

[0000-0002-8342-3011] **О. О. Онищук**, канд. техн. наук, доцент
e-mail: oksanaduda2013@gmail.com

Волинський національний університет імені Лесі Українки
Потапова, 9, м. Луцьк, 43000, Україна

ОПТИМІЗОВАНИЙ РОЗРАХУНОК АДСОРБЦІЙНОГО ПРОЦЕСУ ЧЕРЕЗ НАСАДКОВИЙ АДСОРБЕР МЕТОДОМ КОМІРКОВОЇ МОДЕЛІ

В статті показано оптимізовану модель адсорбції через насадковий адсорбер в ізотермічних умовах. Розглянуто теоретичні розрахунки кінетики адсорбції, часу перебування потоку в насадковому адсорбері, часу захисної дії шару адсорбенту, середньої швидкості процесу адсорбції. Представлено в граничних умовах диференціальне рівняння адсорбційного процесу в ізотермічних умовах. Крім того, визначено кількість теплоти згідно з законом Ленгмюра при адсорбції на активованому вугіллі, та, використовуючи рівняння Трутона, визначено залежність кількості тепла, що поглинається, від температури. Наведено математичну модель адсорбційного процесу, що досліджувалась із застосуванням методу коміркової моделі та програмного забезпечення. Використовуючи пакет прикладних програм MathCAD та рівняння Ленгмюра, ця модель розв'язана шляхом порівняння необхідної кількості комірок n , яка була визначена як її основний параметр. На основі експериментальної кривої зроблено припущення про можливий вигляд коміркової моделі адсорбційного процесу і проведено математичну обробку цієї кривої. Розраховано отримані значення параметрів моделі, проведено нормування експериментальних даних методом трапеції та перевірку моделі на адекватність. Вивчено процес обміну іонів з однаковим зарядом, який проходить між адсорбентом і адсорбатом в точно еквівалентних співвідношеннях, для того щоб пом'якшити воду, яка призначена для виготовлення безалкогольних і алкогольних напоїв, виноматеріалів, оскільки смакові якості цих продуктів поліпшуються в разі зменшення в них іонів магнію, міді, заліза.

Ключові слова: адсорбція, математична модель, теплові процеси, коміркова модель, метод трапеції, MathCAD.

Вступ. Створення сучасних технологій і матеріалів очищення розчинів потребує вивчення механізмів кінетики та інтенсифікації адсорбційного масопереносу у неоднорідних середовищах різної природи і вимагає розвитку нових підходів у моделюванні. Новітні методи дозволятимуть описувати внутрішню кінетику процесу у нестационарних режимах на масообмінних поверхнях.

Проблеми математичного моделювання адсорбційного процесу в неоднорідних пористих середовищах та методи побудови математичних задач таких моделей розглянуто у працях авторів [1-4], а також досліджуються у працях М. П. Ленюка [5], І. В. Сергієнка, В. В. Скопечького, В. С. Дейнеки [8], J. Fraissard, M. A. Springuel-Huet, P. N'Gokoli-Kekele [9].

Асорбційні процеси піддаються найбільш складному математичному опису вна-

слідок великого різноманіття кінетичних факторів, що супроводжують дифузію сорбата в макро-, мезо- і мікропорах сорбенту, і необхідності врахування як специфічних характеристик самого сорбенту (наприклад, склад і властивості активних центрів, умови регенерації), так і особливостей взаємодії в конкретній системі адсорбент–адсорбат і на стадії адсорбції, і на стадії регенерації.

У зв'язку з цим становить інтерес розробка математичної моделі адсорбційного процесу в ізотермічних умовах [1].

Оскільки адсорбційний об'єм пор адсорбенту найповніше використовується при рівних концентраціях, то найбільш ефективним є застосування адсорбції для очищення води з розчинністю, що наближається до цієї граничної величини, тобто за умови $C_s/C_{H_2O} \leq 0,001$ [7, 8].

Пориста структура промислових адсорбентів не тільки визначає граничний об'єм їх адсорбційного простору або максимальну питому кількість адсорбованої речовини, але й впливає певною мірою на вибірковість адсорбції компонентів розчину [9].

Математичну модель адсорбційного процесу можна скласти до проведення експерименту, виходячи з конструкції та принципу дії об'єкта хімічної технології. В такому випадку задача дослідження об'єкта полягатиме у підтвердженні типової гідродинамічної моделі і розрахунку її параметрів. Типовими гідродинамічними моделями є дві ідеалізовані – ідеального змішування та ідеального витіснення, а також моделі, які з достатньою точністю описують реальні процеси: дифузійна, коміркова та комбінована [8-10].

