Modelování jednostupňové extrakce

Grygar Vojtěch

Soutěžní práce
2009

Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně
Fakulta aplikované informatiky

OBSAH

ÚVOD

Součástí mnoha technologických procesů jsou operace, které jsou založeny na principu extrakce. Extrakcí nazýváme separační (difúzní, dělící) metodu, která ke své činnosti využívá vlastnosti difúze tj. samovolného přenosu látky pohybem molekul, z oblasti vyšší koncentrace, do oblasti s nižší koncentrací vlivem tepelného pohybu. Mezi extrakční procesy se řadí prací procesy, které jsou součástí téměř každé technologie. Proto je velmi významné se zabývat jejich optimalizací.

Hlavním cílem extrakce je získat cenné popř. nežádoucí rozpustné látky ze surovin, které lze rozpustit v kapalných rozpouštědel v tzv. extrakčních činidel. Suroviny, jenž jsou extrahovány, se spolu s extrakčními činidly směšují ve speciálních zařízení, zvaných extraktory, které jsou součástí extrakčních zařízení. Tato zařízení lze dělit na jednostupňové a mnohastupňové a na zařízení s nepřetržitým nebo periodickým provozem.

Použitím nevhodných zařízení nebo extrakčních činidel popř. jejich množství se proces stává méně účinným nebo finančně nákladným, což se promítá do ceny výroby. Proto je nutné tyto procesy optimalizovat a navrhnout použití vhodného extrakčního zařízení s co nejmenším množství rozpouštědla, aby bylo dosaženo co nejlepších výsledků a tím se zredukovaly náklady daného procesu na minimum.

Pro minimalizaci nákladů je nezbytné tyto procesy optimalizovat cestou přímého či nepřímého modelování a následně je nutné provést verifikaci modelu.

Podstata přímého modelování spočívá v provádění experimentálního pokusu na modelu reálného zařízení. Pomocí této metody je snahou bez výpočtů a matematických analýz získat odpověď na to, jak se zkoumané zařízení bude chovat v provozu.

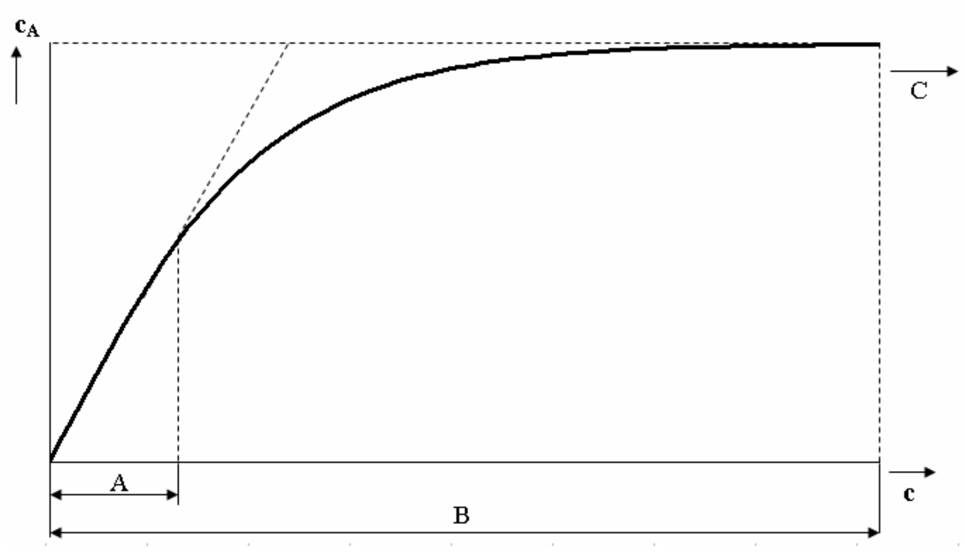
U nepřímého modelování se model popisuje matematicky, tj. sestavuje se matematický model, který by měl co nejpřesněji popisovat mechanismus procesu. Je zřejmé, že se během provozu zařízení mohou měnit vlastnosti některých surovin, jak z fyzikálního, tak i chemického hlediska, dále není možné vytvořit takové matematické modely, které by zahrnovaly všechny vlastnosti procesů, protože by nejen jejich určování bylo komplikované, ale i řešení těchto modelů by bylo obtížnější a složitější. Proto se při sestavování matematických modelů vychází ze zjednodušených vlastností procesů. Provedením experimentu pomocí navrženého matematického modelu mluvíme o tzv. simulaci zařízení.

