Облікова картка НДДКР

Державний обліковий номер: 0224U031374

Державний реєстраційний номер: 0122U001979

Відкрита

Дата реєстрації: 17-04-2024

1. Етапи виконання

Номер етапу: 1

Назва етапу: Аналіз стрктури складних багатокомпонентних процесів і систем, що є основою сучасних кібер-фізичних систем (наноструктури- і нонопористі середовища, нейро-біо-feedback-системи та ін.) на основі створення наукоємних гібридних моделей Розробка нелінійних математичних моделей складних наносорбційних систем і процесів з урахуванням взаємодій нано- і макропотоків, енергій активації, дисперсійних сил, потенціалу Ленарда-Джонса, температури середовища та ін. нанооефектів і чинників поверхневої адсорбційної взаємодії. Побудова спеціалізованих алгоритмів реалізованих на основі підходів і парадигми паралелізму для виконання обчислень на основі математичних моделей нанопористих середовищ при застосуванні схем параметризації в околі точок фазових переходів. Побудова математичних моделей, що викають у спектральних задачах для квазічастинок багатокомпонентних наносистем і багатошарових нанорозмірних об'єктах та основі систем рівнянь Шредінгера та Пуассона.

Початок етапу: 01-2022

Закінчення етапу: 12-2022

Вид звітного документа: Проміжний звіт

2. Виконавець

Назва організації: Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя

Код ЄДРПОУ/ІПН: 05408102

Підпорядкованість: Міністерство освіти і науки України

Адреса: вул. Руська, буд. 56, м. Тернопіль, Тернопільський р-н., Тернопільська обл., 46001, Україна

Телефон: 380352519701

Телефон: 380352254983

E-mail: univ@tu.edu.te.ua

WWW: http://tntu.edu.ua

3. Власник результатів НДДКР (продукції)

Назва організації: Міністерство освіти і науки України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 38621185

Адреса: проспект Берестейський, буд. 10, м. Київ, 01135, Україна

Підпорядкованість: Кабінет Міністрів України

Телефон: 380444813221

E-mail: mon@mon.gov.ua

WWW: https://mon.gov.ua/ua

Назва організації: Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя

Код ЄДРПОУ/ІПН: 05408102

Адреса: вул. Руська, буд. 56, м. Тернопіль, Тернопільський р-н., Тернопільська обл., 46001, Україна

Підпорядкованість: Міністерство освіти і науки України

Телефон: 380352519701

Телефон: 380352254983

E-mail: univ@tu.edu.te.ua

WWW: http://tntu.edu.ua

4. Джерела та напрями фінансування

Підстава для проведення робіт: 34 - договір (замовлення) з центральним органом виконавчої влади, академією наук (головними розпорядниками бюджетних коштів на проведення НДДКР)

КПКВК: 2201040

Напрям фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

Джерело фінансування: 7713 - кошти держбюджету

Фактичний обсяг фінансування за звітний етап: 910.000 тис. грн.

5. Науково-технічна робота

Назва роботи (укр)

Методи та високопродуктивні технології математичного моделювання і функціональної ідентифікації складних багатокомпонентних систем і процесів (нанопористі і нанорозмірні структури, об'єкти безпечної енергетики, когнітивні системи)

Назва роботи (англ)

Methods and high-performance technologies of mathematical modeling and functional identification of complex multicomponent systems and processes (nanoporous and nanoscale structures, safe energy objects, cognitive systems)

Реферат (укр)

