

11. Русакова Н.П., Туровцев В.В., Орлов Ю.Д. // Вестник ТвГУ. Серия: Химия. 2013. №16. С.170–179.
12. Русакова Н.П., Туровцев В.В., Орлов Ю.Д. // Вестник ТвГУ. Серия: Химия. 2013. №16. С. 180–190.
13. Русакова Н.П., Туровцев В.В., Орлов Ю.Д., Чернова Е.М., Котомкин А.В. // Вестник ТвГУ. Серия: Физика. 2014. № 3. С. 3–13.
14. Бейдер Р. Атомы в молекулах. Квантовая теория. М.: Мир. 2001. 528 с.
15. Frisch M.J., Trucks G.W., Schlegel H.B., Pople et al. Gaussian 03 (Revision E 0.1, SMP). Gaussian Inc. Pittsburgh PA. 2007.
16. Clark T., Chandrasekhar J., Spitznagel G.W., and Schleyer P.v.R. // J. Comp. Chem. 1983. V.4, Issue 3. P. 294–301.
17. Todd A. Keith. AIMAll (Version 11.09.18, Professional). 2011. (<http://aim.tkgristmill.com>.)

## ELECTRONEGATIVITY OF GROUPS IN BENZENE SUBSTITUTED AND METHYL RED

*N.P. Rusakova<sup>1</sup>, Zavyalova A.G.<sup>1</sup>, V.V. Turovtsev<sup>4</sup>, S.A. Tretyakov<sup>3</sup>,  
Yu.A. Fedina<sup>5</sup>, Yu.D. Orlov<sup>2</sup>*

<sup>1</sup>Tver State University

<sup>1</sup> Department of Physical Chemistry

<sup>2</sup> Department of General Physics

<sup>3</sup> Department of Applied Physics

Tver State Medical University

<sup>4</sup> Department of Physics, Mathematics and Medical Informatics

<sup>5</sup> Elizabeth Andrews High School Dekalb County School District

### Annotation:

The distribution of electron density in benzene, some of its *ortho*-, *para*- and *monosubstituted* and methyl red is obtained. The group charges  $q(R)$  were calculated using the methods of the "quantum theory of atoms in molecules" by R. Bader. The individual scales of electronegativity of the groups  $\chi(R)$  for each structure under consideration were obtained and the general  $\chi(R)$  was created. The presence of intramolecular hydrogen bonds (IMHB) in *N,N*-dimethylaniline, 4-methyl-*N,N*-dimethylaniline, 4-[(Dimethylamino)phenyl]diazene, 2-(carboxyphenyl)methyldiazene, 2-(carboxyphenyl)diazene and 2-[4-[(Dimethylamino)phenyl]diazanyl] benzoic acid (methyl red) was noted.

**Key words:** *quantum theory of atoms in molecules, electron density, intramolecular hydrogen bonds, group charge, group electronegativity, group electronegativity scale, monosubstituted benzene, parasubstituted benzene, orthosubstituted benzene, methyl red.*

*Об авторах:*

РУСАКОВА Наталья Петровна - кандидат химических наук, доцент кафедры физической химии ТвГУ, [Rusakova.NP@tversu.ru](mailto:Rusakova.NP@tversu.ru), [a002186@mail.ru](mailto:a002186@mail.ru)

ЗАВЬЯЛОВА Анастасия Георгиевна - студентка пятого курса ТвГУ, кафедра физической химии, [nastya-zav@list.ru](mailto:nastya-zav@list.ru)

ТУРОВЦЕВ Владимир Владимирович – доцент, доктор физико-математических наук, заведующий кафедрой физики, математики и медицинской информатики, Тверской ГМУ Минздрава России, [turtsma@mail.ru](mailto:turtsma@mail.ru)

ТРЕТЬЯКОВ Сергей Андреевич - старший преподаватель кафедры прикладной физики ТвГУ, [Tretyakov.SA@tversu.ru](mailto:Tretyakov.SA@tversu.ru)

