ПРОГРАМНО-ТЕХНІЧНІ КОМПЛЕКСИ

УДК 519.6

М.Р. ПЕТРИК
Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя, Тернопіль, Україна, e-mail: *mykhaylo_petryk@tntu.edu.ua*.

І.В. БОЙКО
Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя, Тернопіль, Україна, e-mail: *boyko.i.theory@gmail.com*.

О.М. ХІМІЧ
Інститут кібернетики ім. В.М. Глушкова НАН України, Київ, Україна, e-mail: *khimich505@gmail.com*.

О.Ю. ПЕТРИК
Тернопільський національний технічний університет імені Івана Пулюя, Тернопіль, Україна, e-mail: *oopp3@ukr.net.*

ВИСОКОПРОДУКТИВНІ МЕТОДИ МОДЕЛЮВАННЯ АДСОРБЦІЇ ЗІ ЗВОРОТНИМИ ЗВ'ЯЗКАМИ В НЕОДНОРІДНИХ БАГАТОКОМПОНЕНТНИХ НАНОПОРИСТИХ СЕРЕДОВИЩАХ

Анотація. Розроблено нові високопродуктивні аналітичні методи моделювання полів концентрацій дифундованих газів у внутрішньо- та міжчастинковому просторах у неоднорідних n-складових нанопористих середовищах з використанням операційного методу Гевісайда та матриць впливу Коші для неоднорідних крайових задач адсорбції для систем рівнянь в частинних похідних зі зворотними зв'язками.

Ключові слова: адсорбція і дифузія газів, математичне моделювання, умова рівноваги Ленгмюра, операційний метод Гевісайда, матриці впливу Коші, неоднорідні нанопористі середовища.

ВСТУП

Експериментальне та теоретичне вивчення адсорбції та дифузії газів у нанопористих середовищах важливе у багатьох галузях, таких як сепарація газів, гетерогенний каталіз, декарбонізація і очищення атмосфери тощо. Впровадження нових кіберфізичних нанопористих систем (КФНС) для контролю поглинання газових викидів в атмосферу дає змогу поліпшити стан навколишнього середовища і зменшити вплив глобального потепління [1]. Якість математичних моделей адсорбції з урахуванням нанофізичних зворотних впливів, що обмежують кінетику адсорбції в нанопорах, та високопродуктивних методів побудови розв'язків моделей визначає ефективність таких КФНС [2]. Сьогодні проводяться численні теоретичні та експериментальні дослідження адсорбції в нанопористих середовищах, зокрема, щодо вдосконалення їхніх математичних моделей з урахуванням впливу різних обмежувальних факторів кінетики адсорбції [2–8]. Унаслідок складності процесів та недосконалості підходів до їхнього моделювання ці дослідження більшою мірою обмежуються інтегральним рівнем без комплексного врахування мікро- та макровзаємодій, спрощеними емпіричними описами механізмів адсорбційної рівноваги, неоднорідностей середовищ та ін. Це звужує можливості моделювання, не забезпечує цілісності

© М.Р. Петрик, І.В. Бойко, О.М. Хіміч, О.Ю. Петрик, 2022

та повноти розуміння внутрішньої кінетики нанопроцесів, не дає змоги достатньо враховувати низку визначальних факторів, зокрема, покомпонентної взаємодії мікро- і макропотоків, їхнього впливу на стани рівноваги тощо. Не існує несуперечливих моделей, які повною мірою враховують вказані фізичні чинники, а також високопродуктивні методи їхньої реалізації.

У продовження досліджень [9–17] у цій статті обґрунтовано і розроблено високопродуктивні матричні методи математичного моделювання адсорбції газів у неоднорідних багатошарових середовищах на основі узагальненої нелінійної адсорбційної рівноваги Ленґмюра (АРЛ), що дають змогу найповніше описувати фактори зворотних взаємодій і механізми адсорбційної рівноваги на поверхні нанопор середовищ. Ефективний підхід до декомпозиції нелінійної моделі реалізується обґрунтуванням вибору малого параметра і декомпозиції нелінійної АРЛ у рівномірно збіжний ряд. Високопродуктивні методи операційного числення Гевісайда та матриць впливу Коші використовують для моделювання складного адсорбційного перенесення у гетерогенних середовищах. Це дає змогу отримувати векторні аналітичні розв'язки для лінеаризованих моделей, що підвищують якість розпаралелення обчислень та моделювання для архітектур обчислювальних систем багатоядерних комп'ютерів.

Аналізуючи різні підходи до моделювання складних адсорбційних процесів з використанням рівнянь математичної фізики, можна класифікувати такі основні математичні моделі [1, 5, 7, 11]:

— моделі адсорбції на основі концепції суцільності пористого середовища (СПС);

— дворівневі біпористі моделі адсорбції в середовищі пористих частинок на базі міжмолекулярних взаємодій міжчастинкового і внутрішньочастинкового просторів;

— дворівневі моделі компетитивної адсорбції з урахуванням взаємодій міжчастинкового і внутрішньочастинкового просторів;

— моделі адсорбції, розроблені для випадків неоднорідних та багатошарових нанопористих середовищ різної структури та розмірів.

Модель адсорбції СПС ґрунтується на системі диференціальних рівнянь балансу в частинних похідних [2, 6]:

$$\frac{\partial x}{\partial t} + \frac{\partial a}{\partial t} + v\,\frac{\partial x}{\partial z} = D_{inter}\,\frac{\partial^2 c}{\partial z^2}, \tag{1}$$

$$\frac{\partial a}{\partial t} = \beta(c - c_{eq}(a)). \tag{2}$$

Рівняння (1) описує загальний матеріальний баланс адсорбції та дифузії на макрорівні, вираз (2) — це нелінійне рівняння кінетики адсорбційного переносу в нанопорах частинок середовища. Фазовий перехід адсорбтиву із газового потоку в нанопори частинок має рівноважний характер і визначається нелінійною АРЛ [7, 8] $c_{eq}(a) = a / b(a_{full} - a)$, що встановлює зв'язок між рівноважною концентрацією c_{eq} з величиною адсорбції. Тут c, a — концентрації адсорбтиву в міжчастинковому просторі (interparticle space) та внутрішньочастинковому просторі (intraparticle space), β — коефіцієнт масопереносу, v — швидкість руху газового потоку, a_{full} — гранична величина адсорбції, b — константа рівноваги, D_{inter} — коефіцієнт дифузії в міжчастинковому просторі. Дворівневі моделі адсорбції характеризуються описом адсорбції у двох просторах: міжчастинковому (макрорівень) та внутрішньочастинковому (мікрорівень) на основі взаємодій макро- і мікропотоків [7].

Під час розроблення моделі компетитивної дифузії, яка є певним узагальненням дворівневої біпористої моделі адсорбції, як базову вибрано гіпотезу про наявність у системі адсорбційних взаємодій зі зворотними зв'язками (feedback), визначеними умовами компетитивної адсорбційної рівноваги між N компонентами адсорбату (двох і більше газів) та активними центрами адсорбції (АЦА) на поверхнях нанопор частинок. Розроблено біпористу модель на ґрунті таких підходів та визначальних гіпотез [5, 7, 15]:

— компетитивна адсорбція N газів ($N \ge 2$), зумовлена дисперсійними та електростатичними силами Джона–Ленарда, включає міжмолекулярну взаємодію різних компонентів адсорбату в міжчастинковому просторі і нанопорах сферичних частинок радіуса R, рівномірно упакованих у робочій ділянці середовища;

— компетитивна адсорбція відбувається в АЦА на поверхні нанопор, що адсорбують у різних співвідношеннях молекули різноманітних компонентів адсорбату. Під час еволюції системи до рівноваги спостерігаються градієнти концентрації всіляких компонентів адсорбату в макронанопорах, динаміка яких визначається кількісним і якісним складом потоку адсорбату;

— має місце взаємовплив ефектів асиметричності. Ці ефекти було виявлено і досліджено для двокомпонентної компетитивної дифузії М. Петриком, Ж. Фресаром та І. Сергієнком [11, 12]. Вони пов'язані з дифузією та адсорбцією в нанопорах частинок двох компонентів адсорбтиву з різними властивостями, наприклад i-го компонента за наявності j-го, і навпаки, $i \neq j$. Зокрема, одержано теоретичні та експериментальні результати дослідження окремих несиметричних потоків компетитивної адсорбції типу «бензен за наявності гексану», і навпаки — «гексан за наявності бензену» в рівних пропорціях у нанопористих каталізаторах [12].

1. ПІДХІД ДО ДЕКОМПОЗИЦІЇ НЕЛІНІЙНОЇ СИСТЕМИ ДЛЯ МОДЕЛІ КІНЕТИКИ ГАЗІВ

В остаточному вигляді кінетику компетитивної адсорбції N газів ($N \ge 2$) у середовищі нанопористих частинок з урахуванням нелінійної адсорбційної рівноваги та вказаних фізичних гіпотез описують системою рівнянь у частинних похідних [7, 15]:

$$\frac{\partial C_j(t,Z)}{\partial t} = \frac{D_{inter_j}}{l^2}\frac{\partial^2 C_j}{\partial Z^2} - e_{inter_j}\frac{D_{intra_j}}{R^2}\left(\frac{\partial Q_j}{\partial X}\right)_{X=1}, \tag{3}$$

$$\frac{\partial Q_j(t,X,Z)}{\partial t} = \frac{D_{intra_j}}{R^2}\left(\frac{\partial^2 Q_j}{\partial X^2} + \frac{2}{X}\frac{\partial Q_j}{\partial X}\right). \tag{4}$$

З умовами компетитивної АРЛ на зовнішній поверхні частинки, якщо $X=1$, маємо

$$Q_j(t, X=1, Z)\big|_{X=1} = \frac{K_j C_j(t,Z)}{1 + K_1 C_1(t,Z) + K_2 C_2(t,Z) + \ldots + K_N C_N(t,Z)}, \; j=\overline{1,N}. \tag{5}$$

Рівняння (3), (4) описують масоперенос у міжчастинковому просторі та у нанопорах частинок відповідно. Взаємозв'язок між ними визначається компонентом у правій частині (3) та рівнянням компетитивної АРЛ (5). Долучивши до системи (3), (4) рівняння теплового балансу з відповідними умовами, замінивши рівняння рівноваги (5) узагальненими рівняннями неізотермічної АРЛ

$$Q_j(t, X=1, Z) = (K_j(T) C_j(t,Z)) \Big/ \left(1 + \sum_{s=1}^{N} K_s(T) C_s(t,Z)\right),$$
$$K_j(T) = k_{0j}\exp\left(-\frac{\Delta H_j}{R_g T}\right), \; j=\overline{1,N}, \tag{6}$$

отримаємо неізотермічну модель компетитивної адсорбції. Тут $C_j = c_j / c_{\infty j}$, $Q_j = q_j / q_{\infty j}$ — поточні значення безрозмірних концентрацій компонентів адсорбтиву в міжчастинковому та внутрішньочастинковому просторах; c_j, q_j, $j = \overline{1, N}$, — поточні значення відповідних мольних концентрацій; $c_{\infty j}$, $q_{\infty j}$ — рівноважні значення концентрацій; N — кількість адсорбованих компонентів; $K_j = 1 / \widetilde{K}_j$, $j = \overline{1, N}$, — кофіцієнт адсорбції j-го компонента; $\widetilde{K}_j = q_{\infty_j} / c_{\infty_j}$ — константа адсорбції j-го компонента; D_{intra} — коефіцієнт дифузії в нанопорах; e_{inter} — коефіцієнт впливу внутрішньочастинкового переносу на міжчастинковий; k_{0j} — постійна складова коефіцієнта адсорбції j-го компонента; T — температура потоку; ΔH_j, R_g — енергія активації та універсальна газова стала відповідно.

