УДК 664.002.05

Математическая модель массопереноса при экстрагировании слоя

Кошевой Е.П., Меретуков З.А., Косачев В.С., Михневич А.Н.
zamer@radnet.ru

Майкопский государственный технологический университет,
Кубанский государственный технологический университет

В настоящее время математическое описание экстрагирования слоя растительного материала с учетом продольного перемешивания по жидкой фазе представляет большой практический интерес. В данной работе эта задача решалась численно с применением метода конечных разностей.

Ключевые слова: растительный материал, массообмен, экстрагирование, математическое моделирование.

Mathematical model of mass transfer at extraction process of a layer

Koshevoy E.P., Meretukov Z.A., Kosachev V.S., Mihnevich A.N.

zamer@radnet.ru

Maykop state technological university,
Kuban state technological university

Now the mathematical description of extraction of a layer of a vegetative material in view of longitudinal hashing on a liquid phase represents the big practical interest. In the given work this problem was solved numerically with application of a method of final differences.

Keywords: vegetative material, mass transfer, extraction, mathematical modelling.

Предпринято математическое моделирование экстрагирования слоя растительного материала с учетом продольного перемешивания по жидкой фазе, что представляет основной практический интерес [1]. Известные до настоящего времени работы [2] позволили получить аналитические решения этой задачи только при существенных упрощениях или частных случаях. Данная задача в работе решалась численно с применением метода конечных разностей [3].

Математическая модель включает совместное рассмотрение процесса массообмена во взаимодействующих фазах - твердой и жидкой. Экстрактор представлен цилиндром, заполненным сферическими монодисперсными твердыми частицами.

Главные предположения о модели следующие:
- система является изотермической и изобарической;
- на входе в слой физические свойства растворителя постоянные;
- радиальные градиенты концентрации в жидкой фазе отсутствуют;
- перемешивание жидкой фазы имеет место только в осевом направлении;
- экстракт принят как единственный компонент;
- концентрация экстрактивных веществ в твердых частицах изменяется только в радиальном направлении и не зависит угла направления радиуса.

В математической модели используются дифференциальные уравнения в частных производных, полученные из уравнений дифференциального массового баланса.

Уравнение переноса в твердой фазе определяется уравнением вида

$$\frac{\partial C_s}{\partial \tau} = \frac{2}{Pe_p}\frac{L}{R}\left[\frac{1}{\xi^2}\frac{\partial}{\partial \xi}\left(\xi^2 \frac{\partial C_s}{\partial \xi}\right)\right]$$

(1)

где C_s - концентрация экстрактивных веществ в твердой фазе, кг/м^3; τ безразмерное время (τ = *$U_0 t/L\varepsilon$);* U_o – скорость жидкости в расчете на незаполненное сечение экстрактора, м/с; *t* - время, с; L - длина слоя, м; ε порозность слоя; *Pe_p* - число Пекле частицы твердой фазы (Pe_p = *$U_o d_p/D_m\varepsilon$)*; d_p - диаметр частицы, м; *D_m* – коэффициент внутренней диффузии в твердой фазе, м^2/с; *R* - радиус частицы, м; ξ - безразмерный радиус частицы (ξ = *r/R)*.

Преобразуем уравнение (1) в виде суммы производных

$$\frac{\partial C_s}{\partial \tau} = \frac{2}{Pe_p}\frac{L}{R}\frac{\partial^2 C_s}{\partial \xi^2} + \frac{4}{Pe_p}\frac{L}{R}\frac{\partial C_s}{\partial \xi}$$

(2) При граничных условиях $\tau > 0$, ξ=1, $-\frac{\partial C_s}{\partial \xi} = Bi \cdot (C_{fs} - C_f), C_{fs} = k_p \cdot C_{ss}^+$

(3)

Уравнение массопереноса в жидкой фазе определяется зависимостью вида

$$\frac{\partial C_f}{\partial \tau} = \frac{1}{Pe_b}\frac{\partial^2 C_f}{\partial Z^2} - \frac{\partial C_f}{\partial Z} + \frac{6 \cdot (-\varepsilon)}{\varepsilon \cdot R}\frac{Bi}{Pe_p}(C_{fs} - C_f)$$

(4)

при τ>0, *Z*=0, $C_f - \frac{1}{Pe_b}\frac{\partial C_f}{\partial Z} = 0$

(5)

Введем неявную схему аппроксимации дифференциального уравнения (2) для представленных в нем трех производных. В связи с построением единой разностной схемы для сопряженной твердой и жидкой фазы индексы и принадлежность концентрации к той или иной фазе будет определять численное значение индексов. При этом необходимо учитывать особенности аппроксимации на границах сетки и сингулярность одной из границ на пространственной проекции краевой задачи.

