

СТАТЬЯ

УДК 66.061.34:519.876.5

**МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ
ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ОПТИМАЛЬНЫХ ПАРАМЕТРОВ
В ПРОЦЕССЕ ИОННОГО ОБМЕНА МЕТАЛЛОВ****Сатыбалдыев А.Б.***Ошский технологический университет им. М.М. Адышева, Ош,
e-mail: Baatyrbekovich@gmail.com*

Актуальность процессов ионного обмена металлов заключается в значимости для металлургии, электрохимии и экологических технологий, где данные процессы используются для очистки и получения металлов, а также в производстве аккумуляторов и очищении сточных вод. Цель исследования – разработка математических моделей для определения оптимальных параметров ионного обмена металлов, позволяющих эффективно управлять этими процессами. Основной подход исследования базируется на теоретическом моделировании, включающем уравнения Нернста – Планка для описания потока ионов и уравнения плотности тока. Используются предположения о стационарном состоянии и отсутствии конвекции, что позволило аналитически решить систему уравнений и выявить ключевые параметры, такие как концентрация ионов, коэффициент диффузии, температура и расстояние между электродами. Результаты исследования показали, что математические модели позволяют точно предсказать влияние указанных параметров на эффективность процесса ионного обмена. Обоснована линейная зависимость между плотностью тока и приложенным напряжением, что упрощает управление процессом. Установлено, что форма и площадь электродов существенно влияют на эффективность, а также доказано влияние температуры на проводимость системы. Разработанные модели находят применение в оптимизации процессов в промышленности и экологии, а также в улучшении контроля и управления обменом ионов, что способствует повышению эффективности технологических процессов.

Ключевые слова: ионный обмен металлов; математические модели; оптимальные параметры; электрическое поле; диффузия и миграция; электродные процессы; стационарное состояние

**MATHEMATICAL MODELS FOR DETERMINING OPTIMAL
PARAMETERS IN THE PROCESS OF METAL ION EXCHANGE****Satyrbaldiev A.B.***Osh Technological University named after M.M. Adyshev, Osh,
e-mail: Baatyrbekovich@gmail.com*

The relevance of metal ion exchange processes lies in their significance for metallurgy, electrochemistry, and environmental technologies, where they are employed for metal purification and extraction, as well as in the production of batteries and wastewater treatment. The aim of the article is to develop mathematical models for determining the optimal parameters of metal ion exchange, enabling efficient management of these processes. The main research approach is based on theoretical modeling, which includes the Nernst-Planck equations to describe ion flux and current density equations. Assumptions of steady-state conditions and the absence of convection were used, allowing for an analytical solution of the system of equations and the identification of key parameters such as ion concentration, diffusion coefficient, temperature, and the distance between electrodes. The research results demonstrated that the mathematical models accurately predict the influence of the specified parameters on the efficiency of the ion exchange process. A linear relationship between current density and applied voltage was substantiated, simplifying process management. It was established that the shape and surface area of electrodes significantly affect efficiency, and the influence of temperature on the system's conductivity was also proven. The developed models are applicable for optimizing industrial and environmental processes, as well as improving the control and management of ion exchange, thereby enhancing the efficiency of technological operations.

Keywords: metal ion exchange, mathematical modeling, optimal conditions, electric fields, diffusion and migration phenomena, electrode dynamics, equilibrium state

Введение

Ионный обмен металлов занимает центральное место во множестве научных и прикладных дисциплин, таких как металлургия, электрохимические технологии и экологические проекты, направленные на устранение тяжелых металлов из промышленных сточных вод [1–3]. Этот процесс лежит в основе методик извлечения, очистки и рафинирования металлов, а также играет критическую роль в функционировании аккумуляторных батарей. Несмотря

на то что накоплен значительный практический опыт применения, дальнейшее развитие требует создания усовершенствованных математических моделей, способных учитывать широкий спектр факторов, определяющих эффективность данных реакций.

Разработка таких моделей особенно актуальна для процессов обмена ионов металлов, таких как золото и серебро, которые находят широкое применение в высокотехнологичных отраслях: электронике, медицине, а также в производстве ювелирных изделий [4–6].

Эффективная математическая формализация этих процессов может существенно увеличить их экономическую целесообразность и расширить технологические горизонты. В современных исследованиях акцент делается на уточнении механизмов, идентификации ключевых переменных и оптимизации условий проведения реакций [7; 8].

