

М. Баб'юк

Галицький інститут імені В'ячеслава Чорновола

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ АДСОРБЦІЙНОГО МАСОПЕРЕНОСУ ДЛЯ ОДНО- І ДВОСКЛАДОВИХ НАПІВОБМЕЖЕНИХ СЕРЕДОВИЩ

Методами інтегрального перетворення Лапласа та функцій Коші побудовані точні аналітичні розв'язки математичних моделей адсорбційного масопереносу для однорідного і двоскладового напівобмеженого пористого середовища та здійснено числове моделювання концентраційних полів для технологічних систем адсорбційного очищення води.

M. Babiuk

MATHEMATICAL MODELING OF ADSORPTION MASSTRANSFER FOR ONE AND TWO COMPONENTS HALF LIMITED MEDIAS

The problem of adsorption mass transfer for homogeneous and two components half limited porous medias is presented. The exact analytical solution of this problem is found by application of integral Laplace transformation and Coshy functions. The numerical analysis of model for some values of process parameters is evaluated.

Вступ

Створення сучасних адсорбційних технологій і матеріалів очищення розчинів потребує вивчення механізмів кінетики та інтенсифікації адсорбційного масопереносу в багатозарових неоднорідних середовищах різної природи. Це вимагає розвитку нових підходів моделювання, що дозволяють описувати внутрішню кінетику переносу з урахуванням інтерфейсних взаємодій та нестационарних режимів масопереносу на масообмінних поверхнях. Проблеми математичного моделювання дифузійно-адсорбційного масопереносу в однорідних і неоднорідних пористих середовищах та методи побудови математичних розв'язків таких моделей були розглянуті в роботах Ликова [6], Сергіска, Скопечкого, Дейнеки [9], Леника, Петрика [1-4], Fraissard, Springuel-Huet, N'Gokoli-Kেকে Laurence [7], Karger, Ruthven [8]. В [1,3], зокрема, подана теорія інтегральних перетворень та практика їх застосувань для задач масопереносу для неоднорідних і пористих середовищ з урахуванням системи механізмів інтерфейсних взаємодій між елементами переносу та нестационарних режимів масообміну на масообмінних поверхнях. З використанням викладеної в [1] методики в пропонованій праці побудовані і досліджені на ПК математичні моделі окремих технологічних процесів адсорбційного очищення води рідини масопереносу для однорідних і двоскладових напівобмежених робочих каналів з урахуванням нестационарних технологічних режимів масообміну на масообмінних межах.

1 Математична модель адсорбційного масопереносу для напівобмеженого однорідного середовища. Розглядається крайова задача адсорбційного масопереносу: побудувати обмежений в області $D = \{(t, z), t \geq 0, z \in (l_0, \infty)\}$ розв'язок системи рівнянь

$$\frac{\partial C(t, z)}{\partial t} + \frac{\partial a(t, z)}{\partial t} + \eta^2 C = D_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} + f(t, z); \quad (1.1)$$

$$\frac{\partial a}{\partial t} = \beta_0 (C - \gamma a) \quad (1.2)$$

з початковими умовами

$$C(t, z)|_{t=0} = C_0(z); \quad a(t, z)|_{t=0} = a_0(z) \quad (1.3)$$

та крайовими умовами

$$\left[\left(\alpha_{11}^0 + \delta_{11}^0 \frac{\partial}{\partial t} \right) \frac{\partial}{\partial z} + \beta_{11}^0 + \gamma_{11}^0 \frac{\partial}{\partial t} \right] C|_{z=l_0} = \omega_0(t), \quad \frac{\partial C}{\partial z}|_{z=\infty} = 0. \quad (1.4)$$

Тут $C(t, z)$, $a(t, z)$ – концентрації адсорбованої речовини в рідинній (потоці очислюваної рідини) та твердій (адсорбційній) фазах переносу; D_z – відповідно ефективний коефіцієнт дифузії (стосовно напрямку переносу z) [$\text{м}^2/\text{с}$]; β_0 – загальний коефіцієнт масопередачі; γ – коефіцієнт адсорбції; η^2 – константа хімічного перетворення речовини (першого порядку); $f(t, z)$ – розподілені джерела (стоки) мас. Диференціальне рівняння (1.1) описує матеріальний баланс при переносі, рівняння (1.2) описує кінетику фазового переходу при переносі. Крайові умови (1.4) подані в найзагальнішій формі, яка враховує найрізноманітніші види масопереносу по границях, в тому числі наявність нестационарних режимів масообміну (диференціальний оператор $\frac{\partial}{\partial t}$ в крайових умовах) на граничних масообмінних межах з навколишнім середовищем.

Вважаючи припустимим виконання умов інтегрального перетворення Лапласа стосовно часової змінної t [5]

$$L[U(t, z)] \equiv \int_0^\infty U(t, z) e^{-pt} dt \equiv U^*(p, z) \quad (1.5)$$

та застосовуючи останнє до розглядуваної задачі (1)–(4), отримуємо у зображенні за Лапласом крайову задачу: побудувати обмежений в області $D_1 = \{z: z \in (l_0, \infty)\}$ розв'язок рівняння:

$$\frac{d^2 C^*}{dz^2} - q^2 C^* = -F^*(p^*, z) \quad (1.6)$$

за крайовими умовами

$$\left(\bar{\alpha}_{11}^0 \frac{d}{dz} + \bar{\beta}_{11}^0 \right) C^*(p, z)|_{z=l_0} = \omega_0^*(p) + \omega_{01}; \quad \frac{\partial C^*}{\partial z} \Big|_{z=\infty} = 0. \quad (1.7)$$