Одним із ефективних методів визначення та розрахунку параметрів гідродинамічних моделей є експериментальне дослідження впливу об'єкта хімічної технології на процеси у початковому потоці. Для цього дослідження необхідно в наведених умовах представити диференціальне рівняння адсорбційного процесу згідно з початковими і граничними умовами та графічно зобразити задані залежності у безрозмірних координатах, що демонструють математичну модель заданого процесу. Згідно з методикою доцільно обчислити кількість комірок та порівняти експериментально одержану криву відгуку з кривими, розрахованими згідно з рівнянням коміркової моделі при різноманітних значеннях.

Мета статті та дослідження. Метою роботи є визначення за допомогою коміркової моделі насадкового адсорбера оптимальних умов проходження процесу отримання призначеної для напоїв пом'якшеної води. Така мета обумовлюється поліпшенням смакових якостей продуктів у разі зменшення в них кількості іонів магнію, міді, заліза тощо. Для досягнення поставленої мети в роботі необхідно вирішити такі задачі:

1) вивчити процес обміну іонів з однаковим зарядом, що проходить між адсорбентом і адсорбатом в точно еквівалентних співвідношеннях;

2) побудувати математичну модель адсорбційного процесу з допомогою пакета MathCAD та рівняння Ленгмюра;

3) визначити та розрахувати параметри через кінетику адсорбції, час перебування потоку в насадковому адсорбері, час захисної дії шару адсорбенту.

Виклад основного матеріалу

Кінетика адсорбції. Через адсорбент пропускають суміш, що поглинається. З певним часом адсорбент насичується адсорбтивом, і активність адсорбенту знижується. Для його регенерації через шар адсорбенту пропускають речовину, яка витискує речовину, котра поглинулася, або нагрівають адсорбент [10-13].

При розрахунках адсорберів періодичної дії визначають час адсорбції. Використовують різні формули для визначення часу адсорбції τ залежно від того, в яку область потрапляє C_0 .

Для безперервно діючих адсорберів визначають швидкість руху адсорбенту з формули (12) [14]

$$u = \frac{1}{K}, \quad (1)$$

де K – коефіцієнт захисної дії адсорбенту (адсорбції).

Для усіх випадків визначають висоту шару адсорбенту через кількість одиниць переносу [11]

$$H = \frac{V_G}{S\beta_y} \int_{C_1}^{C_0} \frac{dC}{C - C^*}, \quad (2)$$

де C_0 , C_1 – концентрації речовини, що розподіляється, на вході в адсорбер і на виході з нього.

Інтеграл, який визначається графічно, дорівнює n – кількості одиниць переносу.

Таким чином, стандартне зменшення мольної вільної енергії адсорбції із розчину – стала величина, яка характеризує різницю енергії взаємодії молекул розчиненої речовини і розчинника з адсорбентом і енергії взаємодії розчиненої речовини з оточуючим розчинником. Ця величина не залежить від концентрації молекул компонента в кожній із рівноважних фаз і від взаємодії молекул компонента розчину між собою. По-суті, це рівняння (1) є рівнянням парціальної ізотерми адсорбції органічного компонента із водного розчину або парціальної ізотерми адсорбції речовини із розчину. Воно характеризує розподіл речовини між адсорбентом і водним

розчином. Константа адсорбційної рівноваги може бути розрахована з експериментальних даних або вирахована на основі суми інкрементів стандартного зменшення вільної енергії адсорбції для структурних елементів органічних молекул внаслідок аддитивності взаємодії при фізичній адсорбції [10].

Зроблено висновок [12, 13], що між константою адсорбційної рівноваги й енергетичною характеристикою адсорбції – зменшенням вільної енергії при адсорбції в стандартних умовах існує залежність, яка впливає з другого закону термодинаміки. Константа адсорбційної взаємодії, а відповідно, і зміна вільної енергії є важливими характеристиками адсорбованості органічної речовини [11, 13]. При $C_0/C_s \leq 0,05$ та при її збільшенні в 10 разів або зростанні на 4 кДж/моль збільшується ступінь використання адсорбційної ємності адсорбенту майже в два рази.

Досить важливим є вплив величини константи адсорбційної рівноваги на використання адсорбційної ємності активного вугілля при розчинності 100 ммоль/л. Роль розчинності у використанні адсорбційної ємності активного вугілля при заданій залишковій концентрації речовини в рівноважному розчині $C=5$ ммоль/л і однакових значеннях K суттєво впливає на адсорбційну рівновагу, в особливості при адсорбції тих речовин, які у воді значно розчиняються [2, 4, 10].

Якщо радіус пор наближається до молекулярних розмірів, то починає посилюватись дисперсійна взаємодія атомів адсорбованих молекул з атомами адсорбенту, що оточує молекулу, яка знаходиться в порі. Тому ефект збільшення енергії взаємодії молекули з атомами, які обмежують порожнину адсорбенту, проявляється тим сильніше, чим менший радіус пори і, відповідно, найбільшою мірою виражений у вузьких мікропорах.

