

Створено математичну модель процесу вилучення цільового компоненту із матеріалу для тіл III класу. Для врахування впливу реальної форми поверхні тіла запропонована гіпотеза стабільності потоку мас. Проведено розрахунки відносної концентрації цільового компоненту при різній тривалості екстрагування. Визначено вплив температури і розміру частинок на ступінь вилучення цільового компоненту

Ключові слова: екстрагування, математична модель, тіла реальних розмірів, цільовий компонент, концентрація, розмір часток

Составлена математическая модель процесса извлечения целевого компонента из материалов для тел III класса. Для учета влияния реальной формы поверхности тела предложена гипотеза стабильности потока массы. Проведены расчеты относительной концентрации целевого компонента при различной длительности экстрагирования. Определено влияние температуры и размера частиц на степень извлечения целевого компонента

Ключевые слова: экстрагирование, математическая модель, тела реальных размеров, целевой компонент, концентрация, размер частиц

УДК664.002.05

DOI: 10.15587/1729-4061.2015.43779

МЕТОД СТАБИЛЬНОСТИ ПОТОКА МАССЫ В РАСЧЕТАХ ПРОЦЕССА ЭКСТРАГИРОВАНИЯ

Е. В. Георгиев

Аспирант

Кафедра теплоэнергетики и трубопроводного
транспорта энергоносителей
Одесская национальная
академия пищевых технологий
ул. Дворянская, 1/3,
г. Одесса, Украина, 65082
E-mail: zaklepo4ka@gmail.com

1. Введение

Математическое моделирование процессов экстрагирования вследствие многофакторности процесса и зависимости основных кинетических характеристик от длительности и способа извлечения целевого компонента не может быть описано едиными уравнениями и требует составления частных моделей, характеризующих конкретный физический объект. В настоящее время существует необходимость аналитического исследования процессов извлечения из частиц реальных размеров. В частности, при исследовании экстрагирования веществ из материалов растительного происхождения, что в настоящее время актуально для получения данных о кинетике выхода биологически активных компонентов, необходимо учитывать форму частиц, полученных после измельчения материала, которая, в основном, относится к телам третьего класса (определяющие размеры сопоставимы по трем координатным осям). Для получения необходимых данных требуется разработка математической модели экстрагирования целевого компонента из частицы с реальной формой поверхности и ее верификация, оценка влияния физических параметров (определяющий размер частиц, коэффициент массоотдачи, коэффициент диффузии, температура) на кинетику экстрагирования.

2. Анализ литературных данных и постановка проблемы

В настоящее время вопросом моделирования процесса экстрагирования целевого компонента уделяет-

ся большое внимание, что связано с необходимостью получения надежных данных по полноте извлечения целевых компонентов и оптимизации самого процесса.

Так, в работе [1] построены математические модели процесса извлечения экстрактивных веществ из сырья в форме неограниченной пластины, предназначенные для определения значения концентраций и продолжительность процесса. В работе получено выражение для поля концентраций, позволяющее получить значение концентрации в любой точке пластины для любого момента времени:

$$\Theta = \sum_{n=0}^{n \rightarrow \infty} \frac{2 \sin \mu_n}{(\mu_n + \sin \mu_n \cos \mu_n)} \cos(\mu_n X) \exp(-\mu_n^2 Fo_m), \quad (1)$$

где $Fo_m = \frac{4}{\pi^2} \ln \left(\frac{4}{\pi \Theta_{X=0}} \right)$ – массообменное число Фурье.

Целесообразность моделирования тел в форме бесконечной пластины определяется тем, что более интенсивное экстрагирование для исследуемого сырья: зёрна ячменя, желуды и корни цикория, наблюдается при их измельчении в лепестки вследствие более развитой поверхности контакта фаз и очень малой толщиной лепестка, которая определяет уменьшение извилистости капилляров.

