

С. О. Примиська

Національний технічний університет України "Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського"

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ТЕХНОЛОГІЧНИХ ПРОЦЕСІВ КАТАЛІТИЧНОЇ ОЧИСТКИ

У цій статті представлений огляд в якому показано, як різні математичні моделі процесів каталітичної очистки використовуються в наш час. Серед них найкраще зарекомендували себе чисельні методи аналізу для розв'язку диференціальних рівнянь або їх систем. Для диференціальних рівнянь при описі об'єкта в динаміці необхідно задавати початкові умови та граничні умови. Для стаціонарних об'єктів, які описуються рівняннями в часткових похідних, задають тільки граничні умови. У роботах де розв'язувалися диференціальні рівняння використовувалася метод переходу до нестационарних завдань, які апроксимувалися системами кінцевих рівнянь. Показана можливість виконання математичної обробки експериментальних даних за допомогою графічних методів та апарату інтерполювання функцій. З'ясовано, що за допомогою методу скінченних різниць знайдено чисельний розв'язок крайової задачі для моделювання тепло-, масо- та вологообміну в ґрунтових масивах з урахуванням каталітичних мікро- або наночастинок. Доведено, що для моделювання нестационарних режимів у нерухомому адіабатичному адсорбційно-каталітичному наближенні краще використовувати одновимірну тритемпературну математичну модель. Подібну одновимірну математичну модель можна застосовувати і для опису процесу фільтрації суспензії твердих частинок через пористий тканинний фільтр. Були встановлені кінетичні закономірності процесу каталітичної гідроочищення атмосферного газойлю, на каталізаторі KF-905-1.3Q, за допомогою надійної математичної моделі, придатної для прогнозування та оптимізації найважливіших показників якості атмосферного газойлю. Таким чином, було досліджено можливість попереднього сорбційного очищення стічних вод виробництва соєвого молока сорбентами, отриманими з відходу сільськогосподарського виробництва, показана перспективність використання даних реагентів з використанням методу інтерполяційних поліномів. Також були продемонстровані математична модель для системи у динамічних режимах роботи, які підтвердили адекватність розробленої моделі реальної системи регулювання технологічним процесом каталітичного очищення газів. Показано, як за допомогою інтерполяційних базаточленів Лагранжа можна будувати аналітичні вирази, які описують залежність зміни фізико-хімічних параметрів стічної рідини від концентрації реагенту.

Ключові слова: математичне моделювання, каталітична очистка, диференціальні рівняння, чисельні методи аналізу.

С.А. Примысская

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ КАТАЛИТИЧЕСКОЙ ОЧИСТКИ

В данной статье представлен обзор, в котором показано, как различные математические модели процессов каталитической очистки используются в наше время. Среди них лучшие всего зарекомендовали себя многочисленные методы анализа, с помощью которых можно решить дифференциальное уравнение либо их совокупность в виде системы дифференциальных уравнений. Важной особенностью математического описания, содержащего обычные дифференциальные уравнения, необходимость задачи начальных условий. Такие уравнения (особенно в частных производных) используют для математического описания динамики объектов с распределенными параметрами или стационарных режимов для объектов с параметрами, распределенными по нескольким координатам. Для указанных уравнений при описании динамики объекта наряду с исходными условиями нужно также задавать предельные условия, которые в общем случае являются функциями времени. Для стационарных объектов, описываемых уравнениями в частных производных, задают только предельные условия. Задачи с уравнениями у частных производных, как правило, отличаются наибольшей сложностью, и в большинстве случаев решение каждой конкретной задачи требует серьезной работы. В работах по решению дифференциальных уравнений использовался метод перехода к нестационарным задачам, которые апроксимировались системами конечных уравнений. Представлена возможность выполнения математической обработки экспериментальных данных с помощью графических методов и аппарата интерполирования функции. Выяснено, что с помощью метода конечных разниц найдено численное решение краевой задачи для моделирования тепло-, массо- и влагообмена в ґрунтовых массивах с учетом каталитических микро- или наночастиц. Доказано, что для моделирования нестационарных режимов в неподвижном адіабатическом адсорбційно-каталітичеському приближении лучше использовать одномерную тритемпературную математическую модель. Подобную одномерную математическую модель можно применять и для описания процесса фильтрации суспензии твердых частиц через ячеистый тканевый фильтр. Были установлены кинетические закономерности процесса каталитической гидроочистки атмосферного газойля на каталізаторе KF-905-1.3Q с помощью надежной математической модели, пригодной для прогнозирования и оптимізації важнейших показателей качества атмосферного газойля. Таким образом, была исследована возможность предварительной сорбционной очистки сточных вод производства соєвого молока сорбентами, полученными из ухода сельскохозяйственного производства, показана перспективность использования данных реагентов с использованием метода интерполяционных полиномов. Также была продемонстрирована математическая модель для системы в динамических режимах работы, подтвердившая адекватность разработанной модели реальной системы

