

УДК 519.95

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ПРОЦЕССА АДсорбЦИИ

© В.П. Дудаков

Ключевые слова: адсорбция; математическая модель; поглощение; адекватность; фильтрация. В работе рассматривается применение математического моделирования для расчетов некоторых параметров адсорбции. На примере математической модели адсорбции на границе раздела фаз твердое тело – газ.

Явление адсорбции широко изучалось учеными начиная с XVIII в. [1–6]. Этот процесс находит широкое применение в экологическом аспекте химии, т. к. очень часто входит в процесс очистки сырья. В данной работе рассматривается разработка математической модели процесса адсорбции на границе раздела фаз твердое тело – газ, используя классические теории адсорбции с поправочными коэффициентами.

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.

Модель должна решать задачу по нахождению количества воздуха (V), очищенного от примесей на адсорбере. Для решения этой задачи необходимо знать концентрацию примесей (C), содержащегося 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.

Вначале необходимо рассчитать изотерму адсорбции при различных концентрациях в пределах 1...10 (кг/м³). Для этого воспользуемся эмпирическим уравнением изотермы адсорбции Фрейндлиха:

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

После подсчетов мы получим ряд значений Γ при различных концентрациях.

Следующим шагом необходимо рассчитать по спрямленной форме уравнение изотермы адсорбции Ленгмюра предел адсорбции.

$$\frac{C}{\Gamma} = \frac{1}{\Gamma_m b} + \frac{1}{\Gamma_m} \cdot C.$$

Для этого воспользуемся методом наименьших квадратов.

В результате находим величину предела адсорбции Γ_m , и сможем теперь рассчитать объем воздуха, очищенного в адсорбере.

Количество газа Q , которое может быть адсорбировано на адсорбенте, рассчитывается по формуле:

$$Q = g \cdot \Gamma_m,$$

где g – масса адсорбента (кг).

Зная Q , можно найти объем очищенного воздуха по формуле:

$$V = \frac{Q}{c},$$

где c – концентрация газа в воздухе ($m^3 / кг$).

Необходимо обратить внимание на правильность оценки области применимости математической модели. Поэтому 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.

На рис. 1–3 показаны расчетные 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, взятыми в работах [7–9].

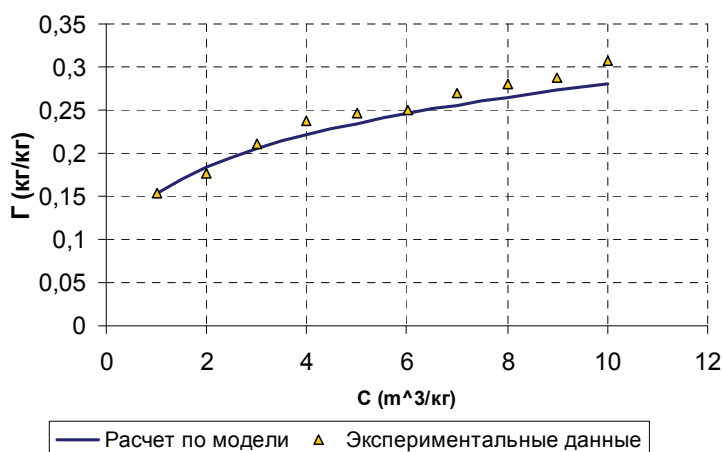


Рис. 1. Изотерма адсорбции сероуглерода на активированном угле при температуре 20 °С

