqrt{b_2}}{v R} \operatorname{tg} \frac{v R}{\sqrt{b_2}} + \frac{1}{\cos^2 \frac{v R}{\sqrt{b_2}}} \right).$$

Здійснюючи обернений перехід до оригіналу по змінній z , з урахуванням (42), (43), одержуємо єдиний розв'язок спряженої крайової задачі (29)–(33) [9, 13]:

$$\varphi(t, z) = -\frac{1}{\mu r_1} \frac{2}{h} \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^t \left[\sum_{j=1}^{\infty} \frac{e^{-v_{jn}^2(t-\tau)}}{\varpi_n(v_{jn})} \left(1 - \frac{r_1}{r_2} \frac{\beta}{R} \right) \left[1 - \frac{1}{\operatorname{ch} \frac{v_{jn} R}{\sqrt{b_2}} \varpi_n(v_{jn})} \right] + \frac{r_1}{r_2} \frac{\beta}{R} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{e^{-\eta_k^2(t-\tau)}}{\frac{R}{\sqrt{b_2}} \sin \frac{\eta_k R}{\sqrt{b_2}} \varpi_n(\eta_k)} \right] \times F(\tau) d\tau \sin \lambda_n z \quad (44)$$

Теорема 1 (про розв'язність спряженої крайової задачі): Якщо виконується умова однозначної розв'язності спряженої крайової задачі (29)–(33), задані та шукані функції є оригіналами за Лапласом за часовою змінною t , і як оригінали задовольняють умовам застосування скінченного інтегрального перетворення Фур'є за геометричною змінною z та додатково за змінною x для двовимірної функції, ψ то розв'язок крайової спряженої задачі (29)–(33) існує і єдиний та визначається формулами (34), (44).

6. Отримання формул виразів градієнтів функціоналу-нев'язки

Зв'язок між прямою і спряженою задачами. Базові рівняння в приростах (20), (21) та спряженої задачі (29), (30) подаємо в операторній формі:

$$Lw(t, x, z) = X, \quad w \in (0, R) \cup \Omega_T, \quad (44)$$

$$L^* \Psi(t, x, z) = Y^n(t, \gamma), \quad \Psi \in (0, R) \cup \Omega_T, \quad (45)$$

де

$$L = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial z} \left(b_1 \frac{\partial}{\partial z} \right) & \beta \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial t} \int_0^R () dx \\ 0 & \frac{\partial}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial x} \left(b_2 \frac{\partial}{\partial x} \right) \end{bmatrix}; \quad L^* = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z} \left(b_1 \frac{\partial}{\partial z} \right) & \beta \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial t} \int_0^R () dx \\ 0 & \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(b_2 \frac{\partial}{\partial x} \right) \end{bmatrix};$$

$$w(t, x, z) = \begin{bmatrix} \Delta P_1(t, z) \\ \Delta P_2(t, x, z) \end{bmatrix}; \quad \Psi(t, x, z) = \begin{bmatrix} \varphi(t, z) \\ \psi(t, x, z) \end{bmatrix}; \quad (46)$$

$$X(t, x, z) = \begin{bmatrix} \frac{\partial}{\partial z} \left(\Delta b_1 \frac{\partial}{\partial z} P_1(t, z) \right) - \Delta \beta \frac{\partial}{\partial t} \bar{P}_2(t, z) \\ \frac{\partial}{\partial x} \left(\Delta b_2 \frac{\partial}{\partial x} P_2(t, x, z) \right) \end{bmatrix}; \quad Y(t, x, z) = \begin{bmatrix} -\frac{1}{\mu r_1} \frac{\partial}{\partial z} E_{error}^n(t, \gamma) \delta(z - \gamma) \\ -\frac{1}{\mu r_2} \frac{\partial}{\partial z} E_{error}^n(t, \gamma) \delta(z - \gamma) \end{bmatrix}$$

Тут L^* – спряжений з оператором L оператор Лагранжа. Введемо скалярний добуток

$$(w, v) = \left[\int_0^T \int_0^h w_1(t, z) \dots dz dt \quad \frac{1}{R} \int_0^T \int_0^h \int_0^R w_2(t, x, z) \dots dx dz dt \right] \cdot \begin{bmatrix} v_1(t, z) \\ v_2(t, x, z) \end{bmatrix} \quad (47)$$

Приріст функціоналу-нев'язки (26), нехтуючи членами другого порядку малості з урахуванням (47) для компактності наступних перетворень подаємо у вигляді:

$$\Delta J(b_1, b_2, \beta) = (\tilde{w}(t, x, z), Y(t, \gamma)), \quad \tilde{w}(t, x, z) = \begin{bmatrix} -\frac{1}{\mu r_1} \Delta P_1(t, z) \\ -\frac{1}{\mu r_2} \Delta P_2(t, x, z) \end{bmatrix}. \quad (48)$$

З урахуванням рівності (45), права частина (48) матиме вигляд:

$$\Delta J(b_1, b_2, \beta) \equiv (\tilde{w}(t, x, z), Y(t, \gamma)) = (\tilde{w}(t, x, z), L^* \Psi(t, x, z)). \quad (49)$$

З урахуванням тотожності Лагранжа [14]:

$$L\tilde{w}(t, x, z), \Psi(t, x, z) = (\tilde{w}(t, x, z), L^* \Psi(t, x, z)) \quad (50)$$

Та рівності (44), отримуємо наступний вигляд приросту функціоналу-нев'язки:

$$\Delta J(b_1, b_2, \beta) = (\tilde{X}(t, x, z), \Psi(t, x, z)) \quad (51)$$

Підставляючи в рівняння (51) компоненти $\tilde{X}(t, x, z)$, одержуємо формулу, що встановлює зв'язок між прямою задачею (1)–(9) і спряженою задачею (23)–(26), що дає можливість отримати явні вирази компонентів градієнта функціонала невязки:

$$\begin{aligned} \Delta J(b_1, b_2, \beta) = & \left(\varphi(t, Z) - \frac{1}{\mu r_1} \left(\frac{\partial}{\partial z} \left(\Delta b_1 \frac{\partial}{\partial z} P_1(t, z) \right) - \Delta \beta \frac{\partial}{\partial t} \bar{P}_2(t, z) \right) \right) + \\ & + \left(\psi(t, x, z) - \frac{1}{\mu r_2} \frac{\partial}{\partial x} \left(\Delta b_2 \frac{\partial}{\partial x} P_2(t, x, z) \right) \right) \end{aligned} \quad (51)$$

Аналiтичні вирази градієнтів функціоналу-нев'язки. Диференціюючи вираз (51) по Δb_1 , Δb_2 і по $\Delta \beta$, розкриваючи скалярний добуток згідно (47), отримуємо необхідні аналітичні вирази компонентів градієнтів функціоналу-

нев'язки для необхідних компонентів коефіцієнтів консолідації b_1 , b_2 і параметра β як функцій від часу відповідно:

$$\nabla J_{b_2}(t) = -\frac{1}{\mu r_2} \frac{1}{R} \int_0^h \int_0^R \frac{\partial^2 P_2(t, x)}{\partial x^2} \psi(t, x, z) dx dz, \quad (52)$$

$$\nabla J_{b_1}(t) = -\frac{1}{\mu r_1} \int_0^h \frac{\partial^2 P_1(t, z)}{\partial z^2} \varphi(t, z) dz \quad (53)$$

$$\nabla J_{\beta}(t) = \frac{1}{\mu r_1} \int_0^h \frac{\partial \bar{P}_2(t, z)}{\partial t} \varphi(t, z) dz \quad (54)$$

Формули градієнтів включають аналітичні розв'язки прямої задачі (7)–(12) і спряженої задачі (29)–(33). Використання високошвидкісних аналітичних методів забезпечує високу продуктивність обчислювального процесу, скорочення великої кількості ітерацій для кожного регуляризаційного циклу. Іншою перевагою формул (52)–(54) є те, що вони дозволяють ідентифікувати вказані досліджувані кінетичні параметри як функції від часу та інших координат. Це забезпечує визначення внутрішньої кінетики консолідації в міжчастинковому (interparticle space) та внутрішньочастинковому (intraparticle space) просторах і дає нове бачення процесу в цілому.

7. Числовий аналіз

Результати чисельного моделювання та ідентифікації параметрів показано на Рис. 1–4. Рис. 1 ілюструє процес збіжності кривих розподілу безрозмірного потоку рідини на виході зі стиснутого шару вологовмісних частинок на поверхні спостереження $z=0$ до кривої спостереження (номер 8) при реалізації процедури покрокової ідентифікації коефіцієнтів консолідації в міжчастинковому та внутрішньочастинковому просторах b_1 і b_2 відповідно згідно (15). Значення вхідних параметрів, властивостей частинок та дані спостереження взяті з робіт [9, 10], оскільки ця робота є розвитком викладених у них результатів. В [9] нами проводилися дослідження компресійно-

консолідуючих властивостей для двох видів біологічних тканин – легко руйнівних (better disrupted issue) і важко руйнівних (less disrupted issue).

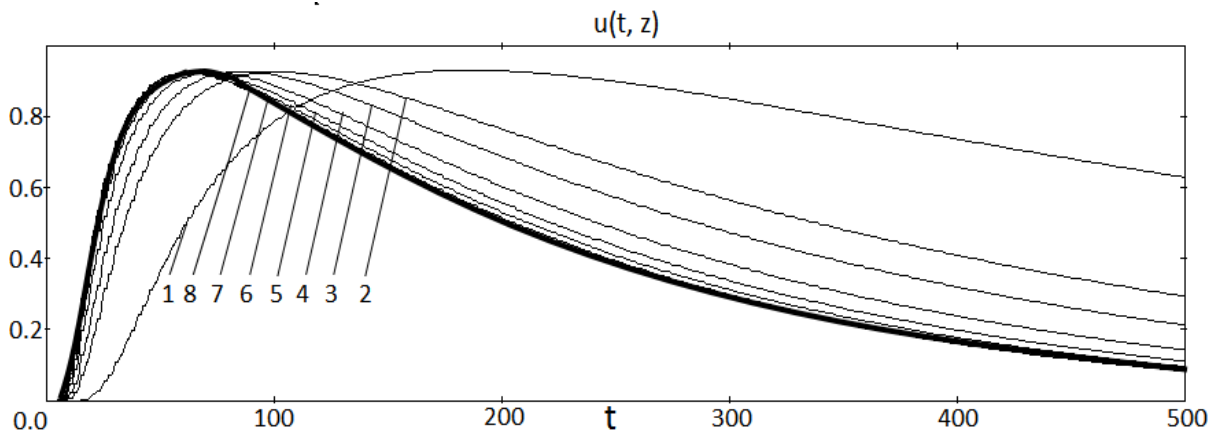


Рис. 1.

Початкові наближення коефіцієнтів консолідації в міжчастковому та внутрішньочастковому просторах взяті для випадку better disrupted tissue, які брались тут відповідно $b_1 = 6.0 \cdot 10^{-8} \text{ м}^2 / \text{с}$, $b_2 = 1.0 \cdot 10^{-8} \text{ м}^2 / \text{с}$. Числа 1–7 на графіках рис.1 відповідають номерам блоків регуляризаційних ітерацій, по обох параметрах (і) одночасно. Сумарна кількість ітерацій за зовнішнім (b_1) та внутрішнім контуром (b_2) для кожного блоку в рамках функціональної моделі регуляризації в середньому становить від 700 до 900 ітерацій.

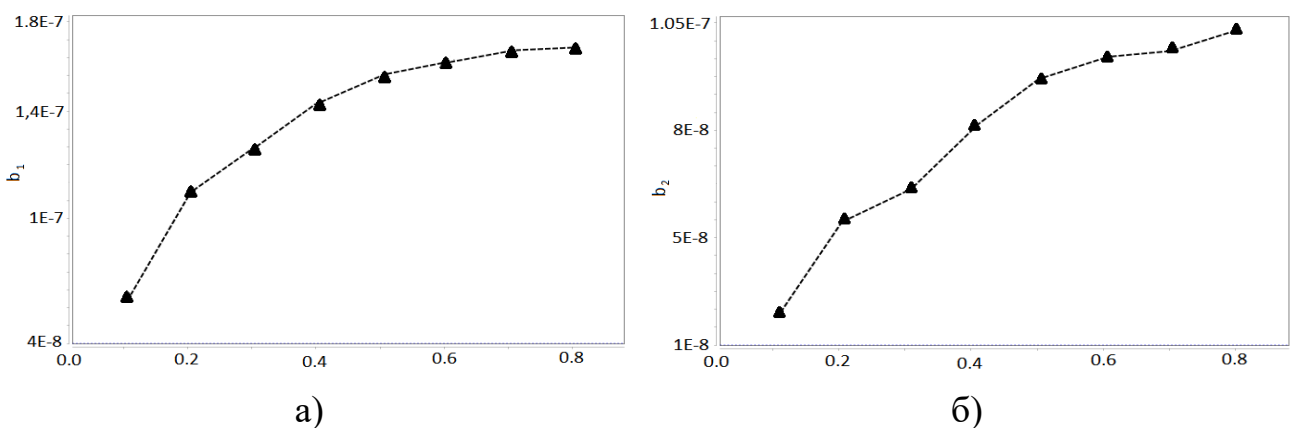


Рис. 2.

На Рис. 2 (а, б) показані відповідні еволюційні картини зміни усереднених на часовому інтервалі процесу консолідації і витіснення вологи з шару

коефіцієнтів консолідації в міжчастинковому просторі b_1 у внутрішньочастинковому просторі b_2 , відновлюваних згідно регуляризаційним залежностям (15) від приведеного до загального числа виконуваних ітерацій. Як видно з Рис. 2., для двох останніх блоків ітерацій (позиції 0.6–0.8) спостерігається стабілізація усереднених профілів коефіцієнтів консолідації. Для коефіцієнта консолідації b_1 отримуємо значення $1.8 \cdot 10^{-7} \text{ м}^2/\text{с}$. Для коефіцієнта консолідації b_2 значення дорівнює $1.0 \cdot 10^{-7} \text{ м}^2/\text{с}$.

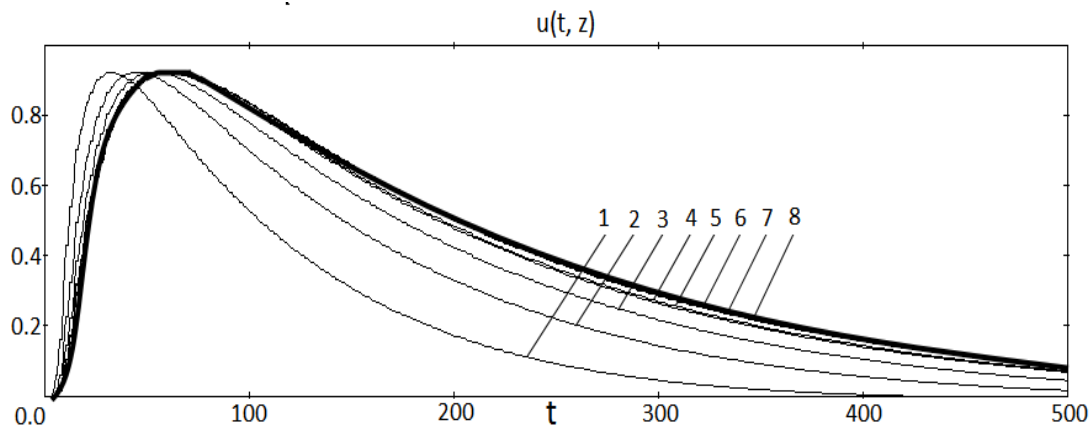


Рис. 3.

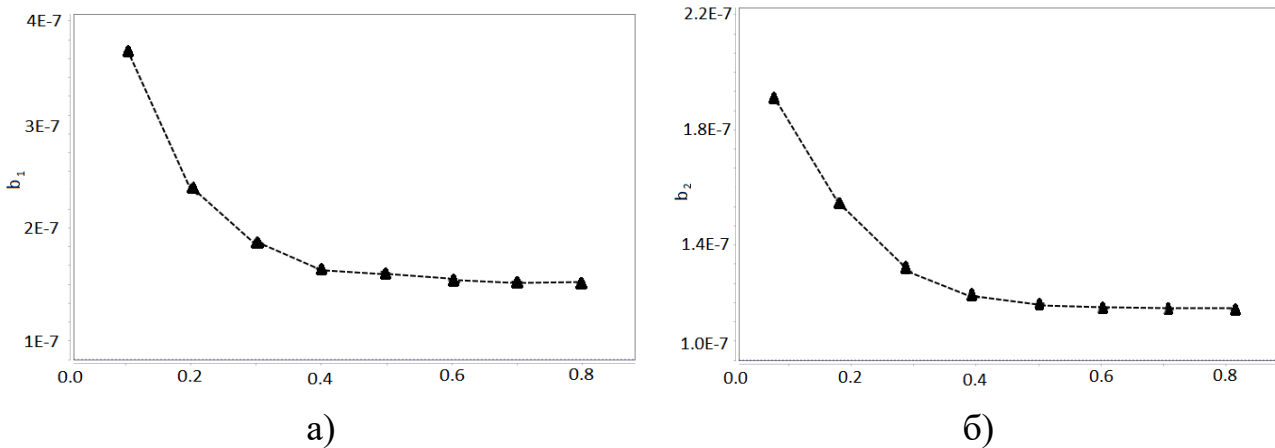


Рис. 4.

Аналогічні результати отримано під час виборів інших початкових наближень. Зокрема, при заданні початкових наближень можна спостерігати аналогічний процес збіжності модельних розподілів потоків рідини до кривої спостереження з протилежної сторони (процес «знизу») (Рис. 3). При цьому забезпечується аналогічна картина еволюції коефіцієнтів консолідації в

просторах макро-і мікропор b_1 b_2 і відповідно до тих же значень $1.8 \cdot 10^{-7}$ м²/с и $1.0 \cdot 10^{-7}$ м²/с (Рис.4 а, б).

8. Високопродуктивні інформаційні технології для дослідження систем нанофільтрації в середовищах різнорозмірних нанопористих частинок

Постановка проблеми. Запропонована інформаційна технологія дослідження нанопористих фільтраційних систем ґрунтується на поданій розробленій нами на початку. розділу феноменологічній моделі двофазного і багаторівневого дворівневого транспорту «нанофільтрація-консолідація» в системі «міжчастинковий простір – нанопористі частинки», що враховує комплексну feedback-взаємодію внутрішніх потоків адсорбованої субстанції з нанопор сферичних частинок та макропотоків субстанції, що знаходяться в міжчастинковому просторі [1, 2]. Нанопористе середовище розглядається як багаторівнева пориста систему з міжчастинковими та внутрішньочастинковими мережами для експрес-потоків рідини.

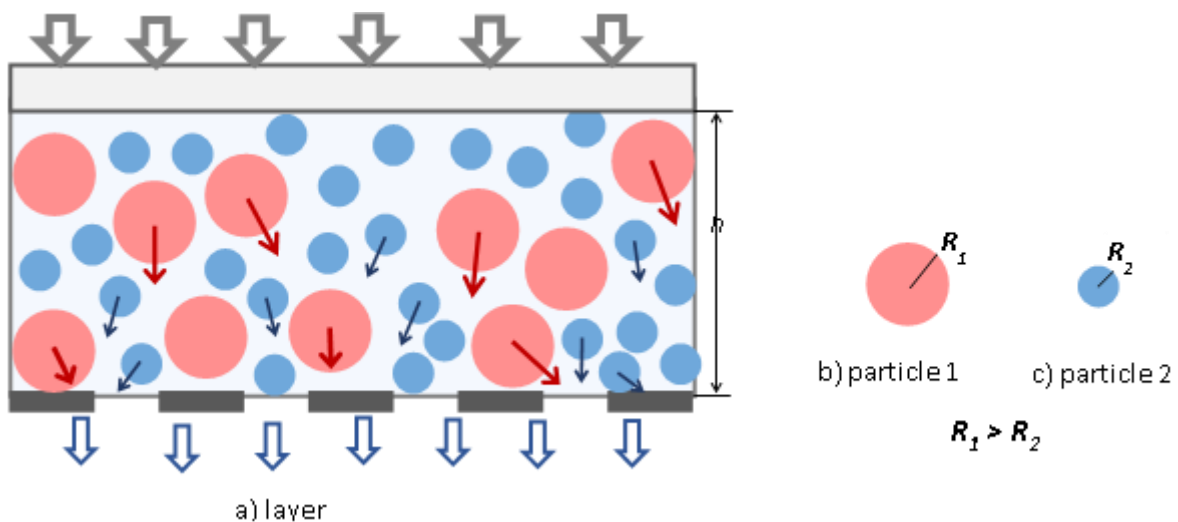


Рис. 1. Схематизація поточкових взаємодій у дворівневій системі нанопор між просторами intraparticle space 1, intraparticle space 2

Розглядаємо нанопористі частинки, що містять рідинну субстанцію, що складається з різних хімічних компонент. Частинки формують нанопористий шар, який піддається одновимірному стискуванню (Рис. 1). Потоки субстанції взаємодіють між усіма розглядуваними просторами. Нанопористі частинки

розділені пористою мембраною. Шар частинок вважається двопористим середовищем. На Рис. 1 зображено два рівні розглянутого елементарного об'єму: рівень 1(a) для системи макропор у міжчастковому просторі (interparticle space) та рівень 2 (b і c) для системи нанопор у внутрішньочастинкових просторах, що включає два підпростори частинок різних розмірів: intraparticle space1 – простір нанопористих частинок радіусом не менше R_1 і intraparticle space 2 – простір нанопористих частинок радіусом не менше R_2 ($R_1 > R_2$).

Математична модель. Математичну модель розглянутого складної системи нанофільтрації та нанодифузії у просторах різнорозмірних нанопористих частинок урахуванням зазначених фізичних чинників та feedback-взаємодій можна описати у вигляді системи крайових задач для рівнянь у частинних похідних для трьох з вказаних взаємозв'язаних просторів, сформованих для усіх просторів (interparticle space та двох intraparticle space) відносно рідкої фази. Подібний підхід можна розвинути на системи з наявністю дифундової газової фази субстанції, що складається з різних компонент для подібних мереж нано-, мікро- і макропор.

Задача А (рівняння консолідації для міжчастинкового простору) полягає в знаходженні обмеженого розв'язку рівняння консолідації для шару середовища з різнорозмірними нанопористими частинками в області $D_1 = \{(t, z) : t > 0, 0 < z < h\}$:

$$\frac{\partial P_1(t, z)}{\partial t} = b_1 \frac{\partial^2 P_1}{\partial z^2} - \beta_1 \frac{\varepsilon}{R_1} \frac{\partial}{\partial t} \int_0^{R_1} P_2(t, x_1, z) dx_1 - \beta_2 \frac{1-\varepsilon}{R_2} \frac{\partial}{\partial t} \int_0^{R_2} P_3(t, x_2, z) dx_2 \quad (1)$$

з початковою умовою:

$$P_1(t, z)|_{t=0} = P_E, \quad (2)$$

граничні умови (для змінної z):

$$P_1(t, z)|_{z=0} = 0; \quad \frac{\partial P_1}{\partial z}|_{z=h} = 0 \quad (\text{умова непроникності}). \quad (3)$$

Задачі В₁, В₂ (рівняння консолідації для різнорозмірних нанопористих частинок) для знаходження обмежених розв'язків рівнянь консолідації для нанопористих частинок (радіус R_i) в областях

$$D_i = \left\{ (t, x_i, z) : t > 0, |x_i| < R_i, 0 < z < h, i = 2, 3 \right\}:$$

$$\frac{\partial P_i}{\partial t} = b_i \frac{\partial^2 P_i}{\partial x_j^2}, \quad i = \overline{2, 3}, \quad j = \overline{1, 2} \quad (4)$$

З початковими умовами:

$$P_i \Big|_{t=0} = P_E(z), \quad i = \overline{2, 3} \quad (5)$$

Крайові умови (по радіальних змінних x_j):

$$\frac{\partial P_i}{\partial x_j} \Big|_{x_j=0} = 0; \quad P_i(t, x_j, z) \Big|_{x_j=R_j} = P_1(t, z). \quad (6)$$

Номенклатура: P₁ – тиск рідини в міжчастковому просторі interparticle space, P₂, P₃ – тиски рідини у внутрішньочастинкових просторах intraparticle space1 та intraparticle space2 (всередині сферичних нанопористих частинок 1 і 2) відповідно, b₁ – коефіцієнт консолідації в міжчастинковому просторі, b₂, b₃ – коефіцієнти консолідації у внутрішньочастинкових просторах intraparticle space1 та intraparticle space2, β₁, β₂ – коефіцієнти пружності частинок 1 і 2 відповідно, h – товщина шару, R₁, R₂ – радіус частинок 1 і 2. Нумерація формул та рисунків у цьому під розділі є локальною

Аналітичні розв'язки. Профілі тисів міжчастинковому просторі interparticle space, внутрішньочастинкових просторах intraparticle space1 та intraparticle space2.

Аналітичний розв'язок задачі побудовано за допомогою операційного метода Гевісайда, та інтегральних перетворень Лапласа і Фур'є. Застосовуючи

скінченне інтегральне перетворення Фур'є (cos) [7, 13] ми будемо мати такі аналітичні вирази для ядер ітегральних перетворень:

$$F_c \left[P_i(t, x_j, z) \right] = \int_0^{R_j} P_i(t, x_j, z) \mathcal{G}(x_j, \eta_{m_j}) dx_j = \int_0^{R_j} P_i(t, x_j, z) \cos \eta_{m_j} x_j dx_j \equiv P_{im_j}(t, z),$$

$$i = \begin{cases} 2, & j = 1 \\ 3, & j = 2 \end{cases}$$

$$F_c^{-1} \left[P_{im_j}(t, z) \right] = \sum_{m_j=0}^{\infty} P_{im_j}(t, z) \frac{\mathcal{G}(x_j, \eta_{m_j})}{\left\| \mathcal{G}(x_j, \eta_{m_j}) \right\|^2} = \frac{2}{R_1} \sum_{m_1=0}^{\infty} P_{im_j}(t, z) \cos \eta_{m_j} x_j \equiv P_i(t, x_j, z),$$

$$i = \begin{cases} 2, & j = 1 \\ 3, & j = 2 \end{cases}$$

$$F_c \left[\frac{\partial P_i}{\partial x_j^2} \right] = \int_0^R \frac{\partial^2 P_i}{\partial x_j^2} \mathcal{G}(x_j, \eta_{m_j}) dx_j = -\eta_{m_j}^2 P_{im_j}(t, z) + (-1)^{m_j} \eta_{m_j} P_1(t, z), \quad i = \begin{cases} 2, & j = 1 \\ 3, & j = 2 \end{cases}$$

де $\mathcal{G}(x_j, \eta_{m_j}) = \cos \eta_{m_j} x_j$, $\eta_{m_j} = \frac{2m_j + 1}{2R_j} \pi$, $m_j = \overline{0, \infty}$ – спектральні функції і

спектральні значення інтегрального перетворення Фур'є (cos-Fourier), ми отримуємо аналітичні розв'язки крайових задач B_1, B_2 :

$$\begin{aligned} P_2(t, x, z) &= P_E(z) \frac{2}{R_1} \sum_{m_1=0}^{\infty} \frac{(-1)^{m_1}}{\eta_{m_1}} e^{-b_2 \eta_{m_1}^2 t} \cos \eta_{m_1} x + \\ &+ \frac{2}{R_1} \sum_{m_1=0}^{\infty} (-1)^{m_1} b_2 \eta_{m_1} \int_0^t e^{-b_2 \eta_{m_1}^2 (t-\tau)} P_1(\tau, z) dz \cos \eta_{m_1} x, \quad |x| \leq R_1 \end{aligned} \quad (7)$$

$$\begin{aligned} P_3(t, x, z) &= P_E(z) \frac{2}{R_2} \sum_{m_2=0}^{\infty} \frac{(-1)^{m_2}}{\eta_{m_2}} e^{-b_3 \eta_{m_2}^2 t} \cos \eta_{m_2} x + \\ &+ \frac{2}{R_3} \sum_{m_2=0}^{\infty} (-1)^{m_2} b_3 \eta_{m_2} \int_0^t e^{-b_3 \eta_{m_2}^2 (t-\tau)} P_1(\tau, z) dz \cos \eta_{m_2} x, \quad |x| \leq R_2 \end{aligned}$$

Підставляючи вирази (7) в рівняння консолідації (1), після низки перетворень та послідовного застосування до крайової задачі (1)–(3)

інтегрального перетворення Лапласа по часовій змінній t [7] та скінченного інтегрального перетворення Фур'є (\sin):

$$F_s \left[P_1^* (s, z) \right] = \int_0^h P_1^* (s, z) \cdot V (z, \lambda_n) dz = \int_0^h P_1^* (s, z) \cdot \sin \lambda_n z dz = P_{1,n}^* (s),$$

$$F_s^{-1} \left[P_{1,n}^* (s) \right] = \sum_{n=0}^{\infty} P_{1,n}^* (s) \frac{V (z, \lambda_n)}{\|V (z, \lambda_n)\|^2} = \frac{2}{h} \sum_{n=0}^{\infty} P_{1,n}^* (s) \sin \lambda_n z \equiv P_1^* (s, z),$$

$$F_s \left[\frac{d^2 P_1^* (s)}{dz^2} \right] = -\lambda_n^2 P_{1,n}^* (s, z),$$

де $V (z, \lambda_n) = \sin \frac{2n+1}{2h} \pi z$ – спектральні функції і $\lambda_n = \frac{2n+1}{2h} \pi$ – спектральні значення інтегрального перетворення Фур'є (Sin-Fourier).

Застосовуючи інтегральний оператор оберненого перетворення Лапласа до виразу (8), ми отримуємо [17]:

$$\begin{aligned} & \left(\lambda^n + \frac{s}{b_1} \left(1 + 2 \frac{\beta_1 \varepsilon}{R_1^2} \sum_{m_1=0}^{\infty} \frac{1}{s/b_2 + \eta_{m_1}^2} + 2 \frac{\beta_2 (1-\varepsilon)}{R_2^2} \sum_{m_2=0}^{\infty} \frac{1}{s/b_3 + \eta_{m_2}^2} \right) \right) P_{1,n}^* (s) = \\ & = -\frac{1}{b_1} \left(2 \frac{\beta_1 \varepsilon}{R_1^2} \sum_{m_1=0}^{\infty} \frac{s/b_2}{s/b_2 + \eta_{m_1}^2} + 2 \frac{\beta_2 (1-\varepsilon)}{R_2^2} \sum_{m_2=0}^{\infty} \frac{s/b_3}{s/b_3 + \eta_{m_2}^2} \right) \frac{P_E}{\lambda_n} + \\ & + \left(\frac{1 + \beta_1 \varepsilon}{b_1} + \frac{1 + \beta_2 (1-\varepsilon)}{b_1} \right) P_E \frac{1}{\lambda_n} \end{aligned}$$

Використовуючи розклади [21]

$$\sum_{m_1=0}^{\infty} \frac{1}{s/b_2 + \eta_{m_1}^2} = \frac{R_1}{2} \sqrt{\frac{b_2}{s}} th \left(\sqrt{\frac{s}{b_2}} R_1 \right)$$

$$\sum_{m=0}^{\infty} \frac{s}{\eta_m^2 (s + b_2 \eta_m^2)} = \sum_{m=0}^{\infty} \left(\frac{1}{\eta_m^2} - \frac{1}{s/b_2 + \eta_m^2} \right) = \frac{R_1^2}{2} - \frac{R_1}{2} \sqrt{\frac{b_2}{s}} th \left(\sqrt{\frac{s}{b_2}} R_1 \right)$$

У результаті отримуємо

$$P_{1_n}^*(s) = \left(b_1 \lambda^n + s + \beta_1 \varepsilon \frac{\sqrt{b_2}}{R_1} \sqrt{s} \cdot th \left(\sqrt{\frac{s}{b_2}} R_1 \right) + \beta_2 (1 - \varepsilon) \frac{\sqrt{b_3}}{R_2} \sqrt{s} \cdot th \left(\sqrt{\frac{s}{b_3}} R_2 \right) \right)^{-1} \cdot \left(2 + \frac{\beta_1 \varepsilon}{R_1} \sqrt{\frac{b_2}{s}} th \left(\sqrt{\frac{s}{b_2}} R_1 \right) + \frac{\beta_2 (1 - \varepsilon)}{R_2} \sqrt{\frac{b_3}{s}} th \left(\sqrt{\frac{s}{b_3}} R_2 \right) \right) P_E \frac{1}{\lambda_n} \quad (8)$$

Вводячи позначення

$$\phi(s, \lambda^n) = s + b_1 \lambda^n + \beta_1 \varepsilon \frac{\sqrt{b_2}}{R_1} \sqrt{s} \cdot th \left(\sqrt{\frac{s}{b_2}} R_1 \right) + \beta_2 (1 - \varepsilon) \frac{\sqrt{b_3}}{R_2} \sqrt{s} \cdot th \left(\sqrt{\frac{s}{b_3}} R_2 \right)$$

та застосовуючи інтегральний оператор оберненого перетворення Лапласа, ми отримуємо формулу для здійснення переходу до оригіналу у формулі (8):

$$P_{1,n}(t) = P_E \frac{2}{\lambda_n} L^{-1} \left[\frac{1}{\phi(s, \lambda^n)} \right] + P_E \frac{\beta_1 \varepsilon}{\lambda_n} L^{-1} \left[\frac{1}{\phi(s, \lambda^n)} \right] * L^{-1} \left[\frac{sh \sqrt{\frac{s}{b_2}} R_1}{\sqrt{\frac{s}{b_2}} R_1 ch \sqrt{\frac{s}{b_2}} R_1} \right] + P_E \frac{\beta_2 (1 - \varepsilon)}{\lambda_n} L^{-1} \left[\frac{1}{\phi(s, \lambda^n)} \right] * L^{-1} \left[\frac{sh \sqrt{\frac{s}{b_3}} R_2}{\sqrt{\frac{s}{b_3}} R_2 ch \sqrt{\frac{s}{b_3}} R_2} \right] \quad (9)$$

де $L^{-1}[\dots]$ – інтегральний оператор оберненого перетворення Лапласа, " * " – інтегральний оператор згортки двох функцій.