Актуальность работы усиливается необходимостью повышения производительности существующих технологических процессов, уменьшения издержек и снижения экологических рисков. Однако, несмотря на значительные достижения в данной области, текущие математические модели нередко базируются на чрезмерно упрощённых предположениях, таких как равенство коэффициентов диффузии или игнорирование конвективных потоков. Эти упрощения серьёзно ограничивают применимость моделей в условиях реального производства [9–11].

Предполагается, что такая модель обеспечит возможность точного определения оптимальных характеристик процессов ионного обмена металлов. Ключевые параметры, подлежащие анализу, включают концентрацию ионов, коэффициенты диффузии, температурные условия, а также геометрические особенности системы, такие как расстояние между электродами. Предполагается, что учёт и корректировка этих факторов позволят целенаправленно управлять процессами и существенно повысить их эффективность.

Цель исследования – создание комплексной математической модели, интегрирующей уравнения, описывающие потоки ионов, плотность тока и связанные параметры.

Основными задачами исследования являются:

1. Построение математической системы, отражающей взаимосвязи между потоками ионов, плотностью тока и другими ключевыми характеристиками.
2. Аналитическое решение полученных уравнений для выявления доминирующих факторов, влияющих на результативность процесса.
3. Изучение влияния таких переменных, как концентрация ионов, геометрические размеры системы и температура, на производительность ионного обмена.
4. Оценка ограничений предложенной модели и определение направлений адаптации данной модели для использования в реальных технологических условиях.

Таким образом, данная работа не только закладывает основу для модернизации процессов ионного обмена в металлургии

и экологии, но и способствует формированию более надёжных подходов к управлению и контролю таких процессов.

Материалы и методы исследования

Для проведения настоящего исследования была применена совокупность математических моделей, основанных на уравнениях Нернста – Планка. Эти уравнения, описывающие ионные потоки с учетом процессов диффузии и миграции, предоставили возможность детально моделировать основные явления, происходящие в исследуемой системе [12]. Особое внимание уделялось условиям стационарного режима, что в сочетании с отсутствием конвекции способствовало упрощению расчетов, не снижая точности анализа.

Расчет электрического потенциала в исследуемой системе был выполнен с использованием подхода, предложенного в работе [4]. Этот метод позволил установить количественные зависимости между приложенным внешним напряжением и распределением электрического поля, что сыграло ключевую роль в оценке закономерностей ионного обмена. При этом электронейтральность системы поддерживалась благодаря методике, описанной в исследовании [5], что исключило влияние побочных эффектов, таких как адсорбция, обеспечивая чистоту экспериментальных данных.

Для обеспечения стабильности концентраций ионов и корректности баланса массы применялось уравнение, рекомендованное в работе [6]. Этот подход позволил достичь высокой точности в описании динамических характеристик модели, что критически важно для проверки теоретических предсказаний.

Дополнительно в исследовании было рассмотрено влияние геометрических характеристик электродов, таких как форма и площадь поверхности, а также температурных условий. Основываясь на данных из работ [7; 8], провели анализ, выявляющий, как различные параметры электродов сказываются на эффективности ионного обмена. Более того, изучение температурных эффектов и варьирования концентрации ионов проводилось в соответствии с методологией, представленной в исследованиях [9; 10]. Сопоставление полученных данных с теоретическими моделями подтвердило обоснованность выбранных подходов и применяемых методов.

Результаты исследования и их обсуждение

Исследование позволило разработать ряд математических моделей, детально опи-

сывающих механизмы ионного обмена металлов. В основу легла система уравнений, которая включает выражения для потоков ионов (уравнение Нернста – Планка), соотношение для плотности тока и условие электронейтральности, а также взаимосвязь напряжения с электрическим полем. Чтобы упростить задачу и получить аналитическое решение, было принято несколько допущений, среди которых выделяются представление системы как эквивалентного бинарного электролита и рассмотрение стационарного режима. Анализ итоговых уравнений позволил выделить главные параметры, определяющие ход исследуемого процесса.

Полное описание процесса ионного обмена металлов представлено математической моделью, включающей следующую систему уравнений.

