

УДК 544.35.03 : 665.7

МОДЕЛЬ АДсорбЦИОННОЙ ОЧИСТКИ СТОКОВ С УЧЕТОМ ХИМИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ

©2 024 О.Р. Каратаев, С.В. Анаников, В.А. Лашков

Казанский национальный исследовательский технологический университет, г. Казань, Россия

Статья поступила в редакцию 30.10.2023

В статье ставится и решается общая задача динамики адсорбции из жидкости в неподвижном слое адсорбента с учетом химической реакции первого порядка и линейной изотерме адсорбции. Модель адсорбции основывается на уравнениях баланса массы целевого компонента для бесконечно малого элемента слоя и кинетики адсорбции, записанных в виде системы линейных дифференциальных уравнений в частных производных первого порядка с соответствующими краевыми условиями. Задача решается методом преобразования Лапласа. Это позволило свести совместное решение системы уравнений в оригиналах к независимому решению в изображениях задачи Коши для обыкновенного дифференциального уравнения и алгебраического уравнения. В результате получены выражения для концентраций целевого компонента в слое адсорбента и в потоке в любой момент времени и в любом сечении слоя. Это позволило выполнить моделирование практической задачи по адсорбции хлороформа цеолитами для очистки стоков реального плавательного бассейна и получить интересные графические материалы на основе решения и разработанного алгоритма. Результаты решения могут быть доведены до числа посредством программирования на любом доступном алгоритмическом языке высокого уровня. Показано, что вид кривых изменения концентраций целевого компонента в адсорбенте и адсорбтиве по толщине слоя адсорбента и во времени не изменяется, хотя числовые значения этих параметров изменяются в достаточно широком диапазоне. Также отмечено, что в рассмотренном в статье интервале изменения концентраций, концентрация адсорбтива вначале резко уменьшается, а затем плавно по всей длине неподвижного слоя адсорбента незначительно уменьшается. Выявлено, что использование методик, приемов и теорем метода преобразования Лапласа применительно к задаче динамики адсорбции дает возможность глубоко проникнуть в механизм решаемой задачи, что недоступно при других методах решения. Это позволяет при известном наборе исходных данных найти изменение концентраций целевого компонента в обеих фазах и подобрать необходимую толщину слоя адсорбента.

Ключевые слова: адсорбция, адсорбент, адсорбтив, динамика адсорбции, целевой компонент, фаза, массопередача, модель, моделирование, преобразование Лапласа, оригинал, изображение.

DOI: 10.37313/1990-5378-2024-26-146-153

EDN: LQRBCY

В работе ставится общая задача динамики адсорбции целевого компонента из жидкости в условиях протекания химической реакции первого порядка при линейной изотерме адсорбции.

Имеющиеся в литературе решения [1-3], представленные различными функциями, не всегда могут быть быстро доведены до числовых инженерных расчетов, вследствие громоздкости полученных результатов.

Поэтому здесь поставлена цель - от постановки задачи до получения числового результата пройти путем алгоритмизации полученного решения и его программирования.

Каратаев Оскар Робиндарович, кандидат технических наук, доцент, доцент кафедры «Основы конструирования и прикладная механика». E-mail: oskar_karataev@mail.ru

Анаников Сергей Ваганович, действительный член Российской академии естествознания (РАЕ), доктор технических наук, профессор, почетный работник высшего профессионального образования.

E-mail: ananikovsv@rambler.ru

Лашков Вячеслав Александрович, доктор технических наук, профессор, заведующий кафедрой «Основы конструирования и прикладная механика».

E-mail: office@kstu.ru

Известно, что согласно теореме о единственности решения, при корректной постановке задачи на результат не влияет метод решения, но форма представления может быть различной.

Рассматриваемая нами модель адсорбции в неподвижном слое адсорбента базируется на уравнениях баланса массы целевого компонента для бесконечно малого элемента слоя и кинетики адсорбции, записанных в частных производных (система уравнений в частных производных).

В этой связи для интегрирования системы линейных дифференциальных уравнений в частных производных первого порядка был выбран метод преобразования Лапласа. Он позволил перейти от совместного решения системы уравнений в частных производных первого порядка к независимому решению в изображениях задачи Коши для обыкновенного дифференциального уравнения первого порядка и алгебраического уравнения. При этом удалось получить результат в широко используемых в математической физике хорошо изученных и табулированных функциях Бесселя.