Тут прийняті позначення

$$F^*(p, z) = \frac{1}{D_z} \left(f^*(p, z) + C_0(z) + \frac{\gamma \beta_0}{p + \gamma \beta_0} \alpha_0(z) \right), \quad \omega_{01} = \left(\delta_{11}^0 \frac{d}{dz} + \gamma_{11}^0 \right) C_0(z) \Big|_{z=l_0},$$

$$q^2 = \frac{1}{D_z(p + \gamma \beta_0)} \left[p^2 + p(\gamma \beta_0 + \beta_0 + \eta^2) + \gamma \beta_0 \cdot \eta^2 \right], \quad \bar{\alpha}_{11}^0 = \alpha_{11}^0 + p \delta_{11}^0; \quad \bar{\beta}_{11}^0 = \beta_{11}^0 + p \gamma_{11}^0.$$

Зафіксуємо вітку, на якій $\text{Re } q > 0$. Безпосередньо перевіряється, що розв'язком крайової задачі (6), (7) є функція:

$$C^*(p, z) = \frac{e^{-qz}}{-\bar{\alpha}_{11}^0 q + \bar{\beta}_{11}^0} \left[\omega_0^*(p) + \omega_{01} \right] + \int_0^\infty \left[\frac{e^{-q(z-\xi)}}{2q} + \frac{e^{-q(z+\xi)}}{2q} - \frac{2\bar{\beta}_{11}^0}{-\bar{\alpha}_{11}^0 q + \bar{\beta}_{11}^0} \frac{e^{-q(z+\xi)}}{2q} \right] F^*(p, \xi) d\xi \equiv$$

$$\equiv W^*(p, z) \cdot \omega_0^*(p) + W^*(p, z) \cdot \omega_{01} +$$

$$+ \frac{1}{D_z} \int_0^\infty E^*(p, z, \zeta) \left[f^*(p, \zeta) + C_0(\zeta) \right] d\zeta + \frac{\gamma \beta_0}{D_z} \int_0^\infty E^*(p, z, \zeta) \frac{\alpha_0(\zeta)}{p + \gamma \beta_0} d\zeta, \quad l_0 = 0. \quad (1.8)$$

Особливими точками головних розв'язків (функції Гріна $W^*(p, z)$ та фундаментальної функції $E^*(p, z)$ є точки розгалуження

$$p = \infty, \quad p_{1,2} = -\frac{1}{2} \left[\beta_0(1 + \gamma) + \eta^2 \pm \sqrt{\beta_0 \left[\beta_0(1 + 2\gamma) + 2\eta^2 \right] + (\beta_0 \gamma - \eta^2)^2} \right] < 0.$$

Звідси випливає, що в півплощині $\operatorname{Re} q > 0$ головні розв'язки $\tilde{W}^*(p, z)$; $E^*(p, z, \zeta)$ є аналітичними функціями. Тому за означенням знаходимо [5]:

$$W(t, z) = L^{-1}[W^*(p, z)] = \frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma_0 - i\infty}^{\sigma_0 + i\infty} W^*(p, x) e^{px} dp = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} W^*(p, x) e^{ix} dp = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} W^*(is, x) e^{ix} ds =$$

$$q = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \operatorname{Re}[W^*(is, z) e^{i\eta}] ds; \quad E(t, z, \zeta) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \operatorname{Re}[E^*(is, z, \zeta) e^{i\eta}] ds.$$

Повертаючись у формулі (8) до оригіналу, отримуємо єдиний розв'язок вихідної задачі:

$$C(t, z) = \int_0^t W(t - \tau, z) \cdot \omega_0(\tau) d\tau + W(t, z) \cdot \omega_0 + \frac{1}{D_z} \int_0^t \int_0^{\infty} E(t - \tau, z, \zeta) \times$$

$$\times [f(t, \xi) + C_0(\xi) \delta_+(\tau)] d\xi d\tau + \frac{\gamma \beta_0}{D_z} \int_0^t \int_0^{\infty} E(t - \tau, z, \xi) e^{-\gamma \beta_0 \tau} d\tau \cdot a_0(\xi) d\xi \quad (1.9)$$

$$a(t, z) = e^{-\gamma \beta_0 t} \cdot a_0(z) + \beta_0 \int_0^t e^{-\gamma \beta_0(t-\tau)} C(\tau, z) d\tau \equiv \int_0^t e^{-\gamma \beta_0(t-\tau)} [\beta_0 C(\tau, z) + \delta_+(\tau) a_0(z)] d\tau, \quad (1.10)$$

$\delta_+(t)$ - дельта-функція, зосереджена в точці $t = 0 +$.

2 Модель адсорбційного масопереносу для напівобмеженого двоскладового середовища. Розглядається масоперенос адсорбцією, який протікає у напівобмеженому двосторонньому середовищі, замкненому двома шарами адсорбітами з різними фізико-хімічними характеристиками. З урахуванням нестационарності масопереносу на масообмінних машинах можна сформулювати математичну задачу: побудувати обмежений в області $D_2 = \{(t, z) : t \geq 0, z \in (l_0, l_1) \cup (l_1, \infty)\}$ розв'язок системи рівнянь:

$$\frac{\partial C_k}{\partial t} + \frac{\partial a_k}{\partial t} + \eta_k^2 C_k = D_{z_k} \frac{\partial^2 C_k}{\partial z^2} + f_k(t, z); \quad (2.1)$$

$$\frac{\partial a_k}{\partial t} = \beta_k (C_k - \gamma_k a_k) \quad (2.2)$$

за початковими умовами

$$C_k(t, z)|_{t=0} = C_{0k}(z); \quad a_k(t, z)|_{t=0} = a_{0k}(z), \quad k=1, 2 \quad (2.3)$$