Вже у супермікропорах цей ефект настільки слабшає, що стандартне зменшення мольної вільної енергії адсорбції з розчину виявляється практично таким же, як і при адсорбції на непористій вуглеводній поверхні або на поверхні мезо- і макропор. Відповідно, відносно широкі пори, адсорбційний потенціал яких такий же, як і потенціал непористої поверхні, заповнюються при більш високих концентраціях розчину, ніж вузькі пори з ви-

соким адсорбційним потенціалом, які заповнюються вже при дуже невеликих концентраціях розчину [3, 5, 15].

Оскільки на адсорбцію впливають одночасно кілька факторів: середня швидкість поширення, кінетика адсорбції, коефіцієнт афінності, то важливим є встановлення рівноваги між складом частини розчину, що міститься в адсорбційному об'ємі пор адсорбенту і знаходиться в полі дії адсорбційних сил, і складом зовнішнього розчину [4-6].

Водночас внаслідок вибіркової адсорбції відношення кількості органічних компонентів до кількості води в адсорбційному просторі може в багато разів перевищувати це співвідношення у зовнішньому рівноважному розчині [5].

В результаті адсорбції змінюється не тільки склад розчинів, а, відповідно, їх хімічні потенціали, що виражається залежністю [4, 7, 9, 11]

$$a_o^* = f(C_y, T).$$

При $T = \text{const}$ ізотерма $a_o^* = f(C_y)$.

Для описання процесу адсорбції використовували хімічну теорію адсорбції Ленгмюра і потенційну теорію (Дубиніна).

На практиці ізотерму адсорбції речовини розраховували, користуючись ізотермою адсорбції стандартної речовини (пари бензолу) [12, 13]:

$$a_2^* = a_1^* \frac{V_1}{V_2}, \quad (3)$$

де a_1^* – ордината ізотерми адсорбції стандартної речовини (кмоль/кг);

a_2^* – ордината ізотерми адсорбції речовини, що досліджується (кмоль/кг);

V_1 і V_2 – мольні об'єми стандартної речовини і речовини, що досліджується;

$$V = \frac{M}{\rho}, \quad (4)$$

де M – мольна маса, кг/кмоль.

Відношення мольних об'ємів парів речовин визначили як коефіцієнт афінності [12]:

$$\beta = \frac{V_2}{V_1}. \quad (5)$$

Адсорбція йде з виділенням теплоти

$$q = \frac{44 \cdot 10^3 \lg \frac{p_2}{p_1}}{\frac{1}{T_1} - \frac{1}{T_2}}, \quad (6)$$

де p_1 і p_2 – рівноважні тиски адсорбтиву над адсорбентом при T_1 і T_2 .

Якщо тепло не відводиться, то відбувається підвищення температури в адсорбері, а це негативно впливає на процеси адсорбції. Теплота адсорбції складається з теплоти конденсації і теплоти змочування. Для активованого вугілля залежність q (кДж/кг вугілля) від кількості пари, що поглинається, виражається рівнянням [11]

$$q = m a^n, \quad (7)$$

де a – кількість адсорбованої пари (дм³/г вугілля); n і m – константи (табличні).

Для органічних речовин, на відміну від неорганічних, q мало залежить від температури.

Залежність кількості тепла, що поглинається, від температури виражається формулою Трутона [13]:

$$\frac{q}{\sqrt{T_{кин}}} = const, \quad (8)$$

$$\frac{da}{d\tau} = \beta_y (C - C^*). \quad (9)$$

Для орієнтовних розрахунків β_y при адсорбції на активованому вугіллі, коли діє закон Ленгмюра, використовують рівняння [15]:

$$Nu'_z = 1,6 Re^{0,5},$$

$$Nu'_z = \frac{\beta_y d}{D}, \quad (10)$$

де d – розмір частинок адсорбенту;

D – коефіцієнт дифузії адсорбтиву в газі, м²/с.

При дослідженні кінетики адсорбції визначали час, який називається часом захисної дії шару адсорбенту [15]:

$$K = (H - h),$$

$$Kh = KH - h_0, \quad (11)$$

де K – коефіцієнт захисної дії адсорбенту, (с/м);

H – висота шару адсорбенту;

h – висота невикористаної частини шару адсорбенту в умовах досліду;

h_0 – кінетичний коефіцієнт, або втрата часу захисної дії сорбенту.

$$K = \frac{a_0^*}{\omega C_0}. \quad (12)$$

Диференціальне рівняння адсорбційного процесу. Розв'язання рівняння при початкових і граничних умовах дасть змогу визначити розподіл температур і концентрацій по товщині адсорбера залежно від його розмірів, режимів руху вихідної суміші, температури суміші, концентрації домішки у вихідній та кінцевій суміші. Процес адсорбції проходить за рахунок дифузії рідини в матеріал адсорбенту [9].

