

УДК 541.18

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ПРОЦЕССА АДСОРБЦИИ НА ГРАНИЦЕ РАЗДЕЛА ФАЗ ТВЕРДОЕ ТЕЛО – ГАЗ

© В.П. Дудаков, Д.М. Шлыков

Ключевые слова: адсорбция, граница раздела твердое тело – газ.

Рассмотрен процесс адсорбции многокомпонентной газовой смеси на границе раздела твердое тело – газ. Разработан алгоритм и математическая модель процесса адсорбции вредных примесей из воздушной среды. Проведено исследование воздействия основных факторов на протекание процесса адсорбции.

Рассмотрим процесс адсорбции на границе раздела фаз твердое тело – газ, используя классические теории адсорбции, с поправочными коэффициентами и разработаем математическую модель данного процесса [1–12].

Для модели исходя из области ее применения сформулированы следующие требования, наша модель должна решать задачу по нахождению количества воздуха (V), очищенного от примесей на адсорбере. Для решения этой задачи нам необходимо знать концентрацию примесей (C), содержащимся в воздухе, массу (m) адсорбента и его удельную активную поверхность, температуру (T), при которой будет протекать процесс адсорбции, и константы эмпирического уравнения Фрейндлиха (K и n), найденные экспериментально при данной температуре.

Сначала рассчитаем изотерму адсорбции при различных концентрациях в пределах 1...10 ($\text{кг}/\text{м}^3$). Для этого воспользуемся эмпирическим уравнением изотермы адсорбции Фрейндлиха [1]:

$$\Gamma = KC^{1/n}. \quad (1)$$

После подсчетов мы получим ряд значений Γ при различных концентрациях, где Γ – величина адсорбции газа.

Следующим шагом необходимо рассчитать по спрямленной форме уравнения изотермы адсорбции Ленгмюра предел адсорбции [2]. Размерность найденной величины (кг газа/ кг адсорбента).

$$\frac{C}{\Gamma} = \frac{1}{\Gamma_m b} + \frac{1}{\Gamma_m} \cdot C. \quad (2)$$

Для этого воспользуемся методом наименьших квадратов для линейной зависимости. При этом достаточно использовать 5–10 значений. Будем использовать 10 значений, т. е. n будет равным 10.

В данной модели в уравнении линейной зависимости $y^* = a + bx$ коэффициент, a был заменен на поправочный коэффициент, равный $\ln(p \cdot M_x)$, для уменьшения погрешности.

В связи с этим после вышеперечисленных преобразований система получилась следующего вида:

$$\begin{cases} \frac{M_y - b \cdot M_x - \ln(p \cdot M_x)}{p} = 0, \\ M_{xy} - M_{x^2} \cdot b - n \cdot \ln(p \cdot M_x) M_x = 0. \end{cases} \quad (3)$$

Для решения полученной системы нелинейных уравнений воспользуемся методом Ньютона.

После расчетов всех сумм и решения системы нелинейных уравнений мы найдем $x = 1/\Gamma_m$. Найдя из этого отношения величину предела адсорбции Γ_m , мы сможем рассчитать объем воздуха, очищенного в адсорбере. Количество газа Q , которое может быть адсорбировано на адсорбенте, рассчитывается по формуле:

$$Q = g \cdot \Gamma_m, \quad (4)$$

где g – масса адсорбента (кг).

Зная Q , можно найти объем очищенного воздуха по формуле:

$$V = \frac{Q}{c}, \quad (5)$$

где c – концентрация газа в воздухе ($\text{м}^3/\text{кг}$).

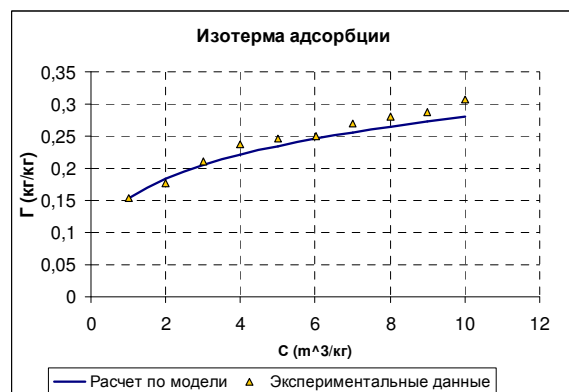


Рис. 1. Изотерма адсорбции сероуглерода на активированном угле при температуре 20 °C

