

АВТОМАТИЗАЦІЯ ТЕХНОЛОГІЧНИХ ПРОЦЕСІВ

УДК 665.66-001.57

**Ярошук Л. Д., к.т.н., доц., Тюріна Є. О., аспірантка
Національний технічний університет України
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»**

ВЕРБАЛЬНЕ МОДЕЛЮВАННЯ МІКРОПРОЦЕСІВ НЕПЕРЕРВНОЇ АДСОРБЦІЙНОЇ РЕГЕНЕРАЦІЇ ОЛИВ ТА МАСТИЛ

Використання олив та мастил у різних галузях діяльності людей призводить до їх забруднення небезпечними речовинами. Відновлення властивостей виконують за різними технологіями, зокрема, шляхом неперервного адсорбційного очищення. Для автоматичного керування багатокомпонентним очищенням треба знати механізми взаємодії речовин в адсорбері. Математична модель, адекватна дійсному перебігу адсорбції, дозволить забезпечити високу ефективність керування завдяки виконанню вимог до якості матеріалів та зменшенню викидів виробництва у довкілля.

Важливо створити математичну модель процесів в адсорбері, яка б давала адекватне відображення поведінки речовин у ньому при зміні властивостей сировини та адсорбенту, що неперервно надходять у цей апарат. Основні сучасні методи моделювання використовують узагальнені властивості вхідних матеріальних потоків і базуються на апроксимації емпіричних даних про перебіг адсорбції. Нами було вибрано метод опису поведінки речовин в адсорбері, який полягає у визначенні таких рушійних сил, які мають місце між молекулами забруднених олив або мастил (ОМ) з одного боку та адсорбенту з іншого. Існуючі дослідження щодо властивостей забруднених матеріалів як наносистем дають на це підстави.

Запропоновано розглядати адсорбент та забруднені ОМ, що надходять в адсорбер, як окремі об'єкти з рисами наносистем. Середовище в адсорбері досліджено як сукупність цих систем та нової – «адсорбент – забруднені ОМ», – властивості якої формуються не адитивно, а динамічно в результаті дій міжмолекулярних сил.

Визначено властивості кожної з наносистем та сили, які запропоновано розглядати як рушійні в цих системах. Очищення забрудненої ОМ виконують на полярних адсорбентах. Важливим в адсорбенті є розміри вхідних вікон, будова гранул (елементарних комірок) та елементарний склад, який впливає на його полярність, а в адсорбтиві – розміри молекул та їх компонентний склад. Найбільш впливовими силами, які діють під час процесу, є електростатичні – орієнтаційні та індукційні.

Показано, за якими сценаріями може відбуватися заповнення гранул адсорбенту за наявності декількох забруднювачів. Визначено, що спочатку має місце адсорбція молекул смол, потім сірки й ароматичних вуглеводнів. Парафіни, які є основою мастильних матеріалів, не поглинаються гранулою адсорбенту через властивість вибіркової адсорбції, яку характеризують сили притягання між молекулою та поверхнею адсорбенту. Ступінь поглинання таких компонентів буде низьким порівняно із забруднювачами через вплив теплоти адсорбції, яка у випадку парафінів є найменшою.

Багатокомпонентну адсорбцію автори пропонують розглядати як явище, що передбачає наявність незліченої кількості випадкових мікропроцесів. Така вербальна модель дозволила визначити методи математичного моделювання, які доцільно використати при створенні моделі для системи керування.

Розроблена модель дає уяву про взаємозв'язки між частинками адсорбенту та забрудненої ОМ на молекулярному рівні й дозволяє розглядати багатокомпонентне адсорбційне очищення олив та мастил як випадкові процеси. Показано, що створення систем керування зазначеним процесом вимагатиме такого математичного забезпечення, яке повинно використовувати методи теорії ймовірностей, адаптації та штучного інтелекту.

Ключові слова: адсорбція, олива, мастило, наносистема, вербальний, модель, керування.

DOI: 10.20535/2617-9741.2.2020.208058

© Ярошук Л. Д., Тюріна Є. О., 2020.

Постановка проблеми. Нафтові оливи широко використовують у сучасній промисловості, зокрема для змащення вузлів тертя різних пристроїв. Це викликає низку проблем, пов'язаних з необхідністю утилізації та регенерації достатньо великих обсягів використаних олив. Одна з них – забруднення довкілля [1].

При відновленні зазначених речовин застосовують різні технологічні методи [2], які пов'язані з фізичними (відстоювання, фільтрація, сепарація), фізико-хімічними (коагуляція, адсорбційне очищення, термовакуумне висушування та селективне розчинення) та хімічними (кислотне й лужне оброблення та гідроочищення) процесами. Показником ефективності останніх є склад очищеної оливи або мастила, зокрема, вміст у них забруднювачів [3].

Найбільш поширеним наразі є метод адсорбційного очищення [4], який реалізують у двох варіантах – періодичне та неперервне. Другий варіант дозволяє очищувати більші обсяги речовин, але має достатню складну технологічну систему та більш наукоємний.

Важливою особливістю мастильних матеріалів є значна кількість характеристик, до яких встановлені вимоги. У той же час можливих керувальних впливів на процес адсорбції обмаль. Суттєва нестаціонарність адсорбції, що викликана нестабільністю властивостей утилізованих олив, вимагає постійного контролю за процесом і використання адаптивних алгоритмів керування. Створення математичних моделей для систем керування адсорбційним очищенням, які дозволять врахувати зазначені аспекти, є актуальною задачею.