$$\frac{\partial C_s}{\partial \tau} = \frac{C_{i,j+1} - C_{i,j}}{\Delta \tau}$$

(6)

$$\frac{\partial^2 C_s}{\partial \xi^2} = \frac{C_{i-1,j+1} - 2 \cdot C_{i,j+1} + C_{i+1,j+1}}{\Delta \xi^2}$$

(7)

Для аппроксимации первой производной по координате будем использовать центральную аппроксимацию для внутренних точек сетки в твердой фазе

$$\frac{\partial C_s}{\partial \xi} = \frac{C_{i-1,j+1} - C_{i+1,j+1}}{2 \cdot \Delta \xi}$$

(8)

Для аппроксимации первой производной на границах сетки будем использовать левую или правую аппроксимации соответственно

$$\frac{\partial C_s}{\partial \xi} = \frac{C_{i-1,j+1} - C_{i,j+1}}{\Delta \xi}$$

(9)

$$\frac{\partial C_s}{\partial \xi} = \frac{C_{i,j+1} - C_{i+1,j+1}}{\Delta \xi}$$

(10)

В этой сеточной аппроксимации отсутствует показатель текущей безразмерной координаты – ξ, которая порождает сингулярность сеточной схемы.

Обычно безразмерная координата аппроксимируется выражением

$$\xi = i \cdot \Delta\xi$$

(11)

Однако в нашем случае необходимо произвести подбор разбиения координатной оси исходя из следующих условий

1. Шаг Δξ должен обеспечивать устойчивость алгоритма решения линейной системы уравнений.
2. Граница сопряжения твердой и жидкой фазы должна совпадать с узлом сеточной схемы.

Для типичных параметров экстракции этим условиям соответствует значение Δξ=2/10. Узлы разбиения берутся по формуле (11) для i=0…5.

В этом случае узлы сетки представляют собой зависимость табличного вида

Таблица 1 Узлы сетки при сеточной аппроксимации

i	-1	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	
ξ	-0,2	0,0	0,2	0,4	0,6	0,8	1,0	0,0	0,2	0,4	0,6	0,8	1,0	1,2	**Z**
								0	1	2	3	4	5	6	**j**

где i – номер узла сетки, ξ – значение текущей безразмерной координаты в твердой фазе, Z – значение текущей безразмерной координаты в жидкой фазе.

Точки для i=(-1) и i=12 используются для аппроксимации условий симметрии на границах соответствующих фаз.

Рассматривая первоначально задачу в рамках сеточной аппроксимации, имеем следующую неявную схему, отличающуюся от схем явной аппроксимации повышенной устойчивостью при поиске решения по координатной проекции

$$\frac{C_{i,j+1}-C_{i,j}}{\Delta\tau}=\frac{2}{Pe_p}\frac{L}{R}\frac{C_{i-1,j+1}-2\cdot C_{i,j+1}+C_{i+1,j+1}}{\Delta\xi^2}+\frac{4}{Pe_p}\frac{L}{R}\cdot\frac{1}{i\cdot\Delta\xi}\frac{C_{i-1,j+1}-C_{i+1,j+1}}{2\cdot\Delta\xi}$$

(12)

Данная схема содержит член i·Δξ, который делает веса этой схемы нерегулярными. Следовательно, каждый из этих членов должен рассчитываться индивидуально по каждому узлу.

Начнем построение сетки и вычисление её весов с нулевого узла. Характерными особенностями этого узла являются сингулярность и условие симметрии.

Учитывая, что функция концентрации в этой точке ограничена, то значение выражения в этой точке имеет предел равный 0, т.е. имеет место, следующее выражение

$$\lim_{\xi\to 0}\left[\frac{\frac{\partial}{\partial\xi}C_S(\xi,\tau)}{\xi}\right]=0$$

(13)

Следовательно, при сеточной аппроксимации для i=0 член, содержащий первую производную по концентрации, отсутствует, тогда

$$\frac{C_{0,j+1}-C_{0,j}}{\Delta\tau}=\frac{2}{Pe_p}\frac{L}{R}\frac{C_{-1,j+1}-2\cdot C_{0,j+1}+C_{1,j+1}}{\Delta\xi^2}$$

(14)

Условие симметрии в этом узле заключается в равенстве концентраций слева и справа от этого узла. Поэтому окончательно имеем

$$\frac{C_{0,j+1}-C_{0,j}}{\Delta\tau}=\frac{2}{Pe_p}\frac{L}{R}\frac{2\cdot C_{1,j+1}-2\cdot C_{0,j+1}}{\Delta\xi^2}$$

(15)

Для реализации неявной схемы необходимо произвести разделение временных слоёв относительно знака равенства (j и j+1 члены) и преобразовать данное уравнение в схему с весами при этих членах. Проводя эквивалентные алгебраические преобразования, имеем:

$$C_{0,j}=\left(\frac{Pe_p\cdot R\cdot\Delta\xi^2+4\cdot L\cdot\Delta\tau}{Pe_p\cdot R\cdot\Delta\xi^2}\right)\cdot C_{0,j+1}+\left(\frac{-4\cdot L\cdot\Delta\tau}{Pe_p\cdot R\cdot\Delta\xi^2}\right)\cdot C_{1,j+1}$$

(16)

Таким образом, для нулевого узла сетки получено двухчленное разложение в виде левого замыкающего линейного алгебраического уравнения.

