

Modelování jednostupňové extrakce

Modeling of single-stage extraction

Vojtěch Grygar

Bakalářská práce
2009



Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně
Fakulta aplikované informatiky

Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně
Fakulta aplikované informatiky
Ústav automatizace a řídicí techniky
akademický rok: 2008/2009

ZADÁNÍ BAKALÁŘSKÉ PRÁCE

(PROJEKTU, UMĚLECKÉHO DÍLA, UMĚLECKÉHO VÝKONU)

Jméno a příjmení: **Vojtěch GRYGAR**
Studijní program: **B 3902 Inženýrská informatika**
Studijní obor: **Automatické řízení a informatika**

Téma práce: **Modelování jednostupňové extrakce**

Zásady pro vypracování:

1. Provedte literární studii týkající se extrakčních procesů a zaměřte se zejména na jednostupňovou extrakci vázané složky.
2. Seznamte se s matematickým popisem procesu a s řešením koncentračních polí v extrahovaném materiálu.
3. Vytvořte funkční programovou aplikaci v prostředí MATLAB pro výpočet koncentrace v tuhé fázi.
4. Ověřte funkčnost programu se vzorovým výpočtem.
5. Dosažené výsledky zhodnoťte v závěru práce.

Rozsah práce:

Rozsah příloh:

Forma zpracování bakalářské práce: **tištěná/elektronická**

Seznam odborné literatury:

1. KOLOMAZNÍK, Karel. Modelování zpracovatelských procesů. 1. vyd. Brno : Vysoké učení technické v Brně, 1990. 191 s. ISBN 80-214-01141.
2. CRANK, John. The Mathematics of Diffusion. Oxford : Oxford University Press, 1979. 414 s. ISBN 978-0-19-853411-2.
3. KOLOMAZNÍK, Karel, BAILEY, David G. a TAYLOR, Maryann E.. Delimiting of Bound and Un-bound Lime from White Hide. In 102nd Annual Meeting, Hyatt Regency, 1. vyd. Eastern Regional Research Center, Wyndmoor, PA: United States Department of Agriculture, 2006. s. 309-316. ISBN 0002-9726.
4. KOLOMAZNÍK, Karel. Analýza dynamických systémů. 1. vyd. Brno : Vysoké učení technické v Brně, 1988. 213 s.
5. KASATKIN, Andrei, G. Základní pochody a přístroje chemické technologie II. 1. vyd. Praha : Technicko-vědecké vydavatelství, 1952. 354 s.

Vedoucí bakalářské práce:

doc. Ing. Dagmar Janáčková, CSc.

Ústav automatizace a řídicí techniky

Datum zadání bakalářské práce:

27. února 2009

Termín odevzdání bakalářské práce:

20. května 2009

Ve Zlíně dne 27. února 2009

prof. Ing. Vladimír Vašek, CSc.

děkan



prof. Ing. Vladimír Vašek, CSc.

ředitel ústavu

ABSTRAKT

Obsahem práce je modelování extrakčního procesu vázané a nevázané složky. Na základě řešeného deterministického modelu extrakce je odvozena nákladová funkce. Za účelem optimalizace procesu jsem vytvořil funkční programovou aplikaci v prostředí Matlab, pomocí níž lze nalézt optimální množství extrakčního činidla a stanovit minimální náklady pro extrakci z pevné fáze. Program umožňuje zobrazit nákladovou křivku, 2D a 3D graf bezrozměrného koncentračního pole vypírané složky z tuhé fáze. Druhá část programové aplikace řeší výpočet difuzního koeficient z naměřených dat. Programy budou využívány nejen pro výpočty při výuce, ale také jej bude možno využívat při řešení extrakce vázané a nevázané složky v praxi.

Klíčová slova:

MATLAB, extrakce, vázaná a nevázaná složka, lázněová extrakce, koncentrace extrahované složky

ABSTRACT

The bachelor's thesis modeling extraction process bound and unbound substance. Based on the deterministic model of the extraction solution is derived cost function. In order to optimize the process, I created a functional application programming in Matlab, which can be found the optimal amount extraction's reagent to provide the minimum cost for the extraction of the solid phase. The program lets you view the cost function, 2D and 3D graph dimensionless concentration field washing of the solid phase component. The second part of the program solves the calculation of diffuse coefficient from the measured data. Programs won't be used to only to the calculations for teaching, but also it can be used in the extraction solution and the unbound-bound substance in practice.

Keywords:

MATLAB, extraction, bound and unbound substance, bath's extraction, concentration washing of substance

Rád bych touto cestou poděkoval vedoucí mé bakalářské práce doc. Ing. Dagmar Janáčové CSc. za její čas, připomínky, cenné rady a hlavně za trpělivost během vedení této práce.

Prohlašuji, že

- beru na vědomí, že odevzdáním bakalářské práce souhlasím se zveřejněním své práce podle zákona č. 111/1998 Sb. o vysokých školách a o změně a doplnění dalších zákonů (zákon o vysokých školách), ve znění pozdějších právních předpisů, bez ohledu na výsledek obhajoby;
- beru na vědomí, že bakalářská práce bude uložena v elektronické podobě v univerzitním informačním systému dostupná k prezenčnímu nahlédnutí, že jeden výtisk bakalářské práce bude uložen v příruční knihovně Fakulty aplikované informatiky Univerzity Tomáše Bati ve Zlíně a jeden výtisk bude uložen u vedoucího práce;
- byl/a jsem seznámen/a s tím, že na moji bakalářskou práci se plně vztahuje zákon č. 121/2000 Sb. o právu autorském, o právech souvisejících s právem autorským a o změně některých zákonů (autorský zákon) ve znění pozdějších právních předpisů, zejm. § 35 odst. 3;
- beru na vědomí, že podle § 60 odst. 1 autorského zákona má UTB ve Zlíně právo na uzavření licenční smlouvy o užití školního díla v rozsahu § 12 odst. 4 autorského zákona;
- beru na vědomí, že podle § 60 odst. 2 a 3 autorského zákona mohu užít své dílo – bakalářskou práci nebo poskytnout licenci k jejímu využití jen s předchozím písemným souhlasem Univerzity Tomáše Bati ve Zlíně, která je oprávněna v takovém případě ode mne požadovat přiměřený příspěvek na úhradu nákladů, které byly Univerzitou Tomáše Bati ve Zlíně na vytvoření díla vynaloženy (až do jejich skutečné výše);
- beru na vědomí, že pokud bylo k vypracování bakalářské práce využito softwaru poskytnutého Univerzitou Tomáše Bati ve Zlíně nebo jinými subjekty pouze ke studijním a výzkumným účelům (tedy pouze k nekomerčnímu využití), nelze výsledky bakalářské práce využít ke komerčním účelům;
- beru na vědomí, že pokud je výstupem bakalářské práce jakýkoliv softwarový produkt, považují se za součást práce rovněž i zdrojové kódy, popř. soubory, ze kterých se projekt skládá. Neodevzdání této součásti může být důvodem k neobhájení práce.

Prohlašuji,

že jsem na bakalářské práci pracoval samostatně a použitou literaturu jsem citoval.

V případě publikace výsledků budu uveden jako spoluautor.

