

УДК 532.516:536.24

д.т.н., с.н.с. **Наталія Сорокова**,
n.sorokova@ukr.net, ORCID: 0000-0002-3529-7145,

Національний технічний університет України
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»

к.т.н., доц. **Юлія Кольчик**,
kolchuk.iium@knuba.edu.ua, ORCID: 0000-0003-4559-5725,
Київський національний університет будівництва і архітектури

к.т.н., доц. **Євген Новаківський**,
enovakivsky@gmail.com, ORCID: 0000-0002-8682-5710,

Національний технічний університет України
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»

<https://doi.org/10.32347/2409-2606.2026.56.26-41>

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ТЕПЛОМАСОПЕРЕНОСУ ТА ФАЗОВИХ ПЕРЕХОДІВ ПРИ РЕГЕНЕРУВАННІ АДСОРБЦІЙНИХ СИСТЕМ МЕТОДОМ ПРОДУВАННЯ

Анотація. Представлено математичну модель динаміки тепломасопереносу і фазових переходів у процесі регенерування дисперсного шару адсорбенту в умовах його продування нагрітим газом. При побудові математичної моделі враховано перенесення маси в капілярах гранул та в транспортних порах, які створюють гранули. Наведено вирази для визначення інтенсивності фазових переходів на поверхнях капілярів гранул, не повністю заповнених рідиною, та на зовнішніх поверхнях гранул, що контактують з продувочним газом. Система диференціальних рівнянь описує дифузійний перенесення енергії та маси рідкої, парової та повітряної фаз у дисперсному шарі, а також дифузійно-фільтраційне перенесення енергії, маси пари та інертного газу в газовому теплоносії. Розроблено чисельний метод розрахунку, який базується на використанні явної тришарової та явної тришарової перерахункової різницевої схем Миколи Нікітенка. Наведено результати чисельних експериментів, які засвідчують адекватність моделі й ефективність методу розрахунку.

Ключові слова: тепломасоперенос, випаровування, конденсація, адсорбент, продувка, дисперсний шар, пористі гранули, математичне моделювання.

Вступ. Адсорбційні системи широко використовуються в різних галузях промисловості для осушення газів, кондиціонування повітря, розділення газових сумішей або очищення газів від різних небажаних домішок. Як робочі тіла в таких системах використовують тверді поглиначі – адсорбенти –

капілярно-пористі матеріали з розвиненою внутрішньою поверхнею (~ 1000 м²/г і більше), на якій адсорбується пара або інші речовини, що потребують видалення. Найбільш використовуваними серед промислових адсорбентів вважають активоване вугілля, цеоліти та силікагелі [1]. Упродовж заповнення капілярів адсорбатом, ємність адсорбенту знижується, і для відновлення робочих функцій він підлягає регенеруванню. Фактично, в адсорбційних системах процес регенерування визначає тривалість циклу, кількість робочих циклів, необхідне обладнання та ефективність використання всієї системи [2].

Актуальність роботи. Правильний вибір способу та температурного режиму регенерування забезпечує довготривале збереження адсорбційних властивостей сорбенту. Метод математичного моделювання тепломасопереносу та фазових переходів у процесі відновлення твердих сорбентів дозволяє визначити оптимальний температурний режим десорбції для обраного способу регенерування з урахуванням властивостей адсорбату та сорбенту.

Останні дослідження та публікації. Термічне регенерування є ефективним способом осушення сорбентів [2], оскільки при нагріванні адсорбційні сили між твердою і рідкою фазами істотно послаблюються. В замкнених адсорбційних системах, до яких відносяться адсорбційні термотрансформатори [3–5], теплота підводиться від зовнішнього джерела кондуктивним способом. Унаслідок невисокої теплопровідності адсорбентів, для інтенсифікації процесу в системі створюють вакуум, а поверхню теплопідведення оребрюють. Більш простим з огляду на організацію та дієвим способом регенерування твердих сорбентів вважається продування дисперсного шару нагрітими газами [6]. У ньому нагрітий газ передає енергію безпосередньо кожній гранулі сорбенту, що інтенсифікує розривання міцних водневих зв'язків між водою та активними центрами. Регенерування силікагелів потребує порівняно низьких температур (до 150–200 °С), тоді як повне регенерування цеолітів відбувається за температур 300–400 °С, для чого ефективним буде використання вторинної теплоти промислових процесів [7].

Насипний шар з диспергованого капілярно-пористого матеріалу – це сукупність гранул, у загальному випадку різної форми. За наявності вологи він може розглядатися як багатокомпонентна гетерогенна система, що містить каркас вологого тіла, рідину та парогазову суміш. Внутрішня структура гранул відрізняється розмаїттям форм, розмірів і взаємного розташування капілярів. Залежно від форми гранул простір між ними (транспортні пори) також будуть мати складну конфігурацію. Тому при математичному описанні тепломасопереносу в дисперсних системах зазвичай вживають різного роду спрощення [8–10]. Зокрема не враховуються гетерогенність системи, пористість частинок диспергованого капілярно-пористого матеріалу, неоднорідність полів

швидкості та температури під час продування дисперсного тіла, іноді не враховується або враховується досить наближено теплота фазових переходів.

Ціллю даної роботи було розроблення математичної моделі та чисельного методу розрахунку динаміки тепломасопереносу й фазових перетворень під час регенерування насипного шару гранульованого сорбенту продуванням крізь нього гарячого газу з метою забезпечення можливості швидкого визначення оптимальних режимних параметрів перебігу цього процесу.

Основна частина. При побудові математичної моделі динаміки та кінетики процесу десорбції в нерухомому дисперсному шарі покладалося, що рідка фаза зв'язана з пористими гранулами та дифундує в їхніх порах, а пароподібна волога переміщується капілярами гранул і в просторі між ними (транспортних порах). Хімічні перетворення твердих компонентів (кістяка тіла) відсутні. Теплота від продувального газу витрачається на підігрівання гранул і випаровування рідини, яка покриває їх внутрішні та зовнішні поверхні. Під час випаровування рідини з поверхонь гранул пара безпосередньо потрапляє в газовий теплоносій, який відводить її до навколишнього середовища. Пара, що утворюється при випаровуванні рідини з капілярів гранул, переноситься шляхом дифузії до їхніх поверхонь і далі, за рахунок масовіддачі, потрапляє у продувну газову суміш.