Для промежуточных узлов в пределах от i=1,…,4 алгебраические уравнения неявного вида для этих узлов получаются подстановкой соответствующего индекса (номера узла по координате) в опорное уравнение (12).

Для первого узла (i=1) имеем

$$\frac{C_{1,j+1}-C_{1,j}}{\Delta\tau}=\frac{2}{Pe_p}\frac{L}{R}\frac{C_{0,j+1}-2\cdot C_{1,j+1}+C_{2,j+1}}{\Delta\xi^2}+\frac{4}{Pe_p}\frac{L}{R}\cdot\frac{1}{i\cdot\Delta\xi^2}\cdot\left(C_{0,j+1}-C_{1,j+1}\right)$$

(17)

и после аналогичных преобразований получаем следующее трехчленное разложение

$$C_{1,j}=\left(\frac{-6\cdot L\cdot\Delta\tau}{Pe_p\cdot R\cdot\Delta\xi^2}\right)\cdot C_{0,j+1}+\left(\frac{Pe_p\cdot R\cdot\Delta\xi^2+8\cdot L\cdot\Delta\tau}{Pe_p\cdot R\cdot\Delta\xi^2}\right)\cdot C_{1,j+1}+\left(-\frac{2\cdot L\cdot\Delta\tau}{Pe_p\cdot R\cdot\Delta\xi^2}\right)\cdot C_{2,j+1}$$

(18)

В остальных внутренних узлах сетки по твердой фазе будем иметь аналогичные уравнения следующего вида.

Для второго узла (i=2) имеем

$$C_{2,j}=\left(\frac{-3\cdot L\cdot\Delta\tau}{Pe_p\cdot R\cdot\Delta\xi^2}\right)\cdot C_{1,j+1}+\left(\frac{Pe_p\cdot R\cdot\Delta\xi^2+4\cdot L\cdot\Delta\tau}{Pe_p\cdot R\cdot\Delta\xi^2}\right)\cdot C_{2,j+1}+\left(-\frac{L\cdot\Delta\tau}{Pe_p\cdot R\cdot\Delta\xi^2}\right)\cdot C_{3,j+1}$$

(19)

Для третьего узла (i=3) имеем

$$C_{3,j}=\left(\frac{-8\cdot L\cdot\Delta\tau}{3\cdot Pe_p\cdot R\cdot\Delta\xi^2}\right)\cdot C_{2,j+1}+\left(\frac{Pe_p\cdot R\cdot\Delta\xi^2+4\cdot L\cdot\Delta\tau}{Pe_p\cdot R\cdot\Delta\xi^2}\right)\cdot C_{3,j+1}+\left(-\frac{4\cdot L\cdot\Delta\tau}{3\cdot Pe_p\cdot R\cdot\Delta\xi^2}\right)\cdot C_{4,j+1}$$

(20)

Для четвертого узла (i=4) имеем

$$C_{4,j}=\left(\frac{-5\cdot L\cdot\Delta\tau}{2\cdot Pe_p\cdot R\cdot\Delta\xi^2}\right)\cdot C_{3,j+1}+\left(\frac{Pe_p\cdot R\cdot\Delta\xi^2+4\cdot L\cdot\Delta\tau}{Pe_p\cdot R\cdot\Delta\xi^2}\right)\cdot C_{4,j+1}+\left(-\frac{3\cdot L\cdot\Delta\tau}{2\cdot Pe_p\cdot R\cdot\Delta\xi^2}\right)\cdot C_{5,j+1}$$

(21)

Пятый узел содержит целый ряд особенностей связанных как с реализацией граничных условий, так и соблюдением условий сопряжения фаз в интегральном балансе.

Учитывая простоту за основу дальнейшего алгоритма взяли подход связанный с необходимостью сохранения диагональной структуры матрицы весов сетки, единой для твердой и жидкой фазы. В этом случае интегральное сопряжение фаз необходимо производить для каждого временного слоя, а безразмерные шаги по координатам должны иметь одинаковую протяженность.

Последний координатный узел определяется из граничных условий. В этом случае значения узлов достигают граничного узла твердой фазы соприкасающейся с жидкой фазой. В дифференциальном виде на границе твердой фазы должны выполняться следующие соотношения

При $\tau > 0$, ξ=1,
$$-\frac{\partial C_s}{\partial \xi} = Bi \cdot (C_{fs} - C_f)$$
(22)

и
$$C_{fs} = k_p \cdot C_{ss}^{+}$$
(23)

где Bi - число Био (Bi = $k_f R/D_m$); k_f - коэффициент массопередачи, м/с; k_p - объемный коэффициент распределения; C_{fs} - концентрация экстрактивных веществ в жидкой фазе на поверхности частицы, кг/м^3; C_f - концентрация экстрактивных веществ в жидкой фазе, кг/м^3; C_{ss}^{+} - равновесная концентрация экстрактивных веществ в твердой фазе на поверхности частицы, кг/м^3.

