



# Viskoznost binarne smeše DMA + 2-butanol za potencijalnu upotrebu kao rastvarača za regenerativne procese odsumporavanja dimnih gasova

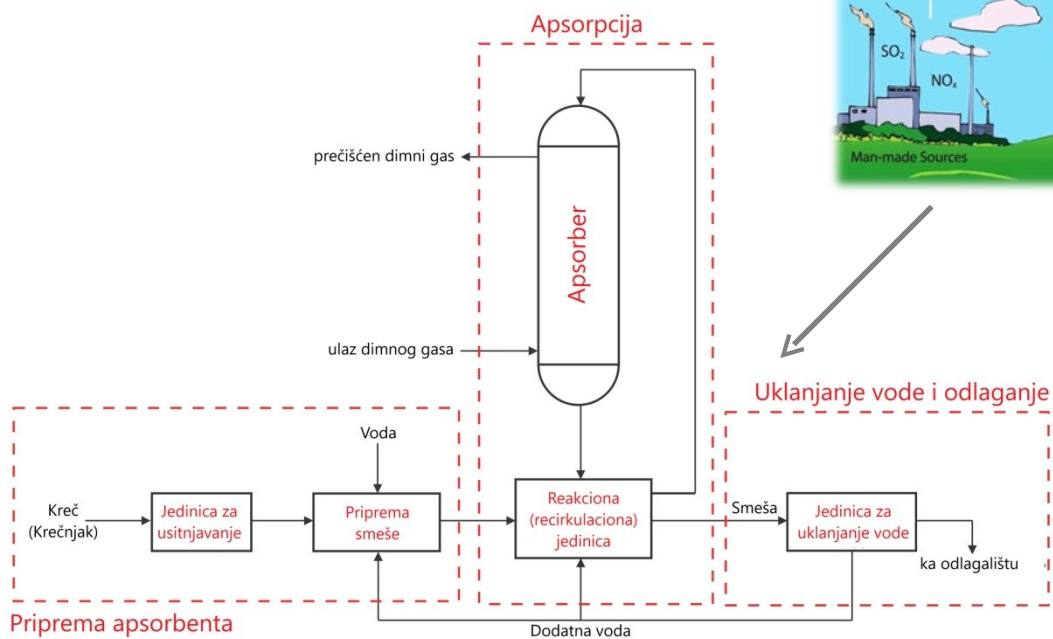
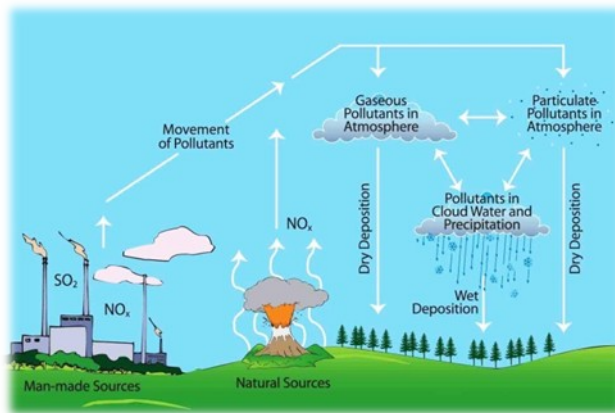


**Divna Majstorović**

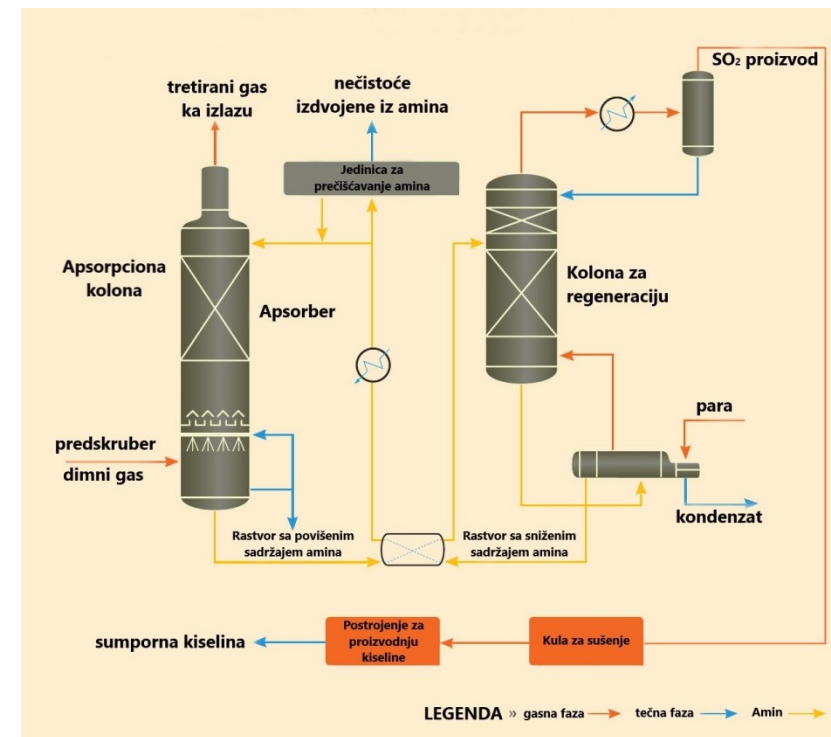
**Nikola Živković, Mirjana Kijevčanin, Emila Živković**



