

QUÁ TRÌNH THU HỒI CHẤT HÒA TAN TRONG CÁC VẬT XỐP

TRƯƠNG MINH CHÁNH

CÁC quá trình thu hồi vật chất từ các vật rắn xốp là một quá trình phổ biến trong công nghiệp hóa học. Thông thường do sự chênh lệch nồng độ của vật chất trong dung dịch ở các lỗ hổng của vật xốp với nồng độ trong dung môi (chất trích ly) ở bên ngoài nên xảy ra quá trình chuyển chất từ vật xốp ra ngoài. Các bài toán đơn giản mô tả sự chuyển chất trong một vật xốp mao dẫn trên cơ sở mô hình khuếch tán suy rộng cho các kết quả phù hợp với thực nghiệm [1]. Điều đó chứng tỏ có thể dùng mô hình đã đề ra để giải thích cho các quá trình chuyển chất khác. Các quá trình thu hồi trong công nghiệp thường được thực hiện với một số lớn các hạt xốp trong một thể tích hữu hạn theo nhiều phương pháp khác nhau, do đó bài toán đặt ra tương ứng trở nên phức tạp. Dưới đây ta trình bày một số bài toán đơn giản mô tả quá trình thu hồi chất từ hỗn hợp các hạt rắn xốp trong công nghiệp trên cơ sở mô hình khuếch tán suy rộng với một số điều kiện biên gần đúng tương ứng với tất cả các quá trình thực tế xảy ra trong các thiết bị công nghiệp [2, 3].

§ 1. ĐẶT BÀI TOÁN

Đối tượng nghiên cứu của chúng ta là các vật xốp có các lỗ hổng chứa đầy dung dịch cấu tử quý. Nếu kích thước của các lỗ hổng nhỏ (nhỏ hơn 10^{-4} cm) thì dung dịch ở trong đó có thể coi về thực tế là không chuyển động. Giả định rằng hỗn hợp các hạt xốp là đơn sắc, vật xốp là đồng nhất và đẳng hướng theo quan điểm khuếch tán sao cho nồng độ của vật chất ở mỗi điểm của vật xốp được mô tả bởi hệ phương trình trong [1]. Đối với hỗn hợp đơn sắc của các vật xốp hình cầu bán kính R, hình trụ tròn bán kính R dài vô hạn, bản phẳng vô hạn dày 2R thì bài toán theo lý thuyết khuếch tán [1] tương ứng với bài toán cổ điển [2, 3, 4] được mô tả bởi hệ phương trình và các điều kiện ở dạng không thứ nguyên sau:

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial F_0} &= \frac{\partial j}{\partial X} + \frac{\Gamma}{X} j \\ \frac{\partial j}{\partial F_0} &= -\frac{1}{\alpha} \left(j - \frac{\partial C}{\partial X} \right) \\ C|_{F_0=0} &= 0; \quad j|_{F_0=0} = 0 \\ [j + B_1(C - C_1)]_{X=1} &= 0 \\ C_1 &= 1 - \beta \bar{C} \\ C|_{X=0} &\neq \infty; \quad \frac{\partial C}{\partial X} \Big|_{X=0} = 0 \end{aligned} \quad (1.1)$$

trong đó ta đặt

$$C = \frac{C_0 - C}{C_0 - C_*}, \quad j = \frac{JR}{\rho D_* (C_0 - C_*)}, \quad X = \frac{r}{R}$$

$$F_0 = \frac{D_* t}{R^2}, \quad \kappa = \frac{D_* \tau_*}{R^2}, \quad Bi = \frac{kR}{D_*}$$

$$\bar{C} = (\Gamma + 1) \int_0^1 C X^\Gamma dX \quad (1.2)$$

$$\bar{J} = (\Gamma + 1) \int_0^1 j X^\Gamma dX$$

Đại lượng C_0 là nồng độ không đổi ban đầu, C_1 là nồng độ vật chất ở khối dung môi trích ly, C_* là nồng độ của dung môi; k là hệ số trao đổi chất của môi trường xốp với bên ngoài; $\beta = \frac{V}{W}$ trong đó V là thể tích của tất cả các lỗ hổng trong hỗn hợp hạt xốp, W là thể tích dung môi trong thiết bị. Điều kiện biên mà ta đã đưa ra ở trên là điều kiện chung cho cả ba phương pháp thực hiện quá trình thu hồi trong công nghiệp: theo qui trình tuần hoàn kín, qui trình chảy thuận và qui trình chảy ngược. Các đại lượng khác được dẫn ra như trong [1].

