

## МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИФФУЗИОННЫХ ПРОЦЕССОВ В НОВОМ СОРБЕНТЕ ДЛЯ ОЧИСТКИ ВОЗДУХА ОТ ТОКСИКАНТОВ

*Е. М. Евсина*

*Астраханский государственный архитектурно-строительный  
университет (Россия)*

Создан новый фильтрующий материал для очистки атмосферного воздуха в закрытых пространствах. Сорбент, как в виде мелких, так и крупных частиц, имеет большую удельную поверхность, что дает возможность применять его для улавливания токсикантов из воды и воздуха, при этом сорбционные характеристики последних сохраняются на высоком уровне.

Анализ результатов свидетельствует о том, что, во-первых, в сорбенте легко диффундируют те вещества, которые в той или иной степени растворимы в воде (НСОН, SO<sub>2</sub>, NO<sub>2</sub>, CH<sub>3</sub>OH, C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>OH). Поэтому и коэффициенты диффузии этих веществ резко возрастают с увеличением влажности сорбента и температуры среды. Для веществ, трудно растворимых в воде (H<sub>2</sub>S, CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>-CH<sub>2</sub>SH, NO, CO) влажность мало влияет на коэффициенты диффузии и, определяющим фактором является температура, с увеличением которой скорость диффузии возрастает.

Весьма важным фактором является то, что во всех случаях происходит проникновение диффундирующих веществ в толщу сорбента. При этом хемосорбционные процессы наблюдаются не только на поверхности, но и в толще сорбента. Особо следует отметить еще одно важное обстоятельство, которое связано с дисперсностью сорбента. Это скорость поглощения и масса поглощенного вещества.

**Ключевые слова:** *диффузия, сорбент, токсиканты, кондиционирование атмосферного воздуха, коэффициент диффузии, константа скорости реакции.*

Created new filtering material to clean the air confined spaces or in. The sorbent as in the form of small and large of particles has a large specific surface, which makes it suitable for trapping toxicants from air and water, while the last characteristics sorption remain high.

Analysis of the results indicates, firstly, in the sorbent readily diffuses those substances which in this or less are soluble in water (НСОН, SO<sub>2</sub>, NO<sub>2</sub>, CH<sub>3</sub>OH, C<sub>6</sub>H<sub>5</sub>OH). Therefore, the diffusion coefficients of these substances increases sharply with increasing humidity of the sorbent and of the ambient temperature. For substances that of difficultly soluble in water (H<sub>2</sub>S, CH<sub>3</sub>CH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>-CH<sub>2</sub>SH, NO, CO) humidity little effect on the diffusion coefficients and, the determining factor is the temperature, that increases speed of diffusion coefficients.

An important factor is what in all the cases there is penetration of the diffusing of substances into the thick of sorbent. Thus chemisorption processes are observed does not only on the surface but also a in the thickness of sorbent. Of particular note is another important circumstance which is associated with the dispersability of sorbent. This is the absorption rate and the mass of the absorbed substances.

**Keywords:** *diffusion, sorbent, toxicants are, of atmospheric air conditioning, the diffusion coefficient, the reaction rate constant.*

Практическая близость сорбционных констант для случая характерной сорбции SO<sub>2</sub> на силикагелях и алюмосиликатах, вместе с очень хоро-

шей сорбцией  $H_2S$ ,  $NO$  и  $CO$ , для которых сорбция на силикагелях и алюмосиликатах нехарактерна, позволяют считать, что хемосорбционные процессы связаны с диффузией различных сорбатов в сорбенте и, практически, скорость и глубина диффузионных процессов являются главными в поглощении сорбатов сорбентом [1, с. 258–2161; 2, с. 135–148; 3, с. 56–72; 4, с. 2–111; 5, с. 201–212]. В связи с этим были поставлены опыты по изучению диффузии в сорбенте, представляющий собой гранулы, необходимых размеров (от 0,5 до 5 см в диаметре), получаемые смешиванием портландцемента – 500, опок Астраханской области с 10%-ным водным раствором поваренной соли, и тех органических и неорганических веществ, для которых была изучена адсорбция:  $SO_2$ ,  $H_2S$ ,  $NO$ ,  $NO_2$ ,  $CO$ ,  $CO_2$ .

Коэффициент диффузии  $D$  рассчитывали по уравнению (установка для изучения диффузии является развитием методики для изучения диффузии электролитов в почвах по методу Лебедева) [6, с. 48–68]:

$$c = \frac{c_0}{2\sqrt{\pi Dt}} \cdot e^{-\frac{x^2}{4Dt}}$$

где  $c$  – концентрация ( $кг/м^3$ ) диффундирующего вещества на расстояние  $x$  (м),  $t$  – время (с),  $D$  – коэффициент диффузии ( $м^2/с$ ).