# Procesi odsumporavanja dimnih gasova



Neregenerativni krečnjački postupak

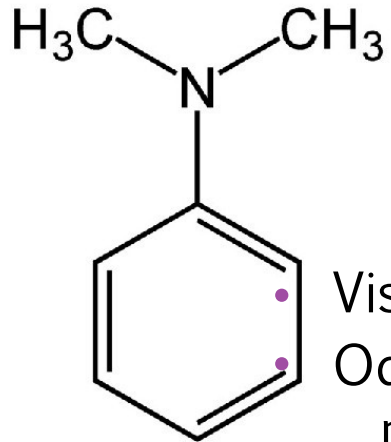


Regenerativni CANSOLV proces



# Izbor supstanci za analizu

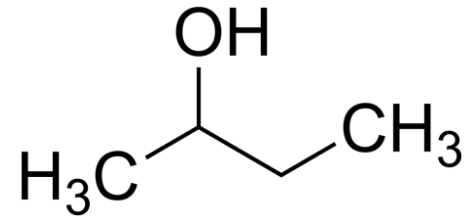
## DIMETIL ANILIN (DMA)



- Visoka selektivnost prema SO<sub>2</sub>
- Odlična sposobnost vezivanja mehanizmima hemijske apsorpcije
- Visoka toksičnost

DMA se već koristi kao sorbent za prečišćavanje izlaznih dimnih gasova u postupcima sa termalnom regeneracijom, CANSOLV, Sulphidine i ASARCO procesima

## 2-BUTANOL



- Vezivanje SO<sub>2</sub> se odvija fizičkom apsorpcijom
- Ekološki prihvatljivija zamena



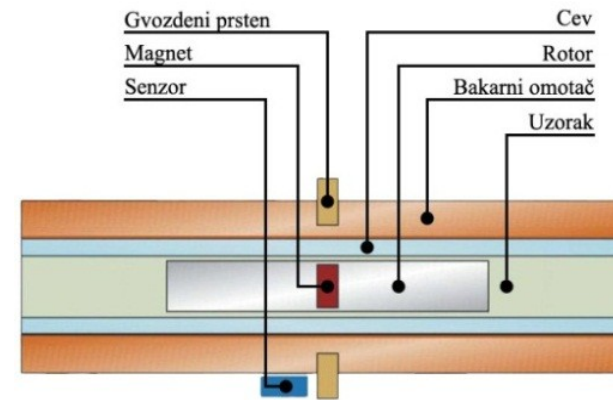
# Aparatura za merenje viskoznosti na atm. p

- korišćenjem samo oko 2,5 ml uzorka može se odrediti dinamička viskoznost, kinematska viskoznost, kao i gustina tečnosti
- Couette princip sa brzo rotirajućim spoljnim cilindrom i unutrašnjim mernim cilindrom koji sporije rotira
- zasniva se na merenju obrtnog momenta i brzine

Opseg merenja: 0,2 ÷ 20000  
 Ponovljivost: 0,1 %

- 1. Dinamička viskoznost (mPas) 0,2 ÷ 20000
- 2. Gustina ( $\text{g cm}^{-3}$ ) 0,65 ÷ 3,0
- 3. Temperatura ( $^{\circ}\text{C}$ ) 5 ÷ 105