Розвиненням нелінійних правих частин (5), що представляють вирази компетитивної АРЛ для j-го компонента адсорбату, в ряд Маклорена в околі точки нульових концентрацій дифундованих компонентів C_j, $j = \overline{1, N}$, обмежуючись другим порядком точності, зводимо умови рівноваги (5) до вигляду [7, 8]

$$Q_j(t, X = 1, Z)\big|_{X=1} = K_j C_j(t, Z) - K_1^2 \sum_{j_1=1}^{N} \frac{K_{j_1} K_j}{K_1^2} C_{j_1}(t, Z) C_j(t, Z), \; j = \overline{1, N}. \quad (7)$$

За припущення, що $K_1 = \max\,\{K_j, K_j < 1\}_{j=1}^{N}$, та визначивши $\varepsilon = K_1^2 << 1$ як малий параметр, розв'язки нелінійних крайових задач на основі системи рівнянь (3), (5) з урахуванням (7) побудуємо у вигляді асимптотичних сум [14, 15]

$$\begin{gathered} C_j(t, Z) = C_{j_0}(t, Z) + \varepsilon C_{j_1}(t, Z) + \varepsilon^2 C_{j_2}(t, Z) + \ldots, \\ Q_j(t, X, Z) = Q_{j_0}(t, X, Z) + \varepsilon Q_{j_1}(t, X, Z) + \varepsilon^2 Q_{j_2}(t, X, Z) + \ldots, \; j = \overline{1, N}. \end{gathered} \quad (8)$$

На основі (8) виконано декомпозицію низки нелінійних моделей адсорбції, розглядуваних з урахуванням наведеної класифікації, та отримано аналітичні розв'язки лінеаризованих моделей [10–17, 20].

2. НЕЛІНІЙНА МОДЕЛЬ АДСОРБЦІЇ В ОДНОСКДАДОВОМУ СЕРЕДОВИЩІ

Розвинувши $c_{eq}(a)$ у ряд Тейлора та обмежившись членами не вище другого порядку, умову АРЛ-рівноваги можна записати у вигляді

$$c_{eq}(a) = \gamma a + \varepsilon a^2, \quad (9)$$

де $\gamma = 1/(b a_{full})$ — константа адсорбції, що описує лінійну складову адсорбційної рівноваги (згідно з законом Ґенрі), $\varepsilon = 1 / b a_{full}^2 < 1$ — малий параметр. З урахуванням цих припущень та формули (9) кінетику адсорбції в напівобмеженому однорідному середовищі можна описати системою рівнянь у частинних похідних [3, 7]

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial a}{\partial t} + v \frac{\partial c}{\partial z} = D_{inter} \frac{\partial^2 c}{\partial z^2}, \quad (10)$$

$$\frac{\partial a}{\partial t} = \beta(\gamma a + \varepsilon a^2) \quad (11)$$

з початковими умовами

$$c(t, z)\big|_{t=0} = C_s, \; a(t, z)\big|_{t=0} = a_s \quad (12)$$

та крайовими умовами

$$c(t, z)\big|_{z=0} = \omega_0(t) = \omega_0, \; \frac{\partial c}{\partial z}\bigg|_{z=\infty} = 0. \quad (13)$$

Розв'язок нелінійної крайової задачі (3)–(6) шукатимемо у вигляді асимптотичних сум [15]

$$c(t,z)=c_0(t,z)+\varepsilon c_1(t,z)+\varepsilon^2 c_2(t,z)+\ldots,$$
$$a(t,z)=a_0(t,z)+\varepsilon a_1(t,z)+\varepsilon^2 a_2(t,z)+\ldots \tag{14}$$

У результаті підстановки (14) нелінійна крайова задача (10)–(13) розпаралелюється на два типи лінеаризованих задач: A_0 і A_m.

Задача A_0 (0-наближення з початковими та крайовими умовами вихідної задачі): знайти обмежений в області $D=\{(t,z):t>0,\ z\in(0,\infty)\}$ розв'язок системи рівнянь

$$\frac{\partial c_0}{\partial t}+\frac{\partial a_0}{\partial t}+v\frac{\partial c_0}{\partial z}=D_{inter}\frac{\partial^2 c_0}{\partial z^2}, \tag{15}$$

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

з початковими умовами

$$c_0(t,z)\big|_{t=0}=C_s,\ a_0(t,z)\big|_{t=0}=a_s \tag{17}$$

та крайовими умовами

$$c_0(t,z)\big|_{z=0}=\omega_0,\ \frac{\partial C_0}{\partial z}\bigg|_{z=\infty}=0. \tag{18}$$

Задача A_m, $m=\overline{1,\infty}$ (m-наближення з нульовими початковими і крайовими умовами): побудувати в області D обмежений розв'язок системи рівнянь

$$\frac{\partial c_m}{\partial t}+\frac{\partial a_m}{\partial t}+v\frac{\partial c_m}{\partial z}=D_{inter}\frac{\partial^2 c_m}{\partial z^2}, \tag{19}$$

$$\frac{\partial a_m}{\partial t}=\beta\left(c_m-\gamma a_m-\sum_{i=0}^{m-1}a_i a_{m-1-i}\right). \tag{20}$$

Задачі A_0 (15)–(18) і A_m (19), (20) розв'язуємо операційним методом Гевісайда з використанням інтегрального перетворення Лапласа за змінною t [18, 19]:

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

У зображеннях за Лапласом одержимо задачі A_0^* і A_m^*.

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

$$\frac{d^2c_0^*}{dz^2}-v_1\frac{dc_0^*}{dz}-q^2c_0^*=-\mathcal{F}^*(p), \tag{21}$$

$$a_0^*(p,z)=\frac{\beta}{p+\gamma\beta}c^*(p,z)+\frac{a_s}{p+\gamma\beta} \tag{22}$$

з крайовими умовами

$$c_0^*\big|_{z=0}=\frac{\omega_0}{p},\ \frac{dc_0^*}{dz}\bigg|_{z=\infty}=0. \tag{23}$$

Тут

$$v_1=\frac{v}{D_{inter}},\ q^2(p)=\frac{p(p+\gamma\beta+\beta)}{D_{inter}(p+\gamma\beta)},\ \mathcal{F}^*=\frac{C_s}{D_{inter}}+\frac{a_s}{D_{inter}}\frac{\beta\gamma}{p+\gamma\beta},$$

$$c_0^*(p,z)=\int_0^\infty c_0(t,z)e^{-pt}dt,\ a_0^*(p,z)=\int_0^\infty a_0(t,z)e^{-pt}dt.$$

Фундаментальну систему розв'язків крайової задачі (21)–(23) складають функції $\exp\left(\left(\frac{\upsilon_1}{2}+\varsigma(p)\right)z\right)$, $\exp\left(\left(\frac{\upsilon_1}{2}-\varsigma(p)\right)z\right)$, де $\varsigma(p)=\sqrt{\frac{1}{4}\upsilon_1^2+q(p)^2}$, $\operatorname{Re}\varsigma>0$. Зафіксувавши гілку $\operatorname{Re}\varsigma(p)>0$, побудуємо методом функцій Коші [19]

$$c_0^*(p,z)=\frac{\omega_0}{p}\exp\left(\left(\frac{\upsilon_1}{2}-\varsigma(p)\right)z\right)+\int_0^\infty \mathcal{E}^*(p,z,\xi)\,\mathcal{F}^*(p,\xi)\,d\xi, \tag{24}$$

де $\mathcal{E}^*(p,z,\xi)$ — функція Коші, визначена у вигляді

$$\mathcal{E}^*(p,z,\xi)=\frac{1}{2\varsigma(p)}\exp\left(\frac{1}{2}\upsilon_1(z-\xi)\right)\left(e^{-|z-\xi|\varsigma(p)}-e^{-(z-\xi)\varsigma(p)}\right). \tag{25}$$

Виконавши інтегрування в (24) з урахуванням (25), після низки перетворень і застосування оберненого оператора Лапласа $L^{-1}[\dots]$ отримаємо формулу для переходу до оригіналу [18]:

$$c_0(t,z)=(C_s+a_s)\frac{\gamma}{1+\gamma}L^{-1}\left[\frac{1}{p}\right]+\frac{C_s-\gamma a_s}{1+\gamma}L^{-1}\left[\frac{1}{p+\beta(1+\gamma)}\right]+(\omega_0-C_s)e^{\frac{u_1}{2}z}L^{-1}\times$$

$$\times\left[\frac{e^{-\varsigma(p)z}}{p}\right]+\beta(C_s-\gamma a_s)L^{-1}\left[\frac{1}{p+\beta(\gamma+1)}\right]*L^{-1}\left[\frac{e^{-\varsigma(p)z}}{p}\right]e^{\frac{u_1}{2}z}. \tag{26}$$

Обчислимо оригінал виразу $e^{-\varsigma(p)z}/p$:

$$L^{-1}\left[\frac{e^{-\varsigma(p)z}}{p}\right]=\frac{1}{2\pi i}\int_{\sigma_0-i\infty}^{\sigma_0+i\infty}\frac{e^{-\varsigma(p)z}}{p}e^{pt}dp\equiv\mathcal{W}_c(t,z). \tag{27}$$

Особливими точками виразу $e^{-\varsigma(p)z}/p$ є полюс першого порядку $p=0$, точка галуження $p=\infty$ і

$$p_{1,2}=-\frac{1}{2}\left[\beta(\gamma+1)+\frac{1}{4}\frac{u^2}{D_{inter}}\pm\sqrt{\left(\beta(\gamma+1)+\frac{1}{4}\frac{u^2}{D_{inter}}\right)^2-\beta\gamma\frac{u^2}{D_{inter}}}\right]<0,$$

де $\varsigma(p)=0$ або $p^2+\left[\frac{u^2}{4D_{inter}}+\beta(\gamma+1)\right]p+\frac{u^2}{4D_{inter}}\beta\gamma=0$. Це дає змогу в (27) замінити інтегрування на прямій $\operatorname{Re}p=\sigma_0>0$ інтегруванням по уявній осі ($\operatorname{Re}p=0$) [13, 15]:

$$\mathcal{W}_c(t,z)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{e^{-\varsigma(i\nu)z}}{i\nu}e^{i\nu t}d\nu=\frac{1}{\pi}\int_0^\infty\operatorname{Re}\left[\frac{e^{-(\varphi_1(\nu)+i\varphi_2(\nu))z}}{i\nu}e^{i\nu t}\right]d\nu+\exp\left(-\frac{u}{2D_{inter}}z\right).$$

Після низки перетворень отримуємо оригінал

$$\mathcal{W}_c(t,z)=L^{-1}\left[\frac{e^{-\omega(p)z}}{p}\right]=\frac{1}{2\pi i}\int_{\sigma_0-i\infty}^{\sigma_0+i\infty}\frac{e^{-\varsigma(p)z}}{p}e^{pt}dp=$$

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

де $\varphi_1(\nu)=\left[\dfrac{(\Gamma_1^2(\nu)+\Gamma_2^2(\nu))^{1/2}+\Gamma_1(\nu)}{2}\right]^{1/2}$, $\varphi_2(\nu)=\left[\dfrac{(\Gamma_1^2(\nu)+\Gamma_2^2(\nu))^{1/2}-\Gamma_1(\nu)}{2}\right]^{1/2}$,

$\Gamma_1(\nu)=\dfrac{u^2}{4D_{inter}^2}+\dfrac{\nu^2\beta}{D_{inter}^2(\nu^2+\beta^2\gamma^2)}$, $\Gamma_2(\nu)=\dfrac{\nu^3+\nu\beta^2(\gamma+1)\gamma}{D_{inter}(\nu^2+\beta^2\gamma^2)}$.

Повертаючись у (22), (26) до оригіналів, отримуємо аналітичні вирази

$$c_0(t,z)=\frac{\gamma(C_s+a_s)}{1+\gamma}+\frac{C_s-\gamma a_s}{1+\gamma}e^{-\beta(1+\gamma)t}+(\omega_0-C_s)e^{\frac{1}{2}\upsilon_1 z}\mathcal{W}_c(t,z)+$$

$$+\beta(C_s-\gamma a_s)e^{\frac{1}{2}\upsilon_1 z}\int_0^t e^{-\beta(1+\gamma)(t-s)}G_0(s,z)\,ds, \tag{28}$$

$$a_0(t,z)=a_s e^{-\gamma\beta t}+\beta\int_0^t e^{-\gamma\beta(t-s)}c_0(s,z)\,ds. \tag{29}$$

Формули (28), (29) складають розв'язок задачі A_0.

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

$$\frac{d^2c_m^*}{dz^2}-\frac{\upsilon}{D_{inter}}\frac{dc_m^*}{dz}-\frac{p}{D_{inter}}(C_s^*+a_s^*)=0, \tag{30}$$

$$\beta c_m^*-(p+\gamma\beta)a_m^*=\beta\left(\sum_{i=0}^{m-1}a_i a_{m-1-i}\right)^* \tag{31}$$

за нульовими крайовими умовами.

