

## Treball final de màster

**Estudi:** Màster en Enginyeria Industrial

**Títol:** Estudi comparatiu de models de filtre per a l'adsorció de contaminants gasosos

**Document:** Resum

**Alumne:** Joan Anglada Lloveras

**Tutores:** Maria Agualeles Carrero i Esther Barrabés Vera  
**Departament:** Informàtica, Matemàtica Aplicada i Estadística  
**Àrea:** Matemàtica Aplicada

**Convocatòria (mes/any):** juny 2022

# Estudi comparatiu de models de filtre per a l'adsorció de contaminants gasosos

Joan Anglada Lloveras

9 de juny de 2022

## Introducció

Aquest projecte parteix de la necessitat de reduir les emissions de gasos contaminants a l'ambient, de manera que cal tenir sistemes de filtratge que puguin dur a terme la captació d'aquests contaminants. Així, també és necessari estudiar els principals fenòmens que tenen lloc en aquest tipus de sistemes, que són l'adsorció, la desorció, la difusió i el transport del contaminant pel flux gasós. A partir d'aquest estudi es poden deduir models matemàtics d'aquests sistemes de filtració que permetin predir el comportament d'un sistema de captació de contaminant real. D'una banda, els models que en resultin hauran de ser tan simples com sigui possible sense que es perdi coherència amb la realitat, permetent així una reducció del nombre d'experiments de laboratori necessaris per al disseny d'un filtre d'adsorció, i de l'altra aproximar la seva vida útil en diverses condicions de treball.

Els objectius que ens hem proposat per aquest projecte són els d'estudiar els fenòmens en què es basa la captació d'un contaminant per una matriu sòlida adsorbent, deduir un model general (Langmuir complet) i dos més amb algunes simplificacions (Langmuir simplificat i Bohart-Adams), i analitzar aquests tres models numèricament (programant codis MATLAB adients), per tal d'obtenir corbes de la concentració de contaminant a la sortida del filtre. A partir d'aquests resultats obtinguts per a diferents concentracions d'entrada de contaminant, aquests es compararan amb els models amb dades experimentals cedides pel LEQUIA (Laboratori d'Enginyeria Química Ambiental, UdG). Finalment, de les exploracions i comparatives fetes, deduirem el model que sigui més fidel a la realitat. Tenir un model que s'ajusti a la realitat és molt important ja que permet escalar-lo per poder conèixer el comportament del filtre sota unes condicions diferents de les dels assaigs i evitar haver de fer múltiples experiments al laboratori, amb els conseqüents costos de temps i material.

Per tal de dur a terme tots aquests propòsits, primer cal deduir les equacions que governen aquest procés de captació de gasos contaminants. Per tal d'obtenir sistemes que siguin tractables, hem tingut en compte un conjunt d'hipòtesis i simplificacions del model real: la matriu sòlida té un volum constant al llarg del temps, el coeficient de la difusió també és constant, la matriu adsorbent es considera homogèniament distribuïda, el límit màxim d'adsorció és constant, la geometria de la columna és axisimètrica (és a dir, es considera un cilindre), la velocitat del flux gasós és baixa, constant i segueix una trajectòria axial i, finalment, les partícules del gas no interactuen amb les parets de la columna. Amb aquestes hipòtesis, per exemple considerem que les variables depenen de la variable longitudinal del filtre i no la radial. Malgrat la reducció de la complexitat, els models que s'obtenen no són prou simples per obtenir solucions explícites de forma analítica i, per aquest motiu, hem utilitzat mètodes numèrics per tal d'obtenir solucions aproximades.

Aquests models, que permeten calcular la concentració del contaminant gasós a la sortida de la columna d'adsorció, també serveixen per calcular l'evolució de la concentració i de la quantitat adsorbida de contaminant per a cada instant de temps i cada secció del filtre. A més, depenen de diversos paràmetres com són el coeficient de difusió, la fracció de buit que deixa la matriu sòlida a l'interior de la columna, la velocitat del gas, les constants d'adsorció i de desorció, la massa molar del contaminant, entre d'altres. En el nostre cas, hem fet servir els paràmetres de la columna d'adsorció que utilitzen al grup LEQUIA de la UdG, i hem considerat com a gas contaminant el toluè, que és amb el que el grup LEQUIA fa els assajos. D'aquesta manera podrem fer la comparació de les corbes teòriques dels models amb les dades experimentals del laboratori i, així, poder comprovar quin és el model que millor s'ajusta a la realitat.