Розглядаємо наступне трансцендентне рівняння:

$$s + b_1 \lambda^n + \beta_1 \varepsilon \frac{\sqrt{b_2}}{R_1} \sqrt{s} \cdot th \left(\sqrt{\frac{s}{b_2}} R_1 \right) + \beta_2 (1 - \varepsilon) \frac{\sqrt{b_3}}{R_2} \sqrt{s} \cdot th \left(\sqrt{\frac{s}{b_3}} R_2 \right) = 0.$$

Підставляючи $i\sqrt{s} = \nu$ або $s = -\nu^2$, отримуємо:

$$\nu^2 - b_1 \lambda_n^2 - \beta_1 \varepsilon \nu \frac{\sqrt{b_2}}{R_1} tg \left(\frac{\nu R_1}{\sqrt{b_2}} \right) - \beta_2 (1 - \varepsilon) \nu \frac{\sqrt{b_3}}{R_2} tg \left(\frac{\nu R_2}{\sqrt{b_3}} \right) = 0. \quad (10)$$

Згідно теореми Гевісайда ми отримуємо вираз переходу до оригіналу за Лапласом [9, 17]:

$$\begin{aligned}
 & \cdot L^{-1} \left[\frac{1}{s + b_1 \lambda^n + \beta_1 \varepsilon \frac{\sqrt{b_2}}{R_1} \sqrt{s} \cdot th \left(\sqrt{\frac{s}{b_2}} R_1 \right) + \beta_2 (1 - \varepsilon) \frac{\sqrt{b_3}}{R_2} \sqrt{s} \cdot th \left(\sqrt{\frac{s}{b_3}} R_2 \right)} \right] = \\
 & = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma} \frac{e^{st} ds}{s + b_1 \lambda^n + \beta_1 \varepsilon \frac{\sqrt{b_2}}{R_1} \sqrt{s} \cdot th \left(\sqrt{\frac{s}{b_2}} R_1 \right) + \beta_2 (1 - \varepsilon) \frac{\sqrt{b_3}}{R_2} \sqrt{s} \cdot th \left(\sqrt{\frac{s}{b_3}} R_2 \right)} = \\
 & = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{e^{st}}{\frac{d}{ds} \left[s + b_1 \lambda^n + \beta_1 \varepsilon \frac{\sqrt{b_2}}{R_1} \sqrt{s} \cdot th \left(\sqrt{\frac{s}{b_2}} R_1 \right) + \beta_2 (1 - \varepsilon) \frac{\sqrt{b_3}}{R_2} \sqrt{s} \cdot th \left(\sqrt{\frac{s}{b_3}} R_2 \right) \right]} \Bigg|_{s = -v_{jn}^2},
 \end{aligned} \tag{11}$$

де v_{jn} , $j = \overline{1, \infty}$; $n = \overline{0, \infty}$ – корені трансцендентного рівняння (10).

Обчислюємо похідну знаменника у формулі (11):

$$\begin{aligned}
 & \frac{d}{ds} \left[s + b_1 \lambda^n + \beta_1 \varepsilon \frac{\sqrt{b_2}}{R_1} \sqrt{s} \cdot th \left(\sqrt{\frac{s}{b_2}} R_1 \right) + \beta_2 (1 - \varepsilon) \frac{\sqrt{b_3}}{R_2} \sqrt{s} \cdot th \left(\sqrt{\frac{s}{b_3}} R_2 \right) \right] \Bigg|_{s = -v_{jn}^2} \\
 & = 1 + \beta_1 \varepsilon \frac{\sqrt{b_2}}{2R_1} \left(\frac{1}{v_{jn}} \operatorname{tg} \left(v_{jn} \frac{R_1}{\sqrt{b_2}} \right) + \frac{R_1}{\sqrt{b_2}} \frac{1}{\cos^2 \left(v_{jn} \frac{R_1}{\sqrt{b_2}} \right)} \right) + \\
 & + \beta_2 (1 - \varepsilon) \frac{\sqrt{b_3}}{2R_2} \left(\frac{1}{v_{jn}} \operatorname{tg} \left(v_{jn} \frac{R_2}{\sqrt{b_3}} \right) + \frac{R_2}{\sqrt{b_3}} \frac{1}{\cos^2 \left(v_{jn} \frac{R_2}{\sqrt{b_3}} \right)} \right)
 \end{aligned}$$

У результаті вираз (11) набуде вигляду:

$$L^{-1} \left[\frac{1}{s + b_1 \lambda^n + \beta_1 \varepsilon \frac{\sqrt{b_2}}{R_1} \sqrt{s} \cdot th \left(\sqrt{\frac{s}{b_2}} R_1 \right) + \beta_2 (1 - \varepsilon) \frac{\sqrt{b_3}}{R_2} \sqrt{s} \cdot th \left(\sqrt{\frac{s}{b_3}} R_2 \right)} \right] = \sum_{j=1}^{\infty} \frac{e^{-v_{jn}^2 t}}{1 + \Phi(v_{jn})}$$

де

$$\Phi(v_{jn}) = 1 + \beta_1 \varepsilon \frac{\sqrt{b_2}}{2R_1} \left(\frac{1}{v_{jn}} \operatorname{tg} \left(v_{jn} \frac{R_1}{\sqrt{b_2}} \right) + \frac{R_1}{\sqrt{b_2}} \frac{1}{\cos^2 \left(v_{jn} \frac{R_1}{\sqrt{b_2}} \right)} \right) + \beta_2 (1 - \varepsilon) \frac{\sqrt{b_3}}{2R_2} \left(\frac{1}{v_{jn}} \operatorname{tg} \left(v_{jn} \frac{R_2}{\sqrt{b_3}} \right) + \frac{R_2}{\sqrt{b_3}} \frac{1}{\cos^2 \left(v_{jn} \frac{R_2}{\sqrt{b_3}} \right)} \right)$$

Переходимо до оригіналів за Лапласом:

$$L^{-1} \left[\frac{\operatorname{sh} \sqrt{\frac{s}{b_2}} R_1}{\sqrt{\frac{s}{b_2}} R_1 \cdot \operatorname{ch} \sqrt{\frac{s}{b_2}} R_1} \right] = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{i(-1)^k e^{-b_2 \eta_k^2 t}}{\frac{d}{ds} \left[\sqrt{\frac{s}{b_2}} R_1 \cdot \operatorname{ch} \sqrt{\frac{s}{b_2}} R_1 \right]_{s=-\eta_k^2}} = -b_2 \frac{2}{R_1^2} \sum_{k=0}^{\infty} e^{-b_2 \eta_k^2 t}.$$

$$L^{-1} \left[\frac{\operatorname{sh} \sqrt{\frac{s}{b_3}} R_2}{\sqrt{\frac{s}{b_3}} R_2 \operatorname{ch} \sqrt{\frac{s}{b_3}} R_2} \right] = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{i(-1)^k e^{-b_3 \mu_k^2 t}}{\frac{d}{ds} \left[\sqrt{\frac{s}{b_3}} R_2 \operatorname{ch} \sqrt{\frac{s}{b_3}} R_2 \right]_{s=-\mu_k^2}} = -b_3 \frac{2}{R_2^2} \sum_{k=0}^{\infty} e^{-b_3 \mu_k^2 t} \quad (12)$$

У результаті перетворень отримуємо оригінал функції P_1

$$P_1(t, z) = P_E \frac{2}{h} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{j=1}^{\infty} \frac{e^{-v_{jn}^2 t}}{\Phi(v_{jn})} \left[1 - \beta_1 \varepsilon \frac{2}{R_1^2} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1 - e^{-b_2 \left(\eta_k^2 - \frac{v_{jn}^2}{b_2} \right) t}}{\left(\eta_k^2 - \frac{v_{jn}^2}{b_2} \right)} - \beta_2 (1 - \varepsilon) \frac{2}{R_2^2} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1 - e^{-b_3 \left(\mu_k^2 - \frac{v_{jn}^2}{b_3} \right) t}}{\left(\mu_k^2 - \frac{v_{jn}^2}{b_3} \right)} \right] \frac{\sin \lambda_n z}{\lambda_n}, \quad (13)$$

що описує розподіли тисків в міжчастинковому просторі *interparticle space*.

Тут $\nu_{jn}, j=\overline{1,\infty}; n=\overline{0,\infty}$ – корені трансцендентного рівняння (10).

$$\eta_k = \frac{(2k+1)\pi}{2R_1}, \quad k=\overline{0,\infty} \text{ – корені рівняння } ch\left(\sqrt{\frac{s}{b_2}}R_1\right)=0, \quad (s=i\eta, \quad i \text{ – уявна}$$

$$\text{одиниця), } \mu_k = \frac{(2k+1)\pi}{2R_2}, \quad k=\overline{0,\infty} \text{ – корені рівняння } ch\left(\sqrt{\frac{s}{b_3}}R_2\right)=0, \quad (s=i\mu)$$

$$\lambda_n = \frac{2n+1}{2h}\pi \text{ – спектральні числа інтегрального перетворення Фур'є (Sin Фур'є).}$$

Підставляючи у формули (7) аналітичний вираз розподілів тиску в міжчастинковому просторі $P_1(t,z)$, розрахований за формулою (13), отримуємо остаточні вирази для визначення просторово-часових розподілів тисків $P_2(t,x, z)$ та $P_3(t,x,z)$ у просторах нанопористих частинок: внутрішньочастинкових просторів *intraparticle space 1* та *intraparticle space 2* відповідно.

Чисельне моделювання та обговорення. У рамках етапу моделювання розроблено спеціальний програмний комплекс для дослідження внутрішньої кінетики складних процесів нанофільтрації і нанодифузії в середовищах з різнорозмірними нанопористими частинками. Таке програмне забезпечення створено з використанням сучасного підходу до розробки програмного забезпечення та з урахуванням найкращих практик програмної інженерії. Результати дослідження кінетики процесів нанофільтрації і нанодифузії для вказаної системи нанопросторів представлені нижче.

Параметри нанопроцесу, які використовуються для моделювання: $h=0,01$ м, $R_1=0,008$ м, $R_2=0,004$ м, $b_1 = 10^{-7}$ м²/с, $b_2 = 2 \cdot 10^{-7}$ м²/с, $b_3 = 10^{-8}$ м²/с, $\beta_1 = 0,1$, $\beta_2 = 0,15$, $\varepsilon = 0,5$. Наносередовище складається з двох типів різнорозмірних нанопористих частинок з різними нанофізичними властивостями.

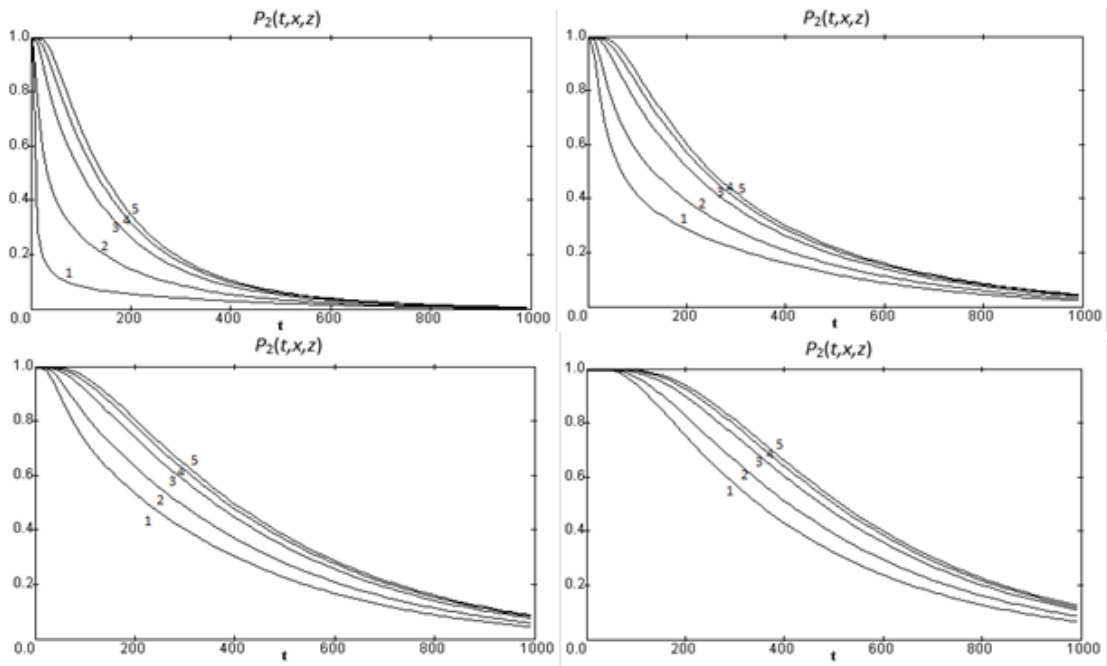


Рис. 1. Розподіл безрозмірного тиску у внутрішньочастинковому просторі $P_2(t,x,z)$ від часу t , [с] в різних ділянках безрозмірного шару: а) $Z=0,05$; б) $Z=0,25$; в) $Z=0,5$; г) $Z=1$ ($Z=z/\text{год}$); 1 – $X=1,0$ 2 – $X=0,8$; 3 – $X=0,6$; 4 – $X=0,4$; 5 – $X=0,05$ ($X=x_1/R_1$)

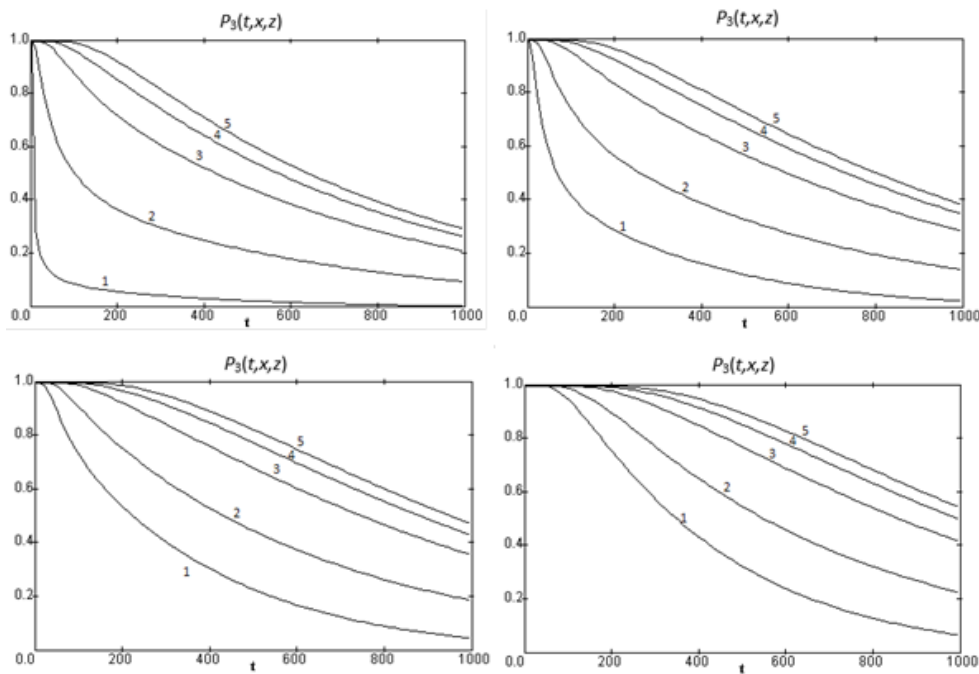


Рис. 2. Розподіл безрозмірного тиску у внутрішньочастинковому просторі $P_3(t,x,z)$ від часу t , [с] в різних перерізах безрозмірного шару: а) $Z=0,05$; б) $Z=0,25$; в) $Z=0,5$; г) $Z=1$ ($Z=z/\text{год}$); 1 – $X=1,0$ 2 – $X=0,8$; 3 – $X=0,6$; 4 – $X=0,4$; 5 – $X=0,05$ ($X=x_2/R_2$)

На Рис. 1 показано безрозмірні профілі тиску рідини всередині нанопористих частинок першого типу $P_2(t,x,z)$ за час $t[s]$. Часові профілі тиску моделювали для різних ділянок шару: $Z=1$ (верхня частина шару), $Z=0,5$ і $Z=0,25$ (середня частина шару) і $Z=0$ (поверхня фільтруючого середовища. На запропонованих зображеннях Зрозуміло, що тиск рідини вище в центрі нанопористих частинок ($X=0,05$) і знижується в напрямку витіснення рідини на поверхню частинок $X=1$ (). На краю частинок тиск у нанопорах прагне до тиску в макропорах. $P_1(t,z)$. Також варто зазначити, що тиск рідини падає швидше на поверхні частинок ($X=1$), ніж у середніх секціях (0,4, 0,6, 0,8) або в центрі частинок ($X=0,05$). Різниця між часовими профілями тиску стає більш суттєвою для частинок, розташованих поверх останніх ($Z=0$). Проте навіть на ділянках, близьких до центральної осі частинок ($X=0$), тиск рідини падає досить швидко.

На Рис. 2 показані часові профілі безрозмірного тиску рідини всередині пористих частинок другого типу (малих) за час $t[s]$. Як і раніше, часові профілі тиску були змодельовані для чотирьох різних секцій шару: $Z=1, 0,25, 0,5$ і $0,05$. Коефіцієнт консолідації для цих типів частинок характеризує менше зруйновану клітинну тканину порівняно з частинками першого типу. Як і в попередньому прикладі, представлені профілі показують, що падіння тиску рідини на поверхні частинок ($X=1$) відбувається швидше, ніж для ділянок, близьких до центру частинки ($X=0,05$), а загальне зниження є більш значним, коли Z призводить до 0. Проте помітне уповільнення падіння тиску рідини можна виявити в нанопорах частинок.

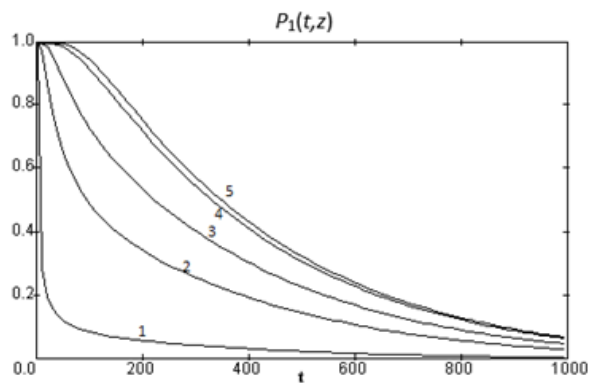


Рис. 3. Розподіл безрозмірного тиску в міжчастинковому просторі $P_1(t,z)$:

1 – $Z = 0.05$, 2 – $Z = 0.3$, 3 – $Z = 0.5$, 4 – $Z = 0.7$; 5 – $Z=1.0$ ($Z=z/h$)

Висновки до розділу 3

У цьому розділі роботі для різномасштабних некласичних моделей нанофільтрації та нанодифузії у насичених середовищах різнопористих нанопористих частинок сформульовані задачі ідентифікації кінетичних параметрів моделей з використанням функціоналів-нев'язки, що враховують зміну сумарного потоку рідини на поверхні спостереження. Запропоновано високопродуктивні методи реалізації задач ідентифікації (коефіцієнтів консолідації b_1 , b_2 у внутрішньочастинковому та міжчастинковому просторах та фактору пружності матеріалу β) як функцій від часу на основі аналітичних розв'язків прямих і спряжених задач, отримані явні вирази компонентів градієнтів функціоналів-нев'язки для реалізації високопродуктивних процедур ідентифікації параметрів моделі. Такий підхід при реалізації адекватних схем лінеаризації моделей забезпечує більш повний опис механізму вологоперенесення з простору мікропор і взаємовпливу мікро- і макропотоків на поведінці рідкої та твердої фази в цілому, явний аналітичний зв'язок між визначальними і лімітуючими параметрами переносу (тисками в рідкій фазі макро- і нанопор P_1 , P_2 та компресійно-кінетичними параметрами b_1 , b_2 , β). Виконано чисельну ідентифікацію та аналіз зазначених параметрів моделі.

Чисельні та аналітичні розв'язки для розподілу тиску та коефіцієнта консолідації були отримані для реального нанопористого матеріалу з двома різними характеристиками стисливості та проникності. Результати показують сповільнене падіння тиску у внутрішньочастинковій мережі та уповільнення кінетики нанофільтрації для різнорозмірних нанопористих частинок. В рамках наукоємних інформаційних технологій для дослідження складних процесів нанофільтрації в середовищах з різнорозмірними нанопористими частинками на основі описаної математичної моделі побудовано спеціальний програмний комплекс. Основними цілями, які переслідували при проектуванні програмного комплексу, були можливість швидкого вивчення процесів нанофільтрації для науковців, можливість роботи на будь-яких сучасних платформах, високопродуктивне чисельне моделювання та дружній UI/UX. Використання

найкращих практик розробки програмного забезпечення дозволило створити дизайн програмного забезпечення, який можна було б легко розширити або вдосконалити в майбутньому з можливістю додавання нових функцій та вдосконалень.

Список використаної літератури

1. Zhuw H. X., Melrose, J. R. A mechanics model for the compression of plant and vegetative tissues. *Journal of Theoretical Biology*. 2003. No. 221. P. 89–101.
2. Schwartzberg H. G. Expression of fluid from biological solids. *Separation and Purification Methods*. 1997. No. 26 (1). P. 1–213.
3. Barenblatt G. I., Entov V. M., Ryzhik V. *Theory of fluid flows through natural rocks*. Dordrecht: Kluwer, 1990. 303 p.
4. Grimi N., Vorobiev E., Lebovka N., Vaxelaire J. Solid-liquid expression from denaturated plant tissue: Filtration-consolidation behavior. *Journal of Food Engineering*. 2010. No. 96 (1). P. 29–36.
5. Terzaghi K. *Erdbaumechnik auf Bodenphysikalischer Grundlage*. Wien. Deuticke, 1925.
6. Suclje L. *Rheological aspects of soil mechanics*. New York: Wiley Interscience, 1970.
7. Shirato M., Murase T., Iwata, M., Nakatsuka S. The Terzaghi-Voigt combined model for constant pressure consolidation of filter cakes and homogeneous semi-solid materials. *Chemical Engineering Science*. 1986, Vol. 41. P. 3213–3218.
8. Lanoisell, J.-L., Vorobyov E. Bouvier J.-M., Piar G. Modelling of solid. liquid expression for cellular materials. *AIChE Journal*. 1996. Vol. 42 (7). P. 2057–2067.
9. Petryk M., Vorobiev E. Numerical and Analytical Modelling of Solid-Liquid Expression from Soft Plant Materials. *AIChE Journal*. Wiley USA. 2013. Vol. 59 (12). P. 4762–4771.
10. Petryk M., Vorobiev E. Liquid Flowing from Porous particles During the Pressing of Biological Materials. *Computer & Chem. Eng.* 2007. Vol. 31 (10). P. 1336–1345.

11. Petryk M., Leclerc S., Canet D., Sergienko I., Deineka V., Fraissard J. Competitive Diffusion of Gases in a Zeolite Bed: NMR and Slice Selection Procedure, Modelling and Parameter Identification. *The Journal of Physical Chemistry C*. ACS (USA). Vol. 119. Issue 47. 2015. P. 26519–26525.
12. Petryk M. R., Boyko I. V., Khimich A. N., Petryk M. M. High-Performance Supercomputer Technologies of Simulation and Identification of Nanoporous Systems with Feedback for n-Component Competitive Adsorption. *Cybernetics and System Analysis*. Springer New York. Vol. 57 (2). 2021. P. 316–328.
13. Ленюк М. П., Петрик М.Р. Інтегральні перетворення Фур'є, Бесселя із спектральним параметром в задачах математичного моделювання масопереносу в неоднорідних середовищах. К: Наукова думка, 2000. 372 с.
14. Petryk M., Gancarczyk T., Khimich O. *Methods of Mathematical Modeling and Identification of Complex Processes and Systems on the basis of High-performance Calculations (neuro- and nanoporous feedback cyber systems, models with sparse structure data, parallel computations)*. Scientific Publishing University of Bielsko-Biala. Bielsko-Biala, Poland, 2021. 194 p.
15. Sergienko I. V., Petryk M. R., Leclerc S., Fraissard J. High productivity methods of identification of competitive diffusion parameters in heterogeneous media of nanoporous particles. *Cybernetics and Systems Analysis*. 2015.51 (4). P. 529–546.
16. Сергієнко І. В., Петрик М. Р., Хіміч О. М., Кане Д., Михалик Д. М., Леклерк С. Фресар. Математичне моделювання масопереносу в середовищах частинок нанопористої структури. К.: Національна академія наук України. Інститут кібернетики імені В. М. Глушкова, 2014. 210 с.
17. Doetsch G. *Handbuch der Laplace-Transformation: Band I: Theorie der Laplace-Transformation*. Springer Basel AG, 2013. 438 p.
18. Petryk M. R. High Velocity Identification Methods of the Model Parameters of Filtration-Consolidation of Compressible Media of Moisture-Saturated Micro-Porous Particles. *Journal of Automation and Information Sciences*. 2016. Vol. 48 (1). P. 69–83.

РОЗДІЛ 4. ВИСОКОПРОДУКТИВНІ ТЕХНОЛОГІЇ МОДЕЛЮВАННЯ НА СУПЕРКОМП'ЮТЕРІ МАКРО- І НАНОФІЛЬТРАЦІЇ І НАНОДИФУЗІЇ В ПРОСТОРІ РІЗНОРОЗМІРНИХ НАНОПРИСТИХ ЧАСТИНОК МЕТОДОМ МОНТЕ-КАРЛО

1. Аналіз стану досліджень

Проблеми, пов'язані з теорією, моделюванням і практичним використанням розділення твердої фази і рідини шляхом фільтрації, постійно привертають велику увагу [1] [2]. У процесі нанофільтрації середовища нанопористих частинок суспензія фільтрується через мембрану з нанопорами, меншими за діаметри деяких частинок [3] [4]. Розділення відбувається з утворенням нанопористого шару на поверхні мембрани, і товщина шару з часом збільшується. Нанофільтрація середовищ нанопористих частинок має широке застосування в біотехнології, обробці води та стічних вод, мінеральній, хімічній, фармацевтичній та нафтовій промисловості. Загалом, фільтраційні властивості можуть суттєво залежати від структури мікро- нанопористих частинок, гранулометричного складу, пористості та інших властивостей середовища [5]. У процесі нанофільтрації можливе внутрішнє та зовнішнє забруднення мембрани (пов'язане з накопиченням відкладень всередині пор мембрани або на поверхні мембрани відповідно). Таке своєрідне фольгування призвело до збільшення опору фільтрації та зниження продуктивності мембрани. Для дослідження процесів нанофільтрації утворення та зростання шару нанопористих частинок різних розмірів широко застосовують метод комп'ютерного моделювання [6]. Для бідисперсної суміші нанопористих частинок в комп'ютерних експериментах спостерігалися складні немонотонні залежності пористості та гідравлічного опору від співвідношення розмірів малих і великих частинок та їх концентрації [7]. Поведінка забруднення в тупиковій нанофільтрації була чисельно змодельована за допомогою складної моделі, що враховує вплив руху частинок на потік рідини, а також потоку рідини на рух частинок [8]. Було обговорено вплив розподілу нанопористих частинок за розміром і різних робочих змінних.

Для дослідження структури шару нанопористих частинок у прилеглий до мембрани (тупиковій) зоні фільтрації використовували модель Монте-Карло з урахуванням різних колоїдних властивостей частинок, взаємодії між ними та їх об'ємної частки [9]. Було проведено моделювання потоку твердих нанопористих частинок, що проходить через пори мембрани в умовах тупикової фільтрації та постійного тиску [10]. Модель враховує тертя кочення, що діє на частинки, і концентрацію частинок на явище закупорювання нанопор. Модель також була застосована для моделювання багатокomпонентної системи, що складається з двох типів частинок з різними коефіцієнтами тертя кочення. Експериментальні дослідження тупикової нанофільтрації суміші частинок (колоїдного золота (50 нм) і латексу (1 мкм)) показали, що присутність частинок латексу порушує формування шару «самовідторгнення», утвореного частинками золота [11]. Було продемонстровано, що утворення шару нанопористих частинок з дрібних частинок поверх великих частинок або шару змішаних частинок може впливати на властивості середовища завдяки комбінованому ефекту. Експериментально досліджено тупикову нанофільтрацію з блокуванням пор і утворенням шару нанопористих частинок [12]. Спостерігали три стадії нанофільтрації. Перші два етапи включали механізм блокування пор, а останній етап включав фільтрацію шару частинок. Експерименти з візуальної характеристики засмічення мембрани та утворення шару нанопористих частинок під час нанофільтрації бідисперсної суспензії частинок полістиролу виявили залежність товщини та пористості шару від складу суміші [13]. Експериментально досліджено вплив співвідношення змішування бінарних дрібних частинок на щільність їх упакування та фільтраційні характеристики [14].

Було продемонстровано, що питомий опір фільтрації шару нанопористих частинок різних розмірів кеку зростає зі збільшенням частки дрібних частинок, а найменша пористість шару спостерігається при об'ємній частці великих частинок 0,75. Конфокальна лазерна скануюча мікроскопія була застосована для дослідження накопичення шару нанопористих частинок

під час тупикової нанофільтрації моно- та бідисперсних сумішей частинок полістиролу [15]. Бідисперсні системи з двома розмірами частинок (1 мкм і 4,8 мкм) були відфільтровані на порах діаметром 0,8 мкм. Було вивчено зв'язок між опором осаду та організацією частинок і було продемонстровано, що дрібні частинки мали визначальний ефект під час нанофільтрації. Нещодавно утворення шару нанопористих частинок під час тупикової нанофільтрації в бідисперсних суспензіях частинок латексу при тупиковій нанофільтрації було досліджено за допомогою мережевого моделювання та оптичної когерентної томографії [16] [17].

