



VYSOKÉ UČENÍ TECHNICKÉ V BRNĚ

BRNO UNIVERSITY OF TECHNOLOGY

FAKULTA CHEMICKÁ

FACULTY OF CHEMISTRY

ÚSTAV FYZIKÁLNÍ A SPOTŘEBNÍ CHEMIE

INSTITUTE OF PHYSICAL AND APPLIED CHEMISTRY

VYUŽITÍ POČÍTAČOVÉHO MODELOVÁNÍ KE STUDIU TRANSPORTNÍCH PROCESŮ V SYSTÉMECH OBSAHUJÍCÍCH HUMINOVÉ LÁTKY

INVESTIGATION OF TRANSPORT PROCESSES IN HUMIC SYSTEMS USING COMPUTER MODELLING

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE

BACHELOR'S THESIS

AUTOR PRÁCE

AUTHOR

Matěj Zeman

VEDOUCÍ PRÁCE

SUPERVISOR

Ing. Jiří Smilek, Ph.D.

BRNO 2024

Zadání bakalářské práce

Číslo práce: FCH-BAK2005/2023 Akademický rok: 2023/24
Ústav: Ústav fyzikální a spotřební chemie
Student: **Matěj Zeman**
Studijní program: Chemie pro medicínské aplikace
Studijní obor: bez specializace
Vedoucí práce: **Ing. Jiří Smilek, Ph.D.**

Název bakalářské práce:

Využití počítačového modelování ke studiu transportních procesů v systémech obsahujících huminové látky

Zadání bakalářské práce:

- Vypracovat literární rešerši na téma využití softwarového modelování ke studiu transportních vlastností v disperzních soustavách.
- Namodelovat transportní experimenty v COMSOL Multiphysics simulující reálné podmínky experimentu v laboratorním měřítku.
- Korelovat výstupy ze simulací s reálnými výsledky experimentů (laboratorní experimenty nebudou realizovány v závěrečné práci).
- Diskutovat výsledky modelování stejně jako použitelnost výstupů pro predikci transportních vlastností v systémech s huminovými látkami.
- Kriticky zhodnotit využitelnost softwarového modelování pro účely laboratorního studia transportních vlastností. Vyvozovat logické závěry.

Termín odevzdání bakalářské práce: 20.5.2024:

Bakalářská práce se odevzdává v děkanem stanoveném počtu exemplářů na sekretariát ústavu. Toto zadání je součástí bakalářské práce.

Matěj Zeman
student

Ing. Jiří Smilek, Ph.D.
vedoucí práce

prof. Ing. Miloslav Pekař, CSc.
vedoucí ústavu

V Brně dne 1.2.2024

prof. Ing. Michal Veselý, CSc.
děkan

ABSTRAKT

Tato bakalářská práce se zabývá problematikou difuze huminových kyselin. Hlavním cílem této práce je získání jednoduchého matematického modelu, který simuluje dialýzu barviva a huminové kyseliny a tím zkoumat vazebné možnosti huminových kyselin jako sorpčního činidla. Tento model byl zjednodušený natolik, aby se z něj dalo vycházet pro příští modelaci. Pro vytvoření modelu byl použit program COMSOL Multiphysics a v něm konkrétně moduly „Transport of Diluted Species“ a „Chemistry“, které umožňují simulaci výše zmíněných procesů.

Výsledky ukázaly, že sledování dialýzy v čase je pomocí tohoto modelu možné a zároveň lze sledovat sorpční vlastnosti těchto látek.

KLÍČOVÁ SLOVA

Difuze, dialýza, osmóza, huminové látky, huminové kyseliny, COMSOL, dialýza huminových kyselin, reakce barviva a huminové kyseliny, modelování

ABSTRACT

This bachelor's thesis deals with issue of humic acid diffusion. The main goal of this work is to obtain a simple mathematical model that simulates the dialysis of a dye and humic acid and thus to investigate the bonding properties of humic acids as a sorption agent. This model was simplified enough to be used as a basis for the next modelling. The COMSOL Multiphysics program was used to create the model, especially the „Transport of Diluted Species“ and „Chemistry“ modules, which enable simulation of the mentioned processes.

The results showed that it is possible to monitor dialysis over time using this model and at the same time the sorption properties of these substances can be observed.

KEYWORDS

Diffusion, dialysis, osmosis, humic substances, humic acids, COMSOL, dialysis of humic acids, reaction of humic acid and dye, modelling

ZEMAN, Matěj. *Využití počítačového modelování ke studiu transportních procesů v systémech obsahujících huminové látky [online]*. Brno, 2024 [cit. 2024-05-19]. Dostupné také z: <https://www.vut.cz/studenti/zav-prace/detail/156930>. Bakalářská práce. Vysoké učení technické v Brně, Fakulta chemická, Ústav fyzikální a spotřební chemie. Vedoucí práce Jiří Smilek.

PROHLÁŠENÍ

Prohlašuji, že jsem uvedenou bakalářskou práci vypracoval samostatně a také že jsem všechny použité zdroje jsem správně a úplně citoval. Bakalářská práce je z hlediska obsahu majetkem Fakulty chemické VUT v Brně a může být využita ke komerčním účelům jen se souhlasem vedoucího práce a děkana FCH VUT.

.....
Matěj Zeman

Na tomto místě bych rád poděkoval vedoucímu mé bakalářské práce Ing. Jiřímu Smilkovi, Ph.D. a konzultantovi prof. Ing. Miloslavovi Pekařovi CSc., za jejich přístup, rady, vedení a čas, který mi věnovali jak při vytváření modelu, tak při psaní této práce. Dále bych chtěl poděkovat mým blízkým, kteří mě podporovali a budou dál podporovat při studiu.

OBSAH

1 ÚVOD	7
2 TEORETICKÁ ČÁST	8
2.1 Difuze.....	8
2.1.1 1. Fickův zákon.....	8
2.1.2 2. Fickův zákon.....	8
2.1.3 Využití Fickových zákonů.....	9
2.1.4 Rozdíly v aplikovatelnosti Fickových zákonů.....	10
2.1.5 Difúzní koeficient.....	11
2.1.6 Stanovení difuzního koeficientu.....	12
2.2 Osmóza.....	13
2.3 Dialýza.....	14
2.3.1 Difuzní dialýza.....	14
2.3.2 Elektrodialýza	15
2.4 Huminové látky.....	16
2.4.1 Huminové kyseliny.....	17
2.5 Počítačové modelování.....	18
2.5.1 COMSOL Multiphysics®.....	18
3 SOUČASNÝ STAV	20
4 EXPERIMENTÁLNÍ STANOVENÍ	21
4.1 Nastavení souboru.....	21
4.2 Parametry.....	21
4.3 Geometrie.....	22
4.4 Transport od Diluted Species.....	24
4.5 Chemistry.....	28
4.6 Dokončení modelu.....	30
4.7 Vykreslení výsledků.....	31
4.8 Zpracování výsledků.....	39
5 VÝSLEDKY A DISKUZE	56
5.1 Výsledky při původní koncentraci barviva 0,01 g/l.....	56
5.2 Výsledky při původní koncentraci barviva 0,05g/l.....	59
5.3 Výsledky při původní koncentraci barviva 0,08 g/l.....	61

5.4	Výsledky při původní koncentraci barviva 0,1 g/l.....	64
6	ZÁVĚR.....	67
7	ZDROJE.....	68

1 ÚVOD

Huminové látky jsou známé svým vlivem na úrodnost půdy. Jednou z jejich součástí jsou huminové kyseliny. Huminové kyseliny kromě vynikajících efektů na úrodnost disponují ještě další velice perspektivní vlastností – mají vysokou sorpční schopnost. V přírodě se to projevuje například výrazným omezením mobility znečišťujících látek, respektive polutantů jako jsou těžké kovy, tenzidy, organická barviva a jiné. Z tohoto důvodu je důležité zjistit jejich strukturu a porozumět adsorbčním vlastnostem vůči těmto znečišťujícím látkám. To je nutné hlavně pro jejich praktické využití nejen v zemědělství, ale i v ochraně životního prostředí. V rámci této bakalářské práce byl vytvořen obecný model, pomocí kterého lze studovat sorpční vlastnosti látek při dialýze.

2 TEORETICKÁ ČÁST

2.1 Difuze

Difuze je jev, díky kterému se látka v systému přemístí z jednoho místa do jiného skrz náhodný pohyb molekul ve směru koncentračního gradientu. Většinou se látky pohybují z míst o vyšší koncentraci do míst s nižší koncentrací, kvůli rozdílu v Gibbsově volné energii tzv. Brownovým pohybem, jehož hlavním motorem je rozdíl v chemických potenciálech [1,2].

Crank difuzi popisuje na experimentu s vodou a jodem, ve kterém je na dně válcovité nádoby roztok jodu, na který se opatrně nalije voda tak, aby se nevytvořilo žádné proudění. Vytvoří se tak roztok, jehož spodní část je hnědá a vrchní část bezbarvá. Později v tomto experimentu zaniká viditelné rozhraní mezi částmi roztoku. Vrchní část se zbarví jemně do hněda a spodní část se jemně odbarví. Eventuálně je roztok v celém objemu zbarven stejně, dosáhlo se rovnováhy a koncentrace jodu je v každém místě roztoku stejná. Jod se tudíž dostal bez přítomnosti proudění i do vrchní vrstvy-difundoval [1].

Rychlost difuze lze popsat difuzním tokem J ($\text{mol} \cdot \text{s}^{-1}$), který se definuje jako látkové množství difundující látky, která za časovou jednotku projde jednotkovou plochou kolmou na směr difuze. Platí pro ni vztah (rovnice 1):

$$J = u \cdot c \quad (1)$$

kde u je střední rychlost toku částic a c je koncentrace částic.

Matematická teorie difuze byla v roce 1855 definována Fickem a jeho zákony. Existují i jiné typy difuze-jestli jde difuze matematicky popsat Fickovými zákony, jedná se o tzv. normální difuzi, jestli ne, jedná se o anomální difuzi [1].

2.1.1 1. Fickův zákon

V roce 1855 přišel s novým zákonem Adolf Fick, který vycházel z práce Thomase Grahama a inspiroval se Fourierem a jeho zákonem o vedení tepla, ve kterém našel jisté podobnosti [3].

Teorie v izotropních systémech (v systémech, kde nezáleží na směru, v tomto případě difuze) tedy říká, že rychlost přenosu difundující látky přes jednotku plochy je přímo úměrná koncentračnímu gradientu měřenému kolmě k oblasti, kam látka difunduje (rovnice 2):

$$J = -D \frac{dc}{dx} \quad (2)$$

kde J je difuzní tok ($\text{mol} \cdot \text{s}^{-1}$), c je koncentrace látky ($\text{mol} \cdot \text{l}^{-1}$), x (m^{-1}), je prostorová souřadnice měřena kolmě k oblasti a D je difuzní koeficient ($\text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$). Difuze postupuje v opačném směru k rostoucí koncentraci, proto je v rovnici použito záporné znaménko.

Tato rovnice platí pouze pro izotropní systémy, respektive pro systémy, kde difuzní koeficienty a struktura prostředí jsou v libovolném bodě ve všech směrech stejné [1,4,5].

2.1.2 2. Fickův zákon

2. Fickův zákon popisuje nestacionární difuzi. V takovém případě se mění koncentrační gradient v čase a difuzní tok se mění s polohou – jejím umístěním v systému. K vyjádření tohoto zákona v daném objemu lze dojít tímto způsobem [5]:

V objemu V narostla koncentrace za čas dt , tudíž v něm přibylo látkové množství dn dané látky (rovnice 3):

$$V = S \cdot \Delta x \quad (3)$$

Kde V je objem, S plocha a x prostorová souřadnice (rovnice 4),

$$dn = (J - J') \cdot S \cdot dt \quad (4)$$

Dále platí, že (rovnice 5):

$$dc = \frac{dn}{V} \quad (5)$$

Po dosazení rovnic 3 a 4 do rovnice 5 dostáváme (rovnice 6):

$$dc = \frac{(J - J') \cdot S \cdot dt}{S \cdot \Delta x} \Rightarrow \frac{dc}{dt} = \frac{(J - J') \cdot S}{S \cdot \Delta x} = \frac{-\Delta J}{\Delta x} \quad (6)$$

Po dosazení rovnice 1 do rovnice 6 (rovnice 7):

$$\frac{dc}{dt} = -\frac{\Delta J}{\Delta x} = -\frac{dJ}{dx} = \frac{d\left(-D \cdot \frac{dc}{dx}\right)}{dx} \quad (7)$$

a po úpravách se vyjadřuje 2. Fickův zákon ve tvaru (rovnice 8):

$$\frac{dc}{dt} = -D \cdot \frac{d^2c}{dx^2} \quad (8)$$

Rovnice 8 popisuje koncentraci látky v systému jako funkci času a pozice a její řešení je závislé, jak na podmínkách reakce jako je teplota, tlak nebo o jakou látku se jedná, tak na difuzním koeficientu D [5].

2.1.3 Využití Fickových zákonů

Jelikož Fickovy zákony pojednávají o difuzi, tak je jejich uplatnění velice široké. Jedná se hlavně o obory:

a) Biologie

V biologii se jimi dají vyjádřit difuzní procesy v buňkách a tkáních. Například se může jednat o vstup živin do buněk, nebo o výměnu plynů v plicích při respiraci [33].

b) Chemie

V chemii se používá při popisu rozpouštění látek v rozpouštědlech a prakticky při jakýchkoliv jiných difuzních procesech v tekutinách i pevných látkách [34].

c) Inženýrství

V inženýrství se používá například v procesech difuzní separace, nebo při výrobě membránových filtrů [35].

d) Potravinářství

V potravinářství se jedná například o procesy spojené s balením. Popisuje, jak látky difundují skrz obaly a jak to ovlivňuje jejich trvanlivost [36].

e) Materiálový výzkum

V materiálovém výzkumu se jedná například o vývoj baterií, kde se studuje difuze iontů v pevných látkách [35].

f) Farmacie

Ve farmacii pomáhá porozumět procesům při distribuci léčiv v těle [37].

g) Enviromentální věda

V enviromentální vědě se používá pro modelování transportu látek v půdě, vodách i vzduchu. To je klíčové pro porozumění procesů jako je znečištění [38].

2.1.4 Rozdíly v aplikovatelnosti Fickových zákonů

Situací, kdy je vhodnější použít pouze jeden z Fickových zákonů je relativně hodně. Skvěle se ovšem dají popsat pomocí dvou příkladů, konkrétně pomocí difuze skrz tenký film a volné difuze [1,6].

Difuze skrz tenký film

Pro tento případ platí (rovnice 9):

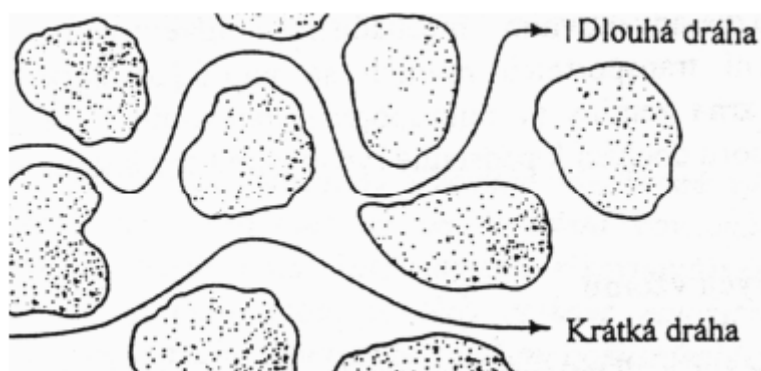
$$\frac{dc}{dt} = 0 \quad (9)$$

Z toho vyplývá, že v této situaci se použije 1. Fickův zákon, ze kterého se stanovuje difuzní tok J a koncentrace v daných místech. Respektive, jaké množství je transportováno přes tenký film a jak se mění koncentrace v objemu. Pokud je znám difuzní tok J , tak je možné stanovit difuzní koeficient D [4,6].

Na každé straně tenkého filmu (membrány) je roztok s látkami o různých koncentracích. Rozpuštěná látka difunduje skrz membránu z místa o vyšší koncentraci do míst s nižší koncentrací. Za předpokladu, že nedochází k akumulaci látky v membráně a proces je ustálený, tak množství látky vstupující do membrány a vystupující z membrány je stejné, takže rychlost difuze ovlivňuje pouze difuzní tok [4,6].

Jelikož není difuzní tok závislý na čase, tak množství difundované látky skrz membránu roste v čase lineárně [4,6].

Pokud by byla membrána vyměněna za mikroporézní destičku, tak už není difuzní proces jednodimenzionální, jelikož musí být brána v úvahu tortuozita, protože je trajektorie částice přes bariéru zakřivená tudíž se již nejedná o aplikaci 1. Fickova zákona.



Obrázek 1: Příklad zakřivení trajektorie difundujících částic [6]

Tzv. tortuozita se v rámci zjednodušení zahrnuje do tzv. efektivního difuzního koeficientu, který vzniká pomocí tohoto i jiných zjednodušení.

Difuzní tok se následně počítá pomocí rovnice (rovnice 10):

$$j = \left(\frac{D_{eff} \cdot H}{l} \right) \cdot \Delta c \quad (10)$$

kde D_{eff} je výše zmíněný efektivní difuzní koeficient, H rozdělovací koeficient (udává míru rozložení látky v systému – pokud se látka v nějakém místě vlivem interakcí koncentruje a někde ne, tak vzniká koncentrační gradient, což lze poté popsat jako rozdělovací koeficient), l je tloušťka vrstvy a Δc změna koncentrace.

Volná difuze

Volná difuze je soubor neustálých difuzních procesů v polonekonečném prostředí, čímž je myšleno prostředí, které má na začátku rozhraní a je dlouhé, myšleno tak, že během difuzního procesu difundující látka nedosáhne konce prostředí, tj. na úplném konci je v každém čase koncentrace difundující látky nulová. Na rozhraní dochází k velkému nárůstu koncentrace oproti původnímu stavu a takto se vytváří koncentrační gradient, který vede k difuzi látky dále do systému. Proto se systém chová v dostatečných difuzních časech jako polonekonečný. Díky tomu, že se koncentrace v čase mění, tak tento proces popisují oba Fickovy zákony. Například roztok oddělený membránou, jako v případě difuze skrz tenký film, má v celém objemu konstantní koncentraci s výjimkou membrány, protože se v ní uplatňuje vliv rozdělovacího koeficientu. Pokud na jedné straně vzroste koncentrace, tak vzroste koncentrace i v membráně a tím se vytváří neustálený stav a koncentrační gradient v membráně. V dostatečně krátkém čase tak zůstává koncentrace na druhé straně konstantní a v membráně se vytváří koncentrační profil. Teoreticky se dá říct, že se jedná o model konstantního zdroje, kde nedochází ke změně koncentrace na jedné straně, ale k vysokému příbytku na straně druhé [1,6].

Difuzní tok se následně vypočítá po různých úpravách rovnicí (rovnice 11):

$$j = -D \frac{dc}{dz} = \sqrt{D/\pi t} \Delta c \quad (11)$$

kde Δc označuje rozdíl koncentrací (v čase $t \neq 0$ a na konci systému).

Z této rovnice plyne, že je difuzní tok funkcí polohy a času.

Po dostatečné době se pak systém dostává zpátky do rovnováhy [1,6].

2.1.5 Difúzní koeficient

Difuzní koeficient je materiálová konstanta, pomocí které se vyjadřuje rychlost difuzního procesu. Je přímo úměrný difuznímu toku. Pokud se budeme bavit pouze o jednodimenzionální definici, tak se difuzní koeficient dá definovat jako rychlost přesunu difundující látky přes jednotku plochy sekce dělený prostorovým gradientem koncentrace této sekce. Pokud je tedy difuzní tok, respektive rychlost přenosu množství látky z čas J , koncentrace difundující látky C a x vyjadřuje prostorovou souřadnici, dostáváme se zpět k 1. Fickovému zákonu (rovnice 1) [1]:

$$J = -D \frac{dc}{dx} \quad (1)$$

Při použití této definice v praxi je ovšem nutné důkladně specifikovat použitou sekci a hlavně jednotky, ve kterých se J , c a x měří. Je to z důvodu závislosti jednotky tohoto koeficientu na jednotkách zbývajících veličin [1].

Pokud budeme uvažovat vzájemnou difuzi dvou kapalin A a B v uzavřené nádobě a předpokládat, že nebude docházet ke změně objemu obou kapalin při difuzi, tak je možné definovat dva difuzní koeficienty, D_A^V a D_B^V pomocí vztahů (rovnice 12a a 12b) [1]:

$$J_A = -D_A^V \frac{dc_A}{dx} \quad (12a)$$

$$J_B = -D_B^V \frac{dc_B}{dx} \quad (12b)$$

kde c_A a c_B jsou koncentrace látek A a B měřeny v ($\text{mol} \cdot \text{m}^{-3}$), J_A a J_B jsou difúzní toky těchto látek měřeny v ($\text{mol} \cdot \text{s}^{-1}$), počátek měření x odpovídá tomu, že x -ová souřadnice řezu je konstantní a měří se v (m). Pokud se používá pro měření vzdálenosti x (m), tak se pro objem musí použít korespondující jednotka respektive V (m^3). Kvůli výše zmíněné závislosti jednotky difúzního koeficientu na jednotkách veličin, skrz které se počítá, pak platí, že jednotky pro D_A^V a D_B^V jsou $m^2 \cdot s^{-1}$ (indexy V u difuzních koeficientů znamenají, že objem je konstantní) [1].

Hodnota difuzního koeficientu v plynech nabývá hodnot okolo $0,1 \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$, v kapalinách okolo $10^{-5} \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$, v pevných látkách je jeho hodnota do značné míry závislá na teplotě a pohybuje se okolo $10^{-10} \text{ cm}^2 \cdot \text{s}^{-1}$. Co se týče polymerů, tak je jeho hodnota někde v rozmezí mezi kapalinou a pevnou látkou [6].

Nejpoužívanější rovnicí pro jeho stanovení je Stokesův-Einsteinův zákon (rovnice 13) [6]:

$$D = \frac{k_B \cdot T}{f} = \frac{k_B \cdot T}{6 \cdot \pi \cdot \mu \cdot R_0} \quad (13)$$

kde k_B představuje Boltzmannovu konstantu ($J \cdot K^{-1}$), T termodynamickou teplotu (K), f frikční koeficient ($kg \cdot s^{-1}$), μ viskozitu soustavy ($m^2 \cdot s^{-1}$) a R_0 odpovídá poloměru difundující látky (m). Stokesův-Einsteinův zákon platí pouze pro kruhovitě částice [6].

2.1.6 Stanovení difuzního koeficientu

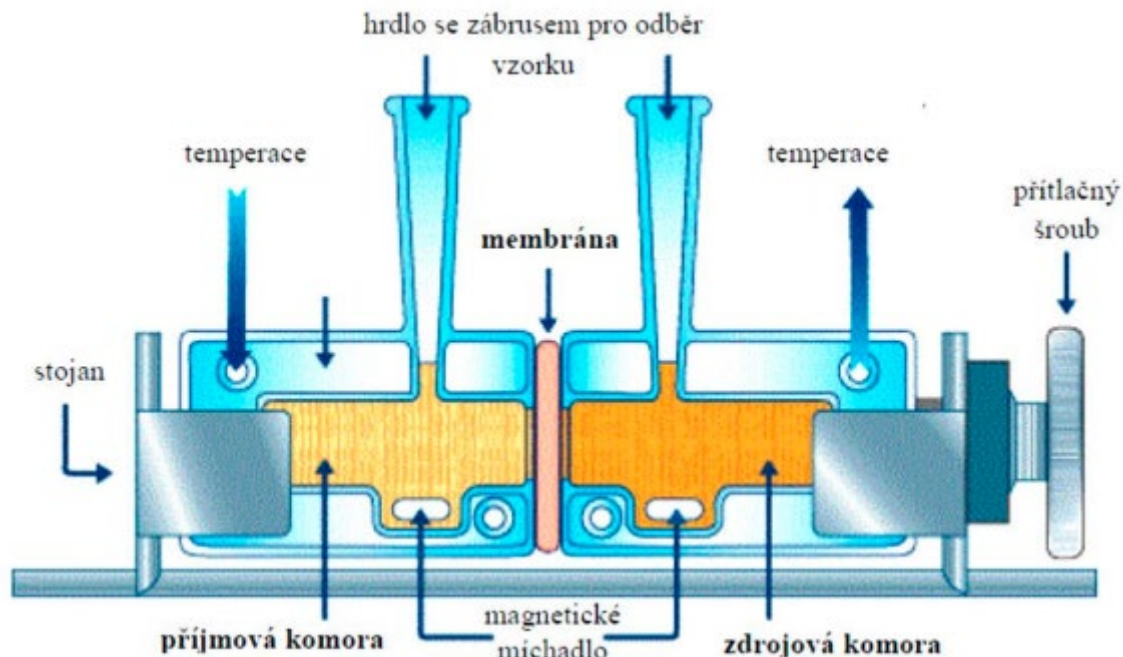
V minulosti bylo měření difuzního koeficientu drahé a mnohdy nepřesné, ale v dnešní době, díky rozvoji analytických metod, lze difuzní koeficienty stanovovat relativně jednoduše s odchylkou 5-10 % [6].

Metod, kterými lze difuzní koeficient stanovit je řada. Jedny z nejpoužívanějších metod jsou metoda difuzní cely, nebo metoda nekonečného zdroje [6].

Metoda difuzní cely

Výhodou této metody je její přesnost, ale hlavně cena. Další výhodou může být i její plná automatizace, která je výhodná hlavně z důvodu, že experimenty mohou trvat řádově i dny.

S její pomocí se dá dosáhnout výsledků s odchylkou pouze okolo 0,2 %. Za jednu z jejich největších nevýhod se dá považovat vysoká spotřeba stanovovaných látek [6].



Obrázek 2: Schéma difuzní cely [7]

Pro stanovení difuzního koeficientu pomocí této metody je nutné znát změny koncentrací látek v čase. Při metodě difuzních cel lze využít například UV-VIS spektrofotometrii.

Difuzní koeficient lze poté vypočítat rovnicí (rovnice 14) [6]:

$$D = \frac{1}{\beta \cdot t} \cdot \ln \left[\frac{(c_{1,zdrojová} - c_{1,příjmací})_t}{(c_{1,zdrojová} - c_{1,příjmací})_0} \right] \quad (14)$$

kde t označuje čas experimentu (s), D difuzní koeficient (pokud se jedná o porézní médium, tak se jedná o efektní difuzní koeficient a je do něj zahrnuta porozita a tortuozita) ($m^{-2} \cdot s^{-1}$). Za přirozeným logaritmem ve výrazu je ve jmenovateli rozdíl koncentrací ($mol \cdot m^{-3}$) v jednotlivých celách v čase t a v jeho čitateli tento rozdíl v čase 0. β zastupuje konstantu difuzní cely, kterou lze vypočítat rovnicí (rovnice 15) [6]:

$$\beta = \frac{A}{l} \ln \left(\frac{1}{V_{příjmací}} + \frac{1}{V_{zdrojová}} \right) \quad (15)$$

kde A (m^2) je plocha, přes kterou difuze probíhá, l je tloušťka membrány (m) a V jsou objemy difuzních cel (m^3). Hodnota difuzní konstanty β se musí stanovovat experimentálně pomocí materiálu, jehož difuzní vlastnosti jsou dobře prozkoumány (např. chlorid draselný) [6].

2.2 Osmóza

Osmóza je jinými slovy transport disperzního prostředí přes semipermeabilní membránu. Tento proces je velmi důležitý v biologii a byl poprvé důkladně prostudován v roce 1877 německým fyziologem rostlin Wilhelmem Pfefferem. Dříve se prováděly méně přesné studie netěsných membrán (např. zvířecích měchýřů) a průchodu vody a unikajících látek skrz ně v opačném

směru. Obecný termín osmóza byl zaveden v roce 1854 britským chemikem Thomasem Grahamem [8].

Pokud je roztok oddělen od čistého rozpouštědla membránou, která je propustná pro rozpouštědlo, ale ne pro rozpuštěnou látku, pak má roztok tendenci se více zředit přijutím rozpouštědla přes membránu. Tento děj se nazývá osmóza. Působením tlaku na stranu roztoku s větší koncentrací rozpouštěné látky lze tento proces zastavit, nebo úplně zvrátit. Minimálnímu tlaku na zastavení toho děje se říká osmotický tlak. Vztah pro výpočet osmotického tlaku rozpouštědla je definován rovnicí (rovnice 16):

$$\Pi = \frac{R \cdot T}{v_{\text{rozpouštědlo}}} \ln(x_{\text{rozpouštědlo}} \cdot \gamma_{\text{rozpouštědlo}}) \quad (16)$$

kde Π zastupuje osmotický tlak (Pa), R univerzální plynovou konstantu ($J \cdot K^{-1} \cdot mol^{-1}$), T teplotu (K), v molární objem čistého rozpouštědla definovaný za daných podmínek ($m^3 \cdot mol^{-1}$) a x molární zlomek. γ je aktivitní koeficient rozpouštědla [9].

Jestliže působíme osmotickým tlakem větším, než je potřeba na pouhé zastavení osmózy, na stranu roztoku přes polopropustnou membránu, tak vzniká separační technika-reverzní osmóza.

Reverzní osmóza se využívá v řadě odvětví, hlavně pro zvýšení koncentrace v roztocích, nebo naopak pro čištění rozpouštědla. Jejím ekologicky nejvýznamnějším využitím je čištění odpadních vod [10,11].

2.3 Dialýza

Dialýza je chemický proces, při kterém se dělí větší koloidní částice od menších molekul (anebo analytických částic, iontů atd.) difuzí (a/nebo osmózou) přes polopropustnou membránu. Využití dialýzy je široké, hlavní obory užívající tuto rozdělovací techniku jsou zdravotnictví, potravinářství a chemie. Probíhá tak, že v dialyzační trubici, oddělené polopropustnou membránou od zbytku rozpouštědla, je veškerý vzorek a podle velikosti částic se molekuly vzorku mohou a nemusí dostat přes membránu (jedná se tedy o semipermeabilní membránu). Jinými slovy, když je částice dostatečně malá, aby se z trubice dostala do zbytku roztoku, tak může projít skrz membránu. Je to tomu tak, protože se snaží vyrovnat svou koncentraci po celém objemu roztoku. Z míst s větší koncentrací tímto způsobem přechází vzorek do míst s nižší koncentrací a zároveň svou koncentraci v celém objemu vyrovnává i rozpouštědlo. Zmíněná vyrovnávání koncentrací jsou vlivy difuze a osmózy při dialýze [12, 13, 14].

Dialýzu objevil v roce 1961 skotský chemik Thomas Graham, který je známý hlavně kvůli jejímu objevu. Je jedním ze zakladatelů koloidní chemie. Představil ji při oddělování sacharózy a arabské gummy, což je směs polysacharidu (arabinogluktan) a glykoproteinů ve vodném roztoku. Molekula sacharózy je daleko menší, takže může difundovat skrz membránu. Molekuly schopné difuze pojmenoval krystaloidy a ty, které zůstaly v cele, nazval membránové koloidy [15].

Dva základní typy dialýzy jsou difuzní dialýza a elektrodialýza. Obecně se dialyzační metody typově rozdělují podle toho, jestli jimi prochází elektrický proud, či nikoliv.

2.3.1 Difuzní dialýza

Difuzní dialýza byla popsána v úvodu kapitoly. Jedná se tedy o rozdělování částic podle jejich velikosti a tvaru skrz polopropustnou membránu. Molekuly se pohybují náhodným

Brownovým pohybem ve směru koncentračního gradientu. Tímto způsobem se snižuje Gibbsova volná energie a entropie se zvyšuje. Oddělování je závislé na různých faktorech – velikost a tvar, náboj částice, pH, teplota, tlak atd. Membrány jsou většinou z celulózy, nebo esterů celulózy. Jsou navrženy tak, aby propouštěla pouze určitý iont. Nejčastěji se používá při oddělování kyselin od jejich solí [12, 16].

Membrány, které jsou silně alkalické, tudíž jimi mohou procházet záporně nabitě ionty, jsou označovány jako AEM (*Anion Exchange Membrane*). Z toho vyplývá, že membránou projde anion kyseliny, např. SO_4^{2-} . Nicméně roztok musí být elektricky neutrální, a tak se skrz membránu dostávají i kationty. Pokud si tedy řekneme, že původní sůl byla CuSO_4 a rozpouštědlo je voda, tak membránou budou difundovat buď měďnaté, nebo vodíkové kationty. Voda, která v tomto případě figuruje jako rozpouštědlo, poskytuje více kationtů vodíku než síran měďnatý měďnatých iontů. Tím pádem s největší pravděpodobností tyto vodíkové kationty projdou membránou a separuje se čistá kyselina sírová [12, 13, 16].

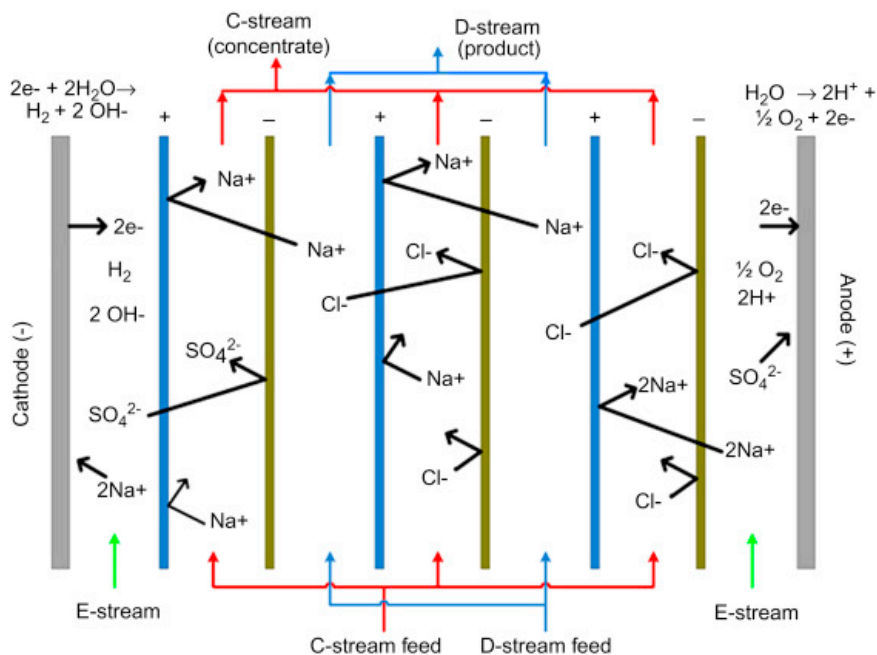
V opačném případě, když je membrána acidická, označována CEM (*Cation Exchange Membrane*), mohou procházet membránou právě kationty. Když si vezmeme předchozí případ, tak budou měďnaté kationty procházet membránou. Aby roztok zůstal elektricky neutrální, tak s daleko větší pravděpodobností membránou budou difundovat hydroxylové anionty, než SO_4^{2-} skupiny a bude vznikat čistý hydroxid měďnatý [12, 16].

