### REFERENCES

- Carnahan, B., Luther, H.A., and Wilkes, J.O. (1969). <u>Applied Numerical</u> <u>Methods</u>, New York: Wiley.
- Erickson, K., and Rase, H. (1979). Fixed-bed ion exchange with differing ionic mobilities and nonlinear equilibrium. <u>Industrial Engineering</u> <u>Chemistry</u>, 18, 312-320.
- Fleck, R.D., Kirwan, D.J., and Hall, K.R. (1973). Mixed-resistance diffusion kinetics in fixed-bed adsorption under constant pattern conditions. <u>Industrial Engineering Chemistry</u>, 12(1), 95-99.
- Gilliland, E.R., and Baddour, R.F. (1952). The rate of ion exchange. Industrial Engineering Chemistry, 45(2), 330-337.
- Helfferich, F.G. (1962) Ion Exchange, New York: McGraw-Hill.
- Huang, R.T., Chen, T.L., and Weng, H.S. (1995). Binary adsorption in a fixed-bed column packed with and ion exchange. <u>Separation Science</u> <u>and Technology</u>, 30(13), 2731-2746.
- Lin, H.S., and Wu, L.C. (1996). Ammonia removal from aqueous solution by ion exchange. <u>Industrial and Engineering Chemistry</u>, 35, 553-558.
- Lucas, A., Pablo, C., and Juan, F.R. (1997). Ion exchange kinetics for the removal of potassium from crude polyols on strong acid resins. <u>Separation Science and Technology</u>, 32(11), 1805-1820.
- Manantapong, M. (1997). <u>Adsorption Kinetics of an Ion Exchange Column.</u>
   M.S. Thesis, The Petroleum and Petrochemical College Chulalongkorn University, Bangkok.
- Maria, I.G., Carlos, A.V., and Alirio, E.R. (1992). Saturation and regeneration of ion exchange with volume change. <u>Industrial and</u> <u>Engineering Chemistry</u>, 31, 2564-2572.

- Tresattayawed, A. (2000). <u>Adsorption Kinetics of an Ion Exchange Column.</u>M.S. Thesis, The Petroleum and Petrochemical College Chulalongkorn University, Bangkok.
- Wilkes, J.O., and LaValle, P.P. (1992). Computers in the undergraduate laboratory: How they can help you. <u>Session 2-Presented at ASEE</u>, 4-5, 25-30.

# **APPENDICES**



Figure A1 Diagram of response time constant determination.

**Table A1** The experimental and predicted hydrogenconcentration for batch system at flowrate 250 rpm.

Time is 13:38:26.57. Date is 6-16-2000.



Time	volt	pН	hm	hm(T)	DIFF	
(sec)						
0	2.3145	4.7116	1.9E-05	0	0	
12	1.2158	0.7545	0.17599	0.05578	0.05576	
24	1.1865	0.6685	0.21454	0.10254	0.07346	
36	1.1768	0.6685	0.21454	0.14174	0.0728	
48	1.1572	0.6512	0.22325	0.1746	0.03993	
60	1.1816	0.5996	0.25142	0.20216	0.0211	
72	1.1621	0.634	0.23227	0.22526	0.02616	
84	1.1523	0.5996	0.25142	0.24463	0.01236	
96	1.1426	0.5996	0.25142	0.26087	0.00945	
108	1.1621	0.5996	0.25142	0.27449	0.02307	
120	1.1475	0.5996	0.25142	0.2859	0.03448	
132	1.167	0.548	0.28314	0.29548	0.04405	
144	1.1572	0.6168	0.24166	0.3035	0.02036	
156	1.1328	0.634	0.23227	0.31023	0.06857	
168	1.1426	0.5996	0.25142	0.31587	0.0836	
180	1.1475	0.5652	0.27214	0.3206	0.06918	
192	1.1328	0.5652	0.27214	0.32457	0.05242	
204	1.1426	0.5652	0.27214	0.32789	0.05575	
216	1.1279	0.5996	0.25142	0.33068	0.05853	
228	1.1475	0.634	0.23227	0.33302	0.0816	
240	1.1523	0.548	0.28314	0.33498	0.1027	
252	1.1475	0.5824	0.26158	0.33662	0.05348	
264	1.1572	0.5652	0.27214	0.338	0.07642	

276	1.1377	0.6168	0.24166	0.33915	0.06701
288	1.1377	0.548	0.28314	0.34012	0.09846
300	1.1328	0.548	0.28314	0.34093	0.05779
312	1.1572	0.5308	0.29458	0.34161	0.05847
324	1.1426	0.548	0.28314	0.34218	0.0476
336	1.1377	0.5824	0.26158	0.34266	0.05952
348	1.1426	0.5996	0.25142	0.34306	0.08148
360	1.1377	0.548	0.28314	0.3434	0.09198
372	1.1279	0.5652	0.27214	0.34368	0.06054
384	1.1523	0.5996	0.25142	0.34392	0.07177
396	1.1377	0.5996	0.25142	0.34412	0.09269
408	1.1328	0.5824	0.26158	0.34428	0.09286
420	1.1279	0.548	0.28314	0.34442	0.08284
432	1.1328	0.634	0.23227	0.34454	0.0614
444	1.1426	0.5308	0.29458	0.34464	0.11236
456	1.1475	0.5652	0.27214	0.34472	0.05014
468	1.1328	0.5308	0.29458	0.34479	0.07264
480	1.1523	0.548	0.28314	0.34484	0.05027
492	1.1377	0.4964	0.31886	0.34489	0.06175
504	1.1475	0.4964	0.31886	0.34493	0.02607
516	1.1475	0.548	0.28314	0.34497	0.02611
528	1.1279	0.5136	0.30648	0.345	0.06186
540	1.1523	0.6168	0.24166	0.34502	0.03854
552	1.1475	0.548	0.28314	0.34504	0.10338
564	1.1523	0.5308	0.29458	0.34506	0.06192
576	1.1328	0.5652	0.27214	0.34507	0.05049
588	1.1328	0.5136	0.30648	0.34508	0.07294
600	1.123	0.5652	0.27214	0.34509	0.03861
612	1.1377	0.5308	0.29458	0.3451	0.07296
624	1.1279	0.4964	0.31886	0.34511	0.05053
636	1.1279	0.548	0.28314	0.34511	0.02625

648	1.123	0.548	0.28314	0.34512	0.06198
660	1.1426	0.4964	0.31886	0.34512	0.06198
672	1.1279	0.5652	0.27214	0.34513	0.02627
684	1.1377	0.5308	0.29458	0.34513	0.07298
696	1.1426	0.548	0.28314	0.34513	0.05055
708	1.1475	0.5136	0.30648	0.34513	0.06199
720	1.1426	0.548	0.28314	0.34513	0.03866
732	1.1377	0.5308	0.29458	0.34514	0.062
744	1.123	0.4964	0.31886	0.34514	0.05056
756	1.1279	0.548	0.28314	0.34514	0.02628
768	1.1328	0.5652	0.27214	0.34514	0.062
780	1.1133	0.5652	0.27214	0.34514	0.073
792	1.123	0.5824	0.26158	0.34514	0.073
804	1.1328	0.548	0.28314	0.34514	0.08356
816	1.1328	0.548	0.28314	0.34514	0.062
828	1.1328	0.4964	0.31886	0.34514	.0.062
840	1.1475	0.548	0.28314	0.34514	0.02628
852	1.1084	0.4792	0.33174	0.34514	0.062
864	1.1377	0.548	0.28314	0.34514	0.0134
876	1.1133	0.548	0.28314	0.34514	0.062
888	1.1279	0.548	0.28314	0.34514	0.062
900	1.123	0.5136	0.30648	0.34514	0.062
912	1.1279	0.4792	0.33174	0.34514	0.03866
924	1.1377	0.462	0.34514	0.34514	0.0134
936	1.1133	0.5652	0.27214	0.34514	3.7E-07
948	1.123	0.4964	0.31886	0.34514	0.073
960	1.1182	0.548	0.28314	0.34514	0.02628
972	1.1182	0.548	0.28314	0.34514	0.062
984	1.1084	0.4964	0.31886	0.34514	0.062
996	1.1328	0.548	0.28314	0.34514	0.02628
1008	1.1328	0.5136	0.30648	0.34514	0.062

