

Н. С. Пузанов, К. Б. Ким, М. С. Игумнов,
С. И. Нифталиев

«SORBLAB» — ПРОГРАММНЫЙ МОДУЛЬ ДЛЯ РАСЧЕТА И ВИЗУАЛИЗАЦИИ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ КИНЕТИКИ И ИЗОТЕРМ СОРБЦИИ

Ключевые слова: сорбция, кинетика сорбции, программный комплекс, автоматизация расчётов, визуализация данных.

В данной работе представлен разработанный программный комплекс «SorbLab» для автоматизации обработки, анализа и визуализации экспериментальных данных по кинетике сорбции. Программа, созданная на языке C#, использует библиотеки MathNet.Numerics (для численных расчётов и нелинейной оптимизации методом наименьших квадратов с применением GoldenSectionMinimizer), System.Windows.Forms.DataVisualization.Charting (для построения графиков) и Newtonsoft.Json (для сериализации данных). Комплекс обеспечивает полный цикл работы: от ввода данных (вручную или импортом) и их калибровки с использованием градуировочных зависимостей до интерактивного редактирования кривых, включая выявление и исключение выбросов. «SorbLab» автоматически аппроксимирует кинетические кривые моделями псевдо-первого и псевдо-второго порядков, вычисляя ключевые параметры (q_e , k_1 , k_2) и статистические критерии качества аппроксимации (R^2 , SSE). Реализованный многооконный интерфейс позволяет наглядно сравнивать экспериментальные данные с подобранными моделями и несколько кривых между собой. Программа позволяет сравнивать несколько моделей одновременно, что стимулирует более объективную интерпретацию. Результаты расчётов, включая все параметры и исходные данные, сохраняются в воспроизводимом формате JSON. Валидация на реальных экспериментальных данных подтвердила точность и надёжность алгоритмов, сопоставимую с литературными данными. Инструмент ориентирован на исследователей и преподавателей, сокращая время обработки, минимизируя субъективные ошибки ручных расчётов и стандартизируя анализ. В перспективе планируется расширение комплекса до универсальной платформы для анализа сорбционных процессов, включая модуль расчёта изотерм (с поддержкой ~15 моделей, таких как Лэнгмура, Фрейндлиха, Темкина, BET), а также модули для анализа кинетики десорбции и динамики сорбции в колонках.

N. S. Puzanov, K. B. Kim, M. S. Igumnov,
S. I. Niftaliev

«SORBLAB» — SOFTWARE MODULE FOR CALCULATION AND VISUALIZATION OF MATHEMATICAL MODELS OF SORPTION KINETICS AND ISOTHERMS

Keywords: sorption, sorption kinetics, software package, automated calculations, data visualization.

This paper presents the developed software package «SorbLab» for the automation of processing, analysis, and visualization of experimental data on sorption kinetics. The program, created in C#, uses the MathNet.Numerics library (for numerical computations and nonlinear optimization via the least squares method using GoldenSectionMinimizer), System.Windows.Forms.DataVisualization.Charting (for graph plotting), and Newtonsoft.Json (for data serialization). The package provides a complete workflow: from data entry (manual or import) and its calibration using calibration curves to interactive curve editing, including identification and exclusion of outliers. «SorbLab» automatically approximates kinetic curves with pseudo-first-order and pseudo-second-order models, calculating key parameters (q_e , k_1 , k_2) and statistical criteria for approximation quality (R^2 , SSE). The implemented multi-window interface allows for clear visual comparison of experimental data with fitted models and of multiple curves with each other. The software enables simultaneous comparison of several models, which stimulates a more objective interpretation. Calculation results, including all parameters and raw data, are saved in a reproducible JSON format. Validation on real experimental data confirmed the accuracy and reliability of the algorithms, comparable with literature data. The tool is aimed at researchers and educators, reducing processing time, minimizing subjective errors of manual calculations, and standardizing analysis. In the future, it is planned to expand the package into a universal platform for the analysis of sorption processes, including an isotherm calculation module (with support for ~15 models such as Langmuir, Freundlich, Temkin, BET), as well as modules for the analysis of desorption kinetics and sorption dynamics in columns.

Введение

Сорбционные процессы находят широкое применение в различных областях – химической технологии, экологии, фармацевтике, материаловедении [1–3]. Анализ кинетики сорбции позволяет оценить скорость протекания этих процессов и выявить механизм взаимодействия между сорбентом и адсорбатом. Однако ручная обработка экспериментальных данных требует значительных временных затрат, подвержена ошибкам и делает трудоёмким сравнение эффективности различных сорбентов.