Динаміка тепломасопереносу в гранулах адсорбента, що супроводжується фазовими перетвореннями, описується системою диференціальних рівнянь, яка містить чотири рівняння: переносу енергії, переносу маси рідини, пари та інертного газу. Їх будують на основі диференціального рівняння переносу субстанції W (енергії, маси, імпульса) для відкритої системи [11]:

$$\frac{\partial W}{\partial t} = -\nabla J_w + I_w, \quad (1)$$

де J_w – густина потоку субстанції W ; I_w – потужність внутрішніх джерел.

Молекулярний потік енергії в багатокомпонентній відкритій системі обумовлений теплопровідністю та масопереносом компонентів ψ зв'язаної з пористим каркасом речовини (рідини $\psi=r$, пари $\psi=p$ та повітря $\psi=пов$):

$$J_q^0 = -\lambda \cdot \left(\nabla T + \sum_{\psi=1}^3 \delta_{U_\psi} \cdot \nabla U_\psi \right), \quad (2)$$

а дифузійний потік маси компонента ψ пропорційний його об'ємній

концентрації U_ψ та температури в даній точці тіла T :

$$J_\psi^0 = -D_\psi (\nabla U_\psi + \delta_{T\psi} \nabla T), \quad (3)$$

де $\delta_{T\psi}$ – коефіцієнт термодифузії компонента ψ , а $\delta_{U\psi} = \delta_{U\psi}$ відповідно до другої теоремою Онзагера.

Ефективні коефіцієнти дифузії визначаються в такий спосіб. Для рідкої фази справедлива формула Миколи Нікітенка [11, 12]

$$D_p = \gamma_{D_p} \left(e^{\frac{A_D}{RT}} - 1 \right)^{-1}, \quad (4)$$

де $\gamma_{D_p} = \text{const}$, A_{D_p} – енергія активування дифузії, R – універсальна газова стала. Для пари та повітря використано вираз

$$D_n = D_{нов} = \frac{(\gamma_{Dn}^0 \cdot (1 - \varepsilon_{uu}) + \gamma_{Dn}^* \cdot \varepsilon_{uu}) \cdot T^{3/2}}{P_2}, \quad (5)$$

де ε_{uu} – порозність шару, γ_{Dn}^0 і γ_{Dn}^* – коефіцієнти, що враховують перенесення відповідно в капілярах гранул адсорбенту та в транспортних порах, P_2 – тиск газової фази.

Внутрішніми джерелами субстанції в системі, що розглядається, є теплові та переносні ефекти фазових переходів між рідиною та парою. При осушенні або зволоженні пористих систем фазові переходи відбуваються на зовнішній поверхні та в капілярах об'єму системи. У роботі [11] отримано вираз для інтенсивності фазового переходу I_c з пласкої поверхні конденсованого шару, який для зовнішньої поверхні пористого тіла записується в такий спосіб:

$$I_c = \gamma_c \cdot \left[\varphi_T \cdot \left(e^{\frac{A}{R \cdot T|_{v=0}}} - 1 \right)^{-1} - \varphi_c \cdot \left(e^{\frac{A}{R \cdot T_c}} - 1 \right)^{-1} \right], \quad \gamma_c = \frac{\varepsilon \rho_p \delta^*}{4}, \quad (6)$$

де γ_c – коефіцієнт поверхневого випаровування; ε – коефіцієнт випромінювання; δ^* – товщина тонкого примежового шару конденсату, у якому відбувається випаровування; ρ_p – густина рідини; φ_m та φ_c – адсорбційна вологість тіла (відносна вологість парогазової суміші, якій відповідає рівноважний вологовміст пористого тіла відповідно до ізотерми сорбції) та відносна

вологість зовнішньої парогазової суміші, $\varphi_c = P_c/P_n$; A – енергія активування; P_c і T_c – тиск і температура зовнішнього середовища. Перший член у квадратних дужках характеризує інтенсивність випаровування рідини (адсорбату), а другий – інтенсивність конденсації пари (сорбуючої речовини).

Інтенсивність фазового переходу I_V в одиниці об'єму пористого тіла знаходиться як добуток інтенсивності фазового переходу I_c між рідиною та паром в порах тіла й сумарної площі S поверхні контакту рідкої та газової фаз: $I_V = I_c \cdot S$. Випаровування на внутрішніх поверхнях дисперсного шару відбувається в капілярах гранул, що не повністю заповнені рідиною, та з зовнішніх поверхонь гранул, що контактують з продувним газом. Для визначення впливу порозності дисперсного шару $\varepsilon_{ш}$ на інтенсивність фазового переходу та шукані функції розглянуто контрольний об'єм $\Delta V = \Delta x \cdot \Delta y \cdot \Delta z$, що містить одну гранулу. Якщо кількість гранул в одиниці об'єму шару n_{gp} , то середня величина контрольного об'єму становить $\Delta V = 1/n_{gp}$, а об'єм гранули $V_{gp} = \Delta V \cdot (1 - \varepsilon_{ш})$. Порозність $\varepsilon_{ш}$ насипного шару представляє об'єм транспортних пор в одиниці об'єму шару. Її значення визначають через густину гранул ρ_{gp} та їхню насипну густину $\rho_{нас}$ як $\varepsilon_{ш} = 1 - \rho_{нас} / \rho_{gp}$. За середньої площі зовнішньої поверхні гранули S_{gp} , яку нескладно визначити через ефективний радіус гранули $S_{gp} = 4 \cdot \pi \cdot r_{ef}^2$, середня напівширина транспортної пори становить $r_{mp} = \varepsilon_{ш} \cdot \Delta V / S_{gp}$. З урахуванням товщини δ шару рідини на поверхнях гранули, площа контакту рідкої фази і продувного газу буде $S'_{gp} = 4 \cdot \pi \cdot (r_{ef} + \delta)^2$. Тоді інтенсивність фазового переходу на поверхні гранул одиничного об'єму визначається за формулою

$$I'_V = \zeta \cdot S'_{gp} \cdot n_{gp} \cdot I_c, \quad (7)$$

де ζ – коефіцієнт, що враховує зменшення поверхні випаровування внаслідок дотику гранул, I_c визначається за формулою (6) де параметри з індексом «с» стосуються продувного газу.