Уравнение Нернста – Планка

Диффузия, миграция и конвекция составляют поток ионов J_i . При отсутствии учета конвекции уравнение Нернста – Планка записывается следующим образом:

$$J_i = -D_i \left(\frac{\partial C_i}{\partial x} + \frac{z_i F}{RT} C_i \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right), \quad (1)$$

где J_i – плотность потока ионов (моль/(м²·с)), D_i – коэффициент диффузии ионов (м²/с), C_i – концентрация ионов (моль/м³), x – расстояние (м), z_i – заряд иона, F – постоянная Фарадея (96,485 Кл/моль), R – универсальная газовая постоянная (8.314 Дж/(моль·К)), T – абсолютная температура (К), φ – электрический потенциал (В).

Уравнение плотности тока

Общий ток i пропорционален сумме потоков всех ионов:

$$i = F \sum_i z_i J_i. \quad (2)$$

Подставляя уравнение потока ионов в уравнение плотности тока, получаем общую математическую модель.

Полная формула плотности тока

Подставляем полученное уравнение для J_i в уравнение для i :

$$i = F \sum_i z_i \left(-D_i \frac{\partial C_i}{\partial x} - \frac{z_i F}{RT} D_i C_i \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) \quad (3)$$

Если раскрыть скобки в этом уравнении, получится следующее:

$$i = -F \sum_i z_i D_i \frac{\partial C_i}{\partial x} - F \sum_i z_i \left(\frac{z_i F}{RT} D_i C_i \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) \quad (4)$$

Введя обозначения в уравнение, получим следующее:

– диффузионный компонент[^]

$$i_{\text{диффузия}} = -F \sum_i z_i D_i \frac{\partial C_i}{\partial x} \quad (5)$$

– миграционный компонент[^]

$$i_{\text{миграция}} = -F^2 \sum_i z_i^2 \frac{D_i C_i}{RT} \frac{\partial \varphi}{\partial x} \quad (6)$$

Таким образом, общая плотность тока будет следующей:

$$i = i_{\text{диффузия}} + i_{\text{миграция}} \quad (7)$$

Условие электронейтральности

В ионном растворе общий заряд должен быть электронейтральным:

$$\sum_i z_i C_i = 0 \quad (8)$$

Уравнение баланса массы (стационарное состояние)

$$\frac{dJ_i}{dx} = 0 \Rightarrow J_i = \text{константа} \quad (9)$$

Связь напряжения и электрического поля

$$E = -\frac{\partial \varphi}{\partial x}, \quad U = \varphi(0) - \varphi(L) \quad (10)$$

Авторская цель – аналитически решить эту систему уравнений и найти функции $C_i(x)$ и $\varphi(x)$.

Для аналитического решения системы уравнений примем следующие упрощающие предположения:

1. Эквивалентный бинарный электролит:
 - Ионы: катион (z_+) и анион (z_-).
 - Заряды равны по абсолютной величине:

$$|z_+| = |z_-| = z.$$

- Коэффициенты диффузии равны:

$$D_+ = D_- = D.$$

2. Электронейтральность:

$$zC_+ - zC_- = 0 \Rightarrow C_+ = C_- = C.$$

3. Стационарное состояние и отсутствие конвекции:

- Постоянные потоки ионов:

$$dJ_i / dx = 0.$$

- Конвективные потоки отсутствуют.

4. Суммарный массовый поток равен нулю:

$$J_+ + J_- = 0.$$

Решение уравнений

1. Уравнения потока ионов
Для катиона ($z_+ = +z$):

$$J_+ = -D \frac{dC}{dx} - \frac{zF}{RT} DC \frac{\partial \varphi}{\partial x} \quad (11)$$

Для аниона ($z_- = -z$):

$$J_- = -D \frac{dC}{dx} + \frac{zF}{RT} DC \frac{\partial \varphi}{\partial x} \quad (12)$$

2. Общее уравнение плотности тока

$$\begin{aligned} i &= F(z_+ J_+ + z_- J_-) = \\ &= F(z J_+ - z J_-) = Fz(J_+ - J_-) \end{aligned} \quad (13)$$