§ 2. QUÁ TRÌNH THU HỒI TỪ HỖN HỢP ĐƠN SẮC

Hệ phương trình (1.1) đối với hỗn hợp đơn sắc của các hạt dạng bản phẳng ($\Gamma=0$), hình trụ tròn ($\Gamma=1$) và hình cầu ($\Gamma=2$) có thể giải dễ dàng bằng phép biến đổi tích phân Laplace. Tác giả đã thu được nghiệm của bài toán cho cả ba trường hợp dưới đây để ngắn gọn chỉ trình bày trường hợp hình cầu bán kính R .

Chọn hệ tọa độ cầu (r, θ, φ) với gốc nằm ở tâm hình cầu và tọa độ r hướng theo phương bán kính (phương của quá trình chuyển chất). Khi đó với $\Gamma=2$, $X = \frac{r}{R}$ ta có nghiệm của bài toán (1.1) trình bày ở dạng:

$$C(X, F_0, Bi, \kappa) = \frac{1}{1 + \beta} + \sum_{n=1}^N \frac{3\beta (1 + \sqrt{1 - 4\kappa\mu_n^2}) - \frac{2\mu_n^2}{Bi}}{\sqrt{1 - 4\kappa\mu_n^2}} \times$$

$$\times \frac{\frac{\sin \mu_n X}{X \sin \mu_n} \exp\left(-1 + \sqrt{1 - 4\kappa\mu_n^2}\right) \frac{F_0}{2\kappa}}{\left[3\beta - \frac{2\mu_n^2}{Bi (1 + \sqrt{1 - 4\kappa\mu_n^2})}\right]^2 + \mu_n^2 \left[1 - \frac{2}{Bi (1 + \sqrt{1 - 4\kappa\mu_n^2})}\right]} + 9\beta$$

$$j(X, F_0, B_i, \kappa) = \sum_{n=1}^N \frac{3\beta - \frac{2\mu_n^2}{B_i(1 + \sqrt{1 - 4\kappa\mu_n^2})}}{\sqrt{1 - 4\kappa\mu_n^2} X^2 \sin \mu_n} \times$$

$$\times \frac{2(\mu_n X \cos \mu_n X - \sin \mu_n X) \exp\left(-1 + \sqrt{1 - 4\kappa\mu_n^2}\right) \frac{F_0}{2\kappa}}{\left[3\beta - \frac{2\mu_n^2}{B_i(1 + \sqrt{1 - 4\kappa\mu_n^2})}\right]^2 + \mu_n^2 \left[1 - \frac{2}{B_i(1 + \sqrt{1 - 4\kappa\mu_n^2})}\right] + 9\beta} \quad (2.1)$$

Các đại lượng đặc trưng trung bình theo thể tích có dạng:

$$\bar{C}(F_0, B_i, \kappa) = \frac{1}{1 + \beta} \sum_{n=1}^N \frac{3\left(1 + \sqrt{1 - 4\kappa\mu_n^2}\right) \exp\left(-1 + \sqrt{1 - 4\kappa\mu_n^2}\right) \frac{F_0}{2\kappa}}{\left[3\beta - \frac{2\mu_n^2}{B_i(1 + \sqrt{1 - 4\kappa\mu_n^2})}\right]^2 + \mu_n^2 \left[1 - \frac{2}{B_i(1 + \sqrt{1 - 4\kappa\mu_n^2})}\right] + 9\beta}$$

$$\bar{j}(F_0, B_i, \kappa) = \sum_{n=1}^N \frac{3\beta - \frac{2\mu_n^2}{B_i(1 + \sqrt{1 - 4\kappa\mu_n^2})}}{(\mu_n \sin \mu_n) \sqrt{1 - 4\kappa\mu_n^2}} \times$$

$$\times \frac{6(\mu_n \sin \mu_n + 2 \cos \mu_n - 2) \exp\left(-1 + \sqrt{1 - 4\kappa\mu_n^2}\right) \frac{F_0}{2\kappa}}{\left[3\beta - \frac{2\mu_n^2}{B_i(1 + \sqrt{1 - 4\kappa\mu_n^2})}\right]^2 + \mu_n^2 \left[1 - \frac{2}{B_i(1 + \sqrt{1 - 4\kappa\mu_n^2})}\right] + 9\beta} \quad (2.2)$$

