2 0 0 7 г **№ 12**

Т р у д ы Ф О Р А

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ДИНАМИКИ АДСОРБЦИИ МНОГОКОМПОНЕНТНОЙ СМЕСИ С ИЗОТЕРМОЙ ЛЕНГМЮРА

С.В. Исраилов, А.Л. Джабраилов, С.С. Юшаев

Комплексный научно-исследовательский институт Российской Академии Наук, г. Грозный

В статье изучается установившийся процесс адсорбции смесей в движущемся слое адсорбента.

Для разделения и очистки газовых смесей часто используются непрерывные процессы адсорбции. Создание математической модели разработки методов расчетов их представляет значительный научный интерес особенно для многокомпонентных смесей (1) в движущемся слое адсорбента. Уравнение материального баланса для твердой и газовой фаз *i*–ой компоненты и граничные условия можно записать в виде (1, 2):

$$\begin{cases} D_{эфф}\dfrac{d^2C_i}{dx^2} = V\dfrac{dC_i}{dx} + \beta_i\left[C_i - \varphi_i(a_1, a_2, ..., a_n)\right] \\ \omega\dfrac{da_i}{dx} = \beta_i\left[C_i - \varphi_i(a_1, a_2, ..., a_n)\right], i = \overline{1, n} \end{cases}, \quad (1)$$

$$\begin{cases} VC_{io} = VC_i(0) - D_{эфф}\dfrac{dC_i(0)}{dx}, x = 0 \\ a_i = 0, D_{эфф}\dfrac{dC_i(H)}{dx} = o, x = H, i = \overline{1, n} \end{cases}, \quad (2)$$

где H – высота адсорбционной колонки; ω - скорость адсорбента; V - скорость паровоздушной смеси, содержащей n компонент с концентрацией C_{io}, $i = \overline{1, n}$; C_i - локальная концентрация *i*–ой компоненты; a_i - величина адсорбции *i*–ой компоненты; $C_{ip} = \varphi_i(a_1, a_2, ..., a_n)$ - концентрация, находящаяся в равновесии с величиной адсорбции $a_i, i = \overline{1, n}$.

Если ввести безразмерные параметры и переменные

$$y_i = \frac{C_i}{C_{io}},\ Z_i = \frac{a_i}{a_{io}},\ \Omega = \frac{V^2}{\beta_i D_{эфф}},\ \Psi_i = \frac{a_{i0}\omega}{C_{io}}$$

$$\varphi_i(z_1, z_2, ..., z_n) = \frac{\varphi_i(a_1, a_2, ..., a_n)}{C_{i0}},\ \xi = \frac{x\beta_i}{V},\ L = \frac{H\beta_i}{V},$$

$\Phi_i = \dfrac{\beta_1}{\beta_2}$, то система и граничные условия (1) и (2) примут более наглядные формы:

$$\begin{cases} \dfrac{d^2y_i}{d\xi^2} = \Omega\left\{\dfrac{dy_i}{d\xi} + \dfrac{1}{\Phi_i}\left[y_i - \varphi_i(z_1, z_2, ..., z_n)\right]\right\}, \\ \dfrac{dz_i}{d\xi} = \dfrac{1}{\Phi_i\psi_i}\left[\varphi_i(z_1, z_2, ..., z_n) - y_i\right], \end{cases} \quad (3)$$

$$\begin{cases} y_i(0)=1+\dfrac{1}{\Omega}z_i(0),\ \xi=0, \\ Z_i(L)=0,\ \dfrac{1}{\Omega}\quad \dfrac{dy_i(L)}{d\xi}=0,\ \xi=L. \end{cases} \tag{4}$$

Для многокомпонентной системы изотерма адсорбции может быть описана интерполяционной формулой Ленгмюра [3,4]:

$$\varphi_i(z_1,z_2,...,z_n)=p_i z_i\frac{\prod\limits_{k=1}^{n_{1i}}(1+p_k)}{\prod\limits_{k=1}^{n}(1+p_k)+\sum\limits_{k=1}^{n}Z_k\prod\limits_{j=1}^{n_{1k}}(1+p_j)},\ i=\overline{1,n}, \tag{5}$$

где

$$P_i=\frac{A_{i\infty}}{\Gamma_i C_{io}},\ i=\overline{1,n}, \tag{6}$$

$A_{i\infty}$ – максимальная емкость шихты по i–ой компоненте в отсутствии другой компоненты; Γ_i - безразмерный коэффициент Генри, характеризующий начальный участок индивидуальной изотермы адсорбции.