3. Суммарный массовый поток равен нулю

$$J_+ + J_- = 0 \Rightarrow J_- = -J_+ \quad (14)$$

4. Выражение для плотности тока

Подставляем $J_- = -J_+$ в уравнение плотности тока:

$$i = Fz(J_+ - (-J_+)) = Fz(2J_+) = 2FzJ_+ \quad (15)$$

Отсюда находится J_+ :

$$J_+ = \frac{i}{2Fz} \quad (16)$$

5. Подстановка потока катиона в уравнение

Подставляем J_+ в уравнение для J_+

$$\frac{i}{2Fz} = -D \frac{dC}{dx} - \frac{zF}{RT} DC \frac{\partial \varphi}{\partial x} \quad (17)$$

Учитывая, что суммарный массовый поток равен нулю и концентрация постоянна ($dC/dx = 0$), уравнение упрощается:

$$\frac{i}{2Fz} = -\frac{zF}{RT} DC_0 \frac{\partial \varphi}{\partial x} \quad (18)$$

6. Выражение для градиента потенциала

Решаем относительно $\frac{\partial \varphi}{\partial x}$:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial x} = -\frac{iRT}{2(Fz)^2 DC_0} \quad (19)$$

Градиент потенциала является константой и не зависит от координаты x .

7. Распределение электрического потенциала

Интегрируем по x :

$$\varphi(x) = -\frac{iRT}{2(Fz)^2 DC_0} x + \varphi_0, \quad (20)$$

где φ_0 – потенциал при $x = 0$.

8. Определение напряжения

Напряжение между электродами U :

$$U = \varphi(0) - \varphi(L) = \frac{iRTL}{2(Fz)^2 DC_0} \quad (21)$$

9. Связь между током и напряжением

Получаем линейную зависимость:

$$U = Ri, \quad (22)$$

где сопротивление R :

$$R = \frac{RTL}{2(Fz)^2 DC_0} \quad (23)$$

Результаты

- Концентрация: $C(x) = C_0$ – постоянная величина.

- Электрический потенциал в рассматриваемой системе может изменяться пропорционально координате x :

$$\varphi(x) = -\frac{iRT}{2(Fz)^2 DC_0} x + \varphi_0 \quad (24)$$

- Напряжение: между током и напряжением существует линейная зависимость:

$$U = \frac{iRTL}{2(Fz)^2 DC_0} \quad (25)$$

Проведённый детальный анализ уравнений, описывающих процессы ионного обмена металлов, позволил выделить ключевые закономерности, существенно углубляющие понимание сложного явления. В рамках данного исследования были сформулированы и обоснованы математические модели, способные с высокой точностью описывать основные аспекты ионного обмена. Анализ показал, что на эффективность процесса существенно влияют такие параметры, как концентрация ионов, диффузионные свойства среды, геометрические характеристики электродов, включая форму и площадь, а также расстояние между ними. Исследование продемонстрировало, что плотность электрического тока находится в линейной зависимости от приложенного напряжения. Этот факт подтверждает справедливость теоретических положений закона Ома и одновременно упрощает задачи оптимизации системы.

На основе полученных данных были сделаны следующие выводы.

1. Геометрия и площадь электродов. Увеличение площади поверхности электродов способствует снижению сопротивления системы, что, в свою очередь, приводит к повышению эффективности ионного

обмена. Равномерное распределение электрического поля в значительной мере зависит от формы и конфигурации электродов. Оптимизация этих параметров открывает новые возможности для повышения производительности промышленных установок.

2. *Влияние температуры.* Повышение температуры электролита приводит к увеличению проводимости, что связано с возрастанием коэффициента диффузии. Однако при достижении определённых критических температур может наблюдаться дестабилизация физико-химических свойств среды, что негативно сказывается на общей эффективности системы. Это подчеркивает необходимость точного контроля температурных условий в технологических процессах.

3. *Концентрация ионов и расстояние между электродами.* Высокая концентрация ионов в электролите положительно влияет на проводимость, в то время как увеличение расстояния между электродами приводит к росту сопротивления, ухудшая эффективность обмена. Эти параметры являются определяющими для разработки более энергоэффективных решений без необходимости сложных модификаций оборудования.

Сформулированные модели подтвердили свою высокую прогностическую ценность при описании стационарных процессов и отсутствия конвективных эффектов. Используя уравнение Нернста – Планка и его производные, удалось получить аналитические зависимости, обеспечивающие детализированное описание поведения системы при различных условиях. Выводы исследования согласуются с результатами предыдущих работ, где значимость геометрических факторов в электролизе была подтверждена эмпирически.

