

8. Adsorpcia

1) Kalibračná krivka

Načítanie údajov z Excelu

```
aprox=readtable('kalibracna_krivka_ads.xlsx')
```

aprox = 7×2 table

	C	A
1	0	0
2	0.001	0.1597
3	0.002	0.3288
4	0.004	0.6536
5	0.006	0.9542
6	0.008	1.2632
7	0.01	1.6193

```
format shortG
```

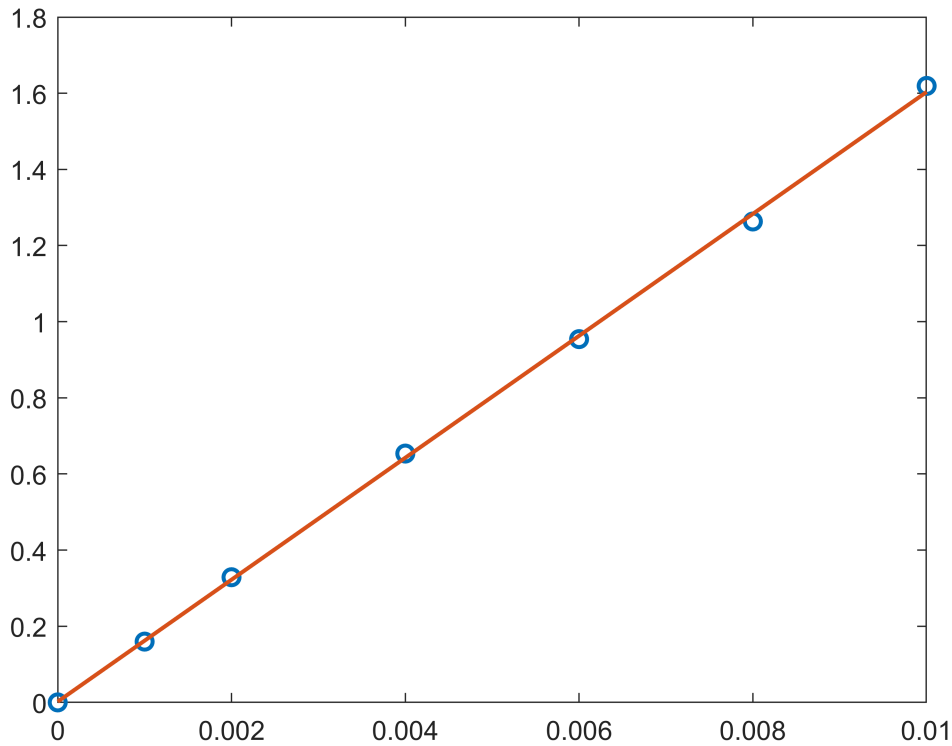
Aproximácia priamkou (t.j. polynómom 1. stupňa)

```
p=polyfit(aprox.C,aprox.A,1)
```

```
p = 1×2  
    160.15    0.0020381
```

Znázornenie

```
set(0, 'DefaultLineWidth', 1.5); % Zmena hrúbky čiar v CELOM dokumente  
y_fit=polyval(p,aprox.C);  
figure  
plot(aprox.C,aprox.A,'o')  
hold on  
plot(aprox.C,y_fit)  
hold off
```



Vyjadrenie z kalibračnej krivky

$$c_A = @y (y - p(2)) / p(1)$$

c_A = function_handle with value:
`@(y)(y-p(2))/p(1)`

2) Namerané hodnoty

Očakáva sa excelovský súbor v ktorom sa budú nachádzať stĺpce interval [min], A (?????), fr (faktor riedenia), V (pretekajúci objem [dm³]), cas (čas prietoku [s]).

Prvé dva a posledné dva riadky tabuľky predstavujú merania na vstupe. Označenie vzoriek je nepovinné.

```
Data=readtable('data_ads2.xlsx')
```

Data = 12×7 table

...

