

DOI: 10.25558/VOSTNII.2023.81.34.009

УДК 544.35.03:665.7

© О.Р. Каратаев, С.В. Анаников, 2023

### О. Р. КАРАТАЕВ

канд. техн. наук, доцент,  
доцент кафедры  
КНИТУ, г. Казань  
e-mail: oskar\_karataev@mail.ru



### С. В. АНАНИКОВ

действительный член РАЕ,  
д-р техн. наук, профессор,  
г. Казань  
e-mail: ananikovsv@rambler.ru



## МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ОЧИСТКИ СТОЧНЫХ ВОД В НЕПОДВИЖНОМ СЛОЕ АДсорбЕНТА

*В статье рассматривается задача адсорбции хлористых соединений цеолитами Татарско-Шартрашанского месторождения Татарстана для очистки сточных вод.*

*Решается конкретная производственная задача по адсорбции хлороформа для очистки стоков плавательного бассейна с применением методик, приемов и теорем метода преобразования Лапласа. Это позволяет глубоко погрузиться в суть полученного решения и одновременно интерпретировать доведенные до логического завершения результаты и выводы для реальных исходных данных процесса в виде графического материала.*

**Ключевые слова:** МОДЕЛЬ, АДсорбЦИЯ, АДсорбЕНТ, МАССоОБМЕН, ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ЛАПЛАСА, ОРИГИНАЛ, ИЗОБРАЖЕНИЕ, ЦЕОЛИТЫ.

В работе моделируется динамика адсорбции хлороформа цеолитами Татарско-Шартрашанского месторождения Татарстана с использованием линейной части изотермы адсорбции, полученной экспериментально, с учетом источникового члена в виде протекающей химической реакции первого порядка.

Решение может быть выполнено различными методами: характеристик, преобразования Лапласа, разделения переменных Фурье [1].

Имеющиеся в литературе решения как точные, так и приближенные [1–3] с учетом и без учета внутреннего массопереноса и химической реакции, использующие для аппроксимации изотермы адсорбции как линейную,

так и нелинейную формы, сложны и представлены в специальных функциях и в интегральной форме, труднодоступны и не всегда могут быть использованы в инженерных расчетах.

Известно, что при корректной постановке задачи на результат не влияет метод решения (теорема единственности решения), но и форма решения может быть различной (использованы различные функции).

Поэтому в настоящей работе была поставлена цель: от постановки задачи дойти до получения численного результата при помощи алгоритмизации полученного решения и его программирования.

Описание процесса адсорбции в неподвижном слое базируется на уравнениях баланса массы целевого компонента для бесконечно малого элемента слоя, кинетики адсорбции, уравнении изотермы адсорбции.

Поэтому при постановке задач по динамике адсорбции приходится решать два дифференциальных уравнения в частных производных одновременно (систему уравнений).

### МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Система дифференциальных уравнений адсорбции в одномерном потоке без учета продольной диффузии имеет вид [1–3]:

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

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

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

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

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  $\tau$ ;  $C(x, \tau)$  — концентрация адсорбтива в потоке на расстоянии  $x$  в момент времени  $\tau$ ;  $W$  — постоянная скорость потока;  $K$  — коэффициент массообмена;  $\delta = \frac{1-\varepsilon}{\varepsilon}$  — коэффициент;  $\varepsilon$  — доля свободного сечения в адсорбенте (постоянная по объему порозность неподвижного слоя);  $C^*(C_a)$  — концентрация целевого компонента в потоке равно-

весная со средним содержанием адсорбтива в слое.

Первые два слагаемых уравнения (1) представляют 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  $\tau$  и в любом сечении  $x$  слоя.