крайовими умовами та умовами спряження за геометричною координатою з:

$$\left[\left(\alpha_{11}^0 + \delta_{11}^0 \frac{\partial}{\partial t} \right) \frac{\partial}{\partial z} + \left(\beta_{11}^0 + \gamma_{11}^0 \frac{\partial}{\partial t} \right) \right] C_1(t, z) \Big|_{z=l_0} = \omega_0(t); \quad \frac{\partial C_2}{\partial z} \Big|_{z=\infty} = 0; \quad (2.4)$$

$$\left\{ \left[\left(\alpha_{j1}^1 + \delta_{j1}^1 \frac{\partial}{\partial t} \right) \frac{\partial}{\partial z} + \left(\beta_{j1}^1 + \gamma_{j1}^1 \frac{\partial}{\partial t} \right) \right] C_1(t, z) - \right.$$

$$\left. - \left[\left(\alpha_{j2}^1 + \delta_{j2}^1 \frac{\partial}{\partial t} \right) \frac{\partial}{\partial z} + \left(\beta_{j2}^1 + \gamma_{j2}^1 \frac{\partial}{\partial t} \right) \right] C_2(t, z) \right\} \Big|_{z=l_1} = \omega_{j1}(t), \quad j=1, 2.$$

Припустимо, що шукані та задані функції вихідної задачі є оригіналом за Лалласом стосовно t . Застосувавши до задачі (2.1) – (2.5) інтегральне перетворення Лалласа, отримаємо крайову задачу [5]: побудувати обмежений на множині $I_1 = \{z : z \in (l_0, l_1) \cup (l_1, \infty), l_0 \geq 0\}$ розв'язок системи диференціальних рівнянь

$$\frac{d^2 C_k^*(p, z)}{dz^2} - q_k^2 C_k^*(p, z) = -\frac{1}{D_z} F_k^*(p, z), \quad k=1, 2 \quad (2.6)$$

за крайовими умовами

$$\left(\bar{\alpha}_{11}^0 \frac{d}{dz} + \bar{\beta}_{11}^0 \right) C_1^*(p, z) \Big|_{z=l_0} = \omega_1^*(p); \frac{dC_2^*}{dz} \Big|_{z=\infty} = 0 \quad (2.7)$$

та умовами спряження

$$\left[\left(\bar{\alpha}_{j1}^1 \frac{d}{dz} + \bar{\beta}_{j1}^1 \right) C_1^*(p, z) - \left(\bar{\alpha}_{j2}^1 \frac{d}{dz} + \bar{\beta}_{j2}^1 \right) C_2^*(p, z) \right] \Big|_{z=l_j} = \bar{\omega}_{j1}^*(p), \quad j=1,2. \quad (2.8)$$

У рівностях (2.6)–(2.8) прийняті позначення:

$$q_k^2 = (p^2 + p[\beta_k(1 + \gamma_k) + \eta_k^2] + \beta_k \gamma_k \eta_k^2) [D_{2k}(p + \beta_k \gamma_k)]^{-1},$$

$$\bar{\omega}_{j1}^*(p) \equiv \omega_{j1}^*(p) + \omega_{j,01}, \quad \omega_{j,01} = \left[(\delta_{j1}^1 d/dz + \gamma_{j1}^1) C_{01}(z) - (\delta_{j2}^1 d/dz + \gamma_{j2}^1) C_{02}(z) \right] \Big|_{z=l_1}, \quad (2.9)$$

$$\omega_1^*(p) \equiv \omega_0^*(p) + \omega_{01} \equiv \omega_0^*(p) + (\delta_{11}^0 d/dz + \gamma_{11}^0) C_{01}(z) \Big|_{z=l_0}; \quad j=1,2;$$

$$a_k^*(p, z) = \frac{a_{0k}(z)}{p + \beta_k \gamma_k} + \frac{\beta_k}{p + \beta_k \gamma_k} C_k^*(p, z); \quad F_k^*(p, z) = f_k^*(p, z) + C_{0k}(z) + \frac{\beta_k \gamma_k}{p + \beta_k \gamma_k} a_{0k}(z).$$

Фундаментальну систему розв'язків для диференціального рівняння Фур'є $(d^2/dz^2 - q^2)\psi = 0$ утворюють функції $v_1 = \exp(-qz)$ та $v_2 = \exp(+qz)$ або їх лінійні комбінації $v_1 = \exp(qz)$ та $v_2 = \exp(-qz)$ [1].

Загальний розв'язок крайової задачі (2.6)–(2.8) будемо за правилами [1]:

$$C_1^*(p, z) = A_1 \exp(q_1 z) + B_1 \exp(q_2 z) + \int_{l_0}^{l_1} E_1^*(p, z, \zeta) F_1^*(p, \zeta) d\zeta \quad (2.10)$$

$$C_2^*(p, z) = B_2 \exp(-q_2(z-l_1)) + \int_{l_1}^{\infty} E_2^*(p, z, \zeta) F_2^*(p, \zeta) d\zeta$$

У рівностях (2.10) беруть участь функції Коші [1]:

$$E_1^*(p, z, \zeta) = -\frac{1}{q_1 \Delta_{11}(p)} \left\{ \Phi_{11}^0(q_1 l_0, q_1 z) \Phi_{11}^1(q_1 l_1, q_1 \zeta), \quad l_0 < z < \zeta < l_1, \right. \quad (2.11)$$

$$E_2^*(p, z, \zeta) = -\frac{1}{q_2 (\bar{\alpha}_{12}^1 q_2 - \bar{\beta}_{12}^1)} \left\{ e^{-q_2(\zeta-l_1)} \Phi_{12}^1(q_2 l_1, q_2 z), \quad l_1 < z < \zeta < \infty, \right. \quad (2.12)$$

