

## МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПОКАЗНИКІВ АДСОРБЦІЇ ШЛАКОВИМ СОРБЕНТОМ

*Грайворонський О. В., Грайворонська І. В.*

*Харківський національний автомобільно-дорожній університет*

Для визначення оптимальних умов адсорбції та проведення процесу з високою ефективністю необхідний облік декількох технологічних параметрів. За допомогою математичного моделювання розроблено методику розрахунку показників адсорбції шлаковим сорбентом при варіюванні умов процесу. Використано численні експериментальні дані, отримані при вивченні адсорбції шлаком на основі мінералу діопсид органічного барвника метиленового синього (МС) в умовах зміни експериментальних умов адсорбції: співвідношення «МС: шлак», часу і рН розчинів МС. Кількісні характеристики сорбції: величина адсорбції ( $a$ ) і ефективність сорбції ( $E$ ) залежать від багатьох чинників, серед яких головними є співвідношення «сорбат: шлаковий сорбент» ( $n$ ), час адсорбції ( $\tau$ ) і рН розчину сорбату.

Для математичного опису процесу адсорбції використовувався пакет прикладних програм MATLAB і його підсистеми Toolbox (пакет математичний) – набір спеціалізованих математичних функцій. Пакет прикладних програм вирішує завдання технічних розрахунків, широкий спектр наукових і інженерних задач, в тому числі і оптимізацію систем. Методом найменших квадратів побудовано рівняння регресії залежностей  $a$  і  $E$  від двох експериментальних факторів одночасно. Коефіцієнти рівнянь отримані з 95% -ою вірогідністю.

Розробка розрахунку показників адсорбції шлаковим сорбентом йшла в два етапи. На першому етапі проаналізовані дані щодо зміни кількісних показників адсорбції в залежності від експериментальних параметрів процесу. На другому етапі здійснювалася математична обробка експериментальних результатів за допомогою пакету прикладних програм MATLAB і його підсистеми Toolbox з отриманням рівнянь регресії кількісних характеристик адсорбції від певних параметрів процесу і побудовою відповідних графічних залежностей.

Перший етап. Зі збільшенням кількості шлаку ефективність адсорбції збільшується, проте, характер збільшення неоднаковий для різних часових інтервалів процесу. Для початкового періоду для досягнення достатньої ефективності адсорбції необхідно 5000-кратне перевищення кількості шлаку над кількістю МС. За 5 діб аналогічна ефективність досягається при 1250-кратному перевищенні кількості шлаку. При тривалості процесу 10 діб адсорбція ефективна при 1000-кратному надлишку адсорбенту.

При співвідношенні «МС: шлак» = 2 мг/г після 11 діб починається десорбція, тому дане співвідношення не можна рекомендувати для тривалої адсорбції. На 11 добу зареєстрована найвища  $a = 1,17$  мг/г при найнижчій ефективності очищення 58,5%.

Доцільно використання співвідношення «МС: шлак» = 1 мг/г, при якому протягом перших 12 діб  $a$  і  $E$  зростають з найбільшою швидкістю. Висока ефективність очищення 92% реєструється при досить високій  $a = 0,92$  мг/г. Протягом 30 діб не спостерігається десорбції.

Другий етап. Із загальної кількості первинних експериментальних результатів для розробки методики використані дані, що свідчать про відсутність десорбції МС. Вони дозволили отримати рівняння залежностей  $a$  і  $E$  від часу сорбції  $\tau$  і співвідношення «МС: шлак» ( $n$ ).

Рівняння регресії « $a - \tau - n$ »:

$$a = 2,11 + 0,02222 \tau - 3,266 n - 0,0008168 \tau^2 + 0,01455 \tau \cdot n + 1,579 n^2. \quad (1)$$

Рисунок 1 є графічним зображенням цієї залежності. Червоним і помаранчевим кольором відзначені найбільш ефективні умови адсорбції, відповідні найбільшим  $a$ . Представлене рівняння регресії другого порядку за параметрами процесу  $\tau$  і  $n$ . Більш ретельний аналіз експериментальних даних і математичного підходу дозволив отримати рівняння регресії третього порядку:

$$a = 5,938 + 0,03538 \tau - 17,87 n - 0,003823 \tau^2 + 0,07923 \tau \cdot n + 18,14 n^2 + 6,477 \cdot 10^{-5} \tau^3 - 0,0002236 \tau^2 \cdot n - 0,03111 \tau \cdot n^2 - 5,892 n^3. \quad (2)$$