Краевые условия (3)–(5) означают следующее. В начальном сечении слоя ( $x = 0$ ) в любой момент времени  $\tau$  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 [4, 5]

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

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

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

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

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

Тогда преобразование (1а), (2а) 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

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

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

Для получения оригиналов от (17а) и (18а) необходимо продолжить их преобразование:

$$F(x, S) = C_0 \exp \left( - \frac{x}{W} s \right) \frac{1}{s \sqrt{s + \frac{K}{A}} \sqrt{s + \frac{K}{A}}} \exp$$

$$\exp\left[\frac{1}{\frac{AW}{K^2\delta x}\left(s+\frac{K}{A}\right)}\right] \times \exp\left[-(\delta K + K_c)\frac{x}{W}\right], \quad f_3(s) = \frac{1}{\sqrt{s+\frac{K}{A}}} \exp\left[\frac{1}{\frac{AW}{K^2\delta^2}\left(s+\frac{K}{A}\right)}\right] \bullet \bullet \bullet F_3(\tau) =$$

(176)

$$\Phi(x,s) = KC_0 \exp\left(-\frac{x}{W}s\right) \times \frac{s+\frac{K}{A}}{s\sqrt{s+\frac{K}{A}}} \frac{1}{\sqrt{s+\frac{K}{A}}} \exp\left[\frac{1}{\frac{AW}{K^2\delta x}\left(s+\frac{K}{A}\right)}\right] \times \exp\left[-(\delta K + K_c)\frac{x}{W}\right]. \quad (186)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{\pi\tau}} e^{-\frac{K}{A}\tau} \operatorname{ch}\left(2\sqrt{\frac{K^2\delta^2}{AW}\tau}\right). \quad (21)$$

Известны оригиналы [4, 5]:

$$\frac{1}{\sqrt{s+a}} \exp\left[\frac{1}{b(s+a)}\right] \bullet \bullet \bullet$$

$$\bullet \bullet \bullet \frac{1}{\sqrt{\pi t}} e^{-at} \operatorname{ch}\left(2\sqrt{\frac{t}{b}}\right),$$

$$\frac{1}{\sqrt{s+a}} \bullet \bullet \bullet \frac{e^{-at}}{\sqrt{\pi t}},$$

$$\frac{e^{-as}}{s} \bullet \bullet \bullet \begin{cases} 0 \text{ при } 0 < t < a, \\ 1 \text{ при } a < t \end{cases}$$

Применительно к нашему случаю для выражения (186) это будут оригиналы:

$$f_1(s) = \frac{e^{-\frac{x}{W}s}}{s} \bullet \bullet \bullet$$

$$\bullet \bullet \bullet F_1(\tau) = \begin{cases} 0 \text{ при } \tau \leq \frac{x}{W} < 0, \\ 1 \text{ при } \tau \geq \frac{x}{W}. \end{cases} \quad (19)$$

$$f_2(s) = \frac{1}{\sqrt{s+\frac{K}{A}}} \bullet \bullet \bullet F_2(\tau) = \frac{e^{-\frac{K}{A}\tau}}{\sqrt{\pi\tau}}. \quad (20)$$

Следовательно, для получения оригинала от изображения  $\Phi(x,s)$ , которое представляет произведение трех изображений, нужно произвести двойную свертку их оригиналов, т. е. двойную свертку правых частей выражений (19), (20), (21). Сначала, например, свертку функции  $F_1(\tau)$  и  $F_2(\tau)$ , а затем свертку полученного оригинала с оригиналом функции  $F_3(\tau)$ .

Следует помнить, что произведению изображений  $f_1(s)f_2(s)$  соответствует своеобразная интегральная комбинация оригиналов функций  $F_1(\tau), F_2(\tau)$ , а именно:

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

Эта интегральная комбинация называется сверткой и символически обозначается через  $F_1(\tau)*F_2(\tau)$  (читается: функция  $F_1(\tau)$  свернутая с функцией  $F_2(\tau)$ ).

Таким образом,

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

Или

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

Аналогично выполняется свертка трех и более функций.

Очевидно, что для области изменения  $\tau \leq \frac{x}{W}$  свертка будет равна нулю из-за того, что оригинал функции  $F_1(\tau)$  равен нулю в данном диапазоне изменения.