Математическая модель экстрагирования семян масличных культур для тел, форма которых принимается соответствующей форме шара, предложена в работе [2]. Особую ценность работы представляет то, что модель учитывает процесс переноса массы целевого компонента (масла) внутри частицы, основным меха-

низмом которого является диффузионный перенос по межклеточным каналам. В [3] приведены результаты моделирования виброэкстракции пектиновых веществ из свекличного жома, которые показывают влияние вибраций на интенсивность извлечения компонентов.

В [4] приведены результаты математического моделирования процесса экстрагирования масла из твердых материалов под действием микроволнового поля. Во всех работах отмечается определяющее влияние внутренней структуры и размера частиц на основные кинетические характеристики [5].

В [6] на основе баланса теплоты и массы получена зависимость для расчета теплоты и концентрации, которая учитывает площадь поверхности контакта жидкость – твердое тело, однако не анализирует методы ее определения. Все существующие модели, целью которых является получение точных аналитических решений задач массоотдачи из твердого тела в экстрагент, основываются на известных теоретических положениях, учитывающее дифференциальное уравнение [7, 8]:

$$\frac{D\rho_i}{d\tau} = DV^2\rho_i \text{ или } \frac{Dm_i}{d\tau} = DV^2m_i. \quad (2)$$

И дифференциального уравнения массоотдачи:

$$\beta = -\frac{D}{\rho_{\text{icc}} - \rho_{\text{io}}} \left(\frac{\partial \rho_i}{\partial y} \right)_{y=0}, \quad (3)$$

где ρ_i , $m_i = \frac{\rho_i}{\rho}$ – концентрация компонента; β – коэф-

фициент массоотдачи; D – коэффициент диффузии, ρ – плотность смеси.

С учетом условий однозначности, в которые входят форма тела и начальное распределение концентрации, получают решения для частных случаев. Однако, все существующие модели не учитывают реальную форму поверхности тела.

3. Цель и задачи исследования

Целью работы является получение аналитических зависимостей для расчета концентрации целевого компонента при экстрагировании его из частиц с формой, соответствующей телам третьего класса, что позволяет расчетным путем проводить оценку степени извлечения и влияние основных характеристик на кинетику процесса.

Для достижения этой цели необходимо решить следующие задачи:

- разработать метод стабильности потока массы по аналогии с методом стабильности теплового потока;
- составить математическую модель процессам массопереноса, соответствующую процессу экстрагирования целевого компонента из капиллярно-пористого тела с учетом массоотдачи на границе для тела классической формы (шара);
- вывести обобщенную зависимость для тела третьего класса на основе полученной модели, описывающей экстрагирование из шара;
- провести вычислительный эксперимент по зависимости для реального тела и определить границы,

при которых влияние отклонения формы поверхности от классической пренебрежимо мало.

4. Материалы и методы исследования процесса экстрагирования целевых компонентов из частиц

Методом является аналитическое исследование модели экстрагирования, полученной решением дифференциального уравнения массоотдачи для тела в форме шара с помощью метода разделения переменных. Вычислительный эксперимент проведен при помощи программы, составленной с помощью средств «MathCAD».

5. Математическая модель экстрагирования

5.1. Математическая модель экстрагирования для тел классической формы (шар)

Для получения аналитической зависимости, позволяющей проводить расчеты процесса экстрагирования целевого компонента из дробленного растительного материала в форме, близкой к шару, была составлена собственная математическая модель в дифференциальном виде, решение которой позволяет найти распределение концентрации внутри шара в любой момент времени при условии, что концентрация в любой точке шара есть функция времени и радиуса r .

Рассматривается сферическое тело (шар) радиусом R с некоторым заданным начальным распределением концентрации в виде функции $f(r)$. В начальный момент времени шар помещается в среду с постоянной концентрацией $C_0 > C_{\text{cp}}$.