1 MODELOVÁNÍ PRACÍCH PROCESŮ

Účelem je snížení množství složky v pevné fázi, přičemž se využívá rozdílných chemických potenciálů prané složky v pevné fázi a prací lázní. V provozních podmínkách pracího procesu se může měnit pevná fáze, ať už po chemické nebo fyzikální stránce, což nejen komplikuje určení matematického modelu, ale činí řešení těchto modelů značně obtížným a složitým. Složitost a pracnost obecného řešení může v některých případech překrývat i praktický účel modelování technologických procesů. Z tohoto důvodu se nebudeme zabývat modely, které berou v úvahu i podstatnou změnu pevné fáze během pracího procesu. To znamená, že pod pojmem prací proces budeme rozumět takovou technologickou operaci, kdy během praní je podstatné a rozhodující snížení množství vypírané složky, přičemž změny pevné fáze během pracího procesu jsou zanedbatelné. [1]

1.1 Termodynamika pracího procesu

Optimalizujeme-li prací proces, je důležité vědět, zda vypíraná složka je vázaná na pevnou fázi či nikoliv, což lze zjistit stanovíme-li sorpční izotermy, tj. závislost rovnovážné koncentrace vypírané složky v pevné fázi na rovnovážné koncentraci složky v lázni. Pojmem rovnovážná koncentrace se rozumí taková koncentrace, která se nemění s časem při konstantních podmínkách experimentu, tzn. nemění se vlastnosti systému jako celku – teplota, tlak, složení apod. Obecná sorpční křivka je zobrazena na obr.1.



Obrázek 1.1 obecná sorpční izoterma

Podstatné je zjistit, ve které části sorpční izotermy se nachází stav vypírané složky. V oblasti označené “C” je vypíraná složka volná – neváže se. V části “B” je vypíraná složka vázaná na pevnou fázi. V zóně “A” je sorpční závislost prakticky lineární, přičemž konstanta úměrnosti nám charakterizuje sílu vazby na pevnou fázi, tzn. do značné míry dovoluje určit jak je praní v této oblasti účinné. [2]

1.2 Dynamika pracích procesů

U většiny uspořádání pracího procesu ve zpracovatelské technologii je rychlost dosažení uvažovaného stupně praní dána transportním procesem, tzn. že k popisu jednotlivých pracích procesů použijeme difúzní modely.

1.2.1 Vypírání vázané složky – lázňové praní

Difúzními modely se rozumí takové matematické modely, u kterých se předpokládá, že transport vypírané složky uvnitř pevné fáze se dá popsat difúzní rovnicí jejíž řešením je koncentrační pole uvnitř pevné fáze a časová závislost prané složky v okolní kapalině. Vztah mezi koncentrací vázané složky a koncentrací téže složky nevázané je lineární.

Základním matematickým modelem lázňového praní je difúzní model [1]

$$\frac{\partial c}{\partial t}(x,t) = k\,\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}(x,t) \qquad t > 0\,,\, 0 \le x \le b \tag{1.1}$$

kde

$$k = \frac{D}{1+K} \tag{1.2}$$

symetrii koncentračního pole v pevné fázi značí podmínka

$$\frac{\partial c}{\partial x}(0,t) = 0 \tag{1.3a}$$

Bilanční vztah, podle kterého je rychlost sdílení hmoty prané složky na povrchu tuhé fáze rovna akumulaci této složky v lázni

$$V_o \frac{\partial c_p}{\partial t}(t) = -DS \frac{\partial c}{\partial x}(b,t) \tag{1.3b}$$

okrajová podmínka prvního druhu – předpoklad dokonalého míchání fáze

$$c(b,t) = c_0(t) \tag{1.3c}$$

na začátku praní je konstantní rozdělení koncentrace v tuhé fázi

$$c(x,0) = \varepsilon \cdot c_p \tag{1.3d}$$

pro lázňové praní je použita čistá kapalina

$$c_0(0) = 0 \tag{1.3e}$$

Pro obecnější vyjádření a zjednodušení výpočtu byly zavedeny bezrozměrné veličiny

$$C = \frac{c}{c_p} \tag{1.4a}$$

$$C_0 = \frac{c_0}{c_p} \tag{1.4b}$$

$$Fo = \frac{kt}{b^2} \tag{1.4c}$$

$$X = \frac{x}{b} \tag{1.4d}$$

$$Na = \frac{Vc}{V} \tag{1.4e}$$

Aplikací bezrozměrných kritérií na rovnice (3.3) se získá bezrozměrný matematický model lázňového praní vázané složky [1]

$$\frac{\partial C}{\partial Fo}(X, Fo) = \frac{\partial^2 C}{\partial X^2}(X, Fo) \tag{1.5}$$

$$\frac{\partial C}{\partial X}(0) = 0 \tag{1.6a}$$

$$-\frac{Na}{1+K}\frac{\partial C_0}{\partial Fo}(Fo) = \frac{\partial C}{\partial X}(1, Fo) \tag{1.6b}$$

$$C(X, 0) = 1 \tag{1.6c}$$

$$C_0(0) = 0 \tag{1.6d}$$

$$C(1, Fo) = \varepsilon C_0(Fo) \tag{1.6e}$$

Rovnice (3.6) představují matematický model lázňového praní vázané složky v bezrozměrném tvaru. Řešení je provedeno Laplaceovou transformací pomocí obrazu difúzní rovnice.