	Var1	interval	vzorka	A	fr	V
1	'vstup'	15	'1A'	1.6806	50	0.5
2	'vstup'	15	'1B'	1.2358	50	0.5
3	'vystup'	15	'2A'	0.0054	1	0.5

	Var1	interval	vzorka	A	fr	V
4	'vystup'	15	'2B'	-0.0027	1	0.5
5	'vystup'	15	'3A'	-0.0297	1	0.5
6	'vystup'	15	'3B'	-0.0356	1	0.5
7	'vystup'	15	'4A'	0.053	1	0.5
8	'vystup'	15	'4B'	0.5813	1	0.5
9	'vystup'	15	'5A'	0.2692	10	0.5
10	'vystup'	15	'5B'	0.8331	1	0.5
11	'vstup'	15	'6A'	0.3077	10	0.5
12	'vstup'	15	'6B'	0.3286	10	0.5

Výpočet c_kk, c_sk, m

```
Data.ckk=max(0,c_A(Data.A))*1000;
Data.csk=Data.ckk.*Data.fr;
Data.m=Data.csk./100;
Data.prietok=Data.V./Data.cas
```

Data = 12x11 table

	Var1	interval	vzorka	A	fr	V
1	'vstup'	15	'1A'	1.6806	50	0.5
2	'vstup'	15	'1B'	1.2358	50	0.5
3	'vystup'	15	'2A'	0.0054	1	0.5
4	'vystup'	15	'2B'	-0.0027	1	0.5
5	'vystup'	15	'3A'	-0.0297	1	0.5
6	'vystup'	15	'3B'	-0.0356	1	0.5
7	'vystup'	15	'4A'	0.053	1	0.5
8	'vystup'	15	'4B'	0.5813	1	0.5
9	'vystup'	15	'5A'	0.2692	10	0.5
10	'vystup'	15	'5B'	0.8331	1	0.5
11	'vstup'	15	'6A'	0.3077	10	0.5
12	'vstup'	15	'6B'	0.3286	10	0.5

```
suma=Data.m(1:2:end)'+Data.m(2:2:end)'
```

```
suma = 1x6
    9.0927    0.00020993         0    0.039353    0.21872    0.39478
```

3) Závislost' množství zachyteného acetónu od času (úbytok acetónu v plyne)

```
t=cumsum(Data.interval(1:2:end-1))'
```

```
t = 1×6  
    15    30    45    60    75    90
```

```
tads=t(2:end-1)'
```

```
tads = 4×1  
    30  
    45  
    60  
    75
```

```
ut=[t(1) t(end)]
```

```
ut = 1×2  
    15    90
```

```
um=[suma(1) suma(end)]
```

```
um = 1×2  
    9.0927    0.39478
```

```
up=polyfit(ut,um,1)
```

```
up = 1×2  
   -0.11597    10.832
```

```
m_odhadnute=polyval(up,tads)
```

```
m_odhadnute = 4×1  
    7.3531  
    5.6135  
    3.8739  
    2.1344
```

```
plot(t,suma,'o','color','r','MarkerSize',10)  
hold on  
axis([0 t(end)+15 0 1.3*suma(1)])
```

```
line(ut,um)
```

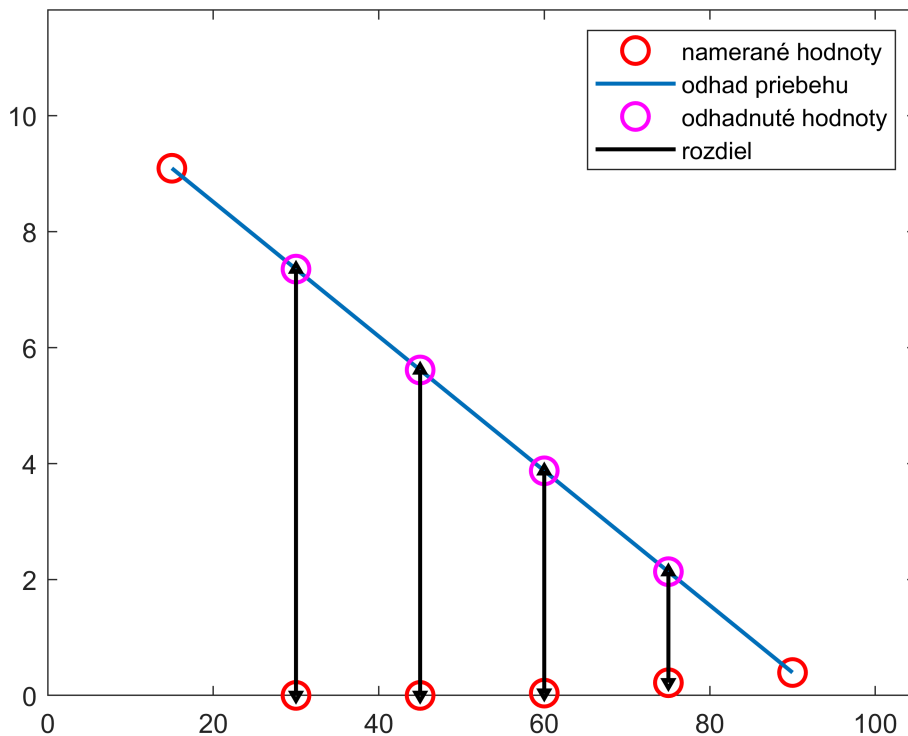
```
obr2=plot(tads,suma(2:end-1),'LineStyle','none','Marker','v','color','black','MarkerSize',3);  
set(get(get(obr2,'Annotation'),'LegendInformation'),'IconDisplayStyle','off');
```

```
plot(tads,m_odhadnute,'LineStyle','none','Marker','o','color','magenta','MarkerSize',10)
```

```
obr4=plot(tads,m_odhadnute,'LineStyle','none','Marker','^','color','black','MarkerSize',3);  
set(get(get(obr4,'Annotation'),'LegendInformation'),'IconDisplayStyle','off');
```

```
line([tads'; tads'],[suma(2:end-1); m_odhadnute'],'color','black')
```

```
legend('namerané hodnoty','odhad priebehu','odhadnuté hodnoty','rozdiel')
hold off
```