Для визначення площі контакту рідкої та газоподібної фаз у капілярах капілярно-пористого тіла в [3] отримано формулу

$$S = \frac{2 \cdot \sqrt{1 - \varphi_T}}{\rho_p \cdot \delta^*} \frac{\partial U_p}{\partial \varphi_T}, \quad 0 \leq S \leq S_n, \quad (8)$$

де ρ_p – густина рідини; S_n – питома площа поверхні сухого капілярно-пористого тіла; $\partial U_p / \partial \varphi_m$ знаходиться з рівняння ізотерми десорбції для даного матеріалу.

Коли відома залежність рівноважної об'ємної концентрації рідини $U_{p,gp}$ в пористій гранулі від φ_m , з (8) впливає вираз для площі контакту рідкої і газової фаз в капілярах гранули S''_{gp} :

$$S''_{zp} = \frac{2 \cdot \sqrt{1 - \varphi_T}}{\rho_p \cdot \delta^*} \frac{\partial U_{p,zp}}{\partial \varphi_T} \cdot V_{zp} \quad (9)$$

За умови локальної термодинамічної рівноваги фаз, що контактують, коли температури в точці контакту фаз є однаковими, вираз (6) для інтенсивності фазових переходів у капілярах гранул можна записати у вигляді

$$I_{Vc} = \gamma_c \left[e^{\frac{A}{RT}} - 1 \right]^{-1} (\varphi_T - \varphi) \quad (10)$$

Тоді інтенсивність випаровування в капілярах гранул в одиниці об'єму дисперсного шару визначається виразом

$$I''_V = S''_{zp} \cdot n_{zp} \cdot I_{Vc} \quad (11)$$

У праці [13] Микола Нікітенко отримав вирази для рівноважної товщини δ шару конденсату на твердих стінках, що перебувають у парогазовому середовищі з відносною вологістю φ , $\delta = \delta^* \cdot (1 - (1 - \varphi)^{1/2})$, та для тиску насичення $P_n = N_p \cdot T^{1/2} \cdot (e^{A/RT} - 1)^{-1}$. Параметри в цих виразах $N_p = 0,4361 \cdot 10^{10}$ кг/(м · с² · К^{0.5}) та $A = 0,4206 \cdot 10^{15}$ Дж знайдено шляхом розв'язання системи двох рівнянь для P_n , у які підставлено значення T_1, P_{n1} та T_2, P_{n2} для двох точок, узятих із таблиці властивостей насиченої пари та води в інтервалі температури $0 < T < 100$ °С.

Для адсорбентів, регенерування яких відбувається в умовах продування шару нагрітим газом, унаслідок малості відношення товщини шару δ до визначального розміру гранули, прийнято $S'''_{zp} \approx S_{zp}$, а $U_{p,zp} \approx U_p$.

Об'ємна частка продувального газу Ψ_{np} дорівнює різниці об'ємних часток транспортних пор ε_{ui} та рідини, що вкриває зовнішню поверхню гранул. Для одиничного об'єму $\Psi_{np} = \varepsilon_{ui} - S_{zp} \cdot \delta$. Парціальні густини пари та повітря в продувальному газі дорівнюють $\bar{p}_n = \bar{U}_n / \Psi_{np}$ та $\bar{p}_e = \bar{U}_e / \Psi_{np}$, а їхні парціальні тиски P_n та P_e знаходяться за рівнянням стану для газу.

Густини потоків теплоти q , маси пари $j_{zp,n}$ та маси повітря $j_{zp,пов}$, що підводяться до зовнішніх поверхонь гранул в одиниці об'єму від продувального газу, визначають за рівняннями тело- та масовіддачі [14]

$$q = \alpha_T \cdot (\bar{T} - T) \Big|_{v=0} \quad (12)$$

$$j_{zp,n} = \alpha_n \cdot (\bar{U}_n - U_n) \Big|_{v=0}, \quad (13)$$

$$j_{zp,\varepsilon} = \alpha_\varepsilon \cdot (\bar{U}_\varepsilon - U_\varepsilon) \Big|_{v=0}. \quad (14)$$

де $\alpha_T, \alpha_n, \alpha_\varepsilon$ – коефіцієнти тепловіддачі та масовіддачі для пари і повітря.

Система рівнянь тепломасопереносу та фазових переходів для дисперсного пористого тіла згідно з рівнянням (1) має такий вигляд

$$c_{ef} \cdot \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla (\lambda_{ef} \cdot \nabla T) - L \cdot (I'_{\nu} + I''_{\nu}) + q \cdot S_{np} \cdot n_{np}, \quad (15)$$

$$\frac{\partial U_p}{\partial t} = \nabla (D_p \cdot (\nabla U_p + \delta_p \cdot \nabla T)) - (I'_{\nu} + I''_{\nu}), \quad (16)$$

$$\frac{\partial U_n}{\partial t} = \nabla (D_n \cdot (\nabla U_n + \delta_n \cdot \nabla T)) + (I'_{\nu} + I''_{\nu}) + j_{zp,n} \cdot S'_{zp} \cdot n_{zp}, \quad (17)$$

$$\frac{\partial U_{nos}}{\partial t} = \nabla (D_{nos} \cdot (\nabla U_{nos} + \delta_{nos} \cdot \nabla T)) + j_{zp,nos} \cdot S_{zp} \cdot n_{zp}, \quad (18)$$

