



## ПРОГРАМНО-ТЕХНІЧНІ КОМПЛЕКСИ

М.Р. ПЕТРИК, І.В. БОЙКО, О.М. ХІМІЧ, М.М. ПЕТРИК

УДК 519.6

### ВИСОКОПРОДУКТИВНІ СУПЕРКОМП'ЮТЕРНІ ТЕХНОЛОГІЇ МОДЕЛЮВАННЯ НАНОПОРИСТИХ КІБЕРСИСТЕМ ЗІ ЗВОТНИМИ ЗВ'ЯЗКАМИ ДЛЯ АДСОРБЦІЙНОГО ОЧИЩЕННЯ ГАЗІВ

**Анотація.** Розроблено високопродуктивні технології моделювання неізотермічної адсорбції газів у нанопористих кіберсистемах зі зворотними зв'язками на основі операційного методу Гевісайда та підходу Ландау до лінеаризації нелінійної адсорбційної рівноваги Ленгмюра шляхом розвинення у збіжний ряд у точці температури фазового переходу з подальшим ефективним розпаралелюванням моделі за малим параметром. Наведено результати числових експериментів на основі високошвидкісних паралельних обчислень з використанням багатоядерних комп'ютерів.

**Ключові слова:** нанопористі кіберсистеми зі зворотними зв'язками, адсорбція та десорбція газів, функція адсорбційної рівноваги Ленгмюра, операційний метод Гевісайда.

#### ВСТУП

Упровадження сучасних кіберфізичних нанопористих систем (КФНС) поглинання шкідливих викидів вуглецевих сполук об'єктів енергетики і транспорту — ключ до розв'язання світової проблеми глобального потепління, покращення стану здоров'я людини, довкілля та реалізації стратегії безпечної енергетики [1]. Якість математичних моделей процесів адсорбції вуглецевих сполук у КФНС з урахуванням нанофізичних факторів зворотного зв'язку, що лімітують адсорбційну кінетику в нанопорах та високопродуктивних методів побудови розв'язків, отриманих на базі цих моделей з орієнтацією на архітектуру сучасних обчислювальних систем, визначає ефективність технологічних рішень для нейтралізації газових викидів, об'єм яких стрімко зростає і зумовлює глобальне потепління [2].

Нині проводяться численні експериментальні та теоретичні дослідження цих процесів, зокрема, дослідження щодо удосконалення їхніх математичних моделей з урахуванням впливу різних обмежувальних факторів внутрішньої кінетики адсорбції у нанопористих середовищах [2–8]. Однак ці моделі не відображають повною мірою цілісність уявлень про внутрішню кінетику нанопроцесів, не забезпечують достатнього врахування цілої низки визначальних факторів, зокрема, факторів нелінійної взаємодії у середовищах нанопотоків уздовж радіальних мікроі нанопор, наявних у частинках, при цьому умови адсорбційної рівноваги здебільшого визначаються спрощеними квазістаціонарними та ізотермічними залежностями без урахування енергетичного потенціалу Джона–Ленарда як основної складової енергії активації тощо. На сьогодні немає строгих математичних моделей, що повною мірою враховують обмежувальні фізичні фактори зворотного зв'язку у процесі наноадсорбції, а також високопродуктивних методів їхньої реалізації.

© М.Р. Петрик, І.В. Бойко, О.М. Хімич, М.М. Петрик, 2020

У продовження досліджень [9–17] у цій статті обґрунтовано та розроблено високопродуктивні методи математичного моделювання адсорбції газів у КФНС на основі узагальненої нелінійної ізотерми Ленгмюра, яка найповніше описує фактори зворотної взаємодії та механізми адсорбційної рівноваги на поверхні нанопор. Для моделювання використано високопродуктивні методи операційного числення Гевісайда та підхід Ландау до лінеаризації та розкладу в ряд неізотермічної адсорбційної рівноваги в точці температури фазового переходу. Це надало змогу обґрунтувати вибір малого параметра та отримати високошвидкісні аналітичні розв'язки, що підвищують якість розпаралелювання обчислювального процесу і моделювання загалом для багатоядерних комп'ютерів.

**НЕЛІНІЙНА МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ НЕІЗОТЕРМІЧНИХ ПРОЦЕСІВ АДСОРБЦІЇ ТА ДЕСОРБЦІЇ НА ОСНОВІ УЗАГАЛЬНЕНОГО РІВНЯННЯ АДСОРБЦІЙНОЇ РІВНОВАГИ ЛЕНГМЮРА**

Вхідний потік газової суміші дифундує в макропорах (міжчастинковому просторі) нанопористої системи і в нанопорах частинок. В основу розроблення моделі покладено гіпотезу про наявність у системі адсорбційних взаємодій зі зворотним зв'язком між молекулами адсорбату та активними центрами адсорбції на поверхні фазового розділу в нанопорах частинок. Ці взаємодії зворотного зв'язку визначають на основі нелінійного рівняння рівноваги між адсорбованою масою та рівноважною їй концентрацією адсорбтиву в газовій фазі, отриманого Нобелівським лауреатом І. Ленгмюром. У цій статті реалізовано модель в узагальненій постановці, в якій взято до уваги залежність адсорбційної рівноваги Ленгмюра від температури газового потоку та енергії активації наносередовища з урахуванням фізичних передумов, описаних у [6, 7].

1. Адсорбція локалізована і зумовлена силами дисперсії, взаємодія яких встановлюється законом Джона–Ленарда та електростатичними силами тяжіння та відштовхування Ван-Дер-Ваальса [6].

2. Адсорбція відбувається в активних центрах на внутрішній поверхні нанопор частинок адсорбенту з формуванням молекулярного шару адсорбованих молекул адсорбату.

3. Адсорбовані молекули утримуються активними центрами впродовж певного проміжку часу залежно від температури.

В остаточному вигляді кінетику неізотермічної адсорбції для нейтралізації викидів газу в КФНС з урахуванням нелінійної функції адсорбційної рівноваги та даних фізичних обґрунтувань можна описати такою системою нелінійних рівнянь у частинних похідних [14–16]:

$$\frac{\partial c(t, z)}{\partial t} + \frac{\partial a(t, z)}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial z} = D_{\text{inter}} \frac{\partial^2 c}{\partial z^2}, \quad (1)$$

$$-H \frac{\partial T(t, z)}{\partial t} - u h_g \frac{\partial T}{\partial z} - Q_{\text{ads}} \frac{\partial a}{\partial t} - \frac{2\alpha_h}{R_{\text{column}}} T + \Lambda \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} = 0, \quad (2)$$

$$\frac{\partial a}{\partial t} = \beta \left( c - \frac{1}{\beta \exp\left(-\frac{\Delta H}{RT}\right)} \frac{a}{a_{\text{full}} - a} \right). \quad (3)$$

Початкові умови:

а) адсорбція:

$$c(t, z)|_{t=0} = 0,$$

$$T(t, z)|_{t=0} = T_0^0,$$

б) десорбція:

$$c(t, z)|_{t=0} = c_0^0, \quad (4)$$

$$T(t, z)|_{t=0} = T_0^0. \quad (5)$$

Крайові умови:

а) адсорбція:

$$c(t, z)|_{z=0} = c_{in},$$

$$\frac{\partial}{\partial z} c(t, z)|_{z=\infty} = 0,$$

$$T(t, z)|_{z=0} = T_{in}, \quad \frac{\partial}{\partial z} T(t, z)|_{z=\infty} = 0, \quad T(t, z)|_{z=0} = T_{in}, \quad \frac{\partial}{\partial z} T(t, z)|_{z=\infty} = 0, \quad (8)$$

б) десорбція:

$$c(t, z)|_{z=0} = c_{in}(t), \quad (6)$$

$$\frac{\partial}{\partial z} c(t, z)|_{z=\infty} = 0, \quad (7)$$

Тут  $c$ ,  $T$ ,  $a$  — поточні значення концентрації адсорбтиву і температури газової фази;  $a$  — концентрація адсорбованої маси в нанопорах адсорбенту;  $\Delta H$  — енергія активації, кДж/моль;  $R$  — газова константа, кДж/моль/м<sup>3</sup>;  $b_0$  — емпіричний коефіцієнт, що дорівнює відношенню констант швидкості десорбції та адсорбції;  $a_{full}$  — концентрація адсорбату в нанопорах із повним заповненням адсорбційних центрів, моль/кг;  $l$ ,  $R_{column}$  — висота і радіус адсорбційної колони, м;  $Q_{ads}$  — теплота адсорбції, кДж/кг;  $\Delta H = M_{ads}Q_{ads}$ ,  $M_{ads}$  — молекулярна маса адсорбенту;  $u$  — швидкість газового потоку, м/с;  $\Lambda$  — коефіцієнт термальної дифузії адсорбційного шару вздовж колони, кДж/(м<sup>2</sup>·К·с);  $H$  — сумарна теплоємність газу та адсорбенту, кДж/(кг·К);  $h_g$  — теплоємність газу;  $2\alpha_h / R_{column}$  — коефіцієнт тепловтрат крізь стінку колони;  $\alpha_h$  — коефіцієнт теплоперенесення;  $D_{inter}$  — коефіцієнт дифузії у міжчастинковому просторі, м<sup>2</sup>/с;  $\beta$  — загальний коефіцієнт масоперенесення, с<sup>-1</sup>.

#### ПРОЦЕДУРА РОЗПАРАЛЕЛЮВАННЯ НЕЛІНІЙНОЇ МОДЕЛІ ДО СИСТЕМИ ЛІНЕАРИЗОВАНИХ КРАЙОВИХ ЗАДАЧ

Виконаємо деякі розвинення елементів нелінійної компоненти  $\frac{1}{\exp\left(-\frac{\Delta H}{RT}\right)} \frac{a}{a_{full} - a}$

диференціального рівняння (3). У результаті розвинення згідно з підходом Ландау виразу  $\exp\left(\frac{\Delta H}{RT}\right)$  у ряд Тейлора в околі точки температури фазового переходу  $T_{eq}$ , що відповідає положенню рівноваги «адсорбат–нанопори», отримуємо [18]

$$\begin{aligned} \exp\left(\frac{\Delta H}{RT}\right) &= \exp\left(\frac{\Delta H}{RT_{eq}}\right) - \frac{\Delta H}{R} \exp\left(\frac{\Delta H}{RT_{eq}}\right) \frac{1}{T_{eq}^2} (T - T_{eq}) + \\ &+ \frac{1}{2!} \left(\frac{\Delta H}{R}\right)^2 \exp\left(\frac{\Delta H}{RT_{eq}}\right) \left(\frac{1}{T_{eq}^4} + \frac{R}{2\Delta H} \frac{1}{T_{eq}^3}\right) (T - T_{eq})^2 + \dots \end{aligned} \quad (9)$$

З урахуванням  $\frac{a}{a_{full}} < 1$  вираз  $\frac{a/a_{full}}{1 - a/a_{full}}$  розвиваємо в ряд Маклорена [17]

$$\frac{a/a_{full}}{1 - \frac{a}{a_{full}}} = \frac{1}{1 - \frac{a}{a_{full}}} - 1 = \frac{a}{a_{full}} + \left(\frac{a}{a_{full}}\right)^2 + \dots + \left(\frac{a}{a_{full}}\right)^n + \dots \quad (10)$$

Нехтуючи членами не менше другого порядку в (9), (10), отримаємо вираз  $\frac{1}{\exp\left(-\frac{\Delta H}{RT}\right)} \frac{a}{a_{full} - a}$  у такому вигляді [13]:

$$c_{eq}(a) \equiv \frac{1}{b_0 \exp\left(-\frac{\Delta H}{RT_{eq}}\right)} \frac{a/a_{full}}{1 - a/a_{full}} \approx \gamma a(t, z) + \varepsilon a(t, z)(a(t, z) - \theta T(t, z)), \quad (11)$$

де  $\gamma = \frac{1 + \Delta H / R}{b_0 a_{\text{full}}} \exp\left(\frac{\Delta H}{RT_{\text{eq}}}\right)$  — константа адсорбції, що описує лінійну компоненту функції адсорбційної рівноваги  $c_{\text{eq}}(a)$  (відповідно до закону Генрі);  $\varepsilon = \frac{1 + \Delta H / R}{b_0 (a_{\text{full}})^2} \exp\left(\frac{\Delta H}{RT_{\text{eq}}}\right)$  — малий параметр, що враховує нелінійну компоненту неізотерми адсорбції;  $\theta = \frac{a_{\text{full}}}{1 + \Delta H / R} \frac{\Delta H}{R} \frac{1}{T_{\text{eq}}^2}$ ;  $Q_{\text{ads}} = \frac{\Delta H}{M_{\text{ads}}}$  — теплота адсорбції.

Підставимо розкладений вираз (11) замість залежності  $c_{\text{eq}}(a)$  у рівнянні (3):

$$\frac{\partial a}{\partial t} = \beta(c - \gamma a(t, z) - \varepsilon a(t, z)(a(t, z) - \theta T(t, z))). \quad (12)$$

Нелінійна крайова задача (1)–(7) з урахуванням кінетичного рівняння (12) з перетвореною функцією неізотермічної адсорбційної рівноваги Ленгмюра містить малий параметр  $\varepsilon$ . Знайдемо її роз’язок за допомогою асимптотичних розкладів за параметром  $\varepsilon$  у вигляді степеневих рядів [19]

$$\begin{aligned} c(t, z) &= c_0(t, z) + \varepsilon c_1(t, z) + \varepsilon^2 c_2(t, z) + \dots, \\ T(t, z) &= T_0(t, z) + \varepsilon T_1(t, z) + \varepsilon^2 T_2(t, z) + \dots, \\ a(t, z) &= a_0(t, z) + \varepsilon a_1(t, z) + \varepsilon^2 a_2(t, z) + \dots \end{aligned} \quad (13)$$

У результаті підстановки асимптотичних сум (13) у рівняння (1)–(7) нелінійна крайова задача (1)–(7) розпаралелюється на два типи квазілінеаризованих крайових задач [14, 16].