Завдяки значному розвитку засобів вимірювань набуває актуальності вивчення властивостей речовин на молекулярному та атомарному рівнях [5], що дає можливість більш детально розглядати моделювання технологічних процесів, як основу створення систем керування.

Аналіз попередніх досліджень. Математичне моделювання достатньо детально розглянуто в науковій літературі як при описі особливостей перебігу адсорбційних явищ [4, 6–11], так і при створенні застосувань для прогнозування результатів та керування процесом [12–14]. Обидва ці напрямки безумовно пов'язані метою найкращого відтворення поведінки процесу, а відрізняються в основному за критерієм можливості використання у виробничих умовах.

У працях [4, 6] автори розглянули основні теоретичні положення адсорбційних процесів та їх моделювання на макрорівні. У [7–11] запропоновано моделювання адсорбції з урахуванням структури адсорбентів та сил, що діють під час перебігу зазначеного процесу.

У [12] автори дослідили рівноважні стани та кінетику адсорбції для різних типів адсорбентів з використанням класичної теорії адсорбційних процесів, в результаті чого запропонували прогнозувальну модель, яка, при порівнянні з експериментальними даними, виявилася ефективною у випадку однокомпонентної адсорбції.

Загальною науковою проблемою є те, що адсорбцію багатокомпонентних сумішей моделюють в основному без урахування закономірностей поведінки мікрочастинок, які беруть участь у процесі. Експериментальні дослідження, як правило, проводять для одно- або двокомпонентних сумішей. Так, у працях [13, 14] автори дослідили адсорбційні процеси в багатокомпонентних сумішах та їх моделювання в системах, що мають нанопористу й неоднорідну структуру, але створені моделі передбачають вилучення із сировини лише одного компоненту забруднювача.

Метою статті є створення описової (вербальної) моделі процесу неперервної адсорбції на рівні наносистем олив та мастил, в яких дисперсійним середовищем є неполярна олива, а дисперсною фазою – окремі і пов'язані між собою наночастинок, що утворюють єдиний каркас [15]. Така модель дозволить розширити коло можливих аспектів, які треба брати до уваги при створенні математичного забезпечення систем керування.

Виклад основного матеріалу. Розглянемо технологічне оформлення очищення у протиточному адсорбері неперервної дії (Рис. 1).

У верхню частину апарату подають адсорбент, протитечією якому направляють охолоджену суміш сировини й розчинника. Внаслідок цього забезпечують її неперервний контакт з потоком адсорбенту й вилучення із сировини небажаних компонентів (важких ароматичних вуглеводнів, смол, сірчистих з'єднань). Очищений продукт направляють у верхню частину адсорбера, де знаходиться відстійна зона, а забруднений адсорбент подають на відновлення і повернення в технологічну ланку. При цьому необхідно враховувати, що після першого «прогону» – циклу адсорбції – змінюються фізико-хімічні властивості адсорбенту.

Сировиною, що надходить в апарат, є забруднена олива або мастило, з якої попередньо вилучають присадки – так зване базове мастило (далі – ОМ). Воно містить у собі групи ізопарафінових, нафтенопарафінових, нафтенароматичних й ароматичних вуглеводнів з різним ступенем циклічності, а також

гетероорганічні з'єднання, до яких відносять кисень, сірку й азот. Залежно від того, які групи переважають у складі мастил, виділяють декілька їх різновидів: парафінові, нафтові, ароматичні та змішані. Для виробництва мастильних матеріалів поширеним є використання парафінових мастил, які володіють необхідними в'язкісно-температурними характеристиками [16]. Так, бажаними компонентами в мастилі є ізопарафіни, нафто-парафінові, моно- та біциклічні ароматичні вуглеводні з довгими боковими ланками. До компонентів забруднювачів відносять поліциклічні ароматичні вуглеводні, смоли та сірчисті з'єднання. При цьому вуглеводні є неполярними або слабо полярними речовинами, а смоли та сірчисті з'єднання – полярними.

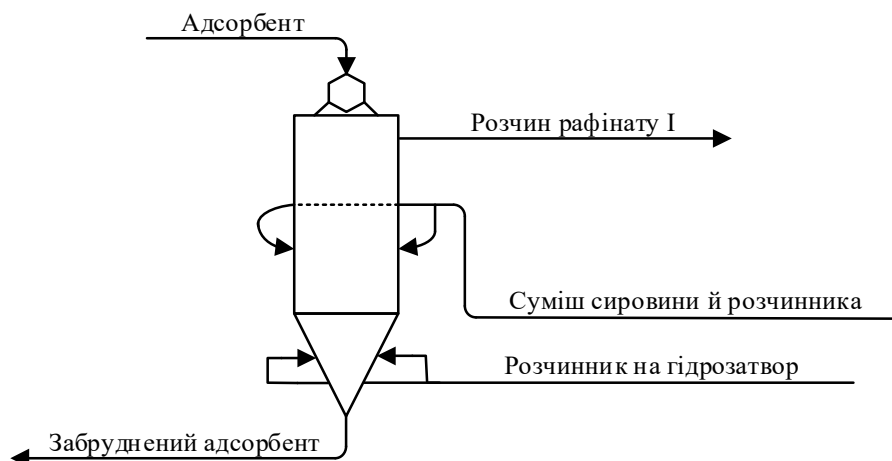


Рис. 1 – Технологічна схема адсорбера

Одним з показників, за якими визначають експлуатаційні властивості олив або мастил, є стабільність. Вона буває фізичною й хімічною та характеризує стійкість мастильних матеріалів відповідно до фізичних та хімічних процесів, що ведуть до зміни їх складу і властивостей [17].

