

Н. А. Ткачук, канд. техн. наук,

Л. М. Мельник, д-р. техн. наук,

В. М. Криворотько, канд. техн. наук

Національний університет харчових технологій

МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ МАСООБМІНУ ПЕРІОДИЧНОЇ АДСОРБЦІЇ ДОМІШОК ІЗ ПИТНОЇ ВОДИ В НЕРУХОМОМУ ШАРІ АДСОРБЕНТА

Розроблена математична модель процесу масообміну періодичної адсорбції домішок із питної води в нерухомому шарі адсорбента, яка побудована на основі дифузійної моделі. Визначено фізичні константи і кінетичні характеристики масопереносу домішок в порах адсорбенту.

Ключові слова: математична модель, масообмін, адсорбція, адсорбент.

Для проведення процесу очищення питної води від небажаних домішок в автоматичному режимі була розроблена математична модель масообміну періодичної адсорбції домішок із питної води в нерухомому шарі адсорбента. Модель побудована на основі дифузійної моделі з урахуванням найбільш важливих параметрів, що визначають кінетику процесу, а також на основі аналізу фізичних явищ, що мають місце в пористому просторі, і включає рівняння, що описують:

© Н.А. Ткачук, Л.М. Мельник, В.М. Криворотько, 2011

1. процеси переносу речовини в рідкій фазі:

$$D_1 \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - \frac{V}{e} \cdot \frac{\partial C}{\partial x} - \beta_1 \cdot (C - C^*) = e \frac{\partial C}{\partial t}, \quad (1)$$

2. процеси переносу речовини в твердій фазі:

$$D_2 \cdot \rho \frac{\partial^2 a}{\partial x^2} + \beta_1 \cdot (C - C^*) = \frac{1-e}{e} \cdot \frac{\partial a}{\partial t}, \quad (2)$$

де $C^* = \frac{a}{A - k \cdot a}$ — рівноважна концентрація.

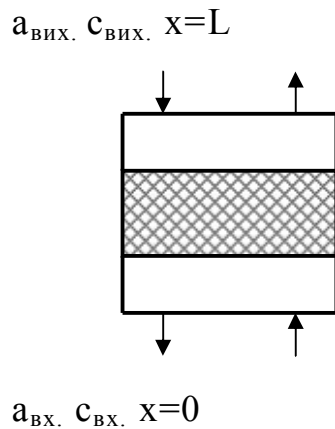


Рис.1 Схема адсорбера з нерухомим шаром адсорбенту

Початкові і граничні умови:

а) по рідкій фазі б) по твердій фазі

$$\text{при } x=0; D_1 \cdot \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{V}{e} \cdot (C - C_0); \quad \text{при } x=0; D_2 \cdot \frac{\partial a}{\partial x} = \beta_2 \cdot (a - a^*);$$

$$\text{при } x=L; \frac{\partial C}{\partial x} = 0;$$

$$\text{при } t=0; c = C_0 = C_{\text{вх}};$$

$$\text{при } x=L; \frac{\partial a}{\partial x} = 0;$$

$$\text{при } t=0; a = a_0,$$

де D_1 — коефіцієнт повздовжнього переносу в рідині, $\text{м}^2/\text{год}$; C — концентрація домішок в рідкій і твердій фазах, од. ХПК; x — координата; V — швидкість руху рідини в шарі (з розрахунку на повний переріз апарата, $\text{м}/\text{год}$; e — поруватість шару адсорбенту; t — час, год ; D_2 — коефіцієнт ефективної дифузії домішок в поруватому середовищі, $\text{м}^2/\text{год}$; ρ — насипна густина шару, $\text{кг}/\text{м}^3$; C_0 — концентрація домішок на вході в апарат, од. ХПК; a_0 — початковий вміст домішок в адсорбенті, од. ХПК; β_1 — коефіцієнт масопередачі, $1/\text{год}$; β_2 — коефіцієнт внутрішнього масопереносу, $1/\text{год}$; A, k — коефіцієнти адсорбційно-десорбційної рівноваги, $\text{дм}^3/\text{г}$, $\text{дм}^3/\text{мл}$.

Для рішення математичної моделі необхідно розрахувати параметри, що в неї входять, а також побудувати ізотерму адсорбції.

Ізотерма адсорбції була побудована при встановлених в процесі досліджень оптимальних параметрах очищення питної води від іонів заліза глауконітом (рис.2).