Итак, можно сразу записать:

$$f_1(s)f_2(s) \bullet \bullet \bullet F_1(\tau)*F_2(\tau) = F_2(\tau)*1 =$$

$$= \int_{\frac{x}{W}}^\tau \frac{e^{-\frac{K}{A}\left(t-\frac{x}{W}\right)}}{\sqrt{\pi\left(t-\frac{x}{W}\right)}} dt. \quad (22)$$

В то время как

$$f_1(s)f_2(s)f_3(s) \bullet \rightarrow F_1(\tau) * F_2(\tau) * F_3(\tau) =$$

$$= \int_{\frac{x}{W}}^{\tau} \int_{\frac{x}{W}}^{\tau} \frac{e^{-\frac{K}{A}\left(t-\frac{x}{W}\right)}}{\sqrt{\pi\left(t-\frac{x}{W}\right)}} dt \frac{e^{-\frac{K}{A}\left(t-\frac{x}{W}\right)}}{\sqrt{\pi\left(t-\frac{x}{W}\right)}} \times$$

$$\times ch \left[ 2 \sqrt{\frac{K^2 \delta^2}{AW}} (\tau - t) \right] dt. \quad (23)$$

После перехода к оригиналу на основе выражений (8), (186), (19) – (23) окончательно получено:

$$\Phi(x, s) \bullet \rightarrow [4].$$

$$\bullet \rightarrow C_a(x, \tau) = K C_0 \int_{\frac{x}{W}}^{\tau} \frac{\exp\left[-\frac{K}{A}\left(t-\frac{x}{W}\right)\right]}{\sqrt{\pi\left(t-\frac{x}{W}\right)}} dt \times$$

$$\times \int_{\frac{x}{W}}^{\tau} \frac{\exp\left[-\frac{K}{A}(\tau-t)\right]}{\sqrt{\pi(\tau-t)}} ch \left[ 2 \sqrt{\frac{K^2 \delta^2}{AW}} (\tau - t) \right] dt \times$$

$$\times \exp\left[-(\delta K + K_c) \frac{x}{W}\right]. \quad (24)$$

Здесь внутренний интеграл как результат свертки функций  $F_1(\tau)$  и  $F_2(\tau)$  вынесен из-под интеграла последней свертки функций.

Преобразуется теперь выражение (176) к виду, когда это изображение будет легко приводится к оригиналу.

Тогда

$$F(x, s) = C_0 \left\{ \frac{\exp\left(-\frac{x}{W}s\right)}{\sqrt{s+\frac{K}{A}}} \frac{1}{\sqrt{s+\frac{K}{A}}} \times \right.$$

$$\times \exp\left[ \frac{1}{\frac{AW}{K^2 \delta x} \left(s+\frac{K}{A}\right)} \right] + \frac{K}{A} \exp\left(-\frac{x}{W}s\right) \times$$

$$\times \left. \frac{1}{s\sqrt{s+\frac{K}{A}}} \frac{1}{\sqrt{s+\frac{K}{A}}} \exp\left[ \frac{1}{\frac{AW}{K^2 \delta x} \left(s+\frac{K}{A}\right)} \right] \right\} \times$$

$$\times \exp\left[-(\delta K + K_c) \frac{x}{W}\right]. \quad (25)$$

Оригинал от второго члена в изображении (25) известен из решения (23).

Теперь находится оригинал от первого члена выражения (25).

Рассматривается изображение  $f_4(s)$  на основании (20):

$$f_4(s) = \exp\left(-\frac{x}{W}s\right) \frac{1}{\sqrt{s+\frac{K}{A}}} =$$

$$= \exp\left(-\frac{x}{W}s\right) f_2(s). \quad (26)$$

Из первой теоремы смещения известно

$$e^{-as} f(s) \bullet \rightarrow \begin{cases} F(\tau - a) & \text{при } \tau > a \geq 0, \\ 0 & \text{при } \tau < a. \end{cases} \quad (27a)$$