ФЕДИНА Юлия Алексеевна - Elizabeth Andrews High School Dekalb County School District, 1701 Mountain Industrial Blvd, Stone Mountain, GA 30083, [chemistryswd@gmail.com](mailto:chemistryswd@gmail.com)

ОРЛОВ Юрий Дмитриевич - профессор, доктор химических наук, заведующий кафедрой общей физики ТвГУ, [Orlov.YD@tversu.ru](mailto:Orlov.YD@tversu.ru)

Поступила в редакцию 13 августа 2019 г.

УДК: 51-7,532,544,543

## МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ НЕСТАЦИОНАРНОЙ СОРБЦИИ В ДВУХФАЗНОЙ СРЕДЕ, УЧИТЫВАЮЩАЯ ПРОСТРАНСТВЕННУЮ НЕРАВНОМЕРНОСТЬ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ КОНЦЕНТРАЦИИ МИКРОКОМПОНЕНТА В ФАЗЕ СОРБЕНТА

Д.А. Тукмаков

Федеральный исследовательский центр «Казанский научный центр  
Российской академии наук»

*Институт механики и машиностроения – обособленное структурное  
подразделение Федерального исследовательского центра «Казанский научный  
центр Российской академии наук»*

Целью данной работы является получение математической модели процесса нестационарной сорбции, учитывающей пространственную неравновесность концентрации микрокомпонента в фазе сорбента. В работе использована система уравнений в частных производных описывающая процесс нестационарной динамической сорбции. Данная система уравнений сведена к одному уравнению старшего порядка относительно функции концентрации микрокомпонента в фазе сорбента. Выведенное уравнение было приведено к канонической форме, позволяющей применять известные из литературы частные решения. Представлено уравнение в частных производных второго порядка, описывающее процесс сорбции относительно концентрации микрокомпонента в фазе сорбента. Получено частное решение для системы уравнений нестационарной динамической сорбции. Математическая модель реализована в виде программного кода. В результате математического моделирования выявлены зависимости влияния пористости сорбента на пространственное распределение концентрации микрокомпонента, как в твёрдой фазе сорбента, так и в жидкой фазе раствора. Проведено сопоставление статического и динамического решений уравнений математической модели. Выявлено, что увеличение пористости приводит к интенсификации процесса выщелачивания микрокомпонента из фазы сорбента.

**Ключевые слова:** *многофазные среды, математическое моделирование, динамическая сорбция, массоперенос.*

DOI 10.26456/vtchem2019.4.3

На данный момент одним из актуальных вопросов математического моделирования является описание нестационарных процессов массопереноса в неоднородных средах [1-8], в частности

таким процессом является сорбция. Интерес к теоретическому исследованию процесса сорбции вызван рядом практических приложений [8-16]. Разработке теоретических моделей сорбционных процессов посвящены работы, как с позиции общей теории динамики многофазных сплошных сред [1], так и с позиции прикладных исследований [2,8]. Современные методы аналитической химии, направленные на выявление содержания в окружающей среде (почве и донных отложениях) токсичных элементов предполагают непрерывную подачу во выражающуюся спиральную колонку потока жидкости [8]. Для оптимизации процессов извлечения элементов во вращающейся спиральной колонке необходима разработка теоретической методологии моделирования массопереноса в процессе нестационарного выщелачивания с подвижным потоком элюента. В работе [8] представлена система уравнений динамики сорбционного процесса в двухфазной среде. Для упрощения решения уравнений математической модели в работе [8] было сделано предположение, что концентрация микрокомпонента в фазе сорбента является функцией исключительно временной переменной и не зависит от пространственной координаты  $x$ . В данной работе рассматривается полная система уравнений, представленная в работе [8] с учётом неравномерного пространственного распределения концентрации микрокомпонента в фазе образца, предложена методика приведения системы уравнений сорбции к одному линейному уравнению старшего порядка, имеющему точные частные решения. Система уравнений нестационарного процесса сорбции имеет вид:

$$F \frac{\partial c(x,t)}{\partial x} + \varepsilon \frac{\partial c(x,t)}{\partial t} + \frac{\partial a(x,t)}{\partial t} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial a(x,t)}{\partial t} = k [c(x,t) - f^{-1}(a(x,t))] \quad (2)$$

$$f(c) = dc, f^{-1}(a) = a/d \quad (3)$$

Здесь  $a(x,t)$  - концентрация микрокомпонента в фазе сорбента;  $c(x,t)$  - концентрация микрокомпонента в подвижной фазе,  $F$ -скорость прокачивания подвижной фазы,  $k$ -коэффициент внешнедиффузионного массопереноса микрокомпонента,  $d$ -отношение равновесных

концентраций микрокомпонент;  $\varepsilon$ -общая пористость сорбента, функция  $f$  - изотерма сорбции [8].

Система уравнений (1) -(2) дополняется граничными условиями (4)

$$c(0,0) = c_1, c(L,0) = c_2, a(0,0) = a_1, a(L,0) = a_2, \quad (4)$$

здесь  $L$ -длина колонки. Из системы уравнений (1) -(2) с помощью изотермы сорбции (3) можно выразить функцию  $c(x, t)$  через функцию  $a(x, t)$

$$c(x, t) = \frac{1}{k} \frac{\partial a(x, t)}{\partial t} + \frac{1}{d} a \quad (5)$$

С помощью уравнения (5) преобразуем систему уравнений (1)-(2) к виду (6):

$$\frac{F}{k} \frac{\partial^2 a(x, t)}{\partial t \partial x} + \frac{\varepsilon}{k} \frac{\partial^2 a(x, t)}{\partial t^2} + \frac{F}{d} \frac{\partial a(x, t)}{\partial x} + \left( \frac{\varepsilon}{d} + 1 \right) \frac{\partial a(x, t)}{\partial t} = 0 \quad (6)$$

Где коэффициенты при производных от функции выражаются в виде (7):

$$\alpha_1 = \frac{F}{k}, \alpha_2 = \frac{\varepsilon}{k}, \alpha_3 = \frac{F}{d}, \alpha_4 = \left( \frac{\varepsilon}{d} + 1 \right) \quad (7)$$

Таким образом получаем уравнение второго порядка относительно концентрации микрокомпонента в фазе сорбента (8):

$$\alpha_1 \frac{\partial^2 a(x, t)}{\partial t \partial x} + \alpha_2 \frac{\partial^2 a(x, t)}{\partial t^2} + \alpha_3 \frac{\partial a(x, t)}{\partial x} + \alpha_4 \frac{\partial a(x, t)}{\partial t} = 0 \quad (8)$$

Так как характеристическое выражение для данного уравнения в частных производных имеет вид:  $0.25 \cdot (\alpha_2)^2 - \alpha_1 \cdot 0 > 0$ , то, следовательно, уравнение относится к уравнениям гиперболического типа. Для приведения к каноническому виду решается уравнение (9) [18,19]:

$$-\alpha_1 dt dx + \alpha_2 (dx)^2 = 0 \quad (9)$$

$$dx(-\alpha_1 dt + \alpha_2 dx) = 0 \quad (9')$$

Таким образом получаем следующую замену координат:  $\xi = x, \eta = \alpha_1 t - \alpha_2 x$ .