Учитывая необходимость сохранения диагональной структуры весов матрицы, объединим эти уравнения следующей разностной схемой
$$-\frac{1}{2}\frac{(C_{4,j+1} - C_{6,j+1})}{\Delta\xi} = Bi \cdot (k_p \cdot C_{5,j+1} - C_{6,j+1})$$
(24)

В опорном уравнении (12) присутствует член, содержащий значение первой производной, который для данного граничного условия (24) принимает следующий вид
$$\frac{(C_{4,j+1} - C_{6,j+1})}{\Delta\xi} = -2 \cdot Bi \cdot (k_p \cdot C_{5,j+1} - C_{6,j+1})$$
(25)

В результате на границе раздела фаз со стороны твердой фазы уравнение (12) принимает следующий вид
$$\frac{C_{i,j+1} - C_{i,j}}{\Delta\tau} = \frac{2}{Pe_p}\frac{L}{R}\frac{C_{i-1,j+1} - 2 \cdot C_{i,j+1} + C_{i+1,j+1}}{\Delta\xi^2} + \frac{4}{Pe_p}\frac{L}{R}\cdot\frac{1}{i \cdot \Delta\xi}\left[-2 \cdot Bi \cdot (k_p \cdot C_{5,j+1} - C_{6,j+1})\right]$$
(26)

Подставив номер граничного узла (i=5) в это уравнение получаем
$$\frac{(C_{5,j+1} - C_{5,j})}{\Delta\tau} = \frac{2}{Pe_p}\frac{L}{R}\cdot\frac{(C_{4,j+1} - 2 \cdot C_{5,j+1} + C_{6,j+1})}{\Delta\xi^2} - \frac{8}{5 \cdot Pe_p}\frac{L \cdot Bi}{R \cdot \Delta\xi}\cdot(k_p \cdot C_{5,j+1} - C_{6,j+1})$$
(27)

Или в виде удобном для использования в решении

$$C_{5,j} = \frac{-2 \cdot L \cdot \Delta\tau}{Pe_p \cdot R \cdot \Delta\xi^2}\cdot C_{4,j+1} + \frac{5 \cdot Pe_p \cdot R \cdot \Delta\xi^2 + 20 \cdot L \cdot \Delta\tau + 8 \cdot L \cdot Bi \cdot k_p \cdot \Delta\tau \cdot \Delta\xi}{Pe_p \cdot R \cdot \Delta\xi^2}\cdot C_{5,j+1} + \ldots$$
$$\ldots + \frac{(-8 \cdot L \cdot Bi \cdot \Delta\tau \cdot \Delta\xi - 10 \cdot L \cdot \Delta\tau)}{5 \cdot Pe_p \cdot R \cdot \Delta\xi^2}\cdot C_{6,j+1}$$
(28)

Следующие узлы разностной схемы принадлежат жидкой фазе (i=6,…,11), для которой на границе с твердой фазой (i=6) выполняется дифференциальное уравнение (4) при $\tau>0$, $Z=0$, $C_f - \frac{1}{Pe_b}\frac{\partial C_f}{\partial Z} = 0$

(29)

где Z - безразмерная осевая координата по слою, z/L; z расстояние измеренное от входного отверстия слоя, м; Pe_b - число Пекле жидкой фазы в слое частиц ($Pe_b = U_o L/D_L \varepsilon$); D_L коэффициент осевой дисперсии жидкой фазы в слое частиц, $м^2/с$.

Преобразуя значение производной в уравнении (29) в разностную схему для этого узла получаем уравнение граничного условия на разделе фаз со стороны жидкой фазы

$$C_{6,j+1} = \frac{1}{Pe_b}\frac{(C_{5,j+1} - C_{7,j+1})}{2\cdot\Delta Z}$$

(30)

Уравнение массопереноса в жидкой фазе имеет вид

$$\frac{\partial C_f}{\partial \tau} = \frac{1}{Pe_b}\frac{\partial^2 C_f}{\partial Z^2} - \frac{\partial C_f}{\partial Z} + \frac{6\cdot(1-\varepsilon)}{\varepsilon\cdot R}\frac{Bi}{Pe_p}(C_{fs} - C_f)$$

(31)