Tento proces se v dnešní době stává velice oblíbeným, díky nízké spotřebě energie a nízkým nákladům na vybavení a jeho údržbu [12, 16].

2.3.2 Elektrodialýza

Elektrodialýza je separační metoda založená na sadě membrán – AEM i CEM ve stejnosměrném elektrickém poli vytvářeného katodou a anodou. Anionty putují k anodě a kationty ke katodě. Vzhledem k typu membrány prochází, nebo ne. Když už nemohou difundovat, tak reagují s opačně nabitým iontem a odchází po proudu kapaliny z roztoku, jako tzv. koncentrát. Kapalína takhle zbavená iontů se nazývá diluát [17,18].

Používá se například k odsolování mořské vody (Obrázek 3).



Obrázek 3: Schéma odsolování mořské vody [18]

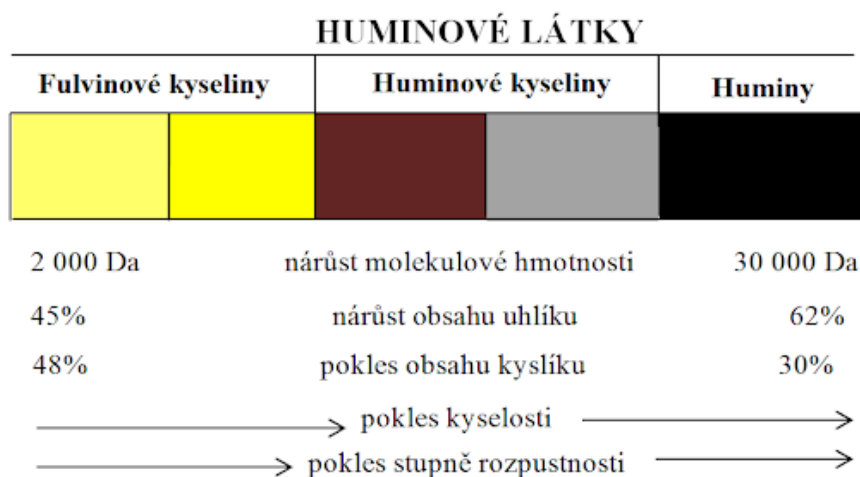
2.4 Huminové látky

Huminové látky je velice široký pojem. Jsou to složité rozvětvené cyklické struktury, které jsou nesmírně důležitou součástí půdy, rašeliny, uhlí a sedimentů. Jejich obsah v půdě kolísá od stopových množství (písek, jíl) přes jednotky procent (běžná hlína) až po desítky procent (hnědé uhlí, lignit). Jsou konečným produktem biotických i abiotických rozkladných procesů, a tím tvoří organickou složku půdy, respektive humus. Jejich důležitost pro člověka tkví hlavně v zemědělství. Jsou uplatněny jako zdroje živin – biogenních prvků (C, O, H, N). Navíc tvoří cheláty s atomy kovů (železo, mangan atd.) a umožňují tím rostlinám lepší vstřebávání těchto prvků. Tyto kovy jsou důležité zejména pro tvorbu kofaktorů, bez kterých by některé enzymatické reakce rostlin nemohly proběhnout a rostliny by nemohly správně fungovat. Zároveň fungují jako půdní pufr, jelikož udržují pH půdy. Udržují také její teplotu a díky své vysoké reaktivitě pomáhají odbourávat toxické látky. Jejich reaktivita je zapříčiněna jejich vznikem. Jelikož vznikají degradací odumřelých organismů, tak jejich majoritně zastoupené funkční skupiny jsou stejné – karboxylové, karbonylové, fenolové, hydroxylové, aminové, amidové atd. Z tohoto důvodu se nedají dost dobře separovat a zároveň zastoupení degradovaných organismů je rozdílné, takže není jednoduché přímo určit strukturu [19, 20, 21, 22, 23, 24, 25].

Huminové látky se dělí na základě rozpustnosti v hydroxidech (sodném a draselném). Z definice se dělí na huminové kyseliny (rozpustné ve vodě od $pH > 2$), fulvinové kyseliny (rozpustné ve vodě v každém pH) a huminy (nerozpustné ve vodě). Huminové a fulvinové kyseliny jsou v těchto hydroxidech rozpustné a huminy představují nerozpustný zbytek. Liší se, jak elementárním složením (Tabulka 1), tak fyzikálně chemickými vlastnostmi a zřetelně i barvou (obrázek 4) [26].

Tabulka 1 Procentuální zastoupení prvků v huminových látkách [23]

Huminová látka	Atomové složení (%)			
	C	O	H	N
Huminové kyseliny	52–62	30–39	2,5–5	3–5
Fulvinové kyseliny	45–48	43–48,5	5–6	0,5–2



Obrázek 4 Srovnání jednotlivých huminových látek [27]

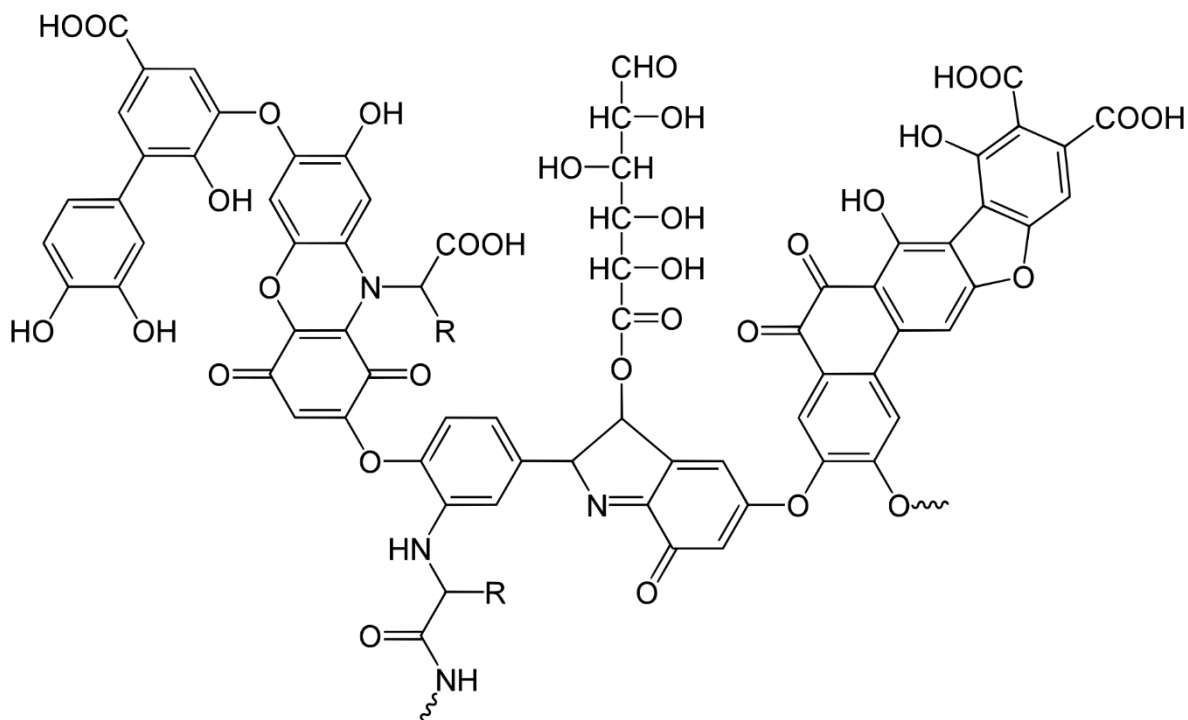
2.4.1 Huminové kyseliny

Jsou velmi ceněnou složkou huminových látek kvůli jejich vysokému obsahu uhlíku a dalších živin, rozpustnosti a dalším vlastnostem. Mají polyaniontový charakter – jsou schopny reagovat s širokou škálou nenabitých molekul i iontů díky vysoké reaktivnosti obsažených skupin např.: hydroxyly, aminy, karboxyly, karbonyly atd. Mají redukční vlastnosti. V minulosti byly vnímány jako organické kyseliny, tudíž se na ně uplatňovaly teorie kyselin a zásad – organická kyselina a její konjugovaná báze. Z tohoto úhlu pohledu byly definovány jako látky, které jsou extrahovány z půdy a při reakcích s hydroxidy koagulují [22, 25].

V dnešní době panuje spíše názor, že jsou to supramolekuly (obrázek 5) spojené nekovalentními interakcemi jako vodíkové můstky, Van Der Waalsovy síly, π - π interakce a iontové vazby. Díky již zmíněnému polyaniontovému charakteru výborně vážou kovy a stávají se nerozpustnými. Tato schopnost roste s molekulovou hmotností kovu, takže skvěle vážou například rtuť, olovo, kadmium, nebo baryum. Tvorbou těchto chelátů s kovy výrazně ovlivňují úrodnost půdy, jelikož tyto kovy jsou důležité pro tvorbu kofaktorů enzymů. Kromě kovů na sebe vážou i jiné toxické molekuly, například mikrobiální toxiny, mykotoxiny, fytotoxiny nebo amoniak, které se následně stávají netoxickými. Toho se využívá v řadě vědních oborů a medicíně [28, 20].

Díky těmto vlastnostem jsou tedy velice ceněny v zemědělství. Jinými slovy, jejich přínos v tomto odvětví spočívá v kladném ovlivňování všech půdních vlastností, které souvisí s úrodností a obsahem živin půdy. Pomáhají zadržovat vodu a živiny a zároveň pomáhají ve

vstřebávání těchto látek rostlinám. Podporují i růst půdních mikroorganismů. Kvůli již zmíněným efektům jsou součástí hnojiv, pesticidů a podobných látek ovlivňující půdu [21, 22].



Obrázek 5 modelová struktura huminové kyseliny [32]

2.5 Počítačové modelování

Počítačové modelování je způsob, jak levně (někdy i rychle) získat informace o dané inženýrské úloze, která je popsána vhodným matematickým modelem. V modelu lze měnit parametry a pozorovat změny ve výsledném řešení. Používá se v praxi pro simulaci složitějších úloh. Většinou není výhodné, někdy ani možné, řešit danou problematiku analyticky. Z tohoto důvodu se uchyluje v nejrůznějších odvětvích (věda, technika, ekonomie) k modelování.

Výhodou modelování je rychlost výpočtů, takže je možné provést za krátký čas velké množství výpočtů s různými parametry a tím zpracovat velké objemy dat.

Samotné modelování lze rozčlenit do několika kroků. Prvním krokem je převedení dané problematiky do matematického modelu. V tomto kroku dochází většinou k aproximaci problému – některé vlivy vyskytující se ve skutečnosti jsou zanedbávány (například neideálnost). Dalším krokem je výběr odpovídajícího algoritmu, pomocí kterého lze provést simulaci. Poté je na řadě samotná modelace problému a zhodnocení výsledků. Výsledky se značně odvíjí od použitého modelu a postupu výpočtů.

Softwary, ve kterých je možné modelovat jsou například Matlab, Simulink, Multiphysics nebo Maple [29].

2.5.1 COMSOL Multiphysics®

COMSOL Multiphysics® je inženýrský program určený k tvoření matematických modelů pomocí metody konečných prvků. V softwaru lze modelovat celou škálu procesů od

jednoduchých fyzikálních (např. přesun tepla v materiálu) po složité multifyzikální (např. model motoru). Díky této komplexnosti lze dosáhnout v programu potřebné věrohodnosti.

Součástí programu je také knihovna, ve které si uživatel může vybrat již předdefinovaný model, který ulehčuje modelování. Ke každému modelu je také k dispozici prezentace vysvětlující děj a postup modelování, podle kterého si uživatel může namodelovat tento děj sám.

K samotnému programu se dají dokoupit ještě rozšiřující moduly – *Electrical, Structural & Acoustics, Fluid & Heat, Chemical* a *Multipurpose*. Každý z modulů má své využití a lze je mezi sebou kombinovat. Například pro modelování dialýzy se propojí moduly *Fluid & Heat* a *Chemical*. Je to z toho důvodu, že je potřebné sledovat jak tok kapaliny a její difuzi, tak chemickou reakci, která v systému probíhá.

Samotné modelování lze následně rozdělit do několika základních kroků:

1. Nastavení modelovacího prostředí

- 1.1. Nastavení dimenze (0D, 1D, 1D osově symetrický, 2D, 2D osově symetrický a 3D)
- 1.2. Výběr studie (závislá na čase, závislá na prostoru)
- 1.3. Výběr fyziky (z jakéhokoliv modulu)

2. Geometrie modelu

- 2.1. Nastavení parametrů a proměnných (délky, koncentrace, difuzní koeficienty atd.)
- 2.2. Výběr materiálu (materiál lze vybrat z knihovny materiálu, nebo jeho vlastnosti nastavit ručně)
- 2.3. Samotné modelování geometrie

3. Nastavení definice

- 3.1. Definování jednotlivých proměnných do geometrického modulu

4. Definování fyzikálního ohraničení

- 4.1. Definování jednotlivých fyzikálních dějů včetně proměnných (např. jakým směrem proudí kapalina o dané koncentraci)

5. Tvorba mřížky

6. Provedení studie

7. Zhodnocení výsledků

- 7.1. Zhodnocení výsledků
- 7.2. Vyhledání chyb
- 7.3. Korelace s reálnými daty

Další možností vedoucí k urychlení úpravy jednotlivých proměnných je vytvoření aplikace.

Z jednotlivých modelů lze vytvořit i aplikaci, ve které lze jednoduše a rychle upravovat vybrané podmínky například: změna koncentrace, napětí, hustoty atd.

Tyto aplikace mají široké využití a většinou jsou výsledkem modelování. Využití mohou být průmyslová, nebo i vzdělávací [30, 31].

3 SOUČASNÝ STAV

V současné době je výzkum huminových kyselin široký. Zejména se jedná o jejich roli v půdním zdraví, vlivu na rostlinný růst a obecně v zemědělství. Jedná se například o zlepšení půdní struktury a zadržování živin. Navíc se zkoumají potenciální aplikace v oblasti ochrany životního prostředí, včetně čištění vod a půdy. Tyto studie jsou založeny na chemické analýze, experimentech s rostlinami a modelování procesů v půdě. Vzhledem k jejich komplexnosti a různorodosti se výzkum huminových kyselin stále vyvíjí a přináší nové poznatky.

V současné době je program COMSOL Multiphysics jedním z předních nástrojů pro multifyzikální simulace a modelování vědeckých a inženýrských problémů. Jeho aktuální přednosti se dají rozdělit mezi několik oblastí. Prvním z nich jsou multifyzikální simulace, které umožňují uživatelům modelovat a simulovat jevy, které zahrnují více fyzikálních domén, například tepelné, mechanické, elektromagnetické, chemické, nebo akustické jevy, zároveň. To je zásadní pro analýzu složitých systémů, které zahrnují interakce mezi různými fyzikálními procesy. Další výhodou je uživatelsky přívětivé prostředí, které je velmi grafické a intuitivní a tím umožňuje vytvářet, upravovat a řešit modely relativně jednoduše. Zároveň je hodně flexibilní. Dají se přidávat nové funkcionality pomocí skriptovacích jazyků, jako je MATLAB a Python a tím přizpůsobit program specifickým potřebám uživatele. Je velmi efektivní a pořád se vyvíjí a díky tomu je možné provádět detailní analýzu (klidně i složitých systémů) v krátkém čase. COMSOL poskytuje svým uživatelům i širokou škálu podpůrných materiálů, a to včetně dokumentace, tutoriálů a online komunity, kde se mohou uživatelé sdílet své zkušenosti.

V nejnovějších studiích obsahující molekulární reakce látek využívajících program COMSOL Multiphysics byl tento program využit hned několika způsoby.

Studie zabývající se syntézou anhydridu kyseliny 3/4-methyltetrahydroftalové pomocí Diels-Alderovy reakce v kontinuálním průtokovém kapilárním reaktoru použila tento program pro zjištění přesných konstant reakčních rychlostí a aktivační energie pentadienu s roztaveným anhydridem kyseliny maleinové. Také pomocí simulací zjistili, optimální průměr kapilár a dobu reakce [38].

Ve studii, která se zabývá zelenou syntézou (ekologická metoda produkce) nanočástic oxidu wolframového a tantalu byl program použit pro srovnání teoretických hodnot s reálnými daty. Studie, ve které se jednalo o využití nanočástic tantalu a oxidu wolframového byly zkoumány vlivy těchto nanočástic při fotokatalytických procesech a jejich vlivu na rozklad methylenové modři pomocí UV záření. V této studii byl program ještě využit pro vzdělávací účely – pomocí simulací byly vytvořeny modely, které čtenářům lépe pomohly pochopit aspekty zkoumaných fotokatalytických jevů [39].

4 EXPERIMENTÁLNÍ STANOVENÍ

V experimentální části byla provedena modelace dialýzy huminové kyseliny a barviva. Prvním krokem bylo vytvoření a definice souboru. Byl vytvořen nový soubor Comsol Multiphysics, zvolena dimenze modelování jako 2D, vybrány moduly *Transport of Diluted Species* a *Chemistry* a typ studie vhodný pro dialýzu huminových kyselin-*Time Dependent Study*. Následně byly přidány základní parametry-počáteční koncentrace látek, průměr membrány a délka komory, které byly následně platné v celém souboru. Tyto parametry jsou proměnné s fixovanou hodnotou a slouží pouze proto, aby uživatel programu nemusel pokaždé, když potřebuje napsat například koncentraci látky A psát její hodnotu, ale pouze proměnnou, která ji zastupuje. Zároveň se dají hodnoty proměnných změnit, takže když by uživatel potřeboval změnit například výše zmíněnou koncentraci látky A na dvojnásobek, tak tuto hodnotu změnit pouze v těchto parametrech. Dále byla nadefinována geometrie. Geometrií je myšleno prostředí, kde se difuze uskuteční. V laboratoři by to mohla být například kádinka. Zde byly použity dva obdélníky, které sloužily jako reakční cely a předěl mezi nimi jako polopropustná membrána. Po nadefinování geometrie byla nadefinována fyzika, která stojí za celým řešením problému pomocí modulů. První modul, který byl použit a díky kterému je možné zobrazit dialýzu, je *Transport of Diluted Species*. Tento modul je zásadní, a bylo v něm prováděno nejvíce modelace. Prvně byla přidána imaginární třetí dimenze pro výše zmíněné obdélníky a také látky vyskytující se v reakci. Poté byl předěl mezi obdélníky definován jako polopropustná membrána. V každém obdélníku, nyní už reakční cele, byly upraveny vlastnosti jednotlivých látek a bylo zdůrazněno, kde se reakce odehrává. Dále byl použit modul *Chemistry*, ve kterém byla nadefinována vratná reakce. Reakce se účastnily dva reaktanty a produkt. Většina vlastností látek nebyla zohledněna, protože nebyly podstatné pro dialýzu ani reakci a neovlivnily výsledky. Poté byly dopraveny některé vlastnosti v modulu *Transport of Diluted Species*, které před definicí modulu *Chemistry* nebyly přístupné a přidala se mřížka. Tato mřížka udává, kde budou vedeny výpočty. Následně byla vedena studie a vykresleny výsledky. Finálně byly vytvořeny a upraveny grafy.

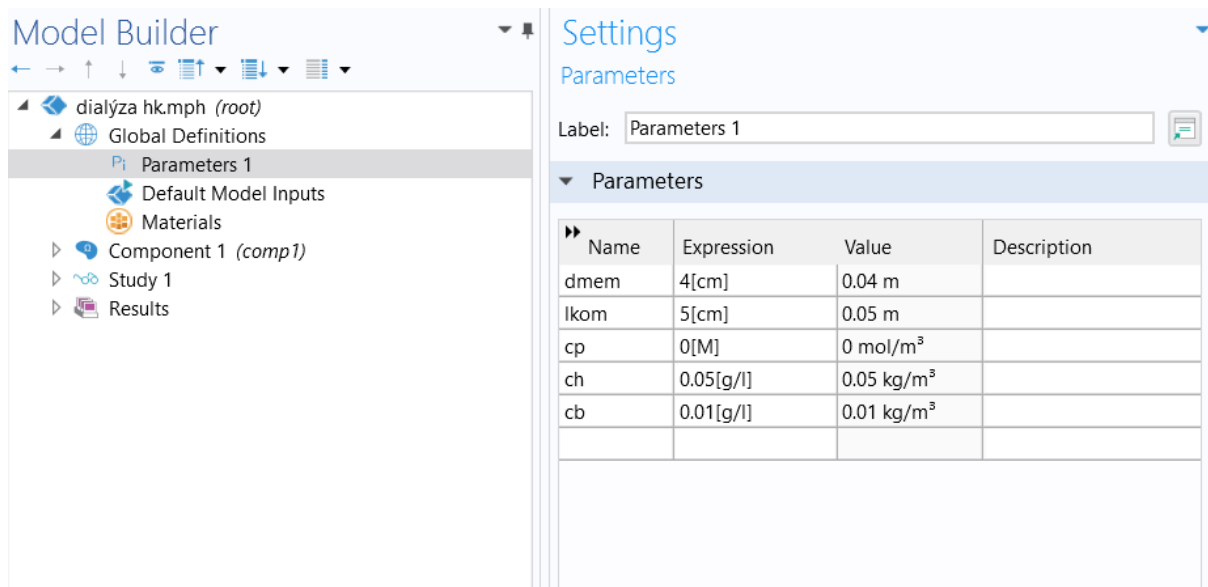
4.1 Nastavení souboru

- a) Vytvořil se nový soubor programu Comsol Multiphysics
- b) Vybrala se možnost *model wizard* (tento režim má výhodu předdefinovaných vlastností souboru)
- c) Zvolila se 2D dimenze
- d) Vybraly se moduly *Chemistry* a *Transport of Diluted Species*
- e) Byla vybrána *Time dependent study* (kvůli nutnosti pozorování chování látek v čase)

4.2 Parametry

V části *Global Definitions* bylo vybráno *Parameters* a byly přidány parametry (musí se používat desetinná tečka a veškeré značení je subjektivní-všechny proměnné mohou být nazvány jakkoliv, ovšem toto značení musí být respektováno a musí se používat v celém souboru stejně):

- a) c_h (počáteční koncentrace huminové kyseliny) = 0.05 g/l
- b) c_b (počáteční koncentrace barviva) = 0.01 g/l
- c) c (počáteční koncentrace produktu) = 0 M
- d) d_{mem} (průměr membrány) = 4 cm
- e) l_{kom} (délka komory) = 5 cm



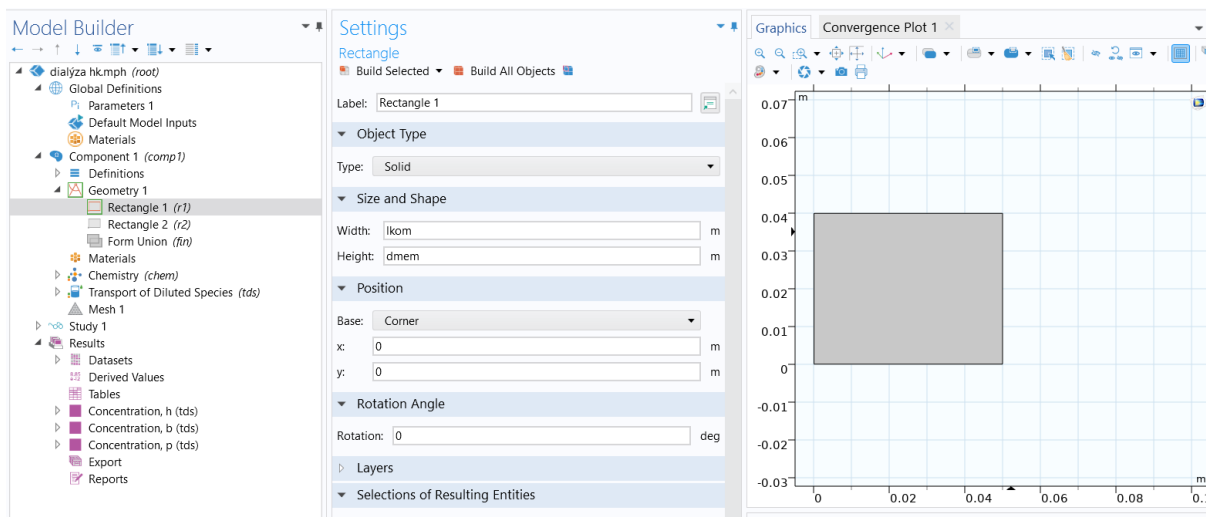
Snímek obrazovky 1 globální parametry souboru

Koncentrace huminové kyseliny, průměr membrány (potažmo komory) a délka komory byly zvoleny takto, aby model odpovídal skutečné předloze. Koncentrace barviva byla zvolena demonstrativně. Produkt na začátku reakce není, proto byla jeho hodnota zvolena jako 0 M.

4.3 Geometrie

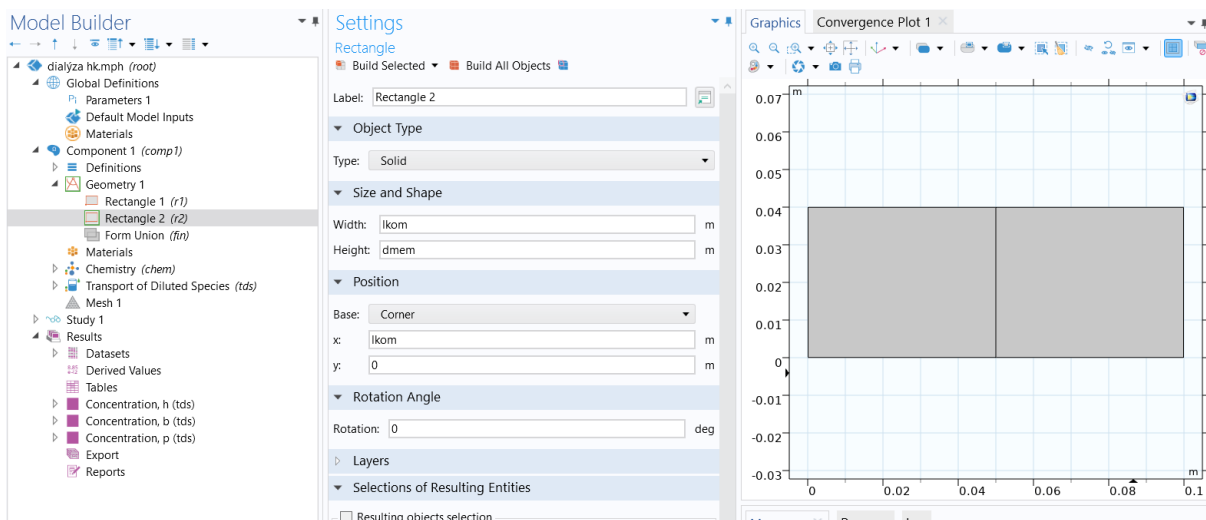
Prvním krokem samotného modelování bylo vytvoření geometrie. V tomto případě se jedná pouze o dva spojené obdélníky

- a) Zvolilo se Geometry 1 a byl přidán rectangle 1
 1. Zde bylo použito pro výšku (*height*) d_{mem}
 2. A pro šířku (*width*) l_{kom}
 3. Souřadnice v prostoru (*position*) byly ponechány 0



Snímek obrazovky 2 první reakční komora a její definice

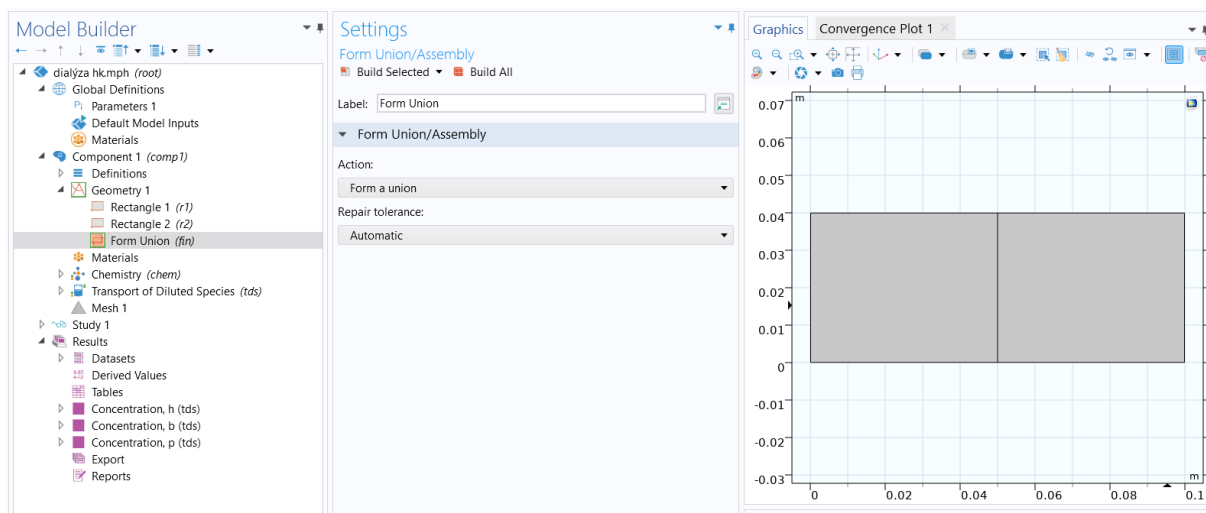
- b) Stejným způsobem byl přidán i *rectangle 2*
1. Opět bylo použito pro výšku (*height*) *dmem*
 2. A pro šířku (*width*) *lkom*
 3. Navíc se zvolila počáteční pozice na souřadnici *x* jako *lkom* pro posun tohoto obdélníku o tuto vzdálenost.



Snímek obrazovky 3 druhá reakční komora a její definice

Stejný obdélník byl použit z důvodu, aby se docílilo symetrie z obou stran membrány. Posun po *x*-ové souřadnici byl zvolen tak, aby byly obdélníky vedle sebe.

- c) Byla zvolena možnost *form union* a pomocí funkce *Build All* byly vykresleny dva obdélníky s „přepážkou“, uprostřed které touto funkcí byly spojeny do jednoho objektu.



Snímek obrazovky 4 spojení cel dohromady

4.4 Transport od Diluted Species

Transport of Diluted species (dále tds) je modul, díky kterému je možno modelovat difuzi. Zde bylo nadefinováno umístění látek a reakce, jejich koncentrace, polopropustná membrána, difuze skrz ni, ale i míchání.

a) Bylo vybráno přímo tds a upravily se parametry:

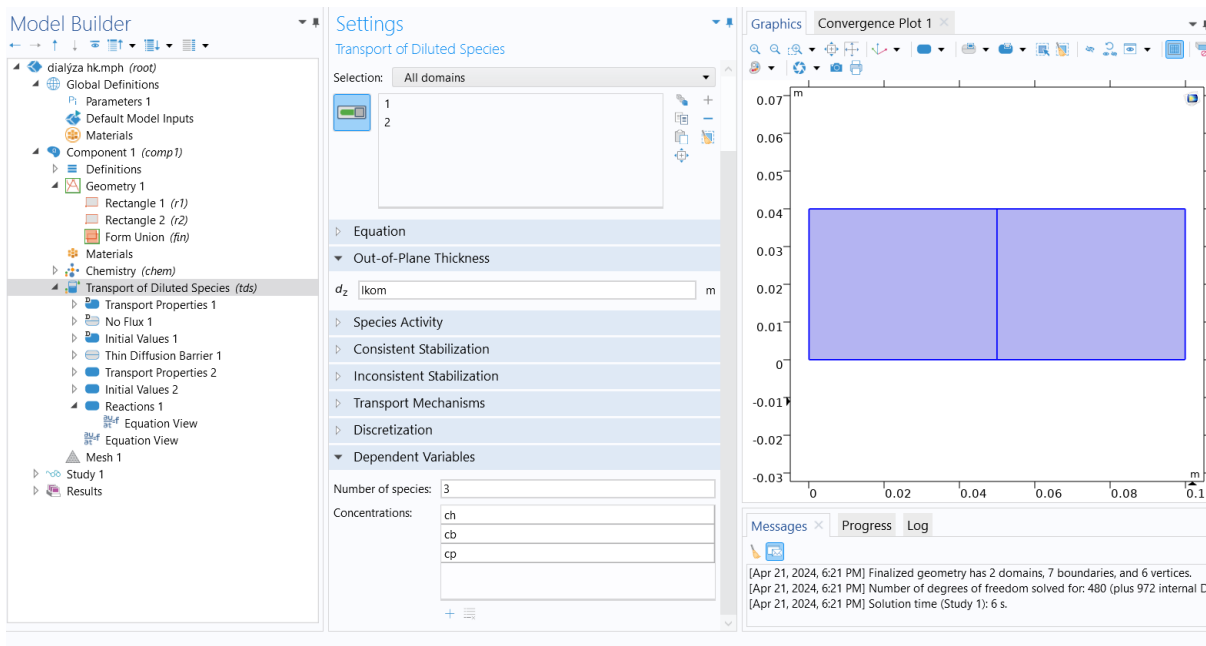
a) *Out-of-Plane Thickness*:

a) $d_z = l_{kom}$

b) *Dependent Variables*:

1. *Number of species*: 3

a. *Concentrations*: ch; cb; cp



Snímek obrazovky 5 obecné nastavení modulu tds

Tímto bylo nastaveno, že hloubka komor (výška, šířka, hloubka) je 5 cm a definováno, že v systému budou 3 látky o koncentracích ch, cb a cp.

c) Byla přidána *Thin Diffusion barrier* (pravým tlačítkem myši byly otevřeny možnosti tds, kde se nechází možnost Interior Surfaces a byla vybrána *Thin Diffusion Barrier*), která byla zároveň nadefinována:

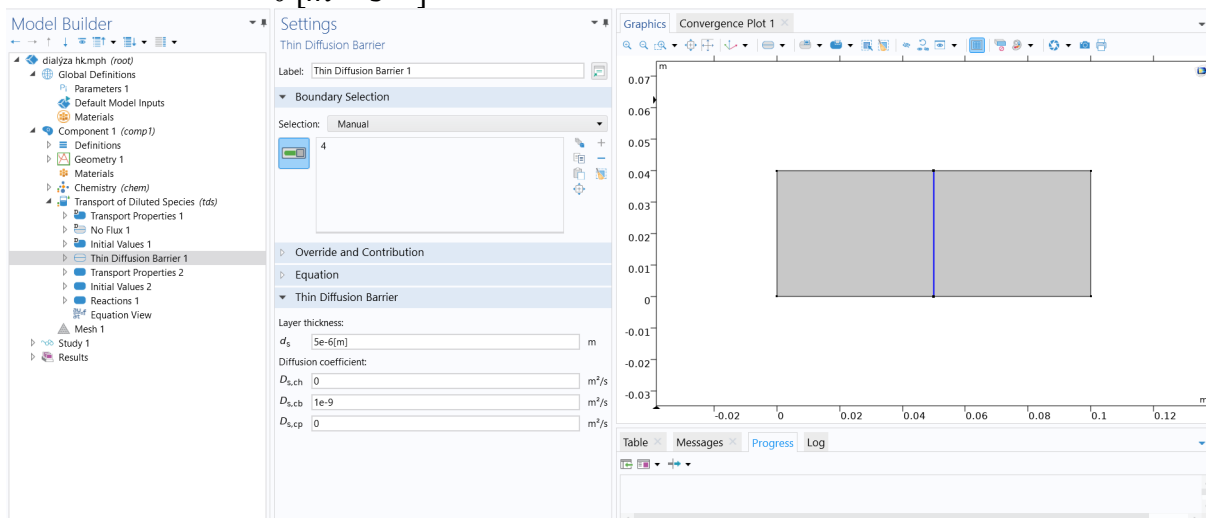
1. *Boundary selection*

a. *selection:manual* a kliknutím na přepážku mezi obdélníky byla určena membrána

2. *Thin Diffusion Barrier*

a. *Layer thickness*: $5 \cdot 10^{-6}$ [m]

b. *Diffusion Coefficient*: $D_{s,ch} = 0$ [$m^2 \cdot s^{-1}$]; $D_{s,cb} = 1e-9$ [$m^2 \cdot s^{-1}$]; $D_{s,cb} = 0$ [$m^2 \cdot s^{-1}$]



Snímek obrazovky 6 vytvoření polopropustné membrány

Hodnoty difuzních koeficientů byly zvoleny tak, aby přes membránu nedifundovali huminová kyselina ani produkt a aby skrz ni difundovalo barvivo, ale zase aby hned nedifundovalo všechno. Tloušťka membrány byla zvolena, aby model odpovídal realu.