Дифференциальное уравнение диффузионного извлечения ЦК из частицы в форме шара для симметричной задачи записывается следующим образом:

$$\frac{\partial C}{\partial \tau} = D \frac{\partial^2 C}{\partial r^2}, \quad (4)$$

$$\tau > 0, \quad 0 < r < R.$$

Начальные и граничные условия:

$$C = f(r), \quad (5)$$

$$-\frac{D}{C - C_{\text{cp}}} \left(\frac{\partial C}{\partial r} \right)_{r=0} = \beta, \quad (6)$$

$$\frac{\partial C(0, \tau)}{\partial r} = 0, \quad C(0, \tau) \neq \infty.$$

Общее решение задачи имеет вид:

$$\begin{aligned} \frac{C - C_{\text{cp}}}{C_0 - C_{\text{cp}}} = & \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2(\mu_n)}{\mu_n - \sin(\mu_n) \cos(\mu_n)} \frac{\sin(\mu_n \frac{r}{R})}{\mu_n^2} \times \\ & \times (\sin \mu_n - \mu_n \cos \mu_n) e^{-\mu_n^2 F_0}, \end{aligned} \quad (7)$$

Принимая, что в начальный момент времени концентрация ЦК в экстрагенте равна нулю, зависимость (7) переходит к следующему виду:

$$\frac{C}{C_0} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2(\mu_n)}{\mu_n - \sin(\mu_n)\cos(\mu_n)} \frac{\sin(\mu_n \frac{r}{R})}{\mu_n^2} \times (\sin \mu_n - \mu_n \cos \mu_n) e^{-\mu_n^2 Fo_p} \quad (8)$$

Полученная зависимость позволяет рассчитать изменение относительной концентрации для тела классической формы (шар). Для расчета реальных объектов, которые представляют собой частицы неправильной формы, в рассматриваемой задаче – частицы, размеры которой по трем координатным осям являются соизмеримыми. С целью уточнения зависимости (8) предлагается использовать метод, положенный в основу метода стабильности теплового потока [9], использующий особое свойство температурного поля, благодаря которому сложное трехмерное поле реальных тел можно приближенно найти по формулам для одного из классических тел. Обоснованием для применения данного метода является аналогия процессов тепло и массопереноса.

5. 2. Разработка метода стабильности потока массы

Согласно принципу стабильности, потоки, проходящие через поверхности реального и классического тел одного класса, должны быть равны, т.е. при граничных условиях III рода:

$$J = \beta(C_n - C_{ж})F = \beta_0(t_n - t_{ж})_0 F_0, \quad (9)$$

(величины без индексов относятся к реальному телу, а с индексом «0» – к основному).

Если разность концентраций одинакова, то из (9) вытекает следующее условие, определяющее эквивалентность концентрационных полей:

$$\delta_0 = \beta \frac{F}{F_0} = \beta \chi, \quad (10)$$

где симплекс $\chi = \frac{F}{F_0}$ называют коэффициентом формы, $c > 1$.

Таким образом, расчет процесса экстрагирования целевого компонента из тела произвольной формы можно выполнять по формулам для классического тела соответствующего класса, причем в число Био следует

подставлять $\beta_0 = \beta \cdot \frac{F}{F_0} = \beta \cdot \chi$, а не истинной значение β .

При больших диффузионных числах Био условие стабильности теплового потока выразится так:

$$J = -D \left(\frac{\partial t}{\partial n} \right)_n F = -D_0 \left(\frac{\partial t}{\partial n} \right)_{n0} F_0, \quad (11)$$

откуда (при условии равенства градиентов концентрации на поверхностях обоих тел) следует, что:

$$D_0 = D \frac{F}{F_0} = D \chi, \quad (12)$$

т. е. в формулы для классического тела следует подставлять не D, а D₀.