Преобразуем данное уравнение (31) в разностное уравнение

$$\frac{C_{i,j+1} - C_{i,j}}{\Delta\tau} = \frac{1}{Pe_b}\frac{C_{i-1,j+1} - 2\cdot C_{i,j+1} + C_{i+1,j+1}}{\Delta Z^2} - \frac{C_{i-1,j+1} - C_{i+1,j+1}}{2\cdot\Delta Z} + \frac{6\cdot(1-\varepsilon)\cdot L\cdot Bi}{\varepsilon\cdot R\cdot Pe_p}\cdot(k_p\cdot C_{5,j+1} - C_{i,j+1})$$

(32)

При этом на границе значение первой производной входящее в это уравнение может быть заменено подстановкой граничного уравнения (30)

$$\frac{C_{i,j+1} - C_{i,j}}{\Delta\tau} = \frac{1}{Pe_b}\frac{C_{i-1,j+1} - 2\cdot C_{i,j+1} + C_{i+1,j+1}}{\Delta Z^2} - C_{6,j+1}\cdot Pe_b + \frac{6\cdot(1-\varepsilon)\cdot L\cdot Bi}{\varepsilon\cdot R\cdot Pe_p}\cdot(k_p\cdot C_{5,j+1} - C_{i,j+1})$$

(33)

Подставив в него номер граничного узла (i=6) получаем

$$\frac{C_{6,j+1} - C_{6j}}{\Delta\tau} = \frac{1}{Pe_b}\frac{C_{5,j+1} - 2\cdot C_{6,j+1} + C_{7,j+1}}{\Delta Z^2} - C_{6,j+1}\cdot Pe_b + \frac{6\cdot(1-\varepsilon)\cdot L\cdot Bi}{\varepsilon\cdot R\cdot Pe_p}\cdot(k_p\cdot C_{5,j+1} - C_{6,j+1})$$

(34)

Собирая множители – веса при соответствующих узлах сетки и разделяя временные слои относительно знака равенства, получаем

$$C_{6,j} = \frac{6\cdot L\cdot Bi\cdot Pe_b\cdot\varepsilon\cdot k_p\cdot\Delta\tau\cdot\Delta Z^2 - \varepsilon\cdot R\cdot Pe_p\cdot\Delta\tau - 6\cdot L\cdot Bi\cdot Pe_b\cdot k_p\cdot\Delta\tau\cdot\Delta Z^2}{\varepsilon\cdot R\cdot Pe_b\cdot Pe_p\cdot\Delta Z^2}\cdot C_{5,j+1} + \ldots$$

$$\ldots + \frac{Pe_b\varepsilon\cdot R\cdot Pe_p\Delta Z^2 + 2\varepsilon R\cdot Pe_p\Delta\tau + Pe_b^2\varepsilon\cdot R\cdot Pe_p\Delta\tau\Delta Z^2 + (6\cdot L\cdot Bi\cdot Pe_b\Delta\tau\Delta Z^2)(1-\varepsilon)}{\varepsilon\cdot R\cdot Pe_b\cdot Pe_p\cdot\Delta Z^2}\cdot C_{6,j+1} + \ldots$$

$$\ldots + \frac{\Delta\tau}{Pe_b\cdot\Delta Z^2}\cdot C_{7,j+1}$$

(35)

Как видно из представленного уравнения (35) сохранена трех диагональная структура, что позволяет получать на каждом временном слое взаимно-согласованное решение по обеим фазам. Внутренние узлы содержат член с концентрацией в граничном узле твердой фазы.

Для седьмого узла (i=7) имеем

$$\frac{C_{7,j+1}-C_{7j}}{\Delta\tau}=\frac{1}{Pe_b}\frac{C_{6,j+1}-2\cdot C_{7,j+1}+C_{8,j+1}}{\Delta Z^2}-\frac{C_{6,j+1}-C_{8,j+1}}{2\cdot\Delta Z}+\frac{6\cdot(1-\varepsilon)\cdot L\cdot Bi}{\varepsilon\cdot R\cdot Pe_p}\cdot\left(k_p\cdot C_{5,j+1}-C_{7,j+1}\right)$$

(36)

Для восьмого узла (i=8) имеем

$$\frac{C_{8,j+1}-C_{8j}}{\Delta\tau}=\frac{1}{Pe_b}\frac{C_{7,j+1}-2\cdot C_{8,j+1}+C_{9,j+1}}{\Delta Z^2}-\frac{C_{7,j+1}-C_{9,j+1}}{2\cdot\Delta Z}+\frac{6\cdot(1-\varepsilon)\cdot L\cdot Bi}{\varepsilon\cdot R\cdot Pe_p}\cdot\left(k_p\cdot C_{5,j+1}-C_{8,j+1}\right)$$

(37)

Для девятого узла (i=9) имеем

$$\frac{C_{9,j+1}-C_{9j}}{\Delta\tau}=\frac{1}{Pe_b}\frac{C_{8,j+1}-2\cdot C_{9,j+1}+C_{10,j+1}}{\Delta Z^2}-\frac{C_{8,j+1}-C_{10,j+1}}{2\cdot\Delta Z}+\frac{6\cdot(1-\varepsilon)\cdot L\cdot Bi}{\varepsilon\cdot R\cdot Pe_p}\cdot\left(k_p\cdot C_{5,j+1}-C_{9,j+1}\right)$$