Крайова умова в точці $z=l_0$ та умови спряження (2.8) в точці $z=l_1$ дають алгебраїчну систему з трьох рівнянь:

$$V_{11}^{01}(q_1 l_0) A_1 + V_{11}^{02}(q_1 l_0) B_1 = \omega_1^*(p),$$

$$V_{j1}^{11}(q_1 l_1) A_j + V_{j1}^{12}(q_1 l_1) B_j + (\bar{\alpha}_{j2}^1 q_2 - \bar{\beta}_{j2}^1) B_2 = \bar{\omega}_{j1}^* + \delta_{j2} G_{12}, \quad j=1,2. \quad (2.13)$$

У рівностях (2.11)–(2.13) беруть участь функції:

$$V_{j1}^{m1}(q_1 l_m) = \bar{\alpha}_{j1}^m q_1 \exp(q_1 l_m) + \bar{\beta}_{j1}^m \exp(q_1 l_m), \quad m=0,1;$$

$$V_{j1}^{m2}(q_1 l_m) = \bar{\alpha}_{j1}^m q_1 \exp(q_1 l_m) + \bar{\beta}_{j1}^m \exp(q_1 l_m),$$

$$\Delta_{j1}(q_1 l_0, q_1 l_1) \equiv \Delta_{j1}(p) = V_{j1}^{01}(q_1 l_0) V_{j1}^{12}(q_1 l_1) - V_{j1}^{02}(q_1 l_0) V_{j1}^{11}(q_1 l_1), \quad j=1,2;$$

$$G_{12} = -c_{11}^*(p) \int_{l_0}^{l_1} \frac{\Phi_{11}^0(q_1 l_0, q_1 \zeta)}{\Delta_{11}(p)} F_1^*(p, \zeta) d\zeta - c_{21}^*(p) \int_{l_1}^{\infty} \frac{e^{-q_2(\zeta-l_1)}}{\bar{\alpha}_{12}^1 q_2 - \bar{\beta}_{12}^1} F_2^*(p, \zeta) d\zeta,$$

$$c_{j1}^*(p) = \bar{\alpha}_{j1}^1 \bar{\beta}_{j1}^1 - \bar{\alpha}_{j1}^1 \bar{\beta}_{j1}^1, \quad \bar{\alpha}_{mj}^1 = \alpha_{mj}^1 + p \delta_{mj}^1, \quad \bar{\beta}_{mj}^1 = \beta_{mj}^1 + p \gamma_{mj}^1,$$

δ_{j2} - символ Кронекера, $\operatorname{Re} q_j > 0$, $j=1,2$.

Припустимо, що виконала умова однозначної розв'язності крайової задачі (2.6)-(2.8): для $p = \sigma + i\delta$ з $\operatorname{Re} p = \sigma > \sigma_0$, де σ_0 - абсциса збіжності інтеграла Лапласа, та $\operatorname{Im} p = \delta \in (-\infty, +\infty)$ визначник алгебраїчної системи (2.13) відмінний від нуля

$$\Delta(p) = (\bar{\alpha}_{22}^1 q_2 - \bar{\beta}_{22}^1) \Delta_{11}(p) - (\bar{\alpha}_{12}^1 q_2 - \bar{\beta}_{12}^1) \Delta_{21}(p) \neq 0. \quad (2.14)$$

Визначимо головні розв'язки даної крайової задачі:

1) породжені неоднорідністю системи (2.6) функції впливу

$$\begin{aligned} H_{11}^*(p, z, \zeta) &= \frac{1}{q_1 \Delta(p)} \left\{ \Phi_{11}^0(q_1 l_0, q_1 z) \left[(\bar{\alpha}_{12}^1 q_2 - \bar{\beta}_{12}^1) \Phi_{21}^1(q_1 l_1, q_1 \zeta) - \right. \right. \\ &\quad \left. - (\bar{\alpha}_{22}^1 q_2 - \bar{\beta}_{22}^1) \Phi_{11}^1(q_1 l_1, q_1 \zeta) \right], \quad l_0 < z < \zeta < l_1, \\ &\quad \left. - (\bar{\alpha}_{22}^1 q_2 - \bar{\beta}_{22}^1) \Phi_{11}^1(q_1 l_1, q_1 z) \right], \quad l_0 < \zeta < z < l_1, \\ H_{12}^*(p, z, \zeta) &= -\frac{c_{21}^*(p)}{\Delta(p)} \Phi_{11}^0(q_1 l_0, q_1 z) e^{-q_2(\zeta - l_1)}, \\ H_{21}^*(p, z, \zeta) &= -\frac{c_{11}^*(p)}{\Delta(p)} \Phi_{11}^0(q_1 l_0, q_1 \zeta) e^{-q_2(z - l_1)}, \end{aligned} \quad (2.15)$$

$$\begin{aligned} H_{22}^*(p, z, \zeta) &= \frac{1}{q_2 \Delta(p)} \left\{ e^{-q_2(\zeta - l_1)} \left[\Delta_{11}(p) \Phi_{22}^1(q_2 l_1, q_2 z) - \right. \right. \\ &\quad \left. - \Delta_{21}(p) \Phi_{12}^1(q_2 l_1, q_2 z) \right], \quad l_1 < z < \zeta < \infty, \\ &\quad \left. - \Delta_{21}(p) \Phi_{12}^1(q_2 l_1, q_2 \zeta) \right], \quad l_1 < \zeta < z < \infty, \end{aligned}$$

2) породжені крайовою умовою в точці $z = l_0$ функції Гріна

$$\begin{aligned} W_{11}^*(p, z) &= \frac{1}{\Delta(p)} \left[(\bar{\alpha}_{22}^1 q_2 - \bar{\beta}_{22}^1) \Phi_{11}^1(q_1 l_1, q_1 z) - (\bar{\alpha}_{12}^1 q_2 - \bar{\beta}_{12}^1) \Phi_{21}^1(q_1 l_1, q_1 z) \right], \\ W_{12}^*(p, z) &= \frac{c_{11}^*(p)}{\Delta(p)} q_1 e^{-q_2(z - l_1)}, \end{aligned} \quad (2.16)$$

