

SOLUÇÃO NUMÉRICA DA CINÉTICA DE ADSORÇÃO EM UM GRÃO ADSORVENTE BIDISPERSO USANDO O MÉTODO DOS VOLUMES FINITOS

Jesus Marlinaldo de Medeiros

Centro Federal de Educação Tecnológica de Sergipe, Lagarto-SE, jesus@les.ufpb.br

José Maurício Alves de Matos Gurgel

Universidade Federal da Paraíba, João Pessoa-PB, gurgel@les.ufpb.br

Francisco Marcondes

Universidade Federal do Ceará, Fortaleza-CE, marcondes@dem.ufc.br

Resumo. *Para analisar a transferência de massa em adsorventes porosos, tais como carvão ativado e zeólita, o modelo bidisperso é empregado considerando tanto a difusão microporosa como a difusão macroporosa. O problema considerado consiste de um único grão formado por pequenas partículas esféricas de tamanho uniforme, onde ocorre a difusão microporosa e entre estes cristais, ocorre a difusão macroporosa. O modelo matemático de difusão e adsorção transiente é composto por duas equações diferenciais parciais acopladas em coordenadas esféricas. Estas equações são resolvidas via método dos volumes finitos. O processo de sorção foi assumido isotérmico e foram consideradas isotermas de adsorção linear e difusividades constantes. Os resultados obtidos são apresentados em forma de perfis de concentração e da quantidade de massa adsorvida no adsorvente. As soluções numéricas ajustam-se bem com dados experimentais e soluções analíticas para os casos de controle de difusão macroporosa e microporosa. No entanto, observou-se uma discrepância em relação aos dados experimentais no caso do controle de difusão bimodal.*

Palavras-chave: Adsorção, Modelo bidisperso, Método dos volumes finitos

1. INTRODUÇÃO

Os processos adsorptivos são amplamente utilizados nas indústrias químicas e petroquímicas por esta razão têm recebido bastante atenção nas últimas décadas. O fenômeno de sorção em um grão adsorptivo envolve a difusão de massa e adsorção em sólidos porosos e tem sido extensivamente estudado experimentalmente e teoricamente quando utilizado um único adsorbato. A descrição do transporte adsorptivo em sólidos microporosos tais como carvão ativado e zeólita é formulado geralmente pelo modelo bidisperso, compreendendo tanto a difusão macroporosa quanto a difusão microporosa. O problema de difusão e adsorção em sólidos bidispersos é de difícil compreensão devido à natureza da rede de poros no grão ser grande e complexa. Dependendo da dimensão dos poros, o mecanismo de transporte de massa pode envolver as difusões moleculares, Knudsen e de superfície. Uma grande variedade de idealizações estruturais foi proposta, baseada em métodos aproximados. O modelo mais popular destas idealizações considera uma partícula sólida como sendo um aglomerado de grãos esféricos microporosos, e entre os grãos ocorre a difusão macroporosa, proposto por Ruckenstein et al. (1971). Posteriormente, foi utilizado um outro modelo usando o método de difusividade efetiva em sólidos bidispersos que levou a uma interpretação errônea quando confrontados a dados experimentais, Furusawa e Smith (1973). Desta forma, o

modelo proposto por Ruckenstein et al. (1971) apresenta um bom ajuste com dados experimentais e foi bem aceito (Ruthven, 1984; Karger e Ruthven, 1992) e utilizado em sucessivos trabalhos numéricos (Bhatia, 1987; Gray e Do, 1990; Bhatia et al., 1991; Bhatia, 1997).

No presente trabalho, o objetivo é analisar o transporte de massa em um grão esférico adsorvente utilizando um modelo bidisperso. O problema foi formulado utilizando o modelo de fluxo Fickiano para descrever a difusão macroporosa e a difusão microporosa empregando o método dos volumes finitos. Foi empregado o esquema de interpolação de diferenças centrais (CDS) para avaliar as propriedades e seus gradientes nas faces dos volumes de controle. Três tipos de configurações possíveis, para descrever os controles de difusão macroporosa, microporosa e bimodal foram simulados numericamente. Os resultados obtidos em termos da fração máxima uptake ajustaram-se bem quando comparados às soluções analíticas. Foi observado, também, um bom ajuste com dados experimentais para os casos de controle de difusão macroporosa e controle de difusão microporosa. No entanto, para o caso do controle de difusão bimodal, foi verificado uma discrepância com os dados experimentais. O que leva a crer, que o modelo matemático empregado não representa bem o fenômeno físico na configuração de controle bimodal.