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Система дифференциальных уравнений адсорбции в одномерном потоке без учета продольной диффузии имеет вид [4-6]

$$\frac{\partial C(x, \tau)}{\partial \tau} + \delta \frac{\partial C_a(x, \tau)}{\partial \tau} + W \frac{\partial C(x, \tau)}{\partial x} = -K_c C(x, \tau), \quad (1)$$

$$x > 0, \tau > 0,$$

$$\frac{\partial C_a(x, \tau)}{\partial \tau} = K [C(x, \tau) - C^*(C_a)], \quad (2)$$

$$x > 0, \tau > 0.$$

при краевых условиях

$$C(x, 0) = 0, \quad x > 0, \quad (3)$$

$$C_a(x, 0) = 0, \quad x > 0, \quad (4)$$

$$C(0, \tau) = C_0, \quad \tau > 0. \quad (5)$$

Уравнение изотермы

$$C_a(x, \tau) = AC^*(C_a). \quad (6)$$

Здесь $C_a(x, \tau)$ – концентрация адсорбированного вещества в сорбенте в сечении x в момент времени τ ; $C(x, \tau)$ – концентрация адсорбтива в потоке на расстоянии x в момент времени τ ; W – постоянная скорость потока;

K – коэффициент массообмена; $\delta = \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon}$ – коэффициент; ε – доля свободного сечения в адсорбенте (постоянная по объему порозность неподвижного слоя); $C^*(C_a)$ – концентрация целевого компонента в потоке равновесная со средним содержанием адсорбтива в слое.

Первые два слагаемых уравнения (1) представляют собой скорость изменения массы целевого компонента в зазорах между частицами и внутри частиц соответственно. Третье слагаемое соответствует приращению количества целевого компонента за счет конвективного переноса со скоростью потока. Слагаемое в правой части (1) представляет изменение концентрации целевого компонента в потоке в момент времени в сечении x за счет химической реакции.

Таким образом, уравнение (1) представляет связь между концентрациями целевого компонента в неподвижном слое адсорбента и в потоке в любой момент времени τ и в любом сечении x слоя.

Краевые условия (3)-(5) означают следующее. В начальном сечении слоя ($x = 0$) в любой момент времени τ концентрация целевого компонента постоянна и равна C_0 , в начальный момент времени при $\tau = 0$ слой адсорбента свободен от адсорбируемого вещества: условия (3),(4).

С учетом (6) уравнения (1), (2) преобразуются к виду

$$\frac{\partial C(x, \tau)}{\partial \tau} + W \frac{\partial C(x, \tau)}{\partial x} = -\delta K \times \left[C(x, \tau) - \frac{C_a(x, \tau)}{A} \right] - K_c C(x, \tau), \quad (1a)$$

$$x > 0, \tau > 0,$$

$$\frac{\partial C_a(x, \tau)}{\partial \tau} = K \left[C(x, \tau) - \frac{C_a(x, \tau)}{A} \right], \quad (2a)$$

$$x > 0, \tau > 0.$$

К уравнениям (1a), (2a) и граничным условиям (3) - (5) применяется прямое преобразование Лапласа [7-9]

$$C(x, \tau) \circ \rightarrow F(x, s) = \int_0^{\infty} C(x, \tau) e^{-s\tau} d\tau, \quad (7)$$

$$C_a(x, \tau) \circ \rightarrow \Phi(x, s) = \int_0^{\infty} C_a(x, \tau) e^{-s\tau} d\tau, \quad (8)$$

$$\frac{\partial C(x, \tau)}{\partial \tau} \circ \rightarrow s F(x, s) - C(x, 0), \quad (9)$$

$$\frac{\partial C_a(x, \tau)}{\partial \tau} \circ \rightarrow s \Phi(x, s) - C_a(x, 0). \quad (10)$$

Здесь знак $\circ \rightarrow$ обозначает переход от оригинала к изображению.

Тогда преобразование (1a), (2a) с учетом граничных условий (3) - (6) будет давать

$$s F(x, s) + W \frac{\partial F(x, s)}{\partial x} = -(\delta K + K_c) F(x, s) + \frac{\delta K}{A} \Phi(x, s), \quad (11)$$

$$\Phi(x, s) = \frac{AK}{AS + K} F(x, s), \quad (12)$$

$$F(0, s) = \frac{C_0}{s}. \quad (13)$$

Дальнейшее преобразование уравнений (11), (12) с учетом (13), приводит к задаче Коши для обыкновенного дифференциального уравнения первого порядка

$$\frac{dF(x, s)}{dx} + A_1 F(x, s) = 0, \quad (14)$$

$$F(0, s) = \frac{C_0}{s},$$

где $A_1 = \frac{s}{W} + \frac{\delta K s}{(s + \frac{K}{A})W} + \frac{K_c}{W}$.