3) породжені неоднорідністю умов спряження (2.8) функції Гріна

$$\begin{aligned} R_{11,1}^*(p, z) &= -\frac{\bar{\alpha}_{22}^1 q_2 - \bar{\beta}_{22}^1}{\Delta(p)} \Phi_{11}^0(q_1 l_0, q_1 z), \quad R_{21,1}^*(p, z) = \frac{\bar{\alpha}_{12}^1 q_2 - \bar{\beta}_{12}^1}{\Delta(p)} \Phi_{11}^0(q_1 l_0, q_1 z), \\ R_{11,2}^*(p, z) &= -\frac{\Delta_{21}(p)}{\Delta(p)} e^{-q_2(z - l_1)}, \quad R_{21,2}^*(p, z) = \frac{\Delta_{11}(p)}{\Delta(p)} e^{-q_2(z - l_1)}. \end{aligned} \quad (2.17)$$

У результаті однозначної розв'язності алгебраїчної системи (2.13), підстановки одержаних значень A_1 , B_1 , B_2 у рівності (2.10) після низки елементарних перетворень маємо єдиний розв'язок крайової задачі (2.6)-(2.8):

$$\begin{aligned} C_j^*(p, z) &= W_{1j}^*(p, z) \omega_1^*(p) + \sum_{k=1}^2 R_{k1,j}^*(p, z) \bar{\omega}_{k1}^*(p) + \\ &+ \int_{l_0}^{l_1} H_{j1}^*(p, z, \zeta) F_1^*(p, \zeta) d\zeta + \int_{l_1}^{\infty} H_{j2}^*(p, z, \zeta) F_2^*(p, \zeta) d\zeta; \quad j=1,2 \end{aligned} \quad (2.18)$$

Особливими точками вище згаданих головних розв'язків є точки розгалуження:

$$P_{1,2} = -\frac{1}{2} \left[(\beta_k (1 + \gamma_k) + \eta_k^2) \pm \sqrt{(-\beta_k \gamma_k + \eta_k^2)^2 + \beta_k (\beta_k (1 + 2\gamma_k) + 2\eta_k^2)} \right] < 0.$$

Звідси випливає, що у півплощині $\text{Re } p \geq 0$ побудовані головні розв'язки з аналітичними функціями. За означенням оригіналів головних розв'язків вихідної задачі (2.1) - (2.5) маємо [35]:

а) породжені крайовою умовою в точці $z=l_0$ функції Гріна

$$\begin{aligned} W_{1k}(t, z) &= L^{-1} [W_{1k}^*(p, z)] = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} W_{1k}^*(p, z) e^{p\tau} dp \Big|_{p=ts} = \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} W_{1k}^*(is, z) e^{i\omega s} ds = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \text{Re} [W_{1k}^*(is, z) e^{i\omega s}] ds, k=1, 2; \end{aligned} \quad (2.19)$$

б) породжені неоднорідністю умов спряження функції Гріна

$$R_{1k}(t, z) = L^{-1} [R_{1k}^*(p, z)] = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \text{Re} [R_{1k}^*(is, z) e^{i\omega s}] ds; \quad (2.20)$$

в) породжені неоднорідністю системи (початкових умов) функції впливу

$$H_{kj}(t, z, \zeta) = L^{-1} [H_{kj}^*(p, z, \zeta)] = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \text{Re} [H_{kj}^*(is, z, \zeta) e^{i\omega s}] ds, \quad j=1, 2. \quad (2.21)$$

Повертаючись до оригіналу у формі (2.9), отримаємо єдиний розв'язок вихідної змішаної задачі (2.1)-(2.5):

$$\begin{aligned} C_k(t, z) &= \int_0^t W_{1k}(t-\tau, z) \omega_0(\tau) d\tau + W_{1k}(t, z) \omega_{01} + R_{11,k}(t, z) \omega_{10,1} + R_{21,k}(t, z) \omega_{20,1} + \\ &+ \int_0^t R_{11,k}(t-\tau, z) \omega_{11}(\tau) d\tau + \int_0^t R_{21,k}(t-\tau, z) \omega_{21}(\tau) d\tau + \\ &+ \int_0^2 \sum_{k_1=1}^2 \frac{1}{D_{2k_1}} \int_{l_{k_1-1}}^{l_{k_1}} H_{k,k_1}(t-\tau, z, \zeta) [f_{k_1}(\tau, \zeta) + C_{0k_1}(\zeta) \delta_k(\tau)] d\zeta d\tau + \sum_{k_1=l_{k_1-1}}^{l_{k_1}} \int_{l_{k_1-1}}^{l_{k_1}} Z_{k,k_1}(t, z, \zeta) a_{0k}(\zeta) d\zeta, \quad l_2 = \infty, \end{aligned} \quad (2.22)$$

$$a_k(t, z) = e^{-\beta_k \gamma_k t} a_{0k}(z) + \beta_k \int_0^t C_k(t-\tau, z) e^{-\beta_k \gamma_k \tau} d\tau \quad (2.23)$$

$$Z_{k,k_1}(t, z, \zeta) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \text{Re} \{ H_{k,k_1}(is, z, \zeta) (\beta_{k_1} \gamma_{k_1} - is) e^{i\omega s} \} \frac{\beta_{k_1} \gamma_{k_1} ds}{D_{2k_1} (s^2 + \beta_{k_1}^2 \gamma_{k_1}^2)}. \quad (2.24)$$

3 Числове моделювання і аналіз концентраційних полів

Розглядається задача адсорбційного масопереносу для процесу очищення питної води від хімічно активних речовин (органічних сполук, фенолів), вміст яких у воді визначається інтегральним показником хімічного забруднення ХСК (хімічне споживання кисню), що необхідний для їх нейтралізації. Використання сучасних адсорбційних технологій дозволяє суттєво знизити індекс ХСК питної води без додаткових капітало- та енерговитрат на додаткове доочищення води. Для числового моделювання використовується розв'язок моделі адсорбційного масопереносу для однорідного одновимірного напівобмеженого каналу (реального середовища переносу) (1.9)-(1.10).