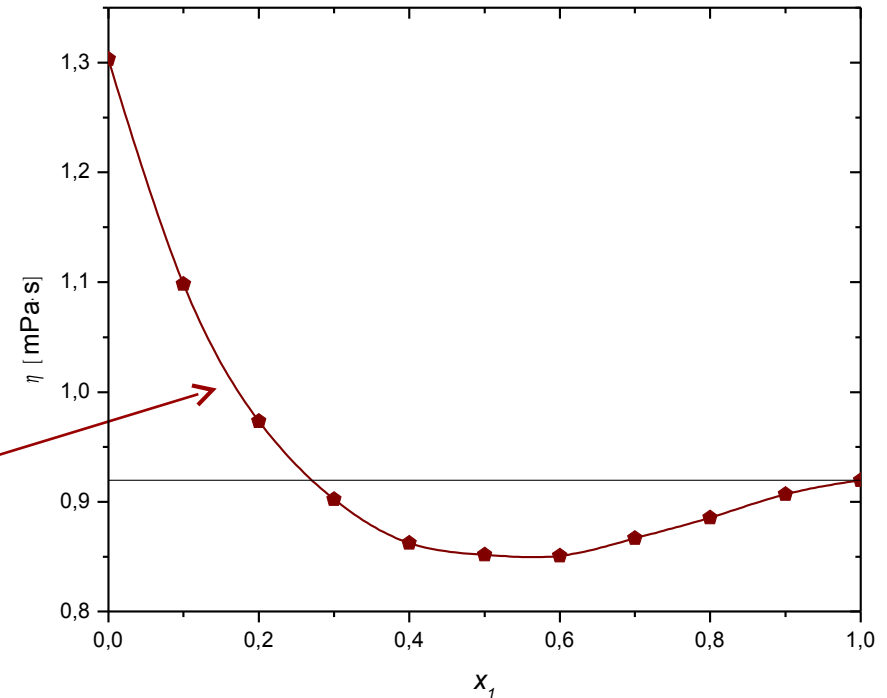
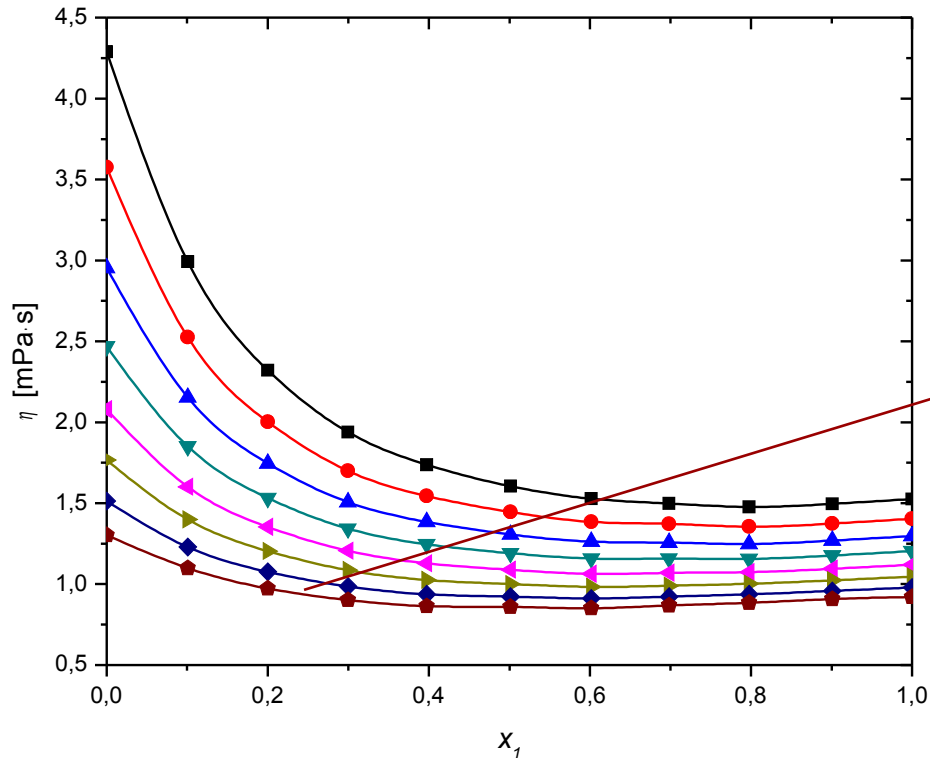
## Anton Paar SVM 3000





# Rezultati eksperimentalnih merenja

- Binarni sistem DMA (1) + 2-butanol (2)



(**T̄**) 288,15 K, (**ū**) 293,15 K, (**˘**) 298,15 K, (**à**) 303,15 K, (**ı**) 308,15 K, (**ò**) 313,15 K, (**ê**) 318,15 K, (**ć**) 323,15 K