У [15] розглядають оливи та мастила як наносистеми, в яких присутні різні за хімічним складом і будовою наноструктури. Автори вказують на тісний зв'язок експлуатаційних характеристик мастильних матеріалів з властивостями наночастинок в цих системах.

З огляду на це, адсорбцію доцільно розглядати в наносередовищі, в якому поглинальні властивості адсорбенту пов'язані з розмірами наночастинок та структурою каркасу, який вони утворюють.

При створенні вербальної моделі спробуємо уявити взаємодію частинки при контактах адсорбенту – алюмосилікатного каталізатора – з одного боку та адсорбтиву й адсорбату – з іншого.

Враховуючи особливості забруднювачів, адсорбцію виконують на полярних адсорбентах [7], молекули яких складаються, в основному, з оксидів кремнію та алюмінію.

Структура гранул (елементарних комірок) алюмосилікатного каталізатора передбачає наявність у них великих і малих адсорбційних порожнин. Можливість проникання адсорбату в зазначені порожнини визначають за розмірами вхідних вікон, які, у свою чергу, залежать від розташування кисневих кілець та числа атомів кисню в них. Кожна велика порожнина має чотири входи, які створені 12-членими кисневими кільцями; вхідні вікна малих порожнин створені 6-членими кисневими кільцями. Таким чином, великі порожнини, в основному, заповнюються адсорбатом, а малі – водою [8].

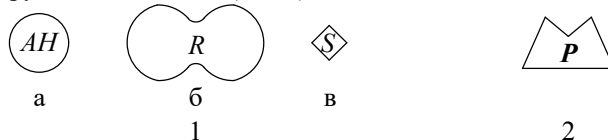
Наведемо в таблиці 1 геометричні характеристики гранули (елементарної комірки) адсорбенту.

Таблиця 1 – Геометричні характеристики гранул адсорбенту

	Діаметр вхідного вікна, нм	Діаметр порожнини, нм	Об'єм порожнини, нм ³	Загальний об'єм, нм ³
Мала порожнина	0,4	0,66	0,15	–
Велика порожнина	0,9	1,162	0,822	–
Гранула	–	–	–	7,776

Спочатку відбувається адсорбція смол через їх високу полярність, що обумовлена несиметричністю будови молекул і наявністю в них конденсованих ароматичних кілець та гетероатомів сірки, кисню й азоту. Далі відбувається адсорбція молекул сірки й ароматичних вуглеводнів. Останні заповнюють адсорбент через вплив електростатичного поля, внаслідок якого в їх молекулах виникає індукування дипольного моменту [7].

Для спрощеної візуалізації описаних процесів запропоновано використати наступні схематичні позначення компонентів забруднювачів та ОМ (Рис.2).

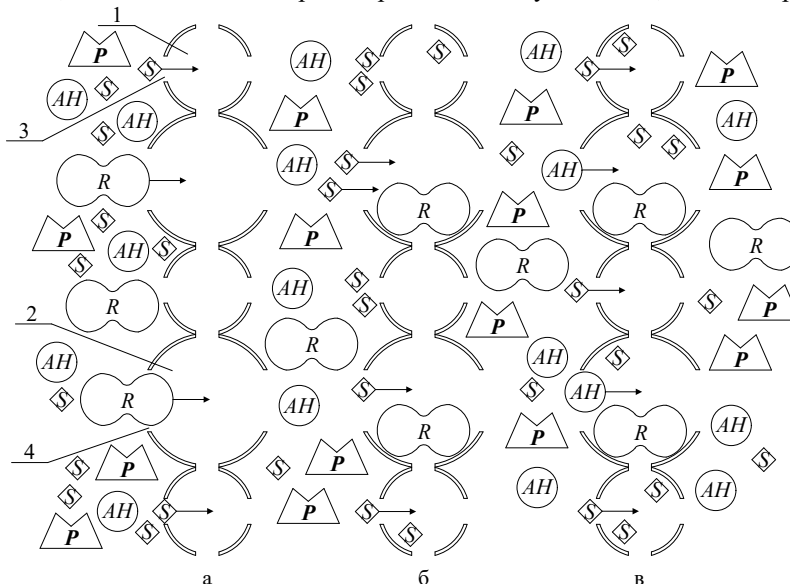


1. 1 – компоненти забруднювачів: а – молекула ароматичних вуглеводнів (Aromatic Hydrocarbons); б – молекула смол (Resin); в – молекула сірчистих з’єднань (Sulfur); 2 – парафіни (Paraffins)

1. Рис. 2 – Схематичне позначення компонентів забруднених ОМ

На Рис. 3 наведено процес розділу багатокомпонентної суміші – очищення ОМ від ароматичних вуглеводнів (Рис. 3. а), сірчистих з’єднань (Рис. 3. б) та смол (Рис. 3. в).

У малих 1 та великих 2 порожнинах поглинання відбувається через вхідні вікна 3 і 4 відповідно. При цьому, згідно з вищенаведеним, у вхідні вікна 3 потрапляють лише молекули сірки, а за рахунок великих розмірів вхідних вікон 4, в них можлива адсорбція ароматичних вуглеводнів, смол та сірчистих з’єднань.



2. 1 – мала порожнина; 2 – велика порожнина; 3 – вхідне вікно малої порожнини; 4 – вхідне вікно великої порожнини; а – адсорбція смол; б – адсорбція сірки; в – адсорбція ароматичних вуглеводнів

Рис. 3 – Загальна схема адсорбції оливи або мастила

На Рис. 4 зображено можливі варіанти взаємодії частинок різних компонентів суміші з частинками адсорбенту для створення уяви про характер їх розділення.

