

# Προσομοίωση & Βελτιστοποίηση Βιομηχανικών Διεργασιών

---

Βελτιστοποίηση Στήλη Προσρόφησης

# Προσρόφηση

---

- Προσρόφηση: συσσώρευση διαλυμένων μορίων στη διεπιφάνεια, συνήθως στερεού-υγρού και στερεού-αερίου με αποτέλεσμα την κατανομή των μορίων μεταξύ στερεού και ρευστού.
- Προσροφητική ουσία (adsorbate): η ουσία που αφαιρείται από την υγρή ή αέρια φάση κατά την αλληλεπίδραση και συγκρατείται από το προσροφητικό μέσο.
- Προσροφητικό μέσο (adsorbent): το στερεό πάνω στο οποίο συσσωρεύεται η προσροφητική ουσία.

ΜΕΙΟΝΕΚΤΗΜΑ: κορεσμός προσροφητικού υλικού

# Προσρόφηση

- Πολλά στερεά σώματα χρησιμοποιούνται ως προσροφητικά μέσα για την απομάκρυνση διαφόρων προσμίξεων από υγρά.
- Τα κοινά προσροφητικά μέσα έχουν κατά κανόνα **μεγάλη επιφάνεια ανά μονάδα μάζας**, ενώ τα πιο γνωστά από αυτά είναι το πυρίτιο (silica gel), το ενεργό αλουμίνιο ή ενεργή αλουμίνα (activated alumina) και ο ενεργός άνθρακας (activated carbon).
- Ο ενεργός άνθρακας χρησιμοποιείται ευρύτατα σαν προσροφητικό μέσο στη διαδικασία καθαρισμού του νερού και στις αντιασφυξιογόνες μάσκες.

# ΕΝΕΡΓΟΣ ΑΝΘΡΑΚΑΣ ΓΙΑ ΤΗΝ ΑΠΟΜΑΚΡΥΝΣΗ ΤΩΝ ΧΡΩΣΤΙΚΩΝ

Προσροφητικό Μέσο	Ικανότητα Προσρόφησης $q_m$ (mg g <sup>-1</sup> )	Πηγή
Ενεργός άνθρακας (εμπορίου)	400	Kumar et al., 2006
Ίνες φοινικέλαιου	400	Hameed et al., 2008
Κουκούτσια ροδάκινου	412	Attia et al., 2008
Φλοιός ρυζιού	343,50	Kannan and Sundaram, 2001
Κέλυφος κακάου (Theobroma cacao)	212,77	Fisal et al., 1999

# ΕΝΕΡΓΟΣ ΑΝΘΡΑΚΑΣ ΓΙΑ ΤΗΝ ΑΠΟΜΑΚΡΥΝΣΗ Cr (VI)

Προσροφητικό Μέσο	Ικανότητα Προσρόφησης $q_m$ (mg g <sup>-1</sup> )	Πηγή
Κατακάθι φυκιών	155,52	Zhang et al., 2010
Φλοιός ρυζιού	48,31	Bansal et al., 2009
Lognan σπόρος	35,02	Yang et al., 2014
Φλοιός φιστικιού	16,26	Al-Othman et al., 2012

# ΕΝΑΛΛΑΚΤΙΚΑ ΠΡΟΣΡΟΦΗΤΙΚΑ ΥΛΙΚΑ ΓΙΑ ΤΗ ΑΠΟΜΑΚΡΥΝΣΗ ΤΩΝ ΧΡΩΣΤΙΚΩΝ

Προσροφητικό Μέσο	Ικανότητα Προσρόφησης $q_m$ (mg g <sup>-1</sup> )	Πηγή
Πολτός ζαχαρότευτλων	244,6	Malekbana et al., 2012
Κότσαλο βαμβακιού	555,56	Deng et al., 2012
Φλοιός ρυζιού	312	McKay et al., 1994
Κατακάθι τσαγιού	242,11	Nasuha and Hameed 2011
Κατακάθι καφέ	240	Kyzas et al., 2012

# ΕΝΑΛΛΑΚΤΙΚΑ ΠΡΟΣΡΟΦΗΤΙΚΑ ΥΛΙΚΑ ΓΙΑ ΤΗ ΑΠΟΜΑΚΡΥΝΣΗ Cr (VI)

Προσροφητικό Μέσο	Ικανότητα Προσρόφησης $q_m$ (mg g <sup>-1</sup> )	Πηγή
Πίτουρο σιταριού	282,54	Singh et al., 2009
Κατακάθι τσαγιού	29,76	Dizadji et al., 2011
<i>Tamarindus indica</i> σπόροι	98,04	Agarwal et al., 2006
Φλοιός καρυδιού	98,13	Wang et al., 2009
Σπιρουλίνα	16,7	Finocchio et al., 2010

# Προσρόφηση

---

- Το φαινόμενο της προσρόφησης παρατηρήθηκε αρχικά στις επιφάνειες στερεών ουσιών, οι οποίες είναι πηγές ελκτικών δυνάμεων, γιατί τα άτομα τους συνορεύουν μονόπλευρα με τα ομοειδή άτομα του πλέγματος του στερεού.
- Κατά αυτό τον τρόπο όμως δημιουργούνται ελεύθερες μονάδες συγγένειας στην επιφάνεια του στερεού, η οποία μπορεί να συγκρατεί ξένα μόρια ή άτομα πολύ ισχυρά.