Решением (14), (13) будет функция

$$F(x, s) = \frac{C_0}{s} e^{-A_1 x}. \quad (15)$$

Подстановка (15) в соотношение (12) приводит к выражению

$$\Phi(x, s) = \frac{K C_0}{s(s + \frac{K}{A})} e^{-A_1 x}. \quad (16)$$

Замена в (15), (16) константы A_1 , её значением позволяет получить

$$F(x, s) = \frac{C_0}{s} \exp \left[- \left(\frac{s}{W} + \frac{\delta K}{W} \frac{s}{s + \frac{K}{A}} + \frac{K_c}{W} \right) x \right], \quad (17)$$

$$\Phi(x, s) = \frac{K C_0}{s(s + \frac{K}{A})} \times \exp \left[- \left(\frac{s}{W} + \frac{\delta K}{W} \frac{s}{s + \frac{K}{A}} + \frac{K_c}{W} \right) x \right]. \quad (18)$$

В соотношениях (17), (18) необходимо преобразовать экспоненциальную функцию для получения таблицы изображений

$$\begin{aligned} & \exp \left[- \left(\frac{s}{W} + \frac{\delta K}{W} \frac{s}{s + \frac{K}{A}} + \frac{K_c}{W} \right) x \right] = \\ & = \exp \left(- \frac{x}{W} s \right) \exp \left[\frac{K^2 \delta x}{AW(s + \frac{K}{A})} \right] \times \\ & \times \exp \left[- (\delta K + K_c) \frac{x}{W} \right]. \end{aligned}$$

Тогда преобразование (17), (18) дает

$$F(x, S) = \frac{C_0 \exp \left(- \frac{x}{W} s \right)}{s} \exp \left[\frac{1}{\frac{AW}{K^2 \delta x} \left(s + \frac{K}{A} \right)} \right] \times \exp \left[- (\delta K + K_c) \frac{x}{W} \right], \quad (17a)$$

$$\Phi(x, s) =$$

$$\begin{aligned} & = \frac{K C_0 \exp \left(- \frac{x}{W} s \right)}{s \left(s + \frac{K}{A} \right)} \exp \left[\frac{1}{\frac{AW}{K^2 \delta x} \left(s + \frac{K}{A} \right)} \right] \times \\ & \times \exp \left[- (\delta K + K_c) \frac{x}{W} \right]. \quad (18a) \end{aligned}$$

Для получения оригиналов от (17a) и (18a) необходимо продолжить их преобразование Известно соотношение [9]

$$\begin{aligned} f(s) &= \frac{1}{\left(s + \frac{K}{A} \right)^2} \exp \left[- \frac{1}{\frac{AW}{K^2 \delta x} \left(s + \frac{K}{A} \right)} \right] \bullet \circ \\ \bullet \circ F(\tau) &= \sqrt{\frac{AW}{K^2 \delta x}} \tau \exp \left(- \frac{K}{A} \tau \right) \times \\ & \times J_1 \left(2 \sqrt{\frac{K^2 \delta x}{AW}} \tau \right). \quad (19) \end{aligned}$$

Выражение (19) будет являться базовым в процессе преобразования (17a), (18a) к табличному виду.

Тогда (17a), (18a) следует переписать в виде

$$F(x, s) = \frac{C_0 \exp \left(- \frac{x}{W} s \right)}{s} \left(s + \frac{K}{A} \right)^2 \times \frac{1}{\left(s + \frac{K}{A} \right)^2} \exp \left[- \frac{1}{\frac{AW}{K^2 \delta x} \left(s + \frac{K}{A} \right)} \right] \times \exp \left[(\delta K + K_c) \frac{x}{W} \right], \quad (17b)$$

$$\begin{aligned} \Phi(x, s) &= \frac{K C_0 \exp \left(- \frac{x}{W} s \right)}{s} \left(s + \frac{K}{A} \right) \times \\ & \times \frac{1}{\left(s + \frac{K}{A} \right)^2} \exp \left[- \frac{1}{\frac{AW}{K^2 \delta x} \left(s + \frac{K}{A} \right)} \right] \times \\ & \times \exp \left[(\delta K + K_c) \frac{x}{W} \right]. \quad (18b) \end{aligned}$$

И, наконец, окончательно преобразуется выражение (17b) путем возведения в квадрат круглой скобки, стоящей в числителе

$$\begin{aligned}
 F(x, s) = C_0 & \left\{ \exp\left(-\frac{x}{W}s\right) s \frac{1}{\left(s + \frac{K}{A}\right)^2} \times \right. \\
 & \times \exp\left[-\frac{1}{\frac{AW}{K^2 \delta x} \left(s + \frac{K}{A}\right)}\right] + 2 \frac{K}{A} \exp\left(-\frac{x}{W}s\right) \times \\
 & \times \frac{1}{\left(s + \frac{K}{A}\right)^2} \exp\left[-\frac{1}{\frac{AW}{K^2 \delta x} \left(s + \frac{K}{A}\right)}\right] + \frac{K^2}{A^2} \times \\
 & \left. \times \frac{\exp\left(-\frac{x}{W}s\right)}{s} \frac{1}{\left(s + \frac{K}{A}\right)^2} \exp\left[-\frac{1}{\frac{AW}{K^2 \delta x} \left(s + \frac{K}{A}\right)}\right] \right\} \times \\
 & \times \exp\left[(\delta K + K_c) \frac{x}{W}\right]. \quad (17в)
 \end{aligned}$$

Для перехода к оригиналу от соотношения (17в) требуется найти оригиналы 3-х отдельных его составляющих, входящих в виде суммы в фигурную скобку.