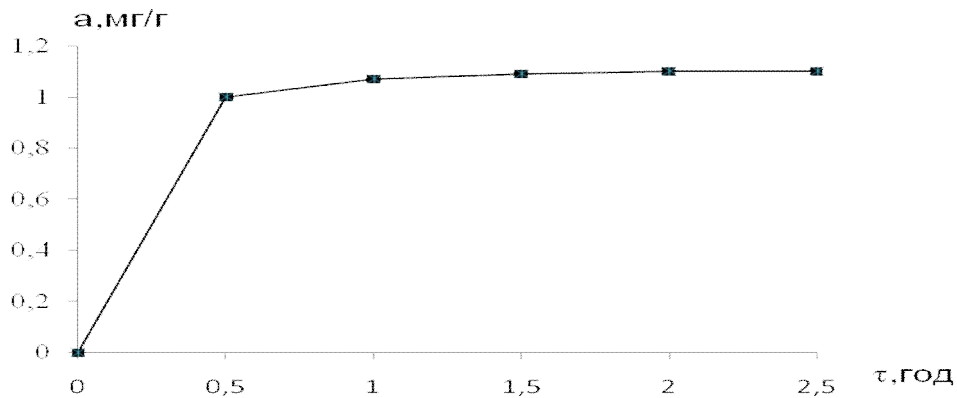


Рис.2 Крива адсорбції іонів заліза із питної води глауконітом при концентрації адсорбента 10 % мас і різних тривалостях процесу
Для обчислення коефіцієнта дифузії використали вираз :

$$D = \frac{k \cdot r^2}{\pi^2 \cdot \tau_{0.5}}, \quad (3)$$

де k — коефіцієнт, який залежить від форми гранул (для кулеподібної $k=0,318$);
 r — еквівалентний радіус частинок адсорбента; $\tau_{0.5}$ — проміжок часу від початку досліду до моменту, коли кількість адсорбованої речовини досягає 50 % рівноважної величини адсорбції.

Еквівалентний радіус частинки обчислюємо за рівнянням:

$$r = \frac{d}{2} = \frac{\sqrt[3]{\frac{6 \cdot m}{\pi \cdot n \cdot \rho_{\text{ч}}}}}{2}, \quad (4)$$

де m — маса адсорбента, кг; n — кількість частинок у зразку, шт.; $\rho_{\text{ч}}$ — густина адсорбента, кг/м³:

$$r = \frac{d}{2} = \frac{\sqrt[3]{\frac{6 \cdot 0,001}{3,14 \cdot 28 \cdot 2100}}}{2} = 1,225 \cdot 10^{-3}(\text{м}).$$

Тоді

$$D = \frac{0,318 \cdot (1,225 \cdot 10^{-3})^2}{3,14^2 \cdot 900} = 0,54 \cdot 10^{-10}(\text{м}).$$

Для визначення коефіцієнта ефективної дифузії, що враховує відмінність реального механізму перенесення маси в капілярно-пористому тілі, скористаємося рівнянням:

$$D_2 = D \cdot \varepsilon, \quad (5)$$

де ε — пористість часток, що дорівнює 0,45

$$D_2 = 0,54 \cdot 10^{-10} \cdot 0,45 = 0,243 \cdot 10^{-10} (\text{м}^2/\text{с}).$$

Коефіцієнт внутрішнього масоперенесення β_T суттєво залежить від величини адсорбції: з її збільшенням β_T знижується, а величина загального дифузійного опору, віднесена до масоперенесення у твердій фазі, зростає. Зміна гідродинамічного режиму адсорбційного процесу практично не впливає на величину коефіцієнта β_T :

$$\beta_T = 4 \cdot \pi^2 \cdot \frac{D}{d_p^2} = 4 \cdot (3,14)^2 \cdot \frac{0,54 \cdot 10^{-10}}{(2,5 \cdot 10^{-2})^2} = 0,34 \cdot 10^{-3} (\text{с}^{-1}). \quad (6)$$

Уявімо собі апарат з мішалкою, в який завантажено W об'ємних одиниць рідини і визначену кількість пористих частинок, які поглинули частину розчину. Прийmemo загальний об'єм поглинутої рідини — V . У результаті перемішування тверді пористі частинки перейдуть у завислий стан і кожна з них буде оточена рідиною. Почнеться перехід речовини із пор твердих частинок в зовнішню рідку фазу. Середня концентрація речовини в порах, що складала раніше величину C_0 , зменшиться до величини C_2 . Концентрація рідини при цьому збільшується із C_n до C_1 . Складемо рівняння балансу для будь-якого моменту часу:

$$V(\bar{C}_2 - C_2) = W(C_1 - C_n); \quad (7)$$

$$\beta_2(\bar{C}_0 - C_2) = C_1 - C_n, \quad (8)$$

де $\beta_2 = \frac{V}{W}$.

В реальних процесах адсорбції в нерухомому шарі чітке розмежування і кількісна оцінка лімітуючих стадій є дуже складною фізичною задачею. Тому для кінетики процесу адсорбції використовують наближене рівняння виду:

$$\frac{\partial \alpha}{\partial \tau} = \beta_1 [c - c^*(a)], \quad (9)$$

де β_1 — загальний коефіцієнт масопередачі.

Він може бути визначений за рівнянням:

$$\frac{1}{\beta_1} = \frac{1}{\beta_2} + \frac{1}{\beta_T} + \frac{D_2}{u^2}, \quad (10)$$

де β_2 — коефіцієнт масоперенесення в рідкій фазі; β_T — коефіцієнт масоперенесення в твердій фазі; D_2 — коефіцієнт ефективної дифузії; u — лінійна швидкість руху дисперсного мінерала.