Початкові дані, основні технологічні обмеження і допущення, що використовувались при числовому моделюванні. Розв'язок математичної моделі (2.16) - (2.18) реалізований у вигляді пакету прикладних програм на мові камп'ютерного математичного моделювання Maple 7 при таких обмеженнях:

1) $C|_{t=0} = C_0 \equiv \text{const}$ - приведена (безрозмірна) концентрація * (індекс ХСК) в робочому середовищі в рідинній фазі в початковий момент часу;

2) значення констант в початкових та крайових умовах: $\beta_{11}^0 = \delta_{11}^0 = \gamma_{11}^0 = 0$; $\alpha_{11}^0 = 1$; $\omega_0 = 0$;

3) $D_x = 0.000004 \frac{m^2}{s}$ - ефективний коефіцієнт дифузії для середовища - система рідина-тверде пористе тіло (вода-активоване вугілля) [98];

4) $\beta = 0.1; 1.15; 0.2; 0.4, [s^{-1}]$ - загальний коефіцієнт масопереносу, що враховує ступінь пористості адсорбенту;

5) $\gamma = 1.5 \div 1.4$ - константа адсорбції (безрозмірна величина) або кінстичний параметр, що визначає швидкість поглинання адсорбентом (активованим вугіллям) адсорбованої речовини (органічних сполук) з води;

6) $a|_{t=0} = a_0 \equiv const$ - безрозмірна ХСК у твердій фазі (в адсорбції у початковий момент часу): $C_0 = 1$; $a_0 = 10^{-5}$;

7) $z^* = \frac{1-z}{\infty}$ - безрозмірна геометрична координата довжини робочого каналу.

Аналіз кінетики адсорбції. Результати числового моделювання на ПК процесу адсорбційного масопереносу згідно з математичною моделлю (1.1) – (1.3) та початковими умовами і основними технологічними обмеженнями, поданими вище, показані на рис. 1 – 5.

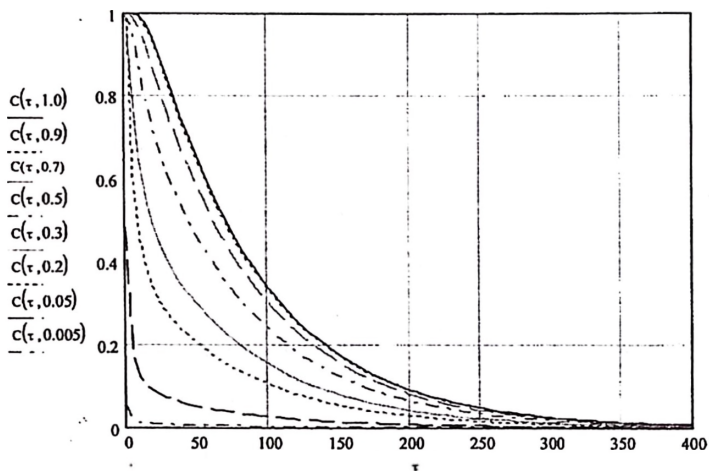


Рисунок 1 - Нестационарні просторово-розподілені поля розподілів концентрацій ХСК $C(\tau, z)$ у H_2O : $\beta = 0.01$; $\gamma_{11}^0 = 0$.

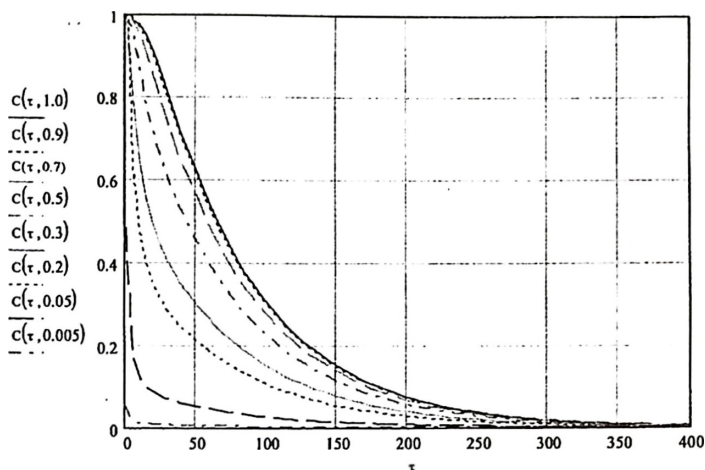


Рисунок 2 - Нестационарні просторово-розподілені поля розподілів концентрацій ХСК $C(\tau, z)$ у H_2O : $\beta = 0.1$; $\gamma_{11}^0 = 0$.