Ve Zlíně

.....
podpis diplomanta

OBSAH

ÚVOD	8
I TEORETICKÁ ČÁST	9
1 EXTRAKCE	10
1.1 POJEM EXTRAKCE.....	10
1.2 ROZDĚLOVACÍ ZÁKON	11
1.3 VOLBA VHDNÉHO EXTRAKČNÍHO ČINIDLA.....	13
2 EXTRAKČNÍ TECHNIKY	15
2.1 EXTRAKCE KAPALINA – KAPALINA	15
2.2 SUPERKRITICKÁ FLUIDNÍ EXTRAKCE	17
2.3 EXTRAKCE Z TUHÉ FÁZE	18
3 MODELOVÁNÍ EXTRAKČNÍCH PROCESŮ	20
3.1 ROZDĚLENÍ EXTRAKČNÍCH PROCESŮ	20
3.2 TERMODYNAMIKA EXTRAKČNÍHO PROCESU	21
3.2.1 Vypírání vázané složky – lážňová extrakce	21
3.2.2 Vypírání nevázané složky – lážňová extrakce.....	23
3.3 DYNAMIKA EXTRAKČNÍCH PROCESŮ	24
3.3.1 Vypírání vázané složky – lážňová extrakce	24
3.3.2 Vypírání nevázané složky – lážňová extrakce.....	27
3.4 STANOVENÍ DIFUZNÍHO KOEFICIENTU	28
4 VZOROVÝ PŘÍKLAD	31
II PRAKTICKÁ ČÁST	37
5 PROGRAMOVÁ APLIKACE	38
5.1 VÝPOČET DIFUZNÍHO KOEFICIENTU.....	39
5.2 OPTIMALIZACE LÁŽŇOVÉ EXTRAKCE	43
ZÁVĚR	50
SUMMARY	52
SEZNAM POUŽITÉ LITERATURY	54
SEZNAM POUŽITÝCH SYMBOLŮ A ZKRATEK	56
SEZNAM OBRÁZKŮ	59
SEZNAM TABULEK	61

ÚVOD

Součástí mnoha technologických procesů jsou operace, které jsou založeny na principu extrakce. Extrakcí se nazývá separační (difuzní, dělicí) metoda, využívající principu difuze tj. samovolného přenosu látky pohybem molekul, z oblasti vyšší koncentrace, do oblasti s nižší koncentrací vlivem tepelného pohybu. Mezi extrakční procesy se řadí prací procesy, které jsou součástí téměř každé technologie. Proto je velmi významné se zabývat jejich optimalizací.

Hlavním cílem extrakce je získat cenné popř. nežádoucí rozpustné látky ze surovin, které lze rozpustit v kapalných rozpouštědla v tzv. extrakčních činidel. Suroviny, jenž jsou extrahovány, se spolu s extrakčními činidly směšují ve speciálních zařízeních, zvaných extraktory, které jsou součástí extrakčních zařízení. Tato zařízení lze dělit na jednostupňové a mnohastupňové a na zařízení s nepřetržitým nebo periodickým provozem.

Použitím nevhodných zařízení nebo extrakčních činidel popř. jejich množství se proces stává méně účinným nebo finančně nákladným, což se promítá do ceny výroby. Proto je nutné tyto procesy optimalizovat a navrhnout použití vhodného extrakčního zařízení s co nejmenším množstvím rozpouštědla, aby bylo dosaženo co nejlepších výsledků a tím se zredukovaly náklady daného procesu na minimum.

Pro minimalizaci nákladů je nezbytné tyto procesy bilancovat a následně optimalizovat a to cestou přímého či nepřímého modelování a následně je nutné provést verifikaci modelu.

Podstata přímého modelování spočívá v provádění experimentálního pokusu na modelu reálného zařízení. Pomocí této metody je snahou bez výpočtů a matematických analýz získat odpověď na to, jak se zkoumané zařízení bude chovat v provozu.

U nepřímého modelování se model popisuje matematicky, tj. sestavuje se matematický model, který by měl co nejpřesněji popisovat mechanismus procesu. Je zřejmé, že se během provozu zařízení mohou měnit vlastnosti některých surovin, jak z fyzikálního, tak i chemického hlediska, dále není možné vytvořit takové matematické modely, které by zahrnovaly všechny vlastnosti procesů, protože by nejen jejich určování bylo komplikované, ale i řešení těchto modelů by bylo obtížnější a složitější. Proto se při sestavování matematických modelů vychází ze zjednodušených vlastností procesů. Provedením experimentu pomocí navrženého matematického modelu se hovoří o tzv. simulaci zařízení.

I. TEORETICKÁ ČÁST

1 EXTRAKCE

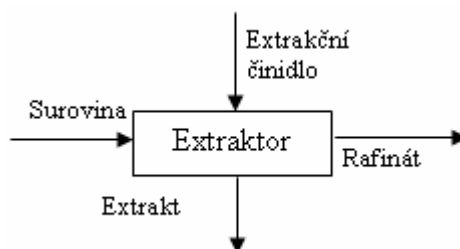
Extrakce se uplatňuje v mnoha technologických operacích, hlavně v chemickém, petrochemickém, farmaceutickém a potravinářském průmyslu a to jak v odvětví anorganických např. při izolaci síry nebo vzácných prvků ze zemin, tak i v organických např. při výrobě cukru, piva, nebo při získávání olejů, tuků, ale i dalších cenných látek z částí rostlinného a živočišného původu.

1.1 Pojem extrakce

Extrakce je separační (dělicí, difuzní) metoda, při které složka přítomná v tuhé nebo kapalně fázi přechází přes fázové rozhraní do rozpouštědla – extrakčního činidla.

Přechod složky přes fázové rozhraní může být realizováno buď pomocí difuzní hnací síly, nebo se uplatňuje chemický vliv, tj. jestliže extrahovaná složka reaguje z rozpouštědlem, kterým je extrahována.

Obohacené roztoky o extrahované složky se nazývají extrakty a suroviny ochuzené se jmenují rafináty. [1]



Obrázek 1.1 – Schéma extrakčního procesu

Extrakční proces zahrnuje tři na sebe navazující postupy: [2]

- 1) vlastní extrakční operaci, tj. uvedení rozpouštědla, kterým látku extrahujeme, do kontaktu s extrahovanou látkou a převodem této látky do rozpouštědla.
- 2) oddělení vzniklých fází; fáze, které vznikají vzájemným působením rozpouštědla a extrahované směsi, se rozdělují usazováním, filtrací, odstředováním, přimíšením dalších látek, které způsobí rozvrstvení roztoku na dvě kapalně fáze – vysolování nebo látky, jež způsobují vyloučení pevné fáze – krystalizace.

- 3) Odstranění extrakčního činidla z extraktu a rafinátu a jeho regenerace; aby se z extraktu získaly vyextrahované látky v čistém stavu, musí se roztoky destilovat nebo krystalizovat popř. obě operace zároveň a z krystalů se pak zbytky rozpouštědel odstraní filtrací, odstředováním a sušením.

1.2 Rozdělovací zákon

Z definice extrakce vyplývá, že tento proces je založen na schopnosti látek, které jsou přítomny ve stýkajících se fázích v různých koncentracích, difundovat z jedné fáze do druhé.

Je-li extrakční činidlo ve styku se surovinou, nasycuje se rozpouštědlo vlivem difuze látkou, která je v něm rozpustná, protože je v něm obsažená v menší koncentraci.