1020	1.123	0.4792	0.33174	0.34514	0.03867
1032	1.1182	0.5308	0.29458	0.34514	0.0134
1044	1.1328	0.5308	0.29458	0.34514	0.05057
1056	1.1328	0.5136	0.30648	0.34514	0.05057
1068	1.1084	0.5824	0.26158	0.34514	0.03867
1080	1.1084	0.548	0.28314	0.34514	0.08357
1092	1.1279	0.5308	0.29458	0.34514	0.062
1104	1.1279	0.548	0.28314	0.34514	0.05057
1116	1.1279	0.4792	0.33174	0.34514	0.062
1128	1.123	0.4964	0.31886	0.34514	0.0134
1140	1.1279	0.5308	0.29458	0.34514	0.02628
1152	1.1377	0.4964	0.31886	0.34514	0.05057
1164	1.123	0.4792	0.33174	0.34514	0.02628
1176	1.1182	0.5652	0.27214	0.34514	0.0134
1188	1.1182	0.4792	0.33174	0.34514	0.073
1200	1.1084	0.4964	0.31886	0.34514	0.0134
1212	1.1182	0.5136	0.30648	0.34514	0.02628
1224	1.1328	0.548	0.28314	0.34514	0.03867
1236	1.1133	0.5308	0.29458	0.34514	0.062
1248	1.1475	0.4792	0.33174	0.34514	0.05057
1260	1.123	0.4964	0.31886	0.34514	0.0134
1272	1.1328	0.5136	0.30648	0.34514	0.02628
1284	1.1084	0.5308	0.29458	0.34514	0.03867
1296	1.1279	0.462	0.34514	0.34514	0.05057
1308	1.1133	0.5308	0.29458	0.34514	1.6E-09
1320	1.1035	0.5652	0.27214	0.34514	0.05057
1332	1.1182	0.462	0.34514	0.34514	0.073
1344	1.123	0.5136	0.30648	0.34514	9.2E-10
1356	1.123	0.5308	0.29458	0.34514	0.03867
1368	1.1328	0.4964	0.31886	0.34514	0.05057
1380	1.123	0.462	0.34514	0.34514	0.02628

_						
	1392	1.1182	0.5136	0.30648	0.34514	4.6E-10
	1404	1.123	0.4964	0.31886	0.34514	0.03867
	1416	1.1279	0.4448	0.35909	0.34514	0.02628
	1428	1.1035	0.5824	0.26158	0.34514	0.01394
	1440	1.1182	0.5308	0.29458	0.34514	0.08357
	1452	1.1035	0.5136	0.30648	0.34514	0.05057
Γ	1464	1.123	0.5136	0.30648	0.34514	0.03867
		·		·		0.0246



**Figure A2** Comparison between measured and theoretical hydrogen ion concentration of response time of pH electrode experiment in batch operation at mixing speed 750 rpm.

### **APPENDIX B**



Figure B1 Diagram of volume of CSTR calculation in No-Adsorption Test.

**Table B1** The experimental and predicted hydrogen concentration of No-Adsorption Test.

Volumetic velocity, v, = Volume of PFR, V <sub>p</sub> , =	0.833 10	m l/s m l
Resident time, t <sub>r</sub> , =	12.0048	S
Volume of CSTR, $V_1$ , =	2.5	ml
init. Conc., h <sub>0</sub> , =	0.2	N
d t =	20	S
beta =	6.664	(v * dt)/V1

			_	
Time (sec)	рH	h2 exp.	h 1	h2 pre.
0	5.56	2.75423E-06	0.173904	0
20	5.41	3.89045E-06	0.196595	0
40	5.38	4.16869E-06	0.199556	0
60	2.50	0.003162278	0.199942	0
80	0.83	0.147910839	0.199992	0.18525
100	0.72	0.190546072	0.199999	0.196595
120	0.70	0.199526231	0.2	0.199556
140	0.70	0.199526231	0.2	0.199942
160	0.70	0.199526231	0.2	0.199992
180	0.70	0.199526231	0.2	0.199999
200	0.70	0.199526231	0.2	0.2
220	0.70	0.199526231	0.2	0.2
240	0.70	0.199526231	0.2	0.2
260	0.70	0.199526231	0.2	0.2
280	0.70	0.199526231	0.2	0.2
300	0.70	0.199526231	0.2	0.2
320	0.70	0.199526231	0.2	0.2
340	0.70	0.199526231	0.2	0.2
360	0.70	0.199526231	0.2	0.2
380	0.70	0.199526231	0.2	0.2

**Table B2** Performance of No-Adsorption (flow characteristic of the column) (completely ImplicitApproach).

# Specific values of

## column

diameter =	2.85	cm	$h_{in} =$	0.2	N
length =	24	cm			
u =	0.13	cm/s			
dt =	10	S			
dx =	3.17073	cm			
eps =	0.41				

	i =	0	1	2	3	4	5	6	7	8
	x (cm) =	0	3.1707	6.3415	9.5122	12.6829	15.8537	19.0244	22.1951	25.3659
n (t)										
0 (0 s)	h	0.1739	0	0	0	0	0	0	0	0
	q	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1 (10 s)	h	0.1852	0.1852	0	0	0	0	0	0	0

	q	0	0	0	0	0	0	0	0	0
2 (20 s)	h	0.1966	0.1852	0.1852	0	0	0	0	0	0
-	q	0	0	0	0	0	0	0	0	0
3 (30 s)	h	0.1981	0.1966	0.1852	0.1852	0	0	0	0	0
	q	0	0	0	0	0	0	0	0	0
4 (40 s)	h	0.1996	0.1981	0.1966	0.1852	0.1852	0	0	0	0
	q	0	0	0	0	0	0	0	0	0
5 (50 s)	h	0.1997	0.1996	0.1981	0.1966	0.1852	0.1852	0	0	0
	q	0	0	0	0	0	0	0	0	0
6 (60 s)	h	0.1999	0.1997	0.1996	0.1981	0.1966	0.1852	0.1852	0	0
	q	0	0	0	0	0	0	0	0	0
7 (70 s)	h	0.2000	0.1999	0.1997	0.1996	0.1981	0.1966	0.1852	0.1852	0
	q	0	0	0	0	0	0	0	0	0

									Τ	1
8 (80 s)	h	0.2000	0.2000	0.1999	0.1997	0.1996	0.1981	0.1966	0.1852	0.1852
	q	0	0	0	0	0	0	0	0	0
9 (90 s)	h	0.2000	0.2000	0.2000	0.1999	0.1997	0.1996	0.1981	0.1966	0.1852
	q	0	0	0	0	0	0	0	0	0
10 (100 s)	h	0.2000	0.2000	0.2000	0.2000	0.1999	0.1997	0.1996	0.1981	0.1966
	q	0	0	0	0	0	0	0	0 -	0
11 (110 s)	h	0.2000	0.2000	0.2000	0.2000	0.2000	0.1999	0.1997	0.1996	0.1981
	q	0	0	0	0	0	0	0	0	0
12 (120 s)	h	0.2000	0.2000	0.2000	0.2000	0.2000	0.2000	0.1999	0.1997	0.1996
	q	0	0	0	0	0	0	0	0	0
13 (130 s)	h	0.2000	0.2000	0.2000	0.2000	0.2000	0.2000	0.2000	0.1999	0.1997
	q	0	0	0	0	0	0	0	0	0