Величины коэффициентов диффузии в сорбенте различных газов и паров приведены в табл. 1, при этом размеры частиц сорбента были одинаковы – от 0,5 до 5 см в диаметре.

Таблица 1

Коэффициенты диффузии в сорбенте различных газов и паров

Влажность сорбента, %	Коэффициент диффузии диоксида серы $D \cdot 10^4 \text{ м}^2/с$ э при температуре, $K$			
	278	298	315	333
2,0	0,35	0,65	1,25	1,95
5,0	0,55	1,25	1,95	2,45
10,0	0,87	1,65	2,35	3,25
20,0	1,35	1,98	2,55	3,70
40,0	1,45	2,15	2,68	3,95
60,0	1,50	2,35	2,95	4,10
Влажность сорбента, %	Коэффициент диффузии диоксида азота $D \cdot 10^4 \text{ м}^2/с$ при температуре, $K$			
	278	298	315	333
2,0	0,20	0,58	1,05	1,75
5,0	0,40	1,10	1,75	2,30
10,0	0,80	1,50	2,10	3,10
20,0	1,20	1,85	2,65	3,50
40,0	1,30	1,95	2,75	3,75
60,0	1,35	2,05	3,10	-

Влажность сорбента, %	Коэффициент диффузии сероводорода $D \cdot 10^4 \text{ м}^2/\text{с}$ при температуре, К			
	278	298	315	333
2,0	0,22	0,50	1,10	1,70
5,0	0,35	0,95	1,75	2,15
10,0	0,65	1,25	2,10	2,90
20,0	1,15	1,80	2,60	3,20
40,0	1,25	1,95	2,80	3,60
60,0	1,37	2,15	3,05	3,60
Влажность сорбента, %	Коэффициент диффузии оксида углерода $D \cdot 10^4 \text{ м}^2/\text{с}$ при температуре, К			
	278	298	315	333
2,0	0,35	0,79	1,15	1,85
5,0	0,50	1,10	1,95	2,45
10,0	0,70	1,40	2,10	2,78
20,0	0,80	1,45	1,95	2,80
40,0	0,80	1,49	2,15	2,45
60,0	0,80	1,55	2,20	2,50
Влажность сорбента, %	Коэффициент диффузии диоксида углерода $D \cdot 10^4 \text{ м}^2/\text{с}$ при температуре, К			
	278	298	315	333
2,0	0,65	1,05	1,55	1,95
5,0	0,80	1,35	1,85	2,25
10,0	1,05	1,85	2,5	2,65
20,0	2,35	2,10	2,65	3,15
40,0	1,65	2,35	2,95	3,35
60,0	1,70	2,45	3,10	3,55
Влажность сорбента, %	Коэффициент диффузии формальдегида $D \cdot 10^4 \text{ м}^2/\text{с}$ при температуре, К			
	278	298	315	333
2,0	1,15	2,45	3,98	5,40
5,0	2,50	5,85	8,25	12,50
10,0	3,50	8,40	14,15	18,25
20,0	4,85	10,80	19,75	24,10
40,0	5,68	12,50	21,40	26,10
60,0	6,15	14,10	22,50	27,50

Анализ результатов, приведенных в табл. 1, свидетельствует о том, что, во-первых, в сорбенте легко диффундируют те вещества, которые в той или иной степени растворимы в воде ( $\text{SO}_2$ ,  $\text{NO}_2$ ). Поэтому и коэффициенты диффузии этих веществ резко возрастают с увеличением влажности сорбента и температуры среды. Для веществ, трудно растворимых в воде ( $\text{H}_2\text{S}$ ,  $\text{NO}$ ,  $\text{CO}$ ) влажность мало влияет на коэффициенты диффузии и, определяющим фактором является температура, с увеличением которой скорость диффузии возрастает.

Для случая реакций, скорость которых лимитируется диффузией, как внешнесферной и внутрисферной можно использовать для расчета констант скорости реакции уравнение [7, с. 55–56]:

$$K_3 = 4 \cdot \pi \cdot R^* \cdot D \cdot N_A$$

где  $R^*$  – расстояние между А и В при образовании пары столкновения  $[AB]^*$  – адсорбент активирует,  $D$  – коэффициент диффузии,  $N_A$  – число Авогадро.

Таким образом, при известных значениях  $R^*$  можно рассчитать константы скорости образования ионных ассоциатов между сорбентом и различными кислыми газами. Константы скоростей реакций формирования ионных ассоциатов между сорбентом и различными кислыми газами приведены в табл. 2.