2. MODELO MATEMÁTICO

Este trabalho investiga simultaneamente a difusão e a adsorção em um grão adsorvente, em regime transiente, unidimensional. Considera-se o grão preenchido de micropartículas (cristais) de tamanho uniforme onde ocorre a difusão microporosa e entre estes cristais, ocorre a difusão macroporosa. As hipóteses adotadas foram: a geometria esférica, o raio do microporo é muito menor que o raio do macroporo, o sistema tratado sob condições isotérmicas, as difusividades macroporosa e microporosa constantes e sob isoterma de adsorção linear. Inicialmente, o grão está em equilíbrio com o adsorbato. Em seguida, ocorre uma mudança na concentração do sorbato externo, provocando a difusão nos macroporos, adsorção nas paredes dos macroporos e difusão e adsorção nos microporos.

A formulação do problema de difusão e adsorção transiente é composta por duas equações diferenciais parciais acopladas, partindo do balanço de massa para a distribuição de sorbato nos macroporos e microporos. Apresentado na forma adimensionalizada (Ruckenstein et al., 1971):

Macroporo

$$\frac{1}{\eta^2} \frac{\partial}{\partial \eta} \left[\eta^2 \frac{\partial C_M}{\partial \eta} \right] = \frac{\partial C_M}{\partial \tau} + \beta \left(\frac{\partial C_\mu}{\partial \xi} \right)_{\xi=1} \quad (1)$$

Com as seguintes condições de contorno e inicial

$$\frac{\partial C_M}{\partial \eta}(\tau, 0) = 0 \quad ; \quad C_M(\tau, 1) = 1 \quad (2)$$

$$C_M(0, \eta) = 0 \quad (3)$$

Microporo

$$\frac{\alpha}{\xi^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \left[\xi^2 \frac{\partial C_\mu}{\partial \xi} \right] = \frac{\partial C_\mu}{\partial \tau} \quad (4)$$

Com as seguintes condições de contorno e inicial

$$\frac{\partial C_\mu}{\partial \xi}(\tau, 0) = 0 \quad ; \quad C_\mu(\tau, 1) = C_M(\tau, \eta) \quad (5)$$

$$C_\mu(0, \xi) = 0 \quad (6)$$

Com os seguintes parâmetros adimensionais:

$$C_M = \frac{C_m}{C_{m_\infty}}; \quad C_\mu = \frac{C_{\mu i}}{C_{\mu i_\infty}}; \quad \eta = \frac{r_m}{R_m}; \quad \xi = \frac{r_\mu}{R_\mu}; \quad (7)$$

$$\alpha = \frac{D_\mu R_M^2}{D_M R_\mu^2}; \quad \beta = \left[\frac{3(1 - \varepsilon_M) \varepsilon_\mu}{\varepsilon_M} \right] \alpha; \quad \tau = \frac{D_M t}{R_M^2}$$

onde C_M , C_μ , η e ξ representam as concentrações adimensionais e raios adimensionais do macroporo e do microporo respectivamente; τ representa o tempo adimensional. Os parâmetros físicos envolvidos nos adimensionais acima representados por D_M , D_μ , R_M , R_μ , ε_M e ε_μ são as difusividades, raios e porosidade do macroporo e do microporo; C_m a concentração de sorbato no macroporo na fase fluida e $C_{\mu i}$ a concentração de sorbato no microporo na fase fluida; r_m a distância ao centro do macroporo e r_μ a distância ao centro do microporo; ∞ significa que atingiu o equilíbrio.

O parâmetro α tem um significado físico que representa a razão de tempo no processo de penetração do adsorbato nos macroporos e nos microporos. Enquanto que o parâmetro β representa a difusão no leito preenchido de partículas.

A Fração de massa adsorvida (F_A) é avaliada pela determinação da quantidade de adsorbato que entra na partícula após a mudança da concentração externa. Esta fração (F_A), também chamada de fração uptake na partícula é mostrada em (Kiil e Bhatia, 1998)

$$F_A = 3 \left[\sigma \int_0^1 \eta^2 C_M d\eta + 3(1 - \sigma) \int_0^1 \eta^2 \int_0^1 \xi^2 C_\mu d\xi d\eta \right] \quad (8)$$

onde σ é um parâmetro adimensional associado a porosidade no macroporo

$$\sigma = 3\alpha / (\beta + 3\alpha) \quad (9)$$

Para um campo escalar geral, as Eqs. (1) e (4) podem ser escritas da seguinte forma

$$\frac{\Omega^\phi}{\Gamma^\phi} \frac{\partial}{\partial r^\phi} \left(\Gamma^\phi \frac{\partial \phi}{\partial r^\phi} \right) = \frac{\partial \phi}{\partial \tau} + S^\phi \quad (10)$$

onde o termo do lado esquerdo representa o fluxo líquido por difusão. O primeiro termo do lado direito representa o termo de armazenamento. Enquanto que, o último termo representa o termo fonte, responsável por acomodar o acoplamento entre o macroporo e o microporo.