Для того, щоб адсорбент поглинув частинку забруднювача, необхідно, щоб її критичний діаметр був меншим за діаметр вхідного вікна гранули адсорбенту. Розмір молекул забруднювачів залежить від їх структури, зокрема, критичний діаметр смол та діаметр вхідних вікон великих порожнин майже однакові. У такому випадку адсорбування відбувається з великою енергією активації й молекула повинна мати достатній запас енергії [8].

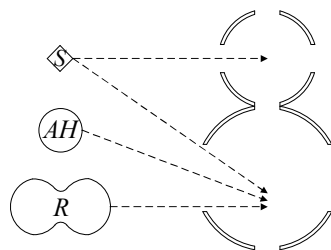
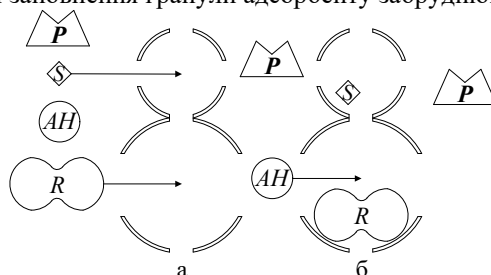


Рис. 4 – Схематичне зображення адсорбції забруднювачів з Ом залежно від розмірів вхідних вікон

Як видно з Рис. 4, поглинальна здатність адсорбенту істотно залежить від розмірів вхідних вікон порожнин. Так, малі порожнини доступні лише для молекул сірчистих з'єднань, у той час як великі порожнини можуть вміщувати в собі всі наведені компоненти забруднювачів. При цьому одночасно у вхідне вікно малої порожнини може потрапити одна молекула сірчистих з'єднань. Для вікон великих порожнини існує декілька варіантів одночасного потрапляння забруднювачів у них: одна молекула смол, одна молекула ароматичних вуглеводнів, одна або дві молекули сірчистих з'єднань. При багатокомпонентній сировині та різноманітні геометричних характеристик гранул адсорбенту можна вважати, що впродовж часу взаємодії цих двох потоків в апараті виникає занадто багато способів заповнення гранул.

Наведемо на Рис. 5 принцип заповнення гранули адсорбенту забруднювачами.

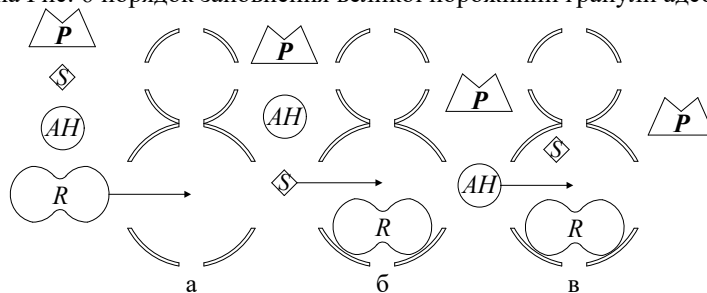


3. а – вилучення молекул смол та сірки; б – вилучення молекули ароматичних вуглеводнів після етапу а)

Рис. 5 – Загальний принцип заповнення гранули адсорбенту

На Рис. 5 наведено приклад розвитку процесу адсорбції, який, зокрема, може відбуватися таким чином. У малу і велику порожнини одночасно потрапляють, відповідно, молекули сірчистих з'єднань та смол (Рис. 5. а). У подальшому процесі очищення, відповідно до розмірів вхідних вікон, бере участь велика порожнина, в яку послідовно потрапляють молекули сірки та ароматичних вуглеводнів (Рис. 5. б).

Наведемо окремо на Рис. 6 порядок заповнення великої порожнини гранули адсорбенту.



4. а – вилучення молекули смол; б – вилучення молекули сірки; в – вилучення молекули ароматичних вуглеводнів

Рис. 6 – Порядок заповнення великої порожнини гранули адсорбенту

У великій порожнині поглинання молекул забруднювачів відбувається в такому порядку: смоли (Рис. 6. а) → сірчисті з'єднання (Рис. 6. б) → ароматичні вуглеводні (Рис. 6. в) [7].

Парафіни, які є основою мастильних матеріалів, не потрапляють всередину адсорбенту через властивість вибіркової адсорбції, яку характеризують сили притягання між молекулою та поверхнею адсорбенту. Зазначені сили, у свою чергу, залежать від теплоти адсорбції, яка у випадку парафінів є найменшою, тому ступінь поглинання таких компонентів буде також дуже низьким порівняно із забруднювачами.

При описі сил, які впливають на перебіг процесів адсорбції, використовують різні їх класифікації. Розглянемо їх детально.

Адсорбція буває фізичною та хімічною (хемосорбція). Остання має місце у випадку хімічної схожості адсорбату та адсорбенту і передбачає їх хімічну взаємодію. При очищенні мастильних матеріалів відбувається фізична адсорбція, яка полягає у збільшенні концентрації речовини на поверхні адсорбенту за рахунок ван-дер-ваальсових (міжмолекулярних) сил [9]. У такому випадку, молекула адсорбату потрапляє на поверхню адсорбенту, який затримує цю молекулу своїм силовим полем протягом деякого часу, після чого відбувається процес десорбції. Сили Ван-дер-Ваальса діють на відстанях, що значно перевищують розміри адсорбованих молекул, тому на поверхні адсорбенту зазвичай утримують кілька шарів молекул адсорбату [9].