# Modelovanje viskoznosti binarnih smeša

- Korelativni modeli

- uključuju interakcione parametre (jedan ili više) koji se dobijaju nekom optimizacionom tehnikom
- interakcioni parametri imaju različite vrednosti za svaku smešu na definisanim temperaturi i pritisku
- eksperimentalni podaci su neophodni za utvrđivanje interakcionih parametara
- ✓ uglavnom dolaze do mnogo boljih rezultata od prediktivnih modela

$$OF = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \left( \frac{\eta_{exp} - \eta_{cal}}{\eta_{exp}} \right)^2 \rightarrow \min$$

$$PD = \frac{100}{m} \sum_{i=1}^m \left| \frac{\eta_{exp} - \eta_{cal}}{\eta_{exp}} \right|_i$$



# Izabrani korelativni modeli

- Eyring-UNIQUAC (“Universal Quasichemical Functional-Group Activity Coefficient“) model

$$\frac{g_E}{RT} = \sum_{i=1}^n x_i \ln \left( \frac{\phi_i}{x_i} \right) + \frac{z}{2} \sum_{i=1}^n q_i x_i \ln \left( \frac{\theta_i}{\phi_i} \right) - \sum_{i=1}^n x_i q_i \ln \left( \sum_{j=1}^n \theta_i \psi_{ji} \right)$$

$\Delta u_{12}, \Delta u_{21}$  - parametri modela

- Eyring-NRTL (“Non-Random Two-Liquid“) model

$$\ln(\eta_m V_m) = x_1 \ln(\eta_1 V_1) + x_2 \ln(\eta_2 V_2) + x_1 x_2 \left[ \frac{\tau_{21} \exp(-\alpha \tau_{21})}{x_1 + x_2 \exp(-\alpha \tau_{21})} + \frac{\tau_{12} \exp(-\alpha \tau_{12})}{x_2 + x_1 \exp(-\alpha \tau_{12})} \right]$$

$\alpha = 0.55$   
 $\Delta g_{12}, \Delta g_{21}$  - parametri modela



# Izabrani korelativni modeli

- McAllister modeli

$U_{12}, U_{21}$  – parametri modela

## McAllister-3

$$\ln v = x_1^3 \ln v_1 + 3x_1^2 x_2 \ln v_{12} + 3x_1 x_1^2 \ln v_{21} + x_2^3 \ln v_2 - \ln \left( x_1 + \frac{x_2 M_2}{M_1} \right) + 3x_1^2 x_2 \ln \left[ \frac{\left( 2 + \frac{M_2}{M_1} \right)}{3} \right] +$$
$$+ 3x_1 x_2^2 \ln \left[ \frac{\left( 1 + 2M_2/M_1 \right)}{3} \right] + x_2^3 \ln \left( M_2/M_1 \right)$$

## McAllister-4

$$\ln v_m = x_1^4 \ln v_1 + 4x_1^3 x_2 \ln v_{1112} + 6x_1^2 x_2^2 \ln v_{1122} + 4x_1 x_2^3 \ln v_{2221} + x_2^4 \ln v_2 - \ln \left[ x_1 + \frac{x_2 M_2}{M_1} \right] +$$
$$+ 4x_1^3 x_2 \ln \left[ \frac{\left( 3 + \frac{M_2}{M_1} \right)}{4} \right] + 6x_1^2 x_2^2 \ln \left[ \frac{\left( 1 + \frac{M_2}{M_1} \right)}{2} \right] + 4x_1 x_2^3 \ln \left[ \frac{\left( 1 + 3M_2/M_1 \right)}{4} \right] + x_2^4 \ln \left[ M_2/M_1 \right]$$

$U_{1112}, U_{1122}, U_{2221}$  – parametri modela





# Izabrani korelativni modeli

- Eyring-PR EOS+vdW1-3 model

$$\eta V = (\eta V)_{ID} \exp\left(\frac{\sigma G^E}{RT}\right) \begin{cases} \ln(\eta V)_{ID} = \sum_i x_i \ln(\eta_i V_i) & \text{iz PR EOS} \\ G^E = RT \sum_{i=1}^{n_c} x_i (\ln \hat{\phi}_i - \ln \phi_i^0) \end{cases}$$