Trong công thức (2.1) và (2.2) để các đại lượng tìm được là xác định và mô tả đúng quá trình thu hồi chất hòa tan từ hỗn hợp các hạt xốp ta cần thêm điều kiện

$$\beta > -1 \quad (2.3)$$

Các giá trị μ_n được xác định từ phương trình đặc trưng

$$\text{ctg } \mu = \frac{1}{\mu} + \frac{1}{\frac{3\beta}{\mu} - \frac{2\mu}{B_i(1 + \sqrt{1 - 4\kappa\mu_n^2})}} \quad (2.4)$$

Phương trình đặc trưng (2.4) cho vô số nghiệm μ_n nhưng ta chỉ chọn N nghiệm thỏa mãn điều kiện

$$\mu \leq \frac{1}{2\sqrt{\kappa}} \quad (2.5)$$

Phương trình động học mô tả đường cong C_1 ở các thời điểm có thể dễ dàng xác định từ (1.1), (2.2). Phương trình này chính là phương trình xác định nồng độ trung bình của vật chất trong dung môi khi tiến hành quá trình thu hồi và rõ ràng nhờ nó ta có thể dễ dàng so sánh với các số liệu thực nghiệm hơn là đối với trường nồng độ bên trong vật xốp.

Từ các phương trình nhận được cũng có thể xét các trường hợp đơn giản hơn. Khi tăng chuẩn số Biô vận tốc thu hồi cũng tăng, khi $B_i \rightarrow \infty$ sức cản khuếch tán bên ngoài coi như không đáng kể, điều kiện biên loại ba mà ta đã xét sẽ chuyển thành điều kiện biên loại thứ nhất. Các kết quả tương ứng dễ dàng nhận được từ các nghiệm trên khi cho $B_i \rightarrow \infty$.

Trường hợp khi quá trình thu hồi được tiến hành với thể tích dung môi rất lớn so với thể tích của pha rắn, khi đó ta có $\beta = 0$. Khi vận tốc của quá trình chuyển chất rất lớn thì phương trình khuếch tán dạng hyperbolic (1.1) sẽ chuyển về phương trình khuếch tán dạng parabolic cổ điển (ứng với $\alpha = 0$). Nghiệm của các trường hợp riêng này cũng dễ dàng nhận được từ (2.1) - (2.5).

§ 3. QUÁ TRÌNH THU HỒI TỪ HỖN HỢP ĐA SẮC

Bây giờ ta xét động học của quá trình thu hồi chất hòa tan từ hỗn hợp đa sắc của các hạt xếp hình dạng như nhau nhưng có kích thước khác nhau khi cho trước hàm phân bố hạt theo kích thước của chúng. Rõ ràng đối với các hỗn hợp đa sắc như trên ta thấy ở cùng một thời điểm đã cho mức độ thu hồi chất đối với các hạt có kích thước khác nhau sẽ không như nhau. Quá trình thu hồi từ các hạt nhỏ sẽ xảy ra nhanh hơn so với quá trình thu hồi từ các hạt lớn vì gradient nồng độ ở các hạt nhỏ lớn hơn.

Dưới đây ta chỉ hạn chế xét quá trình thu hồi từ các hạt xếp hình cầu có bán kính khác nhau, bài toán tương tự trong trường hợp cổ điển đã được trình bày ở [3, 4]. Giả sử hỗn hợp được tạo thành từ q loại hạt (trong loại i các hạt đều có cùng một bán kính R_i) và nồng độ thể tích của các lỗ hổng trong mỗi loại so với thể tích của các lỗ hổng trong toàn hỗn hợp được cho trước không đổi và bằng φ_i ($i = 1, \dots, q$), các loại hạt đều có cùng tính chất như nhau (đặc trưng bởi cùng các hằng số D_*, τ_*, \dots).