Таблица 2

Константы скоростей реакций формирования ионных ассоциатов между сорбентом и различными кислыми газами

Влажность сорбента, %	Константы скоростей реакций формирования ионных ассоциатов между сорбентом и диоксидом азота при температуре, К ( $10^{10}$ )			
	278	298	315	333
2,0	15,12	43,848	79,38	132,3
5,0	30,24	83,16	132,3	173,8
10,0	60,48	113,4	158,76	234,36
20,0	90,72	139,86	200,34	264,6
40,0	98,28	147,42	207,9	283,5
60,0	102,06	154,98	234,36	-
Влажность сорбента, %	Константы скоростей реакций формирования ионных ассоциатов между сорбентом и сероводородом при температуре, К ( $10^{10}$ )			
	278	298	315	333
2,0	16,6	37,8	83,16	128,52
5,0	26,46	71,82	132,3	162,54
10,0	49,14	94,5	158,76	219,24
20,0	86,94	136,08	196,56	251,52
40,0	94,5	147,42	211,68	272,16
60,0	103,6	162,54	230,58	272,16
Влажность сорбента, %	Константы скоростей реакций формирования ионных ассоциатов между сорбентом и оксидом углерода при температуре, К ( $10^{10}$ )			
	278	298	315	333
2,0	26,46	59,72	86,94	139,86
5,0	37,8	83,16	147,2	162,54
10,0	52,92	105,84	158,76	210,168
20,0	60,48	109,62	147,42	211,68
40,0	60,48	112,6	162,54	185,22
60,0	60,48	117,18	166,32	189
Влажность сорбента, %	Константы скоростей реакций формирования ионных ассоциатов между сорбентом и сероуглеродом при температуре, К ( $10^{10}$ )			
	278	298	315	333
2,0	15,12	39,3	86,94	127,01
5,0	26,46	58,97	117,18	200,34
20,0	34,02	74,09	147,42	245,7
40,0	41,58	90,72	185,22	272,16
60,0	45,36	98,28	211,68	281,06

Весьма важным фактором является то, что во всех случаях происходит проникновение диффундирующих веществ в толщу сорбента. При этом хемосорбционные процессы наблюдаются не только на поверхности, но и в толще сорбента.

Особо следует отметить еще одно важное обстоятельство, которое связано с дисперсностью сорбента [8, с 76–80]. Это скорость поглощения и масса поглощенного вещества.

#### Список литературы

1. Кучеров Р. Я. Диффузионное скольжение и конвективная диффузия газа в капиллярах // Журн. теоретической физики. 1957. Т. 27, № 9. С. 2158–2161.
2. Ливчак И. Ф., Воронов Ю. В., Стрелков Е. В. Охрана окружающей среды. М. : Колос, 1995. 271 с.
3. Методика расчета концентраций в атмосферном воздухе вредных веществ, содержащихся в выбросах предприятия. ОНД -86. Госкомгидромет. Л. : Гидрометиздат, 1987. 93 с.
4. Перечень и коды веществ, загрязняющих атмосферный воздух / НИЦ охраны атмосферного воздуха Министерства охраны окружающей среды и природных ресурсов РФ. М. : Интеграл, 1995. 137 с.
5. Агабальянц Э. Г. Круглицкий Н. Н., Оробченко В. И. Регулирование процессов коагуляционного структурообразования в водных дисперсиях искусственных смесей глинистых минералов // Физ.-хим. механика и леофильность дисперс. систем. 1971. Вып. 2. С. 120–125.
6. Сандеров Э. Э., Хитаров Н. И. Цеолиты, их синтез и условия образования в природе. М. : Наука, 1970. 282 с.
7. Лазман М. З., Яблонский Г. С., Быков В. И. Стационарное кинетическое уравнение. Нелинейный одномаршрутный механизм // Хим. физика. 1983. Т. 2. № 2. С. 239–248.
8. Алыков Н. М., Евсина Е. М. Объединенная математическая модель процессов диффузии, сорбции и химической кинетики для описания процессов хемосорбции // Экологические системы и приборы. 2007. № 10. С. 55–56.

УДК 004.896

#### МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ ВЫЯВЛЕНИЯ И ВЫБОРА ОБОБЩЕННОГО ПРИЕМА

*О. И. Евдошенко<sup>1</sup>, И. Ю. Петрова<sup>2</sup>*

*<sup>1</sup>Астраханский государственный университет (Россия)*

*<sup>2</sup>Астраханский государственный архитектурно-строительный университет (Россия)*

В статье представлена математическая постановка задачи выявления и выбора обобщенных приемов улучшения эксплуатационных характеристик на основе комплексного критерия оценки. Сформулирован комплексный критерий, основанный на коэффициенте универсальности и эффективности, средней балльной оценки степени улучшения или ухудшения, количестве улучшаемых или ухудшаемых характеристик и