

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ФЛОТОЕКСТРАКЦІЙНОГО ВИДАЛЕННЯ БАРВНИКІВ

Сангінова О. В.¹, Обушенко Т. І.², Толстопалова Н. М.², Ремінна К. А.¹

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФЛОТОЭКСТРАКЦИОННОГО УДАЛЕНИЯ КРАСИТЕЛЕЙ

Сангинова О. В.¹, Обушенко Т. И.², Толстопалова Н. М.², Реминная К. А.¹

SIMULATION OF DYES REMOVAL BY SOLVENT SUBLATION

Sanginova O.¹, Obushenko T.², Tolstopalova N.², Reminna K.¹

¹Кафедра кібернетики хіміко-технологічних процесів
Національний технічний університет України
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»
Київ, Україна
reminna_k28@ukr.net

²Кафедра технології неорганічних речовин, водоочищення
та загальної хімічної технології
Національний технічний університет України
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»
Київ, Україна
tio1963@gmail.com

У роботі представлено результати моделювання процесу флотоекстракційного видалення барвника у програмному середовищі STAR. Розглянуто можливості застосування отриманих результатів для визначення коефіцієнтів та характеристик моделі барвника, отриманих у вигляді звичайного диференційного рівняння 1-го порядку. Отримані результати можуть бути використані для покращення якості існуючих схем водоочищення

Ключові слова: моделювання, флотоекстракція, стічні води

В работе представлены результаты моделирования процесса флотоекстракционного удаления красителя в программной среде STAR. Рассмотрены возможности применения полученных результатов для определения коэффициентов и характеристик модели красителя, полученных в виде обычного дифференциального уравнения 1-го порядка. Полученные результаты могут быть использованы для улучшения качества существующих схем водоочистки

Ключевые слова: моделирование, флотоэкстракция, сточные воды

The results of simulation of dyes removal by solvent sublation using the STAR software presented. The possibilities of applying the obtained results to determine the coefficients and characteristics of the dye model obtained in the form of a conventional differential equation of the 1st order. The obtained results can be used to improve the quality of existing water treatment schemes.

Keywords: simulation, solvent sublation, waste water

ВСТУП

Велика кількість недостатньо очищених стічних вод, які потрапляють у водойми в результаті інтенсивної діяльності промисловості, призвела до того, що протягом останніх 25-30 років ресурс самовідновлюваних властивостей водних ресурсів України майже вичерпано [1]. Барвники утворюють багаточисельний клас органічних сполук, для яких характерною є наявність ненасичених зв'язків (хромофори), таких, як —C=C— , —N=N— і $\text{—C}\equiv\text{N—}$, що відповідають за забарвлення, а також функціональних груп, що відповідають за їх фіксацію на тканинах —NH— , —OH— , —COOH і $\text{—SO}_3\text{H}$. Світове виробництво текстильних матеріалів використовує активні барвники з високими колористичними характеристиками й стійкістю до фізико-хімічних і фізико-механічних показників. Тому, потрапляючи у довкілля, барвники легко забарвлюють воду і оточуюче середовище, тим самим створюючи несприятливе естетичне сприйняття, погіршуючи органолептичні властивості води. Крім того, барвники можуть також істотно впливати на здатність до фотосинтезу у мешканців водойм, зменшуючи інтенсивність проникання світла і можуть також бути токсичними для деяких водних видів флори і фауни за рахунок ароматичних кілець та хлорних замісників. Це може призвести до масової загибелі представників водного світу, порушення процесів самоочищення, санітарного стану водойми, важкого отруєння людини. Велика кількість стічних вод містить різноманітні барвники, які є токсичними та небезпечними для оточуючого середовища. До них слід віднести стічні води (СВ) заводів, на яких ці барвники виготовляють, а також фарбувальних цехів різних промислових підприємств. Аналіз останніх публікацій [2] показав, що застосування комбінованих методів дозволяє більш ефективно здійснювати очищення стічних вод.

Одним з перспективних методів очищення стічних воді від барвників є флотоекстракція [2, 3]. Метод флотоекстракції поєднує два методи – флотацію і екстракцію – і базується на пропусканні газових бульбашок крізь водну фазу; при цьому відбувається винесення речовини забрудника (сублату) в органічну фазу. Поверхнево-активні речовини (ПАР) застосовуються в процесі флотоекстракції в якості збирачів. Молекули ПАР беруть безпосередньо участь в утворенні сублату та впливають на ступінь вилучення, зменшуючи значення вільної поверхневої енергії на межі розподілу органічної та водної фаз, а також стабілізують поверхню бульбашок. ПАР зв'язуються з іонами барвників в нерозчинні гідрофобні сублати, які виносяться з водної фази в органічну.

