

УДК 544.723:004.42

ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС SORBLAB
ДЛЯ АНАЛИЗА КИНЕТИКИ СОРБЦИИН. С. ПУЗАНОВ¹, К. Б. КИМ¹, М. С. ИГУМНОВ^{1, 2}, Ю. М. НЕЧЕСОВА¹Научный руководитель С. И. НИФТАЛИЕВ¹, д-р хим. наук, проф.¹Воронежский государственный университет инженерных технологий
Воронеж, Россия²Елецкий государственный университет имени И. А. Бунина
Елец, Россия

Обработка кинетических данных включает несколько последовательных этапов: пересчет измеряемого сигнала по градуировочной зависимости, определение сорбционной емкости, подбор параметров кинетических моделей и оценку качества аппроксимации. При выполнении этих операций в электронных таблицах или нескольких программных средствах значительная часть времени затрачивается на перенос данных и повторение однотипных расчетов, что усложняет воспроизводимость результатов. Для объединения этих этапов разработан программный комплекс SorbLab, предназначенный для автоматизации расчета и визуализации кинетики сорбции [1].

Программа реализована на языке C# в виде многооконного настольного приложения. Для численных расчетов используется библиотека MathNet.Numerics, построение графиков выполняется средствами System.Windows.Forms.DataVisualization.Charting, а сохранение проектов – с применением Newtonsoft.Json. Такое сочетание позволяет объединить в одном программном продукте ввод экспериментальных значений, математическую обработку, визуальное представление и сохранение результатов.

Работа с экспериментом начинается с ввода или импорта исходных данных. В программе формируется и сохраняется градуировочная зависимость, используемая для пересчета измеряемого сигнала, например оптической плотности, в концентрацию сорбата. После задания объема раствора и массы сорбента рассчитывается сорбционная емкость, а полученные значения отображаются на графике. Такое представление позволяет контролировать исходные данные и сразу сопоставлять их с результатами последующей аппроксимации.

В SorbLab реализована аппроксимация кинетических кривых моделями псевдо-первого и псевдо-второго порядков. Для каждой модели автоматически определяются расчетная равновесная сорбционная емкость q_e и соответствующая константа скорости k_1 или k_2 . Параметры подбираются нелинейным методом наименьших квадратов путем минимизации отклонения между экспериментальной и расчетной кривыми. Такой подход позволяет выполнять оценку непосредственно в исходных координатах и избегать части искажений, связанных с линеаризацией кинетических уравнений [2].

Качество аппроксимации оценивается по коэффициенту детерминации R^2 и сумме квадратов отклонений SSE. Численные показатели рассматриваются

совместно с графическим представлением: в одном окне отображаются экспериментальные точки и рассчитанные кривые, что позволяет оценить характер расхождений на различных участках процесса. Программа поддерживает одновременное отображение нескольких серий данных и модельных кривых, что удобно при сравнении сорбентов и выборе модели, наиболее адекватно описывающей конкретную экспериментальную систему.

Исходные значения, сведения о калибровках и результаты моделирования сохраняются в структурированном формате JSON. Благодаря этому проект можно повторно открыть и воспроизвести последовательность расчета без повторного ввода данных. Валидация программного комплекса на экспериментальных данных показала согласованность получаемых параметров с результатами независимых расчетов и литературными данными [1]. Автоматизация уменьшает число ручных операций, снижает риск ошибок при переносе значений и стандартизирует обработку серий кинетических экспериментов.

Комплекс может использоваться в исследовательской и учебной работе. При скрининге сорбционных материалов он ускоряет обработку большого числа кинетических кривых и облегчает сопоставление значений q_e , k_1 и k_2 . В образовательном процессе программа позволяет сосредоточить внимание на физическом смысле моделей и влиянии экспериментальных данных на результат аппроксимации, не сводя работу к повторению однотипных вычислений.

Дальнейшее развитие SorbLab предполагает создание модуля анализа равновесных изотерм с поддержкой моделей Лэнгмюра, Фрейндлиха, Темкина, Дубинина – Радужкевича, BET и других зависимостей [3]. Для каждой модели планируется оценивать параметры и качество описания экспериментальных данных. В качестве перспективных направлений также рассматриваются анализ кинетики десорбции и моделирование динамики сорбции в колонках. Эти функции находятся на этапе разработки и проверки и должны расширить возможности комплекса для анализа сорбционных процессов.

Таким образом, действующая версия SorbLab обеспечивает полный цикл обработки кинетического эксперимента: от ввода и калибровки данных до подбора моделей, визуального сравнения и сохранения результатов. Программа сокращает трудоемкость анализа, повышает его воспроизводимость и позволяет сосредоточить внимание на интерпретации полученных параметров.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. «SorbLab» – программный модуль для расчета и визуализации математических моделей кинетики и изотерм сорбции / Н. С. Пузанов, К. Б. Ким, М. С. Игумнов, С. И. Нифталиев // Вестник технологического университета. – 2026. – Т. 29, № 3. – С. 146–152.
2. **Wang, J.** Adsorption kinetic models: Physical meanings, applications, and solving methods / J. Wang, X. Guo // Journal of Hazardous Materials. – 2020. – Vol. 390. – Art. 1221563.
3. **Al-Ghouti, M. A.** Guidelines for the use and interpretation of adsorption isotherm models: A review / M. A. Al-Ghouti, D. A. Da'ana // Journal of Hazardous Materials. – 2020. – Vol. 393. – Art. 122383.