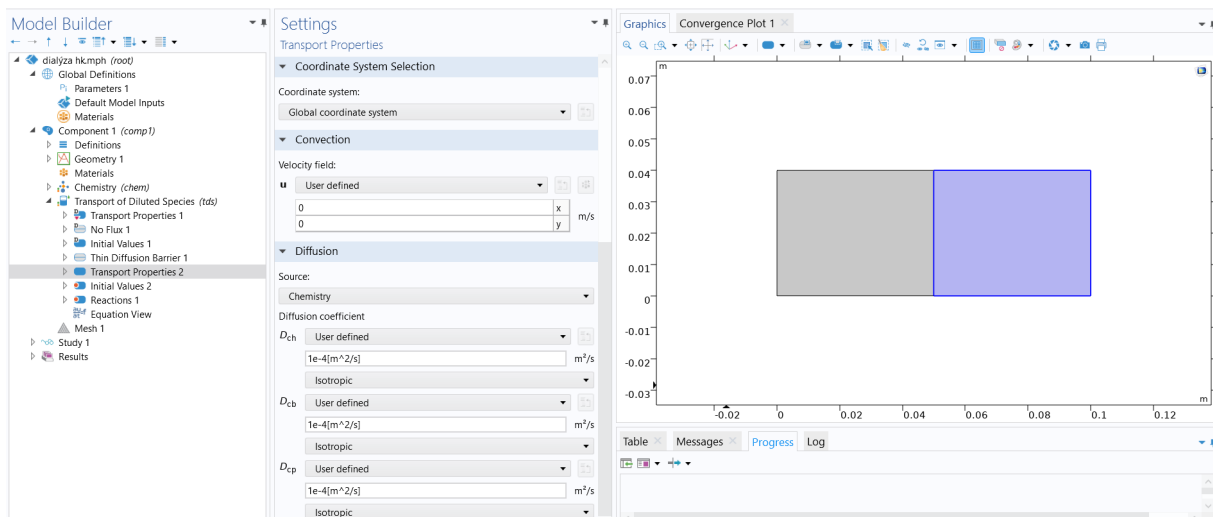
d) Byly přidány *Transport Properties 2*, pomocí kterých se nadefinuje pouze pravá strana systému, ve které bude probíhat reakce

1. *Domain selection*

a. *Selection: Manual* a kliknutím na pravý obdélník byl vybrán

2. *Diffusion*

a. *Diffusion Coefficient*: $D_{s,ch} = 1e-4$ [$m^2 \cdot s^{-1}$]; $D_{s,cb} = 1e-4$ [$m^2 \cdot s^{-1}$]; $D_{s,ch} = 1e-4$ [$m^2 \cdot s^{-1}$]



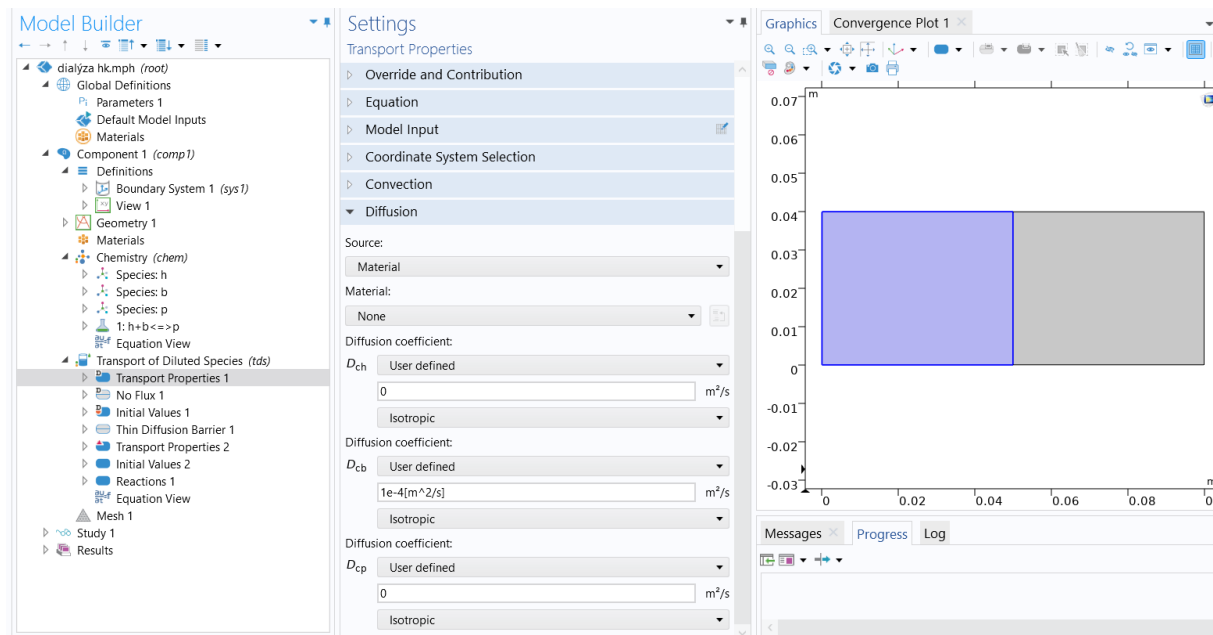
Snímek obrazovky 7 výběr vlastností pro pravou komoru

Po namodelování membrány o tloušťce $5 \cdot 10^{-6}$ [m] a definici rychlosti průchodu membránou byl zajištěno míchání na pravé straně pomocí difuzních koeficientů.

e) V možnosti *Transport Properties 1* byly změněny difuzní koeficienty:

1. *Diffusion*:

a. *Diffusion Coefficient*: $D_{s,ch} = 0 [m^2 \cdot s^{-1}]$; $D_{s,cb} = 1e-4 [m^2 \cdot s^{-1}]$; $D_{s,cp} = 0 [m^2 \cdot s^{-1}]$



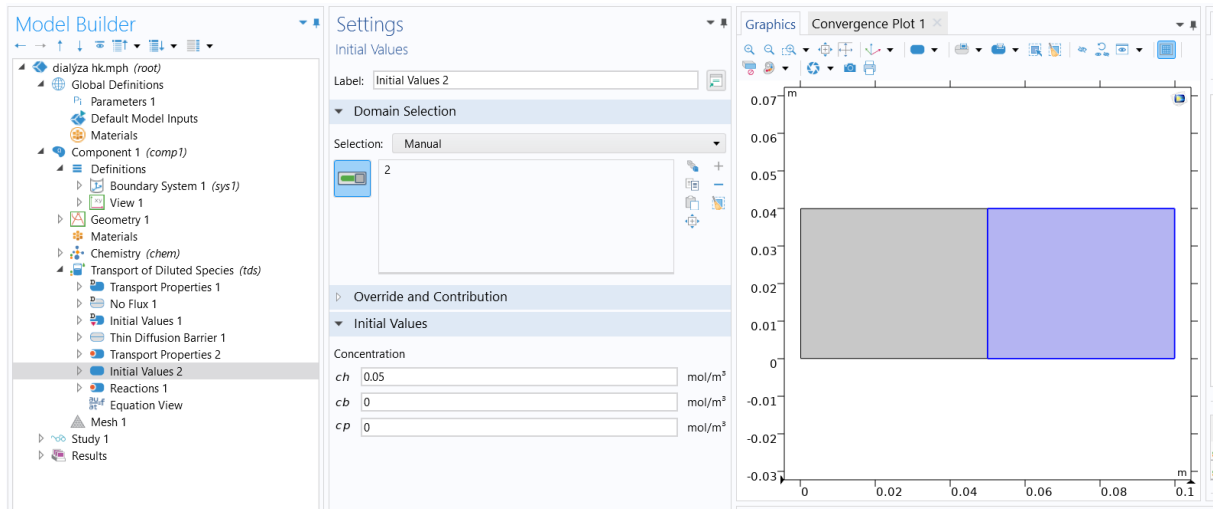
Snímek obrazovky 8 výběr vlastností pro levou komoru

V tomto kroku byl zapříčiněn rychlejší pohyb barviva pro průchod membránou a zároveň bylo mírně urychleno počítání modelu, protože na levé straně nejsou ani huminové kyseliny ani produkt (proto byly zvoleny 0) a tak s nimi program na levé straně nepočítá

f) Byly přidány *Initial Values 2* (opět pravé tlačítko myši na tds)

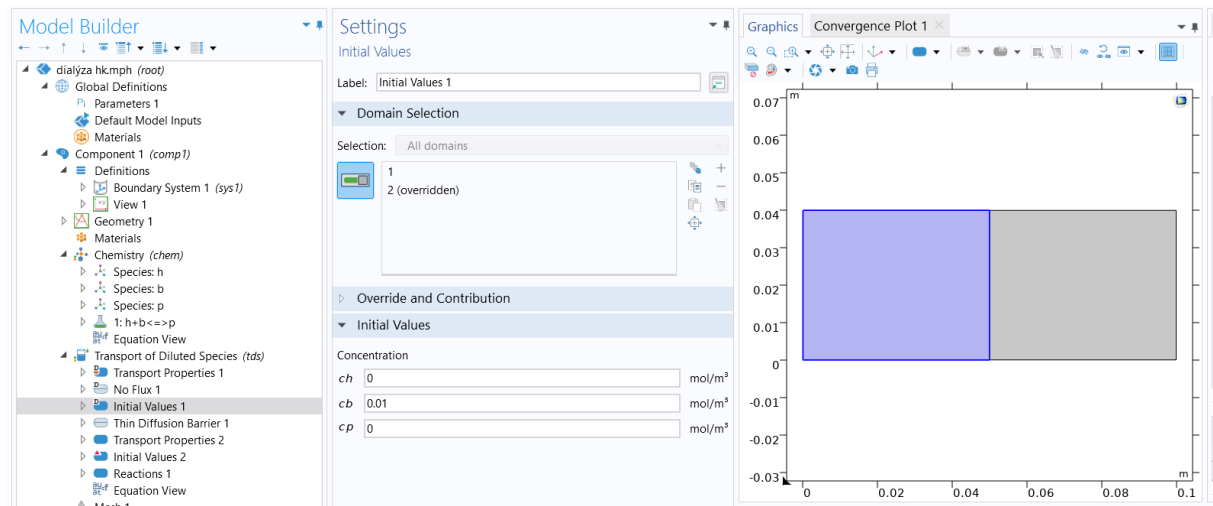
1. *Domain selection*

- b. *Selection: Manual* a opět byl vybrán pouze pravý obdélník
2. *Initial values:*
- a. *Concentration: $ch=0.05$ M*



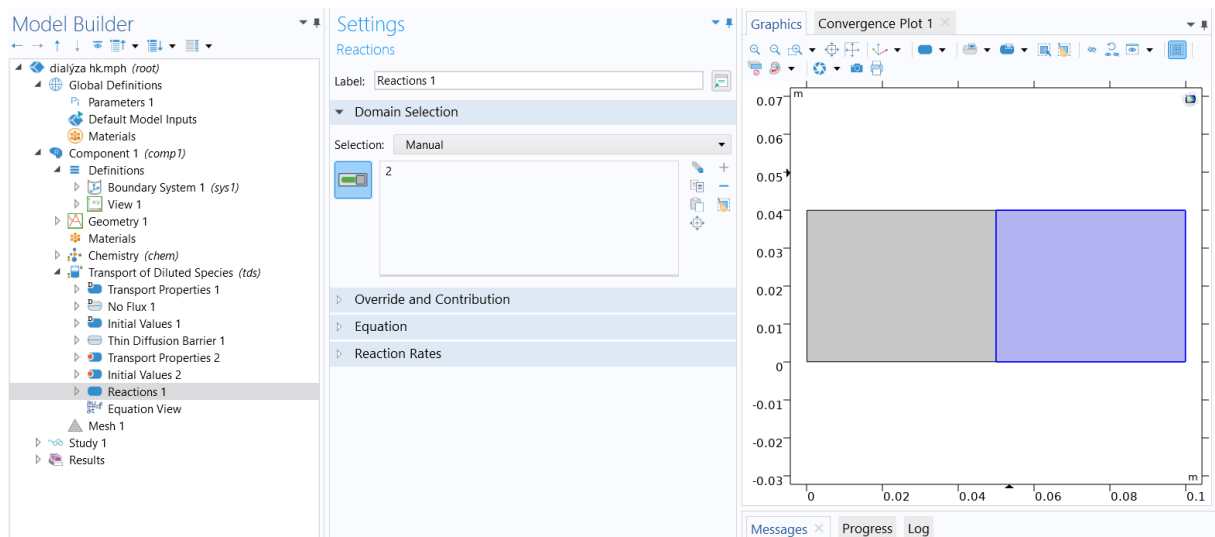
Snímek obrazovky 9 nastavení vstupních hodnot pravé komory

- g) V možnosti *Initial Values 1* byla změněna koncentrace
1. *Initial values:*
- a. *Concentration: $cb=0.01$ M*



Snímek obrazovky 10 nastavení vstupních hodnot levé komory

- h) Bylo přidáno *Reactions 1* (opět stejným způsobem-klik pravým tlačítkem na tds poté se našlo *reactions* a ve výběru možností se vybralo *Reactions*)
1. *Domain selection*
- a. *Selection: Manual* a opět byl vybrán pouze pravý obdélník

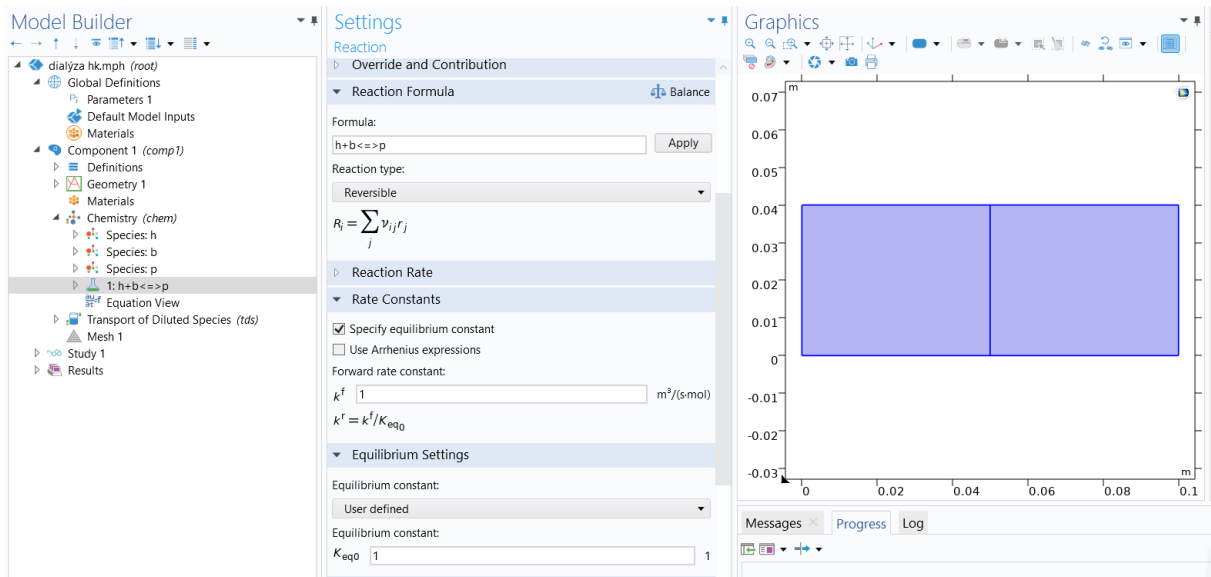


Snímek obrazovky 11 přidání reakce a její umístění

4.5 Chemistry

Chemistry je modul, díky kterého jde naprogramovat reakci. V tomto případě jde o vratnou reakci, která se skládá z huminové kyseliny, barviva a produktu.

- a) *Species 1* bylo přidáno (pravým tlačítkem myši byl kliknuto na *Chemistry* a přidáno *Species*) a bylo pojmenováno „h“
- b) *Species 2* bylo přidáno stejným způsobem a bylo pojmenováno „b“
- c) *Species 3* bylo přidáno stejným způsobem a bylo pojmenováno „p“
- d) Dále byla stejným způsobem přidána *Reaction*
 1. *Reaction formula*:
 - a. *Formula*: $h+b \rightleftharpoons p$
 - b. Zmáčknuto „*apply*“
 2. *Rate constants*
 - a. Byla vybrána možnost *specify equilibrium constant*
 3. *Equilibrium Settings*
 - a. *Equilibrium constant*: *User defined*
 - b. *Equilibrium constant*: $K_{eq0} = 1$



Snímek obrazovky 12 definice reakce

e) Byla otevřena samotná *Chemistry*

1. *Mixture Properties*

a. *Phase: liquid*

2. *Species Matching*

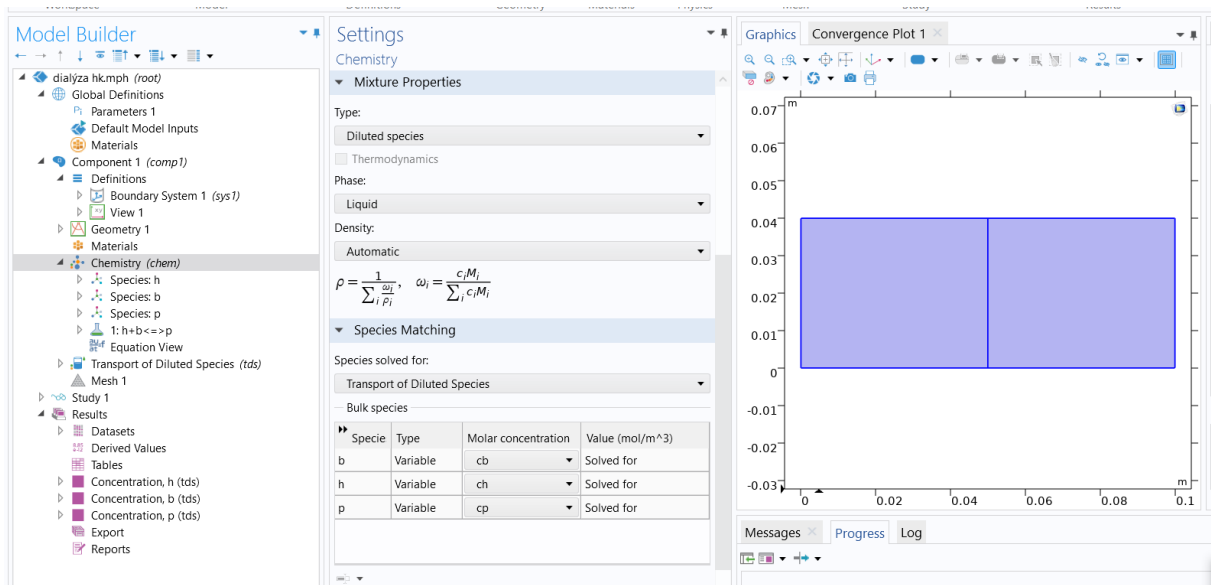
a. *Species solved for: Transport of Diluted Species*

b. *Bulk species:*

i. *Species b: molar concentration:cb*

ii. *Species h: molar concentration:ch*

iii. *Species p: molar concentration:cp*



Snímek obrazovky 13 změna fází látek na kapalné a volba jejich koncentrací

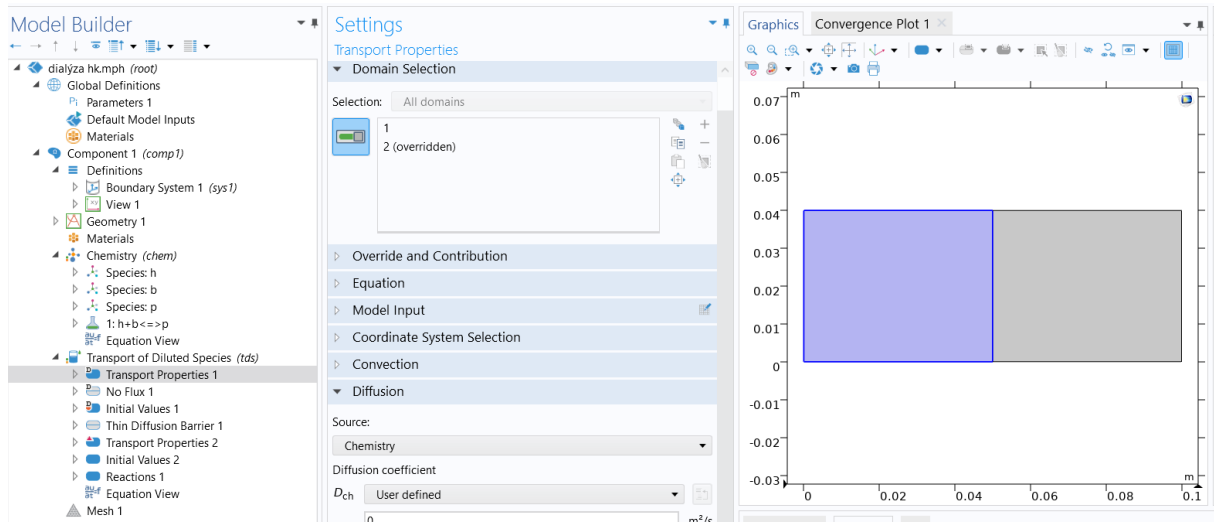
4.6 Dokončení modelu

Pro dokončení základního modelu bylo třeba ještě potřeba udělat několik úprav v tds modulu, které byly zpřístupněny až po přidání *Chemistry* modulu a také upravit mřížku (*Mesh*), která určuje detailnost výpočtů

a. V možnosti *Transport Properties 1*

1. *Diffusion:*

a. *Source: Chemistry*



Snímek obrazovky 14 změna zdroje difuze

b. V možnosti *Transport Properties 2*

1. *Diffusion:*

a. *Source: Chemistry*

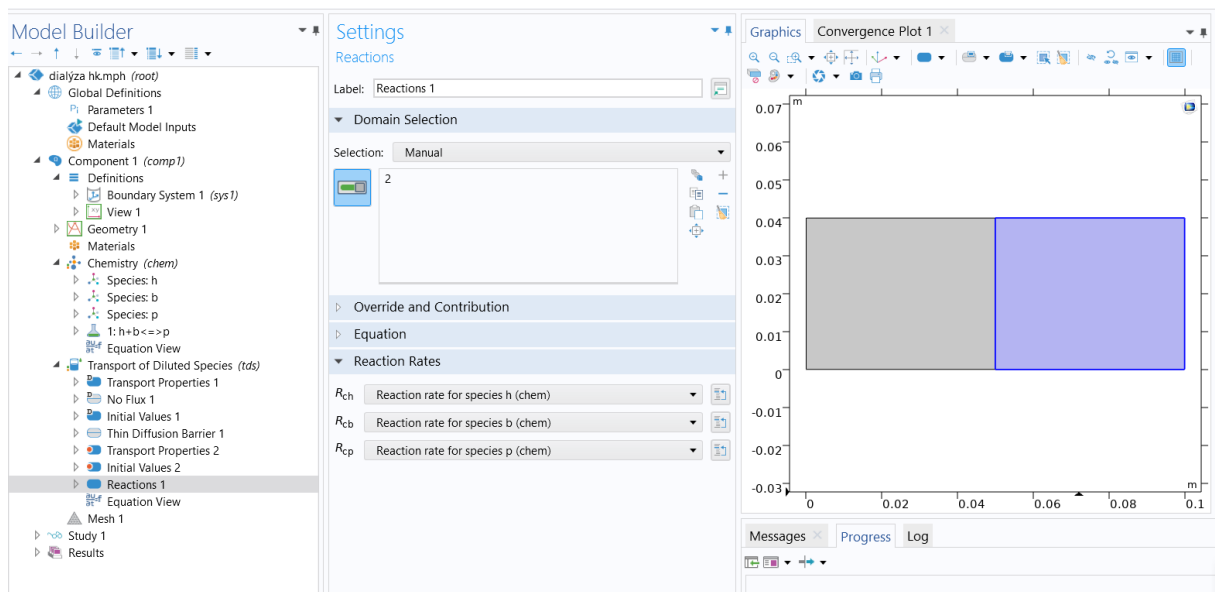
c. *Reactions 1*

1. *Reaction rates:*

a. R_{ch} : reaction rate for species *h*

b. R_{cb} : reaction rate for species *b*

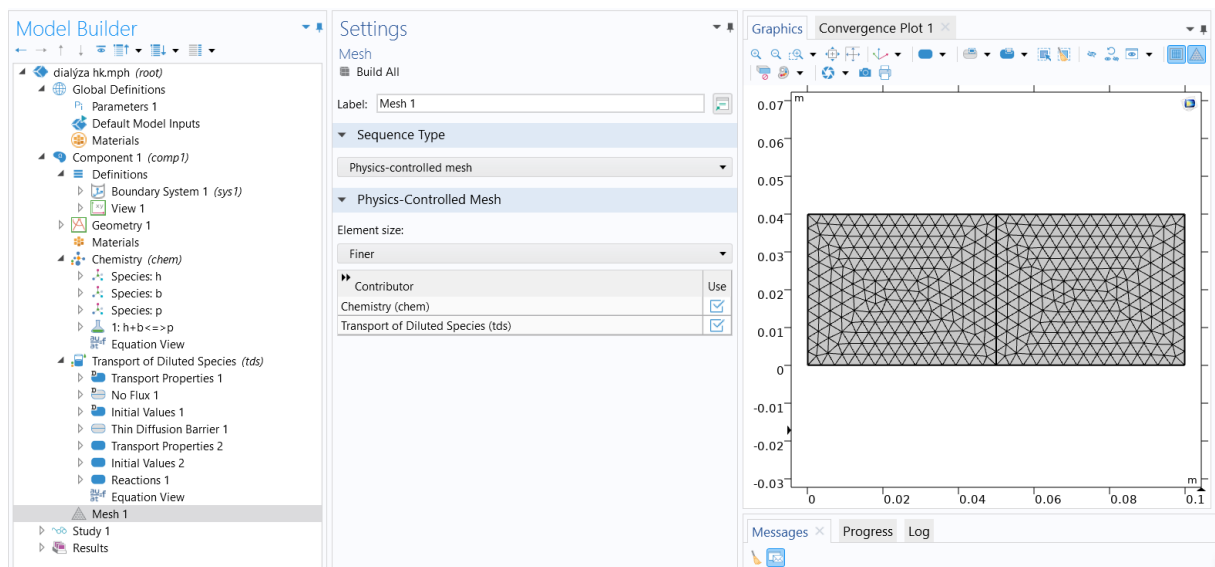
c. R_{cp} : reaction rate for species *p*



Snímek obrazovky 15 vložení reakčních konstant

d. Mesh 1

1. *Sequence Type:*
 - a. *Physics-controlled mesh*
2. *Physics-controlled mesh*
 - a. *Element size: Finer*



Snímek obrazovky 16 tvorba mřížky

4.7 Vykreslení výsledků

Po tomto namodelování už zbývá pouze vykreslit výsledky, respektive provést studii. Tyto kroky byly provedeny ve *Study 1*.

a) *Step 1: Time Dependent*

1. *Study settings:*

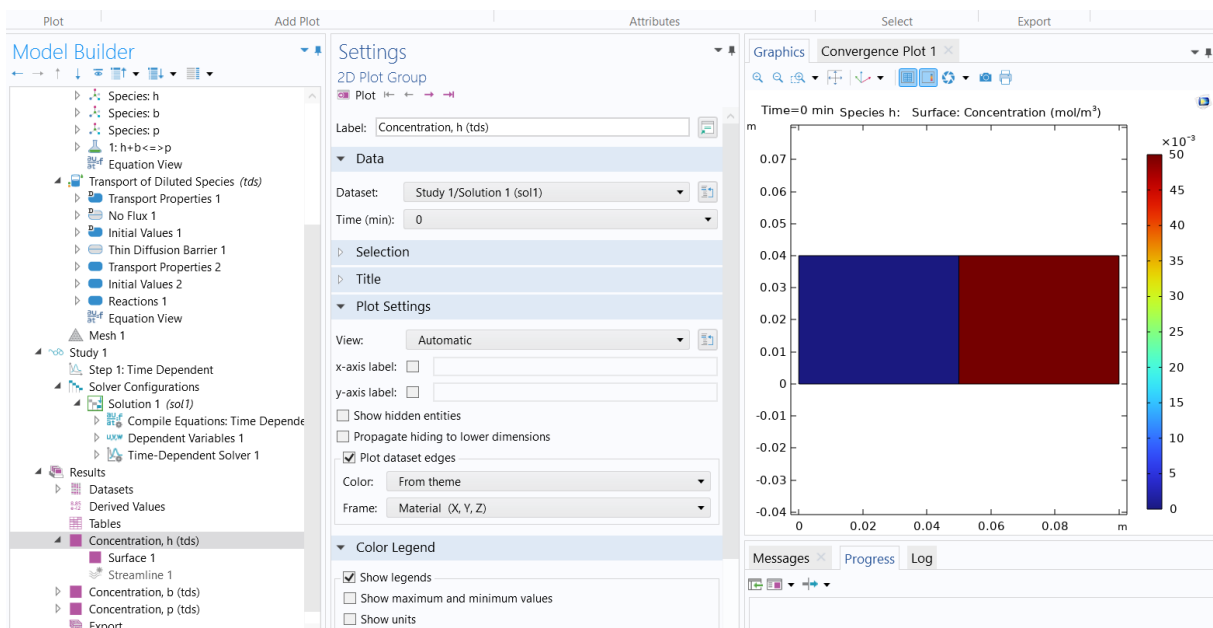
- a. *Time unit: min*

b) Po této finální úpravě, kterou byla změněna časová jednotka výpočtů ze sekund na minuty, bylo provedeno vykreslení výsledků, respektive vypočítána změna koncentrace látek, zatímco difundovaly a reagovaly za těchto podmínek tlačítkem „compute“

c) Zobrazení výsledků

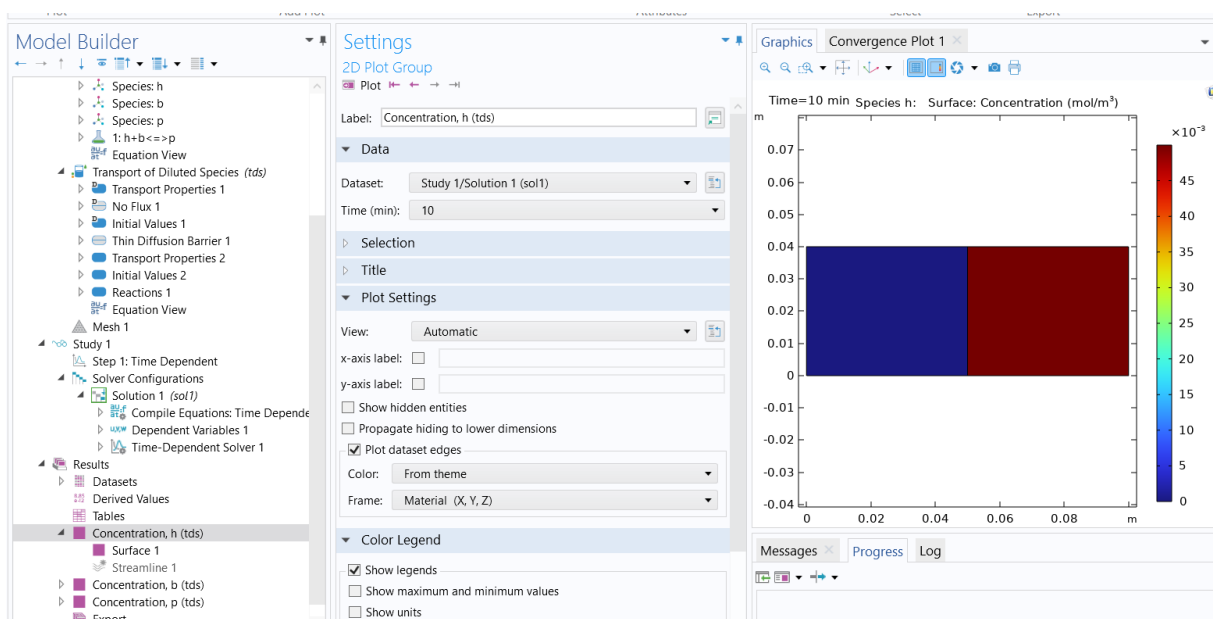
1. První látka, která byla pozorována, byla huminová kyselina. S tím, že jí v systému bylo mnohonásobně více, tak se její koncentrace v čase téměř nezměnila.