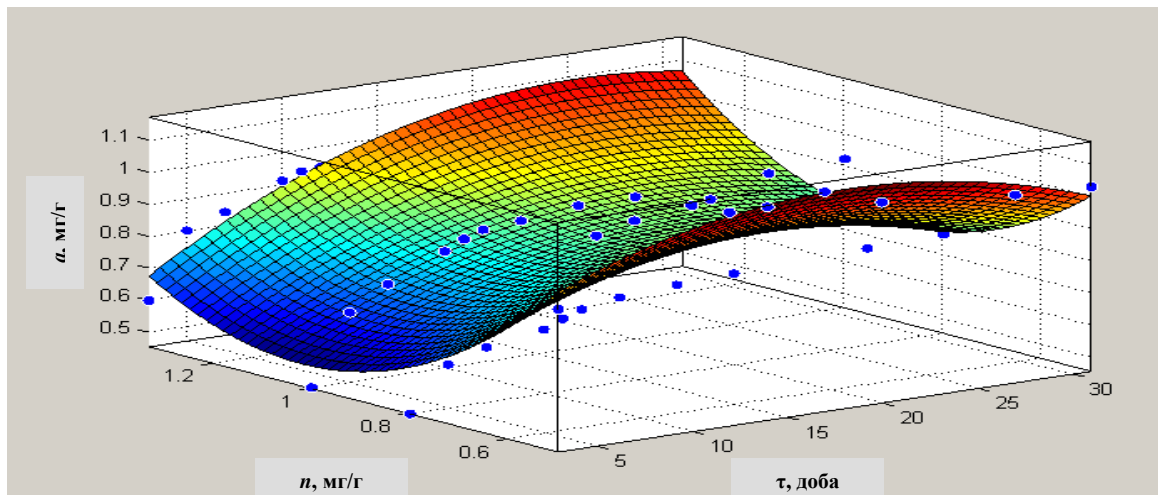


Рисунок 1 – Графічне зображення залежності  $a = 2,11 + 0,02222 \tau - 3,266 n - 0,0008168 \tau^2 + 0,01455 \tau \cdot n + 1,579 n^2$

Графічне зображення залежності (2) наведено на рис. 2. На відміну від тривимірної залежності рис. 1 поверхня менш вигнута, розширена сфера оптимальних значень  $a$ . Рівняння регресії третього порядку (2) більш точно відображає залежність « $a - \tau - n$ » і може бути рекомендовано для розрахунку  $a$ .

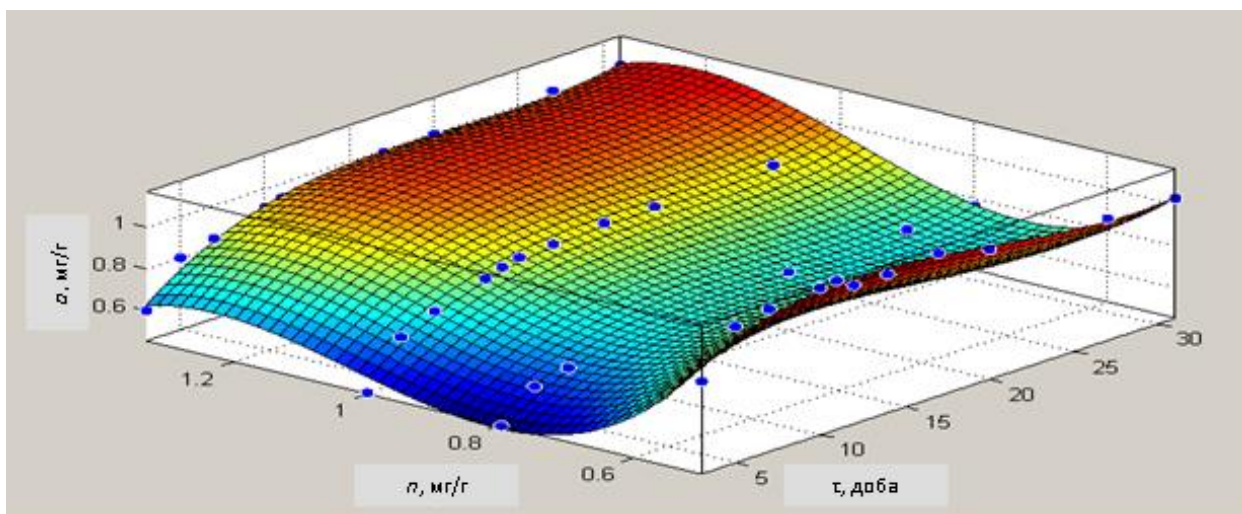


Рисунок 2 – Графічне зображення залежності  $a = 5,938 + 0,03538 \tau - 17,87 n - 0,003823 \tau^2 + 0,07923 \tau \cdot n + 18,14 n^2 + 6,477 \cdot 10^{-5} \tau^3 - 0,0002236 \tau^2 \cdot n - 0,03111 \tau \cdot n^2 - 5,892 n^3$