Безпосередньо перевіряється, що розв'язком системи рівнянь (30), (31) є

$$c_m^*(p,z)=\frac{p\beta}{D_{inter}(p+\gamma\beta)}\int_0^\infty \mathcal{E}^*(p,z,\xi)\left(\sum_{i=0}^{m-1}a_i a_{m-1-i}\right)^*(p,\xi)\,d\xi, \tag{32}$$

$$a_m^*(p,z)=\frac{\beta}{p+\gamma\beta}c_m^*(p,z)-\frac{\beta}{p+\gamma\beta}\left(\sum_{i=0}^{m-1}a_i a_{m-1-i}\right)^*(p,z). \tag{33}$$

Обчислимо оригінал

$$\mathcal{E}(t,z,\xi)\equiv L^{-1}[\mathcal{E}^*(p,z,\xi)]=\frac{1}{2\pi i}\int_{\sigma_0-i\infty}^{\sigma_0+i\infty}\mathcal{E}^*(p,z,\xi)e^{pt}=$$
$$=e^{\frac{1}{2}\upsilon_1(z-\xi)}[G(t,|z-\xi|)-G(t,z+\xi)].$$

Повертаючись в (32), (33) до оригіналів, отримуємо вирази

$$c_m(t,z)=\frac{\beta}{D_{inter}}\int_0^t\int_0^\infty[\mathcal{E}(t-s,z,\xi)-\gamma\beta\mathcal{E}_1(t-s,z,\xi)]\sum_{i=0}^{n-1}a_i(s,\xi)a_{n-1-i}(s,\xi)\,d\xi\,ds, \tag{35}$$

$$a_m(t,z)=\beta\int_0^t e^{-\gamma\beta(t-s)}[c_m(s,z)-a_0^2(s,z)]ds,\ m=\overline{1,\infty}, \tag{36}$$

де

$$\mathcal{E}_1(t,z,\xi)=\int_0^t e^{-\gamma\beta(t-s)}\mathcal{E}(s,z,\xi)\,ds,$$

$$G(t,z)=\frac{1}{2\sqrt{2\pi}}\int_0^{\infty}\frac{q_1\cos\left(\eta t-\frac{z}{\sqrt{2}}q_2\right)+q_2\sin\left(\eta t-\frac{z}{\sqrt{2}}q_2\right)}{\sqrt{\bar{a}^2+\eta^2 b^2}}\exp\left(-\frac{z}{\sqrt{2}}q_1\right)d\eta .$$

Формули (35), (36) є розв'язком задачі $A_m,\ m=\overline{1,\infty}$.

3. КРАЙОВА ЗАДАЧА ДЛЯ МОДЕЛІ АДСОРБЦІЇ В НЕОДНОРІДНИХ *n*-КОМПОНЕНТНИХ НАНОПОРИСТИХ СЕРЕДОВИЩАХ

Розглядається адсорбція в напівобмеженому неоднорідному за координатою z в n-складовому нанопористому середовищі (n — довільне число) адсорбентів з різними фізичними характеристиками. Математична модель такого переносу може описуватись нелінійною крайовою задачею: побудувати обмежений в області $D_n=\left\{(t,z): t>0,\ z\in\bigcup_{k=1}^{n+1}(l_{k-1},l_k),\ l_0\ge 0,\ l_{n+1}=\infty\right\}$ розв'язок системи рівнянь у [15, 19]

$$\frac{\partial}{\partial t}c_k(t,z)+\frac{\partial}{\partial t}a_k(t,z)+\eta_{k_k}=D_{inter_k}\frac{\partial^2}{\partial z^2}c_k, \tag{37}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}a_k(t,z)=\beta_k(c_k(t,z)-\gamma_k a_k(t,z)(1+\varepsilon a_k)),\ \ k=\overline{1,n+1}, \tag{38}$$

за початковими умовами

$$c_k(t,z)\big|_{t=0}=c_{0_k}(z),\ \ a_k(t,z)\big|_{t=0}=a_{0_k}(z), \tag{39}$$

крайовими умовами за геометричною змінною z

$$\left(\alpha_{11}^0\frac{\partial}{\partial z}+\delta_{11}^0\right)c_1(t,z)\bigg|_{z=l_0}=\omega_0(t),\ \left(\alpha_{22}^{n+1}\frac{\partial}{\partial z}+\delta_{22}^{n+1}\right)c_{n+1}(t,z)\bigg|_{z=l_{n+1}}=\omega_{n+1}(t) \tag{40}$$

та системою n-інтерфейсних умов третього роду за змінною z

$$\left(\alpha_{j1}^k\frac{\partial}{\partial z}+\delta_{j1}^k\right)c_k(t,z)\bigg|_{z=l_k}=\left(\alpha_{j2}^k\frac{\partial}{\partial z}+\delta_{j2}^k\right)c_{k+1}(t,z)\bigg|_{z=l_k},\ \ k=\overline{1,n}. \tag{41}$$

З урахуванням нестаціонарності масообміну на масообмінних межах ($z=l_{k-1},\ k=\overline{1,n+1}$) замість умов (40), (41) можуть бути використані умови вигляду

$$\left[\left(\alpha_{12}^0+\delta_{12}^0\frac{\partial}{\partial t}\right)\frac{\partial}{\partial z}+\left(\beta_{12}^0+\gamma_{12}^0\frac{\partial}{\partial t}\right)\right]c_1(t,z)\bigg|_{z=l_0}=\omega_0(t),\ \ \frac{\partial c_{n+1}(t,z)}{\partial t}\bigg|_{z=\infty}=0,$$

$$\left[\left[\left(\alpha_{j1}^k+\delta_{j1}^k\frac{\partial}{\partial t}\right)\frac{\partial}{\partial z}+\left(\beta_{j1}^k+\gamma_{j1}^k\frac{\partial}{\partial t}\right)\right]c_k(t,z)-\right.$$

$$\left.-\left[\left(\alpha_{j2}^k+\delta_{j2}^k\frac{\partial}{\partial t}\right)\frac{\partial}{\partial z}+\left(\beta_{j2}^k+\gamma_{j2}^k\frac{\partial}{\partial t}\right)\right]c_{k+1}(t,z)\right]\bigg|_{z=l_k}=0,\ \ k=\overline{1,n},\ \ j=\overline{1,2}.$$

Застосувавши до задачі (37)–(41) інтегральне перетворення Лапласа за змінною t [18], отримаємо крайову задачу в зображеннях: побудувати обмежений на множині $I_n=\left\{z: z\in\bigcup_{k=1}^{n+1}(l_{k-1},l_k),\ l_0\ge 0,\ l_{n+1}=\infty\right\}$ розв'язок системи рівнянь

$$\frac{d^2 c_k^*}{dz^2} - q_k^2(p)\, c_k^*(p,z) = -\mathcal{F}_k^*(p,z), \; k = \overline{1, n+1}, \tag{42}$$

з крайовими умовами

$$\left[\alpha_{12}^0 \frac{d}{dz} + \delta_{12}^0\right] c_1^*(p,z)\Bigg|_{z=l_0} = \omega_1^*(p), \; \frac{dc_{n+1}^*(t,z)}{dt}\Bigg|_{z=\infty} = 0 \tag{43}$$

та інтерфейсними умовами за координатою z

$$\left[\left(\alpha_{j1}^k \frac{d}{dz} + \delta_{j1}^k\right) c_k^*(p,z) - \left(\alpha_{j2}^k \frac{d}{dz} + \delta_{j2}^k\right) c_{k+1}^*(p,z)\right]\Bigg|_{z=l_k} = 0, \; k = \overline{1,n}, \; j = \overline{1,2}, \tag{44}$$

де

$$\mathcal{F}_k^*(p,z) = \frac{1}{D_{inter_k}}\left[C_{0_k}(z) + \frac{\beta_k \gamma_k}{p + \beta_k \gamma_k} a_{0_k}(z)\right], \; \omega_1^*(p) = \omega_0^*(p),$$

$$q_k^2(p) = \frac{1}{D_{inter_k}(p + \beta_k \gamma_k)}[p^2 + p(\beta_k(1+\gamma_k) + \beta_k \gamma_k \eta_k)], \; k = \overline{1,n}, \; j, m = \overline{1,2},$$

$$a_k^*(p,z) = \frac{a_{0_k}(z)}{p + \beta_k \gamma_k} + \frac{\beta_k}{p + \beta_k \gamma_k} c_k^*(p,z), \; k = \overline{1, n+1}. \tag{45}$$

Зафіксувавши гілку $\operatorname{Re} q_k(p) > 0$, розв’язок неоднорідної крайової задачі (42)–(44) побудуємо методом функцій Коші [19]

$$c_k^*(p,z) = A_k \cdot \operatorname{ch}(q_k z) + B_k \cdot \operatorname{sh}(q_k z) + \int_{l_{k-1}}^{l_k} \mathcal{E}_k^*(p,z,\xi)\mathcal{F}_k^*(p,\xi)\, d\xi, \; k = \overline{1,n}, \tag{46}$$

$$c_{n+1}^*(p,z) = B_{n+1} e^{-q_{n+1}(z-l_n)} + \int_{l_n}^{\infty} \mathcal{E}_{n+1}^*(p,z,\xi)\mathcal{F}_{n+1}^*(p,\xi)\, d\xi, \tag{47}$$

де $\mathcal{E}_k^*(p,z,\xi)$, $k = \overline{1, n+1}$, — функції Коші, що визначені у вигляді

$$\mathcal{E}_k^*(p,z,\xi) = -\frac{1}{q_k \Delta_{11}(q_k l_{k-1}, q_k l_k)} \times$$

$$\times \begin{cases} \Phi_{12}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k z)\, \Phi_{11}^k(q_k l_k, q_k \xi), & l_{k-1} < z < \xi < l_k, \\ \Phi_{12}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k \xi)\, \Phi_{11}^n(q_k l_k, q_k z), & l_{k-1} < \xi < z < l_k, \end{cases}$$

$$\mathcal{E}_{n+1}^*(p,z,\xi) = \frac{1}{q_{n+1}(\alpha_{12}^n q_{n+1} - \delta_{12}^n)} \times$$

$$\times \begin{cases} \Phi_{12}^n(q_{n+1} l_n, q_{n+1} z) e^{-q_{n+1}(\xi - l_n)}, & l_n < z < \xi < \infty, \\ \Phi_{12}^n(q_{n+1} l_n, q_{n+1} \xi) e^{-q_{n+1}(z - l_n)}, & l_n < \xi < z < \infty. \end{cases} \tag{48}$$

Тут

$$\Delta_{11}(q_k l_{k-1}, q_k l_k) = V_{12}^{k-1,1}(q_k l_{k-1}) V_{11}^{k2}(q_k l_k) - V_{11}^{k1}(q_k l_k) V_{12}^{k-1,2}(q_k l_{k-1}),$$

$$\Phi_{ij}^k(q_s l_k, q_s z) = V_{ij}^{k2}(q_s l_k) \operatorname{ch}(q_s z) - V_{ij}^{k1}(q_s l_k) \operatorname{sh}(q_s z),$$

$$V_{ij}^{k1}(q_s l_k) = \left(\alpha_{ij}^k \frac{d}{dz} + \delta_{ij}^k\right) \operatorname{ch}(q_s z)\Bigg|_{z=l_k} = \alpha_{ij}^k q_s \operatorname{sh}(q_s l_k) + \delta_{ij}^k \operatorname{ch}(q_s l_k),$$

$$V_{ij}^{k2}(q_s l_k) = \left(\alpha_{ij}^k \frac{d}{dz} + \delta_{ij}^k\right) \operatorname{sh}(q_s z)\Bigg|_{z=l_k} = \alpha_{ij}^k q_s \operatorname{ch}(q_s l_k) + \delta_{ij}^k \operatorname{sh}(q_s l_k).$$