Для этого следует сначала найти ещё один табличный оригинал [7]

$$\frac{\exp(-as)}{s} \bullet \circ \begin{cases} 0 \text{ при } 0 < t < a, \\ 1 \text{ при } a < t, \end{cases}$$

который применительно к нашему случаю, будет иметь вид

$$\begin{aligned}
 f_1(s) &= \frac{\exp\left(-\frac{x}{W}s\right)}{s} \bullet \circ \\
 \bullet \circ F_1(\tau) &= \begin{cases} 0 \text{ при } 0 < \tau < \frac{x}{W}, \\ 1 \text{ при } \frac{x}{W} < \tau. \end{cases} \quad (20)
 \end{aligned}$$

Следует отметить, что нахождение оригиналов от каждого из 3-х суммируемых изображений в фигурной скобке выражения (17в) производится по разному. Оригиналу третьего члена находится простой сверткой оригиналов.

Известно, что произведению изображений соответствует своеобразная интегральная комбинация оригиналов функций, то есть

$$f_1(s)f_2(s) \bullet \circ F_1(\tau) * F_2(\tau) =$$

$$= \int_0^\tau F_1(t) F_2(\tau - t) dt \equiv \int_0^\tau F_1(\tau - t) F_2(t) dt.$$

Тогда применительно к третьему члену выражения (17в) на основании формул (19), (20) можно получить

$$\begin{aligned}
 f(s)f_1(s) \bullet \circ F(\tau) * F_1(\tau) &= F(\tau) * 1 = \\
 &= \int_{\frac{x}{W}}^\tau \sqrt{\frac{AW}{K^2 \delta x}} t \exp\left(-\frac{K}{A}t\right) \times \\
 & \times J_1\left(2\sqrt{\frac{K^2 \delta x}{AW}} t\right) dt. \quad (21)
 \end{aligned}$$

Ко второму члену выражения (17в) применяется первая теорема смещения [7]

$$F(t - a) \bullet \circ \exp(-as) f(s).$$

В обозначениях статьи согласно (19) это дает

$$\begin{aligned}
 f_2(s) &= \exp\left(-\frac{x}{W}s\right) f(s) \bullet \circ \\
 \bullet \circ F_2(\tau) &= \sqrt{\frac{AW}{K^2 \delta x}} \left(\tau - \frac{x}{W}\right) \exp\left[-\frac{K}{A}\left(\tau - \frac{x}{W}\right)\right] \times \\
 & \times J_1\left[2\sqrt{\frac{K^2 \delta x}{AW}} \left(\tau - \frac{x}{W}\right)\right]. \quad (22)
 \end{aligned}$$

Следует подчеркнуть, что при $\tau < \frac{x}{W}$ дей-

ствительное решение задачи отсутствует. Это видно, в частности, из соотношения (22).

При поиске оригинала для первого члена в соотношении (17в) сначала применяется теорема о дифференцировании оригинала [4]

$$F'(\tau) \bullet \circ s f(s) - F(+0).$$

В соответствии с этой записью, представленными в статье обозначениями, формулами (17в) и (19) должно быть записано

$$\frac{dF}{d\tau} = F'(\tau) \bullet \circ s f(s) - F(+0). \quad (23)$$

Согласно соотношению (19) $F(+0) = 0$ и

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{d\tau} & \left\{ \sqrt{\frac{AW}{K^2 \delta x}} \tau \exp\left(-\frac{K}{A}\tau\right) \times \right. \\
 & \left. \times J_1\left(2\sqrt{\frac{K^2 \delta x}{AW}} \tau\right) \right\} \bullet \circ s f(s). \quad (23а)
 \end{aligned}$$

Дифференцирование левой части (23а) после необходимых преобразований приведет к зависимости

$$s f(s) \bullet \rightarrow \exp\left(-\frac{K}{A}\tau\right) \left[J_0\left(2\sqrt{\frac{K^2\delta x}{AW}\tau}\right) - \frac{K}{A}\sqrt{\frac{AW}{K^2\delta x}}\tau J_1\left(2\sqrt{\frac{K^2\delta x}{AW}\tau}\right) \right]. \quad (24)$$

Теперь к выражению (24) применяется первая теорема смещения [7] после умножения его правой части на $\exp\left(-\frac{x}{W}s\right)$.

