Облікова картка НДДКР

Державний обліковий номер: 0219U001716

Державний реєстраційний номер: 0116U004744

Відкрита

Дата реєстрації: 21-02-2019

1. Етапи виконання

Номер етапу: 1

Назва етапу: Моделювання тепломасопереносу та адсорбції вуглеводнів в нанопористих цеолітних каталізаторах систем нейтралізації відпрацьованих газів

Початок етапу: 02-2016

Закінчення етапу: 12-2018

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 України

Адреса: м. Тернопіль, вул. Руська, 56

Телефон: (0352) 524181

WWW: www.tntu.edu.ua

3. Власник результатів НДДКР (продукції)

Назва організації: Міністерство освіти і науки України

Код ЄДРПОУ/ІПН: 38621185

Адреса: просп. Перемоги, 10, м. Київ, Київська обл., 01135, Україна

Підпорядкованість: Кабінет Міністрів України

Телефон: 380444813221

E-mail: mon@mon.gov.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: 600.8 тис. грн.

5. Науково-технічна робота

Назва роботи (укр)

Моделювання тепломасопереносу та адсорбції вуглеводнів в нанопористих цеолітних каталізаторах систем нейтралізації відпрацьованих газів

Назва роботи (англ)

Modeling of heat and mass transfer and adsorption of hydrocarbons in nanoporous zeolite catalysts neutralization of exhaust gases

Реферат (укр)

Робота присвячена розробці моделей та методів моделювання тепло і масопереносу газів в каталітичних середовищах частинок мікро- та нанопористої структури для технологій ресурсозбереження в інженерній екології, каталізі, нафтохімічній промисловостях і технологій очищення повітря та навколишнього середовища у відповідності з Комплексними програмам фундаментальних досліджень НАН України «Наноструктурні системи, наноматеріали, нанотехнології» та «Фундаментальні проблеми створення нових речовин і матеріалів хімічного виробництва». Розглядається циклічний процес адсорбції-десорбції вуглеводнів в Х цеолітах зі змінною температурою під час періоду холодного пуску, що має місце в системах нейтралізації відпрацьованих газів. Запропонована модель орієнтована на моделювання процесів адсорбції-десорбції пропану в цеолітних каталітичних середовищах у фіксованому ложі за умов холодного пуску та дозволяє поглибити знання що до циклічного процесу адсорбції вуглеводнів в цеолітах, оптимізувати процеси і розширити отриманні знання для практичного застосування.

Реферат (англ)

The work is devoted to the development of models and methods for modeling heat and mass transfer of gases in catalytic environments of particles of micro and nanoporous structure for resource conservation technologies in engineering ecology, catalysis, petrochemical industries, air purification technologies and environment in accordance with the Comprehensive Basic Research Programs of the National Academy of Sciences of Ukraine «Nanostructural systems, nanomaterials, nanotechnology» and «Fundamental problems of creation of new substances and materials of chemical production». The cyclic process of adsorption-desorption of hydrocarbons in X zeolites with a variable temperature during the cold start period, which takes place in the systems of neutralization of exhaust gases, is considered. The proposed model is oriented on the modeling of adsorption-desorption processes of propane in zeolite catalytic media in a fixed bed under cold start conditions and allows to deepen knowledge of the cyclical process of adsorption of hydrocarbons in zeolites, to optimize processes and to broaden the knowledge gained for practical application.

Індекс УДК: 519.713;519.711:53, 519.4

Коди тематичних рубрик НТІ: 28.17.23

6. Науково-технічна продукція (НТП)

НТП 1

Назва продукції (укр): Моделювання тепломасопереносу та адсорбції вуглеводнів в нанопористих цеолітних каталізаторах систем нейтралізації відпрацьованих газів

Назва продукції (англ): Modeling of heat and mass transfer and adsorption of hydrocarbons in nanoporous zeolite catalysts neutralization of exhaust gases

Очікувані результати:

Галузь застосування: Хімічна та нафтогазова промисловості

Опис продукції (укр): Отримано нові методики моделювання, ідентифікації та дослідження параметрів циклічних процесів адсорбції-десорбції вуглеводнів в нанопористих цеолітних каталізаторах систем нейтралізації відпрацьованих газів зі змінною температурою, включаючи період холодного пуску на основі нелінійних моделей тепломасопереносу в нанопористих середовищах з урахуванням комплексу фізичних чинників, що визначають взаємодію макропотоків та мікропотоків в мікро- і нанопористих частинок, та дозволяють отримати уточнену візію внутрішньої кінетики дифузійно-каталітичних процесів. Розроблено нелінійні математичні моделі процесу десорбції в середовищах нанопористих цеолітів (вуглецевих пасток) на основі балансових диференціальних рівняння масопереносу та маловитратні швидкісні ефективні схеми лінеаризації моделей адсорбції та отримання регуляризаційних виразів для ідентифікації коефіцієнтів дифузії.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Стадія завершеності НТП: Звіт по НДДКР