Rovnovážné rozdělení složky mezi zpracovávanou směsí a extrakčním činidlem neboli mezi dvěma fázemi se určuje rozdělovacím koeficientem. [2]

$$K_R = \frac{c_0}{c} \quad (1.1)$$

kde c_0 – koncentrace extrahované složky v extraktu [kg/m^3]

c – koncentrace extrahované složky v rafinátu [kg/m^3]

Zákony průchodu hmoty z jedné fáze do druhé jsou popsány difuzními rovnicemi, které pro rozpouštění tuhých látek v kapalinách poprvé odvodil A. V. Ščukarev. [2]

Pro nehybné prostředí

$$dG = -DdF \frac{dc}{dx} dt \quad (1.2)$$

Pro pohybující se prostředí

$$\frac{dc}{dt} = D \frac{d^2c}{dx^2} \quad (1.3)$$

kde G – množství prodifundované látky [kg], D – difuzní koeficient [m^2s^{-1}], F – povrch difuze [m^2], t – čas [s], $\frac{dc}{dx}$ – koncentrační gradient, x – souřadnice polohy [m]

Po aplikaci těchto vztahů na extrakci lze vyvodit tyto závěry: [2]

1. styčná plocha fází F má být při extrakci co největší, při extrakci z tuhých látek se zvětšuje styčná plocha rozmělněním tuhé fáze nebo promícháváním, při extrakci z kapaliny probubláváním nebo rozprašováním
2. koncentrační gradient $\frac{dc}{dx}$, který určuje hnací sílu procesu, má být co největší.
Můžeme ho zvětšit buď použitím většího množství extrakčního činidla nebo tím, že proces extrakce uspořádáme protiproudě
3. při extrakci v pohybujícím se prostředí má být rychlost pohybu fází w co největší; velká rychlost zmenšuje tloušťku laminárního filmu na rozhraní obou fází, který představuje hlavní odpor difuze rozpuštěné složky
4. aby bylo získáno co nejvíce extrahované složky G , měla by také doba trvání extrakce být co nejdelší. Avšak prodlužovat extrakci je výhodné pouze do určité meze. Po jejím překročení se extrahované množství nijak výrazně nezvětší, ani když značně prodloužíme dobu trvání extrakce.

1.3 Volba vhodného extrakčního činidla

Průběh extrakce závisí na volbě rozpouštědla. Při jeho nejvhodnějším výběru se vychází z několika hledisek, která jsou někdy protichůdná, takže je třeba přihlídnout ke všem vlastnostem extrakčního činidla a zhodnotit je celkově. Pro extrakci je mimo rozdělovacího koeficientu důležitými rovnicemi selektivita, měrná hmotnost, povrchové napětí, vzájemná rozpustnost se surovinou, viskozita, pro další zpracování též napětí par, možnost rekuperace, korozivnost, jedovatost, hořlavost, teplota tuhnutí ale i cena a jeho dostupnost na trhu. [3]

Selektivita

Selektivitu je schopnost extrakčního činidla oddělit požadované složky z extrahované fáze. Extrakční činidlo označujeme pak jako selektivní pro extrahovanou složku. Selektivita rozpouštědla β_{CA} je numericky definována jako poměr extrakčních faktorů vymývané složky ε_C a pevné fáze ε_A . [3],[4]

$$\beta_{CA} = \frac{\varepsilon_C}{\varepsilon_A} \quad (1.4)$$

Extrakční faktor určité látky udává poměr jejího množství v extraktu k jejímu množství v rafinátu.

$$\varepsilon_C = \frac{E_{w_{CB}}}{R_{w_{CA}}} \quad (1.5)$$

$$\varepsilon_A = \frac{E_{w_{AB}}}{R_{w_{AA}}} \quad (1.6)$$

kde E – hmotnost extraktu

R – hmotnost rafinátu

w_{CB}, w_{CA} - hmotnostní zlomek vypírané složky v extraktu a rafinátu

w_{AB}, w_{AA} - hmotnostní zlomek pevné fáze v extraktu a rafinátu

Vzájemná rozpustnost složek

Pro snadnější regeneraci extrakčního činidla se předpokládá malá vzájemná rozpustnost pevné fáze v rozpouštědle.

Hustota

Relativně velký rozdíl hustot extraktu a rafinátu zkracuje dobu usazování, tedy potřebnou dobu prodlení směsi v usazováku [3]

Mezipovrchové (mezifázové) napětí

Mezipovrchové napětí by mělo být mezi oběma fázemi co největší, aby se zajistila jejich snadná oddělitelnost. Avšak příliš vysoká hodnota může způsobit obtíže při dispergování obou fází během extrakce, zatímco malé hodnoty mezipovrchových napětí mohou vést k tvorbě stabilních emulzí.

Viskozita

Pro snížení nákladů na přečerpávání, pro vytvoření příznivějších podmínek teplotního přestupu při rekuperaci a pro zvýšení přípustné rychlosti průtoku extrakčních zařízení je třeba dávat přednost látkám s co nejmenší viskozitou.

Hořlavost

Z hlediska provozní bezpečnosti se dává přednost rozpouštědlům nehořlavým, např. chlorid uhličitý, trichlóretylénu apod. – jenž však mohou působit často korozivně. Z hořlavých rozpouštědel volíme taková, která mají pokud možno malou těkavost.

Toxicita

Použití rozpouštědel ohrožujících zdraví vyžaduje zvláštní bezpečnostní opatření a zaostřený dozor při práci. [4]

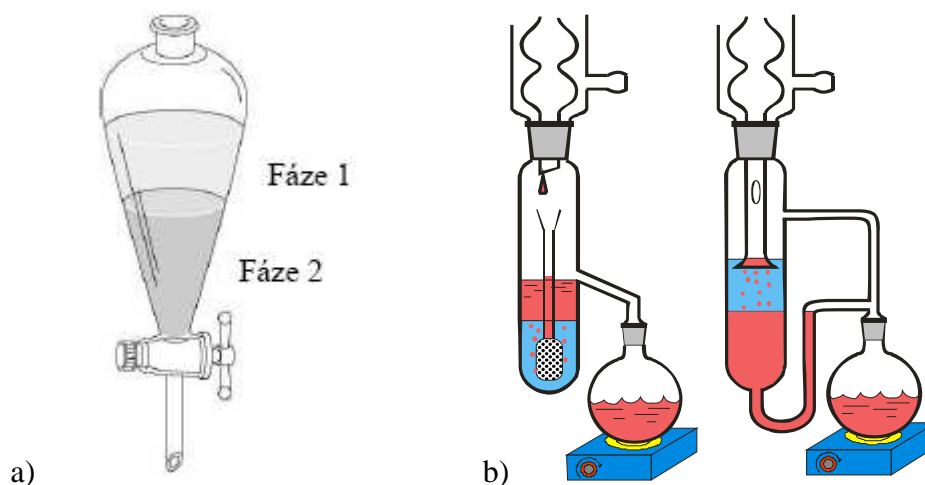
2 EXTRAKČNÍ TECHNIKY

2.1 Extrakce kapalina – kapalina

Extrakce kapalinou (LLE-Liquid – Liquid Extraction) je jednoduchá metoda, která patří k často používaným separačním metodám.

Extrahovaná látka přechází z jedné kapalně fáze do druhé tak dlouho, až se ustaví rovnováha. Extrahovat lze pouze takovým rozpouštědlem, které se s kapalnou směsí nemísí.