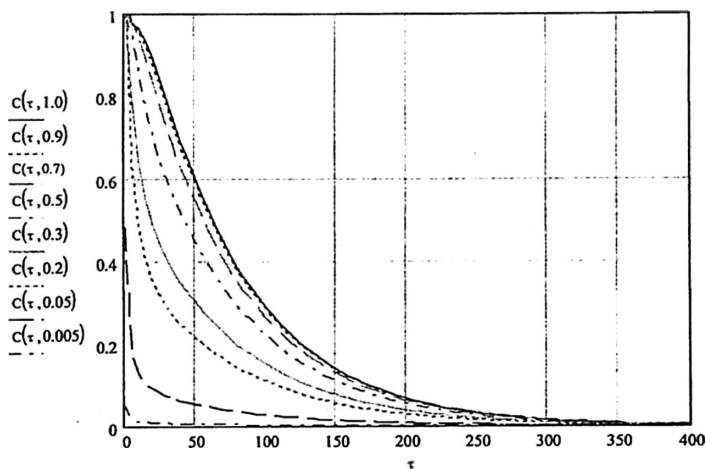


Рисунок 3 - Нестационарні просторово-розподілені поля розподілів концентрацій ХСК $C(\tau, z)$ у H_2O : $\beta = 0.15$; $\gamma_{11}^0 = 0$.

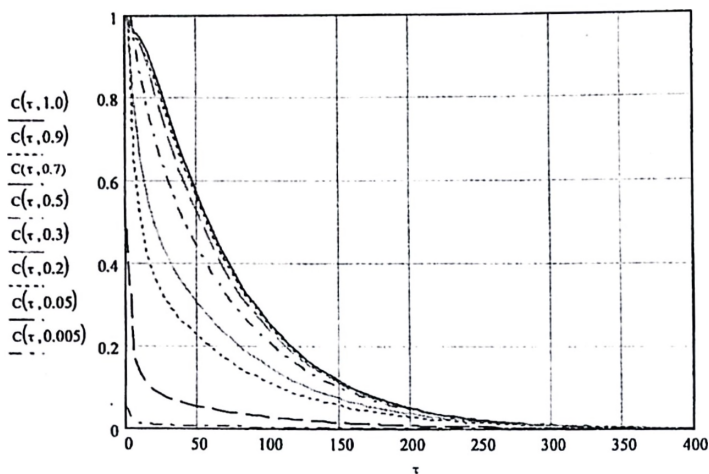


Рисунок 4 - Нестационарні просторово-розподілені поля розподілів концентрацій ХСК $C(\tau, z)$ у H_2O : $\beta=0.2$; $\gamma_{11}^0=0$.

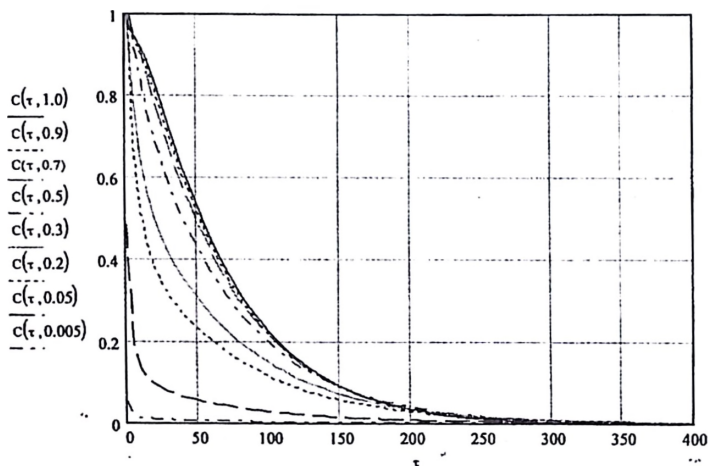


Рисунок 5 - Нестационарні просторово-розподілені поля розподілів концентрацій ХСК $C(\tau, z)$ у H_2O : $\beta=0.4$; $\gamma_{11}^0=0$.

Аналіз концентраційних профілів – полів нестационарних просторово-розподілених концентрацій ХСК у рідинній фазі для адсорбційного масопереносу (рис. 1- 5) показує наступне. Із ростом коефіцієнта масопереносу β від 0,01 до 0,1 тривалість адсорбції зменшується від 400 до 250 одиниць (тут τ - приведений (безрозмірний) час). Отже, найкращі результати щодо мінімізації тривалості очищення

при заданому ступені очищення ($C_{\text{допуст}} < 10^{-5}$) показують такі адсорбційні матеріали: активоване вугілля із показником $\beta \geq 0.4$.

При зміні положення безрозмірної геометричної координати z^* від 1 до нуля, що відповідає зміні геометричної змінної z від 0 до ∞ , профілі розподілу концентрацій – ХСК в рідинній фазі (воді) у робочому каналі змінюються наступним чином. У початковий момент часу приведена концентрація ХСК в рідинній фазі адсорбційного середовища дорівнює 1, що відповідає початковій умові (2). З ростом часу τ від 0 до 100 – 150 одиниць (рис. 1) спостерігаємо стадію експоненціального спаду концентрації $C(\tau, z^*)$, причому при прямуванні z^* від 1 до 0 $C(\tau, z^*)$ різко падає до нуля.

Наступною важливою стадією (τ змінюється від 150 до 300 одиниць), з точки зору керування технологічним процесом, є стадія відносно пологого (квазілінійного) спаду концентрацій $C(\tau, z^*)$ по довжині всієї робочої області, що свідчить про вихід процесу на режим стабілізації – стану динамічної рівноваги процесу адсорбції, що виникає між концентраціями адсорбтиву (поглинутої) речовини порами адсорбенту та рівноважною їй концентрації в рідкій фазі. Режим стабілізації (стан динамічної рівноваги) процесу наступає практично для усіх ділянок робочого середовища при діапазоні зміни τ від 300 – 350 одиниць і більше. Це дає змогу технологічно узгодити максимальну тривалість протікання процесу очистки на одиницю маси з максимально допустимою довжиною робочого каналу при заданому ступені очищення ($C_{\text{допуст}} < 10^{-5}$).

