

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА УДАЛЕНИЯ СЛАДКОГО НАЛЕТА ТЛИ ИЗ ЛИСТЬЕВ ТАБАКА

В данной статье представлены математические формулы для определения степени растворения, полное растворение, а также модель растворения моносферического материала в воде.

Ключевые слова: математические формулы, табак, листья табака, удаления сладкого налета, степень растворения.

MATHEMATICAL MODELING OF THE PROCESS OF REMOVING THE SWEET FLYING APHIDS FROM TOBACCO LEAVES

This paper presents a mathematical formula to determine the extent of dissolution, the complete dissolution, and the dissolution of a model spherical mono-dispersible material in the water.

Keywords: mathematical formulas, tobacco, tobacco leaves, sweet remove plaque, the dissolution rate.

Для описания процесса растворения и удаления смолистых налетов тли рассмотрим модель отдельной частицы. При этом вводим ряд упрощающих предположений, в частности для описания процесса предполагаем, что поверхность частиц постоянна, частицы имеют сферическую форму и одинаковый размер, растворитель присутствует в избытке, вследствие чего радиус частицы линейно изменяется во времени. Полученные таким путем результаты позволяют выявить общие закономерности процесса растворения.

Модель частицы с невзаимодействующим ядром предполагает, что выщелачивание происходит в первую очередь во внешней поверхности частицы. Граница растворения постепенно продвигается внутрь частицы и размер частицы постепенно уменьшается.

Как известно, интенсивность процесса растворения может быть записана как скорость химической реакции по величине концентрации растворителя C_p в основной массе раствора:

$$-\frac{dM}{d\tau} = \kappa S C_p^m \quad (1)$$

где M - масса растворяемого вещества твердой фазы (г);

S - поверхность растворяемой твердой фазы (m^2);

m и κ - порядок и константа скорости реакции растворения.

Если кинетика растворения зависит только от скорости химического взаимодействия растворителя и растворяемого вещества при постоянных значениях концентрации растворителя и температуры уравнение (1) можно записать относительно радиуса сферической частицы (r):

$$dV = S dr \quad (2)$$

$$-\frac{\rho_T dV}{d\tau} = \kappa_s C_p^m \quad (3)$$

$$-\frac{\rho_T S dr}{d\tau} = k_S C_p^m \quad (4)$$

$$-\frac{dr}{d\tau} = \frac{k_S}{\rho_T} C_p^m \quad (5)$$

$$-\int_{r_0}^r dr = \frac{k_S}{\rho_T} C_p^m \int_0^\tau d\tau \quad (6)$$

$$-r + r_0 = \frac{k_S}{\rho_T} C_p^m \tau \quad (7)$$

или

$$r = r_0 - \frac{k_S}{\rho_T} C_p^m \tau \quad (8)$$

Полное растворение частицы происходит за время τ_m при $r=0$, тогда из (8) получим:

$$\tau_m = \frac{r_0 \rho_T}{k C_p^m} \quad (9)$$

Степень растворения (γ) (для не растворившегося вещества) для сферической частицы определяется как:

$$\gamma = \left(\frac{r}{r_0} \right)^3 \quad (10)$$

$$\gamma = \left(1 - \frac{k C_p^m}{r_0 \rho_T} \tau \right)^3 \quad (11)$$

В технологических процессах растворения в большинстве случаев лимитирующей стадией является *отвод вещества*, тогда уравнение (1) для сферической частицы запишется в виде:

$$\frac{dr}{\beta(r)} = \frac{\Delta C}{\rho_T} d\tau \quad (12)$$

где $\Delta C = C^* - C$, где $C = C_f$

Интегрируя уравнение (12), получим:

$$-\int_{r_0}^r \frac{dr}{\beta(r)} = \frac{\Delta C}{\rho_T} \tau \quad (13)$$

Интегрирование зависит от вида зависимости $\beta(r)$.

В простом случае, когда радиус r_0 частицы и скорость ее обтекания раствором ω малы и критерий Рейнольдса равен:

$$Re = \frac{2\omega r_0}{\nu} < 0,2, \text{ а, следовательно, критерий Нуссельта: } Nu=2, \text{ тогда}$$

$$\beta = D/r \quad (14)$$

D - коэффициент молекулярной диффузии целевого компонента мг/с.

Для сферической частицы, не меняющей формы в процессе растворения:

$M = \rho_T 4\pi r^3 / 3$ и, $S = 4\pi r^2$, тогда подставляя β, M, S в уравнение (1) и интегрируя,

получим:

$$r = (r_0^2 - 2D\Delta C\tau / \rho_T)^{1/2} \quad (15)$$

Полное растворение частицы ($r=0$) происходит за время:

$$\tau_m = \frac{r_0^2 \rho_T}{2D\Delta C} \quad (16)$$

и решение (40) (15) можно записать через время полного растворения τ_m :

$$r = \sqrt{r_0^2 \left(1 - 2 \frac{D\Delta C \tau}{r_0^2 \rho_T}\right)} = r_0 \sqrt{\left(1 - \frac{\tau}{\tau_m}\right)} \quad (17)$$

$$\frac{r}{r_0} = \left(1 - \frac{\tau}{\tau_m}\right)^{1/2} \quad (18)$$

а степень растворения в этом случае:

$$\gamma = \frac{M}{M_0} = \left(1 - \frac{\tau}{\tau_m}\right)^{3/2} = \left(\frac{r}{r_0}\right)^3 \quad (19)$$