V současnosti se tato metoda používá hlavně k extrakci lipidů. Nevýhodou LLE je tvorba emulzí, velké objemy vzorku, velké množství použití organického rozpouštědla.[5]



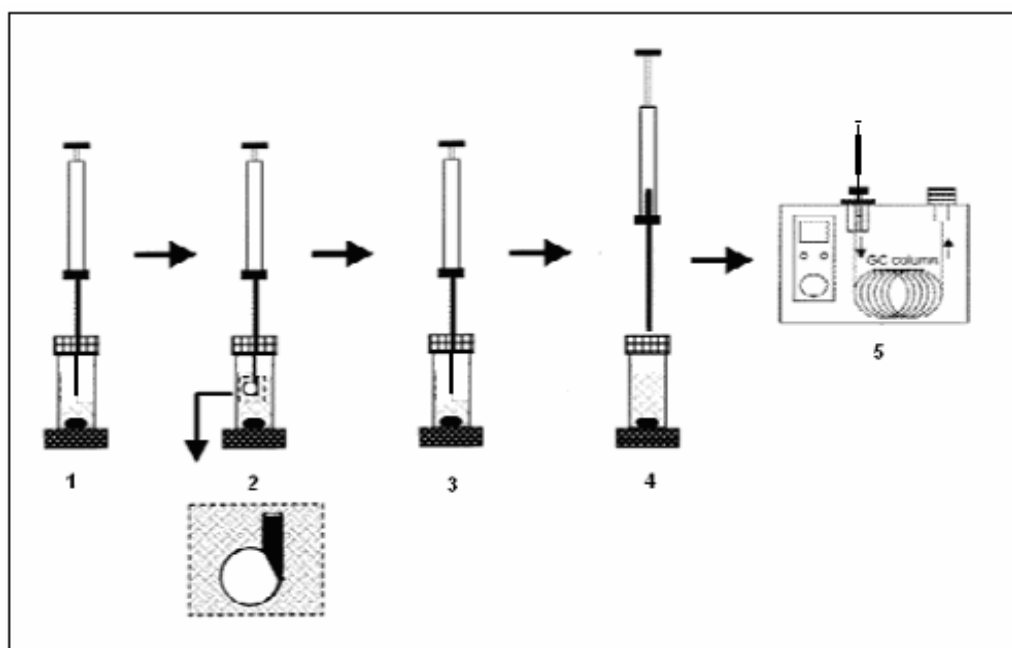
Obrázek 2.1 – Extrakce kapalinou a) vytřepáváním nebo b) tzv. perforátory [6],[7]

Pod skupinou této extrakční techniky je tzv. mikroextrakce kapalina – kapalina, která byla poprvé popsána roku 1996. Je známá pod názvem mikroextrakce jednou kapkou (SDME – Single Drop MicroExtraction).

Metoda využívá kapky rozpouštědla na konci teflonového vlákna, nebo nověji na špičce nástřikové jehly. Injekční stříkačka obsahuje určité množství extrakčního činidla, její jehla je ponořena do nádoby s vodným roztokem a poté je z jehly vytlačena 2 μ l kapka rozpouštědla do vzorku. Po působení (extrahování) kapkou ve vodném roztoku je kapka

vtažena zpět do stříkačky, jehla vytažena z nádoby a posléze je proveden nástřik do chromatografického přístroje. Celý proces extrakce musí být přesně opakován. [8]

Mezi hlavní výhody se řadí snížení pořizovacích a provozních nákladů, úspora času a snahou je minimalizovat množství extrakčního činidla. Nevýhodou je horší reprodukovatelnost – teplota a čas extrakce. Tyto faktory musí být stále stejné. Z hlediska teploty extrakce s jejím zvyšováním vzrůstá množství extrahovaných látek, ale zároveň se i urychluje rozpouštění organické kapky. Proto se ideální teplota pohybuje okolo 40°C. [8]



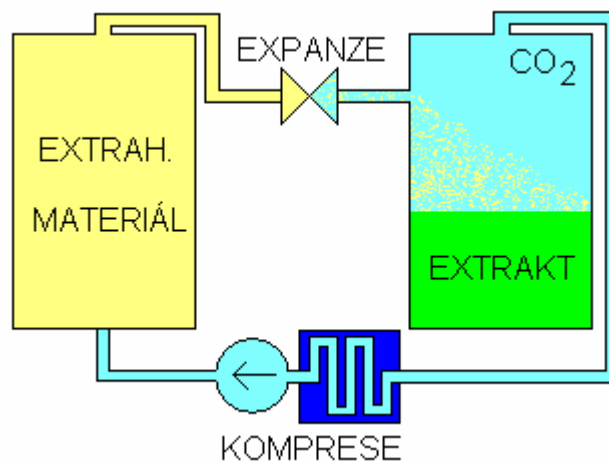
Obrázek 2.2 – Princip mikroextrakce kapalina-kapalina

2.2 Superkritická fluidní extrakce

V současné době se rozvíjí extrakce pomocí tzv. superkritických tekutin - plyny získávají stlačením a ohřením do nadkritického (superkritického) stavu dobrou rozpouštěcí schopnost.

Extrakční postup, který využívá rozpouštědlo v nadkritickém stavu, nazýváme superkritická extrakce (SFE). Z nejrůznějších testovaných plynů se jako nejvhodnější ukázal oxid uhličitý.

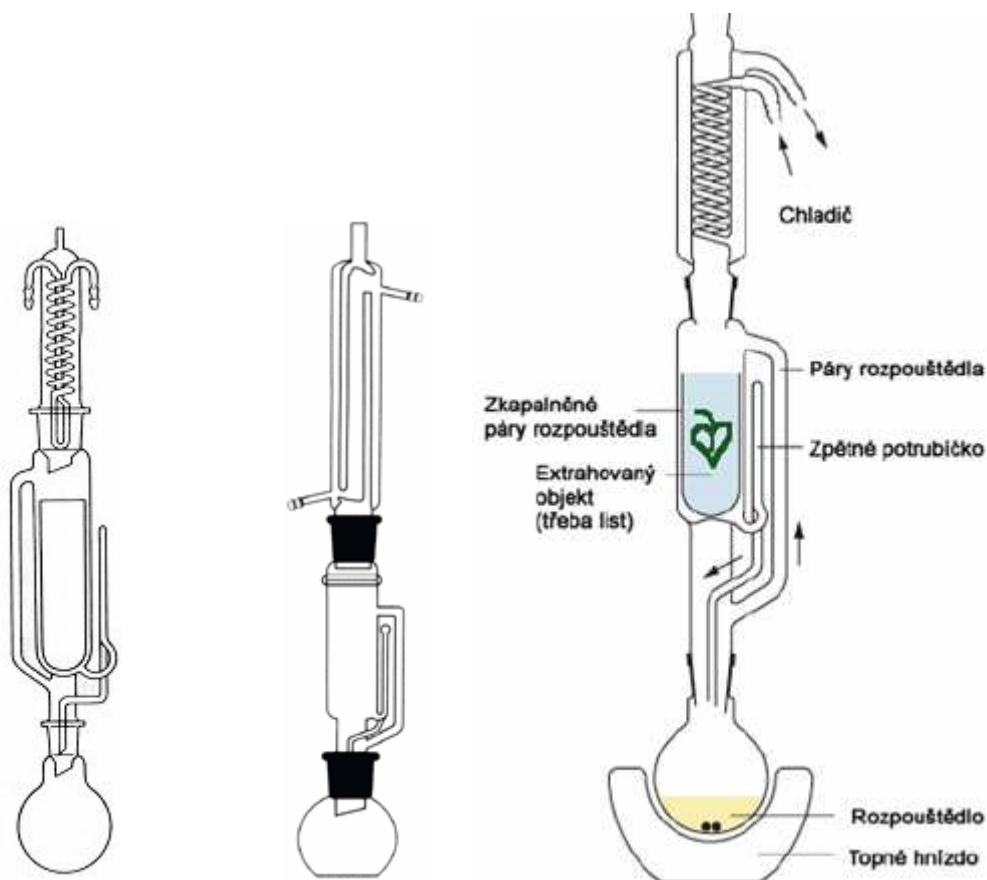
Výhodou extrakce oxidem uhličitým je jeho nehořlavost, nízká cena, extrakt neobsahuje žádné zbytky toxických rozpouštědel, fyziologicky nezávadný a nevzniká ekologicky závadný odpad. [9]