a. Koncentrace v čase 0 minut



Snímek obrazovky 17 koncentrace huminové kyseliny v čase 0 minut

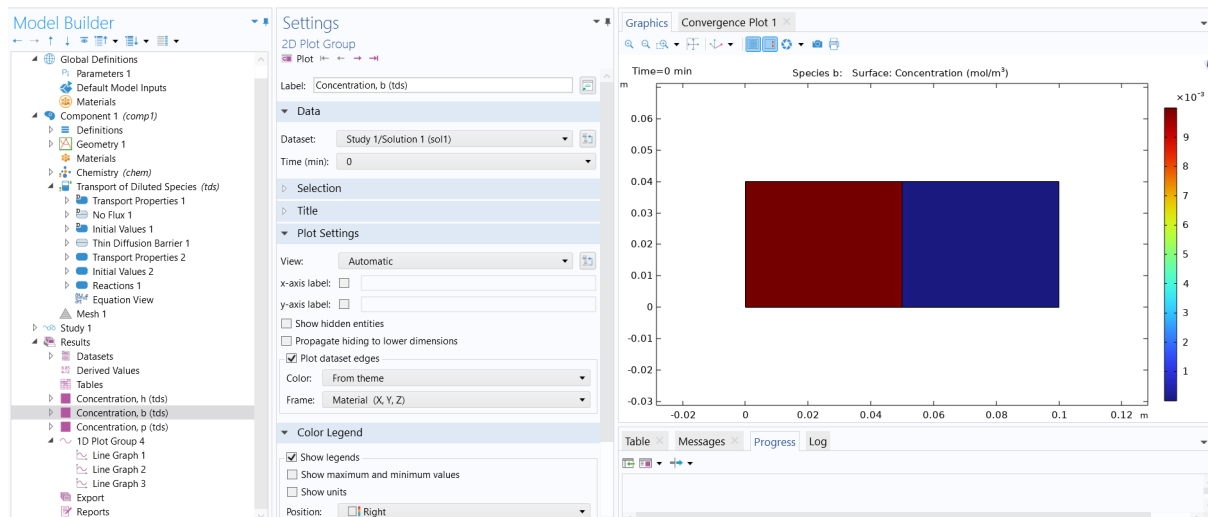
b. Koncentrace v čase 10 minut



Snímek obrazovky 18 koncentrace huminové kyseliny v čase 10 minut

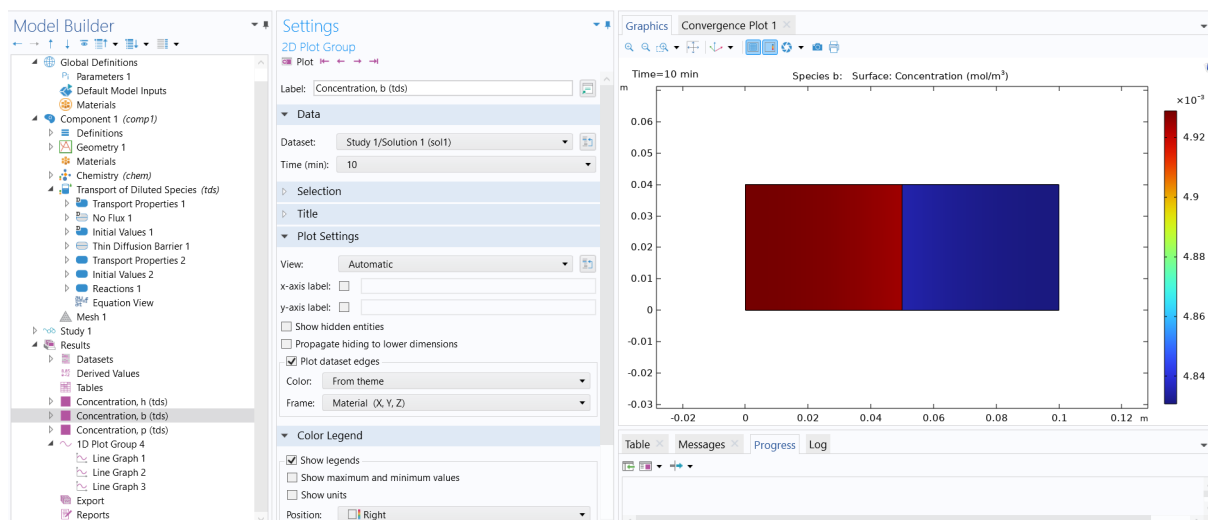
2. Druhou pozorovanou látkou bylo barvivo. Vzhledem k tomu, že reakce dosahuje rovnováhy po 10 minutách, tak se také jeho koncentrace v čase moc nezměnila.

a. Koncentrace v čase 0 minut



Snímek obrazovky 19 koncentrace barviva v čase 0 minut

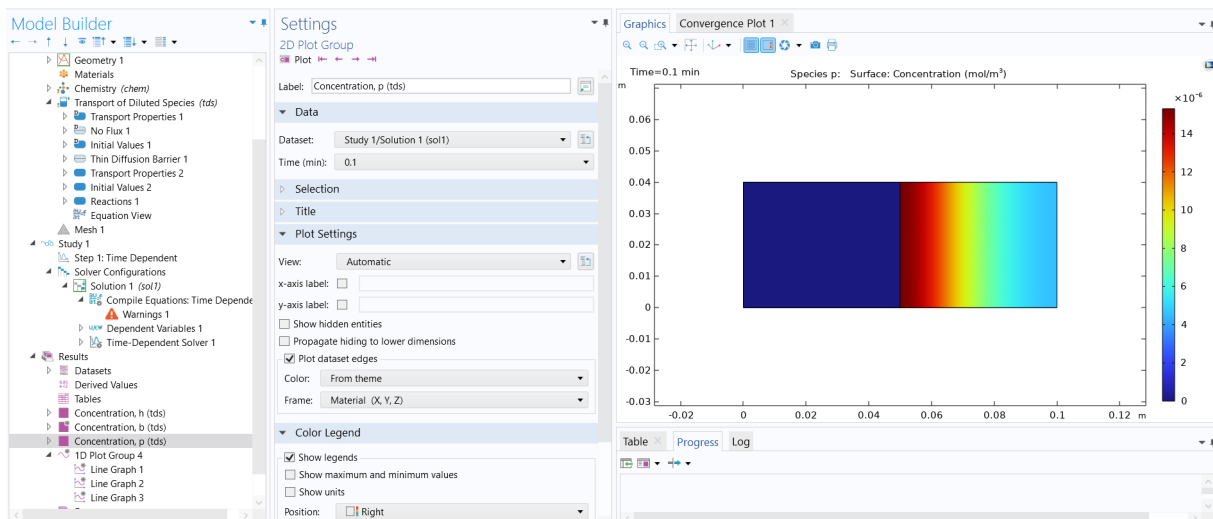
b. Koncentrace v čase 10 minut



Snímek obrazovky 20 koncentrace barviva v čase 10 minut

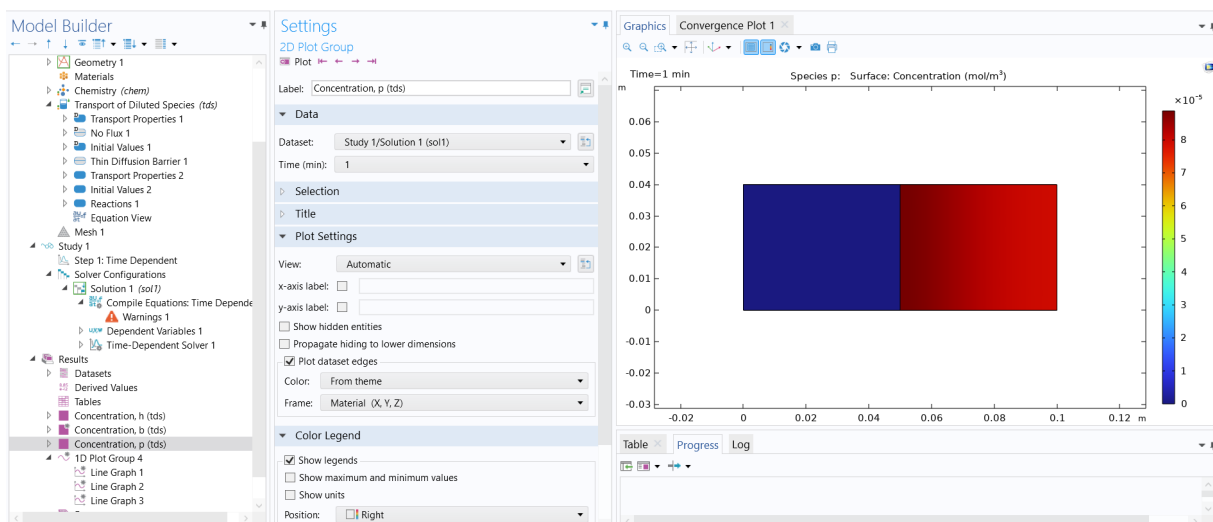
3. Posední pozorovanou látkou byl produkt, u kterého se změna koncentrace v čase výrazně měnila.

a. Koncentrace v čase 0,1 minuty (v čase 0 minut se objevuje chyba)



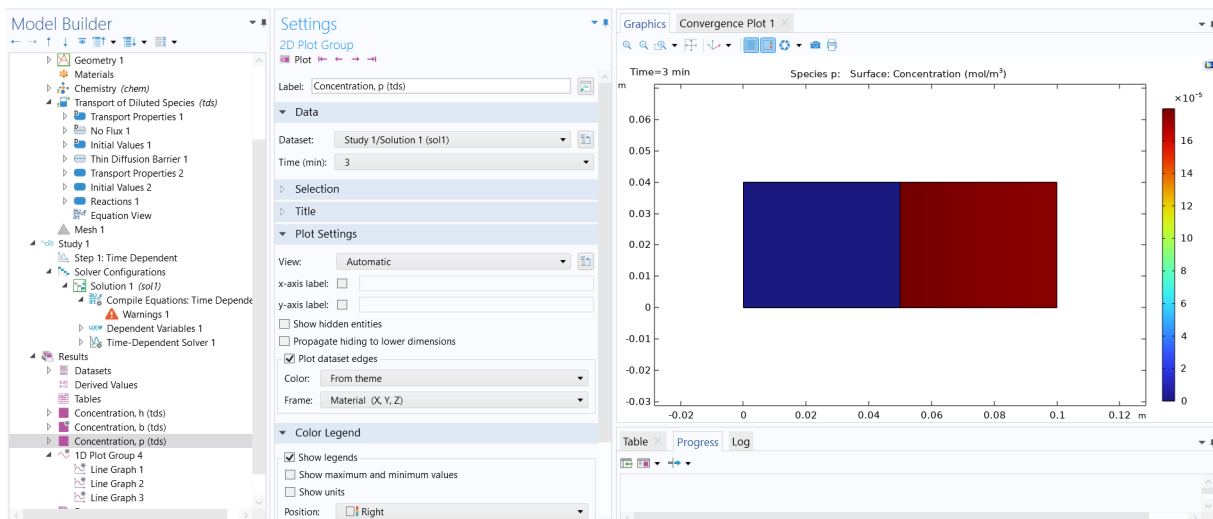
Snímek obrazovky 21 koncentrace produktu v čase 0,1 minuty

b. Koncentrace v čase 1 minuta



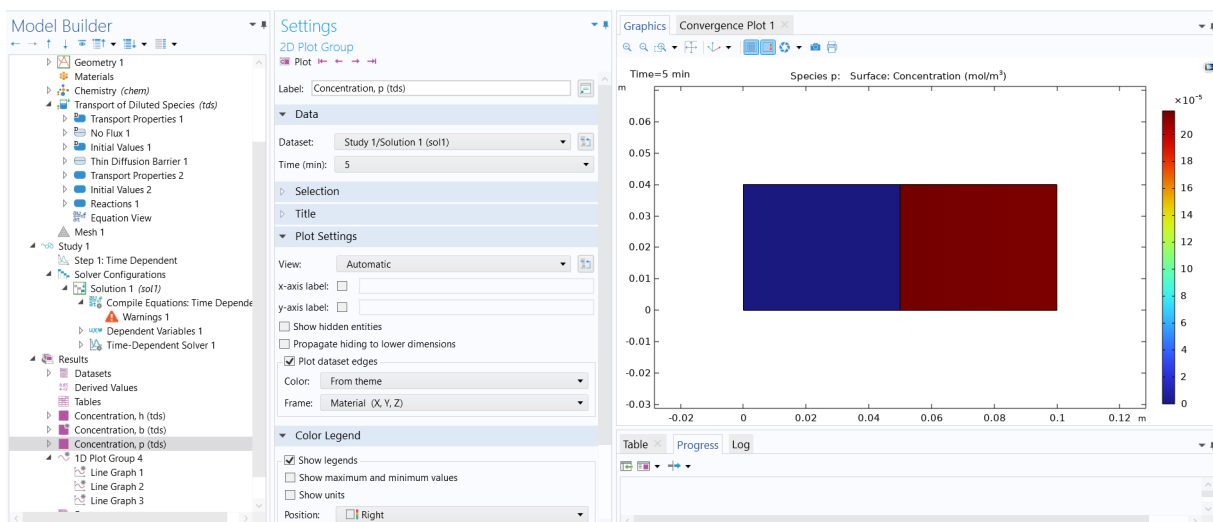
Snímek obrazovky 22 koncentrace produktu v čase 1 minuta

c. Koncentrace v čase 3 minuty



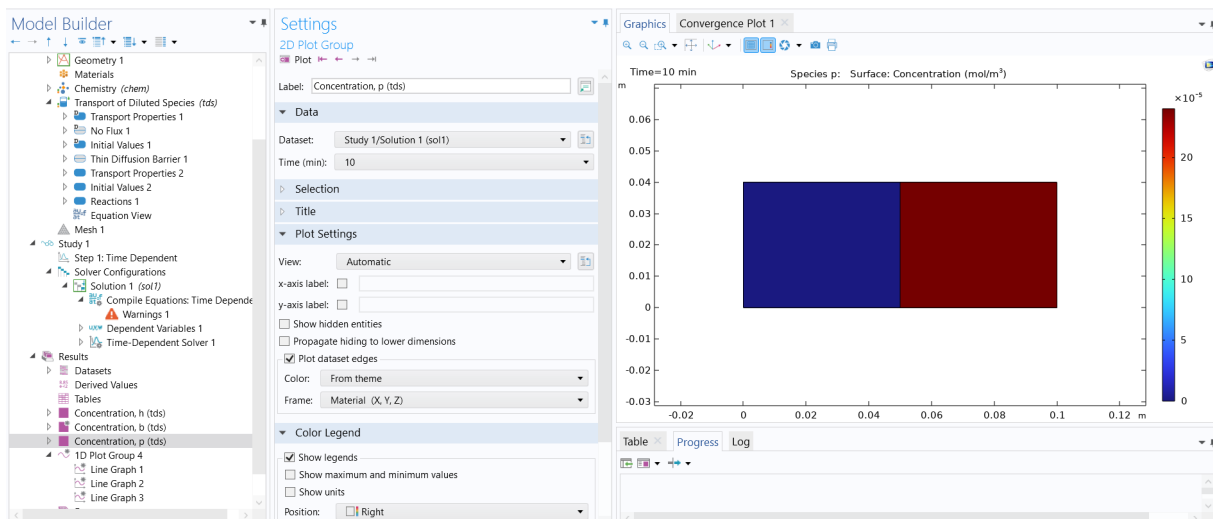
Snímek obrazovky 23 koncentrace produktu v čase 3 minuty

d. Koncentrace v čase 5 minut



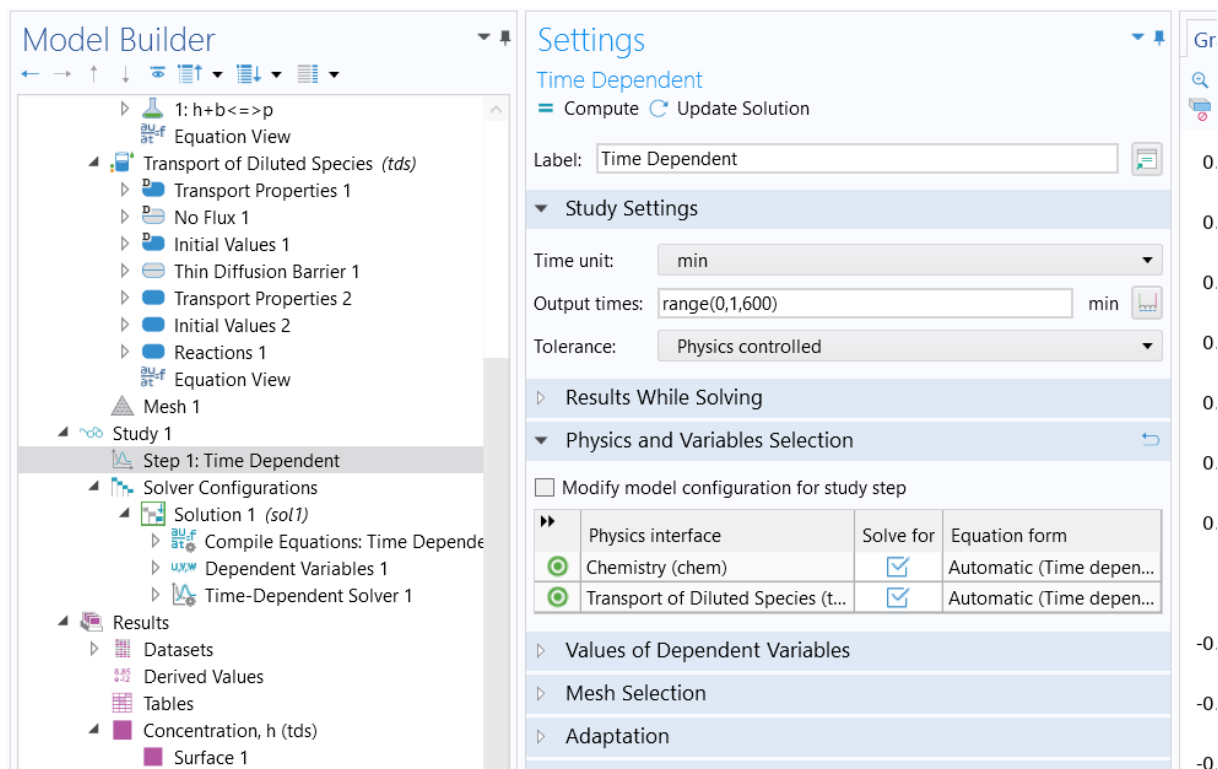
Snímek obrazovky 24 koncentrace produktu v čase 10 minut

e. Koncentrace v čase 10 minut



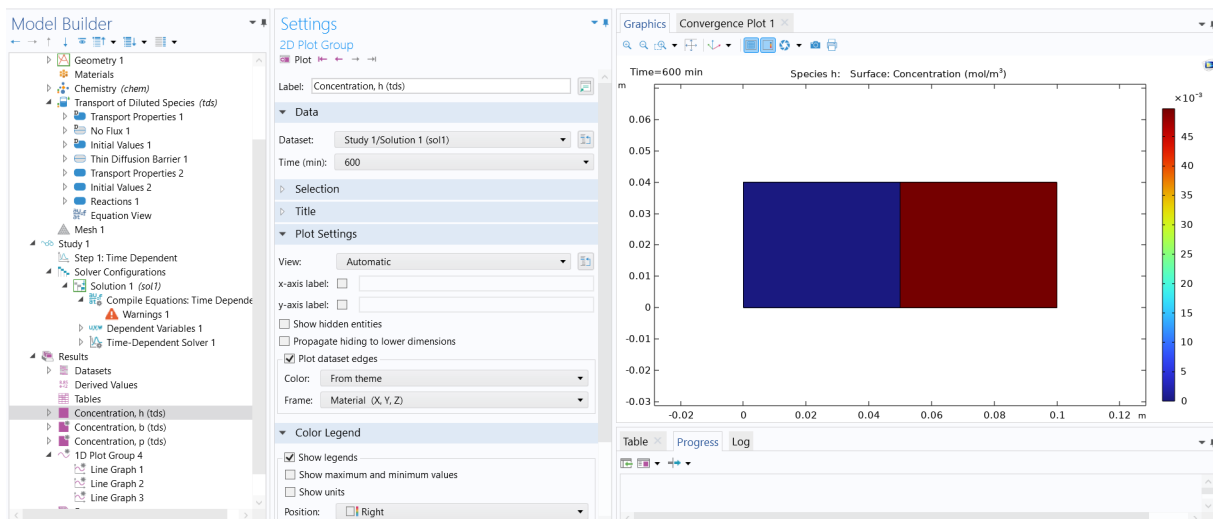
Snímek obrazovky 25 koncentrace produktu v čase 10 minut

4. Po zjištění, že by bylo lepší vykreslit výsledky ve větším časovém horizontu, byl pozměněn krok vykreslování a konečný čas. krok 0,1 minut byl změněn na 1 minutu a konec vykreslování byl přesunut na 600 minut a opět bylo použito tlačítko „compute“.



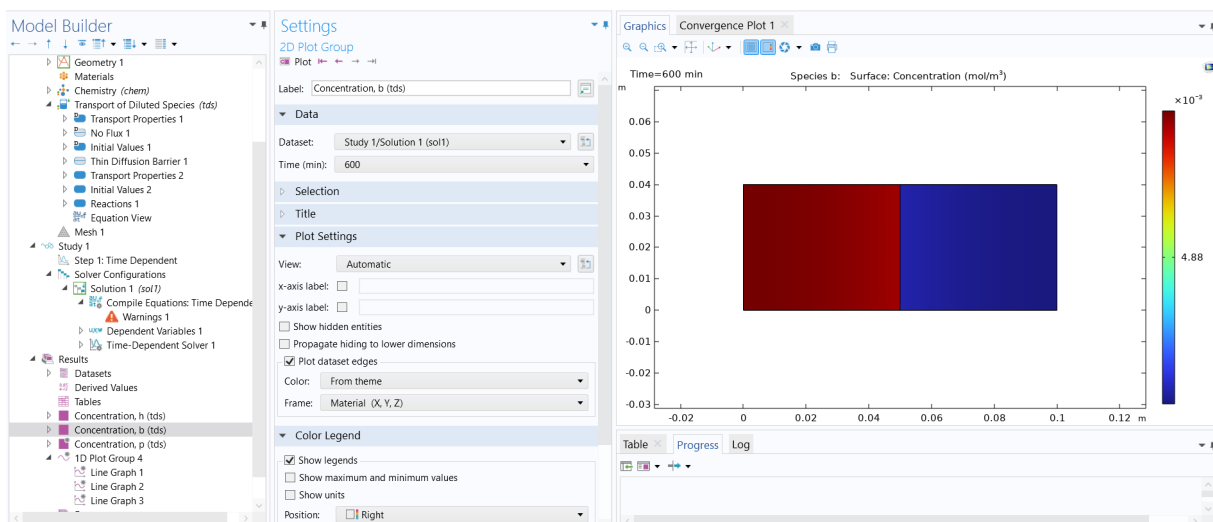
Snímek obrazovky 26 změna času reakce

- a. Koncentrace huminové kyseliny v čase 600 minut



Snímek obrazovky 27 koncentrace huminové kyseliny v čase 600 minut

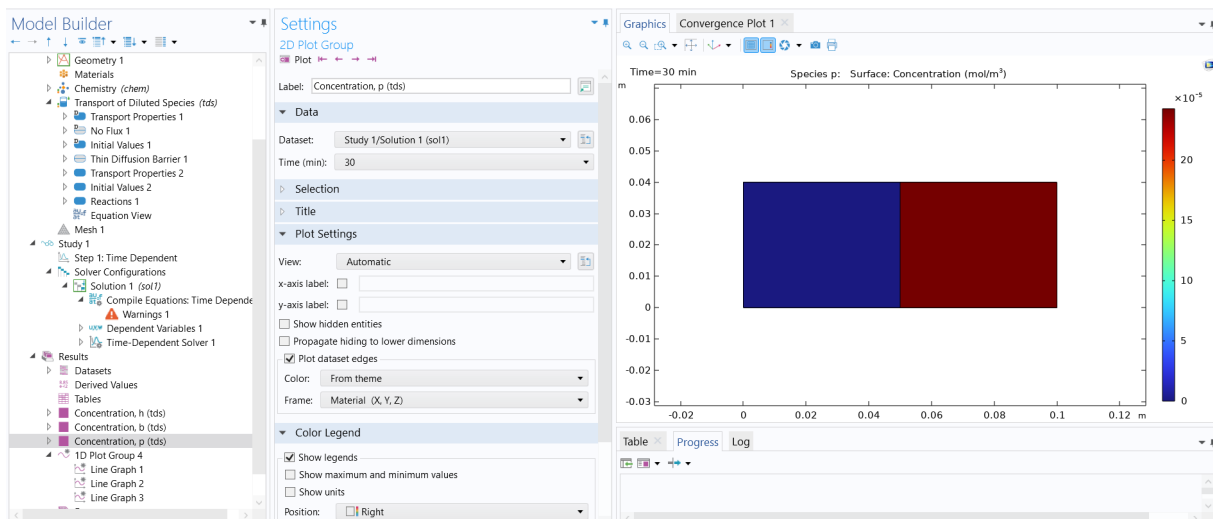
b. Koncentrace barviva v čase 600 minut



Snímek obrazovky 28 koncentrace barviva v čase 600 minut

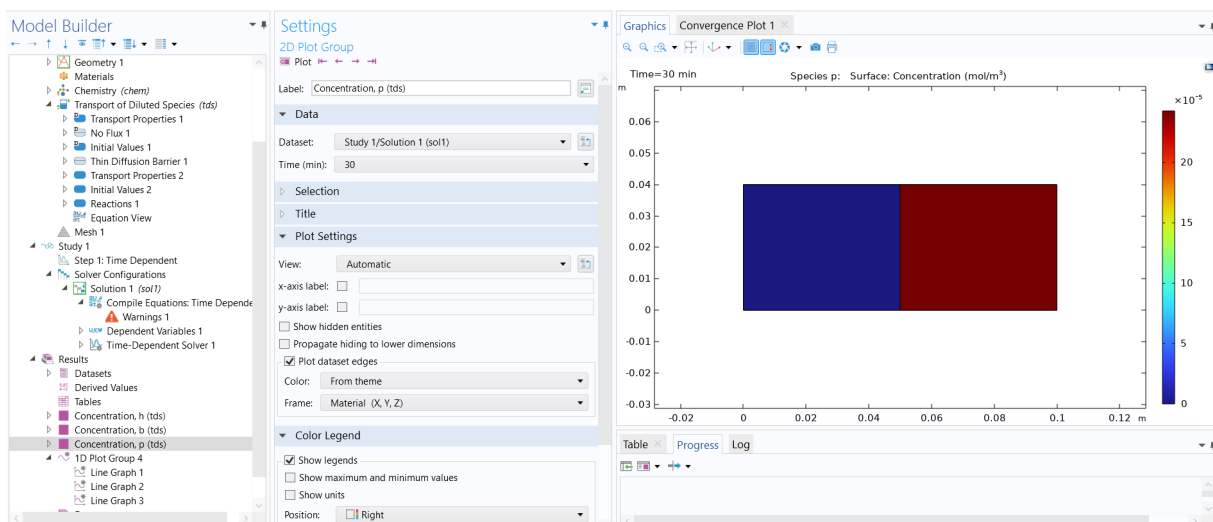
c. Koncentrace produktu

i. V čase 30 minut



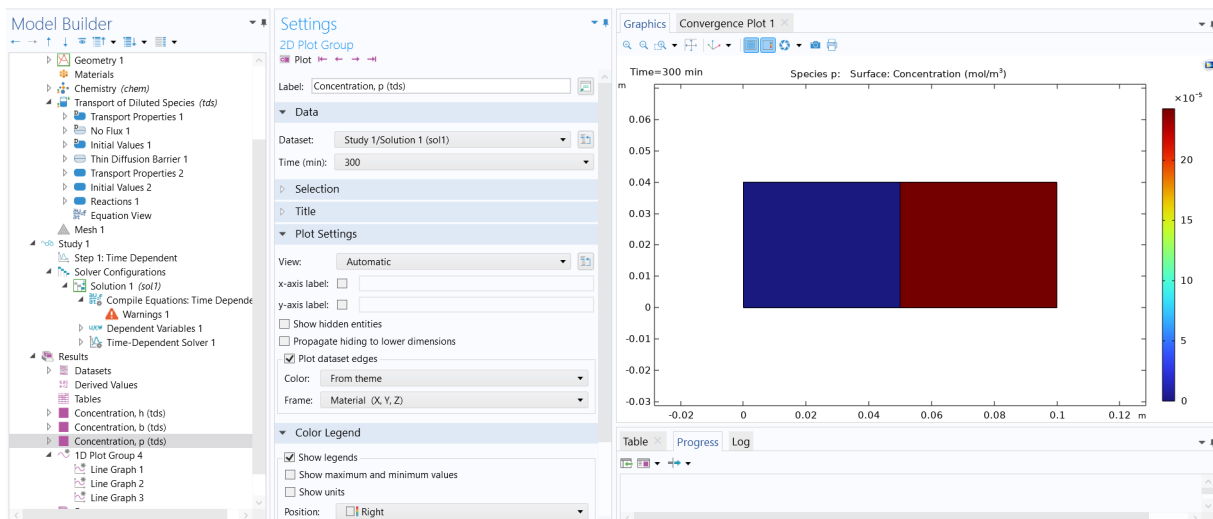
Snímek obrazovky 29 koncentrace produktu v čase 30 minut

ii. V čase 60 minut



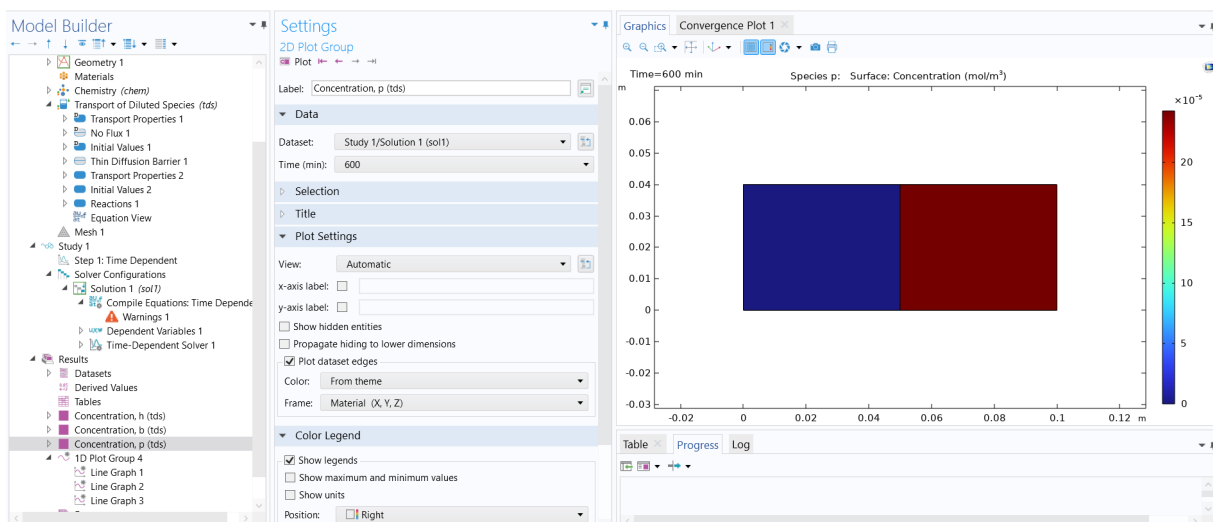
Snímek obrazovky 30 koncentrace produktu v čase 60 minut

iii. V čase 300 minut



Snímek obrazovky 31 koncentrace produktu v čase 300 minut

iv. V čase 600 minut



Snímek obrazovky 32 koncentrace produktu v čase 600 minut

4.8 Zpracování výsledků

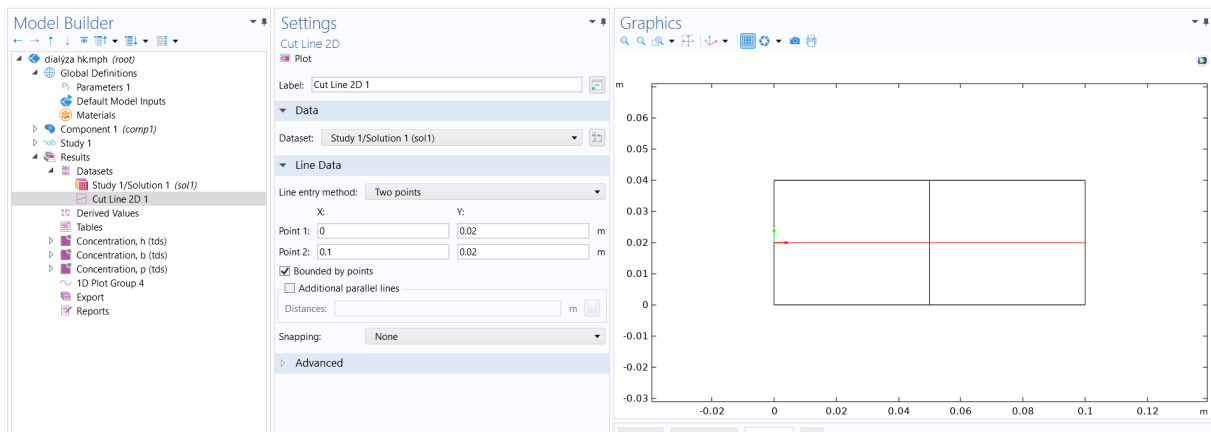
Z důvodu, že v systému probíhá reakce, bylo nutné zkontrolovat výsledky jednotlivých látek podle jejich umístění a také změny koncentrací v čase.