В этой связи актуальным является создание программного обеспечения, способного автоматизировать обработку и визуализацию кинетических данных. В настоящей работе представлена разработанный программный комплекс «SorbLab», предназначенный для анализа кинетики сорбции с возможностью аппроксимации данных различными математическими моделями.

Адсорбенты широко применяются для извлечения тяжёлых металлов и органических поллютантов из сточных вод. Современные обзоры, например Raji et al. (2023), подчёркивают эффективность адсорбции в удалении ионов тяжёлых металлов и необходимость

подбора адсорбентов с высокой ёмкостью и воспроизводимыми кинетическими характеристиками [4]. Кинетические характеристики адсорбции существенно влияют на эффективность удаления примесей из водных сред [5]. Экспериментальные данные, обычно, анализируют вручную (посредством аппроксимации и графического построения), что требует значительных временных затрат. В частности, батчевый метод является распространённым методом изучения равновесия и кинетики, но выводы зачастую делают на основе эмпирических моделей [3].

Для описания кинетики сорбции чаще всего применяются модели псевдо-первого и псевдо-второго порядков (модели Лагергрена, Но & МсКау и др.), которые получили широкое распространение [6, 7].

Статическую сорбционную ёмкость q_e рассчитывают по формуле:

$$q_e = \frac{(C_0 - C)}{m} V \quad (1)$$

где q_e - равновесная сорбционная ёмкость, ммоль/г (или мг/г); C_0 - начальная концентрация сорбата в растворе, ммоль/см³ (или мг/дм³); C - равновесная концентрация сорбата в растворе, ммоль/см³ (или мг/дм³); V - объём раствора, см³; m — масса сорбента, г.

Увеличение объёмов экспериментальных данных и необходимость оперативного получения кинетических констант (k_1 , k_2 , q_e) делают такую работу трудоёмкой и сопряженной с риском ошибок. Традиционно расчет параметров кинетических моделей проводят с помощью электронных таблиц (например, *Microsoft Excel*) или подбирают параметры на основе линеаризованных уравнений.

В литературе описано применение таких инструментов, как *Excel Solver*, *Matlab*, *Origin*, *Maple* и др., однако их использование требует навыков программирования или глубокого понимания принципов численной оптимизации [8].

При росте объёма данных ручная аппроксимация становится узким местом анализа и снижает точность результатов. Кроме того, во многих работах анализ кинетики и изотерм сорбции ограничивается несколькими простейшими моделями (например, Лэнгмюра и Фрейндлиха для изотерм, псевдо-первого и псевдо-второго порядков для кинетики), что может приводить к методическим ошибкам при сравнении эффективности различных сорбентов [9].

Целью настоящей работы является разработка программного инструмента для автоматизированного расчёта кинетических параметров сорбции. Для достижения этой цели решались следующие задачи:

- создание удобного графического интерфейса для ввода и визуализации экспериментальных данных;
- реализация вычислительных модулей для аппроксимации кинетических кривых по наиболее распространённым моделям;
- внедрение критериев оценки качества аппроксимации и возможности сравнения моделей;
- верификация работы комплекса на реальных экспериментальных данных.

Архитектура программного обеспечения

Программный комплекс реализован на языке C# с применением библиотек *MathNet.Numerics* и

System.Windows.Forms.DataVisualization.Charting для визуализации и оптимизации параметров, а также *Newtonsoft.Json* для хранения данных.

System.Windows.Forms.DataVisualization.Charting — библиотека, входящая в стандартный *.NET Framework*, используется для построения графиков и диаграмм в Windows-приложениях. В «*SorbLab*» она применяется для визуализации экспериментальных данных, построения градуировочных кривых и графиков аппроксимации. Программный комплекс реализует поддержку как точечных, так и линейных графиков с возможностью настройки параметров отображения: цвета, размера маркеров, стилей линий и др. Кроме того, предусмотрена работа с несколькими сериями данных, что позволяет сравнивать сорбционные кривые различных образцов в одном окне.

MathNet.Numerics.Optimization — часть библиотеки *MathNet.Numerics*, предоставляющей широкий набор инструментов для численных расчётов. В частности, в «*SorbLab*» используется модуль оптимизации *GoldenSectionMinimizer* для оценки параметров моделей кинетики методом минимизации отклонения между модельной и экспериментальной кривыми. Как подчёркивают Wang и Guo (2020), подбор параметров кинетических моделей на основе линейных форм может исказить физический смысл процессов сорбции, и предпочтение следует отдавать нелинейным методам оптимизации, реализованным, в частности, в *MathNet.Numerics* [10]. Библиотека позволяет реализовать метод последовательной оптимизации параметров, обеспечивающих устойчивость и точность аппроксимации в условиях зашумленных данных.