**Задача  $A_0$**  (нульове наближення з початковими та крайовими умовами початкової нелінійної задачі): знайти розв’язок в області  $D = \{(t, z) : t > 0, z \in (0, \infty)\}$  такої системи рівнянь у частинних похідних:

$$\frac{\partial c_0(t, z)}{\partial t} + \frac{\partial a_0(t, z)}{\partial t} + u \frac{\partial c_0}{\partial x} = D_{\text{inter}} \frac{\partial^2 c_0}{\partial z^2}, \quad (14)$$

$$-H \frac{\partial T_0(t, z)}{\partial t} - u h_g \frac{\partial T_0}{\partial z} - Q_{\text{ads}} \frac{\partial a_0}{\partial t} - \frac{2\alpha_h}{R_{\text{column}}} T_0 + \Lambda \frac{\partial^2 T_0}{\partial z^2} = 0, \quad (15)$$

$$\frac{\partial a_0}{\partial t} = \beta(c_0 - \gamma a_0). \quad (16)$$

Початкові умови:

а) адсорбція:

$$c(t, z)|_{t=0} = 0,$$

$$T_0(t, z)|_{t=0} = T_0^0,$$

б) десорбція:

$$c(t, z)|_{t=0} = c_0^0, \quad (17)$$

$$T_0(t, z)|_{t=0} = T_0^0. \quad (18)$$

Крайові умови:

а) адсорбція:

$$c_0(t, z)|_{z=0} = c_{in},$$

$$\frac{\partial}{\partial z} c_0(t, z)|_{z=\infty} = 0,$$

$$T_0(t, z)|_{z=0} = T_{in}, \quad \frac{\partial}{\partial z} T_0(t, z)|_{z=\infty} = 0, \quad T_0(t, z)|_{z=0} = T_{in}, \quad \frac{\partial}{\partial z} T_0(t, z)|_{z=\infty} = 0, \quad (21)$$

б) десорбція:

$$c_0(t, z)|_{z=0} = c_{in}(t), \quad (19)$$

$$\frac{\partial}{\partial z} c_0(t, z)|_{z=\infty} = 0, \quad (20)$$

**Задача  $A_n$ ,  $n = \overline{1, \infty}$**  ( $n$ -го наближення з нульовими початковими та крайовими умовами): побудувати в області  $D$  обмежений розв'язок системи рівнянь

$$\frac{\partial c_n(t, z)}{\partial t} + \frac{\partial a_n(t, z)}{\partial t} + u \frac{\partial c_n}{\partial x} = D_{\text{inter}} \frac{\partial^2 c_n}{\partial z^2}, \quad (22)$$

$$-H \frac{\partial T_n(t, z)}{\partial t} - u h_g \frac{\partial T_n}{\partial z} - Q_{\text{ads}} \frac{\partial a_n}{\partial t} - \frac{2\alpha_h}{R_{\text{column}}} T_n + \Lambda \frac{\partial^2 T_n}{\partial z^2} = 0, \quad (23)$$

$$\frac{\partial a_n}{\partial t} = \beta \left( c_n - \gamma a_n - \sum_{i=0}^{n-1} \left( a_i(t, z) \left( a_{n-1-i}(t, z) - \frac{R}{\Delta H} T_{n-1-i}(t, z) \right) \right) \right). \quad (24)$$

Задача  $A_0$  є лінійною щодо нульового наближення  $c_0$ ,  $a_0$ ,  $T_0$ . Задача  $A_n$ ,  $n = \overline{1, \infty}$ , є лінійною щодо  $n$ -го наближення та нелінійною щодо всіх попередніх  $i$  наближень,  $i = \overline{0, n-1}$ .

#### МЕТОДИКА ПОБУДОВИ АНАЛІТИЧНИХ РОЗВ'ЯЗКІВ СИСТЕМИ НЕОДНОРІДНИХ КРАЙОВИХ ЗАДАЧ АДСОРБЦІЇ/ДЕСОРБЦІЇ

Побудуємо аналітичні розв'язки задач  $A_0$  та  $A_n$ ,  $n = \overline{1, \infty}$ , з використанням операційного методу Гевісайда [14, 20]. У результаті застосування за часовою змінною  $t$  до крайових задач (14)–(21) та (22)–(24) інтегрального оператора прямого перетворення Лапласа одержимо відповідну їм систему крайових задач у зображеннях за Лапласом [20]:

**Задача  $A_0^*$** : побудувати в області  $D^* = \{z \in (0, \infty)\}$  обмежений розв'язок системи рівнянь

$$\frac{d^2 c_0^*(p, z)}{dz^2} - u_1 \frac{dc_0^*}{dz} - q_1^2(p) c_0^* = -\mathcal{F}_{c_0}^*(p), \quad (25)$$

$$\frac{d^2 T_0^*}{dz^2} - u_2 \frac{dT_0^*}{dz} - q_2^2(p) T_0^* = -\mathcal{F}_{T_0}^*(p), \quad (26)$$

$$a_0^*(p, z) = \beta \frac{1}{p + \beta\gamma} c_0^*(p, z). \quad (27)$$

Крайові умови:

а) адсорбція:

$$c_0^*(p, z)|_{z=0} = c_{in}^*(p),$$

$$\frac{\partial}{\partial z} c_0^*(p, z)|_{z=\infty} = 0,$$

$$T_0^*(p, z)|_{z=0} = \frac{1}{p} T_{in}^*,$$

$$\frac{\partial}{\partial z} T_0^*(p, z)|_{z=\infty} = 0,$$

б) десорбція:

$$\frac{d}{dz} c_0^*(p, z)|_{z=\infty} = 0, \quad (28)$$

$$c_0^*(p, z)|_{z=0} = \frac{1}{p} c_{in}^*, \quad (29)$$

$$\frac{\partial}{\partial z} T_0^*(p, z)|_{z=\infty} = 0,$$

$$T_0^*(p, z)|_{z=0} = T_{in}^*(p). \quad (30)$$

**Задача  $A_n^*$ ,  $n = \overline{1, \infty}$** : побудувати в області  $D^* = \{z \in (0, \infty)\}$  обмежений розв'язок системи рівнянь

$$\frac{d^2 c_n^*(p, z)}{dz^2} - u_1 \frac{dc_n^*}{dz} - q_1^2(p) c_n^* = -\mathcal{F}_{c_n}^*(p, z), \quad (31)$$

$$\frac{d^2}{dz^2} T_n^* - u_2 \frac{d}{dz} T_n^* - q_2^2(p) T_n^* = -\mathcal{F}_{T_n}^*(p, z), \quad (32)$$

$$a_n^*(p, z) = \beta \frac{1}{p + \beta\gamma} \left( c_n^* - \left( \sum_{i=1}^{n-1} a_i a_{n-1-i} \right)^* (p, z) \right), \quad (33)$$