Тогда будет

$$\exp\left(-\frac{x}{W}s\right) s f(s) \bullet \rightarrow F\left(\tau - \frac{x}{W}\right) = \exp\left[-\frac{K}{A}\times\left(\tau - \frac{x}{W}\right)\right] \left\{ J_0\left[2\sqrt{\frac{K^2\delta x}{AW}\left(\tau - \frac{x}{W}\right)}\right] - \frac{K}{A}\times\sqrt{\frac{AW}{K^2\delta x}\left(\tau - \frac{x}{W}\right)} J_1\left[2\sqrt{\frac{K^2\delta x}{AW}\left(\tau - \frac{x}{W}\right)}\right] \right\}. \quad (25)$$

Таким образом на основании (17в), (21), (22), (25) получено

$$F(x, s) \bullet \rightarrow C(x, \tau) = C_0 \left\{ \exp\left[-\frac{K}{A}\left(\tau - \frac{x}{W}\right)\right] \times J_0\left[2\sqrt{\frac{K^2\delta x}{AW}\left(\tau - \frac{x}{W}\right)}\right] + \frac{K}{A}\exp\left[-\frac{K}{A}\left(\tau - \frac{x}{W}\right)\right] \times \sqrt{\frac{AW}{K^2\delta x}\left(\tau - \frac{x}{W}\right)} J_1\left[2\sqrt{\frac{K^2\delta x}{AW}\left(\tau - \frac{x}{W}\right)}\right] + \frac{K^2}{A^2} \int_{\frac{x}{W}}^{\tau} \sqrt{\frac{AW}{K^2\delta x}} t \exp\left(-\frac{K}{A}t\right) J_1\left(2\sqrt{\frac{K^2\delta x}{AW}t}\right) dt \right\} \times \exp\left[(\delta K + K_c)\frac{x}{W}\right]. \quad (26)$$

Аналогичным образом на основе (18б) осуществляется переход к оригиналам с использованием тех же методов, теорем и таблиц изображений, приведенных выше.

Было получено

$$\Phi(x, s) \bullet \rightarrow C_a(x, \tau) = K C_0 \left\{ \sqrt{\frac{AW}{K^2\delta x}\left(\tau - \frac{x}{W}\right)} \exp\left[-\frac{K}{A}\left(\tau - \frac{x}{W}\right)\right] \times J_1\left[2\sqrt{\frac{K^2\delta x}{AW}\left(\tau - \frac{x}{W}\right)}\right] + \frac{K}{A} \int_{\frac{x}{W}}^{\tau} \sqrt{\frac{AW}{K^2\delta x}} t \times \right.$$

$$\left. \times \exp\left(-\frac{K}{A}t\right) J_1\left(2\sqrt{\frac{K^2\delta x}{AW}t}\right) dt \right\} \times \exp\left[(\delta K + K_c)\frac{x}{W}\right]. \quad (27)$$

Для доведения выражений (26), (27) до числа необходимо численным методом найти один и тот же интеграл, входящий в оба выражения. Поэтому для рационализации вычислений можно выполнить небольшое преобразование на основе дифуравнения (2а).

Для этого следует подставить в правую часть (2а) решения (26) и (27). Тогда после необходимых математических операций можно получить

$$\frac{\partial C_a(x, \tau)}{\partial \tau} = K \left[C(x, \tau) - \frac{C_a(x, \tau)}{A} \right] = K C_0 \times \exp\left[-\frac{K}{A}\left(\tau - \frac{x}{W}\right)\right] J_0\left[2\sqrt{\frac{K^2\delta x}{AW}\left(\tau - \frac{x}{W}\right)}\right] \times \exp\left[(\delta K + K_c)\frac{x}{W}\right]. \quad (28)$$

Откуда

$$C(x, \tau) = \frac{C_a(x, \tau)}{A} + C_0 \exp\left[-\frac{K}{A}\left(\tau - \frac{x}{W}\right)\right] \times J_0\left[2\sqrt{\frac{K^2\delta x}{AW}\left(\tau - \frac{x}{W}\right)}\right] \times \exp\left[(\delta K + K_c)\frac{x}{W}\right]. \quad (29)$$

Кстати, можно отметить, что, если взять производную от (27) по времени, то в точности получится выражение (28), что подтверждает правильность полученных решений.

Таким образом, результаты решений могут быть доведены до числа по следующему алгоритму:

- вычисляется $C_a(x, \tau)$ по выражению (27);
- вычисляется концентрация $C(x, \tau)$ по выражению (29).

Полученные результаты решения исходной задачи полностью подготовлены к программированию на любом алгоритмическом языке высокого уровня.

ЧИСЛЕННАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ РЕЗУЛЬТАТОВ МОДЕЛИРОВАНИЯ

Результаты решения позволили разработать алгоритмы и выполнить программирование задачи для получения численных результатов.

Далее выполняется расчет концентраций $C(x, \tau)$ и $C_a(x, \tau)$ в адсорбции хлороформа

при очистке сточных вод плавательного бассейна цеолитами Татарско-Шаршатранского месторождения Татарстана. Использовались следующие исходные характеристики цеолитового слоя, состоящего из гранул диаметром 4,69 мм.

Истинная плотность гранул, $\rho_u = 2.26 \text{ г/см}^3$; кажущаяся плотность слоя цеолита, $\rho_k = 1.2 \text{ г/см}^3$; насыпная плотность гранул цеолита в слое, $\rho_n = 0.71 \text{ г/см}^3$; порозность слоя цеолита, $\delta = 0.41$; коэффициент $A = 36.4$; $W = 0.00011 \text{ м/с}$ [10]; $C_0 = 15 \text{ мг/л}$; $K = 0.0004351 \text{ м/с}$; $K_c = 0.0001 \text{ м/с}$.