Моделювання процесів флотоекстракційного видалення барвників дозволить дослідити вплив основних параметрів на ефективність процесу, обґрунтувати вибір збирача та екстрагенту, визначити оптимальні умови проведення процесу.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ

Метою даної роботи є комп'ютерне моделювання процесу флотоекстракції як методу очищення стічних вод від барвників катіонного і аніонного типів.

АНАЛІЗ ДОСЛІДЖЕНЬ

Експериментальну частину досліджень виконано на кафедрі технології неорганічних речовин, водоочищення та загальної хімічної технології КПІ ім. Ігоря Сікорського. Процес флотоекстракції проводився у циліндричній скляній колонці діаметром 35 мм. Крізь пористу скляну перегородку, розташовану в нижній частині

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ХІМІКО-ТЕХНОЛОГІЧНИХ ТА БІОХІМІЧНИХ ПРОЦЕСІВ І СИСТЕМ

колонки, подавалось повітря з компресору. Витрати газу контролювали ротаметром. Процес флотоекстракції відбувався до встановлення постійної залишкової концентрації барвника, яку визначали фотометричним методом на однопроменевому скануючому спектрофотометрі *Portlab 501* (Великобританія). Корегування значення рН проводилося розчинами NaOH з концентрацією 0,1 моль/дм³ та HCl з концентрацією 0,1 моль/дм³ (рН водних розчинів вимірювався за допомогою рН-метра рН-150МИ). Мірою ефективності процесу флотоекстракції слугував показник ступеня вилучення барвника.

Досліджено модельні розчини наступних барвників: активний яскраво-блакитний, бромкрезоловий зелений, бромфеноловий синій, індігокармін, легкозмиваємий червоний, малахітовий зелений, метиленовий синій, метиловий фіолетовий та кристалічний фіолетовий. В усіх розчинах вихідна концентрація барвника становила 10 мг/дм³, об'єм модельного водного розчину – 200 см³, органічної фази – 10 см³.

Використовуючи математичний апарат системи *STAR*, яка розроблена на кафедрі кібернетики хіміко-технологічних процесів КПІ ім. Ігоря Сікорського, в якості математичної моделі, яка описує зміну залишкової концентрації різних барвників у часі, запропоновано обрати звичайне диференціальне рівняння 1 порядку:

$$T \cdot Y' + Y = Q(X_1, X_2, X_3),$$

де Y – залишкова концентрація барвника мг/дм³, X_1 – значення рН, X_2 – співвідношення барвник: ПАР, X_3 – тривалість процесу, хв.

Коефіцієнти математичних моделей для кожного барвника визначено за допомогою підсистеми *GEM* системи *STAR*. Нижче представлена математична модель для барвника метиловий фіолетовий у співвідношенні барвника до ПАР, як 1:0,5:

$$5,99 \cdot Y' + Y = -0,14 \cdot X_1 - 6,28 \cdot 10^{-3} \cdot X_2 + 0,16 \cdot X_3$$

Розраховані характеристики моделі, а саме відношення Фішера $F = 1195$, кореляційне відношення $r = 0,99$ та середнє квадратичне відхилення $\sigma = 4,96 \cdot 10^{-3}$, дозволяють зробити висновок, що модель з достатньою мірою точності описує процес зміни концентрації барвника у часі.

У таблиці 1 наведені розраховані значення $Y_{\text{експ}}(t)$ та $Y_{\text{розра}}(t)$, а також наведено на рисунку 1 графік залишкової концентрації барвника від часу.

Таблиця 1. Експериментальні та розраховані значення концентрації барвника

t , хв	$Y_{\text{експ}}$	$Y_{\text{розра}}$	Відхилення
2	0,79	0,787	$0,24 \cdot 10^{-2}$
4	0,69	0,682	$0,75 \cdot 10^{-2}$
6	0,64	0,638	$0,15 \cdot 10^{-2}$
8	0,6	0,605	$-0,50 \cdot 10^{-2}$
10	0,57	0,573	$-0,33 \cdot 10^{-2}$
12	0,32	0,322	$-0,23 \cdot 10^{-2}$
14	0,25	0,254	$-0,45 \cdot 10^{-2}$
15	0,22	0,217	$0,29 \cdot 10^{-2}$
18	0,18	0,184	$-0,47 \cdot 10^{-2}$
20	0,16	0,153	$0,68 \cdot 10^{-2}$