$$\bar{c}_{ef} \cdot \left(\frac{\partial \bar{T}}{\partial t} + w_z \cdot \nabla \bar{T} \right) = \nabla (\bar{\lambda}_{ef} \cdot \nabla \bar{T}) - q \cdot S_{zp} \cdot n_{zp}, \quad (19)$$

$$\frac{\partial \bar{U}_n}{\partial t} + \nabla (w_z \cdot \bar{U}_n) = \nabla (\bar{D}_n \cdot (\nabla \bar{U}_n + \delta_n \cdot \nabla \bar{T})) + (I'_{\nu} + I''_{\nu}) - j_{zp,n} \cdot S_{zp} \cdot n_{zp}, \quad (20)$$

$$\frac{\partial \bar{U}_{nos}}{\partial t} + \nabla (w_z \cdot \bar{U}_{nos}) = \nabla (\bar{D}_{nos} \cdot (\nabla \bar{U}_{nos} + \delta_{nos} \cdot \nabla \bar{T})) - j_{zp,nos} \cdot S_{zp} \cdot n_{zp}, \quad (21)$$

де $U_p, U_n, U_{nos}, \rho_{me} \cdot \Psi_{me}$ – об'ємні концентрації рідини, пари, повітря та твердої фази в шарі, \bar{U}_n та \bar{U}_{nos} – об'ємні концентрації пари та повітря в продувному газі, $c_{ef} = c_{me} \cdot \rho_{me} \cdot \Psi_{me} + c_p \cdot U_p + c_n \cdot U_n + c_{nos} \cdot U_{nos}$ – ефективна теплоємність; $\lambda_{ef} = \lambda_{me} \cdot \Psi_{me} + (\lambda_p \cdot U_p / \rho_p) + (\lambda_n \cdot U_n / \rho_n) + (\lambda_{nos} \cdot U_{nos} / \rho_{nos})$ – ефективна теплопровідність; $\Psi_{me} = (1 - \Pi) \cdot (1 - \varepsilon_{ul})$ – об'ємна частка твердої фази у дисперсному шарі,

Π – пористість гранул; L – питома теплота випаровування; w_2 – швидкість продувного газу.

Для визначення параметрів потоку продувного газу, що подається з початковою швидкістю w_{z0} , розглядалась одновимірна встановлена течія вздовж осі x в каналі змінного перетину $S_c(x)$, через стінки якого відводиться пара. Припускалося, що площа перерізу каналу та параметри потоку вздовж його осі змінюються достатньо плавно. Під час руху газу крізь дисперсний шар його швидкість буде збільшуватися [9]: $w = w_z/\varepsilon_{uu}$. Вектор швидкості пари w_n , що потрапляє в потік унаслідок фазових переходів, перпендикулярний до осі x . Складна структура дисперсного шару призводить до подовження каналів, якими рухається газ, і, відповідно, до зростання гідравлічного опору шару. Для характеристики цього подовження вводиться коефіцієнт звивистості $K_{зв} = \ell/\ell_0$ каналів, де ℓ – довжина транспортного каналу, ℓ_0 – товщина дисперсного шару.

Рівняння збереження кількості руху для елемента каналу, об'єм якого обмежений поверхнями x та $x + dx$, у проєкціях на вісь Ox має вигляд:

$$m \cdot \frac{dw}{dt} = f_P + f_z + f_\tau - w \cdot \frac{dm}{dt}, \quad (22)$$

де $m = \rho \cdot S_c \cdot dx$ – маса газу в елементі транспортного каналу; $f_P = (S_c \cdot P)_x - (S_c \cdot P)_{x+dx} = -d(S_c \cdot P)$ – рівнодійна сил тиску, що діють на елемент; $f_z = m \cdot g \cdot \cos(z, x) = S_c \cdot \rho \cdot g \cdot \cos(z, x) = S_c \cdot \rho \cdot g \cdot dz$ – гравітаційна сила, $f_\tau = \tau_0 \cdot \Pi_c \cdot K_{зв} \cdot dx = c_f \cdot \rho \cdot w^2 \cdot \Pi_c \cdot K_{зв} \cdot dx / 2$ – сила тертя на стінці каналу; $\Pi_c = 2 \cdot S_c \cdot S_{zp} / \Delta V$ – периметр перерізу каналу.

Вираз для Π_c отримано за умови, що гідравлічний радіус каналу $r_z = 2 \cdot S_c / \Pi_c$ дорівнює радіусу транспортної пори $r_{mp} = \varepsilon_{uu} \Delta V / S_{zp}$.

Зміна маси газу в елементі каналу зумовлена випаровуванням рідини на внутрішніх і зовнішніх поверхнях гранул адсорбенту, а також процесами масовіддачі пари й повітря, інтенсивність яких визначають за (13) і (14). Густина потоку пари I_{mp} на поверхні транспортної пори дорівнює $I_{mp} = I_V / S_{mp}$, $I_V = I'_V + I''_V$.

Інтенсивність підведення або відведення пари до елемента транспортного каналу крізь його поверхню визначається за виразом

$$\frac{w \cdot dm}{dt} = w \cdot (I_{mp} + j_{zp, n} + j_{zp, e}) \cdot \Pi_c \cdot K_{зв} \cdot dx = \frac{w \cdot (I_{mp} + j_{zp, n} + j_{zp, e}) \cdot K_{зв} \cdot 2 \cdot S_c \cdot S_{zp}}{\varepsilon_{uu} \cdot \Delta V} \cdot dx. \quad (23)$$

Після підставлення до (22) представлені вирази для доданків правої

частини отримуємо диференціальне рівняння руху рідини в транспортному каналі змінного перерізу з проникними стінками

$$w \cdot \frac{dw}{dx} + \frac{1}{\rho \cdot S_c} \cdot \frac{d(P \cdot S_c)}{dx} + g \cdot \frac{dz}{dx} + w \cdot (I_{mp} + j_{zp,n} + j_{zp,s}) \cdot K_{z\phi} \cdot \frac{2 \cdot S_{zp}}{\rho \cdot \varepsilon_{ui} \cdot \Delta V} - \frac{c_f \cdot w^2 \cdot K_{z\phi} \cdot S_{zp}}{\varepsilon_{ui} \cdot \Delta V} = 0, \quad (24)$$