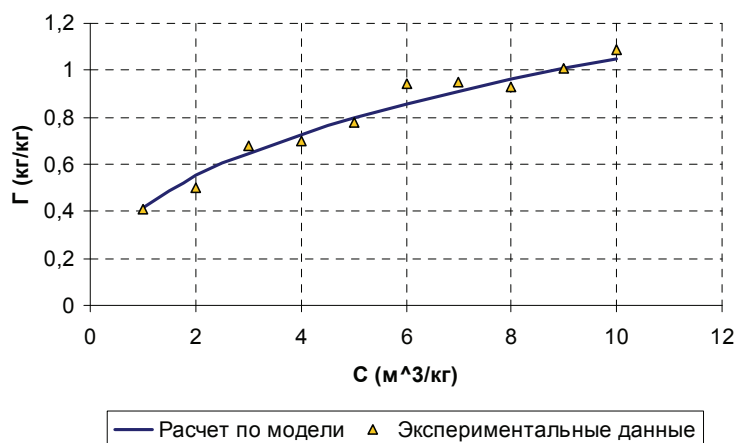


Рис. 2. Изотерма адсорбции углекислого газа на активированном угле при температуре равной 20 °С

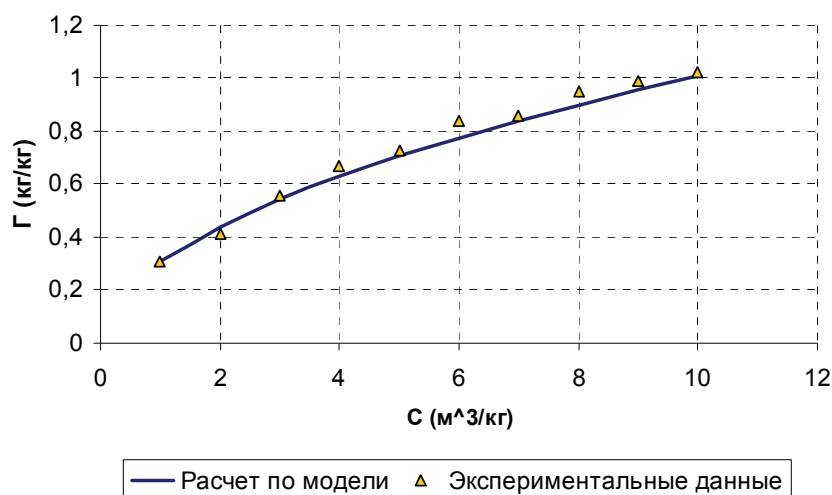


Рис. 3. Изотерма адсорбции водорода на активированном угле при температуре 20 °С

Для того чтобы оценить, насколько хорошо модель представляет реальный процесс, вычислим среднюю относительную погрешность по следующей формуле:

$$\varepsilon = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left| \frac{y - y^*}{y} \right| \cdot 100 \%,$$

где y – экспериментальные данные, y^* – данные, рассчитанные по модели.

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 $\varepsilon_{\max} = 7,6374\%$).

Допустимый уровень этого критерия – от 5 до 10 %.

Таким образом, данная математическая модель с принятыми допущениями хорошо согласуется с экспериментальными данными, что говорит о ее применимости для расчетов в рамках рассмотренных ограничений.

ЛИТЕРАТУРА

1. Волков В.А. Задачи и расчеты по коллоидной химии. М., 2005.
2. Воскресенская Н.И., Шепелев А.Н., Левит М.З. Активированный уголь как средство очистки выбросов при производстве фрикционных изделий // Экология и промышленность России. 2006. Май.
3. Кудряшов И.В. Сборник примеров и задач по физической химии. М.: Высш. шк., 1991.
4. Лукьянов А.Б. Физическая и коллоидная химия. М.: Химия, 1988.
5. Равдель А.А. Справочник физико-химических величин. М.: Высш. шк., 2002.
6. Роцина Т.М. Адсорбционные явления и поверхность // Соросовский Образовательный журнал. 1998. № 2.
7. Киреев В.А. Краткий курс физической химии. М.: Химия, 1978.
8. Полторак О.М. Термодинамика в физической химии. М.: Высш. шк., 1991.
9. Фридрихсберг Д.А. Курс коллоидной химии. Л.: Химия, 1994.

Поступила в редакцию 25 августа 2010 г.

Dudakov V.P. Mathematical model of adsorption process

The paper examines the application of mathematical modeling for the calculation of some parameters of adsorption. On example of mathematical model of adsorption at the border of solid body – gas.

Key words: adsorption; mathematical model; absorption; adequacy; filtering.