де

$$u_1 = \frac{u}{D_{\text{inter}}}, \quad q_1^2(p) = \frac{p(p + \beta(\gamma + 1))}{D_{\text{inter}}(p + \beta\gamma)}, \quad q_2^2(p) = \frac{1}{\Lambda} \left( Hp + \frac{2\alpha_h}{R_{\text{column}}} \right),$$

$$\mathcal{F}_{c_0}^* = \frac{c_0^0}{D_{\text{inter}}}, \quad \mathcal{F}_{T_0}^*(p, z) = \frac{1}{\Lambda} \left( HT_0 - \beta Q_{\text{ads}} \left( 1 - \frac{\beta\gamma}{p + \beta\gamma} \right) c_0^*(p, z) \right),$$

$$\mathcal{F}_{c_n}^*(p, z) = \frac{\beta}{D_{\text{inter}}} \left( 1 - \frac{\beta\gamma}{p + \beta\gamma} \right) \left( \sum_{i=0}^{n-1} a_i \left( a_{n-1-i} - \frac{R}{\Delta H} T_{n-1-i} \right) \right)^* (p, z),$$

$$\mathcal{F}_{T_n}^*(p, z) = -\frac{\beta Q_{\text{ads}}}{\Lambda} \left( 1 - \frac{\beta\gamma}{p + \beta\gamma} \right) \left( c_n^*(p, z) - \left( \sum_{i=0}^n a_i \left( a_{n-1-i} - \frac{R}{\Delta H} T_{n-1-i} \right) \right)^* (p, z) \right),$$

$$c^*(p, z) = \int_0^{\infty} c(t, z) e^{-pt} dt \equiv L[c], \quad a^*(p, Z) = \int_0^{\infty} a(t, z) e^{-pt} dt \equiv L[a],$$

$$T^*(p, z) = \int_0^{\infty} T(t, z) e^{-pt} dt \equiv L[T].$$

**Розв'язок неоднорідної крайової задачі  $A_0$ .** Побудуємо розв'язок неоднорідної крайової задачі  $A_0^*$  (з використанням методу Коші) [13, 16]:

$$\begin{aligned} c_0^*(p, z) &= (pc_{in}^*(p)) \exp\left\{ \frac{u_1}{2} z \right\} \frac{e^{-\omega_1(p)z}}{p} + c_0^0 \frac{\gamma}{\gamma + 1} \times \\ &\times \left( \frac{1}{p} + \frac{1}{p + \beta(\gamma + 1)} - \frac{\gamma + 1}{\gamma} \exp\left\{ \frac{u_1}{2} z \right\} \frac{e^{-\omega_1(p)z}}{p} \right) + \\ &+ c_0^0 \frac{\beta}{(p + \beta(\gamma + 1))} \frac{e^{-\omega_1(p)z}}{p} \exp\left\{ \frac{u_1}{2} z \right\}, \end{aligned} \quad (34)$$

$$T_0^*(p, z) = pT_{in}^*(p) \frac{\exp\left\{ \left( \frac{u_2}{2} - \omega_2(p) \right) z \right\}}{p} +$$

$$+ \int_0^{\infty} \exp\left\{ \frac{u_2}{2} (z - \xi) \right\} \left( \frac{e^{-\omega_2(p)|z - \xi|}}{2\omega_2(p)} - \frac{e^{-\omega_2(p)(z + \xi)}}{2\omega_2(p)} \right) \mathcal{F}_{T_0}^*(p, z, \xi) d\xi, \quad (35)$$

$$\text{де } \omega_1(p) = \left( \frac{u_1^2}{4} + q_1^2(p) \right)^{1/2}, \quad \omega_2(p) = \left( \frac{u_2^2}{4} + q_2^2(p) \right)^{1/2}, \quad \text{Re } \omega_1 > 0, \quad \text{Re } \omega_2 > 0.$$

Застосовуючи інтегральний оператор оберненого перетворення Лапласа  $L^{-1}[\dots^*(p, z)] = \frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma_0 - i\infty}^{\sigma_0 + i\infty} \dots^*(p, z) e^{pt} dt$  до формул (34), (35), отримуємо на основі [14, 20] їхні оригінали, що формують аналітичний розв'язок задачі  $A_0$  нульового

наближення: залежність концентрації адсорбтиву в газовій фазі, температури та концентрації адсорбату в нанопорах вздовж координати шару середовища та в часі для циклів адсорбції та десорбції

$$c_0(t, z) = c_{in}(0) \exp\left\{\frac{u}{2D_{inter}} z\right\} \Phi_c^0(t, z) + \exp\left\{\frac{u}{2D_{inter}} z\right\} \int_0^t \frac{d}{d\tau} c_{in}(\tau) \Phi_c^0(t-\tau, z) d\tau +$$

$$+ c_0^0 \frac{\gamma}{\gamma+1} \left(1 + \frac{1}{\gamma} e^{-\beta(\gamma+1)t} - \frac{\gamma+1}{\gamma} \exp\left\{\frac{u}{2D_{inter}} z\right\} \Phi_c^0(t, z)\right) +,$$

$$+ \beta c_0^0 \exp\left\{\frac{u}{2D_{inter}} z\right\} \int_0^t e^{-\beta(\gamma+1)(t-s)} \Phi_c^0(t, z) ds, \quad (36)$$

$$T_0(t, z) = T_{in}(0) \Phi_T^0(t, z) + \int_0^t \Phi_T^0(t-\tau, z) \frac{d}{d\tau} T_{in}(\tau) d\tau +$$

$$+ \frac{1}{\Lambda} \int_0^t \int_0^\infty \left( HT_0^0 \mathcal{H}_T(t-\tau, z, \xi) - \beta Q_{ads} \left( \mathcal{H}_T(t-\tau, z, \xi) - \right.$$

$$\left. - \beta \gamma \int_0^{t-\tau} \mathcal{H}_T(\tau-s, z, \xi) e^{-\beta\gamma(t-\tau-s)} ds \right) c_0(\tau, \xi) d\xi d\tau, \quad (37)$$

$$a_0(t, z) = b \int_0^t e^{-\gamma\beta(t-\tau)} c_0(\tau, z) d\tau. \quad (38)$$

Під час переходу до оригіналів за Лапласом у формулі (37) перетворення першої компоненти здійснюється з використанням інтеграла Дюамеля [20].

**Розв'язок неоднорідної крайової задачі  $A_n$ ,  $n=1, \infty$ .** Розв'язки задач  $A_n^*$ ,  $n=1, \infty$ , є функціями [13]:

$$c_n^*(p, z) = \int_0^\infty \exp\left\{\frac{u_1}{2}(z-\xi)\right\} \left( \frac{e^{-\omega_1(p)|z-\xi|}}{2\omega_1(p)} - \frac{e^{-\omega_1(p)(z+\xi)}}{2\omega_1(p)} \right) \mathcal{F}_{c_n}^*(p, \xi) d\xi, \quad (39)$$

$$T_n^*(p, z) = \int_0^\infty \exp\left\{\frac{u_2}{2}(z-\xi)\right\} \left( \frac{e^{-|z-\xi|\omega_2(p)}}{2\omega_2(p)} - \frac{e^{-(z+\xi)\omega_2(p)}}{2\omega_2(p)} \right) \mathcal{F}_{T_n}^*(p, \xi) d\xi, \quad (40)$$

$$a_n^*(p, z) = \frac{b}{p+\gamma\beta} \left[ c_n^*(p, z) - \left( \sum_{i=0}^{n-1} a_i \left( a_{n-1-i} - \frac{R}{\Delta H} T_{n-1-i} \right) \right)^* (p, z) \right]. \quad (41)$$

