

Д. И. Махмутова, Д. И. Басырова, О. Т. Шипина,  
А. П. Кирпичников, М. Н. Карпова

## МОДЕЛЬ ТЕХПРОЦЕССА РЕГЕНЕРАЦИИ КОМПОНЕНТОВ ИЗ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ КОНДЕНСИРОВАННЫХ СИСТЕМ

*Ключевые слова: регенерация, уравнение диффузии, численные методы.*

*В статье рассматривается процесс регенерации методом экстракции с использованием противоточной пульсационной установки. Решение нелинейного уравнения диффузии осуществляется численными методами путем внутренних итераций по коэффициенту диффузии. Авторами была создана программная реализация механизма численного решения математической модели, позволяющая наглядно проследить динамическое изменение концентрационных профилей пластификатора внутри частиц.*

*Keywords: regeneration, diffusion equation, numerical methods.*

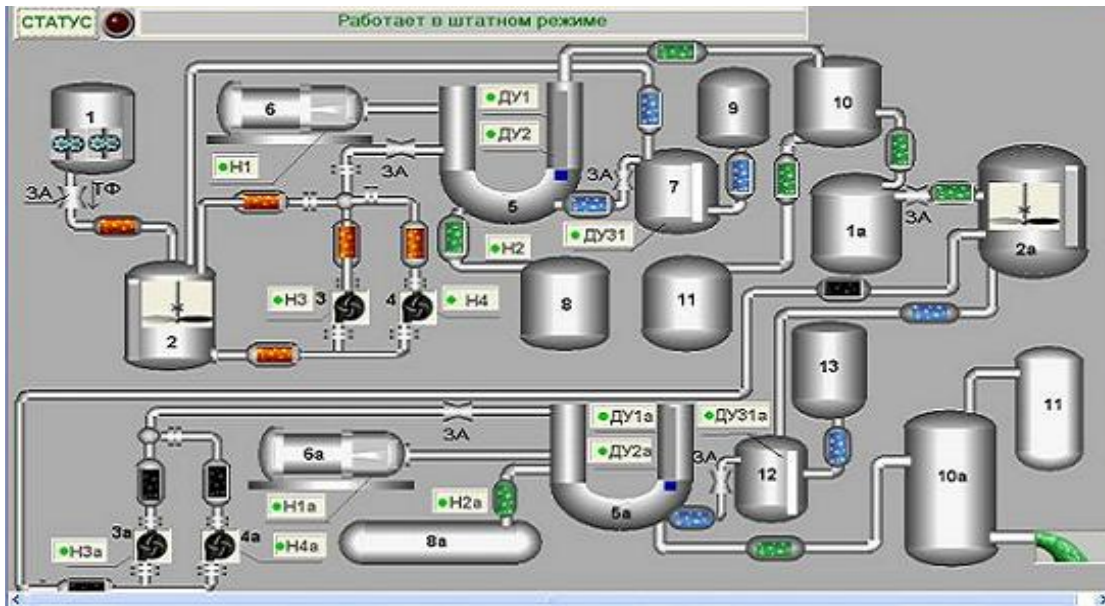
*The article discusses the process of regeneration done by extraction method using a counter-pulsation settings. The solution of the nonlinear diffusion equation is carried out by numerical methods, such as through the inner iterations of the diffusion coefficient. The authors have worked out a software implementation of the mechanism of the numerical solution of a mathematical model that allows visually to examine the dynamic change of plasticizer concentration profiles inside the particles.*

В настоящее время чрезвычайно актуальна задача развития конверсионных и ресурсосберегающих технологий, в частности утилизации энергетических конденсированных систем (ЭКС). Энергетические конденсированные системы (ЭКС) – это различные виды порохов, смесевых ракетных твердых топлив, взрывчатые вещества. Вторичное использование компонентов ЭКС, сохраняющих свои энергетические свойства позволит экономически эффективно использовать отслужившие срок годности полимерные продукты и решить проблему получения сырья для производства эфиров целлюлозы. В этой связи работа по утилизации полимеров ведутся в разных направлениях, одним из перспективных направлений считается регенерация составных компонентов устаревших полимеров методом пульсационного экстрагирования.

