

УДК 004.942

Гикава В.–ст. гр. СП-41

Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя

ПРОГРАМНИЙ КОМПЛЕКС ДЛЯ МАТЕМАТИЧНОГО МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ ДИФУЗІЇ В РІЗНОМАНІТНИХ ЗРАЗКАХ ЦЕОЛІТУ

Науковий керівник: к.ф.-м.н., доцент Бойко І. В.

Нукaвa V.

Ternopil Ivan Puluj National Technical University

SOFTWARE COMPLEX FOR MATHEMATICAL MODELING OF DIFFUSION PROCESSES IN VARIOUS ZEOLITE SAMPLES

Supervisor: Ph.D. in Physics and Mathematics, associate professor Boyko I.V.

Ключові слова: обернена задача, математична модель, ідентифікація параметрів дифузії
Keywords: inverse problem, mathematical model, identification of diffusion parameters

Моделювання процесів дифузії у багатошарових матеріалах, таких як цеоліти та силікагель, має важливе значення для вирішення завдань у сферах інженерії, хімії та енергетики. Ці матеріали вирізняються своєю мікропористою структурою, яка впливає на ефективність тепломасоперенесення. Детальне дослідження дифузійних процесів є ключем до вдосконалення технологій сорбції, каталізу, мембранного розділення та енергетичного зберігання. Водночас, класичні методи моделювання часто стикаються з обмеженнями при аналізі таких складних систем. Це зумовлює необхідність створення універсальних математичних моделей і програмних систем, які дозволять дослідникам точно прогнозувати властивості матеріалів.

Для вирішення цих завдань були розроблені математичні моделі, які враховують особливості багатошарових структур. В основі дослідження лежать рівняння дифузії, що описують тепломасоперенесення у матеріалах із різною пористістю. Використано числові методи, такі як методи прямої та зворотної прогонки, для розв'язання задач із високою точністю та ефективністю. Важливим результатом роботи стало створення програмного комплексу, який дозволяє інтерактивно моделювати геометричні параметри матеріалів, налаштовувати фізико-хімічні характеристики і виконувати графічну візуалізацію 2D та 3D розподілу концентрацій або тепла в зразках. Система зручна для користувачів та адаптована до широкого спектру інженерних і дослідницьких завдань.

У рамках роботи проведено тестування розробленого програмного комплексу на різних типах матеріалів, таких як цеоліти різних класів (ZSM-5, ZSM-11, ZSM-12) та силікагель. Виконано аналіз концентраційних розподілів, просторових залежностей і перерізів для багатошарових систем з пористістю різного ступеня. Зокрема, досліджено ефективність процесів дифузії в цеолітах, які виявилися значно вищими порівняно із силікагелем. Ці експерименти дозволили оцінити реалістичність отриманих результатів, підтвердити високу продуктивність розробленої системи та її потенціал для використання в галузях науки і промисловості.