ISSN 2312-9794

Editor-in-Chief Yuriy Bobalo

Mathematical Modeling and Computing

Математичне моделювання та інформаційні технології

Volume 5 • Number 2



Founder and Publisher Lviv Polytechnic National University CMM IAPMM NASU 2 0 1 8



Mathematical Modeling and Computing

Volume 5 • Number 2

2 0 1 8

Editorial Board

Editor-in-Chief: Prof. **Yuriy Bobalo**, Lviv Polytechnic National University, Ukraine *Executive Secretary:* PhD. **Adrian Torskyy**, Centre of Mathematical Modelling of IAPMM NASU, Ukraine

Prof. Viktor Berbyuk, Sweden Prof. Rostyslav Bun, Ukraine Prof. Carlo Cattani, Italy Prof. Yevhen Chaplya, Poland Prof. Vasyl Chekurin, Ukraine Prof. Olha Chernukha, Ukraine Prof. Mieczyslaw Cieszko, Poland DSc. Bogdan Drobenko, Ukraine Prof. Anatoly Dzyuba, Ukraine Prof. Bogdan Gera, Ukraine Prof. Oleksandr Hachkevych, Ukraine Prof. Igor Javors'kyj, Ukraine Prof. Mariusz Kaczmarek, Poland Prof. Petro Kalenyuk, Ukraine Prof. Petro Kostrobij, Ukraine (Associate Editor) Prof. Myroslav Kutniv, Poland Prof. Oleg Limarchenko, Ukraine Prof. Bogdan Lukiyanets, Ukraine Prof. Leonid Lyubchyk, Ukraine Prof. Petro Malachivskyy, Ukraine PhD. Bogdan Markovych, Ukraine (Science Editor) Prof. Oleg Mashkov, Ukraine Prof. Mykola Medykovskyy, Ukraine Prof. Roman Musii, Ukraine Prof. Viktor Mykhaskiv, Ukraine Prof. Taras Nahirnyj, Poland Prof. Oleksandr Nakonechnyi, Ukraine Prof. Andriy Peleshchyshyn, Ukraine DSc. Volodymyr Pelykh, Ukraine Prof. Valery Pilipchuk, USA Prof. Yuriy Povstenko, Poland DSc. Yaroslav Pyanylo, Ukraine (Associate Editor) Prof. Michele La Rocca, Italy Prof. Yarema Savula, Ukraine Prof. Yaroslav Sokolovskyy, Ukraine Prof. Alois Steindl, Austria Prof. Imre Timar, Hungary Prof. Mykhailo Tokarchuk, Ukraine Prof. Anatoly Vlasyuk, Ukraine DSc. Roman Yuzefovych, Ukraine Prof. Liubov Zhuravchak, Ukraine

Founder and Publisher Lviv Polytechnic National University Centre of Mathematical Modelling of IAPMM named

after Ya. S. Pidstryhach Ukrainian National Academy of Sciences Address for contacts:

Lviv Polytechnic National University 12, S. Bandera Str., Lviv, 79013, Ukraine e-mail: mmc@lpnu.ua Centre of Mathematical Modelling of IAPMM named

after Ya. S. Pidstryhach Ukrainian National Academy of Sciences 15, Dudayev Str., Lviv, 79005, Ukraine e-mail: pjanylo@cmm.lviv.ua

Lviv Polytechnic Publishing House

4, F. Kolessa Str., Lviv, 79013, Ukraine Tel.: +38 032 258 2242 vlp@vlp.com.ua; http://vlp.com.ua

Printing Center of Lviv Polytechnic Publishing House 4, F. Kolessa Str., Lviv, 79013, Ukraine Tel.: +38 032 258 2242

© Lviv Polytechnic National University, 2018 © CMM IAPMM NASU, 2018

•

Науково-технічний журнал "Математичне моделювання та інформаційні технології" №2 (10) • 2018

Виходить двічі на рік з 2014 року.

Засновник і видавець Національний університет "Львівська політехніка" Центр математичного моделювання Інституту прикладних проблем механіки і математики ім. Я. С. Підстригача НАН України

Контактна адреса:

Національний університет "Львівська політехніка" вул. С. Бандери, 12, Львів, 79013, Україна e-mail: mmc@lpnu.ua

Центр математичного моделювання Інституту прикладних проблем механіки і математики ім. Я. С. Підстригача НАН України вул. Дж. Дудаєва, 15, Львів, 79005, Україна e-mail: pjanylo@cmm.lviv.ua

Мова видання англійська.

Рекомендувала Вчена рада Національного університету "Львівська політехніка" (протокол № 41 від 26.02.2018 р.)

© Національний університет "Львівська політехніка", 2018 © ЦММ ІППММ НАНУ, 2018

•

ISSN 2312-9794

CONTENTS

99 Rovenchak A., Trokhymchuk A. From Brownian motion to molecular simulations

108 Bomba A., Safonyk A., Voloshchuk V.

Spatial modeling of multicomponent pollution removal for liquid treatment under identification of mass transfer coefficient

119 Chekurin V., Postolaki L.

Residual stresses in a finite cylinder. Direct and inverse problems and their solving using the variational method of homogeneous solutions

134 Hachkevych O., Hachkevych M., Torskyy A., Dmytruk V.

Mathematical model of optimization of annealing regimes by the stress state for heat-sensitive glass elements of structures

147 Klapchuk M., Grygorchak I.

The effect of additional off-diagonal disorder of interionic interaction on charge-storage in sub-nanometer pores of supramolecular carbon supercapacitors

158 Kostrobij P., Ryzha I., Markovych B.

Mathematical model of carbon monoxide oxidation: influence of the catalyst surface structure

169 Labay V., Dovbush O., Yaroslav V., Klymenko H.

Mathematical modeling of a split-conditioner operation for evaluation of exergy efficiency of the R600A refrigerant application

178 Limarchenko O., Nefedov A.

Resonant modes of the motion of a cylindrical reservoir on a movable pendulum suspension with a free-surface liquid

184 Markovych B.

Investigation of effective potential of electron-ion interaction in semibounded metal

193 Musii R., Melnyk N., Dmytruk V.

Investigation of properties of contact connector of bimetallic hollow cylinder under the influence of electromagnetic pulse

201 Pelykh V., Taistra Y.

On the null one-way solution to Maxwell equations in the Kerr space-time

207 Raskin L., Sira O., Sagaydachny D.

Multi-criteria optimization in terms of fuzzy criteria definitions

221 Shopa T.

Vibration of orthotropic doubly curved panel with a set of inclusions of arbitrary configuration with different types of connections with the panel

235 Stasyuk I., Stetsiv R., Farenyuk O.

Low-frequency dynamics of 1d quantum lattice gas: the case of local potential with double wells

242 Vdovych A., Zachek I., Levitskii R.

Calculation of transverse piezoelectric characteristics of quasi-one-dimensional glycine phosphite ferroelectric