Тогда для изображения в наших обозначениях, конкретизируя оригинал, можно получить:

$$f_4(s) = e^{-\frac{x}{W}s} \frac{1}{\sqrt{s+\frac{K}{A}}} \bullet \rightarrow F_4\left(\tau - \frac{x}{W}\right) =$$

$$= \begin{cases} \frac{e^{-\frac{K}{A}\left(\tau-\frac{x}{W}\right)}}{\sqrt{\pi\left(\tau-\frac{x}{W}\right)}} & \text{при } \tau > \frac{x}{W} \geq 0, \\ 0 & \text{при } \tau < \frac{x}{W}. \end{cases} \quad (27)$$

Понятно, что при  $\tau < \frac{x}{W}$  любая свертка будет обращаться в ноль, поэтому данный результат выпадает из дальнейшего рассмотрения.

Далее производится свертка оригиналов  $F_4\left(\tau - \frac{x}{W}\right)$  с  $F_3(\tau)$ , т. е. (27) с (21):

$$f_4(s)f_3(s) \bullet \rightarrow F_4\left(\tau - \frac{x}{W}\right) * F_3(\tau) =$$

$$= \frac{e^{-\frac{K}{A}\left(\tau-\frac{x}{W}\right)}}{\sqrt{\pi\left(\tau-\frac{x}{W}\right)}} \int_{\frac{x}{W}}^{\tau} \frac{e^{-\frac{K}{A}(\tau-t)}}{\sqrt{\pi(\tau-t)}} \times$$

$$\times ch \left[ 2 \sqrt{\frac{K^2 \delta^2}{AW}} (\tau - t) \right] dt. \quad (28)$$

Тогда согласно (7), (23), (25), (27), (28) можно прийти к выражению:

$$\begin{aligned}
 F(x, s) &\bullet\circ C(x, \tau) = \\
 &= C_0 \left\{ \frac{e^{-\frac{K}{A}\left(\tau - \frac{x}{W}\right)}}{\sqrt{\pi\left(\tau - \frac{x}{W}\right)}} \int_{\frac{x}{W}}^{\tau} \frac{e^{-\frac{K}{A}(\tau-t)}}{\sqrt{\pi(\tau-t)}} \times \right. \\
 &\quad \times ch \left[ 2\sqrt{\frac{K^2 \delta^2}{AW}} (\tau-t) \right] dt + \\
 &\quad \left. + \frac{K}{A} \int_{\frac{x}{W}}^{\tau} \frac{\exp\left[-\frac{K}{A}\left(t - \frac{x}{W}\right)\right]}{\sqrt{\pi\left(t - \frac{x}{W}\right)}} dt \times \right. \\
 &\quad \left. \int_{\frac{x}{W}}^{\tau} \frac{\exp\left[-\frac{K}{A}(\tau-t)\right]}{\sqrt{\pi(\tau-t)}} ch \left[ 2\sqrt{\frac{K^2 \delta^2}{AW}} (\tau-t) \right] dt \right\} \times \\
 &\quad \times \exp\left[-(\delta K + K_c) \frac{x}{W}\right]. \quad (29)
 \end{aligned}$$

Интерпретация результатов решений (24), (29) возможна только с использованием численных методов. Необходимо вычислить два определенных интеграла, лучше использовать метод Симпсона.

Учитывая, что одни и те же интегралы встречаются в обоих решениях, можно для уменьшения трудоёмкости решения представить алгоритм с первоначальным вычислением.

Таким образом, полученные решения могут быть доведены до числа по следующему алгоритму:

- решается задача нахождения  $C_a(x, \tau)$ ;
- решается задача нахождения  $C(x, \tau)$ .