Умови (43), (44) дають алгебраїчну систему з $(2n+1)$ рівнянь для визначення коефіцієнтів A_k, B_k $(k=\overline{1, n})$ та B_{n+1} у формулах (46), (47) загального розв'язку задачі (42)–(44) (з урахуванням (48)):

$$\begin{cases} V_{12}^{01}(q_1 l_0)A_1 + V_{12}^{02}(q_1 l_0)B_1 = \omega_1^*(p), \\ V_{11}^{11}(q_1 l_1)A_1 + V_{11}^{12}(q_1 l_1)B_1 - V_{12}^{11}(q_2 l_1)A_2 - V_{12}^{12}(q_2 l_1)B_2 = \omega_{1_1}, \\ V_{21}^{11}(q_1 l_1)A_1 + V_{21}^{12}(q_1 l_1)B_1 - V_{22}^{11}(q_2 l_1)A_2 - V_{22}^{12}(q_2 l_1)B_2 = G_1^*, \\ \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots \\ V_{11}^{k1}(q_k l_k)A_k + V_{11}^{k2}(q_k l_k)B_k - V_{12}^{k1}(q_{k+1} l_k)A_{k+1} - V_{12}^{k2}(q_{k+1} l_k)B_{k+1} = 0, \\ V_{21}^{k1}(q_k l_k)A_k + V_{21}^{k2}(q_k l_k)B_k - V_{22}^{k1}(q_{k+1} l_k)A_{k+1} - V_{22}^{k2}(q_{k+1} l_k)B_{k+1} = G_k^*, \\ \dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots \\ V_{11}^{n,1}(q_n l_n)A_n + V_{11}^{n,2}(q_n l_n)B_n - (\bar\beta_{12}^n - \bar\alpha_{12}^n q_{n+1})B_{n+1} = 0, \\ V_{21}^{n,1}(q_n l_n)A_n + V_{21}^{n,2}(q_n l_n)B_n - (\bar\beta_{22}^n - \bar\alpha_{22}^n q_{n+1})B_{n+1} = G_n^*, \end{cases} \tag{49}$$

де

$$G_k^* = h_{2_k} \int_{l_k}^{l_{k+1}} \frac{\Phi_{11}^{k+1}(q_{k+1} l_{k+1}, q_{k+1}\xi)}{\Delta_{11}(q_{k+1} l_k, q_{k+1} l_{k+1})} \mathcal{F}_{k+1}^*(p,\xi)\, d\xi -$$

$$- h_{1_k} \int_{l_{k-1}}^{l_k} \frac{\Phi_{12}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k \xi)}{\Delta_{11}(q_k l_{k-1}, q_k l_k)} \mathcal{F}_{k+1}^*(p,\xi)\, d\xi,$$

$$h_{j_k} = \alpha_{2j}^k \delta_{1j}^k - \alpha_{1j}^k \delta_{2j}^k, \ \ k=\overline{1, n}, \ \ j=\overline{1, 2}.$$

Запишемо матрицю коефіцієнтів системи (49):

$$M = \begin{bmatrix} V_{12}^{01} & V_{12}^{02} & & & & & & & & \\ V_{11}^{11} & V_{11}^{12} & -V_{12}^{11} & -V_{12}^{12} & & & & & & \\ V_{21}^{11} & V_{21}^{12} & -V_{22}^{11} & -V_{22}^{12} & & & & 0 & & \\ & & & \dots & & & & & & \\ & & & & V_{11}^{k1} & V_{11}^{k2} & -V_{12}^{k1} & -V_{12}^{k2} & & \\ & & & & V_{21}^{k1} & V_{21}^{k2} & -V_{22}^{k1} & -V_{22}^{k2} & & \\ & & & & & & & \dots & & \\ & & & 0 & & & V_{11}^{n-1,1} & V_{11}^{n-1,2} & -V_{22}^{n-1,1} & -V_{22}^{n-1,2} \\ & & & & & & & V_{11}^{n,1} & V_{11}^{n,2} & -(\delta_{12}^n - \alpha_{12}^n q_{n+1}) \\ & & & & & & & V_{21}^{n,1} & V_{21}^{n,2} & -(\delta_{22}^n - \alpha_{22}^n q_{n+1}) \end{bmatrix}.$$

Припустимо, що виконана умова однозначної розв'язуваності крайової задачі (42)–(44), тобто що визначник алгебраїчної системи (49) є відмінним від нуля

$$\Delta^*(p) \equiv \Delta_{12}(q_{n+1} l_n, q_{n+1} l_{n+1})\Delta'_{\overline{1, 2n}} - \Delta_{11}(q_{n+1} l_n, q_{n+1} l_{n+1})\Delta_{\overline{1, 2n}} \neq 0. \tag{50}$$

На підставі однозначної розв'язуваності алгебраїчної системи (49) у результаті підстановки одержаних значень A_k, B_k, D_{1_k}, D_{2_k}, $\mathcal{E}_{1_k}$, $\mathcal{E}_{2_k}$, $k=\overline{1, n+1}$, в (46), (47) після низки перетворень, розкривши визначники $\Delta_{A_k}^* \operatorname{ch}(q_k z) + \Delta_{B_k}^* \operatorname{sh}(q_k z)$, $k=\overline{1, n+1}$, отримаємо аналітичні вирази для обчислення компонентів $c_k^*(p, z)$ векторного розв'язку крайової задачі (42)–(44) [19]:

$$
C_1^*(p,z)=\frac{1}{\Delta^*(p)}\left(\Delta^*_{A_1}\operatorname{ch}(q_1 z)+\Delta^*_{B_1}\operatorname{sh}(q_1 z)\right)+\int_{l_0}^{l_1}\mathcal{E}_1^*(p,z,\xi)\cdot\mathcal{F}_1^*(p,\xi)\,d\xi=
$$

$$
=\frac{1}{\Delta^*(p)}\begin{vmatrix}
\omega_1^* & \Phi_{12}^0(q_1 z, q_1 l_0) & 0 & 0 & \cdots \\
0 & \Phi_{11}^1(q_1 z_1, q_1 l_1) & -V_{12}^{11} & -V_{12}^{12} & \cdots \\
G_1^* & \Phi_{21}^1(q_1 z_1, q_1 l_1) & -V_{22}^{11} & -V_{22}^{12} & \cdots \\
0 & 0 & V_{11}^{21} & V_{12}^{21} & \cdots \\
\cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\
0 & 0 & \cdots & & \cdots \\
G_n^* & 0 & \cdots & & \cdots
\end{vmatrix}+\int_{l_0}^{l_1}\mathcal{E}_1^*(p,z,\xi)\mathcal{F}_1^*(p,\xi)\,d\xi,
$$

$$
c_k^*(p,z)=\frac{1}{\Delta^*(p)}\left(\Delta^*_{A_k}\operatorname{ch}(q_k z)+\Delta^*_{B_k}\operatorname{sh}(q_k z)\right)+\int_{l_{k-1}}^{l_k}\mathcal{E}_k^*(p,z,\xi)\mathcal{F}_k^*(p,\xi)\,d\xi=\frac{1}{\Delta^*(p)}\times
$$

$$
\times\begin{vmatrix}
V_{12}^{01} & V_{12}^{02} & 0 & & \cdots & & 0 & \omega_1^* & 0 & & \cdots & & & 0 \\
V_{11}^{11} & V_{11}^{12} & -V_{12}^{11} & & \cdots & & 0 & 0 & 0 & & \cdots & & & 0 \\
V_{21}^{11} & V_{21}^{12} & -V_{22}^{11} & & \cdots & & 0 & G_1^* & 0 & & \cdots & & & 0 \\
0 & 0 & V_{11}^{21} & V_{11}^{22} & \cdots & & & & & & \cdots & & & 0 \\
\cdots & & \cdots & & \cdots & & \cdots & & \cdots & & \cdots & & & \\
0 & & & & \cdots & V_{11}^{k-1,1} & -V_{11}^{k-1,2} & 0 & -\Phi_{12}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k z) & 0 & \cdots & & & \\
\cdots & & & & \cdots & V_{21}^{k-1,1} & V_{21}^{k-1,2} & G_{k-1}^* & -\Phi_{22}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k z) & 0 & \cdots & & & \cdots \\
0 & & & & \cdots & 0 & 0 & 0 & \Phi_{11}^{k}(q_k l_k, q_k z) & -V_{12}^{k1} & \cdots & & & \cdots \\
0 & & & & \cdots & 0 & 0 & G_k^* & \Phi_{21}^{k}(q_k l_k, q_k z) & -V_{22}^{k1} & \cdots & & & \cdots \\
\cdots & & \cdots & & \cdots & & \cdots & & & & \cdots & & & \cdots \\
0 & & & & \cdots & & & 0 & & & \cdots & V_{11}^{n,1} & V_{11}^{n,2} & -(\delta_{12}^n-\alpha_{12}^n q_{n+1}) \\
0 & & & & \cdots & & 0 & G_n^* & 0 & & \cdots & V_{21}^{n,1} & V_{21}^{n,2} & -(\delta_{22}^n-\alpha_{22}^n q_{n+1})
\end{vmatrix}+
$$

$$
+\int_{l_{k-1}}^{l_k}\mathcal{E}_k^*(p,z,\xi)\mathcal{F}_k^*(p,\xi)\,d\xi,\ \ k=\overline{2,n},
$$

$$
c_{n+1}^*(p,z)=\frac{1}{\Delta^*(p)}\begin{vmatrix}
V_{12}^{01} & V_{12}^{02} & 0 & 0 & 0 & \cdots & & & \omega_1^* \\
V_{11}^{11} & V_{11}^{12} & -V_{12}^{11} & -V_{12}^{12} & 0 & \cdots & & & 0 \\
V_{21}^{11} & V_{21}^{12} & -V_{22}^{11} & -V_{22}^{12} & 0 & \cdots & & & G_1^* \\
0 & 0 & V_{11}^{21} & V_{11}^{22} & -V_{12}^{21} & \cdots & & & 0 \\
0 & 0 & V_{21}^{21} & V_{21}^{22} & -V_{22}^{21} & \cdots & & & G_2^* \\
\cdots & & \cdots & & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\
0 & & & & & \cdots & -V_{12}^{n-1,1} & -V_{12}^{n-1,2} & 0 \\
0 & & & & & \cdots & -V_{22}^{n-1,1} & -V_{22}^{n-1,2} & G_{n-1}^* \\
0 & & & & & \cdots & V_{11}^{n1} & V_{11}^{n2} & 0 \\
0 & & & & & \cdots & V_{21}^{n2} & V_{21}^{n2} & G_n^*
\end{vmatrix}\times
$$

$$
\times\, e^{q_{n+1}(z-l_n)}+\int_{l_n}^{\infty}\mathcal{E}_{n+1}^*(p,z,\xi)\mathcal{F}_{n+1}^*(p,\xi)\,d\xi\,.
$$

Розкриваючи визначники $\Delta^*_{A_k}\operatorname{ch}(q_k z) + \Delta^*_{B_k}\operatorname{sh}(q_k z)$, $k = \overline{1, n+1}$, після перетворень отримуємо вирази для визначення компонентів $c_k^*(p, z)$ векторного розв'язку неоднорідної крайової задачі

$$c_k^*(p,z) = W_{1_k}^*(p,z)\omega_1^*(p) + \sum_{j=1}^{n+1} \int\limits_{l_{j-1}}^{l_j} \mathcal{H}_{kj}^*(p,z,\xi)\mathcal{F}_j^*(p,\xi)\,d\xi, \quad k = \overline{1, n+1}, \quad l_{n+1} = \infty. \tag{51}$$

Компоненти вектора впливу $\omega_1^*(p)$ крайової умови на k-й сегмент середовища мають вигляд

$$W_{1_k}^*(p,z) = \begin{cases} \Phi_{11}^1(q_1 l_1, q_1 z)\mathrm{A}_{\overline{1,2}} - \Phi_{21}^1(q_1 l_1, q_1 z)\mathrm{A}'_{\overline{1,2}}, & k = 1, \\ \dfrac{1}{\Delta^*(p)} \prod\limits_{s=1}^{k-1} q_s h_{1_s} [\Phi_{11}^k(q_k l_k, q_k z)\mathrm{A}_{\overline{1,2k}} - \Phi_{21}^k(q_k l_k, q_k z)\mathrm{A}'_{\overline{1,2k}}], & k = \overline{1, n}, \\ \dfrac{1}{\Delta^*(p)} \prod\limits_{s=1}^{n} q_1 h_{1_s} \cdot e^{-q_{n+1}(z - l_n)}, & k = n+1. \end{cases} \tag{52}$$

