

Adsolab: Platform for modeling and validating equilibrium in pollutant adsorption processes

Jorge De Celis¹ Silvia Adriana Ramos¹ Federico Rossini¹ Francisco Ruiz¹ Agustina Vásquez¹ and Andrés Visciglio¹

¹ Universidad de Buenos Aires, Facultad de Ingeniería, Paseo Colón 850, Ciudad Autónoma de Buenos Aires, Argentina

jdecelis@fi.uba.ar, saramos@fi.uba.ar, frossini@fi.uba.ar, fruiz@fi.uba.ar, avasquez@fi.uba.ar, avisciglio@fi.uba.ar

Abstract. Adsorption process occurs when some of the components of a mixture in liquid or gas phase are transported to the surface of a solid (porous or non-porous) and attracted by chemical bonds or physical interactions at certain suitable sites.

Adsorption isotherm describes the equilibrium behavior of adsorbents at constant temperature, and depends on adsorbed species, adsorbate, adsorbent, and various physical properties of the solution, such as pH, ionic strength, and temperature.

Empirical results are usually represented by different mathematical models of adsorption isotherms, where the quality of the fit must be evaluated. Convenient methods for resolving nonlinearized isotherms must be developed, and a more efficient method for comparing models must be proposed. The task includes the selection of parameters that initialize the fitting process, which requires the development of robust and easy-to-use calculation, graphical representation, and results presentation platforms.

This paper reviews the development work on the design and implementation of a model comparison system using statistical estimators and thermodynamic concepts that consider the nature of the adsorbent material and the characteristics of the adsorbate being studied, enabling intelligent user interaction. Artificial intelligence tools are being applied for modeling, result comparison, and presentation, generating an appropriate interface for its use.

Keywords: Adsorption, Isotherms, Statistics

Adsolab: Plataforma para el modelado y validación del equilibrio en los procesos de adsorción de contaminantes

Resumen. El proceso de adsorción ocurre cuando algunos de los componentes de una mezcla, ya sea líquida o gaseosa, son transportados a la superficie de un

sólido (poroso o no poroso) y atraídos por enlaces químicos o interacciones físicas en sitios adecuados.

La isoterma de adsorción describe el comportamiento de equilibrio de los adsorbentes a temperatura constante y depende de las especies adsorbidas, el adsorbato, el adsorbente y diversas propiedades físicas de la solución, como el pH, la fuerza iónica y la temperatura.

Los resultados empíricos suelen representarse mediante diferentes modelos matemáticos de isotermas de adsorción, donde debe evaluarse la calidad del ajuste. Es necesario desarrollar métodos convenientes para resolver isotermas no linealizadas y proponer un método más eficiente para comparar modelos. Esta tarea incluye la selección de parámetros que inicializan el proceso de ajuste, lo que requiere el desarrollo de plataformas robustas y fáciles de usar para el cálculo, la representación gráfica y la presentación de resultados.

Este artículo revisa el trabajo de desarrollo en el diseño e implementación de un sistema de comparación de modelos mediante estimadores estadísticos y conceptos termodinámicos que consideran la naturaleza del material adsorbente y las características del adsorbato en estudio, lo que permite una interacción inteligente con el usuario. Se aplican herramientas de inteligencia artificial para el modelado, la comparación y la presentación de resultados, generando una interfaz adecuada para su uso.

Palabras clave: Adsorción, Isotermas, Estadísticos.

1 Introducción

Este trabajo reseña el proceso para desarrollar un sistema que permita la comparación de modelos matemáticos que permitan resolver el proceso de adsorción, por esto en este punto resumiremos de qué se trata ese proceso y cómo lo hemos resuelto.

1.1 El proceso de adsorción

El proceso de adsorción es conocido y estudiado por el ser humano desde hace mucho tiempo. Se utiliza cada vez más con fines de purificación o separación. Este fenómeno ocurre cuando algunos de los componentes de una mezcla en fase líquida o gaseosa son transportados hacia la superficie de un sólido (poroso o no poroso) y atraídos por enlaces químicos o interacciones físicas en ciertos sitios aptos para tal fin. Si el medio sólido es poroso puede proporcionar una elevada superficie específica, lo que posiblemente conduciría a una alta capacidad de adsorción. Particularmente, en este trabajo nos enfocaremos en los sistemas sólido-líquidos.