Впровадження НТП: Впроваджено

Строки впровадження: 2019-2021

Виробник продукції: підприємства хімічної та нафто-хімічної промисловості

Споживачі продукції: матеріали впроваджено на підприємства та в навчальний процес

Перспективні ринки: Україна, Євросоюз, СНД

Права інтелектуальної власності: За договорами

Форми та умови передачі продукції: Спільні НДДКР

7. Бібліографічний опис

1. Petryk M., Khimitch A., Petryk M.M., Fraissard J. Experimental and computer simulation studies of dehydration on microporous adsorbent of natural gas used as motor fuel. Fuel. Vol. 239, 1324–1330 (2019) (impact factor 5.03) 2. 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, Begell House USA, Vol. 50, Issue 10, 18-33 (2018) 3. Petryk M., Khimitch A., Petryk M.M., Fraissard J. Modeling of Heat and Mass Transfer, Adsorption and Desorption of Hydrocarbons in Nanoporous Zeolite- Catalisators of Neutralizing Systems of Exhaust Gases. Journal of Automation and Information Sciences, Begell House USA, Vol. 50, Issue 4, 1-12(2018) 4. Boyko I.V.Analytical method for calculation of the potential profiles of nitride-based resonance tunneling structures. Condensed Matter Physics. Vol. 21 (4) , 43701 (2018) 5. Petryk M. 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. Begell House (USA).Vol. 48. Issue 1. 2016. p.69-83. 6. M. Petryk. Retrospective Identification Problem in Integrated Form for Systems of Filtration– Consolidation of Compressible Media of Liquid Contained Microporous Particles. Journal of Automation and Information Sciences, Begell House USA, Vol. 48. - Issue 8. P. 1-14, (2016) 7. I.V. Boyko, M.R. Petryk. Phys. Influence of the Space Charge on Tunneling of Electrons and Their Conductivity by the Resonance Tunneling Structures in the Constant Electric Field. Journal of Nano- and Electronic Physics , 9 No 3, 03030 (2017) 8. Boyko I.V. Anisotropic wurtzite resonance tunneling structures: stationary spectrum of electron and oscillator strengths of quantum transitions. Journal of physical studies. Vol. 22(1), 1701-1709(2018) 9. I.V. Boyko, A.M. A.M. Gryschuk. The Spectrum of Transverse Acoustic Phonons in Planar Multilayer Semiconductor Nanostructures. Journal of Nano- and Electronic Physics // Vol. 8 No 4(1), 04001(5pp) (2016). 10. Prikazchikov V. G., Khimich A.N.Comparing the Energy of Convergence of One-Step and Two-Step Iterative Methods. Cybernetics and Systems Analysis. Vol. 53(1), 21–25 (2017) 11. Prikazchikov V. G., Khimich A.N. Asymptotic Estimates of the Accuracy of Eigenvalues of Fourth Order Elliptic Operator with Mixed Boundary Conditions. Cybernetics and Systems Analysis. Vol. 53(3), 358–365 (2017) 12. A. N. Khimich, V. Popov, V. Chistyakov. Hybrid Algorithms for Solving the Algebraic Eigenvalue Problem with Sparse Matrices. Cybernetics and Systems Analysis, 53(6), 937–94, (2017). 13. Iu. G. Kryvonos, I. T. Selezov, A. N. Khimich, Yu. Baranov. Modeling the Evolution of a Propagating Signal from Input to Output with Total Absorption. Cybernetics and Systems Analysis, 52(1), 46-51, (2016). 14. Yasniy O.P., Lapusta Y.Effect of the defect initial shape on the fatigue lifetime of a continuous casting machine roll. Comptes Rendus Mecanique, Vol. 344(8), 596-602 (2018) 15. Lupenko, S., Lutsyk, N. , Yasniy, O. Statistical analysis of human heart rhythm with increased informativeness. Acta Mechanica et Automatica,Vo l.12(4), 311-315(2018) 16. Yasniy O., Pyndus Y., Iasnii V., Lapusta Y. Residual lifetime assessment of thermal power plant superheater header. Engineering Failure Analysis, Vol. 82, 390-403 (2017) 17. Sulym H. T., Yasnii O. P., Pasternak Ya. M. Modeling of Multiple Cracking Under the Conditions of Thermomechanical Fatigue Materials Science. Springer, Vol.51(6), 765–772 (2016) 18. Математичне моделювання теплопереносу та адсорбції вуглеводнів в нанопористих цеолітних каталізаторах систем нейтралізації відпрацьованих газів / Петрик М.Р., Хіміч О.М., Бойко І.В.,