У результаті підстановки значень  $\mathcal{F}_{c_n}^*(p, \xi)$  і  $\mathcal{F}_{T_n}^*(p, \xi)$  відповідно в рівняння (31), (32) і застосування інтегрального оператора оберненого перетворення Лапласа до формул (39)–(41), отримаємо на основі [14, 17, 20] їхні оригінали, які формують аналітичний розв'язок задачі  $A_n$ ,  $n=1, \infty$ , що описує часово-просторові розподіли  $n$ -го наближення концентрацій адсорбтиву у газовій фазі, температури та адсорбції (концентрація адсорбату в нанопорах):

$$c_n(t, z) = \frac{b}{D_{inter}} \int_0^\tau \int_0^\infty \left[ \mathcal{H}_c(t-\tau; z, \xi) - \beta \gamma \int_0^{t-\tau} e^{-\beta\gamma(t-s)} \mathcal{H}_c(s; z, \xi) ds \right] \times$$

$$\times \left( \sum_{i=0}^{n-1} a_i \left( a_{n-1-i} - \frac{R}{\Delta H} T_{n-1-i} \right) \right) (t, \xi) d\xi d\tau, \quad (42)$$

$$T_n(t, z) = \frac{\beta Q_{\text{ads}}}{\Lambda} \int_0^t \int_0^\infty \left( \mathcal{H}_T(t-\tau, z, \xi) - \beta \gamma \int_0^{t-\tau} \mathcal{H}_T(\tau-s, z, \xi) e^{-\beta \gamma(t-\tau-s)} ds \times \right. \\ \left. \times \left( \sum_{i=0}^{n-1} a_i \left( a_{n-1-i} - \frac{R}{\Delta H} T_{n-1-i} \right) \right) (\tau, \xi) - c_0(\tau, \xi) \right) d\xi d\tau, \quad (43)$$

$$a_n(t, z) = \beta \int_0^t e^{-\beta \gamma(t-\tau)} \left( c_n(\tau, z) - \sum_{i=0}^{n-1} a_i \left( a_{n-1-i} - \frac{R}{\Delta H} T_{n-1-i} \right) (\tau, z) \right) d\tau. \quad (44)$$

Тут

$$\Phi_c^0(t, z) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty e^{-\varphi_1(\nu)z} \frac{\sin(\nu t - z\varphi_2(\nu)^2)}{\nu} d\nu + \exp\left\{ \frac{u}{2D_{\text{inter}}} z \right\},$$

$$\Phi_c(t, z) = \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty \frac{\varphi_1(\nu) \cos(\nu t - \varphi_2(\nu)z) + \varphi_2(\nu) \sin(\nu t - \varphi_2(\nu)z)}{(\Gamma_1^2(\nu) + \nu^2 \Gamma_2^2(\nu))^{1/2}} d\nu,$$

$$\Phi_T^0(t, z) = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty e^{-\varphi_1(\nu)z} \frac{\sin(\nu t - z\varphi_2(\nu)^2)}{\nu} d\nu + \exp\left\{ \frac{u}{2D_{\text{inter}}} z \right\},$$

$$\Phi_T(t, z) = \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty \frac{\varphi_1(\nu) \cos(\nu t - \varphi_2(\nu)z) + \varphi_2(\nu) \sin(\nu t - \varphi_2(\nu)z)}{(\Gamma_{T_1}^2(\nu) + \nu^2 \Gamma_{T_2}^2(\nu))^{1/2}} d\nu,$$

$$H_T(\tau; z, \xi) = \exp\left\{ \frac{u_2}{2} (z - \xi) \right\} (\Phi_T(\tau, |z - \xi|) - \Phi_T(\tau, z + \xi)),$$

$$H_c(\tau; z, \xi) = \exp\left\{ \frac{u_1}{2} (z - \xi) \right\} (\Phi_c(\tau, |z - \xi|) - \Phi_c(\tau, z + \xi)),$$

$$\varphi_{1,2}(\nu) = \left[ \frac{(\Gamma_1^2(\nu) + \nu \Gamma_2^2(\nu))^{1/2} \pm \Gamma_1^2(\nu)}{2} \right]^{1/2}, \quad \Gamma_1(\nu) = \frac{u^2}{4D_{\text{inter}}^2} + \frac{\nu^2 \beta}{2D_{\text{inter}}^2 (\nu^2 + \beta^2 \gamma^2)},$$

$$\Gamma_2(\nu) = \frac{\nu^3 + \nu^2 \beta (\gamma + 1) \gamma}{D_{\text{inter}} (\nu^2 + \beta^2 \gamma^2)}, \quad \phi_{1,2}(\nu) = \left[ \frac{(\Gamma_{T_1}^2(\nu) + \nu^2 \Gamma_{T_2}^2(\nu))^{1/2} \pm \Gamma_{T_1}^2(\nu)}{2} \right]^{1/2},$$

$$\Gamma_{T_1}(\nu) = \frac{u^2 + 4\Lambda X^2}{4\Lambda^2}, \quad \Gamma_{T_2}(\nu) = \frac{H\nu}{\Lambda}.$$

**Теорема 1** (про розв'язність лінеаризованої системи крайових задач). Якщо задані і шукані функції крайових задач  $A_0, A_n, n = 1, \infty$ , є оригіналами за Лапласом за часовою змінною  $t$  і виконуються умови однозначної розв'язності крайових задач у зображеннях за Лапласом  $A_0^*, A_n^*, n = 1, \infty$ , то розв'язки системи крайових задач  $A_0, A_n, n = 1, \infty$ , існують, є єдиними та визначаються відповідно формулами (36)–(38) і (42)–(44), які є складовими розв'язку початкової нелінійної крайової задачі (1)–(7).



**КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ. АНАЛІЗ РОЗПОДІЛІВ КОНЦЕНТРАЦІЇ АДСОРБТИВУ В ГАЗОВІЙ ФАЗІ ТА НАНОПОРАХ ЧАСТИНОК І ТЕМПЕРАТУР**

Метою комп'ютерного моделювання було вивчення можливостей моделі, запропонованої для її подальшого використання в технологіях очищення викидів вуглецю в атмосферу енергетичними та транспортними об'єктами (пропан, CO<sub>2</sub> та інші продукти згорання). Застосування цієї моделі є одним із ключових способів розв'язання проблеми глобального потепління та створення безпечної енергетичної стратегії [1].

Як адсорбтив вибрано пропан, обсяг якого становить близько 30 % загального обсягу потоку газу, що виходить із двигуна автомобіля [2]. З використанням розробленої математичної теорії та технології, орієнтованої на паралельні багатоядерні комп'ютерні обчислення, здійснено моделювання та обчислення концентраційних залежностей неізотермічних кривих адсорбції та десорбції в нанопористих каталітичних пластах.

Обчислювальні експерименти виконано для експериментального зразка [9, 17].

