Облікова картка НДДКР

Державний обліковий номер: 0216U001404

Державний реєстраційний номер: 0113U000251

Відкрита

Дата реєстрації: 11-02-2016

1. Етапи виконання

Номер етапу: 1

Назва етапу: Функціональна ідентифікація параметрів дифузії газів в каталітичних середовищах частинок мікро- та мезопористої структури

Початок етапу: 01-2013

Закінчення етапу: 12-2015

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) 524185

E-mail: Mykhaylo_Petryk@tu.edu.te.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: 125.5 тис. грн.

5. Науково-технічна робота

Назва роботи (укр)

Функціональна ідентифікація параметрів дифузії газів в каталітичних середовищах частинок мікро- та мезопористої структури

Назва роботи (англ)

Functional identification of parameters of gases diffusion in the catalytic media of particles with micro-and mesoporous structure

Реферат (укр)

Робота присвячена розробці методів функціональної ідентифікації та математичному моделюванню кінетики дифузії вуглеводневих сполук в каталітичних мікро та мезопористих цеоліт-каталізаторах з метою подальшого застосування для технологій ресурсозбереження в інженерній екології, каталізі, нафтохімічній промисловостях і технологій очищення повітря та навколишнього середовища, що відповідає Комплексним програмам фундаментальних досліджень НАН України "Наноструктурні системи, наноматеріали, нанотехнології". Проект мав на меті вирішення інформаційної проблеми, пов'язаної з встановленням кількісних характеристик лімітуючих чинників внутрішньої кінетики дифузії, що є визначальним при створенні нових наноматеріалів та технологій. Конкретно, розглядаються нові задачі функціональної ідентифікації параметрів кінетики багатокомпонентних систем дифузії газів в каталітичних середовищах частинок мікро- та мезопористої структури, як функцій від часу та просторових координат, на основі експериментальних даних у вигляді NMR- зображень отриманих з допомогою методу ядерно-магнітного резонансу та методів керування станом СРБС.

Реферат (англ)

The work is devoted to developing methods of functional identification and mathematical modeling for diffusion kinetics of hydrocarbon compounds in catalytic micro and mesoporous zeolite catalyst to further use at technology resource in engineering environment, catalysis, petrochemical industries and technologies of air purification that meets the complex program of fundamental Studies of NAS of Ukraine 'Nanostructure systems, nanomaterials, nanotechnology ". The project is aimed at solving the problem of establishment of quantitative characteristics factors limiting internal diffusion kinetics, which is crucial for creating new nanomaterials and technologies. Specifically, new problems of functional parameter identification of multi kinetics of diffusion of gases in the catalytic particles media with micro- and mesoporous structures as functions of time and space coordinates are considered, based on experimental data as NMR- images obtained by the method of nuclear magnetic resonance and methods state control.

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 та методи функціональної ідентифікації параметрів дифузії газів в каталітичних середовищах частинок мікро- та мезопористої структури

Назва продукції (англ): Mathematical models and methods of functional parameter identification diffusion of gases in the catalytic particles media of micro- and mesoporous structure

Очікувані результати:

Галузь застосування: Хімічна та нафтогазова промисловості

Опис продукції (укр): Отримані нові теоретичні та експериментальні методи та підходи до дослідження ідентифікації

параметрів внутрішньої кінетики багатокомпонентних систем адсорбції та дифузії в каталітисних середовищах частинок мікро- і мезопористоїструктури. Розроблено і апробовано нову методику та порграмні засоби функціональної ідентифікації систем переносу, що дозволяє отримати уточнену візію кінетичних процесів з урахуванням взаємовпливів потоків мікро- та мезорівнях, умов рівноваги, компетитивності дифундованих компонент, різнорідності структури мікро і мезо пористих частинок. Розроблені засоби ідентифікації дозволили отримати уточнені функціоналні залежності визначальних параметрів, що лімітують швидкості переносу на мікро та мезо рівнях та реалізувати ефективні градієнті процедури ідентифікації з використанням MNR-зображень.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Стадія завершеності НТП: Звіт по НДДКР