яке за умов $S_c = \text{const}$, $K_{z\phi} = 1$ та $I_{mp} = j_{zp,n} = j_{zp,s} = 0$ в інтервалі $0 < x < \ell_0$ переходить у рівняння Бернуллі для усталеного руху в трубі постійного перерізу

$$\frac{w_2^2 - w_1^2}{2} + \frac{P_2 - P_1}{\rho} + (z_2 - z_1)g = c_f w^2 \frac{l S_{zp}}{\varepsilon_{ui} \cdot \Delta V}. \quad (25)$$

Коефіцієнт тертя c_f для гладких каналів визначається залежно від числа Рейнольдса Re : для ламінарного режиму (при $Re \leq 2320$) $c_f = 64/Re$, для турбулентного режиму (при $3 \cdot 10^3 < Re < 10^5$) $c_f = 11,64/Re^{0,25}$. У число Рейнольдса підставляється швидкість w_r течії газу в каналі та еквівалентний діаметр гранули $d_{екв} = (6V_{zp}/\pi)^{1/3}$.

Граничні умови тепло- та масообміну третього роду для системи рівнянь (15) – (21) за заданих параметрів продувного газу формулюються таким чином:

$$\lambda_{ef} \cdot \left. \frac{\partial T}{\partial v} \right|_{v=0} = \alpha \cdot (T_c - T|_{v=0}) - L \cdot I_c, \quad (25)$$

$$D_p \cdot \left(\left. \frac{\partial U_p}{\partial v} \right|_{v=0} + \delta_p \cdot \left. \frac{\partial T}{\partial v} \right|_{v=0} \right) = I_c, \quad (27)$$

$$-D_n \cdot \left(\left. \frac{\partial U_n}{\partial v} \right|_{v=0} + \delta_n \cdot \left. \frac{\partial T}{\partial v} \right|_{v=0} \right) = \gamma_{nc} \cdot (U_n|_{v=0} - \rho_{nc} \Psi_z) + \gamma_{nc} \cdot \delta_{nc} \cdot \Psi_z \cdot (T|_{v=0} - T_c), \quad (28)$$

$$P|_{v=0} = P_c, \quad (29)$$

Для розв'язання системи рівнянь (15) – (21) за заданих умов однозначності (26) – (29) розроблено сітковий метод. Він базується на явній тришаровій та

явній тришаровій перерахунковій різницевоїх схемах Миколи Нікітенка [15], які застосовують відповідно для рівнянь дифузійного перенесення (15) – (18) та дифузійно-конвективного перенесення (19) – (21). У декартових координатах x_1, x_2, x_3 на рівномірній різницевоїх сітці $x_k = m_k \cdot h_k$ ($m_k = 0, 1, 2, \dots; h_k = \text{const}; k = 1, 2, 3$), $t_n = n \cdot \ell$ ($n = 0, 1, \dots; \ell > 0$) різницева апроксимація рівняння дифузійного переносу виду $(\partial W / \partial t) = \nabla(D \cdot (\nabla W)) - I_V$ має вигляд:

$$(1 + \theta_w) \frac{W^{n+1} - W^n}{\ell} - \theta_w \frac{W^n - W^{n-1}}{\ell} = \sum_{k=1}^3 \delta_k \left[D_w (\delta_k W^n) \right] - I_V. \quad (30)$$

У кінцево-різницевоїх формі рівняння дифузійно-конвективного переносу $(\partial W / \partial t) + \nabla(w \cdot W) = \nabla(D \cdot (\nabla W)) - I_V$ набуває вигляду

$$\frac{\tilde{W}^n - W^n}{\ell} = - \sum_{k=1}^3 \delta_k \cdot (w_k \cdot W^n), \quad (31)$$

$$(1 + \theta_w) \frac{W^{n+1} - W^n}{\ell} - \theta_w \frac{W^n - W^{n-1}}{\ell} = - \sum_{k=1}^3 \delta_k \cdot (w_k \cdot \tilde{W}^n) + \sum_{k=1}^3 \delta_k \cdot (D_w \cdot (\delta_k \cdot \tilde{W})) - I_V, \quad (32)$$

де θ_w – ваговий параметр різницевоїх рівнянь, що усуває обмеження на крок за часом, $\theta_w \geq 0$; апроксимації просторових похідних за координатою x_1 розписуються в такий спосіб

$$\delta_1 \cdot (w_1 \cdot W) = \frac{(w_1 \cdot W)_{m_1+1, m_2, m_3}^n - (w_1 \cdot W)_{m_1-1, m_2, m_3}^n}{2 \cdot h_1}, \quad (33)$$

$$\delta_1 \cdot (D_w \cdot (\delta_1 \cdot W)) = \frac{1}{2 \cdot h_1^2} \left((D_{W m_1+1, m_2, m_3} + D_{W m_1, m_2, m_3}) \times \right. \\ \left. \times (W_{m_1+1, m_2, m_3}^n - W_{m_1, m_2, m_3}^n) - (D_{W m_1, m_2, m_3} - D_{W m_1-1, m_2, m_3}) \cdot (W_{m_1, m_2, m_3}^n - W_{m_1-1, m_2, m_3}^n) \right). \quad (34)$$

Похибка апроксимації рівнянь (15) – (21) різницевоїми рівняннями виду (30-32) має порядок $\ell + h_1^2 + h_2^2 + h_3^2$. Необхідні умови стійкості

$$\ell \leq \min \left(\left(\sum_{k=1}^3 \frac{w_k}{h_k} \right)^{-1}; (1 + 2 \cdot \theta_w) \cdot \left(2 \cdot D_w \cdot \sum_{k=1}^3 \frac{1}{h_k^2} \right)^{-1} \right). \quad (35)$$

На основі представленої математичної моделі та чисельного методу розрахунку проведено дослідження (рис. 1-3) динаміки та кінетики десорбції води з шару гранульованого силікагелю за таких вихідних даних: $T_0=293$ К; $U_{p0}=42$ кг/м³; $\rho_{нас}=800$ кг/м³; $\rho_{zp}=1250$ кг/м³; $T_c=293$ К; $P_c=0,981 \cdot 10^5$ Па; $w_{z0}=0,08$ м/с; $\varphi_c=0,1$; $S_n=6 \cdot 10^5$ м²/кг; $A=0,4205 \cdot 10^8$ Дж/кмоль; $\rho_{mv}=2200$ кг/м³; $c_{mv}=0,92$ кДж/(кг·К); $\lambda_{mv}=0,335$ Вт/(м·К); $\Pi=0,43$.