Определяющий размер ℓ_0 , который должен входить в числа подобия, находят из условия равенства объемов реального и классического тела $V = V_0$. Для тел первого класса $\ell_0 = \frac{V}{2F_\phi}$ (F_ϕ – площадь средней плоскости тела), второго класса $\ell_0 = \sqrt{\frac{F_c}{\pi}}$ (F_c – площадь поперечного сечения тела), третьего класса $\ell_0 = \sqrt[3]{\frac{3V}{4\pi}}$.

Анализ показывает, что для средних и центральных областей тел неправильной формы метод дает достаточно точные результаты.

5. 3. Апробация расчетных зависимостей для концентрации компонентов при экстрагировании из частиц

Результаты расчета относительной концентрации $\frac{C}{C_0}$, рассчитанной по зависимости (8) для частицы в форме шара, представлены на рис. 1. Полученные данные позволяют оценить влияние радиуса частицы на выход целевого компонента.

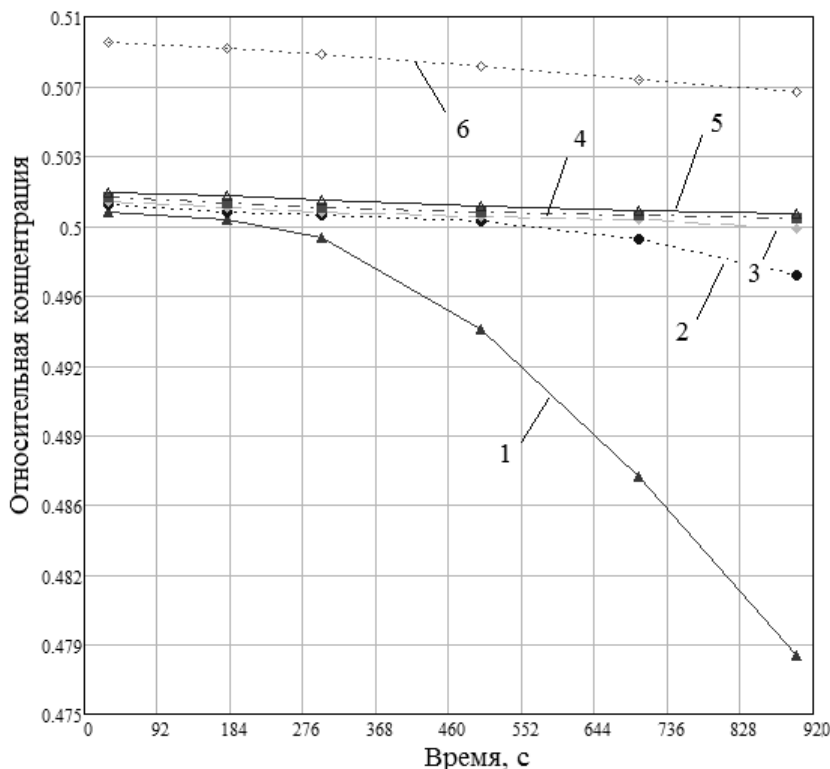


Рис. 1. Влияние размера частиц на кинетику экстрагирования: 1 – 5 мм; 2 – 8 мм; 3 – 10 мм; 4 – 12 мм; 5 – 15 мм; 6 – 20 мм

Расчеты были получены при значении коэффициента массоотдачи $\beta = 2.5 \cdot 10^{-7}$ м/с, коэффициента диффузии $D = 2 \cdot 10^{-9}$ м²/с.

Из рис. 1 видно, что наиболее интенсивно выход целевого компонента происходит при $r = 5$ мм. При переходе к $r = 8$ мм темп экстрагирования существенно снижается, и при дальнейшем увеличении радиуса частицы темп экстрагирования остается практически неизменным, причем при $r \geq 10$ мм темп экстрагирования можно считать величиной постоянной (в течение процесса) и равного $1.18 \cdot 10^{-6}$ с⁻¹.

Результаты расчета относительной концентрации для частиц кубической формы, которая по определению относится к телам 3-го класса, полученные при значениях физических параметров, аналогичным параметрам, примененным для получения данных рис. 1, приведены на рис. 2.