Для частных производных в новых координатах получаем выражения:

$$\frac{\partial a}{\partial x} = \frac{\partial a}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{\partial a}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial x} = \frac{\partial a}{\partial \xi} - \alpha_2 \frac{\partial a}{\partial \eta}, \quad (10)$$

$$\frac{\partial a}{\partial t} = \frac{\partial a}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial t} + \frac{\partial a}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial t} = \alpha_1 \frac{\partial a}{\partial \eta}, \quad (11)$$

$$\frac{\partial^2 a}{\partial t^2} = \frac{\partial}{\partial \xi} \left( \alpha_1 \frac{\partial a}{\partial \eta} \right) \frac{\partial \xi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \eta} \left( \alpha_1 \frac{\partial a}{\partial \eta} \right) \frac{\partial \eta}{\partial t} = \alpha_1^2 \frac{\partial^2 a}{\partial \eta^2}, \quad (12)$$

$$\frac{\partial^2 a}{\partial t \partial x} = \frac{\partial}{\partial \xi} \left( \frac{\partial a}{\partial \xi} - \alpha_2 \frac{\partial a}{\partial \eta} \right) \frac{\partial \xi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \eta} \left( \frac{\partial a}{\partial \xi} - \alpha_2 \frac{\partial a}{\partial \eta} \right) \frac{\partial \eta}{\partial t} = \alpha_1 \frac{\partial^2 a}{\partial \eta \partial \xi} - \alpha_1 \alpha_2 \frac{\partial^2 a}{\partial \eta^2}, \quad (13)$$

Подстановкой выражений (10) -(13) в уравнение (8) получаем уравнение относительно новых переменных:

$$\alpha^2 \frac{\partial^2 a}{\partial \eta \partial \xi} + (\alpha_1^2 \alpha_2 - \alpha_1^2 \alpha_2) \frac{\partial^2 a}{\partial \eta^2} + \alpha_3 \frac{\partial a}{\partial \xi} + (\alpha_4 \alpha_1 - \alpha_3 \alpha_2) \frac{\partial a}{\partial \eta} = 0 \quad (14)$$

$$\beta_1 = \alpha^2, \beta_2 = \alpha_3, \beta_3 = (\alpha_4 \alpha_1 - \alpha_3 \alpha_2) \quad (15)$$

С учётом (15) уравнение (14) имеет вид (16), что является первой канонической формой для гиперболического уравнения [18,19]:

$$\beta_1 \frac{\partial^2 a}{\partial \eta \partial \xi} + \beta_2 \frac{\partial a}{\partial \xi} + \beta_3 \frac{\partial a}{\partial \eta} = 0 \quad (16)$$

Далее осуществляется замена переменных:  $\xi_1 = \xi + \eta$ ,  $\eta_1 = \xi - \eta$ . В новых переменных частные производные будут иметь вид:

$$\frac{\partial a}{\partial \xi} = \frac{\partial a}{\partial \xi_1} \frac{\partial \xi_1}{\partial \xi} + \frac{\partial a}{\partial \eta_1} \frac{\partial \eta_1}{\partial \xi} = \frac{\partial a}{\partial \xi_1} + \frac{\partial a}{\partial \eta_1}, \quad (17)$$

$$\frac{\partial a}{\partial \eta} = \frac{\partial a}{\partial \xi_1} \frac{\partial \xi_1}{\partial \eta} + \frac{\partial a}{\partial \eta_1} \frac{\partial \eta_1}{\partial \eta} = \frac{\partial a}{\partial \xi_1} - \frac{\partial a}{\partial \eta_1}, \quad (18)$$

$$\frac{\partial^2 a}{\partial \xi \partial \eta} = \frac{\partial}{\partial \xi_1} \left( \frac{\partial a}{\partial \xi_1} + \frac{\partial a}{\partial \eta_1} \right) \frac{\partial \xi_1}{\partial \eta} + \frac{\partial}{\partial \eta_1} \left( \frac{\partial a}{\partial \xi_1} + \frac{\partial a}{\partial \eta_1} \right) \frac{\partial \eta_1}{\partial \eta} = \frac{\partial^2 a}{\partial \xi_1^2} - \frac{\partial^2 a}{\partial \eta_1^2}, \quad (19)$$

$$\beta_1 \frac{\partial^2 a}{\partial \xi_1^2} - \beta_1 \frac{\partial^2 a}{\partial \eta_1^2} + (\beta_2 + \beta_3) \frac{\partial a}{\partial \xi_1} + (\beta_2 - \beta_3) \frac{\partial a}{\partial \eta_1} = 0 \quad (20)$$

$$\gamma_1 = (\beta_2 + \beta_3) / \beta_1, \gamma_2 = (\beta_2 - \beta_3) / \beta_1, \quad (21)$$