(38)

Для десятого узла (i=10)

$$\frac{C_{10,j+1}-C_{10,j}}{\Delta\tau}=\frac{1}{Pe_b}\frac{C_{9,j+1}-2\cdot C_{10,j+1}+C_{11,j+1}}{\Delta Z^2}-\frac{C_{9,j+1}-C_{11,j+1}}{2\cdot\Delta Z}+\frac{6\cdot(1-\varepsilon)\cdot L\cdot Bi}{\varepsilon\cdot R\cdot Pe_p}\cdot\left(k_p\cdot C_{5,j+1}-C_{10,j+1}\right)$$

(39)

Проводя эквивалентные алгебраические преобразования этих уравнений к виду удобному для решения, имеем

Для седьмого узла (i=7)

$$C_{7,j}=\frac{-6\cdot L\cdot Bi\cdot Pe_b\cdot k_p\cdot\Delta\tau\cdot\Delta Z^2+6\cdot L\cdot Bi\cdot Pe_b\cdot k_p\cdot\varepsilon\cdot\Delta\tau\cdot\Delta Z^2}{\varepsilon\cdot R\cdot Pe_b\cdot Pe_p\cdot\Delta Z^2}\cdot C_{5,j+1}+\ldots$$

$$\ldots+\frac{Pe_b\cdot\varepsilon\cdot R\cdot Pe_p\cdot\Delta\tau\cdot\Delta Z-2\cdot\varepsilon\cdot R\cdot Pe_p\cdot\Delta\tau}{2\cdot\varepsilon\cdot R\cdot Pe_b\cdot Pe_p\cdot\Delta Z^2}\cdot C_{6,j+1}+\ldots$$

$$\ldots+\frac{Pe_b\cdot\varepsilon\cdot R\cdot Pe_p\cdot\Delta Z^2+2\cdot\varepsilon\cdot R\cdot Pe_p\cdot\Delta\tau+6\cdot L\cdot Bi\cdot Pe_b\cdot\Delta\tau\cdot\Delta Z^2\cdot(1-\varepsilon)}{Pe_b\cdot R\cdot Pe_p\cdot\varepsilon\cdot\Delta Z^2}\cdot C_{7,j+1}+\ldots$$

$$\ldots+\frac{-Pe_b\cdot\varepsilon\cdot R\cdot Pe_p\cdot\Delta\tau\cdot\Delta Z-2\cdot\varepsilon\cdot R\cdot Pe_p\cdot\Delta\tau}{2\cdot Pe_b\cdot\varepsilon\cdot R\cdot Pe_p\cdot\Delta Z^2}\cdot C_{8,j+1}$$

(40)

Для восьмого узла (i=8) имеем

$$C_{8,j}=\frac{-6\cdot L\cdot Bi\cdot Pe_b\cdot k_p\cdot\Delta\tau\cdot\Delta Z^2+6\cdot L\cdot Bi\cdot Pe_b\cdot k_p\cdot\varepsilon\cdot\Delta\tau\cdot\Delta Z^2}{\varepsilon\cdot R\cdot Pe_b\cdot Pe_p\cdot\Delta Z^2}\cdot C_{5,j+1}+\ldots$$

$$\ldots+\frac{Pe_b\cdot\varepsilon\cdot R\cdot Pe_p\cdot\Delta\tau\cdot\Delta Z-2\cdot\varepsilon\cdot R\cdot Pe_p\cdot\Delta\tau}{2\cdot\varepsilon\cdot R\cdot Pe_b\cdot Pe_p\cdot\Delta Z^2}\cdot C_{7,j+1}+\ldots$$

$$\ldots+\frac{Pe_b\cdot\varepsilon\cdot R\cdot Pe_p\cdot\Delta Z^2+2\cdot\varepsilon\cdot R\cdot Pe_p\cdot\Delta\tau+6\cdot L\cdot Bi\cdot Pe_b\cdot\Delta\tau\cdot\Delta Z^2\cdot\left(-\varepsilon\right)}{Pe_b\cdot R\cdot Pe_p\cdot\varepsilon\cdot\Delta Z^2}\cdot C_{8,j+1}+\ldots$$

$$\ldots+\frac{-Pe_b\cdot\varepsilon\cdot R\cdot Pe_p\cdot\Delta\tau\cdot\Delta Z-2\cdot\varepsilon\cdot R\cdot Pe_p\cdot\Delta\tau}{2\cdot Pe_b\cdot\varepsilon\cdot R\cdot Pe_p\cdot\Delta Z^2}\cdot C_{9,j+1}$$

(41)