Сравнение данных, приведенных на рис. 1, 2 показывает, что при $r = 5$ мм $r = 8$ мм отличия в значениях относительной концентрации наблюдается для всех значений радиусов, участвующих в расчете.

В табл. 1 приведены результаты расчета для тел классической формы – шар, определяющим размером является радиус, концентрация вещества $C_{ш}$ для данной формы рассчитана по формуле (8). Варьируемыми параметрами являлись: радиус частицы $R = 2 \cdot 10^{-3} \dots 15 \cdot 10^{-3}$ м, коэффициент диффузии $D = 10^{-8} \dots 10^{-11}$ $\frac{м^2}{с}$, коэффициент массоотдачи $\beta = 10^{-4} \dots 10^{-7}$ $\frac{м}{с}$.

Диапазон выбора которых основан на

работах [1, 10, 11, 12]. Телом неправильной формы выбран куб, абсолютная концентрация для частиц данной формы рассчитана по уравнению (8) с учетом коэффициента формы.

Полученная относительная погрешность, которая определялась как отношение абсолютного изменения концентрации при переходе к расчету реальной частицы к концентрации в реальной частице, свидетельствует о том, что изменение относительной поверхности на 48 % (в зависимости от χ) приводит к изменению концентрации на 11 % – для $r = 2$ мм (наименьший радиус), и на 1 % – для $r = 20$ мм (наибольший радиус). Наименьшая погрешность соответствует $r = 10$ мм (0,01 %).

Таблица 1

Погрешность абсолютной величины концентрации вещества с учетом коэффициента формы

Определяющий размер (шар), м	Определяющий размер (куб), м	$C_{ш}$	$\frac{C_{ш}}{C_0}$	$C_{к}$	$\frac{C_{к}}{C_0}$	δ
$2 \cdot 10^{-3}$	$4 \cdot 10^{-3}$	0.0654648	0.4364319	0.0581115	0.3874099	11.23
$5 \cdot 10^{-3}$	$10 \cdot 10^{-3}$	0.0741439	0.4942929	0.0734441	0.4896276	0.94
$8 \cdot 10^{-3}$	$16 \cdot 10^{-3}$	0.0749637	0.4997579	0.0749313	0.4995418	0.043
$10 \cdot 10^{-3}$	$20 \cdot 10^{-3}$	0.0750006	0.5000040	0.0749890	0.4999264	0.01
$12 \cdot 10^{-3}$	$24 \cdot 10^{-3}$	0.0750284	0.5001895	0.0750382	0.5002547	0.013
$15 \cdot 10^{-3}$	$30 \cdot 10^{-3}$	0.0750767	0.5005111	0.0751068	0.5007118	0.04
$20 \cdot 10^{-3}$	$40 \cdot 10^{-3}$	0.0761271	0.5075141	0.0753641	0.5024273	1