регулювання технологічним процесом каталітичної очистки газів. Показано, як з допомогою інтерполяційних многочленів Лагранжа можна строить аналітичні вирази, описуючі залежність зміни фізико-хімічних параметрів скляної рідини від концентрації реагента.

Ключевые слова: математическое моделирование, каталитическая очистка, дифференциальные уравнения, многочисленные методы анализа.

S. Prymyska MATHEMATICAL MODELING OF TECHNOLOGICAL PROCESSES OF CATALYTIC CLEANING

This article presents an overview that shows how different mathematical models of catalytic purification processes are used today. Among them, numerical methods of analysis for solving differential equations or their systems have proved to be the best. An important feature of the mathematical description, which contains ordinary differential equations, is the need to specify the initial conditions. Differential equations in partial derivatives are used to mathematically describe the dynamics of objects with distributed parameters or stationary modes for objects with parameters distributed over several coordinates. For these equations, when describing the dynamics of the object, along with the initial conditions, you must also specify the boundary conditions, which in the general case are functions of time. For stationary objects, which are described by equations in partial derivatives, set only the boundary conditions. Problems with equations in partial derivatives, as a rule, are of the greatest complexity, and in most cases the solution of each specific problem requires serious work. The method of transition to nonstationary problems, which were approximated by systems of finite equations, was used in the works on solving differential equations. The possibility of performing mathematical processing of experimental data using graphical methods and apparatus for interpolating the function is shown. It was found that the numerical solution of the boundary value problem for modeling heat, mass and moisture exchange in soil massifs taking into account catalytic microparticles or nanoparticles was found using the finite difference method. It is proved that it is better to use a one-dimensional three-temperature mathematical model for modeling nonstationary regimes in a stationary adiabatic adsorption-catalytic approximation. A similar one-dimensional mathematical model can be used to describe the process of filtering a suspension of solid particles through a porous tissue filter. The kinetic regularities of the process of catalytic hydrotreating of atmospheric gas oil on the catalyst KF-905-1.3Q were established using a reliable mathematical model suitable for forecasting and optimizing the most important indicators of the quality of atmospheric gas oil. Thus, the possibility of preliminary sorption treatment of wastewater from soy milk production with sorbents obtained from agricultural waste was investigated, the prospects of using these reagents using the method of interpolation polynomials were shown. A mathematical model for the system in dynamic modes of operation was also demonstrated, which confirmed the adequacy of the developed model of the real control system by the technological process of catalytic gas purification. It is shown how, with the help of Lagrange interpolation polynomials, it is possible to construct analytical expressions that describe the dependence of the change in the physicochemical parameters of the wastewater on the reagent concentration.

Keywords: mathematical modeling, catalytic purification, differential equations, numerical methods of analysis.