# Προσρόφηση – Απορρόφηση

---

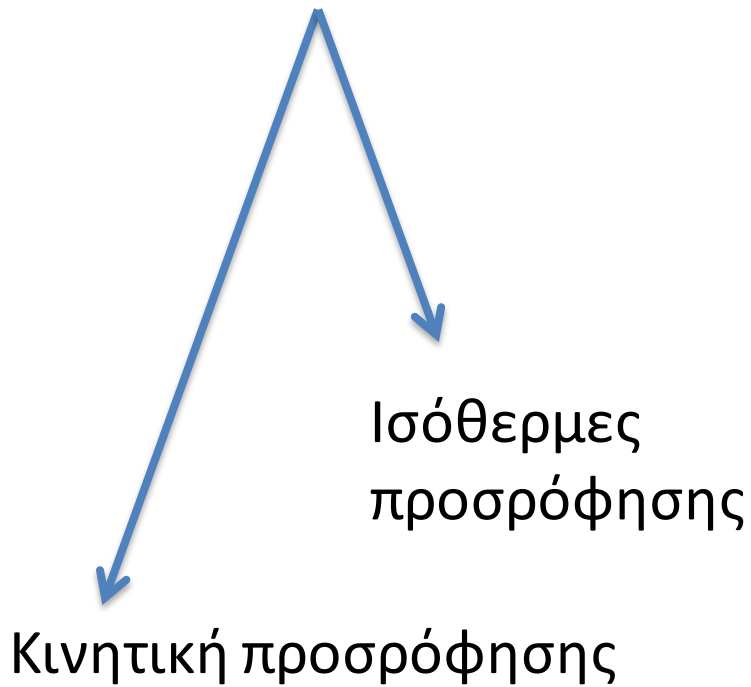
Το φαινόμενο της προσρόφησης συχνά συγχέεται με αυτό της απορρόφησης, οπότε θα ήταν σκόπιμο να διευκρινίσουμε την διαφορά μεταξύ των δυο φαινομένων.

- **Απορρόφηση** λέγεται το φαινόμενο κατά το οποίο τα μόρια της ξένης ουσίας εισέρχονται (διεισδύουν) ανάμεσα στα μόρια του απορροφητικού μέσου.
- Η **προσρόφηση** αντιθέτως είναι ένα επιφανειακό φαινόμενο, αφού η προσροφούμενη ουσία συσσωρεύεται στην επιφάνεια του προσροφητικού μέσου.

# Διεργασίες Προσρόφησης

---

Διαλείποντος έργου



Συνεχούς έργου



# Αντιδραστήρες

---

- Οι αντιδραστηρές διαλείποντος έργου (batch reactor) θεωρούνται κλειστά συστήματα, γιατί κατά την διάρκεια λειτουργίας τους δεν υπάρχουν εισερχόμενες και εξερχόμενες ροές.
- Οι αντιδραστήρες συνεχούς λειτουργίας είναι ένα ανοικτό σύστημα που λειτουργεί συνεχώς με μία συνεχή εισαγωγή και εκροή των ρευστών φάσεων.



# Επεξεργασία Πειραματικών Αποτελεσμάτων

- Καταγράφουμε τις μετρήσεις (απορρόφηση ABS, συγκέντρωση C) που προέκυψαν. Θα ισχύει:

$$C = C_0 \cdot \left( A \cdot e^{-r \cdot t} + 1 \right)^{-\frac{1}{n-1}}$$

- Η παραπάνω σχέση λογαριθμιζόμενη δίνει:

$$\ln \left[ \left( \frac{C_i}{C} \right)^{n-1} - 1 \right] = \ln A - r \cdot t$$

# Επεξεργασία Πειραματικών Αποτελεσμάτων

Η οποία με γραμμική παλινδρόμηση δίνει τις τιμές του  $A$  και του  $r$  για την βέλτιστη προσαρμογή θεωρητική καμπύλης και πειραματικών αποτελεσμάτων. Επίσης η αρχική σχέση μπορεί να επιλυθεί ως προς  $C$  και να χρησιμοποιηθεί για τον υπολογισμό της θεωρητικής τιμής της συγκέντρωσης  $C_{\theta\epsilon\omega\rho}$

$$C_{\theta\epsilon\omega\rho} = C_i \cdot \left( A \cdot e^{-r \cdot t} + 1 \right)^{-\frac{1}{n-1}}$$

όπου  $C$ ,  $C_i$  οι συγκεντρώσεις του methylene blue ή red reactif 195 ( $C$  εκροής,  $C_i$  εισροής),  $t$  ο χρόνος,  $n$  το αντίστροφο της κλίσης της ισόθερμου προσρόφησης του Freundlich,  $A$  συντελεστής και  $r$  μια σταθερά.