Висновки. Результати математичного моделювання динаміки і кінетики регенерації шару зволоженого дисперсного силікагелю свідчать про можливість застосування викладеної математичної моделі та чисельного методу розрахунку для задач розроблення сорбційних апаратів. Температура гранул силікагелю впродовж осушування істотно відрізняється від температури продувного газу. Це пов'язано зі значною розбіжністю коефіцієнтів теплопровідності зволожених гранул силікагелю та газу. Підвищення температури продувного газу на виході з дисперсного шару пояснюється зменшенням інтенсивності випаровування рідкої фази при наближенні об'ємної концентрації рідини в гранулах силікагелю до рівноважного значення.

Перспективи подальших досліджень. Запропонована математична модель може бути використана для дослідження тепломасопереносу і фазових переходів при зволоженні дисперсного шару адсорбенту в разі продування кризьного газу, що потребує осушування.

References

1. "Adsorbent." *Interface Science and Technology*, vol. 33, Elsevier, 2021, pp. 71–210. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-818805-7.00009-6>.
2. Van Kampen, Jasper, Jurriaan Boon, Frans Van Berkel, Jaap Vente, Martin Van Sint Annaland. "Steam Separation Enhanced Reactions: Review and Outlook." *Chemical Engineering Journal*, vol. 374, Oct. 2019, pp. 1286–303. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2019.06.031>.
3. Nikitenko, M., Yu Snizhkin, N. Sorokova. "Matematychnе Modeliuvannia Teplomasoperenesennia v Protsesakh Sorbtsii Ta Desorbtsii v Hranulovanykh Sorbentakh v Adsorberi Termotransformatora." *Naukovi Pratsi ONAKhT*.
4. Sorokova, Nataliia. *Mathematical modeling of the dynamics of heat and mass transfer in the processes of sorption and drying in the apparatus of periodic and continuous action*. 2017, <https://nrat.ukrintei.ua/searchdoc/0517U000822>. Institute of Technical Thermophysics, Dr Hab.

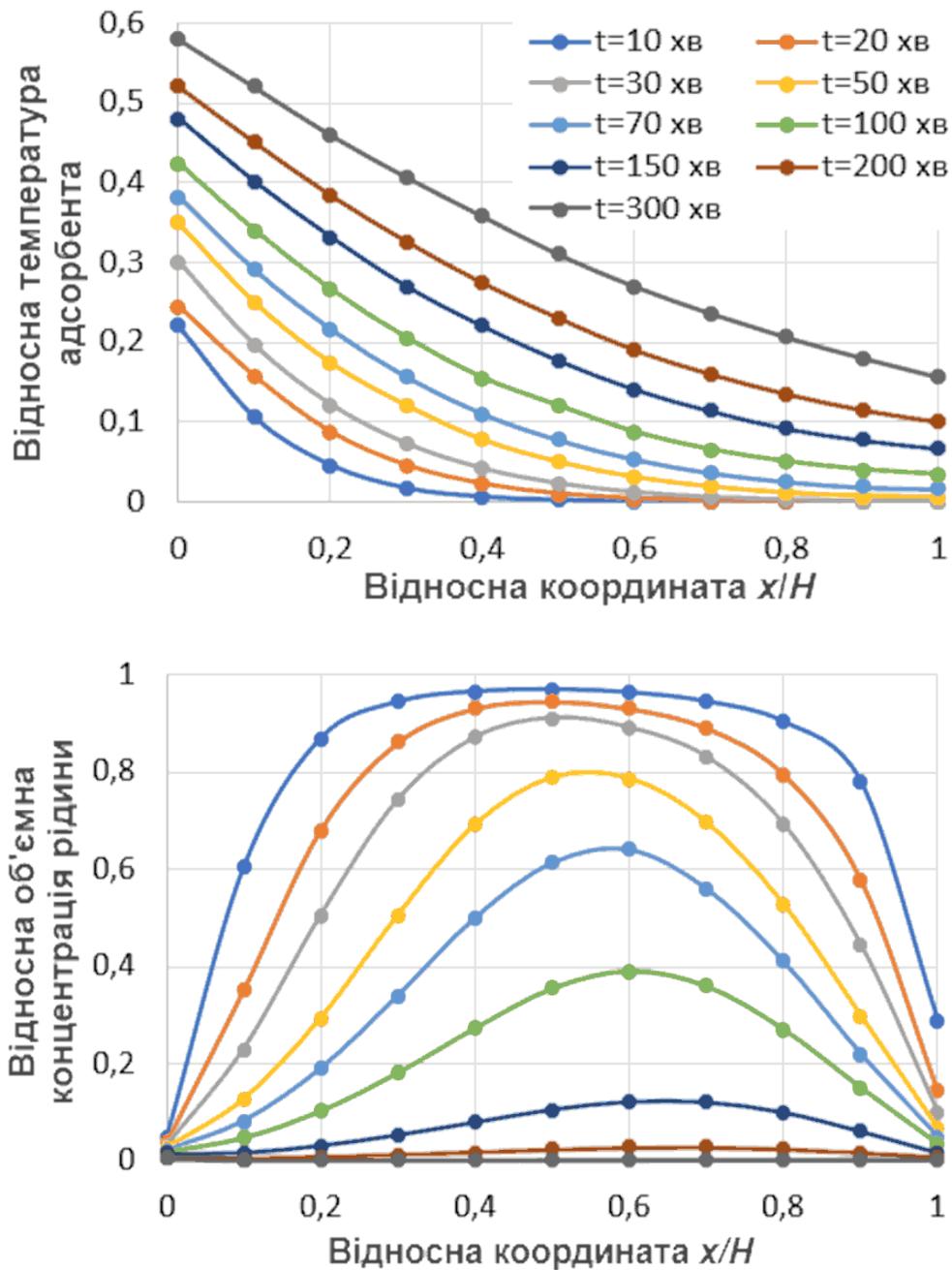


Рис. 1. Зміна за товщиною шару відносних значень температури $\tilde{T}(x) = (T(x) - T_c|_{x=H}) / (T_c - T_c|_{x=H})$ та об'ємної концентрації рідкої фази $\tilde{U}_d(x) = U_d(x) / U_{d0}$ в різні моменти часу регенерації дисперсного силікагелю