Po vyřešení získáme kořeny transcendentní rovnice

$$-\frac{Na \cdot q}{\varepsilon(1+K)} = tg(q) \tag{1.7}$$

Výsledné řešení koncentrace vypírané látky v tuhé fázi [1]

$$C = \frac{\varepsilon(1+K)}{\varepsilon(1+K)+Na} -$$

$$-2 \cdot Na \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\cos(X \cdot q_n) \cdot \exp\left(-Foq_n^2\right)}{\varepsilon(1+K) \cdot \cos(q_n) - \frac{\varepsilon(1+K)}{q_n}\sin(q_n) - Na \cdot q_n \cdot \sin(q_n)} \tag{1.8}$$

Koncentrace vypírané látky v lázni

$$C_0 = \frac{1}{\varepsilon(1+K)+Na} - 2 \cdot \frac{Na}{\varepsilon(1+K)} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\exp\left(-F_0 q_n^2\right)}{\varepsilon(1+K) + Na + \frac{q_n^2 \cdot Na^2}{\varepsilon(1+K)}} \tag{1.9}$$

Stupeň pracího procesu

$$y = \frac{Na}{\varepsilon(1+K)+Na} - 2 \cdot \frac{Na^2}{\varepsilon(1+K)} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\exp\left(-Foq_n^2\right)}{\varepsilon(1+K)+Na+\frac{q_n^2 \cdot Na^2}{\varepsilon(1+K)}} \qquad (1.10)$$

kde q_n jsou kořeny rovnice (2.17)

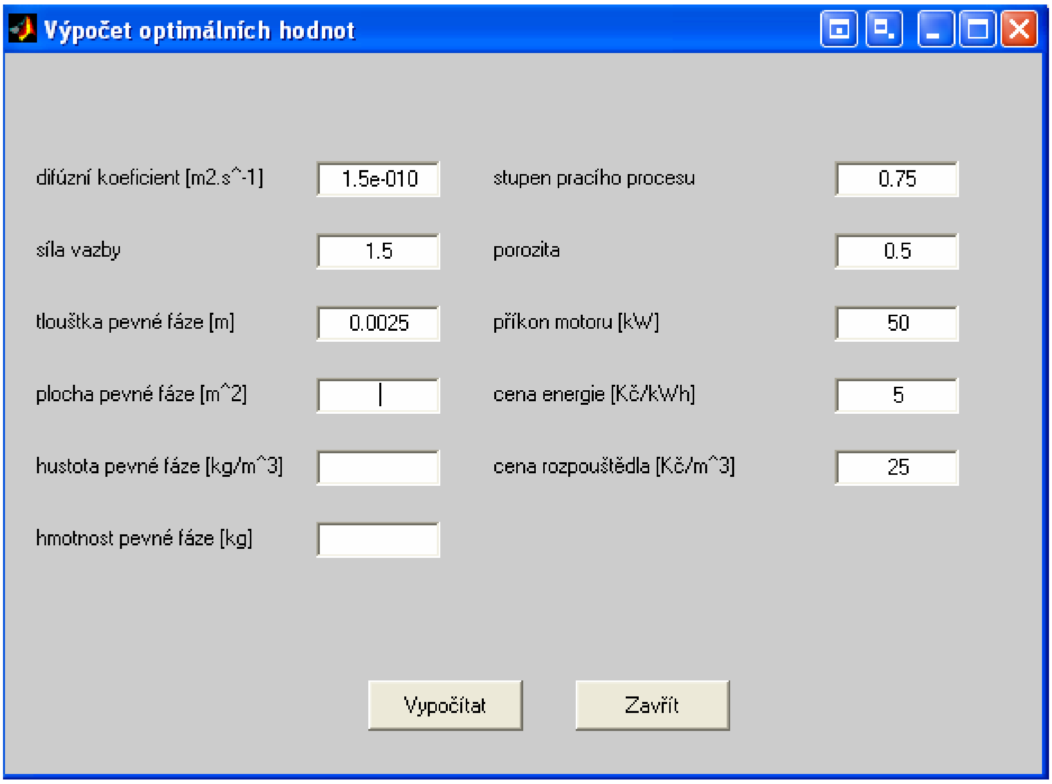
kde

Na – spotřeba činidla, *K*- síla vazby, ε-porozita, q_n - kořeny transcendentní rovnice, *Fo* – bezrozměrný čas