Newtonsoft.Json (также известна как *Json.NET*) — популярная *.NET*-библиотека для сериализации и десериализации данных в формате *JSON*. В «*SorbLab*» она используется для сохранения данных о сорбентах, экспериментах, калибровках и результатах моделирования в текстовые файлы, для повторной загрузки. Использование *JSON*-формата обеспечивает компактность хранения, читаемость и совместимость с другими программными средствами обработки данных, включая *Python*, *Excel* и веб-приложения.

Главное окно программы «*SorbLab*» содержит список загруженных сорбционных данных, меню для доступа к основным функциям программы и панель инструментов для выполнения ключевых операций. Интерфейс программы реализован по принципу многооконности и включает ряд специализированных модулей. В состав графического интерфейса входят:

- главное окно управления проектами;
- окно добавления экспериментальных данных;
- окно построения графиков;
- окно просмотра результатов моделирования;
- окно добавления градуировочных зависимостей (калибровок).

Для понимания архитектуры описываемого программного продукта представлена структурная схема программного комплекса «*SorbLab*» (рис. 1). Информационные связи между модулями организованы последовательно и обеспечивают поэтапную обработку данных — от ввода экспериментальных значений до получения и анализа результатов моделирования.

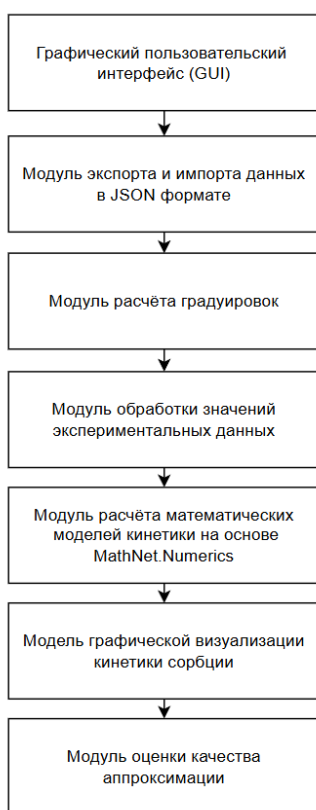


Рис. 1 – Структурная схема архитектуры программного комплекса «SorbLab»

Fig. 1 – Structural architecture of the «SorbLab software package

Каждый модуль отвечает за определённый этап работы. Например, окно добавления данных обеспечивает ввод новых экспериментальных точек, окно графиков отображает динамику сорбции, а модуль просмотра результатов позволяет анализировать рассчитанные параметры моделей. Такой подход к архитектуре повышает удобство работы пользователя и модульность программного кода.

Функциональные возможности

Основные этапы работы комплекса «SorbLab» следующие:

- загрузка или ввод экспериментальных данных (временные точки и соответствующие значения) вручную или импортированием из файла;
- автоматическое построение графика кинетической кривой сорбции на основе загруженных данных.
- аппроксимация данных с использованием кинетических моделей псевдо-первого и псевдо-второго порядков;
- расчёт параметров модели – для каждой модели вычисляются основные параметры и коэффициент детерминации (R^2) аппроксимации;
- сохранение результатов в файлы формата JSON для последующего использования и анализа.

Для ввода экспериментальных данных предусмотрена отдельная форма (рис. 2), позволяющая задавать название образцу, вносить значения времени и измеренные величины сорбции, а также рассчитывать концентрации на основе калибровочных данных.

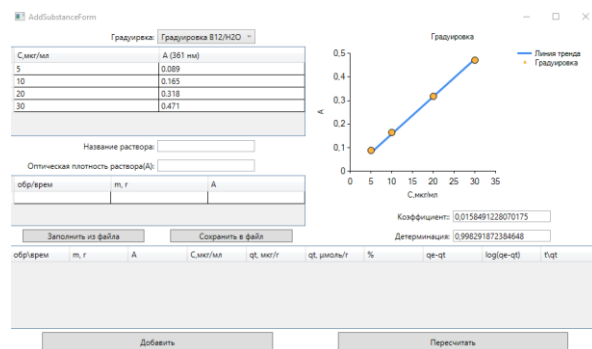


Рис. 2 – Окно ввода экспериментальных данных и построения градуировочной зависимости в программном комплексе «SorbLab»

Fig. 2 – Window for entering experimental data and constructing a calibration curve in the «SorbLab» software package

Окно ввода данных содержит таблицы и поля ввода, облегчающие добавление экспериментальных результатов, как вручную, так и импортированием данных из файла.

Предусмотрена возможность использования заранее введённых градуировочных зависимостей (калибровок) для пересчёта измеренных сигналов (например, оптической плотности) в значения концентраций. После ввода данных становится доступно построение кинетической кривой.