A Equação para o macroporo é obtida quando

$$\phi = C_M, \quad \Omega^\phi = 1, \quad \Gamma^\phi = \eta^2, \quad S^\phi = \beta \left(\frac{\partial C_\mu}{\partial \xi} \right)_{\xi=1} \quad e \quad r^\phi = \eta \quad (11)$$

Da mesma forma, a Equação para o microporo é obtida quando

$$\phi = C_{\mu}, \quad \Omega^{\phi} = \alpha, \quad \Gamma^{\phi} = \xi^2, \quad S^{\phi} = 0 \quad e \quad r^{\phi} = \xi \quad (12)$$

3. TRATAMENTO NUMÉRICO

As equações governantes (1) e (4), sujeita as seguintes condições de contorno e iniciais (2)-(3) e (5)-(6), foram resolvidas numericamente pelo Método dos Volumes Finitos, Patankar (1980) e Maliska (1995). Para avaliar as propriedades e seus gradientes nas faces dos volumes de controle, o esquema de interpolação de diferenças centrais (CDS) foi empregado.

Integrando a Eq. (10) no espaço e no tempo, e usando o esquema CDS, a seguinte equação para ϕ é obtida,

$$A_p^{\phi} \phi_p = A_e^{\phi} \phi_E + A_w^{\phi} \phi_W + B^{\phi} \quad (13)$$

Tomando $\phi=C_M$ e C_{μ} na Eq. (13), obtém-se as equações de difusão de massa para os macroporos e microporos, respectivamente. Cada equação de difusão obtida é unidimensional formando, portanto, uma matriz tridiagonal. O procedimento de solução do sistema será iterativo, resolvendo a equação do macroporo e posteriormente a equação do microporo em cada instante de tempo. Para resolver os sistemas lineares para C_M e C_{μ} , foi utilizado o algoritmo de Thomas (TDMA), Patankar (1980). Como critério de convergência global foi empregado o seguinte critério em C_M , Maliska (1995): $(\phi_i^{n+1} - \phi_i^n) / |\phi_{\max} - \phi_{\min}| \leq 10^{-4}$. Onde $|\phi_{\max} - \phi_{\min}|$ representa a variação máxima de C_M obtida na iteração n . Quando esta condição não foi verificada, uma nova iteração foi requerida.

Para os resultados que serão apresentados na próxima seção, foi empregada uma malha uniforme de 200 volumes para o grão macroporoso. Cada volume do macroporo foi ocupado por uma micropartícula que também foi discretizada em 200 volumes. Alguns testes foram realizados utilizando uma malha mais refinada e foi observada uma independência do tamanho da malha para a malha de 200 volumes.

4. RESULTADOS E DISCUSSÕES

Nesta seção, apresentam-se alguns resultados numéricos para problemas adsorptivos em sólidos bidispersos usando o Método dos volumes finitos. O método numérico foi implementado em Fortran 77 na forma geral apresentada na seção acima, baseada na aplicação simples da resolução da Eq. (13) resultante da estratégia de discretização através do esquema CDS. Os casos simulados incluem os controles de difusão macroporosa, microporosa e bimodal. Os resultados computados para a fração máxima uptake (F_A) são comparados com a solução analítica para vários casos variando os parâmetros α e β , obtidos por Ruckenstein et al. (1971), utilizando a isoterma linear e difusividades macroporosas e microporosas constantes.

Para distinguir os três tipos de configurações possíveis, Ruckenstein et al. (1971) verificaram que o controle de difusão microporosa ocorre quando $\alpha > 10^2$. Já o controle de difusão bimodal compreende a faixa de $10^{-3} < \alpha < 10^2$ e o controle de difusão microporosa ocorre quando $\alpha < 10^{-3}$.