Представленные для численного решения выражения (24), (29) могут быть записаны в такой последовательности:

$$C_a(x, \tau) = K C_0 \int_{\frac{x}{W}}^{\tau} \frac{\exp\left[-\frac{K}{A}\left(t - \frac{x}{W}\right)\right]}{\sqrt{\pi\left(t - \frac{x}{W}\right)}} dt \times$$

$$\begin{aligned}
 &\times \int_{\frac{x}{W}}^{\tau} \frac{\exp\left[-\frac{K}{A}(\tau-t)\right]}{\sqrt{\pi(\tau-t)}} ch \left[ 2\sqrt{\frac{K^2 \delta^2}{AW}} (\tau-t) \right] dt \times \\
 &\quad \times \exp\left[-(\delta K + K_c) \frac{x}{W}\right], \\
 C(x, \tau) &= C_0 \frac{e^{-\frac{K}{A}\left(\tau - \frac{x}{W}\right)}}{\sqrt{\pi\left(\tau - \frac{x}{W}\right)}} \times \\
 &\quad \times \int_{\frac{x}{W}}^{\tau} \frac{e^{-\frac{K}{A}(\tau-t)}}{\sqrt{\pi(\tau-t)}} ch \left[ 2\sqrt{\frac{K^2 \delta^2}{AW}} (\tau-t) \right] dt \times \\
 &\quad \times \exp\left[-(\delta K + K_c) \frac{x}{W}\right] + \frac{C_a(x, \tau)}{A}.
 \end{aligned}$$

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

В качестве дополнения можно отметить, что переход к оригиналу в выражении (186) можно производить по другому варианту с использованием известных теорем операционного исчисления, в частности, без использования табличного изображения (19).

Преобразуется выражение для изображения  $f(s)$  в (186):

$$\begin{aligned}
 f(s) &= \exp\left(-\frac{x}{W}s\right) \frac{1}{s\sqrt{s + \frac{K}{A}}} \equiv \\
 &\equiv \frac{\exp\left(-\frac{x}{W}s\right)}{s} \frac{1}{\sqrt{s + \frac{K}{A}}}.
 \end{aligned}$$

Известен оригинал изображения [4]:

$$\frac{1}{\sqrt{s}} \bullet\circ \frac{1}{\sqrt{\pi\tau}}. \quad (30)$$

Тогда по теореме затухания оригинала [4]:

$$e^{-a\tau} F(\tau) \bullet\circ f(s+a),$$

где  $a$  — положительное вещественное число, будет из (30) получено выражение (20):

$$f_2(s) \equiv \frac{1}{\sqrt{s + \frac{K}{A}}} \bullet\circ \frac{e^{-\frac{K}{A}\tau}}{\sqrt{\pi\tau}}.$$

Следует отметить, что выражение (20) ранее было взято из [4, 5].

Применение к (20) первой теоремы сдвига [4] дает:

$$f_4(s) = e^{-\frac{x}{W}s} \frac{1}{\sqrt{s + \frac{K}{A}}} \bullet \circ F_4\left(\tau - \frac{x}{W}\right) = \begin{cases} \frac{e^{-\frac{K}{A}\left(\tau - \frac{x}{W}\right)}}{\sqrt{\pi\left(\tau - \frac{x}{W}\right)}} & \text{при } \tau > \frac{x}{W} \geq 0, \\ 0 & \text{при } \tau < \frac{x}{W}. \end{cases} \quad (31)$$

Наконец, применение теоремы об интегрировании оригинала [4]:

$$F(\tau) * 1 = \int_0^\tau F(t) dt \bullet \circ \frac{1}{s} f(s),$$

к (31) приводит к выражению

$$\frac{1}{s} f_4(s) = \exp\left(-\frac{x}{W}s\right) \frac{1}{s\sqrt{s + \frac{K}{A}}} \bullet \circ \bullet \circ F_4\left(\tau - \frac{x}{W}\right) * 1 = \int_{\frac{x}{W}}^\tau \frac{e^{-\frac{K}{A}\left(t - \frac{x}{W}\right)}}{\sqrt{\pi\left(t - \frac{x}{W}\right)}} dt \quad \text{при } \tau > \frac{x}{W} \geq 0 \quad (32)$$