Рассматривается полимерная композиция: пластификатор-Ц-НЦ.

В качестве аппаратного оформления техпроцесса регенерации оборудования был предложен пульсационный массообменный аппарат непрерывного действия представляющий собой две U-образные колонны с противоточным пульсационным транспортированием твердой фазы (рис. 1). В первой колонне из композиции хлорметиленом извлекается пластификатор, во второй колонне ацетоном извлекается нитроцеллюлоза. Противоточное перемещение слоя твердой фазы производится при помощи пневмогидравлической системы подвода пульсаций [1].

Экстракция является одним из перспективных методов разделения и концентрирования [2,3]. Давно известно, что многие вещества распределяются между двумя несмешивающимися жидкостями, причем характер разделения в известной степени зависит от растворимости веществ в индивидуальных фазах. Современные экстракционные методы достаточно универсальны. Трудно найти типы соединений, которые нельзя было бы экстрагировать. С помощью экстракции можно разделять многокомпонентные системы, причем эффективнее и быстрее, чем это достигается другими методами. Экстракционные методы пригодны для абсолютного и относительного концентрирования, извлечения в экстракт микроэлементов или матрицы, индивидуального и группового выделения элементов.



**Рис. 1 – Технологическая схема аппарата**

Механизм извлечения целевого компонента из твердых материалов определяется следующими этапами: перенос экстрагента к целевому компоненту в твердом материале, взаимодействие растворителя с извлекаемым компонентом, перенос к границе раздела твердой и жидкой фаз, перенос через пограничный слой и отвод извлекаемой массы целевого компонента в ядро потока растворителя.

Диффузионный перенос целевого компонента – это молекулярный перенос вещества из области с более высокой концентрацией целевого компонента в область с более низкой его концентрацией. Он носит название молекулярной диффузии и описывается законом Фика, следствием которого является дифференциальное уравнение диффузии [4]:

$$\frac{\partial u}{\partial \tau} = -\frac{\partial}{\partial x} \left( D \frac{\partial u}{\partial x} \right),$$

где  $u(x, \tau)$  – концентрация целевого компонента в жидкости;  $D$  – коэффициент молекулярной диффузии, зависящий от массосодержания и температуры процесса;  $\tau$  – время, сек;  $x$  – координата, м.

Перейдем к общей постановке задачи о процессе регенерации внутри элемента – крошек полимерного продукта. При построении математической модели процесса экстракции была принята следующая идеализация – полимерные частицы изотропны, крошки полимерного продукта полагаем круглыми частицами радиуса  $R$ , перемешивание двухфазной системы «твердая фаза – жидкость» происходит интенсивно.

С учетом сделанных допущений извлечение пластификатора предлагается описать следующим уравнением:

$$\frac{\partial C}{\partial \tau} = \frac{1}{r^2} \cdot \frac{\partial}{\partial r} \left( D \frac{\partial C}{\partial r} \right).$$

где  $D_{эф} = D_0 C^\alpha T^\gamma$  – эффективный коэффициент диффузии;  $D_0$  – коэффициент самодиффузии;  $C$  – концентрация смеси целевого компонента на расстоянии  $R$  от центра в момент времени  $\tau$ ;  $T$  – температура процесса;  $\alpha, \gamma$  – константы, определяемые эмпирическим путем.

Анализ уравнения показывает, что оно является нелинейным. Решение уравнений такого типа осуществляется численными методами путем внутренних итераций по коэффициенту диффузии  $D$ . Исходя из начального приближения коэффициента диффузии,

решается линеаризованная задача, находится поле массосодержания  $u(x, \tau)$ , на основании которого находится новое приближение данного коэффициента, и решение повторяется. Моментом прекращения внутренних итераций является выполнение условий по точности (например, отличие предшествующего и текущего значения коэффициента диффузии не более одного процента). Учитывая незначительные временные и температурные интервалы, а также гладкость функции, выражающей коэффициент диффузии, он будет незначительно меняться с каждым интервалом, и условие точности выполняется уже после первых итераций. Следовательно, итерационный процесс не усложняет алгоритм решения.