Вступ. Задачі промислового каталізу невід'ємно пов'язані з необхідністю вирішення систем нелінійних диференціальних рівнянь. Їх аналітичне рішення в більшості випадків було неможливе в наслідок багатьох факторів. У зв'язку з цим насамперед у Німеччині з 1925 р., а потім у США почала розвиватися теорія подібності до хіміко-технологічних процесів. Однак практика її застосування призводила до помилок при масштабному переході та у країнах Заходу сформувалася система дослідних установок поступово зростаючого розміру для здійснення масштабного переходу від лабораторних досліджень до промислових умов. Новизна математичного моделювання хіміко-технологічних процесів у 1957–1960 рр. полягала у розширенні можливостей вирішення математичних завдань, наданих електронно-обчислювальною технікою. Першою такою науковою базою для моделювання була лампова аналогова моделювальна установка МН-7, яка дозволяла проводити розв'язання систем нелінійних звичайних рівнянь до шостого порядку [1].

Аналіз останніх досліджень. Розвиток математичного моделювання був дуже тісно пов'язаний з великими досягненнями у сфері обчислювальної математики. Істотно розвинуто метод кінцевих різниць як ефективний метод розв'язання диференціальних рівнянь. Широке застосування цього методу для завдань промислового каталізу було принципово неможливе раніше у зв'язку з необхідністю проведення великої кількості арифметичних операцій. У роботах з розв'язання диференціальних рівнянь використовувався метод переходу до нестационарних завдань, які апроксимувалися системами кінцевих рівнянь. В одновимірному випадку для здійснення неявних різницевої схем застосовувався метод прогонки або метод розрахунку, що «біжить». Для багатовимірних завдань найбільш дієвим методом був метод розщеплення (метод дробових кроків). Але зі зростанням потужності комп'ютерних машин, а також з розвитком розробки програмного забезпечення, з'являється потреба у вдосконаленні математичних моделей різноманітних технологічних процесів, насамперед процесів каталітичної очистки. При математичному моделюванні різних процесів та явищ в наш час, найчастіше використовуються чисельні методи аналізу, оскільки вони дають більш точні результати, хоча і вимагають відповідних машинних ресурсів. У цій роботі проведено огляд різних математичних моделей для

процесів каталітичної очистки, які почали використовувати за останній час. Крім того, деякі математичні методи були вперше застосовані для деяких процесів каталітичної очистки. Також в даній статті показано, нові методи математичного моделювання які дозволили більш адекватно описати технологічну задачу ніж у минулі роки.

Цілями даної статі є порівняння сучасних методів математичного моделювання, де ми покажемо переваги нелінійних методів над лінійними, коли вперше була застосована одновимірна модель в каталітичних процесах. Вперше, що за допомогою методу скінченних різниць знайдено чисельний розв'язок крайової задачі для моделювання тепло-, масо- та вологообміну в ґрунтових масивах з урахуванням каталітичних мікро- або наночастинок. А також продемонстрована можливість виконання математичної обробки експериментальних даних за допомогою графічних методів та апарату інтерполювання функції.

Виклад основного матеріалу. В роботі [2] представлена математична модель, яка базується на нестационарній кінетичній моделі, враховує вплив зміни технологічних параметрів, обсягу і складу сировини, що переробляється, а також типу каталізатора. Розробка такої математичної моделі була використана для оптимізації процесу гідроочищення атмосферного газозолу. За основу математичної моделі каталітичного перетворення реагентів в хімічному реакторі було обрано кінетичну схему у вигляді диференціальних рівнянь, де кожне рівняння відповідало протіканню конкретної реакції. Було показано, що на створення схеми перетворення вуглеводнів величезний вплив мали методи поділу та дослідження покомпонентного складу сировини. На основі наведеної в роботі схеми перетворень вуглеводнів складена кінетична математична модель процесу гідроочищення атмосферного газозолу. Модель являє собою систему диференціальних рівнянь, що відображає зміну кожного псевдокомпонента від часу протікання процесу. Знаходження кінетичних параметрів здійснено на основі експериментальних даних, отриманих на лабораторній каталітичній установці. Встановлені кінетичні закономірності процесу каталітичної гідроочищення атмосферного газозолу, на каталізаторі KF-905-1.3Q, лягли в основу надійної математичної моделі, придатної для прогнозування та оптимізації найважливіших показників якості атмосферного газозолу.