Компоненти матриці впливу j-ї неоднорідності $\mathcal{F}_j^*(p,\xi)$ (спричиненою j-ми складовими початкових концентрацій адсорбтиву у газовій фазі $C_{0_j}(z)$ та нанопорах $a_{0_j}(z)$) на k-й сеґмент нанопористого середовища $\mathcal{H}_{kj}^*(p, z, \xi)$ мають вигляд:

$$\mathcal{H}_{1j}^*(p,z,\xi) = \begin{cases} \dfrac{\Phi_{12}^0(q_1 l_0, q_1 z)}{q_1 \Delta^*(p)} [\Phi_{21}^1(q_1 l_1, q_1 \xi)\mathrm{A}'_{\overline{1,2}} - \Phi_{11}^1(q_1 l_1, q_1 \xi)\mathrm{A}_{\overline{1,2}}], & j = 1, \\ \dfrac{\prod\limits_{s=1}^{j-1} q_s h_{2_s}}{q_1 \Delta^*(p)} \Phi_{12}^0(q_1 l_0, q_1 z)[\Phi_{21}^j(q_j l_j, q_j \xi)\mathrm{A}'_{\overline{1,2j}} - \Phi_{11}^j(q_j l_j, q_j \xi)\mathrm{A}_{\overline{1,2j}}], & j = \overline{2, n}, \\ -\dfrac{\prod\limits_{s=1}^{n} q_s h_{2_s}}{q_1 \Delta^*(p)} \Phi_{12}^0(q_1 l_0, q_1 z) e^{-q_{n+1}(\xi - l_n)}, & j = n+1; \end{cases}$$

$$\mathcal{H}_{kj}^*(p,z,\xi) = \begin{cases} \dfrac{\Phi_{12}^0(q_1 l_0, q_1 \xi)}{q_1 \Delta^*(p)} \prod\limits_{s=1}^{k-1} h_{1_s} q_s [\Phi_{21}^k(q_k l_k, q_k z)\mathrm{A}'_{\overline{1,2k}} - \Phi_{11}^k(q_k l_k, q_k z)\mathrm{A}_{\overline{1,2k}}], & j = 1, \\ \dfrac{\prod\limits_{s=j}^{k-1} q_s h_{1_s}}{q_j \Delta^*(p)} [\Phi_{11}^k(q_k l_k, q_k z)\mathrm{A}_{\overline{1,2k}} - \Phi_{21}^k(q_k l_k, q_k z)\mathrm{A}'_{\overline{1,2k}}] \times & \\ \times [\Phi_{22}^{j-1}(q_j l_j, q_j \xi)\Delta_{\overline{1,2j-2}} - \Phi_{12}^{j-1}(q_j l_{j-1}, q_j \xi)\Delta'_{\overline{1,2j-2}}], & j = \overline{2, k-1}, \\ \dfrac{1}{q_k \Delta^*(p)} [\Phi_{22}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k z)\Delta_{\overline{1,2k-2}} - \Phi_{12}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k z)\Delta'_{\overline{1,2k-2}}] \times & \\ \times [\Phi_{11}^k(q_k l_k, q_k \xi)\mathrm{A}_{\overline{1,2k}} - \Phi_{21}^k(q_k l_k, q_k \xi)\mathrm{A}'_{\overline{1,2k}}], & j = k, \\ \dfrac{\prod\limits_{s=k}^{j-1} q_s h_{2_s}}{q_k \Delta^*(p)} [\Phi_{12}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k z)\Delta'_{\overline{1,2k-2}} - \Phi_{22}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k z)\Delta_{\overline{1,2k-2}}] \times & \\ \times [\Phi_{21}^j(q_j l_j, q_j \xi)\mathrm{A}'_{\overline{1,2j}} - \Phi_{11}^j(q_j l_j, q_j \xi)\mathrm{A}_{\overline{1,2j}}], & j = \overline{k+1, n}, \\ -\dfrac{\prod\limits_{s=k}^{n} q_s h_{2_s}}{q_k \Delta^*(p)} [\Phi_{22}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k z)\Delta_{\overline{1,2k-2}} - \Phi_{12}^{k-1}(q_k l_{k-1}, q_k z)\Delta'_{\overline{1,2k-2}}] e^{-q_{n+1}(\xi - l_n)}, & j = n+1; \end{cases}$$

$$\mathcal{H}^*_{n+1,\,j}(p,z,\xi)=\frac{1}{\Delta^*(p)}\times$$

$$\times\begin{cases} -\dfrac{\prod\limits_{s=1}^{n} h_{1_s} q_s}{q_1}\Phi^0_{12}(q_1 l_0, q_1\xi)e^{-q_{n+1}(z-l_n)}, & j=1,\\ \dfrac{\prod\limits_{s=j}^{n} h_{1_s} q_s}{q_j}[\Phi^{j-1}_{22}(q_j l_{j-1}, q_j\xi)\Delta_{\overline{1,2j-2}}-\Phi^{j-1}_{12}(q_j l_{j-1}, q_j\xi)\Delta'_{\overline{1,2j-2}}]\,e^{-q_{n+1}(z-l_n)}, & j=\overline{2,n},\\ -\dfrac{e^{-q_{n+1}(\xi-l_n)}}{q_{n+1}}[\Phi^n_{22}(q_{n+1}l_n, q_{n+1}z)\Delta_{\overline{1,2n}}-\Phi^n_{12}(q_{n+1}l_n, q_{n+1}z)\Delta'_{\overline{1,2n}}], & j=n+1. \end{cases} \quad (53)$$

Особливими точками головних розв'язків крайової задачі $W^*_{1_k}(p,z)$, $\mathcal{H}^*_{k,k_1}(p,z,\xi)$ є точки галуження $p=\infty$ та $p_{1,2}=-\frac{1}{2}[S_1\pm\sqrt{S_2}]<0$, де $S_1=\beta_k(1+$ $+\gamma_k)+\eta_k$, $S_2=(\eta_k-\beta_k\gamma_k)^2>0$. Тому в процесі переходу до оригіналів за Лапласом інтеграл по контуру Бромвіча можна замінити інтегралом по уявній осі [17, 20]:

$$W_{1_k}(t,z)=L^{-1}[W^*_{1_k}(p,z)]=\frac{1}{2\pi i}\int_{\sigma-i\infty}^{\sigma+i\infty}W^*_{1_k}(p,z)e^{pt}dp=\frac{1}{2\pi i}\int_{-i\infty}^{i\infty}W^*_{1_k}(p,z)\,e^{pt}dp=$$

$$=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}W^*_{1_k}(i\nu,z)e^{i\nu t}d\nu=\frac{1}{\pi}\int_0^{\infty}\mathrm{Re}[W^*_{1_k}(i\nu,z)\,e^{i\nu t}]\,d\nu\,, \quad (54)$$

$$\mathcal{H}^*_{k,k_1}(t,z,\xi)=L^{-1}[\mathcal{H}^*_{k,k_1}(p,z,\xi)]=\frac{1}{\pi}\int_0^{\infty}\mathrm{Re}[\mathcal{H}^*_{k,k_1}(i\nu,z,\xi)\,e^{i\nu t}]d\nu\,.$$

На підставі однозначної розв'язуваності алгебраїчної системи (49) з урахуванням одержаних головних розв'язків задачі (52), (53) та формул (45) і (54) отримуємо єдиний векторний розв'язок вихідної крайової задачі (37)–(41) у векторному вигляді

$$c_k(t,z)=\int_0^t W_{1_k}(t-\tau,z)\,\omega_1(t)\,d\tau+\sum_{k_1=1}^{n+1}\int_{l_{k_1-1}}^{l_{k_1}}\mathcal{H}_{k,k_1}(t-\tau,z,\xi)C_{0_{k_1}}(\xi)\,d\xi+$$

$$+\int_0^t\sum_{k_1=1}^{n+1}\int_{l_{k_1-1}}^{l_{k_1}}\frac{\beta_{k_1}\gamma_{k_1}}{D_{inter_{k_1}}}\mathcal{H}_{k,k_1}(t-\tau;z,\xi)\,e^{-\beta_{k_1}\gamma_{k_1}\tau}a_{0_{k_1}}(\xi)\,d\xi d\tau, \quad (55)$$

$$a_k(t,z)=\beta_k\int_0^t e^{-\beta_k\gamma_k(t-\tau)}c_k(\tau,z)\,d\tau+e^{-\beta_k\gamma_k t}a_{0_k}(z)\,. \quad (56)$$

Теорема 1 (про розв'язуваність). Якщо виконується умова однозначної розв'язуваності крайової задачі та шукані і задані функції є оригіналами за Лапласом, то розв'язок крайової задачі (37)–(41) існує, є єдиним і визначається формулами (55), (56).

4. МАТРИЧНІ АЛГОРИТМИ ОБЧИСЛЕННЯ ВИЗНАЧНИКА СИСТЕМИ ТА ГОЛОВНИХ РОЗВ'ЯЗКІВ ЗАДАЧІ

4.1. Схема алгоритму обчислення визначника системи $\Delta^*(p)$. Розклавши визначник системи за останнім $(2n+1)$-м стовпчиком, одержимо:

$$\Delta^*(p)=(\alpha^n_{22}q_{n+1}-\delta^n_{22})\Delta_{\overline{1,2n}}-(\alpha^n_{12}q_{n+1}-\delta^n_{12})\Delta'_{\overline{1,2n}}\,,$$

$$\Delta(i\nu)=\overline{\Delta}(\nu)+i\widetilde{\Delta}(\nu),$$

$$\overline{\Delta}(\nu)=((\alpha_{22}^{n}\varphi_{1_{n+1}}-\delta_{22}^{n})\overline{\Delta}_{\overline{1,2n}}-\varphi_{2_{n+1}}\widetilde{\Delta}_{\overline{1,2n}})-(\alpha_{12}^{n}\varphi_{1_{n+1}}-\delta_{12}^{n})\overline{\Delta}'_{\overline{1,2n}}-\varphi_{2_{n+1}}\widetilde{\Delta}'_{\overline{1,2n}})),$$

$$\widetilde{\Delta}(\nu)=((\varphi_{2_{n+1}}\overline{\Delta}_{\overline{1,2n}}+(\alpha_{22}^{n}\varphi_{1_{n+1}}-\delta_{22}^{n})\widetilde{\Delta}_{\overline{1,2n}})-(\varphi_{2_{n+1}}\overline{\Delta}'_{\overline{1,2n}}+(\alpha_{12}^{n}\varphi_{1_{n+1}}-\delta_{12}^{n})\widetilde{\Delta}'_{\overline{1,2n}})).$$

Тут

$$\Delta_{11}(q_k l_{k-1},q_k l_k)=V_{12}^{k-1,1}\cdot V_{11}^{k2}-V_{12}^{k-1,2}\cdot V_{11}^{k1},$$

$$\Delta_{22}(q_k l_{k-1},q_k l_k)=V_{22}^{k-1,1}\cdot V_{21}^{k2}-V_{22}^{k-1,2}\cdot V_{21}^{k1},$$

$$\Delta_{12}(q_k l_{k-1},q_k l_k)=V_{12}^{k-1,1}\cdot V_{21}^{k2}-V_{12}^{k-1,2}\cdot V_{21}^{k1},$$

$$\Delta_{21}(q_k l_{k-1},q_k l_k)=V_{22}^{k-1,1}\cdot V_{11}^{k2}-V_{22}^{k-1,2}\cdot V_{11}^{k1}.$$

4.2. Рекурсивна процедура обчислення визначників $\Delta_{\overline{1,2k}},\Delta'_{\overline{1,2k}}$. Покладемо

$$\Delta_{\overline{1,2}}=\begin{vmatrix}V_{12}^{01} & V_{11}^{11}\\ V_{12}^{02} & V_{11}^{12}\end{vmatrix}\equiv\Delta_{11}^{1}(q_1l_0,q_1l_1),\ \ \Delta'_{\overline{1,2}}=\begin{vmatrix}V_{12}^{01} & V_{21}^{11}\\ V_{12}^{02} & V_{21}^{12}\end{vmatrix}\equiv\Delta_{21}^{1}(q_1l_0,q_1l_1),$$