a) *Datasets*

1. Byl přidán horizontální řez pomocí funkce *Cut Line 2D*

a. *Line data:*

- i. *X: point 1:0; point 2:0.1*
- ii. *Y: point 1:0.02; point 2:0.02*



Snímek obrazovky 33 horizontální řez

b) V nabídce funkcí v záložce *Results* byla vybrána a přidána *1D Plot Group*

1. Byl přidán *Line Graph 1*

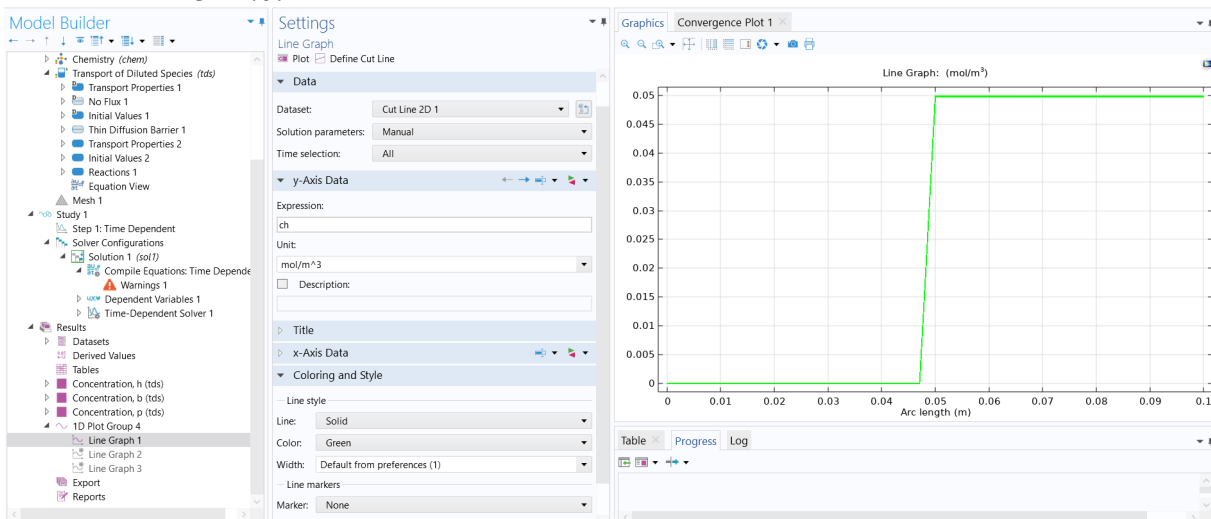
a. *Data:*

i. *Dataset: Cut Line 2D 1*

2. *Coloring and style:*

a. *Color: green*

3. *Plot*



Snímek obrazovky 34 koncentrace huminové kyseliny podle vzdálenosti

4. Byl přidán *Line Graph 2*

a. *Data:*

i. *Dataset: Cut Line 2D 1*

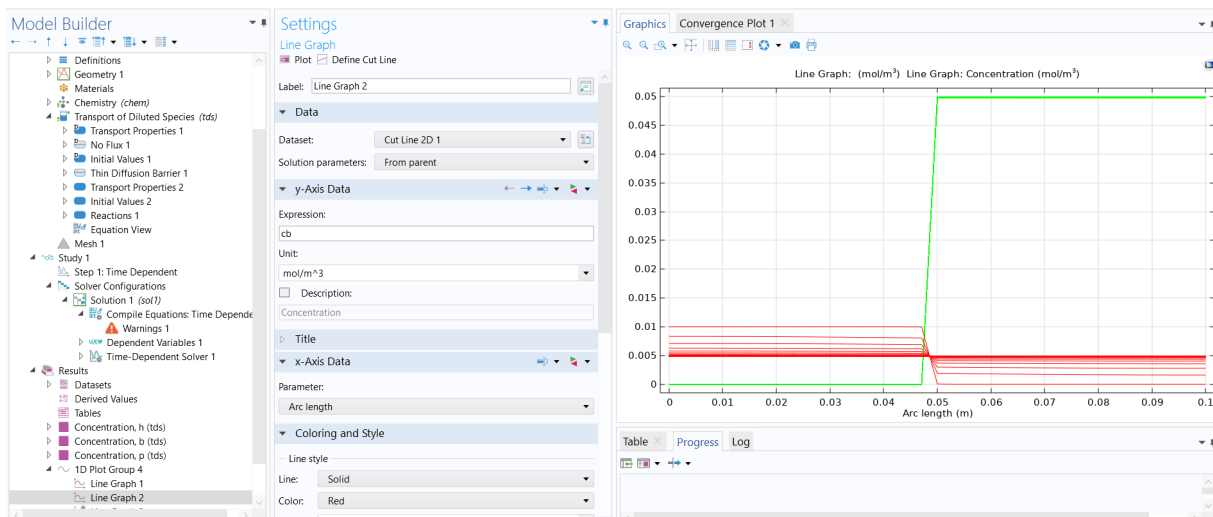
b. *y-axis:*

i. *expression: cb*

c. *Coloring and style:*

i. *Color: red*

5. *Plot*

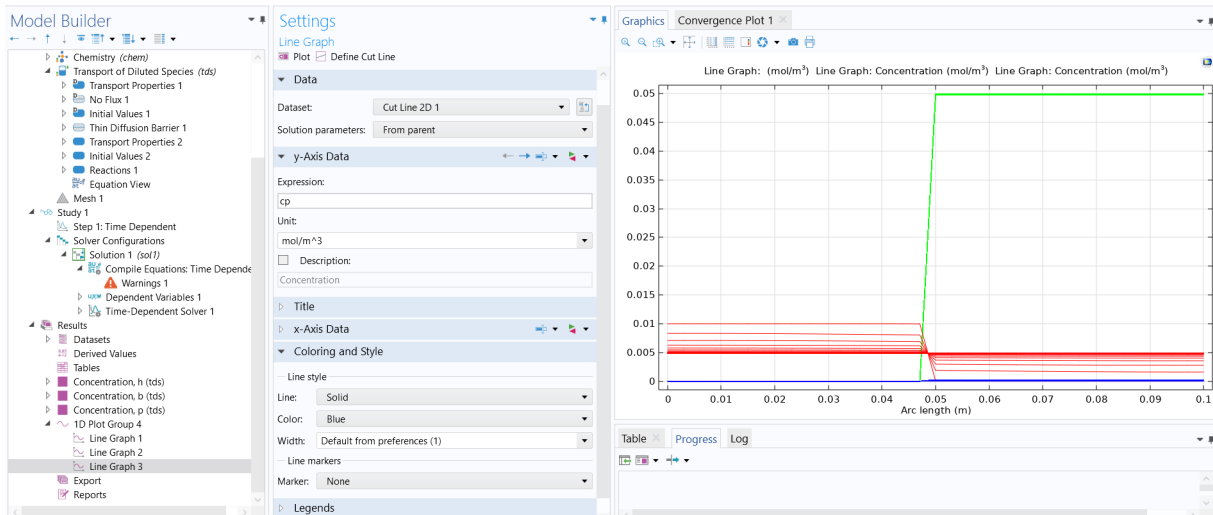


Snímek obrazovky 35 koncentrace huminové kyseliny a barviva podle vzdálenosti

6. Byl přidán Line Graph 2

- a. *Data*:
 - i. *Dataset: Cut Line 2D 1*
- b. *y-axis*:
 - i. *expression: cp*
- c. *Coloring and style*:
 - i. *Color: blue*

7. Plot

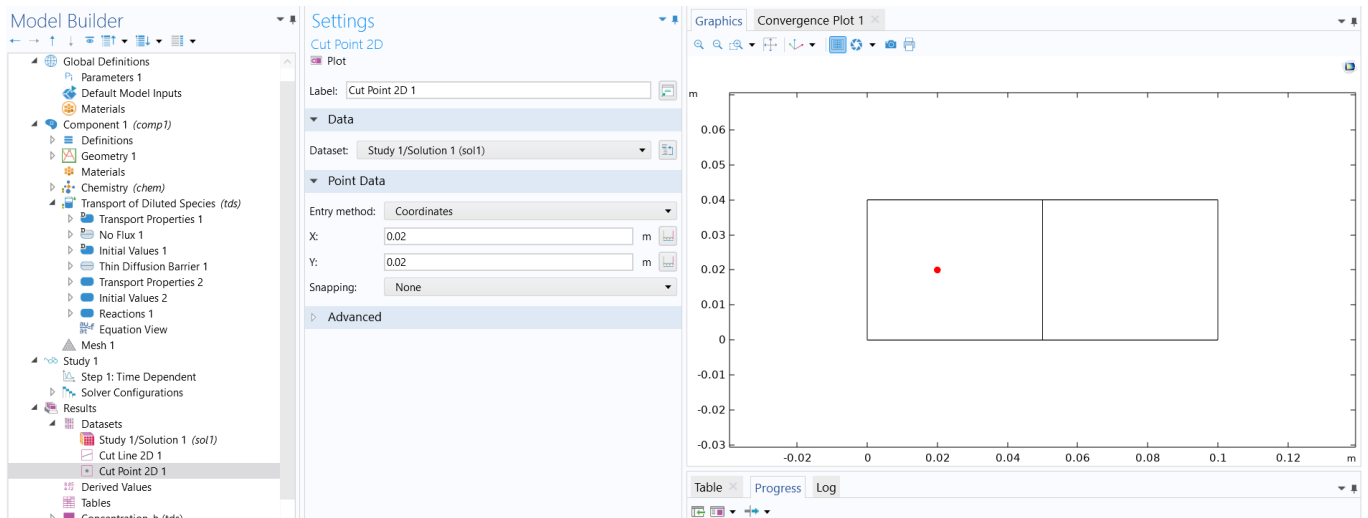


Snímek obrazovky 36 koncentrace huminové kyseliny, barviva a produktu podle vzdálenosti

c) *Datasets*

1. *Byl přidán bod vybraný v náhodném místě na levé straně membrány pomocí funkce Cut Point 2D*
 - a. *Point Data*
 - i. *Entry method: Coordinates*
 - ii. *X: 0.02*

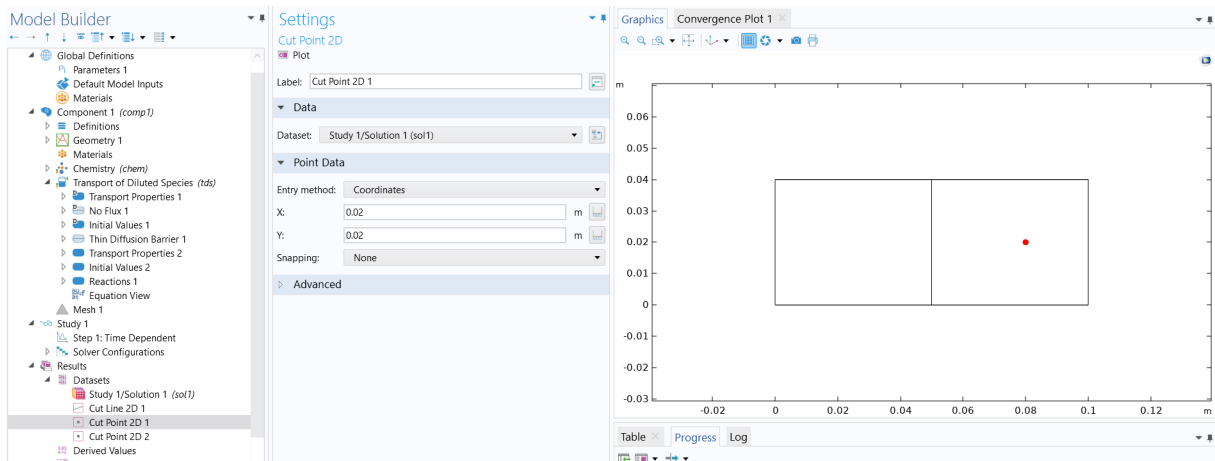
- iii. $Y:0.02$
- b. *Plot*



Snímek obrazovky 37 bod vytvořený bod na levé straně

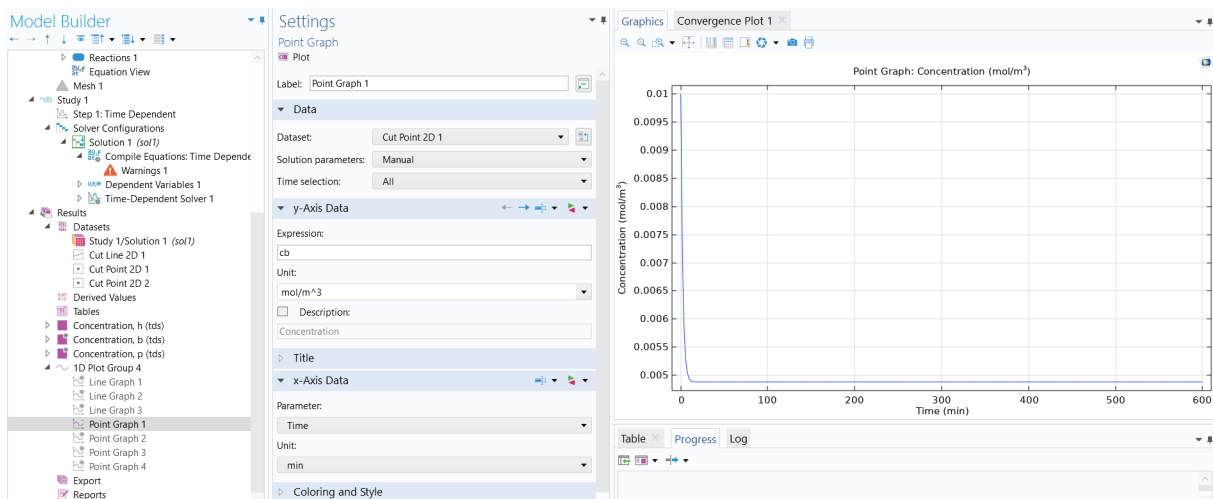
2. Stejným způsobem byl vytvořen bod na pravé straně

- a. *Point data Point Data*
 - i. *Entry method:Coordinates*
 - ii. $X:0.02$
 - iii. $Y:0.02$
- b. *Plot*



Snímek obrazovky 38 náhodně vytvořený bod na pravé straně

- a) V nabídce funkcí v záložce *Results* byla vybrána a přidána *1D Plot Group*
 - 1. Byl přidán *Point Graph 1*
 - a. *Data:*
 - i. *Dataset: Cut Point 2D 1*
 - 2. *y-Axis Data:*
 - a. *Expression: cb*
 - 3. *Plot*



Snímek obrazovky 39 závislost koncentrace barviva na čase v bodě [0.02;0.02]

Byl vytvořen graf závislosti koncentrace barviva na čase v bodě [0.02;0.02]

b) V nabídce funkcí v záložce *Results* byla vybrána a přidána *1D Plot Group*

1. Byl přidán *Point Graph 2*

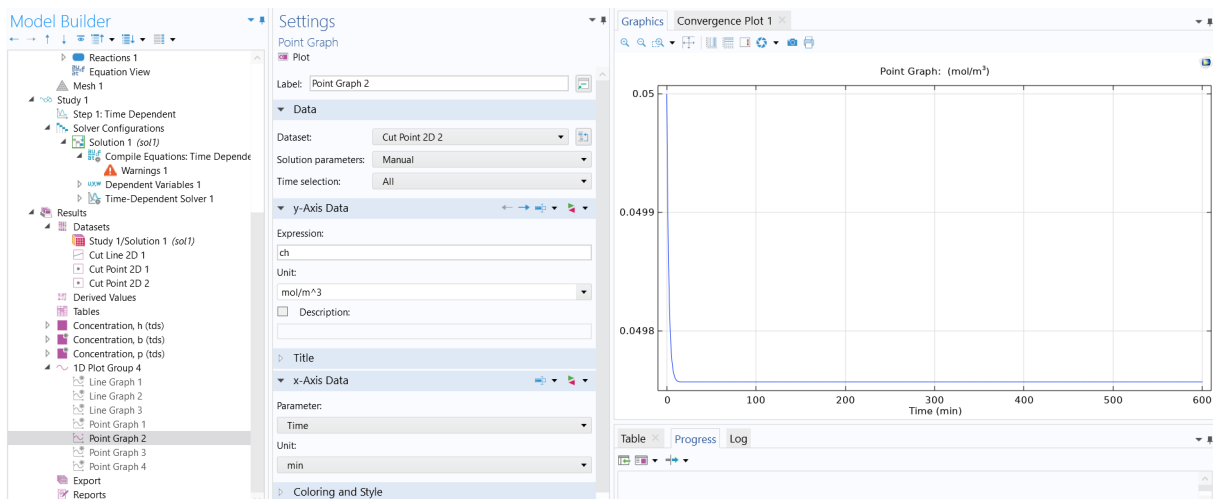
a. *Data:*

i. *Dataset: Cut Point 2D 2*

2. *y-Axis Data:*

a. *Expression: ch*

3. *Plot*



Snímek obrazovky 40 závislost koncentrace huminové kyseliny na čase v bodě [0.08;0.02]

c) V nabídce funkcí v záložce *Results* byla vybrána a přidána *1D Plot Group*

1. Byl přidán *Point Graph 3*

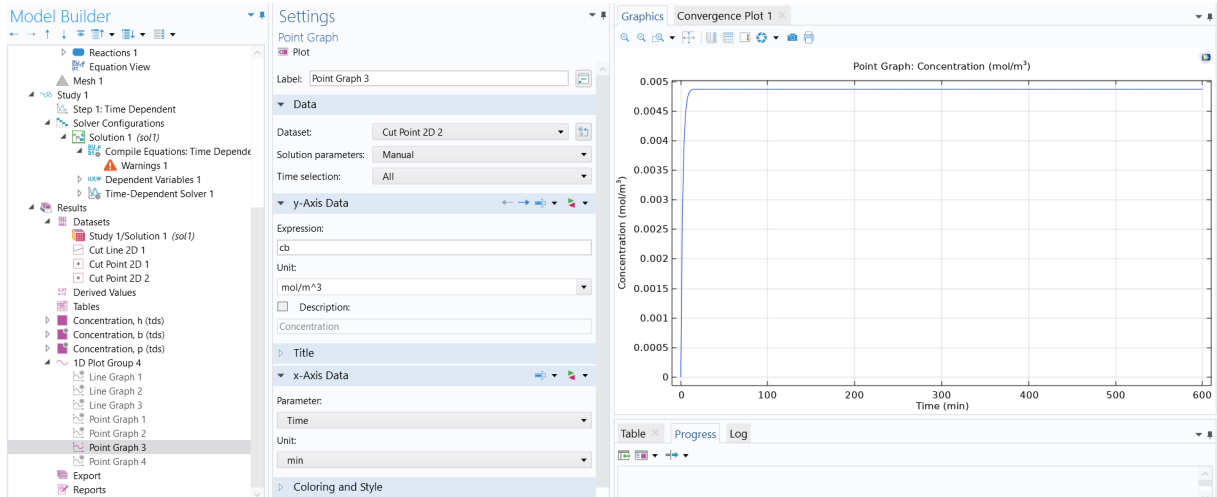
a. *Data:*

i. *Dataset: Cut Point 2D 2*

2. *y-Axis Data:*

a. *Expression: cb*

3. *Plot*



Snímek obrazovky 41 závislost koncentrace barviva na čase v bodě [0.08;0.02]

d) V nabídce funkcí v záložce *Results* byla vybrána a přidána *1D Plot Group*

1. Byl přidán *Point Graph 4*

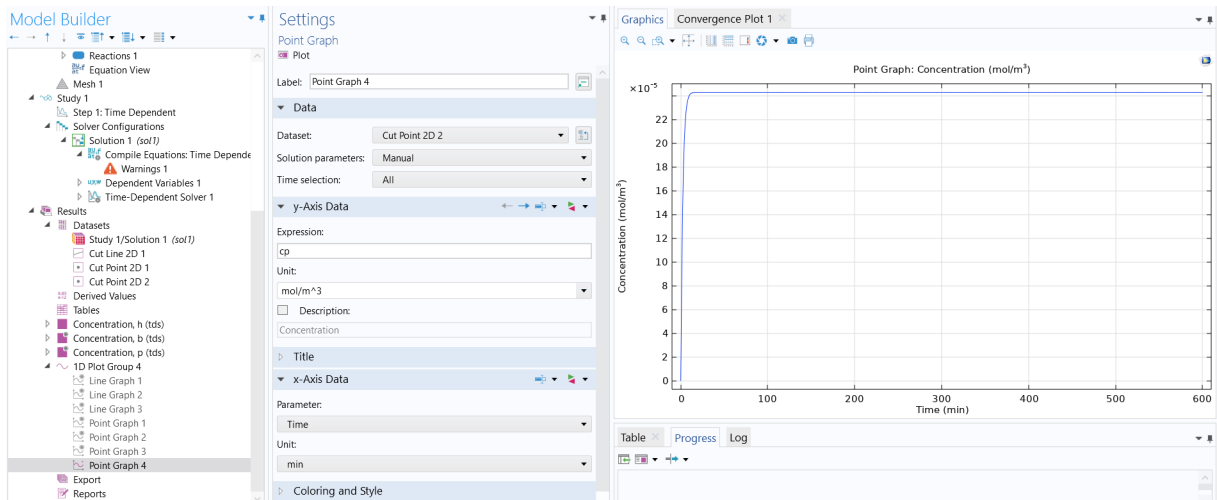
a. *Data:*

i. *Dataset: Cut Point 2D 2*

2. *y-Axis Data:*

a. *Expression: cp*

3. *Plot*



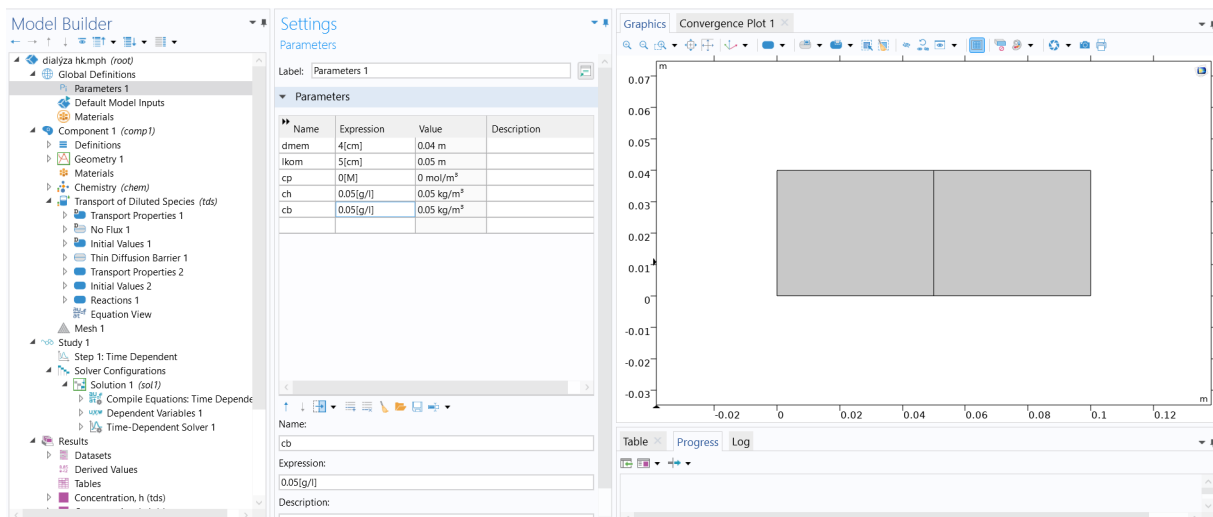
Snímek obrazovky 42 závislost koncentrace produktu na čase v bodě [0.08;0.02]

b. Změny koncentrací

Pro zjištění sorpčních vlastností byla vedena simulace vícekrát, pokaždé s jinou koncentrací barviva.

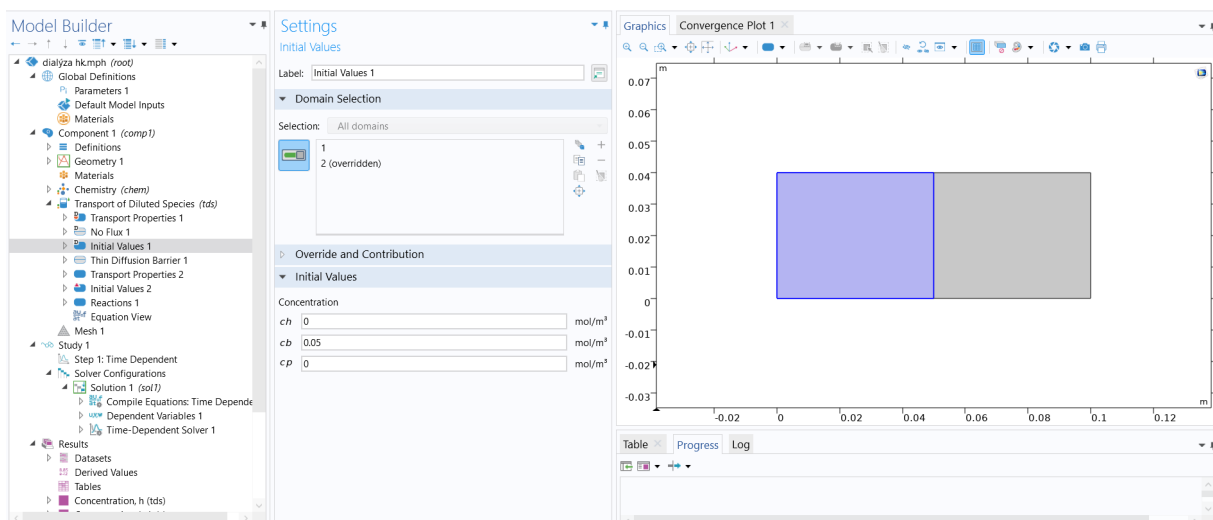
1. Koncentrace 0,05 g/l

a. Koncentrace byla změněna v *Parameters 1*



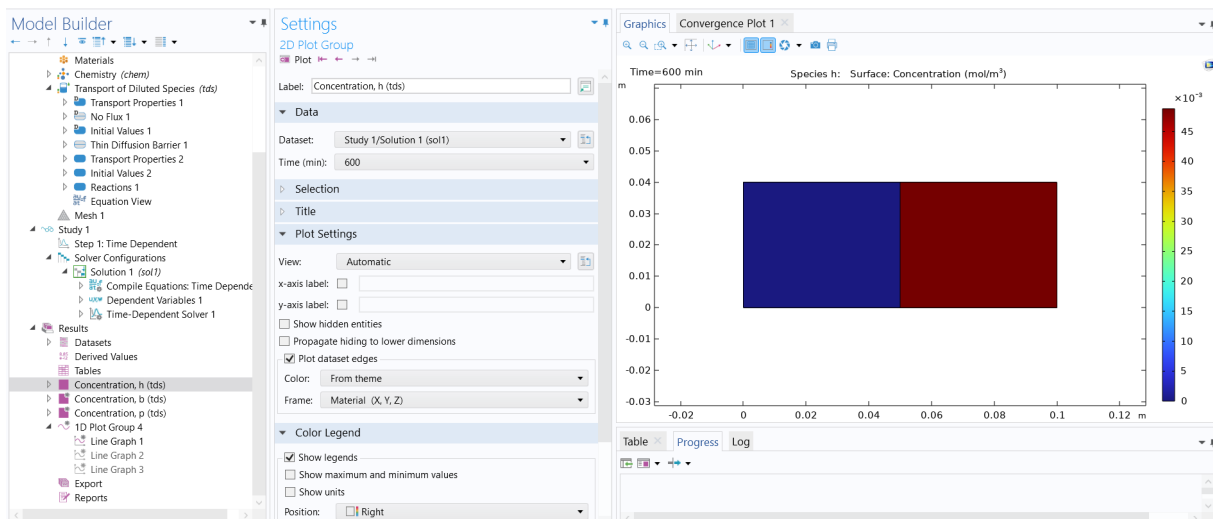
Snímek obrazovky 43 změna koncentrací v Parameters 1

b. Koncentrace byla změněna v *Initial Values 1*



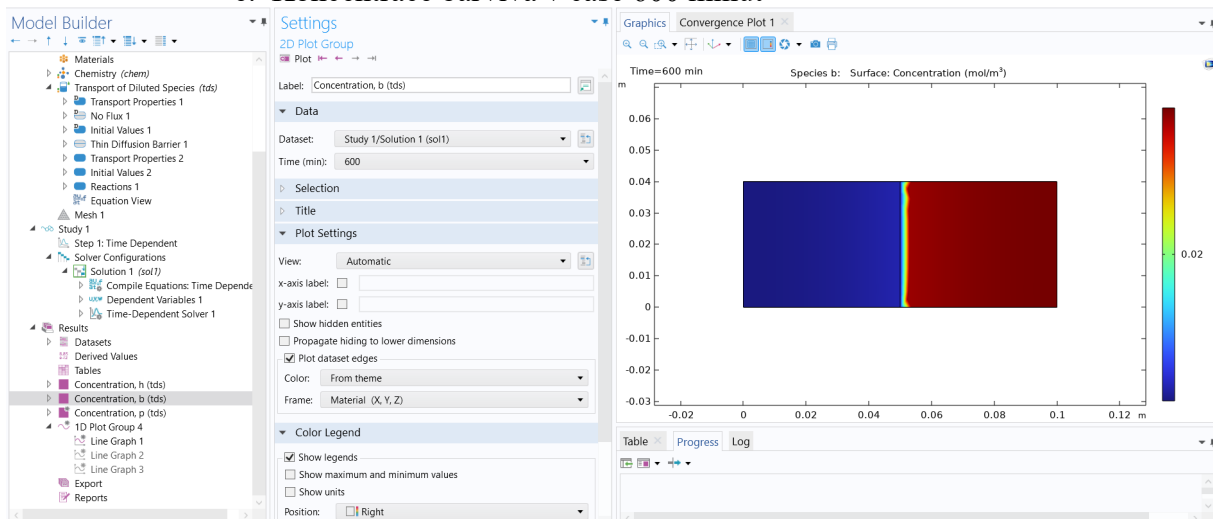
Snímek obrazovky 44 změna koncentrace v initial values 1

- c. Pomocí „Compute“ v sekci *Study 1* byly zjištěny koncentrace
- d. Koncentrace huminové kyseliny v čase 600 minut



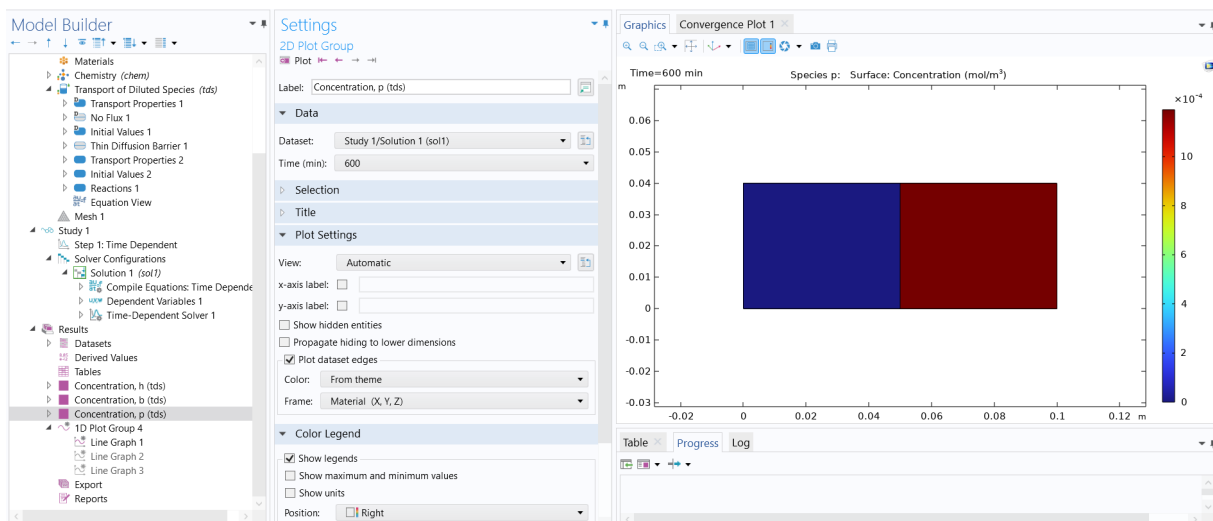
Snímek obrazovky 45 koncentrace huminové kyseliny v čase 600 minut

e. Koncentrace barviva v čase 600 minut



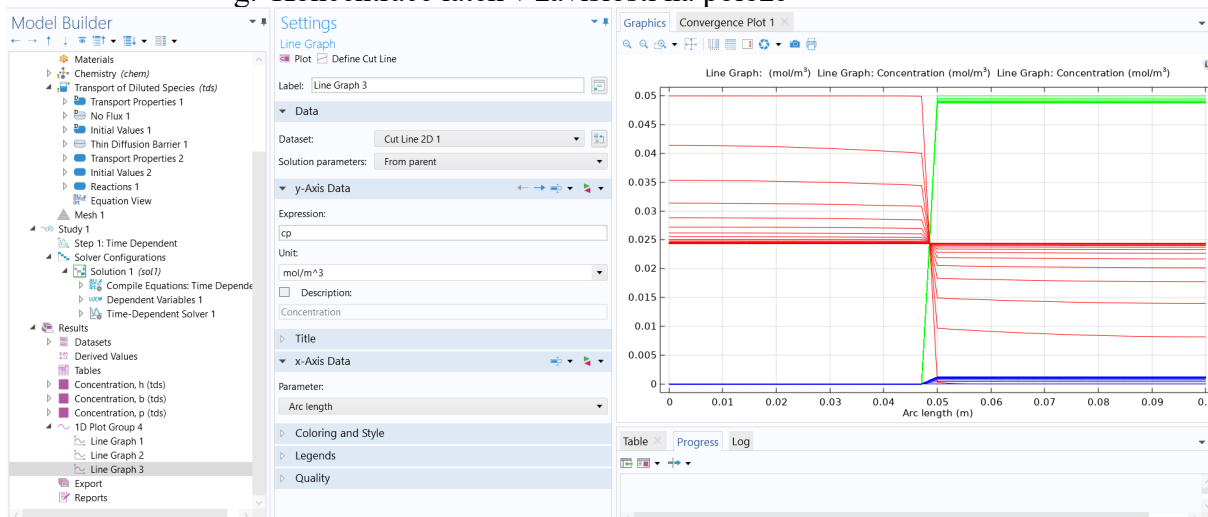
Snímek obrazovky 46 koncentrace barviva v čase 600 minut

f. Koncentrace produktu v čase 600 minut



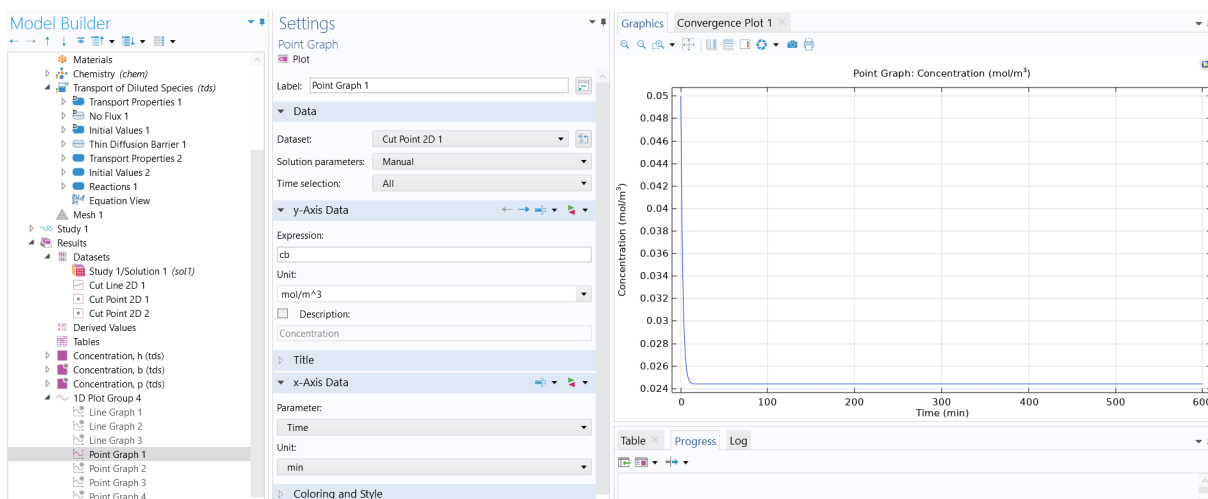
Snímek obrazovky 47 koncentrace produktu v čase 600 minut

g. Koncentrace látek v závislosti na poloze



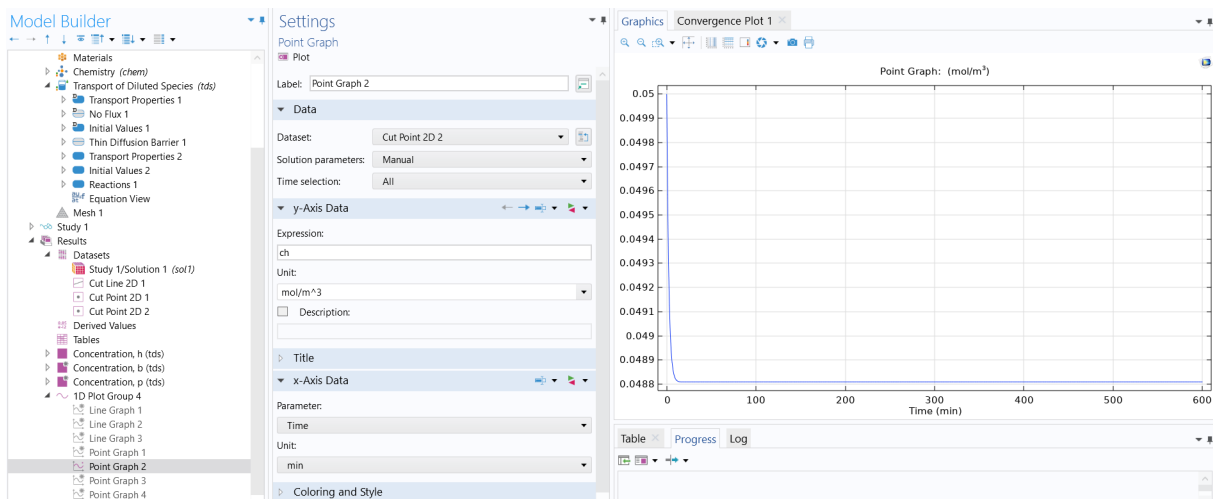
Snímek obrazovky 48 koncentrace látek v závislosti na poloze

h. Koncentrace barviva v bodě [0.02;0.02]