Математические модели и алгоритмы

Для описания кинетики сорбции в программе «SorbLab» применяются широко распространённые кинетические модели [6, 7]:

1. Модель псевдо-первого порядка – основана на предположении, что скорость сорбции пропорциональна количеству незанятых активных центров на поверхности сорбента – применяется для описания физических (адсорбционных) процессов. Линеаризованная форма уравнения имеет вид:

$$\log(q_e - q_t) = \log q_e - \left(\frac{k_1}{2.303}\right)t \quad (2)$$

где q_t – количество адсорбированного вещества в момент времени t , ммоль/г (или мг/г); k_1 – константа скорости псевдо-первого порядка, мин; t – время контакта, мин;

2. Модель псевдо-второго порядка – учитывает химическую природу взаимодействия сорбата и сорбента и во многих случаях более точно описывает кинетику сорбции – исходит из предположения о химической (активной) сорбции, лимитирующей общую скорость процесса. Линеаризованная форма записывается как:

$$\frac{t}{q_t} = \frac{1}{(k_2 q_e^2)} + \frac{t}{q_e} \quad (3)$$

где k_2 – константа скорости псевдо-второго порядка, г/(ммоль·мин) или г/(мг·мин).

Для каждой модели в ходе расчёта определяется коэффициент детерминации R^2 , что позволяет количественно оценить точность соответствия модели экспериментальным данным. Поиск искомых пара-

метров осуществляется методом наименьших квадратов с использованием библиотеки *MathNet.Numerics*, что гарантирует подбор оптимальных значений параметров, обеспечивающих наилучшее совпадение модели с экспериментальной кинетической кривой. В частности, как продемонстрировано Elamin et al. (2021), использование нелинейной аппроксимации даёт более точные результаты по сравнению с линейной регрессией при анализе кинетики сорбции лекарственных веществ [11].

В программном комплексе «*SorbLab*» основной акцент сделан на двух наиболее распространённых моделях сорбционной кинетики — псевдо-первого и псевдо-второго порядков. Модель псевдо-первого порядка (уравнение Лагергрена) предполагает, что скорость сорбции пропорциональна разности между максимальной сорбционной ёмкостью (q_e) и текущим значением (q_t). В интегральной форме данная зависимость описывается экспоненциальной кривой, что делает её удобной для моделирования начальных стадий сорбции.

Модель псевдо-второго порядка (*Ho & McKay*) основана на квадратичной зависимости скорости процесса от той же разности $(q_e - q_t)^2$ и, как правило, лучше описывает хемосорбцию, связанную с участием функциональных центров на поверхности сорбента [3].

В «*SorbLab*» уравнения обеих моделей встроены в вычислительный модуль. Подбор параметров (q_e , k_1 , k_2) выполняется методом нелинейной оптимизации, обеспечивающим минимизацию ошибки между экспериментальной и теоретической кривыми. Для каждой загруженной серии данных программа может производить расчёт по обеим моделям и выводить рассчитанные параметры в числовой и графической формах.

Пользователь может выбрать, какая модель (одна или обе) будет отображаться на графике для сравнения с экспериментальными точками, что позволяет визуально оценить качество аппроксимации и адекватность модели конкретным данным.

В дальнейшем планируется расширение библиотеки кинетических моделей за счёт добавления уравнения Эловича, диффузионной модели Вебера–Морриса и других часто используемых эмпирических зависимостей. Тем не менее, даже реализованные в текущей версии базовые модели обеспечивают надёжную первичную оценку кинетических параметров сорбции. Автоматизация их расчёта значительно сокращает время обработки данных и снижает вероятность ошибок, характерных для ручного построения линеаризованных графиков.

Графическое представление данных и аппроксимация моделями

Графический модуль программы отображает график зависимости количества сорбируемого вещества от времени, что позволяет визуально оценить характер процесса (рис. 3).

Каждый эксперимент может быть визуализирован в виде точки или кривой на графике, с возможностью отображения одновременно нескольких кривых для сравнения (например, для разных сорбентов или

условий опыта). Графическое представление данных облегчает качественный анализ: по форме кривой можно судить о скорости сорбции на начальных этапах, времени достижения равновесия и иных особенностях процесса.

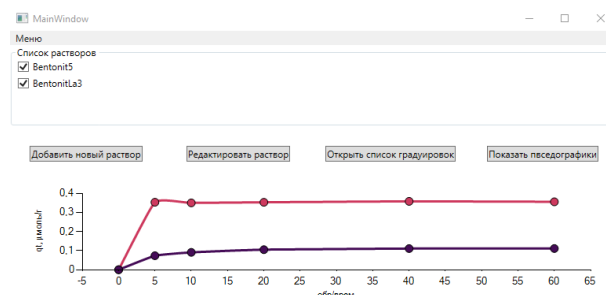


Рис. 3 – Окно программного комплекса «*SorbLab*» с графической интерпретацией график зависимости количества сорбируемого вещества от времени

Fig. 3 - «*SorbLab*» software window showing graphical interpretation of experimental sorption kinetic curves

Программа предоставляет окно для редактирования экспериментальной кривой, позволяющее уточнять и корректировать данные (рис. 4).