δ – относительная погрешность, %

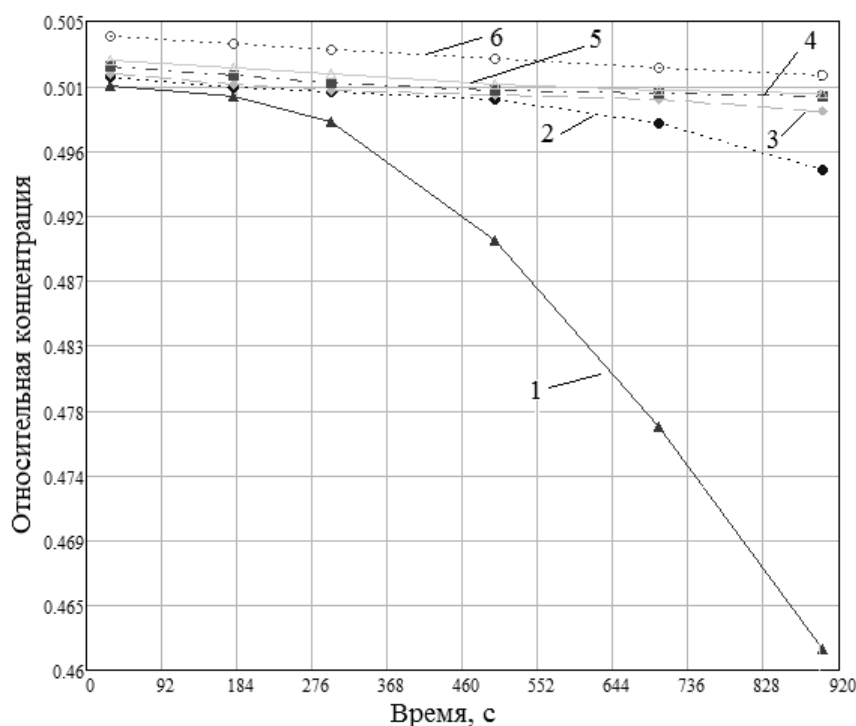


Рис. 2. Влияние размера частиц на кинетику экстрагирования: 1 – 5 мм; 2 – 8 мм; 3 – 10 мм; 4 – 12 мм; 5 – 15 мм; 6 – 20 мм

Таким образом, принимая принцип стабильности потока массы, можно уточнить расчетные данные по концентрации целевого компонента в зависимости от характерного размера частицы. При размере частиц больше 5 мм влияние формы реального тела (для тел третьего класса) пренебрежимо мало и расчеты можно проводить по зависимости, полученной для тел классической формы, в рассматриваемой задаче – в форме шара. В табл. 1 приведены данные по погрешности расчета концентрации, относительной

$\frac{C}{C_0}$ и абсолютной C , позволяющие оценить, как влияет определяющий размер частицы (r – для шара, l – для реального тела) на точность расчета при переходе от идеализированного тела к реальному.

Для оценки влияния изменения относительной погрешности по радиусу частицы были выбраны следующие параметры: радиус ча-

стицы – от 2 до 20 мм, длительность экстрагирования 500 с. Графически влияние радиуса частицы на точность определения концентрации представлено рис. 3

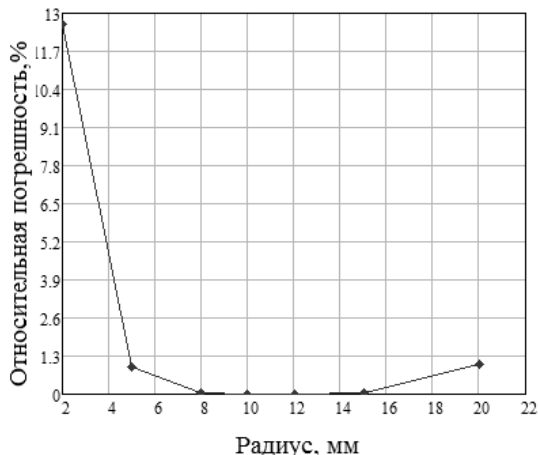


Рис. 3. Влияние радиуса частицы на точность расчета относительной концентрации

Представленные результаты были получены при фиксированных значениях коэффициента массоотдачи и коэффициента диффузии. Расчетное исследование влияния коэффициента массоотдачи на кинетику экстрагирования показало, что при увеличении $\beta = 2.5 \cdot 10^{-7}$ до $\beta = 2.5 \cdot 10^{-5}$ м/с, скорость экстрагирования увеличивается в 1,4 раза для частицы радиусом 10 мм. Коэффициент диффузии изменялся от $D = 2 \cdot 10^{-11}$ до $D = 2 \cdot 10^{-8}$ м²/с.

Увеличение коэффициента диффузии существенно интенсифицирует экстрагирование (рис. 4), что верно отражает физический процесс.