Виявлено складні взаємозв'язки між початковою швидкістю осадження частинок, питомою стійкістю до шару та концентрацією різних видів у мережеских моделюючих дослідженнях. Оптичні дослідження з'ясували залежності між однорідністю шару і відносною концентрацією частинок. Проведено експериментальні дослідження забруднення мембран сумішами протилежно заряджених частинок [18]. Забруднення як зовнішньої, так і внутрішньої мембрани відстежувалося в режимі реального часу. Результати виявили досить несподівану поведінку забруднення для досліджуваних сумішей.

Тому дослідження даного розділу присвячене моделюванню та з'ясуванню внутрішніх механізмів і зворотних впливів тупикової нанофільтрації бідисперсних суспензій частинок за допомогою методу моделювання Монте-Карло (Monte-Carlo, MC) на суперкомп'ютері. Досліджено неперервну 2D модель вертикальної нанофільтрації бінарної суміші частинок сферичної форми двох різних діаметрів d і D ($D > d$). Досліджено вплив таких змінних, як числові концентрації малих (f_d) і великих (f_D) частинок, співвідношення діаметрів d/D і початковий розмір систем у вертикальному напрямку L_y . Розділ структуровано таким чином. У підрозділі 2 описані основні визначення та техніка обчислень, а також визначені всі необхідні величини. Підрозділ 3 представляє наші основні висновки та обговорення. Нарешті, у підрозділі 4 представлені деякі заключні зауваження.

2. Основні визначення та методика обчислень

Початкове пакування бінарних суспензій частинок з двома діаметрами d і D ($D > d$) у рідині здійснювали шляхом їх осадження на площину за умови відсутності перетинів. Усі відстані були виміряні з використанням діаметра більшої частинки, D , як одиниці довжини. У горизонтальному напрямку розмір систем був L_x і застосовувалися періодичні граничні умови. Моделювання процедури вертикальної фільтрації передбачало одночасний броунівський рух частинок і рух поршня вниз. Мембрана внизу була проникною для частинок меншого діаметру d (Рис. 1). У вертикальному напрямку довжина системи ((висота), h , зменшувалася з часом, починаючи з $h = L_y$ у початковий момент часу. Чисельні концентрації частинок оцінювали як $f_{d,D} = N_{d,D} / L_x L_y$, де N_d і N_D – кількість осаджених малих і великих частинок відповідно. Досліджувалися бінарні суміші з різними чисельними концентраціями f_D (для більших частинок) і f_d (для менших частинок).

Броунівську дифузію моделювали за допомогою кінетичної процедури МС. На кожному кроці випадковим чином вибирали довільну частинку та враховували поступальні дифузійні рухи. На кожному кроці МС зсув частинки в довільному напрямку Δr здійснювався з ймовірністю відповідно до її коефіцієнтів дифузії, яка була обернено пропорційною діаметру нанопористої частинки. Значення максимального зсуву МС було вибрано таким, щоб бути достатньо малим, щоб отримати задовільну прийнятність зміщення МС ($\approx 0,5$) [19]. Кожний крок МС t_{MC} відповідав спробі переміщення загальної кількості частинок, присутніх у системі.

Початкові упаковки частинок перед процедурою вертикальної фільтрації були врівноважені броунівською дифузією протягом достатньо тривалого часу $t_{MC} = 10^4 - 10^6$ (одиниці часу МС). Загальна тривалість симуляції процедури вертикальної нанофільтрації зазвичай становила $t_{MC} = 10^6$. Рух поршня моделювався безперервним низхідним заміщенням верхньої межі та сусідніх частинок на відстані не більше їхнього діаметра з відносно малою постійною швидкістю $d_h / dt_{MC} = 10^{-4}$ (одиниці часу МС). ($L_y / t_{MC} = 10^{-4}$).

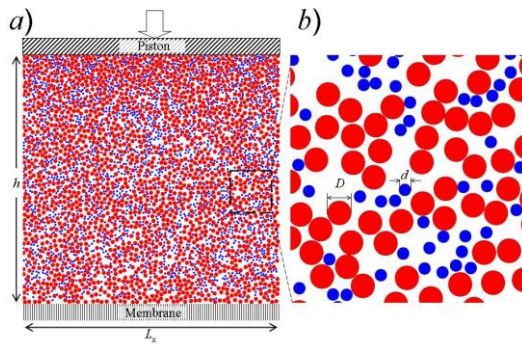


Рис. 1. Ілюстрація змодельованих моделей тупикової фільтрації бінарної суміші частинок. У лівій частині зображено збільшений малюнок. Тут відношення діаметрів частинок становило $d/D=0,5$, а числові концентрації менших і більших частинок становили $f_d=0,5$, $f_D=0,5$ відповідно

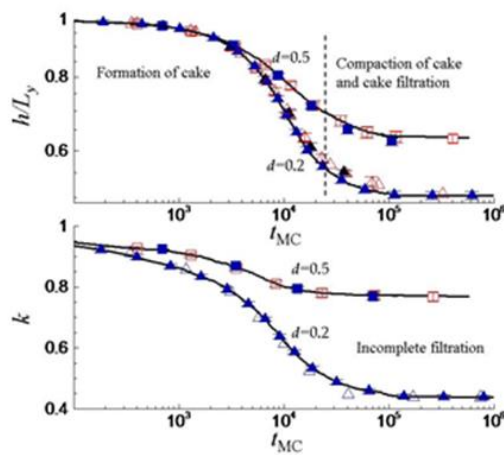


Рис. 2. Приклади часових залежностей нормованої висоти h/L_y та коефіцієнта фільтрації k при двох значеннях $L_x=32$ (відкриті символи) та $L_x=64$ (закриті символи). Чисельні концентрації дрібніших і більших частинок становили $f_d=0,9$, $f_D=0,1$ відповідно. Початкова висота у вертикальному напрямку становила $L_y=32$. Дані представлені для двох значень меншого діаметра частинок $d=0,2$ і $d=0,5$

Коефіцієнт нанофільтрації k визначався як відносна частка більш дрібних частинок у фільтрованій суспензії, тобто $k=N_d/N_d(\text{ini})$. У початковий момент часу $k=1$ і безперервно зменшується під час нанофільтрації. Для повної фільтрації, тобто при повній евакуації дрібніших часток із суміші значення k наближається до 0 на кінцевих етапах нанофільтрації. У попередньому розрахунку вплив розміру системи в горизонтальному напрямку було оцінено L_x . На Рис. 2 представлені

типові приклади часових залежностей нормованої висоти h/L_y і коефіцієнта нанофільтрації k при двох значеннях $L_x=32$ (відкриті символи) і $L_x=64$ (закриті символи). Отримані дані показали, що ефекти масштабування були незначними при $L_x=64$, і всі розрахунки були зроблені з використанням цього значення L_x . Початкову довжину систем у вертикальному напрямку змінювали в межах $L_y=4-64$. У дослідженнях впливу концентрації частинок значення f_d змінювалося в межах $f_d=0,1-1$, і основні результати представлені лише для окремого випадку $f_D=1-f_d$.

Для кожного заданого значення параметрів d , f_d комп'ютерні експерименти повторювали 100 разів, а потім дані усереднювали. Смуги похибок на малюнках відповідають стандартному відхиленню середнього значення. Якщо не показано явно, вони мають розмір порядку маркера.

3. Результати і обговорення

На Рис. 3 представлені взаємозв'язки між коефіцієнтом нанофільтрації, k , і нормалізованою висотою фільтраційного безрозмірного шару h/L_y під час процесу нанофільтрації. Дані наведено для різних значень $d=0,25-0,9$, фіксованих чисельних концентрацій і $f_d=0,9$ і $L_x=64$, $L_y=32$. Фільтрація починається з $k=1$ і $h/L_y=1$ і в кінцевій точці спостерігаються різні кінцеві значення k_f і h_f/L_y в залежності від меншого діаметра наночастинок, d . Для частинок відносно невеликого розміру ($d<0,5$) можлива повна нанофільтрація з відкачуванням усіх дрібних частинок через нижню мембрану.

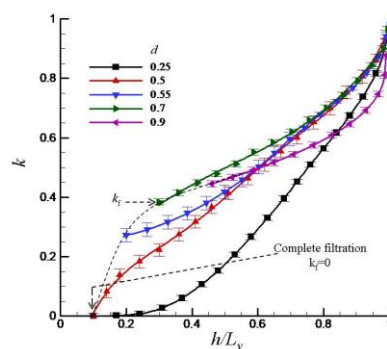


Рис. 3. Залежність коефіцієнта нанофільтрації k від нормалізованої висоти фільтраційного шару h/L_y при різних значеннях меншого діаметра частинок d . Чисельні концентрації дрібніших і більших частинок становили $f_d=0,9$, $f_D=0,1$ відповідно. Дані представлені для $L_x=64$ і $L_y=32$

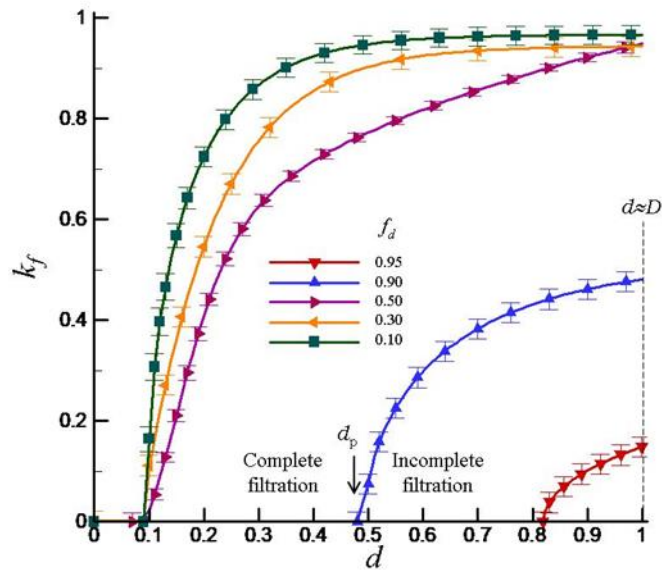


Рис. 4. Залежність кінцевого коефіцієнта нанофільтрації k_f від меншого діаметра частинок, d , при різних значеннях чисельних концентрацій менших, f_d , частинок. Дані представлені для $L_x=64$ і $L_y=32$, а також $f_D=1-f_d$. Тут d_p – критичний діаметр нанофільтрації (перколяції)

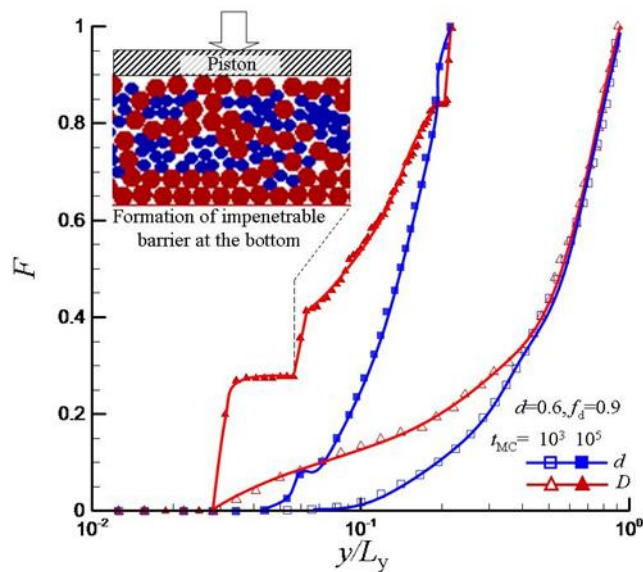


Рис. 5. Приклади інтегральних функцій розподілу частинок $F(y/L_y)$ уздовж вертикальної осі для окремого випадку режиму неповної нанофільтрації. Дані представлені на початковому ($t_{MC}=10^3$) і кінцевому ($t_{MC}=10^5$) етапах фільтрації для $d=0,6$, $f_d=0,9$, $L_x=64$ і $L_y=32$, і $f_D=1-f_d$. Вставка показує типову схему при $t_{MC}=10^5$

Вплив значення d на кінцеві коефіцієнти нанофільтрації при різних концентраціях більш дрібних частинок f_d представлено на Рис. 4. Добре видно,

що перехід між повною та повною фільтрацією спостерігається при певному значенні діаметра частинок d_p (перколяція діаметр).

Цікаво, що для фільтрації частинок із приблизно однаковими діаметрами ($d \approx D=1$) спостерігалася значна залежність k_f від f_d . У цьому випадку нанофільтрація спостерігалась як досить ефективна (з малими значеннями k_f) лише для малих значень f_d і ставала досить неефективною для $f_d > 0,5$. Явище неповної нанофільтрації можна пояснити утворенням непроникного бар'єру з більших частинок на дні осаду.

Для ілюстрації на Рис. 5 представлено приклади інтегральних функцій розподілу частинок $F(y/L_y)$ уздовж вертикальної осі y . Дані представлені для окремого випадку $d=0,6$, $f_d=0,9$, $f_D=0,1$ на проміжній ($t_{MC}=103$) і кінцевій ($t_{MC}=105$) стадіях нанофільтрації для $L_x=64$, $L_y=32$. Для цього конкретного випадку спостерігався неповний процес нанофільтрації (Рис. 4). Інтегральний розподіл $F(y/L_y)$ відповідає відносній кількості частинок у шарі під вертикальною координатою $y (\leq h)$ (Рис. 5).

У початковий момент часу ($t_{CM}=0$) просторовий розподіл обох типів частинок є однорідним і значення $F(y/L_y)$ лінійно збільшуються з y/L_y . У проміжному періоді ($t_{MC}=103$) на дні утворилися збіднений і збагачений шари для менших і більших частинок відповідно. Висота збагаченого більшими частинками шару становила 1–2 D .

Значення критичного фільтраційного (перколяційного) діаметра d_p зростало зі збільшенням концентрації більш дрібних частинок f_d , причому найбільш значні зміни спостерігалися при $f_d > 0,7$ (рис. 6). Початкова висота системи у вертикальному напрямку L_y є важливим параметром, який впливає на поведінку фільтрації (Рис. 7).

На Рис. 6 наведено приклади залежностей кінцевого коефіцієнта нанофільтрації k_f і відносної висоти осаду h_f/L_y від початкового розміру системи у вертикальному напрямку. Дані представлені для діаметра меншої частинки $d=0,5$, чисельної концентрації меншої частинки $f_d=0,5$, $L_x=64$ і $f_D=1-f_d$. На вставці показано типові закономірності при різних значеннях L_y .

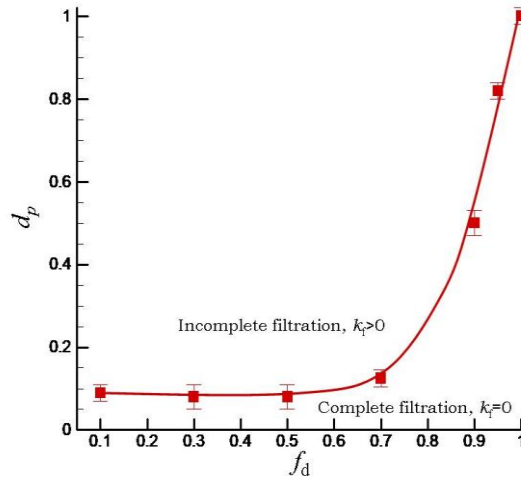


Рис. 6. Критичний фільтраційний (перколяційний) діаметр для менших частинок, d_p , від чисельних концентрацій менших частинок, f_d . Дані представлені при $L_x=64$, $L_y=32$ і $f_D=1-f_d$. Кінцевий коефіцієнт фільтрації k_f зростає зі збільшенням L_y і різкий перехід від повної до неповної нанофільтрації спостерігався при деякому перехідному значенні $L_y^t \approx 4$

Тому ефективна нанофільтрація з малими значеннями k_f може бути виконана лише для досить низьких значень L_y нижче L_y^t . Спостережувану поведінку можна пояснити ефектами утворення непроникних бар'єрів із більших частинок на дні відкладень, подібних до представлених на Рис. 5.

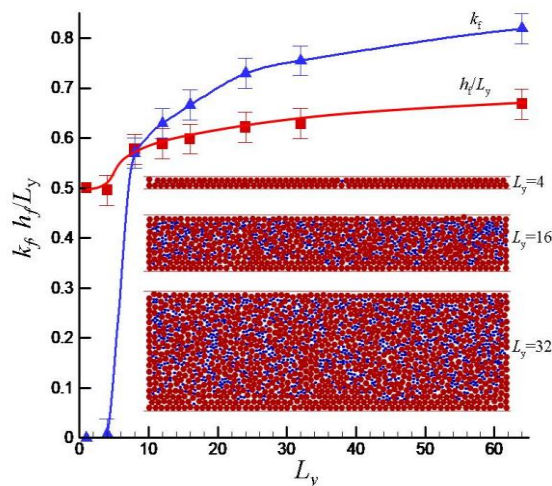


Рис. 7. Приклади залежностей кінцевого коефіцієнта фільтрації k_f та відносної висоти шару осаду h_f/L_y від початкової висоти системи L_y . Дані представлені для діаметра меншої частинки $d=0,5$, чисельної концентрації меншої частинки $f_d=0,5$, $L_x=64$ і $f_D=1-f_d$. На вставці показано типові закономірності при різних значеннях L_y

Висновки до розділу 4

Безперервну 2D модель вертикальної нанофільтрації бідисперсної суспензії суміші сферичних нанопористих частинок з двома діаметрами d і D ($D > d$) досліджено методом МС моделювання. Отримали початковий однорідний стан перед нанофільтрацією. Передбачалося, що мембрана внизу була проникною для частинок меншого діаметру d і непроникною для частинок більшого діаметру D . При моделюванні вертикальної нанофільтрації враховувався одночасний броунівський рух частинок і рух поршня вниз. Досліджено бінарні суміші з різними параметрами (числовими концентраціями малих (f_d) і великих (f_D) частинок, співвідношенням діаметрів d/D і початковим розміром систем у вертикальному напрямку L_y). Залежності від часу коефіцієнта нанофільтрації k (визначається як відносна частка більш дрібних частинок у фільтрованій суспензії, тобто $k = N_d/N_d(\text{ini})$) і відносної висоти суспензії h/L_y виявили наявність режимів повної та неповної нанофільтрації.

Для повного режиму нанофільтрації кінцевий коефіцієнт фільтрації k_f наближається до 0 на кінцевих етапах нанофільтрації. Отримані дані виявили наявність нанофільтраційно-дифузійного розшарування нанопористих частинок сферичної форми різного діаметру у вертикальному напрямку. Явище неповної нанофільтрації пояснювалося утворенням непроникного бар'єру з нанопористих частинок більшого діаметру на дні шару. Прояв цього явища сильно залежав від параметрів фільтрованих суспензій. Зокрема, значення критичного фільтраційного (перколяційного) діаметра d_p , необхідного для переходу від повної ($k_f=0$) до неповної ($k_f>0$) нанофільтрації, зростало зі збільшенням концентрації дрібних нанопористих частинок f_d .

Безумовно, представлена 2D модель для сумішей нанопористих частинок сферичної форми різного діаметру сферичних нанопористих частинок, але розгляд 3D систем все ще займає вкрай багато часу. У майбутніх дослідженнях бажано розглядати більш реалістичні системи, що враховують взаємодію між нанопористими частинками, їхню полідисперсність та різну здатність до нанофільтрації та засмічення мембран сумішами.

Список використаної літератури

1. J. Olivier, J. Vaxelaire, and E. Vorobiev, Modelling of Cake Filtration: An Overview, *Sep. Sci. Technol.* 42, 1667. 2007.
2. H. Anlauf, *Wet Cake Filtration: Fundamentals, Equipment, and Strategies* (John Wiley & Sons, 2019).
3. C. Tien, *Introduction to Cake Filtration: Analyses, Experiments and Applications* (Elsevier, 2006).
4. Petryk M., Vorobiev E. Numerical and Analytical Modelling of Solid-Liquid Expression from Soft Plant Materials. *AIChE J. Wiley USA.* Vol. 59. Issue 12. 2013. P. 4762–4771.
5. S. S. Haramkar, G. N. Thombre, S. V Jadhav, and B. N. Thorat, The Influence of Particle (s) Size, Shape and Distribution on Cake Filtration Mechanics – a Short Review, *Comptes Rendus. Chim.* 24, 255 (2021).
6. L. A. Ni, A. B. Yu, G. Q. Lu, and T. Howes, Simulation of the Cake Formation and Growth in Cake Filtration, *Miner. Eng.* 19, 1084 (2006).
7. J. G. Dueck, Porosity and Hydraulic Resistance of a Bidisperse Mixture, *J. Eng. Phys. Thermophys.* 80, 662 (2007).
8. K. Akamatsu, S. Kanasugi, M. Fujita, and S. Nakao, Numerical Simulation of Fouling by Particles in Dead-End Constant-Pressure Microfiltration, *Math. Monogr.* 9, 65 (2016).
9. K. Guan, Y. Liu, X. Yin, W. Zhu, Y. Chu, C. Peng, M. Lv, Q. Sun, P. Rao, and J. Wu, Influence of Operation Conditions on Cake Structure in Dead-End Membrane Filtration: Monte Carlo Simulations and a Force Model, *Chem. Eng. Res. Des.* 124, 124 (2017).
10. Y. Mino, S. Sakai, and H. Matsuyama, Simulations of Particulate Flow Passing through Membrane Pore Under Dead-End and Constant-Pressure Filtration Condition, *Chem. Eng. Sci.* 190, 68 (2018).
11. S. S. Madaeni, The Effect of Large Particles on Microfiltration of Small Particles, *J. Porous Mater.* 8, 143 (2001).

- 12.S. Kosvintsev, R. G. Holdich, I. W. Cumming, and V. M. Starov, Modelling of Dead-End Microfiltration with Pore Blocking and Cake Formation, *J. Memb. Sci.* 208, 181 (2002).
- 13.I. S. Ngene, R. G. H. Lammertink, M. Wessling, and W. G. J. der Meer, Visual Characterization of Fouling with Bidisperse Solution, *J. Memb. Sci.* 368, 110 (2011).
- 14.K.-J. Hwang and I.-L. Lin, Effects of Mixing Ratio of Binary Fine Particles on the Packing Density and Filtration Characteristics, *KONA Powder Part. J.* 2016013 (2016).
- 15.Ben Hassan, C. Lafforgue, A. Ayadi, and P. Schmitz, A Multiscale Approach to Study Dead End Microfiltration of Mono and Bidispersed Particle Suspensions, *Can. J. Chem. Eng.* 93, 404 (2015).
- 16.Q. Han, T. A. Trinh, and J. W. Chew, Cake Formation of Bidisperse Suspensions in Dead-End Microfiltration, *J. Memb. Sci.* 577, 31 (2019).
- 17.Q. Han, H. T. Lay, W. Li, and J. W. Chew, Effect of Initial Particle Deposition Rate on Cake Formation During Dead-End Microfiltration, *J. Memb. Sci.* 618, 118672 (2021).
- 18.H. T. Lay, R. Wang, and J. W. Chew, Membrane Fouling by Mixtures of Oppositely Charged Particles, *J. Memb. Sci.* 625, 119093 (2021).
- 19.D. Landau and K. Binder, *A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics*, Fifth edition (Cambridge university press, 2021).
- 20.Lebovka N., Petyk M., Vorobiev E. Monte Carlo simulation of dead-end diafiltration of bidispersed particle suspensions. *Physical Review E*. Vol. 106. 064610 (2022) DOI: 10.1103/PhysRevE.106.064610.

РОЗДІЛ 5. ДИНАМІЧНА ПРОВІДНІСТЬ РЕЗОНАНСНО-ТУНЕЛЬНИХ СТРУКТУР З НЕПАРНОЮ (ПАРНОЮ) КІЛЬКІСТЮ КВАНТОВИХ ЯМ У АКТИВНІЙ ЗОНІ КВАНТОВИХ КАСКАДНИХ ЛАЗЕРІВ ЧИ ДЕТЕКТОРІВ

1. Аналіз стану досліджень

Робота квантових каскадних лазерів та детекторів суттєво залежить від фізичних параметрів їх основних складових елементів: активної зони та інжектора в ККЛ і активної зони та екстрактора у ККД. Як відомо [1–27], геометричний дизайн активних зон обох наноприладів, в основному формує частоти випромінювання електромагнітного поля ККЛ і поглинання в ККД. Геометричний дизайн інжектора ККЛ вибирається так, щоб він забезпечував релаксацію і транспорт електронів з одного каскаду в інший у однакові квазістаціонарні стани для виконання умови когерентності.

Геометричний дизайн екстрактора ККД вибирається таким, щоб він забезпечував релаксацію енергії збудження через випромінювання фононів по так званій “фононній драбині” з тим, щоб електронний потік потрапляв у основний КСС кожного наступного каскаду.

Адекватна теорія, яка б описувала фізичні процеси у відкритих багатошарових РТС, що забезпечують роботу ККЛ та ККД, поки що відсутня. Отже, метою цього розділу є побудова теорії КСС і динамічної провідності електронів відкритими нано-РТС у постійному електричному полі з урахуванням взаємодії електронів з електромагнітним полем. Розвинута теорія дасть змогу вибором геометричного дизайну активних зон та окремих каскадів ККЛ і ККД оптимізувати роботу цих наноприладів.

Оскільки в переважній більшості експериментальних робіт вибір геометричного дизайну ґрунтується на оцінці енергетичного спектру і сил осциляторів квантових переходів у закритих системах, то для оцінки оптимальності того чи іншого геометричного дизайну активної зони та окремого каскаду буде розвинута теорія стаціонарного спектру та сил осциляторів квантових переходів у відповідних закритих системах.

2. Стаціонарний електронний спектр та сили осциляторів квантових переходів у багат шарових закритих резонансно-тунельних структурах, як грубих моделях квантових каскадних детекторів

Для оцінки частоти електромагнітного випромінювання і необхідних частот фононів для функціонування “фононної драбини” у переважній більшості експериментальних робіт [20–27] виконувався теоретичний розрахунок стаціонарного електронного спектру в спрощеній моделі окремого каскаду як двох незалежних закритих РТС, що імітують активну зону й екстрактор відповідно.

Звичайно, теорію стаціонарного електронного спектру та сил осциляторів квантових переходів у моделі прямокутних потенціалів для закритих наносистем більш доцільно і послідовно побудувати в моделі єдиної закритої РТС як окремого каскаду ККД, оскільки отримані результати можна буде порівняти з тими, що будуть отримані далі у реалістичній моделі відкритого каскаду.

Будемо вивчати плоску закриту багат шарову РТС, яка моделює окремий каскад ККД, що досліджувався в експериментальній роботі [27]. Наносистема містить п'ять шарів-бар'єрів ($\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$) та чотири шари-ями ($\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$).

Вибравши систему координат так, як показано на Рис. 1, ефективну масу і потенціальну енергію електрона в закритій РТС (без поля), запишемо у вигляді:



Рис. 1. Геометрична та енергетична схеми моделі закритого окремого каскаду квантового каскадного детектора

$$m(z) = m_1[\theta(-z) + \theta(z - b)] + m_1 \sum_{p=1}^3 [\theta(z - z_{2p-1}) - \theta(z - z_{2p})] +$$

$$+ m_0 \sum_{p=0}^3 [\theta(z - z_{2p}) - \theta(z - z_{2p+1})], \quad (1)$$

$$U(z) = U \left([\theta(-z) + \theta(z - b)] + \sum_{p=1}^3 [\theta(z - z_{2p-1}) - \theta(z - z_{2p})] \right), \quad (2)$$

де m_0, m_1 – ефективні маси електрона в ямах і бар'єрах РТС відповідно, а U – висота потенціального бар'єра.

Щоб знайти стаціонарний енергетичний спектр і хвильові функції електрона в цій системі, розв'язується стаціонарне рівняння Шредінгера

$$H(z)\Psi(z) = E\Psi(z) \quad (3)$$

з гамільтоніаном

$$H(z) = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(z)} \frac{\partial}{\partial z} + U(z), \quad (4)$$

яке з урахуванням (1), (2), записується для кожного з шарів РТС, а також зліва й справа від неї – у вигляді системи рівнянь:

$$\begin{cases} \left(\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + E \right) \Psi(z) = 0, & z \in [0, z_1] \cup [z_2, z_3] \cup [z_4, z_5] \cup [z_6, z_7], \\ \left(-\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + U - E \right) \Psi(z) = 0, & z \in (-\infty, 0] \cup [z_1, z_2] \cup [z_3, z_4] \cup [z_5, z_6] \cup [z_7, \infty). \end{cases} \quad (5)$$

Система (5) має точні розв'язки, які можна записати у вигляді

$$\Psi(z) = \Psi^{(0)}(z)\theta(-z) + \sum_{p=1}^7 \Psi^{(p)}(z)[\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p)] + \Psi^{(8)}(z)\theta(z - z_7), \quad (6)$$

де функції

$$\begin{cases} \Psi^{(0)}(z) = A^{(0)} e^{\chi z}, \\ \Psi^{(p)}(z) = \begin{cases} A^{(p)} e^{ikz} + B^{(p)} e^{-ikz}, & p = 1, 3, 5, 7 \\ A^{(p)} e^{\chi z} + B^{(p)} e^{-\chi z}, & p = 2, 4, 6 \end{cases}, \\ \Psi^{(8)}(z) = b^{(8)} e^{-\chi z}, \quad k = \hbar^{-1} \sqrt{2m_0 E}; \quad \chi = \hbar^{-1} \sqrt{2m_1(U - E)}. \end{cases} \quad (7)$$

є суперпозиціями лінійно незалежних розв'язків рівнянь (5) у відповідних областях змінної z .

На всіх межах наносистеми повинні виконуватися умови неперервності хвильових функцій і потоків їх густин:

$$\Psi^{(p)}(z_p) = \Psi^{(p+1)}(z_p); \quad \left. \frac{d\Psi^{(p)}(z)}{m(z)dz} \right|_{z=z_{p-\varepsilon}} = \left. \frac{d\Psi^{(p+1)}(z)}{m(z)dz} \right|_{z=z_{p+\varepsilon}}; \quad p = 0 \div 7; \quad (\varepsilon \rightarrow +0). \quad (8)$$

У моделі закритої системи хвильові функції повинні прямувати до нуля при $z \rightarrow \pm\infty$, що було враховано в розв'язках рівняння Шредінгера (7), де покладено $B^{(0)} = B^{(8)} = 0$. Система рівнянь (8) має нетривіальний розв'язок, який приводить до дисперсійного рівняння відносно стаціонарного енергетичного спектру (E_n),

$$\begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \frac{\chi}{m_1} & -\frac{ik}{m_0} & \frac{ik}{m_0} & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & e^{ikz_p} & e^{-ikz_p} & -e^{\chi z_p} & -e^{-\chi z_p} & 0 & 0 \\ 0 & \dots & \frac{ik}{m_0} e^{ikz_p} & -\frac{ik}{m_0} e^{-ikz_p} & -\frac{\chi}{m_1} e^{\chi z_p} & \frac{\chi}{m_1} e^{-\chi z_p} & 0 & 0 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & e^{ikz_7} & e^{-ikz_7} & -e^{-\chi z_7} \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & \frac{ik}{m_0} e^{ikz_7} & -\frac{ik}{m_0} e^{-ikz_7} & \frac{\chi}{m_1} e^{-\chi z_7} \end{pmatrix} = 0, \quad (9)$$

а з урахуванням умови нормування

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi_n^*(z) \Psi_n(z) dz = 1. \quad (10)$$

дозволяє визначити усі коефіцієнти $A^{(p)}, B^{(p)}$, а, отже однозначно знайти хвильові функції $\Psi_n(z)$ усіх станів дискретного спектру.

Знайдені хвильові функції $\Psi(z)$ і енергетичний спектр (E_n) дозволяють розрахувати сили осциляторів квантових переходів між електронними стаціонарними станами n і n' :

$$f_{mn'} = \frac{2(E_n - E_{n'})}{\hbar^2} \left\{ m_1 \left(\left| \int_{-\infty}^0 \Psi_n^{(0)*}(z) z \Psi_{n'}^{(0)}(z) dz \right|^2 + \left| \int_{z_7}^{\infty} \Psi_n^{(8)*}(z) z \Psi_{n'}^{(8)}(z) dz \right|^2 \right) + \sum_{p=0}^6 m_p \left| \int_{z_p}^{z_{p+1}} \Psi_n^{(p+1)*}(z) z \Psi_{n'}^{(p+1)}(z) dz \right|^2 \right\}, \quad (11)$$

де $m_0 = m_2 = m_4 = m_6$, $m_1 = m_3 = m_5$.