де

$$V_{ij}^{k1}(q_s(i\nu)l_k)=\overline{V}_{ij}^{k1}(\nu)+i\widetilde{V}_{ij}^{k1}(\nu),\ \ V_{ij}^{k2}(q_s(i\nu)l_k)=\overline{V}_{ij}^{k2}(\nu)+i\widetilde{V}_{ij}^{k2}(\nu),$$

$$\Delta_{\overline{1,2}}(i\nu)=\overline{\Delta}_{11}^{1}(\nu,l_0,l_1)-i\widetilde{\Delta}_{11}^{1}(\nu,l_0,l_1),\ \ \Delta'_{\overline{1,2}}(i\nu)=\overline{\Delta}_{21}^{1}(\nu,l_0,l_1)-i\widetilde{\Delta}_{21}^{1}(\nu,l_0,l_1),$$

$$\overline{\Delta}_{11}^{1}(\nu,l_0,l_1)=\overline{V}_{12}^{01}\overline{V}_{11}^{12}-\widetilde{V}_{12}^{01}\widetilde{V}_{11}^{12}-(\overline{V}_{12}^{02}\overline{V}_{11}^{11}-\widetilde{V}_{12}^{02}\widetilde{V}_{11}^{11}),$$

$$\widetilde{\Delta}_{11}^{1}(\nu,l_0,l_1)=\overline{V}_{12}^{01}\widetilde{V}_{11}^{12}+\widetilde{V}_{12}^{01}\overline{V}_{11}^{12}-(\overline{V}_{12}^{02}\widetilde{V}_{11}^{11}-\widetilde{V}_{12}^{02}\overline{V}_{11}^{11}).$$

Відповідно визначники $\Delta_{\overline{1,2k}}$ і $\Delta'_{\overline{1,2k}}$ обчислюють за формулами:

$$\Delta_{\overline{1,2k}}=\Delta_{11}^{k}(q_k l_{k-1},q_k l_k)\Delta'_{\overline{1,2k-2}}-\Delta_{21}^{k}(q_k l_{k-1},q_k l_k)\Delta_{\overline{1,2k-2}},$$

$$\Delta'_{\overline{1,2k}}=\Delta_{12}^{k}(q_k l_{k-1},q_k l_k)\Delta'_{\overline{1,2k-2}}-\Delta_{22}^{k}(q_k l_{k-1},q_k l_k)\Delta_{\overline{1,2k-2}},\ \ k=\overline{2,n}.$$

4.3. Рекурсивна процедура обчислення визначників $\mathrm{A}_{\overline{1,2j}},\mathrm{A}'_{\overline{1,2j}}$ (за аналогією обчислення визначників $\Delta_{\overline{1,2k}}$, $\Delta'_{\overline{1,2k}}$):

$$\mathrm{A}_{\overline{1,2n}}=\alpha_{22}^{n}q_{n+1}-\delta_{22}^{n},\ \ \mathrm{A}'_{\overline{1,2n}}=\alpha_{12}^{n}q_{n+1}-\delta_{12}^{n},$$

$$\mathrm{A}_{\overline{1,2n}}=\alpha_{22}^{n}(\varphi_{1_{n+1}}+i\varphi_{2_{n+1}})-\delta_{22}^{n}\equiv\overline{\mathrm{A}}_{\overline{1,2n}}+i\widetilde{\mathrm{A}}_{\overline{1,2n}},$$

$$\mathrm{A}'_{\overline{1,2n}}=\alpha_{12}^{n}(\varphi_{1_{n+1}}+i\varphi_{2_{n+1}})-\delta_{12}^{n}\equiv\overline{\mathrm{A}}'_{\overline{1,2n}}+i\widetilde{\mathrm{A}}'_{\overline{1,2n}}.$$

Відповідно визначники $\mathrm{A}_{\overline{1,2n-2}}$, $\mathrm{A}'_{\overline{1,2n-2}}$ обчислюють:

$$\mathrm{A}_{\overline{1,2n-2}}=\begin{vmatrix}-V_{22}^{n-1,1}(q_nl_{n-1}) & -V_{22}^{n-1,2}(q_nl_{n-1})\\ V_{11}^{n,1}(q_nl_n) & V_{11}^{n,2}(q_nl_n)\end{vmatrix}(\alpha_{22}^{n}q_{n+1}-\delta_{22}^{n})-$$

$$-\begin{vmatrix}-V_{22}^{n-1,1}(q_nl_{n-1}) & -V_{22}^{n-1,2}(q_nl_{n-1})\\ V_{21}^{n,1}(q_nl_n) & V_{21}^{n,2}(q_nl_n)\end{vmatrix}(\alpha_{12}^{n}q_{n+1}-\delta_{12}^{n}),$$

$$\mathrm{A}'_{\overline{1,2n-2}}=\begin{vmatrix}-V_{12}^{n-1,1}(q_nl_{n-1}) & -V_{12}^{n-1,2}(q_nl_{n-1})\\ V_{11}^{n,1}(q_nl_n) & V_{11}^{n,2}(q_nl_n)\end{vmatrix}(\alpha_{22}^{n}q_{n+1}-\beta_{22}^{n})-$$

$$-\begin{vmatrix}-V_{12}^{n-1,1}(q_nl_{n-1}) & -V_{12}^{n-1,2}(q_nl_{n-1})\\ V_{21}^{n,1}(q_nl_n) & V_{21}^{n,2}(q_nl_n)\end{vmatrix}(\alpha_{12}^{n}q_{n+1}-\delta_{12}^{n}).$$

Визначники $\mathrm{A}_{\overline{1,2k}}$, $\mathrm{A}'_{\overline{1,2k}}$ відповідно обчислюють:

$$\mathrm{A}_{\overline{1,2k}}=\Delta_{22}(q_{k+2}l_{k+1},q_{k+2}l_{k+2})\mathrm{A}'_{\overline{1,2k+2}}-\Delta_{21}(q_{k+2}l_{k+1},q_{k+2}l_{k+2})\mathrm{A}_{\overline{1,2k+2}},$$

$$\mathrm{A}'_{\overline{1,2k}}=\Delta_{12}(q_{k+2}l_{k+1},q_{k+2}l_{k+2})\mathrm{A}'_{\overline{1,2k+2}}-\Delta_{11}(q_{k+2}l_{k+1},q_{k+2}l_{k+2})\mathrm{A}_{\overline{1,2k+2}},\ k=\overline{2,n-2},$$

$$\mathrm{A}_{\overline{1,2k}}(i\nu)=\overline{\mathrm{A}}_{\overline{1,2k}}(\nu)+i\widetilde{\mathrm{A}}_{\overline{1,2k}}(\nu),$$

$$\overline{\mathrm{A}}_{\overline{1,2k}}(\nu)=\overline{\Delta}^k_{22}\overline{\mathrm{A}}'_{\overline{1,2k+2}}-\widetilde{\Delta}^k_{22}\widetilde{\mathrm{A}}'_{\overline{1,2k+2}}-(\overline{\Delta}^k_{21}\overline{\mathrm{A}}_{\overline{1,2k+2}}-\widetilde{\Delta}^k_{21}\widetilde{\mathrm{A}}_{\overline{1,2k+2}}),$$

$$\widetilde{\mathrm{A}}_{\overline{1,2k}}(\nu)=\overline{\Delta}^k_{22}\widetilde{\mathrm{A}}'_{\overline{1,2k+2}}+\widetilde{\Delta}^k_{22}\overline{\mathrm{A}}'_{\overline{1,2k+2}}-(\overline{\Delta}^k_{21}\widetilde{\mathrm{A}}_{\overline{1,2k+2}}+\widetilde{\Delta}^k_{21}\overline{\mathrm{A}}_{\overline{1,2k+2}}),$$

$$\mathrm{A}'_{\overline{1,2k}}(i\nu)=\overline{\mathrm{A}}'_{\overline{1,2k}}(\nu)+i\widetilde{\mathrm{A}}'_{\overline{1,2k}}(\nu),$$

$$\overline{\mathrm{A}}_{\overline{1,2k}}(\nu)=\overline{\Delta}^k_{12}\overline{\mathrm{A}}'_{\overline{1,2k+2}}-\widetilde{\Delta}^k_{12}\widetilde{\mathrm{A}}'_{\overline{1,2k+2}}-(\overline{\Delta}^k_{11}\overline{\mathrm{A}}_{\overline{1,2k+2}}-\widetilde{\Delta}^k_{11}\widetilde{\mathrm{A}}_{\overline{1,2k+2}}),$$

$$\widetilde{\mathrm{A}}_{\overline{1,2k}}(\nu)=\overline{\Delta}^k_{12}\widetilde{\mathrm{A}}'_{\overline{1,2k+2}}+\widetilde{\Delta}^k_{12}\overline{\mathrm{A}}'_{\overline{1,2k+2}}-(\overline{\Delta}^k_{11}\widetilde{\mathrm{A}}_{\overline{1,2k+2}}+\widetilde{\Delta}^k_{11}\overline{\mathrm{A}}_{\overline{1,2k+2}}).$$

4.4. Алгоритми обчислення компонентів матриці впливу $\mathcal{H}^*_{kj}(p,z,\xi)$.

Обчислення компонента $\mathcal{H}^*_{11}(p,z,\xi)$. Розкривши визначник $\Delta^*(p)$ за першими двома стовпчиками та з урахуванням співвідношень

$$h_{1_1}q_1=\begin{vmatrix}V^{11}_{11}(q_1l_1) & V^{12}_{11}(q_1l_1)\\ V^{11}_{21}(q_1l_1) & V^{12}_{21}(q_1l_1)\end{vmatrix},\ [h_{1_1}q_1\Phi^0_{12}(q_1l_0,q_1\xi)\mathrm{A}'_{\overline{1,2}}-\Delta^*(p)\Phi^1_{11}(q_1l_1,q_1\xi)]=$$
$$=\Delta_{11}(q_1l_0,q_1l_1)[\Phi^1_{11}(q_1l_1,q_1\xi)\mathrm{A}_{\overline{1,2}}-\Phi^1_{21}(q_1l_1,q_1\xi)\mathrm{A}'_{\overline{1,2}}],$$

отримаємо

$$H_{11}(i\nu,z,\xi)=-\frac{1}{(\varphi_{1_k}+i\varphi_{2_k})(\overline{\Delta}(\nu)-i\widetilde{\Delta}(\nu))}\Phi^0_{12}(q_1l_0,q_1z)\times$$
$$\times[\Phi^1_{11}(q_1l_1,q_1\xi)\mathrm{A}_{\overline{1,2}}-\Phi^1_{21}(q_1l_1,q_1\xi)\mathrm{A}'_{\overline{1,2}}].$$

Після перетворення отримуємо оригінал

$$H_{11}(\nu,z,\xi)\equiv\mathrm{Re}(H^*_{11}(i\nu,z,\xi))=$$
$$(((\varphi_{1_k}(\nu)\overline{\Delta}(\nu)-\varphi_{2_k}(\nu)\widetilde{\Delta}(\nu))\overline{\Phi}^0_{12}(\nu,l_k,z)-(\varphi_{1_k}(\nu)\widetilde{\Delta}(\nu)+\varphi_{2_k}(\nu)\overline{\Delta}(\nu))\widetilde{\Phi}^0_{12}(\nu,l_k,z))\times$$
$$\times(\overline{\Phi}^1_{11}(\nu,l_k,\xi)\overline{\mathrm{A}}_{\overline{1,2}}-\widetilde{\Phi}^1_{11}(\nu,l_k,\xi)\widetilde{\mathrm{A}}_{\overline{1,2}}+\overline{\Phi}^1_{21}(\nu,l_k,\xi)\overline{\mathrm{A}}'_{\overline{1,2}}-\widetilde{\Phi}^1_{21}(\nu,l_k,\xi)\widetilde{\mathrm{A}}'_{\overline{1,2}})-$$
$$-((\varphi_{1_k}(\nu)\overline{\Delta}(\nu)-\varphi_{2_k}(\nu)\widetilde{\Delta}(\nu))\widetilde{\Phi}^0_{12}(\nu,l_k,z)+(\varphi_{1_k}(\nu)\widetilde{\Delta}(\nu)+\varphi_{2_k}(\nu)\overline{\Delta}(\nu))\overline{\Phi}^0_{12}(\nu,l_k,z))\times$$
$$\times(\overline{\Phi}^1_{11}(\nu,l_k,\xi)\widetilde{\mathrm{A}}_{\overline{1,2}}+\widetilde{\Phi}^2_{11}(\nu,l_k,\xi)\overline{\mathrm{A}}_{\overline{1,2}}+\overline{\Phi}^1_{21}(\nu,l_k,\xi)\widetilde{\mathrm{A}}'_{\overline{1,2}}+\widetilde{\Phi}^1_{21}(\nu,l_k,\xi)\overline{\mathrm{A}}'_{\overline{1,2}}))\times$$
$$\times((\varphi^2_{1_k}(\nu)-\varphi^2_{2_k}(\nu))(\overline{\Delta}^2(\nu)-\widetilde{\Delta}^2(\nu)))^{-1}.$$