Результаты расчетов представлены на рисунках 1 - 2.

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

На рисунках 1 и 2 представлены графики изменения концентраций хлороформа в адсорбенте и адсорбтиве в зависимости от расстояния x от входа в слой цеолита при фиксированном времени, τ .

Значения концентрации $C(x, \tau)$, как и ожидалось, уменьшаются, а $C_a(x, \tau)$ сначала увеличиваются, а затем уменьшаются вдоль координаты x . Причем, согласно условиям (4), (5) должно быть: при $x > 0$, $\tau \rightarrow 0$ концентрация $C_a(x, 0) \rightarrow 0$, а при $\tau > 0$, $x \rightarrow 0$ концентрация $C(0, \tau) \rightarrow 0$, что в действительности и имеет место.

Решения (26), (27), именно, стремятся к нулю соответственно при $\tau \rightarrow 0$ и $x \rightarrow 0$, а не точно равны нулю. Такие свойства обычно имеют решения, полученные при использовании метода преобразования Лапласа.

В самом деле, решения пригодны при $\tau > \frac{x}{W}$ и фактически граница времени (значит

и граница решения) при постоянной W и различных x перемещается в зависимости от x , в то время как при $\tau \leq \frac{x}{W}$ значения концентраций уже становятся равными нулю, но не точно при $x = 0$.

Поэтому на графиках рисунка 1 концентрация $C(0, \tau)$ обозначена согласно граничному условию равной C_0 , а при $\tau > 0$ концентрация $C_a(x, 0)$ обозначена равной нулю.

Другими словами, нисходящая ветвь кривой концентраций $C(x, \tau)$, как и должно быть, представлена точно выходящей из точки $C(0, \tau) = C_0$, хотя координата x не равна нулю, а восходящая ветвь концентраций $C_a(x, \tau)$ исходящей из точки $C_a(x, 0) = 0$, хотя время τ не равно нулю (условно обозначена пунктиром).

Следует отметить, что вне зависимости от времени характер изменения концентраций на обоих графиках не изменяется, хотя числовые значения величин различны. Также очевидно, что при малых исходных значениях концентраций, которые представлены в статье, концентрация адсорбтива вначале резко уменьшается (сильно отличается от C_0), а затем плавно во всем диапазоне изменения x незначительно уменьшается.

Иными словами, слой цеолита даже небольшой толщины может в течение длительного времени работать в этих условиях, практически

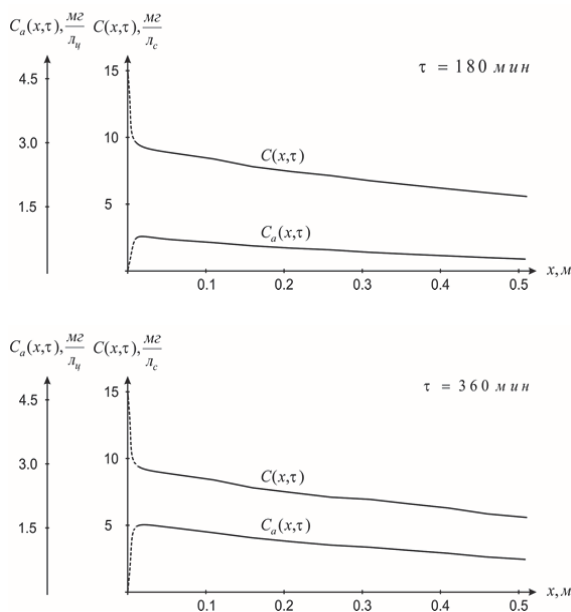


Рис. 1. Изменение концентрации адсорбтива и адсорбата в зависимости от координаты x при фиксированном времени t

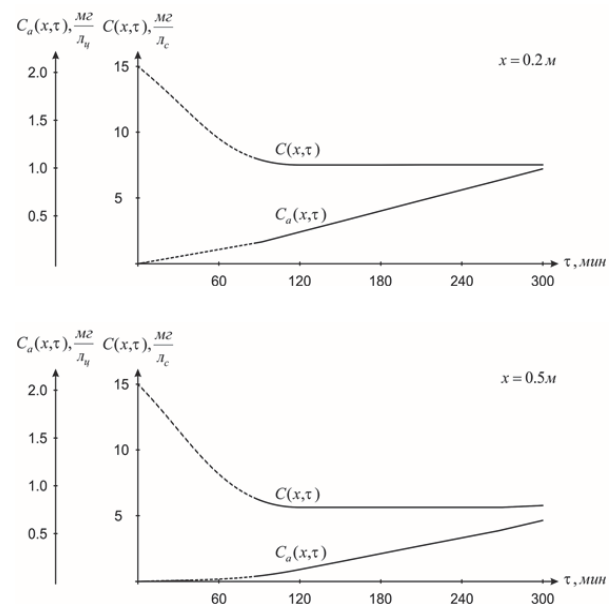


Рис. 2. Изменение концентрации адсорбтива и адсорбата в зависимости от времени t при фиксированном расстоянии x

не изменяя адсорбционных свойств: схождение ветвей кривых $C(x, \tau)$ и $C_a(x, \tau)$ – невелико.