Розроблені високопродуктивні технології для обчислень та ідентифікації параметрів моделей (складних багатокомпонентних систем і процесів для нанопористих і нанорозмірних структур, об'єктів безпечної енергетики з поглинанням шкідливих викидів в атмосферу та когнітивних систем), що забезпечує прийняття науково-обґрунтованих рішень (властивостей наноструктур, параметрів енергії активації, умов рівноваги, коефіцієнтів дифузії у різноромірних між- і внутрічастинкових просторах, амплітудно-частотних параметрів когнітивних сигналів біооб'єктів). Запропонована методика двовимірного моделювання та дослідження методом Монте-Карло компетитивної адсорбції у внутрікристалітному просторі різнорозмірних сферичних наночастинок, що симулюють дифузію як броунівського руху суміші малих і великих молекул адсорбату всередині мікропористого каналу кристаліту цеоліту, що дало можливість проаналізувати кінетику осадження малих і великих молекул різної концентрації адсорбату на внутрішній поверхні мікропори під дією чинників поверхневої адсорбційної взаємодії. Розроблені нові маловитратні методи ідентифікації коефіцієнтів дифузі та консолідації у внутрішньо- та міжчастинковому просторах наносистем на основі теорії оптимального керування для реалізації високопродуктивних процедур ідентифікації параметрів моделей. Побудовані просторові адаптивні матриці відклику когнітивної системи та алгоритми обчислення значень векторів вагових коефіцієнтів впливу когнітивних сигналів EEG-сенсорів нейровузлів, що визначають параметри її станів у залежності від feedback впливів визначених груп нейро-об'єктів. На основі розробленої теорії квазістаціонарних станів та активної

динамічної провідності відкритих наносистем розроблено системи ШІ (моделі та програмні засоби) для встановлення ступеню відклику електронних систем на зовнішнє збурення та встановлення ефектів такої взаємодії на роботу і прецизійні параметри безпосередньо функціонуючих наноприладів, що працюють у інфрачервоному діапазоні.

Реферат (англ)

High-performance calculations and identification technologies of model parameters (complex multicomponent systems and processes for nanoporous and nanoscale structures, safe energy objects with absorption of harmful emissions into the atmosphere, and cognitive systems), which ensures the adoption of scientifically based decisions (properties of nanostructures, energy activation, equilibrium, diffusion coefficients in inter- and intraparticle spaces, amplitude-frequency parameters of cognitive signals) is developed. The proposed method of two-dimensional modeling and research by the Monte Carlo method of competitive adsorption in the intracrystalline space of spherical nanoparticles of different sizes simulating diffusion as a Brownian motion of a mixture of small and large adsorbate molecules inside the microporous channel of a zeolite crystallite.. New low-cost methods for identifying diffusion and consolidation coefficients in the intra- and interparticle spaces of nanosystems based on the theory of optimal control have been developed for the implementation of high-performance procedures for identifying model parameters. Spatial adaptive response matrices of the cognitive system and algorithms for calculating the vector values of the weighting coefficients of the influence of the cognitive signals of the EEG sensors of the neuronodes, which determine the parameters of its states depending on the feedback of the influence of certain groups of neuro-objects, were constructed. On the basis of the developed theory of quasi-stationary states and active dynamic conductivity of open nanosystems, artificial intelligence systems (models and software) have been developed to establish the degree of response of electronic systems to external disturbances and to establish the effects of such interaction on the operation and precision parameters of directly functioning nanodevices operating in the infrared range electromagnetic waves.

Індекс УДК: , 621.373, 510.51 519.712.3 51-73 51-74

Коди тематичних рубрик НТІ: 29.41.01, 47.09.48

6. Науково-технічна продукція (НТП)

НТП 1

Назва продукції (укр): Методи та високопродуктивні технології математичного моделювання і функціональної ідентифікації складних багатокомпонентних систем і процесів

Назва продукції (англ): Methods and high-performance technologies of mathematical modeling and functional identification of complex multicomponent systems and processes

Очікувані результати: Методи, теорії, Програмні продукти

Галузь застосування: інженерна екологія, адсорбційні нанотехнології очищення повітря від вуглецевих викидів як зниження впливу глобпльного потепління; цифрова діагностика неврологічного стану людини; прикладна мікроелекторніка: наноелементи приладів, що працюють в інфрачервоному діапазоні