В роботі [3] описано пропозиції щодо модернізації існуючої системи регулювання вузла каталітичного очищення газів. Показано, що найбільш відповідним математичним апаратом, що дозволяє вирішувати завдання моделювання та управління такого роду об'єктів, є апарат нечітких множин. Дана модернізація дозволяє нечітко розглядати певні робочі параметри, які роблять взаємний вплив один на одного, шляхом введення в регулятора, побудованого на пристрої нечіткої логіки. Результати моделювання даної системи у динамічних режимах роботи підтвердили адекватність розробленої моделі реальної системи регулювання технологічним процесом каталітичного очищення газів.

Відкриття впорядкованих мезопористих матеріалів відкрило великі можливості для нових застосувань у гетерогенному каталізі, наприклад, в процесах очищення ґрунту. Таким чином у роботі [4] була виконана розробка математичної моделі для моделювання тепло-, масо- та вологообміну в ґрунтових масивах з урахуванням каталітичних мікро- або наночастинок. Була представлена нелінійна математична модель розподілу забруднень у ненасичених каталітичних пористих середовищах в неізотермічних умовах. За допомогою методу скінченних різниць знайдено чисельний розв'язок відповідної крайової задачі, а також представлено аналітичне рішення масообміну в каталітичних мікро- або наночастинках (1):

$$\sigma_1 \frac{\partial c_1}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_1(c_1) \frac{\partial c_1}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{T_1} \frac{\partial T}{\partial x} \right) - v(c_1) \frac{\partial c_1}{\partial x} - \gamma_1 c_1 + \gamma_2 c_2 \quad (1)$$

Чисельні експерименти та їх аналіз проводили за допомогою програмного комплексу NanoSurface.

У роботі [5] було запропоновано загальну модель поглинання з неелементарною хімічною реакцією. Моделювання системи проводилося в межах плівки застійної рідини, що оточує бульбашки в реакторі барботажної колони. Для розв'язування основних диференціальних рівнянь використовувався метод скінченних різниць. Модель розв'язана для загальних порядків реакції компонентів із загальною граничною умовою. Тому він включає всі кінетичні режими, засновані на теорії плівки, і здатний передбачити систему поглинання зі складною оборотною або необоротною хімічною реакцією. Також в роботі був досліджувався вплив різних параметрів, таких як константа рівноваги, концентрація компонентів та порядок хімічних реакцій, на

посилання поглинання. Результати показали, що початкова концентрація та порядок реакції компонентів можуть суттєво впливати на посилення поглинання.

В роботі [6] була виконана математична обробка експериментальних даних за допомогою графічних методів та апарату інтерполювання функції. За допомогою інтерполяційних багаточленів Лагранжа [7] були побудовані аналітичні вирази, що описують залежність зміни фізико-хімічних параметрів стікної рідини від концентрації реагенту, що досліджується. Інтерполяція функції є найважливішим апаратом чисельного аналізу, основі якого будується більшість методів розв'язання різних прикладних завдань. Завдання інтерполювання полягає у наступному. За n даними дискретним значенням $x_1, x_2 \dots x_n$ і відповідним їм значенням $f(x_1), \dots, f(x_n)$ функції будують аналітичний вираз функції $f(x)$, що дає можливість отримати будь-яке значень x . Це дозволяє замість багаторазового безпосереднього проведення експериментальних вимірювань отримати результати вимірювань з аналітичних виразів і формул. Використовуваний у роботі [6] інтерполяційний многочлен Лагранжа (2) був записаний як:

$$L_n(x) = \sum_{i=1}^n f(x_i) \Phi_i(x) \quad (2)$$

Були наведені аналітичні вирази, що описують зміну значень хімічного споживання кисню в залежності від часу контакту та виду сорбенту, що використовується:

- тирси: $f(x) = 0,0004x^4 - 0,1027x^3 + 9,7135x^2 - 328,88x - 18000$;
- лущиння оболонок насіння гороху $f(x) = 0,0012x^4 - 0,2424x^3 + 16,905x^2 - 369,9x + 18000$;
- пшеничної соломи $f(x) = 0,001x^4 - 0,2208x^3 + 16,182x^2 - 373,96x + 18000$;
- ячної муки $f(x) = 0,0009x^4 - 0,1845x^3 + 12,664x^2 - 277,79x + 18000$;
- лляна костра $f(x) = 0,001x^4 - 0,2208x^3 + 16,182x^2 - 373,96x + 18000$;
- пшеничного лущиння $f(x) = 0,0009x^4 - 0,1845x^3 + 12,664x^2 - 277,79x + 18000$.

Таким чином, було досліджено можливість попереднього сорбційного очищення стічних вод виробництва соєвого молока сорбентами, отриманими з відходу сільськогосподарського виробництва, показана перспективність використання даних реагентів з використанням методу інтерполяційних поліномів.

Нещодавно у роботі [8] повідомлялося про застосування іонних рідин на основі нафталіну для застосування фотолюмінесценції при кімнатній температурі, досліджене за допомогою математичного моделювання. Показано переваги зонного очищення, заснованого на теорії затвердіння/сегрегації. Розділення розчиненої речовини і розчинника поступово збільшувалося через проходи розплавленої зони, які рухалися вздовж бруска. Домішки накопичувалися на його кінцях, в результаті чого у проміжній області утворювався матеріал високої чистоти. Ця робота спрямована на вирішення завдання, використовуючи напіваналітичну/числову модель у поєднанні з двома підходами до штучного інтелекту. Експериментальні профілі домішок родаміну після ряду проходів розплавленої зони в нафталіновому бруску порівнювалися з теоретичними прогнозами математичної моделі для цілей перевірки. Два підходи до штучного інтелекту, що використовуються роєм, є біологічними алгоритмами: Particle Swarm Optimization, який імітує поведінку польоту птаха, задаючи швидкість і координати для кожного птаха та Cuckoo Search. Показано, що кожен алгоритм успішно взаємодіє з математичною моделлю, який дозволив оптимізувати очищення нафталіну шляхом зонного рафінування. Обидва алгоритми продемонстрували, що кращого ефекту очищення можна досягти, використовуючи більші довжини зони для початкових проходів зони. Показано, що Cuckoo Search потребує менше ітерацій для досягнення конвергенції порівняно з оптимізацією Particle Swarm.

Коефіцієнт розподілу розчиненої речовини, також відомий як коефіцієнт розподілу (k), є співвідношенням твердого і рідкого складу, тобто $k = C_S / C_L$, зазвичай визначається з урахуванням рівноважних умов охолодження, тобто за допомогою фазових діаграм. Було показано, що суміш розчинених речовин зустрічається лише в дифузійному шарі (δ), домішки дифузії в розплаві (D), а також рівномірна концентрація домішок в рідині, що залишилася (C_L) за рахунок ефектів конвекції. Ефективний коефіцієнт розподілу був визначений як [9]:

$$k_{ef} = \frac{k}{k + (1 - k) \exp\left(\frac{-v\delta}{D}\right)} \quad (3)$$

Рівняння (3) також дозволило оцінити вплив швидкості зміщення межі тверде тіло/рідина (v) на значення коефіцієнта розподілу, $k_{ef} \rightarrow k$ при $v \rightarrow 0$, а $k_{ef} \rightarrow 1$ при $v \rightarrow \infty$, $k \leq k_{ef} \leq 1,0$. Вираз k_{ef} можна застосувати до аналізу перерозподілу розчину в кінцевій системі, якщо її довжина значно

перевищує дифузійний прикордонний шар у рідині. Що стосується ефектів очищення, то бажаним є максимальний ступінь змішування, що забезпечується $k_{ef} \rightarrow k$, який також дозволяє використовувати більш високі швидкості переміщення зони, як це було видно з рівняння (3).