Na literatura atual, um novo parâmetro foi adotado para delimitar os três tipos de configurações possíveis, (Liu e Bhatia, 1999), que será adotado neste artigo, definido pela seguinte equação,

$$\gamma = \alpha/\sigma \quad (14)$$

A partir da Eq. (14), a ordem de grandeza para definir o tipo de configuração é:

Controle de difusão macroporosa: $\gamma \gg 1$

Controle de difusão microporosa: $\gamma \ll 1$

Controle de difusão bimodal: $\gamma \equiv O(1)$

Para determinar a concentração microporosa média (C_{μ}^*) no grão adsorativo utiliza-se a seguinte equação adimensionalizada,

$$C_{\mu}^* = 3 \int_0^1 C_{\mu} \xi^2 d\xi \quad (15)$$

Nas subseções seguintes, serão realizadas comparações entre resultados numéricos, analíticos e experimentais. Lembrando que as soluções analíticas foram obtidas utilizando a técnica da transformada de Laplace, onde ζ_{qk} são as raízes da equação transcendental abaixo:

$$\beta(1 - \zeta_{qk} \cot g \zeta_{qk}) + \alpha \zeta_{qk}^2 = k^2 \pi^2; \quad k = 1, 2, 3, \dots, \infty. \quad (16)$$

Modelo Analítico para controle de difusão macroporosa:

$$F_A = \frac{\sum_{k=1}^{\infty} \sum_{q=1}^{\infty} \frac{k^2 [1 - \exp(-\alpha \zeta_{qk}^2 \tau)]}{\zeta_{qk}^4 \left[\frac{\alpha}{\beta} + 1 + \cot g^2 \zeta_{qk} - \left(1 - \frac{k^2 \pi^2}{\beta}\right) \frac{1}{\zeta_{qk}^2} \right]}}{\sum_{k=1}^{\infty} \sum_{q=1}^{\infty} \frac{k^2}{\zeta_{qk}^4 \left[\frac{\alpha}{\beta} + 1 + \cot g^2 \zeta_{qk} - \left(1 - \frac{k^2 \pi^2}{\beta}\right) \frac{1}{\zeta_{qk}^2} \right]}} \quad (17)$$

Modelo Aproximado para controle de difusão macroporosa:

$$F_A = 1 - \frac{6}{\pi^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} \exp\left(\frac{-n^2 \pi^2 \tau}{1 + \frac{\beta}{3\alpha}}\right) \quad (18)$$

Modelo Analítico para controle de difusão bimodal e difusão microporosa:

$$F_A = \frac{\left[1 - \frac{6}{\pi^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} \exp(-n^2 \pi^2 \tau)\right] + \frac{\beta}{3\alpha} \left[1 - \frac{6}{\pi^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} \exp(-n^2 \pi^2 \alpha \tau)\right]}{1 + \frac{\beta}{3\alpha}} \quad (19)$$

4.1 Controle de Difusão Macroporosa

Quando $\gamma \gg 1$, isto é, quando a partícula do adsorvente é grande, as micropartículas são pequenas e a partícula tem alta capacidade de adsorção, a difusão microporosa é rápida e o transporte macroporoso é relativamente lento. O sistema dinâmico, portanto, é controlado pela

difusão macroporosa. Ou seja, a taxa de transferência de massa para atingir o equilíbrio depende do tamanho da partícula macropora e independe do tamanho das micropartículas.

A Fig. 1 mostra os perfis de concentração nos macroporos e nos microporos para o caso do sistema H₂O-A21 (resina de troca iônica), quando $\gamma=133,33$; $D_M/R_M^2=3.5 \times 10^{-4}$, $\alpha=10^2$ e $\beta=10^2$. Pode ser observado que tanto a concentração média nos microporos quanto à concentração nos macroporos avançaram conjuntamente no tempo. No entanto, em relação aos outros tipos de configurações pode-se considerar que a concentração nos microporos é rápida.