Враховуючи, що $\frac{\delta}{L} = 8 \div 10$, відношення опору переносу маси в напрямку осі z є на порядок більшим, ніж у напрямку осі r (радіуса) [1, 3]. Умови переносу речовини на внутрішній і зовнішній поверхні адсорбенту однакові, крім того, властивості матеріалу адсорбенту постійні по товщині δ і ширині L .

Отже, можна прийняти припущення [5]:

$$\frac{\partial C}{\partial \varphi} = 0, \quad \frac{\partial C}{\partial z} = 0. \quad (13)$$

Тоді рівняння дифузії для адсорбенту має вигляд [1, 6]:

$$\frac{\partial C}{\partial \tau} = D \left(\frac{\partial^2 C}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C}{\partial r} \right), \quad (14)$$

де D – коефіцієнт дифузії речовини в адсорбенті.

Початкові умови [7]:

$$\tau = 0; C = C_m.$$

Граничні умови [7]:

$$r = r_{пп}, \quad \beta_1 (C^* - C) = D \frac{\partial C}{\partial r}, \quad (15)$$

$$r = r_{зовн}, \quad 2(C^* - C) = D \frac{\partial C}{\partial r}, \quad (16)$$

де β_1 і β_2 – коефіцієнти масовіддачі на внутрішній і зовнішній поверхні відповідно;

C^* – рівноважна концентрація.

Особливістю цього рівняння є те, що розміри адсорбенту змінюються в процесі адсорбції.

Введемо коефіцієнт співвідношення розмірів адсорбенту [7, 10]:

$$K = \frac{r_{зовн}(\tau)}{r_{пп}(\tau)}. \quad (17)$$

Введемо нову змінну [1, 7]:

$$\eta = \frac{r}{r_{\text{пп}}}, \quad (18)$$

де значення змінної лежить в межах

$$1 \leq \eta \leq K.$$

Перейдемо до нової змінної [8, 9, 10]:

$$\frac{\partial C}{\partial r} = \frac{\partial C}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial r} = \frac{1}{r_{\text{пп}}}, \quad (19)$$

$$\frac{\partial^2 C}{\partial \eta^2} = \frac{1}{r_{\text{пп}}^2} \frac{\partial^2 C}{\partial \eta^2}. \quad (20)$$

Тоді диференціальне рівняння набуває вигляду [8, 10]:

$$\frac{\partial C}{\partial \tau} = D \left(\frac{1}{r_{\text{пп}}^2} \frac{\partial^2 C}{\partial \eta^2} + \frac{1}{\eta} \frac{1}{r_{\text{пп}}} \frac{\partial C}{\partial \eta} \right). \quad (21)$$

Початкові умови [6, 7]: $\tau = 0$, $C = C_{\text{п}}$,

$$\eta = 1, \quad \beta_1(C^* - C) = \frac{D}{r_{\text{пп}}} \frac{\partial C}{\partial \eta}, \quad (22)$$

$$\eta = K, \quad \beta_2(C^* - C) = \frac{D}{r_{\text{пп}}} \frac{\partial C}{\partial \eta}. \quad (23)$$

Аналіз літературних джерел [3, 12, 15] показав, що для визначення наближених коефіцієнтів дифузії найбільш доцільним є використання досвідно-експериментальної методики, розглянутої в роботах, та моделювання [2, 8-14].

Результати досліджень. Розглядаємо насадковий колонний апарат-адсорбер, який задаємо до проведення експерименту комірковою моделлю.

На вхід колони (наприклад в потік рідини) вводили у вигляді імпульсу індикатор розчину. Результати аналізу наведено в таблиці 1. Далі визначали кількість комірок n порівнянням експериментально одержаної кривої відгуку з кривими, розрахованими згідно з рівнянням коміркової моделі при різноманітних значеннях кількості комірок:

$$(t) = \frac{1}{\tau} \frac{n^n}{(n-1)!} \frac{t^{n-1}}{\tau} \cdot e^{-n \cdot t/\tau}, \quad (24)$$

де τ – середній час перебування потоку в адсорбері, який може бути знайдений як математичне очікування безперервної випадкової величини t :

$$t = M[t] = \int t \cdot C_{\text{кр}}(t) dt. \quad (25)$$

Вихідні дані: 1-й стовпчик – значення часу, 2-й – концентрація індикатора на виході.