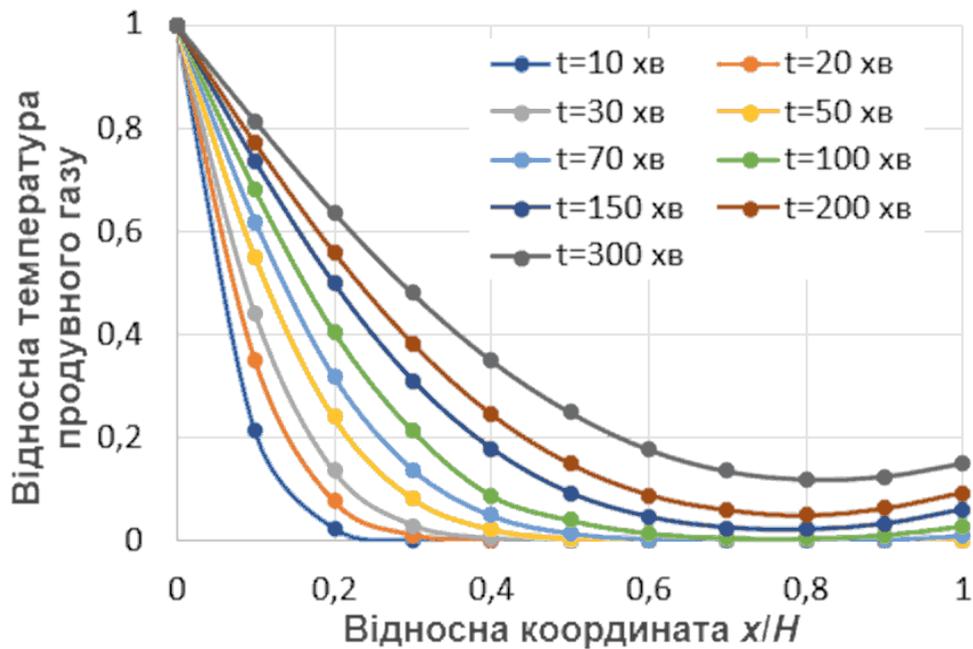


Рис. 2. Зміна відносної температури $\tilde{T}_{np}(x) = (\bar{T}(x) - T'_c) / (T_c - T'_c)$ продувального газу по товщині дисперсного шару силікагелю в різні моменти часу

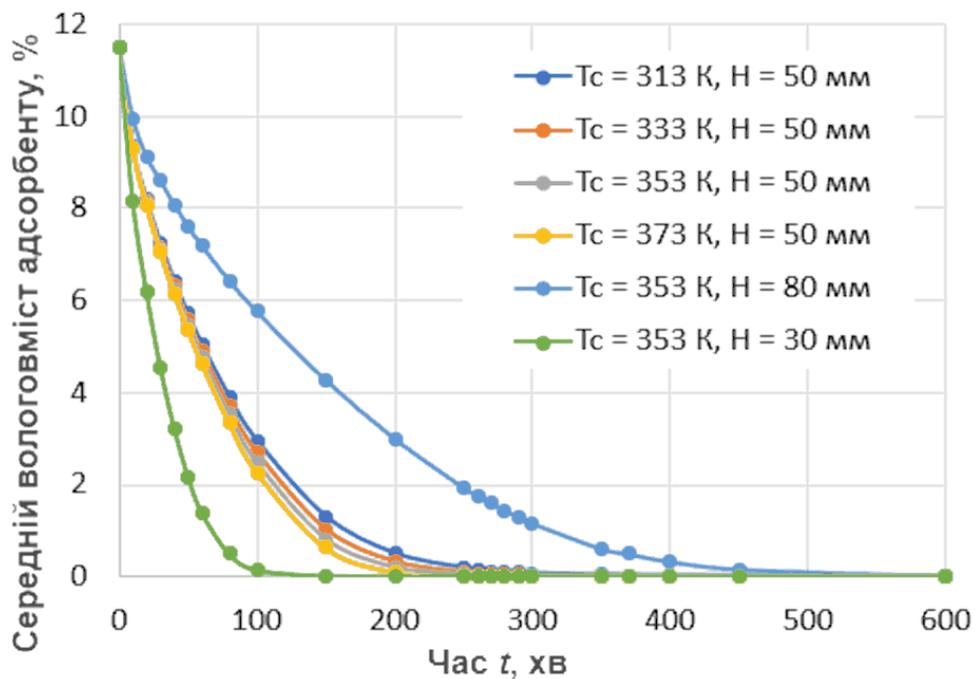


Рис. 3. Графік зміни середнього вологовмісту $W = m_p(x) / m_r$ гранульованого силікагелю за різних температур продувального газу та товщин дисперсного шару