Quá trình thu hồi chất từ hỗn hợp đa sắc của các hình cầu được mô tả bởi bài toán tương tự như bài toán đã xét ở trên và trình bày ở dạng:

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_i}{\partial F_0} &= \frac{\partial j_i}{\partial X} + \frac{2}{X} j_i, & \frac{\partial j_i}{\partial F_0} &= -\frac{1}{\alpha} \left(j_i - \frac{\partial C_i}{\partial X} \right) \\ C_i|_{F_0=0} &= 0, & j_i|_{F_0=0} &= 0 \\ \frac{\partial C_i}{\partial X} \Big|_{X=0} &= 0, & C_i \Big|_{X=R_i} &= C_i = 1 - \beta \bar{C} \end{aligned} \quad (3.1)$$

Các đại lượng \bar{C} và \bar{j} là các đại lượng trung bình theo thể tích xác định nhờ công thức

$$\bar{C} = \sum_{i=1}^q \varphi_i \bar{C}_i; \quad \bar{j} = \sum_{i=1}^q \varphi_i \bar{j}_i \quad (3.2)$$

còn kích thước đặc trưng R ta sẽ xác định khi giải bài toán.

Nghiệm \bar{C}, \bar{j} có dạng:

$$\bar{C}(F_0, \alpha) = \frac{1}{1+\beta} + \sum_{n=1}^N \left\{ \frac{\exp(-1 - \sqrt{1-4\alpha\mu_n^2}) \frac{F_0}{2\alpha}}{1 + \sqrt{1-4\alpha\mu_n^2}} - \frac{\exp(-1 + \sqrt{1-4\alpha\mu_n^2}) \frac{F_0}{2\alpha}}{1 - \sqrt{1-4\alpha\mu_n^2}} \right\}$$

$$\frac{4\kappa\mu_n^2}{\beta\sqrt{1-4\kappa\mu_n^2}\left[1+3\beta\left(1-\frac{1}{\mu_n^2}+\sum_{i=1}^q\varphi_i\text{ctg}^2\alpha_i\mu_n\right)\right]}$$

$$\bar{j}(F_0, \kappa) = 6 \sum_{n=1}^N \left[\exp(-1 + \sqrt{1-4\kappa\mu_n^2}) \frac{F_0}{2\kappa} - \exp(-1 - \sqrt{1-4\kappa\mu_n^2}) \frac{F_0}{2\kappa} \right]$$

$$\frac{\mu_n + 2 \sum_{i=1}^q \frac{\varphi_i \text{ctg} \alpha_i \mu_n}{\alpha_i^3} - 2 \sum_{i=1}^q \frac{\varphi_i}{\alpha_i^3 \sin \alpha_i \mu_n}}{\mu_n \sqrt{1-4\kappa\mu_n^2} \left[1 + 3\beta \left(1 - \frac{1}{\mu_n^2} + \sum_{i=1}^q \varphi_i \text{ctg}^2 \alpha_i \mu_n \right) \right]}, \sum_{i=1}^q \frac{\varphi_i}{\alpha_i^2} = 1, \alpha_i = \frac{R_i}{R}, (i = 1, 2, \dots, q)$$

trong đó các giá trị đặc trưng μ_n được xác định từ phương trình

$$\frac{1}{\mu} + \frac{\mu}{3\beta} = \sum_{i=1}^q \varphi_i \frac{\text{ctg} \alpha_i \mu}{\alpha_i}, \mu \leq \frac{1}{2\sqrt{\kappa}} \quad (3.4)$$

Từ phương trình động học mô tả quá trình thu hồi chất từ hỗn hợp các hạt xốp hình cầu có kích thước khác nhau ta dễ dàng nhận được các trường hợp đã biết: Khi $\kappa \rightarrow 0$ ta thu được các kết quả ở [3]. Khi $R_i = R$ từ (3.3), (3.4) ta nhận được các công thức (2.2), (2.4) với $B_i = \infty$.

Địa chỉ
Đại học Tổng hợp

Nhận ngày 7-1-1981

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. TRƯƠNG MINH CHÁNH. Tạp chí Cơ Học, Số 3-1981
2. АКСЕЛЬРУД Г.А. ЖФХ, 2316-2324, 33, 10, 1959.
3. АКСЕЛЬРУД Г.А. ЖФХ 86-91, 34, 1, 1960.
4. АКСЕЛЬРУД Г.А. Массообмен в системе твердое тело-жидкость, Изд. Львовского университета, 1970.

SUMMARY

THE EXTRACTION OF DISSOLVED MATTER FROM POROUS MATERIALS

The extraction of dissolved matter from monodisperse of porous spheres and polydisperse mixture of spheres having different radii are considered within the framework of the generalized - diffusive theory. The obtained solutions are generalized as the classical results and can be used to define the kinematic coefficients.