Таблиця 1 – Результати аналізу залежності вихідного потоку від вмісту індикатора

0	.17		0
1	1.15	0	0
2	2.0	1	0.105
3	2.0	2	0.252
4	1.5	3	0.255
5	1.14	4	0.181
6	0.66	5	0.106
7	.35	6	0.055
8	.04	7	0.026
9	.02	8	0.012
		9	$5.008 \cdot 10^{-3}$

Розрахункові (теоретичні) криві коміркової моделі зазвичай наводяться у безрозмірних координатах, оскільки у математичних викладках припускається, що одиничне імпульсне збурення й концентрація не мають конкретної фізичної розмірності (рисунок 1). Під безрозмірними величинами розуміються t час і диференціальна крива $Z(\theta)$.

Таким чином, для порівняння експериментальної кривої з теоретичними кривими (рисунок 1) необхідно врахувати θ згідно із залежністю (15) і зробити відповідні перерахунки.

Шляхом порівняння знайшли необхідну кількість комірок n , яку визначили як основний параметр моделі.

Також провели нормування експериментальних значень концентрації $x(i)$ до загальної енергії імпульсу індикатора KCl , введеного у колонку. Чисельні значення визначених інтегралів, що входять у рівняння, знайшли за методом трапеції, який у загальному випадку має наступний вигляд:

$$f(x) dx = \frac{h}{2} \cdot [y_0 + y_n + 2(y_1 + y_2 + \dots + y_{n-1})], \quad (26)$$

де $[a, b]$ – інтервал інтегрування;

h – крок інтегрування;

y_i – значення підінтегральної функції в i -тій точці.

Для виконання необхідних розрахунків використали пакет прикладних програм MathCAD [12, 14, 15].

Після цього нанесли на один графік *S*-криві відгуку, розраховані згідно з комірковою гідродинамічною моделлю, а також експериментальну *S*-криву у безрозмірній формі, водночас теоретичні криві мають різну кількість комірок (відповідно 1, 2, 6, 8).

Шляхом порівняння знайти необхідну кількість комірок *n*, яка буде визначена як основний параметр моделі.

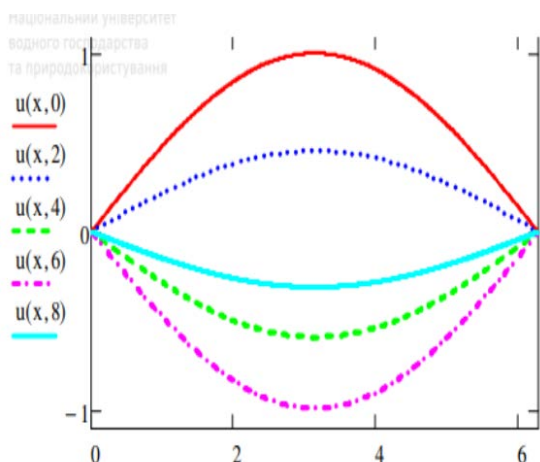


Рисунок 1 – Порівняння експериментальної кривої з теоретичними кривими при різній кількості комірок (відповідно 2, 4, 6, 8)

Далі проводимо нормування експериментальних даних з використанням методу трапеції щодо визначення інтегралу [11]:

$$c := \frac{Cv^{<1>}}{2 \sum Cv^{<1>} - Cv_{0,1} - Cv_{9,1}}$$

Визначимо середній час перебування потоку в адсорбері:

$$\tau := \frac{2 \cdot Cv^{<0>} \cdot C - Cv_{0,0} \cdot C_0 - Cv_{9,0} \cdot C_9}{2}$$

Визначимо безрозмірні величини:

$$\theta := \frac{Cv^{<0>}}{\tau}, \quad Z := C.$$

Далі розраховали і зафіксували теоретичну *S*-криву для різних значень кількості комірок (2, 4, 6, 8), оцінюючи результат за величиною середньоквадратичного відхилення.

Графік у безрозмірних координатах має вигляд, як зображено на рисунку 2.

$$n := 4 P(t) := \frac{1}{\tau}$$

$$C_{kp}(t) := \frac{n^n \cdot \left(\frac{1}{\tau}\right)^{n-1} e^{-n\frac{1}{\tau}}}{\tau(n-1)!}$$

Перевіримо адекватність моделі.

$$\sigma := \sqrt{\frac{\sum(Ck_{pt} - C)^2}{9}}, \quad res := (0,035 \ 0,021 \ 0,047 \ 0,066)$$

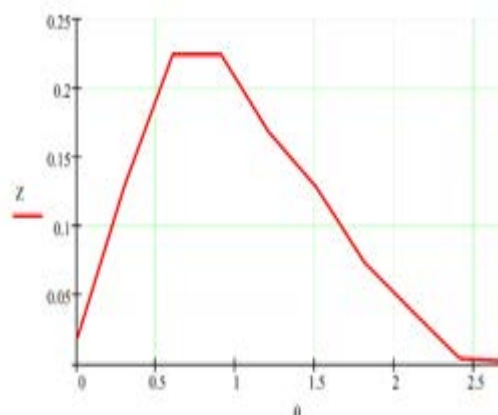


Рисунок 2 – Графік експериментально отриманої *S*-кривої

Результати оцінювання (таблиця 2):

1-й рядок – значення кількості комірок, 2-й рядок – середньоквадратичне відхилення).