Впровадження НТП: Впроваджено

Строки впровадження: 2016

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. М. Петрик Математичне моделювання полів масопереносу в неоднорідних і нанопористих середовищах та ідентифікація їх параметрів. Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора фізико-математичних наук / Інститут кібернетики імені В.М.Глушкова НАН України. 2013.- 388 с. (науковий консультант, академік НАН України, докт.фіз.-мат.наук Дейнека В.С.) 2. Бабій Н.В. Моделі процесів дифузійного перенесення і методи оцінювання технологічних параметрів в багатошарових наноплівках. Автореферат дисертації на здобуття наукового ступеня кандидата технічних наук 01.05.02 - математичне моделювання та обчислювальні методи / Н.В.Бабій - Тернопіль, 2013. - 22 с. (науковий керівник докт.фіз.-мат. наук Петрик М.Р.) 3. Дейнека В.С., Петрик М.Р., Кане Д., Фресар Ж. Математичне моделювання та ідентифікація параметрів масопереносу в неоднорідних і нанопористих середовищах(адсорбція, компетитивна дифузія) : монографія / К.: Національна академія наук України. Інститут кібернетики імені В.М.Глушкова (ISBN 978-966-02-7098-5). - 2014. - 178 с. 4. Сергієнко І.В., Петрик М.Р., Хіміч О.М., Кане Д., Михалик Д.М., Леклерк С., Фресар Ж. Математичне моделювання масопереносу в середовищах частинок нанопористої структури: монографія / К.: Національна академія наук України, Інститут кібернетики імені В.М. Глушкова (ISBN 978-966-02-7480-8). - 2014. - 210 с. 5. Петрик М.Р., Василюк П.М., Михалик Д.М., Бабій Н.В., Петрик О.Ю. Моделі процесів дифузійного переносу і методи оцінювання параметрів в багато композитних наноплівках : монографія / Тернопіль : Вид-во ТНТУ імені Івана Пулюя (ISBN 978-966-305-071-3), 2015. - 176 с. 6. Petryk M. Competitive Diffusion of Gases in a Zeolite Bed: NMR and Slice Selection Procedure, Modelling and Parameter Identification / M.Petryk, S.Leclerc, D.Canet, I.Sergienko, V.Deineka, J. Fraissard // The Journal of Physical Chemistry C. ACS (USA). - 2015. - Vol. 119. - Issue 47. - P. 26519-26525. (impact factor 4.772). 7. S. Leclerc Competitive diffusion of gases in a zeolite using proton NMR and a slice selection procedure. / S. Leclerc, M. Petryk, D. Canet, J. Fraissard // Catalysis Tody.- Vol. 187.- Issue1. - 2012. - p. 104-107. (impact factor 3.89) 8. M.Petryk Numerical and Analytical Modeling of Solid-Liquid Expression from Soft Plant Materials. / M.Petryk, E.Vorobiev // AIChE Journal. Wiley.(USA) - 2013 - Volume 59, Issue 12. - p.4454-4888 (impact factor 2.75) 9. Sergienko I.V. Highly Efficient Methods of the Identification of Competitive Diffusion Parameters in Inhomogeneous Media of Nanoporous Particles / I.V.Sergienko , M. R. Petryk, J. Fraissard, S. Leclerc // Cybernetics and Systems Analysis. Springer (USA). -2015.- Volume 51. Issue 4. - pp. 529-546 . 10. Boyko I.V. Contribution of Two-photon Detector Electronic Transitions in the Formation of Dynamic Conductivity of Three-barrier Resonant Tunneling Structures / Boyko I.V., Petryk M.R., Tsupryk H.B. // Journal of Nano-and Electronic Physics. Vol. 7. No 4. 2015. P. 04078-1 - 04078-6. (impact factor 0.44) 11. Петрик М.Р. Высокоскоростные методы идентификации параметров моделей фильтрации-консолидации сжимаемых сред влагонасыщенных микропористых частиц. // Международный научно-технический журнал "Проблемы управления и информатики".- 2016. - № 1.- С.18-31. (impact factor 0.2) 12. Petryk M. Parameter Identification of Competitive Diffusion of Nanoporous Particles Media Using Gradient Method and the Heviside's Operational Method // Radioelectronics & Informatics Journal. - 2015. - Volume 68. - Issue 1. - P. 30-36. (IEEE, Computer Society USA, TTTC, ISSN) (Copernicus) 13. Петрик М.Р. Высокоскоростные методы идентификации параметров моделей фильтрации-консолидации сжимаемых сред влагонасыщенных микропористых частиц. Международный научно-технический журнал