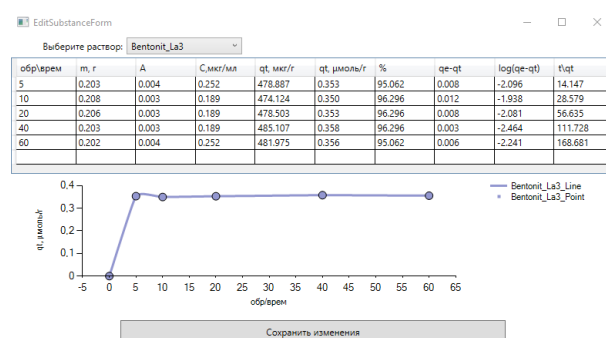


Рис. 4 – Окно программного комплекса «*SorbLab*», демонстрирующее интерфейс для редактирования и корректировки экспериментальных данных

Fig. 4 - «*SorbLab*» software window demonstrating the interface for editing and correction of experimental data

В окне корректировки графика может увидеть числовые значения загруженных данных в табличной форме и соответствующую им кривую на графике.

При необходимости пользователь может исключать выбросы, корректировать отдельные точки или пересчитывать дополнительные параметры — например, преобразованные значения, используемые в линеаризованных формах моделей. В том числе:

обр/время — обрабатываемое время (мин);

m — масса образца (г);

A — оптическая плотность;

C — концентрация сорбата в растворе (мкг/мл);

% — процент сорбции;

$q_e - q_t$ — разность между равновесной и текущей сорбционной ёмкостью;

$\log(q_e - q_t)$ — логарифм этой разности;

t/q — отношение времени к qt (для модели псевдо-второго порядка).

После внесения изменений скорректированные данные могут быть сохранены для дальнейшего анализа, что повышает надёжность обработки и позволяет оперативно выявлять и устранять возможные ошибки ввода.

На основе введённых данных программный комплекс «SorbLab» проводит аппроксимацию кинетической кривой двумя wybranными моделями: псевдо-первого и псевдо-второго порядка. Для каждой из моделей рассчитываются соответствующие оптимальные значения параметров и коэффициент детерминации. Модель псевдо-второго порядка, как правило, обеспечивает более высокую степень соответствия экспериментальным данным, что согласуется с литературными сведениями о её универсальности при описании сорбционных процессов [3]. При этом, как отмечается в обзорах Revellame et al. (2020) и Kostoglou & Karapantsios (2022), высокая точность модели PSO в литературе зачастую объясняется не объективным превосходством, а методическими упрощениями или некорректным применением линейных форм [3, 12]. В то же время модель псевдо-первого порядка может быть применима для описания начальных стадий сорбции или процессов, протекающих преимущественно по физическому механизму.

Расчёт параметров по выбранным моделям выполняется автоматически по команде «Аппроксимировать» - программа «SorbLab» отображает результаты в удобной для анализа форме.

Во-первых, на графике экспериментальные точки автоматически дополняются теоретической кривой модели (или двумя кривыми — если выбраны обе модели для сравнения), что позволяет сразу визуально оценить соответствие модели экспериментальным данным. Подобный подход успешно применяется в ряде доступных решений, например, в исследовании Wongphat et al. (2024), где для аппроксимации кинетики сорбции использовались функции Excel Solver с визуализацией и статистическим сравнением моделей [13].

Во-вторых, численные значения параметров (q_e , k_1 , k_2) и статистических критериев качества аппроксимации выводятся в виде таблицы (рис. 5). В ней представлены рассчитанные значения равновесной сорбционной ёмкости q_e (model), константы скорости k_1 или k_2 , а также статистические показатели, такие как сумма квадратов отклонений (SSE) и коэффициент детерминации (R^2) для каждой модели. Как отмечается в работе Mahammedi et al. (2021), использование нескольких статистических критериев, включая χ^2 , R^2 и SSE, позволяет объективно сравнивать модели и повышает достоверность анализа кинетических данных [14].

Данные обновляются при каждой новой аппроксимации, что позволяет протестировать несколько моделей и оперативно определить, какая из них наиболее точно описывает экспериментальную систему. Результаты аппроксимации визуализируются и представляются для последующего анализа.