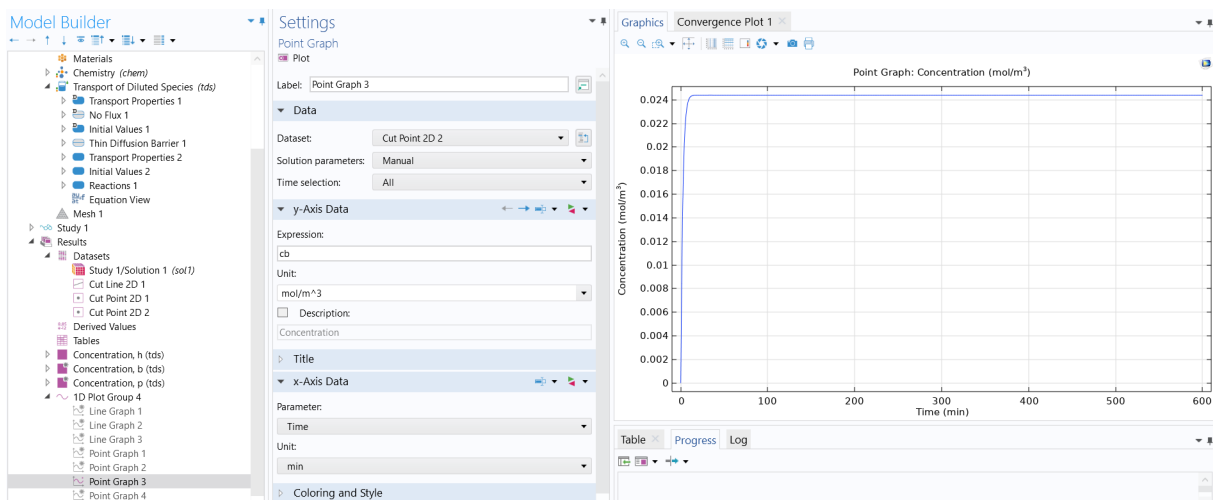
Snímek obrazovky 49 závislost koncentrace barviva na čase v bodě [0.02;0.02]

i. Koncentrace huminové kyseliny v bodě [0.08;0.02]



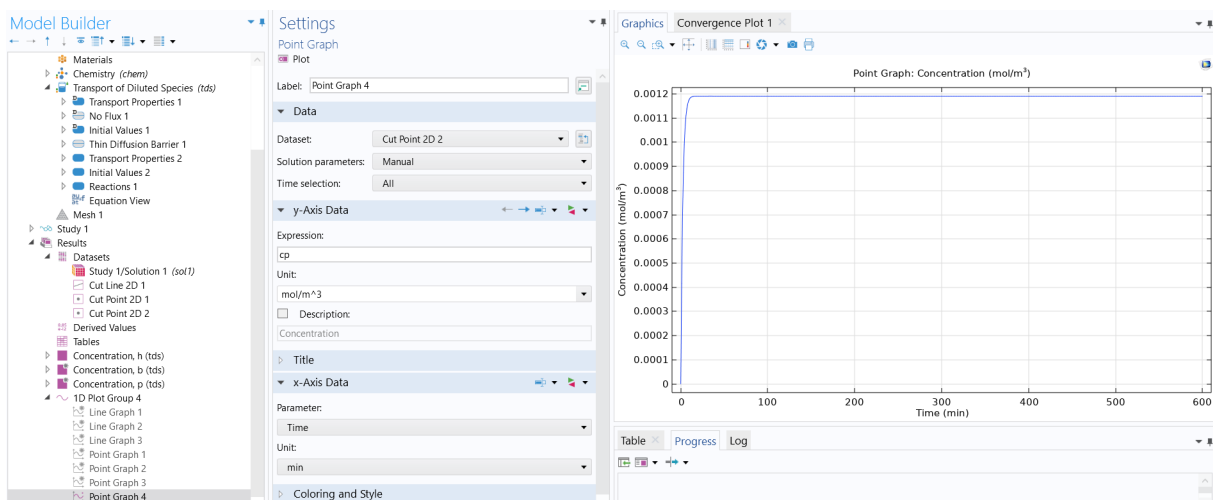
Snímek obrazovky 50 závislost koncentrace huminové kyseliny na čase v bodě [0.08;0.02]

j. Koncentrace barviva v bodě [0.08;0.02]



Snímek obrazovky 51 závislost koncentrace barviva na čase v bodě [0.08;0.02]

k. Koncentrace produktu v bodě [0.08;0.02]

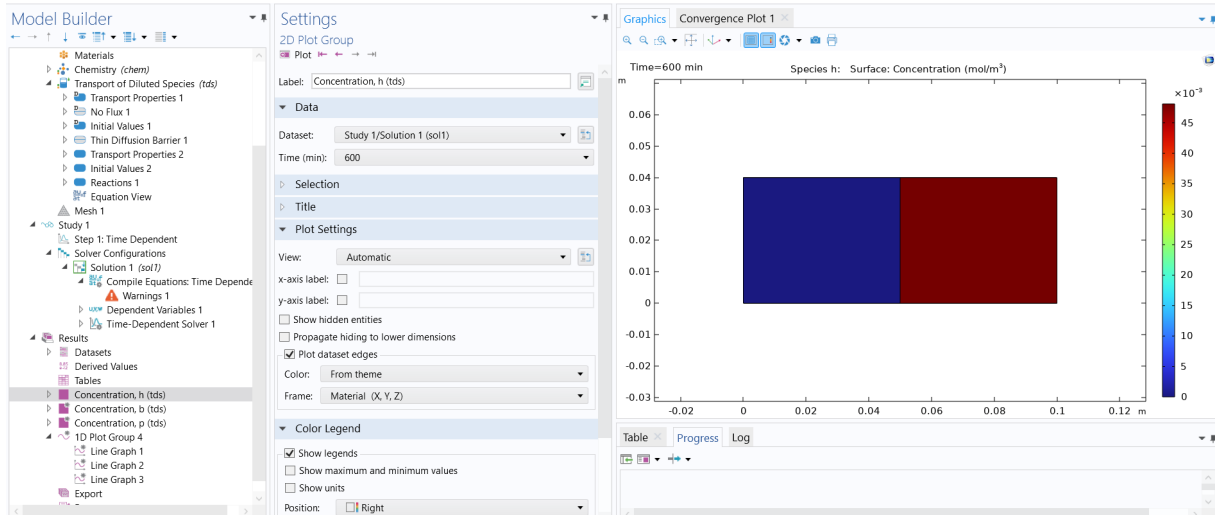


Snímek obrazovky 52 závislost koncentrace produktu na čase v bodě [0.08;0.02]

2. Koncentrace 0,08 g/l

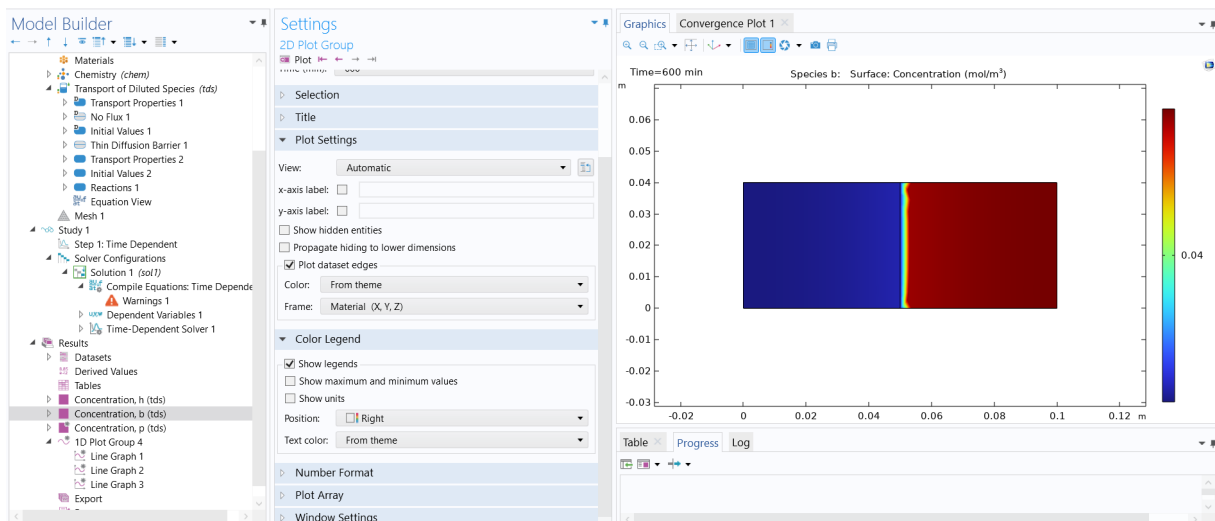
Stejným způsobem, jako u minulého případu byla koncentrace změněna na 0,08 g/l. Tato hodnota odpovídá reálným datům. Poté byly výsledky vykresleny.

a. Koncentrace huminové kyseliny v čase 600 minut



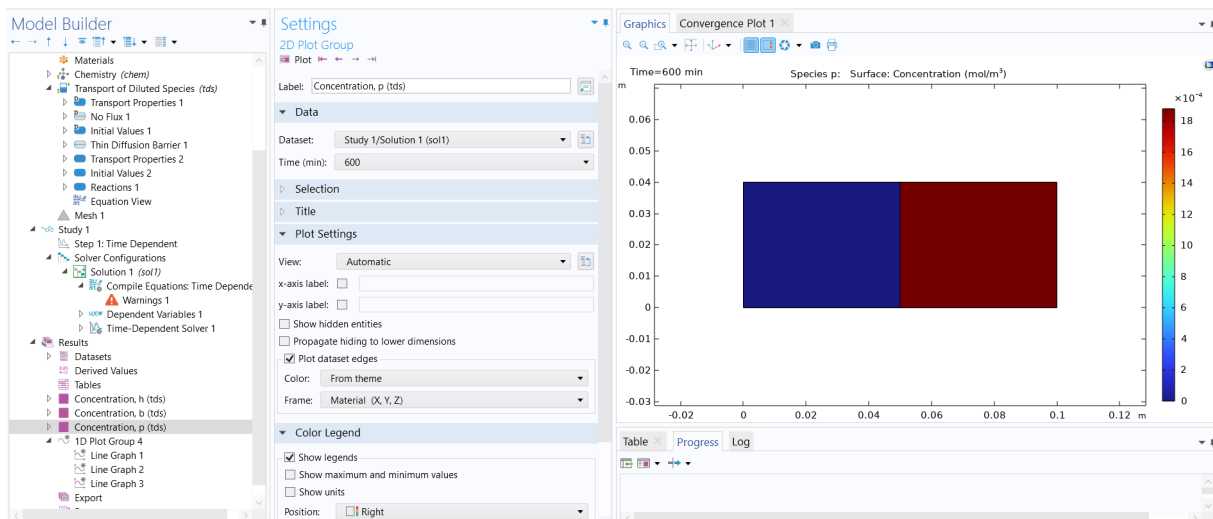
Snímek obrazovky 53 koncentrace huminové kyseliny v čase 600 minut

b. Koncentrace barviva v čase 600 minut



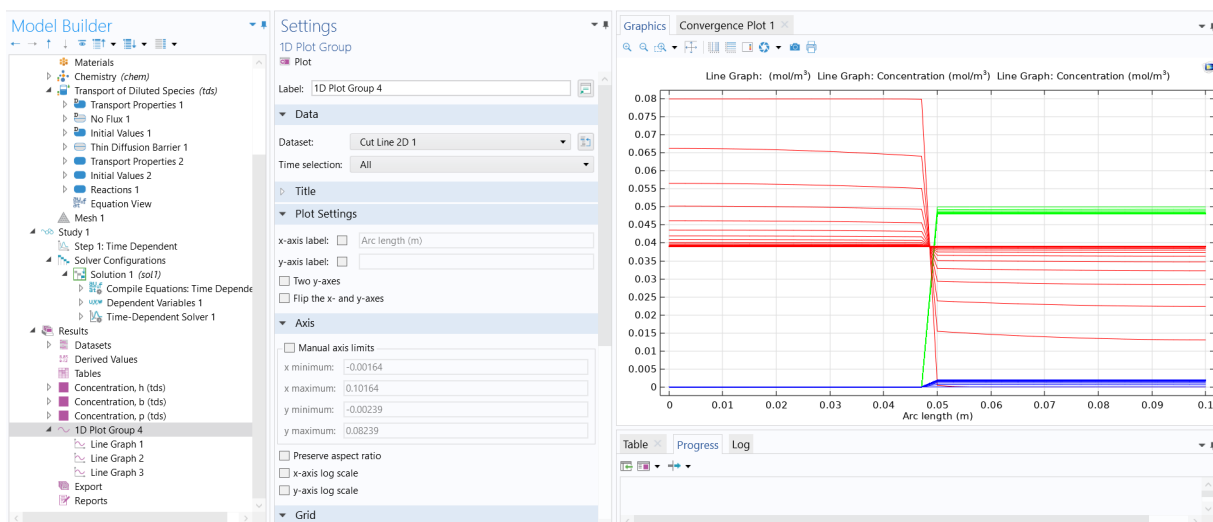
Snímek obrazovky 54 koncentrace barviva v čase 600 minut

c. Koncentrace produktu v čase 600 minut



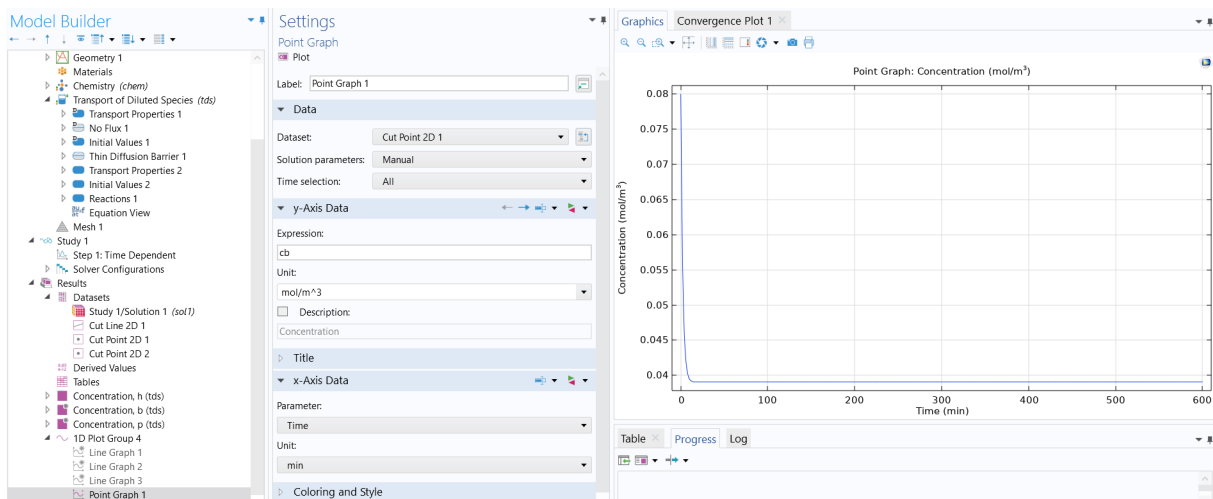
Snímek obrazovky 55 koncentrace produktu v čase 600 minut

c. Koncentrace látek v závislosti na poloze



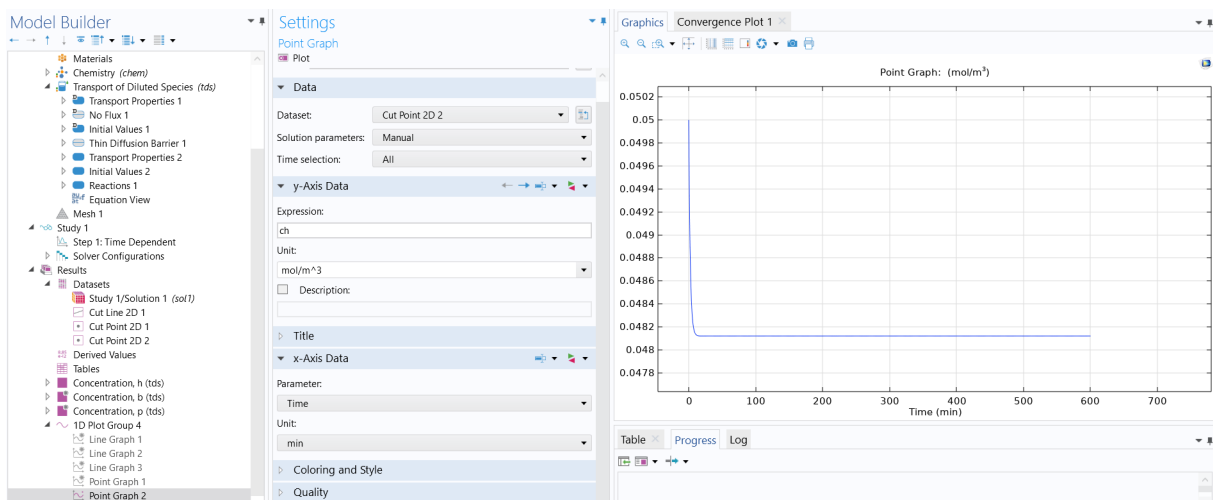
Snímek obrazovky 56 koncentrace látek v závislosti na poloze

a. Koncentrace barviva v bodě [0.02;0.02]



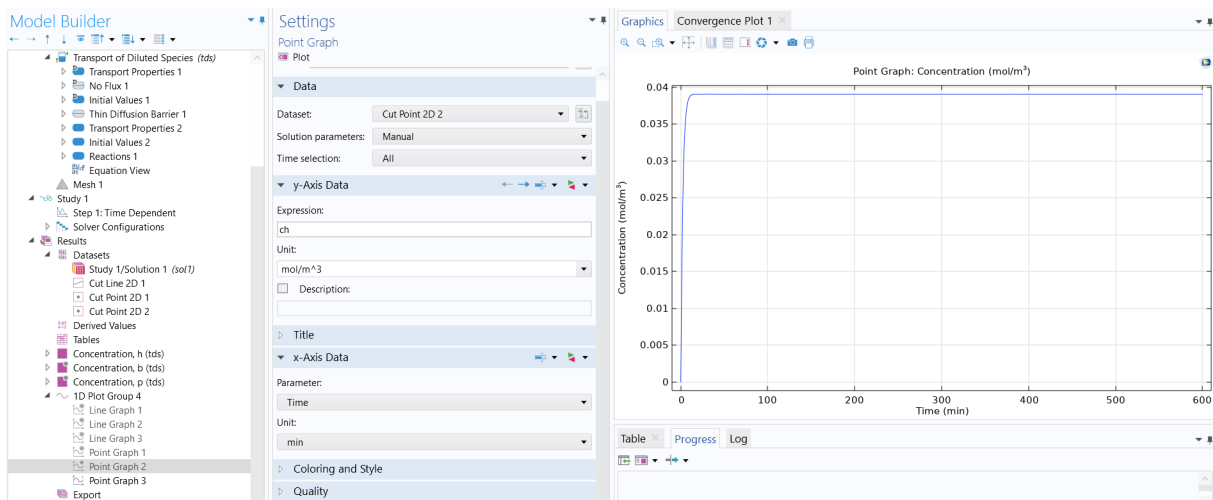
Snímek obrazovky 57 závislost koncentrace barviva na čase v bodě [0.02;0.02]

b. Koncentrace huminové kyseliny v bodě [0.08;0.02]



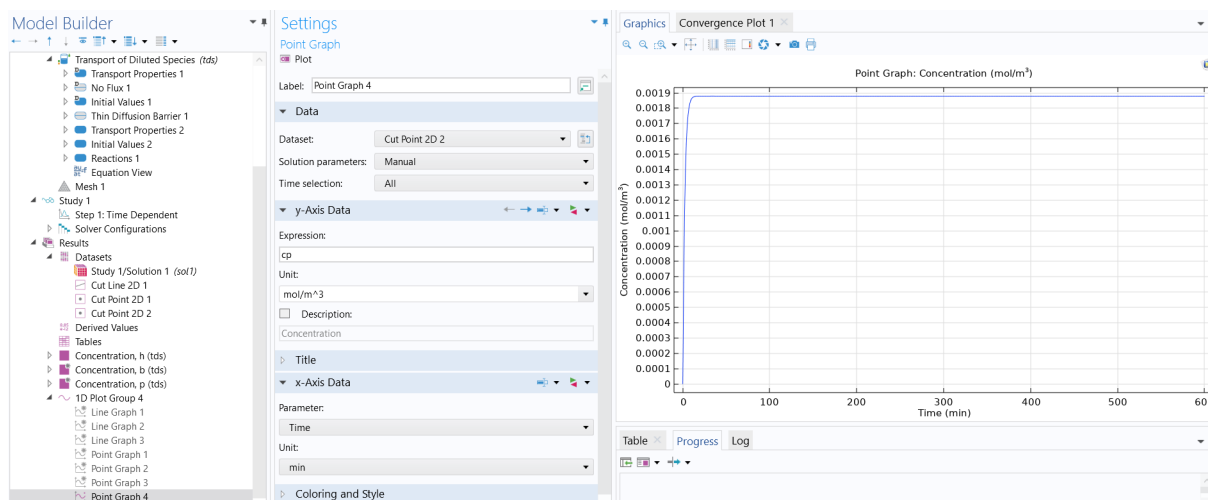
Snímek obrazovky 58 závislost koncentrace huminové kyseliny na čase v bodě [0.08;0.02]

c. Koncentrace barviva v bodě [0.08;0.02]



Snímek obrazovky 59 závislost koncentrace barviva na čase v bodě [0.08;0.02]

d. Koncentrace produktu v bodě [0.08;0.02]

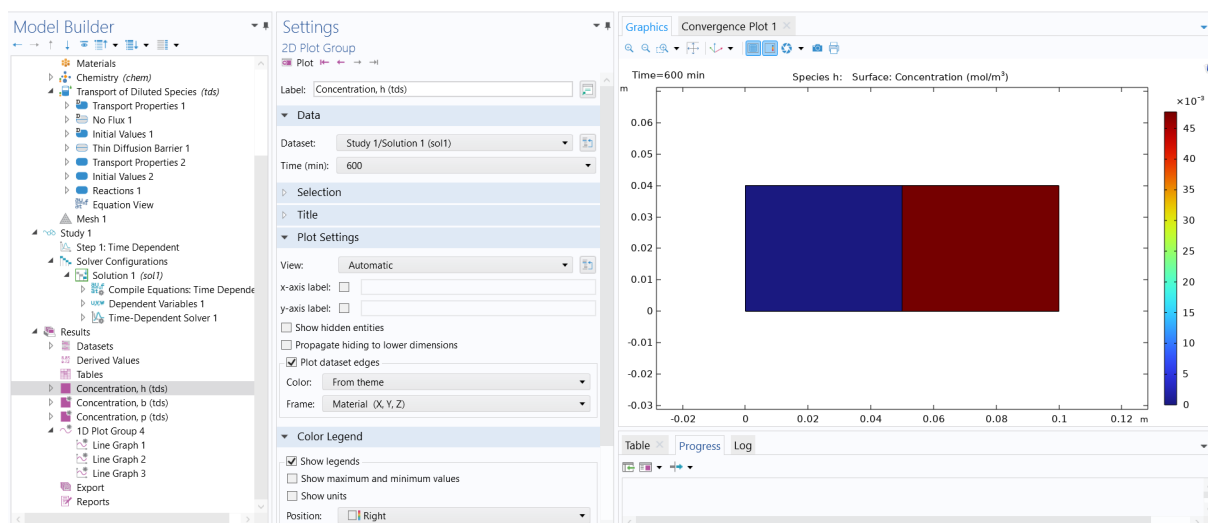


Snímek obrazovky 60 závislost koncentrace produktu na čase v bodě [0.08;0.02]

3. Koncentrace 0,1 g/l

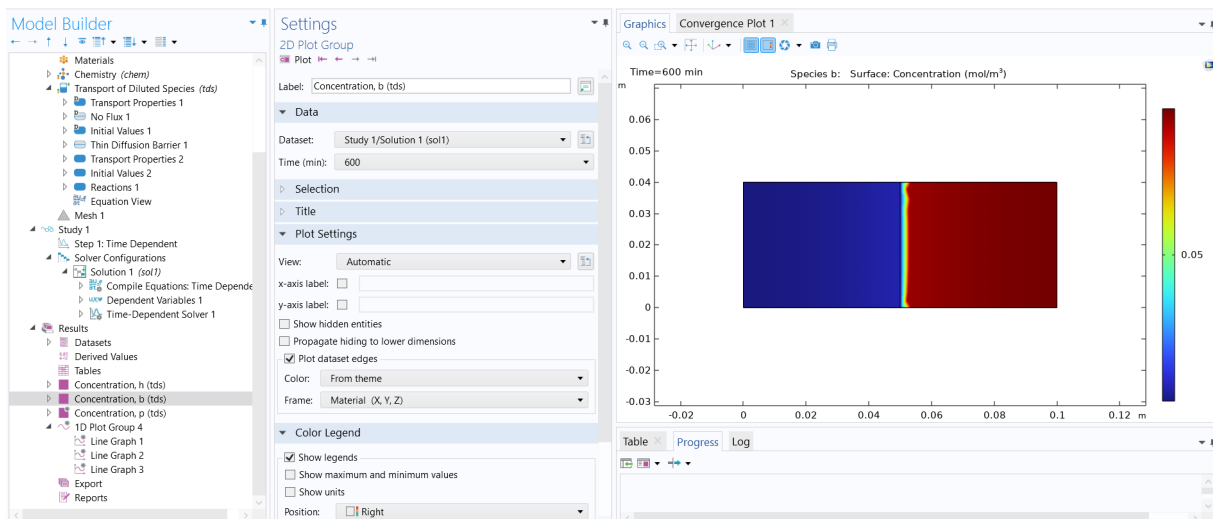
Stejným způsobem, jako u minulého a předminulého případu byla koncentrace změněna na 0,1 g/l. Poté byly výsledky vykresleny.

a. Koncentrace huminové kyseliny v čase 600 minut



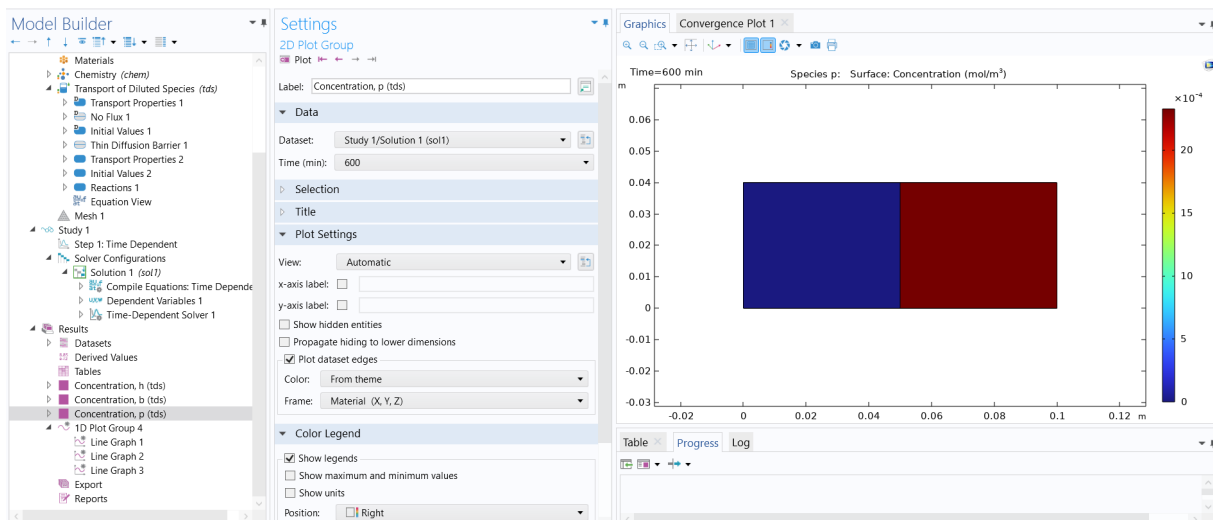
Snímek obrazovky 61 koncentrace huminové kyseliny v čase 600 minut

b. Koncentrace barviva v čase 600 minut



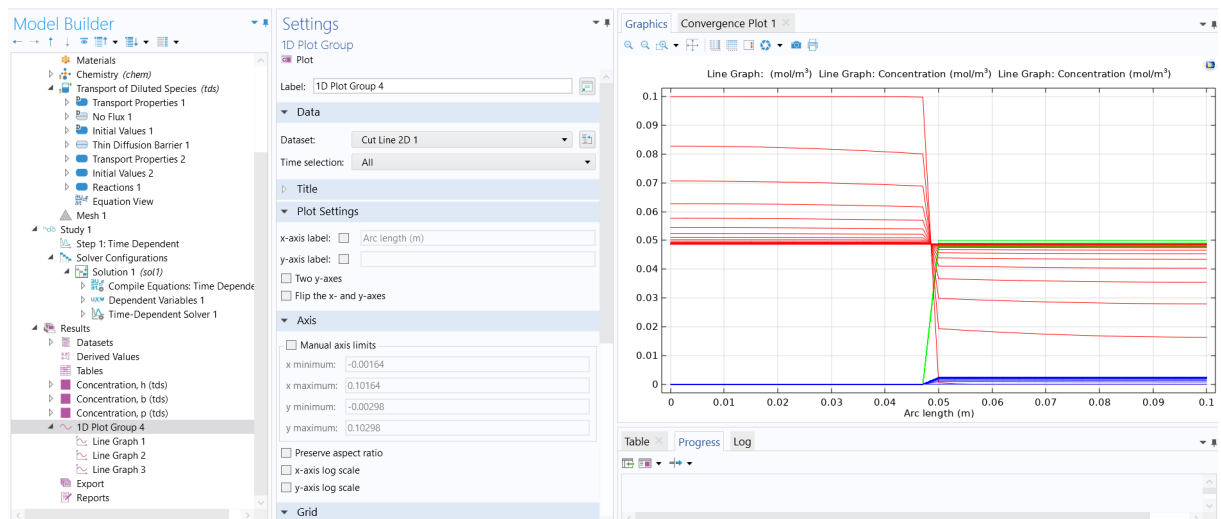
Snímek obrazovky 62 koncentrace barviva v čase 600 minut

c. Koncentrace produktu v čase 600 minut



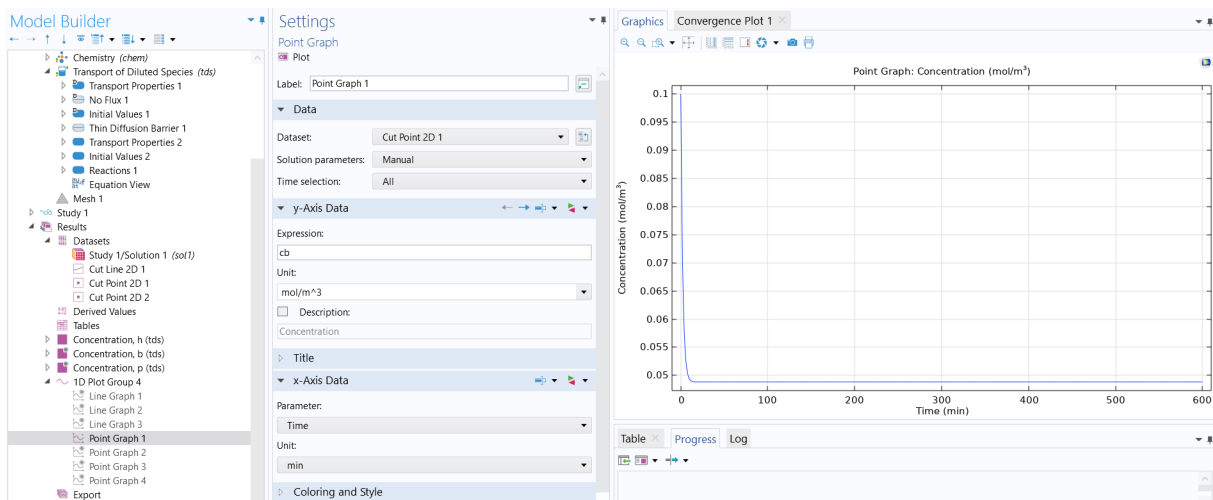
Snímek obrazovky 63 koncentrace produktu v čase 600 minut

d. Koncentrace látek v závislosti na čase



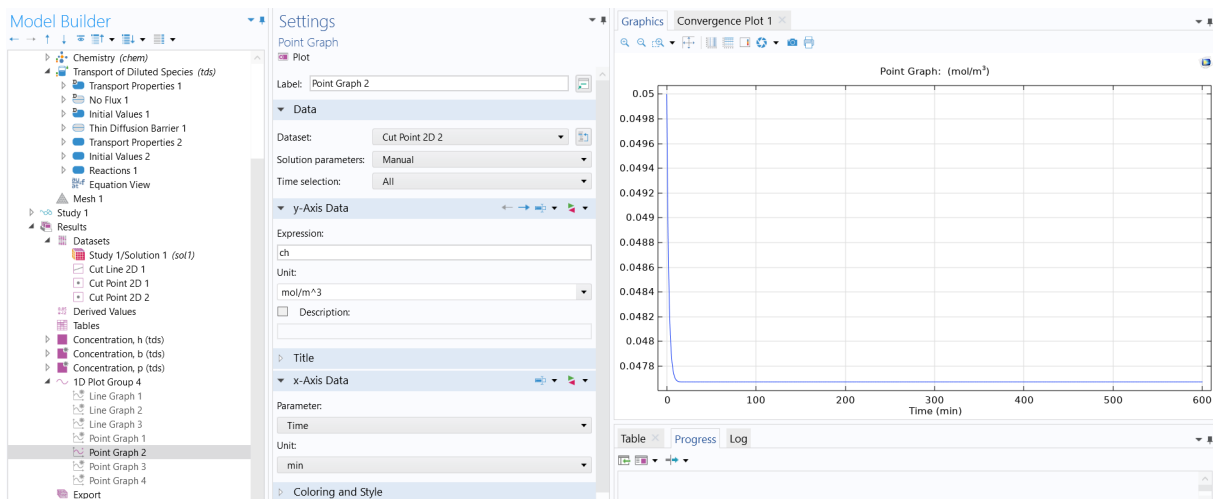
Snímek obrazovky 64 koncentrace látek v závislosti na poloze

e. Koncentrace barviva v bodě [0.02;0.02]