Таким чином, параметр моделі *n*=4. Таким чином, отримана модель адсорбера є адекватною, виходячи з отриманих експериментально значень параметру коміркової моделі: $\tau = 3.321 \sigma = 0,02$.

Таблиця 2 – Результати оцінювання

$C_{kp}(Cv_{0,0})$	0	
$C_{kp}(Cv_{1,0})$	0	0.019
$C_{kp}(Cv_{2,0})$	1	0.129
$C_{kp}(Cv_{3,0})$	2	0.224
$C_{kp}(Cv_{4,0})$	3	0.224
$C_{kp}(Cv_{5,0})$	4	0.168
$C_{kp}(Cv_{6,0})$	5	0.128
$C_{kp}(Cv_{7,0})$	6	0.074
$C_{kp}(Cv_{8,0})$	7	0.039
$C_{kp}(Cv_{9,0})$	8	$4.477 \cdot 10^{-3}$
	9	$2.238 \cdot 10^{-3}$

Обговорення результатів. Комірковий метод полягає у визначенні параметра n через статистичні оцінки диференціальної функції розподілу часу перебування речовини в адсорбері. Цю функцію знаходили експериментально за даними дослідів із використанням індикатора. Водночас час перебування частинок речовини в адсорбері розглядали як випадкову величину, дискретний розподіл та ідеальність якої описали за допомогою теоретично ймовірних характеристик. Індикатор вибирають із тим розрахунком, щоб він не руйнував гідродинаміку потоку в адсорбері і в той же час легко аналізувався [10, 11-15].

Як індикатор використано розчин інертних твердих частинок. Обраний індикатор вводили у початковий потік у вигляді стандартного сигналу для спрощення подальшої аналітичної обробки експериментальних даних. У певні моменти часу після вводу індикатора відбирали проби з вихідного потоку та аналізували вміст індикатора в них. Згідно з експериментальними даними побудовано S -криву відгуку. Час перебування частинок речовини в апараті розглядали як випадкову величину, що має диференційну функцію. Розрахункові (теоретичні) криві коміркової моделі наводяться у безрозмірних координатах і показують незначні відмінності від експериментально отриманої кривої математичної моделі, оскільки у математичних викладах припускається, що одиничне імпульсне збурення й концентрація не мають конкретної фізичної розмірності.

Висновки. Наукова новизна роботи полягає в такому:

1. Наведено та досліджено чисельно із застосуванням методу трапецій та програмного забезпечення MathCAD [4, 13] математичну модель адсорбційного процесу.

2. Вивчено процес обміну іонів з однаковим зарядом, що проходить між адсорбентом і адсорбатом в точно еквівалентних співвідношеннях; побудовано математичну модель адсорбційного процесу з допомогою пакета MathCAD та рівняння Ленгмюра; визначено та розраховано параметри через кінетику адсорбції, час перебування потоку в насадковому адсорбері, час захисної дії шару адсорбенту.

3. Розглянуто основні теоретичні аспекти розрахунку кінетики адсорбції, часу перебування потоку в насадковому адсорбері, часу захисної дії шару адсорбенту та диференціальне рівняння адсорбційного процесу згідно з початковими та граничними умовами. Графічно отримано S -криву у безрозмірних координатах, що демонструє математичну модель адсорбційного процесу.

4. Обчислено оптимальну кількість комірок порівнянням експериментально одержаної кривої відгуку з кривими, розрахованими згідно з рівнянням коміркової моделі при різноманітних значеннях.

5. Вивчено процес обміну іонів з однаковим зарядом, який проходить між адсорбентом і адсорбатом у точно еквівалентних співвідношеннях, для того щоб пом'якшити воду, яка призначена для виготовлення безалкогольних і алкогольних напоїв, виноматеріалів, оскільки смакові якості цих продуктів поліпшуються в разі зменшення в них іонів магнію, міді, заліза.

Проблеми математичного моделювання адсорбційних процесів у неоднорідних середовищах та методи побудови математичних задач таких моделей потребують подальшого вивчення та мають перспективу подальших досліджень.