Покривання адсорбатом поверхні адсорбенту частково врівноважує поверхневі сили і внаслідок цього знижує поверхневий натяг. Разом з цим відбувається спад ентропії системи за рахунок зменшення ступеня свободи адсорбованих молекул. Це призводить до зменшення ентальпії системи, що рівнозначно виділенню тепла, тобто процеси адсорбції екзотермічні [6, 9].

Міжмолекулярні сили у процесах адсорбції мають електричну природу й залежать від відстані між молекулами. Розрізняють сили взаємного тяжіння, до яких відносять електростатичні та дисперсійні U_d , а також сили відштовхування між заповненими електронними оболонками атомів молекул. У свою чергу, серед електростатичних сил виділяють орієнтаційні U_o та індукційні U_i . Повний потенціал U ван-дер-ваальсових сил [9] визначають за формулою:

$$U = U_o + U_i + U_d. \quad (1)$$

Орієнтаційні сили мають місце при адсорбції на поверхні полярних молекул, що несуть постійні електростатичні заряди (іони, диполі), індукційні викликані поляризацією нейтральної молекули під дією постійного диполя. Наведення диполя – індукування молекул за рахунок наявності властивості поляризованості. Постійний диполь може індукувати дипольний розподіл зарядів у неполярній молекулі, яка стає полярною. В результаті молекули притягують одна одну, але не так сильно, як дві полярні молекули.

Індукційні сили, на відміну від орієнтаційних, обумовлені поляризацією зсуення й не залежать від температури. [9, 10, 18].

Дисперсійні сили характеризують електричну взаємодію між миттєвими диполями, змінними за величиною і напрямком, яка виникає внаслідок руху електронів в атомах, незалежно від наявності в них постійного дипольного моменту. Оскільки під час взаємодії двох молекул, які зближуються, зменшується повна енергія системи, такі сили є силами тяжіння [6, 9].

Фізична адсорбція, не вимагає енергії активації, отже, її швидкість залежить тільки від числа зіткнень молекул з поверхнею адсорбенту [18].

Одночасно із силами тяжіння у процесах адсорбції діють сили міжмолекулярного відштовхування, тобто відштовхування електронних оболонок молекул на дуже малих відстанях, що перешкоджає їх злиттю [10].

Причинами адсорбції, близької до фізичної, вважають також утворення водневих зв'язків, які, зокрема, виникають при адсорбції на адсорбентах з поверхневими гідроксильними групами. При утворенні водневого зв'язку енергія взаємодії адсорбтиву з адсорбентом досить велика, і тому теплота, що виділяється при такій адсорбції, зазвичай значно більше теплоти адсорбції речовин, подібних за геометричною формою і розміром молекул, які не утворюють водневих зв'язків [11].

У процесах адсорбції на полярних адсорбентах в основному діють орієнтаційні та індукційні сили. Полярні сили (сили притягання між полярними молекулами) переважають над дисперсійними, тому адсорбованість компонентів на адсорбентах такого типу зростає зі збільшенням дипольного моменту їх молекул. Адсорбція неполярних речовин, до яких належать вуглеводні, викликає утворення в їх молекулах індукваного диполя [7], в результаті відбувається притягання неполярних молекул ароматичних вуглеводнів до полярних молекул адсорбенту, а отже, їх поглинання.

На перебіг адсорбційних процесів впливають властивості забрудненої ОМ, адсорбенту та розчинника. При цьому розчинник необхідний для зниження в'язкості сировини, створення необхідного гідравлічного режиму рухливих потоків і для покращення дифузії у шпарини адсорбенту речовин, які адсорбують [7].

До властивостей адсорбенту належать: фізико-хімічні: хімічний склад, вологоємність, водостійкість, механічна міцність; структура: каркасна структура, об'єм шпарин; додані (тобто ті, що набуті після регенерації): хімічний склад, каркасна структура, об'єм шпарин, вологоємність, водостійкість, механічна міцність, концентрації ароматичних вуглеводнів, сірки та смол.

Фізико-хімічні властивості забрудненої ОМ: компонентний склад (елементний, груповий та структурно-груповий), в'язкість, розмір молекул, вміст механічних домішок і води, концентрації ароматичних вуглеводнів, сірки та смол.

Фізико-хімічні властивості очищеної ОМ: компонентний склад (елементний, груповий та структурно-груповий), індекс в'язкості, розмір молекул, вміст механічних домішок і води, концентрації ароматичних вуглеводнів, сірки та смол, температури застигання, спалаху, помутніння, протизношувальні, мийно-диспергувальні та протиокислювальні властивості, корозійна активність, змашувальна здатність, щільність.

Основні фізико-хімічні властивості розчинника після адсорбції: фракційний склад, температура кипіння.

Оскільки суміш, яку адсорбують, є багатокомпонентною, то основними є структурні особливості речовин, які беруть участь у зазначеному процесі. Останнє, у свою чергу, свідчить про вибірковість адсорбції.

Наведемо на Рис. 7 структурно-параметричну схему з відображенням сил взаємодії між молекулами речовин у наносистемі мастил. Розглянемо її складові.



Рис. 7 – Структурно-параметрична схема в наносистемі олів та мастил

Як видно з Рис. 7, у процесі діють сили Ван-дер-Ваальса та відштовхування. Оскільки очищення виконують на полярному адсорбенті, то в зазначеному процесі найбільш впливовими є електростатичні сили тяжіння – орієнтаційні та індукційні.

Під час перебігу адсорбційних процесів відбувається спад ентальпії системи (тобто виділення тепла), що призводить до зменшення ступеня адсорбції. Також за цим показником можна опосередковано визначити сили тяжіння: найбільша кількість тепла виділяється при адсорбуванні речовин, молекули яких містять подвійні зв'язки, а також атоми сірки, кисню й азоту, найменша – при вилученні насичених з'єднань, до яких належать парафінові та нафтеніві вуглеводні [7].