Геометричні розміри: довжина колони  $l=1.5 \cdot 10^{-2}$  м, радіус колони  $R_{\text{column}}=0.3$  м. Теплові і масообмінні характеристики:  $Q=2800$  кДж/кг (для цеоліту);  $\gamma=700$  (константа адсорбції Генрі);  $\Lambda=0.5$  кДж/(м<sup>2</sup>·К·год),  $h_g=1.2$  кДж/м<sup>3</sup>·К (для пропану при 3 Атм);  $\rho_a=700$  кг/м<sup>3</sup>;  $H=0.96$  кДж/кг·К (масова);  $\alpha_h=20$  кДж/(м<sup>2</sup>·К·год);  $D_{\text{inter}}=5.0 \cdot 10^{-6}$  м<sup>2</sup>/с;  $\beta=0.95$  с<sup>-1</sup>. Початкова температура газового потоку: для адсорбції  $T=20$  °С, для десорбції  $T=300-350$  °С; швидкість потоку  $u=0.4$  м/с (адсорбція, десорбція). Для аналізу впливу зміни швидкості потоку розглянуто діапазон 0.2–2 м/с. Кількість членів у рядах апроксимаційних виразів (13)  $N_1$  дорівнює від 15 до 20.

З використанням представленої у статті методології та залежностей (36), (40) виконано розрахунки концентрацій адсорбату в газовій фазі. На рис. 1, а, б, в, г

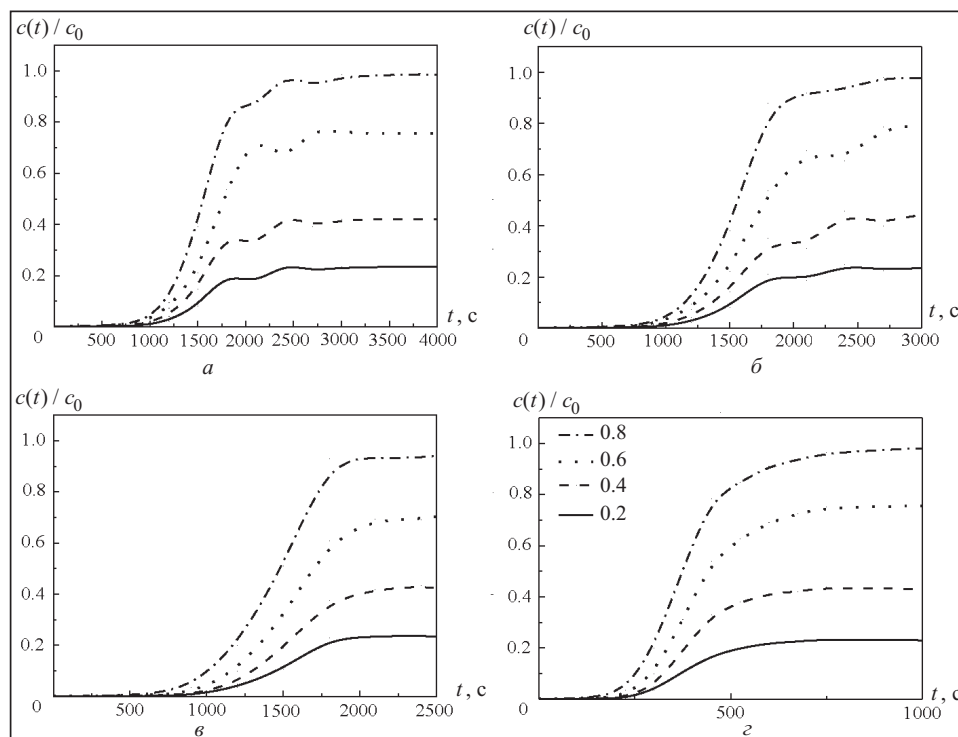


Рис. 1. Залежності концентрації адсорбату в газовій фазі  $c = c(t, z)$ , розрахованої для фіксованих значень  $z$  ( $z/z_0 = 0.2; 0.4; 0.6; 0.8$ ) за температури 30 °С (а), 60 °С (б), 100 °С (в), 350 °С (г)

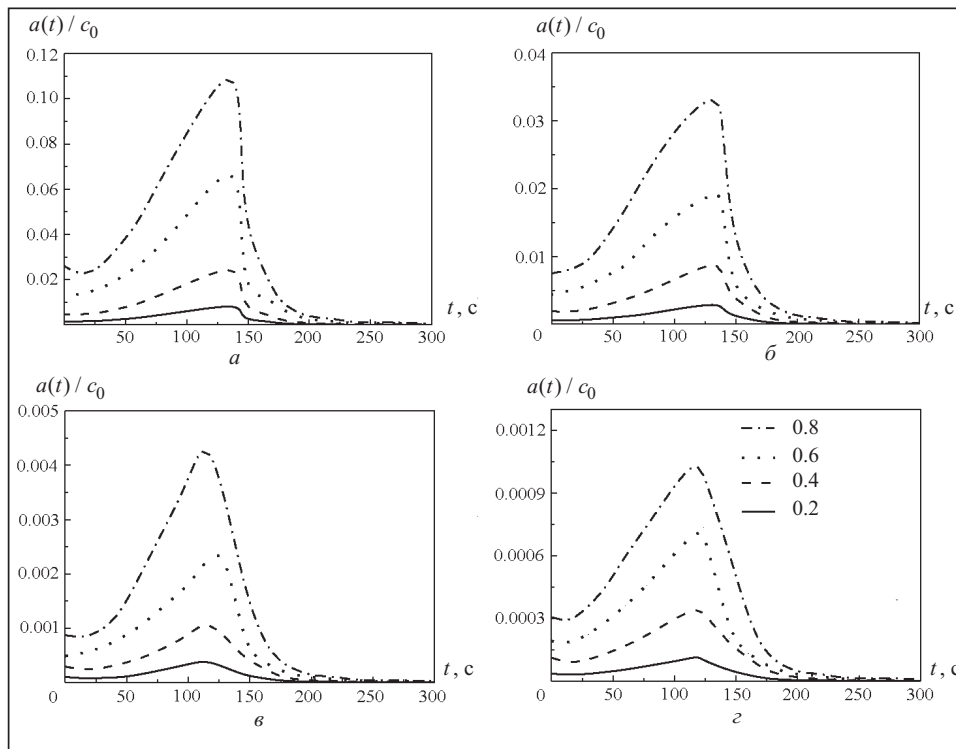


Рис. 2. Залежності концентрації в порах адсорбенту  $a = a(t, z)$ , розраховані для фіксованих значень  $z$  ( $z/z_0 = 0.2; 0.4; 0.6; 0.8$ ) за температури 30 °С (а), 60 °С (б), 100 °С (в), 350 °С (г)

відповідно наведено залежності розрахованих величин концентрації  $c = c(t, z)$  від часу для фіксованих значень геометричних розмірів досліджуваного зразка та фіксованих значень температури 30 °С, 60 °С, 100 °С, 350 °С, при яких протікають наноадсорбційні процеси.