Аналіз властивостей дискретного спектру і сил осциляторів квантових переходів у конкретних РТС у залежності від їх геометричного дизайну буде виконано далі.

3. Теорія квазістаціонарного електронного спектру та активної динамічної провідності багат шарових відкритих резонансно-тунельних структур як відкритих моделей квантових каскадних детекторів

Розглядається плоска відкрита багат шарова РТС, що складається з п'яти шарів-бар'єрів з однакового напівпровідникового матеріалу ($\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$) та шістьох шарів квантових ям іншого матеріалу ($\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$), два з яких є зовнішнім середовищем (Рис. 2). Така РТС є типовою відкритою системою, що відіграє роль окремого каскаду ККД [127]. При цьому, незалежно від кількості квантових ям та бар'єрів, що складають робочий каскад ККД, його принципова структура в сучасних приладах залишається незмінною: однамна або двоямна активна зона, де відбувається квантовий перехід електрона з нижчих у вищі КСС з поглинанням енергії електромагнітного поля та екстрактор, в якому відбувається релаксація електронної енергії за рахунок випромінювання фононів [19–23].



Рис. 2. Геометрична та енергетична схеми моделі відкритого окремого каскаду квантового каскадного детектора

Будемо розглядати окремий каскад ККД, як відкриту багатошарову РТС з відомими геометричними параметрами: товщинами потенціальних бар'єрів $(\Delta_1, \Delta_2, \Delta_3, \Delta_4, \Delta_5)$ та ширинами квантових ям (b_1, b_2, b_3, b_4) .

Досліджуючи РТС у відкритій моделі, будемо вважати, що зліва, перпендикулярно до її шарів, падає моноенергетичний потік невзаємодіючих між собою електронів з енергією E і концентрацією n_0 . Оскільки різниця між сталими ґраток шарів ям a_0 і бар'єрів a_1 є малою, то в подальшому багатошарові РТС як окремі каскади ККЛ чи ККД, будемо розглядати у моделі ефективних мас та прямокутних потенціалів.

При виборі системи координат так, як показано на Рис. 2, ефективну масу і потенціальну енергію електрона у відкритій нано-РТС можна записати у такому вигляді:

$$m(z) = m_0[\theta(-z) + \theta(z - b)] + m_0 \sum_{p=1}^4 [\theta(z - z_{2p-1}) - \theta(z - z_{2p})] +$$

$$+ m_1 \sum_{p=0}^4 [\theta(z - z_{2p}) - \theta(z - z_{2p+1})]$$
(12)

$$U(z) = U \sum_{p=0}^4 [\theta(z - z_{2p}) - \theta(z - z_{2p+1})].$$
(13)

На відміну від закритої наносистеми, де потік електронів крізь неї був неможливим, потік електронів крізь відкриту РТС існує, оскільки в ній реалізуються квазістаціонарні електронні стани. Процес тунелювання електронів, взаємодіючих зі змінним у часі електромагнітним полем крізь відкриті РТС описується активною динамічною провідністю, яка виникає внаслідок електронних квантових переходів між квазістаціонарними станами з поглинанням чи випромінюванням енергії електромагнітного поля.

Для розрахунку активної динамічної провідності каскаду ККД у моделі відкритої системи потрібно знати електронний квазістаціонарний спектр і хвильові функції, для чого необхідно розв'язати одномірне стаціонарне рівняння Шредінгера

$$H(z)\Psi(z) = E\Psi(z) \quad (14)$$

з гамільтоніаном

$$H(z) = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(z)} \frac{\partial}{\partial z} + U(z). \quad (15)$$

Рівняння Шредінгера (14), записане для кожного з шарів відкритої РТС, а також зліва та справа від неї, має вигляд:

$$\begin{cases} \left(\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + E \right) \Psi(z) = 0, & z \in (-\infty, 0] \cup [z_1, z_2] \cup [z_3, z_4] \cup [z_5, z_6] \cup [z_7, z_8] \cup [z_9, \infty), \\ \left(-\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + U - E \right) \Psi(z) = 0, & z \in [0, z_1] \cup [z_2, z_3] \cup [z_4, z_5] \cup [z_6, z_7] \cup [z_8, z_9]. \end{cases} \quad (16)$$

Точні розв'язки рівнянь (16) доцільно подати у вигляді

$$\Psi(z) = \Psi^{(0)}(z)\theta(-z) + \sum_{p=1}^9 \Psi^{(p)}(z) [\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p)] + \Psi^{(10)}(z)\theta(z - z_9), \quad (17)$$

де функції

$$\begin{cases} \Psi^{(0)}(z) = A^{(0)} e^{ikz} + B^{(0)} e^{-ikz}, \\ \Psi^{(p)}(z) = \begin{cases} A^{(p)} e^{ikz} + B^{(p)} e^{-ikz}, & p = 2, 4, 6, 8 \\ A^{(p)} e^{\chi z} + B^{(p)} e^{-\chi z}, & p = 1, 3, 5, 7, 9 \end{cases} \\ \Psi^{(10)}(z) = A^{(10)} e^{ikz}, \end{cases} \quad (18)$$

є суперпозиціями точних лінійно незалежних розв'язків рівнянь (16) у відповідних областях змінної z .

Тут

$$k = \frac{\sqrt{2m_0 E}}{\hbar}; \quad \chi = \frac{\sqrt{2m_1 (U - E)}}{\hbar}. \quad (19)$$

На всіх межах гетеросистеми повинні виконуватися умови неперервності хвильових функцій і потоків їх густин:

$$\Psi^{(p)}(z_p) = \Psi^{(p+1)}(z_p); \quad \left. \frac{d\Psi^{(p)}(z)}{m(z)dz} \right|_{z=z_{p-\varepsilon}} = \left. \frac{d\Psi^{(p+1)}(z)}{m(z)dz} \right|_{z=z_{p+\varepsilon}}; \quad p = 0 \div 9; \quad (\varepsilon \rightarrow +0). \quad (20)$$

З граничних умов (3.20), а також з умови нормування хвильової функції

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(k, z) \Psi(k', z) dz = \delta(k - k') \quad (21)$$

однозначно визначаються всі невідомі коефіцієнти $A^{(0)}, B^{(0)}, A^{(10)}, A^{(p)}, B^{(p)}$, ($p = 1 \div 9$), а значить, і хвильова функція $\Psi(E, z)$, яка через відкритість системи залежить не лише від координати z , а й від енергії E .

Електронний спектр відкритої наносистеми є квазістаціонарним з резонансними енергіями (E_n) і резонансними ширинами ($\Gamma_n = \hbar \tau_n^{-1}$), де τ_n – час життя електрона у n -ому квазістаціонарному стані. Як відомо, резонансні енергії (E_n) визначаються положеннями у шкалі енергій (E) максимумів функції розподілу ймовірності знаходження електрона у межах РТС

$$W(E) = \frac{1}{z_9} \int_0^{z_9} |\Psi(E, z)|^2 dz = \frac{1}{z_9} \left\{ \sum_{p=0}^8 \int_{z_p}^{z_{p+1}} |\Psi^{(p)}(E, z)|^2 dz \right\}, \quad (22)$$

а резонансні ширини (Γ_n) визначаються ширинами цієї функції на половині її максимумів, розташованих при відповідних резонансних енергіях E_n .

Тепер уже можна розв'язувати задачу знаходження динамічної провідності відкритої РТС. Справді, при проходженні електронів крізь відкрити РТС, яка знаходиться в електромагнітному полі, відбуваються квантові переходи між електронними квазістаціонарними станами, що формують активну динамічну провідність, яка й характеризує інтенсивність поглинання енергії електромагнітного поля.

Для розрахунку величини позитивної провідності відкритої РТС, що працює в детекторному режимі, необхідно знати повну залежну від часу хвильову функцію електронів з урахуванням їх взаємодії з електромагнітним полем. Вона визначається повним рівнянням Шредінгера:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(z, t)}{\partial t} = (H(z) + H(z, t)) \Psi(z, t), \quad (23)$$

$$H(z, t) = -e\mathcal{E} [z(\theta(z) - \theta(z - z_9)) + z_9 \theta(z - z_9)] (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}) \quad (24)$$

де $H(z)$ – гамільтоніан електрона стаціонарної задачі (15), а – гамільтоніан взаємодії електрона зі змінним у часі електромагнітним полем частоти ω із амплітудою напруженості ϵ його електричної складової.

Уважаючи, що амплітуда високочастотного електромагнітного поля є малою, у, так званому, малосигнальному наближенні, хвильова функція $\Psi(z, t)$, як розв’язок рівняння (23) шукається в одномодовому наближенні за теорією збурень

$$\Psi(z, t) = \sum_{s=-1}^{+1} \Psi_s(z) e^{-i(\omega_0 + s\omega)t}, \quad (\omega_0 = E/\hbar) \quad (25)$$

де $\Psi_{s=0}(z) \equiv \Psi(z)$ – хвильова функція електрона, однозначно знайдена раніше (17).

Для визначення поправок $\Psi_{\pm 1}(z)$ до хвильової функції, вираз (25) підставляється у рівняння (23), зберігаючи при цьому величини першого порядку малості. Тоді отримуються неоднорідні рівняння

$$[H(z) - \hbar(\omega_0 \pm \omega)] \Psi_{\pm 1}(z) - e\epsilon \{z[\theta(z) - \theta(z - z_9)] + z_9 \theta(z - z_9)\} \Psi(z) = 0, \quad (26)$$

розв’язками яких є суперпозиції функцій

$$\Psi_{\pm 1}(z) = \Psi_{\pm}(z) + \Phi_{\pm}(z). \quad (27)$$

Функції $\Psi_{\pm}(z)$, як розв’язки однорідних рівнянь (26), шукаються у вигляді

$$\begin{aligned} \Psi_{\pm}(z) &= \Psi_{\pm}^{(0)}(z) \theta(-z) + \sum_{p=1}^9 \Psi_{\pm}^{(p)}(z) [\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p)] + \Psi_{\pm}^{(10)}(z) \theta(z - z_9) = \\ &= B_{\pm}^{(0)} e^{-ik_{\pm} z} \theta(-z) + A_{\pm}^{(10)} e^{ik_{\pm} z} \theta(z - z_9) + \\ &+ \sum_{p=1}^9 \left(A_{\pm}^{(p)} e^{ik_{\pm}^{(p)} z} + B_{\pm}^{(p)} e^{-ik_{\pm}^{(p)} z} \right) [\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p)], \end{aligned} \quad (28)$$

де

$$k_{\pm} = \frac{\sqrt{2m_0(E \pm \Omega)}}{\hbar}; \quad k_{\pm}^{(p)} = \begin{cases} \frac{\sqrt{2m_0(E \pm \Omega)}}{\hbar}, & p = 2, 4, 6, 8 \\ \frac{\sqrt{2m_1(E - U \pm \Omega)}}{\hbar}, & p = 1, 3, 5, 7, 9 \end{cases}; \quad \Omega = \hbar\omega. \quad (29)$$

Частинні розв'язки неоднорідних рівнянь (26) знаходяться точно і мають наступний аналітичний вигляд

$$\Phi_{\pm}(z) = \sum_{p=1}^9 \left[\mp \frac{e\mathcal{E}z}{\Omega} \Psi^{(p)}(z) + \frac{e\hbar^2 \mathcal{E}}{m(z)\Omega^2} \frac{d\Psi^{(p)}(z)}{dz} \right] [\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p)] \mp \frac{e\mathcal{E}z_9}{\Omega} \Psi^{(10)}(z_9) \theta(z - z_9). \quad (30)$$

Умови неперервності повної хвильової функції $\Psi(z, t)$ і відповідних потоків густин ймовірностей на всіх гетеромежах приводять для функцій $\Psi_{\pm}(z)$ до граничних умов типу (20), із яких однозначно визначаються невідомі коефіцієнти $B_{\pm}^{(p)}$, $A_{\pm}^{(p)}$ ($p = 0 \div 10$), а, відповідно, і, повна хвильова функція $\Psi(z, t)$.

Далі, виконавши аналітичний розрахунок енергії взаємодії електрона з електромагнітним полем, як суму енергій електронних хвиль, що виходять з обох сторін нано-РТС, у квазікласичному наближенні визначається дійсна частина активної провідності σ через густини потоків електронних хвиль, що виходять з обох сторін нано-РТС

$$\sigma(\Omega, E) = \frac{\Omega}{2be\mathcal{E}^2} \{ [j(E + \Omega, z = b) - j(E - \Omega, z = b)] - [j(E + \Omega, z = 0) - j(E - \Omega, z = 0)] \}. \quad (31)$$

Згідно з квантовою механікою, густини потоків визначаються хвильовою функцією $\Psi(E, z)$

$$j(E, z) = \frac{ie\hbar n_0}{2m(z)} \left[\Psi(E, z) \frac{\partial}{\partial z} \Psi^*(E, z) - \Psi^*(E, z) \frac{\partial}{\partial z} \Psi(E, z) \right]. \quad (32)$$

У результаті розрахунку дійсної частини активної провідності, вона може бути представлена у вигляді суми двох складових

$$\sigma(\Omega, E) = \sigma^-(\Omega, E) + \sigma^+(\Omega, E), \quad (33)$$

де

$$\sigma^-(\Omega, E) = \frac{\hbar\Omega n_0}{2bm_0\mathcal{E}^2} (k_+ |B_+^{(0)}|^2 - k_- |B_-^{(0)}|^2); \quad (34)$$

$$\sigma^+(\Omega, E) = \frac{\hbar\Omega n_0}{2bm_0\mathcal{E}^2} (k_+ |A_+^{(10)}|^2 - k_- |A_-^{(10)}|^2).$$

Фізичний зміст парціальних складових (σ^\pm) повної активної динамічної провідності $\sigma(\Omega, E)$ полягає в тому, що вони зумовлені потоками електронів, які, взаємодіючи з високочастотним електромагнітним полем у РТС, виходять з неї вперед (σ^+) і назад (σ^-) по відношенню до початкового напрямку руху.

Аналіз властивостей квазістаціонарного спектру і електронної активної провідності конкретних відкритих багат шарових РТС, як окремих каскадів, у залежності від їх геометричного дизайну буде виконано у параграфі 3.6.

4. Стаціонарний електронний спектр та сили осциляторів квантових переходів у багат шарових закритих резонансно-тунельних структурах у поздовжньому постійному електричному полі, як грубих моделях квантових каскадних лазерів

На відміну від ККД, де узгодження роботи каскадів здійснюється «фононою драбиною» екстрактора, який переводить електрони зі збудженого КСС попереднього каскаду в основний КСС наступного, роль «узгоджувача» сусідніх каскадів у ККЛ виконує постійне електричне поле й інжектор, який вибирається так, щоб електронний потік з основного квазістаціонарного стану попереднього каскаду потрапляв у необхідний збуджений КСС наступного каскаду.

У зв'язку з описаною конструкцією ККЛ у грубих теоретичних моделях, що використовувалися в експериментальних роботах [3–27], як правило, оцінювався енергетичний спектр активної зони і сили осциляторів квантових переходів у закритих моделях.

Оскільки каскад ККЛ є відкритою РТС, у постійному електричному полі, то потрібно розвинути теорію динамічної електронної провідності такою системою, а для порівняння буде вивчатися спектр і сили осциляторів квантових переходів у еквівалентній закритій багат шаровій РТС.

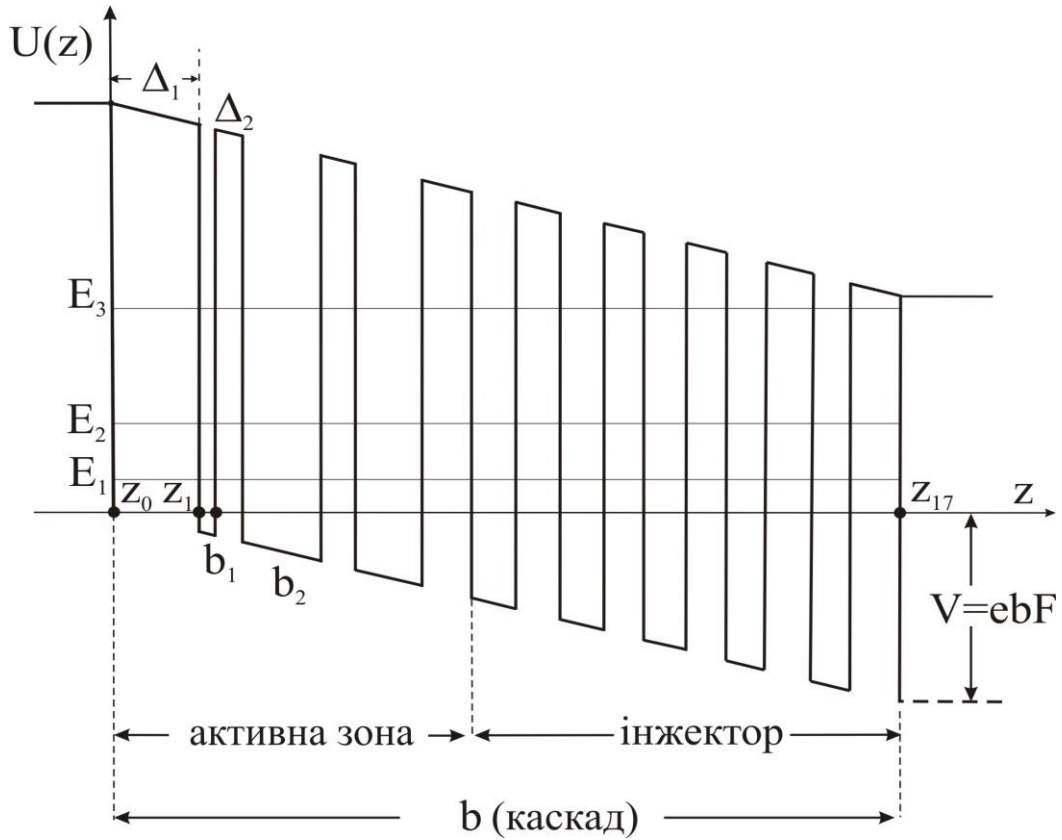


Рис. 3. Геометрична та енергетична схеми у моделі закритого окремого каскаду квантового каскадного лазера

Отже, розглядається багатошарова замкнута РТС з прикладеним до її шарів постійним електричним полем, як модель окремого каскаду ККЛ. Вибираючи систему координат так, як показано на Рис. 3, ефективну масу електрона та його потенціальну енергію в системі запишемо у вигляді

$$m(z) = m_1[\theta(-z) + \theta(z - b)] + m_1 \sum_{p=1}^8 [\theta(z - z_{2p-1}) - \theta(z - z_{2p})] +$$

$$+ m_0 \sum_{p=0}^8 [\theta(z - z_{2p}) - \theta(z - z_{2p+1})]$$
(35)

$$U(z) = U \left([\theta(-z) + \theta(z - b)] + \sum_{p=0}^8 [\theta(z - z_{2p}) - \theta(z - z_{2p+1})] \right).$$
(36)

Потенціальна енергія взаємодії електрона з постійним електричним полем напруженості F , що спрямована вздовж осі Oz , є

$$U_e(z) = eFz[\theta(z - b) - \theta(z)] - V\theta(z - b). \quad (V = eFb)$$
(37)

Щоб визначити стаціонарний електронний спектр і хвильові функції електрона, потрібно розв'язати стаціонарне рівняння Шредінгера з гамільтоніаном

$$H(z) = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(z)} \frac{\partial}{\partial z} + U(z) + U_e(z), \quad (38)$$

записане для кожного з шарів РТС, а також зліва справа від неї

$$\left\{ \begin{array}{l} \left(\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - U + E \right) \Psi(z) = 0, \quad z \in (-\infty, 0], \\ \left(-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - E - V \frac{z}{b} \right) \Psi(z) = 0, \quad \text{у внутрішніх ямах,} \\ \left(-\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + U - E - V \frac{z}{b} \right) \Psi(z) = 0, \quad \text{у внутрішніх бар'єрах,} \\ \left(\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - U + E + V \right) \Psi(z) = 0. \quad z \in [b, \infty) \end{array} \right. \quad (39)$$

Точні розв'язки рівнянь (39) можна подати у такому вигляді:

$$\Psi(z) = \Psi^{(0)}(z)\theta(-z) + \sum_{p=1}^{17} \Psi^{(p)}(z) [\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p)] + \Psi^{(18)}(z)\theta(z - b), \quad (40)$$

де функції

$$\Psi^{(0)}(z) = A^{(0)} e^{\chi z}; \quad \left(\chi = \frac{\sqrt{2m_1(U - E)}}{\hbar} \right). \quad (41)$$

$$\Psi^{(p)}(z) = A^{(p)} Ai(\xi_p(z)) + B^{(p)} Bi(\xi_p(z)); \quad (p = 1, 2, \dots, (17)) \quad (42)$$

$$\Psi^{(18)}(z) = B^{(18)} e^{-\chi^{(18)} z}; \quad \left(\chi^{(18)} = \frac{\sqrt{2m_0(U - E - V)}}{\hbar} \right), \quad (43)$$

є суперпозиціями точних лінійно незалежних розв'язків рівнянь (39) у відповідних областях змінної z . Тут у аргументах функцій Ейрі $Ai(\xi_p(z))$ та $Bi(\xi_p(z))$ фігурують уведені нові змінні

$$\xi_p(z) = \begin{cases} + \left(\frac{2m_1 V b^2}{\hbar^2} \right)^{1/3} \left(\frac{U-E}{V} - \frac{z}{b} \right), & p = 1, 3, 5 \dots \\ - \left(\frac{2m_0 V b^2}{\hbar^2} \right)^{1/3} \left(\frac{E}{V} + \frac{z}{b} \right). & p = 2, 4, 6 \dots \end{cases} \quad (44)$$

Враховуючи те, що хвильові функції електрона повинні прямувати до нуля при $z \rightarrow \pm\infty$, у розв'язках стаціонарного рівняння Шредінгера в зовнішніх шарах було покладено $B^{(0)} = A^{(18)} = 0$. Умови неперервності хвильової функції $\Psi(z)$ та потоку її ймовірності на усіх гетеромежах РТС дають систему рівнянь

$$\Psi^{(p)}(z_p) = \Psi^{(p+1)}(z_p); \quad \left. \frac{d\Psi^{(p)}(z)}{m(z)dz} \right|_{z=z_{p-\varepsilon}} = \left. \frac{d\Psi^{(p+1)}(z)}{m(z)dz} \right|_{z=z_{p+\varepsilon}}; \quad p = 0 \div 17; (\varepsilon \rightarrow +0), \quad (45)$$

з якої отримується дисперсійне рівняння для визначення стаціонарного спектру електрона

$$\begin{pmatrix} 1 & -Ai(\xi_1(0)) & -Bi(\xi_1(0)) & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \chi & -Ai'(\xi_1(0)) & Bi'(\xi_1(0)) & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ m_1 & m_1 & m_1 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & Ai(\xi_p(z_p)) & Bi(\xi_p(z_p)) & -Ai(\xi_{p+1}(z_p)) & -Bi(\xi_{p+1}(z_p)) & 0 & 0 \\ 0 & \dots & Ai'(\xi_p(z_p)) & Bi'(\xi_p(z_p)) & -Ai'(\xi_{p+1}(z_p)) & -Bi'(\xi_{p+1}(z_p)) & 0 & 0 \\ \dots & \dots & m_0 & m_0 & m_1 & m_1 & \dots & \dots \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & Ai(\xi_{17}(z_{17})) & Bi(\xi_{17}(z_{17})) & -e^{-\chi^{(18)}z_{17}} \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & Ai'(\xi_{17}(z_{17})) & Bi'(\xi_{17}(z_{17})) & \chi e^{-\chi^{(18)}z_{17}} \end{pmatrix} = 0. \quad (46)$$

Система рівнянь (39) разом з умовою нормування (10) однозначно визначає всі коефіцієнти $A^{(0)}, A^{(p)}, B^{(p)}, B^{(18)}$, а отже, і хвильові функції $\Psi_n(z)$ та енергетичний спектр (E_n), які дозволяють виконати розрахунок сил осциляторів квантових переходів між стаціонарними електронними станами n і n' :

$$f_{nn'} = \frac{2(E_n - E_{n'})}{\hbar^2} \left\{ m_1 \left[\left| \int_{-\infty}^0 \Psi_n^{(0)*}(z) z \Psi_{n'}^{(0)}(z) dz \right|^2 + \left| \int_{z_{17}}^{\infty} \Psi_n^{(18)*}(z) z \Psi_{n'}^{(18)}(z) dz \right|^2 \right] + \sum_{p=0}^{16} m_p \left| \int_{z_p}^{z_{p+1}} \Psi_n^{(p+1)*}(z) z \Psi_{n'}^{(p+1)}(z) dz \right|^2 \right\}, \quad (47)$$

де

$$m_0 = m_2 = m_4 = m_6 = m_8 = m_{10} = m_{12} = m_{14} = m_{16}, \quad m_1 = m_3 = m_5 = m_7 = m_9 = m_{11} = m_{13} = m_{15}.$$

Розвинута теорія стаціонарного електронного спектру та сил осциляторів квантових переходів для закритих багатошарових РТС, як моделей окремих каскаді ККЛ, далі буде застосована до розрахунків геометричного дизайну експериментально реалізованих наноприладів, а також для порівняння отриманих результатів з тими, що будуть отримані для відкритих систем.

5. Теорія квазістаціонарного електронного спектру та активної динамічної провідності багатошарових відкритих резонансно-тунельних структур у поздовжньому постійному електричному полі, як відкритих моделей квантових каскадних лазерів

Розглядається відкрита багатошарова нано РТС у постійному поздовжньому електричному полі, як окремого каскаду ККЛ. Для конкретності вважається, що геометричний дизайн активної зони та інжектора (Рис. 4) окремого каскаду ККЛ відповідає експериментальній роботі [27].

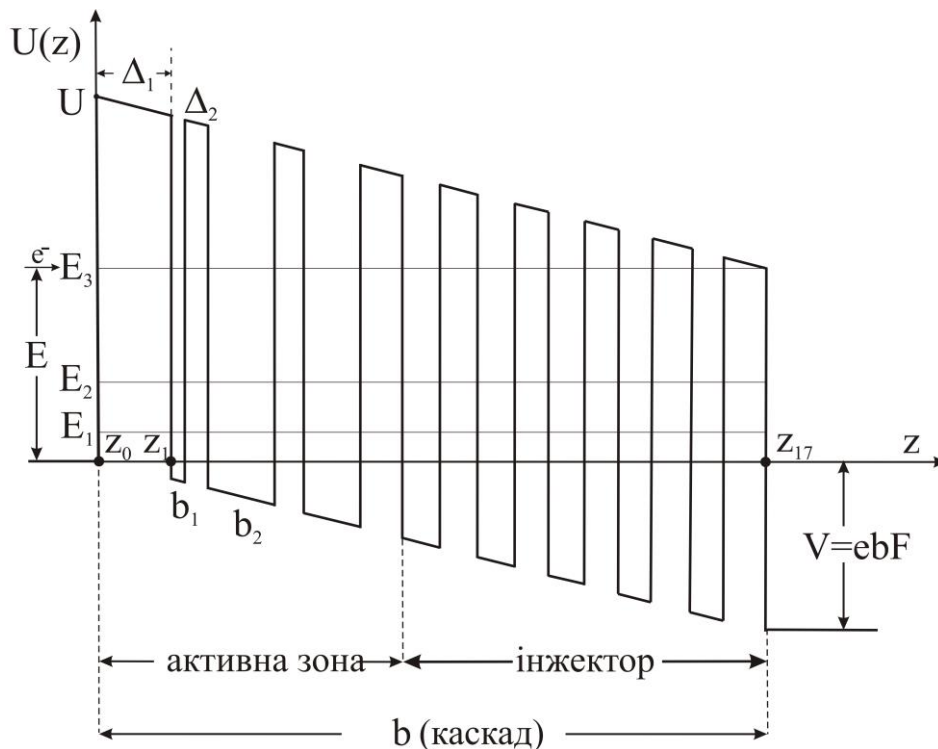


Рис. 4. Геометрична та енергетична схеми у моделі відкритого каскаду квантового каскадного лазера

Перпендикулярно до шарів РТС, що складається з бар'єрів з однакового напівпровідникового матеріалу ($\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$) та квантових ям іншого матеріалу ($\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$), прикладене постійне електричне поле напруженості F (Рис. 4). Вважається, що зліва на цю відкриту наносистему, перпендикулярно до її шарів, падає моноенергетичний потік невзаємодіючих між собою електронів з енергією E і концентрацією n_0 . За таких умов, з урахуванням незначної різниці величин постійних ґраток шарів-ям і бар'єрів, задача про тунелювання електронів крізь РТС зводиться до вивчення одномірного руху окремого електрона у моделі ефективних мас і прямокутних потенціалів. Через наявність всередині цієї нано-РТС постійного електричного поля, спектральні характеристики (резонансні енергії та ширини) КСС електрона, а отже, й активна динамічна провідність будуть іншими, ніж у наносистемі без поля. Тому викладену теорію потрібно модифікувати так, щоб врахувати діюче у системі постійне електричне поле.

Вибравши систему координат так, як показано на Рис. 4, запишемо ефективну масу і потенціальну енергію електрона у відкритій РТС без електричного поля у вигляді:

$$m(z) = m_0[\theta(-z) + \theta(z - b)] + m_0 \sum_{p=1}^8 [\theta(z - z_{2p-1}) - \theta(z - z_{2p})] +$$

$$+ m_1 \sum_{p=0}^8 [\theta(z - z_{2p}) - \theta(z - z_{2p+1})], \quad (48)$$

$$U(z) = U \sum_{p=0}^8 [\theta(z - z_{2p}) - \theta(z - z_{2p+1})], \quad (49)$$

а потенціальну енергію взаємодії електрона з постійним електричним полем, що діє в РТС, як

$$U_e(z) = -eF[z(\theta(z) - \theta(z - b)) + b\theta(z - b)]. \quad (50)$$

Для визначення спектральних характеристик і хвильових функцій електрона в РТС треба розв'язати стаціонарне рівняння Шредінгера

$$H(z)\Psi(E, z) = E\Psi(E, z) \quad (51)$$

з гамільтоніаном

$$H(z) = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial}{\partial z} \frac{1}{m(z)} \frac{\partial}{\partial z} + U(z) + U_e(z). \quad (52)$$

Записавши стаціонарне рівняння Шредінгера (51) для кожного з шарів РТС отримується

$$\left\{ \begin{array}{l} \left(\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + E \right) \Psi(z) = 0, \quad z \in (-\infty, 0], \\ \left(-\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2}{\partial z^2} - E - V \frac{z}{b} \right) \Psi(z) = 0, \quad \text{у внутрішніх ямах,} \\ \left(-\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + U - E - V \frac{z}{b} \right) \Psi(z) = 0, \quad \text{у внутрішніх бар'єрах,} \\ \left(\frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + E + V \right) \Psi(z) = 0, \quad z \in [b, \infty), \end{array} \right. \quad (53)$$

де

$$V = eFb \quad (54)$$

- повне зміщення потенціальної енергії електрона, зумовлене прикладанням до РТС постійного електричного поля.