Властивості вербальної моделі багатокомпонентного адсорбційного очищення олів.

Розглянуті вище основи процесу адсорбції на мікрорівні дозволяють створити уяву про нього, як про взаємодію двох потоків речовин: частинок адсорбенту та частинок сировини, причому кожний з цих потоків треба, у свою чергу, розглядати як сукупності декількох потоків речовин, елементи яких відрізняються за

конфігураціями, розмірами та властивостями. Особливо це стосується сировини, яка складається як з речовин, притаманних оливам та мастилам, так і речовин-забруднювачів. Властивості сировини нестабільні за визначенням – сировина забруднена. Властивості адсорбенту також нестабільні, оскільки, з одного боку, порожнини насичуються забруднювачем по-різному, а, по-друге, після кожного циклу регенерації ступінь відновлення властивостей частинок різний.

Елементи усіх речовин в адсорбері перемішуються, що створює систему, розподілену за властивостями та рушійними силами процесів як за висотою, так і за діаметром апарату.

Наведений вище матеріал дозволяє отримати уяву про причинно-наслідкові основи процесів, які відбуваються у системі «адсорбент – забруднені ОМ», і створити образ процесу адсорбції як об'єкту моделювання.

Сучасний підхід до моделювання адсорбційних процесів не ґрунтується на мікропроцесах. Кількісною характеристикою адсорбції є кількість молей адсорбованої речовини, що припадає на одиницю поверхні або одиницю маси адсорбенту. Позначимо її $C_{e,a}$.

При достатньому часі зіткнення фаз і постійній температурі під дією адсорбційних сил гранула адсорбенту перестає активно поглинати забруднювачі й настає адсорбційна (статична) рівновага, при якій встановлюється певне рівноважне співвідношення між кількістю молекул адсорбтиву й адсорбату [6]. У загальному виді цю залежність позначають так [6]:

$$C_{e,a} = f(C_{e,p}, T), \quad (2)$$

де $C_{e,a}$ – рівноважна концентрація адсорбату; $C_{e,p}$ – рівноважна концентрація адсорбтиву в об'ємній фазі; T – температура адсорбції.

Часто рівноважну залежність подають у вигляді функції $C_{e,a}$ від парціального тиску P адсорбтиву в об'ємній фазі [6]:

$$C_{e,a} = f(P, T). \quad (3)$$

При постійній температурі рівняння (2) і (3) мають вигляд:

$$C_{e,a} = f(C_{e,p}), \quad (4)$$

$$C_{e,a} = f(P). \quad (5)$$

Крива, що описує залежність (4) або (5) при досягненні рівноваги, називають ізотермою адсорбції.

Висновки. За результатами наведених досліджень було визначено основні положення вербальної моделі зазначеної системи:

- у взаємодію вступає велика кількість елементів (Рис. 2 – 6);
- елементи можуть бути віднесені до декількох груп речовин, але кількість груп невідома;
- способи взаємодії елементів численні та різноманітні;
- елементи мають розміри, які відповідають за визначенням наносистемам;
- сили, які відображають взаємодії між елементами занадто малі і також відповідають наносистемам;
- сучасні промислові технічні засоби автоматизації (ТЗА) не можуть бути застосовані для визначення властивостей вказаних елементів і сил;
- адекватна математична формалізація процесів, яка повинна враховувати поточні властивості частинок, наразі неможлива.

Зазначені властивості дають підставу вважати неперервне очищення забруднених олиव або мастил в адсорбері складною системою і для задач керування нею в реальному часі застосовувати методи моделювання, притаманні для таких систем.

Перспективи подальших досліджень. Описаний підхід до моделювання процесів адсорбційного розділення компонентів ОМ дозволяє враховувати різні аспекти перебігу таких процесів, зокрема, випадковий характер їх поведінки, який залежить від численних факторів, що стосуються властивостей адсорбенту, розчинника й забруднених олив або мастил. Це означає, що створення систем керування зазначеним процесом вимагатиме такого математичного забезпечення, яке повинно використовувати методи теорії ймовірностей, адаптації та штучного інтелекту.