Obrázek 2.3 – Princip superkritické fluidní extrakce [10]

2.3 Extrakce z tuhé fáze

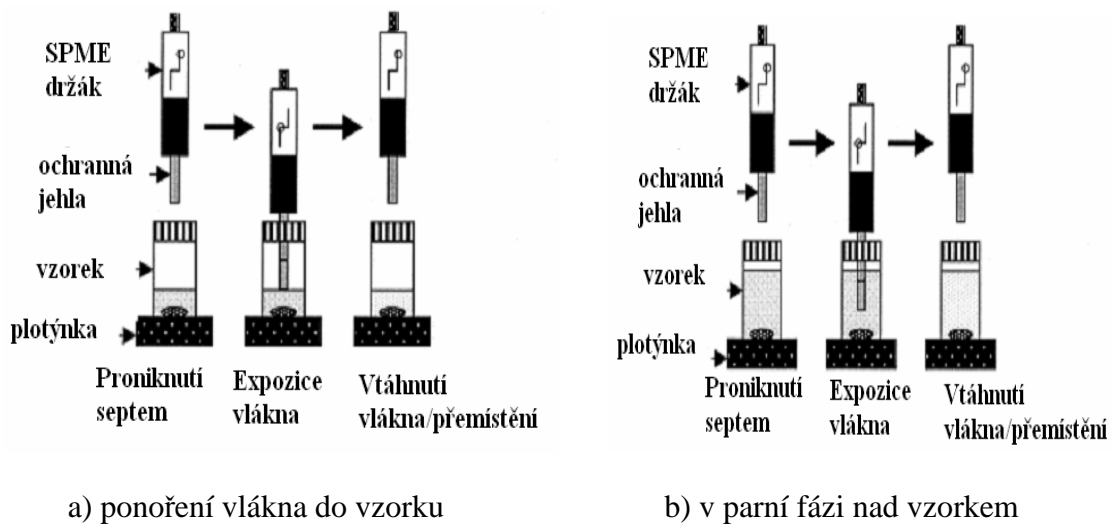
Extrakce z tuhé fáze (SPE – Solid Phase Extraction) se v poslední době stala dosti používanou metodou. Při použití této metody se lze vyhnout řadě problémů, které jsou spojeny s extrakcí kapalina – kapalina. Nejdůležitější výhodou je snížení spotřeby organických rozpouštědel, která jsou často řazena mezi látky jedovaté, ničí ozónovou vrstvu, ale i jinak nebezpečné, dále je to i zkrácení doby extrakce, dosažení vyšší účinnosti a v neposlední řadě i možnost automatizace. [11]



Obrázek 2.4 – Soxhletovy extraktory [12],[13]

Poměrně novou, ale již relativně standardně používanou extrakční metodou je mikroextrakce z pevné fáze (Solid-Phase MicroExtraction – SPME).

Její základní princip je velmi jednoduchý – vhodný sorbent (adsorbent) je navázán na jemné “tyče“, jako jsou křemičitá vlákna nebo dráty. Tato vlákna jsou ponořena do vzorků a analyt je extrahován na obalené vlákno. Celý systém připomíná injekční stříkačku. Jako adsorbenty se používají nejen polární i nepolární látky. [5]



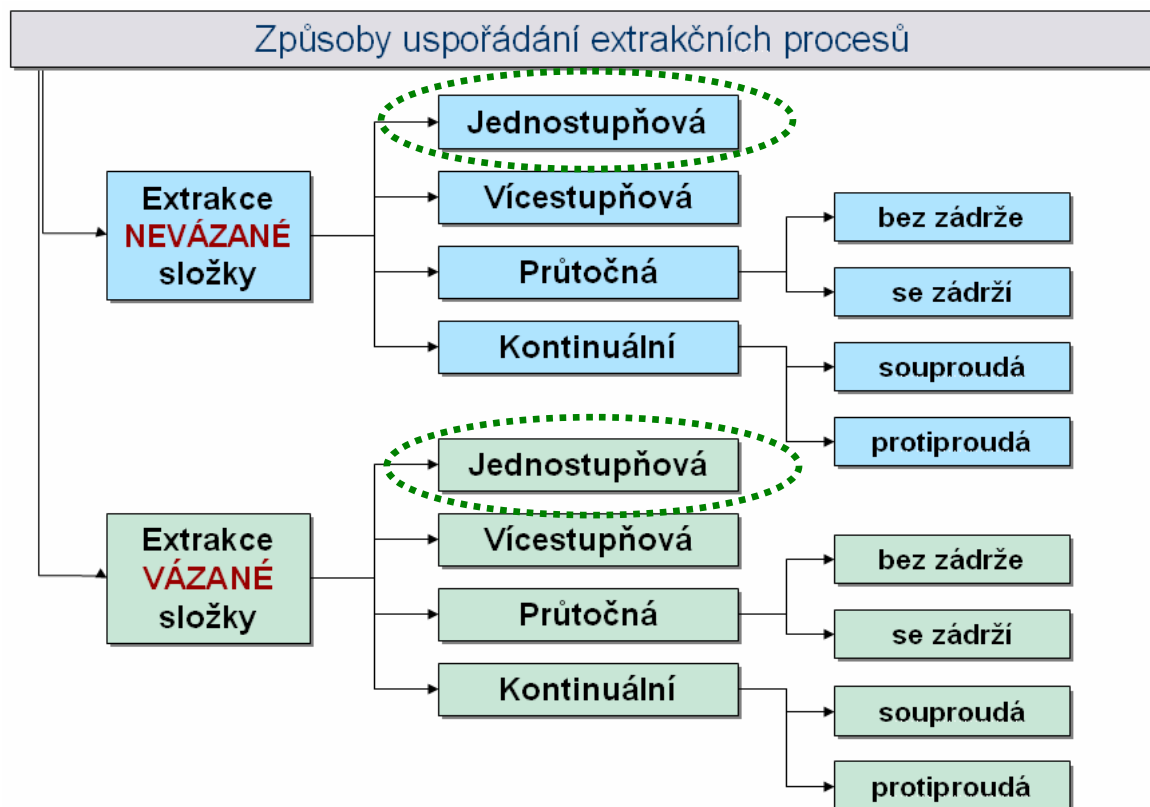
Obrázek 2.5 – Mikroextrakce z tuhé fáze [14]