Список використаних джерел

- [1] T. G. Myersa, and M. G. Hennessy, "Mathematical modelling of carbon capture in a packed column by adsorption", *Applied Energy*, vol. 278, Nov. 15, 2020. doi: 10.1016/j.apenergy.2020.115565.
- [2] E. Igberase, and P. O. Osifo, "Mathematical modelling and simulation of packed bed column for the efficient adsorption of Cu (II) ions using modified bio-polymeric material", *Journal of Environmental Chemical Engineering*, no. 7 (3), 2019.
- [3] Amirhossein Ghorbani1, Ramin Karimzadeh, and Masoud Mofarahi, "Mathematical modeling of fixed bed adsorption: breakthrough curve", Department of chemical engineering, Tarbiat Modares University, Tehran, Iran, 2018. doi: 10.22059/JCHPE.2018.255078.1226.

- [4] M. Askari, and H. Adibi, "Numerical solution of advection-diffusion equation using meshless method of lines", *Iranian Journal of Science and Technology, Transactions A: Science*, vol. 41, no. 2, pp. 457-464, 2017.
- [5] М. П. Ленюк, "Математичне моделювання адсорбційного масопереносу зі спектральним параметром для неоднорідних н-інтерфейсних циліндричних обмежених мікропористих середовищ з порожниною", *Вісник Тернопільського державного технічного університету*, т. 9, № 4, с. 147-148, 2014.
- [6] М. Р. Петрик, "Математичне моделювання нелінійних динамічних задач адсорбції та дифузії для нерухомого шару адсорбенту", *Інтегральні перетворення та їх застосування до крайових задач: зб. наук. пр., вип. 5*, с. 201-215. Київ: Ін-т математики НАНУ, 2000.
- [7] И. А. Буртная, и Д. В. Литвиненко, "Математическая модель процесса первапоарации для бинарных смесей", *Восточно-Европейский журнал передовых технологий*, т. 2, № 4 (50), с. 8-11, 2011. [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://journals.urau.ru/eejet/article/view/1766/1662>.
- [8] И. В. Сергиенко, В. В. Скопецкий, и В. С. Дейнека, *Математическое моделирование и исследование процессов в неоднородных средах*. Киев, Украина: Наукова думка, 2001.
- [9] P. N'Gokoli-Kekele, M. A. Spiringuel-Huet, and J. Fraissard, "An analytical study of molecular transport in zeolite bed", *Adsorption (Kluwer)*, no. 8, p. 35-44, 2002.
- [10] В. В. Кузьмин и др., *Математическое моделирование технологических процессов сборки и механической обработки изделий машиностроения: учебник для вузов*. Москва, Россия: Высшая школа, 2008.
- [11] Б. Я. Советов, и С. А. Яковлев, *Моделирование систем: учебник для вузов*, 3-е изд., перераб и доп. Москва, Россия: Высшая школа, 2001.
- [12] А. Н. Остриков и др., *Процессы и аппараты пищевых производств*, кн. 1. Санкт-Петербург, Россия: Гиорд, 2007.
- [13] А. М. Поперечный, О. І. Черевко, В. Б. Гаркуша, та Н. В. Кирпиченко, *Процеси та апарати харчових виробництв: підручник*, А. М. Поперечний, Ред. Київ, Україна: Центр учбової літератури, 2007.
- [14] В. П. Дьяконов и др., *Новые информационные технологии: учеб. пособие*, В. П. Дьяконов, Ред. Москва, Россия: СОЛОН-Пресс, 2005.
- [15] В. Г. Дулов, и В. А. Цибаров, *Математическое моделирование в современном естествознании: учеб. пособие*, В. Г. Дулов, Ред. Санкт-Петербург, Россия: Изд-во С.-Петерб. ун-та, 2001.

References

- [1] T. G. Myersa, and M. G. Hennessy, "Mathematical modelling of carbon capture in a packed column by adsorption", *Applied Energy*, vol. 278, Nov. 15, 2020. doi: 10.1016/j.apenergy.2020.115565.
- [2] E. Igberase, and P. O. Osifo, "Mathematical modelling and simulation of packed bed column for the efficient adsorption of Cu (II) ions using modified bio-polymeric material", *Journal of Environmental Chemical Engineering*, no. 7 (3), 2019.
- [3] Amirhossein Ghorbani¹, Ramin Karimzadeh, and Masoud Mofarahi, "Mathematical modeling of fixed bed adsorption: breakthrough curve", Department of chemical engineering, Tarbiat Modares University, Tehran, Iran, 2018. doi: 10.22059/JCHPE.2018.255078.1226.
- [4] M. Askari, and H. Adibi, "Numerical solution of advection-diffusion equation using meshless method of lines", *Iranian Journal of Science and Technology, Transactions A: Science*, vol. 41, no. 2, pp. 457-464, 2017.
- [5] М. Р. Ленюк, "Mathematical modeling of adsorption mass transfer with spectral parameter for inhomogeneous n-interface cylindrical bounded microporous media with a cavity", *Visnyk Ternopilskoho derzhavnoho tekhnichnoho universytetu*, vol. 9, no. 4, pp. 147-148, 2014 [in Ukrainian].
- [6] М. Р. Петрик, "Mathematical modeling of nonlinear dynamic problems of adsorption