В частности, один из модулей программного комплекса иллюстрирует качество аппроксимации экспе-

риментальных кривых сорбции с использованием моделей псевдо-первого и псевдо-второго порядков, представляя их в виде интерактивной таблицы (рис. 5). В работе Tran (2023) предложен подход к выявлению ошибок на начальном участке сорбционных кривых, что также реализовано в модуле обработки данных SorbLab и позволяет повысить достоверность аппроксимации [7].

Модель кинетики	Образец	Уравнение аппроксимации	q_e , (мг/г)	K_1 , (мин ⁻¹)	R^2
Псевдо-первый порядок	Bentonit_5	$y = -1,392 + -0,035 \cdot x$	0,111	0,081	0,923
	Bentonit_La3	$y = -1,537 + -0,013 \cdot x$	0,364	0,029	0,521
Псевдо-второй порядок	Bentonit_5	$y = 22,54 + 8,582 \cdot x$	0,117	460,28	1
	Bentonit_La3	$y = 1,512 + 2,775 \cdot x$	0,36	48,131	1

Рис. 5 - Табличное представление результатов аппроксимации экспериментальных данных по моделям псевдо-первого и псевдо-второго порядков в программном комплексе «SorbLab»

Fig. 5 - Tabular representation of the results of experimental data approximation using pseudo-first-order and pseudo-second-order models in the «SorbLab» software package

Программный комплекс предоставляет меню для сохранения и загрузки данных, что упрощает управление проектами и повторный анализ. Функционалом является выпадающее «Меню», через которое можно сохранить текущий проект (данные и результаты расчётов) или загрузить ранее сохранённый. Данные эксперимента, а также параметры, полученные при аппроксимации, сохраняются в формате JSON.

Кроме того, через это же меню предусмотрены опции сохранения и загрузки градуировок – калибровочных зависимостей, применяемых для пересчёта измеренных величин. Возможность повторного обращения к сохранённым данным позволяет проводить сопоставление результатов разных экспериментов и проверять воспроизводимость расчётов.

Обсуждение результатов

Программный комплекс «SorbLab» значительно упрощает трудоёмкий процесс обработки сорбционных данных, повышает качества их анализа и обладает рядом дополнительных преимуществ:

- во-первых, обеспечивает воспроизводимость – все этапы обработки данных стандартизованы, и различные пользователи могут получать идентичные результаты при работе с одними и теми же исходными данными;

- во-вторых, интегрированный интерфейс с графиками и таблицами упрощает контроль качества данных – сразу видно, как расположены экспериментальные точки относительно модели, можно оперативно выявить аномальные отклонения и повторно выполнить аппроксимацию после коррекции данных;

- в-третьих, позволяет одновременное сравнение нескольких моделей, стимулирует более строгий и объективный подход к интерпретации результатов.

По сравнению с написанием скриптов на *Python* или *MATLAB*, разработанный комплекс не требует навыков программирования и специальных знаний в области обработки данных. Это особенно важно для широкого круга исследователей, не являющихся IT-специалистами [8].

Отдельно стоит подчеркнуть удобство «*SorbLab*» в образовательных целях — при проведении лабораторных работ и подготовке курсовых проектов. Студенты могут сосредоточиться на понимании физических механизмов и сравнении моделей, не тратя основное время на рутинные вычисления. Преподаватель, в свою очередь, получает инструмент для наглядной демонстрации различных кинетических режимов: например, можно мгновенно показать, как выглядит кривая при ограничении процесса внешней диффузией (псевдо-первый порядок) или хемосорбцией (псевдо-второй порядок).

В контексте научных исследований программный комплекс полезен при скрининге массива адсорбентов. Быстрая обработка десятков экспериментальных кривых позволяет оперативно определить, какие образцы обладают лучшими кинетическими характеристиками (высокими значениями q_e и k_2). Возможность сохранять проекты со всеми данными делает результаты моделирования удобными для включения в отчёты и статьи.

Существуют программные решения для моделирования адсорбционных процессов — от электронных таблиц до специализированных библиотек [15–17]. Разработанный комплекс выгодно отличается узкой специализацией на задачах кинетического анализа сорбции и удобством использования «из коробки». Он объединяет функциональность, ранее доступную только через сочетание нескольких инструментов (*Excel* для расчётов, *Origin* для графиков и т.д.), в одном приложении.

