Секция «Математика и механика»

Наилучшая упаковка частиц и обратная задача в теории сверхкритической флюидной экстракции

Саламатин Артур Андреевич
Студент
Казанский государственный университет им. В.И. Ульянова-Ленина, Факультет вычислительной математики и кибернетики, Казань, Россия
E-mail: Arthouse131@rambler.ru

В последние десятилетия растет интерес к извлечению ценных фракций масла из растительного сырья на основе сверкритических технологий. Процесс экстракции сводится к тому, что экстрагент (вещество в сверхкритическом состоянии — флюид) фильтруется через засыпку, содержащую молотое растительное сырье, растворяет в себе запасенное масло и выносит его к выходному сечению аппарата. Одна из известных моделей для описания процессов, происходящих в частицах засыпки и в поровом пространстве аппарата, называется "модель сужающегося ядра"(модель SC)[1,2]. Она подразумевает, что в частицах размера a (радиус сфер в сферическом приближении и полутолщина пластинок в плоском приближении) в каждый момент времени выделяются две зоны. В ядре $0 \le r \le R(t)$ запасы масла равны начальным, а в зоне истощения $R(t) \le r \le a$ масло полностью выработано. Для учета полидисперсии засыпки вводится в рассмотрение функция $f(a)$ — плотность объемного распределения частиц по размерам. В безразмерных переменных система уравнений модели SC имеет вид задачи Коши:

$$\frac{\partial y}{\partial z} = \int_0^{+\infty} S\left(\frac{t-y}{a^2}\right)\chi(a,z)da, \quad S = 1-(R/a)^n \tag{1}$$

$$\frac{t-y}{a^2} = \varphi(s), \quad \varphi(s) = \begin{cases} s^2, & n=1 \\ 3(1-(1-s)^{2/3})-2s, & n=3 \end{cases} \tag{2}$$

с начальным условием

$$y(t,0) = 0$$

Здесь t — время, $z \in [0;1]$ — пространственная координата, отсчитываемая от входного сечения аппарата, $\chi(a,z)$ — плотность объемного распределения частиц по размерам в сечении аппарата на высоте z, n — параметр, определяющий форму частиц, равен одному для пластинок и трем для сфер. Функции $\varphi(s)$ и $S \equiv \varphi^{-1}$ определены на отрезке $[0;1]$ и монотонно возрастают. Функция $S(x)$ формально продолжается нулем при $x < 0$ и единицей при $x > 1$. Основной практический интерес представляет функция накопленной добычи

$$y(t,z) = \int_0^t C(\tau,z)d\tau,$$

где $C(t,z)$ — концентрация в поровом пространстве аппарата.

Для модели SC в постановке (1)-(2) решена задача оптимальной упаковки засыпки в смысле наименьшего времени экстракции t_+ при заданном ограничении на функцию χ, которое определяется функцией f. Интегрируя уравнение (1) по z на отрезке $[0;1]$ и полагая $t = t_+$, получим:

$$y(t_+, 1) = 1 = \int_0^1 \int_0^{+\infty} S\left(\frac{t_+ - z}{a^2}\right)\chi(a, z)dadz$$

Так как $0 \leq S \leq 1$, то с учетом (2):

$$t_+ = \max_{z\in[0,1]}(a^2_{max}(z) + z),$$

где $a_{max}(z)$ — правая граница носителя функции $\chi(a, z)$ при фиксированном z. Наименьшее значение функционала $t_+[\chi]$ достигается при выборе функции χ в виде $\delta(a - a(z))$, где $a(z)$ определяется из условия "идеальной сортировки":

$$z = 1 - F(a), \quad a \in \Omega,$$

где $F(a)$ — функция распределения, соответствующая плотности $f(a)$, а Ω — носитель f. Оптимальное время t^o_+ выразится следующим образом:

$$t^o_+ = \max_{\Omega}(a^2 + 1 - F(a)) < 1 + a^2_{max}$$

Верхняя оценка достигается в случае "идеального перемешивания", когда $\chi(a, z) = f(a)$.

Для этого часто реализуемого на практике случая была сформулирована обратная задача определения $F(a)$ по кривой выхода масла $Y(t) \equiv y(t, 1)$, определяемой экспериментально. Для плоских частиц ($n = 1$) построено аналитическое решение. Оно сводится к решению функционального уравнения (3) относительно вспомогательной функции $G(t)$ и ее дифференцированию (4):

$$G(Y) = G(t - Y) + 1 \tag{3}$$

$$F(a) = -2a^2\frac{d}{da}\left(\frac{da}{dG(a^2)}\right) \tag{4}$$

Для частиц сферической формы $n = 3$ предлагается решать линейное функциональное уравнение $\mathrm{A}_3 f = Y$ (оператор A_3 определяется системой (1)-(2)) приближенно на основе двуслойного итерационного процесса, когда в качестве разрешающего оператора выбирается оператор A_1 для плоских частиц.

Литература

1. M. Goto, B.C. Roy, T. Hirose. Shrinking-core leaching model for supercritical fluid extraction // J. of Supercritical Fluids. 1996. V.9. P. 128-133.

2. Егоров А.Г., Мазо А.Б., Максудов Р.Н. Экстракция полидисперсного зернистого слоя молотых семян масличных культур сверхкритическим диоксидом углерода // Теоретические основы химической технологии. 2010. Т.44. No 5. С. 498-506.