Список використаної літератури

1. Тюріна Є. О., Ярошук Л. Д. Задачі моделювання процесу адсорбції олів та мастил // Автоматизація та комп'ютерно-інтегровані технології – 2019: Матеріали VI Міжнар. наук.-практ. конф. молодих учених, аспірантів і студ. (АКІТ – 2019) (Київ, 23-24 квітня 2019 р.) : зб. тез доп. / укл. М. В. Лукінюк. Київ: КПІ ім. Ігоря Сікорського, 2019. С. 57-58.
2. Рылякин Е. Г., Волошин А. И. Очистка и восстановление отработанных масел // Молодой ученый. 2015. № 1 (81). С. 92-94. URL: <https://moluch.ru/archive/81/14784/> (дата обращения: 17.04.2020).
3. Голубятников В. А., Шувалов В. В. Автоматизация производственных процессов в химической промышленности: учебн. для техникумов. Москва: Химия, 1985. 352 с.
4. Плановский А.Н., Рамм В.М., Каган С. З. Процессы и аппараты химической технологии. Москва: Химия, 1967. 848 с.
5. Фесенко. О. М., Ковальчук С. В., Нищик Р. А. Проблеми та перспективи розвитку нанотехнологій в Україні та світі // Маркетинг і менеджмент інновацій. 2017. № 1. С. 170-179. DOI: <http://doi.org/10.21272/mmi.2017.1-15> (дата звернення: 14.12.2016).
6. Дытнерский Ю. И. Процессы и аппараты химической технологии: учебн. для вузов. В 2-х кн. Часть 2. Массообменные процессы и аппараты. Москва: Химия, 1995. 368 с.
7. Казакова Л. П., Крейн С. Э. Физико-химические основы производства нефтяных масел. Москва: Химия, 1978. 320 с.
8. Кельцев Н. В. Основы адсорбционной техники. Москва: Химия, 1976. 512 с.
9. Мархасин И. Л. Физико-химическая механика нефтяного пласта / Нефтяное пласта / Нефтяное пласта. Москва, 1977. 214 с.
10. Макаревич Н. А., Богданович Н. И. Теоретические основы адсорбции: учеб. пособ. Архангельск: САФУ, 2015. 362 с.
11. Воюцкий С. С. Курс коллоидной химии. Москва: Химия, 1975. 512 с.
12. Van Vliet B. M., Weber Jr W. J., Hozumi H. Modeling and prediction of specific compound adsorption by activated carbon and synthetic adsorbents // Water Research, 1979. Vol. 14. P. 1719-1728.
13. Математичне моделювання теплопереносу та адсорбції вуглеводнів в нанопористих цеолітичних катализаторах систем нейтралізації відпрацьованих газів: монографія/Петрик М. Р. та ін. Київ, 2017. 280 с.
14. Schönbacher A. Thermische Verfahrenstechnik: Grundlagen und Berechnungsmethoden für Ausrüstungen und Prozesse. Berlin: Springer, 2002. P. 1030.
15. Кобилянський Є. В., Іщук Ю. Л., Альтшулер М. А. Основи нанотехнологій мастильних матеріалів // Катализ и нефтехимия. 2005. № 13. С. 1-8. URL: <http://dspace.nbu.gov.ua/handle/123456789/3767> (дата звернення: 17.04.2020).
16. Топлива, смазочные материалы, технические жидкости. Ассортимент и применение: справочник / Анисимов И. Г. и др.; под редакцией Школьников В. М. Москва: Техинформ, 1999. 596 с.
17. Справочник по горюче-смазочным материалам в судовой технике / Гулин Е. И., Сомов В. А., Чечот И. М. Ленинград: Судостроение, 1981. 320 с.
18. Комаров В. С., Бесараб С. В. Адсорбенты и носители катализаторов. Научные основы регулирования пористой структуры. Москва: ИНФРА-М, 2018. 203 с.

Надійшла до редакції 23.04.2020

Yaroshchuk L. D., Tiurina Y. O.

VERBAL MODELING OF MICROPROCESSES OF CONTINUOUS OIL AND GREASE ADSORPTION

The use of oils and greases in various fields of activity leads to their contamination by hazardous substances. Regeneration of properties is performed by various technologies, in particular, by continuous adsorption purification. For the automatic control of multicomponent purification it is necessary to know the mechanisms of substances interaction in the adsorber. A mathematical model that is adequate to the actual adsorption course, will ensure high control efficiency by meeting the quality requirements for the materials and reducing production emissions into the environment.

It is important to create a mathematical model of the processes in adsorber, which would give an adequate reflection of substances behavior in it when changing properties of raw materials and adsorbent, that are continuously flow into this apparatus. Main modern modeling methods use generalized properties of input material flows and are based

on the approximation of empirical adsorption data. We have chosen a method for describing behavior of substances in adsorber, which is supposed to determine the driving forces that occur between molecules of contaminated oils or greases (OG) on the one hand and adsorbent on the other. Existing studies on the properties of contaminated materials as nanosystems provide grounds for this.

It is suggested to consider adsorbent and contaminated OG that enter the adsorber as separate objects with features of nanosystems. The environment in adsorber has been investigated as a collection of these systems and the new one – "adsorbent – contaminated OG" – whose properties are formed not additively but dynamically by the action of intermolecular forces.

The properties of each of the nanosystems and the forces that are proposed to consider as driving forces in these systems are determined. Purification of contaminated OG is performed on polar adsorbents. In the adsorbent there are important the size of entrance windows, the structure of granules (elementary cells) and the elemental composition, which affects its polarity, and in the adsorbent – the size of molecules and their component composition. The most influential forces that act during the process are electrostatic ones – orientation and induction forces.

It is shown under what scenarios the adsorbent granules can be filled in the presence of several contaminants. It was determined that the adsorption of resin molecules, followed by sulfur and aromatic hydrocarbons, takes place first. The paraffins that underlie the greases are not adsorbed by the adsorbent granules due to the adsorption selectivity, which is characterized by the attraction forces between molecule and adsorbent surface. The adsorption rate of such components will be low compared to pollutants due to the adsorption heat effect, which is the lowest in case of paraffins.

Authors suggest to consider multicomponent adsorption as a phenomenon that implies the presence of innumerable random microprocesses. Such a verbal model made it possible to identify mathematical modeling techniques that would be appropriate to use when creating model for a control system.

The developed model gives an idea of the relationship between the adsorbent particles and contaminated OG at the molecular level and allows us to consider multi-component adsorption purification of oils and greases as random processes. It is shown that the creation of control systems for this process will require such mathematical support, which should use methods of probability theory, adaptation and artificial intelligence.

Keywords: adsorption, oil, grease, nanosystem, verbal, model, control.