Розв'язки рівнянь (53) можна подати у такому вигляді:

$$\Psi(z) = \Psi^{(0)}(z)\theta(-z) + \sum_{p=1}^{17} \Psi^{(p)}(z) [\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p)] + \Psi^{(18)}(z)\theta(z - b), \quad (55)$$

де функції

$$\Psi^{(0)}(z) = A^{(0)} e^{ikz} + B^{(0)} e^{-ikz}; \quad k = \frac{\sqrt{2m_0 E}}{\hbar}; \quad (56)$$

$$\Psi^{(p)}(z) = A^{(p)} Ai(\xi_p(z)) + B^{(p)} Bi(\xi_p(z)); \quad (p = 1, 2, \dots, (17)) \quad (57)$$

$$\Psi^{(18)}(z) = A^{(18)} e^{iKz}; \quad (K = \frac{\sqrt{2m_0(E+V)}}{\hbar},) \quad (58)$$

є суперпозиціями точних лінійно незалежних розв'язків рівнянь (53) у відповідних областях змінної z . Тут уведено позначення:

$$\xi_p(z) = \begin{cases} + \left(\frac{2m_1 V b^2}{\hbar^2} \right)^{1/3} \left(\frac{U - E}{V} - \frac{z}{b} \right), & p = 1, 3, 5 \dots \\ - \left(\frac{2m_0 V b^2}{\hbar^2} \right)^{1/3} \left(\frac{E}{V} + \frac{z}{b} \right), & p = 2, 4, 6 \dots \end{cases} \quad (59)$$

$Ai(\xi_p(z)), Bi(\xi_p(z))$, – функції Ейрі.

На всіх межах гетеросистеми повинні виконуватися умови неперервності хвильових функцій і потоків їх густин:

$$\Psi^{(p)}(z_p) = \Psi^{(p+1)}(z_p); \quad \left. \frac{d\Psi^{(p)}(z)}{m(z)dz} \right|_{z=z_p-\varepsilon} = \left. \frac{d\Psi^{(p+1)}(z)}{m(z)dz} \right|_{z=z_p+\varepsilon}; \quad p = 0 \div 17; \quad (\varepsilon \rightarrow +0) \quad (60)$$

а також умова нормування хвильової функції

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(k, z) \Psi(k', z) dz = \delta(k - k'). \quad (61)$$

Це однозначно визначає усі невідомі коефіцієнти $A^{(p)}, B^{(p)}, A^{(18)}$ ($p = 0 \div 17$), а значить, і хвильову функцію $\Psi(E, z)$, яка, в силу відкритості РТС, крім координати z залежить і від енергії E .

Резонансні енергії та резонансні ширини КСС електрона, як раніше, визначаються функцією розподілу ймовірності знаходження електрона у межах РТС

$$W(E) = \frac{1}{b} \int_0^b |\Psi(E, z)|^2 dz = \frac{1}{b} \left\{ \sum_{p=0}^{16} \int_{z_p}^{z_{p+1}} |\Psi^{(p)}(E, z)|^2 dz \right\}. \quad (62)$$

Аналітичний розрахунок електронної від'ємної активної провідності відкритої РТС у постійному електричному полі, що працює в лазерному режимі, виконується у розвинутому вище підході для провідності каскаду, який працює у детекторному режимі.

Тепер часовозалежна хвильова функція $\Psi(z,t)$ визначається повним рівнянням Шредінгера

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(z,t)}{\partial t} = (H(z) + H(z,t)) \Psi(z,t), \quad (63)$$

де $H(z)$ – гамільтоніан (52), а $H(z,t)$ – гамільтоніан взаємодії електрона зі змінним у часі електромагнітним полем частоти ω з амплітудою напруженості ϵ його електричної складової.

$$H(z,t) = -e\epsilon [z(\theta(z) - \theta(z-b)) + b\theta(z-b)] (e^{i\omega t} + e^{-i\omega t}), \quad (64)$$

Знову розв'язуючи повну задачу Шредінгера в малосигнальному одномодовому наближенні для повної хвильової функції, отримується вираз

$$\Psi(z,t) = \sum_{s=-1}^{+1} \Psi_s(z) e^{-i(\omega_0 + s\omega)t}, \quad (\omega_0 = E/\hbar) \quad (65)$$

де $\Psi_{s=0}(z) \equiv \Psi(z)$ – хвильова функція (55), а для поправок $\Psi_{\pm 1}(z)$ отримується система двох неоднорідних рівнянь

$$[H(z) - \hbar(\omega_0 \pm \omega)] \Psi_{\pm 1}(z) - e\epsilon \{z[\theta(z) - \theta(z-b)] + b\theta(z-b)\} \Psi(z) = 0, \quad (66)$$

розв'язками яких є

$$\Psi_{\pm 1}(z) = \Psi_{\pm}(z) + \Phi_{\pm}(z). \quad (67)$$

Функції $\Psi_{\pm}(z)$ як розв'язки однорідних рівнянь (66) шукаються у вигляді

$$\begin{aligned} \Psi_{\pm}(z) &= \Psi_{\pm}^{(0)}(z)\theta(-z) + \sum_{p=1}^{17} \Psi_{\pm}^{(p)}(z) [\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p)] + \Psi_{\pm}^{(18)}(z)\theta(z-b) = \\ &= B_{\pm}^{(0)} e^{-ik_{\pm}z} \theta(-z) + A_{\pm}^{(18)} e^{iK_{\pm}z} \theta(z-b) + \\ &+ \sum_{p=1}^{17} (A_{\pm}^{(p)} Ai(\xi_{\pm}^{(p)}) + B_{\pm}^{(p)} Bi(\xi_{\pm}^{(p)})) [\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p)], \end{aligned} \quad (68)$$

де

$$k_{\pm} = \frac{\sqrt{2m_0(E \pm \Omega)}}{\hbar}; \quad K_{\pm} = \frac{\sqrt{2m_1[(E \pm \Omega) + V]}}{\hbar}; \quad \Omega = \hbar\omega; \quad (69)$$

$$\xi_{\pm}^{(p)}(z) = \begin{cases} + \left(\frac{2m_1 V b^2}{\hbar^2} \right)^{1/3} \left(\frac{U - (E \pm \Omega)}{V} - \frac{z}{b} \right), & p = 1, 3, 5 \dots \\ - \left(\frac{2m_0 V b^2}{\hbar^2} \right)^{1/3} \left(\frac{E \pm \Omega}{V} + \frac{z}{b} \right). & p = 2, 4, 6 \dots \end{cases} \quad (70)$$

Частинні розв'язки неоднорідних рівнянь (66) мають точний аналітичний вигляд

$$\begin{aligned} \Phi_{\pm}(z) = & \\ = \pi \frac{\epsilon}{F} \sum_{p=1}^{17} & \left(\text{Bi}(\xi_{\pm}^{(p)}) \int_1^{\xi^{(p)}} \left(\eta - \left(\frac{2m(z)b^2 V}{\hbar^2} \right)^{1/3} \frac{U(z) - E}{V} \right) \text{Ai} \left(\eta \mp \left(\frac{2m(z)b^2 V}{\hbar^2} \right)^{1/3} \frac{\Omega}{V} \right) \Psi^{(p)}(\eta) d\eta - \right. \\ & \left. - \text{Ai}(\xi_{\pm}^{(p)}) \int_1^{\xi^{(p)}} \left(\eta - \left(\frac{2m(z)b^2 V}{\hbar^2} \right)^{1/3} \frac{U(z) - E}{V} \right) \text{Bi} \left(\eta \mp \left(\frac{2m(z)b^2 V}{\hbar^2} \right)^{1/3} \frac{\Omega}{V} \right) \Psi^{(p)}(\eta) d\eta \right) \times \\ & \times \left[\theta(z - z_{p-1}) - \theta(z - z_p) \right] \mp \frac{eCb}{\Omega} \Psi^{(18)}(b) \theta(z - b). \end{aligned} \quad (71)$$

Умови неперервності повної хвильової функції $\Psi(z, t)$ і відповідних потоків густин на всіх гетерограницях приводять для функцій $\Psi_{\pm}(z)$ до граничних умов типу (60), з яких однозначно визначаються невідомі коефіцієнти $B_{\pm}^{(p)}$, $A_{\pm}^{(p)}$ ($p = 0 \div 18$), а відповідно і повна хвильова функція $\Psi(z, t)$.

Розрахована повна хвильова функція електрона $\Psi(z, t)$ дає змогу аналогічно до (31) виконати розрахунок активної динамічної провідності $\sigma(\Omega, E)$ електронів багат шаровою РТС з прикладеним до неї постійним електричним полем та представити її у вигляді двох парціальних складових

$$\sigma(\Omega, E) = \sigma^{-}(\Omega, E) + \sigma^{+}(\Omega, E), \quad (72)$$

де

$$\begin{aligned} \sigma^{-}(\Omega, E) &= \frac{\hbar \Omega n_0}{2b m_0 \epsilon^2} \left(k_+ |B_+^{(0)}|^2 - k_- |B_-^{(0)}|^2 \right) \\ \sigma^{+}(\Omega, E) &= \frac{\hbar \Omega n_0}{2b m_0 \epsilon^2} \left(K_+ |A_+^{(18)}|^2 - K_- |A_-^{(18)}|^2 \right) \end{aligned} \quad (73)$$

Розвинута теорія електронного квазістаціонарного спектру та активної динамічної провідності відкритої багат шарової РТС з прикладеним до неї постійним електричним полем є доброю моделлю окремого каскаду ККЛ. На базі цієї теорії далі буде виконано розрахунок провідності конкретних експериментально реалізованих систем.

6. Енергетичний спектр оптичних фононів у багат шаровій резонансно-тунельній структурі

Як відомо [3–27], експериментально створені ККЛ і ККД сконструйовані так, що для успішного функціонування обох типів цих приладів важливу роль відіграють фонони. Справді, оскільки ККЛ працює за рахунок квантових переходів між третім і другим КСС, то швидке звільнення другого КСС забезпечується ще й за рахунок взаємодії з фононами, енергія яких близька (або рівна) до різниці резонансних енергій другого і першого КСС. Що ж до функціонування ККД, то для них важливо, щоб енергії фононів були такими, які забезпечують «фононну драбину».

Отже, з метою розрахунку фононного спектру досліджуваних наносистем, потрібно розвинути теорію обмежених та інтерфейсних фононів у плоских багат шарових наноструктурах.

Розглядається плоска відкрита багат шарова РТС, яка складається з чотирьох напівпровідникових шарів – бар'єрів ($\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$) та трьох квантових шарів-ям ($\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$), що вміщені в зовнішнє напівпровідникове середовище ($\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$) (Рис. 5).

Вісь z вибирається у напрямку перпендикулярному до площин гетеропереходів наносистеми, геометричні параметри наносистеми вздовж осі z визначаються згідно із Рис. 5.

Діелектрична проникність середовища, що відповідає шарам – ямам (0) і шарам – бар'єрам (1) наносистеми, вважається відомою і такою, що задовольняє співвідношенню Ліддейна-Сакса-Теллера

$$\varepsilon_i(\omega) = \varepsilon_{i\infty} \frac{\omega^2 - \omega_{iLO}^2}{\omega^2 - \omega_{iTO}^2} \quad (74)$$

де $\varepsilon_{i\infty}$ – високочастотна діелектрична проникність, ω_{iLO} та ω_{iTO} – частоти повздовжніх та поперечних фононів у відповідних масивних напівпровідникових кристалах.

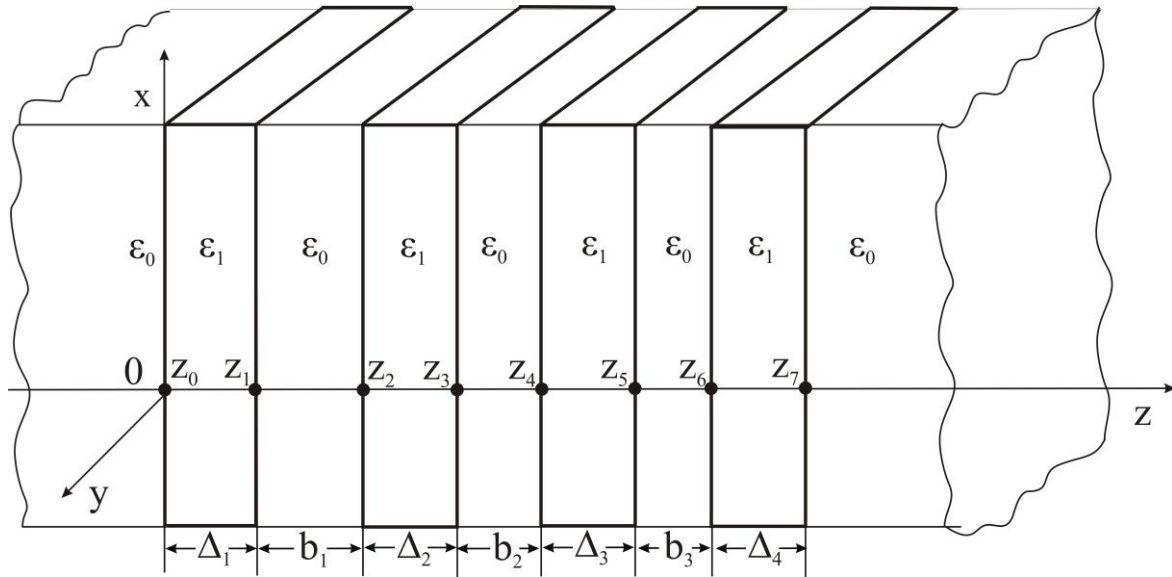


Рис. 5. Геометрична схема плоскої багатошарової наногетеросистеми

Згідно з моделлю діелектричного континууму потенціал поля поляризації та енергетичний спектр оптичних фононів наносистеми визначається матеріальним рівнянням і двома рівняннями Максвелла

$$\begin{cases} \vec{D} = \varepsilon(\vec{r}, \omega) \vec{E}, \\ \vec{E} = -\vec{\nabla} \Phi, \\ \vec{\nabla} \vec{D} = 0, \end{cases} \quad (75)$$

де \vec{D} – вектор індукції електричного поля, \vec{E} – вектор напруженості електричного поля, Φ – потенціал поля поляризації, $\varepsilon(\vec{r}, \omega)$ – діелектрична проникність, що залежить від координат

$$\varepsilon(\vec{r}, \omega) = \begin{cases} \varepsilon_0(\omega), & z \in (-\infty, 0] \cup [z_1, z_2] \cup [z_3, z_4] \cup [z_5, z_6] \cup [z_7, +\infty), \\ \varepsilon_1(\omega), & z \in [0, z_1] \cup [z_2, z_3] \cup [z_4, z_5] \cup [z_6, z_7] \end{cases} \quad (76)$$

З рівнянь Максвелла для середовищ (3.75) отримується рівняння:

$$\varepsilon(\omega)\Delta\Phi(\vec{r})=0, \quad (77)$$

розв'язки якого визначають спектр частот фононів наногетеросистеми. Як видно із рівняння (77), існують два типи розв'язків:

а) якщо

$$\varepsilon_n(\omega)=0, \quad \Delta\Phi_n(\vec{r})\neq 0, \quad (n=0,1,\dots,8), \quad (78)$$

то отримується спектр частот обмежених оптичних фононів;

б) якщо

$$\varepsilon_n(\omega)\neq 0, \quad \Delta\Phi_n(\vec{r})=0, \quad (n=0,1,\dots,8), \quad (79)$$

то отримується спектр частот інтерфейсних оптичних фононів наноструктури.

Спектр обмежених оптичних фононів визначається з умови (78), яка є еквівалентною до системи рівнянь

$$\begin{cases} \varepsilon_0(\omega) = \varepsilon_{0\infty} \frac{\omega^2 - \omega_{0LO}^2}{\omega^2 - \omega_{0T}^2} = 0, & \text{у ямах} \\ \varepsilon_1(\omega) = \varepsilon_{1\infty} \frac{\omega^2 - \omega_{1LO}^2}{\omega^2 - \omega_{1TO}^2} = 0. & \text{у бар'єрах} \end{cases} \quad (80)$$

З системи рівнянь (80) видно, що частоти ω_n обмежених оптичних фононів наносистеми збігаються з відповідними частотами ω_{nLO} поздовжніх оптичних фононів у масивних кристалах, а отже, енергії обмежених фононів є

$$\Omega_{nLO} = \hbar\omega_{nLO} \quad (n=0,1,\dots,8). \quad (81)$$

З урахуванням симетрії наносистеми, потенціал поля поляризації обмежених оптичних фононів може бути записаний у вигляді:

$$\Phi_{LO}(\vec{r}) = \sum_{n=0}^8 \Phi_{LOn}(\vec{r})\sigma(z - z_n), \quad (82)$$

де

$$\sigma(z - z_n) = \begin{cases} 1, & z_{n-1} \leq z \leq z_n, \\ 0, & \text{інша область,} \end{cases} \quad (83)$$

тут $z_{-1} = -\infty$, $z_8 = +\infty$. Величини $\Phi_{LOn}(\vec{r})$ визначаються за допомогою розкладу потенціалу $\Phi_{Ln}(\vec{r})$ за повною ортонормованою системою функцій:

$$\Phi_{LOn}(\vec{r}) = \Phi_{LOn}(x, y, z) = \sum_{k_x, k_y, k_n} A_n e^{i(k_x x + k_y y)} \sin k_n z. \quad (84)$$

При цьому коефіцієнти розкладу A_n і поздовжній квазіімпульс k_n обмежених оптичних фононів визначаються з умов рівності нулю потенціалу поляризації на гетерограницях наносистеми:

$$\Phi_{LO}(\vec{r})|_{z=z_n} = 0, \quad n = 0, 1, \dots, 8, \quad (85)$$

та з умов ортонормованості повної системи функцій, за якими відбувається розклад в (84).

Спектр інтерфейсних оптичних фононів отримується з умови (79), яка для потенціалу поляризації інтерфейсних оптичних фононів еквівалентна рівнянню

$$\Delta \Phi_{IO}(\vec{r}) = \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \Phi_{IO}(x, y, z) = 0. \quad (86)$$

Оскільки шари наносистеми чергуються вздовж осі z , а в площині $ХОУ$ рух квазічастинок вільний, то відповідний потенціал $\Phi_{IO}(x, y, z)$ доцільно подати у вигляді:

$$\Phi_{IO}(x, y, z) = \sum_{n=0}^8 \Phi_{IO_n}(x, y, z) \sigma(z - z_n), \quad (87)$$

де

$$\Phi_{In}(x, y, z) = B_n e^{i(q_x x + q_y y)} \phi_n(z). \quad (88)$$

де q_x , q_y – компоненти поперечного квазіімпульсу інтерфейсних оптичних фононів. Підставляючи вирази (87), (88) у рівняння (86), отримується рівняння для функцій $\phi_n(z)$

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial z^2} - q^2 \right) \phi_n(z) = 0, \quad (90)$$

де $q = \sqrt{q_x^2 + q_y^2}$ – квазіімпульс інтерфейсних оптичних фононів.

Шукаючи розв’язки рівнянь (90) у вигляді

$$\begin{cases} \phi_0(z) = C_0^+ e^{qz}, & -\infty \leq z \leq 0 \\ \phi_n(z) = C_n^+ e^{qz} + C_n^- e^{-qz}, & z_{n-1} \leq z \leq z_n, \quad (n=1,2,\dots,7). \\ \phi_8(z) = C_8^- e^{-qz}, & z_7 \leq z \leq \infty \end{cases} \quad (91)$$

з умов неперервності потенціалу поляризації та вектора електричного зміщення на межах наносистеми вздовж осі z , отримуються коефіцієнти $B_n, C_0^+, C_n^+, C_n^-, C_8^-$ та енергетичний спектр інтерфейсних фононів $\Omega_{\lambda}(q)$, де λ – кількість мінізон, що визначаються числом розв’язків дисперсійного рівняння, яке впливає із системи:

$$\begin{aligned} \Phi_{10n}(q, z_n) &= \Phi_{10n+1}(q, z_n); \\ \varepsilon_n(\omega) \frac{\partial \Phi_{10n}(q, z)}{\partial z} \Big|_{z=z_n} &= \varepsilon_{n+1}(\omega) \frac{\partial \Phi_{10n+1}(q, z)}{\partial z} \Big|_{z=z_n}; \quad (n = 0 \div 7); \end{aligned} \quad (92)$$

і має вигляд

$$\begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \varepsilon_0(\omega) & -\varepsilon_1(\omega) & \varepsilon_1(\omega) & 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & e^{qz_n} & e^{-qz_n} & e^{qz_n} & e^{-qz_n} & 0 & 0 \\ 0 & \dots & \varepsilon_0(\omega)e^{qz_n} & \varepsilon_0(\omega)e^{-qz_n} & -\varepsilon_1(\omega)e^{qz_n} & -\varepsilon_1(\omega)e^{-qz_n} & 0 & 0 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 0 \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & e^{qz_7} & e^{-qz_7} & -e^{-qz_7} \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 & \varepsilon_1(\omega)e^{qz_7} & -\varepsilon_1(\omega)e^{-qz_7} & \varepsilon_0(\omega)e^{-qz_7} \end{pmatrix} = 0 \quad (93)$$

На основі цієї теорії далі виконувався розрахунок енергетичних спектрів інтерфейсних оптичних фононів активної зони каскаду ККД (модель (а) двобар’єрної РТС у середовищі) та активної зони каскаду ККЛІ (модель (б) чотирибар’єрної РТС у середовищі). Такого типу наносистеми, що базувалися

на матеріалах $\text{In}_x\text{Al}_{1-x}\text{As}$ та $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ з фізичними параметрами, приведеними у таблиці 1 відігравали роль активних зон ККЛ [25] і ККД [27]

Таблиця 1

	$\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$	$\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$
Ω_L (меВ)	34,00	39,12
Ω_T (меВ)	31,12	35,24
ε_0	13,90	11,71
ε_∞	11,64	10,31
a (нм)	0,581	0,581

На Рис. 6 а, б приведено залежності від квазіімпульсів q (в одиницях π/a) усіх ($\lambda = 1, 2, \dots, s$) гілок інтерфейсних фононних енергій $\Omega_{L\lambda}(q)$, розрахованих для обох моделей РТС з відповідними геометричними параметрами (в нанометрах): а) шарів-бар'єрів(2,6; 4,7), шару-ями (11,1); б) шарів-бар'єрів (5,0; 1,5; 2,2; 3,0), шарів-ям (0,9; 4,7; 4,0). Там же вказані енергії обмежених оптичних фононів (Ω_{L0}, Ω_{L1}), а також, для зручності аналізу, енергії поперечних фононів (Ω_{T0}, Ω_{T1}) відповідних масивних кристалів.

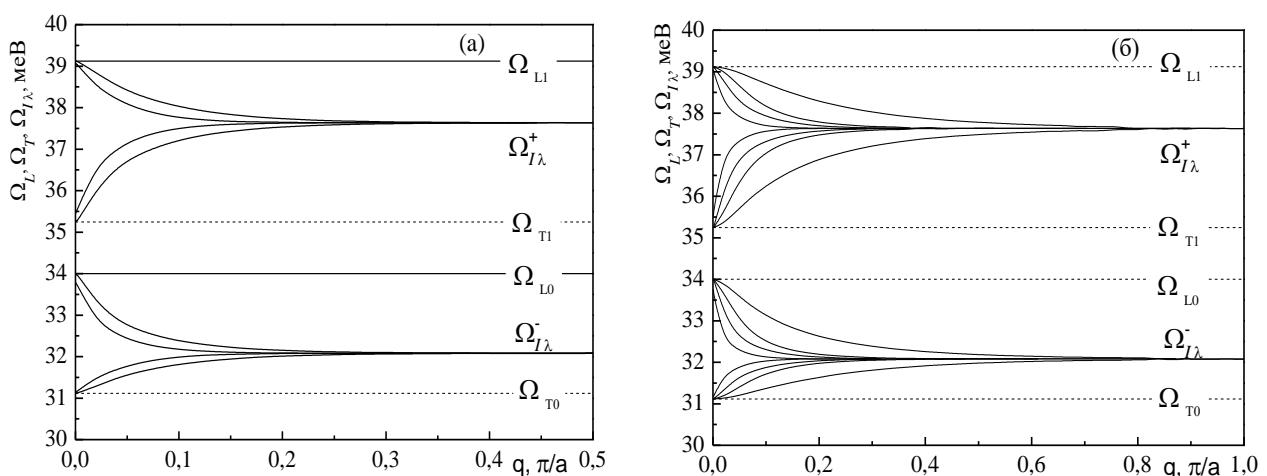


Рис. 6. Спектр обмежених та інтерфейсних фононів для двох моделей РТС: а) двобар'єрної; б) чотирибар'єрної

З Рис. 3.6 а, б видно, що незалежно від кількості шарів у РТС, кількість (s) гілок інтерфейсних фононів удвічі більша від кількості меж між різними середовищами. Уся сукупність гілок складається з двох однакових груп. Енергії однієї групи гілок розташовані між енергіями Ω_{T_0} та Ω_{L_0} , а енергії другої групи – між енергіями Ω_{T_1} та Ω_{L_1} . Кожна з цих груп містить по дві підгрупи гілок: одна з позитивною, а друга з негативною дисперсією.

При великих значеннях квазіімпульсу (q) фононні гілки з двох груп вироджуються кожна в одну з своїх енергій. При актуальних для роботи ККЛ і ККД значеннях квазіімпульсу ($q \sim 0$) енергії усіх гілок інтерфейсних фононів мають незначну дисперсію і для обох досліджуваних моделей вони знаходяться у межах кількох меВ у околах енергії обмежених фононів $\Omega_{L_0} = 34$ меВ і $\Omega_{L_1} = 39,12$ меВ.

7. Властивості активної електронної провідності багат шарової резонансно-тунельної структури, як основного елемента квантового каскадного детектора

Розвинуті у параграфах 2 та 3 теорії квазістаціонарного електронного спектру і активної динамічної провідності відкритими РТС та стаціонарного спектру і сил осциляторів квантових переходів у закритих РТС, дають змогу виявити ту модель каскаду, яка найбільш адекватно описує транспортні властивості електронів, а тому може слугувати основою для оптимізації роботи ККД шляхом належного вибору геометричного дизайну активної зони окремого каскаду.

У якості багат шарових РТС, як моделей окремого каскаду, були вибрані наносистеми на основі $\text{In}_{0.53}\text{Ga}_{0.47}\text{As}$ та $\text{In}_{0.52}\text{Al}_{0.48}\text{As}$, що відповідали реальним типовим ККД [27]. Ці системи характеризуються відомими фізичними ($U=516$ меВ, $m_0 = 0.047 m_e$; $m_1 = 0.089 m_e$, $n_0 = 4,5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$) і

заданими у нанометрах геометричними (рис. 1 та рис 2) ($(\Delta_1, \Delta_2, \Delta_3, \Delta_4, \Delta_5)$ (2,6; 4,7; 4,8; 4,4; 2,6)), ((b_1, b_2, b_3, b_4) (11,1; 3,9; 5,0; 6,8) параметрами.

Як відомо, успішне функціонування ККД у потрібній області частот електромагнітних хвиль визначається енергетичним спектром тих станів, у яких електрони переважно перебувають у активній зоні каскаду, між якими й відбуваються квантові переходи. Тому, враховуючи, що типова активна зона є двоямною наносистемою, важливо дослідити як впливатиме її геометрична конфігурація, а саме положення внутрішнього шару-бар'єру відносно обох зовнішніх на спектральні та інші параметри РТС.

З цією метою в моделі закритої РТС виконувався розрахунок стаціонарного енергетичного спектру (E_n^c) й сил осциляторів квантових переходів ($f_{m'}$), а у відкритій моделі – резонансних енергій (E_n), часів життя (τ_n), активної динамічної провідності ($\sigma_{m'}$) та її парціальних складових $\sigma_{m'}^\pm$. Результати розрахунків усіх вказаних величин у залежності від положення внутрішнього бар'єра між двома зовнішніми, тобто від ширини b_1 вхідної ями активної зони при фіксованих розмірах усіх інших елементів каскаду, приведені на Рис. 7.

Розрахунок стаціонарного енергетичного спектру (E_n^c) в моделі закритої РТС і спектру резонансних енергій (E_n) у моделі відкритої РТС показав, що незалежно від величини b_1 , обидва спектри збігаються між собою з точністю не гірше 0,1%.

Приведені на Рис. 3.7 а залежності резонансних енергій квазістаціонарних станів електронів, розраховані у моделі відкритого каскаду, де E_1, E_2, E_3 (жирні лінії) відповідають трьом квазістаціонарним станам, у яких електрон з найбільшою ймовірністю перебуває у межах активної зони (Рис. 3.8), а резонансні енергії $E_{e1} \div E_{e3}$ (тонкі лінії) належать квазістаціонарним станам, у яких електрон з більшою ймовірністю перебуває у екстракторній частині каскаду ККД.