14 (140 s)	h	0.2000	0.2000	0.2000	0.2000	0.2000	0.2000	0.2000	0.2000	0.1999
	q	0	0	0	0	0	0	0	0	0
15 (150 s)	h	0.2000	0.2000	0.2000	0.2000	0.2000	0.2000	0.2000	0.2000	0.2000
	q	0	0	0	0	0	0	0	0	0
16 (160 s)	h	0.2000	0.2000	0.2000	0.2000	0.2000	0.2000	0.2000	0.2000	0.2000
	q	0	0	0	0	0	0	0	0	0
17 (170 s)	h	0.2000	0.2000	0.2000	0.2000	0.2000	0.2000	0.2000	0.2000	0.2000
	q	0	0	0	0	0	0	0	0	0
18 (180 s)	h	0.2000	0.2000	0.2000	0.2000	0.2000	0.2000	0.2000	0.2000	0.2000
	q	0	0	0	0	0	0	0	0	0
19 (190 s)	h	0.2000	0.2000	0.2000	0.2000	0.2000	0.2000	0.2000	0.2000	0.2000
	q	0	0	0	0	0	0	0	0	0
20 (200 s)	h	0.2000	0.2000	0.2000	0.2000	0.2000	0.2000	0.2000	0.2000	0.2000
	q	0	0	0	0	0	0	0	0	0

### **APPENDIX C**





Figure C1 Diagram of c, q and h calculation in fixed-bed operation.

**Table C1** The experimental and predicted hydrogen concentration of ion-adsorption in fixed-bed operation.

Volumetic velocity, V,	1.67	ml/s
Volune of CSTR, V1, =	2.5	ml
init. Conc., C0, =	0.1	Ν
Hight of column =	24	cm

Volume of resin (completely packed), V <sub>R</sub> =	147.78	ml
Volume of liquid, V <sub>L</sub> =	60.59	ml
eps =	0.41	

Time (sec)	рН	h2 exp.	h2 pre.
0	4.0000	0.0001	0.0000
5	3.9700	0.0001	0.0000
10	3.9400	0.0001	0.0000
15	3.9100	0.0001	0.0000
20	3.8800	0.0001	0.0000
25	3.8475	0.0001	0.0000
30	3.8150	0.0002	0.0000
35	3.7825	0.0002	0.0000
40	3.7500	0.0002	0.0000
45	3.7025	0.0002	0.0000
50	3.6550	0.0002	0.0000
55	3.6075	0.0002	0.0000
60	3.5600	0.0003	0.0000
65	3.1610	0.0007	0.0000

70	2.7620	0.0017	0.0003
75	2.3630	0.0043	0.0039
80	1.9640	0.0109	0.0177
85	1.6870	0.0206	0.0440
90	1.4100	0.0389	0.0775
95	1.1330	0.0736	0.1113
100	0.8560	0.1393	0.1413
105	0.8119	0.1542	0.1659
110	0.7678	0.1707	0.1851
115	0.7237	0.1889	0.1996
120	0.6796	0.2091	0.2103
125	0.6697	0.2140	0.2182
130	0.6597	0.2189	0.2238
135	0.6498	0.2240	0.2279
140	0.6398	0.2292	0.2307
145	0.6361	0.2312	0.2328
150	0.6324	0.2331	0.2342
155	0.6287	0.2351	0.2352
160	0.6250	0.2371	0.2359
165	0.6248	0.2373	0.2364
170	0.6245	0.2374	0.2368
175	0.6243	0.2375	0.2370
180	0.6240	0.2377	0.2372
185	0.6240	0.2377	0.2373
190	0.6240	0.2377	0.2374
195	0.6240	0.2377	0.2374
200	0.6240	0.2377	0.2374
205	0.6240	0.2377	0.2374
210	0.6240	0.2377	0.2374
	1		

215	0.6240	0.2377	0.2374
220	0.6240	0.2377	0.2374
225	0.6240	0.2377	0.2374
230	0.6240	0.2377	0.2374
235	0.6240	0.2377	0.2374
240	0.6240	0.2377	0.2374
245	0.6240	0.2377	0.2374
250	0.6240	0.2377	0.2374
255	0.6240	0.2377	0.2374
260	0.6240	0.2377	0.2374
265	0.6240	0.2377	0.2374
270	0.6240	0.2377	0.2374
275	0.6240	0.2377	0.2374
280	0.6240	0.2377	0.2374
285	0.6240	0.2377	0.2374
290	0.6240	0.2377	0.2374
295	0.6240	0.2377	0.2374
300	0.6240	0.2377	0.2374
305	0.6240	0.2377	0.2374
310	0.6240	0.2377	0.2374
315	0.6240	0.2377	0.2374
320	0.6240	0.2377	0.2374
325	0.6240	0.2377	0.2374
330	0.6240	0.2377	0.2374
335	0.6240	0.2377	0.2374
340	0.6240	0.2377	0.2374
345	0.6240	0.2377	0.2374
350	0.6240	0.2377	0.2374
355	0.6240	0.2377	0.2374

360	0.6240	0.2377	0.2374
365	0.6240	0.2377	0.2374
370	0.6240	0.2377	0.2374
375	0.6240	0.2377	0.2374
380	0.6240	0.2377	0.2374
385	0.6240	0.2377	0.2374
390	0.6240	0.2377	0.2374
395	0.6240	0.2377	0.2374
400	0.6240	0.2377	0.2374
405	0.6240	0.2377	0.2374
410	0.6240	0.2377	0.2374
415	0.6240	0.2377	0.2374
420	0.6240	0.2377	0.2374
425	0.6240	0.2377	0.2374
430	0.6240	0.2377	0.2374
435	0.6240	0.2377	0.2374
440	0.6240	0.2377	0.2374
445	0.6240	0.2377	0.2374
450	0.6240	0.2377	0.2374
455	0.6240	0.2377	0.2374
460	0.6240	0.2377	0.2374
465	0.6240	0.2377	0.2374
470	0.6240	0.2377	0.2374
475	0.6240	0.2377	0.2374
480	0.6240	0.2377	0.2374
485	0.6240	0.2377	0.2374
490	0.6240	0.2377	0.2374
495	0.6240	0.2377	0.2374
500	0.6240	0.2377	0.2374
	A	A	

505	0.6240	0.2377	0.2374
510	0.6240	0.2377	0.2374
515	0.6240	0.2377	0.2374
520	0.6240	0.2377	0.2374
525	0.6240	0.2377	0.2374
530	0.6240	0.2377	0.2374
535	0.6240	0.2377	0.2374
540	0.6240	0.2377	0.2374
545	0.6240	0.2377	0.2374
550	0.6240	0.2377	0.2374
555	0.6240	0.2377	0.2374
560	0.6240	0.2377	0.2374
565	0.6240	0.2377	0.2374
570	0.6240	0.2377	0.2374
575	0.6240	0.2377	0.2374
580	0.6240	0.2377	0.2374
585	0.6240	0.2377	0.2374
590	0.6240	0.2377	0.2374
595	0.6240	0.2377	0.2374
600	0.6240	0.2377	0.2374
605	0.6240	0.2377	0.2374
610	0.6240	0.2377	0.2374
615	0.6240	0.2377	0.2374
620	0.6240	0.2377	0.2374
625	0.6240	0.2377	0.2374
630	0.6240	0.2377	0.2374
635	0.6240	0.2377	0.2374
640	0.6240	0.2377	0.2374
645	0.6240	0.2377	0.2374

0.6240	0.2377	0.2374
0.6240	0.2377	0.2374
0.6240	0.2377	0.2374
0.6240	0.2377	0.2374
0.6240	0.2377	0.2374
0.6240	0.2377	0.2374
0.6240	0.2377	0.2374
0.6240	0.2377	0.2374
0.6240	0.2377	0.2374
0.6240	0.2377	0.2374
0.6240	0.2377	0.2374
0.6240	0.2377	0.2374
0.6240	0.2377	0.2374
0.6240	0.2377	0.2374
0.6240	0.2377	0.2374
0.6240	0.2377	0.2374
0.6240	0.2377	0.2374
0.6240	0.2377	0.2374
0.6240	0.2377	0.2374
0.6240	0.2377	0.2374
0.6240	0.2377	0.2374
0.6240	0.2377	0.2374
0.6240	0.2377	0.2374
0.6240	0.2377	0.2374
0.6240	0.2377	0.2374
0.6240	0.2377	0.2374
0.6240	0.2377	0.2374
0.6240	0.2377	0.2374
0.6240	0.2377	0.2374
	0.6240 0.6240	0.62400.2377