Для $Re > 0,2$, $Nu = 2 + 0,6Re^{0,5}$ получим более сложную зависимость для времени растворения:

$$\tau = \frac{2\rho_T}{DK^4\Delta C} \left[\frac{(1+Kz)^3}{3} - \frac{3}{2}(1+Kz)^2 + 3(1+Kz) - \ln(1+Kz) \right] \frac{\sqrt{r_0}}{\sqrt{r}} \quad (20)$$

Где $K = 0,3\sqrt{2\omega/\nu} = const$, z - переменная интегрирования.

Для $Re > 500$ при $\beta = K_1/\sqrt{r}$, где $K_1 = 0,4D \cdot Pr^{1/3} \sqrt{2\omega/\nu}$ кинетика растворения частицы описывается уравнением:

$$\tau = \frac{2}{3} \frac{\rho_T}{K_1\Delta C} (r_0^{3/2} - r^{3/2}) \quad (21)$$

В широком диапазоне значений критерия диффузионный процесс растворения частицы лучше описывается следующим *корреляционным* соотношением:

$$Nu = 2 + 0,347(Re \sqrt{Pr})^{0,62} + 0,569(Pr \cdot Ar)^{0,25} \quad (22)$$

где $Ar = \frac{gd^3}{\nu^2} \frac{\rho_3 - \rho}{\rho}$ - учитывает естественную конвекцию около растворяющейся

поверхности, возникающую за счет разности плотностей насыщенного раствора у поверхности и ненасыщенного раствора в основном объеме раствора.

Большое практическое значение представляет собой массовое растворение частиц в периодическом процессе при полном перемешивании суспензии, которое происходит в условиях *увеличивающейся концентрации целевого компонента в растворе*.

Количество растворяющегося вещества в дисперсной твердой и сплошной фазах определяется уравнением материального баланса. В периодическом процессе с перемешиванием обеих фаз концентрация в растворе и радиус растворяющихся сферических частиц равномерны по рабочему объему емкости с водой:

$$\frac{4\pi}{3} (r_0^3 - r^3) \rho_T N = V(C - C_0) \quad (23)$$

где $\frac{4\pi}{3} (r_0^3 - r^3) \rho_T N$ - дисперсная среда; $V(C - C_0)$ - сплошная среда (растворитель), где

N - число частиц начального радиуса r_0 , V - объем чистого растворителя.

Уравнение (23) можно записать через текущее значение относительного радиуса

частиц $y = \frac{r}{r_0}$:

$$\alpha(1 - y^3) = C - C_0 \quad (24)$$

где $\alpha = \frac{M_0}{V}$, $M_0 = \frac{4\pi}{3} r_0^3 \rho_T N$ - масса твердой фазы в начале процесса растворения.

Балансовое уравнение (24), определяющее связь между степенью растворения твердой фазы и концентрацией целевого компонента в растворителе, *должно анализироваться совместно с кинетическими соотношениями* при расчетах массового растворения.

Модель растворения монодисперсного сферического материала в периодическом режиме запишем в виде:

$$\alpha(1 - y^3) = C - C_0, y=1 \text{ при } \tau = 0 \quad (25a)$$

$$-\frac{dy}{d\tau} = \frac{\beta(y)}{\rho_T r_0} (C^* - C) \quad (25b)$$

Подстановка C из уравнения (25a) в уравнение (25b), разделение переменных и интегрирование при $r=r_0$ при $\tau = 0$ дают:

$$\int_y^1 \frac{dy}{\beta(y) [\Delta C - \alpha(1 - y^3)]} = \frac{\tau}{\rho_T r} \quad (26)$$

Где $\Delta C = C^* - C_0$.

Для сложных зависимостей $\beta(y)$ значение интеграла (26) может быть найдено приближенными методами:

Для $Nu=2$, $\beta(y) = \frac{D}{r_0 y}$ - интеграл (26) принимает вид:

$$\int_y^1 \frac{y dy}{\frac{\Delta C}{\alpha} - 1 + y^3} = \frac{D\alpha}{\rho_T r_0^2} \tau \quad (27)$$

Здесь возможны два случая:

Первый случай $\frac{\Delta C}{\alpha} = \frac{V(C^* - C_0)}{M_0} < 1$, когда *исходной массы* M_0 растворившегося

вещества *достаточно* для достижения равновесной концентрации C^* , и вычисление интеграла приводит к выражению:

$$f(y) - f(1) = \frac{D\alpha}{\rho_T r_0^2} \tau \quad (28)$$

где $f(y) = \frac{1}{6a_1} \ln \frac{a_1^2 + a_1 y + y^2}{(a_1 - y)^2} - \frac{1}{a_1 \sqrt{3}} \operatorname{arctg} \frac{2y + a_1}{a_1 \sqrt{3}}$, $a_1 = \sqrt[3]{1 - \Delta C / \alpha}$.