На рисунке 2 представлены графики изменения концентраций целевого компонента в адсорбтиве и адсорбенте при фиксированных значениях x . При построении этих графиков также учитывались вышеотмеченные нюансы, касающиеся графиков на рисунке 1. Поэтому приведенный в них результат понятен, очевидно, и без комментариев.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Из вышеприведенных рассуждений очевидно, что применение методик приемов и теорем метода преобразования Лапласа дало возможность глубоко проникнуть в суть задачи, что не доступно при других методах решения.

Использование метода преобразования Лапласа позволило найти решение задачи адсорбции в новой форме посредством сведения системы двух взаимосвязанных уравнений к системе независимых уравнений и их решению.

Полностью решена практическая задача, от постановки до получения числового результата, по адсорбции хлороформа при очистке стоков плавательных бассейнов. Это позволяет при известном наборе исходных данных по детально разработанному алгоритму, реализованному в виде программы на языке высокого уровня, найти изменение концентраций целевого компонента в обеих фазах и подобрать толщину слоя адсорбента.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Luo X. Simulation, exergy analysis and optimization of a shale oil hydrogenation process for clean fuels production / X. Luo, Q. Guo, D. Zhang, H. Zhou, Q. Yang // *Applied Thermal Engineering*. 2018. Vol. 140. P. 102–111.
2. Зеленая, К.В. Кинетика адсорбции меланоидина из водных растворов активными углями / К.В. Зеленая, Н.С. Голубева, А.Б. Хлопова // *Техника и технология пищевых производств*. – 2017. – Т. 47. – № 4. – С. 130–135.
3. Erdogan A.S., Sazakliodlu A.U. A note in the numerical solution of an identification problem for observing two-phase flow in capillaries // *Mathematical method in the Applied Science*. 2014. Vol. 37, No. 16. P. 2393–2405.
4. Чефранов, С.Г. Линейная неустойчивость плоских течений Куэтта и Пуазейля / С.Г. Чефранов, А.Г. Чефранов // *Журнал экспериментальной и теоретической физики*. – 2016. – Т. 149. – № 5. – С. 1068–1075.
5. Башкиров, Д.В. Математическое моделирование процесса адсорбции на примере осушки влажного воздуха неподвижным слоем силикагеля / Д.В. Башкиров, А.В. Клинов, А.И. Разинов // *Вестник казанского технологического университета*. – 2014. – Т. 17. – № 19. – С. 365–368.
6. Brea P., Delgado J. A., Águeda V. I., Gutiérrez P., Uguina M. A. Multicomponent adsorption of H₂, CH₄, CO and CO₂ in zeolites NaX, CaX and MgX. Evaluation of performance in PSA cycles for hydrogen purification // *Microporous and Mesoporous Materials*. 2019. Vol. 286. P. 187–198.
7. Деч, Г. Руководство к практическому применению преобразования Лапласа и Z-преобразования / Г. Деч. – М.: Наука, 1971. – 288 с.
8. Monde M., Arima H., Liu W., Mitutake Y., Hammad J.A. An analytical solution for two-dimensional inverse heat conduction problems using Laplace transform // *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 2003. Vol. 46. P. 2135–2148.
9. Япарова, Н.М. Метод решения обратной задачи идентификации функции источника с использованием преобразования Лапласа / Н.М. Япарова // *Вестник ЮУрГУ. Серия: Вычислительная математика и информатика*. – 2016. – Т. 5. – № 3. – С. 20–35.
10. Каратаев, О.Р. Моделирование процесса очистки сточных вод в неподвижном слое адсорбента / О.Р. Каратаев, С.В. Анаников // *Вестник НЦ ВостНИИ*. – 2023. – № 3. – С.82–91.