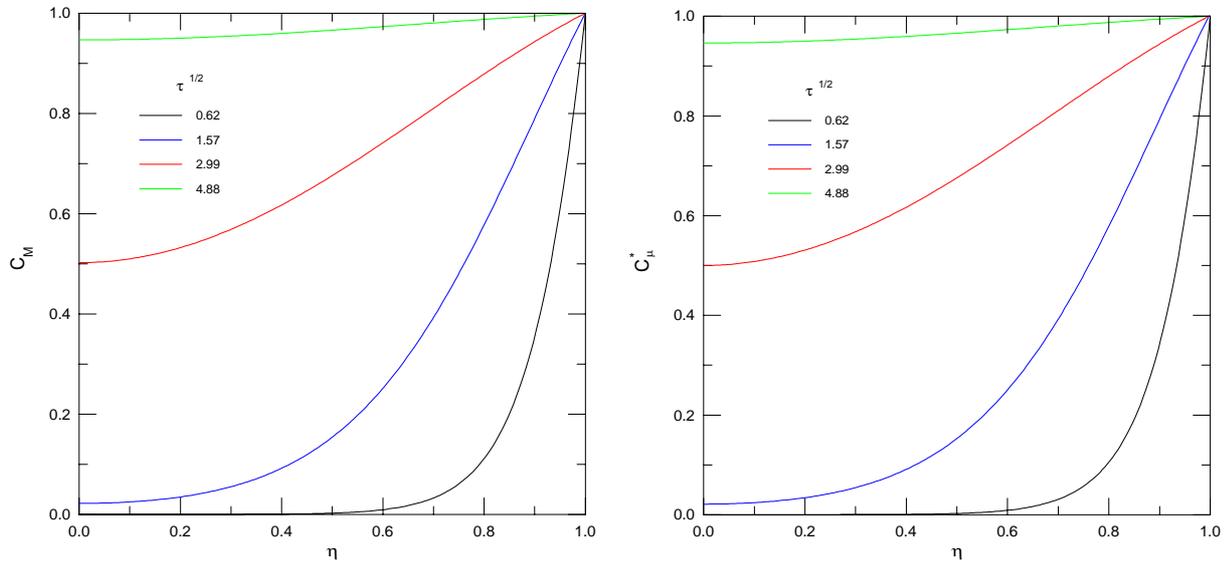


Figura 1 – Perfil de concentração no sistema H₂O-A21

A Fig. 2 mostra a Fração adsorvida (F_A) obtida numericamente comparada com as soluções analítica e aproximada e os dados experimentais neste caso do sistema H₂O-A21. Pode ser observado um bom ajuste com os demais modelos e com os dados experimentais.

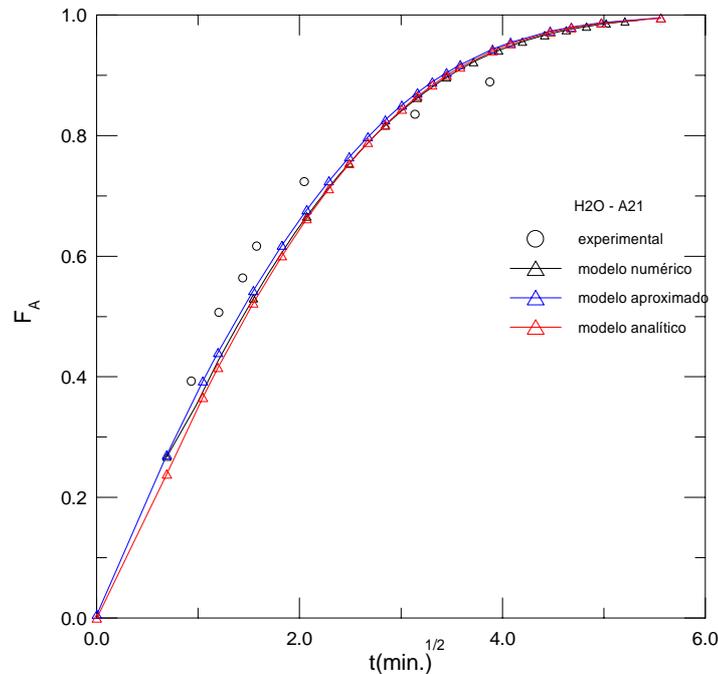


Figura 2 – Massa adsorvida no sistema H₂O-A21

4.2 Controle de Difusão Bimodal

Quando $\gamma \equiv O(1)$, ambas as difusões macroporosas e microporosas são importantes. O sistema dinâmico, portanto, depende tanto do tamanho das partículas macroporosas quanto do tamanho das partículas microporosas.

A Fig. 3 mostra os perfis de concentração nos macroporos e nos microporos para o caso do sistema $\text{NH}_3\text{-A15}$ (resina de troca iônica), quando $\gamma=0,133$; $D_M/R_M^2=3.12 \times 10^{-5}$, $\alpha=10^{-1}$ e $\beta=10^{-1}$. Pode ser observado que a concentração média nos microporos já não avança tão rapidamente como a concentração macroporosa.