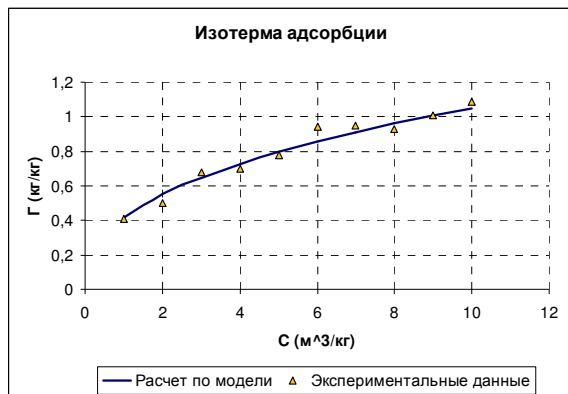


Рис. 2. Изотерма адсорбции углекислого газа на активированном угле при температуре равной 20 °С

Основное требование, предъявляемое к математической модели, – адекватность рассматриваемому процессу, явлению, т. е. она должна достаточно точно (в рамках допустимой погрешности) отражать характерные черты явления. Вместе с тем она должна обладать сравнительной простотой и доступностью исследования.

Адекватность и сравнительная простота модели не исчерпывают предъявляемых к ней требований. Необходимо обратить внимание на правильность оценки области применимости математической модели. По-

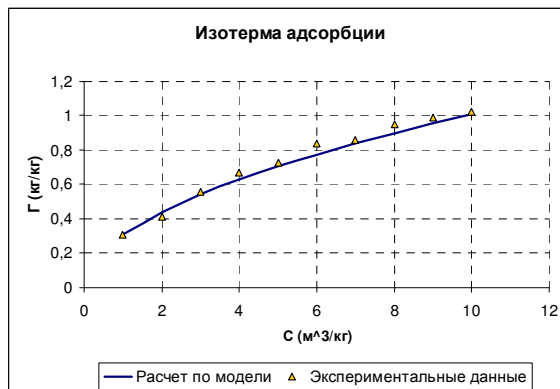


Рис. 3. Изотерма адсорбции водорода на активированном угле при температуре 20 °С

этому перечислим допущения, принятые в математической модели:

1) расчеты в модели ведутся с учетом того, что температура берется величиной постоянной ($T = \text{const}$);

2) так как в модели используется эмпирическое уравнение Фрейндлиха, то надо учитывать, что это уравнение не отражает особенностей адсорбционной изотермы в области низких и в области высоких давлений. Но для обширной области промежуточных давлений оно хорошо согласуется с опытными данными.