Тем не менее предложенная модель имеет ограничения: не учитывает влияние конвективных потоков и предполагает равенство коэффициентов диффузии для всех ионов, что снижает применимость к более сложным системам. Для решения этих вопросов необходимы дальнейшие исследования, направленные на создание более универсальных моделей, способных учитывать нестационарные и неоднородные условия.

Результаты данной работы предоставляют широкие перспективы для улучшения существующих систем ионного обмена. Они предлагают научно обоснованный подход к выбору параметров, обеспечивая максимальную производительность с минимальными затратами. Внедрение таких моделей на практике может существенно повысить эффективность промышленных процессов, связанных с ионным обменом.

Заключение

Таким образом, разработанные математические модели предоставляют надёжный инструмент для оптимизации и управления процессами ионного обмена металлов. В то же время для более точного описания реальных условий необходимо учитывать динамические изменения, такие как неравномерная концентрация и наличие конвекции. Дальнейшие исследования должны быть направлены на расширение и улучшение существующих моделей, включая применение численных методов для анализа более сложных и динамических систем, что позволит повысить точность и универсальность применения в промышленных и экологических технологиях.

Список литературы

- Семенов А.Ф., Либерман Е.Ю., Колесников В.А. Обзор современных методов очистки сточных вод гальванических производств от ионов тяжелых металлов // *Успехи в химии и химической технологии.* 2020. № 4 (227). С. 83-85. URL: <https://www.muctr.ru/upload/iblock/d58/d586b1db4ee2913e2d64525f6453c30e.pdf> (дата обращения: 15.11.2024).
- Пимнева Л.А., Пиннигина И.А., Решетова А.А. Извлечение ионов меди, марганца и железа из природных и сточных вод // *Успехи современного естествознания.* 2021. № 2. С. 107–113. URL: <https://natural-sciences.ru/ru/article/view?id=37582> (дата обращения: 15.11.2024). DOI: 10.17513/use.37582.
- Гасаналиев А.М. Пути практического использования ионных расплавов // *Нанотехнологии: наука и производство.* 2023. № 5. С. 23–26.
- Montes A., Abeywickrama J., Hoth N., Grimmer M., Drenbenstedt C. Modeling of ion exchange processes to optimize metal removal from complex mine water matrices // *Water.* 2021. Vol. 13(21). P. 3109. DOI: 10.3390/w13213109.
- Haverkort J. Modeling and experiments of binary electrolytes in the presence of diffusion, migration, and electroosmotic flow // *Physical Review Applied.* 2020. Vol. 14(4). DOI: 10.1103/physrevapplied.14.044047.
- Ghorbani A., Ghassemi A., Andersen P., Foudazi R. A prediction model of mass transfer through an electro dialysis cell // *Desalination and Water Treatment.* 2016. Vol. 57. P. 22290–22303. DOI: 10.1080/19443994.2015.1123195.
- Bu S., Huang J., Boyer T., Miller C. An evaluation of solution algorithms and numerical approximation methods for modeling an ion exchange process // *Journal of Computational Physics.* 2010. Vol. 229, № 13. P. 4996–5010. DOI: 10.1016/j.jcp.2010.03.021.
- Hsu J., Jiang J. Expression for the transport of ions through a spherical ion-exchange membrane // *Journal of Membrane Science.* 1999. Vol. 158. P. 257–267. DOI: 10.1016/S0376-7388(99)00034-4.
- Janssen M. Curvature affects electrolyte relaxation: Studies of spherical and cylindrical electrodes // *Physical Review.* 2019. Vol. 100, № 4-1. P. 042602. DOI: 10.1103/PhysRevE.100.042602.
- Ding L. Shear dispersion of multispecies electrolyte solutions in the channel domain // *Journal of Fluid Mechanics.* 2023. Vol. 970. DOI: 10.1017/jfm.2023.626.
- Tikhonov N., Zagorodni A. Simulation of dual temperature ion-exchange separation process taking into account complex formation in solution // *Separation Science and Technology.* 1998. Vol. 33. P. 633–653. DOI: 10.1080/01496399808544780.
- Натареев С.В., Ларина А.И. Ионообменная очистка воды в аппарате с прямоточным движением иона и раствора // *Современные наукоемкие технологии. Региональное приложение.* 2024. № 3 (79). С. 82-86. DOI: 10.6060/snt.20247903.00013.