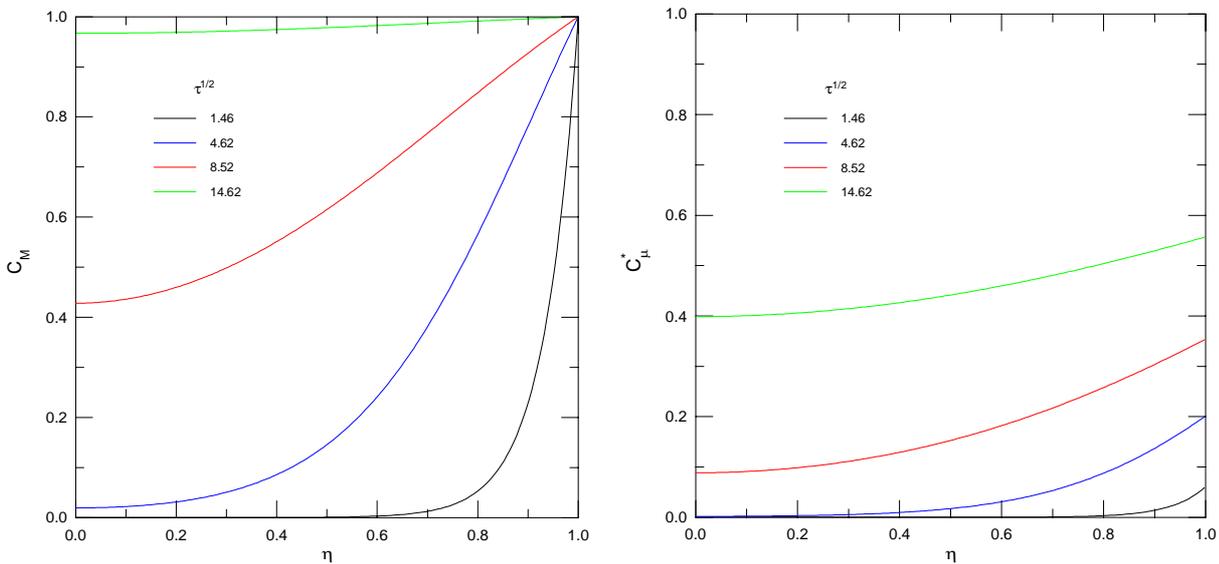


Figura 3 – Perfil de concentração no sistema $\text{NH}_3\text{-A15}$

A Fig. 4 mostra a Fração adsorvida (F_A) obtida numericamente comparada com a solução analítica, solução aproximada e os dados experimentais neste caso do sistema $\text{NH}_3\text{-A15}$. Pode ser observado um bom ajuste com o modelo analítico, mas uma discrepância com os dados experimentais. Isto significa que, para esta configuração, o modelo empregado não representa bem o fenômeno físico.

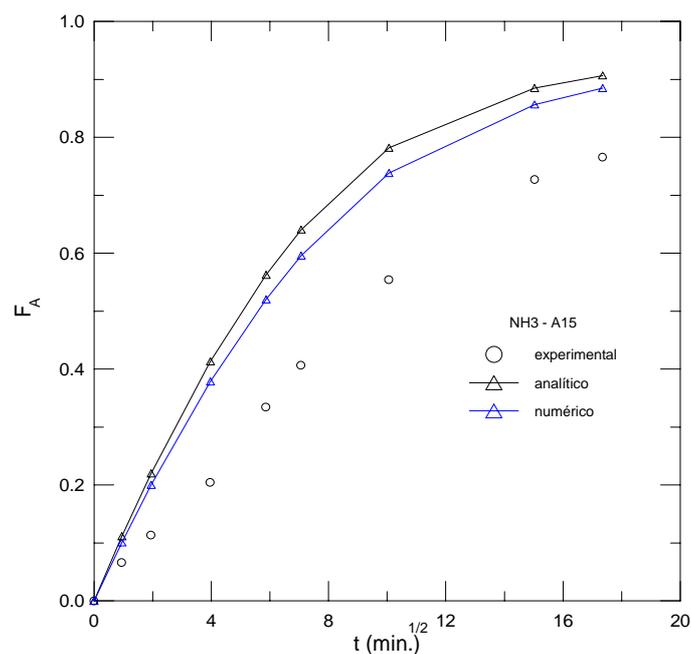


Figura 4 – Massa adsorvida no sistema $\text{NH}_3\text{-A15}$

4.3 Controle de Difusão Microporosa

Quando $\gamma \ll 1$, isto é, quando a partícula do adsorvente é pequena, as micropartículas são grandes e a partícula tem baixa capacidade de adsorção, a difusão microporosa é lenta enquanto que o transporte macroporoso é relativamente rápido. O sistema dinâmico, portanto, é controlado pela difusão microporosa. Neste caso, a adsorção ocorre essencialmente em dois estágios. No primeiro estágio, ocorre a rápida adsorção nos macroporos e em seguida uma lenta adsorção nos microporos.

A Fig. 5 mostra os perfis de concentração nos macroporos e nos microporos para o caso do sistema CO₂-A21 (resina de troca iônica), quando $\gamma=2,33 \times 10^{-4}$; $D_M/R_M^2=0,3 \times 10^{-4}$, $\alpha=10^{-4}$ e $\beta=4 \times 10^{-4}$. Pode ser observado que a concentração média nos microporos avança muito mais lentamente que a concentração macroporosa, caracterizando a adsorção em dois estágios.