795	0.6240	0.2377	0.2374
800	0.6240	0.2377	0.2374
805	0.6240	0.2377	0.2374
810	0.6240	0.2377	0.2374
815	0.6240	0.2377	0.2374
820	0.6240	0.2377	0.2374
825	0.6240	0.2377	0.2374
830	0.6240	0.2377	0.2374
835	0.6240	0.2377	0.2374
840	0.6240	0.2377	0.2374
845	0.6240	0.2377	0.2374
850	0.6240	0.2377	0.2374
855	0.6240	0.2377	0.2374
860	0.6240	0.2377	0.2374
865	0.6240	0.2377	0.2374
870	0.6240	0.2377	0.2374
875	0.6240	0.2377	0.2374
880	0.6240	0.2377	0.2374
885	0.6240	0.2377	0.2374
890	0.6240	0.2377	0.2374
895	0.6240	0.2377	0.2374
900	0.6240	0.2377	0.2374
905	0.6240	0.2377	0.2374
910	0.6240	0.2377	0.2374
915	0.6240	0.2377	0.2374
920	0.6240	0.2377	0.2374
925	0.6240	0.2377	0.2374
930	0.6240	0.2377	0.2374
935	0.6240	0.2377	0.2374

940	0.6240	0.2377	0.2374
945	0.6240	0.2377	0.2374
950	0.6240	0.2377	0.2374
955	0.6240	0.2377	0.2374
960	0.6240	0.2377	0.2374
965	0.6240	0.2377	0.2374
970	0.6240	0.2377	0.2374
975	0.6240	0.2377	0.2374
980	0.6240	0.2377	0.2374
985	0.6240	0.2377	0.2374
990	0.6240	0.2377	0.2374
995	0.6240	0.2377	0.2374
1000	0.6240	0.2377	0.2374
1005	0.6240	0.2377	0.2374
1010	0.6240	0.2377	0.2374
1015	0.6240	0.2377	0.2374
1020	0.6240	0.2377	0.2374
1025	0.6240	0.2377	0.2374
1030	0.6240	0.2377	0.2374
1035	0.6240	0.2377	0.2374
1040	0.6240	0.2377	0.2374
1045	0.6240	0.2377	0.2374
1050	0.6240	0.2377	0.2374
1055	0.6240	0.2377	0.2374
1060	0.6240	0.2377	0.2374
1065	0.6240	0.2377	0.2374
1070	0.6240	0.2377	0.2374
1075	0.6240	0.2377	0.2374
1080	0.6240	0.2377	0.2374

ſ	1085	0.6240	0.2377	0.2374
	1090	0.6240	0.2377	0.2374
	1095	0.6240	0.2377	0.2374
╞	1100	0.6240	0.2377	0.2374
	1105	0.6240	0.2377	0.2374
ŀ	1110	0.6240	0.2377	0.2374
	1115	0.6240	0.2377	0.2374
	1120	0.6240	0.2377	0.2374
╞	1125	0.6240	0.2377	0.2374
$\left  \right $	1130	0.6240	0.2377	0.2374
	1135	0.6240	0.2377	0.2374
$\left  \right $	1140	0.6240	0.2377	0.2374
ŀ	1145	0.6240	0.2377	0.2374
	1150	0.6240	0.2377	0.2374
	1155	0.6240	0.2377	0.2374
	1160	0.6240	0.2377	0.2374
	1165	0.6240	0.2377	0.2374
	1170	0.6240	0.2377	0.2374
ŀ	1175	0.6240	0.2377	0.2374
	1180	0.6240	0.2377	0.2374
	1185	0.6240	0.2377	0.2374
ŀ	1190	0.6240	0.2377	0.2374
$\left  \right $	1195	0.6240	0.2377	0.2374
$\left  \right $	1200	0.6240	0.2377	0.2374
$\left  \right $	1205	0.6240	0.2377	0.2374
ŀ	1210	0.6240	0.2377	0.2374
$\left  \right $	1215	0.6240	0.2377	0.2374
	1220	0.6240	0.2377	0.2374
	1225	0.6240	0.2377	0.2374
		1	L	1

1230	0.6240	0.2377	0.2374
1235	0.6240	0.2377	0.2374
1240	0.6240	0.2377	0.2374
1245	0.6240	0.2377	0.2374
1250	0.6240	0.2377	0.2374
1255	0.6240	0.2377	0.2374
1260	0.6240	0.2377	0.2374
1265	0.6240	0.2377	0.2374
1270	0.6240	0.2377	0.2374
1275	0.6240	0.2377	0.2374
1280	0.6240	0.2377	0.2374
1285	0.6240	0.2377	0.2374
1290	0.6240	0.2377	0.2374
1295	0.6240	0.2377	0.2374
1300	0.6240	0.2377	0.2374
1305	0.6240	0.2377	0.2374
1310	0.6240	0.2377	0.2374
1315	0.6240	0.2377	0.2374
1320	0.6240	0.2377	0.2374
1325	0.6240	0.2377	0.2374
1330	0.6240	0.2377	0.2374
1335	0.6240	0.2377	0.2374
1340	0.6240	0.2377	0.2374
1345	0.6240	0.2377	0.2374
1350	0.6240	0.2377	0.2374
1355	0.6240	0.2377	0.2374
1360	0.6240	0.2377	0.2374
1365	0.6240	0.2377	0.2374
1370	0.6240	0.2377	0.2374
	L	i	·

1375	0.6240	0.2377	0.2374
1380	0.6240	0.2377	0.2374
1385	0.6240	0.2377	0.2374
1390	0.6240	0.2377	0.2374
1395	0.6240	0.2377	0.2374
1400	0.6240	0.2377	0.2374

Table C2 Performance of ion adsorption in fixed-bed operation (completely implicit approach).

dx = 3.170732 cm cm/s (flowrate = 100 ml/min, diameter of column = 2.85 cm and length of column = 24 cm 0.26 **u** = eps = 0.41 5 dt =S meq/ml  $\mathbf{r} = \mathbf{K}(\mathbf{beta} * \mathbf{c}^1 / \mathbf{n} - \mathbf{q})$ c in = 0.1 alpha = 1.603659 K\*dt/eps K = 0.1315 s-1gamma = 1.114407 K\*dt/(1-eps) 0.304 beta = 2.45 n = 1/n (m) = 0.408163 trigger = 2 start c = under-relaxation = 0.1 0.2

	i =	0	1	2	3	4	5	6	7	8
	x (cm) =	0	3.1707	6.3415	9.5122	12.6829	15.8537	19.0244	22.1951	25.3659
n (t)										
0 (0 s)	с	0.1	0	0	0	0	0	0	0	0

	q	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	h	0	0	0	0	0	0	0	0	0
1 (5 s)	с	0.1000	0.0388	0	0	0	0	0	0	0
	q	0.0626	0.0425	0	0	0	0	0	0	0
	h	0.1252	0.0851	0	0	0	0	0	0	0
2 (10 s)	с	0.1000	0.0594	0.0075	0	0	0	0	0	0
	q	0.0922	0.0707	0.0217	0	0	0	0	0	0
	h	0.1844	0.1415	0.0435	0	0	0	0	0	0
3 (15 s)	С	0.1000	0.0740	0.0249	0.0002	0	0	0	0	0
	q	0.1062	0.0888	0.0458	0.0051	0	0	0	0	0
	h	0.2124	0.1776	0.0915	0.0101	0	0	0	0	0
4 (20 s)	с	0.1000	0.0836	0.0442	0.0041	3.00E-08	0	0	0	0
	q	0.1128	0.1002	0.0665	0.0195	0.0001	0	0	0	0
	h	0.2257	0.2004	0.1330	0.0389	0.0003	0	0	0	0