Обчислення компонентів $\mathcal{H}^*_{1j}(p,z,\xi)$, $j=\overline{2,n}$. Використовуючи умови

$$\Phi^j_{11}(q_jl_j,q_j\xi)h_{2_j}\mathrm{A}'_{\overline{1,2j-2}}-\Phi^{j-1}_{12}(q_jl_{j-1},q_j\xi)q_jh_{2_{j-1}}\mathrm{A}'_{\overline{1,2j}}h_{1_j}=$$
$$=h_{2_{j-1}}\Delta_{11}(q_jl_{j-1},q_jl_j)[\Phi^j_{21}(q_jl_j,q_j\xi)\mathrm{A}'_{\overline{1,2j}}-\Phi^j_{11}(q_jl_j,q_j\xi)\mathrm{A}_{\overline{1,2j}}],\quad(57)$$

отримуємо

$$\mathcal{H}^*_{1j}(p,z,\xi)=\frac{\prod_{s=1}^{j-1}q_sh_{2_s}}{q_1\Delta^*(p)}[\Phi^j_{21}(q_jl_j,q_j\xi)\mathrm{A}'_{\overline{1,2j}}-\Phi^j_{11}(q_jl_j,q_j\xi)\mathrm{A}_{\overline{1,2j}}].$$

Обчислення компонентів $\mathcal{H}^*_{kj}(p,z,\xi)$, $k=\overline{2,n}$, $j=\overline{2,k-1}$. Враховуючи розклад $\Delta_{\overline{1,2j}}=\Delta_{11}[\Phi_{22}^{j-1}(q_j l_{j-1},q_j\xi)\Delta_{\overline{1,2j-2}}-\Phi_{12}^{j-1}(q_j l_{j-1},q_j\xi)\Delta'_{\overline{1,2j-2}}]$ та умову (57), отримуємо

$$\mathcal{H}^*_{kj}(p,z,\xi)=\frac{\prod\limits_{s=j}^{k-1}q_s h_{1_s}}{q_j\Delta^*(p)}[\Phi_{11}^k(q_k l_k,q_k z)\mathrm{A}_{\overline{1,2k}}-\Phi_{21}^k(q_k l_k,q_k z)\mathrm{A}'_{\overline{1,2k}}]\times$$

$$\times[\Phi_{22}^{j-1}(q_j l_j,q_j\xi)\Delta_{\overline{1,2j-2}}-\Phi_{12}^{j-1}(q_j l_{j-1},q_j\xi)\Delta'_{\overline{1,2j-2}}],\ \ j=\overline{2,k-1}.$$

Обчислення компонентів $\mathcal{H}^*_{kj}(p,z,\xi)$, $k=\overline{2,n}$, $j=\overline{k+1,n}$. З урахуванням розкладів

$$\mathrm{A}_{\overline{1,2j-2}}=\begin{vmatrix}V_{12}^{j-1,1} & V_{12}^{j-1,2}\\ V_{21}^{j1} & V_{21}^{j2}\end{vmatrix}\mathrm{A}'_{\overline{1,2j}}-\Delta_{11}(q_j l_{j-1},q_j l_j)\mathrm{A}_{\overline{1,2j}},$$

$$[h_{2_{j-1}}\Phi_{11}^j(q_j l_j,q_j\xi)\mathrm{A}_{\overline{1,2j-2}}-h_{1_j}h_{2_{j-1}}q_j\Phi_{12}^{j-1}(q_j l_j,q_j\xi)\mathrm{A}'_{\overline{1,2j}}]=$$
$$=h_{2_{j-1}}\Delta_{11}[\Phi_{21}^j(q_j l_j,q_j\xi)\mathrm{A}'_{\overline{1,2j}}-\Phi_{11}^j(q_j l_j,q_j\xi)\mathrm{A}_{\overline{1,2j}}]$$

одержуємо

$$\mathcal{H}^*_{\substack{kj\\ j=\overline{k+1,n}}}(p,z,\xi)=\frac{\prod\limits_{s=k}^{j-1}q_s h_{2_s}}{q_k\Delta^*(p)}[\Phi_{12}^{k-1}(q_k l_{k-1},q_k z)\Delta'_{\overline{1,2k-2}}-\Phi_{22}^{k-1}(q_k l_{k-1},q_k z)\Delta_{\overline{1,2k-2}}]\times$$

$$\times[\Phi_{21}^j(q_j l_j,q_j\xi)\mathrm{A}'_{\overline{1,2j}}-\Phi_{11}^j(q_j l_j,q_j\xi)\mathrm{A}_{\overline{1,2j}}].$$

Обчислення компонентів $\mathcal{H}^*_{kk}(p,z,\xi)$, $k=\overline{2,n}$. Розкривши визначник $\Delta^*(p)$ за $(2k-1)$-м і $2k$-м стовпчиками та врахувавши вирази

$$[q_k h_{2_{k-1}}\Phi_{11}^k(q_k l_k,q_k z)+\Delta_{21}(q_k l_{k-1},q_k l_k)\Phi_{12}^{k-1}(q_k l_{k-1}q_k z)]=$$
$$=\Delta_{11}(q_k l_{k-1},q_k l_k)\Phi_{22}^{k-1}(q_k l_{k-1}q_k z),$$

$$[q_k h_{2_{k-1}}\Phi_{21}^k(q_k l_k,q_k z)+\Delta_{22}(q_k l_{k-1},q_k l_k)\Phi_{12}^{k-1}(q_k l_{k-1},q_k z)]=$$
$$=\Phi_{22}^{k-1}(q_k l_{k-1},q_k\xi)\begin{vmatrix}V_{12}^{k-1,1} & V_{12}^{k-1,2}\\ V_{21}^{k1} & V_{21}^{k2}\end{vmatrix},$$

$$[q_k h_{1_k}\Phi_{12}^{k-1}(q_k l_{k-1},q_k\xi)-\Phi_{11}^k(q_k l_k,q_k\xi)_{12}^{k-1,1}]\begin{vmatrix}V_{12}^{k-1,1}(q_k l_{k-1}) & V_{12}^{k-1,2}(q_k l_{k-1})\\ V_{21}^{k1}(q_k l_k) & V_{21}^{k2}(q_k l_k)\end{vmatrix}\times$$
$$\times\Phi_{22}^{k-1}(q_k l_{k-1},q_k z)\Delta_{\overline{1,2k-2}}\mathrm{A}'_{\overline{1,2k}}=$$
$$=-\Delta_{11}(q_k l_{k-1},q_k l_k)\Phi_{21}^k(q_k l_k,q_k\xi)\Phi_{22}^{k-1}(q_k l_{k-1},q_k z)\Delta_{\overline{1,2k-2}}\mathrm{A}'_{\overline{1,2k}},$$

$$[\Delta_{12}(q_k l_{k-1},q_k l_k)\Phi_{11}^k(q_k l_k,q_k\xi)-q_k h_{1_k}\Phi_{12}^{k-1}(q_k l_{k-1},q_k\xi)]\times$$
$$\times\Phi_{12}^{k-1}(q_k l_{k-1},q_k z)\Delta'_{\overline{1,2k-2}}\mathrm{A}'_{\overline{1,2k}}=$$
$$=\Delta_{11}(q_k l_{k-1},q_k l_k)\Phi_{21}^k(q_k l_k,q_k\xi)\Phi_{12}^{k-1}(q_k l_{k-1},q_k z)\Delta'_{\overline{1,2k-2}}\mathrm{A}'_{\overline{1,2k}},$$

отримаємо

$$\mathcal{H}^*_{kk}(p,z,\xi)=\frac{1}{q_k\Delta^*(p)}[\Phi^{k-1}_{22}(q_k l_{k-1},q_k z)\Delta_{\overline{1,2k-2}}-\Phi^{k-1}_{12}(q_k l_{k-1},q_k z)\Delta'_{\overline{1,2k-2}}]\times$$

$$\times[\Phi^k_{11}(q_k l_k,q_k\xi)\,\mathrm{A}_{\overline{1,2k}}-\Phi^k_{21}(q_k l_k,q_k\xi)\mathrm{A}'_{\overline{1,2k}}].$$

Обчислення компонентів $\boldsymbol{\mathcal{H}^*_{n+1,j}(p,z,\xi)}$, $\boldsymbol{j=\overline{2,n}}$. Враховуючи розклад $\Delta_{\overline{1,2j}}=\Delta_{11}(q_j l_{j-1},q_j l_j)\Delta'_{\overline{1,2j-2}}-\Delta_{21}(q_j l_{j-1},q_j l_j)\Delta_{\overline{1,2j-2}}$ та рівність

$$[h_{2_{j-1}}q_j\Phi^j_{11}(q_j l_j,q_j\xi)-\Delta_{21}(q_j l_{j-1},q_j l_j)\Phi^{j-1}_{12}(q_j l_{j-1},q_j\xi)]=$$

$$=\Phi^{j-1}_{22}(q_j l_{j-1},q_j\xi)\Delta_{11}(q_j l_{j-1},q_j l_j),$$

отримуємо

$$\mathcal{H}^*_{n+1,j}(p,z,\xi)=\frac{\prod_{s=j}^{n}h_{1_s}q_s}{q_j\Delta^*(p)}e^{-q_{n+1}(z-l_n)}\times$$

$$\times[\Phi^{j-1}_{22}(q_j l_{j-1},q_j\xi)\Delta_{\overline{1,2j-2}}-\Phi^{j-1}_{12}(q_j l_{j-1},q_j\xi)\Delta'_{\overline{1,2j-2}}],\ \ j=\overline{2,n}.$$

Обчислення компонентів $\boldsymbol{\mathcal{H}^*_{n+1,n+1}(p,z,\xi)}$. Враховуючи розклад $\Delta^*(p)=$ $=(\alpha^n_{22}q_{n+1}-\delta^n_{22})\Delta_{\overline{1,2n}}-(\alpha^n_{12}q_{n+1}-\delta^n_{12})\Delta'_{\overline{1,2n}}$ та рівність

$$V^{n2}_{22}(q_{n+1}l_n)-V^{n1}_{22}(q_{n+1}l_n)=-\frac{e^{-q_{n+1}(\xi-l_n)}}{\alpha^n_{22}q_{n+1}-\delta^n_{22}},$$

отримуємо

$$\mathcal{H}^*_{n+1,n+1}(p,z,\xi)=-\frac{1}{q_{n+1}\Delta^*(p)}e^{-q_{n+1}(\xi-l_n)}\times$$

$$\times[\Phi^n_{22}(q_{n+1}l_n,q_{n+1}z)\Delta_{\overline{1,2n}}-\Phi^n_{12}(q_{n+1}l_n,q_{n+1}z)\Delta'_{\overline{1,2n}}].$$

Перехід до оригіналів за Лапласом в обчислених компонентах матриці впливу здійснюється аналогічно схемі обчислення оригіналу компонента $\mathcal{H}^*_{11}(p,z,\xi)$.