Обозначим $\nu_i=\dfrac{p_i}{\prod\limits_{k=n_{1i+1}}^{n}(1+p_k)}$, $q_k=\dfrac{1}{\prod\limits_{k=n_{1k}+1}^{n}(1+P_j)}$, $i=\overline{1,n}$, $k=\overline{1,n}$ и выражение (5) перепишем в виде

$$\varphi_i(z_i,z_2,...,z_n)=\nu_i z_i\varphi(z_i,z_2,...,z_n),\ i=\overline{1,n}, \tag{7}$$

$$\varphi(z_i,z_2,...,z_n)=\frac{1}{1+\sum\limits_{k=1}^{m}q_k Z_k}. \tag{8}$$

Преобразуя систему (3) в соответствие с (7) и (8):

$$\begin{cases} \dfrac{d^2y_i}{d\xi^2}=\Omega\left\{\dfrac{dy_i}{d\xi}+\dfrac{1}{\Phi_i}\left[y_i-\nu_i z_i\varphi(z_i,z_2,...,z_n)\right]\right\} \\ \dfrac{dz_i}{d\xi}=\dfrac{1}{\phi_i\psi_i}\left[\nu_i z_i\varphi(z_i,z_2,...,z_n)-y_i\right],\ i=\overline{1,n}. \end{cases} \tag{9}$$

Из сравнения уравнений системы (9) получим:

$$y_i''=\Omega y_i'-\Omega\Psi_i z_i',\ i=\overline{1,n}. \tag{10}$$

Проинтегрируем уравнение (10) с учетом условий (4):

$$y_i'(\xi)=\Omega y_i(\xi)-\Omega\Psi_i Z_i(\xi)-\Omega y_i(L),\ i=\overline{1,n}. \tag{11}$$

Решаем второе уравнение системы (9) при условии $Z_i(L)=0$ относительно $Z_i(\xi)$:

$$Z_i(\xi)=-\frac{\gamma_i}{\nu_i}\int\limits_L^{\xi}e^{\gamma_i\int_s^{\xi}\varphi(z_1,z_2,...,z_n)dt}y_i(s)ds,\ i=\overline{1,n} \tag{12}$$

где $\gamma_i=\dfrac{\nu_i}{\Phi_i\psi_i}$, $i=\overline{1,n}$.

Если учесть краевые условия (4), то система дифференциальных уравнений (11) равносильна системе интегральных уравнений

$$y_i(\xi)=e^{\Omega\xi}+\frac{e^{\Omega\xi}}{\Omega}Z_i(o)-\Omega\psi_i\int e^{\Omega(\xi-t)}Z_i(t)dt+y_i(L)\left[e^{-\Omega\xi}-1\right],\ i=\overline{1,n} \tag{13}$$

При $\xi=L$ из (13) находим

$$y_i(L)=\frac{e^{\Omega L}}{2-e^{-\Omega L}}+\frac{e^{\Omega L}}{\Omega(2-e^{-\Omega L})}Z_i(0)-\frac{\Omega\Psi_i}{2-e^{-\Omega L}}\int_0^L e^{\Omega(L-t)}Z_i(t)dt,\ i=\overline{1,n} \quad (14)$$