Получается результат тот же, что и в выражении (22). Выполнение свертки (32), записанной в виде интеграла, с функцией (21) дает:

$$\frac{1}{s} f_4(s) f_3(s) = \exp\left(-\frac{x}{W}s\right) \frac{1}{s\sqrt{s + \frac{K}{A}}} \times \frac{1}{\sqrt{s + \frac{K}{A}}} \exp\left[\frac{1}{K^2 \delta^2 \left(s + \frac{K}{A}\right)}\right] \bullet \circ \bullet \circ F_4\left(\tau - \frac{x}{W}\right) * 1 * F_3(\tau) =$$

$$= \int_{\frac{x}{W}}^\tau \frac{e^{-\frac{K}{A}\left(t - \frac{x}{W}\right)}}{\sqrt{\pi\left(t - \frac{x}{W}\right)}} dt \int_{\frac{x}{W}}^\tau \frac{1}{\sqrt{\pi(\tau - t)}} e^{-\frac{K}{A}(\tau - t)} \times \times ch\left[2\sqrt{\frac{K^2 \delta^2}{AW}}(\tau - t)\right] dt. \quad (33)$$

И окончательно получается (24):

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

Этим еще раз подтверждается правильность результата решения задачи.

### 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,  $\rho_u = 2,26 \text{ г/см}^3$ ;  $\rho_k = 1,2 \text{ г/см}^3$ ; насыпная плотность гранул цеолита в слое,  $\rho_n = 0,71 \text{ г/см}^3$ ; порозность слоя цеолита,  $\delta = 0,41$ ; коэффициент  $A = 36,4$ ;  $W = 0,00011 \text{ м/с}$  [6];  $C_0 = 15 \text{ мг/л}$ ;  $K = 0,0004351 \text{ м/с}$ ;  $K_c = 0,0001 \text{ м/с}$ .

Результаты расчетов представлены на рис. 1–2.

### ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

На рис. 1 и 2 представлены графики изменения концентраций хлороформа в адсорбенте и адсорбтиве в зависимости от расстояния

от входа в слой цеолита при фиксированном времени,  $\tau$ .

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 (24), (29) 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  $\tau > \frac{x}{W}$  значения концентраций уже становятся равными нулю, но не точно при  $x = 0$ .