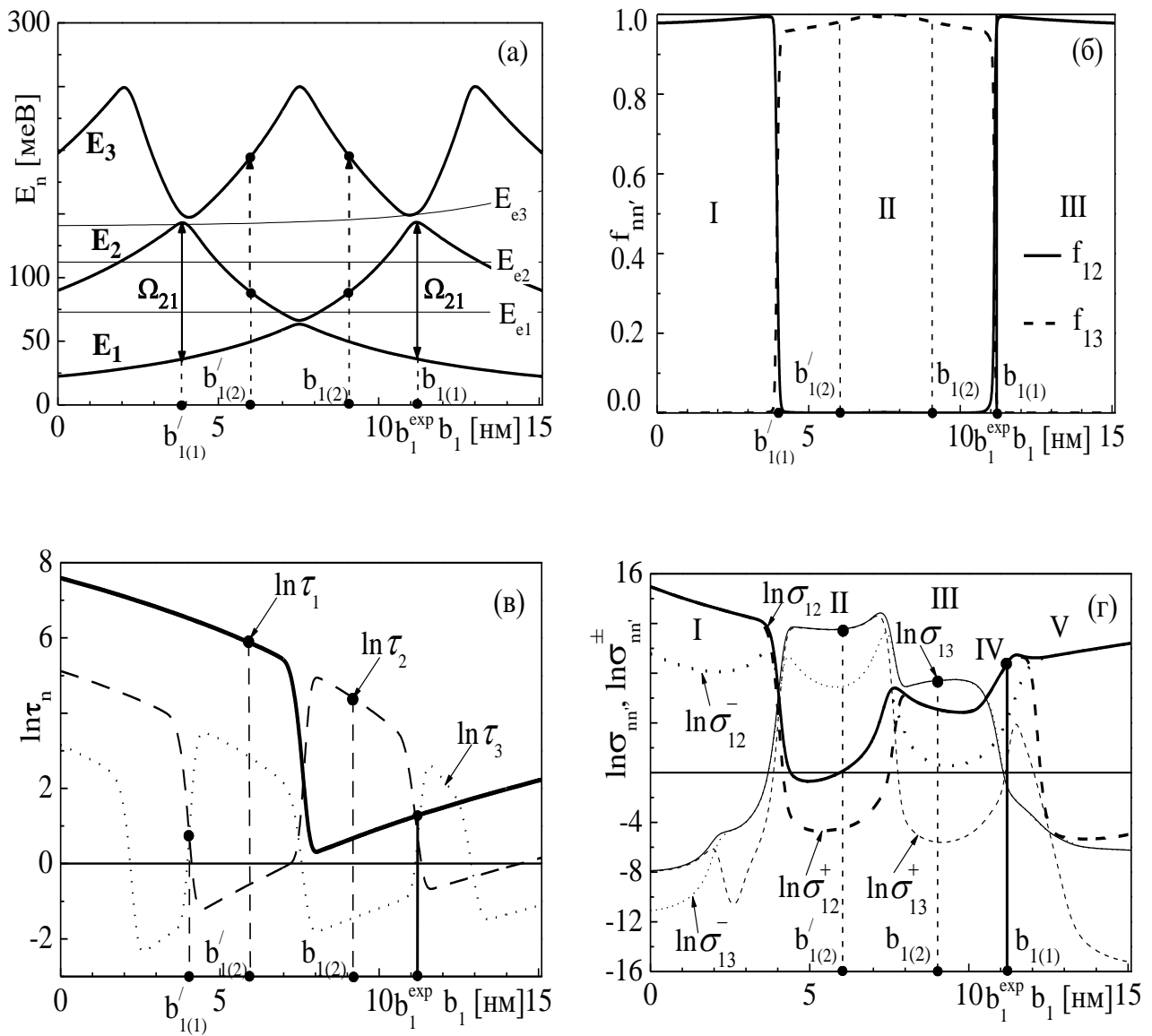


Рис. 7. Еволюція енергетичного спектру E_n (а), сил осциляторів квантових переходів f_{nm} (б), логарифмів часів життя $\ln \tau_n$ (в) в одиницях $\tau_0=1$ пс та логарифмів динамічних провідностей $\ln \sigma$, $\ln \sigma^\pm$ (г) в одиницях $\sigma_0=1$ См/см у залежності від положення внутрішнього бар'єра у активній зоні (b_1)

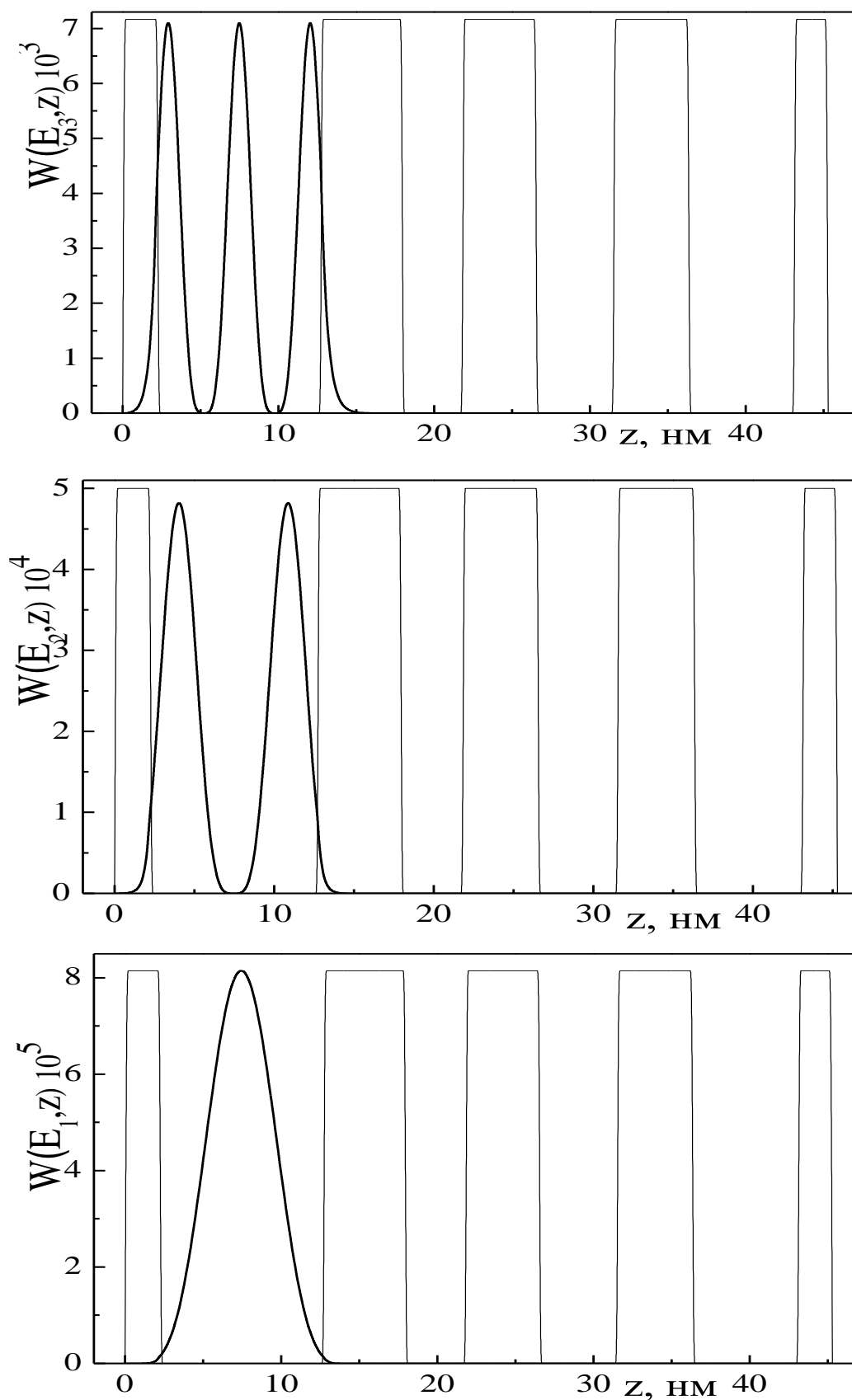


Рис. 8. Залежності густини розподілу ймовірності знаходження електрона у перших трьох КСС, де він з найбільшою ймовірністю перебуває у межах активної зони

У експериментальній роботі [27] ККД працював на довжині хвилі $\lambda = 10,7$ мкм за рахунок того, що електрони з енергією E_1 потрапляли у перший КСС активної зони і внаслідок поглинутої енергії електромагнітного поля $\Omega_{21} = E_2 - E_1$, переходили у другий КСС того ж каскаду. Релаксація електронної енергії здійснювалася “фононою драбиною” екстрактора, внаслідок чого електронний потік з попереднього каскаду потрапляв у перший КСС наступного.

Метою розвинутої теорії є виявлення такої конфігурації активної зони каскаду, яка б забезпечувала оптимальне функціонування ККД, тобто при заданій величині енергії електромагнітного поля, детектор повинен споживати мінімальний струм і не реагувати на поля з іншими частотами і т.п. У цьому відношенні можливості моделей закритої і відкритої РТС, як буде видно, значно відрізняються.

З метою виявлення оптимальної геометричної конфігурації активної зони у моделі закритого каскаду ККД виконувався розрахунок енергетичного спектру (Рис. 7а) та сил осциляторів квантових переходів f_{12} і f_{13} (Рис. 7б) у залежності від величини b_1 вхідної ями активної зони.

Оптимізація роботи ККД у закритій моделі можлива лише при такому геометричному дизайні активної зони, при якому буде забезпечене детектування електромагнітної енергії $\Omega_{21} = E_2 - E_1$ у результаті квантового переходу $1 \rightarrow 2$, що мінімізує початковий струм. При цьому потрібно, щоб сила осцилятора квантового переходу f_{12} була на порядок більшою від f_{13} . З Рис. 7б видно, що у такій моделі закритого каскаду є дві еквівалентні області (I і III) зміни положення внутрішнього бар'єру b_1 відносно зовнішніх у активній зоні, де згадана умова ($f_{12}^{I,III} \gg f_{13}^{I,III}$) виконується. Потрібна (визначена на експерименті) величина енергії $\Omega_{21} = E_2 - E_1 = 120$ меВ поглинання електромагнітного поля забезпечується у квантовому переході $1 \rightarrow 2$ в активній зоні каскаду при двох положеннях ($b_{1(I)}$, $b'_{1(I)}$) внутрішнього бар'єру відносно зовнішніх. У обох конфігураціях ($f_{12} = 0,94$, $f_{13} = 0,06$), причому теоретичне

значення $b_{1(1)}$ практично збігається з експериментально реалізованим ($b_1^{\text{exp}} = 11,1$ нм). Чому експериментально не реалізована конфігурація активної зони, при якій внутрішній бар'єр розташований ближче до вхідного ($b'_{1(1)}$), закрита модель відповіді не дає, хоча, як буде видно далі, у більш адекватній моделі відкритого каскаду ця відповідь є однозначною.

З Рис. 7 а видно, чому не доцільно реалізовувати детектування електромагнітного поля з тією ж енергією $\Omega_{23} = \Omega_{12}$, але у квантовому переході $2 \rightarrow 3$ в РТС з конфігурацією активної зони каскаду, при якій розмір вхідної ями міг би бути або $b_{1(2)}$, або $b'_{1(2)}$ і виконувалося б співвідношення $f_{23} > f_{12}$. Очевидними є дві основні причини.

По-перше, при переході $2 \rightarrow 3$ вхідний потік електронів повинен подаватися на другий КСС, енергія якого E_2 більша від E_1 , а тому й початковий струм повинен бути більшим, адже $j_0 \sim \sqrt{E}$.

По-друге, потрібно було б змінити геометричний дизайн екстрактора. Адже для функціонування ККД на переході $1 \rightarrow 2$ він побудований так, щоб відстані ($E_{in} - E_{in-1}$; $n = 3 \div 2$) між рівновіддаленими між собою екстракторними енергетичними рівнями, які розташовані між E_2 та E_1 , були рівні величинам енергій обмежених та інтерфейсних фононів. Такий дизайн екстрактора створює, так звану, енергетичну “фононну драбину”, завдяки якій відбувається релаксація електронної енергії з верхнього робочого стану (E_2) попереднього каскаду на основний робочий стан (E_1) наступного каскаду ККД. Очевидно, що для реалізації роботи ККД на переході $2 \rightarrow 3$ геометричний дизайн екстрактора, виконаний для переходу $1 \rightarrow 2$, порушує “фононну драбину”.

Відкрита модель, на відміну від закритої, дозволяє більш детально проаналізувати умови оптимізації роботи ККД за рахунок геометричного дизайну активної зони. Адже у цій моделі можна оцінювати не лише величину активної провідності у обраному квантовому переході (наприклад $1 \rightarrow 2$), але й задовольняти вимогу, щоб її величина значно переважала провідність у іншому

переході (наприклад $1 \rightarrow 3$), за умови, що парціальна складова (σ_{12}^+) у прямому потоці крізь РТС, значно переважає парціальну складову (σ_{12}^-) в оберненому потоці.

Розраховані часи життя (τ_n) у робочих квазістаціонарних станах електронів з енергіями E_1, E_2, E_3 дозволяють контролювати природну фізичну умову, щоб вони не перевищували часу релаксації електронної енергії у дисипативних процесах за рахунок розсіювання електронів на домішках, фононах, нерівностях поверхонь розділу середовищ та інших факторів, які за оцінками роботи [7], не переважають 20 пс. Крім того великий час життя у основному квазістаціонарному стані призводитиме до накопичення взаємодіючих між собою електронів у активній зоні, що спотворюватиме прямокутний енергетичний профіль наноструктури за рахунок перенормування потенціальної енергії електрона взаємодією з просторовим динамічним зарядом.

На Рис. 7 в, г приведені результати розрахунків логарифмів провідностей і часів життя електронів у робочих квазістаціонарних станах у моделі відкритого каскаду в залежності від розміру (b_1) вхідної ями активної зони каскаду ККД.

З аналізу еволюції динамічної провідності $\sigma_{m'}$ у залежності від b_1 видно, що у моделі відкритого каскаду, як і в моделі закритого каскаду, існують дві області (I, III) зміни b_1 , у яких оптимальним є квантовий перехід $1 \rightarrow 2$ (що і реалізовано експериментально у області III), та одна широка область (II) з оптимальним переходом $1 \rightarrow 3$. Положення і розміри цих областей практично такі ж, як і в моделі закритої наносистеми. Однак, не дивлячись на те, що в області I виконуються умови $\sigma_{12} > \sigma_{13}$, $\sigma_{12}^+ > \sigma_{12}^-$, вона не є оптимальною для роботи ККД, оскільки аналіз часів життя (Рис. 7в) показує, що при такому геометричному дизайні час життя в основному робочому квазістаціонарному стані $\tau_1 \geq 10$ пс стає суттєвим і порівняним за величиною з тривалістю дисипативних процесів. Отже, модель відкритого каскаду показує, що у

експериментальному ККД [127] може існувати лише одна вузька область (III) ($10.5 \text{ нм} \leq b_1 \leq 11.6 \text{ нм}$) для розташування внутрішнього бар'єра відносно зовнішніх бар'єрів активної зони, у якій детектор працюватиме в оптимальному режимі. Адже лише при такій конфігурації активна провідність σ_{12}^+ у прямому потоці значно переважає інші провідності. При цьому, як видно з Рис. 7в часи життя у обох робочих квазістаціонарних станах є досить малими ($\tau_1, \tau_2 \leq 1.3 \text{ пс}$).

Щоб порівняти теоретичні результати з експериментальними, виконувався розрахунок величини енергій (E_1, E_2, E_3) робочих станів при таких значеннях геометричних і фізичних параметрів, які вказані у роботі [127]. У результаті розрахунків виявилось, що теоретичне значення енергії електромагнітного поля $\Omega_{21} = E_2 - E_1 = 120 \text{ меВ}$ відрізняється від експериментального $\Omega_{21}^{\text{exp}} = 116 \text{ меВ}$ на 3,5%, а різниця енергій електронних станів, локалізованих у екстракторі, складає 32 меВ, що практично збігається з величинами енергій обмежених та інтерфейсних фононів, розрахованих у параграфі 6.

Важливо зауважити, що хоча геометричний дизайн експериментального каскаду ККД [27] з шириною вхідної ями ($b_1 = 11,1 \text{ нм}$) активної зони добре узгоджується з цим же значенням b_1 у обох теоретичних моделях, бо воно відповідає близьким до максимальних значень сил осциляторів у закритих моделях чи активних провідностей у відкритих моделях, однак перевага моделі відкритого каскаду у тому, що вона не містить лишніх геометричних конфігурацій активної зони, притаманних закритій моделі, які не відповідають оптимальній роботі ККД. Крім того слід відмітити, що дослідження ймовірності знаходження квазістаціонарних станів електрона з енергіями E_1, E_2 у межах відкритого каскаду ККД з відомими геометричними параметрами [127] показало (Рис 3.8), що робочі електронні стани локалізовані в першій (вхідній) потенціальній ямі активної зони. Це забезпечує прямий квантовий перехід $1 \rightarrow 2$ при поглинанні енергії Ω_{12} з релаксацією електронної енергії у екстракторі. Подальший рух електронів здійснюється тунельним ефектом зі

стану з енергією E_2 на близький за енергією стан E_{e3} , що локалізований у вихідній потенціальній ямі (b_2) активної зони, з якого вже й відбувається релаксація енергії через «фононну драбину».

Отже, розроблена теорія для відкритих та закритих РТС адекватно (в узгодженні з експериментом) показує, що експериментальний ККД працює у режимі двоямної відкритої активної зони з прямим квантовим переходом з подальшою прямою релаксацією енергії через «фононну драбину», а також дозволяє зробити висновок про те, що дослідження відкритих РТС, як моделей каскадів ККД має велику перевагу в порівнянні з дослідженням закритих моделей РТС, оскільки дозволяє виявити і однозначно розрахувати оптимальні геометричні конфігурації активної зони каскаду ККД.

8. Властивості активної електронної провідності багат шарової резонансно-тунельної структури у поздовжньому постійному електричному полі, як основного елемента квантового каскадного лазера

Розвинута теорія дозволяє виявити таку модель плоскої РТС з прикладеним до її шарів постійним електричним полем, яка найкраще описує квантові переходи і транспортні властивості електронів у каскаді ККЛ, і тому дає можливість оптимізувати роботу ККЛ геометричним дизайном активної зони окремого каскаду.

На основі побудованої теорії для відкритих та закритих РТС розрахунки спектральних параметрів, активної динамічної провідності та сил осциляторів квантових переходів виконувалися у чотирьох моделях наносистем: I) дві закриті а) чотирибар'єрна активна зона з інжектором, б) повний каскад; II) дві відкриті а) чотирибар'єрна активна зона з інжектором, б) повний каскад.

Для порівняння з експериментом, в основу досліджуваних моделей було покладено такі фізичні ($U=516$ меВ, $F = 68$ кВ/см, $n_0=2 \cdot 10^{17}$ см⁻³) та геометричні параметри, які вибирались згідно з роботою [27] для відкритого каскаду (Рис.4). Ширини бар'єрів (Δ_p) (5,0; 1,5; 2,2; 3,0; 2,3; 2,2; 2,0; 2,3; 2,8) і ям (b_p) (0,9; 4,7;

4,0; 2,3; 2,2; 2,0; 2,0; 1,9; 1,9), вказані у нанометрах, розташовані зліва направо по РТС.

Слід зауважити, що оскільки переважна більшість шарів ям і бар'єрів РТС експериментального каскаду [27] має дуже малі розміри і містить до чотирьох елементарних комірок, то введення поняття різних ефективних мас електрона у різних шарах наносистеми було б не коректним з фізичної точки зору. Однак активна зона, а тим більше весь каскад, уже містять десятки комірок своїх складових елементів, тому можна очікувати, що вибрана нами усереднена за всіма трьома складовими (GaAs, AlAs, InAs) ефективна маса електрона $m=0.08 m_0$ є більш адекватною реальній фізичній ситуації. Щоб вивчити вплив на роботу ККЛ геометричної конфігурації активної зони окремого каскаду в моделі закритої наносистеми, виконувався розрахунок стаціонарного енергетичного спектру (E_n^c) і сил осциляторів квантових переходів ($f_{mn'}$), а у відкритій моделі – резонансних енергій (E_n), часів життя (τ_n), активної динамічної провідності ($\sigma_{mn'}$) та її парціальних складових $\sigma_{mn'}^{\pm}$. На рис. 9 приведені результати розрахунків усіх вказаних величин у залежності від ширини (b_1) вхідної ями чотирибар'єрної активної зони, тобто від положення внутрішнього двобар'єрного елемента між двома зовнішніми бар'єрами активної зони при фіксованих розмірах усіх інших елементів каскаду.

Необхідно відмітити, що, як показали розрахунки, залежності від величини b_1 відповідних електронних спектрів у закритих і відкритих системах збігаються між собою з точністю не гірше десятої відсотка. Крім цього, з Рис. 9а видно, що залежності від b_1 перших трьох резонансних енергій, розрахованих у моделі відкритої чотирибар'єрної активної зони, збігаються з відповідними залежностями резонансних енергій (E_1, E_2, E_3) тих трьох станів, розрахованих в моделі відкритого повного каскаду, у яких електрон з найбільшою ймовірністю перебуває у межах активної зони. На Рис. 3.9д приведено також і резонансні енергії $E_{i1} \div E_{i4}$ (тонкі лінії), що належать КСС, у яких електрони з більшою ймовірністю перебувають у інжекторній частині каскаду.

Згідно з геометричним дизайном каскаду експериментального ККЛ [27], він був улаштований так, щоб електронний потік потрапляв у стан $|3\rangle$ активної зони каскаду. У активній зоні відбувається квантовий перехід у стан $|2\rangle$ з випромінюванням електромагнітного поля з енергією $\Omega_{32} = E_3 - E_2$ і виходом електронів крізь інжектор у наступний каскад. Крім цього, за рахунок електрон-фононої взаємодії, частина електронів переходить у стан $|1\rangle$, з якого електрон також тунелює у наступний каскад. Так як зі стану $|3\rangle$ квантові переходи можуть відбуватися як у стан $|2\rangle$, так і у стан $|1\rangle$, то їх потрібно порівняти між собою. З цією метою у моделі закритої системи розраховувалися сили осциляторів квантових переходів f_{32} і f_{31} у залежності від величини b_1 . Результати розрахунків для закритої моделі чотирибар'єрної активної зони приведені на Рис. 9г, а для моделі повного заритого каскаду – на Рис. 9 ж.

Умовою оптимізації роботи ККЛ можна вважати досягнення максимального значення сили осцилятора квантового переходу, наприклад, f_{32} , між станами $|3\rangle$ і $|2\rangle$, які забезпечують потрібну енергію випромінювання електромагнітного поля (у нашому випадку $\Omega_{32}=E_3-E_2$) при тому, щоб сила осцилятора квантового переходу f_{31} була на порядок меншою. З Рис. 3.8 г видно, що у моделі закритої чотирибар'єрної активної зони є дві області (I і II) зміни b_1 (на рисунку тоновані), де згадана умова виконується. При цьому область I краща, ніж II, тому що $f_{32}^I > f_{32}^{II}$. Як видно, експериментальне значення b_1^{exp} практично відповідає максимальному значенню f_{32} , як функції від b_1 . У закритій моделі повного каскаду (Рис. 9ж) є одна область зміни b_1 (I), де $f_{32} > f_{31}$ і одна область (II), де $f_{31} > f_{32}$. При цьому експериментальне значення b_1^{exp} також практично збігається з тим значенням b_1 , яке відповідає максимальному значенню f_{32} , а ширина і положення оптимальної області зміни b_1 у цій моделі практично такі ж, як і в моделі чотирибар'єрної активної зони. Ще потрібно відмітити, що в

повнокаскадній моделі існує область (II) у якій $f_{31} > f_{32}$, і тому здавалось би, що ККЛ міг би працювати за рахунок квантового переходу $3 \rightarrow 1$. Однак, як це буде видно далі, у більш адекватній відкритій моделі такої можливості не існує.

У двох моделях (активної зони Рис. 9а, б, в і повного каскаду Рис. 9д, е, є) відкритої наносистеми розраховувалися залежності від b_1 резонансних енергій (E_n, E_{in}), часів життя (τ_n), активних динамічних провідностей (σ_{32}, σ_{31}) та їх парціальних складових ($\sigma_{32}^{\pm}, \sigma_{31}^{\pm}$).

Перш ніж аналізувати отримані результати зауважимо, що у відкритій моделі активної зони розрахунок величин активних провідностей і їх парціальних складових виконувався з усередненням по тій області енергій, де рівномірно розташовані рівні інжекторної зони ($E_{i4} - E_{i1}$). Розрахунок цих величин провідностей у відкритій моделі окремого повного каскаду виконувався з урахуванням тієї обставини, що електрони з попереднього каскаду виходять з енергією E_1 , яка зміщена відносно резонансної енергії E_3 досліджуваного каскаду на величину $E_3 - E_1 - eFb$.

На відміну від закритих, відкриті моделі дозволяють детальніше і адекватніше проаналізувати умови оптимізації роботи ККЛ за рахунок геометричного дизайну активної зони. Адже у цих моделях можна оцінювати не лише величину активної динамічної провідності у потрібному квантовому переході (наприклад, $3 \rightarrow 2$), але й задовольняти вимогу, щоб ця величина значно переважала провідність у близькому за енергією переході (наприклад, $3 \rightarrow 1$), при умові, що парціальна складова провідності (σ_{32}^+) у напрямку прямого потоку крізь РТС значно переважає парціальну складову провідності (σ_{31}^-) в оберненому потоці.

Результати розрахунків провідностей і часів життя у відповідних квазістаціонарних станах ($n = 1, 2, 3$) у відкритих моделях активної зони та повного каскаду в залежності від величини b_1 приведені на Рис. 3.9б, в і є, е відповідно.

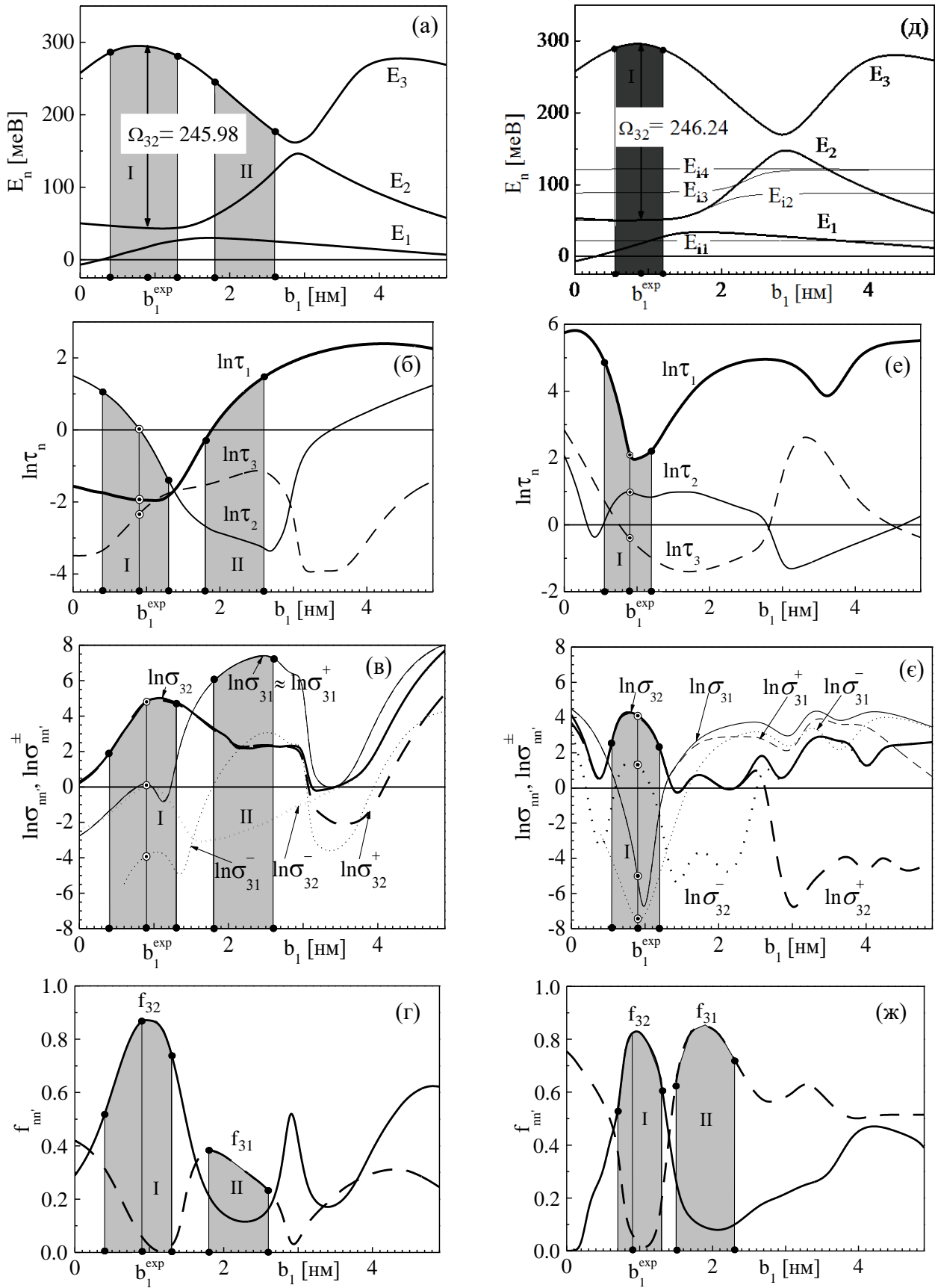


Рис. 9. Еволюція спектру, часів життя, сил осциляторів та динамічних провідностей у залежності від ширини (b_1) вхідної ями активної зони ККЛ

Аналіз еволюції τ_n , $\sigma_{m'}$, $\sigma_{m'}^{\pm}$ у залежності від b_1 показує, що у моделі відкритої чотирибар'єрної активної зони (Рис. 9б, в) існують дві області зміни b_1 де: I – оптимальними є квантові переходи $3 \rightarrow 2$ (що і реалізовано експериментально), II – оптимальними є переходи $3 \rightarrow 1$. З Рис.9в видно, що ця модель, подібно до моделі закритого каскаду, вказує на можливість реалізації переходу $3 \rightarrow 1$, однак у цій вузькій області (II) зміни b_1 , час життя у першому квазістаціонарному стані досить малий ($\tau_1 \leq 1 \div 3$ пс < 10 пс).

Модель повного відкритого каскаду (Рис. 3.9е, є) найбільш адекватно описує властивості потоку електронів крізь резонансно-тунельну структуру ККЛ з випромінюванням електромагнітного поля при квантових переходах. З Рис. 9є видно, що в ній, як і в моделі відкритої активної зони, також є дві області зміни b_1 (I і II) у яких добре виконуються умови оптимізації роботи ККЛ (у переходах $3 \rightarrow 2$ і $3 \rightarrow 1$ відповідно). Положення і розміри цих областей практично такі ж, як і в моделі відкритої активної зони і в моделі закритого повного каскаду. Однак аналіз часів життя τ_1 , τ_2 , τ_3 (Рис. 9е) показує, що насправді область II не є оптимальною, так як при такому геометричному дизайні час життя $\tau_1 \geq 10$ пс стає порівняним за величиною з тривалістю дисипативних процесів, які виводять ККЛ з когерентного стану. Отже, модель відкритого каскаду показує, що у експериментально створеному ККЛ [27] існує лише одна вузька область (I) ($0.55 \text{ нм} \leq b_1 \leq 1.2 \text{ нм}$) розташування внутрішньої двобар'єрної структури відносно зовнішніх бар'єрів активної зони, у якій лазер працює в оптимальному режимі. Адже лише при такій конфігурації активна провідність σ_{32} у прямому потоці значно переважає інші провідності. При цьому, як видно з Рис. 3.8е, не лише часи життя у обох робочих квазістаціонарних станах є досить малими ($\tau_3, \tau_2 \leq 2$ пс), а й час життя у першому квазістаціонарному стані ($\tau_1 \leq 10$ пс), через який внаслідок взаємодії з фононами [27], здійснюється витік електронів у наступний каскад, також виявляється мінімальним.

Для порівняння з експериментальними результатами роботи [27] у всіх чотирьох теоретичних моделях виконувався розрахунок усіх досліджуваних

величин при таких значеннях геометричних і фізичних параметрів, які вказані у цитованій роботі [27]. У результаті таких розрахунків виявилось, що у всіх чотирьох моделях величини енергій (E_1 , E_2 , E_3) робочих станів відрізняються між собою не більше ніж на 0.1%. Внаслідок цього у всіх моделях теоретичне значення енергії лазерного випромінювання $\Omega_{32}=E_3-E_2=246\text{meV}$ відрізняється від експериментального $\Omega_{32}^{\text{exp}} = 238.8\text{ meV}$ на 3%, а різниця енергій $E_2 - E_1=34\text{ meV}$ добре корелює з величинами енергій обмежених та інтерфейсних фононів.

Нарешті потрібно відмітити, що, хоча експериментальний геометричний дизайн каскаду ККЛ [27] з шириною вхідної ями ($b_1 = 0.9\text{ нм}$) чотирибар'єрної активної зони добре узгоджується з цим же значенням b_1 у всіх теоретичних моделях, однак найбільш адекватною є лише модель повного відкритого каскаду, бо не містить тих притаманних іншим моделям, геометричних конфігурацій активної зони, які не відповідають оптимальній роботі ККЛ.

Висновки до розділу 5

Розвинена теорія квазістаціонарних станів електронів та активної динамічної провідності відкритих багатошарових РТС у постійному електричному полі та без нього з урахуванням взаємодії електронів зі слабким високочастотним електромагнітним полем.

Розвинена теорія стаціонарного електронного спектру та сил осциляторів квантових переходів у закритих багатошарових РТС у постійному електричному полі та без нього. Виконано розрахунок фононного спектру в двоямній РТС, що може слугувати активною зоною ККЛ та ККД.

На прикладі експериментально реалізованого ККД з двоямною активною зоною окремого каскаду показано, що лише модель відкритої РТС як повного каскаду дозволяє надійно оптимізувати геометричний дизайн активної зони та описувати фізичні процеси при тунелюванні електронів крізь каскад ККД.

На прикладі експериментально реалізованого ККЛ з чотирибар'єрною активною зоною окремого каскаду показано, що лише модель відкритої РТС як

повного каскаду дозволяє надійно оптимізувати геометричний дизайн активної зони.

Список використаної літератури

1. J. Faist, F. Capasso, D. L. Sivco [et al.] Quantum Cascade Laser. *Science*. 1994. Vol. 264. No. 5158. P.533–556.
2. J. Faist, C. Sirtori, F. Capasso [et al.] High-power long wavelength ($\lambda \sim 11,5 \mu\text{m}$) quantum cascade lasers operating above room temperature/ *IEEE Photon. Technol. Lett.* 1998. Vol. 10. No. 8. P. 1100–1102.
3. M. Rochat, J. Faist, M. Beck [et al.] Far-infrared ($\lambda = 88 \mu\text{m}$) electroluminescence in a quantum cascade structure/ *Appl. Phys. Lett.* 1998. Vol. 73. No. 25. P. 3724–3727.
4. C. Sirtori, P. Kruck, S. Barbieri [et al.] GaAs/Al_xGa_{1-x}As Quantum Cascade Lasers. *Appl. Phys. Lett.* 1998. Vol. 73. No. 24. P. 3486–3489.
5. D. Hofstetter, J. Faist, M. Beck and U. Oesterle Surface-emitting 10.1 μm quantum-cascade distributed feedback lasers. *Appl. Phys. Lett.* 1999. Vol. 75. No. 24. P. 3724–3727.
6. C. Sirtori, P. Kruck, S. Barbieri [et al.] Low-loss Al-free waveguides for unipolar semiconductor lasers. *Appl. Phys. Lett.* 2004. Vol. 75. No. 25. P. 3911–3914.
7. C. Sirtori, S. Barbieri, P. Kruck [et al.] Influence of DX Centers on the Performance of Unipolar Semiconductor Lasers Based GaAs/Al_xGa_{1-x}As. *IEEE Photon. Technol. Lett.* 1999. Vol. 11. No. 9. P. 1090–1092.
8. D. Hofstetter, J. Faist Measurement of semiconductor laser gain and dispersion curves utilizing Fourier transforms of the emission spectra. *IEEE Photon. Technol. Lett.* 1999. Vol. 11. No. 11. P. 1372–1374.
9. A. Müller, M. Beck J. Faist [et al.] Electrically tunable, room-temperature quantum-cascade lasers. *Appl. Phys. Lett.* 1999. Vol. 75. No. 11. P. 1509–1512.
10. S. Blaser, D. A. Yarekha, L. Hvozdar [et al.] Room-temperature, continuous-wave, single-mode quantum-cascade lasers at $\lambda \simeq 5.4 \mu\text{m}$. *Appl. Phys. Lett.* 2004. Vol. 86. No. 4. P. 041109-1–041109-3.