"Проблемы управления и информатики".- 2016. - № 2 . (in prsess). Бомба А.Я. Моделювання нелінійних сингулярно збурених трикомпонентних процесів типу "дифузія-конвекція-масообмін" в нано-пористому середовищі / Бомба А.Я., Петрик М.Р., Леклерк Д., Присяжнюк О.В., Фресар Ж. // Журнал обчислювальної і прикладної математики, 2015. - №3 (200). - С.107-115 15. Дейнека В.С. Функціональна ідентифікація градієнтними методами та інтегральними перетвореннями / В.Дейнека, М.Петрик //Доповіді НАН України. - 2013. - №12. -С. 45-51. 16. Петрик М. Математична модель неізотермічного адсорбційного масопереносу в нанопористих каталізаторах // Вісник ТНТУ. - 2015. - Том 75. -№ 1. - С. 233-239 17. Петрик М.Р. Математичне моделювання фільтраційної консолідації в неоднорідних багатокомпонентних циліндричних дисперсійних мікропористих середовищах / Петрик М.Р., Дейнека В.С., Воробієв Є.І. // Компьютерная математика. Київ, Ін-т кібернетики імені В.М.Глушкова НАНУ, 2013, № 1, с. 37-45. 18. Дейнека В.С. Математичне моделювання дифузійного перенесення в багатошарових наноплівках оксидної структури (дослідження зразка за технологією виробництва базальтового супертонкого волокна) / Дейнека В.С.,Петрик М.Р., Василюк П., Бабій Н. // Вісник Тернопільського національного технічного університету, 2013, № 2(70), с. 219-231 19. Fraissard J. Competitive diffusion of benzene-hexane mixtures in microporous medium: mathematical modeling and parameters identification / J. Fraissard, S. Leclerc, D. Canet, D. Mykhalyk, M. Petryk // Buletin of Kharkov V. Karazin National University. № 1131 Serie "Mathematical Modelling & IT-tecnologies. Control Systems". Issue 25 (2014), 181-191. 20. Петрик М.Р. Математичне моделювання кінетики систем багатокомпонентної дифузії в неоднорідних середовищах за результатами ідентифікації їх кінетичних параметрів / М.Р. Петрик, Михалик Д.М., М.І. Шинкарик, О.Ю. Петрик // Вісник Херсонського національного технічного університету.- Випуск 3(50), - 2014. - С. 400 - 404 21. Петрик М.Р Ідентифікація кінетичних параметрів компетитивної дифузії газів в твердих пористих тілах з використанням результатів NMR-аналізу / Петрик М.Р., Фрессар Ж., Михалик Д.М // Збірник праць. Т.9: Сучасні проблеми техніки і технології Тернопільський осередок Наукового товариства ім. Шевченка / відп. ред.: М. Андрейчин, ред. тому: П. Ясній. - Тернопіль : Астон, 2014. - С.146-157. 22. Петрик М.Р. Моделювання та ідентифікація параметрів процесів дифузійного перенесення в багатошарових оксидних наноплівках / М.Р. Петрик, Д.М. Михалик, М.І. Шинкарик, О.Ю. Петрик, Н.В. Бабій // Математичне та комп'ютерне моделювання. Серія: Технічні науки : зб. наук. праць / Інститут кібернетики імені В. М. Глушкова Національної академії наук України, Кам'янець-Подільський національний університет імені Івана Огієнка, 2014 - Вип.10 - С167-178. 23. Петрик М. Моделювання процесів дифузійного перенесення хрому в багато композитних оксидних наноплівках / М.Петрик, Д.Михалик, О.Петрик, Н.Бабій // Вісник ТНТУ - Тернопіль : ТНТУ, 2014. - Том 74. - № 2. - С. 199-209. 24. М.Петрик. Математичне моделювання процесу відтиску біпористих середовищ та аналізу тиску в частинках та міжчастинковому просторі / М. Петрик, Є. Воробйов, Д. Михалик // Вісник ТНТУ - Тернопіль : ТНТУ, 2014. - Том 76. - № 4. - С 195-203. 25. Петрик М. Програмне та математичне забезпечення для моделювання і дослідження параметрів систем переносу типу "фільтрація-консолідація" в середовищі частинок мікропористої структури / М.Р. Петрик, Михалик Д.М., М.М. Петрик // Вісник Херсонського національного технічного університету.- Випуск 3(54), - 2015. - С. 290 - 293. 26. Петрик М. Моделювання та ідентифікація параметрів задач дифузії в неоднорідних наномультикомпозитах градієнтними методами та інтегральними перетвореннями// Математичне та комп'ютерне моделювання. Серія: Технічні науки: Зб. наук. праць / Інститут кібернетики ім. В. М. Глушкова Національної академії наук України, КПНУ, 2015. - Вип. 12. - С.141-160. 27. Петрик М. Числове моделювання складного дворівневого масопереносу в середовищах частинок мікропористої структури з використанням схеми Кранка-Ніколсон / М.Р. Петрик, Д. Михалик, М.М. Петрик // Вісник ТНТУ - Тернопіль : ТНТУ, 2015. - Том 80. - № 4. - С 161-169

8. Звітна документація

Кількість сторінок в звіті: 313

Мова звіту: Українська

Кількість файлів у звіті: 1

9. Заключні відомості

Перелік осіб-виконавців

Балабан Степан Миколайович

Ковбашин Василь Іванович

Луцик Надія Степанівна

Міщук Оксана Іванівна

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.