В роботі [10] було проведено математичне моделювання каталітичного гідрування рослинних олій, яке включало стадію фільтрації. Була розроблена одновимірна математична модель, яка врахувала основні фізичні явища процесу фільтрації, такі як просочування частинок через пористий фільтр, нагромадження частинок уздовж пор фільтра та поступове їх згортання та зростання. Модель дозволила передбачити, що сканування полідисперсних частинок проникає крізь фільтруючу тканину, і в той же час накопичується всередині тканини та на її зовнішній поверхні. Передбачено, що гідравлічний опір кеку збільшується лише за рахунок зростання його висоти, а гідравлічний опір фільтруючого полотна збільшується за рахунок частинок, які затрималися в порах. Було проведено чисельний аналіз моделі в діапазоні параметрів, характерних для промислових умов. Встановлено, що ефективність процесу, яка була визначена як мінімальний час, необхідний для фільтрації певної кількості гідрогенізованої олії до максимального ступеня очищення каталізатора, залежить головним чином від часу, за який утворюється шар достатньої висоти. Модель була перевірена шляхом порівняння прогнозованих результатів з експериментальними даними. Для опису процесу фільтрації суспензії твердих частинок через пористий тканинний фільтр розроблено одновимірну математичну модель. Одновимірна математична модель передбачає, що: пористість, діаметр пор та інші структурні властивості шару кеку не змінюються з часом; після того, як висота кеку досягає критичного значення H_{cake} , частинки більше не можуть проникати через фільтр, а осідають на його зовнішній поверхні. Таким чином, після розв'язання системи диференціальних рівнянь було показано, що висота гідравлічного опору в кожен момент часу може бути виражена як (4):

$$H_{cake}(t) = \frac{m^{in} - m^{out} - \bar{m} - \tilde{m}}{S} \cdot \left(\frac{1}{\rho_{solid}} + \frac{(n-1)}{\rho_{liquid}} \right) \quad (4)$$

В роботі [11] була проведена оптимізація геометрії шару адсорбент-каталізатор в адсорбційно-каталітичному процесі видалення летких органічних сполук за допомогою математичного моделювання. Для 2D осесиметричного моделювання процесу з внутрішнім розташуванням нагрівача, що ініціює самодостатню регенерацію адсорбент-каталізатор, було використано комерційне програмне забезпечення COMSOL Multiphysics. Модель враховувала реакції адсорбції та окислення на внутрішній поверхні гранул, масообмін між газовим потоком і шаром каталізатора, дифузію в гранулах та теплообмін у шарі. Моделювання показало збій регенерації адсорбент-каталізатор у циліндричному шарі. У той же час значно ефективнішими виявилися ложі з вхідною частиною у формі усіченого конуса. За допомогою математичного моделювання було розглянуто різні кути сторони конуса та витрати газу. У дослідженні визначено оптимальні параметри геометрії для найкращої продуктивності процесу. Для призначення рівнянь моделі використовувалися вбудовані фізичні інтерфейси. Каталітичний шар був представлений у вигляді пористого середовища з інтерфейсом «Reactive Pellet Bed», що дає додатковий розмір, пов'язаний з радіусом гранул. Таким чином, матеріальний баланс у шарі встановлювався інтерфейсом «Транспортування розбавлених форм у пористих середовищах» з включеним модулем «Реактивний шар гранул» (5).

$$\varepsilon_p \frac{\partial c_i}{\partial t} - \nabla \cdot (D_{e,i} \nabla c_i) + u \cdot \nabla c_i = S_i \quad (5)$$