Per acabar d'acotar l'abast d'aquest projecte, només hem tingut en compte un sol gas contaminant, de manera que no hem tingut en compte possibles interaccions que hi poden haver quan es tracten diversos contaminants alhora. Els models obtinguts són isotèrmics, és a dir, no es tenen en compte ni possibles variacions de temperatura externes ni les que serien provocades per la reacció d'adsorció.

## Modelització matemàtica

Per a l'obtenció dels 3 models matemàtics que hem deduït, ens basem en un contenidor cilíndric anomenat columna que a dins hi té una matriu sòlida adsorbent, que és d'un material amb una gran àrea superficial, com el carbó actiu, i on s'adhereixen les molècules del gas contaminant. A través de la columna s'hi fa passar un fluid gasós que consta d'un gas inert (que no interactua amb el filtre) i un gas contaminant (que és adsorbit per la matriu). En el nostre cas, no estudiem la columna com un únic element sinó que l'analitzem a partir de les característiques i variables a cada una de les seccions transversals.

Cal tenir en compte que en el sistema real, hi ha dos processos que tenen lloc simultàniament: un és l'adsorció, que consisteix en l'adhesió de molècules del gas contaminant a la superfície de la matriu sòlida, i l'altre és la desorció, que és el procediment invers. Aquests dos processos ocorren a velocitats diferents fins que s'arriba a l'equilibri i tant l'adsorció com la desorció tenen la mateixa taxa i la columna queda saturada.

Per poder deduir els models, s'ha partit del conjunt d'hipòtesis i d'un balanç de matèria sobre un volum de control qualsevol de l'interior de la columna d'adsorció. L'expressió trobada, quan es desenvolupa per cada secció transversal del filtre permet trobar l'equació de l'evolució temporal de la concentració de contaminant, que incorpora els fenòmens de difusió, advecció i, a més depèn de la variació de la quantitat adsorbida de contaminant. És en aquest moment quan, a partir de les expressions que descriuen els fenòmens d'adsorció i desorció, trobem l'equació per al model de Langmuir complet per a la quantitat adsorbida. Llavors, si per una banda es consideren les condicions d'equilibri per a tot l'augment de la quantitat adsorbida en aquella secció, es dedueix el l'equació de l'evolució de la pel model de Langmuir simplificat i, si per altra banda se suposa que el fenomen de la desorció té lloc a un ritme molt inferior respecte de l'adsorció es dedueix l'equació de la quantitat adsorbida pel model de Bohart-Adams.

Així, si es pren l'equació corresponent a la concentració i una de les de la quantitat adsorbida s'obté un model que descriu el funcionament de la columna d'adsorció. En tots els tres casos, el que s'obté són equacions en derivades parcials i que per a la seva resolució hem optat per discretitzar la variable longitudinal del filtre però no del temps, de manera que s'acaba obtenint un sistema d'equacions diferencials.

## Resultats

En aquest cas, presentem un recull de les solucions aproximades obtingudes provinents de la resolució dels 3 models deduïts (Langmuir complet, Langmuir simplificat i Bohart-Adams) i ho comparem amb el comportament real del sistema, gràcies a les dades experimentals cedides pel LEQUIA. Així, hem considerat dues concentracions d'entrada de toluè diferents: una de baixa, que es correspon a  $1.316 \cdot 10^{-3} \text{ kg/m}^3$ , i una d'alta, que és de  $2.835 \cdot 10^{-3} \text{ kg/m}^3$ . Per a totes dues concentracions i per als tres models, en aquest projecte presentem les gràfiques de l'evolució al llarg del temps de la concentració de toluè a la sortida de la columna i les gràfiques de la quantitat adsorbida de contaminant a l'interior de la columna per a quatre instants de temps diferents repartits equidistantment al llarg del temps simulat, que són a un 25%, a un 50%, a un 75% i al 100% del temps total, és a dir a l'últim instant de la simulació.

Així, amb aquest estudi comparatiu podem observar com el model de Langmuir complet, que és el que inclou més paràmetres i fenòmens dels tres models analitzats, és el que s'ajusta més correctament a les dades experimentals, però preveu que la concentració de contaminant a la sortida comenci a pujar abans del que ho fa en realitat. A més, la seva corba s'ajusta millor a les dades reals quan la concentració d'entrada és alta que quan és baixa. En canvi, el model de Langmuir simplificat presenta oscil·lacions aleatòries a la banda negativa de la concentració de contaminant a la sortida de la columna, quan aquest fet no té lloc a la realitat. Per aquest motiu, aquest model resolt numèricament com ho hem fet no modelitza correctament el sistema físic real. Pensem que això és degut a que el model de Langmuir simplificat inclou la funció de Heaviside i això fa que sigui un procés lent de resolució numèrica a través del MATLAB i amb les eines que hem utilitzat. Finalment, a les gràfiques d'aquest model també es pot observar com presenta un retard a l'hora de predir l'augment de la concentració de toluè a la sortida del filtre. Pel que fa al model de Bohart-Adams, quan la concentració és baixa no s'ajusta a les dades experimentals, sinó que és el model que més es desvia, preveient l'augment de la concentració de la sortida uns 30 minuts més tard del que realment passa. Això es deu al fet que aquest model es basa en la hipòtesi que la desorció té lloc a un ritme tan lent que es pot obviar quan, en realitat, la desorció fa augmentar la concentració del contaminant més ràpidament. Aquesta discrepància s'amplifica quan la concentració de toluè a l'entrada és més baixa.