11. A. Wittmann, M. Giovannini, J. Faist [et al.] Room temperature, continuous wave operation of distributed feedback quantum cascade lasers with widely spaced operation frequencies. *Appl. Phys. Lett.* 2006. Vol. 89. No. 14. P. 141116-1–141116-3.
12. A. Mohan, A. Wittmann, A. Hugi [et al.] Room-temperature continuous-wave operation of an external-cavity quantum cascade laser. *Opt. Lett.* 2007. Vol. 32. No. 19. P. 2792–2794.
15. M. Geiser, C. Walther, G. Scalari [et al.] Strong light-matter coupling at terahertz frequencies at room temperature in electronic LC resonators. *Appl. Phys. Lett.* 2010. Vol. 97. No. 19. P. 191107-1–19110-3.
13. A. Bismuto, M. Beck and J. Faist High power Sb-free quantum cascade laser emitting at 3.3 μm above 350 K. *Appl. Phys. Lett.* 2011. Vol. 98. No. 19. P. 191104-1–191104-3.
14. L. Tombez, J. Di Francesco, S. Schilt [et al.] Frequency noise of free-running 4.6 μm distributed feedback quantum cascade lasers near room temperature. *Opt. Lett.* 2011. Vol. 36. No. 16. P. 3109–3111.
15. M. Geiser, G. Scalari, F. Castellano, M. Beck and J. Faist Room temperature terahertz polariton emitter. *Appl. Phys. Lett.* 2012. Vol. 104. No. 14. P. 141118-1–141118-4.
16. D. Hofstetter, M. Beck and J. Faist Quantum-cascade-laser structures as photodetectors. *Appl. Phys. Lett.* 2002. Vol. 81. No. 15. P. 2683–2685.
17. G. Scalari, M. Graf, D. Hofstetter [et al.] A THz quantum cascade detector in a strong perpendicular magnetic field. *Semicond. Sci. Technol.* 2002. Vol. 21. No. 12. P. 1743–1746.
18. F. R. Giorgetta, E. Baumann, M. Graf [et al.] 16.5 μm quantum cascade detector using miniband transport. *Appl. Phys. Lett.* 2007. Vol. 90. No. 23. P. 231111-1–231111-3.
19. F. R. Giorgetta, E. Baumann, R. Théron [et al.] Short wavelength (4 μm) quantum cascade detector based on strain compensated InGaAs/InAlAs. *Appl. Phys. Lett.* 2008. Vol. 92. No. 12. P. 121101-1–121101-3.

20. H. Schneider, H. C. Liu, S. Winnerl [et al.] Room-temperature midinfrared two-photon photodetector. *Appl. Phys. Lett.* 2008. Vol. 93. No. 10. P. 101114-1–101114-3.
21. L. Diehl, M. Beck, J. Faist [et al.] Characterization and modeling of quantum cascade lasers based on a photon-assisted tunneling transition. *IEEE J. Quantum Electron.* 2001. Vol. 37. 3. P. 448–455.
22. H. Willenberg, G. H. Döhler and J. Faist Intersubband gain in a Bloch oscillator and quantum cascade laser. *Phys. Rev. B.* 2003. Vol. 67. No. 8. P. 085315-1–080315-10.
23. G. Scalari, L. Ajili, J. Faist [et al.] Far-infrared ($\lambda \sim 87 \mu\text{m}$) bound-to-continuum quantum-cascade lasers operating up to 90 K. *Appl. Phys. Lett.* 2003. Vol. 82. No. 19. P. 3165–3167.
24. C. Sirtori, J. Faist, F. Capasso and A. Y. Cho The quantum cascade laser. A device based on two-dimensional electronic subbands. *Pure. Appl. Opt.* 1998. Vol. 7. No. 2. P. 373–381.
25. E. Dupont, S. Fatholouloumi, and H. C. Liu Simplified density-matrix model applied to three-well terahertz quantum cascade lasers. *Phys. Rev. B.* 2010. Vol. 81. No. 20. P. 205311-1–205311-10.
26. K. Rapedius, and H. J. Korsch Barrier transmission for the nonlinear Schrödinger equation: surprises of nonlinear transport. *J. Phys. A: Math. Theor.* 2008. Vol. 77. No. 2008. 355001. 6. p.
27. K. Rapedius, and H. J. Korsch Resonance solutions of the nonlinear Schrödinger equation in an open double-well potential. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 2009. Vol. 42. No. 2009. 044005. 12 p.

РОЗДІЛ 6. ВИСОКОПРОДУКТИВНІ МЕТОДИ ТА ІНФОРМАЦІЙНІ ТЕХНОЛОГІЇ МОДЕЛЮВАННЯ ТА ІНДЕНТИФІКАЦІЇ ПАРАМЕТРІВ АНОРМАЛЬНИХ РУХІВ ПІД ДІЄЮ ЗВОРОТНИХ КОГНІТИВНИХ ВПЛИВІВ

1. Аналіз стану досліджень проблеми АНР

Новітні інформаційні технології та методи моделювання в розробці комп'ютерної діагностичної системи покращують вирішення проблеми лікування критичних захворювань у світі, особливо людей, уражених неврологічними захворюваннями, такими як аномальні неврологічні рухи (АНР) або тремтіння та їх екстремальні форми. у вигляді хвороб Альцгеймера, Паркінсона [1]. АНР – небажані коливальні рухи певної частини тіла (рук, органів мови, очних яблук), що виникають внаслідок мимовільного скорочення м'язів людини [2]. Ознаками порушень регуляції рухів людини є збільшення їх амплітуди, зміна частоти і форми коливань. Аналіз цих параметрів АНР має вирішальне значення для розуміння ролі дисфункції зворотного зв'язку (feedback) в нейронних вузлах кори головного мозку (КГМ) у процесах когнітивного контролю рухів людини та раннього виявлення нейромоторних розладів.

Складність ідентифікації АНР полягає в недосконалому існуючих методів діагностики, їх низькій точності, а також у відсутності математичних і програмних засобів ідентифікації нервово-зворотного впливу КГМ-вузлів на їх поведінку [2]. Дослідження нейросистем, пов'язані з аналізом поведінки пацієнтів із симптомами тремору (Т-об'єкти), проводилися рядом дослідників, таких як Pullman S.L., Legrand A.-P., Vidailhet M. (ESPCI Paris Tech, ICeM CNRS), Ван Дж.-С., Луї Е., Хаубенбергер Д., Каловіц Д. та інші. [2–5]. Тут основну увагу було приділено аналізу параметрів відносно нормального стану та поведінки пацієнтів за допомогою класичних методів цифрової обробки на основі перетворення Фур'є [5–12]. Однак такі методи на сьогодні вже вичерпали себе і не дозволяють аналізувати аномальні стани зі складною, важкопрогнозованою поведінкою, яка притаманна реальним Т-об'єктам з

високим ступенем тремору. Через недосконалість таких методів відбувається втрата 60–80% важливої інформації з опису реального стану пацієнтів, що де-факто зумовлює низьку якість такого аналізу.

2. Пропоновані підходи до вирішення проблеми аналізу АНР під дією зворотних когнітивних впливів

Авторами запропоновано високопродуктивну інформаційну технологію дослідження АНР, побудовану на основі гібридної моделі аналізу сигналів нейросистеми, яка описує стан і поведінку 3D елементів траєкторій АНР Т-об'єкта з урахуванням когнітивні ефекти нервового зворотного зв'язку ідентифікованих вузлів КГМ з використанням комп'ютерного тестування рухів Т-об'єкта, що робить спроби відтворення шаблонних тестових траєкторій (у вигляді спіралі Архімеда та ін. тестів). За допомогою методів гібридних перетворень Фур'є побудовано швидкісні аналітичні розв'язки моделі аналізу АНР у вигляді векторних функцій, які визначають елементи тестових траєкторій рухів Т-об'єкта на кожному сегменті АНР [13–16]. На їх основі запропоновано високопродуктивні алгоритми ідентифікації параметрів АНР для покомпонентної оцінки ефектів нейро-зворотного зв'язку, які дозволяють розпаралелювати обчислення.

Спосіб збору даних АНР за допомогою графічного планшета. Якісне оцінювання характеристик АНР шляхом та кількісного покращення схем комп'ютерного тестування АНР вимагає знання точного положення електронного пера Т-об'єкта, що проходить тест на цифровому планшеті та тиску пера на поверхню планшета як функції часу впродовж усієї тривалості експерименту. Для визначення координат X і Y як функцій часу цього необхідне використання графічного планшета зі спеціально адаптованим програмним забезпеченням, що забезпечує високу частоту і точність збору даних. З цих причин був обраний графічний планшет WACOM Bamboo Fun Medium. Його активна зона (відповідає 217 мм x 137 мм) сумісна із загальноприйнятими моделями шкали оцінки тремору Фана-Толози-Маріна

(FTRS) [4]. Рідер має роздільну здатність введення пера 2540 dpi, точність 0,25 мм і швидкість розпізнавання 133 точки в секунду (згідно зі специфікаціями виробника). Крім того, даний планшет дозволяє відображати тиск пера під час малювання на площині та вимірювати рухи на відстані до 16 мм над поверхнею пера, що дозволяє візуалізувати рухи пацієнта в просторі.



Рис. 1. Візуальне представлення використання графічного планшета Wascom Bamboo 2.2. Комп'ютерна електроенцефалографічна система NeuroCom виробництва ХАЙ-МЕДИКА

Для дослідження електроенцефалографічних (ЕЕГ) сигналів КГМ обрано комп'ютерний електроенцефалограф НЕЙРОКОМ – п'яте покоління розроблених комплексів комп'ютерної електроенцефалографії. Енцефалограф в комплексі призначений для реєстрації, поглибленого аналізу та інтерпретації ЕЕГ і викликаних потенціалів (ВП), проведення різноманітних аналізів для наукових досліджень.

Шолом для аналізу конітивних сигналів кори головного мозку із встановленою апаратно-програмною платформою виробника забезпечує 16-канальний відбір енцефалограм і передачу їх на персональний комп'ютер за відповідним протоколом. Програмне кондиціонування сигналів ЕЕГ і постобробка відбувається на ПК. Дані зберігаються як у необробленому тексті, так і у візуалізованому представленні в кожен момент часу. Дані зчитуються з кожного каналу відведення з інтервалом 2 мс (частота 500 Гц).

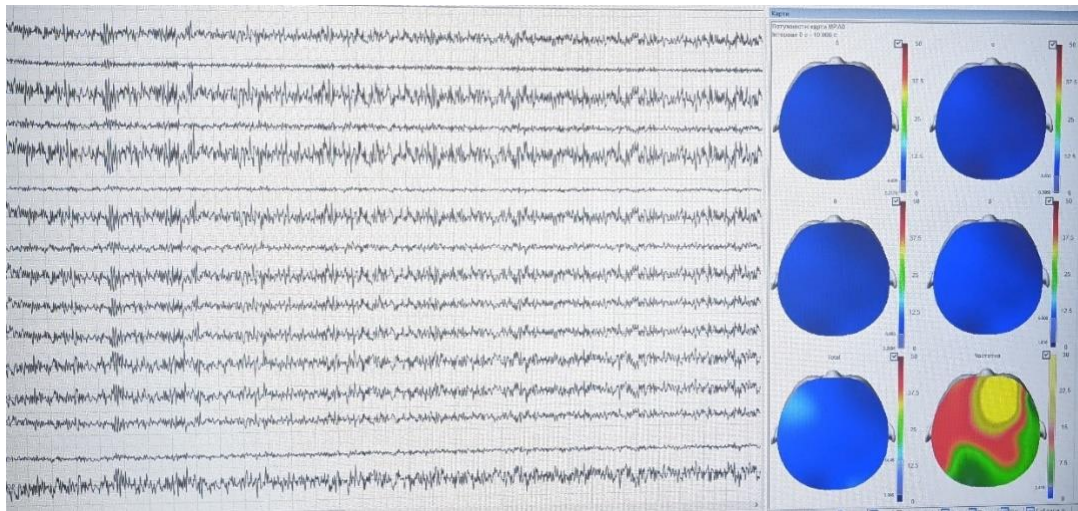


Рис. 2. Візуальне представлення процесу збору даних від електроенцефалографічного комплексу NeuroCom

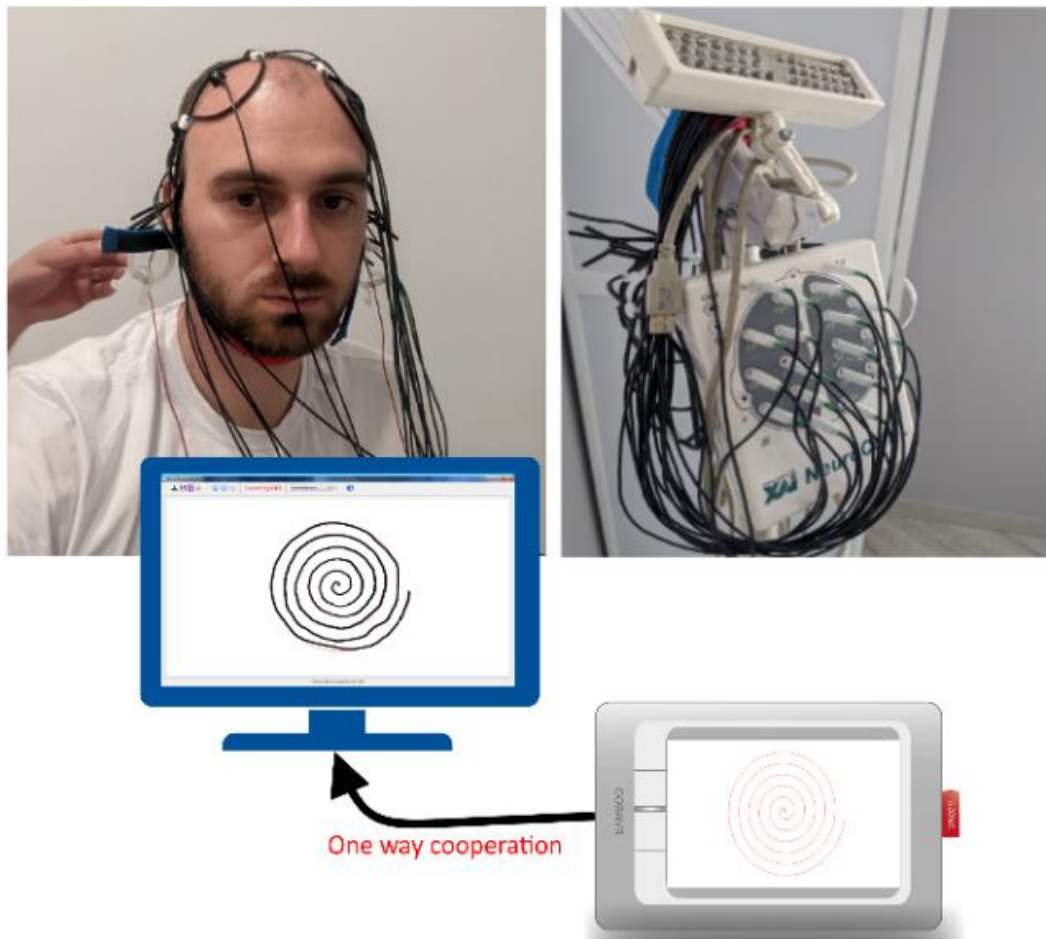


Рис. 3. Ілюстрація використання дослідницького обладнання 3. Гібридна математична модель аналізу Т-об'єкта АНР з урахуванням когнітивних нейро-зворотних впливів вузлів КГМ

Гібридний модельний аналіз АНР, побудований на основі концепції поширення хвильового сигналу, визначає поsegmentний опис елементів траєкторій АНР з урахуванням матриці когнітивних feedback-впливів вектора сигналів нейровузлів КГМ на сегментах АНР [13].

В основі реалізації лежить метод визначення положення електронного пера, з допомогою якого Т-об'єкт відтворює траєкторію руху шаблону (спіралі Архімеда) на екрані інтерактивного планшета [14, 15]. Відхилення траєкторії руху пера від шаблону має складну форму (рис. 4) і дає оцифровану інформацію для визначення неврологічного стану Т-об'єкта.

Слід руху пера розбивається на простіші елементи з метою декомпозиції складних АНР-рухів у схематизації моделі. Кількість поділок залежно від складності зображення АНР можна вибирати довільно. Гібридна модель забезпечує кількісні амплітудно-частотні характеристики АНР. Для врахування когнітивних feedback-впливів на поведінку АНР системи використовуються отримані цифрові набори індикаторів ЕЕГ-сигналів, які синхронно з рухом електронного пера Т-об'єкта надходять від 16-ти елементного вектора часових послідовностей сигналів, що поступають від ЕЕГ-сенсорів, встановлених на визначених на нейровузлах КГМ.

Вектор ЕЕГ-сигналів в цілому визначають динаміку АНР для кожного j -го сегмента складної АНР-траси, де $j = 1, n_1$ – номер поточного сегмента АНР, n_1 – кількість сегментів розбиття усєї траси АНР (рис. 4). У моделі розбиття може бути встановлено автоматично будь-яким способом, з будь-якою кінцевою кількістю сегментів. Їх довжина також може бути різною залежно від вибору рівня деталізації ділянок руху. Слід зауважити, що згідно концепції запропонованої гібридної моделі, когнітивні feedback-впливи вектор ЕЕГ-сигналів впливають тільки на поточні сегменти АНР-траси, що синхронізовані по часу проходження зі значеннями компонентів ЕЕ – вектора та обумовлюють визначену спадну експоненціальну післядію на майбутні ділянки коливного руху (на пройдені ділянки руху ці впливи відсутні, що природньо).

Visualisation de l'influence des composants du vecteur de neurosignaux $S(t)$ sur les éléments de MNA-trace $(l_{j-1}, l_j), j = 1, n_1$

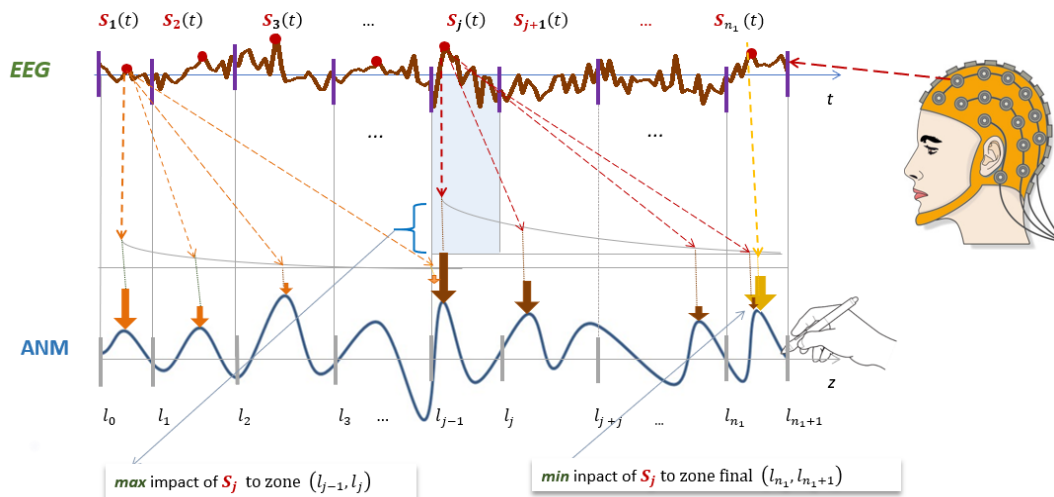


Рис. 4. Схематизація та візуалізація почасових когнітивних feedback-впливі компонентів вектора зв'язків ЕЕГ-сигналів нейровузлів КГМ на окремі елементи АНР-траси $(l_{j-1}, l_j), j = 1, n_1$ в рамках гібридної моделі АНР-аналізу

3. Опис математичної моделі функціональної ідентифікації АНР

Для представлення математичного розв'язку у вигляді реалізації процедури функціональної ідентифікації амплітудних складових і фазової швидкості розповсюдження хвилі АНР як функцій часу в рамках декомпозиції моделі, враховуючи умови, що відомі траси (дані спостереження у вигляді цифрових даних АНР-рухів Т-об'єкта) розв'язку для кожного k -го сегмента, отримана наступна система прямих початково-крайових задач (мікромоделей) для послідовних сегментів АНР [13]:

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} u_k(t, z) = b_k^2 \frac{\partial^2}{\partial z^2} u_k + S_k^*(t, z). \quad (1)$$

з початковими умовами

$$u_k(t, z)|_{t=0} = 0, \quad \frac{\partial u_k}{\partial t} \Big|_{t=0} = 0, \quad k = \overline{1, n_1 + 1}. \quad (2)$$

Крайові умови на кожному з тонких сегментів АНР по z

$$u_{k-1}(t, z)|_{z=l_{k-1}} = U_{L_{k-1}}, \quad u_k(t, z)|_{z=l_k} = U_{l_k}, \quad k = \overline{1, n_1 + 1} \quad (3)$$

Вибір функціонала-нев'язки. Вважаємо, що компоненти фазової швидкості поширення хвилі АНР b_k , $k = \overline{1, n_1 + 1}$ крайової задачі (1–3) є невідомими функціями від часу. При відомих значеннях положення пера $u_k(t, z)$ в точках спостереження на сегментах АНР $\gamma_k \subset \Omega_k$, $k = \overline{1, n_1 + 1}$

$$u_k(t, z)|_{\gamma_k} = U_{l_k}(t, z)|_{\gamma_k}. \quad (4)$$

початково-крайова задача (6.1)–(6.4) може бути розглянута для кожної точки z для кожного тонкого k_l -го сегмента траси АНР і полягатиме в знаходженні функцій $b_k \in D$, де $D = \left\{ v(t, z): v|_{\Omega_{k_{IT}}} \in C(\Omega_{k_{IT}}), v > 0, k = \overline{1, n_1 + 1} \right\}$.

Функціонал-нев'язка відхилення розв'язку від його слідів на $\gamma_{k_1} \in \Omega_{k_1}$, згідно [14] запишеться у вигляді

$$J_k(b_k) = \frac{1}{2} \int_0^T \left(\|u_k(t, z, b_k) - U_k^*\|^2 \right) dt. \quad (5)$$

Методика розв'язання прямої крайової задачі ідентифікації. Побудова та математичне обґрунтування розв'язку задачі здійснюється шляхом використання скінченного інтегрального перетворення Фур'є. Застосувавши до задачі (1)–(4) інтегральні оператори [13]:

$$F[u_k(t, z)] = \int_{k-1}^{l_k} u_k(t, z) V_m(\beta_m, z) dz \equiv U_{km}(t), \quad F^{-1}[U_{km}(t)] = \sum_{m=0}^{\infty} U_{km}(t) \frac{V_m(\beta_m, z)}{\|V_m(\beta_m, z)\|^2} \equiv u_k(t, z), \quad (6)$$

$$F\left[\frac{\partial^2}{\partial z^2} u_k(t, z)\right] = -\beta_m^2 U_{km}(t) + \beta_m U_{l_{k-1}} \left[1 - (-1)^m \frac{U_{l_k}}{U_{l_{k-1}}}\right] = -\beta_m^2 U_{km}(t) + \beta_m U_{l_{k-1}} - \beta_m (-1)^m U_{l_k},$$

$$V_k(\beta_m, z) = \sin \beta_m (z - l_{k-1}), \quad \beta_m = \frac{m\pi}{\Delta h}, \quad \|V_k\|^2 = \int_{l_{k-1}}^{l_k} [V_k(\beta_m, z)]^2 dz = \frac{\Delta h}{2},$$

$$\sin \beta(l_k - l_{k-1}) = 0$$

Розв'язок задачі (1)–(4) після низки перетворень одержано у формі зручній і ефективній для числових ітераційних розрахунків для використання в процедурах ідентифікації параметрів:

$$u_k(t, z) = \frac{2}{\Delta l} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1 - \cos(b_k \beta_m t)}{\beta_m} \sin \beta_m (z - l_{k-1}) \left(S_k^* \frac{1}{(b_k \beta_m)^2} \left((-1)^m - 1 \right) + U_{l_{k-1}} \left(1 - (-1)^m \frac{U_{l_k}}{U_{l_{k-1}}} \right) \right) \quad (7)$$

4. Метод розв'язання спряженої крайової задачі АНР

У відповідності з вихідною прямою початково-крайовою задачею (1)–(5), слідуючи [14] для кожного наближення b_k^n , розв'язку b_k вводимо до розгляду спряжену часово-крайову задачу

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \phi_k(t, z) + b_k \frac{\partial^2}{\partial z^2} \phi_k(t, z) = \left(u_{k_k}^n - U_k^* \right) \Big|_{z=\gamma_k} \delta(z - \gamma_k), \quad k = \overline{1, n_1 + 1} \quad (8)$$

умовами при $t = T$

$$\phi_k(t, z) \Big|_{t=T} = 0 \quad (9)$$

та крайовими умовами першого роду для кожного наближення $D_{sp k}^n$, розв'язку

$$\phi_k(t, z) \Big|_{z=l_{k-1}} = 0; \quad \phi_k(t, z) \Big|_{z=l_k} = 0, \quad (10)$$

Аналітичний розв'язок спряженої часово-крайової задач (6.10)–(6.10) отримуємо у вигляді [14]:

$$\phi_k(t, z) = \int_{t=l_{k-1}}^T \int_{l_{k-1}}^{l_k} \bar{H}_k(t - \tau, z, \xi) \left(u_{k_k}^n - U_k^* \right) \Big|_{z=\gamma_k} \delta(z - \gamma_k) d\xi d\tau, \quad (11)$$

де

$$\bar{H}_k(t - \tau, z, \xi) = \frac{2}{\Delta h} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\text{sh } b_k \beta_m (t - \tau)}{b_k \beta_m} \sin \beta_m (\xi - l_{k-1}) \sin \beta_m (z - l_{k-1}).$$

Розв'язок (11) спряженої задачі (8)–(9) після інтегрування і низки перетворень конвертуємо у формі зручній і ефективній для числових ітераційних розрахунків для використання в процедурах ідентифікації параметрів.

$$\phi_k(t, z) = \frac{2}{\Delta h} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1 - \operatorname{ch}(b_k \beta_m (T - t))}{(b_k \beta_m)^2} \sin \beta_m \gamma_k \sin \beta_m (z - l_{k-1}) (U_k^* - u_{k_k}^n), \quad k = \overline{1, n_1 + 1}$$

5. Формули аналітичних виразів градієнтів функціонала-нев'язки

Вирази компонентів градієнтів функціонала-нев'язки для необхідних коефіцієнтів b_k :

$$\nabla J_{b_k} = \int_0^T \int_{l_{k-1}}^{l_k} \phi_k(t, z) \frac{\partial^2}{\partial z^2} u_k(t, z) dz dt.$$

Для задач функціональної ідентифікації формули для компонентів градієнтів функціоналу невязки як функції від часу або координати, отримуємо, знімаючи відповідний інтеграл по t чи z

$$\nabla J_{b_k}(t) = \int_{l_{k-1}}^{l_k} \phi_k(t, z) \frac{\partial^2}{\partial z^2} u_k(t, z) dz, \quad (12)$$

$$\nabla J_{b_k}(z) = \int_0^T \phi_k(t, z) \frac{\partial^2}{\partial z^2} u_k(t, z) dt. \quad (13)$$

Тут подані точні аналітичні вирази компонентів підінтегральних виразів (12), (13):

$$\phi_k(t, z) = \frac{2}{\Delta h} \sum_{m=0}^{\infty} \frac{1 - \operatorname{ch}(b_k \beta_m (T - t))}{(b_k \beta_m)^2} \sin \beta_m \gamma_k \sin \beta_m (z - l_{k-1}) (U_k^* - u_{k_k}^n), \quad k = \overline{1, n_1 + 1}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} u_k(t, z) = -\frac{2}{\Delta l} \sum_{m=0}^{\infty} \beta_m (1 - \cos(b_k \beta_m t)) \sin \beta_m (z - l_{k-1}) \left(S_k^* \frac{1}{(b_k \beta_m)^2} ((-1)^m - 1) + U_{l_{k-1}} \left(1 - (-1)^m \frac{U_{l_k}}{U_{l_{k-1}}} \right) \right),$$

Регуляризаційні вирази для $n+1$ -го кроку визначення ідентифікуючої залежності отримуються далі.

З використанням методу мінімальних похибок для визначення залежності функціональної ідентифікації компоненти амплітудного коефіцієнта коливного руху сигналу b_k^{n+1} як константу (параметр) на відрізьку або у вигляді функціональної залежності від часу t чи z , або від двох змінних

для кожного k -го елемента АНР $k = \overline{1, n_1 + 1}$. Зокрема, для функціональної залежності від часу t маємо такий регуляризаційні вирази:

$$b_k^{n+1}(t) = b_k^n(t) - \nabla J_{b_k}^n(t) \frac{\|u_k(t, \gamma_k, b_k) - U_k^*\|^2}{\|\nabla J_{b_k}^n(t)\|_{\gamma_k}^2}, \quad t \in (0, T), \quad k = \overline{1, n_1} \quad (14)$$

6. Матричний алгоритм ідентифікації вектора адаптивних коефіцієнтів впливу матриці когнітивних ЕЕГ сигналів на вектор сегментів траєкторії АНР

Формула зв'язку вектор сегментів траєкторії коливного руху електронного пера $[u_j(t)]$, $j = \overline{1, n+1}$ з матрицею матриці сигналів сенсорів ЕЕГ $[S_{ij}(t)]$, $i = \overline{1, m}$; $j = \overline{1, n+1}$, де m – кількість сенсорів ЕЕГ (в нашому випадку $m = 16$), $n+1$ – загальна кількість сегментів траєкторії руху пера вздовж координати z :

$$\begin{bmatrix} u_1(t, z) \\ u_2(t, z) \\ \dots \\ u_{n+1}(t, z) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S_{11}(t) & S_{12}(t) & \dots & S_{1m}(t) \\ S_{21}(t) & S_{22}(t) & \dots & S_{2m}(t) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ S_{n+1,1}(t) & S_{n+1,2}(t) & \dots & S_{n+1,m}(t) \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \dots \\ \alpha_m \end{bmatrix}. \quad (15)$$

Звідси знаходимо:

$$\begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \dots \\ \alpha_m \end{bmatrix} = \left(\begin{bmatrix} S_{11}(t) & S_{12}(t) & \dots & S_{1m}(t) \\ S_{21}(t) & S_{22}(t) & \dots & S_{2m}(t) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ S_{n+1,1}(t) & S_{n+1,2}(t) & \dots & S_{n+1,m}(t) \end{bmatrix}^T \right)^{-1} \cdot \begin{bmatrix} u_1(t, z) \\ u_2(t, z) \\ \dots \\ u_{n+1}(t, z) \end{bmatrix}, \quad (16)$$

або

$$\begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \dots \\ \alpha_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} S_{11}(t) & S_{12}(t) & \dots & S_{1, n+1}(t) \\ S_{21}(t) & S_{22}(t) & \dots & S_{2, n+1}(t) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ S_{m,1}(t) & S_{m,2}(t) & \dots & S_{m, n+1}(t) \end{bmatrix}^{-1} \cdot \begin{bmatrix} u_1(t, z) \\ u_2(t, z) \\ \dots \\ u_{n+1}(t, z) \end{bmatrix}. \quad (17)$$

Перемножуючи в правій частині (17) елементи матриць за правилами множення, отримуємо вектор значень коефіцієнтів адаптивного впливу $[S_{ij}(t)]$, $i = \overline{1, m}$; $j = \overline{1, n+1}$ на $[u_j(t)]$, $j = \overline{1, n+1}$:

$$\begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \dots \\ \alpha_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \tilde{S}_{11}(t) \cdot u_1(t, z) + \tilde{S}_{12}(t) \cdot u_2(t, z) + \dots + \tilde{S}_{1, n+1}(t) \cdot u_{n+1}(t, z) \\ \tilde{S}_{21}(t) \cdot u_1(t, z) + \tilde{S}_{22}(t) \cdot u_2(t, z) + \dots + \tilde{S}_{2, n+1}(t) \cdot u_{n+1}(t, z) \\ \dots \\ \tilde{S}_{m, 1}(t) \cdot u_1(t, z) + \tilde{S}_{m, 2}(t) \cdot u_2(t, z) + \dots + \tilde{S}_{m, n+1}(t) \cdot u_{n+1}(t, z) \end{bmatrix}, \quad (18)$$

де $\tilde{S}_{ij}(t)$, $i = \overline{1, m}$; $j = \overline{1, n+1}$ – елементи оберненої матриці $(s^T)^{-1}$, індекс T – знак транспонування матриці.

