

Розглянуто проблему математичного опису адсорбційного розділення суміші газів HFC-134 та HFC-134a. Наведені результати дослідження моделей, що описують ізотерми адсорбції HFC-134 та HFC-134a на цеоліті NaY

Ключові слова: тетрафторетан, адсорбція, математична модель

Рассмотрена проблема математического описания адсорбционного разделения смеси газов HFC-134 и HFC-134a. Приведены результаты исследования моделей, описывающих изотермы адсорбции HFC-134 и HFC-134a на цеолите NaY

Ключевые слова: тетрафторэтан, адсорбция, математическая модель

The problem of mathematical description of the adsorption separation for gas mixtures HFC-134 and HFC-134a is considered. The results of models describing studies for adsorption isotherm HFC-134 and HFC-134a on zeolite NaY is given

Keywords: tetrafluoroethane, adsorption, mathematical model

АНАЛІЗ ПАРАМЕТРІВ МАТЕМАТИЧНОЇ МОДЕЛІ АДСОРБЦІЇ ТЕТРАФТОРЕТАНУ НА ЦЕОЛІТІ NaY

М.З. Кваско

Кандидат технічних наук, професор*

О.С. Жураковська

Кандидат технічних наук, доцент

Кафедра автоматизованих систем обробки інформації і управління**

Контактний тел.: (044) 245-79-89, 068-354-01-06

E-mail: oxana@asu.ntu-kpi.kiev.ua

Я.Ю. Жураковський

Старший викладач*

Контактний тел.: (044) 245-79-89, 068-376-47-56

E-mail: zhurakovsky@bigmir.net

*Кафедра автоматизації хімічних виробництв**

**Національний технічний університет України

«Київський політехнічний інститут»

пр. Перемоги, 37, м. Київ, 03056

1. Вступ

Тetraфторетан (CH₂FCF₃) – (1,1,2,2-тетрафторетан) є хладагентом для холодильників та кондиціонерів. Він був розроблений для заміни хлорфторуглеводів, таких як діхлордифторметан (Фреон R12), шкідливих для навколишнього середовища. Розв'язання задач пов'язаних із виробництвом, використанням та утилізацією цієї речовини є актуальними для сучасної інженерної науки.

Ізомер HFC-134 (CHF₂CHF₂) (1,1,1,2-тетрафторетан), який не використовується як хладагент, є побічним продуктом виробництва HFC-134a [3]. Вимірювання ізотерм адсорбції HFC-134 і HFC-134a на ряді цеолітів необхідне для дослідження можливого застосування способу розділення цих газів за допомогою адсорбції.

2. Постановка задачі

У попередній роботі [1] були наведені дані експериментально отриманих ізотерм адсорбції ізомерів тетрафторетану HFC-134a та HFC-134 на цеоліті NaY при різних температурних режимах. Після отримання результатів вимірювань, постає питання обрання відповідного математичного рівняння, що адекватно описує ці результати. Існує багато моделей різного

ступеня складності - від повністю емпіричних до переважно теоретичних. У рамках цієї роботи розглянуто та перевірено відповідність деяких моделей адсорбційних ізотерм результатам практичних вимірювань.

3. Використані моделі

Була розглянута модель Тота (Toth) [2], що описується формулою:

$$n = \frac{n^0 p}{(1/K_1^* + p^m)^{1/m}} \quad (1)$$

де $1/K_1^*$ - константа; n^0 - навантаження насичення; m - емпіричний параметр ($0 < m < 1$).

Рівняння Тота було змінено із додаванням можливості підбирати параметри для функції, що описує залежність навантаження насичення від температури:

$$n^0 = n^* (1 - \alpha(T - T_{nbp})) \quad (2)$$

де T_{nbp} - температура кипіння; α , n^* - емпіричні параметри.

Константа K_1^* була описана функцією

$$K_1^* = \frac{1}{K_b} \exp\left(\frac{U_0}{RT}\right) \tag{3}$$

$$K_b = 2.346\sqrt{MT} \times 10^8 \tag{4}$$

де M – молярна маса; R – універсальна газова константа; U_0 – емпіричний параметр.

Для параметра m використано рівняння

$$m = m_1 - \frac{m_2}{T} \tag{5}$$

де m_1, m_2 - емпіричні параметри.