4) Bilancia adsorpcie v trvaní 3x15'

```
vstup=(suma(1)+suma(end))/2*3
```

```
vstup =  
14.231
```

```
vystup=sum(suma(2:end-1))
```

```
vystup =  
0.25828
```

```
ads_hmotnost=vstup-vystup
```

```
ads_hmotnost =  
13.973
```

5) Adsorbčná kapacita adsorbenta

```
m_s=4.1 % priame zadanie
```

```
m_s =  
4.1
```

```
% m_s=input('Zadajte m_s [mg]:'); % Vymeniť sprechádzajúcim príkazom ak  
% je premenlivé.
```

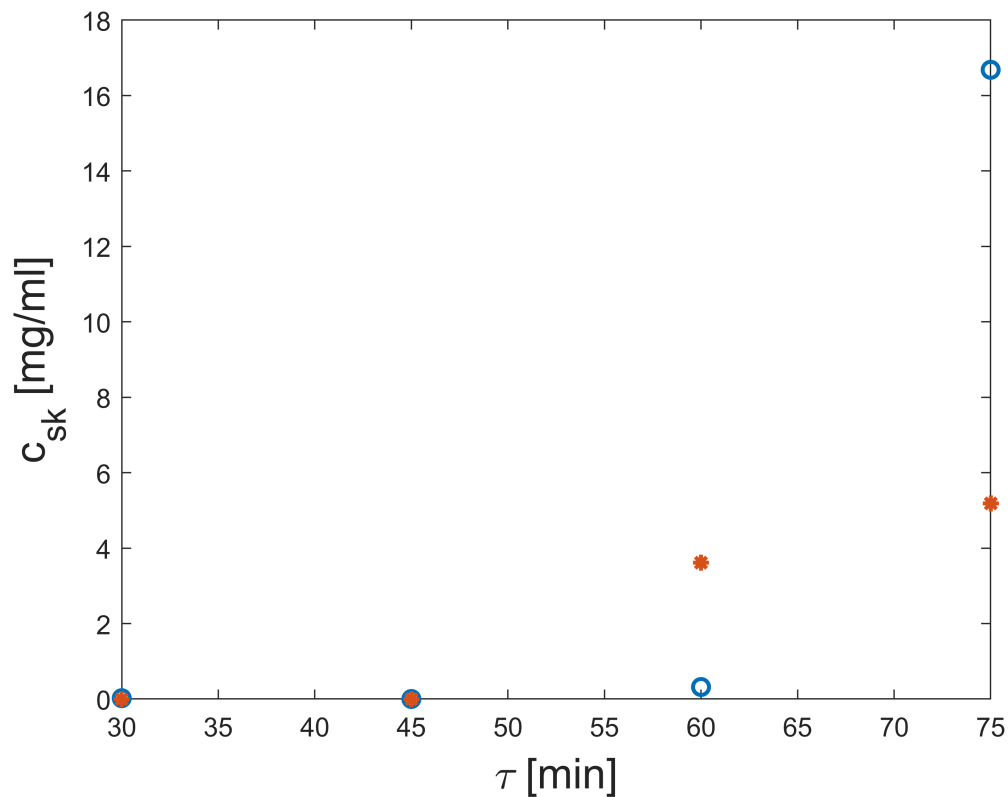
```
as=ads_hmotnost/m_s
```

```
as =  
3.408
```