5. Chalaev, Dzhamalutdin. *Development the theory and practice of sorption and vapor compression technologies for heat transformation*. 2021, <https://nrat.ukrintei.ua/en/searchdoc/0521U101371/>. Institute of Engineering Thermophysics, Dr Hab.
6. Meloni, Eugenio, Marco Martino, Pluton Pullumbi, Federico Brandani, Vincenzo Palma. “Intensification of TSA Processes Using a Microwave-Assisted Regeneration Step.” *Chemical Engineering and Processing - Process Intensification*, vol. 160, Mar. 2021, p. 108291. <https://doi.org/10.1016/j.cep.2020.108291>.
7. Kolobrodov, M., V. Kulko, L. Karnatsevych, E. Vinokurov, M. Khazhmuradov, V. Zhukovin, N. Timokhina. “Adsorbtsiia ta desorbtsiia pariv vody riznymi tseolitamy.” *Pytannia atomnoi nauky ta tekhniky, Vakuum, chysti materialy, nadprovidnyky*, no. 1, 2002, https://vant.kipt.kharkov.ua/ARTICLE/VANT_2002_1/article_2002_1_50.pdf.
8. Mushtaev, V. I., A. A. Pakhomov, N. V. Danilenko. “Energy and Resource Savings in the Drying of Disperse Materials.” *Chemical and Petroleum Engineering*, vol. 38, nos. 7–8, July 2002, pp. 382–89. <https://doi.org/10.1023/A:1021071115749>.
9. Atamaniuk, V., Ya Humnytskyi. *Naukovi osnovy filtratsiinoho sushinnia dyspersnykh materialiv*. Vydavnytstvo Lvivskoi politekhniky, 2013. 145×200 mm.
10. Centre of Mathematical Modelling of Ukrainian National Academy of Sciences, B. Hayvas, V. Dmytruk, Lviv Polytechnic National University, Centre of Mathematical Modeling of Pidstryhach IAPMM, NAS of Ukraine, A. Torsky, Centre of Mathematical Modeling of Pidstryhach IAPMM, NAS of Ukraine, Lviv Polytechnic National University, A. Dmytruk, Ivan Franko National University of Lviv. “On Methods of Mathematical Modeling of Drying Dispersed Materials.” *Mathematical Modeling and Computing*, vol. 4, no. 2, Dec. 2017, pp. 139–47. <https://doi.org/10.23939/mmc2017.02.139>.
11. Nikitenko, N., Yu Sniezkin, N. Sorokovaia, Yu Kolchik. *Molekuliarno-radiatsiina teoriia i metody rozrakhunku teplo- i massoobminu*. Naukova Dumka, 2014.
12. Nikitenko, N. I. “Problems of the Radiation Theory of Heat and Mass Transfer in Solid and Liquid Media.” *Journal of Engineering Physics and Thermophysics*, vol. 73, no. 4, July 2000, pp. 840–48. <https://doi.org/10.1007/s10891-000-0102-9>.
13. Nikitenko, N. I. “Investigation of the Dynamics of Evaporation of Condensed Bodies on the Basis of the Law of Spectral-Radiation Intensity of Particles.” *Journal of Engineering Physics and Thermophysics*, vol. 75, no. 3, May 2002,

pp. 684–92. <https://doi.org/10.1023/A:1016813711896>.

14. Luikov, A. V. “Heat and Mass Transfer in Capillary-Porous Bodies.” *Advances in Heat Transfer*, vol. 1, Elsevier, 1964, pp. 123–84. [https://doi.org/10.1016/S0065-2717\(08\)70098-4](https://doi.org/10.1016/S0065-2717(08)70098-4).
15. Nikitenko, M. *Spriazheni ta zvorotni zadachi teplomasoperenosu*. Naukova Dumka, 1988.

UDC 532.516:536.24

Dr hab., Prof. **Natalia Sorokova**
n.sorokova@ukr.net, ORCID: 0000-0002-3529-7145,
National Technical University of Ukraine
“Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute”
PhD, Assoc. Prof. **Yuliia Kolchyk**,
kolchyk.iium@knuba.edu.ua., ORCID: 0000-0003-4559-5725,
Kyiv National University of Construction and Architecture
PhD, Assoc. Prof. **Yevhen Novakivskyi**,
enovakivsky@gmail.com, ORCID: 0000-0002-8682-5710,
National Technical University of Ukraine
“Igor Sikorsky Kyiv Polytechnic Institute”

<https://doi.org/10.32347/2409-2606.2026.56.26-41>

MATHEMATICAL MODELLING OF HEAT AND MASS TRANSFER AND PHASE TRANSITION DURING REGENERATION OF ADSORPTION SYSTEMS BY PURGE METHOD

Abstract: *A mathematical model of the dynamics of heat and mass transfer and phase transitions in the process of regeneration of a dispersed layer of adsorbent under conditions of its purging with heated gas is presented. A stationary layer of adsorbent granules was considered, which are capillary-porous bodies, the pores of which are filled with liquid, steam, and air. When constructing the mathematical model, mass transfer in the capillaries of the granules and in the transport pores created by the granules was taken into account. The model includes differential equations for energy transfer in the dispersed layer and mass transfer of the components of the bound substance, energy in the purge gas, and mass transfer of the inert gas and vapor that enters the purge gas during evaporation of the liquid from the granules. To determine the change in the velocity of the purge gas, a differential equation of fluid motion in a transport channel of variable cross-section with permeable walls was constructed. Expressions are given for determining the intensity of phase transitions on the surfaces of capillaries in the volume of adsorbent granules*

that are not completely filled with liquid, and on the outer surfaces of granules that are in contact with the purge gas. The system of differential equations describes the diffusion transfer of energy, mass of the liquid phase and mass of steam and air in a dispersed layer of capillary-porous granules, as well as the diffusion-filtration transfer of energy, mass of steam and inert gas in a gaseous coolant. To implement the constructed mathematical model, a numerical calculation method was developed, which is based on the use of the explicit three-layer and explicit three-layer recalculation difference schemes of M.I. Nikitenko. The results of numerical experiments are presented, which indicate the adequacy of the mathematical model and the effectiveness of the calculation method.

Keywords: *heat and mass transfer, evaporation, condensation, adsorbent, purge, dispersed layer, porous granules, mathematical modelling.*

Received/Надійшла до редакції 25.11.2025

Reviewed/Рецензована 18.12.2025

Accepted/Прийнята 24.12.2025