Дальнейшее развитие программного комплекса «*SorbLab*» планируется в направлении расширения его функциональных возможностей и области практического применения. Одним из приоритетных направлений является добавление модуля анализа сорбционных изотерм. В «*SorbLab*» планируется реализовать поддержку порядка 15 наиболее распространённых моделей изотерм, включая уравнения Лэнгмюра, Фрейндлиха, Темкина, Дубинина–Радушкевича, а также их обобщённые формы — Сипса (Лэнгмюра–Фрейндлиха), Редлиха–Петерсона, Джовановича, Кобла–Корригана, ВЕТ и другие. Как подчёркивается в обзорах Al-Ghouti & Da'ana (2020) и Mozaffari Majd et al. (2022), корректный выбор модели изотермы имеет ключевое значение для надёжной интерпретации сорбционных характеристик, и требует учёта физических предпосылок каждой модели [9, 18]. Например, в некоторых работах проведено сравнение 14 двухпараметрических моделей изотерм, среди которых Фаулер–Гуггейнхайм, Хилл–де Бура, Киселёва, Харкинса–Джуры и др. [9, 15, 19–21].

Внедрение аналогичных моделей в «*SorbLab*» позволит пользователям анализировать равновесные

данные столь же детально, как и кинетические, и выбирать оптимальную модель для описания конкретного сорбционного процесса. Реализуемый функционал будет включать автоматический расчёт характерных констант (например, q_m и K^L для модели Лэнгмюра, K^S и n для модели Фрейндлиха) с оценкой погрешностей, а также построение изотерм в линейных и нелинейных координатах. Такой модуль сделает «*SorbLab*» удобным инструментом для определения сорбционной ёмкости материалов и автоматического выбора наиболее эффективного адсорбента по совокупности кинетических и равновесных параметров.

Помимо анализа изотерм, планируется расширение «*SorbLab*» на другие типы данных, связанные с сорбционными процессами. В частности, будет реализована возможность анализа кинетики десорбции (высвобождения вещества из сорбента) в тех же модельных приближениях, что и адсорбция. Это направление найдёт применение при исследовании процессов регенерации адсорбентов.

Архитектура комплекса также предусматривает возможность интеграции новых блоков расчёта для других процессов массопереноса, например, моделирования динамики адсорбции в колонках (фронтальные кривые). В перспективе «*SorbLab*» может стать основой для целого набора прикладных программ, автоматизирующих анализ процесса сорбции.

Заключение

Программный комплекс *SorbLab* представляет собой современный инструмент для анализа кинетики сорбции, предназначенный для автоматизированной обработки экспериментальных данных, визуализации результатов и подбора оптимальных моделей, описывающих сорбционные процессы. Реализация в виде многооконного приложения обеспечивает удобство работы и наглядное представление информации. «*SorbLab*» может быть эффективно использован как в научных исследованиях, так и в образовательных целях при изучении закономерностей сорбции.

Созданный в рамках данной работы программный комплекс обеспечивает удобный ввод экспериментальных данных, их интерактивную визуализацию и аппроксимацию с использованием двух основных кинетических моделей — псевдо-первого и псевдо-второго порядков. Реализованный алгоритм нелинейной оптимизации позволяет точно рассчитывать константы скоростей и равновесные ёмкости сорбентов. Результаты выводятся в форме графиков и таблиц, что облегчает интерпретацию и сравнительный анализ.

Валидация на тестовых данных показала, что автоматизированный расчёт с помощью «*SorbLab*» обеспечивает воспроизводимые результаты, сопоставимые с литературными, исключая субъективные ошибки, характерные для ручных методов. Программный комплекс «*SorbLab*» успешно реализует функции ввода, хранения, визуализации и анализа данных, необходимых для полного цикла лабораторного исследования процессов сорбции.

Литература

1. O.P. Murphy, M. Vashishtha, P. Palanisamy, K.V. Kumar, ACS Omega, 8, 20, 17407–17430 (2023). DOI: 10.1021/acsomega.2c08155.

