Облікова картка НДДКР

Державний обліковий номер: 0224U031437

Державний реєстраційний номер: 0122U001979

Відкрита

Дата реєстрації: 26-04-2024

1. Етапи виконання

Номер етапу: 2

Назва етапу: Побудова розробка принципово нових математичних моделей складних нанопористих систем з урахуванням враховують факторів впливу внутрішніх і поверхневих фізико-хімічних чинників та механізмів компететивних впливів і адіабатично включених взаємодій. Розробка моделей багатопараметричної ідентифікації для обернених задач складних систем багатокомпонентної компетитивної дифузії вуглеводнів у різнотипних функціональних мікропористих матеріалах, як складних багатокомпонентних системах безпечної енергетики та з контролю викидів в атмосферу використанням засобів оптимального керування; дослідження моделей на основі побудови функціоналів-нев'язки.

Початок етапу: 01-2023

Закінчення етапу: 12-2023

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: 780.000 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 нові наукоємні математичні моделі складних нанопористих систем і нанопроцесів, що протікають у них з урахуванням враховують факторів впливу внутрішніх і поверхневих фізико-хімічних чинників та механізмів компетитивних впливів і адіабатично включених взаємодій, енергій активації та узагальнених умов неізотермічної рівноваги типу Ленгмюра та ін. Розроблена комп'ютерна mc-модель симуляції кінетики компетитивної адсорбції різнорозмірних нанопористих частинок, де адсорбційні 2-D пласти наноструктур багатоетапно формувались на основі концепції RSA (random sequential adsorption) у вигляді мультикомпозитних мікрошарів сферичних та сферопрямокутних нанопористих частинок з різними співвідношеннями параметрів (концентраціями частинок різних типів, співвідношенням діаметрів, довжин та ін.) для формування надійних шарів нанокаталізаторів довготривалої технологічної експлуатації. На цій основі побудовані матричні високопродуктивні алгоритми та обчислювальні процедури, для реалізації розпаралелювання обчислень для досліджуваних моделей нанопористих і нанорозмірних систем з використанням багатоядерних комп'ютерних архітектур. Розроблені моделі багатопараметричної ідентифікації визначальних параметрів режимів повної та неповної адсорбції для обернених задач складних систем багатокомпонентної компетитивної дифузії вуглеводнів у різнотипних функціональних сучасних нанопористих матеріалах типу целіт ZSM- 5, як складних багатокомпонентних системах безпечної енергетики, та з контролю викидів в атмосферу об'єктів енергетики, переробних і харчових виробництв, транспорту з використанням методів теорії оптимального керування. Побудовані швидкісні

алгоритми ідентифікації внутрішньо кінетичних параметрів задач багатокомпонентних компететивних дифузії та адсорбції вуглеводнів при застосуванні суперкомп'ютерів і хмарних обчислень.

Реферат (англ)

New scientific mathematical models of complex nanoporous systems and nanoprocesses occurring in them have been developed, taking into account the factors of influence of internal and surface physico-chemical factors and mechanisms of competitive influences and adiabatically included interactions, activation energies and non-isothermal Langmuir equilibrium. High-speed analytical solutions of competitive non-isothermal adsorption and desorption systems in nanoporous media using Heaviside's method are obtained. A computer 2-D MC simulation model of of competitive adsorption kinetics of different-sized nanoporous spherical and spherorectangular particles with different parameter ratios are developed. On this basis, matrix high-performance algorithms and computational procedures were built to implement parallelization of calculations for the studied models of nanoporous and nanoscale systems using multi-core computer architectures. The models of multi-parameter identification of complete and incomplete adsorption models of complex systems of multi-component competitive diffusion of hydrocarbons in modern nanoporous materials of the ZSM-5 zeolite, as multi-component systems of controlling emissions into the atmosphere are obtained. High-speed identification algorithms of kinetic parameters of multicomponent competitive adsorption of hydrocarbons using supercomputers and cloud computing were built. Developed architecture and software implementation of algorithms for identification of active parameters of complex systems and interface interactions in functional nanoporous and nanosized materials under the conditions of their application in complex systems of safe and renewable energy, electronics, control of cleaning of industrial gas emissions and other industries.

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 нові маловитратні методи ідентифікації коефіцієнтів дифузі у внутрішньо- та міжчастинковому просторах наносистем на основі аналітичних розв'язків прямих і спряжених задач, отримані явні вирази компонентів градієнтів функціоналів-нев'язки для реалізації процедур ідентифікації параметрів. Побудовані адаптивні матриці відклику когнітивної системи та алгоритми обчислення значень векторів вагових коефіцієнтів feedback -впливів когнітивних сигналів, що визначає параметри її станів. З використанням розробленої нової методологіїї (моделі, методи) квазістаціонарних станів та активної динамічної провідності відкритих наносистем розроблено систему на основі штучного інтелекту (наукоємні 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 сканування. Зокрема, розроблена методологія моделювання описує екситон-акустичну фононну взаємодію в плоских напівпровідникових наносистемах при ненульових температурах на основі моделі ефективної маси до електрона та дірки з урахуванням внутрішніх електричних полів поляризації. Методом температурних функцій Гріна отримані аналітичні розв'язки рівняння Дайсона, що описує екситон-фононної взаємодії. На основі розглянутих методологій моделювання розроблена архітектура та реалізовані алгоритми ідентифікації активних параметрів складних систем та інтерфейсних взаємодій в функціональних мікропористих матеріалах для комплексних систем безпечної енергетики, очистки газових викидів та наноструктур, утилізації відходів та переробної галузі, діагностики і прикладної електроніки.