References

1. Tiurina, Y. O. and Yaroshchuk, L. D. (2019). "Modeling tasks for adsorption process of oil and grease purification", *Avtomatyzatsiia ta kompiuterno-intehrovani tekhnolohii – 2019* [Automation and Computer-Integrated Technologies – 2019], Kyiv, Ukraine, April 23–24, 2019, pp. 57-58.
2. Ryliakin, E. G. and Voloshin, A. I. (2015). "Purification and regeneration of waste oils", *Molodoi uchenyi*, no. 1 (81), pp. 92-94, available at: <https://moluch.ru/archive/81/14784/> (Accessed April 17, 2020).
3. Golubiatnikov, V. A. and Shuvalov, V. V. (1985). *Avtomatizatsiia proizvodstvennykh protsessov v khimicheskoi promyshlennosti* [Production Processes Automation in the Industry], Khimiia, Moscow, USSR.
4. Planovskii, A. N., Ramm, V. M. and Kagan, S. Z. (1967). *Protsessy i apparaty khimicheskoi tekhnologii* [Processes and Apparatuses of Chemical Technology], Khimiia, Moscow, USSR.
5. Fesenko, O. M., Kovalchuk, S. V. and Nyshchuk, R. A. (2017). "Challenges and opportunities for nanotechnology development in Ukraine and the world", *Marketynh i menedzhment innovatsii*, no. 1, pp. 170-179, available at: <http://doi.org/10.21272/mmi.2017.1-15> (Accessed December 14, 2016).
6. Dytnerkii, I. I. (1995). *Protsessy i apparaty khimicheskoi tekhnologii* [Processes and Apparatuses of Chemical Technology], Khimiia, Moscow, Russia.
7. Kazakova, L. P. and Krein, S. E. (1978). *Fiziko-khimicheskie osnovy proizvodstva nefianykh masel* [Physicochemical fundamentals of petroleum oils production], Khimiia, Moscow, USSR.
8. Keltsev, N. V. (1976). *Osnovy adsorbtsionnoi tekhniki* [Adsorption technology basics], Khimiia, Moscow, USSR.
9. Markhasin, I. L. (1977). *Fiziko-khimicheskaiia mekhanika nefianogo plasta* [Physicochemical mechanics of the oil reservoir], Nedra, Moscow, USSR.
10. Makarevich, N. A. and Bogdanovich, N. I. (2015). *Teoreticheskie osnovy adsorbtsii* [Theoretical basics of adsorption], SAFU, Arkhangelsk, Russia.
11. Voiutskii, S. S. (1975). *Kurs kolloidnoi khimii* [Colloid chemistry course], Khimiia, Moscow, USSR.
12. Van Vliet, B. M., Weber, Jr W. J. and Hozumi, H. (1979). "Modeling and prediction of specific compound adsorption by activated carbon and synthetic adsorbents", *Water Research*, vol. 14, pp. 1719-1728.

13. Petryk, M. R., Khimich, O. M., Boiko, I. V., Mykhalyk, D. M., Petryk, M. M. and Kovbashyn, V. I. (2017). *Matematychnе modeliuvannia teploperenosu ta adsorbtsii vuhlevodniv v nanoporystykh tseolitnykh katalizatorakh system neutralizatsii vidpratsovanykh haziv* [Mathematical modeling of heat transfer and adsorption of carbohydrates in nanoporous cellular catalysts of the systems of neutralization of welded gases], Kyiv, Ukraine.
14. Schönbacher, A. (2002). *Thermische Verfahrenstechnik: Grundlagen und Berechnungsmethoden für Ausrüstungen und Prozesse* [Thermal process engineering: basics and calculation methods for equipment and processes], Springer, Berlin, Germany.
15. Kobylanskyi, Y. V., Ishchuk, Y. L. and Altshuler, M. A. (2005). “Fundamentals of the nanotechnologies of lubricating materials”, *Kataliz i neftekhimiia*, no. 13, pp. 1-8, available at: <http://dspace.nbuv.gov.ua/handle/123456789/3767> (Accessed April 17, 2020).
16. Anisimov, I. G., Badyshova, K. M., Bnatov, S. A., Bogdanov, S. K., Bogdanova, T. I., Borshchevskii, S. B., Bulatnikov, V. V., Bushueva, E. M., Gaitov, K. E., Grudnikov, I. B., Dovgopolyi, E. E., Dubrovskii, S. I., Emelianov, V. E., Ishchuk, I. L., Kolesnik, I. O., Korokh, N. I., Kutsevalov, V. V., Lendel, I. V., Mitusova, T. N., Nazarova, T. I., Nikitina, E. A., Reznikov, V. D., Sadovnikova, L. A., Fiazinov, V. V., Fufaev, A. A., Khurumova, A. F., Cherednichenko, G. I., Shabalina, T. N., Sheinina, S. Z., Shestakovskaia, T. V. Shekhter, I. N. and Englin, B. A. (1999). *Topliva smazochnye materialy tekhnicheskije zhidkosti Assortiment i primeneniie* [Fuels, lubricants, technical fluids. Assortment and application], in Shkolnikov, V. M. (Ed.), Tekhinform, Moscow, Russia.
17. Gulín, E. I., Somov, V. A. and Chechot, I. M. (1981). *Spravochnik po goriuche-smazochnym materialam v sudovoi tekhnike* [Directory of fuels and lubricants in marine engineering], Sudostroenie, Leningrad, USSR.
18. Komarov, V. S. and Besarab, S. V. (2018). *Adsorbenty i nositeli katalizatorov. Nauchnye osnovy regulirovaniia poristoi struktury* [Adsorbents and catalyst carriers. The scientific basis of the porous structure regulation], INFRA-M, Moscow, Russia.