

Михайло Петрик¹, Ігор Бойко¹, Микола Шинкарик²,
Оксана Петрик¹

Математична модель дифузійних процесів вуглеводнів у нанопористому каталістичному середовищі цеоліту ZSM-5 з використанням ізотерми Ленгмюра

¹ Тернопільський національний технічний університет імені Івана
Пулюя, Тернопіль, Україна

E-mail: mykhaILOpetryk@tu.edu.te.ua

² Тернопільський національний економічний університет, Тернопіль,
Україна

E-mail: shmi@tneu.edu.ua

У пропонуваній роботі викладені теоретичні основи моделювання неізотермічних процесів дифузії вуглеводнів в нанопористих каталізаторах для нелінійної ізотерми Ленгмюра, що найбільш повно визначає механізм адсорбційної рівноваги для нанопористих мезосистем цеоліту.

$$\begin{aligned} \frac{\partial c(t, z)}{\partial t} + \frac{\partial a(t, z)}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial z} &= D_{inter} \frac{\partial^2 c}{\partial z^2}; \\ -H \frac{\partial T(t, z)}{\partial t} - u h_g \frac{\partial T}{\partial z} - Q \frac{\partial a}{\partial t} - X^2 T + \Lambda \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} &= 0; \end{aligned} \quad (1)$$
$$\frac{\partial a}{\partial t} = \beta \left(c - \frac{1}{b_0 \exp\left(-\frac{\Delta H}{RT}\right)} \frac{a}{a_{full} - a} \right),$$

де перше та друге рівняння описують процеси масопереносу та теплопереносу відповідно, третє рівняння - нелінійна ізотерма Ленгмюра.

Для розв'язання системи (1) було використано операційний метод Хевісайда [1] і перетворення Лапласа [2].

- [1] Lavrentiev M.A., Shabat B.V. *Methods of theory of functions of a complex variable*. – М: Nauka, 1987. – 736 p.
- [2] Petryk M., Leclerc S., D. Canet, Sergienko I.V., Deineka V.S., Fraissard J. *The Competitive Diffusion of Gases in a zeolite bed: NMR and Slice Procedure, Modelling and Identification of Parameters* // Journal of Physical Chemistry C. – 2015. – **119**, 47. – P. 26519-26525.