

УДК 504.064+628.316.12

Петрушка І. М., Мальований М.С., Петрушка К.І. (Львів, Україна)

**ОСНОВИ МОДЕЛЮВАННЯ МЕХАНІЗМУ СОРБЦІЇ ЗАБРУДНИКІВ З РІДИННИХ  
СЕРЕДОВИЩ ПРИРОДНИМИ СОРБЕНТАМИ**

Можливість передбачити та регулювати інтенсивність сорбційних процесів дозволяє в значній мірі підвищити ефективність використання сорбентів, зокрема в природоохоронних технологіях. Моделювання механізму селективної здатності природних сорбентів в системі «рідина-тверда фаза» в основному залежать від кінетики процесу. Якщо час циклу адсорбції є значно меншим від часу дифузії в частинках адсорбенту, проблематичним стає використання відомих кінетичних рівнянь адсорбції, які описують процес з достатньо довгим часом насичення адсорбенту. Окрім цього, з огляду на невеликий ступінь насичення адсорбенту за короткий час, дифузійний опір в частинці може бути настільки малий, що найбільш значний опір створюється в зовнішньодифузійній області. Це спричиняє необхідність прийняття до уваги саме цього параметру в кінетичних рівняннях. Експлуатаційні властивості неорганічних сорбентів в значній мірі залежать не тільки від форми їх кристалічної решітки, але і форми елементарної частинки, гранулометричного складу та коефіцієнту заповнення пор. Дослідження кінетики сорбційних процесів базується на стадіях, які розділені між собою в часі і просторі. Промислові адсорбційні процеси протікають найчастіше в асоціаціях частинок, розміри яких є кратними кільком діаметрам зерен адсорбенту. Більшість теорій, які використовуються для побудови математичної моделі масообміну процесу адсорбції на зерні адсорбенту та встановлення швидкості адсорбційного процесу, допускають, що адсорбція проходить на доступній для рідини границі фаз «рідина – тверде тіло». Поверхня цієї границі фаз складається як із зовнішньої поверхні частинки сорбенту, так і з поверхні його пор. Кінетична характеристика сорбенту пов'язана з пористістю частинки адсорбенту, а сумарна швидкість процесу визначається швидкістю лімітуючої стадії.

Використання традиційних методів розрахунку швидкості масообмінних процесів це довготривалий та трудомісткий процес з достатньо великою похибкою експерименту. Тому використання нестандартних підходів для прогнозування механізму та кінетики сорбційних процесів створює можливість ефективнішого використання сорбційних здатностей не тільки штучних але і природних мінералів.

Прогнозування процесу кінетики адсорбції на прикладі прямих синтетичних барвників з стічних вод дозволяє встановити швидкість досягнення рівноваги, максимальну сорбційну ємність адсорбенту для певного складу розчину, механізм сорбційного процесу та розрахувати коефіцієнти дифузії масообмінного процесу.

Метою роботи є розрахунок коефіцієнтів внутрішньої та зовнішньої дифузії для створення математичної моделі кінетики сорбції на прикладі синтетичних барвників природними сорбентами на основі основі теорії локальної ізотропної турбулентності та методу обмеженого об'єму за гелевою моделлю.

На основі графічних залежностей, розрахункових ефективних коефіцієнтів внутрішньої дифузії та форми кінетичних кривих можна стверджувати, що процес з зовнішньодифузійного, або змішаного, переходить у внутрішньодифузійний за короткий проміжок часу, який характеризується числом Біо ( $Bi \rightarrow \infty$ ). Проте надійні відомості про механізм дифузії дає метод переривання, або так званої "кінетичної пам'яті". Для розрахунку ступеня досягнення адсорбційної рівноваги використовували модель гелевої дифузії з обмеженого об'єму в елементарну частинку адсорбента кулястої форми. При цьому розрахунок коефіцієнта внутрішньої дифузії проводився на основі розробленої математичної моделі, в якій  $\tau$  представляє собою безрозмірний час і є аналогом числа Фур'є. Характер отриманих кінетичних кривих підтверджують домінуючий механізм внутрішньої дифузії при адсорбції прямих барвників з стічних вод природними дисперсними сорбентами. Модель зовнішньодифузійного процесу сорбції на основі теорії локальної ізотропної турбулентності дозволяє прогнозувати його інтенсивність за розрахованими ефективними коефіцієнтами зовнішньої дифузії.