Облікова картка НДДКР

Державний обліковий номер: 0213U002585

Державний реєстраційний номер: 0111U002585

Відкрита

Дата реєстрації: 31-01-2013

1. Етапи виконання

Номер етапу: 1

Назва етапу: Параметрична ідентифікація систем компетитивної дифузії і адсорбції вуглеводневих сполук в нанопористих цеолітних каталізаторах

Початок етапу: 01-2011

Закінчення етапу: 12-2012

Вид звітного документа: Остаточний звіт

2. Виконавець

Назва організації: Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя

Код ЄДРПОУ/ІПН: 05408102

Підпорядкованість: Міністерство освіти і науки, молоді та спорту України

Адреса: м. Тернопіль, вул. Руська, 56

Телефон: (0352) 524185

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

3. Власник результатів НДДКР (продукції)

Назва організації: Інститут енергозбереження та енергоменеджменту Національного технічного університету України "Київський Політехнічний Інститут"

Код ЄДРПОУ/ІПН: 00027677

Адреса: пр. Перемоги 37, м. Київ, Київ, 03056, Україна

Підпорядкованість: Міністерство освіти і науки України

Телефон: 0442048428

E-mail: auek@ukr.net

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: 2.2 - прикладні дослідження і розробки

Джерела фінансування

Джерело фінансування: 7713 - кошти держбюджету

Фактичний обсяг фінансування за звітний етап: 132.9 тис. грн.

5. Науково-технічна робота

Назва роботи (укр)

Параметрична ідентифікація систем компетитивної дифузії і адсорбції вуглеводневих сполук в нанопористих цеолітних каталізаторах

Назва роботи (англ)

Parametric identification of competitive diffusion and adsorpton systems of hydrocarbon compounds in nanoporous zeolite catalysts

Реферат (укр)

Робота присвячена розробці методів параметричної ідентифікації і експериментальним дослідженням кінетики компетитивної дифузії та адсорбції вуглеводневих сполук в нанопористих цеоліт-каталізаторах з метою їх подальшого використання для ресурсозберігаючих нанотехнологій хімічної та нафтохімічній промисловостей, технологій очищення повітря і навколишнього середовища, що відповідає Комплексній програмі фундаментальних досліджень НАН України "Наноструктурні системи, наноматеріали та нанотехнології". На відміну від відомих досліджень дифузії окремих газів для цеолітних адсорбційних каталізаторів, даний проект включає комплексне дослідження кінетики компетитивного (сумісного) дифузійного переносу та адсорбції вуглеводневих сполук в нанопорах цеоліт-каталізаторах. З урахуванням різних умов проведення експерименту, запропоновані методики та програмні засоби багатопараметричної ідентифікації компетитивної дифузії сполук в нанопористих цеолітних каталізаторах, визначення концентраційних профілів та градієнтних полів, профілів коефіцієнтів дифузії в мікропорах кристалітів та міжкристалітному просторі цеолітних каталізаторів. Обґрунтовуються вибір режимно-технологічних параметрів таких систем для практичних застосувань для нанотехнологій, нафтохімії, сепарації газів, інженерної екології та інших.

Реферат (англ)

The work is concerned with the parameter identification and experimental researches of competitive diffusion kinetics and adsorption of hydrocarbon compounds in nanoporous zeolite catalyst for their further use for resource nanotechnology chemical and petrochemical industries, air purification technologies and environment, responsible Comprehensive Program for Fundamental Research of Ukraine " Nanosystems, nanomaterials and nanotechnology". Unlike in other studies of diffusion of individual gases for adsorption zeolite catalysts, this project includes a comprehensive study of kinetics of competitive (compatible) diffusion transfer and adsorption of hydrocarbon compounds in nanopores zeolite catalyst. Given the different conditions of the experiment, the proposed technique and software multiparameter identification of compounds in nanoporous zeolite catalysts, determining the concentration profiles and gradient fields, profiles of diffusion coefficients in crystalline micropores and intergranular space of zeolite catalysts. Substantiated choice of regime-technological parameters of such systems for practical applications for nanotechnology, petrochemical, gas separation, environmental engineering and others.

Індекс УДК: 519.711.3, 519.4

Коди тематичних рубрик НТІ: 28.17.19

6. Науково-технічна продукція (НТП)

НТП 1

Назва продукції (укр): Математичні моделі, що описують внутрішню кінетику багатокомпонентних систем адсорбції та дифузії в неоднорідних нанопористих середовищах та методи відшукання їх розв'яку. Ідентифіковані профілі коефіцієнтів дифузії для бензолу та гексану в нано- і макропорах кристалітів.