Cuando una cierta cantidad de material adsorbente se pone en contacto con un dado volumen de líquido, que contiene uno o más solutos (adsorbato/os), el proceso de adsorción acontecerá hasta que el equilibrio sea alcanzado. Cuando un solo soluto se encuentra presente en la solución, el estado de equilibrio se caracterizará por la concentración final del mismo en el líquido (C_e) y la masa de adsorbato retenido por unidad de masa del adsorbente sólido (q_e).

La isoterma de adsorción describe el comportamiento de equilibrio de los adsorbentes cuando la temperatura es constante. Depende de la especie adsorbida, el adsorbato, el adsorbente y varias propiedades físicas de la solución, como el pH, la fuerza iónica y la temperatura.

Los resultados empíricos suelen representarse mediante diferentes modelos matemáticos de isotermas de adsorción, donde la calidad del ajuste se debe evaluar. Deben desarrollarse métodos convenientes para resolver las isotermas no linealizadas y se debe proponer un método de comparación entre modelos más eficiente. La tarea incluye la selección de los parámetros que inicializan el proceso de ajuste, lo cual requiere el desarrollo de plataformas de cálculo, representación gráfica y presentación de resultados, robustos y de fácil operación.

1.2 Sustento teórico

La isoterma se refiere a la relación entre las concentraciones de adsorbato de equilibrio en la fase líquida y la cantidad de adsorción de equilibrio en la fase sólida a una temperatura determinada. Podemos modelar los datos de adsorción de equilibrio mediante las isotermas, e investigar la información de adsorción, como los mecanismos de adsorción, la capacidad máxima de adsorción, así como las propiedades de los adsorbentes mediante el estudio y análisis de las isotermas.

A lo largo de los años, se han propuesto y estudiado varios modelos para describir las isotermas de adsorción. Abordándolos desde el punto de vista de la termodinámica, la cinética, la teoría de potenciales o del mero empirismo; distintos autores han desarrollado ecuaciones de dos, tres, o más parámetros a fin de poder predecir el comportamiento que tendrá un sistema de adsorción. De todas maneras, existen dos modelos de dos parámetros que se destacan por resultar adecuados en la gran mayoría de los casos. Un ejemplo de esto es el 90% de los casos en los que se trabaja con carbón activado como adsorbente. Estos modelos son la isoterma de Langmuir y la isoterma de Freundlich.

Además de estos dos casos, existen otras opciones que deben ser evaluadas, como lo es el modelo de Temkin. Otros autores han propuesto modelos de tres parámetros que combinan o modifican las isotermas de Langmuir y de Freundlich a fin de compensar las limitaciones que cada uno de ellos presenta. A saber, se conocen los modelos de Radke-Prausnitz, Redlich-Peterson, Sips, y Toth.

También, se pueden utilizar metodologías de aprendizaje automático e inteligencia artificial que permita modelar los resultados empíricos de los procesos de adsorción estudiados, como se indica en De Celis et al (2022).

2 Plataforma de cálculo a desarrollar

2.1 Estadísticos de ajuste

Existe una gran variedad de parámetros estadísticos para valorar la bondad del ajuste. Algunos de ellos son más utilizados que otros, como el valor de R^2 , Chi-cuadrado no

lineal χ^2 , SSE, entre otros. La isoterma de mejor ajuste u óptima se refiere a la isoterma que mejor puede modelar los datos experimentales, con un valor del coeficiente de determinación (R^2) lo más cercano posible a 1 o valores cercanos a cero de otros parámetros estadísticos, como el chi-cuadrado no lineal (χ^2) y la suma residual de cuadrados (SSE).