Аналізуючи картину кінетики процесу відповідно до отриманих графічних залежностей (рис. 1–5), можна встановити ще одну важливу особливість. При наближенні безрозмірної геометричної координати z^* до 1 та $z^* \rightarrow 0$ ми спостерігаємо збіжність концентраційних профілів до їх значень, визначених крайовими умовами задачі (3) (дані фізичних експериментів), що ще раз підкреслює вірогідність математичного і чисельного розв'язку моделі та її адекватність даним фізичного експерименту.

На рис. 6 показана інтегральна функція ефективності поглинання адсорбцією органічних домішок, розчинених у воді, яка визначається за формулою:

$$S(\tau) = \int_0^{\infty} a(\tau, z^*) dz^*$$

при різних значеннях константи адсорбції γ : ($\gamma_1 = 1.1$; $\gamma_2 = 1.4$), які визначають різний ступінь поглинання адсорбтиву (адсорбції ХСК).

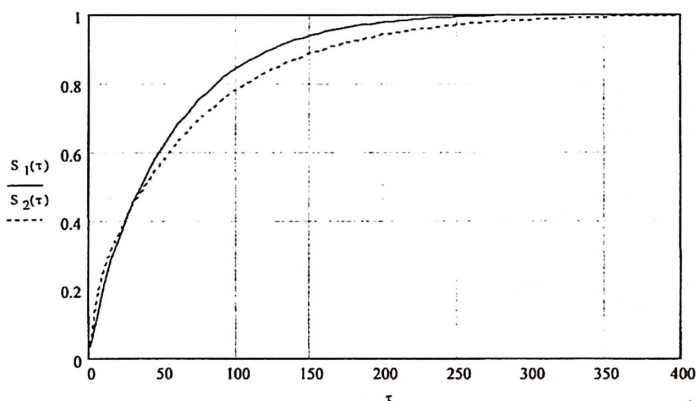


Рисунок 6 - Інтегральна функція ефективності адсорбції ХСК.

Інтегральна функція ефективності адсорбції ХСК $S(\tau)$ дає змогу розраховувати кількість поглиненої адсорбованої маси на одиницю маси адсорбенту або вхідного потоку. Як видно з рис. 6, при положенні часу $\tau = 200$ одиниць, що відповідає половині тривалості технологічного циклу адсорбції, адсорбент поглинає понад 80% максимально можливої кількості маси, яку він може поглинути ($S_1(200) \approx 80\%$); ($S_2(200) \approx 85\%$).

Впродовж другого періоду технологічної тривалості процесу $\tau \approx 200 \div 400$ одиниць поглинається від 15 до 20 відсотків маси. Найочевидніше, що це є стадія „тонкого поглинання” адсорбенту, що відповідає стадії тонкої очистки рідини і потребує подальшого дослідження і аналізу: оцінки технічних параметрів.

Висновки

З використанням методів інтегрального перетворення Лапласа та функцій впливу Коші побудовані точні аналітичні розв'язки математичних моделей адсорбційного переносу для однорідних і двоскладових напівобмежених середовищ стосовно систем технологічного очищення води. Здійснено числове моделювання концентраційних полів досліджуваних технологічних систем очищення з урахуванням нестационарних технологічних режимів масообміну на масообмінних межах.

Література

1. Лєнюк 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. — 372с.
2. Лєнюк М.П., Петрик М.Р. Математичне моделювання дифузійного масопереносу зі спектральним параметром для n – інтерфейсних неоднорідних і нанопористих обмежених середовищ //Волинський математичний вісник. Серія прикладна математика, 2003.-Вип. 1. - С. 69-95.
3. Лєнюк М.П., Петрик М.Р. Математичне моделювання адсорбційного масопереносу зі спектральним параметром для неоднорідних n – інтерфейсних циліндричних обмежених мікропористих середовищ з порожниною //Вісник Тернопільського державного технічного університету, 2004. -Том. 9. № 4. - С. 147-148.
4. Петрик М.Р. Математичне моделювання іспілійних динамічних задач адсорбції та дифузії для нерухомого шару адсорбенту // Інтегральні перетворення та їх застосування до крайових задач: Зб. наук. пр. - Київ: Ін-т. матем. НАНУ, 1993.-Вип. 5.- С. 201-215.
5. Лаврєнтієв М.А., Шабат Б.В. Методи теорії функції комплексного перемінного. - М.: Наука, 1965. - 715с.
6. Лыков А.В. Теория теплопроводности. – М.: Высшая Школа, 1967.-600с.
7. P. N'Gokoli-Kekele, M. A. Spiringuel-Huet, J. Fraissard. An Analitical Study of Molecular Transport in Zeolite Bed. Adsorption.(Kluwer), 8, 35-44, (2002).
8. Karger, J. and D. Ruthven, Diffusion in Zeolites and Other Microporous Solids, John Wiley & Sons, New York, 1992.
9. Сергієнко І.В., Скопецкий В.В., Дейнека В.С. Математическое моделирование и исследование процессов в неоднородных средах. – К.: Наукова думка, 1991.- 432 с.
10. Петрик М.Р., Баб'юк М.П. Двовимірний асиметричний математичний модель двофазного сорбційного масопереносу із спектральним параметром для напівобмеженого двоскладового (по вісі z) середовища// Вісник Херсонського державного технічного університету, 2000.-Т.2.- С. 36-41.
11. М.П. Баб'юк. Інтегральні перетворення Фур'є на двоскладовому сегменті зі спектральним параметром // Нелинейные краевые задачи математической физики и их приложения. Сборник научных трудов.- Киев, 1999.-С. 12-15.
12. Петрик М., Баб'юк М. Математичне моделювання і дослідження кінетики адсорбції в системі "рідина-тверде тіло"// Мат. 2-го Міжнародного Смакулового симпозиуму.-Тернопіль:ТДТУ імені Івана Пулюя, 2000.-С.92-93.

Одержано 16.01.2007 р.