3 MODELOVÁNÍ EXTRAČNÍCH PROCESŮ

Účelem je snížení množství složky v pevné fázi, přičemž se využívá rozdílných chemických potenciálů extrahované složky v pevné fázi a extrakční lázni. V provozních podmínkách extrakčního procesu se může měnit pevná fáze, ať už po chemické nebo fyzikální stránce, což nejen komplikuje určení matematického modelu, ale činí řešení těchto modelů značně obtížným a složitým. Složitost a pracnost obecného řešení může v některých případech překrývat i praktický účel modelování technologických procesů. Z tohoto důvodu se pod pojmem extrakční proces rozumí taková technologická operace, kdy během extrakce je podstatné a rozhodující snížení množství extrahované složky, přičemž změny pevné fáze během extrakčního procesu jsou zanedbatelné. [15]

3.1 Rozdělení extrakčních procesů

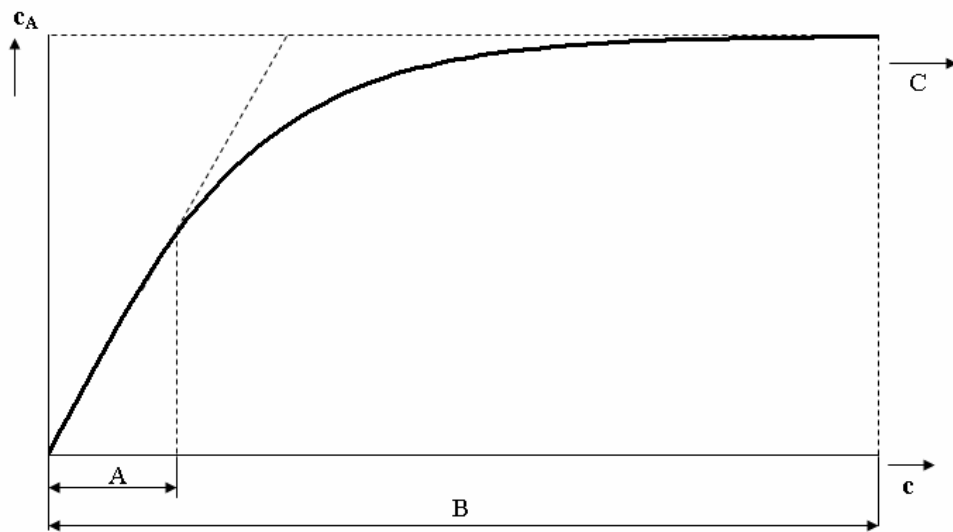
Podle způsobu uspořádání lze extrakční procesy rozdělit na několik případů Obrázek 3.1, proto jsem se ve své bakalářské práci zaměřil pouze na jednostupňovou extrakci vázané a nevázané složky.



Obrázek 3.1 – Rozdělení extrakčních procesů, [16]

3.2 Termodynamika extrakčního procesu

Při optimalizaci extrakčního procesu, je důležité vědět, zda extrahovaná složka je vázaná na pevnou fázi či nikoliv, což lze zjistit stanovením sorpční izotermy, tj. závislost rovnovážné koncentrace extrahované složky v pevné fázi na rovnovážné koncentraci složky v lázni. Rovnovážná koncentrace je taková koncentrace, která se nemění s časem při konstantních podmínkách experimentu, tzn. nemění se vlastnosti systému jako celku – teplota, tlak, složení apod. Obecná sorpční křivka je zobrazena na Obrázek 3.2 [15]



Obrázek 3.2 – Obecná sorpční izoterma

Podstatné je zjistit, ve které části sorpční izotermy se nachází stav vypírané složky. V oblasti označené “C” je vypíraná složka volná – neváže se. V části “B” je vypíraná složka vázaná na pevnou fázi. V zóně “A” je sorpční závislost prakticky lineární, přičemž konstanta úměrnosti nám charakterizuje sílu vazby na pevnou fázi, tzn. do značné míry dovoluje určit jak je praní v této oblasti účinné. [16]

3.2.1 Vypírání vázané složky – lážňová extrakce

Ve většině případů v důsledku aktivity pevné fáze se vypíraná složka sorbuje. V obecném případě sorpční izoterma závisí na struktuře pevné fáze, aktivitě povrchu a jeho interakci se sorbovanou složkou, na teplotě, stupni pokrytí, koncentraci doprovázejících složek, vlastnostech rozpouštědla aj. Z toho vyplývá, že tvar sorpční izotermy, tj. rovnovážné závislosti koncentrace vázané složky na rovnovážné závislosti koncentrace této složky

v roztoku je komplikovaný. V nejjednodušším případě lze tuto závislost vyjádřit pomocí Langmuirovou sorpční izotermou [16]

$$c_A = \frac{Kc}{Bc + 1} \quad (3.1)$$

Pro velmi malé koncentrace, kdy $Bc \ll 1$, lze vymezit oblast, kdy sorpční izoterma má lineární tvar

$$c_A = Kc \quad (3.2)$$

Pro velké koncentrace, $Bc \gg 1$, dostaneme maximální hodnotu koncentrace sorbované složky nazývané někdy sorpční kapacita pevné fáze

$$c_A = \frac{K}{Bc} \quad (3.3)$$

Bilance prané složky: [15]

$$c_p V + c_{Ap} V = V_o c_o + cV + c_A V \quad (3.4)$$

V rovnováze platí, že $\varepsilon \cdot c_o = c$, takže s využitím rovnice (3.2) a po úpravách platí vztah:

$$c_o = \frac{c_p (1 + K)V}{V_o + \varepsilon(1 + K)V} = \frac{c_p (1 + K)}{Na + \varepsilon(1 + K)} \quad (3.5)$$

Pro stupeň pracího procesu platí:

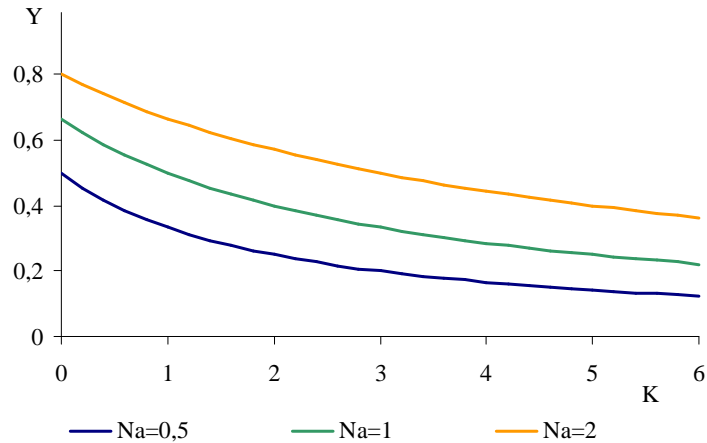
$$y = \frac{c_o V_o}{V(c_p + Kc_p)} = \frac{c_o Na}{c_p (1 + K)} \quad (3.6)$$

Použijeme-li předcházejícího vztahu $c_o = \frac{c_p (1 + K)V}{V_o + \varepsilon(1 + K)V} = \frac{c_p (1 + K)}{Na + \varepsilon(1 + K)}$ (3.5), pro

c_o , získá se konečný vztah pro y :

$$y = \frac{Na}{Na + \varepsilon(1 + K)} \quad (3.7)$$

Závislost jakosti praní na velikosti rovnovážné konstanty sorpce (síla vazby sorbované složky na pevnou fázi) je zobrazena na Obrázek 3.3 [15]