- and diffusion for a fixed layer of adsorbent", *Integral transformations and their application to boundary value problems: coll. of sci. papers*, iss. 5, pp. 201-215. Kyiv: In-t matematyky NANU, 2000 [in Ukrainian].
- [7] I. A. Burtynaya, and D. V. Litvinenko, "Mathematical model of the pervaporation process for binary mixtures", *Vostochno-Evropeyskiy zhurnal peredovykh tekhnologiy*, vol. 2, no. 4 (50), pp. 8-11, 2011. [Online]. Available: <http://journals.urau.ru/eejet/article/view/1766/1662> [in Russian].
- [8] I. V. Sergienko, V. V. Skopetsky, and V. S. Deineka, *Mathematical modeling and study of processes in inhomogeneous media*. Kyiv, Ukraine: Naukova dumka, 2001 [in Russian].
- [9] P. N'Gokoli-Kekele, M. A. Spiringuel-Huet, and J. Fraissard, "An analytical study of molecular transport in zeolite bed", *Adsorption* (Kluwer), no. 8, p. 35-44, 2002.
- [10] V. V. Kuzmin et al., *Mathematical modeling of technological processes of assembly and mechanical processing of mechanical engineering products: textbook for universities*. Moscow, Russia: Vysshaya shkola, 2008 [in Russian].
- [11] B. Ya. Sovetov, and S. A. Yakovlev, *Modeling of systems: textbook for universities*, 3rd ed., revised and suppl. Moscow, Russia: Vysshaya shkola, 2001 [in Russian].
- [12] A. N. Ostrikov et al., *Processes and devices of food production*, book 1. St. Petersburg, Russia: Giord, 2007 [in Russian].
- [13] A. M. Poperechny, O. I. Cherevko, V. B. Garkusha, and N. V. Kirpychenko, *Processes and apparatus of food production: textbook*, A. M. Poperechny, Ed. Kyiv, Ukraine: Tsentr uchbovoi literatury, 2007 [in Ukrainian].
- [14] V. P. Dyakonov et al., *New information technologies: textbook*, V. P. Dyakonov, Ed. Moscow, Russia: SOLON-Press, 2005 [in Russian].
- [15] V. G. Dulov, and V. A. Tsibarov, *Mathematical modeling in modern natural science: textbook*, V. G. Dulov, Ed. St. Petersburg, Russia: Izd-vo St. Petersburg. un-ta, 2001 [in Russian].

O. O. Onyschuk, Ph. D., Associate Professor
e-mail: oksanaduda2013@gmail.com
Lesya Ukrainka Volyn National University
Potapova, 9, Lutsk, 43000, Ukraine

OPTIMIZED CALCULATION OF ADSORPTION PROCESS THROUGH THE NOZZLE ADSORBER BY THE CELL MODEL METHOD

This paper considers the main theoretical calculations of adsorption kinetics, time of the flow in the nozzle adsorber, time of protective action of the adsorbent layer, average speed of adsorption process and the differential equation of the adsorption process according to initial and boundary conditions. Graphically, C-curve has been obtained, which is presented in dimensionless coordinates and demonstrates a mathematical model of adsorption process. The optimal number of cells is calculated by comparing the experimentally obtained response curve with the curves calculated according to the equation of the cell model at different values. In addition, the amount of heat according to the Langmuir's law for adsorption on activated carbon and the dependence of the amount of heat adsorbed on temperature using the Truton's equation have been determined. A mathematical model of the adsorption process, which has been studied using the cell model method and software, is presented. Using the MathCAD application package and the Langmuir's equation, this model has been solved by comparing the required number of cells n , which is defined as its main parameter. Based on the experimental curve, an assumption is made about the possible form of the cell model of adsorption process and mathematical processing of this curve is performed. The obtained values of model parameters have been calculated, the experimental data have been normalized by the trapezoidal method and the model has been tested for adequacy. The process of exchange of ions with the same charge, which

takes place between the adsorbent and the adsorbate in exactly equivalent proportions in order to soften the water intended for the production of soft and alcoholic beverages, wine materials, is studied, as the taste of these products improves with the reduction of magnesium, copper and iron ions. Problems of mathematical modeling of adsorption processes in inhomogeneous media and methods of constructing mathematical problems of such models require further study and have the prospect of further research.

Keywords: *adsorption, mathematical model, thermal processes, cell model, trapezoid method, MathCAD.*

Стаття надійшла 01.02.2022

Прийнято 08.02.2022