Опис продукції (укр): Розроблені високопродуктивні суперкомпютерні технології для обчислень та ідентифікації параметрів моделей (складних багатокомпонентних систем і процесів для нанопористих і нанорозмірних структур, об’єктів безпечної енергетики з поглинанням шкідливих викидів в атмосферу та когнітивних систем), для прийняття науково-обґрунтованих рішень (властивостей наноструктур, параметрів енергії активації, коефіцієнтів дифузії у різноромірних між- і внутрічастинкових просторах). Розроблено нові аналітичні методи моделювання полів концентрацій дифундованих компонетів адсорбату у внутрішньо- та міжчастинковому просторах у багатокомпонентних нанопористих середовищах з використанням операційного методу Гевісайда та матриць впливу Коші для неоднорідних крайових задач адсорбції зі зворотними зв’язками для класів нелінійних ізотерм адсорбції типу Ленгмюра. Обґрунтовані і розвинуті підходи побудови узагальнених нелінійних рівнянь рівноваги адсорбції Ленґмюра. Реалізовані ефективні схеми розпаралелювання та декомпозиції нелінійних моделей. Проаналізовано динаміку покриття поверхні мікропори у стані адсорбційної рівноваги. Розроблені: маловитратні методи ідентифікації коефіцієнтів дифузі та консолідації у внутрішньо- та міжчастинковому просторах наносистем, отримані вирази градієнтів функціоналів-нев'язки для реалізації високопродуктивних процедур ідентифікації параметрів моделей; наукова основа проєктування багатокомпонентних наносистем і багатошарових нанорозмірних об’єктах прикладної електроніки.; варіаційний метод для рівняння Шредінгера, що враховує складову гамільтоніана, зумовлену потенціалом деформації акустичних фононів при різних

температурах. Побудовані адаптивні матриці відклику когнітивної системи для визначення параметрів її станів у залежності від feedback впливу нейросигналів. Запропоновано нову квантово-механічну методологію моделювання тунельного транспорту через відкриті наноструктури на основі нітридних напівпровідників з урахуванням внеску акустичних фононів.

Соціально-економічна спрямованість НТП: Поліпшення стану навколишнього середовища, Економія енергоресурсів, Поліпшення якості життя та здоров'я населення, ефективності діагностики та лікування хворих

Стадія завершеності НТП: Звіт по НДДКР, Розроблені математичні моделі, високопродуктивні методи і алгоритми

Впровадження НТП: окремі складові розробки знаходяться в процесі впровадження

Строки впровадження: 01.202212.2022

Виробник продукції: Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя

Споживачі продукції: Установи проєктування газопереробного обладнання, систем каталізу та очистки повітря, лабораторії дослідження та установи проєктування багатокомпонентних нанорозмірних елементів прикладної електроніки, медичні установи та центри цифрової медицини та діагностики

Перспективні ринки:

Права інтелектуальної власності: За договорами, Подано заявку на видачу охоронного документу, В Україні

Форми та умови передачі продукції: Продаж «Ноу-хау», Продаж продукції, Навчання персоналу, Спільні НДДКР

7. Бібліографічний опис

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), 787-805 (2022) DOI 10.1007/s10559-022-00512-8

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

Boyko, I., Petryk, M. (2022)Tunneling transport in open nitride resonant tunneling structures taking into account the acoustic phonons: An variational approach. Physica B: Condensed Matter. Vol. 636 (7), 413862(1 July 2022) https://doi.org/10.1016/j.physb.2022.413862

Vorobiev.E., Lebovka N.I. Processing of sugar beets assisted by pulsed electric fields. Research Agr. Engineering. 2022, 68(2):63-79 DOI: 10.17221/91/2021-RAE

Lebovka N., Goncharuk O., Klepko V., Mykhailyk V., Samchenko Y., Kernosenko L., Pasmurtseva N., Poltoratska T., Olena Siryk O., Solovieva O., Tatochenko M. Cross-Linked Hydrogels Based on PolyNIPAAm and Acid-Activated Laponite RD: Swelling and Tunable Thermosensitivity. Langmuir. 2022, V.38(18), 5708-5716. DOI: 10.1021/acs.langmuir.2c00310.

