Облікова картка НДДКР

Державний обліковий номер: 0210U001379

Державний реєстраційний номер: 0107U000542

Відкрита

Дата реєстрації: 10-02-2010

1. Етапи виконання

Номер етапу: 1

Назва етапу: Моделювання та експериментальні дослідження адсорбції газів в неоднорідних нанопористих каталітичниї цеолітних середовищах

Початок етапу: 01-2007

Закінчення етапу: 12-2009

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: 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: 2201020

Напрям фінансування: 2.1 - фундаментальні дослідження

Джерела фінансування

Джерело фінансування: 7713 - кошти держбюджету

Фактичний обсяг фінансування за звітний етап: 44.993 тис. грн.

5. Науково-технічна робота

Назва роботи (укр)

Моделювання та експериментальні дослідження адсорбції газів в неоднорідних нанопористих каталітичниї цеолітних середовищах

Назва роботи (англ)

Experimental research and modeling of gas adsorption in heterogeneous and nanoporous catalytically zeolite medias

Реферат (укр)

Робота присвячена теоретичному і експериментальному дослідженню кінетики дифузії і адсорбції в нанопористих каталітичних середовищах для їх подальшого використання в сучасних ресурсозберігаючих технологіях в хімічній та нафтохімічній галузях: каталітичні процеси, сепарація вуглеводнів та інших газів, очищення повітря і навколишнього середовища від шкідливих сполук. Створено математичні моделі, методи комп'ютерного моделювання та програмні засоби що описують кінетику моно та компетитивної дифузії (competitive diffusion) суміші двох газів в мікро- і нанопорах кристалітів цеоліту, що реальніше відображає внутрішню картину процесів. Здійснено параметричну ідентифікацію кінетичних параметрів двокомпонентних адсорбційних каталітичних систем, зокрема отримані розподіли коефіцієнтів дифузії для бензолу та гексану в нано- і макропорах кристалітів з використанням експериментальних розподілів адсорбованих мас. Змодельовано профілі концентрацій та їх ґрадієнти як для моно так і для компетитивної дифузії і адсорбції двокомпонентних сумішей при різних вхідних співвідношеннях в нано- і макропорах кристалітів цеолітних каталізаторів

Реферат (англ)

Work is devoted to theoretical and experimental research of internal kinetics of diffusion and adsorption processes in nanoporous catalytic media for their subsequent use in modern power save technologies in chemical and petrochemical industry: catalytic processes, separation of hydrocarbons and other gases, cleanings of air and environment. Mathematical models, methods of computer design and program software, are created, that describe kinetics mono and competitive diffusions of mixture of two gases in micro- and nanoporous of zeolite crystallites which represents the internal picture of processes more real. Parametric authentication of kinetic parameters of the twocomponent adsorption catalytic systems is carried out, in particular found diffusion coefficients distributing for benzen and hexane mixtures in nano- and macropores of crystallites with the use of the experimental distributing of adsorbabled masses. The concentrations profiles and their gradients are modelled as for mono so for competitive diffusion of two component mixtures in nano- and macropores of zeolite crystallites catalysts

Індекс УДК: 519.6, 519.6

Коди тематичних рубрик НТІ: 27.41

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:

Опис продукції (укр): Отримані нові теоретичні та експериментальні методи та підходи дослідження внутрішньої кінетики багатокомпонентних систем адсорбції та дифузії в неоднорідних нанопористих цеолітних каталізаторах. Зокрема розроблено і апробована нова методика багато параметричної ідентифікації досліджуваних систем 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 чисельного комп'ютерного моделювання.

Соціально-економічна спрямованість НТП:

Стадія завершеності НТП: Звіт по НДДКР

Впровадження НТП: Впроваджено

Строки впровадження: 2009

Виробник продукції: підприємства хімічної та нафто-хімічної промисловості

Споживачі продукції: матеріали впроваджено в навчальний процес

Перспективні ринки: Україна, СНД

Права інтелектуальної власності: За договорами

Форми та умови передачі продукції: Спільні НДДКР

7. Бібліографічний опис

1. M.Petryk Mathematical modeling of mass transfer in symmetric heterogeneous and nanoporous media with a system of n - interface interactions / M.Petryk // Cybernetics and System Analysis, Springer New York, - 2007. - Volume 43, - Number 1, - 1060-0396 (Print) 1573-8337 (Online). - p. 94-111 2. Petryk M Mathematical modeling and visualization of gas transport in a zeolite bed using a slice selection procedure. / Petryk M., Leclerc S., Canet D., Fraissard J. // Diffusion Fundamentals. - 2007. - Volume 4. - p. 11.1-11.23 3. Petryk. M. Liquid Flowing from Porous particles During the Pressing of Biological Materials./ Petryk. M., Vorobiev E. // Computer and Chemical Engineering Elsevier Irland. - 2007. - ISSU 31. - p.1336-1345. 4. Petryk M. Modeling of gas transport in a microporous solid using a sclice selection procedure: Application to the diffusion of benzene in ZSM5. / Petryk M. Leclerc S., Canet D., Fraissard J. // Catalysis Today, Elsevier Irland, ISSU. - 2008 5. Petryk M. Mathematical modeling and visualization of gas transport in a zeolite bed using a slice selection procedure. / Petryk M., Leclerc S., Canet D., Fraissard J. // Proceedings of WFC 10. LEIPZIG -GERMANY. - 2008. - Volume 1. - P 6. 6. Petryk M. Liquid Flowing from Porous particles During the Pressing of Biological Materials. / Petryk M., Vorobiev E. // Proceedings of WFC 10. LEIPZIG -GERMANY. - 2008, - Volume 1. P. 6 7. Petryk M. Mathematical Modeling of Nonlinear Competitive Two-Component Diffusion in Media of Nanoporous Particles. / Petryk M., Fraissard J. // Journal of Automation and Information Sciences, Begell House USA - 2009. - Volume 41. - Issue 3. - p. 37-55 8. Petryk M. Modeling and Analysis of Concentration Fields of Nonlinear Competitive Two-Component Diffusion in Medium of Nanoporous Particles. / Petryk M., Fraissard J, Mykhalyk D. // Journal of Automation and Information Sciences, Begell House USA. - 2009. - Vol. 41. - Issue 8. - p. 13-23. 9. Петрик М.Р. Математическое моделирование массопереноса в симметрических неоднородных и нанопористых средах с системой n-интерфейсных взаимодействий / Петрик М.Р. // Кибернетика и системный анализ. - 2007. - № 1 - .С.114-134. 10. Петрик М.Р. Математичне моделювання систем масопереносу з спектральним параметром для неоднорідних n-інтерфейсни циліндричних напівобмежених нанопористих середовищ з порожниною / Петрик М.Р. // Науковий вісник Чернівецького університету: Зб. наук. праць. Вип. 336-337. Математика. - 2007.- № 1.-.С.151-159. 11. Петрик М. Математичне моделювання і оптимізація систем електродифузійного масопереносу / Шаблій О., Петрик О., Петрик М. // Вісник ТДТУ ім. Івана ПУЛЮЯ. - 2007. - № 4. - С. 165-183. 12. Петрик М.Р. Математическое моделирование и визуализация системы многоуровневого массопереноса в неоднородных каталитических средах нанопористых частиц / Петрик М.Р., Фрессард Ж. // Проблемы управления и информатики. ? 2008.? № 5.? С. 54-73. 13. Петрик М.Р. Математичне моделювання нелінійного ізотермічного адсорбційного масопереносу для обмежених нанопористих середовищ / Петрик М.Р., Глинська М.Л. // Весник Херсонского национального технического университета, 2008. - Вип. 2(31). - С. 392-397. 14. Петрик М.Р. Математичне моделювання адсорбційного массопереносу з спектральним параметром дя неоднорідних n -інтерфейс них циліндричних необмежених нанопористих середовища / Петрик М.Р. // Крайові задачі для диференціальних рівнянь: Зб. наук. пр. - К.: Ін-т. математики НАН України, 2008. - Вип. 14. - С.182-195. 15. Петрик М.Р. Математичне моделювання процесу дифузії в багатошарових плівках (Fe/Dy) / Скакальська Н.В., Петрик М.Р. // Весник Херсонского национального

технического университета, 2008. - Вип. 2(31). - С. 443-449. 16. Петрик М.Р. Математическое моделирование нелинейной компетитивной двухкомпонентной диффузии в среде нанопористых частиц / Петрик М.Р., Фрессард Ж. // Проблемы управления и информатики. - 2009.- № 2.- С. 47-64. 17. Петрик М.Р., Фрессард Ж., Михалик Д.М. Моделирование и анализ концентрацыонних полей нелинейной компетитивной двухкомпонентной диффузии в среде нанопористых частиц // Проблемы управления и информатики. - 2009.- № 4. - С. 73-83. 18. Петрик М.Р. Математичне моделювання сорбційного масопереносу для одно- та двоскладових обмежених середовищ / Петрик М.Р., Михалик Д.М. Бабюк М. // Вісник ТДТУ ім. І.Пулюя. - 2009. - №;3 С.157-165 19. Петрик М.Р. Математичне моделювання адсорбційного нелінійного масопереносу в каталітичних пористих середовищах / Петрик М.Р., Михалик Д.М. // Вісник ТДТУ ім. І.Пулюя. - 2009. - № 4

8. Звітна документація

Кількість сторінок в звіті: 156

Мова звіту: Українська

Кількість файлів у звіті: 1

9. Заключні відомості

Перелік осіб-виконавців

ЛЕНЮК Михайло Павлович

МИХАЛИК Дмитро Михайлович

Керівник організації:

Ясній Петро Володимирович

Керівники роботи:

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

Керівник відділу реєстрації наукової діяльності УкрІНТЕІ

Юрченко Т.А.