Используя коэффициенты (21) получаем вторую каноническую форму гиперболического уравнения:

$$\frac{\partial^2 a}{\partial \xi_1^2} - \frac{\partial^2 a}{\partial \eta_1^2} + \gamma_1 \frac{\partial a}{\partial \xi_1} + \gamma_2 \frac{\partial a}{\partial \eta_1} = 0 \quad (22)$$

$$\frac{\partial^2 a}{\partial \xi_1^2} + \gamma_1 \frac{\partial a}{\partial \xi_1} = \frac{\partial^2 a}{\partial \eta_1^2} - \gamma_2 \frac{\partial a}{\partial \eta_1} \quad (22')$$

Далее для преобразования уравнения (22') к гиперболическому уравнению без частных производных первого порядка осуществляется замена переменных (23) [17]:

$$a(\xi_1, \eta_1) = \exp\left(\frac{1}{2} \gamma_2 \eta_1 - \frac{1}{2} \gamma_1 \xi_1\right) \varphi(\xi_1, \eta_1) \quad (23)$$

После применения преобразования искомой функции (23) уравнение (22) сводится к уравнению Клейна-Гордона [17]:

$$\frac{\partial^2 \varphi}{\partial \xi_1^2} = \frac{\partial^2 \varphi}{\partial \eta_1^2} + \left( \frac{1}{4} \gamma_1^2 - \frac{1}{4} \gamma_2^2 \right) \varphi \quad (24)$$

В данном уравнении выполняется следующее соотношение  $\gamma_2^2 - \gamma_1^2 < 0$  так как из (21) следует:

$$(\beta_2 - \beta_3)^2 - (\beta_2 + \beta_3)^2 = -4\beta_2\beta_3 = -4(\alpha_3\alpha_4\alpha_1 - \alpha_3^2\alpha_2) = -4\frac{F^2}{d^2}\left(\frac{d}{k}\right) = -4\frac{F^2}{dk} < 0$$

Из монографии [17] известно, что при выполнении условий  $\gamma_2^2 - \gamma_1^2 < 0$ , для уравнения типа (24) частное решение может иметь вид:

$$a(\xi_1, \eta_1) = \exp\left(\left(\frac{1}{2}\gamma_2\eta_1 - \frac{1}{2}\gamma_1\xi_1\right) - \frac{\xi_1}{2}\sqrt{\gamma_1^2 - \gamma_2^2}\right)(A\eta_1 + B) \quad (29)$$

При последовательной замене координат получаем:

$$a(\xi, \eta) = \exp\left(\frac{1}{\beta_1}(-\xi\beta_3 - \eta\beta_2) - (\xi + \eta)\frac{k^2}{F^2}\sqrt{\frac{k}{d}}\right)(A\xi - A\eta + B) \quad (29')$$

$$a(x, t) = \exp\left(x\left(\frac{\varepsilon k}{Fd} - \frac{F}{k} + \frac{k^2 - \varepsilon k}{F^2}\sqrt{\frac{k}{d}}\right) + t\left(\frac{k}{F}\sqrt{\frac{k}{d}} - \frac{k}{d}\right)\right)\left(A\left(\frac{\varepsilon + k}{k}x + t\left(\frac{-F}{k}\right)\right) + B\right) \quad (29'')$$