Назва продукції (англ): Mathematical models which describe internal kinetics of the multicomponent systems of adsorption and diffusion in heterogeneous nanoporous media and its solution finding methods. Identified profiles of diffusion coefficients for benzen and hexane in нано- and macropores of crystalites.

Очікувані результати:

Галузь застосування: Хімічна та нафтогазова промисловості

Опис продукції (укр): Отримані нові теоретичні та експериментальні методи та підходи до дослідження внутрішньої кінетики багатокомпонентних систем адсорбції та дифузії в неоднорідних нанопористих цеолітних каталізаторах. Зокрема розроблено і апробована нова методика багато параметричної ідентифікації систем компетитивного переносу, що дозволяє отримати уточнену візію кінетичних процесів з урахуванням взаємовпливів та умов рівноваги та макро- і мікрорівнях (нанопорах частинок). Ця методика є комплексною і включає як підходи та принципи для проведення експериментальних досліджень процесів монодифузії та компетитивної дифузії так і побудову математичних моделей, що їх описують, аналітичних та чисельних алгоритмів відшукання розв'язків цих моделей та методи комп'ютерного моделювання.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Стадія завершеності НТП: Звіт по НДДКР

Впровадження НТП: Впроваджено

Строки впровадження: 2012

Виробник продукції: підприємства хімічної та нафто-хімічної промисловості

Споживачі продукції: матеріали впроваджено на підприємства та в навчальний процес

Перспективні ринки: Україна, СНД

Права інтелектуальної власності: За договорами

Форми та умови передачі продукції: Спільні НДДКР

7. Бібліографічний опис

1.S. Leclerc, M.Petryk, D.Canet, J.Fraissard Competitive diffusion of gases in a zeolite using proton NMR and a slice selection procedure, Catalysis Today. Elsevier. - Volume 187. - Issue 1. 104-107 (2012) [impact factor 3,476] 2.Deineka V., Petryk M., Fraissard J. Identifying kinetic parameters of masstransfer in components of multicomponent heterogeneous nanoporous media of a competitive diffusion system, Cybernetics and System Analysis, Springer New York, Vol. 47. Number 5, 705-723 (2011) 3.V.Deineka, M.Petryk, D.Mykhalyk Functional Identification of Intraparticle Diffusion Coefficients in Inhomogeneous Layer of Nanoporous Particles, Journal of Automation and Information Sciences, Begell House USA, Vol. 44. - Issue 2. P. 1-14, (2012) 4.V. Deineka, M. Petryk, D. Mykhalyk Identification of Kinetic Parameters of One-Component Adsorptive Mass Transfer in Microporous Catalytic Media, Journal of Automation and Information Sciences, Begell House USA, Vol. 43, Issue 3, 9-23 (2011) 5.M. Petryk Liquid expression from biosolid porous particles: mathematical model / M. Petryk, D. Mykhalyk, E. Vorobiev // WFC 2012 works. - Austria - 2012. 6.I.V. Sergienko Parameter identification in thermoelastic problems for nonstationary thermal field / I.V. Sergienko Numerical solution of some inverse nonstationary thermal coduction problems using pseudoinverses / I.V. Sergienko, V.S. Deineka // Cybernetic and System Analysis. - vol. 48. - pp. 681-700 (2012) 7.V.S. Deineka Optimal Control of Elliptic System and Identification of its Parameters for Observation of Solutions Derivatives / I.V. Sergienko, V.S. Deineka // Journal of Automation and Information Sciences, Begell House USA, Vol. 47. - Issue 10. P. 1-25, (2012) 8.I.V. Sergienko Parameter identification in thermoelastic problems for nonstationary thermal field / I.V. Sergienko, V.S. Deineka // Cybernetic and System Analysis. - vol. 47, no. 3. - pp. 375-399 (2011) 9.I.V. Sergienko Identifying the parameters of elliptic-pseudoparabolic distributed systems / I.V. Sergienko, V.S. Deineka // Cybernetic and System Analysis. - vol. 47, no. 4. - pp. 523-545 (2011) 10.Дейнека В. Функциональная идентификация коэффициентов внутришньочастичной диффузии в неоднородном слое нанопористых частиц / В.Дейнека, М.Петрик, Д.Михалик // Проблемы управления и информатики. - 2012. - № 1. - С. 27-39. 11.Дейнека В. Функціональна ідентифікація параметрів дифузії в неоднорідних наномульти-композитах: перетворення та градієнтні методи / М.Петрик, В.Дейнека // Вісник Харківського національного університету. - №1015. - 2012. - С.87-103 12.Дейнека В. Моделювання та коефіцієнтна ідентифікація адсорбційного масопереносу в неоднорідному каталітичному середовищі з використанням схеми Кранка-Ніколсона / В.Дейнека, М.Петрик, Д.Михалик // Вісник ТНТУ. - 2011. - Том 16. - № 1. - С.186-194. 13.Дейнека В. Ідентификация кинетических параметров однокомпонентного адсорбционного массопереноса в микропористых каталитических середах / В.С.Дейнека, М.Р.Петрик, Д.М.Михалик // Проблемы управления и информатики. - 2011. - № 2. - С. 12-25. 14.Петрик М.Р. Моделювання дворівневого переносу типу "фільтрація-консолідація" в середовищі вологонасичених частинок мікропористої структури //Петрик М.Р. - Крайові задачі для диференціальних рівнянь: Зб. наук. пр. - Чернівці: Прут, 2011.-Вип.20. 15.Дейнека В.С. Параметрична ідентифікація кінетичних параметрів