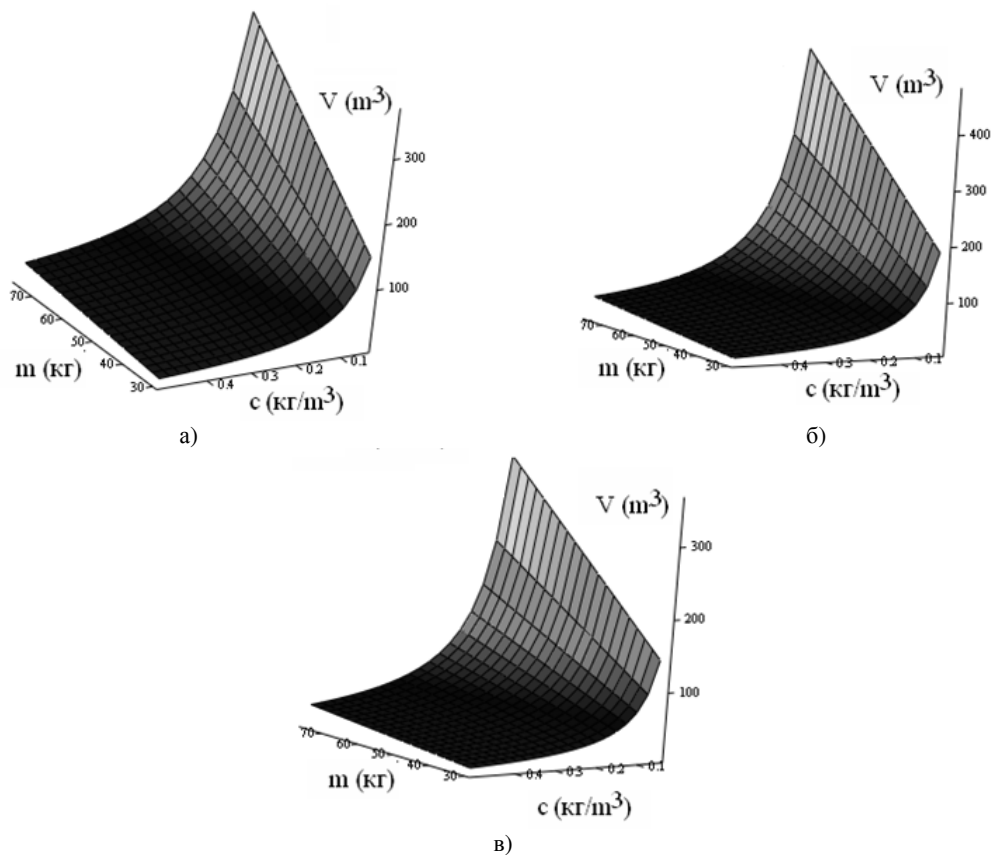


Рис. 4. Поверхность отклика изменения объема воздуха на изменения концентрации вредных примесей и массы адсорбента: а) сероуглерода на активированном угле; б) углекислого газа на активированном угле; в) водорода на активированном угле

На рис. 1–3 показаны рассчитанные данные по математической модели и экспериментальные данные изотерм адсорбции различных газов на активированном угле при постоянной температуре. Из графиков видно, что данные, полученные с помощью модели, хорошо согласуются с экспериментальными данными [3–6]. После подсчетов мы получили следующие средние относительные значения погрешностей:

$\varepsilon = 4,2053 \%$ – для сероуглерода на активированном угле (при максимальной погрешности $\varepsilon_{max} = 8,5923 \%$),

$\varepsilon = 3,8825 \%$ – для углекислого газа на активированном угле (при максимальной погрешности $\varepsilon_{max} = 8,9988 \%$),

$\varepsilon = 3,1173 \%$ – для водорода на активированном угле (при максимальной погрешности $\varepsilon_{max} = 7,6374 \%$).

Таким образом, данная математическая модель с принятыми допущениями хорошо согласуется с экспериментальными данными, что говорит о возможности применения ее для расчетов адсорбентов.

Наиболее интересной задачей является исследование зависимости процесса адсорбции от изменения нескольких входных параметров.

На рис. 4 изображены поверхности отклика изменения объема очищенного воздуха на изменения концентрации вредных примесей и массы адсорбента. Видно, что присутствует очевидная линейная зависимость между массой вещества и объемом очищенного воздуха. Так же присутствует обратная зависимость между концентрацией вредного вещества и количеством очищенного воздуха. Заметим, что увеличение массы значительно меньше влияет на очистку воздуха, чем увеличение концентрации вредных примесей.

Таким образом, выполненные с помощью математической модели исследования позволили проанализи-

ровать влияние наиболее значимых факторов на процесс очистки воздуха от вредных примесей с принятыми допущениями.

ЛИТЕРАТУРА

1. Хмельницкий Р.А. Физическая и коллоидная химия. М., 1988.
2. Цыганкова Л.Е. Сборник задач по адсорбции и коллоидной химии. Тамбов, 2000.
3. Волков В.А. Задачи и расчеты по коллоидной химии. М., 2005.
4. Кудряшов И.В. Сборник примеров и задач по физической химии. М., 1991.
5. Равдель А.А. Справочник физико-химических величин. М., 2002.
6. Фридрихсберг Д.А. Курс коллоидной химии. Л., 1994.
7. Бекман И.Н. Диагностика базальтовых волоконных адсорбентов // Вестн. Моск. ун-та. Сер. 2. Химия. 2003. Т. 44. № 5.
8. Воскресенская Н.И., Шепелев А.Н., Левит М.З. Активированный уголь как средство очистки выбросов при производстве фриക്ഷонных изделий // Экология и промышленность России. 2006. Май.
9. Киреев В.А. Краткий курс физической химии. М., 1978.
10. Лукьянов А.Б. Физическая и коллоидная химия. М., 1988.
11. Полтораки О.М. Термодинамика в физической химии. М., 1991.
12. Роцина Т.М. Адсорбционные явления и поверхность // Соросовский Образовательный журнал. 1998. №2.

Поступила в редакцию 25 августа 2008 г.

Dudakov V.P., Shlykov D.M. Mathematical model of adsorption process on the border of phase division solid body - gas. Adsorption process of a multicomponent gas mix on the border of division solid body - gas is considered in the paper. An algorithm and mathematical model of adsorption process of harmful admixtures from the air medium is developed. Influence of major factors on adsorption process course is studied.

Key words: adsorption, border of phase division solid body – gas.