MODEL OF ADSORPTION WASTE TREATMENT INCLUDING A CHEMICAL REACTION

© 2024 O.R. Karataev, S.V. Ananikov, V.A. Lashkov

Kazan National Research Technological University, Kazan, Russia

The article poses and solves the general problem of the dynamics of adsorption from a liquid in a fixed layer of adsorbent, taking into account a first-order chemical reaction and a linear adsorption isotherm. The adsorption model is based on the mass balance equations of the target component for an infinitesimal layer element and adsorption kinetics, written as a system of linear first-order partial differential equations with corresponding boundary conditions. The problem is solved by the Laplace transform method. This made it possible to reduce the joint solution of a system of equations in the originals to an independent solution in images of the Cauchy problem for an ordinary differential equation and an algebraic equation. As a result, expressions were obtained for the concentrations of the target component in the adsorbent layer and in the flow at any time and in any section of the layer. This made it possible to simulate a practical problem of the adsorption of chloroform by zeolites for the treatment of wastewater from a real swimming pool and obtain interesting graphic materials based on the solution and the developed algorithm. The results of the solution can be translated

into numbers by programming in any available high-level algorithmic language. It is shown that the shape of the curves of changes in the concentrations of the target component in the adsorbent and adsorbent over the thickness of the adsorbent layer and over time does not change, although the numerical values of these parameters change in a fairly wide range. It is also noted that in the range of concentration changes considered in the article, the concentration of the adsorbent initially decreases sharply, and then smoothly along the entire length of the fixed adsorbent layer decreases slightly. It has been revealed that the use of methods, techniques and theorems of the Laplace transform method in relation to the problem of adsorption dynamics makes it possible to deeply penetrate the mechanism of the problem being solved, which is not possible with other solution methods. This allows, with a known set of initial data, to find the change in the concentrations of the target component in both phases and select the required thickness of the adsorbent layer.

Keywords: adsorption, adsorbent, adsorptive, adsorption dynamics, target component, phase, mass transfer, model, simulation, laplace transform, original, image.

DOI: 10.37313/1990-5378-2024-26-146-153

EDN: LQRBCY

REFERENCES

1. Luo X. Simulation, exergy analysis and optimization of a shale oil hydrogenation process for clean fuels production / X. Luo, Q. Guo, D. Zhang, H. Zhou, Q. Yang // *Applied Thermal Engineering*. 2018. Vol. 140. P. 102–111.
2. Zelenaya, K.V. Kinetika adsorbции меланойдина из водных растворов активными углями / K.V. Zelenaya, N.S. Golubeva, A.B. Xlopova // *Техника и технология пищевых производств*. – 2017. – Т. 47. – № 4. – С. 130–135.
3. Erdogan A.S., Sazakliodlu A.U. A note in the numerical solution of an identification problem for observing two-phase flow in capillaries // *Mathematical method in the Applied Science*. 2014. Vol. 37, No. 16. P. 2393–2405.
4. Chefranov, S.G. Linejnaya neustojchivost' ploskix techenij Kue'tta i Puazejlya / S.G. Chefranov, A.G. Chefranov // *Zhurnal eksperimental'noj i teoreticheskoj fiziki*. – 2016. – Т. 149. – № 5. – С. 1068–1075.
5. Bashkirov, D.V. Matematicheskoe modelirovanie processa adsorbции na primere osushki vlazhnogo vozduxa nepodvizhny'm sloem silikagelya / D.V. Bashkirov, A.V. Klinov, A.I. Razinov // *Vestnik kazanskogo tekhnologicheskogo universiteta*. – 2014. – Т. 17. – № 19. – С. 365–368.
6. Brea P., Delgado J. A., Águeda V. I., Gutiérrez P., Uguina M. A. Multicomponent adsorption of H₂, CH₄, CO and CO₂ in zeolites NaX, CaX and MgX. Evaluation of performance in PSA cycles for hydrogen purification // *Microporous and Mesoporous Materials*. 2019. Vol. 286. P. 187–198.
7. Dech, G. Rukovodstvo k prakticheskomu primeneniyu preobrazovaniya Laplasy i Z-preobrazovaniya / G. Dech. – М.: Nauka, 1971. – 288 s.
8. Monde M., Arima H., Liu W., Mitutake Y., Hammad J.A. An analytical solution for two-dimensional inverse heat conduction problems using Laplace transform // *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 2003. Vol. 46. P. 2135–2148.
9. Yaparova, N.M. Metod resheniya obratnoj zadachi identifikacii funkciony istochnika s ispol'zovaniem preobrazovaniya Laplasy / N.M. Yaparova // *Vestnik YuUrGU. Seriya: Vychislitel'naya matematika i informatika*. – 2016. – Т. 5. – № 3. – С. 20–35.
10. Karataev, O.R. Modelirovanie processa oshistki stochny'x vod v nepodvizhnom sloe adsorbenta / O.R. Karataev, S.V. Ananikov // *Vestnik NCz VostNII*. – 2023. – № 3. – С.82–91.

Oskar Karataev, Candidate of Engineering Sciences, Associate Professor, Associate Professor of the Department of Fundamentals of Design and Applied Mechanics.

E-mail: oskar_karataev@mail.ru

Sergey Ananikov, Full Active Member of Russian Academy of Natural History (RANH), Doctor of Engineering Sciences, Professor, Honorary Worker of Higher Professional Education of the Russian Federation.

E-mail: ananikovsv@rambler.ru

Vyacheslav Lashkov, Doctor of Technical Sciences, Professor, Head of the Department «Fundamentals of Design and Applied Mechanics». E-mail: office@kstu.ru