6) Závislosť výstupnej koncentrácie od času

Dáta, ktoré sa budú modelovať:

```
plot(tads,Data.csk(3:2:end-2),'o',tads,Data.csk(4:2:end-2),'*')  
xlabel('\tau [min]','fontsize',16,'fontweight','bold')  
ylabel('c_{sk} [mg/ml]','fontsize',16)
```



Funkcia:

```
modelFun = @(b,x) b(1)./(1+exp(-b(2).*x-b(3)));
```

Štartovacie hodnoty (niekedy treba ručne zmeniť aby proces skonvergoval):

```
start = [max(Data.csk); 0.01;1];
```

Aproximácia metódou najmenších štvorcov.

Je žiadúce mať čo najviac meraní, inak MatLab bude vypisovať chybové hlášky a odhad môže byť nepresný.

```
n1m = fitnlm(tads,Data.csk(3:2:end-2),modelFun,start);
```

Warning: Iteration limit exceeded. Returning results from final iteration.

```
n1m2 = fitnlm(tads,Data.csk(4:2:end-2),modelFun,start);
```

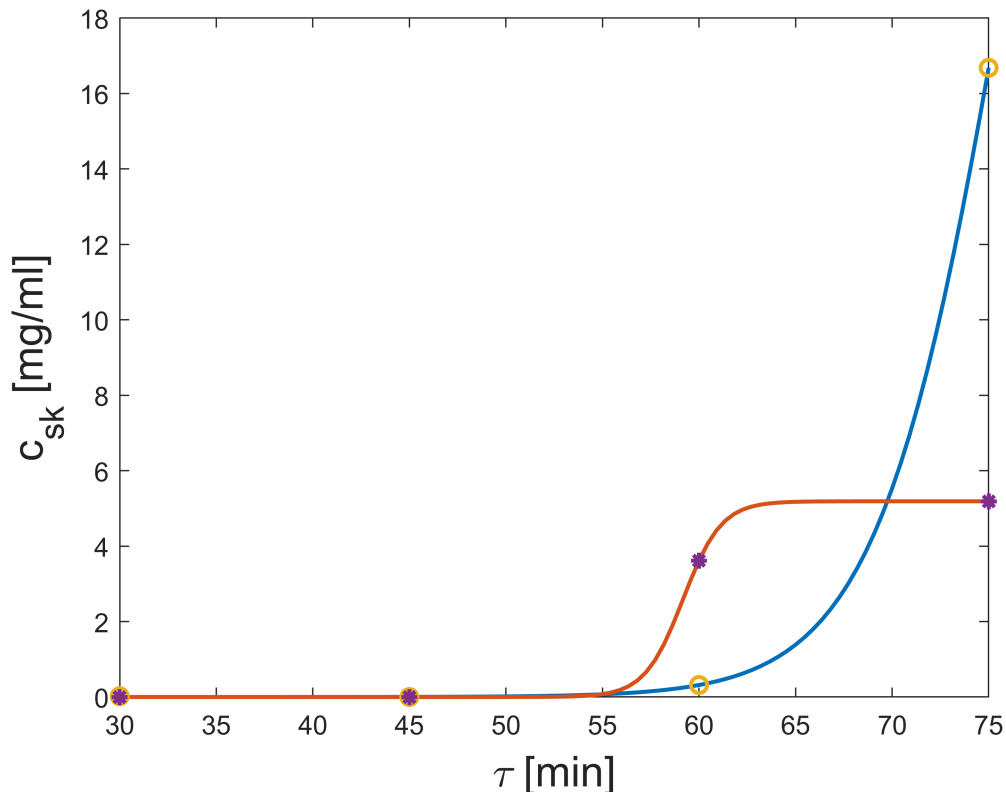
Warning: Iteration limit exceeded. Returning results from final iteration.