У розд. 4 використано такі позначення: $\mathrm{A}_{\overline{1,2k}}$ — визначник, утворений з визначника системи $\Delta^*(p)$ вилученням перших $2k$ рядків і стовпчиків (з номерами $\overline{1,2k}$, $k=\overline{1,n}$); $\mathrm{A}'_{\overline{1,2k}}$ — визначник, утворений з визначника системи $\Delta^*(p)$ вилученням перших $2k+1$ рядків, окрім $2k$-го (з номерами $\overline{1,2k-1,2k+1}$; $k=\overline{1,n}$), і перших $2k$ стовпчиків (з номерами $\overline{1,2k}$, $k=\overline{1,n}$); $\Delta_{\overline{1,2k}}$ — визначник, утворений з перших $2k$ рядків і стовпчиків (з номерами $\overline{1,2k}$, $k=\overline{1,n}$) визначника системи $\Delta^*(p)$; $\Delta'_{\overline{1,2k}}$ — визначник, утворений з перших $2k+1$ рядків, окрім $2k$-го (з номерами $\overline{1,2k-1,2k+1}$, $k=\overline{1,n}$) і перших $2k$ стовпчиків (з номерами $\overline{1,2k}$, $k=\overline{1,n}$) визначника системи $\Delta^*(p)$;

$$V^{k1}_{ij}(q_s(i\nu)l_k)=\overline{V}^{k1}_{ij}(\nu)+i\widetilde{V}^{k1}_{ij}(\nu),\ V^{k2}_{ij}(q_s(i\nu)l_k)=\overline{V}^{k2}_{ij}(\nu)+i\widetilde{V}^{k2}_{ij}(\nu),$$

$$\overline{V}^{k1}_{ij}(\nu)=\alpha^k_{ij}(\varphi_{1_s}\sin(\Gamma_{1_s}l_k)\cos(\Gamma_{2_s}l_k)-\varphi_{2_s}\cos(\Gamma_{1_s}l_k)\sin(\Gamma_{2_s}l_k))+$$

$$+\delta^k_{ij}\cos(\Gamma_{1_s}l_k)\sin(\Gamma_{2_s}l_k),$$

$$\widetilde{V}^{k1}_{ij}(\nu)=\alpha^k_{ij}\varphi_{1_s}\sin(\Gamma_{1_s}l_k)\cos(\Gamma_{2_s}l_k)+\delta^k_{ij}\sin(\Gamma_{1_s}l_k)\sin(\Gamma_{2_s}l_k),$$

$$\overline{V}_{ij}^{k2}(\nu)=\alpha_{ij}^{k}(\varphi_{1_s}\cos(\Gamma_{1_s}l_k)\cos(\Gamma_{2_s}l_k)-\varphi_{2_s}\sin(\Gamma_{1_s}l_k)\sin(\Gamma_{2_s}l_k))+$$
$$+\delta_{ij}^{k}\cos(\Gamma_{1_s}l_k)\sin(\Gamma_{2_s}l_k),$$
$$\widetilde{V}_{ij}^{k2}(\nu)=\alpha_{ij}^{k}\varphi_{1_s}\cos(\Gamma_{1_s}l_k)\cos(\Gamma_{2_s}l_k)+\delta_{ij}^{k}\cos(\Gamma_{1_s}l_k)\sin(\Gamma_{2_s}l_k),$$
$$\operatorname{ch}(q_k(i\nu)z)\equiv\operatorname{ch}(\Gamma_{1_k}(\nu)z+i\Gamma_{2_k}(\nu)z)=$$
$$=\cos(\Gamma_{1_k}(\nu)z)\cos(\Gamma_{2_k}(\nu)z)+i\sin(\Gamma_{1_k}(\nu)z)\sin(\Gamma_{2_k}(\nu)z),$$
$$\operatorname{sh}(q_k(i\nu)z)=\sin(\Gamma_{1_k}(\nu)z)\cos(\Gamma_{2_k}(\nu)z)+i\cos(\Gamma_{1_k}(\nu)z)\sin(\Gamma_{2_k}(\nu)z),$$
$$q_k(i\nu)=\varphi_{1_k}(\nu)+i\varphi_{2_k}(\nu),\;\; q_k^2(i\nu)=\Gamma_{1_k}(\nu)+i\Gamma_{2_k}(\nu),$$
$$\varphi_{1_k}(\nu)=\left[\frac{(\Gamma_{1_k}^2(\nu)+\Gamma_{2_k}^2(\nu))+\Gamma_{1_k}(\nu)}{2}\right]^{1/2},\;\;\varphi_{2_k}(\nu)=\left[\frac{(\Gamma_{1_k}^2(\nu)+\Gamma_{2_k}^2(\nu))^{1/2}-\Gamma_{1_k}(\nu)}{2}\right]^{1/2},$$
$$\Gamma_{1_k}(\nu)=\frac{\nu^2\beta_k^2(\gamma_k\eta_k+1)}{D_{inter_k}(\beta_k^2\gamma_k^2+\nu^2)},\;\;\Gamma_{2_k}(\nu)=\frac{\nu(\nu^2+\beta_k^2\gamma_k+\beta_k^2\gamma_k^2(\eta_k+1))}{D_{inter_k}(\beta_k^2\gamma_k^2+\nu^2)},$$
$$q_k^m(i\nu)=(\varphi_{1_k}(\nu)+\varphi_{2_k}(\nu))^{n/2}(\cos n\psi_k+i\sin n\psi_k)=\Upsilon_{1_k}(\nu)+i\Upsilon_{2_k}(\nu),$$
$$\Upsilon_{1_k}(\nu)=(\varphi_{1_k}(\nu)+\varphi_{2_k}(\nu))^{n/2}\cos n\psi_k,\;\;\Upsilon_{2_k}(\nu)=(\varphi_{1_k}(\nu)+\varphi_{2_k}(\nu))^{n/2}\sin n\psi_k,$$
$$\psi_k=\arg(q_k(i\nu))=\operatorname{arctg}\left(\frac{\varphi_{2_k}}{\varphi_{1_k}}\right),\;\;\varphi_{1_k}>0,\;\;\varphi_{2_k}>0,$$
$$q_k^m(i\nu)=(\varphi_{1_k}(\nu)+\varphi_{2_k}(\nu))^{n/2}(\cos n\psi_k+i\sin n\psi_k),$$
$$\Phi_{ij}^{k}(q_s(i\nu)l_k,z)=\overline{\Phi}_{ij}^{k}(\nu,l_k,z)+i\widetilde{\Phi}_{ij}^{k}(\nu,l_k,z),$$
$$\overline{\Phi}_{ij}^{k}(\nu,l_k,z)=\mathrm{A}_{ij}^{k2}(\nu)\cos(\Gamma_{1_k}(\nu)z)\cos(\Gamma_{2_k}(\nu)z)-\mathrm{B}_{ij}^{k2}(\nu)\sin(\Gamma_{1_k}(\nu)z)\sin(\Gamma_{2_k}(\nu)z)-$$
$$-\mathrm{A}_{ij}^{k1}(\nu)\sin(\Gamma_{1_k}(\nu)z)\cos(\Gamma_{2_k}(\nu)z)-\mathrm{B}_{ij}^{k1}(\nu)\cos(\Gamma_{1_k}(\nu)z)\sin(\Gamma_{2_k}(\nu)z),$$
$$\widetilde{\Phi}_{ij}^{k}(\nu,l_k,z)=\mathrm{B}_{ij}^{k2}(\nu)\cos(\Gamma_{1_k}(\nu)z)\cos(\Gamma_{2_k}(\nu)z)-\mathrm{A}_{ij}^{k2}(\nu)\sin(\Gamma_{1_k}(\nu)z)\sin(\Gamma_{2_k}(\nu)z)-$$
$$-\mathrm{B}_{ij}^{k1}(\nu)\sin(\Gamma_{1_k}(\nu)z)\cos(\Gamma_{2_k}(\nu)z)+\mathrm{A}_{ij}^{k1}(\nu)\cos(\Gamma_{1_k}(\nu)z)\sin(\Gamma_{2_k}(\nu)z).$$

ВИСНОВКИ

Розроблено високопродуктивні методи і обчислювальні технології моделювання адсорбції газів у неоднорідних багатокомпонентних нанопористих середовищах зі зворотними впливами для класів нелінійних ізотерм адсорбції типу Ленґмюра. Обґрунтовано і розвинуто підходи побудови узагальнених нелінійних рівнянь рівноваги адсорбції Ленґмюра. Реалізовано ефективні схеми розпаралелювання та декомпозиції нелінійних моделей. Запропоновані математичні моделі адсорбції в напівобмеженому неоднорідному нанопористому середовищі і отриманий аналітичний розв'язок в узагальненому вигляді описують впливи неоднорідностей, спричинених розподіленими складовими початкових та граничних концентрацій адсорбтиву у газовій фазі та нанопорах на кожен окремий шар середовища. Побудовано високошвидкісні аналітичні розв'язки математичних моделей з використанням операційного методу Гевісайда та реалізації рекурентних алгоритмів побудови матриць впливу Коші, що забезпечує ефективне розпаралелювання обчислювальних процесів для багатоядерних комп'ютерів та підвищення швидкодії 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. Barrer R.M. Diffusion and flow in porous zeolite, carbon or ceramic media, characterization of porous solids. London: Society of Chemical Industry, 1979. https://doi.org/10.1016/S0167 -2991(09)60728-X.
3. De Boor R. Contemporary progress in porous theory. *Apl. Mech. Rev*. 2000. Vol. 53, Iss. 12. P. 323–369. https://doi.org/10.1115/1.3097333.
4. Krisnha R., Van Baten J.M. Investigating the non-idealities in adsorption of CO_2 -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.
5. Krishna R. Thermodynamically consistent methodology for estimation of diffusivities of mixtures of guest molecules in microporous materials. *ACS Omega*. 2019. Vol .4, Iss. 8. P. 13520–13529. https://doi.org/10.1021/acsomega.9b01873.
6. Kärger J., Ruthven D. Diffusion in zeolites and other microporous solids. New York: Wiley & Sons, 1992.
7. Kärger J., Ruthven D., Theodorou D. Diffusion in nanoporous materials. Hoboken: Wiley, 2012. 902 p.
8. Langmuir I. Vapor pressures evaporation, condensation and adsorption. *J. Am. Chem. Soc*. 1932. Vol 54. P. 2798–2832. DOI: 10.1021/ja01346a022.
9. Lecler S., Petryk M., Canet D., Fraissard J. Competitive diffusion of gases in a zeolite using proton NMR and slice selection procedure. *Catalysis Today. 2*012. Vol. 187, N 1. P. 104–107. https://doi.org/10.1016/j.cattod.2011.09.007.
10. 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(3). P. 234–240. https://doi.org/10.1016/j.cattod.2008.05.034.
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(47). P. 26519–26525. https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.5b07974.
12. Sergienko I.V., Peryk M.R., Leclerk S., Fraissard J. Highly efficient methods of the identification of competitive diffusion parameters in heterogeneous media of nanoporous particles. *Cybernetics and Systems Analysi*s. 2015. Vol. 51, N 4. P. 529–546. https://doi.org/10.1007/s10559-015-9744-7.
13. Petryk M.R., Boyko I.V., Khimich O.M., Petryk M.M. High-performance supercomputer technologies of simulation of nanoporous feedback systems for adsorption gas purification. *Cybernetics and Systems Analysis.* 2020. Vol. 56, N 5. P. 835–847. https://doi.org/10.1007/s10559-020-00304-y.
14. 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: IntecOpenn, 2020 P. 13–31. https://doi.org/10.5772/intechopen.88138.
15. 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 високопродуктивних обчислень. Київ: Вид-во НАН України, 2019. 190 с.

16. Petryk M., 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.

17. 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, Iss. 10. P. 18–33. https://doi.org/10.1615/JAutomatInfScien.v50.i10.20.

18. Doetsch G. Handbuch der Laplace-transformation: Band I: Theorie der Laplace-transformation. Basel: Springer, 2013. 581 p.

19. Ленюк М.П., Петрик М.Р. Інтегральні перетворення Фур'є, Бесселя із спектральним параметром в задачах математичного моделювання масопереносу в неоднорідних середовищах. Київ: Наук. думка, 2000. 372 с.

20. Petryk M., Gancarczyk T., Khimich O. Methods of mathematical modeling and identification of complex processes and systems on the basis of high-performance calculations (neuro- and nanoporous feedback cyber systems, models with sparse structure data, parallel computations). Bielsko-Biala, Poland: Scientific Publishing University of Bielsko-Biala (Wydawnictwo Naukowe Akademia Techniczno-Humanistyczna), 2021. 194 p. https://www.sbc.org.pl/dlibra/publication/584139/edition/549297.

M.R. Petryk, I.V. Boyko, O.M. Khimich, O.Yu. Petryk

HIGHLY PRODUCTIVE METHODS TO MODEL THE ADSORPTION WITH FEEDBACK IN HETEROGENEOUS MULTICOMPONENT NANOPOROUS MEDIA

Abstract. New high-performance analytical methods for modeling diffuse gas concentration fields in intra- and interparticle spaces in heterogeneous n-component nanoporous media using the Heaviside operational method and Cauchy influence matrices for heterogeneous adsorption boundary-value problems for systems of partial differential equations with feedback have been developed.

Keywords: adsorption and diffusion of gases, mathematical modeling, Langmuir equilibrium condition, Heaviside operational method, Cauchy influence matrices, heterogeneous nanoporous media.

Надійшла до редакції 15.05.2022