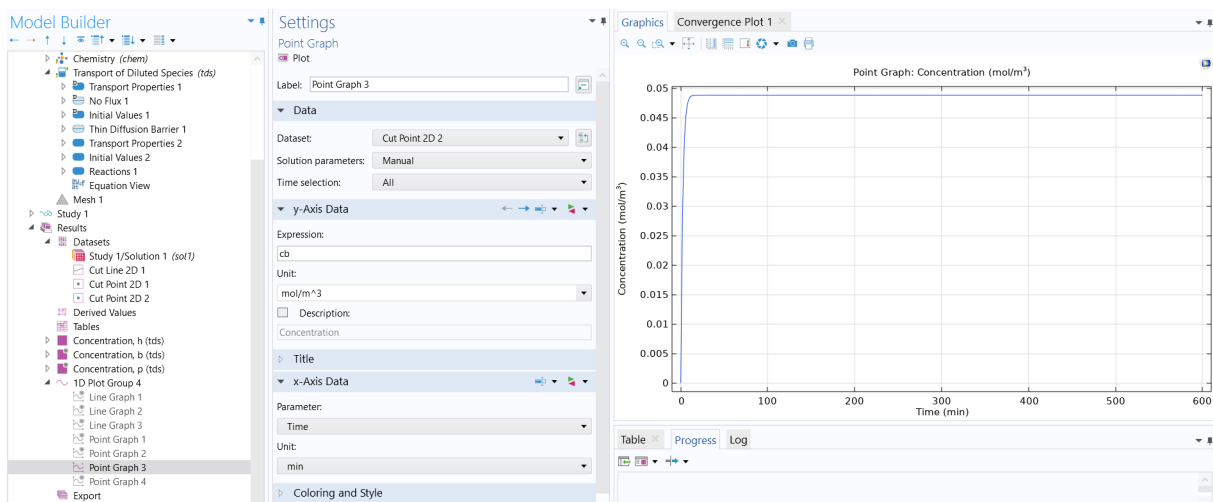
Snímek obrazovky 65 závislost koncentrace barviva na čase v bodě [0.02;0.02]

f. Koncentrace huminové kyseliny v bodě [0.08;0.02]



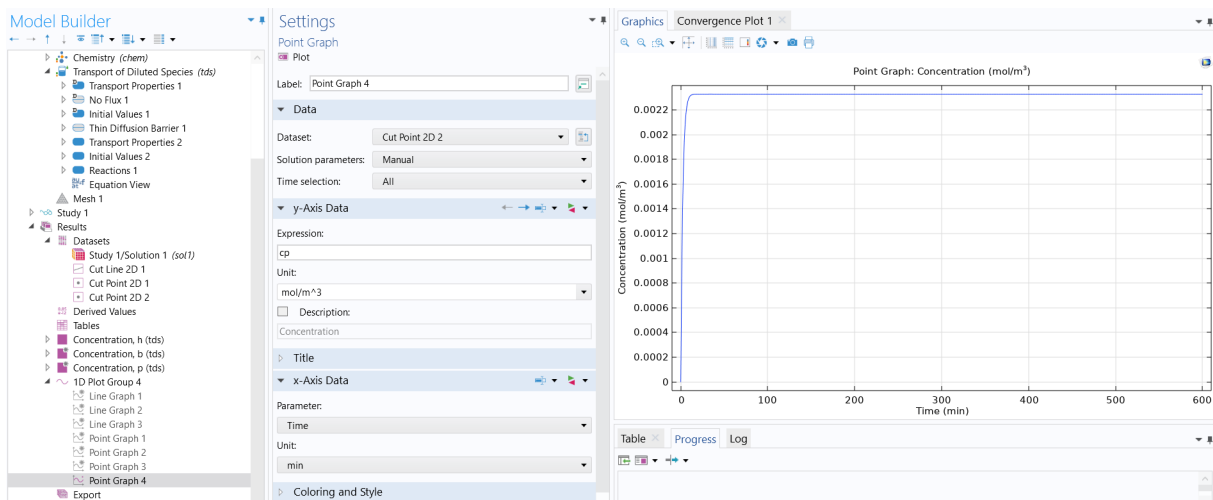
Snímek obrazovky 66 závislost koncentrace huminové kyseliny na čase v bodě [0.08;0.02]

g. Koncentrace barviva v bodě [0.08;0.02]



Snímek obrazovky 67 závislost koncentrace barviva na čase v bodě [0.08;0.02]

h. Koncentrace produktu v bodě [0.08;0.02]

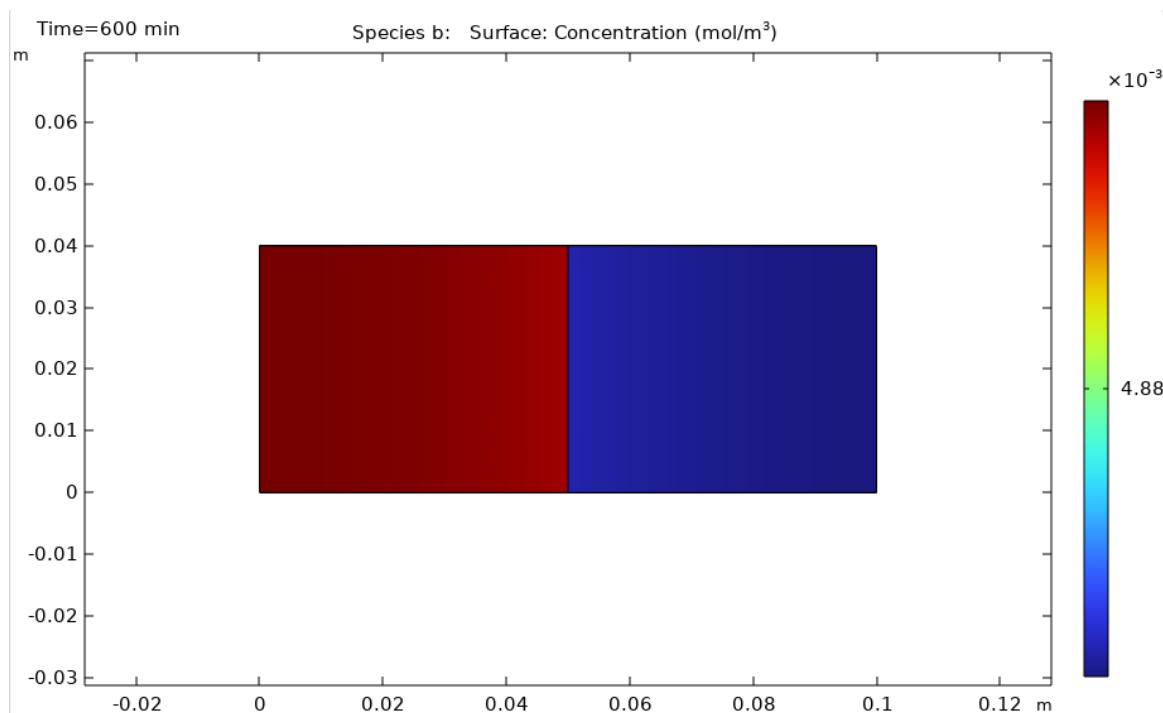


Snímek obrazovky 68 závislost koncentrace produktu na čase v bodě [0.08;0.02]

5 VÝSLEDKY A DISKUZE

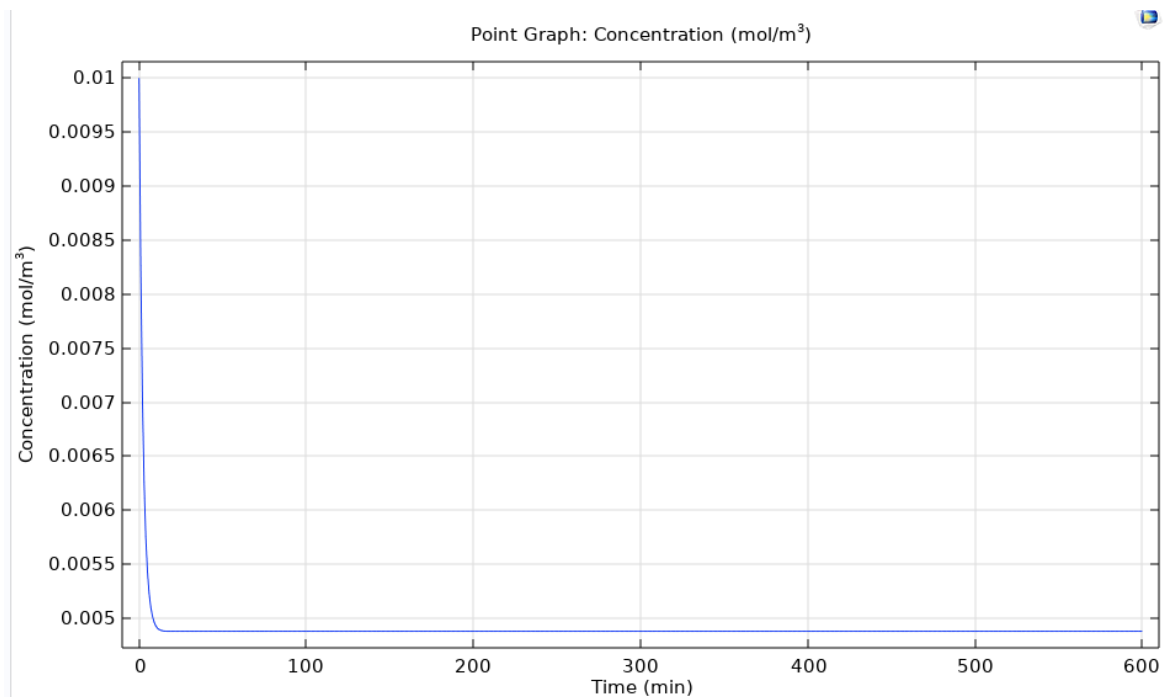
Při srovnávání výsledků bylo rozhodnuto, že jednotlivé výsledky mezi sebou budou srovnány v čase 600 minut. To z toho důvodu, že reakce je v rovnováze. Vzhledem k neměnné prakticky neměnné koncentraci huminové kyseliny byly sledované koncentrace produktu a barviva. Poté byla data srovnána s reálnými výsledky, které byly získány z diplomové práce Ing. Bělušové [40].

5.1 Výsledky při původní koncentraci barviva 0,01 g/l



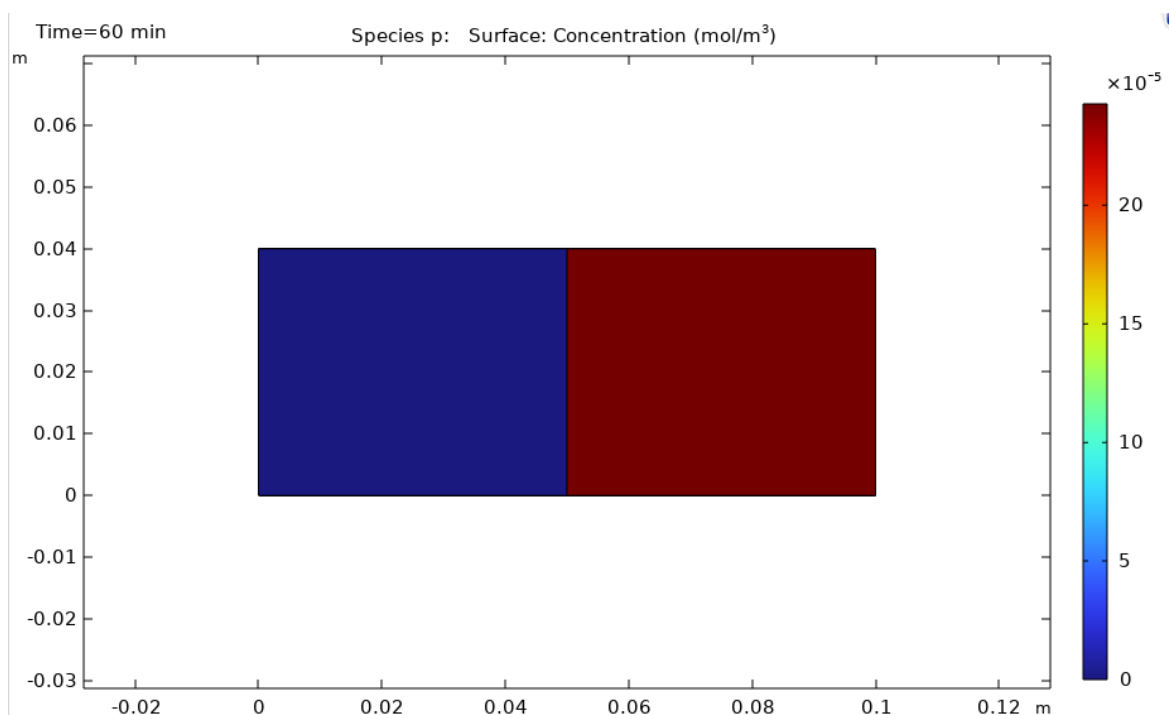
Výsledná koncentrace 1 koncentrace barviva v rovnováze o původní koncentrace 0,01 g/l

Při koncentraci barviva 0,01 g/l lze vidět, že po docílení rovnováhy lze pozorovat, že na levé i pravé straně membrány je koncentrace barviva $4,88 \cdot 10^{-3} \text{ mol} \cdot \text{m}^{-3}$. Kdyby reakce neproběhla vůbec, tak se rovnováha ustálí na $0,5 \cdot 10^{-3} \text{ mol} \cdot \text{m}^{-3}$. Tím pádem v každé komoře chybí $0,12 \cdot 10^{-3} \text{ mol} \cdot \text{m}^{-3}$. Z toho vyplývá, že muselo zreagovat $2,4 \cdot 10^{-5} \text{ mol} \cdot \text{m}^{-3}$, což jde lépe vidět na grafu 1:

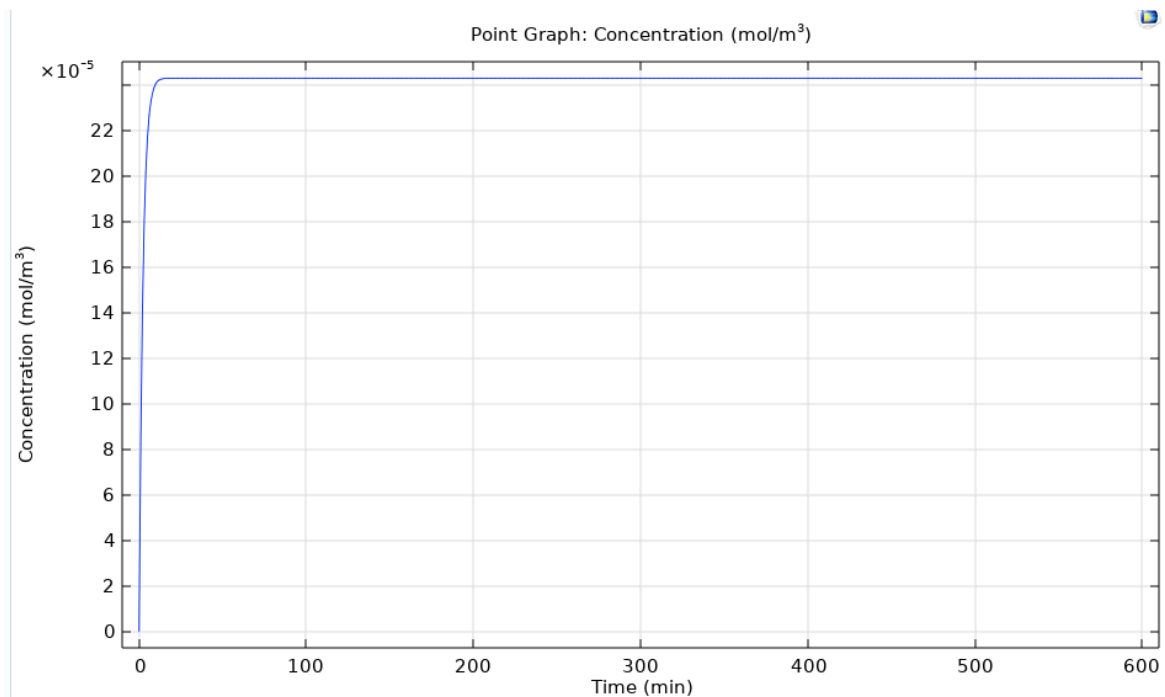


Graf 1 koncentrace barviva v závislosti na čase při původní koncentraci 0,01 g/l

Výsledky se i potvrdily na výsledné koncentraci 2 a na grafu 2:



Výsledná koncentrace 2 koncentrace produktu v rovnováze při původní koncentraci barviva 0,01 g/l



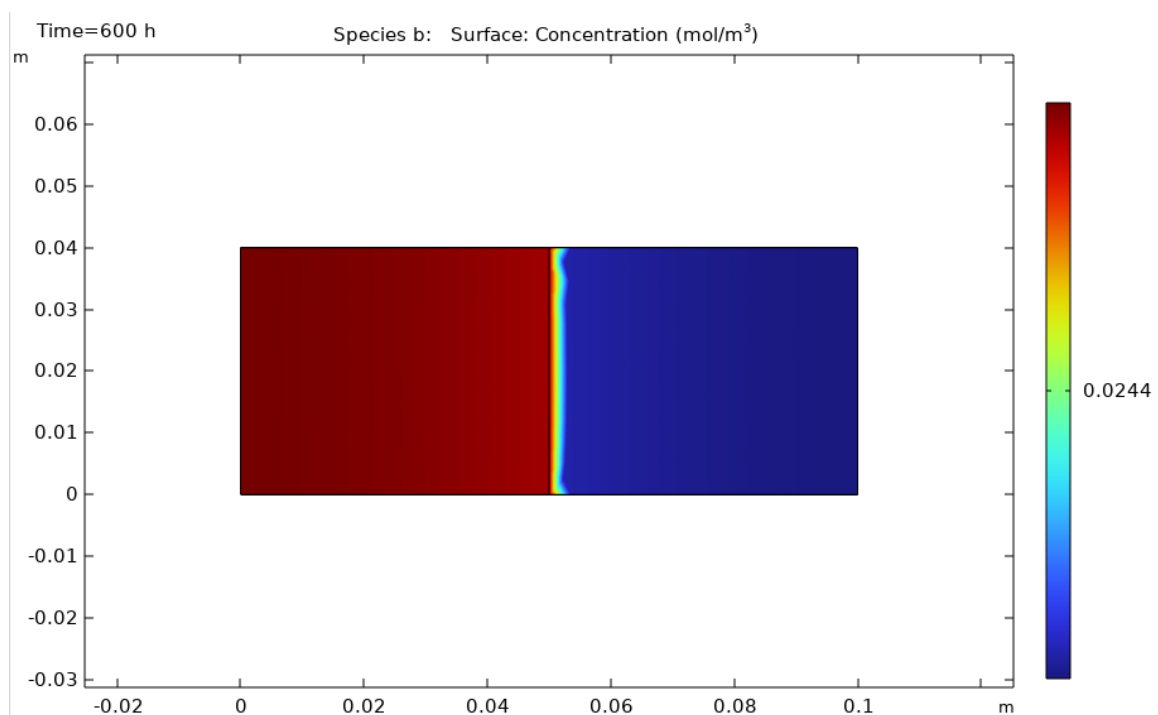
Graf 2 koncentrace produktu v závislosti na čase při původní koncentraci barviva 0,01 g/l

Na výsledné koncentraci 2 a na grafu 2 lze vidět, že podle měřítka koncentrace produktu odpovídá.

To znamená, že huminová kyselina na sebe navázala $2,4 \cdot 10^{-5} \text{ mol} \cdot \text{m}^{-3}$ barviva, což odpovídá 2,40 %.

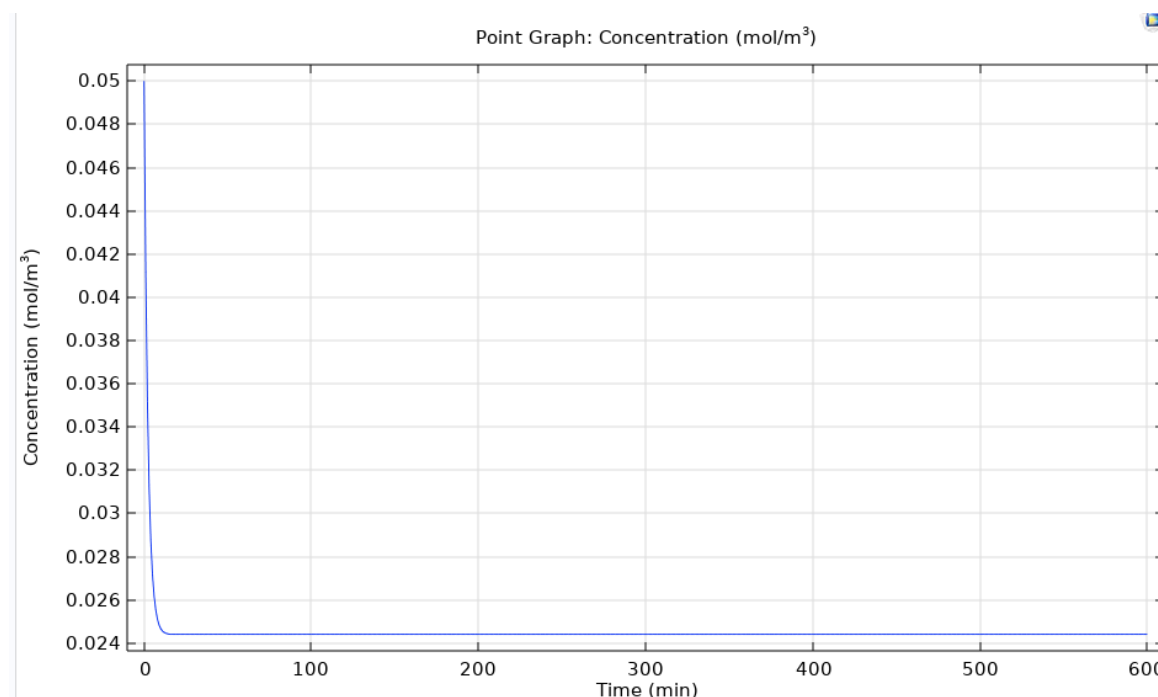
Stejným způsobem se pokračovalo i u ostatních výsledků.

5.2 Výsledky při původní koncentraci barviva 0,05g/l



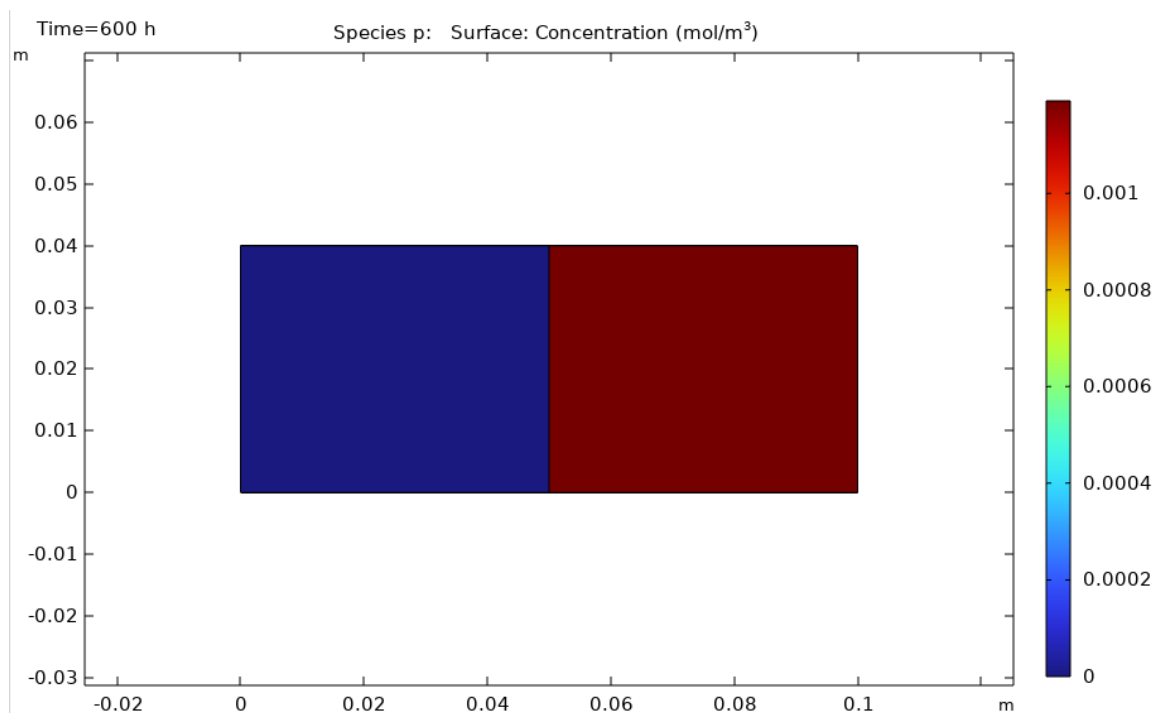
Výsledná koncentrace 3 koncentrace barviva v rovnováze o původní koncentrace 0,05 g/l

Při koncentraci barviva 0,05 g/l lze vidět, že po docílení rovnováhy lze pozorovat, že v celém systému je koncentrace barviva $0,0244 \cdot 10^{-3} \text{ mol} \cdot \text{m}^{-3}$. Z toho vyplývá, že muselo zreagovat $1,22 \cdot 10^{-4} \text{ mol} \cdot \text{m}^{-3}$ barviva, což jde lépe vidět na grafu 3:

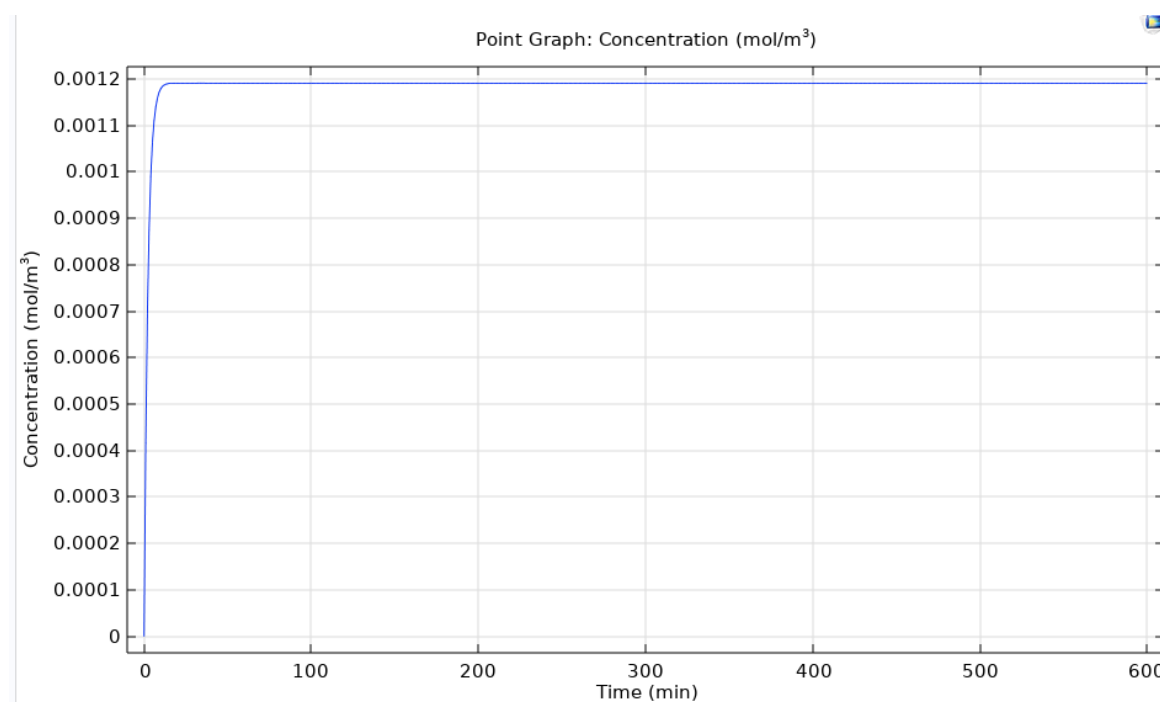


Graf 3 koncentrace barviva v závislosti na čase při původní koncentraci 0,05 g/l

Opět se to potvrdilo na výsledné koncentraci 4 a grafu 4:



Výsledná koncentrace 4 koncentrace produktu v rovnováze při původní koncentraci barviva 0,08 g/l



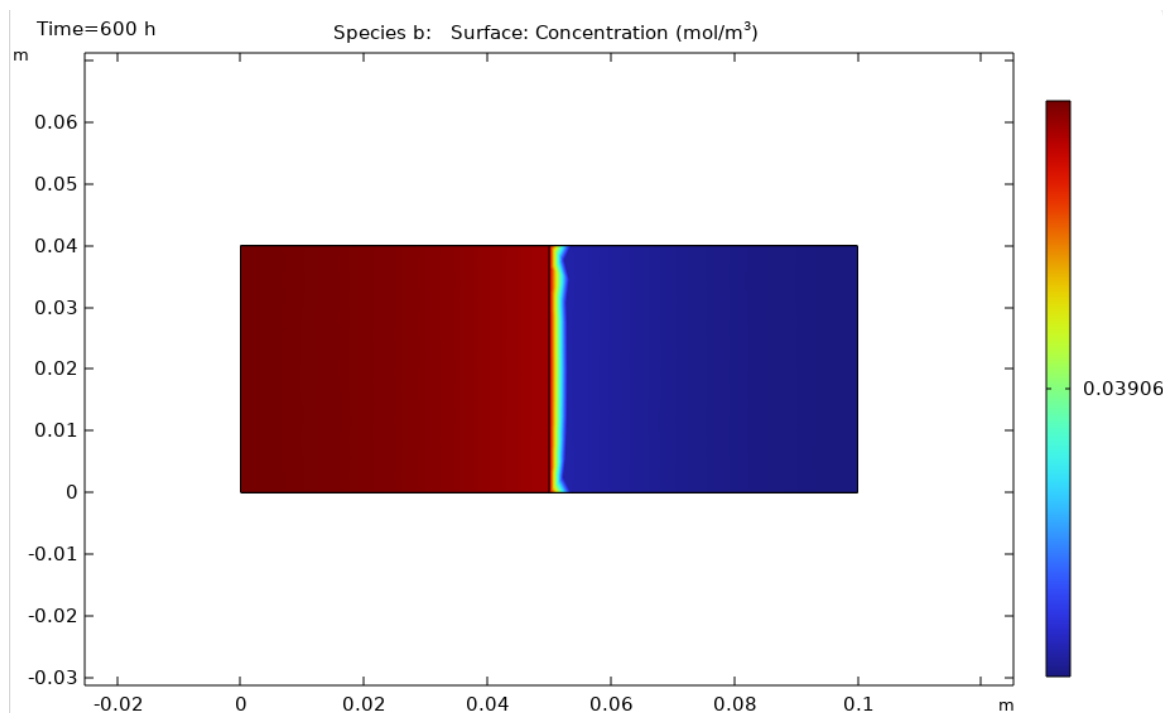
Graf 4 koncentrace produktu v závislosti na čase při původní koncentraci barviva 0,05 g/l

kde lze vidět, že podle měřítka koncentrace produktu odpovídá.

To znamená, že huminová kyselina na sebe navázala $1,22 \cdot 10^{-4} \text{ mol} \cdot \text{m}^{-3}$ barviva, což odpovídá 2,44 %.

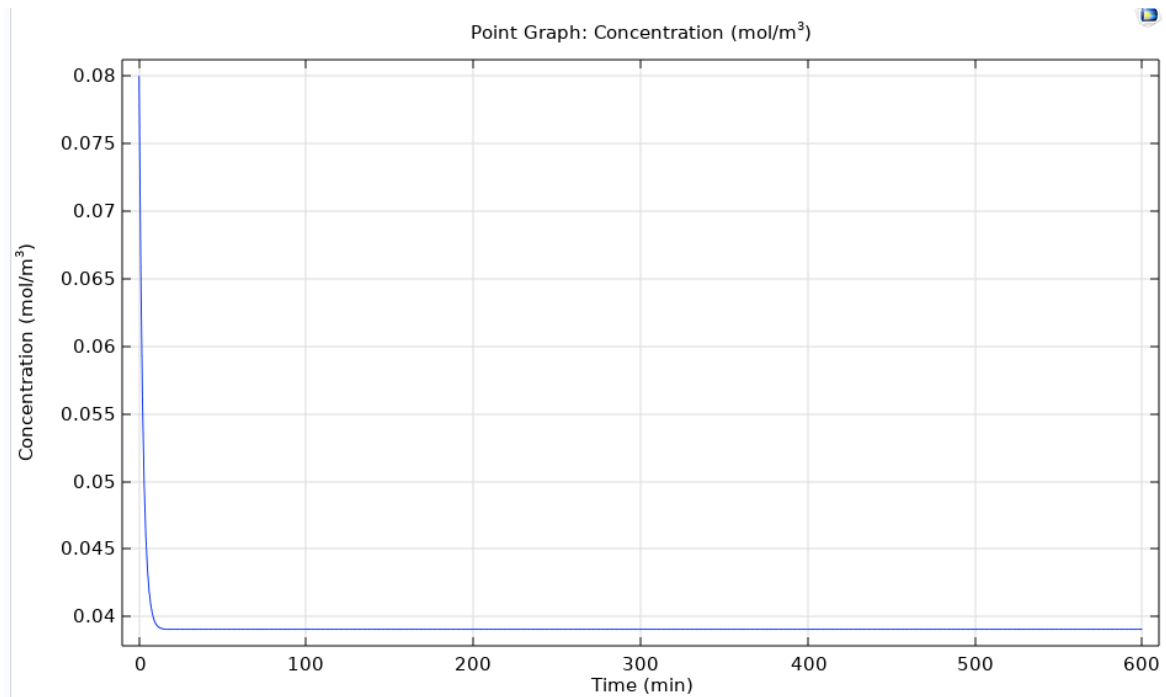
5.3 Výsledky při původní koncentraci barviva 0,08 g/l

U případu s koncentrací 0,08 g/l byly výsledky porovnány i s grafem od Ing. Bělušové, protože dělala reálný pokus, který byl volnou předlohou modelace. Už na první pohled lze vidět, že není třeba zacházet do hloubky zkoumat výsledky dopodrobna, protože její reakce probíhala desítky dní, zatímco tato simulace se ustálila už po několika minutách.