Warning: The Jacobian at the solution is ill-conditioned, and some model parameters may not be estimated well (they are not identifiable). Use caution in making predictions.

```
ttemp=linspace(tads(1),tads(end))
```

```
ttemp = 1x100  
        30        30.455        30.909        31.364        31.818        32.273 ...
```

```
plot(ttemp,predict(n1m,ttemp'),ttemp,predict(n1m2,ttemp'),...  
      tads,Data.csk(3:2:end-2),'o',tads,Data.csk(4:2:end-2),'*')  
xlabel('\tau [min]','fontsize',16,'fontweight','bold')  
ylabel('c_{sk} [mg/ml]','fontsize',16)
```



7) Závislosť adsorbovaného množstva acetónu od pretečeného objemu vzduchu

```
VG=Data.V(1:2:end)*15
```

```
VG = 6×1
      7.5
      7.5
      7.5
      7.5
      7.5
      7.5
```

```
Vpreteceny=cumsum(VG)
```

```
Vpreteceny = 6×1
      7.5
      15
      22.5
      30
      37.5
      45
```

```
priemerny_prietok=mean(Data.prietok)
```

```
priemerny_prietok =
      0.0082028
```

8) Maximálne nasýtenie adsorbenta

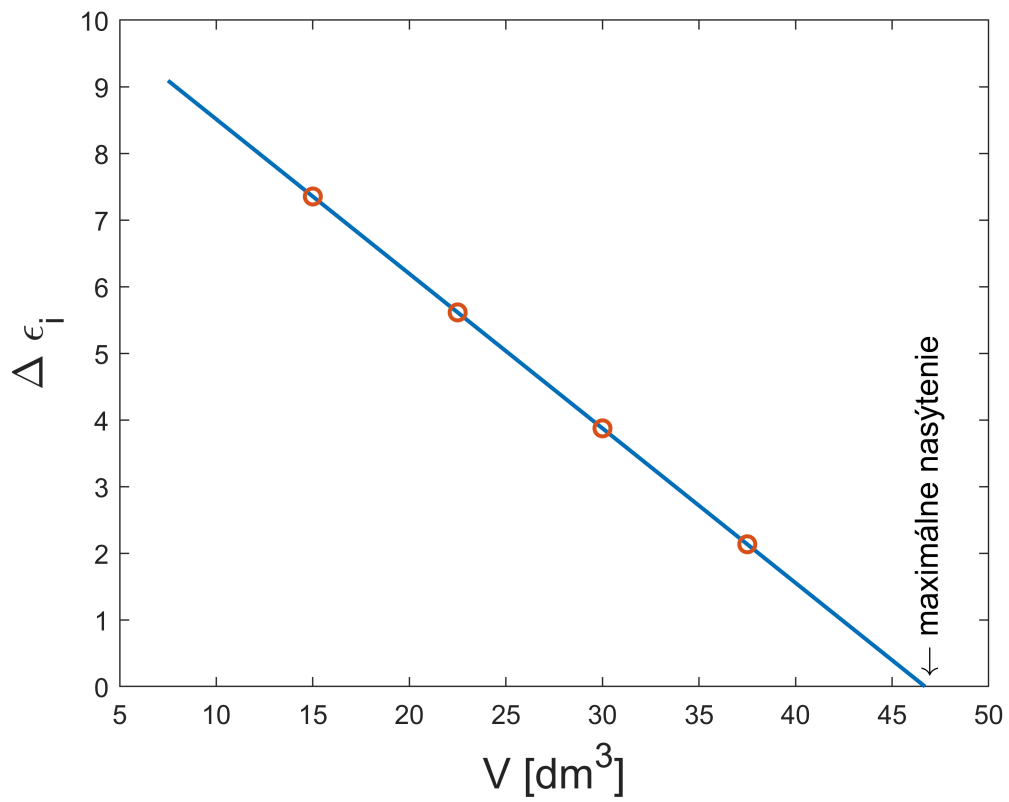
```
p_ads=polyfit(Vpreteceny(2:end-1)',m_odhadnute',1)
```

```
p_ads = 1×2
      -0.23194      10.832
```

```
obj_nula_ads=-p_ads(2)/p_ads(1)
```

```
obj_nula_ads =
      46.702
```

```
Vtemp=Vpreteceny(1):0.1:obj_nula_ads;
m_fit=polyval(p_ads,Vtemp);
figure
plot(Vtemp,m_fit)
hold on
plot(Vpreteceny(2:end-1),m_odhadnute,'o')
xlabel('V [dm^3]', 'fontsize',16, 'fontweight', 'bold')
ylabel('\Delta \epsilon_i', 'fontsize',16)
txt = ' \leftarrow maximálne nasýtenie';
h=text(Vtemp(end),m_fit(end),txt, 'fontsize',12);
set(h, 'Rotation',90);
hold off
```

```
maximalne_nasytenie=obj_nula_ads/priemerny_prietok/60
```

```
maximalne_nasytenie =  
94.89
```