Boyko I., Petryk M., Mykhailyshyn R. Excitons in resonant tunnelling structures based on AlN/GaN/AlN/AlGaN/AlN nitride: spectral dependences and intensities of interband optical transitions. Ukrainian Journal of Physical Optics, 2022, 23(3), 180-191 (2022) DOI 10.3116/16091833/23/3/180/2022

I. Boyko, M. Petryk, H. Tsupryk, I. Mudryk and Y. Stoianov, "Piezoelectric Properties and Electron-Phonon Interaction in Semiconductor Arsenide GaAs/AlAs Nanosystems of Plane Symmetry," 2022 IEEE 12th International Conference Nanomaterials: Applications & Properties (NAP), 2022, pp. 1-5. https://ieeexplore.ieee.org/document/9934129/

I. Boyko, H. Tsupryk, Y. Stoianov, G. Grygorchuk, M. Petryk, "A Theoretical Model of Thermal Conductivity for Multilayer Nitride-based Nanosystems," 2022 IEEE 41st International Conference on Electronics and Nanotechnology (ELNANO), 2022, pp. 111-114. https://ieeexplore.ieee.org/document/9926990

J. Nestor, I. Boyko, I. Mudryk, H. Tsupryk and Y. Stoianov, "Nitride Semiconductor Quantum Dots - Mathematical Models of the Electronic Spectrum and Methods for its Simulation," 2022 12th International Conference on Advanced Computer Information Technologies (ACIT), 2022, pp. 136-139. https://ieeexplore.ieee.org/document/9913103/

M. Petryk, M. Bachynskyi, V.Brevus, I.Mudryk, D. Mykhalyk .Analysis technology of neurological movements considering

cognitive feedback influences of cerebral cortex signals. Proceedings of the 2nd International Workshop on Information Technologies: Theoretical and Applied Problems (ITTAP 2022). Ternopil, Ukraine, November 22-24, 2022, 45-54 paper4.pdf (ceur-ws.org)

D. Mykhalyk, M. Petryk, I.Boyko, Y. Drohobytskiy, V. Kovbashyn Intellectual information technologies for the study of filtration in multidimensional nanoporous particles media. Proceedings of the 2nd International Workshop on Information Technologies: Theoretical and Applied Problems (ITTAP 2022).Ternopil, Ukraine, November 22-24, 2022, 175-185 https://ceur-ws.org/Vol-3309/paper13.pdf

O.Petryk, I.Boyko, Y.Stoianov, S.Balaban, J.Nestor Mathematical modeling of diffusion transfer for charged particles in the layered composite medium. Proceedings of the 2nd International Workshop on Information Technologies: Theoretical and Applied Problems (ITTAP 2022) Ternopil, Ukraine, November 22-24, 2022, 436-446 https://ceur-ws.org/Vol-3309/paper26.pdf

Bulavin L., N. Lebovka !Soft Matter Systems for Biomedical Applications. Springer Proceedings in Physics Series. 1est ed . Part of the book series: Springer Proceedings in Physics (SPPHY, Volume 266). Springer (2022). 466 p. https://link.springer.com/book/10.1007/978-3-030-80924-9

Vorobiev E., Lebovka N.I. Cell Membrane Permeabilization by Pulsed Electric Fields for Efficient Extraction of Intercellular Components from Foods. Springer: Food Engineering Series. Chapter in Boock, 2022, pp. 209–269 https://link.springer.com/chapter/10.1007/978-3-030-70586-2_26

Петрик М.Р. Методи та моделі ідентифікації параметрів складних багатокомпонентних нанопористих і нанорозмірних структур і процесів: монографія / Петрик М.Р., Бойко І.В., Лебовка М.І., Бревус В.М.– Тернопіль: Вид-во ТНТУ імені Івана Пулюя, 2023 – 156 с. (ISBN 978-966-305-125-3) http://elartu.tntu.edu.ua/handle/lib/40847

А.Ю. Дорошенко, М.Р. Петрик, Д.М. Михалик, П.А. Іваненко, О.А. Яценко. Автоматизоване розпаралелювання програми моделювання внутрішньочастинкової дифузії та абсорбції в неоднорідних нанопористих середовищах. Проблеми програмування. 2022. № 3-4. (ISSN 1727-4907 категорія Б) https://doi.org/10.15407/pp2022.03-04.059