$$\ln \hat{\phi}_i = \frac{b_i}{b_m} (Z - 1) - \ln \left( Z - \frac{P b_m}{RT} \right) - \frac{a_m}{2\sqrt{2} b_m RT} \left( 1 + \frac{\bar{a}_i}{a_m} - \frac{b_i}{b_m} \right) \ln \left[ 1 + \frac{2\sqrt{2} b_m}{V + (1 - \sqrt{2}) b_m} \right]$$

$$\ln \phi^0 = (Z - 1) - \ln \left( Z - \frac{P b}{RT} \right) - \frac{a}{2\sqrt{2} RT} \ln \left[ 1 + \frac{2\sqrt{2} b}{V + (1 - \sqrt{2}) b} \right]$$

$$a_m = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n x_i x_j a_{ij}$$

$$b_m = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n x_i x_j b_{ij} \quad \text{iz vdW1-3}$$

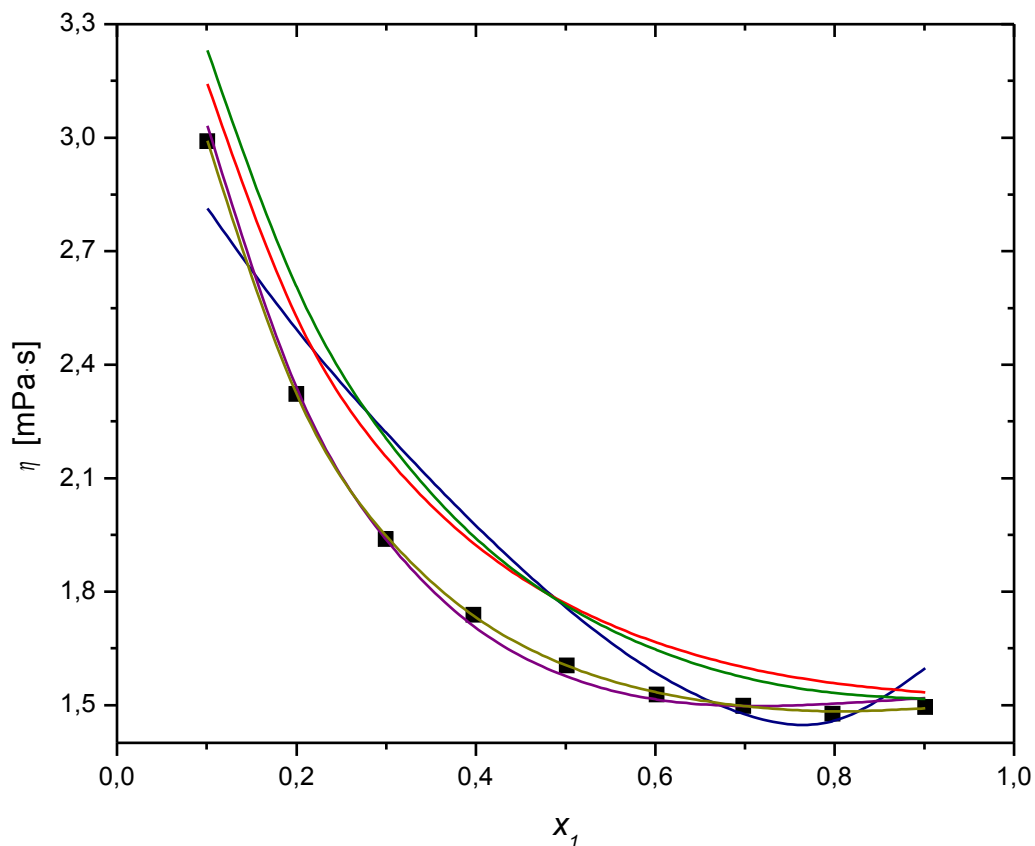
$\sigma = \sigma_0 + x_1 \sigma_1 + x_1^2 \sigma_2$   
 $\sigma_0, \sigma_1, \sigma_2$  - parametri modela





# Rezultati modelovanja viskoznosti

- Binarni sistem DMA + 2-butanol - 288,15 K



- (■) eksperimentalne tačke
- (—) McAllister-3
- (—) McAllister-4
- (—) Eyring-NRTL
- (—) Eyring-UNIQUAC
- (—) Eyring-PR EOS+vdW1-3

- Eyring-UNIQUAC	4,51 -
7,16 %	
- Eyring-NRTL	0,62
9,17 %	
- Eyring-PR EOS+vdW1-3	2,29 - 8,83
%	

- McAllister-3  
0,21 - 1,20 %

- McAllister-4  
0,15 - 0,26 %



***HVALA NA PAŽNJI!***