## Conclusions

Primer de tot cal remarcar que la funció principal de la modelització d'aquests filtres és la de predir en quin instant de temps començarà a sortir contaminant per l'extrem de la columna i, per tant, poder conèixer quina és la vida útil de la matriu sòlida adsorbent sense haver de realitzar experiments al laboratori per a cada cas. Per aquest motiu hem fet una comparació dels resultats dels models amb les dades experimentals del laboratori i, així, poder conèixer la bondat de cada model.

Pel que fa al model de Langmuir complet, hem observat que és el que té un comportament que millor s'ajusta a la sèrie de dades experimentals, tant per concentracions altes com per baixes, encara que per aquestes últimes el model no s'hi ajusta tant. Així, la corba teòrica de la concentració de contaminant a la sortida comença a augmentar instants abans que ho faci el sistema real i, per tant, aquest model esdevé un bon indicador per saber la vida útil d'una matriu sòlida, ja que ens avisa una mica abans que realment s'estigui emetent contaminant a l'ambient.

El model de Langmuir simplificat, en canvi, inicialment no s'ajusta correctament al que s'esperaria i, passat un cert temps, la concentració de contaminant a la sortida del filtre augmenta, però ho fa més tard que les dades experimentals. D'aquesta manera aquest model no és la millor eina pel disseny de sistemes d'adsorció. A més, també cal remarcar que el Langmuir simplificat té una corba de

la concentració a la sortida que presenta un augment molt ràpid, ja que aquest model considera la concentració de l'equilibri per a tota l'evolució de la quantitat adsorbida. D'aquesta manera, acaba preveient la saturació completa del filtre i l'equilibri total abans que ho faci la columna experimental.

Finalment, el model de Bohart-Adams té un comportament diferent en funció de la concentració de contaminant a l'entrada. Si aquesta pren un valor petit, la corba teòrica queda molta estona endarrerida respecte a les dades reals i, si la concentració d'entrada és gran, la corba teòrica s'aproxima a l'experimental. Així doncs, per aquest model cal poder classificar la concentració d'entrada per saber si els resultats seran propers als reals o n'estaran gaire allunyats. Tot i això, en tots dos casos de concentracions de contaminant a l'entrada del filtre que s'han estudiat en aquest projecte, la concentració a la sortida segons el model de Bohart-Adams augmenta després de les dades reals i, per tant, aquest model no és un bon indicador de quina és la vida útil d'una matriu sòlida adsorbent.

## Qüestions per a projectes futurs

Per a possibles treballs futurs que estiguin relacionats amb aquest Projecte Final de Màster, existeixen diverses vies d'exploració que es poden estudiar. Un seria el fet de deduir un model que inclogui les variacions de les propietats en la direcció radial de la columna d'adsorció i això implicaria deixar d'utilitzar valors mitjans per a cada una de les seccions. Una altra via possible seria la d'incorporar la interacció del gas amb les parets de la columna, incloent-hi possibles variacions tèrmiques provinents de l'exterior i, ja que es treballaria amb un model no isotèrmic, contemplar també les variacions tèrmiques degudes a la reacció d'adsorció.

Per altra banda, havent comprovat que el model de Langmuir simplificat presenta alguns inconvenients deguts a la manera que hem utilitzat per a resoldre'l, es podrien plantejar altres possibles resolucions. Una, per exemple, podria ser la d'utilitzar eines numèriques més adients per a la resolució d'un sistema d'equacions diferencials discontinües o bé, una altra opció podria ser la d'aplicar-hi una discretització bidimensional, és a dir, discretitzar també el temps a més de la variable longitudinal (que és la que s'ha discretitzat en les resolucions d'aquest projecte).

Finalment, una altra extensió natural d'aquest projecte és la de considerar que la matriu sòlida captura, simultàniament, més d'un contaminant diferent. En aquesta situació, caldria refer els models per tenir en compte les possibles interaccions entre els dos contaminants a adsorbir.