- 2.A. Magdy, M.R. Mostafa, S.A. Moustafa, G.G. Mohamed, O.A. Fouad, *Sci. Rep.*, 14, Article 24392 (2024). DOI: 10.1038/s41598-024-73697-x.
- 3.E.D. Revellame, D.L. Fortela, W. Sharp, R. Hernandez, M.E. Zappi, *Cleaner Eng. Technol.*, 1, Article 100032 (2020). DOI: 10.1016/j.clet.2020.100032.
- 4.Z. Raji, A. Karim, A. Karam, S. Khalloufi, *Waste*, 1, 3, 775–805 (2023). DOI: 10.3390/waste1030043.
- 5.J. Amoko, S. Omondi, D. Kariuki, C. Akinyi, *Int. J. Eng. Sci.*, 12, 1, 10–19 (2023). DOI: 10.1007/s13762-022-04598-3.
- 6.J.P. Vareda, *J. Mol. Liq.*, 376, Article 121416 (2023). DOI: 10.1016/j.molliq.2023.121416.
- 7.H.N. Tran, *Water*, 15, 6, Article 1231 (2023). DOI: 10.3390/w15061231.
- 8.E. Dautzenberg, S. van Hurne, M.M.J. Smulders, L.C.P.M. de Smet, *Comput. Phys. Commun.*, 280, Article 108494 (2022). DOI: 10.1016/j.cpc.2022.108494.
- 9.M.A. Al-Ghouthi, D.A. Da'ana, J. Hazard. Mater., 393, Article 122383 (2020). DOI: 10.1016/j.jhazmat.2020.122383.
10. J. Wang, X. Guo, *J. Hazard. Mater.*, 390, Article 122156 (2020). DOI: 10.1016/j.jhazmat.2020.122156.
11. M.R. Elamin, B.Y. Abdulkhair, F.K. Algethami, L. Khezami, *Sci. Rep.*, 11, Article 13606 (2021). DOI: 10.1038/s41598-021-92891-5.
12. M. Kostoglou, T.D. Karapantsios, *Colloids Interfaces*, 6, 4, Article 55 (2022). DOI: 10.3390/colloids6040055.
13. A. Wongphat, S. Wongcharee, N. Chaiduangri, et al., *ChemEngineering*, 8, 3, Article 58 (2024). DOI: 10.3390/chemengineering8030058.
14. F. Mahammedi, K. Belhamel, M. Abbas, *Arab. J. Chem.*, 14, 5, Article 103067 (2021). DOI: 10.1016/j.arabjc.2021.103067.
15. G.J. Millar, M.J. Hudson, T. Hall, *Chem. Eng. J.*, 256, 161–169 (2015). DOI: 10.1016/j.cej.2014.07.014.
16. M.I. El-Khaiary, G.F. Malash, *Adsorption*, 17, 3, 467–476 (2011). DOI: 10.1007/s10450-011-9321-8.
17. J.G. Outram, N. Yusoff, R.A. O'Shea, G.J. Millar, *J. Water Process Eng.*, 41, Article 102009 (2021). DOI: 10.1016/j.jwpe.2021.102009.
18. M. Mozaffari Majd, V. Kordzadeh-Kermani, V. Ghandari, A. Askari, M. Sillanpää, *Sci. Total Environ.*, 812, Article 151334 (2022). DOI: 10.1016/j.scitotenv.2021.151334.
19. S. Shimizu, N. Matubayasi, *Langmuir*, 37, 33, 10279–10290 (2021). DOI: 10.1021/acs.langmuir.1c01236.
20. C.M. Dalby, K.S. Walton, S. Shimizu, *Langmuir*, 38, 41, 13084–13092 (2022). DOI: 10.1021/acs.langmuir.2c01750.
21. Q. Hu, R. Lan, L. He, H. Liu, X. Pei, *J. Environ. Manage.*, 329, Article 117104 (2023). DOI: 10.1016/j.jenvman.2022.117104.

References

- 1.O.P. Murphy, M. Vashishtha, P. Palanisamy, K.V. Kumar, *ACS Omega*, 8, 20, 17407–17430 (2023). DOI: 10.1021/acsomega.2c08155.

© **Н. С. Пузанов** – аспирант кафедры Неорганической химии и химической технологии (НХХТ), Воронежский государственный университет инженерных технологий (ВГУИТ), Воронеж, Россия, nikolaidealux@mail.ru; **К. Б. Ким** – к.х.н., доцент кафедры НХХТ, ВГУИТ, kmkseniya@yandex.ru; **М. С. Игумнов** – ассистент кафедры НХХТ, ВГУИТ; аспирант кафедры Химико-биологических дисциплин и фармакологии, Елецкий государственный университет им. И.А. Бунина, Елец, Россия, mi9umnov@yandex.ru; **С. И. Нифталиев** – д.х.н., профессор, заведующий кафедрой НХХТ, ВГУИТ, niftaliev@gmail.com.

© **N. S. Puzanov** – PhD-student, Department of Inorganic Chemistry and Chemical Technology (ICCT), Voronezh State University of Engineering Technologies (VSUET), Voronezh, Russia, nikolaidealux@mail.ru; **K. B. Kim** – PhD (Chemical Sci.), Associate Professor, Department of ICCT, VSUET, kmkseniya@yandex.ru; **M. S. Igumnov** – Assistant at the ICCT department, VSUET; PhD-student at the Department of Chemical-Biological Disciplines and Pharmacology, Yelets State University named after I.A. Bunin, Yelets, Russia, mi9umnov@yandex.ru; **S. I. Niftaliev** – Doctor of Sciences (Chemical Sci.), Professor, Head of the ICCT department, VSUET, niftaliev@gmail.com.

Дата поступления рукописи в редакцию – 14.01.26.

Дата принятия рукописи в печать – 13.02.26.