дифузії в багатошарових неоднорідних Fe/Dy-наномультикомпозитах // В.С. Дейнека, М.Р.Петрик.- Математичне та компютерне моделювання. Серія: Фізико-математичні науки: зб. наук. праць / Інститут кібернетики ім.В.М.Глушкова НАНУ, Камянець-Подільський національний університет ім. І. Огієнка, 2011. - Вип. 5. - С.85-112. 16.Дейнека В. Идентификация кинетических параметров многокомпонентних систем компетитивной дифузии в неоднородних нанопористих средах // В.С. Дейнека, М.Р.Петрик, Ж.Фрессар. / Кибернетика и системний анализ - 2011. - №5 - С.46-64 17.Дейнека В.С. Градієнтна ідентифікація параметрів в багатошарових Fe/Dy- наноплівках/ В.С. Дейнека, М.Р. Петрик, Д.М. Михалик // Праці міжнародної науково-технічної конференції "Комп'ютерное моделювання в наукоємних технологіях" (КМНТ-2012). Харків. ? 2012. ? Ч.1. ?С.90-93. 18.М.Петрик Параметрична ідентифікація коефіцієнтів дифузії для бензол-гексан сумішей / М.Петрик, Д.Михалик // Матеріали XVI наукової конференції ТНТУ ім. І. Пулюя. 2012. Том І. Природничі науки та інформаційні технології, 5-6 грудня 2012р. - Тернопіль ТНТУ, 2012. - С.12 19.М.Петрик Чисельне моделювання та ідентифікація кінетичних параметрів для багатошарових мультикомпозитів / М. Петрик, Д. Михалик // Матеріали XVI наукової конференції ТНТУ ім. І. Пулюя. 2012. Том І. Природничі науки та інформаційні технології, 5-6 грудня 2012р. - Тернопіль ТНТУ, 2012. - С.13 20.М.Петрик Функціональна ідентифікація коефіцієнтів дифузії для процесу адсорбції аліфатичних сполук цеолітами / М.Петрик, Д.Михалик // Праці інженерно-технічної комісії - том 7. - 2012, видавництво Джура, Тернопіль. - С.119-125 21.М.Петрик Ідентифікація коефіцієнтів дифузії в багатошарових плівках / М.Петрик, Д.Михалик // Матеріали другої науково-технічної конференції "Інформаційні моделі систем та технологій", 25 квітня 2012 р. - Тернопіль ТНТУ, 2012 - С.44 22.Петрик М.Р. Моделі і методи функціональної ідентифікації параметрів складних багатокомпонентних систем / М. Петрик, В.Дейнека // Матеріали першої науково-технічної конференції "Інформаційні моделі систем та технологій", 20 травня 2011 р. - Тернопіль ТНТУ, 2011. - С. 51. 23.Петрик М.Р. Програмно-обчислювальний комплекс ідентифікації коефіцієнтів консолідації неоднорідних дисперсних середовищ вологонасичених частинок / М. Петрик, Д.Михалик, О.Петрик // Матеріали першої науково-технічної конференції "Інформаційні моделі систем та технологій", 20 травня 2011 р. - Тернопіль ТНТУ, 2011. - С. 52.

8. Звітна документація

Кількість сторінок в звіті: 119

Мова звіту: Українська

Кількість файлів у звіті: 1

9. Заключні відомості

Перелік осіб-виконавців

Дудкін Дмитро Павлович

Михалик Дмитро Михайлович

Рогатинська Лілія Романівна

Керівник організації:

Ясній Петро Володимирович

Керівники роботи:

Петрик Михайло Романович (д. ф.-м. н., професор)

Керівник відділу реєстрації наукової діяльності УкрІНТЕІ

Юрченко Т.А.