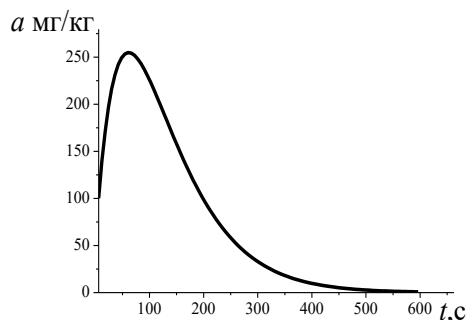
Из (29'') и уравнения (5) следует формула для частного решения распределения концентрации микрокомпонента в фазе раствора (30):

$$c(x, t) = \exp\left(x\left(\frac{\varepsilon k}{Fd} - \frac{F}{k} + \frac{k^2 - \varepsilon k}{F^2}\sqrt{\frac{k}{d}}\right) + t\left(\frac{k}{F}\sqrt{\frac{k}{d}} - \frac{k}{d}\right)\right)\left(Ax\left(\left(\frac{\varepsilon + k}{k^2}\right)\left(\frac{k}{F}\sqrt{\frac{k}{d}} - \frac{k}{d}\right) + \left(\frac{\varepsilon + k}{kd}\right)\right) + At\left(\left(\frac{-F}{k^2}\right)\left(\frac{k}{F}\sqrt{\frac{k}{d}} - \frac{k}{d}\right) - \frac{F}{kd}\right) + B\left(\frac{1}{F}\sqrt{\frac{k}{d}} - \frac{1}{d}\right) - \frac{AF}{k^2} + \frac{B}{d}\right) \quad (30)$$

Константы  $A$  и  $B$  определяются исходя из начальных и граничных условий (4). Для реализации аналитического решения системы уравнений динамической сорбции (29'')-(30) был разработан алгоритм на языке программирования Fortran.

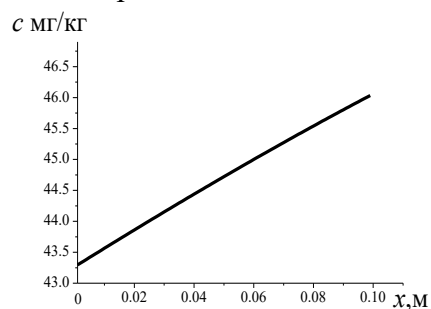
В расчётах предполагалось, что скорость протекания элюента через колонку  $F=100$  мл/мин, пористость сорбента  $\varepsilon=0.95$ ,  $k=0.005$ ,  $d=0.01$ ,  $L=0.1$  м,  $a_1=1$  г/кг,  $a_2=0$ . Из рисунка 1 следует, что процесс вытеснения микрокомпонента из фазы сорбента, для точки находящейся между концами трубки, протекает в два этапа. Первый этап – рост концентрации микрокомпонента, вызванный движением массы микрокомпонента из одного конца трубки в другой. Второй этап–

уменьшение концентрации, вызванное массопереносом микрокомпонента из трубки.

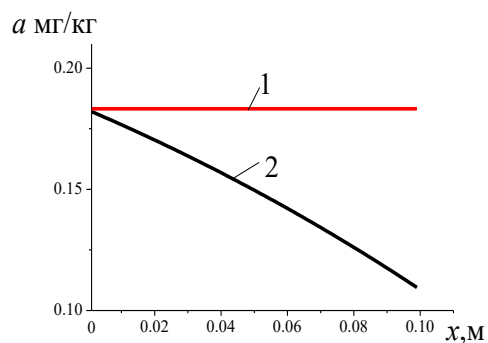


Р и с . 1 . Временная зависимость концентрации микрокомпонента в фазе сорбента в точке  $x=0.01$  м

Для пространственного распределения концентрации микрокомпонента в фазе раствора можно наблюдать рост концентрации в направлении истечения потока элюента –рис.2,а.