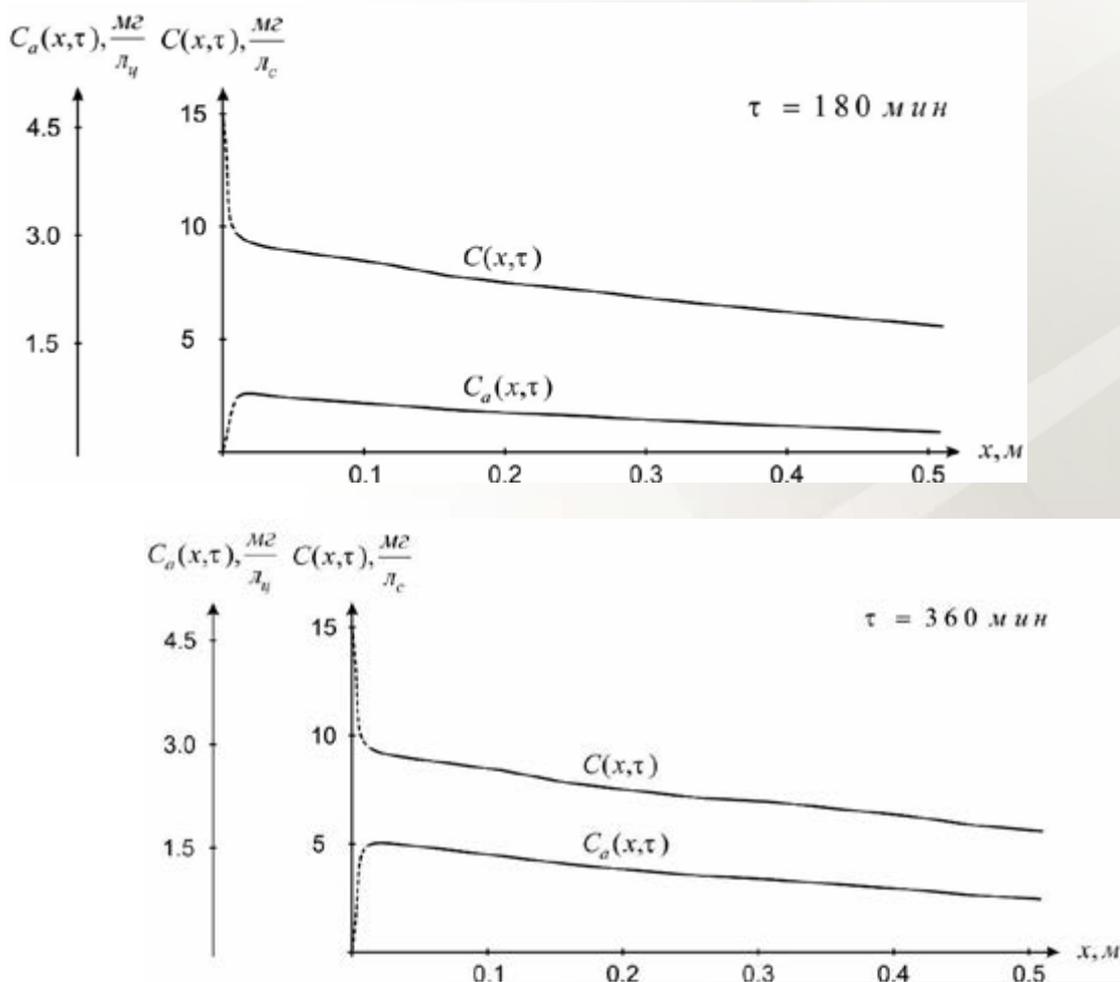


Рис. 1. Изменение концентрации адсорбтива и адсорбата в зависимости от координаты  $x$  при фиксированном времени  $\tau$

Поэтому на графиках рис. 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  $C(x, 0) = 0$ , хотя время  $\tau$  не равно нулю (условно обозначена пунктиром).

Следует отметить, что вне зависимости от времени характер изменения концентраций на обоих графиках не изменяется, хотя число-

вые значения величин различны. Также очевидно, что при малых исходных значениях концентраций, которые представлены в статье, концентрация адсорбтива вначале рез-

ко уменьшается (сильно отличается от  $C_0$ ), а затем плавно во всем диапазоне изменения  $x$  незначительно уменьшается.