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: 01.202312.2023

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: Ринки розвинутих країн

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

Lebovka N., Petyk M., Tatochenko M. and Vygornitskii N. Two-stage random sequential adsorption of discorectangles and disks on a two-dimensional surface. Physical Review E. Vol.108(2), 024109 (2023) https://doi.org/10.1103/PhysRevE.108.024109 (Quartile 1)

Petryk M., Boyko I., Fessard J.,Lebovka N. Modelling of non-isothermal adsorption of gases in nanoporous adsorbent based on Langmuir equilibrium. Adsorption. Springer (Publised : 8 Juine 2023), 29(3-4), 141–150. https://doi.org/10.1007/s10450-023-00389-9 (Quartile 2)

Boyko, I. Exciton-phonon interaction in planar nitride nanostructures: The case of acoustic phonons. Physical Review B, 2023, 108(7), 075403. DOI 10.1103/PhysRevB.108.075403 (Quartile 1)

Boyko I., Petryk M., Lebovka N. Application of the Lewis-Riesenfeld quantum mechanical invariant method for description of electron tunneling transport in nitride multilayer quantum well nanostructures. Physics Letters A. Vol. 489, 129152 (28 November 2023) https://doi.org/10.1016/j.physleta.2023.129152 (Quartile 2)

Petrone, L., Lebovka, N., Cieśla, M. Random sequential adsorption of aligned rectangles with two discrete orientations: finite-size scaling effects. Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment, 2023, 2023(10), 103201 DOI 10.1088/1742-5468/acfc41 (Quartile 2)

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. (Q1, Impact factor – 3.7)

Gherabli A., Grimi, N., Lemaire J., Vorobiev E., Lebovka N. Extraction of Valuable Biomolecules from the Microalga Haematococcus pluvialis Assisted by Electrotechnologies. Molecules, 2023, 28(5), 2089 https://doi.org/10.3390/molecules28052089 (Quartile 2)

Petryk, M.R., Boyko, I.V., Khimich, O.M., Sydoruk, V.A. High-Performance Methods of Modeling the Nano-Adsorption and Diffusion with Feedback in Heterogeneous Cylindrical Multicomponent Nanoporous Media. Cybernetics and Systems Analysis, 2023, 59(6), 1008–1022. DOI: 10.1007/s10559-023-00636-5 (Quartile 3, Impact factor – 0.72)

Khimich, O.M., Popov, A.V. Solving Ill-Posed Problems of the Theory of Elasticity Using High-Performance Computing Systems. Cybernetics and Systems Analysis, 2023, 59(5), 743–752. https://doi.org/10.1007/s10559-023-00610-1

Khimich, O.M., Popov, O.V., Chistyakov, O.V., Kokhanovskyi, V.O. Adaptive Algorithms for Solving Eigenvalue Problems in the Variable Computer Environment of Supercomputers. Cybernetics and Systems Analysis. 2023, 59(3), 480–492 https://doi.org/10.1007/s10559-023-00583-1

Bachynskyi, M., Petryk, M., Brevus, V., Mudryk, I., Glova, B. 3D-hybrid mathematical model for analysis of abnormal neurological movements for the purposes of diagnosis and treatment of limb tremor. 3rd International Workshop on Information Technologies: Theoretical and Applied Problems, ITTAP 2023. Ternopil. 22-23 November 2023 (Code 196745). CEUR Workshop

Proceedings, 2023, 3628, pp. 183–196. https://www.scopus.com/record/display.uri?eid=2-s2.0-85184385310&origin=resultslist

Petryk, M., Brevus, V., Mykhalyk, D., Kyshkevych, O. Advancing Computational Architectures for Analyzing and Simulation of Systems of nanoporous particles filtration Software. 3rd International Workshop on Information Technologies: Theoretical and Applied Problems, ITTAP 2023. Ternopil. 22-23 November 2023 (Code 196745). CEUR Workshop Proceedings, 2023, 3628, pp. 338–343. https://www.scopus.com/record/display.uri?eid=2-s2.0-85184382166&origin=resultslist

Petryk, M., Mykhalyk, D., Fraisard, J., Petryk, O. Information System for Adsorption Parameters Identification in NanoPorous Media. 1st International Workshop on Computer Information Technologies in Industry 4.0, CITI 2023.Ternopil 14-16 June 2023. (code 192052). CEUR Workshop Proceedings, 2023, 3468, pp. 181–190. https://www.scopus.com/record/display.uri?eid=2-s2.0-85171986618&origin=resultslist