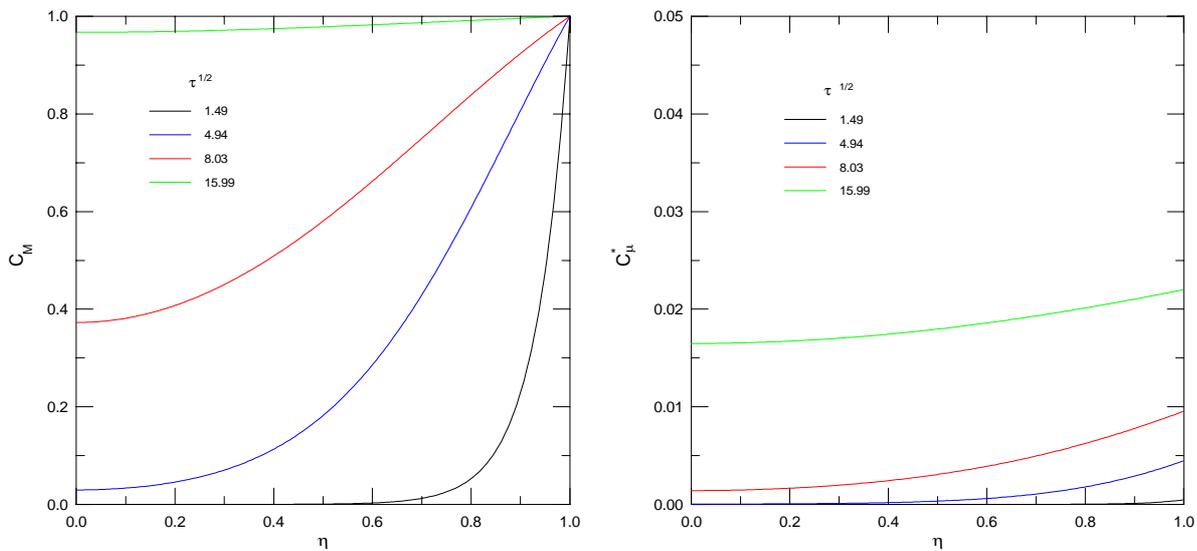


Figura 5 – Perfil de concentração no sistema CO₂-A21

A Fig. 6 mostra a Fração adsorvida (F_A) obtida numericamente comparada com a solução analítica e os dados experimentais neste caso do sistema CO₂-A21. Pode ser observado um bom ajuste com o modelo analítico e com os dados experimentais.