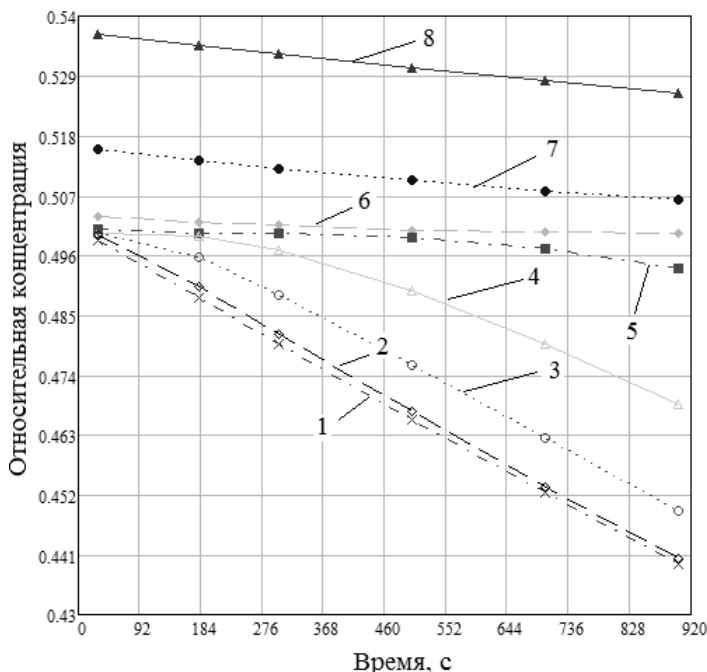


Рис. 4. Влияние коэффициента диффузии на выход целевого компонента: $\beta = 2.5 \cdot 10^{-7}$ м/с; $r = 5$ мм: 1 – $3 \cdot 10^{-11}$ м²/с; 2 – $9 \cdot 10^{-11}$ м²/с; 3 – $3 \cdot 10^{-10}$ м²/с; 4 – $9 \cdot 10^{-10}$ м²/с; 5 – $3 \cdot 10^{-9}$ м²/с; 6 – $9 \cdot 10^{-9}$ м²/с; 7 – $3 \cdot 10^{-8}$ м²/с; 8 – $3 \cdot 10^{-8}$ м²/с

Как указывается в работах [10], посвященных определению коэффициента диффузии, при использовании традиционных методов его порядок составляет 10^{-9} м²/с. При применении метода микроволновой экстракции это значение увеличится вследствие того, что возникают дополнительные механизмы переноса [8].

Полученная модель демонстрирует возможность получения корректных данных для всех возможных условий ведения процесса экстрагирования, а специфика используемых методов учитывается коэффициентами массоотдачи и диффузии, точность получения которых определяет точность расчетных данных.

6. Обсуждение результатов математического моделирования процесса экстракции

Результаты апробации математических моделей, полученных автором в работе, свидетельствуют о принципиальной новизне подхода к моделированию процесса экстрагирования из частиц реальных размеров. Следует отметить, что в настоящее время имеются корректные математические представления экстракции для тел классической формы, которые в определенных условиях применения приводят к получению корректных результатов [1–3]. Однако для тел реальных размеров моделирование до настоящего времени не проводилось. Основываясь на аналогии процессов переноса теплоты и массы и на сведениях, полученных при развитии метода стабильности теплового потока, можно сформулировать метод стабильности потока массы, который является относительно простым и эффективным способом учета отклонений формы тела (частицы) от классической, позволяющий получить данные о кинетике экстрагирования целевого компонента из тела реальных размеров. Ограничением метода является то, что в рассматриваемом приближении концентрационные поля на поверхности частицы будут существенно отличаться от полей классических тел, что не может быть учтено в данном случае. В данной работе метод описан и апробирован для тел III класса, в дальнейшем предполагается получить и исследовать подобные модели для тел I и II класса. Представляется, что предложенный метод позволит расчетным путем с приемлемой погрешностью определять кинетику экстрагирования, что представляет интерес как для аналитического исследования особенностей процесса, так и для оптимизации режимных параметров при производстве экстрактов.