Як видно з розрахованих залежностей від часу  $t$ , їхній загальний характер є якісно подібним: для кожного значення  $z/z_0$  значення концентрації  $c(t)/c_0$  зростають. При цьому на графіках рис. 1 а, б, в можна спостерігати незначне зменшення концентрації адсорбтиву, а далі його концентрація збільшується, досягаючи насичення. У міру зростання температури виявлений ефект стає все менш вираженим. Поява цього ефекту пов'язана з тим, що при малій температурі молекули відштовхуються одна від одної, як впливає зі співвідношення Ленарда-Джонса, що спричиняє часткове вивільнення нанопорами частини адсорбованих молекул. У міру зростання температури сили відштовхування між молекулами слабшають і цей ефект стає слабко вираженим. Слід зауважити, що швидкість росту концентрації адсорбату в газовій фазі сильно залежить від температури: вона швидко зростає у міру її збільшення.

На рис. 2 а, б, в, г відповідно наведено результати моделювання концентрації адсорбованої маси газової фази у нанопорах адсорбенту. Розрахунки виконано залежно від часу  $t$  для тих самих геометричних параметрів досліджуваного зразка та значень  $z$  і температури, для яких отримано залежності, наведені на рис. 1.

Як видно з аналізу наведених на рис. 2 а, б, в, г залежностей, їхні графіки мають одну характерну особливість: у кожному графіку зі зміною часу формується похиле плато, пов'язане зі зростанням концентрації у порах адсорбенту. Після досягнення максимуму в кожній концентраційній залежності формується вертикальна стінка, що з фізичного погляду визначає діапазон часу, за який нанопори втрачають захоплений леткий адсорбат. Слід також зауважити, що попри схожість отриманих залежностей, у

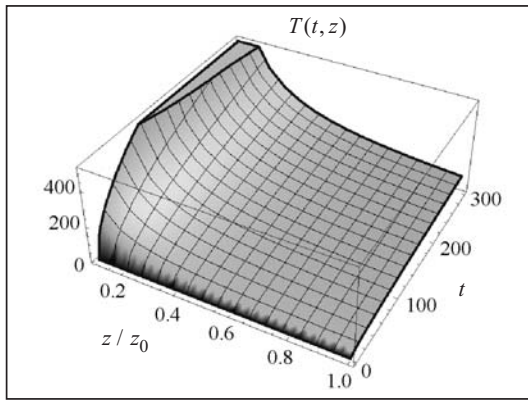


Рис. 3. Просторова залежність температури  $T = T(t, z)$  всередині зразка від часу  $t$  та знерозміреної координати  $z/z_0$

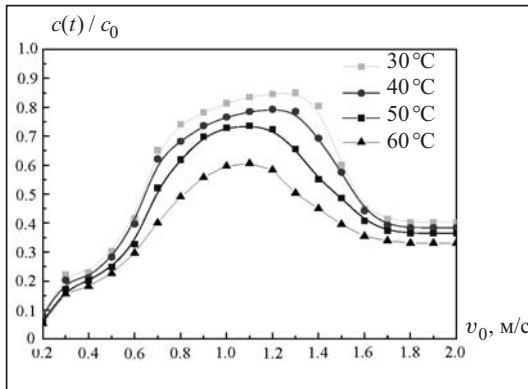


Рис. 4. Зміна концентрації адсорбату в газовій фазі від швидкості вхідного потоку і температури для фіксованого значення  $z (z/z_0 = 0.4)$  і тривалості процесу адсорбції  $\tau = 400$  с

стадії адсорбції, забезпечивши високий ступінь поглинання адсорбату нанопорами. Достовірність і повноту результатів числового аналізу та високу швидкодію обчислень забезпечено завдяки програмній реалізації високопродуктивних алгоритмів. Це надало змогу виконати паралельні обчислення окремих компонентів розв'язків моделі, включаючи інтегральні складові функцій впливу, компонентів  $n$ -х ( $n = 1, N_1$ ) наближень концентрацій адсорбату в газовій фазі та нанопорах частинок адсорбенту і температур потоку з використанням багатоядерних процесорів, враховуючи підходи, викладені у праці [17].

## ВИСНОВКИ

Розроблено високопродуктивні методи та обчислювальні технології моделювання неізотермічної адсорбції газів у нанопористих кіберсистемах зі зворотними зв'язками для класів нелінійних ізотерм адсорбції. Обґрунтовано і розвинуто підходи побудови узагальнених нелінійних рівнянь рівноваги адсорбції Ленгмюра на випадки неізотермічної циклічної адсорбції–десорбції шляхом включення в них компонентів впливу температури середовища та енергії активації. На їхній основі побудовано нові нелінійні математичні моделі, що включають балансові рівняння адсорбції/десорбції з урахуванням факторів взаємодії зі зворотним зв'язком для нано- і макропотоків, швидкості і температури газового потоку. Реалізовано ефективні схеми розпаралелювання та

міру зростання температури концентрація  $a(t)$  у порах адсорбенту різко зменшується. Крім того, максимуми кожної залежності при цьому зміщуються у шкалі часу вправо, однак, як видно з графіків, зменшення концентрації відбувається протягом такого самого інтервалу часу.

На процес адсорбції істотно впливає зростання температури всередині досліджуваного зразка (рис. 3). З порівняння графіків, наведених на рис. 2 а, б, в, г і рис. 3, видно, що процес поглинання нанопорами адсорбенту відбувається в проміжку від 50 с до 200 с, при цьому температура всередині досліджуваного зразка змінюється в середньому від 100 °С до 350 °С.

На рис. 4. наведено графіки, що відображають зміну концентрації адсорбату в газовій фазі залежно від швидкості вхідного потоку і температури для фіксованого значення  $z (z/z_0 = 0.4)$  і тривалості адсорбції  $\tau = 400$  с. Залежно від зміни швидкості газового потоку можна відслідковувати та оцінювати робочі зони максимального та мінімального поглинання адсорбату порами нанопористих частинок і у такий спосіб регулювати тривалість

лінеаризації нелінійних моделей на основі підходу Ландау щодо розвинення в ряд функції рівноваги в точці температури фазового переходу та малого параметру. Побудовано високошвидкісні аналітичні та числові розв'язки, отримані за допомогою цих моделей з використанням операційного методу Гевісайда, здійснено їхню алгоритмічну і програмну реалізацію, що надає змогу виконати ефективне розпаралелювання обчислювальних процесів з використанням багатоядерних комп'ютерів та підвищити швидкість обчислень.

#### СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Puertolas B., Navarro M.V., Lopez J.M., Murillo R., Mastral A.M., Garcia T. Modelling the heat and mass transfers of propane onto a ZSM-5 zeolite. *Separation and Purification Technology*. 2012. Vol. 86. P. 127–136. <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2011.10.036>.
2. Krishna R., Van Baten J.M. Investigating the non-idealities in adsorption of CO<sub>2</sub>-bearing mixtures in cation-exchanged zeolites. *Separation and Purification Technology*. 2018. Vol. 206. P. 208–217. <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2018.06.009>.
3. Kanellopoulos N.K. Nanoporous materials: advanced techniques for characterization, modeling, and processing. London: CRC Press, 2011. 564 p.
4. Santander J., Conner W.C., Jobic H., Auerbach S.M. Simulating microwave-heated open systems: tuning competitive sorption in zeolites. *J. Phys. Chem. B*. 2009. Vol. 113, N 42. P. 13776–13781. <https://doi.org/10.1021/jp902946g>.
5. Hammond K.D., Conner W.C. Chapter one — analysis of catalyst surface structure by physical sorption. *Advances in Catalysis*. 2013. Vol. 56. P. 1–101. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-420173-6.00001-2>.
6. Kärger J., Ruthven D., Theodorou D. Diffusion in nanoporous materials. Hoboken: John Wiley & Sons, 2012. 902 p.
7. Karge H.G., Weitcamp J. Adsorption and diffusion. Berlin: Springer, 2008. 400 p.
8. Krishna R. Thermodynamically consistent methodology for estimation of diffusivities of mixtures of guest molecules in microporous materials. *ACS Omega*. 2019. Vol. 4, N 8. P. 13520–13529. <https://doi.org/10.1021/acsomega.9b01873>.
9. Petryk M., Leclerc S., Canet D., Fraissard J. Modeling of gas transport in a microporous solid using a slice selection procedure: Application to the diffusion of benzene in ZSM5. *Catalysis Today*. 2008. Vol. 139, N 3. P. 234–240. <https://doi.org/10.1016/j.cattod.2008.05.034>.
10. Leclerc S., Petryk M., Canet D., Fraissard J. Competitive diffusion of gases in a zeolite using proton NMR and slice selection procedure. *Catalysis Today*. 2012. Vol. 187, N 1. P.104–107. <https://doi.org/10.1016/j.cattod.2011.09.007>.
11. Petryk M., Leclerc S., Canet D., Sergienko I.V., Deineka V.S., Fraissard J. Competitive diffusion of gases in a zeolite bed: NMR and slice procedure, modelling and identification of parameters. *J. Phys. Chem. C*. 2015. Vol. 119, N 47. P. 26519–26525. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.5b07974>.
12. Sergienko I.V., Petryk M.R., Leclerc S., Fraissard J. Highly efficient methods of the identification of competitive diffusion parameters in heterogeneous media of nanoporous particles. *Cybernetics and Systems Analysis*. 2015. Vol. 51, N 4. P. 529–546. <https://doi.org/10.1007/s10559-015-9744-7>.
13. Petryk M., Ivanchov M., Leclerc S., Canet D., Fraissard J. Competitive adsorption and diffusion of gases in a microporous solid. In: *Zeolites — New Challenges*. Margeta K., Farkas A. (Eds.). London: IntechOpen, 2019. P. 1–23. URL: <https://www.intechopen.com/online-first/competitive-adsorption-and-diffusion-of-gases-in-a-microporous-solid>.
14. Petryk M.R., Khimich A.N., 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*. 2018. Vol. 50, N 10. P. 18–33. <https://doi.org/10.1615/JAutomatInfScien.v50.i10.20>.
15. Petryk M.R., Khimich A., Petryk M.M., Fraissard J. Experimental and computer simulation studies of dehydration on microporous adsorbent of natural gas used as motor fuel. *Fuel*. 2019. Vol. 239. P. 1324–1330. <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2018.10.134>.
16. Mykhalyk D., Petryk M., Petryk M.M., Petryk O., Mudryk I. Mathematical modeling of hydrocarbons adsorption in nanoporous catalyst media using nonlinear Langmuir's isotherm using activation energy. *Proc. 9th International Conference on Advanced Computer Information Technologies (ACIT'2019)* (5–7 June 2019, Budejovice, Czech Republic). Budejovice, 2019. P. 72–75.

17. Хіміч О.М., Петрик М.Р., Михалик Д.М., Бойко І.В., Попов О.В., Сидорук В.А. Методи математичного моделювання та ідентифікації складних процесів і систем на основі висопродуктивних обчислень. Київ: Вид-во НАН України, 2019. 190 с.
18. Ландау Л.Д. К теории фазовых переходов. *Журнал экспериментальной и теоретической физики*. 1937. Т. 7. С. 19–32.
19. Прудников А.П., Брычков Ю.А., Марычев О.И. Интегралы и ряды. Дополнительные главы. Москва: Наука, 1986. 800 с.
20. Лаврентьев М.А., Шабат Б.В. Методы теории функций комплексного переменного. Москва: Наука, 1973. 749 с.

*Надійшла до редакції 08.04.2020*

**М.Р. Петрик, І.В. Бойко, А.Н. Химич, М.М. Петрик**  
**ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫЕ СУПЕРКОМПЬЮТЕРНЫЕ**  
**ТЕХНОЛОГИИ МОДЕЛИРОВАНИЯ НАНОПОРИСТЫХ КИБЕРСИСТЕМ**  
**С ОБРАТНЫМИ СВЯЗЯМИ ДЛЯ АДСОРБЦИОННОЙ ОЧИСТКИ ГАЗОВ**

**Аннотация.** Разработаны высокопроизводительные технологии моделирования неизотермической адсорбции газа в нанопористых киберсистемах с обратными связями на основе операционного метода Хевисайда и подхода Ландау к линеаризации нелинейного адсорбционного равновесия Ленгмюра с помощью разложения в сходящийся ряд в точке температуры фазового перехода с последующим эффективным распараллеливанием модели по малому параметру. Представлены результаты численных экспериментов на основе высокоскоростных параллельных вычислений на многоядерных компьютерах.

**Ключевые слова:** нанопористые киберсистемы с обратными связями, адсорбция и десорбция газов, функция адсорбционного равновесия Ленгмюра, операционный метод Хевисайда.

**M.R. Petryk, I.V. Boyko, A.M. Khimich, M.M. Petryk**  
**HIGH-PERFORMANCE CALCULATING SUPERCOMPUTER TECHNOLOGIES**  
**OF SIMULATION OF NANOPOROUS SYSTEMS WITH FEEDBACK FOR ADSORPTION**  
**GAS PURIFICATION**

**Abstract.** High-performance methods and computer technologies for modeling of non-isothermal gas adsorption in nanoporous cyber feedback systems are based on the Heaviside operating method and Landau's linearization approach to Langmuir's nonlinear adsorption equilibrium using the decomposition in a convergent series at the temperature transition point with subsequent efficient parallelization of the model over a small parameter are developed. The results of numerical experiments based on high-speed parallel computations on multicore computers are presented..

**Keywords:** nanoporous feedback systems, adsorption and desorption of gases, Langmuir adsorption equilibrium function, Heaviside operational method.

**Петрик Михайло Романович,**  
 доктор фіз.-мат. наук, професор, завідувач кафедри Тернопільського національного технічного університету імені Івана Пулюя, e-mail: mykhaylo\_petryk@ntu.edu.ua.

**Бойко Ігор Володимирович,**  
 кандидат фіз.-мат. наук, доцент, доцент кафедри Тернопільського національного технічного університету імені Івана Пулюя, e-mail: boyko.i.theory@gmail.com.

**Хіміч Олександр Миколайович,**  
 чл.-кор. НАН України, доктор фіз.-мат. наук, професор, заступник директора Інституту кібернетики імені В.М. Глушкова НАН України, Київ, e-mail: khimich505@gmail.com.

**Петрик Марія Михайлівна,**  
 аспірантка Тернопільського національного технічного університету імені Івана Пулюя,  
 e-mail: mashapetryk@gmail.com.