2 PROGRAMOVÁ APLIKACE

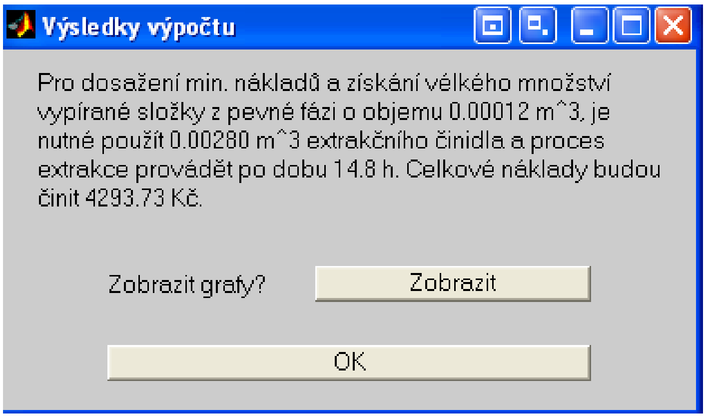
Nalezení optimálních hodnot

Prvním a hlavně důležitým úkolem, je nalezení optimálního množství spotřebovávaného extrakčního činidla Na, stanovit minimální náklady pro extrakci a určit dobu provádění procesu. Na obr.2 je vidět okno programu pro zadávání hodnot, jenž je nutné pro daný výpočet optimálních hodnot zadat.

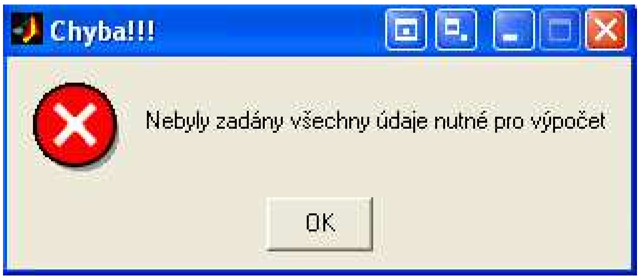


Obr.2 – okno pro výpočet optimálních hodnot

Jsou-li vyplněna všechna pole důležitá pro výpočet, tak po stisku tlačítka “Vypočítat” dojde k vypočítání optimálních hodnot a k jejich zobrazení v dalším okně – obr.3. V opačném případě se zobrazí zpráva na obr.4 a je nutné doplnit chybějící údaje.



Obr.3 – okno zobrazující optimální hodnoty

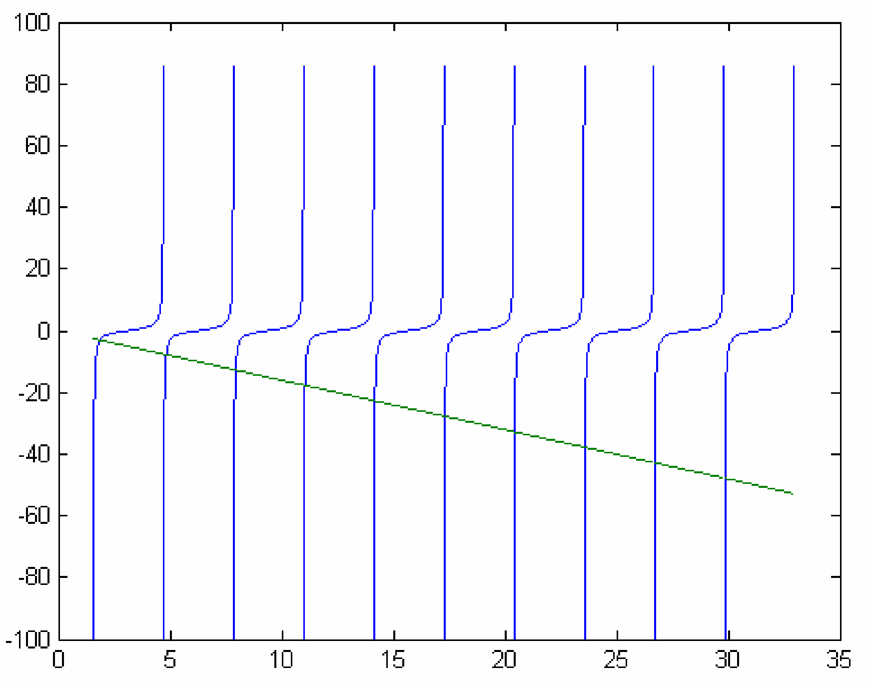


Obr.4 – chybová hláška

Hledání kořenů transcendentní rovnice

Abych se dopočítal k optimálním výsledkům, musel jsem nejdřív nalézt kořeny transcendentní rovnice (3.7),tzn. nalézt průsečíky přímky s tangentoidami:

$$-\frac{Na \cdot q}{\varepsilon(1+K)} = tg(q)$$



Obr.4 – průsečíky přímky s tangentami

Průsečíky hledám tak, že rovnici (3.7) upravím do tvaru :

