

VI МІЖНАРОДНА НАУКОВО-
ТЕХНІЧНА КОНФЕРЕНЦІЯ
«КОМП'ЮТЕРНЕ
МОДЕЛЮВАННЯ ТА
ОПТИМІЗАЦІЯ СКЛАДНИХ
СИСТЕМ»

VI INTERNATIONAL SCIENTIFIC
AND TECHNICAL CONFERENCE
«COMPUTER MODELING AND
OPTIMIZATION OF COMPLEX
SYSTEMS»

Дніпро, ДВНЗ УДХТУ
4-6 листопада 2020

doi: 10.32434/CMOCS-2020

МАТЕМАТИЧНА ОБРОБКА ТА ОПТИМІЗАЦІЯ ПРОЦЕСУ ФОСФОРИЛЮВАННЯ ЛІГНОЦЕЛЮЛОЗНИХ СОРБЕНТІВ

Гасин Б.С.¹, Галиш В.В.^{1,2}, Трус І.М.¹, Гомеля М.Д.¹

¹ Національний технічний університет України

«Київський політехнічний інститут», Київ, Україна

² Інститут хімії поверхні О.О. Чуйка

Національної академії наук України, Київ, Україна

На сьогоднішній день високий рівень забруднення природних водойм промисловими стічними водами призвів до катастрофічної ситуації, за якої вміст йонів важких металів в найбільших водних об'єктах України за останні 10–15 років збільшився в десятки та сотні разів. На сьогодні в країні склалась ситуація, коли велика кількість стічних вод підприємств різних галузей промисловості скидаються практично без очистки [1].

Тому розробка ефективних методів видалення йонів важких металів зі стічних та природних питних вод є вкрай важливою та актуальною задачею.

Очищення стічних вод, що містять сполуки важких і кольорових металів, можна здійснювати різними способами. В даний час для очищення застосовують хімічні, фізико-хімічні, фізичні методи, в тому числі такі, як зворотній осмос, нанофільтрація, електрокоагуляція, сорбція і т.д. [2, 3].

Одним з найбільш ефективних, дешевих та простих в реалізації методів видалення важких металів з вод різного походження є адсорбція. Процес адсорбції найбільше залежить від величини площі контакту адсорбенту з розчином, характеристик адсорбенту, адсорбату та розчину, в якому реалізується процес.

Застосування різноманітних сорбентів забезпечує високу ефективність видалення йонів важких металів в широких діапазонах початкових концентрацій. З іншого боку, сорбція є досить економічним методом, особливо враховуючи можливість використання різноманітних природних матеріалів та відходів в якості сорбентів [4, 5].

В процесі виконання науково-дослідної роботи було проведено модифікування подрібненої шкаралупи волоського горіху різного фракційного складу. В результаті процесу модифікування фракцій вихідного матеріалу з розмірами 0,5–1,0 мм (фракції А), 1,0–0 1,5 мм (фракція Б), а також 1,5–2,0 мм (фракції В) з використанням як модифікатору ортофосфорної кислоти, було одержано порошкоподібні лігноцелюлозні матеріали [6, 7].

В роботі було досліджено вплив концентрації ортофосфорної кислоти на такі показники лігноцелюлозних сорбентів, як вихід, статична обмінна ємність за Na^+ та ефективність поглинання метиленового синього. Хімічне модифікування шкаралуп волоського горіху проводили протягом 60, 120 та 180 хв.

Для визначення оптимальних умов одержання фосфорильованих сорбентів були виконані експериментальні дослідження відповідно до плану повного факторного експерименту (ПФЕ) типу 2².

Ідентифікацію і статистичну перевірку математичних моделей процесу фосфорилування шкаралуп волоського горіху для показників y_i та багатокритеріальну оптимізацію на основі отриманих моделей було виконано з використанням комп'ютерного забезпечення.

Для відтворення експериментальних даних як математичну модель було використано поліном другого порядку, яка для двох незалежних змінних має вигляд:

$$y_i = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_1x_2 + b_4x_1^2 + b_5x_2^2$$

де y_i – показники лігноцелюлозних біосорбентів; $b_0, b_1, b_2, b_3, b_4, b_5$ – коефіцієнти математичної моделі; x_1 і x_2 – значення факторів.

Оптимізацію технологічних параметрів процесу одержання фосфорилуваних сорбентів виконано методом багатокритеріальної оцінки з використанням узагальненої функції бажаності Харрінгтона. Значення параметрів y_i переводили у відповідні бажаності (d_1, d_2, d_3). Для цього використовували шкали бажаності в інтервалі від 0 до 1, тобто від «дуже погано» ($d = 0,20 - 0,00$) до «дуже добре» ($d = 1,00 - 0,80$). Узагальнену функцію бажаності розраховували як середнє геометричне за формулою:

$$D = \sqrt{d_1 d_2 d_3}$$

Для визначення оптимальних значень параметрів модифікування шкаралуп волоського горіху фосфорною кислотою були обрані однобічні профілі бажаності Харрінгтона. Пошук оптимуму узагальненої функції бажаності було здійснено методом сканування з кроком 0,001.

Як фактори, що впливають на показники сорбентів, були обрані наступні змінні (x_i): x_1 – концентрація кислоти, %; x_2 – тривалість модифікування, хв. Змінними функціями (y_i) були встановлені наступні показники сорбентів: y_1 – вихід сорбенту, %; y_2 – ефективність поглинання метиленового синього, %; y_3 – статична обмінна ємність за натрієм, %.

Початкові дані для складання матриці планування експерименту ПФЕ типу 2^2 наведено у табл. 1.