Obrázek 3.3 – Závislost jakosti praní na síle vazby vypírané složky s pevnou fází pro různá námoková čísla

3.2.2 Vypírání nevázané složky – lážňová extrakce

Je-li hodnota síly vazby $K=0$, tak po dosazení do rovnice (3.4) platí vztah pro bilanci extrahované nevázané složky ve tvaru

$$c_p V = V_o c_o + cV \quad (3.8)$$

Pro koncentraci extrahované složky v lázni platí

$$c_o = \frac{c_p V}{V_o + \varepsilon V} = \frac{c_p}{Na + \varepsilon} \quad (3.9)$$

Stupeň pracího procesu y je dán jako podíl hmotnosti vyextrahované složky k počáteční hmotnosti této složky v pevné fázi

$$y = \frac{Na}{Na + \varepsilon} \quad (3.10)$$

[16]

3.3 Dynamika extrakčních procesů

U většiny uspořádání pracího procesu ve zpracovatelské technologii je rychlost dosažení uvažovaného stupně extrakce dána transportním procesem, tzn. že k popisu jednotlivých extrakčních procesů se používají difuzní modely. [15]

3.3.1 Vypírání vázané složky – lážňová extrakce

Difuzními modely jsou takové matematické modely, u kterých se předpokládá, že transport vypírané složky uvnitř pevné fáze se dá popsat difuzní rovnicí jejíž řešením je koncentrační pole uvnitř pevné fáze a časová závislost extrahované složky v okolní kapalině. Vztah mezi koncentrací vázané složky a koncentrací téže složky nevázané je lineární. Dynamiku praní vázané složky lze považovat za zvláštní případ difuze s chemickou reakcí, přičemž difundující látka nám chemickou reakcí vzniká. Vztáhne-li se reakční rychlost vzniku dané složky na jednotkový objem a jednotku času, je možné bilanci extrahované složky v pevné fázi popsat takto [15]

$$r = \frac{\partial J}{\partial x} + \frac{\partial c}{\partial t} \quad (3.11)$$

Z toho vyplývá, že reakční rychlost vzniku vyvolá ekvivalentní změnu v hustotě difuzního toku J a akumulaci. Za předpokladu platnosti jednoduchých difuzních vzorců lze rovnici

$$(3.11) \quad r = \frac{\partial J}{\partial x} + \frac{\partial c}{\partial t} \quad (3.11 \text{ přepsat na tvar:})$$

$$D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} = \frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial c_A}{\partial t} \quad (3.12)$$

kde

$$r = - \frac{\partial c_A}{\partial t} \quad (3.13)$$

pro koncentraci vázané složky platí

$$c_A = K \cdot c \quad (3.14)$$

Pro koncentraci vázané složky platí (3.14) a její aplikací na (3.12) se získá po úpravě

$$\frac{\partial c}{\partial t} = k \frac{\partial^2 c}{x^2} \quad (3.15)$$

kde

$$k = \frac{D}{1 + K} \quad (3.16)$$

Základní deterministický difuzní model s danými podmínkami tvoří matematickým modelem lážňové extrakce [15]

$$\frac{\partial c}{\partial t}(x, t) = k \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}(x, t), \quad t > 0, 0 \leq x \leq b \quad (3.17)$$

symetrii koncentračního pole v pevné fázi značí podmínka

$$\frac{\partial c}{\partial x}(0, t) = 0 \quad (3.18)$$

bilanční vztah, podle kterého je rychlost sdílení hmoty extrahované složky na povrchu tuhé fázi rovna akumulaci této složky v lázni [15]

$$V_o \frac{\partial c_p}{\partial t}(t) = -DS \frac{\partial c}{\partial x}(b, t) \quad (3.19)$$

okrajová podmínka prvního druhu – předpoklad dokonalého míchání fáze

$$c(b, t) = c_o(t) \quad (3.20)$$

na začátku extrakce je konstantní rozdělení koncentrace v tuhé fázi

$$c(x, 0) = c_p \quad (3.21)$$

pro lážňovou extrakci je použita čistá kapalina

$$c_o(0) = 0 \quad (3.22)$$

Pro obecnější vyjádření a zjednodušení výpočtu byly zavedeny bezrozměrné veličiny [15]

$$C = \frac{c}{c_p}, \quad C_0 = \frac{c_0}{c_p}, \quad F_0 = \frac{kt}{b^2}, \quad X = \frac{x}{b}, \quad Na = \frac{V_o}{V} \quad (3.23 \text{ abcde})$$

Aplikací bezrozměrných kritérií na rovnice (3.17) – (3.22) se získá bezrozměrný matematický model lázněvé extrakce vázané složky

$$\frac{\partial C}{\partial F_0}(X, F_0) = \frac{\partial^2 C}{\partial X^2}(X, F_0) \quad (3.24)$$

$$\frac{\partial C}{\partial X}(0) = 0 \quad (3.25)$$

$$-\frac{Na}{1+K} \frac{\partial C_0}{\partial F_0}(F_0) = \frac{\partial C}{\partial X}(1, F_0) \quad (3.26)$$

$$C(X, 0) = 1 \quad (3.27)$$

$$C_0(0) = 0 \quad (3.28)$$

$$C(1, F_0) = \varepsilon C_0(F_0) \quad (3.29)$$

Řešení toho to modelu je provedeno Laplaceovou transformací. [15]

Po vyřešení se získá vztah pro výpočet kořenů transcendentní rovnice

$$-\frac{Na \cdot q}{\varepsilon(1+K)} = \operatorname{tg}(q) \quad (3.30)$$

Výsledné řešení bezrozměrné koncentrace vypírané látky v tuhé fázi

$$C = \frac{\varepsilon(1+K)}{\varepsilon(1+K) + Na} - 2 \cdot Na \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\cos(X \cdot q_n) \cdot \exp(-F_0 q_n^2)}{\varepsilon(1+K) \cdot \cos(q_n) - \frac{\varepsilon(1+K)}{q_n} \sin(q_n) - Na \cdot q_n \cdot \sin(q_n)} \quad (3.31)$$

Bezrozměrná koncentrace vypírané látky v lázni

$$C_0 = \frac{1}{\varepsilon(1+K) + Na} - 2 \cdot \frac{Na}{\varepsilon(1+K)} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\exp(-F_0 q_n^2)}{\varepsilon(1+K) + Na + \frac{q_n^2 \cdot Na^2}{\varepsilon(1+K)}} \quad (3.32)$$

Stupeň pracího procesu

$$y = \frac{Na}{\varepsilon(1+K)+Na} - 2 \cdot \frac{Na^2}{\varepsilon(1+K)} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\exp(-F_0 q_n^2)}{\varepsilon(1+K)+Na + \frac{q_n^2 \cdot Na^2}{\varepsilon(1+K)}} \quad (3.33)$$

kde q_n jsou kořeny rovnice (3.30)

3.3.2 Vypírání nevázané složky – lážňová extrakce

V případě, že hodnota síly vazby $K=0$, získáme vztahy pro nevázanou složku [15] a to

