

Секция «Математика и механика»

Постановка задачи оптимизации процесса сверхкритической флюидной экстракции и подходы к ее решению

Саламатин Артур Андреевич

Аспирант

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Институт математики и механики им. Н.И. Лобачевского, Казань, Россия

E-mail: Arthouse131@rambler.ru

Процесс сверхкритической флюидной экстракции (СФЭ) заключается в том, что молотое растительное сырье, помещенное в аппарат-экстрактор постоянного сечения, омывается экстрагентом, находящимся в сверхкритическом состоянии. Во время экстракции растворитель фильтруется через зернистый слой молотых гранул растительного сырья, растворяет в себе запасенное в сырье масло и выносит его к выходному сечению аппарата. Описанный процесс экстракции считается безвредным в отличие от традиционных методов, которые используют органические растворители, оказывающие губительное воздействие на окружающую среду. Как правило, в качестве экстрагента в этом процессе используется диоксид углерода, являющийся нетоксичным, невзрывоопасным и имеющий газообразную форму при комнатной температуре, что позволяет с легкостью отделять его от экстракта. По этим причинам во многих странах, включая Россию, увеличивается интерес к СФЭ [4].

В связи с промышленным применением этой технологии актуальными становятся и вопросы ее оптимизации, которая может проходить по двум независимым направлениям: обеспечение селективности экстракции ("химическое" направление) за счет выбора подходящих давления и температуры процесса и увеличение темпов выработки целевых веществ ("технологическое" направление) за счет изменения скорости фильтрации и степени измельчения сырья.

В данной работе рассматривается второе, технологическое, направление. В результате исследования основных стадий СФЭ было выделено три функциональных параметра оптимизации, а именно: функция F распределения частиц по размерам, функция упаковки χ , описывающая способ упаковки молотых частиц сырья в аппарат, а также зависимость скорости фильтрации v от времени. Постановка задачи оптимизации состоит в минимизации времени t_+ полной экстракции масла из зернистого слоя за счет выбора соответствующих значений параметров $\{F, \chi, v\}$ при ограниченном объеме доступного растворителя. Его количество равно минимальному объему растворителя, способному полностью растворить исходные запасы масла в сырье при заданных давлении и температуре. А на функцию χ накладывается естественное ограничение

$$f(a) = \int_0^1 \chi(a, z) dz,$$

выражающее закон сохранения числа частиц заданного размера, то есть запрещается дополнительное измельчение или объединение имеющихся частиц. Здесь z — безразмерная пространственная координата, нормированная на высоту аппарата и отсчитываемая от входного сечения аппарата вдоль его оси, a — безразмерный размер частиц, $f(a)$ — плотность функции распределения F .

В рамках модели сужающегося ядра (SC) [1,2] аналитически было показано, что можно уменьшить число параметров оптимизации, зафиксировав способ упаковки частиц. Так называемая локально монодисперсная стратифицированная (ЛМС) упаковка минимизирует время t_+ среди всех возможных способов упаковки для любой фиксированной пары $\{F, v\}$. Важной особенностью этого способа упаковки, является то, что она, среди прочих оптимальных упаковок, максимизирует долю $Y(t)$ масла, извлеченного из аппарата в каждый момент времени экстракции. Эти результаты справедливы для частиц сферической, цилиндрической и плоской формы.

ЛМС упаковка подразумевает, что частицы должны быть отсортированы по размеру и упакованы в аппарат так, чтобы у входного сечения располагались наиболее крупные частицы, а их размер монотонно уменьшался к выходному сечению аппарата. Соответствующая зависимость a_s размера частиц a от высоты z аппарата определяется из следующего неявного выражения

$$F(a_s(z)) = 1 - z.$$

Для доказательства оптимальности ЛМС упаковки исходная математическая формулировка модели SC была заменена на эквивалентную задачу Коши относительно искомой функции $y(z, t)$ — доли масла, выработанного из части зернистого слоя $[0, z]$ к моменту безразмерного времени t

$$\frac{\partial y}{\partial z} = \int_0^{+\infty} s \left(\frac{t-g}{a^2} \right) \chi(a, z) da, \quad y(0, t) = 0$$

$$\varphi(s) = \min \left(1, \frac{t-g}{a^2} \right), \quad g = \frac{y}{v} + \int_0^t y \frac{\dot{v}}{v^2} dt$$

В новой постановке задачи время t рассматривается как параметр, s — доля масла, выработанного из частицы. Аналитический вид функции φ зависит от формы частиц, но для каждого из трех рассматриваемых типов частиц, эта функция монотонно возрастает на отрезке $[0, 1]$, что позволяет определить обратную функцию $s = \varphi^{-1}$.

Рассмотрение новой постановки задачи позволило показать, что за счет двух типов операций перераспределения частиц в аппарате от произвольной упаковки можно перейти к ЛМС упаковке. При этом каждая из этих операций не уменьшает значение функции Y в любой момент времени экстракции.

В случае постоянной скорости фильтрации задача оптимизации решена полностью [3], а также показано, что глобальный минимум времени t_+ достижим при использовании ЛМС упаковок. В этом случае существует целый класс нетривиальных функций распределения, доставляющих глобальный минимум функционалу t_+ .

В настоящее время проводятся попытки ослабить ограничения, накладываемые на класс оптимальных функций распределения частиц, за счет варьирования скорости фильтрации. Для этого применяются как численные, так и аналитические подходы. В случае плоского приближения формы частиц получены автомодельные решения для степенных функций $v(t)$. Эти решения, а также численные расчеты для сферических частиц демонстрируют целесообразность поиска оптимальной скорости фильтрации, позволяющей ослабить ограничения на класс оптимальных распределений F . Из полученных на текущий момент результатов видно, что такая зависимость $v(t)$ должна быть монотонно убывающей и зависит от рассматриваемой формы частиц.

Литература

1. Егоров А.Г., Мазо А.Б., Максудов Р.Н. Экстракция полидисперсного зернистого слоя молотых семян масличных культур сверхкритическим диоксидом углерода // Теорет. основы хим. технологии. 2010. Т. 44, № 5. С. 498–506.
2. Егоров А.Г., Саламатин А.А., Максудов Р.Н. Прямые и обратные задачи сверхкритической экстракции из полидисперсного зернистого слоя растительного материала // Теорет. основы хим. технологии. 2014. Т. 48, № 1. С. 43–51.
3. Саламатин А.А. Наилучшая упаковка частиц и обратная задача в теории сверхкритической флюидной экстракции // Материалы XX Международной конференции студентов, аспирантов и молодых ученых "Ломоносов", г. Москва, 8-13 апреля 2013 г. Математика и механика. Прикладная механика / Отв. ред. А.И. Андреев, А.В. Андриянов, Е.А. Антипов, М.В. Чистякова. [Электронный ресурс], 2 с.
4. Schutz E. Supercritical Fluids and Applications — A Patent Review // Chem. Eng. Technol. 2007. V. 30, №. 6. P. 685–688