5 (25 s)	с	0.1000	0.0898	0.0606	0.0161	5.40E-05	1.00E-17	0	0	0
	q	0.1160	0.1073	0.0825	0.0389	0.0030	1.84E-08	0	0	0
	h	0.2319	0.2146	0.1649	0.0779	0.0059	3.69E-08	0	0	0
6 (30 s)	с	0.1000	0.0937	0.0731	0.0329	1.60E-03	1.20E-09	8.00E-41	0	0
	q	0.1174	0.1117	0.0941	0.0582	0.0130	3.66E-05	6.90E-18	0	0
	h	0.2349	0.2234	0.1882	0.1164	0.0260	0.0001	1.38E-17	0	0
7 (35 s)	c	0.1000	0.0961	0.0820	0.0496	0.0090	5.00E-06	5.00E-21	2.00E-97	0
	q	0.1181	0.1144	0.1022	0.0745	0.0296	0.0011	8.29E-10	5.44E-41	0
	h	0.2363	0.2288	0.2044	0.1491	0.0592	0.0022	1.66E-09	1.09E-40	0
8 (40 s)	c	0.1000	0.0976	0.0881	0.0636	0.0228	0.0004	3.70E-12	6.65E-49	1.00E-97
	q	0.1185	0.1161	0.1078	0.0873	0.0482	0.0071	3.46E-06	3.47E-21	4.10E-41
	h	0.2369	0.2322	0.2156	0.1746	0.0964	0.0142	6.91E-06	6.94E-21	8.20E-41
0 (45 )		0.1000	0.0005	0.0022	0.0744	0.0200	0.0040	1 755 07	2 (0E 27	1.005.07
9 (45 s)	С	0.1000	0.0985	0.0922	0.0744	0.0389	0.0040	1./5E-U/	3.0UE-2/	1.00E-9/
	q	0.1186	0.1171	0.1115	0.0968	0.0654	0.0202	0.0003	2.58E-12	6.04E-41
	h	0.2373	0.2342	0.2231	0.1935	0.1308	0.0403	0.0006	5.16E-12	1.21E-40

			-			+				
10 (50 s)	с	0.1000	0.0991	0.0949	0.0824	0.0540	0.0139	5.29E-05	1.02E-15	5.95E-64
	q	0.1187	0.1178	0.1140	0.1036	0.0796	0.0375	0.0030	1.22E-07	2.50E-27
	h	0.2374	0.2355	0.2281	0.2072	0.1592	0.0750	0.0060	2.43E-07	5.01E-27
11 (55 s)		0 1000	0.0994	0.0967	0.0880	0.0665	0.0285	0.0012	1 21E-09	6 79E-36
11 (33 8)		0.1000	0.0774	0.0707	0.0000	0.0000	0.0205	0.0012	1.212-07	7.00E 1(
	q	0.1187	0.1181	0.1157	0.1084	0.0906	0.0552	0.0118	3.08E-05	/.09E-10
	h	0.2375	0.2363	0.2314	0.2168	0.1813	0.1105	0.0236	0.0001	1.42E-15
							0.0110	0.0070		
12 (60 s)	с	0.1000	0.0997	0.0979	0.0919	0.0761	0.0440	0.0070	2.69E-06	5.18E-21
	q	0.1188	0.1184	0.1168	0.1118	0.0989	0.0709	0.0267	0.0009	8.41Ē-10
	h	0.2375	0.2368	0.2335	0.2235	0.1977	0.1418	0.0535	0.0017	1.68E-09
						0.0000	0.0550	0.0100	0.0000	0.017
13 (65 s)	С	0.1000	0.0998	0.0986	0.0946	0.0833	0.0579	0.0188	0.0002	8.21E-13
	q	0.1188	0.1185	0.1175	0.1140	0.1049	0.0836	0.0443	0.0056	1.87E-06
	h	0.2375	0.2371	0.2349	0.2281	0.2097	0.1672	0.0885	0.0112	3.74E-06
14 (70 s)	с	0.1000	0.0999	0.0991	0.0964	0.0884	0.0692	0.0337	0.0026	4.16E-08
	q	0.1188	0.1186	0.1179	0.1156	0.1091	0.0934	0.0611	0.0168	0.0002