У роботі [12] було розглянуто новий підхід до підвищення ефективності адсорбційно-каталітичного очищення газів від летких органічних сполук, який був заснований на застосуванні структурованого комбінованого нерухомого шару, що складається з великих гранул адсорбенту-каталізатора і мікрОВОЛОКНИСТОГО каталізатора. Чисельне математичне моделювання показало, що в ході високотемпературної окисної регенерації сорбенту-каталізатора за рахунок значно більш високої зовнішньої питомої поверхні мікрОВОЛОКНИСТОГО каталізатора нагрівається значно швидше, ніж великі гранули сорбенту-каталізатора. Це дозволило ефективно окислювати неокислені леткі органічні сполуки, що десорбуються з поверхні сорбенту-каталізатора, тим самим мінімізуючи десорбційні втрати та суттєво підвищуючи ступінь очищення газів. Для моделювання нестационарних режимів у нерухомому адиабатичному адсорбційно-каталітичному шарі використовувалася одновимірна тритемпературна математична модель, що враховує протікання реакційних і сорбційних процесів, тепло і масообмін як між потоком газу і поверхнею каталізаторів, так і всередині гранул сорбента-каталізатора, а також теплопровідність. Для спрощення моделі

враховувалася інерційність системи лише стосовно поверхневих концентрацій проміжних речовин і температури каталізаторів, параметри газової фази (температура, склад) вважалися квазістаціонарними стосовно них. Зміна концентрацій реагентів у газовій суміші по довжині шару з урахуванням процесів зовнішнього масобміну описувалося рівняннями (6) (7).

$$u \frac{\partial C_A}{\partial l} = \beta_p^A S_p (C_{AR}^p - C_A) + \beta_f^A S_f (C_A^f - C_A) \quad (6)$$

$$u \frac{\partial C_0}{\partial l} = \beta_p^0 S_p (C_{0R}^p - C_0) + \beta_f^0 S_f (C_0^f - C_0) \quad (7)$$

В роботі [13] розроблено математичну модель, яка дозволяє адекватно реєструвати технологічний процес очищення прозорих нафтових фракцій у нафтопереробній та нафтохімічній промисловості, проаналізовано положення сучасних методів, що використовуються для виконання завдань оптимізації, та знайдено оптимальне рішення. Також було виконано [14] математичне моделювання процесу очищення стічних вод методом активного мулу для можливості підвищення ефективності в промисловості WOD-KAN.

Висновок. З огляду досліджень видно, що при математичному моделюванні різних процесів та явищ в наш час, найчастіше використовуються чисельні методи аналізу для розв'язку диференційних рівнянь або їх систем. Для диференційних рівнянь при описі об'єкта в динаміці необхідно задавати початкові умови та граничні умови. Для стаціонарних об'єктів, які описуються рівняннями в часткових похідних, задають тільки граничні умови. У роботах з розв'язання диференціальних рівнянь використовувався метод переходу до нестационарних завдань, які апроксимувалися системами кінцевих рівнянь. Показана можливість виконання математичної обробки експериментальних даних за допомогою графічних методів та апарату інтерполювання функції. З'ясовано, що за допомогою методу скінченних різниць знайдено чисельний розв'язок крайової задачі для моделювання тепло-, масо- та вологообміну в ґрунтових масивах з урахуванням каталітичних мікро- або наночастинок. Доведено, що для моделювання нестационарних режимів у нерухомому адиабатичному адсорбційно-каталітичному наближенні краще використовувати одновимірну тритемпературну математичну модель. Подібну одновимірну математичну модель можна застосовувати і для опису процесу фільтрації суспензії твердих частинок через пористий тканинний фільтр. Були встановлені кінетичні закономірності процесу каталітичної гідроочистки атмосферного газойлю, на каталізаторі KF-905-1.3Q, за допомогою надійної математичної моделі, придатної для прогнозування та оптимізації найважливіших показників якості атмосферного газойлю. Таким чином, було досліджено можливість попереднього сорбційного очищення стічних вод виробництва соєвого молока сорбентами, отриманими з відходу сільськогосподарського виробництва, показана перспективність використання даних реагентів з використанням методу інтерполяційних поліномів. Також були продемонстрована математична модель для системи у динамічних режимах роботи, які підтвердили адекватність розробленої моделі реальної системи регулювання технологічним процесом каталітичного очищення газів. Показано, як за допомогою інтерполяційних багаточленів Лагранжа можна будувати аналітичні вирази, які описують залежність зміни фізико-хімічних параметрів стічної рідини від концентрації реагенту. Планується продовжувати роботу над експериментальним випробування двох із запропонованих підходів до процесів каталітичної очистки.