Рівняння Дубініна - Астахова, перетворене із урахуванням рівняння Клаузіуса - Клайпейрона до наступного вигляду:

$$n = \exp\left(C - D \left[\log \frac{p_c \exp(h(1 - T_c/T))}{p} \right]^m \right) \tag{6}$$

де C, D - емпіричні параметри, m - параметр, що характеризує тип комірок.

Критерієм підбору параметрів була мінімізація відносного квадратичного відхилення, що розраховане за формулою:

$$\Delta = \frac{(n(i)_{обч} - n(i)_{вим})^2}{n(i)_{вим}^2} \tag{7}$$

де $n(i)_{обч}$ – кількість адсорбованої речовини, що була розрахована; $n(i)_{вим}$ - кількість адсорбованої речовини за результатами експерименту.

4. Результати досліджень

Досліди проводилися для адсорбенту NaY при двох значеннях температури: 51 та 92°С.

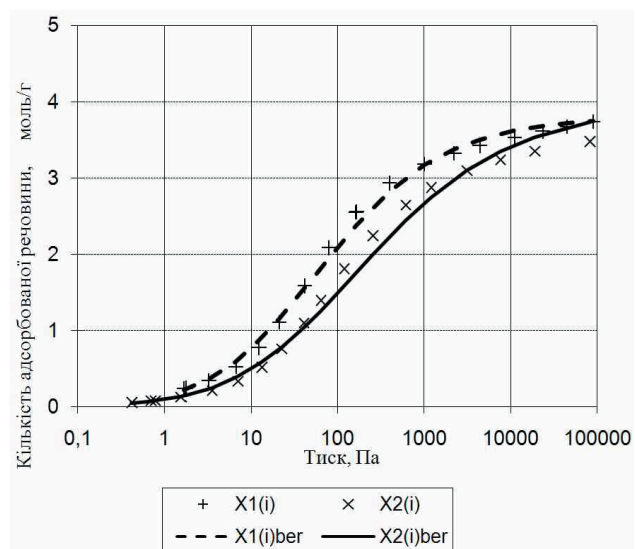


Рис. 1. Ізотерми адсорбції HFC-134 та HFC-134a на NaY при T=51°С: X1(i), X2(i) – експериментальні дані для HFC-134 та HFC-134a відповідно; X1(i)ber, X2(i)ber – дані, отримані за рівнянням Тота

В результаті досліджень були отримані ізотерми адсорбції HFC-134a та HFC-134 [1].

На рис. 1 представлені результати перевірки моделі Тота для отриманих експериментальних даних.

Значення параметрів для (1) були отримані шляхом мінімізації відносного квадратичного відхилення (7).

Для даного випадку $n^0 = 3,8$; $1/K_1^* = 5,47$; $m = 0,57$; середнє $\Delta = 0,004$.

На рис. 2 наведені результати використання моделі Дубініна-Астахова (6) для ізотерм адсорбції тетрафторетана на NaY при T=51°С. При цьому для параметрів моделі були отримані значення: C = 5,8; D = 0,09; m = 1,76.

Середнє відносне квадратичне відхилення складає 0,002.

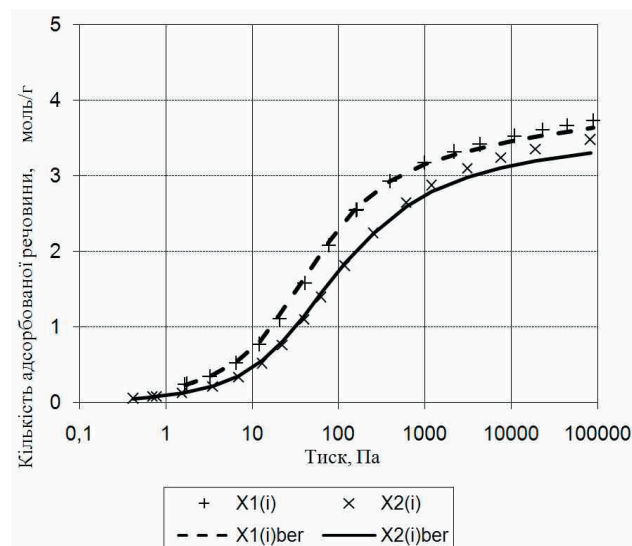


Рис. 2. Ізотерми адсорбції HFC-134 та HFC-134a на NaY при T=51°С: X1(i), X2(i) – експериментальні дані для HFC-134 та HFC-134a відповідно; X1(i)ber, X2(i)ber – дані, отримані за рівнянням Дубініна-Астахова

На рис. 3 наведені результати використання модифікованої моделі Тота для ізотерм адсорбції тетрафторетана на NaY при T=51°С.