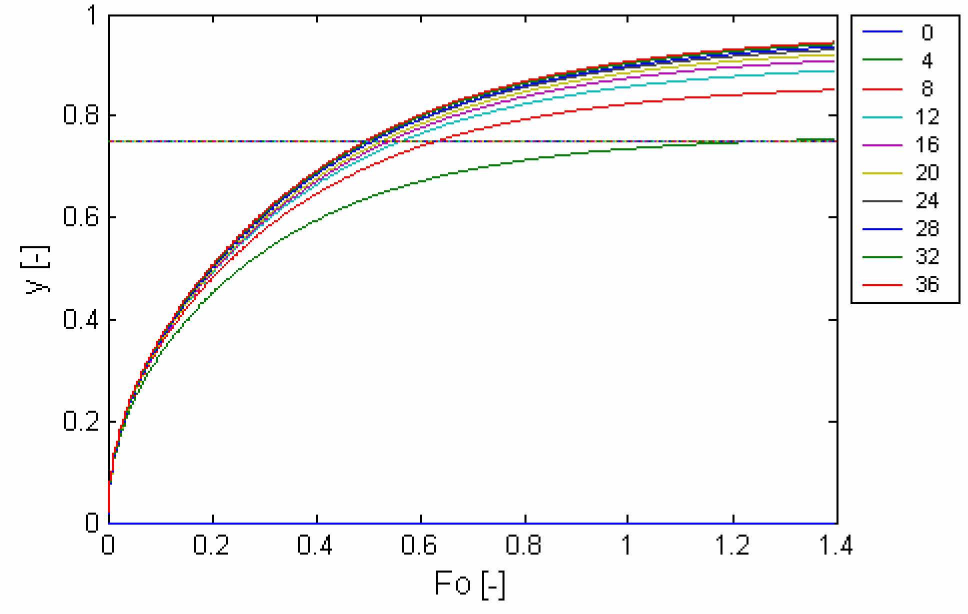
$$tg(q) + \frac{Na \cdot q}{\varepsilon(1+K)} = 0 \tag{3.11}$$

A hledám takové hodnoty rovnice (3.11), jenž procházejí 0.

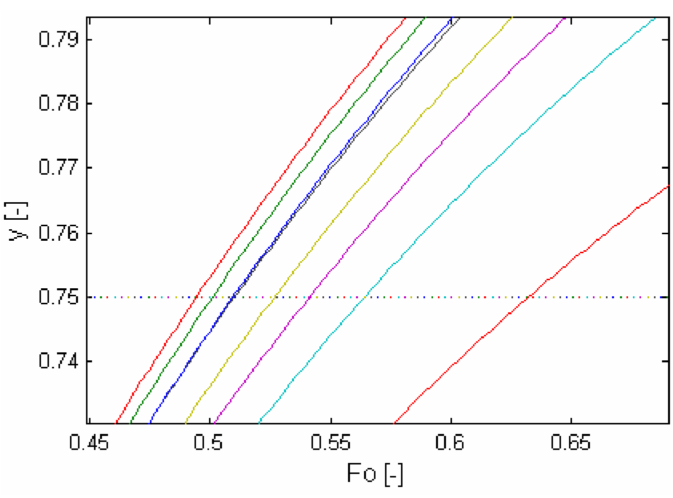
Závislost pracího procesu na bezrozměrném čase

Po nalezení těchto kořenů q(i),je do rovnice (3.10) ,pro výpočet pracího procesu, dosazována hodnota Na z předem definovaného intervalu, za účelem zisku několika závislostí pracího procesu na bezrozměrném čase Fo obr.5

$$y=\frac{Na}{\varepsilon(1+K)+Na}-2\cdot\frac{Na^2}{\varepsilon(1+K)}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{\exp\left(-Foq_n^2\right)}{\varepsilon(1+K)+Na+\dfrac{q_n^2\cdot Na^2}{\varepsilon(1+K)}}$$



Obr.5 – závislosti pracího procesu na bezrozměrném čase pro různé spotřeby činidel Na



Obr.6 detail grafu na obr.5

Z křivek, jenž procházejí žádanou hodnotou pracího procesu (v tomto případě 0.75), získáme čas a hodnoty spotřeby extrakčních činidel pro vykreslení nákladové křivky.