Михалик Д.М., Петрик М.М., Ковбашин В.І. – Національна академія наук України Інститут кібернетики імені В.М. Глушкова (ISBN 978- 966-02-8423-4) – 2017. - 280 с 19. M. Petryk, D. Mykhalyk, M. Petryk, I.Boyko, M. Mudryk. Modeling of adsorption nd desorption of hydrocarbons in nanoporous catalyst zeolyte using nonlinear Langmuir isotherm //International coferenc; Advanced computer information technologies ". –Ceske Budejovice: 2018. – С. 42-45. 20. Дослідження механізмів оцінки інформації у системах сприйняття. / Грицик В.В., Павлюк О.М., Петрик М.Р., Різник В.В. – Львів СПОЛОМ, 2018 (ISBN 978-966-919-341-4).-340с. 21. Boyko I.V., Petryk M.M., Petryk M.R. An Analytical Approach to the Calculation of the Spectral Characteristics of an Electron in Nitride Nanostructures. 2018 IEEE 8th International Conference on Nanomaterials: Applications, IEEE, Vol. 1., 2038-1(2018) 22. Петрик М .Р., Михалик Д.М., Петрик О.Ю., Бойко І.В., Мудрик І.Я. Моделювання процесів адсорбції та десорбції вуглеводнів каталітичним середовищем із застосуванням нелінійної функції абсорбційної рівноваги Ленгмюра. Мат. міжнародної науково-технічної конференції "Комп'ютерне моделювання в наукоємних технологіях", Харків, 2018,Т.(1), С.39-242. 23. Петрик М.Р., Бойко І., Шинкарик М., Петрик О. Математична модель дифузійних процесів вуглеводнів у нанопористому каталістичному середовищі цеоліту ZSM-5 з використанням ізотерми Ленгмюра. Мат. міжнародної наукової конференції «Сучасні проблеми математики та ї ї застосування в природничих науках і інформаційних технологіях». Чернівці, 2018. С.152. 24. Свідоцтво про реєстрацію авторського права на твір. Комп’ютерна програма «Паралельна програма GausSolver для дослідження та розв’язування лінійних систем зі щільними невиродженими матрицями з довільною розрядністю на MIMD-комп’ютерах» “GausSolver”/Хіміч О. М., Ніколаєвська О. А., Чистякова Т. В., Полянко В. В., Баранов І. А. (Україна). – № 76941; дата реєстрації 19.02.2018 25. Комп’ютерна програма «SPARSE_SOLVER» для дослідження та розв’язування систем лінійних алгебраїчних рівнянь з розрідженими матрицями на комп’ютерах з багатоядерними процесорами та графічними прискорювачами / Хіміч О.М., Сидорук В.А. // Свідоцтво на реєстрацію авторського права на твір № 65346 від 16.05.2016 р., Державна служба інтелект. власності України 26. Комп’ютерна програма: «Гібридна програма Evp_bs_bp_g для розв’язування часткової узагальненої проблеми на власні значення для стрічкових симетричних матриць на багатоядерних комп’ютерах з графічними прискорювачами» / Хіміч О.М., Баранов А.Ю.,Попов О.В., Чистяков О.В // Свідоцтво на реєстрацію авторського права на твір № 65347 від 16.05.2016 р., Державна служба інтелектуальної власності України. 27. Спосіб цифрового вимірювання параметрів анормальних неврологічних рухів верхніх кінцівок у пацієнтів із проявами тремору / Петрик М.Р., Михалик Д.М., Мудрик І.Я. // Патент України № 130247. 16.12.2018.

8. Звітна документація

Кількість сторінок в звіті: 321

Мова звіту: Українська

Кількість файлів у звіті: 1

9. Заключні відомості

Перелік осіб-виконавців

Бойко Ігор Володимирович

Ковбашин Василь Іванович

Луцик Надія Степанівна

Мішук Оксана Іванівна

Михалик Дмитро Михайлович

Мудрик Іван Ярославович

Сеник Оксана Ярославівна

Хіміч Олександр Миколайович

Ясній Олег Петрович

Керівник організації:

Ясній Петро Володимирович

Керівники роботи:

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

Керівник відділу реєстрації наукової діяльності УкрІНТЕІ

Юрченко Т.А.