Для девятого узла (i=9) имеем

$$C_{9,j}=\frac{-6\cdot L\cdot Bi\cdot Pe_b\cdot k_p\cdot\Delta\tau\cdot\Delta Z^2+6\cdot L\cdot Bi\cdot Pe_b\cdot k_p\cdot\varepsilon\cdot\Delta\tau\cdot\Delta Z^2}{\varepsilon\cdot R\cdot Pe_b\cdot Pe_p\cdot\Delta Z^2}\cdot C_{5,j+1}+\ldots$$

$$\ldots+\frac{Pe_b\cdot\varepsilon\cdot R\cdot Pe_p\cdot\Delta\tau\cdot\Delta Z-2\cdot\varepsilon\cdot R\cdot Pe_p\cdot\Delta\tau}{2\cdot\varepsilon\cdot R\cdot Pe_b\cdot Pe_p\cdot\Delta Z^2}\cdot C_{8,j+1}+\ldots$$

$$\ldots+\frac{Pe_b\cdot\varepsilon\cdot R\cdot Pe_p\cdot\Delta Z^2+2\cdot\varepsilon\cdot R\cdot Pe_p\cdot\Delta\tau+6\cdot L\cdot Bi\cdot Pe_b\cdot\Delta\tau\cdot\Delta Z^2\cdot\left(-\varepsilon\right)}{Pe_b\cdot R\cdot Pe_p\cdot\varepsilon\cdot\Delta Z^2}\cdot C_{9,j+1}+\ldots$$

$$\ldots+\frac{-Pe_b\cdot\varepsilon\cdot R\cdot Pe_p\cdot\Delta\tau\cdot\Delta Z-2\cdot\varepsilon\cdot R\cdot Pe_p\cdot\Delta\tau}{2\cdot Pe_b\cdot\varepsilon\cdot R\cdot Pe_p\cdot\Delta Z^2}\cdot C_{10,j+1}$$

(42)

Для десятого узла (i=10).

$$C_{10,j}=\frac{-6\cdot L\cdot Bi\cdot Pe_b\cdot k_p\cdot\Delta\tau\cdot\Delta Z^2+6\cdot L\cdot Bi\cdot Pe_b\cdot k_p\cdot\varepsilon\cdot\Delta\tau\cdot\Delta Z^2}{\varepsilon\cdot R\cdot Pe_b\cdot Pe_p\cdot\Delta Z^2}\cdot C_{5,j+1}+\ldots$$

$$\ldots+\frac{Pe_b\cdot\varepsilon\cdot R\cdot Pe_p\cdot\Delta\tau\cdot\Delta Z-2\cdot\varepsilon\cdot R\cdot Pe_p\cdot\Delta\tau}{2\cdot\varepsilon\cdot R\cdot Pe_b\cdot Pe_p\cdot\Delta Z^2}\cdot C_{9,j+1}+\ldots$$

$$\ldots+\frac{Pe_b\cdot\varepsilon\cdot R\cdot Pe_p\cdot\Delta Z^2+2\cdot\varepsilon\cdot R\cdot Pe_p\cdot\Delta\tau+6\cdot L\cdot Bi\cdot Pe_b\cdot\Delta\tau\cdot\Delta Z^2\cdot\left(-\varepsilon\right)}{Pe_b\cdot R\cdot Pe_p\cdot\varepsilon\cdot\Delta Z^2}\cdot C_{10,j+1}+\ldots$$

$$\ldots+\frac{-Pe_b\cdot\varepsilon\cdot R\cdot Pe_p\cdot\Delta\tau\cdot\Delta Z-2\cdot\varepsilon\cdot R\cdot Pe_p\cdot\Delta\tau}{2\cdot Pe_b\cdot\varepsilon\cdot R\cdot Pe_p\cdot\Delta Z^2}\cdot C_{11,j+1}$$

(43)

Все эти узлы содержат по четыре слагаемых в правой части, следовательно, метод прогонки оказывается неприменимым. В этом случае, как правило, используются прямые методы решения (например, метод Гаусса) для решения возникающих систем уравнений. Для решения необходимо замкнуть эту систему уравнением на границе жидкой фазы (Z=1 или i=11) выходящей из экстрактора. Так как после выхода из экстрактора концентрация не может меняться на этой границе, возникает условие симметрии, которое и будем использовать для замыкания системы уравнения на очередном временном слое

$$\frac{C_{i-1,j+1}-C_{i+1,j+1}}{2\cdot\Delta Z}=0$$

(44)

Используем это условие в уравнении на крайнем узле разностной схемы

$$\frac{C_{11,j+1}-C_{11,j}}{\Delta\tau}=\frac{2}{Pe_b}\cdot\frac{\left(C_{10,j+1}-C_{11,j+1}\right)}{\Delta Z^2}+\frac{6\cdot(1-\varepsilon)\cdot L\cdot Bi}{\varepsilon\cdot R\cdot Pe_p}\cdot\left(k_p\cdot C_{5,j+1}-C_{11,j+1}\right)$$