7. Моделювання та ідентифікація параметрів сигналів АНР під впливом когнітивних feedback-впливів нейровузлів КГР

Для конфігурації моделі ідентифікації використовували фрагменти траєкторії АНР спірального типу досліджуваного Т-об'єкта, здійснювану ним на цифровому планшеті (Рис. 1). Моделювання та ідентифікацію параметрів рухів АНР проводили в рамках завдання ідентифікації параметрів когнітивних feedback-впливів ЕЕГ-вектора сигналів КГР на сегменти траєкторії АНР, розробленого за допомогою гібридної моделі АНР. Для побудови ідентифікаційної моделі використовувався фрагмент сліду АНР досліджуваного Т-об'єкта, виконаний ним електронним пером на інтерактивному цифровому планшеті (Рис. 5).

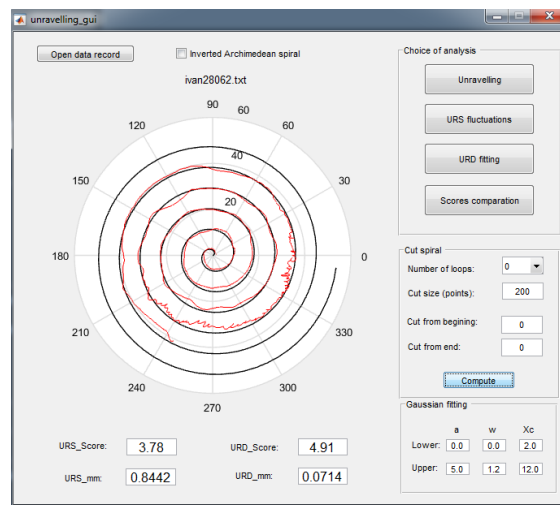


Рис. 5. Спіральний тип АНР, зроблений пацієнтом на інтерактивному планшеті

Виправлений фрагмент сліду цього спірального прикладу тестового патерну (спіралі Архімеда) пацієнтом за допомогою електронного пера на цифровому планшеті в кількості дискретизованих 2400 точок – положень треку представлено на рисунку 6. Тут абсциса k – число положень відхилення пера від рівноваги під час проходження спірального зразка.

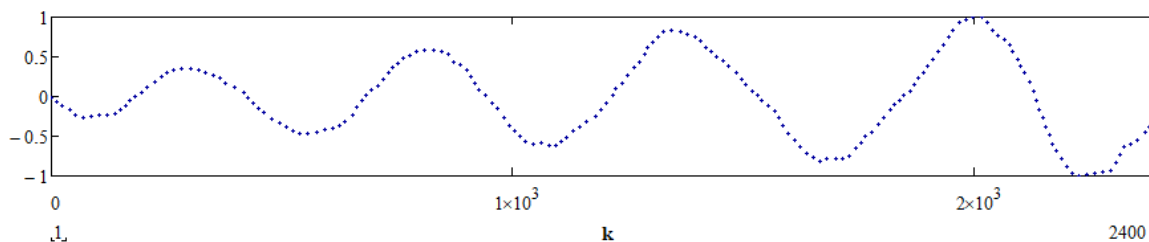


Рис. 6. Випрямлений фрагмент електронного сліду спіральної схеми за допомогою електронного пера на планшеті

Кількість точок 2422 Для аналізу використовувався тестовий набір ЕЕГ-сигналів нейровузла Fr1 (згідно з картою класифікації вузлів КГМ), який вимірювався синхронно з рухом електронного пера, коли пацієнт проводив тестовий патерн (Рис. 7).

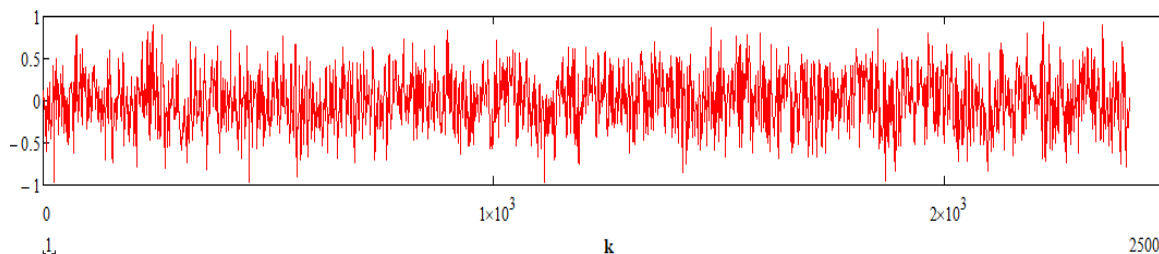


Рис. 7. Тестовий набір ЕЕГ-сигналів нейровузла Fr1 КГМ при відстеженні тестового патерну

Налаштування моделі треку АНР та їх покрокова та посегментна ідентифікація (параметри амплітуди та частоти для кожного сегмента з урахуванням цілісності системи) до конкретного зразка траси, що виконується пацієнтом (спостереження) крива або експериментальна крива) було виконано за схемою зворотного зв'язку та аналітичним розв'язком гібридної моделі АНР (Рис. 8).

Solution du Modèle (matricielle form): la **trace du MNA-mouvement** en domane I_{n_1}

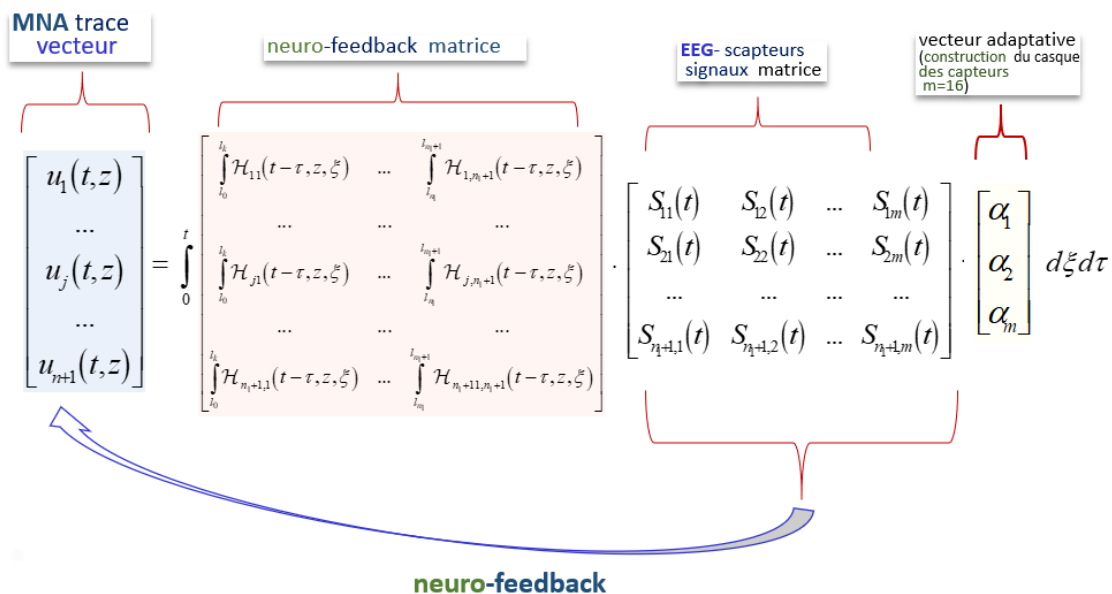


Рис. 8. Модель треку АНР зі зворотним зв'язком

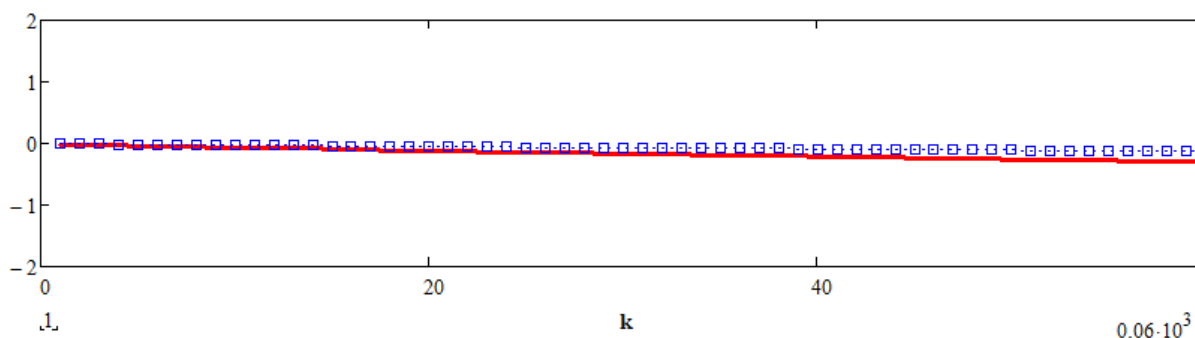


Рис. 9. Порівняльний аналіз треку моделі АНР (червона суцільна лінія) і реального сліду пацієнта (сині квадратні маркери) для перших 60 точок

Результати моделювання аномальних неврологічних рухів (АНР) кінцівки електронною ручкою пацієнта NNN, їх верифікація за даними нейроексперименту згідно з рисунком 4, які супроводжувалися синхронним когнітивним ефектом нейро-зворотного зв'язку. нейровузла Fp1 (набір сигналів EEG згідно з рис.7) та використання гібридної моделі аналізу АНР (на основі гібридного перетворення Фур'є). Спочатку ми брали відносно невелику кількість точок, намагаючись відтворити профіль кривої спостереження (профіль треку АНР, виконаного пацієнтом з урахуванням картини кривої зворотного зв'язку EEG (Рис. 7).

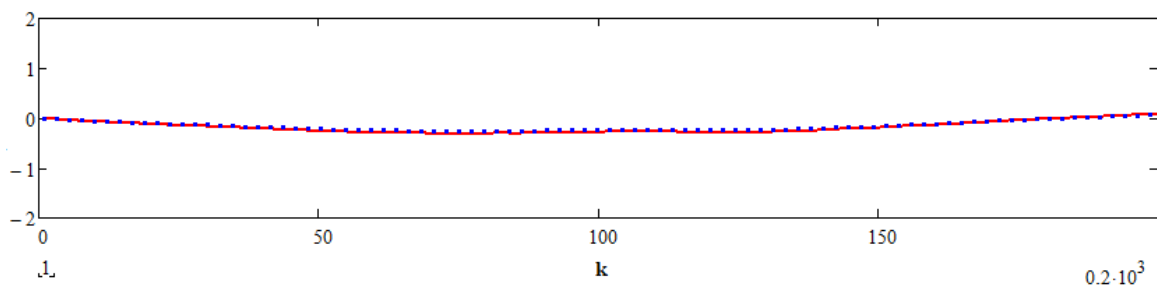


Рис. 10. Порівняльний аналіз доріжки моделі АНР (суцільна червона лінія) та реального відстеження пацієнта (маркери синіх точок)

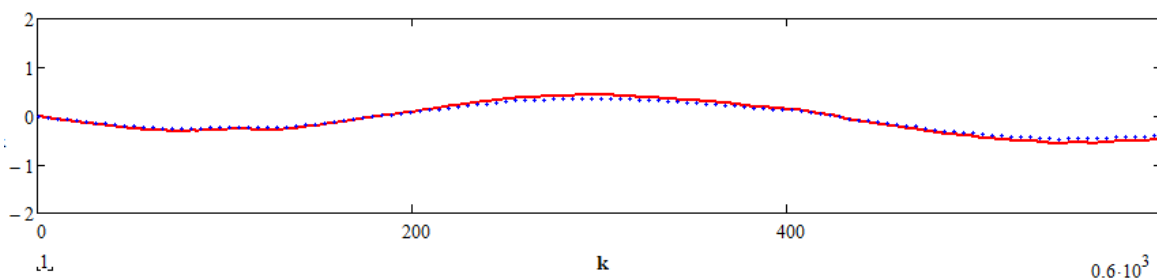


Рис. 11. Аналіз треку моделі АНР (червона суцільна лінія) і реального сліду пацієнта (маркери синіх точок) для перших 600

Як видно з Рис. 9, точність збігу модельного сліду з реальним слідом пацієнта дуже висока (до 1,5–2%) для 60 точок спостереження. Амплітудно-частотні характеристики за рахунок побудованої нами гібридної спектральної функції, побудованої системно для всіх сегментів пробою (з урахуванням їх зв'язності, а не кожного окремо), дозволили отримати практично повний збіг модельної траси з реальною траєкторією електронного пера, виведеного кінцівкою пацієнта. Потім ми поступово збільшували кількість очок на трасі. Для кількості балів 200 результати виявилися практично однаковими (Рис. 10). 200 точок (глибший рівень верифікації моделі на реальних даних) Надалі ми знову поступово збільшували кількість точок до 600, 120, 2400 і 4 і вивчали поведінку модельних кривих, оцінюючи їх можливі відхилення від експериментальних слідів АНР пацієнта.

На Рис. 11 для відрізка з 600 точками ми спостерігаємо невелике відхилення в сідловій зоні навколо 60-ї точки траси, приблизно 3–5%. Однак цю проблему можна технічно вирішити, зменшивши сегментацію траси в цій

області. До речі, сама модель дозволяє довільно розбивати на довільні розміри кожен сегмент і робити їх настільки маленькими, наскільки це необхідно.

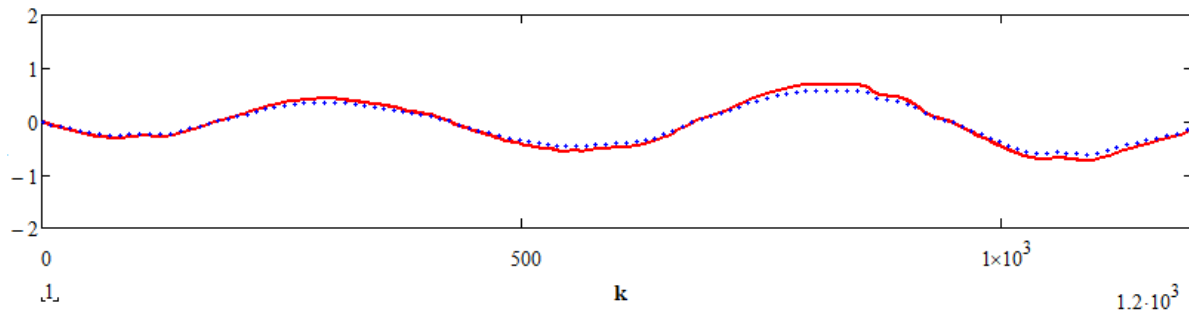


Рис. 12. Аналіз треку моделі АНР (червона суцільна лінія) – і реального сліду пацієнта (маркери синіх крапок) для перших 1200 точок

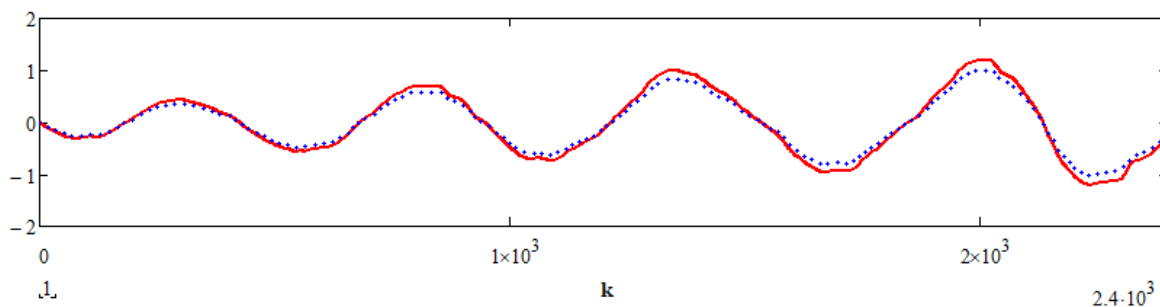


Рис. 13. Аналіз треку моделі АНР (червона суцільна лінія) – і реального сліду пацієнта (маркери синіх крапок) для перших 2400 точок (перевірка моделі в широкому діапазоні треку зі складними ділянками хвильового руху)

Позитивним моментом є те, що на всіх графіках ми бачимо повне відтворення частотних характеристик треку (періодичність модельних кривих майже повністю відповідає періодичності кривих, виконаних пацієнтом). Зі збільшенням кількості досліджуваних точок в окремих точках сідла або хребта вона зменшується. Але це завжди можна змити, вибравши менший поділ у цих зонах. Як видно з представлених графіків, розроблена модель на високому рівні відтворює поведінку пацієнта, відображаючи трек АНР, який практично збігається з намальованим ним на планшеті. Найважливішим є те, що модель містить можливість відображення механізмів її зворотного впливу сигналу СС у вигляді матриці сигналів ЕЕГ, які визначають поведінку цих рухів. Подальші дослідження можуть

включати зміну цієї поведінки, мабуть, на краще, в залежності від зміни величини цих ефектів зворотного зв'язку ЕЕГ після певних терапевтичних процедур і розширити межі застосування.

Висновки до розділу 6

Інформаційну технологію розроблено на основі гібридної моделі АНР-аналізу нейросистеми, яка описує стан і поведінку Т-об'єктів з урахуванням когнітивних feedback-впливів КГМ. За допомогою методу гібридних перетворень Фур'є побудовано аналітичний розв'язок моделі у векторному вигляді, визначає елементи траєкторій на кожному сегменті АНР. На основі цього запропоновано високоефективні алгоритми ідентифікації параметрів досліджуваних систем зворотного зв'язку. На відміну від загальноприйнятого класичного статистичного підходу обробки сигналів, запропонована гібридна модель орієнтована на глибоку декомпозицію системи без порушення її цілісності та всіх важливих зв'язків. Крім того, завдання цього спостереження полягає в тому, щоб ретельно перевірити механізми та вдосконалити методи збору та аналізу даних, отриманих із спіральних малюнків пацієнта. В якості реалізації поставленої задачі використовується комп'ютеризована модель, що реалізує поведінку необхідних алгоритмів і математичних моделей для реальних розумів. Ефективність автоматизованого способу малювання спіралі порівняно з папером оцінюється за такими параметрами: тривалість тесту – на 45% швидше (в середньому близько 1 хвилини замість 2–3 хвилин ручного введення); оперативність і точність оцінки – значне підвищення продуктивності за рахунок високої швидкості аналізу даних, якість процесу отримання вхідних даних 3D-креслення спіралі, однозначність інтерпретації результатів. Такий підхід дає можливість більш якісно описати складні приховані механізми АНР з великою кількістю внутрішніх зв'язків і когнітивних feedback-впливів КГМ, забезпечити високий ступінь повноти даних.

Список використаної літератури

1. Electroencephalography complex NEUROKOM, NEUROLAB. Instructions for medical application AINC.941311.001 I1 U 33.1-02066769-001-2002
2. Haubenberger D., Kalowitz D., Nahab F. B., Toro C., Ippolito D., Luckenbaugh D. A., Wittevrongel L., Hallett M. Validation of Digital Spiral Analysis as Outcome Parameter for Clinical Trials in Essential Tremor. *Movement Disorders*, 26 (11), 2073-2080, 2011.
3. Rajaraman V., Jack D., Adamovich S. V., Hening W., Sage J., Poizner H. A novel quantitative method for 3D measurement of Parkinsonian tremor. *Clinical neurophysiology*, 11 (2), 187–369, 2000.
4. Legrand A. P., Rivals I., Richard A., Apartis E., Roze E., Vidailhet M., Meunier S., Hainque E. New insight in spiral drawing analysis methods – Application to action tremor quantification. *J Clinical Neurophysiology*, 128 (10), 1823–1834. (2017)
5. Wang J.-S., Chuang F.-C. An Accelerometer-Based Digital Pen with a Trajectory Recognition Algorithm for Handwritten Digit and Gesture Recognition. *IEEE Transactions on Industrial Electronics*, 59 (7), 2998–3007. 2012.
6. Louis E. D., Gillman A., Böschung S., Hess C. W., Yu Q., & Pullman S. L. High width variability during spiral drawing: Further evidence of cerebellar dysfunction in essential tremor. *Cerebellum*, 11, 872–879. 2012.
7. Pullman S L. Spiral analysis: a new technique for measuring tremor with digitizing tablet. *Movement Disorders*, 1998, 3:85–89.
8. Xie H, Wang Z. Mean frequency derived via Huang-Hilbert transform with application to fatigue EMG signal analysis. *Comput Meth Progr Biomed*, 2006, 82:114–20
9. Bhidayasiri R., Mari Z. Digital phenotyping in Parkinson's disease: Empowering neurologists for measurement-based care. *Parkinsonism Relat Disord*. 2020, Nov, 80:35–40. DOI: 10.1016/j.parkreldis.2020.08.038.
10. Viviani P, Burkhard P. R., Chiuvé S. C., dell'Acqua C. C., Vindras P. Velocity control in Parkinson's disease: a quantitative analysis of isochrony in scribbling movements. *Exp Brain*, 2009, 194:259–83.

11. A. Salarian, H. Russmann, C. Wider, P. R. Burkhard, F. J. Vingerhoets, and K. Aminian, "Quantification of tremor and bradykinesia in Parkinson's disease using a novel ambulatory monitoring system," *Biomedical Engineering, IEEE Transactions on*, 54. Jg., Nr. 2, p. 313–322, 2007.
12. G. LO, A. R. Suresh, L. Stocco, S. González-Valenzuela, and V. C. Leung, "A wireless sensor system for motion analysis of Parkinson's disease patients," (PERCOM Workshops), 2011 IEEE International Conference on. IEEE, pp. 372–375, 2011
13. Petryk M., Gancarczyk T., Khimich O. *Methods of Mathematical Modeling and Identification of Complex Processes and Systems on the basis of High-performance Calculations (neuro- and nanoporous feedback cyber systems, models with sparse structure data, parallel computations)*. Scientific Publishing University of Bielsko-Biala.:Bielsko-Biała, Polska), 2021, 194 p.
14. Khimich A. N., Petryk M. R., Mykhalyk D. N., Boyko I. V., Popov A. V., Sydoruk. V. A. *Methods for mathematical modeling and identification of complex processes and systems based on visoproductive computing (neuro- and nanoporous cyber-physical systems with feedback, models with sparse structure data, parallel computing)*. Monograph, Kiev: National Academy of Sciences of Ukraine. Glushkov Institute of Cybernetics. 2019. 176 p. ISBN: 978-966-02-9188-1.
15. Mudryk I., Petryk M. *Hybrid artificial intelligence systems for complex neural network analysis of abnormal neurological movements with multiple cognitive signal nodes*. 2020 IEEE Third International Conference on Data Stream Mining & Processing (DSMP): Conference, Lviv, 21–25 August 2020. P. 108–111. DOI: 10.1109/DSMP47368.2020.9204341
16. Mudryk I., Petryk M. *High-performance modeling, identification and analysis of heterogeneous abnormal neurological movement's parameters based on cognitive neuro feedback-influences*. *Innovative Solutions in Modern Science*. 2021. New York. TK Meganom LLC. V1(45). P. 235–249. Doi: 10.26886/2414-634X.1(45)2021.16.

ЗАГАЛЬНІ ВИСНОВКИ

1. Розроблені високопродуктивні методи і обчислювальні технології моделювання складних процесів адсорбції в неоднорідних багатокомпонентних нанопористих середовищах зі зворотними впливами для класів нелінійних ізотерм адсорбції типу Ленгмюра. Обґрунтовані і розвинуті підходи побудови узагальнених нелінійних рівнянь рівноваги адсорбції Ленгмюра. Реалізовані ефективні схеми розпаралелювання та декомпозиції нелінійних моделей. Запропоновані математичні моделі адсорбції в напівобмеженому неоднорідному нанопористому середовищі і отриманий аналітичний розв'язок в узагальненому вигляді описують впливи неоднорідностей, спричинених розподіленими складовими початкових та граничних концентрацій адсорбтиву у газовій фазі та нанопорах на кожен окремий шар середовища. Побудовані високошвидкісні аналітичні розв'язки математичних моделей з використанням операційного методу Гевісайда та реалізації рекурентних алгоритмів побудови матриць впливу, що забезпечує ефективне розпаралелювання обчислювальних процесів для багатоядерних комп'ютерів та підвищення швидкодії обчислень.

2. Розроблені моделі наноадсорбції в обмежених циліндричних багатоскладових нанопористих середовищах та отримано аналітичні розв'язки, які в загальному вигляді описують вплив факторів внутрішньої кінетики переносу заряджених частинок, на основі рівноваги Ленгмюра та нестационарних умов системи n -інтерфейсних зв'язків. Це дає змогу моделювати та будувати графічні профілі концентрації адсорбату в макро- та мікропорах, розраховувати розподіл електричного потенціалу всередині досліджуваного зразка, проводити комплексний аналіз внутрішньої кінетики масообміну як в макро- так і нанопорах частинок, проектувати оптимальні технологічні схеми та досліджувати на оптимальність різні нестационарні режими нанодифузії та наноадсорбції газів для багатокомплексних наносередовищ із різними сорбційними властивостями, розмірами частинок, товщин шарів та ін. Отримані модельні розв'язки та ефективні рекурентні матричні алгоритми побудови матриць впливу важливі при постановці та

розв'язуванні обернених задач наносорбції – ідентифікації кінетичних лімітуючих параметрів процесу, що дає можливість перевірити адекватність параметри моделювання та фізичного експерименту.

3. Для різномасштабних складних некласичних моделей нанофільтрації та нанодифузії у насичених середовищах різнопористих нанопористих частинок сформульовані задачі ідентифікації кінетичних параметрів моделей з використанням функціоналів-нев'язки, що враховують зміну сумарного потоку фільтрату на поверхні спостереження. Запропоновано високопродуктивні методи реалізації задач ідентифікації (коефіцієнтів консолідації b_1 , b_2 у внутрішньочастинковому та міжчастинковому просторах та фактору пружності матеріалу β) як функцій від часу на основі аналітичних розв'язків прямих і спряжених задач, отримані явні вирази компонентів градієнтів функціоналів-нев'язки для реалізації високопродуктивних процедур ідентифікації параметрів моделі.

В рамках наукоємних інформаційних технологій для дослідження складних процесів нанофільтрації в середовищах з різнорозмірними нанопористими частинками на основі описаної математичної моделі побудовано спеціальний програмний комплекс. Основними цілями, які переслідували при проектуванні програмного комплексу, були можливість швидкого вивчення процесів нанофільтрації для науковців, можливість роботи на будь-яких сучасних платформах, високопродуктивне чисельне моделювання та дружній UI/UX. Використання найкращих практик розробки програмного забезпечення дозволило створити дизайн програмного забезпечення, який можна було б легко розширити або вдосконалити в майбутньому з можливістю додавання нових функцій та вдосконалень.

4. Безперервну складну 2D модель вертикальної нанофільтрації бідисперсної суспензії суміші сферичних нанопористих частинок з двома діаметрами d і D ($D > d$) досліджено методом МС моделювання на суперкомп'ютері. Отримано початковий однорідний стан перед нанофільтрацією. Передбачалося, що мембрана внизу була проникною для

частинок меншого діаметру d і непроникною для частинок більшого діаметру D . При моделюванні вертикальної нанофільтрації враховувався одночасний броунівський рух частинок і рух поршня вниз при стискуванні. Досліджено бінарні суміші з різними параметрами (числовими концентраціями малих (f_d) і великих (f_D) частинок, співвідношенням діаметрів d/D і початковим розміром систем у вертикальному напрямку L_y). Залежності від часу коефіцієнта нанофільтрації k (визначається як відносна частка більш дрібних частинок у фільтрованій суспензії, тобто $k=N_d/N_d(\text{ini})$) і відносної висоти суспензії h/L_y виявили наявність режимів повної та неповної нанофільтрації.

5. Розвинена теорія квазістаціонарних станів і активної динамічної провідності електронів відкритими багат шаровими РТС у моделях прямокутних потенціалів і різних ефективних мас у різних шарах каскадів і активних зон ККЛ і ККД з урахуванням взаємодії електронів з високочастотним електромагнітним полем. На прикладі експериментально реалізованих ККЛ і ККД у моделях відкритих РТС з три- та чотирибар'єрними активними зонами каскадів запропоновано такий їх геометричний дизайн, який дозволяє надійно оптимізувати роботу цих наноприладів.

6. Розроблено на основі гібридної моделі АНР-аналізу нейросистеми високопродуктивну інформаційну технологію опису станів і поведінки Т-об'єктів з урахуванням когнітивних feedback-впливів КГМ. Методом гібридних інтегральних перетворень Фур'є побудовано аналітичний розв'язок моделі у векторному вигляді, визначає елементи траєкторій на кожному сегменті АНР. На основі цього реалізовано високоефективні та маловитратні алгоритми ідентифікації параметрів досліджуваних систем зворотного зв'язку. В якості реалізації поставленої задачі використовується комп'ютеризована модель, що реалізує поведінку необхідних алгоритмів і математичних моделей для реальних Т-об'єктів. Ефективність автоматизованого способу дизайну та візуалізації АНР-траєкторій під дією когнітивних feedback-впливів порівняно з традиційним ручним оцінюється за такими параметрами: тривалість тесту – на 45% швидше; оперативність і точність оцінки – значне підвищення

продуктивності за рахунок високої швидкості аналізу даних, якість процесу отримання вхідних даних 3D-зображень АНР-траєкторій спірального типу, їх декомпозиції на проекції простіших рухів та однозначність інтерпретації результатів. Це дає можливість більш якісно описати складні приховані механізми АНР з великою кількістю внутрішніх зв'язків і когнітивних feedback- впливів КГМ, забезпечуючи високий ступінь повноти даних. Дана розробка має відношення до відновлення стану людини спричиненими різними техногенними навантаженнями та наслідками бойових дій.

Петрик М.Р., Лебовка М.І., Бойко І.В.

**ВИСОКОПРОДУКТИВНІ МЕТОДИ
МОДЕЛЮВАННЯ ТА ПРОЄКТУВАННЯ
СКЛАДНИХ РЕСУРСО-ЕНЕРГОЗБЕРІГАЮЧИХ
ПРОЦЕСІВ У НАНОПОРИСТИХ І ДИСПЕРСНИХ
СЕРЕДОВИЩАХ**

Монографія

Формат 60x90/16. Обл. вид. арк. 4,49. Тираж 15 пр. Зам. № 3581

Видавництво Тернопільського національного
технічного університету імені Івана Пулюя.
46001, м. Тернопіль, вул. Руська, 56.
Свідоцтво суб'єкта видавничої справи ДК № 4226 від 08.12.11