En líneas generales, los estadísticos pueden ser estimados de forma sencilla mediante programas como Origin, SPSS, Excel, etc. Sin embargo, en muchos casos, modelos diferentes presentan valores comparables de los parámetros estadísticos calculados. Esta situación dificulta la determinación de las isotermas óptimas. Por lo tanto, también se deben calcular y comparar la mayor cantidad de parámetros estadísticos para garantizar la elección del modelo más adecuado. Por otro lado, se deben establecer claramente las reglas de comparación que involucren el análisis de los parámetros obtenidos de cada ajuste, verificando su viabilidad, consistencia numérica y la sensibilidad del modelo frente a perturbaciones.

2.2 Plataforma en desarrollo

El objetivo general de este trabajo es el de diseñar un sistema de comparación de modelos mediante estimadores estadísticos y conceptos termodinámicos que contemple la naturaleza del material adsorbente y las características de adsorbato estudiado, permitiendo una interacción inteligente con el usuario. Asimismo, se desea Aplicar las herramientas de inteligencia artificial para el modelado, comparación de resultados y su presentación, generando la interfaz adecuada para su utilización.

En la primera versión se están utilizando estadísticos de ajuste para determinar qué tan bien ajusta la muestra a cada uno de los modelos teóricos que el usuario haya seleccionado para probar, aportando de manera gráfica la visualización de las curvas correspondientes.

Para el desarrollo de la red neuronal el equipo de trabajo sigue los lineamientos del trabajo de De Celis et al (2022). Si bien este trabajo es el informe final de una aplicación particular en la empresa ACUMAR, sus conclusiones son útiles para el desarrollo de los estadísticos de comparación para este trabajo.

Una de las arquitecturas más utilizadas es la de Perceptrón multicapa de una única capa oculta y con funciones de activación del tipo sigmoidea. Para esta arquitectura se suele utilizar un algoritmo de entrenamiento del tipo “retropropagación de errores” o BP: Back Propagation. Este consiste en ir actualizando los valores de los pesos y de los sesgos de la capa de salida y de la oculta y así minimizar el ECM de cada iteración; para esto implementa el método del descenso por el gradiente (DG) y de esta manera encontrar el mínimo local de la función error. Las formas de ejecutar el método DG se pueden observar en el trabajo de Larranaga et al., (1997). La popularidad de la arquitectura de Perceptrón multicapa se debe al hecho de que una RNA como ésta, con una única capa oculta, podría aproximar cualquier función continua sin la necesidad de un gran desarrollo.

2.3 Resultados preliminares

La herramienta en desarrollo permite cargar una muestra obtenida mediante experiencias de laboratorio y elegir cuáles son los modelos en los cuales se probará la bondad del ajuste. Luego indicará, mediante la aplicación de los estadísticos (a futuro aplicando la red neuronal seleccionada), cuál es el modelo que ajusta mejor.

En este momento el sistema está siendo probado por los investigadores y becarios del Laboratorio de Química de Sistemas Heterogéneos para evaluar datos experimentales y comparar los modelos. Los primeros resultados, aplicando los estadísticos, son promisorios e inclusive se ha utilizado el sistema para la elaboración de una tesis de grado, utilizando sus resultados comparados con un sistema comercial como Optima, verificándose en ese caso que Adsolab (nuestro sistema) presenta una bondad de ajuste superior.

3 Conclusiones

Además de la utilidad que presenta la herramienta para la solución de problemas en la industria que requieren del proceso de adsorción, este software permitirá monitorear, con adaptaciones, otros procesos industriales de purificación.

El laboratorio de sistemas heterogéneos del departamento de Química de la Facultad de Ingeniería de la Universidad de Buenos Aires recibe frecuentes consultas de organizaciones civiles y pequeñas empresas que necesitan resolver problemas de contaminación. Esta herramienta servirá para poner en valor las investigaciones del laboratorio y conseguir mejoras productivas en las empresas que tienen problemas de contaminación.

Referencias

- De Celis, J., Pamparato, M.L., Pérez, F., Vezzoni, A. (2022). Acuerdo Específico Nro. 4: Desarrollo de un modelo de Inteligencia Artificial para evaluar y predecir la calidad del agua superficial en subcuencas de la cuenca Matanza Riachuelo.
- Larranaga, P., Inza, I., & Moujahid, A. (1997). Tema 8. Redes Neuronales, U. del P. Vasco, 12-17