а

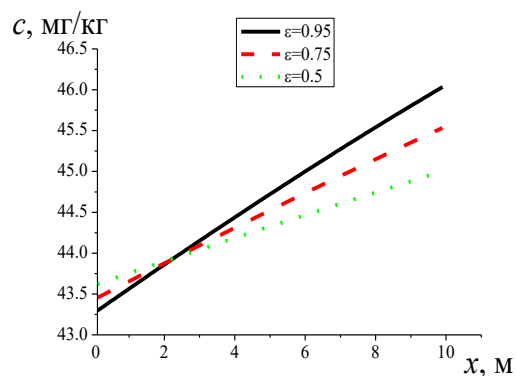


б

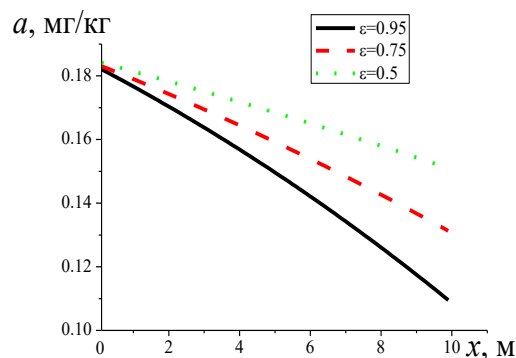
Р и с . 2 . Пространственное распределение концентрации микрокомпонента в жидкой фазе – рис.2,а; концентрации микрокомпонента в фазе сорбента – рис.2,б.



Сопоставление статического (независящего от пространственной координаты) и динамического решений уравнений сорбции для концентрации микрокомпонента в фазе сорбента показывает, что в фазе сорбента происходит уменьшение концентрации микрокомпонента на протяжении длины сорбционной колонки –рис.2,б. При этом значения концентрации микрокомпонента при увеличении пористости материала сорбента уменьшается в фазе сорбента-рис.3,а и возрастает в фазе элюента –рис.3 б.



а



б

Р и с . 3 . Пространственное распределение концентрации микрокомпонента в жидкой фазе- рис.3,а; концентрации микрокомпонента в фазе сорбента-рис.3,б.

**Выводы.** В данной работе система уравнений, в частных производных, описывающая процесс динамической сорбции сведена к уравнению старшего порядка относительно функции концентрации микрокомпонента в фазе сорбента, полученное уравнение методом замены координат было сведено к уравнению Клейна-Гордона,

имеющему точные частные решения известные из литературы. Таким образом, получено аналитическое решение для системы уравнений сорбции с пространственно неравномерным распределением концентрации микрокомпонента в фазе сорбента. Аналитическое решение было реализовано в виде компьютерной программы. С помощью компьютерной реализации математической модели было исследовано влияние пористости сорбента на процесс выщелачивания. В работе проведено сопоставление решений с учетом и без учета пространственной неравномерности концентрации микрокомпонента в фазе сорбента. В результате расчётов было установлено, что в подвижной фазе раствора концентрация микрокомпонента увеличивается в направлении течения потока жидкости. Выявлено, что при возрастании пористости материала сорбента, происходит увеличение концентрации микрокомпонента в фазе раствора и уменьшение концентрации микрокомпонента в фазе сорбента.