Рівняння регресії другого порядку (3) для залежності ефективності вилучення сорбату МС ( $E$ ) від  $\tau$  і  $n$  « $E - \tau - n$ » виглядає наступним чином:

$$E = -52,64 + 2,256 \tau + 242,9 n - 0,07112 \tau^2 + 1,012 \tau \cdot n - 132,8 n^2 \quad (3)$$

і відображається графічною залежністю на рис. 3. Широка область оптимальних значень  $E$ , які реєструються в тих же інтервалах значень  $\tau$  і  $n$ , що і для залежності « $a - \tau - n$ », вираженої рівнянням регресії третього порядку, є підтвердженням правильності вибору рівняння (2) для опису залежності « $a - \tau - n$ ».

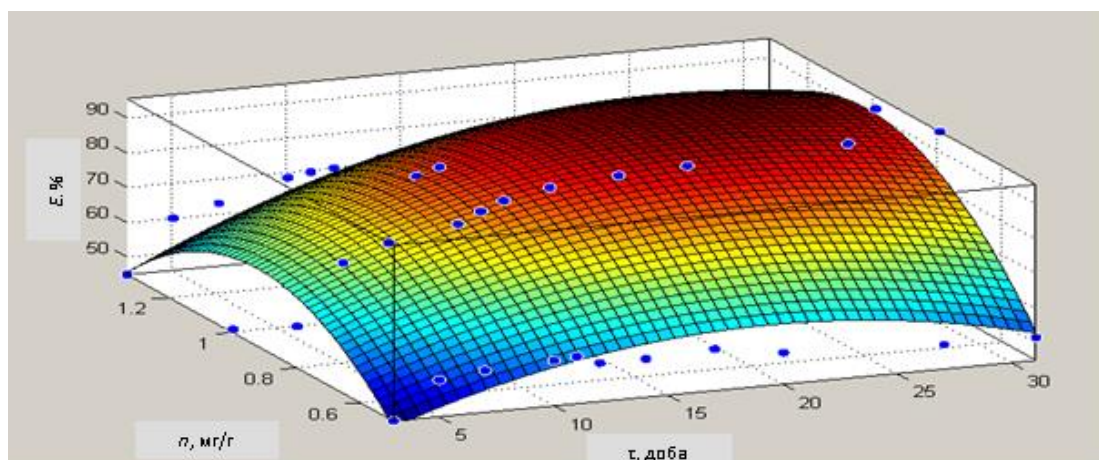


Рисунок 3 – Графічне зображення залежності  $E = -52,64 + 2,256 \tau + 242,9 n - 0,07112 \tau^2 + 1,012 \tau \cdot n - 132,8 n^2$

pH водних розчинів впливає на перебіг адсорбції і змінює її кількісні показники. Адсорбція з дуже кислих і лужних розчинів менш інтенсивна, ніж з нейтральних середовищ. Збільшення pH з 2,2 до 4,8 призводить до більш значного прискорення адсорбції, ніж при подальшому підвищенні pH до 10,4. Причому відмінність в швидкості адсорбції з розчинів з різними pH збільшується в часі. Практично повне вилучення МС з розчинів можливо при 4,8 pH 10,4 за інтервал часу не менше 7 діб. Ефективність вилучення МС за даний інтервал становить (89-97)%,  $a = (90-93)\%$  від її максимуму. З дуже кислих розчинів адсорбція МС ускладнюється в порівнянні з адсорбцією з нейтральних розчинів. Отримано рівняння регресії другого порядку для залежності « $a - \text{pH} - \tau$ »:

$$a = -0,02022 + 0,0312 \text{ pH} + 0,02194 \tau - 0,002069 (\text{pH})^2 - 0,0002651 \text{ pH} - 0,0009393 \tau^2, \quad (3)$$

яке відображається графічною залежністю на рис. 4. Область оптимальних значень  $a$  широка і чітко виражена, що підтверджує достовірність регресійної залежності графічно відображуваним рис. 5.