При цьому для параметрів моделі були отримані значення: $U_0 = 52182,32$; $n^* = -0,044$; $\alpha = 1,2$; $m_1 = 3,37$; $m_2 = 912,5$; $n^0 = 3,8$; $K_1^* = 0,19$; $m = 0,56$.

Середнє відносне квадратичне відхилення складає 0,01.

Можна бачити, що всі три обрані для дослідження математичні моделі добре описують ізотерми адсорбції ізомерів тетрафторетану на цеоліті NaY при температурі 51°С.

Аналогічні результати були отримані при проведенні дослідження адсорбції при температурі 91°С.

Також добре узгоджуються значення емпіричних параметрів, отриманих для досліджуваних речовин при однакових температурах.

Мале значення середнього відносного квадратичного відхилення свідчить про якість підібраних параметрів моделей.

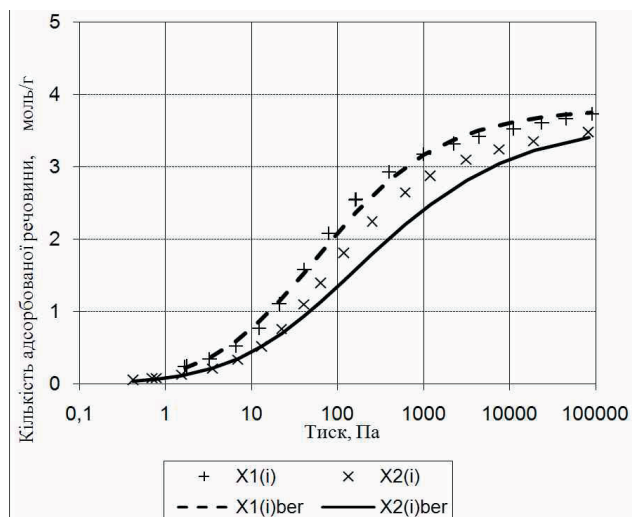


Рис. 3. Ізотерми адсорбції HFC-134 та HFC-134a на NaY при $T=51^{\circ}\text{C}$: $X1(i)$, $X2(i)$ – експериментальні дані для HFC-134 та HFC-134a відповідно; $X1(i)_{ber}$, $X2(i)_{ber}$ – дані, отримані за модифікованим рівнянням Тота

5. Висновки

Були проведені експерименти та отримані ізотерми адсорбції ізомерів тетрафторетану HFC-134a та HFC-134 на NaY в різних температурних режимах. Отримані ізотерми показують, що цеоліт NaY може бути застосований для розділення ізомерів тетрафторетану при їх виробництві, оскільки має чітко виражену селективність до HFC-134a. Крім того даний адсорбент може бути використаний в процесах пов'язаних із утилізацією даних фреонів і зменшення їх викидів у атмосферу.

Отримані результати можуть бути використані для синтезу систем управління процесами адсорбції як вихідні дані для розробки математичної моделі процесу, а також як складова бази знань про адсорбцію.

Були розглянуті математичні моделі процесу адсорбції: Тота, Дубініна-Астахова та модифікована модель Тота; показано, що вони добре описують експериментально отримані дані для однокомпонентної адсорбції ізомерів тетрафторетану.

Література

1. Кваско, М. З. Дослідження ізотерм адсорбції тетрафторетану на цеоліті NaY [Текст] / М. З. Кваско, О. С. Жураковська, Я. Ю. Жураковський // Рибне господарство України. – 2011. – № 2. – С. 48-52.
2. Mersmann A. Thermische Verfahrenstechnik: Grundlagen und Methoden / A. Mersmann, M. Kind, J. Stichlmair. – Springer Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 2005. – 644p.
3. Savitz S. Adsorption of Hydrofluorocarbons HFC-134 and HFC-134A on X and Y Zeolites: Effect of Ion-Exchange on Selectivity and Heat of Adsorption / S. Savitz, F. R. Siperstein, R. Huber, S. M. Tieri, R. J. Gorte, A. L. Myers, C. P. Grey, D. R. Corbin // J. Phys. Chem. B. – 1999. – Vol. 103, №39. – P. 8283-8289.