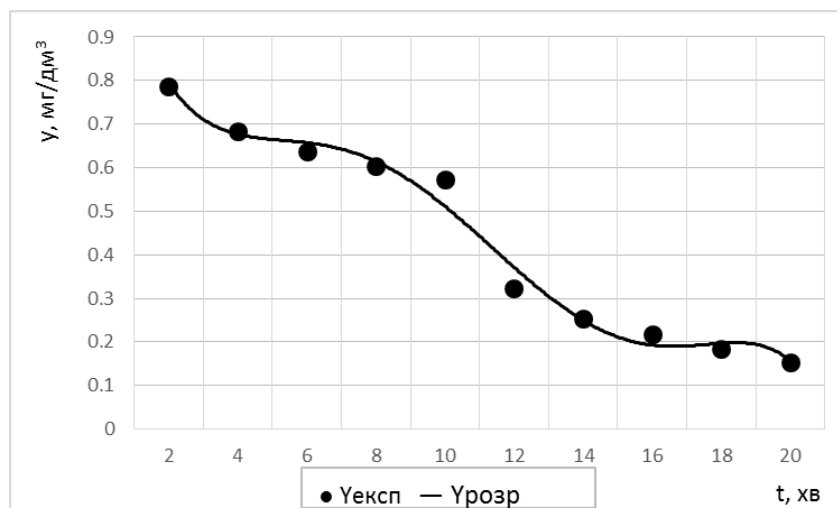


Рис. 1. Графік залежності експериментальної $Y_{\text{експ}}$ та розрахованої $Y_{\text{розн}}$ концентрації барвника від часу

Аналогічні розрахунки виконано для наступних барвників: активний яскраво-блакитний, бромкрезоловий зелений, бромфеноловий синій, індігокармін, легкозмиваємий червоний, малахітовий зелений, метиленовий синій та кристалічний фіолетовий. Результати розрахунків подано у таблиці 2.

ВИСНОВКИ

Виконано моделювання процесів флотоекстраційного видалення барвника у програмному середовищі *STAR*. Отримані результати можуть бути використані для покращення якості існуючих схем водоочищення, всі моделі практично є схожими, проте за результатами середньо-квадратичного відхилення найкращою виявилась модель барвника метиловий фіолетовий з отриманими характеристиками моделі, а саме відношення Фішера $F = 1195$, кореляційне відношення $r = 0,99$, середнє квадратичне відхилення $\sigma = 4,96 \cdot 10^{-3}$.

ЛІТЕРАТУРА

1. Фізико-хімічні методи очищення води. Керування водними ресурсами» / під редакцією проф. Астреліна І. М. та проф. Ратнавира Х. (Норвегія). Water Harony Project: 2015. 577 с.
2. Астрелін І. М., Обушенко Т. І., Толстопалова Н. М., Таргонська О. О. Теоретичні засади та практичне застосування флотоекстракції: огляд. *Вода і водоочисні технології*, 2013. №3. С. 3-23.
3. Обушенко Т. І., Толстопалова Н. М., Астрелін І. М., Науменко О. С. Дослідження закономірностей флотоекстракції катіонних барвників. *ScienceRise*, 2018. №12. С. 54-59.

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ХІМІКО-ТЕХНОЛОГІЧНИХ ТА БІОХІМІЧНИХ ПРОЦЕСІВ І СИСТЕМ

Таблиця 2. Порівняльна таблиця досліджувальних барвників

№	Барвник	Коефіцієнти математичної моделі				Характеристики моделі		
		T	k_1	k_2	k_3	F	r	σ
1	Активний яскраво-блакитний	6,886	-0,5	-0,012	0,385	36,0	0,98	0,07
2	Бромкрезоловий зелений	5,220	1,39	-0,039	-0,12	309,2	0,99	0,05
		5,155	-0,8	-0,11	1,012	2,5	0,78	1,38
		7,114	-1,6	-0,105	1,359	2,2	0,74	1,58
3	Бромфеноловий синій	5,316	-0,1	-0,058	0,367	34,1	0,98	0,07
		17,21	-0,3	0,096	0,216	31,1	0,98	0,11
		5,863	-0,2	-0,037	0,273	12,7	0,96	0,12
4	Індігокармін	6,476	1,45	-0,053	-0,23	58,9	0,99	0,16
5	Легкозмиваємий червоний	8,753	-0,6	-0,06	0,549	11,9	0,95	0,22
		5,527	-0,4	-0,039	0,409	13,9	0,96	0,11
6	Малахітовий зелений	12,36	0,59	-0,024	0,579	65,7	0,99	0,11
		20,78	-0,3	-0,04	0,232	8,5	0,93	0,43
		6,529	-0,6	-0,074	-0,08	25,6	0,98	0,17
7	Метиленовий синій	7,148	-0,4	-0,082	0,674	6,7	0,92	0,29
		6,254	-0,7	-0,082	0,627	6,2	0,91	0,36
8	Метилловий фіолетовий	5,992	-0,1	-0,006	0,159	1195	0,99	$4,96 \cdot 10^{-3}$
9	Кристалічний фіолетовий	5,011	-0,3	-0,085	0,618	12,6	0,96	0,18
		5,671	-0,5	-0,104	0,579	9,9	0,95	0,26