Наименьший возможный размер, к которому стремятся частицы определим из уравнения (24):

$y_{\min} = \sqrt[3]{1 - \Delta C / \alpha}$. При этом *время* достижения равновесной концентрации и относительного размера *бесконечно велико*.

Второй случай $\frac{\Delta C}{\alpha} = \frac{V(C^* - C_0)}{M_0} > 1$, когда начального количества растворяемого

вещества *недостаточно*, чтобы насытить объем V растворителя.

Интегрирование (27) дает следующее выражение:

$$f_1(y) - f_1(1) = \frac{D\alpha}{\rho_T r_0^2} \tau \quad (29)$$

где $f_1(y) = \frac{1}{6a_1} \ln \frac{a_1^2 - a_1 y + y^2}{(a_1 + y)^2} + \frac{1}{a_1 \sqrt{3}} \operatorname{arctg} \frac{2y - a_1}{a_1 \sqrt{3}}$, $a_1 = \sqrt[3]{\Delta C / \alpha - 1}$.

Максимальная концентрация компонента находится из баланса (49) (24) при полном растворении твердой фазы ($y=0$): $C_{np}=C_0+M_0/V$. Тогда величина времени достижения концентрации C_{np} определяется из (29) при $y=0$:

$$\tau_m = \frac{\rho_T r_0^2}{D\alpha} [f_1(1) - f_1(0)] \quad (30)$$

В этих случаях кинетику растворения целесообразно определять экспериментально. А исследуемый полидисперсный материал должен быть представлен по всем основным параметрам.

Тогда относительная доля *нерастворившегося* вещества γ является функцией времени растворения τ при некоторых значениях концентрации C в растворе, температуре процесса t и гидродинамической обстановки в емкости Γ :

$$\gamma = \gamma(\tau, C, t, \Gamma) \quad (31)$$

Подставляя безразмерное время $\theta = \frac{\tau}{\tau_m}$, где τ_m - время полного растворения,

определим экспериментально, используя зависимость $\gamma(\theta)$, называемую *кинетической функцией* процесса растворения (рис. 1).

Преимущество зависимости $\gamma(\theta)$ в том, что она инвариантна относительно C, t, Γ , то есть каждому значению θ соответствует одно значение γ при любых постоянных значениях C, t, Γ . Физически это означает, что влияние концентрации, температуры и гидродинамической обстановки в аппарате сосредоточено в величине времени полного растворения $\tau_m(C, t, \Gamma)$, значения которого зависят от данных параметров.

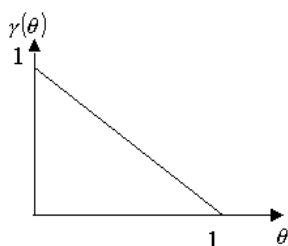


Рис.1. Графическая зависимость $\gamma(\theta)$.

В некоторых случаях $\gamma(\theta)$ может быть получено из модельных представлений.

Например, по соотношению:

$$\gamma = (1-\theta)^3 \quad (32)$$

где $\theta = \frac{\tau}{\tau_m}$, а τ_m определяется по формуле (9).

Практическая же ценность метода кинетической функции состоит в использовании ее для реальных процессов растворения, когда упрощенные модели являются неудовлетворительными.

В общем случае скорость растворения может зависеть от концентрации в растворителе, величины γ - к данному моменту растворения температуры (t) и гидродинамических параметров (Γ). Тогда

$$-\frac{d\gamma}{d\tau} = F(C, \gamma, t, \Gamma) \quad (33)$$

Представив влияние факторов в виде сомножителей, получим:

$$\tau = \int_r^1 \frac{d\gamma}{F_1(\gamma)} / F_2(C, t, \Gamma) \quad (34)$$

Время полного растворения материала определяется из соотношения (34) при условии $\gamma = 0$.

Безразмерное текущее время растворения:

$$\theta = \int_r^1 \frac{d\gamma}{F_1(\gamma)} / \int_0^1 \frac{d\gamma}{F_1(\gamma)} \quad (35)$$

где $\gamma(\theta)$ инвариантна относительно C, t, Γ . А характер зависимости скорости растворения от концентрации и температуры в процессе растворения не изменяется.

Опыты по определению $\gamma(\theta)$ для конкретного продукта следует проводить при $C=const, t=const, \Gamma=const$.

Литература:

1. Вигдорчик Е. М. Математическое моделирование непрерывных процессов растворения [Текст] // Е. М. Вигдорчик, А. Б. Шейнин – Л.: Химия, 1991. – 248 с.
2. Самарский А. А., Михайлов А. П. Математическое моделирование. Идеи. Методы. Примеры. — 2-е изд., испр. — М.: Физматлит, 2001. — ISBN 5-9221-0120-X
3. Севостьянов, А.Г. Моделирование технологических процессов: учебник / А.Г. Севостьянов, П.А. Севостьянов. – М.: Легкая и пищевая промышленность, 1994. - 344 с.