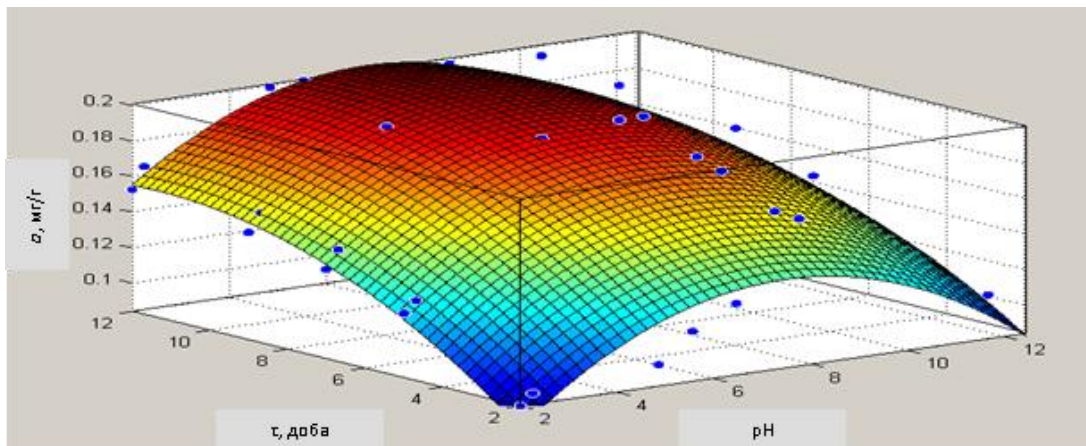


Рисунок 4 – Графічне зображення залежності  $a = -0,02022 + 0,0312 \text{ рН} + 0,02194 \tau - 0,002069 (\text{рН})^2 - 0,0002651 \text{ рН} \cdot \tau - 0,0009393 \tau^2$

Залежність « $E - \text{рН} - \tau$ » виражається рівнянням регресії другого порядку:

$$E = -10,1 + 15,6 \text{ рН} + 10,97 \tau - 1,034 (\text{рН})^2 - 0,1324 \text{ рН} \cdot \tau - 0,4694 \tau^2, \quad (4)$$

Область оптимальних значень  $E$  повністю збігається з подібною областю для  $a$  (рис. 4), що відповідає про достовірність рівнянь регресії (4) і (5).

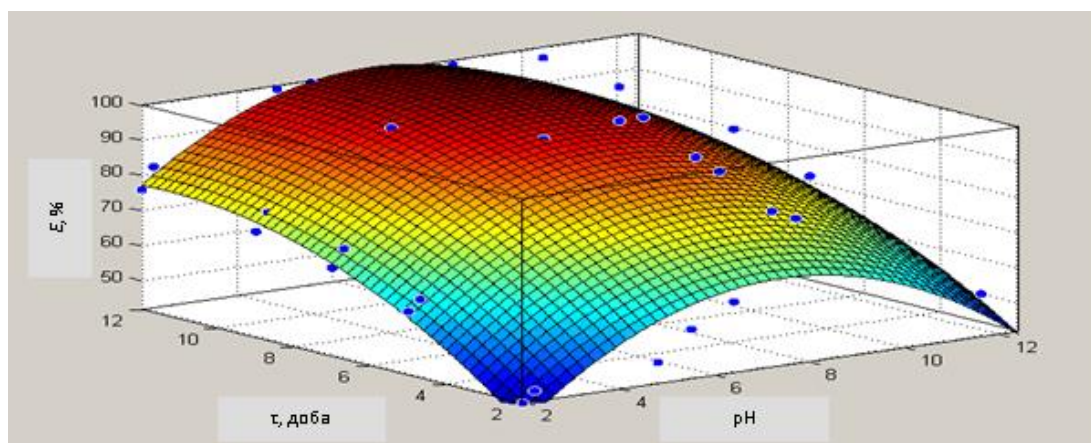


Рисунок 5 – Графічне зображення залежності  $E = -10,1 + 15,6 \text{ рН} + 10,97 \tau - 1,034 (\text{рН})^2 - 0,1324 \text{ рН} \cdot \tau - 0,4694 \tau^2$

Методика розрахунку показників адсорбції шлаковим сорбентом на основі діопсиду базується на достовірних рівняннях регресії, включає основні кількісні показники і параметри протікання адсорбційного процесу, дозволяє визначити оптимальні умови адсорбції органічних сполук, розрахувати величину адсорбції в статичному режимі і ефективність адсорбції для певних умов. Методика рекомендується для прогнозування перебігу сорбційної очистки промислових стічних вод в реальних умовах.