(45)

которое преобразуем к стандартному виду

$$C_{11,j}=\frac{-6\cdot L\cdot Bi\cdot Pe_b\cdot k_p\cdot\Delta\tau\cdot\Delta Z^2+6\cdot L\cdot Bi\cdot Pe_b\cdot k_p\cdot\varepsilon\cdot\Delta\tau\cdot\Delta Z^2}{\varepsilon\cdot R\cdot Pe_b\cdot Pe_p\cdot\Delta Z^2}\cdot C_{5,j+1}-\frac{2\cdot\Delta\tau}{Pe_b\cdot\Delta Z^1}\cdot C_{10,j+1}+\ldots$$

$$\ldots+\frac{Pe_b\cdot\varepsilon\cdot R\cdot Pe_p\cdot\Delta Z^2+2\cdot\varepsilon\cdot R\cdot Pe_p\cdot\Delta\tau+6\cdot L\cdot Bi\cdot Pe_b\cdot\Delta\tau\cdot\Delta Z^2\cdot(1-\varepsilon)}{Pe_b\cdot R\cdot Pe_p\cdot\varepsilon\cdot\Delta Z^2}\cdot C_{11,j+1}$$

(46)

Таким образом, получили замкнутую систему линейных алгебраических уравнений недиагонального вида для расчета распределения концентрации по фазам очередного временного слоя, которая может быть представлена следующим матричным уравнением

$$\left|\begin{array}{c}C_{0,k}\\C_{1,k}\\C_{2,k}\\C_{3,k}\\C_{4,k}\\C_{5,k}\\C_{6,k}\\C_{7,k}\\C_{8,k}\\C_{9,k}\\C_{10,k}\\C_{11,k}\end{array}\right|=\left|\begin{array}{cccccccccccc}
d_0 & e_0 & & & & & & & & & & \\
c_1 & d_1 & e_1 & & & & & & & & & \\
 & c_2 & d_2 & e_2 & & & & & & & & \\
 & & c_3 & d_3 & e_3 & & & & & & & \\
 & & & c_4 & d_4 & e_4 & & & & & & \\
 & & & & c_5 & d_5 & e_5 & & & & & \\
 & & & & & c_6 & d_6 & e_6 & & & & \\
 & & & & & f_7 & c_7 & d_7 & e_7 & & & \\
 & & & & & f_8 & & c_8 & d_8 & e_8 & & \\
 & & & & & f_9 & & & c_9 & d_9 & e_9 & \\
 & & & & & f_{10} & & & & c_{10} & d_{10} & e_{10} \\
 & & & & & f_{11} & & & & & c_{11} & d_{11}
\end{array}\right|\cdot\left|\begin{array}{c}C_{0,k+1}\\C_{1,k+1}\\C_{2,k+1}\\C_{3,k+1}\\C_{4,k+1}\\C_{5,k+1}\\C_{6,k+1}\\C_{7,k+1}\\C_{8,k+1}\\C_{9,k+1}\\C_{10,k+1}\\C_{11,k+1}\end{array}\right|$$

(47)

Как видно из структуры представленной разреженной квадратной матрицы решение данного матричного уравнения не возможно методом прогонки, поэтому использовали метод Гаусса. В этом случае матрица не только не может быть вырожденной, но даже и почти вырожденная матрица не может быть использована. Вырожденность определяется как матрица, у которой детерминант равен нулю. Матрица является почти вырожденной, если имеет большое число обусловленности. Для расчета числа обусловленности c(A) использовали формулу

$$c(A)=\frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}}$$

(48)

где λ - собственные значения этой матрицы.

Основным параметром, влияющим на число обусловленности, является шаг сетки по времени. Поэтому исследовали его влияние на это число. В результате была выявлена зависимость, которая представлена на графике. С высокой точностью эта зависимость описывается уравнением

$$c(A) = -0{,}0278 \cdot \Delta\tau^2 + 12{,}949 \cdot \Delta\tau + 12{,}754$$

(49)

Как видно из представленных данных минимальное число обусловленности близко к 12,754. Для устойчивого решения системы содержащей 12 неизвестных это число не должно превышать 100.

Поэтому шаг по времени выбрали в пределах 600 секунд, что соответствует числу обусловленности равному *c(A)*=81.

ВЫВОД

Построена разностная схема математической модели массопереноса экстрагирования слоя.

Список литературы:

1. Кошевой Е.П. Процесс экстрагирования пищевых сред. В кн. Теоретические основы пищевых технологий: Книга 2.-М.: Колос, 2009. С.894-913.
2. Аксельруд Г.А., Альтшулер М.А. Введение в капиллярно-химическую технологию. - М.: Химия, 1983. – 263 с.
3. Самарский А.А. Теория разностных схем. – М.: Наука, 1983.-616 с.