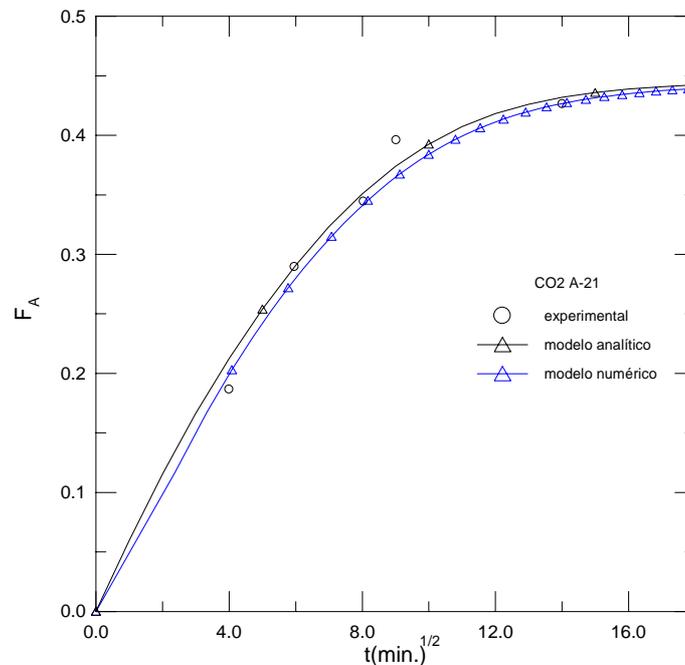


Figura 6 – Massa adsorvida sistema CO₂-A21

5. CONCLUSÃO

O presente trabalho investigou o problema de difusão de massa em um grão adsorvivo utilizando o modelo Fickiniano, empregando o método dos volumes finitos. Os resultados numéricos obtidos para as três configurações possíveis, mostraram uma boa concordância com resultados teóricos. Quanto aos perfis de concentração nos macroporos e nos microporos foi observado um comportamento similar ao descrito na literatura. No entanto, na configuração bimodal observou-se uma maior discrepância na evolução da fração mássica no tempo quando comparados a dados experimentais. Isto pode está associado à natureza do fenômeno de adsorção que gera calor quando o adsorbato está sendo retido no adsorvente. E ao gerar calor, diminui-se sua capacidade de adsorção. Como foi empregado um modelo isotérmico, obteve-se uma fração mássica maior que a real evoluindo no tempo. Isso não implica que o modelo isotérmico deva ser desprezado, apenas nesta configuração tal modelo tornou-se ineficiente. Baseado nesta observação fica evidente que mais esforços são necessários para determinar um modelo que represente melhor a difusão de massa envolvendo o fenômeno de adsorção. Dará-se continuidade a pesquisa, empregando o modelo não isotérmico, haja vista que na adsorção ocorre uma reação exotérmica e este calor gerado deve ser considerado na análise.

6. REFERÊNCIAS

- Bhatia, S. K., 1987, “Modelling the pore structure of coal”, American Institute of Chemical Engineers Journal, Vol. 33, pp. 1707-1718.
- Bhatia, S. K., 1997, “Transport in bidisperse adsorbents: Significance of the macroscopic adsorbate flux”, Chemical Engineering Science, Vol. 52, pp. 1377-1386.
- Bhatia, S. K., Gray, P. G., and Do, D. D. 1991, “Modelling of sorption of gaseous sorbates in bidispersed structured solids: the concept of heterogeneity of the microphase”, Gas Separation and Purification, Vol. 5, pp. 49-55.
- Furusawa, T. and Smith, J. M., 1973, “Diffusivities from dynamic adsorption data.”, American Institute of Chemical Engineers Journal, Vol. 19, pp. 401-403.

- Gray, P. G., and Do, D. D. 1990, "Adsorption and desorption of gaseous sorbates on a bidisperse particle with Freundlich isotherm-III contribution of surface diffusion to the sorption dynamics of sulphur dioxide on activated carbon", *Gas Separation and Purification*, Vol. 4, pp. 149-157.
- Karger, J., and Ruthven, D. M. 1992, "Diffusion in Zeolites and Other Microporous Solids", Wiley, New York.
- Kiil, S. and Bhatia, S. K. 1998, "Solution of adsorption problems involving steep moving profiles", *Computers and Chemical Engineering*, Vol. 22, pp. 893-896.
- Liu, F. and Bhatia, S. K. 1999, "Computationally efficient solution techniques for adsorption problems involving steep gradients in bidisperse particles", *Computers and Chemical Engineering*, Vol. 23, pp. 933-943.
- Maliska, C. R., 1995, "Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional", LTC, Rio de Janeiro, Brasil.
- Patankar, S. V., 1980, "Numerical Heat Transfer and Fluid Flow", Hemisphere/McGraw-Hill, New York, pp. 96-100.
- Ruckenstein, E., Vaidyanathan, A. S., and Youngquist, G. R. 1971, "Sorption by solids with bidisperse pore structures", *Chemical Engineering Science*, Vol. 26, pp. 1305-1318.
- Ruthven, D. M., 1984, "Principles of adsorption and adsorption processes", Wiley, New York, USA.

NUMERICAL SOLUTION OF THE KINETICS OF ADSORPTION IN THE BIDISPERSE ADSORBENT PELLET USING THE FINITE-VOLUME METHOD

Jesus Marlinaldo de Medeiros

Federal Center of Technological Education of Sergipe, Lagarto-SE, Brazil jesus@les.ufpb.br

José Maurício Alves de Matos Gurgel

Federal University of Paraíba, João Pessoa-PB, Brazil gurgel@les.ufpb.br

Francisco Marcondes

Federal University of Ceará, Fortaleza-CE, Brazil marcondes@dem.ufc.br

Abstract. *The bidisperse model is used to analyze the mass transfer in a porous adsorbent, such as activated coal and zeolites considering the micropore diffusion and macropore diffusion. The considered problem consists of a single grain formed by small spherical particles of uniform size, wherein happens the micropore diffusion and among these crystals happens the macropore diffusion. The mathematical model of diffusion and transient adsorption is composed by two coupled partial differential equations written in spherical coordinates. These equations are resolved in a finite volume framework. The sorption process was assumed to be isothermal and linear adsorption isotherms and constant diffusivity were considered. The results are presented in term of concentration profiles and the amount of mass uptake in the adsorbent. The numerical solutions are adjusted well with experimental data and analytic solutions for the cases of macropore and micropore diffusion modes. However, a discrepancy was observed in relation to the experimental data in the case of bimodal diffusion mode.*

Keywords: Adsorption, Bidisperse model, Finite-Volume Method