Petryk M., Mykhalyk D. (2022) High-performance intellectual information technologies for the study of filtration systems in different-sized nanoporous particles media. Scientific Journal of TNTU (Tern.), vol. 108, no 4, pp. 16-26. http://elartu.tntu.edu.ua/handle/lib/42018

Петрик М.Р., Бойко І.В., Хіміч О.М., Петрик О.Ю. Високопродуктивні методи моделювання адсорбції зі зворотними зв'язками в неоднорідних багатокомпонентних нанопористих середовищах. Кібернетика і системний аналіз. Т.58, .№ 5, 2022, 129–148

М.Р. Петрик, І.Я. Мудрик, М.В. Бачинський, І.Я. Стадник, М.І. Підгурський, В.О. Ямко. Високопродуктивні методи та інформаційні технології моделювання та індентифікації параметрів анормальних рухів під дією зворотних когнітивних впливів. Прикладні питання математичного моделювання. Т. 5. №1 (2022), 72-81 https://doi.org/10.32782/mathematical-modelling/2022-5-1-9

Федорів В.М. Стадник І.Я., Краєвська С.П., Піддубний В.А. Індукційний перетворювач. Патент. №u 2021 06317 МНК (2022.01) від 3.02.22р.

Petryk M. Mathematical model of _ltration in the media of multidimensional nanoporous particles. Aapplied mathematics and informatioon technology Materials of International Scientific Conference, dedicated to the 60th anniversary of the Department of Applied Mathematics and Information Technology September 22nd – 24th, 2022 Chernivtsi– 2022 (2022), 33-36 http://www.amit60.fmi.org.ua/files/AMIT2022-Materials.pdf

O. Melnyk, M. Petryk . Development of architecture for business communications information system based on streaming platform optimizations. Матеріали X науково-технічної конференції «Інформаційні моделі, системи та технології» Тернопільського національного технічного університету імені Івана Пулюя, (Тернопіль, 7–8 грудня 2022). – Тернопіль: ТНТУ. (2022),121 https://elartu.tntu.edu.ua/bitstream/lib/40078/1/Zbirnyk_7_12_2022.pdf

A. Koval, M. Petryk. Microservice architecture in software development. Матеріали X науково-технічної конференції «Інформаційні моделі, системи та технології» Тернопільського національного технічного університету імені Івана Пулюя, (Тернопіль, 7–8 грудня 2022). – Тернопіль: ТНТУ. (2022), 117 https://elartu.tntu.edu.ua/bitstream/lib/40078/1/Zbirnyk_7_12_2022.pdf

8. Звітна документація

Кількість сторінок в звіті: 13

Мова звіту: Українська

Кількість файлів у звіті: 1

9. Заключні відомості

Перелік осіб-виконавців

Балабан Степан Миколайович (к. т. н., доц.)

Бачинський Михайло Володимирович (к.т.н., доц.)

Бойко Ігор Володимирович (к. т. н., доцент)

Василів Микола Володимирович

Ковбашин Василь Іванович (к. т. н., доц., старший науковий співробітник)

Коноваленко Ігор Володимирович (к.т.н., доц.)

Лебовка Микола Іванович (д. ф.-м. н., професор)

Михалик Дмитро Михайлович (к.т.н., доц.)

Мудрик Іван Ярославович (д.філософ)

Підгурський Микола Іванович (д. т. н., професор)

Панчишин Інна Павлівна

Плескун Михайло Іванович

Романовська Лілія Михайлівна

Стадник Ігор Ярославович (д. т. н., професор)

Стефанишин Володимир Миколайович

Чиж Віталій Михайлович

Керівник організації:

Митник Микола Мирославович (к.т.н., доц.)

Керівники роботи:

Петрик Михайло Романович (к.т.н., доц.)

Керівник відділу реєстрації наукової діяльності УкрІНТЕІ

Юрченко Т.А.