Список використаних джерел:

1. Слинко М. Г. История развития математического моделирования каталитических процессов и реакторов. Теоретические основы химической технологии. 2007. Т. 41, № 1. С. 16–34.
2. Пучкова А. А. Математическое моделирование процесса гидроочистки атмосферного газойля. Химия и химическая технология в XXI веке: материалы XXI Международной научно-практической конференции студентов и молодых ученых имени выдающихся химиков ЛП Кулёва и НМ Кижнера, посвященной 110-летию со дня рождения профессора АГ Стромберга, 21–24 сентября 2020. С. 404–405.
3. Морозов И. Н., Пророков А. Е., Богатиков В. Н. Модернизация и математическое моделирование системы регулирования узла каталитической очистки газов агрегата производства неконцентрированной азотной кислоты. Труды Кольского научного центра РАН. 2011. Т. 7.

4. Vlasyuk A., Zhukovskyy N., Zhukovska V., Pinchuk O., Rajab H. Mathematical Modeling of Heat, Mass and Moisture Transfer in Catalytic Porous Media. WSEAS Transactions on Applied and Theoretical Mechanics. 2020. Vol. 15. P. 52-59. DOI:10.37394/232011.2020.15.8
5. Jangara H., Shayesteh K., Asl M. S. Mathematical modeling of absorption accompanied by a non-elementary reversible chemical reaction. Chemical Engineering Research and Design. 2020. Vol. 157. P. 58–64. DOI:10.1016/j.cherd.2020.02.030
6. Шакиров Ф. Ф., Ахмадиев М. Г., Фридланд С. В., Шайхiev И. Г. Математическое моделирование процессов очистки сточных вод с применением интерполяционных полиномов. Вестник Казанского технологического университета. 2009. Т. 6.
7. Бахвалов, Н.С. Жидков Н.П., Кобельков Г.М. Численные методы. Москва : Наука, 1987. 356 с.
8. Silva-Santos C. H., Morais J. V. F, Bertelli F., Garcia A., Cheung N. Purification of naphthalene by zone refining: Mathematical modelling and optimization by swarm intelligence-based techniques. Separation and Purification Technology. 2020. Vol. 234. <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2019.116089>
9. Pfann W.G. Principles of zone-melting. Trans. Am. Inst. Min. Metall. Eng. 1952. Vol. 194. P. 747–753.
10. Vernikovskaya N. V., Chumachenko V. A., Romanenko A. V., Dobrynkin N. M. Filtration of the catalyst suspension in hydrogenated oil through the woven cloth: Mathematical model of the process accounting for dynamics of the cake growth and filter pore blockage. Separation and Purification Technology. 2019. Vol. 212. P. 355–367. DOI:10.1016/j.seppur.2018.11.007
11. Zazhigalov S., Chumakova N., Zagoruiko A. Adsorption-catalytic process for removal of volatile organic compounds from lean waste gases: Optimization of the adsorbent-catalyst bed geometry. Chem. Eng. & Proces. Inten. 2018. Vol. 132. P. 1–10.
12. Зажигалов С. В., Чумакова Н. А., Загоруйко А. Н. Моделирование мультидисперсной адсорбционно-каталитической системы для очистки отходящих газов от органических примесей. Теоретические основы химической технологии. 2013. Т. 47, № 2. С. 224–224.
13. Исмаиллы Н. С., Магеррамова Т. М. Математическое моделирование технологических устройств по очистке прозрачных нефтяных фракций от органических кислот и разработка системы оптимизации управления. Тези доповідей Міжнародної науково-практичної конференції молодих учених, аспірантів та студентів «Інформаційні технології в сучасному світі: дослідження молодих вчених». 2018. С. 53.
14. Drewnowski J. Modelowanie matematyczne w procesie oczyszczania ścieków metodą osadu czynnego. Kurier WOD-KAN. 2016. Vol. 1. P. 8–9.