## ΙΣΟΘΕΡΜΗ Freundlich

---

$$q = K_F (C_e)^{1/n}$$

**$q$**  : η ποσότητα της προσροφούμενης ουσίας ανά μονάδα μάζας του προσροφητικού υλικού ( $\text{mg g}^{-1}$ )

**$C_e$**  : η συγκέντρωση ισορροπίας της προσροφούμενης ουσίας στο διάλυμα ( $\text{mg L}^{-1}$ ) για χρόνο  $t \rightarrow \infty$

**$1/n$**  : η κλίση της ισόθερμης Freundlich και αποτελεί ένδειξη της ενέργειας προσρόφησης (αδιάστατη παράμετρος)

**$K_F$**  : ο συντελεστής της ισόθερμης Freundlich ( $\text{mg}^{1-1/n} \text{g}^{-1} \text{L}^{1/n}$ )

## ΙΣΟΘΕΡΜΗ Langmuir

---

$$\frac{1}{q} = \left( \frac{1}{q_m} \right) + \left( \frac{1}{K_L q_m} \right) \cdot \left( \frac{1}{C_e} \right)$$

$K_L$ : ο συντελεστής της ισόθερμης Langmuir που σχετίζεται με την ενέργεια της προσρόφησης ( $L \text{ mg}^{-1}$ )

$q_m$ : η συντελεστής της ισόθερμης Langmuir που σχετίζεται με την ποσότητα της ουσίας που προσροφήθηκε ( $\text{mg g}^{-1}$ ) όταν ολοκληρώθηκε επιτυχώς η προσρόφηση του χρώματος-μετάλλου

## ΙΣΟΘΕΡΜΗ Sips

$$q = \frac{q_m \cdot (K_L \cdot C_e)^{1/n}}{1 + (K_L \cdot C_e)^{1/n}}$$

$K_L$ : ο συντελεστής της ισόθερμης που σχετίζεται με την ενέργεια της προσρόφησης ( $L \text{ mg}^{-1}$ )

$q_m$ : ο συντελεστής της ισόθερμης Langmuir που σχετίζεται με την ποσότητα της ουσίας που προσροφήθηκε ( $\text{mg g}^{-1}$ ) όταν ολοκληρώθηκε ο χρωματικός διαποτισμός.

$1/n$ : είναι η κλίση της ισόθερμης και αποτελεί ένδειξη της ενέργειας προσρόφησης.

$C_e$ : η συγκέντρωση ισορροπίας της προσροφούμενης ουσίας στο διάλυμα ( $\text{mg L}^{-1}$ ) για χρόνο  $t \rightarrow \infty$

## ΤΥΠΙΚΟ ΣΦΑΛΜΑ ΑΠΟΚΛΙΣΗΣ

---

$$SEE = \sqrt{\sum_{i=1}^{n'} (y_i - y_{i,theor})^2 / (n' - p')}$$

$y_i$  : η πειραματική τιμή της εξαρτημένης μεταβλητής

$y_{i,theor}$  : είναι η θεωρητική ή εκτιμώμενη αξία της εξαρτημένης μεταβλητής

$n$ : ο αριθμός των πειραματικών μετρήσεων

$p$  : ο αριθμός των παραμέτρων (η διαφορά  $n$ -είναι ο αριθμός των βαθμών ελευθερίας)

## Bohart-Adams Model

---

$$\ln\left(\frac{C_i}{C} - 1\right) = \frac{K \cdot N \cdot x}{u} - K \cdot C_i \cdot t$$

**C** : η συγκέντρωση εκροής (mg L<sup>-1</sup>)

**C<sub>i</sub>** : η συγκέντρωση εισροής (mg L<sup>-1</sup>)

**K** : ο συντελεστής ρυθμού προσρόφησης (L/mg·min)

**N** : ο συντελεστής απόδοσης προσρόφησης (mg L<sup>-1</sup>)

**V** : η γραμμική ταχύτητα (cm min<sup>-1</sup>)

**T** : ο χρόνος (min)

**x** : το ύψος της στήλης προσρόφησης (cm)

## Clark Model

---

$$\frac{C}{C_i} = \left( \frac{1}{1 + Ae^{-rt}} \right)^{1/(n-1)}$$

$r, A$  : σταθερές της συνάρτησης

$n$  : το αντίστροφο της κλίσης στην ισόθερμη Freundlich

Η σταθερά  $A$  ορίζεται από σχέση  $A = e^a = e^{KNx/V}$  και  $r = b = K C_i$

## Modified Dose-Response (MDR) Model

---

$$\frac{C}{C_i} = 1 - \frac{1}{1 + (V / b_{mdr})^{\alpha_{mdr}}}$$

$b_{mdr} = C / (q_o M)$  και  $\alpha_{mdr}$  είναι οι σταθερές δόσεις-απόκρισης