Nákladová křivka

Rovnice nákladové křivky je dána součtem nákladů na spotřebovávanou energii Ne a nákladů na spotřebovávané extrakční činidlo Nc

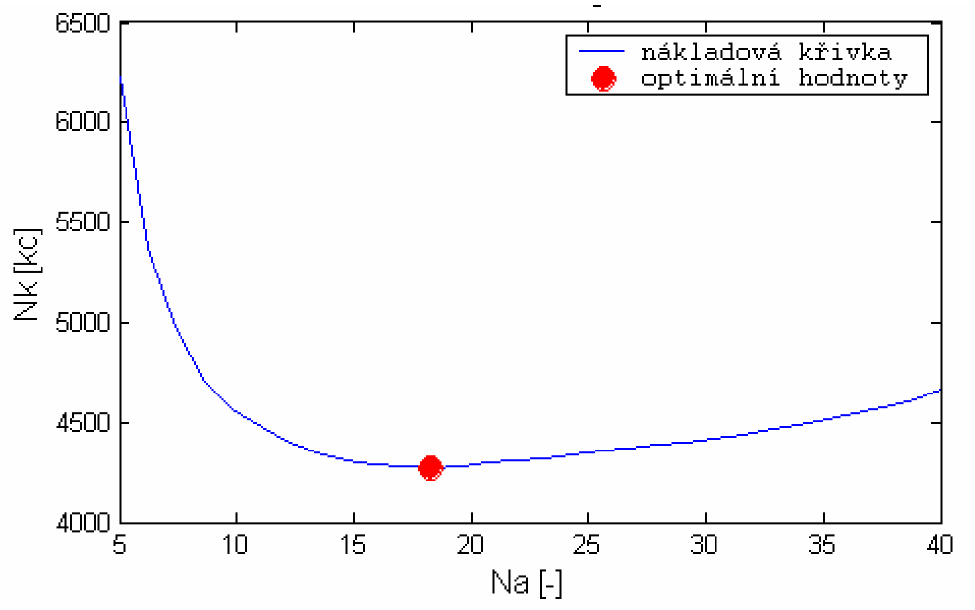
$$Nk=Ne+Nc$$

Náklady energie jsou dány součinem ceny elektrické energie *ke*, příkonu motoru *P* pro pohon míchadla a času *t*

$$Ne=ke*P*t$$

Náklady na spotřebovávané činidlo jsou dány součinem ceny činidla *kc* a jeho objemu *Vo*