h	0.2375	0.2373	0.2359	0.2312	0.2183	0.1868	0.1221	0.0336	0.0003
с	0.1000	0.0999	0.0994	0.0976	0.0921	0.0779	0.0485	0.0105	1.89E-05
q	0.1188	0.1187	0.1182	0.1167	0.1121	0.1007	0.0755	0.0329	0.0020
h	0.2375	0.2374	0.2365	0.2333	0.2243	0.2014	0.1509	0.0658	0.0039
c	0.1000	0.1000	0.0996	0.0984	0.0946	0.0844	0.0614	0.0235	0.0006
q	0.1188	0.1187	0.1184	0.1174	0.1142	0.1060	0.0870	0.0502	0.0088
h	0.2375	0.2374	0.2368	0.2347	0.2285	0.2121	0.1739	0.1005	0.0177
С	0.1000	0.1000	0.0998	0.0990	0.0963	0.0891	0.0717	0.0385	0.0046
q	0.1188	0.1187	0.1185	0.1178	0.1157	0.1099	0.0958	0.0661	0.0220
h	0.2375	0.2375	0.2371	0.2357	0.2314	0.2197	0.1916	0.1323	0.0440
	0.1000	0 1000	0.0000	0.0993	0.0975	0.0924	0.0796	0.0526	0.01/3
	0.1000	0.1000	0.0777	0.1103	0.0775	0.0724	0.0770	0.0520	0.0143
q	0.1188	0.1188	0.1186	0.1182	0.116/	0.1126	0.1023	0.0794	0.0387
h	0.2375	0.2375	0.2373	0.2363	0.2333	0.2252	0.2047	0.1589	0.0775
c	0.1000	0.1000	0.0999	0.0996	0.0983	0.0948	0.0855	0.0645	0.0282
	h c q h c q h c q h c q h c q h c q h	h       0.2375         c       0.1000         q       0.1188         h       0.2375	h       0.2375       0.2373         c       0.1000       0.0999         q       0.1188       0.1187         h       0.2375       0.2374         c       0.1000       0.1000         q       0.1188       0.1187         h       0.2375       0.2374         c       0.1000       0.1000         q       0.1188       0.1187         h       0.2375       0.2374         c       0.1000       0.1000         q       0.1188       0.1187         h       0.2375       0.2374         c       0.1000       0.1000         q       0.1188       0.1187         h       0.2375       0.2375         c       0.1000       0.1000         q       0.1188       0.1188         h       0.2375       0.2375         c       0.1000       0.1000         q       0.1188       0.1188         h       0.2375       0.2375	h       0.2375       0.2373       0.2359         c       0.1000       0.0999       0.0994         q       0.1188       0.1187       0.1182         h       0.2375       0.2374       0.2365         c       0.1000       0.1000       0.0996         q       0.1188       0.1187       0.1182         h       0.2375       0.2374       0.2365         c       0.1000       0.1000       0.0996         q       0.1188       0.1187       0.1184         h       0.2375       0.2374       0.2368         c       0.1000       0.1000       0.0998         q       0.1188       0.1187       0.1185         h       0.2375       0.2375       0.2371         c       0.1000       0.1000       0.0999         q       0.1188       0.1188       0.1186         h       0.2375       0.2375       0.2373         c       0.1000       0.1000       0.0999         q       0.1188       0.1186       0.1186         h       0.2375       0.2375       0.2373         c       0.1000       0.1000       0.0999	h         0.2375         0.2373         0.2359         0.2312           c         0.1000         0.0999         0.0994         0.0976           q         0.1188         0.1187         0.1182         0.1167           h         0.2375         0.2374         0.2365         0.2333           c         0.1000         0.1000         0.0996         0.0984           q         0.1188         0.1187         0.1182         0.1167           h         0.2375         0.2374         0.2365         0.2333           c         0.1000         0.1000         0.0996         0.0984           q         0.1188         0.1187         0.1184         0.1174           h         0.2375         0.2374         0.2368         0.2347           c         0.1000         0.1000         0.0998         0.0990           q         0.1188         0.1187         0.1185         0.1178           h         0.2375         0.2375         0.2371         0.2357           c         0.1000         0.1000         0.0999         0.0993           q         0.1188         0.1186         0.1182           0.2375         0.2375	h         0.2375         0.2373         0.2359         0.2312         0.2183           c         0.1000         0.0999         0.0994         0.0976         0.0921           q         0.1188         0.1187         0.1182         0.1167         0.1121           h         0.2375         0.2374         0.2365         0.2333         0.2243           c         0.1000         0.1000         0.0996         0.0984         0.0946           q         0.1188         0.1187         0.1184         0.1174         0.1142           h         0.2375         0.2374         0.2368         0.2347         0.2285           q         0.1188         0.1187         0.1184         0.1174         0.1142           h         0.2375         0.2374         0.2368         0.2347         0.2285           c         0.1000         0.1000         0.09998         0.0990         0.0963           q         0.1188         0.1187         0.1185         0.1178         0.1157           h         0.2375         0.2375         0.2371         0.2357         0.2314           c         0.1000         0.1000         0.09999         0.0993         0.0975 <td>h         0.2375         0.2373         0.2359         0.2312         0.2183         0.1868           c         0.1000         0.0999         0.0994         0.0976         0.0921         0.0779           q         0.1188         0.1187         0.1182         0.1167         0.1121         0.1007           h         0.2375         0.2374         0.2365         0.2333         0.2243         0.2014           c         0.1000         0.1000         0.0996         0.0984         0.0946         0.0844           q         0.1188         0.1187         0.1184         0.1174         0.1142         0.1060           h         0.2375         0.2374         0.2368         0.2347         0.2285         0.2121           c         0.1000         0.1000         0.0998         0.0990         0.0963         0.0891           q         0.1188         0.1187         0.1185         0.1178         0.1157         0.1099           h         0.2375         0.2375         0.2371         0.2357         0.2314         0.2197           c         0.1000         0.0999         0.0993         0.0975         0.0924           q         0.1188         0.</td> <td>h         0.2375         0.2373         0.2359         0.2312         0.2183         0.1868         0.1221           c         0.1000         0.0999         0.0994         0.0976         0.0921         0.0779         0.0485           q         0.1188         0.1187         0.1182         0.1167         0.1121         0.1007         0.0755           h         0.2375         0.2374         0.2365         0.2333         0.2243         0.2014         0.1509           c         0.1000         0.0996         0.0984         0.0946         0.0844         0.0614           q         0.1188         0.1187         0.1184         0.1174         0.1142         0.1060         0.0870           h         0.2375         0.2374         0.2368         0.2347         0.2285         0.2121         0.1739           c         0.1000         0.0998         0.0990         0.0963         0.0891         0.0717           q         0.1188         0.1187         0.1185         0.1178         0.1157         0.1099         0.0958           h         0.2375         0.2375         0.2371         0.2357         0.2314         0.2197         0.1916           c</td> <td>h         0.2375         0.2373         0.2359         0.2312         0.2183         0.1868         0.1221         0.0336           c         0.1000         0.0999         0.0994         0.0976         0.0921         0.0779         0.0485         0.0105           q         0.1188         0.1187         0.1182         0.1167         0.1121         0.1007         0.0755         0.0329           h         0.2375         0.2374         0.2365         0.2333         0.2243         0.2014         0.1509         0.0658           c         0.1000         0.1000         0.0996         0.0984         0.0946         0.0844         0.0614         0.0235           q         0.1188         0.1187         0.1184         0.1174         0.1142         0.1060         0.0870         0.0502           h         0.2375         0.2374         0.2368         0.2347         0.2285         0.2121         0.1739         0.1005           q         0.1188         0.1187         0.1174         0.1182         0.2121         0.0717         0.0385           q         0.1000         0.0998         0.0990         0.0963         0.0891         0.0717         0.0385           q</td>	h         0.2375         0.2373         0.2359         0.2312         0.2183         0.1868           c         0.1000         0.0999         0.0994         0.0976         0.0921         0.0779           q         0.1188         0.1187         0.1182         0.1167         0.1121         0.1007           h         0.2375         0.2374         0.2365         0.2333         0.2243         0.2014           c         0.1000         0.1000         0.0996         0.0984         0.0946         0.0844           q         0.1188         0.1187         0.1184         0.1174         0.1142         0.1060           h         0.2375         0.2374         0.2368         0.2347         0.2285         0.2121           c         0.1000         0.1000         0.0998         0.0990         0.0963         0.0891           q         0.1188         0.1187         0.1185         0.1178         0.1157         0.1099           h         0.2375         0.2375         0.2371         0.2357         0.2314         0.2197           c         0.1000         0.0999         0.0993         0.0975         0.0924           q         0.1188         0.	h         0.2375         0.2373         0.2359         0.2312         0.2183         0.1868         0.1221           c         0.1000         0.0999         0.0994         0.0976         0.0921         0.0779         0.0485           q         0.1188         0.1187         0.1182         0.1167         0.1121         0.1007         0.0755           h         0.2375         0.2374         0.2365         0.2333         0.2243         0.2014         0.1509           c         0.1000         0.0996         0.0984         0.0946         0.0844         0.0614           q         0.1188         0.1187         0.1184         0.1174         0.1142         0.1060         0.0870           h         0.2375         0.2374         0.2368         0.2347         0.2285         0.2121         0.1739           c         0.1000         0.0998         0.0990         0.0963         0.0891         0.0717           q         0.1188         0.1187         0.1185         0.1178         0.1157         0.1099         0.0958           h         0.2375         0.2375         0.2371         0.2357         0.2314         0.2197         0.1916           c	h         0.2375         0.2373         0.2359         0.2312         0.2183         0.1868         0.1221         0.0336           c         0.1000         0.0999         0.0994         0.0976         0.0921         0.0779         0.0485         0.0105           q         0.1188         0.1187         0.1182         0.1167         0.1121         0.1007         0.0755         0.0329           h         0.2375         0.2374         0.2365         0.2333         0.2243         0.2014         0.1509         0.0658           c         0.1000         0.1000         0.0996         0.0984         0.0946         0.0844         0.0614         0.0235           q         0.1188         0.1187         0.1184         0.1174         0.1142         0.1060         0.0870         0.0502           h         0.2375         0.2374         0.2368         0.2347         0.2285         0.2121         0.1739         0.1005           q         0.1188         0.1187         0.1174         0.1182         0.2121         0.0717         0.0385           q         0.1000         0.0998         0.0990         0.0963         0.0891         0.0717         0.0385           q

	q	0.1188	0.1188	0.1187	0.1184	0.1174	0.1145	0.1071	0.0899	0.0557
	h	0.2375	0.2375	0.2374	0.2367	0.2347	0.2290	0.2143	0.1798	0.1113
						-				
20 (100 s)	c	0.1000	0.1000	0.0999	0.0997	0.0989	0.0964	0.0898	0.0741	0.0430
· · · · ·	q	0.1188	0.1188	0.1187	0.1185	0.1178	0.1158	0.1106	0.0979	0.0707
	h	0.2375	0.2375	0.2374	0.2370	0.2356	0.2316	0.2212	0.1958	0.1413
21 (105 s)	c	0.1000	0.1000	0.1000	0.0998	0.0993	0.0976	0.0929	0.0813	0.0564
	q	0.1188	0.1188	0.1187	0.1186	0.1181	0.1167	0.1130	0.1038	0.0830
	h	0.2375	0.2375	0.2375	0.2372	0.2363	0.2335	0.2261	0.2077	0.1659
22 (110 s)	с	0.1000	0.1000	0.1000	0.0999	0.0995	0.0983	0.0951	0.0867	0.0675
	q	0.1188	0.1188	0.1187	0.1187	0.1183	0.1174	0.1148	0.1082	0.0926
	h	0.2375	0.2375	0.2375	0.2373	0.2367	0.2348	0.2296	0.2163	0.1851
23 (115 s)	c	0.1000	0.1000	0.1000	0.0999	0.0997	0.0989	0.0966	0.0906	0.0762
	q	0.1188	0.1188	0.1188	0.1187	0.1185	0.1178	0.1160	0.1113	0.0998
	h	0.2375	0.2375	0.2375	0.2374	0.2370	0.2357	0.2320	0.2225	0.1996