Из вышесказанного следует, что перенос пластификатора внутри сферических частиц описывается следующим линеаризованным уравнением:

$$\frac{\partial C}{\partial \tau} = D_{эф} \left( \frac{\partial^2 C}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial C}{\partial r} \right).$$

Запишем начальные и граничные условия. Пусть в момент времени  $\tau = 0$  распределение концентрации пластификатора в частице постоянно:

$$C(r, 0) = \text{const.}$$

На внешней границе должны быть выполнены условия:

$$-D \frac{\partial C}{\partial r} \Big|_{r=R} = \beta(C^* - C_{ж}),$$

где  $\beta$  – коэффициент массоотдачи, который считается одинаковым для всех частиц;  $C^*$  – равновесная концентрация извлекаемого компонента на поверхности крошки;  $C_{ж}$  – текущая концентрация в жидкой фазе.

Дополнительным граничным условием служит условие симметрии:

$$\frac{\partial C}{\partial r} \Big|_{r=0} = 0.$$

Модель техпроцесса во второй колонне аналогична модели в первой колонне, метод решения и интерпретация результатов идентичны.

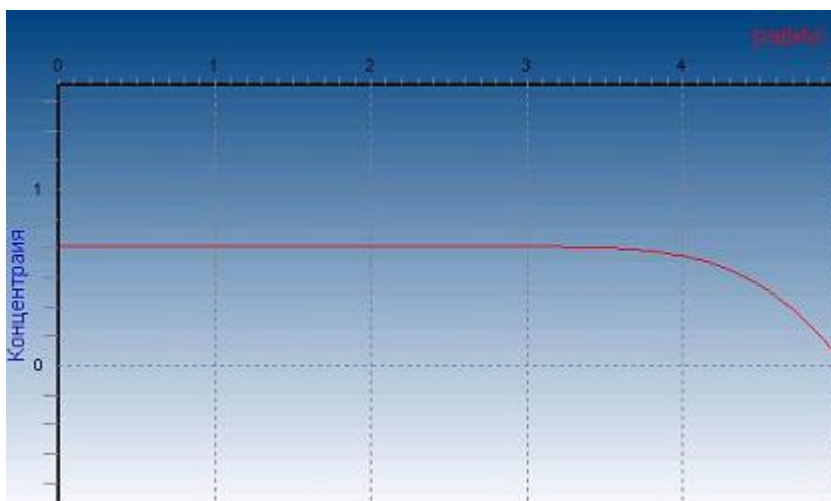
Для решения задачи на уровне микрокинетики была разработана неявная конечно-разностная схема [5,6]. Результаты моделирования при помощи метода конечных разностей имеют хорошую сходимость с экспериментальными данными.

Авторами была создана программная реализация алгоритма нахождения решения математической модели. Результаты расчетов могут быть представлены, как в численном виде, так и в виде графиков (см. рис. 2 – 4), позволяющих наглядно проследить динамическое изменение концентрационных профилей пластификатора внутри зерна для любого выбранного радиуса в процессе экстракции или изменение среднего по зерну значения концентрации в течение всего времени процесса. Среднеинтегральная концентрация рассчитывается по следующей формуле:

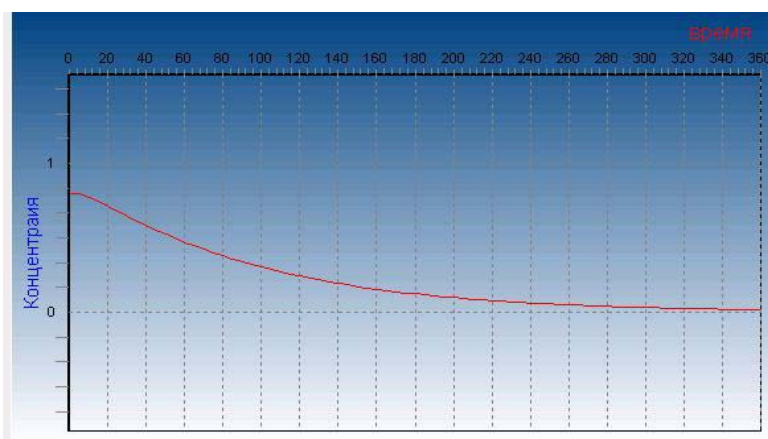
$$\bar{C} = \frac{3}{4\pi r^3} \int_0^R C(r, \tau) 4\pi r^2 dr.$$