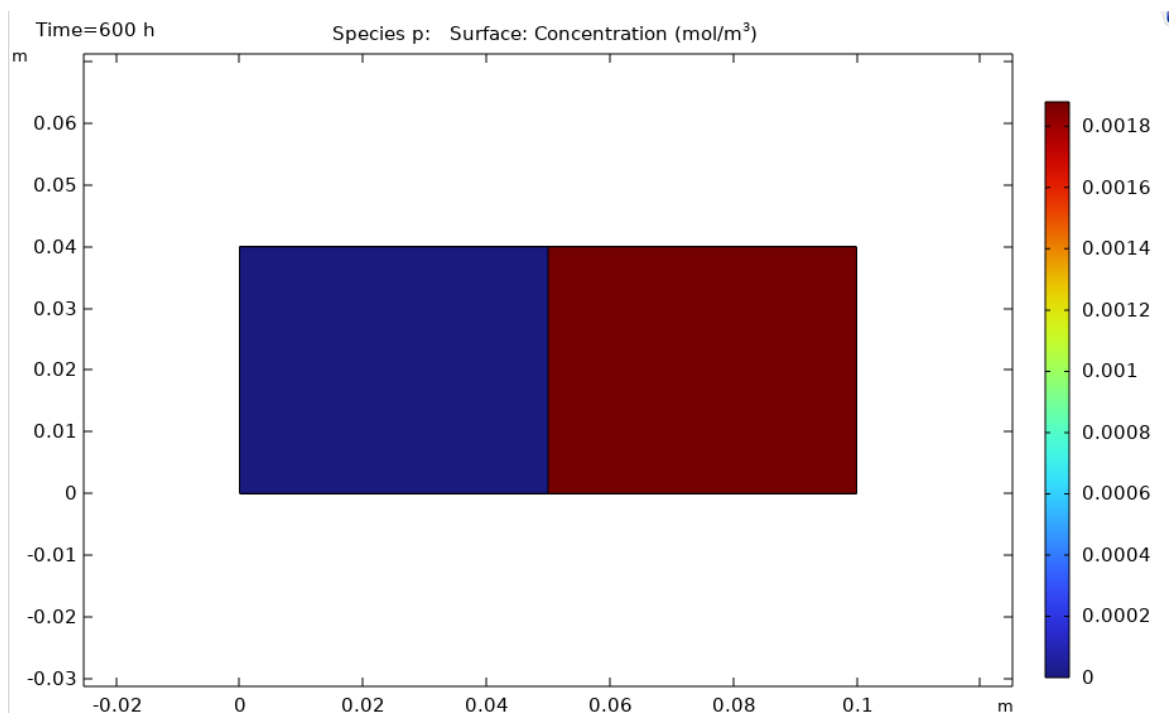
Výsledná koncentrace 5 koncentrace barviva v rovnováze o původní koncentrace 0,08 g/l

U tohoto případu se koncentrace ustálila na $0,03906 \text{ mol} \cdot \text{m}^{-3}$. Z toho vyplývá že zreagovalo $0,00188 \text{ mol} \cdot \text{m}^{-3}$ barviva, což jde lépe vidět na grafu 5:

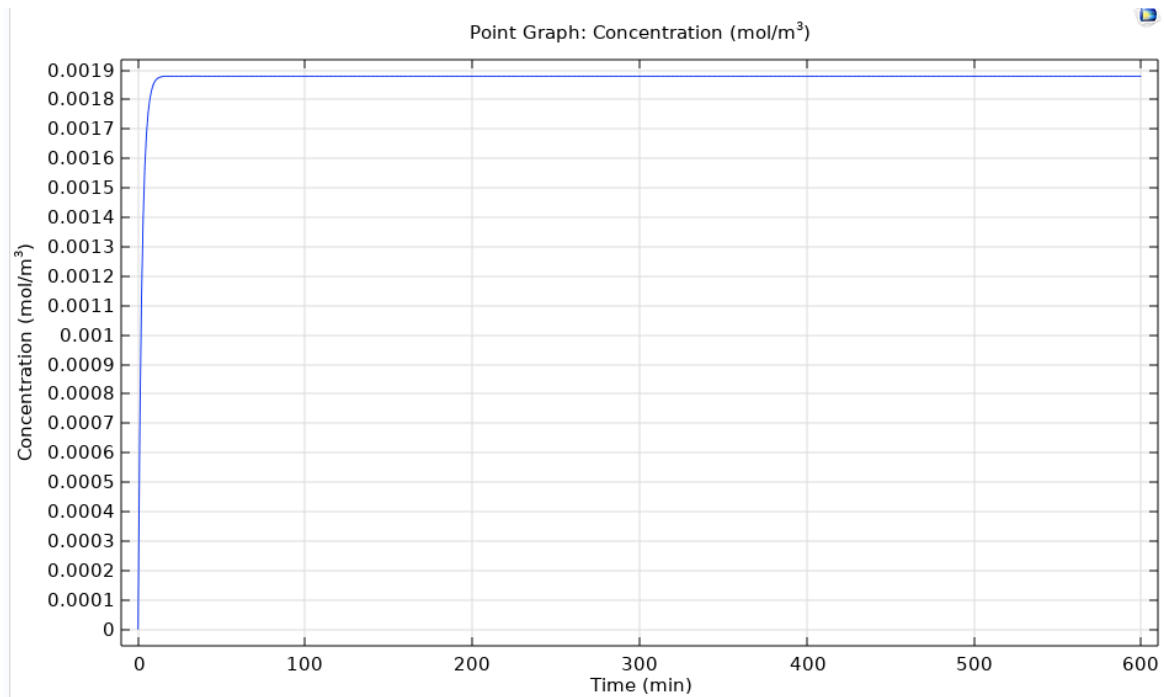


Graf 5 koncentrace barviva v závislosti na čase při původní koncentraci 0,08 g/l

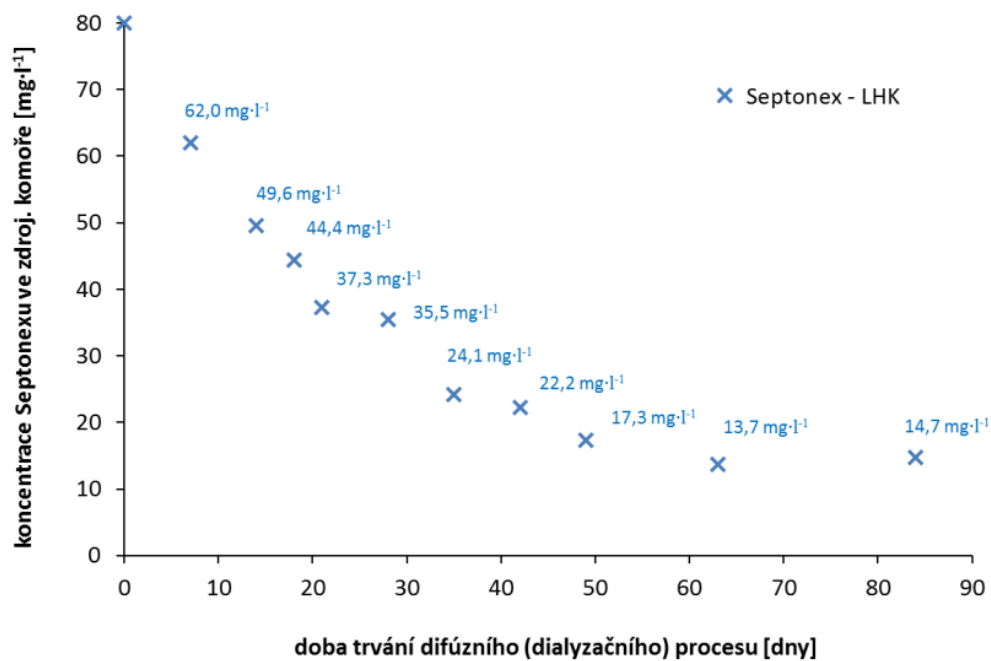
Opět se to potvrdilo na výsledné koncentraci 6 a grafu 6:



Výsledná koncentrace 6 koncentrace produktu v rovnováze při původní koncentraci barviva 0,08 g/l



Graf 6 koncentrace produktu v závislosti na čase při původní koncentraci barviva 0,08 g/l kde lze vidět, že koncentrace produktu dosáhla 0,00188 mol · m⁻³. Tato koncentrace odpovídá 2,35 %.

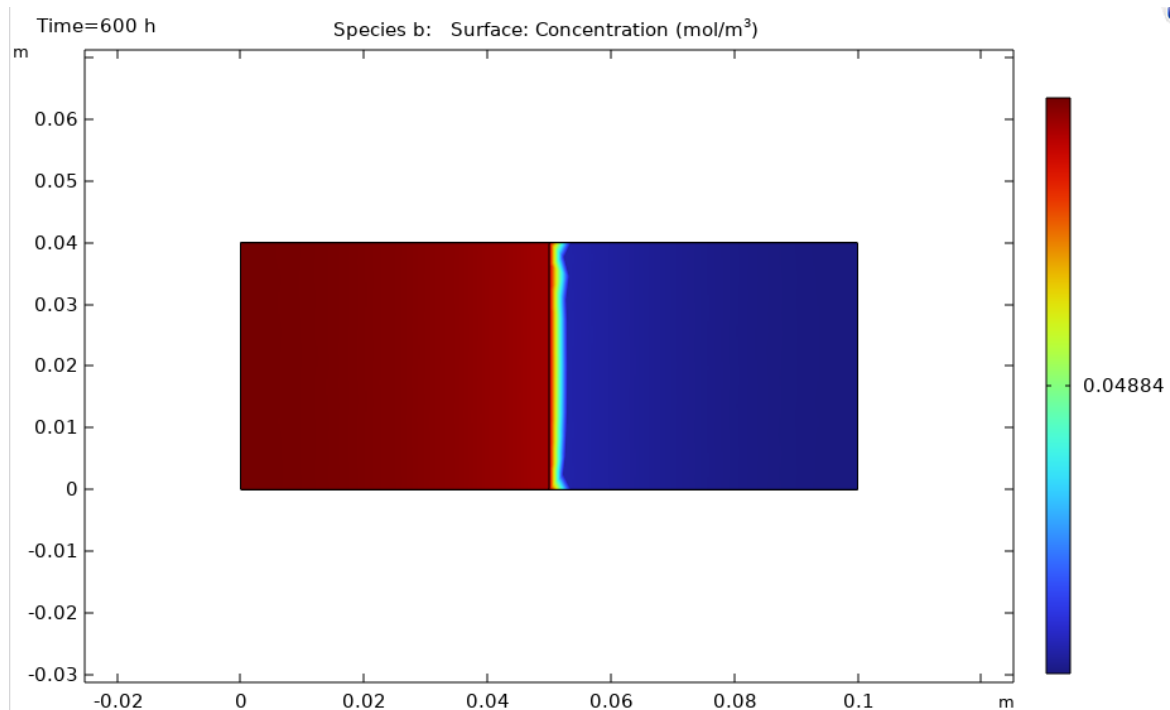


Snímek obrazovky 69 snímek grafu z práce Ing. Bělušové popisující změnu koncentrace Septonexu v závislosti na čase [40]

Rovnováha reakce huminové kyseliny se septonexem v reálném případě nastala po 9 týdnech, což bylo potvrzeno po 12 týdnech a hodnota byla ustálena okolo 14 mg/l. Když tyto hodnoty byly srovnány s modelem, kde byla rovnováha docílena po necelých 10 minutách na hodnotě 39,06 mg/l, tak bylo jasné, že model ještě neodpovídá skutečnosti a je třeba ho upravit, aby fungoval.

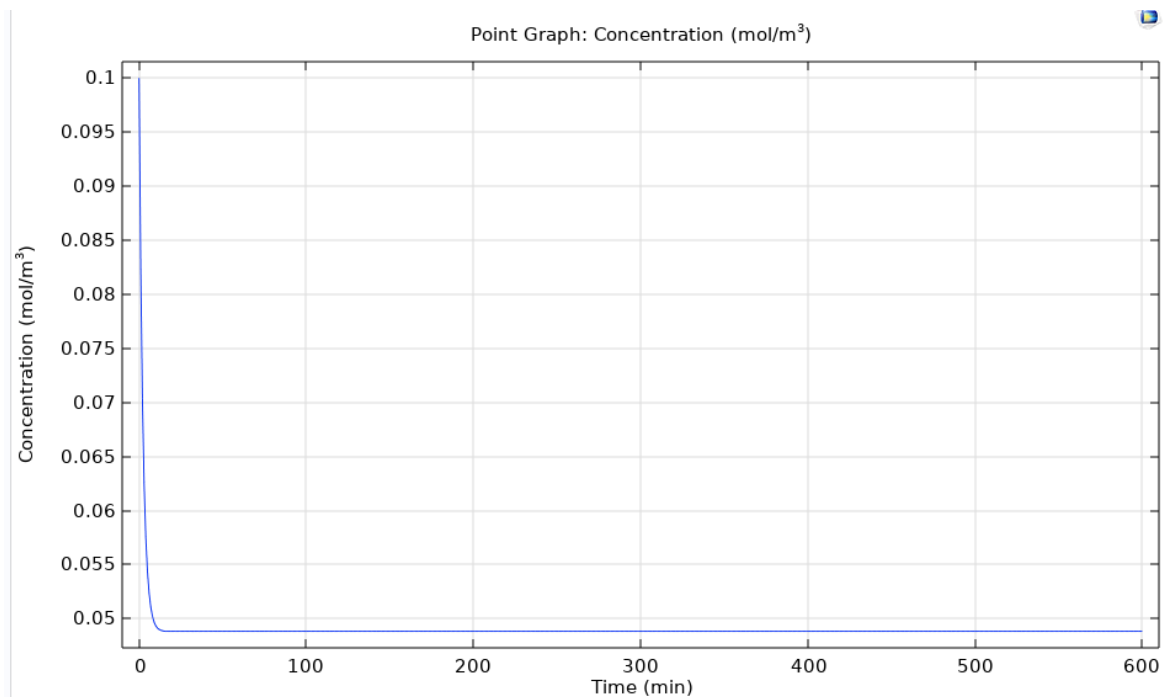
5.4 Výsledky při původní koncentraci barviva 0,1 g/l

I přes to, že se ukázalo, že model neodpovídá realitě, tak byly vyhodnocen i výsledky při koncentraci barviva 0,1 g/l.



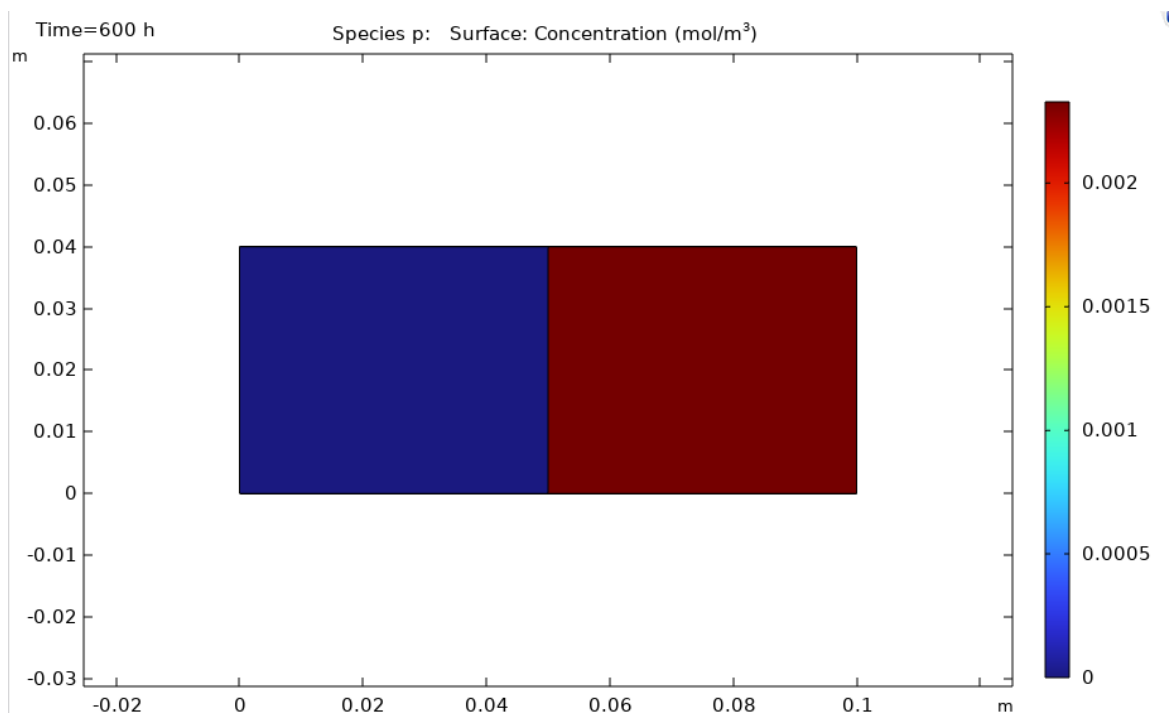
Výsledná koncentrace 7 koncentrace barviva v rovnováze o původní koncentrace 0,1 g/l

U tohoto případu se koncentrace ustálila na $0,04884 \text{ mol} \cdot \text{m}^{-3}$. Z toho vyplývá že zreagovalo $0,00232 \text{ mol} \cdot \text{m}^{-3}$ barviva, což jde lépe vidět na grafu 7:

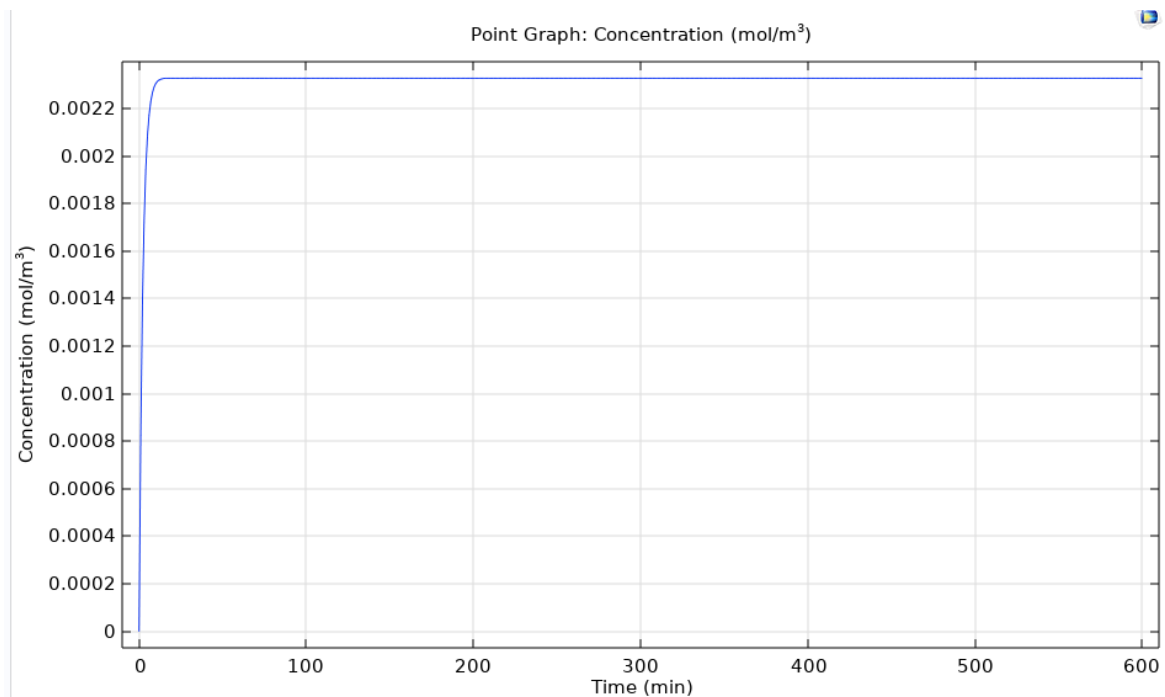


Graf 7 koncentrace barviva v závislosti na čase při původní koncentraci 0,1 g/l

Opět se to potvrdilo na výsledné koncentraci 8 a grafu 8:



Výsledná koncentrace 8 koncentrace produktu 8 v rovnováze při původní koncentraci barviva 0,1 g/l



Graf 8 koncentrace produktu v závislosti na čase při původní koncentraci barviva 0,1 g/l
 kde lze vidět, že koncentrace produktu dosáhla $0,00232 \text{ mol} \cdot \text{m}^{-3}$. Tato koncentrace odpovídá 2,38 %.

Při srovnání výsledků pozorujeme, že na huminové kyseliny bylo navázáno více barviva, když ho v systému původně bylo více. Trend sorpce okolo 2,4 %, ale přetrval z důvodu nastavení reakce. U srovnávání modelačních výsledků o původní koncentraci barviva 0,08 g/l s reálnými daty bylo zjištěno, že reakce v modelu probíhá výrazně rychleji, ale z hlediska sorpce huminové kyseliny je daleko méně účinná.

Aspektů, proč tomu tak je, tak je hned několik. Soubor byl nastaven tak, aby rychlostní a rovnovážná konstanta byly 1, zároveň reakce probíhala v poměru 1:1 a systém byl míchán pomocí difuze. V reálném případě je systém míchán externě. Rovnovážná konstanta rovněž pravděpodobně nebude odpovídat 1, rychlostní konstanta také ne a reagenty nebudou reagovat v poměru 1:1.

6 ZÁVĚR

V této práci byla sledována teoretická dialýza barviva a huminové kyseliny a vytvoření produktu jejich vzájemné reakce. Modelace byla provedena pomocí inženýrského programu COMSOL Multiphysics, který slouží pro přesné matematicko-fyzikální výpočty a modelace různých problematik. Byly sledovány dialýza barviva o různých koncentrací v čase, tvorba produktu reakce, pomocí které se sledovala sorpce a také čas, za který došlo k rovnováze v systému. Výsledky byly porovnány s reálnými daty a bylo zjištěno, že tento model je dostatečně funkční, aby simuloval reálnou problematiku.

Důvod, proč výsledky nekorelovaly je ten, že je potřeba upravit některé z parametrů, aby model lépe odpovídal realitě. Jmenovitě by bylo třeba upravit poměr, ve kterém látky reagují, protože huminové kyseliny pravděpodobně nereagují s polutanty v poměru 1:1. Zároveň rychlostní konstanta reakce a rovnovážná konstanta, které byly zvoleny jako 1 nebudou v reálném případě platit.

Z tohoto důvodu je tento model vhodný jako výchozí pro tvorbu případných modelů s přesnějšími daty, popřípadě ho lze využít pro vytvoření modelů obsahující jiné látky a zjištění jejich sorpčních vlastností.

Přes všechna tato úskalí má nicméně modelování řadu výhod. Je rychlé, levné, relativně jednoduché a se správnými daty i hodně přesné.

7 ZDROJE

- [1] CRANK, J. The mathematics of diffusion. 2nd ed. Cambridge: Cambridge University Press, c2000. ISBN 978-0-19-853411-2
- [2] HIEMENZ, P. Principles of colloid and surface chemistry. 3rd ed. New York: Marcel Dekker, Inc., c1997. ISBN 08-247-9397-8
- [3] FICK, Adolph. On liquid diffusion. *Journal of Membrane Science*. 1995, vol. 100, no. 1, pp. 33-38. ISSN 0376-7388
- [4] MASARO, Laurent a Xiaoxia ZHU. Physical models of diffusion for polymer solutions, gels and solids. *Progress in Polymer Science*. 1999, vol. 24, no. 5, pp. 731-775. ISSN 0079-6700., ISBN 80-7080-579- X
- [5] BARTOVSKÁ, Lidmila. Fyzikální chemie povrchů a koloidních soustav. 5. přeprac. vyd. Praha: Vysoká škola chemicko-technologická, 2005, 244 s. ISBN 80-7080-579- X
- [6] SMILEK, Jiří. *Nové metody studia reaktivity a transportních vlastností biokoloidů* [online]. Brno, 2016 [cit. 2023-05-08]. Dostupné z: <http://hdl.handle.net/11012/51961>. Disertační práce. Vysoké učení technické v Brně. Fakulta chemická. Ústav fyzikální a spotřební chemie. Vedoucí práce Martina Klučáková.
- [7] PermeGear, Inc. - Equipment that measures permeation through membranes [online]. 2023 [cit. 2023-05-14]. Dostupné z: <http://www.permegear.com/>
- [8] Britannica, The Editors of Encyclopaedia. "osmosis". *Encyclopedia Britannica*, 12 May. 2023, <https://www.britannica.com/science/osmosis>. Accessed 14 May 2023
- [9] SALMANI, Hossein Jalaei, Hamed KARKHANECHI, Jeon JEON a Hideto MATSUYAMA, 2022. Calculating osmotic pressure of liquid mixtures by association theory for sustainable separating of solvents by membrane processes. *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*. **109**(5), 137-146. ISSN 1226-086X. Dostupné z: <https://doi.org/10.1016/j.jiec.2022.01.035>
- [10] YANG, Zi, Yi ZHOU, Zhiyuan FENG, Xiaobo RUI, Tong ZHANG a Zhien ZHANG, 2019. A Review on Reverse Osmosis and Nanofiltration Membranes for Water Purification. *Polymers*. **11**(8). Dostupné z: doi:<https://doi.org/10.3390/polym11081252>
- [11] BLEHA, Miroslav a Darina BOUZKOVÁ. Česká membránová platforma: Strategická výzkumná agenda. Česká Lípa, 2009

- [12] GARG, Manoj Chandra, 2019. Renewable Energy-Powered Membrane Technology: Cost Analysis and Energy Consumption. Current Trends and Future Developments on (Bio-) Membranes [online]. Elsevier, 2019, 85-110 [cit. 2022-06-30]. ISBN 9780128135457. Dostupné z: doi:10.1016/B978-0-12-813545-7.00004-0
- [13] Ninfa, A.J., Ballou, D. P. and Benore, M. (2009). Fundamental Laboratory Approaches for Biochemistry and Biotechnology. p. 45. ISBN 978-0-470-08766-4
- [14] PALATÝ, Zdeněk a Bohumil BERNAUER. *Membránové procesy*. V Praze: Vysoká škola chemicko-technologická, 2012, 282 s.: il.; 25 cm. ISBN 978-80-7080-808-5.
- [15] Britannica, The Editors of Encyclopaedia. "Thomas Graham". Encyclopedia Britannica, 16 Dec. 2021, <https://www.britannica.com/biography/Thomas-Graham>. Accessed 30 June 2022
- [16] LUO, Jingyi, Cuiming WU, Tongwen XU a Yonghui WU, 2011. Diffusion dialysis-concept, principle and applications. Journal of Membrane Science [online]. 366(1-2), 1-16 [cit. 2022-06-30]. ISSN 03767388. Dostupné z: doi:10.1016/j.memsci.2010.10.028
- [17] SCOTT, Keith, 1995. RECOVERY OF SALTS, ACIDS AND BASES. In: SCOTT, Keith. *Handbook of Industrial Membranes* [online]. 2nd edition. Amsterdam: Elsevier Science, s. 691-722 [cit. 2023-05-16]. ISBN 9781856172332. Dostupné z: <https://doi.org/10.1016/B978-185617233-2/50019-2>
- [18] OLIVER, Barry G. *Handbook of Nonwoven Filter Media: algae and fulvic acid as precursors* [online]. 1983, 2016, 17(2), 80-83 [cit. 2022-07-01]. ISSN 0013-936X. Dostupné z: doi:10.1016/C2011-0-05753-8
- [19] SZANYI, Gejza, 2015. POZNATKY O HUMÍNOVÝCH KYSELINÁCH. *Vetservis Spravodajca*. 2015(2), 1-4. Dostupné z: doi:https://www.vetservis.sk/media/object/368/poznatky_o_huminovych_kyselinach.pdf
- [20] PICCOLO, Alessandro, 2002. The supramolecular structure of humic substances: A novel understanding of humus chemistry and implications in soil science. *Science Direct* [online]. 75, 57-134 [cit. 2023-05-16]. ISSN 0065-2113. Dostupné z: [https://doi.org/10.1016/S0065-2113\(02\)75003-7](https://doi.org/10.1016/S0065-2113(02)75003-7)
- [21] OROLÍNOVÁ, Mária, 2009. *Chémia a životné prostredie* [online]. Trnava [cit. 2023-05-16]. Dostupné z: <https://pdf.truni.sk/download?e-skripta/chzp.pdf>. Skripta. Trnavská univerzita.
- [22] ČERNEKOVÁ, Danica a Ľudmila POSPIŠILOVÁ, 2015. Humínové kyseliny a ich vplyv na úrodnosť a znižovanie chemického zaťaženia pôd. *Vetservis* [online]. Nitra: Vetservis [cit.

2023-05-16]. Dostupné z: https://www.vetservis.sk/media/object/363/huminove_kyseliny_a_ich_vplyv_na_urodnost_a_znizovanie_chemickeho_zatazenia_pod.pdf

[23] TOTH, Stefan, 2013. Humínové látky, základ účinnosti rôznych kondicionérov na báze uhlíka. *HumaCon* [online]. Košice: Centrum výskumu rastlinnej výroby, Výskumný ústav agroekológie Michalovce [cit. 2023-05-16]. Dostupné z: http://humac-portal.eu/wp-content/uploads/2015/08/HUMAC-Agro_Part-4.pdf

[24] Čo sú humínové látky. In: HumAGRO HUMIC SUBSTANCES [online]. 2016. [cit. 2023-04-24]. Dostupné z: <http://humagro.sk/2016/01/29/co-su-to-huminove-latky/>

[25] MACCARTHY, P., C.E. CLAPP, R.L. MALCOLM a P.R. BLOOM. Humic Substances in Soil and Crop Sciences: Selected Readings [online]. United States of America: The American Society of Agronomy, 1990 [cit. 2023-04-24]. ISBN 9780891188742. Dostupné z: <https://access.onlinelibrary.wiley.com/doi/book/10.2136/1990.humicsubstances>

[26] SKOKANOVÁ, M., K. DERCOVÁ. Humínové kyseliny. Interakcie humínových kyselín s kontaminantami [online]. In: Chemické listy [online]. 2008, č. 102, s. 262-268 [cit. 2024-04-24]. Dostupné z: http://chemicke-listy.cz/docs/full/2008_05_338-345.pdf

[27] O huminových látkách, 2008. *INTERNATIONAL HUMIC SUBSTANCES SOCIETY (IHSS)* [online]. Colorado, USA [cit. 2023-05-16]. Dostupné z: <http://ihss-cz.cz/o-huminovych-latkach.html>

[28] Ghabbour, E.A.; Davies, G. (Editors) (2001). Humic Substances: Structures, Models and Functions. Cambridge, U.K.: RSC publishing. ISBN 978-0-85404-811-3

[29] Počítačové modelování. *Fyzikální webové stránky - webFyzika* [online]. Praha: Fakulta stavební ČVUT v Praze [cit. 2023-05-16]. Dostupné z: <http://webfyzika.fsv.cvut.cz/5predmet.htm>

[30] COMSOL Multiphysics®, 2018. *HUMUSOFT* [online]. Praha: Comsol [cit. 2023-05-16]. Dostupné z: <https://www.humusoft.cz/comsol/details/>

[31] COMSOL Multiphysics®, 2018. *HUMUSOFT* [online]. Praha: Comsol [cit. 2023-05-16]. Dost. z: <https://www.humusoft.cz/comsol/products/>, <https://www.comsol.com/video/setting-up-and-running-a-simulation-with-comsol-multiphysics>

[32] Humus Chemistry: Genesis, Composition, Reactions, 2nd Edition, 1994. In: *Humus chemistry: genesis, composition, reactions*. 2nd ed. New York: Wiley. ISBN isbn:978-0-471-59474-1.

[33] ALBERTS, Bruce, 2002. *Molecular biology of the cell*. 4th ed. New York: Garland. ISBN 08-153-4072-9.

[34] GEANKOPLIS, Christie John, 2013. *Transport Processes and Separation Process Principles (Includes Unit Operations): Pearson New International Edition*. 4. Pearson. ISBN 1292026022.

[35] ASKELAND, Donald R. a Pradeep P. FULAY, 2008. *Essentials of Materials Science & Engineering*. 2. Cengage Learning, 2008. ISBN 9781111801977.

[36] WELTI-CHANES, J., F. VERGARA-BALDERAS a D. BERMÚDEZ-AGUIRRE, 2005. Transport phenomena in food engineering: basic concepts and advances. *Journal of Food Engineering*. 67(1-2), 113-128. ISSN 0260-8774.

[37] SINKO, Patrick J., 2010. *Martin's Physical Pharmacy and Pharmaceutical Sciences*. 6. Lippincott Williams & Wilkins. ISBN 0781797667.

[38] SCHWARZENBACH, René P., Philip M. GSCHWEND a Dieter M. IMBODEN, 2005. *Environmental Organic Chemistry*. 2. John Wiley. ISBN 9780471743996.

[38] YIN, Lei, Tingting GE, Cuncun ZUO, Ming WANG, Guangjun CUI, Yuchao LI, Haofei HUANG a Liping ZHANG, 2024. Kinetic verification and Comsol modeling of the Diels-Alder reaction of conjugated pentadiene with maleic anhydride in a continuous flow capillary reactor. *Arabian Journal of Chemistry* [online]. 17(4) [cit. 2024-05-18]. ISSN ISSN 1878-5352. Dostupné z: doi:<https://doi.org/10.1016/j.arabjc.2024.105696>

[39] MARYAM, Iqra, Tahir IQBAL, Asad SYED, Ali H. BAHKALI, Aqsa TEHSEEN, Sumera AFSHEEN a Muhammad SHEHZAD SULTAN, 2024. Facile green synthesis of novel tantalum doped tungsten trioxide for photocatalytic degradation: Correlation with COMSOL simulation. *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy* [online]. 314 [cit. 2024-05-18]. ISSN ISSN 1386-1425. Dostupné z: doi:<https://doi.org/10.1016/j.saa.2024.124191>

[40] BĚLUŠOVÁ, Anna. Vliv methylace huminových kyselin na interakci s povrchově aktivními látkami. Online, Diplomová práce, vedoucí Jiří Smilek. Brno: Vysoké učení technické v Brně. Fakulta chemická. Ústav fyzikální a spotřební chemie, 2021. Dostupné z: <http://hdl.handle.net/11012/201464>. [cit. 2024-05-19].