24 (120 s)	С	0.1000	0.1000	0.1000	0.0999	0.0998	0.0992	0.0976	0.0934	0.0828
	q	0.1188	0.1188	0.1188	0.1187	0.1186	0.1181	0.1169	0.1135	0.1052
	h	0.2375	0.2375	0.2375	0.2374	0.2372	0.2363	0.2337	0.2270	0.2103
25 (125 s)	С	0.1000	0.1000	0.1000	0.1000	0.0999	0.0995	0.0984	0.0954	0.0877
	q	0.1188	0.1188	0.1188	0.1187	0.1186	0.1183	0.1174	0.1151	0.1091
	h	0.2375	0.2375	0.2375	0.2375	0.2373	0.2367	0.2349	0.2302	0.2182
26 (130 s)	с	0.1000	0.1000	0.1000	0.1000	0.0999	0.0997	0.0989	0.0968	0.0913
	q	0.1188	0.1188	0.1188	0.1188	0.1187	0.1185	0.1179	0.1162	0.1119
	h	0.2375	0.2375	0.2375	0.2375	0.2374	0.2370	0.2357	0.2324	0.2238
27 (135 s)	c	0.1000	0.1000	0.1000	0.1000	0.0999	0.0998	0.0992	0.0978	0.0939
	q	0.1188	0.1188	0.1188	0.1188	0.1187	0.1186	0.1181	0.1170	0.1139
	h	0.2375	0.2375	0.2375	0.2375	0.2374	0.2371	0.2363	0.2340	0.2279
28 (140 s)	c	0.1000	0.1000	0.1000	0.1000	0.1000	0.0998	0.0995	0.0985	0.0957
	q	0.1188	0.1188	0.1188	0.1188	0.1187	0.1186	0.1183	0.1175	0.1154
	h	0.2375	0.2375	0.2375	0.2375	0.2375	0.2373	0.2367	0.2350	0.2307

29 (145 s)	с	0.1000	0.1000	0.1000	0.1000	0.1000	0.0999	0.0996	0.0989	0.0970
	q	0.1188	0.1188	0.1188	0.1188	0.1187	0.1187	0.1185	0.1179	0.1164
	h	0.2375	0.2375	0.2375	0.2375	0.2375	0.2374	0.2370	0.2358	0.2328
30 (150 s)	С	0.1000	0.1000	0.1000	0.1000	0.1000	0.0999	0.0998	0.0993	0.0979
	q	0.1188	0.1188	0.1188	0.1188	0.1188	0.1187	0.1186	0.1182	0.1171
	h	0.2375	0.2375	0.2375	0.2375	0.2375	0.2374	0.2371	0.2363	0.2342
31 (155 s)	С	0.1000	0.1000	0.1000	0.1000	0.1000	0.1000	0.0998	0.0995	0.0985
	q	0.1188	0.1188	0.1188	0.1188	0.1188	0.1187	0.1186	0.1184	0.1176
	h	0.2375	0.2375	0.2375	0.2375	0.2375	0.2375	0.2373	0.2367	0.2352
32 (160 s)	С	0.1000	0.1000	0.1000	0.1000	0.1000	0.1000	0.0999	0.0997	0.0990
	q	0.1188	0.1188	0.1188	0.1188	0.1188	0.1187	0.1187	0.1185	0.1180
	h	0.2375	0.2375	0.2375	0.2375	0.2375	0.2375	0.2374	0.2370	0.2359
33 (165 s)	с	0.1000	0.1000	0.1000	0.1000	0.1000	0.1000	0.0999	0.0998	0.0993
	q	0.1188	0.1188	0.1188	0.1188	0.1188	0.1188	0.1187	0.1186	0.1182

	h	0.2375	0.2375	0.2375	0.2375	0.2375	0.2375	0.2374	0.2372	0.2364
34 (170 s)	c	0.1000	0.1000	0.1000	0.1000	0.1000	0.1000	0.1000	0.0998	0.0995
	q	0.1188	0.1188	0.1188	0.1188	0.1188	0.1188	0.1187	0.1186	0.1184
	h	0.2375	0.2375	0.2375	0.2375	0.2375	0.2375	0.2375	0.2373	0.2368
35 (175 s)	c	0.1000	0.1000	0.1000	0.1000	0.1000	0.1000	0.1000	0.0999	0.0997
	q	0.1188	0.1188	0.1188	0.1188	0.1188	0.1188	0.1187	0.1187	0.1185
	h	0.2375	0.2375	0.2375	0.2375	0.2375	0.2375	0.2375	0.2374	0.2370
36 (180 s)	c	0.1000	0.1000	0.1000	0.1000	0.1000	0.1000	0.1000	0.0999	0.0998
	q	0.1188	0.1188	0.1188	0.1188	0.1188	0.1188	0.1188	0.1187	0.1186
	h	0.2375	0.2375	0.2375	0.2375	0.2375	0.2375	0.2375	0.2374	0.2372
37 (185 s)	c	0.1000	0.1000	0.1000	0.1000	0.1000	0.1000	0.1000	0.0999	0.0998
	q	0.1188	0.1188	0.1188	0.1188	0.1188	0.1188	0.1188	0.1187	0.1186
	h	0.2375	0.2375	0.2375	0.2375	0.2375	0.2375	0.2375	0.2375	0.2373
28 (100 c)		0.1000	0.1000	0 1000	0.1000	0.1000	0 1000	0 1000	0.1000	0.0000
30 (190 S)	c	0.1000	0.1000	0.1000	0.1000	0.1000	0.1000	0.1000	0.1000	0.0999

#### **APPENDIX D**



**Figure D1** Diagram of fraction of ions adsorbed onto the resin calculation for batch operation.

**Table D1** The  $Ca^{2+}$  ions concentration as a function of time in batch operation.

Ca2+ (in mixed ion solution)From the data inlet Ca2+=0.1 meq/ml of solutionin batch operationBut I use solution 600 ml. So inlet Ca2+=0.1\*600 meq9/26/2000inlet Ca2+=60 meq.outlet Ca2+=0.0543\*600=32.58 meq.