Якщо прийняти витрати твердої і рідкої фази $W = 1,5 \cdot 10^{-3} (\text{м}^3 / \text{м}^2 \cdot \text{с})$ та порозність рухомого шару дисперсної фази $\varepsilon = 0,5$, то лінійна швидкість руху дисперсного мінерала:

$$u = W / (1 - \varepsilon) = \frac{1,5 \cdot 10^{-3}}{1 - 0,5} = 3 \cdot 10^{-3} (\text{м/с}) \quad (11)$$

Критерій Прандля:

$$\text{Pr} = \frac{\mu}{\rho \cdot D} = \frac{1 \cdot 10^{-3}}{1000 \cdot 0,54 \cdot 10^{-10}} = 1,85 \cdot 10^{-10} \quad (12)$$

Критерій Рейнольдса:

$$\text{Re} = \frac{u \cdot d \cdot \rho}{\mu} = \frac{3 \cdot 10^{-3} \cdot 2,5 \cdot 10^{-3} \cdot 1000}{1 \cdot 10^{-3}} = 7,5 \quad (13)$$

Критерій Нусельта:

$$\text{Nu} = 0,8 \cdot \sqrt[3]{\text{Pr}} \cdot \sqrt{\text{Re}} = 0,8 \cdot 10 \cdot 2,65 \cdot 2,74 = 58,1. \quad (14)$$

Величина коефіцієнта масовіддачі:

$$\beta_2 = \frac{\text{Nu} \cdot D}{2 \cdot r} = 58,1 \cdot \frac{0,54 \cdot 10^{-10}}{2,5 \cdot 10^{-3}} = 12,55 \cdot 10^{-7} (1/\text{с}). \quad (15)$$

Коефіцієнт масопередачі:

$$\frac{1}{\beta_1} = \frac{1}{\beta_2} + \frac{1}{\beta_T} + \frac{D_2}{u^2} = \frac{1}{12,55 \cdot 10^{-7}} + \frac{0,243 \cdot 10^{-10}}{9 \cdot 10^{-6}} = 80294 \quad (16)$$

$$\beta_1 = \frac{1}{80294} = 0,12 \cdot 10^{-5} (\text{с}^{-1}).$$

Коефіцієнт повздовжнього перенесення в рідині обчислюємо за рівнянням:

$$D_1 = \frac{L^2}{\tau \cdot \text{Pe}}, \quad (17)$$

Де L — діаметр адсорбера; τ — час; Pe — критерій Пекле.

Критерій Пекле обчислюємо із рівняння:

$$Pe = \frac{u \cdot l}{D} \quad (18)$$

$$D_1 = \frac{0,45^2}{60 \cdot 60 \cdot 19} \quad 0,29 \cdot 10^{-5} (\text{м/с}).$$

На основі представленої математичної моделі підібрана програма, за допомогою якої можна розрахувати розподіл домішок по висоті адсорбера.

Висновки. Розроблена математична модель очищення питної води дає можливість передбачити розподіл небажаних домішок по висоті адсорбера.

Побудовано кінетичну криву адсорбції іонів заліза глауконітом.

Розраховано фізичні константи: (коефіцієнт дифузії, коефіцієнт ефективної дифузії) та кінетичні характеристики: (коефіцієнти: масо- передачі, масоперенесення), які сприяли рішенню розробленої математичної моделі.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Аксельруд Г.А.* Исследование кинетики адсорбции бензойной и серной кислот из водных растворов / Г.А. Аксельруд, А.Е. Кашеев., М.Б. Левицкая // Журн. прикл. химии. — 1990. — №5. — С.1092-1094.

2. *Алексеев Е.Л.* Моделирование и оптимизации технологических процессов в пищевой промышленности /Е. Л. Алексеев, В. Ф. Пахомов.— М.: Агропромиздат,1988. — 273 с.

Одержана редколегією 26.09.2011

Н. А. Ткачук, Л. Н. Мельник, В. М. Криворотько,

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА МАССООБМЕНА ПЕРИОДИЧЕСКОЙ АДСОРБЦИИ ПРИМЕСЕЙ ИЗ ПИТЬЕВОЙ ВОДЫ В НЕПОДВИЖНОМ СЛОЕ АДСОРБЕНТА

Разработана математическая модель процесса массообмена периодической адсорбции примесей из питьевой воды в неподвижном слое адсорбента, которая построена на основе диффузионной модели. Определены

физические константы и кинетические характеристики массопереноса примесей в порах адсорбента.

Ключевые слова: математическая модель, массообмен, адсорбция, адсорбент.

N. Tkachuk, L. Melnik, V. Krivorotko,

**A DESIGN OF PROCESS OF MASS-TRANSFER OF PERIODIC
ADSORPTION OF ADMIXTURES FROM DRINKING-WATER IN
IMMOBILE LAYER OF ADSORBENT**

The mathematical model of the process for mass transfer of impurities periodic adsorption from drinking water within adsorbent's immovable layer, based on diffusion model, has been elaborated. Physical constants and kinetic parameters of impurities mass transfer in adsorbent's pores have been determined.

Key words: mathematical model, mass transfer, adsorption, adsorbent.