и окончательно система (13) запишется так:

$$y_i(\xi)=R_0(\xi)+R_1(\xi)Z_i(0)+\int_0^L R_i(\xi,t)Z_i(t)dt,\ i=\overline{1,n} \quad (15)$$

$$R_0(\xi)=\frac{e^{\Omega L}\left(e^{-\Omega\xi}-1\right)}{2-e^{-\Omega L}}+e^{\Omega\xi},\ R_1(\xi)=\frac{e^{\Omega\xi}}{\Omega}+\frac{e^{\Omega L}\left(e^{-\Omega\xi}-1\right)}{\Omega\left(2-e^{-\Omega L}\right)},$$

где $R_i(\xi,t)=-\Omega\psi_i\beta(\xi,t)-\frac{\Omega\psi_i\left(e^{-\Omega\xi}-1\right)}{2-e^{-\Omega L}},\ \ \beta(\xi,t)=\begin{cases}1,0\le t\le\xi,\\0,\xi\le t\le L\end{cases}.$

Но при $\xi=0$ из (12) имеем

$$Z_i(0)=\frac{\gamma_i}{\nu_i}\int_0^L e^{\gamma_i\int_s^0\varphi(z_1,z_2,\ldots,z_n)dt} \quad (16)$$

И окончательно систему нелинейных интегральных уравнений

$$\begin{cases}y_i(\xi)=R_0(\xi)+\int_0^L K_i(\xi,s,z_1,z_2,\ldots,z_n)y_i(s)ds,\\ Z_i(\xi)=\frac{\gamma_i}{\nu_i}\int_0^L e^{\gamma_i\int_s^0\varphi(z_1,z_2,\ldots,z_n)dt}\ y_i(s)ds,\ i=\overline{1,n},\end{cases} \quad (17)$$

где

$$K_i(\xi,s,z_1,z_2,\ldots,z_n)=\frac{\gamma_i}{\nu_i}\left[R,(\xi)e^{\int_s^0\varphi(z_1,z_2,\ldots,z_n)d\tau}+\int_0^s e^{\gamma_i\int_s^t\varphi(z_1,z_2,\ldots,z_n)d\tau}\right]i=\overline{1.n} \quad (18)$$

При практическом решении системы (17) последовательные приближения по схеме

$$\begin{cases}y_{im}(\xi)=R_0(\xi)+\int_o^L K_i(\xi,s,z_{1m-1},z_{2m-1},\ldots,z_{nm-1})y_{im}(s)ds,\\ Z_{im}(\xi)=\frac{\gamma_i}{\nu_i}\int_0^L e^{\gamma_i\int_s^0\varphi(z_{1m-1},z_{2m-1},\ldots,z_{nm-1})d\tau}\ y_{im}(s)ds,\quad i=\overline{1,n},\quad m=1,2\ldots\end{cases} \quad (19)$$

уже в первом приближении дают практически приемлемые результаты, т.к. $\left|\varphi(z\ ,z_2,\ldots,z_n)\right|\le 1$ и в силу второй из формул (19) всегда выполняются неравенства $\left|z_{im}(\xi)\right|\le M\left|y_{im}\right|$, m=1,2,…,M - известная константа, а сами приближения $y_{im}(\xi)$ являются точными решениями интегральных уравнений Фредгольма.

Литература

1. *Исраилов С.В., Юшаев С.С.* Некоторые вопросы математического моделирования процесса сорбции и кристаллизации. Грозный 2002.
2. *Баранов Е.И., Лезин Ю.С.* и др. Исследование динамики адсорбции смесей в движущемся слое адсорбента. Сб. «Кинематика и динамика физической адсорбции», «Наука», 1973.
3. *Исраилов С.В., Опришко А.А.* Интегральная модель динамики адсорбции в кипящем слое. Тезисы докладов Всесоюзной технической конференции «Гермес 75», г. Ленинград.
4. *Тодес О.М.* Проблемы теории динамики адсорбции смесей. Сб. «Кинематика и динамика физической адсорбции», «Наука», 1973.

Mathematical model of dynamics of adsorption of a multicomponent mixture with Langmuir isotherm

S.V. Israilov, A.L. Dgabrailov, S.S. Yushaev

In paper the erected process of adsorption of mixtures in a moving adsorbent bed is studied