### Список литературы

1. Нигматулин Р.И. Динамика многофазных сред. Ч.2, М.: Наука, 1987, 360 с.
2. Веницианов Е.В., Рубенштейн Р.Н. Динамика сорбции из жидких сред. М.: Наука, 1983.
3. Тонконог В.Г., Тукмаков Д.А. // Инженерно-физический журнал, 2013. Т. 86. № 3. С.576–583.
4. Нигматулин Р.И., Губайдуллин Д.А., Тукмаков Д.А. // Доклады академии наук, 2016, том 466, № 4, С. 418–421.
5. Тукмаков А.Л., Кашапов Н.Ф., Тукмаков Д.А., Фазлыяхматов М.Г. // Теплофизика высоких температур, 2018, том 56, выпуск 4, С.498–502.
6. Тукмаков Д. А. // Известия вузов. Прикладная нелинейная динамика, 2019. №3, С. 73–85.
7. Тукмаков А.Л. // Инженерно-физический журнал. 2014. Т. 87. № 1. С. 35–44.
8. Федотов П.С., Статкус М.А., Цизин Г.И. // Журнал аналитической химии, 2007, №8, С.802–806.
9. Allmon S.D., Dorsey J.G. // Journal of Chromatography, 2009, V. 1216. № 26. P. 5106 – 5111.
10. Брындына Л.В., Перов С.Н., Попова И.В. // Сорбционные и хроматографические процессы. 2006, Т.6, Вып. 4, С.648–652.
11. Брындына Л.В., Корнеева О.С., Полянских К.К. // Вестник Тамбовского университета. Сер. Естественные и технические науки. 2015. Т.18. Вып.4. С.1463–1465.
12. Девятова Т.А., Горбунова Ю.С. // Вестник ВГУ. Серия: Химия. Биология. Фармация. – 2012. – №2. – С. 136-143.
13. Ксенофонтов Б.С. // Безопасность жизнедеятельности. 2009. № 1. С. 40 – 42.

14. Гончарова Е.Н., Семенова И.П., Статкус М.А., Цизин Г.И. // Вестник Московского университета. Серия 2: Химия. 2017. Т. 58. № 6. С. 275–280.
15. Кац Э.М., Никашина В.А., Серова И.Б. // Сорбционные и хроматографические процессы. 2014. Т. 14. № 3. С. 406–412.
16. Загородняя А.Н., Абишева З.С., Агапова Л.Я., Шарипова А.С. // Химическая технология. 2018. Т. 19. № 11. С. 482–490.
17. Полянин А.Д. Справочник по линейным уравнениям математической физики. М.: Физматлит, 2001. 576 с.
18. Парфёнов А.А. Аналитическое и численное решение уравнений в частных производных. Издательство Тольяттинского университета, 2014, 50 с.
19. Тихонов А.Н., Самарский А.А. Уравнения математической физики, М.: Издательство МГУ, 1999, 799.

**MATHEMATICAL MODEL OF NON-STATIONARY  
SORPTION IN A TWO-PHASE MEDIUM TAKING INTO ACCOUNT  
THE SPATIAL UNEQUALITY OF THE DISTRIBUTION OF THE  
MICROCOMPONENT CONCENTRATION DISTRIBUTION IN THE  
SORBENT PHASE**

**Tukmakov D.A.**

FIC KazanSC of RAS,  
IME FIC KazSC RAS

The aim of this work is to obtain a mathematical model of the process of non-stationary sorption, taking into account the spatial nonequilibrium concentration of the microcomponent in the sorbent phase. In the work, a system of partial differential equations describing the process of non-stationary dynamic sorption is used. This system of equations is reduced to one higher order equation with respect to the concentration function of the microcomponent in the sorbent phase. The resulting equation was reduced to canonical form, allowing the use of particular solutions known from the literature. A second-order partial differential equation is described that describes the sorption process relative to the concentration of the microcomponent in the sorbent phase. A particular solution is obtained for the system of equations of non-stationary dynamic sorption. The mathematical model is implemented in the form of program code. As a result of mathematical modeling, the dependences of the influence of sorbent porosity on the spatial distribution of the concentration of the microcomponent both in the solid phase of the sorbent and in the liquid phase of the solution are revealed. The static and dynamic solutions of the equations of the mathematical model are compared. It was found that an increase in porosity

leads to an intensification of the leaching of the microcomponent from the sorbent phase.

**Keywords:** *multiphase media, mathematical modeling, dynamic sorption, mass transfer*

Об авторах:

ТУКМАКОВ Дмитрий Алексеевич – кандидат физико-математических наук, научный сотрудник, Институт механики и машиностроения – обособленное структурное подразделение Федерального исследовательского центра «Казанский научный центр Российской академии наук», e-mail: tukmakovDA@imm.knc.ru

Поступила в редакцию 13 октября 2019 г.