Для полного описания процесса регенерации необходимо дополнить модель описанием переноса в диффузионном слое и уравнениями баланса вещества в сплошной фазе – уравнениями макрокинетики процесса, описывающими процесс на уровне всего аппарата.

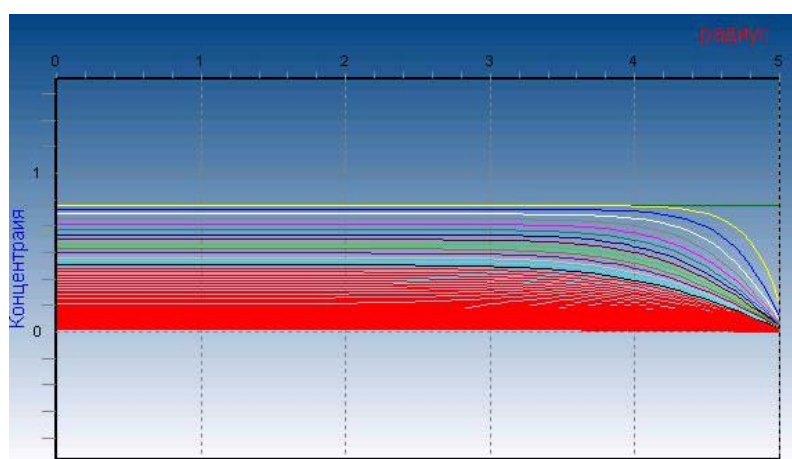
Предложенная модель процесса экстракции позволяет рассчитать профиль распределения компонентов в полимерном элементе в зависимости от внешних и внутренних параметров процесса, что может быть использовано для интенсификации и оптимизации процесса, а также для управления процессом с целью получения конечного продукта с заранее заданными качественными характеристиками.



**Рис. 2 – Профиль концентрации по радиусу частицы**



**Рис. 3 – Среднеинтегральная концентрация**



**Рис. 4 – Изменение концентрации по радиусу за все интервалы времени**

## Литература

1. *Басырова, Д. И.* Система безопасности техпроцесса регенерации компонентов из полимерных композиций / Д. И. Басырова, А. П. Кирпичников, О. Т. Шипина // Вестник Казан. технол. ун-та. – 2010. - №9. , С.203.-210
2. *Аксельруд, Г. А.* Экстрагирование (система твердое тело – жидкость) / Г. А. Аксельруд, В. М. Лысянский. – Л.: Химия, 1974. – 256 с.
3. *Романков, П. Г.* Экстрагирование из твердых материалов / П. Г. Романков, М. И. Курочкина. – Л.: Химия, 1983. – 256 с.
4. *Лыков, А. В.* Тепломассоперенос: справочник / А. В. Лыков. – М.: Энергия, 1978. – 480 с.
5. *Самарский, А. А.* Вычислительная теплопередача / А. А. Самарский, П. Н. Вабищевич. – М.: Едиториал УРСС, 2003. – 784 с.
6. *Тихонов, А. П.* Уравнения математической физики/ А. П. Тихонов, А. А. Самарский.– М.: Наука, 1976. – 724 с.

---

© **Д. И. Махмутова** - асс. каф. математики и экономической информатики КГФЭИ; **Д. И. Басырова** - асп. КНИТУ; **А. П. Кирпичников** - д-р физ.-мат. наук проф., зав. каф. интеллектуальных систем и управления информационными ресурсами КНТУ; **О. Т. Шипина** – д-р техн. наук, проф. каф. химии и технологии высокомолекулярных соединений КНИТУ; **М. Н. Карпова** – соиск. той же кафедры.