7. Выводы

Разработан метод стабильности потока массы, позволяющий расчетным путем определять концентрацию целевого компонента в процессе экстрагирования. Теоретическими предпосылками для данного метода является метод стабильности теплового потока и существующая аналогия процессов тепло- и массообмена.

Составлена математическую модель процессам массопереноса при экстрагировании целе-

вого компонента из частицы с учетом массоотдачи на границе для тела в форме шара.

Получена обобщенная зависимость для расчета концентрации по аналитическим формулам для тел в форме шара, в которых учитывается отклонение от формы реального тела.

Проведенный вычислительный эксперимент подтвердил соответствие полученной математической

модели физическому процессу экстрагирования. Сопоставление расчетных данных по концентрации целевого компонента, полученных для реального тела и идеального, показало, что применение метода стабильности теплового потока позволяет учесть отклонение формы и снизить погрешность расчета, которая тем больше, чем меньше определяющий размер частицы.

Литература

1. Плюха, С. Ю. Разработка и научное обоснование способа экстрагирования из ячменя, желудей и цикория жидким диоксидом углерода [Текст]: автореф. дис. ... к-та. техн. наук / С. Ю. Плюха. – Воронежский ун-тет инженерных технологий» (ФГБОУ ВПО «ВГУИТ»), 2012. – 19 с.
2. Максудов, Р. Н. Математическая модель экстрагирования семян масличных культур сверхкритическим диоксидом углерода [Текст] / Р. Н. Максудов, А. Г. Егоров, А. Б. Мазо, В. А. Аляев, И. Ш. Абдуллин // Журн. «Сверхкр. флюиды: Теория и практика». – 2008. – Т. 3, № 2. – С. 20–32.
3. Мищенко, Е. В. Моделирование процесса экстракции пектиновых веществ из свекличного жома с применением вибрационного воздействия [Текст] / Е. В. Мищенко, В. Я. Мищенко // Метод. Вопросы развития с.-х. биотехнологии: Вестник ОрелГАУ. – 2011. – № 3. – С. 80–82.
4. Белобородов, В. В. Экстрагирование из твердых материалов в электромагнитном поле сверхвысоких частот [Текст] / В. В. Белобородов // Инж.-физ. журнал. – 1999. – Т. 72, № 1. – С. 141–146.
5. Белобородов, В. В. Основные процессы производства растительных масел [Текст] / В. В. Белобородов. – М.: Пищ. пром, 1966. – 474 с.
6. Лыков, А. В. Тепломассообмен [Текст]: справочник / А. В. Лыков. – М.: Энергия, 1978. – 480 с.
7. Теория тепломассообмена [Текст] / под ред. А. И. Леонтьева. – М.: Высшая школа, 1979. – 495 с.
8. Chemat, F. Microwave-assisted extraction for bioactive compounds. Theory and practice [Text] / F. Chemat, G. Grivotto. – New York: Springer, 2013. – 248 p.
9. Вейник, А. И. Приближенный расчет процессов теплопроводности [Текст] / А. И. Вейник. – М.: Гос. энерг. изд, 1959. – 183 с.
10. Лысянский, В. М. Экстрагирование в пищевой промышленности [Текст] / В. М. Лысянский, С. М. Гребенюк. – М.: Агропромиздат, 1987 – 182 с.
11. Потапов, А. Н. Исследование диффузионных свойств рябины обыкновенной (*Sorbus Aucuparia* L.) [Текст] / А. Н. Потапов // Техн. и технол. пищ. произв. – 2012. – № 4. – С. 1–5.
12. Пушанко, Н. Н. Гидродинамические условия экстрагирования и эффективность работы диффузионных установок [Текст] / Н. Н. Пушанко, В. Н. Кухар // AvgustcropProtection. – 2013. – № 11. – С. 2–6.