Таблиця 1 – Рівні та інтервали варіювання факторів x_i

Фактор	Нижній рівень	Верхній рівень
Концентрація кислоти x_1 (%)	5	75
Тривалість модифікування x_2 (хв)	60	180

За результатами експерименту були розраховані математичні моделі процесу фосфорилування шкаралуп волоського горіху за різних значень концентрації ортофосфорної кислоти та тривалості модифікування.

Обробку експериментальних даних та параметричну ідентифікацію одержаних математичних моделей проводили за методом найменших квадратів. Рівняння регресії, що адекватно описують процес модифікування

шкаралупи волоського горіху фосфорною кислотою, одержано з урахуванням критеріїв Кохрена і Фішера.

Одержані рівняння регресії мають наступний вигляд.

Вихід сорбенту, %:

$$y_1 = 98,084 - 0,0377x_1 - 0,101x_2 - 0,0013 x_1x_2 - 0,0005x_{12} + 0,0003x_{22};$$

Ефективність поглинання метиленового синього, %:

$$y_2 = 25,25 - 0,1589x_1 + 0,0128x_2 + 0,0021x_1x_2 + 0,0012x_{12} - 0,00069x_{22};$$

Статична обмінна смність, мг-екв/г:

$$y_3 = 0,937 + 0,0051x_1 + 0,0051x_2 + 0,000077x_1x_2 + 0,00023x_{12} - 0,00014 x_{22}.$$

Оцінку одержаних математичних моделей виконано з урахуванням критеріїв Стюдента (t-критерій). Значення t-критеріїв для кожного коефіцієнта відповідного рівняння регресії та висновок про значимість наведено в табл. 2. Табличне значення t-критерію для рівня значимості $q=0.1$ та числа ступеня вільності $f=9$ складає 1,83.

Задача пошуку оптимальних значень параметрів проведення модифікування шкаралупи волоського горіху фосфорною кислотою є багатокритеріальною. Тому для знаходження компромісного оптимального рішення було вирішено застосувати об'єднання критеріїв (показників якості) з використанням узагальненої функції бажаності. Шкалу бажаності по кожному з показників y_i наведено у табл. 2.

Таблиця 2 – Значення t-критеріїв для коефіцієнтів рівнянь регресії

Коефіцієнти рівняння регресії	Математичні моделі		
	t-критерій (висновок про значимість)		
b_0	728,35 (значимий)	241,29 (значимий)	16162 (значимий)
b_1	113,19 (значимий)	86,956 (значимий)	51,229 (значимий)
b_2	35,381 (значимий)	41,371 (значимий)	17,899 (значимий)
b_3	13,381 (значимий)	32,059 (значимий)	2,456 (значимий)
b_4	14,849 (значимий)	23,664 (значимий)	3,029 (значимий)
b_5	11,382 (значимий)	2,211 (значимий)	5,523 (значимий)
b_6	7,131 (значимий)	0,73 (не значимий)	2,082 (значимий)

Розраховані та експериментальні значення y_i в точці оптимуму також наведено в табл. 3.

Таблиця 3 – Шкала бажаності для показників сорбентів та результати оптимізації

Показник y_i	Шкала бажаності		Значення в точці оптимуму	
	Дуже добре	Дуже погано	Розрахункове	Експериментальне
$Y_1, \%$	92,8	74,4	80,1	80,8
$Y_2, \%$	42,2	24,9	35,2	36,0
$Y_3, \text{мг-екв/л}$	1,93	1,22	1,76	1,74

За результатами розрахунків було встановлено, що оптимальними параметрами процесу є концентрація кислоти 54,8 % та тривалість 120 хв. Саме для цих технологічних параметрів узагальнена функція бажаності Харрінгтона характеризується максимальним значенням, яке становить 0,7612.

Список літературних джерел

1. Trus I., Radovenchuk I., Halysh V., Skiba M., Vasylenko I., Vorobyova V., Hlushko O., Sirenko L. 2019. Innovative Approach in Creation of Integrated Technology of Desalination of Mineralized Water. *Journal of Ecological Engineering*. 20(8), 107–113.
2. Гомеля М. Ефективність вилучення іонів важких металів з розведених розчинів іонообмінним методом / М.Гомеля, В.Іванова, І.Трус // *Технічні науки та технології*. – 2017. – № 4 (10). – С. 154-162.
3. Гомеля М.Д. Застосування баромембранних методів в процесі очищення води від іонів важких металів / М.Д. Гомеля, В.П. Іванова, І.М. Трус, Є.С. Булгаков // *Вісник Вінницького політехнічного інституту*. – 2018. – № 3 С. 23-27.
4. Трус І.М. Використання сорбентів на основі магнетиту для очищення води від іонів важких металів / І.М. Трус, М.Д. Гомеля, Т.В. Крисенко, К.С. Сенькова // *Технічні науки та технології*. – 2019. - № 4(18). – С. 175-182.
5. Ковальчук А. Фосфорилювання шкаралуп волоських горіхів для підвищення ефективності очищення водних розчинів / А. Ковальчук, Т. Почечун, В. Галиш, І. Трус // *Технічні науки та технології*. – 2018. - № 2(12). – С. 236-244.
6. Білявський С.А., Сарахман Р.Б., Галиш В.В., Трус І.М. Оптимізація технології одержання сорбентів з відходів рослинного походження // *Екологічні науки*. – 2018. - № 21. – С. 212-217.
7. V. Halysh, I. Trus, M. Gomelya, I. Trembus, V. Pasalskiy, N.a Chykun, G. Trokhymenko, I. Remeshevsk. Utilization of Modified Biosorbents Based on Walnut Shells in the Processes of Wastewater Treatment from Heavy Metal Ions. *Journal of Ecological Engineering*. – 2020. – № 21(4) . – P.128–133.