Petryk, M., Pastukh, O., Bachynskiy, M., Mudryk, I., Stefanyshyn, V. Processing of Cerebral Cortex Neurosignals from EEG Sensors and Recognizing Specific Types of Mechanical Movements Elements of Pacient Limbs under the Cognitive Feedback Influenses. 1st International Workshop on Computer Information Technologies in Industry 4.0, CITI 2023.Ternopil 14-16 June 2023. (code 192052). CEUR Workshop Proceedings, 2023, 3468, pp. 61–70 https://www.scopus.com/record/display.uri?eid=2-s2.0-85171969836&

Manilo, M., Borodinova, T., Klepko, V., Cherepov, S., Lebovka, N. Hybrid Magnetic Particles Based on Laponite RD®: Structure, Stability, and Electrosurface Properties. Springer Proceedings in Physics, 2023, 279, pp. 505–517 https://doi.org/10.1007/978

Boyko, I., Balaban, S., Kovbashyn, V. Mathematical model of diffusion in a layered zeolite medium with spherical symmetry. CEUR Workshop Proceedings, 2023, 3628, 358–364 Microsoft Word - CEUR-ITTAP-2023_Boyko.docx (ceur-ws.org)

Boyko, I., Nestor, J. Mathematical model of coherent the electron transfer for nanostructures with an applied magnetic field of constant strength. CEUR Workshop Proceedings, 2023, 3628, 300–305 Microsoft Word - CEUR-ITTAP-2023_Boyko_Nestor.docx (ceur-ws.org)

Boyko, I. Mathematical Model of Tunneling Transport in Nanosystems with the Influence of Optical Phonons. Proceedings - International Conference on Advanced Computer Information Technologies, ACIT, 2023, 182–186 DOI: 10.1109/ACIT58437.2023.10275429

Lebovka, N., Vorobiev, E. History of high-voltage electrical discharges (underwater spark discharges) Processing of Food Products and Wastes with High Voltage Electrical Discharges. Book Chapter, 2023, pp. 3–36

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)

Vorobiev, E., Boussetta, N., Lebovka, N. Processing of Food Products and Wastes with High Voltage Electrical Discharges. Processing of Food Products and Wastes with High Voltage Electrical Discharges, 2023, pp. 1–351

Automated Parallelization of Software for Identifying Parameters of Intraparticle Diffusion and Adsorption in Heterogeneous Nanoporous Media Petryk, M., Doroshenko, A., Mykhalyk, D., Ivanenko, P., Yatsenko, O. Lecture Notes in Networks and Systems, Springer. 2023, 667 LNNS, pp. 33–47

M.R. Petryk, D.M. Mykhalyk, I.M. Brevus, I.V. Goyanyuk. High-performance information technologies to study filtration processes in media with variable-sized nanoporous particles. Прикладні питання математичного моделювання. Т. 6, № 2, 2023. С.122-131. (категорія В) https://orcid.org/0000-0001-6612-7213

Петрик М.Р., Бойко І.В., Хіміч О.М., Сидорук В.А. Високопродуктивні методи моделювання наноадсорбції та дифузії зі зворотними зв'язками в неоднорідних циліндричних багато-компонентних нанопористих середовищах. Кібернетика та системний аналіз Т.59(№6), 2023, 163–177 http://www.kibernetika.org/volumes/2023/numbers/06/articles/16/ArticleDetailsUA.html

Petryk M.R., Boyko I.V., Petryk O.Ju., Fraissard J. Mathematical modeling of competitive adsorption and desorption of gases in nanoporous media using langmuir's equilibriums. Bukovinian Math. Journal. 2023, 11, 2, 59–70. (категорія В) https://doi.org/10.31861/bmj2023.02.06

Хіміч О.М., Попов О.В. Розв'язування некоректних задач теорії пружності на високопродуктивних обчислювальних

системах. Кібернетика та системний аналіз. 2023,Т.59 (5), 66-77. http://www.kibernetika.org/volumes/2023/numbers/05/articles/07/ArticleDetailsUA.html

Petryk M., Boyko I., Petryk O. Mathematical modeling and parameters identification of nonlinear competitive adsorption in nanoporous particles media. Мат. Міжн. Конференції «Математика та інформаційні технології». Чернівці: ЧНУ, 20-30 вересня 2023.с.108-110. MIT55 (chnu.edu.ua)

С.М. Балабан, І.Я. Стадник, В.Б. Каспрук, А.В. Деркач.Газова тунельна піч. Патент на корисну модель № 152930. УкрНОІВІ (2023.05) від 3.05.2023р.

8. Звітна документація

Кількість сторінок в звіті: 15

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

Кишкевич Олег Олегович

Ковбашин Василь Іванович (к. т. н., доц.)

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

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

Плескун Михайло Іванович

Попов Олександр Володимирович (к.ф.-м.н., доц., с.н.с.)

Романовська Лілія Михайлівна

Сидорук Володимир Антонович (к. т. н., старший науковий співробітник)

Цуприк Галина Богданівна (к. т. н., доц.)

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.