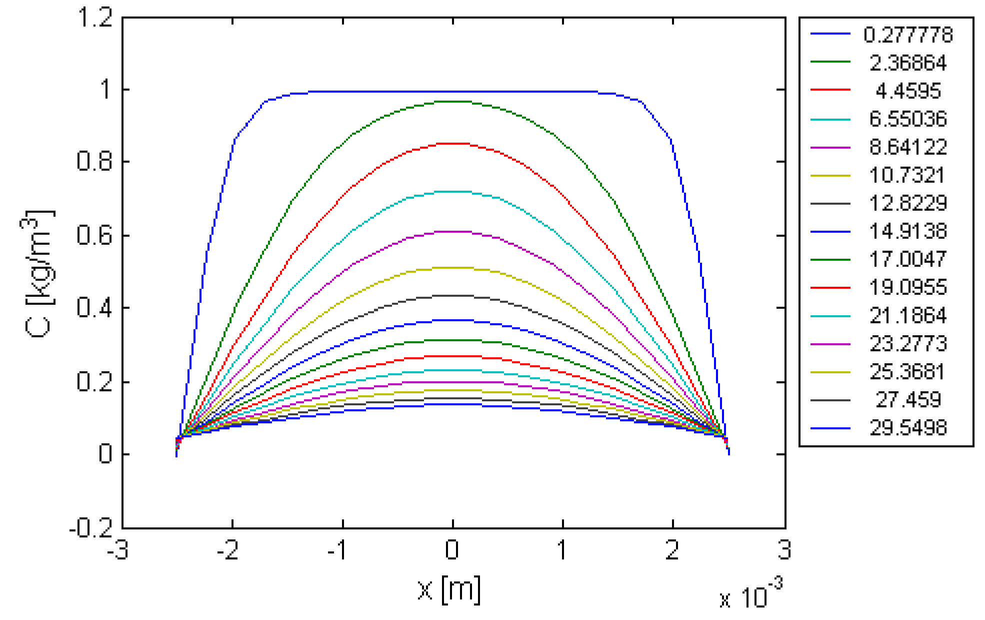
$$Nc=kc*Vo$$



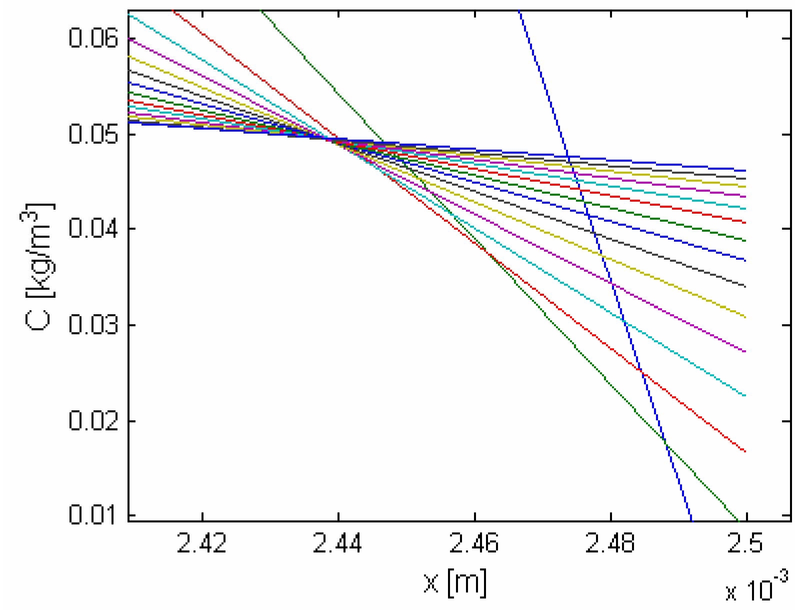
Obr.7 – nákladová křivka

Koncentrační pole vypírané složky z tuhé fáze

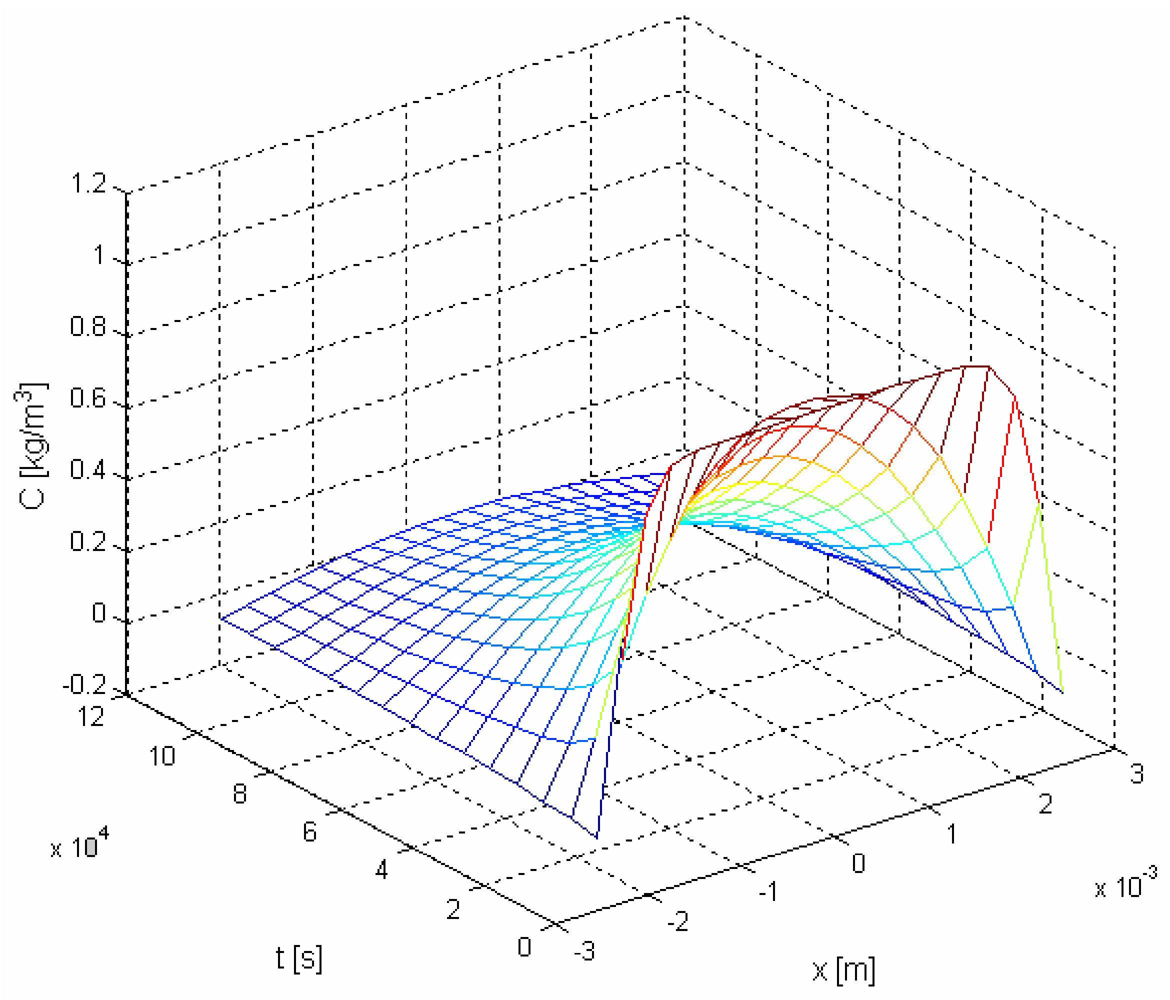
Dosazením zjištěné optimální hodnoty spotřeby činidla Na, doby vypírání a tloušťky pevné fáze jsem schopen vytvořit 2D a 3D graf koncentračního pole v tuhé fázi. Zmíněné grafy jsou uvedeny na obr.7 a obr.8