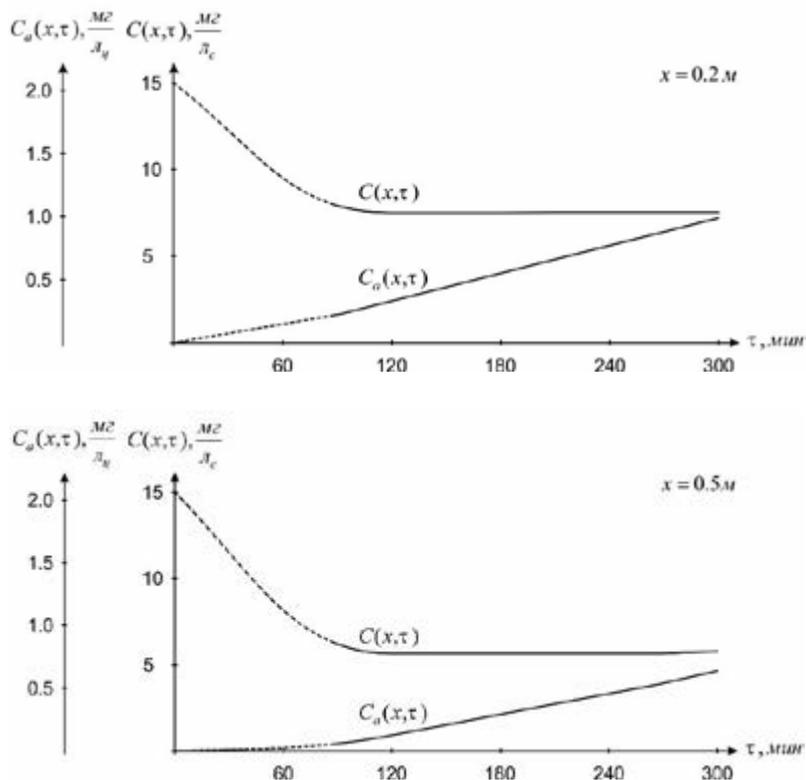


Рис. 2. Изменение концентрации адсорбтива и адсорбата в зависимости от времени  $\tau$  при фиксированном расстоянии  $x$

Иными словами, слой цеолита даже небольшой толщины может в течение длительного времени работать в этих условиях, практически не изменяя адсорбционных свойств: схождение ветвей кривых  $C(x, \tau)$  и  $C_a(x, \tau)$  — невелико.

На рис. 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 рис. 1. Поэтому приведенный в них результат понятен 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. Федоткин И.М. Математическое моделирование технологических процессов. Киев, 1988. 415 с.
2. Романков П.Г. Массообменные процессы химической технологии. Л., 1990. 384 с.
3. Золотарев П.П. К кинетике адсорбции смеси двух веществ, когда лимитирующая стадия — внешний массообмен // Известия АН СССР. 1971. № 9. С. 2055.
4. Деч Г. Руководство к практическому применению преобразования Лапласа. М., 1958. 208 с.
5. Диткин В.А., Кузнецов П.И. Справочник по операционному исчислению. М.–Л., 1951. 208 с.
6. Кельцев Н.В. Основы адсорбционной техники. М., 1984. 592 с.

DOI: 10.25558/VOSTNII.2023.81.34.009

UDC 544.35.03:665.7

© O.R. Karataev, S.V. Ananikov, 2023

### O. R. KARATAEV

Candidate of Engineering Sciences, Associate Professor,  
Associate Professor of the Department  
KNITU, Kazan  
e-mail: oskar\_karataev@mail.ru

### S. V. ANANIKOV

Full active member of Russian Academy of Natural History (RANH),  
Doctor of Engineering Sciences, Professor, Kazan  
e-mail: ananikovsv@rambler.ru

## MODELLING OF THE WASTEWATER TREATMENT PROCESS IN A FIXED ADSORBENT LAYER

*The article deals with the problem of adsorption of chloride compounds by zeolites of the Tatarsko-Shatrashansky deposit of Tatarstan for wastewater treatment.*

*A specific production task is being solved for the adsorption of chloroform for the purification of swimming pool effluents using methods, techniques and theorems of the Laplace transform method. This allows you to delve deeply into the essence of the resulting solution and at the same time interpret, brought to a logical conclusion, the results and conclusions for the real source data of the process in the form of graphic material.*

Keywords: MODEL, ADSORPTION, ADSORBENT, MASS TRANSFER, LAPLACE TRANSFORMATION, ORIGINAL, IMAGE, ZEOLITES.

## REFERENCES

1. Fedotkin I.M. Mathematical modeling of technological processes. Kyiv, 1988. 415 p. [In Russ.].
2. Romankov P.G. Mass transfer processes of chemical technology. L., 1990. 384 p. [In Russ.].
3. Zolotarev P.P. To the kinetics of adsorption of a mixture of two substances, when the limiting stage is external mass transfer // News of the USSR Academy of Sciences. 1971. No. 9. P. 2055. [In Russ.].
4. Dech G. Guide to the practical application of the Laplace transform. M.: GIFML, 1958. 208 p. [In Russ.].
5. Ditkin V.A., Kuznetsov P.I. Handbook of operational calculus. M.–L., 1951. 208 p. [In Russ.].
6. Keltsev N.V. Fundamentals of adsorption technology. M.: Chemistry, 1984. 592 p. [In Russ.].