So Mg2+ are adsorbed = 27.42/21.3 by 6 = 1.283 meq/ml of resin

adsorption rate of Mg2+ is (0.098-0.0701)/(160-0) = 1.74375e-4 meq/ml.of sol .sec.r = (1.74375e-4 \* 600)/21.1666 = 0.0048966 meg/ml.of sol .sec

Time (s)	с
	(meq./ml.)
0	0.098
20	0.093
45	0.0908

70	0.085
100	0.08
130	0.0752
160	0.070)
190	0.0675
220	0.0623
250	0.0608
290	0.0573
320	0.0568
360	0.0559
400	0.0546
440	0.0554
480	0.056
520	0.0549
560	0.0547
630	0.0543
750	0.05463



**Figure D2** Correlation between  $Ca^{2+}$  ions concentration and time in batch operation.

**Table D2** The  $Mg^{2+}$  ions concentration as a function of time in batch operation.

Mg2+ (in mixed ion solution) in batch operation 9/26/2000

Time (s)	c (meq./ml.)
0	0.098
20	0.09575
45	0.0937
70	0.09035
100	0.0878
130	0.0834
160	0.0819
190	
220	0.0754
250	0.0725

From the data inlet Mg2+ = 0.1 meq/ml of solution But I use solution 600 ml. So inlet Mg2+ = 0.1\*600 meq inlet Mg2+ = 60 meq. outlet Mg2+ = 0.059\*600 = 35.4 meq. So Mg2+ are adsorbed = 24.6/21.36 meq.

adsorption rate of Mg2+ is (0.098-0.0796)/(190-0) = 9.6842e-5 meq/ml.of sol .sec.r = (9.6842e-5 \* 600)/21.3676 = 0.0027126 meq/ml.of resin . Sec

## In batch (mixed-ion solution)

Total metal adsorption = 1.283+1.15127 = 2.43427 meq/ml of resin.Fraction of Ca2+ adsorbed onto the resin = (1.283/2.43427)\*100 = 52.7 %Fraction of Mg2+ adsorbed onto the resin = (1.15127/2.43427)\*100 = 47.3 %

290	0.0708
320	0.0663
360	0.0649
400	0.0618
440	0.0584
480	0.0586
520	0.0591
560	0.0589
630	0.0587
750	0.059



**Figure D3** Correlation between  $Mg^{2+}$  ions concentration and time in batch operation.



**Figure D4** Diagram of fraction of ions adsorbed onto the resin calculation for fixed-bed operation.

**Table D3** The  $Ca^{2+}$  ions concentration vs. time and number of  $Ca^{2+}$  ions adsorbed onto the resins.

Ca2+ / H+ ion exchange in<br/>fixed-bed operation at<br/>at flowrate 100 ml./min.c0 = 0.1<br/>meq.Ca2+/ml.sol.flowrate 100 ml./min.flowrate = 1.67<br/>ml.sol./sec.no. of Ca2+ inlet = 0.167<br/>meq.Ca2+/sec.

7/20/00

Time (sec.)	(meq./ml.	no. of adsorbed Ca2	no. of adsorbed Ca2+		(
		(meq.Ca2+/ml.sol.)	(meq.Ca2+/sec.)		
0	0.0072	0.09	0.15		]
40	0.0081	0.09	0.15	6.1389	1
70	0.0054	0.09	0.16	4.7395	'
90	0.0045	0.10	0.16	3.1897	V
120	0.0036	0.10	0.16	4.8296	
150	0.0063	0.09	0.16	4.6944	
180	0.0054	0.09	0.16	4.7395	
210	0.0126	0.09	0.15	4.3787	1
240	0.0189	0.08	0.14	4.0631	
270	0.0261	0.07	0.12	3.7024	

e0 = 0.41 e = 0.3897 h = 14.5 cm. h0 = 15 cm. Vt = 92.538 ml. VR = 36.058 ml.

300	0.0315	0.07	0.11	3.4319
330	0.0387	0.06	0.10	3.0711
360	0.0396	0.06	0.10	3.0260
390	0.0423	0.06	0.10	2.8908
420	0.0558	0.04	0.07	2.2144
450	0.0585	0.04	0.07	2.0792
480	0.0655	0.03	0.06	1.7285
510	0.0785	0.02	0.04	1.0772
540	0.0895	0.01	0.02	0.5261
570	0.0983	0.00	0.00	0.0852
600	0.0990	0.00	0.00	0.0501
630	0.1000	0.00	0.00	0.0000
660	0.1000	0.00	0.00	0.0000
690	0.1000	0.00	0.00	0.0000
720	0.1000	0.00	0.00	0.0000
	Fotal no. of	adsorbed Ca2+ (meq.	Ca2+/sec) =	60.6561

**Table D4** The  $Ca^{2+}$  ions concentration vs. time and number of  $Ca^{2+}$  ions desorbed from the resin.

regenerate Ca2+ / H+ ion exchange in

fixed-bed operation at

flowrate 100 ml./min. (single-ion solution)

c0 = 0.1 meq. Ca2+/ml.soflowrate 1.67 ml. Sol./sec/ no. of Ca2+ inlet 0.167 meq. Ca2+/sec.

10/17/2000

Time (sec.)	c (meq./ml.	no. of desorbed C	Ca2+
		(meq Ca2+/s)	
0	4.50E-05	0.0001	
50	0.0000	0.0001	0.00376
120	0.0036	0.0060	0.42084
150	0.0468	0.0782	2.34468
170	0.0576	0.0962	1.92384
200	0.0556	0.0929	2.78556
220	0.0496	0.0828	1.65664
240	0.0436	0.0728	1.45624
260	0.0397	0.0663	1.32598

$$e0 = 0.41$$
  
 $e = 0.3257$   
 $h = 14$  cm.  
 $h0 = 16$  cm.  
 $Vt = 89.348$  ml.  
 $VR = 29.102$  ml.



280	0.0325	0.0543	1.0855
300	0.0298	0.0498	0.99532
330	0.0258	0.0431	1.29258
360	0.0216	0.0361	1.08216
390	0.0174	0.0291	0.87174
420	0.0126	0.0210	0.63126
450	0.0080	0.0134	0.4008
480	0.0056	0.0094	0.28056
510	0.0031	0.0052	0.15531
540	0.0013	0.0022	0.06513
570	0.0008	0.0013	0.04008
600	0.0005	0.0008	0.02505
630	0.0002	0.0004	0.01227
660	0.0002	0.0003	0.00802
690	0.0001	0.0001	0.00281
720	0.0000	0.0000	0.0013

qd = (0.724101+0.648598)/2

= 0.6863 meq/ml resin

From adsorption part

qt = (1.682176 + 1.700239)/2

= 1.6912 meq/ml resin.

So dq/dt = 0.68635/1.6912= 0.4058

Ca2+ desorbed from resins = 40.58 % of

Ca2+ adsorbed onto the resins

900	0.0000	0.0000	0
870	0.0000	0.0000	0
840	0.0000	0.0000	0
810	0.0000	0.0000	0.00085
780	0.0001	0.0001	0.00301
750	0.0001	0.0001	0.00406

Table D5 Amount of  $Ca^{2+}$  ions desorbed and adsorbed onto the resins as a function of time for fixed-bed operation.

# desorption part for mixed ion solution

exchange with the resin at

flowrate 100 ml/min

## 9/27/2000

Time (sec)	amount of Ca2	amount of Ca2+
	ions desorbed	ions adsorbed
0	0.0000	0.0000
20	0.0000	0.0000
40	0.0001	0.0003
60	0.0023	0.0057
80	0.0046	0.0112
100	0.0097	0.0239
120	0.0086	0.0212
140	0.0359	0.0885
160	0.0328	0.0808
180	0.0275	0.0678

Fraction of adsorbed Ca2+	0.6112	61.12 %
Fraction of adsorbed Mg2	0.3888	38.88 %

amount of	dearbod Ca2+	
460	0.0000	0.0000
430	0.0000	0.0000
400	0.0002	0.0005
370	0.0006	0.0015
340	0.0001	0.0002
310	0.0003	0.0007
280	0.0021	0.0052
260	0.0055	0.0136
240	0.0104	0.0256
220	0.0157	0.0387
200	0.0226	0.0557

neq/ml

## **Appendix E**



Figure E1 Diagram of how the trigger cell work.

**Appendix F** 



Figure F1 Diagram of how the under-relaxation work.





Figure G1 Diagram of iteration method (Completely Implicit Approach).

#### **APPENDIX H**



Figure H1 Diagram of solution preparation for AAS test.



Figure H2 Method of conversion from AAS result to real concentration.



## **CURRICULUM VITAE**

Name:	Ms. Atchara Worasinchai
Date of Birth:	January 22, 1978
Nationality:	Thai
University Educat	tion:
1996-1999	Bachelor Degree of Engineering in Department of
	Chemical Engineering, Faculty of Engineering, Suranaree
	University of Technology, Nakhon Ratchasima, Thailand

14 L