Obr.8 – 2D graf koncentračního pole vypírané složky v tuhé fázi

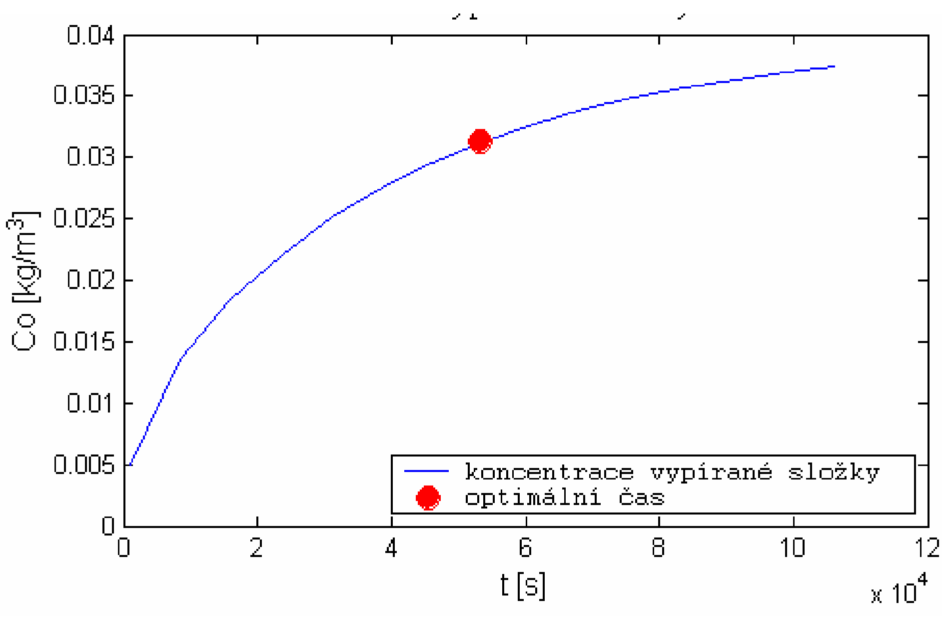


Obr.9 – detail grafu z obr.8



Obr.9 – 3D graf koncentračního pole vypírané složky v tuhé fázi

Koncentrace vypírané složky v lázni



Obr.10 – koncentrace vypírané složky v lázni

ZÁVĚR

Protože extrakce je součástí mnoha technologických procesů, vede její optimalizace k úsporám nákladů na proces, úsporám množství extrakčního činidla a následně k snížení vzniklých kapalných odpadů během operace extrakce, což vede k ochraně životního prostředí.

Pro optimalizaci procesu jsem na základě řešeného deterministického difúzního modelu extrakce vytvořil funkční programovou aplikaci v prostředí Matlab, pomocí níž lze nalézt optimální množství extrakčního činidla, stanovit dobu provozu procesu a určit minimální náklady pro extrakci z pevné fáze na základě odvozené nákladové funkce.

Program dále umožňuje zobrazit nákladovou křivku, 2D a 3D graf koncentračního pole vypírané složky z tuhé fáze a koncentraci vypírané složky v lázni.

Programová aplikace bude využívána nejen při výuce, ale také jí bude možno využít pro technické výpočty v praxi, protože hodnoty vypočítává ve zlomcích sekundy na rozdíl od ručního počítání, kdy jsou výpočty komplikované např. zjištění kořenů transcendentní rovnice.

SEZNAM POUŽITÉ LITERATURY

[1] KOLOMAZNÍK, K. Modelování zpracovatelských procesů. Brno:VUT v Brně, určeno pro posluchače FT ve Zlíně, 1990. s. 51-79. ISBN 80-214-0114-1.

[2] JANÁČOVÁ, D. *Modelování extrakčních procesů*. Zlín: UTB ve Zlíně, teze habilitační práce, 2002. s.20, ISBN 80-248-0194-9

[3] ZAPLATÍLEK, K., DOŇAR, B., MATLAB pro začátečníky. Praha 2007,

ISBN 80-7300-175-6

[4] ZAPLATÍLEK, K., DOŇAR, B., MATLAB tvorba uživatelských aplikací. Praha 2005, ISBN 80-7300-133-0

[5] PERŮTKA, K., MATLAB – základy pro studenty automatizace a informační technologie. UTB ve Zlíně 2005, ISBN 80-7318-355-2

[6] KOVÁŘÍK, M., Počítačové zpracování dat v programu MATLAB, Bučovice 2008,

ISBN 978-8087106-09-9