Transcendentní rovnici ve tvaru

$$-\frac{Na \cdot q}{\varepsilon} = \operatorname{tg}(q) \quad (3.34)$$

Vztah pro výpočet bezrozměrné koncentrace extrahované složky v tuhé fázi

$$C = \frac{\varepsilon}{\varepsilon + Na} - 2 \cdot Na \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\cos(X \cdot q_n) \cdot \exp(-F_0 q_n^2)}{\varepsilon \cdot \cos(q_n) - \frac{\varepsilon}{q_n} \sin(q_n) - Na \cdot q_n \cdot \sin(q_n)} \quad (3.35)$$

a bezrozměrnou koncentraci extrahované složky v lázni

$$C_0 = \frac{1}{\varepsilon + Na} - 2 \cdot \frac{Na}{\varepsilon} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\exp(-F_0 q_n^2)}{\varepsilon + Na + \frac{q_n^2 \cdot Na^2}{\varepsilon}} \quad (3.36)$$

pro stupeň pracího procesu

$$y = \frac{Na}{\varepsilon + Na} - 2 \cdot \frac{Na^2}{\varepsilon} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\exp(-F_0 q_n^2)}{\varepsilon + Na + \frac{q_n^2 \cdot Na^2}{\varepsilon}} \quad (3.37)$$

kde q_n jsou kořeny rovnice (3.34)

3.4 Stanovení difuzního koeficientu

Difuzní koeficient představuje rychlost pohybu rozpustných látek nebo plynů, přičemž jejich pohyb je reakcí na koncentrační gradient v prostředí, v němž jsou tyto látky rozpuštěny tj. množství látky, jež difunduje plochou 1 cm^2 při rozdílu koncentrace 1 g pro vzdálenost 1 cm za jednotku času. [17]

Hodnoty difuzních koeficientů se nejčastěji určují pokusně nebo jsou uvedeny v příslušných tabulkách. V tabulkách se často tabelují hodnoty difuzního koeficientu spolu se Schmidtovým kritériem

$$Sc = \frac{v}{D} \quad (3.38)$$

a to proto, že hodnota Schmidtova kritéria se s tlakem nemění vůbec a s teplotou se mění jen velmi málo. Proto lze kritérium využít k výpočtu difuzního koeficientu při různých tlacích a teplotách, pokud ovšem při těchto podmínkách je známá hodnota kinematické viskozity ν . [17]

Pro stanovení difuzního koeficientu teoretickým výpočtem však není znám žádný všeobecně platný vztah, ale existuje celá řada empirických vztahů pro jeho výpočet, jejichž výsledky se velmi dobře shodují s experimentálně zjištěným koeficientem. Tyhle vztahy jsou však rozdílné jak pro plyny, kapaliny tak i pro pevné látky. [17]

Výpočet difuzního koeficientu v plynech

$$D = 2,45 \cdot 10^2 \frac{T^{\frac{3}{2}}}{p \left(V_A^{\frac{1}{3}} + V_B^{\frac{1}{3}} \right)^2} \sqrt{\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B}} \quad (3.39)$$

pro systém vzduch – vodní pára lze použít vztah

$$D = 2,139 \cdot 10^{-6} \frac{1}{p} \left(\frac{T}{273,15} \right)^{1,8} \quad (3.40)$$

kde D – difuzní koeficient [$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$], T – absolutní teplota [K], p – celkový tlak [Pa], V_A, V_B – molární objemy složek [$\text{m}^3 \text{mol}^{-1}$], M_A, M_B – molární hmotnosti složek [$\text{kg} \cdot \text{mol}^{-1}$]

Difuzní koeficient v kapalinách

jeho hodnota bude nižší než u plynů, protože koncentrace molekul je u kapalin vyšší, řádově $D = 10^{-9} \text{ m}^2\text{s}^{-1}$ [17]

$$D = 4,67 \cdot 10^{-6} \frac{T (A_{sp} M_B)^{0,5}}{\eta_B V_A^{0,6}} \quad (3.41)$$

kde

D – difuzní koeficient [m^2s^{-1}], η_B - dynamická viskozita rozpouštědla [$\text{N}\cdot\text{s}\cdot\text{m}^{-2}$], T – teplota [K], V_A – molový objem difundující látky v kapalině [$\text{m}^3\text{mol}^{-1}$], M_B – molární hmotnost rozpouštědla [$\text{kg}\cdot\text{mol}^{-1}$], A_{sp} – asociační parametr rozpouštědla

Stanovit **difuzní koeficient v pevných látkách** je v případě pórovité struktury tělesa velmi obtížné. Proto se zavádí tzv. efektivní difuzní koeficient, který je určen na základě struktury pevné látky a přítomné tekutiny. Pokud pevné látky nemají výrazně pórovitou strukturu, je hodnota difuzního koeficientu o několik řádů menší než u kapalin. [17]

Hodnota efektivního difuzního koeficientu lze vypočítat podle vztahu

$$D_{ef} = \frac{D}{\psi} \quad (3.42)$$

kde ψ - součinitel difuzního odporu => číslo >1 a je závislé na teplotě, tlaku, porozitě a druhu materiálu. Hodnoty ψ jsou tabelovány.

Další možností stanovení difuzního koeficientu pro pevné látky je pomocí experimentálního měření s využitím Crankova vztahu (platného pro krátké časy) [18]

$$\frac{m(t)}{m_\infty} = \frac{c(t)}{c_\infty} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{1+\alpha}{\alpha} \sqrt{\lambda} \sqrt{t} \quad (3.43)$$

kde

$$\lambda = \frac{D}{b^2} \quad (3.44)$$

a

$$\alpha = \frac{Na}{\varepsilon} \quad (3.45)$$

$$Na = \frac{V_o}{V} \quad (3.46)$$

kde

V_o - objem lázně [m^3], V – objem pevné fáze [m^3]

Vynesením závislosti bezrozměrné koncentrace $\frac{m(t)}{m_\infty}$ popř. $\frac{c(t)}{c_\infty}$ na \sqrt{t} lze získat přímku,

z jejíž směrnice se vypočítá hodnota efektivního difuzního koeficientu. [16]

4 VZOROVÝ PŘÍKLAD

Z výše uvedených vztahů jsem schopen daný proces modelovat a zjištěním nákladové funkce mohu stanovit minimální náklady na proces s použitím optimálního množství extrakčního činidla. Pro zjištění optimálních hodnot provedu výpočet vzorového příkladu tj. extrahování hydroxidu sodného (NaCl) ze vzorku surové kůže PACKER, jehož zadání je

příkon elektromotoru pracího zařízení	$P=50$ kW
stupeň pracího procesu	$y=0,75$
cena elektrické energie	$k_e=5$ Kč/kWh
cena rozpouštědla	$k_c=25$ Kč/m ³
porozita	$\varepsilon = 0,5$
síla vazby	$K=1,5$
tloušťka pevné fáze	$c=0,00442$ cm
plocha pevné fáze	$S=0,0233$ m ²
difuzní koeficient	$D= ?$ m ² s ⁻¹

Úkolem je zjistit nákladovou funkci daného procesu, určit minimální množství extrakčního činidla, stanovit minimální dobu procesu a vypočítat celkové náklady.

Abych mohl dané úkoly vyřešit, musel jsem nejdříve zjistit hodnotu difuzního koeficientu. K jeho stanovení jsem využil Crankova vztahu (3.43) [18], pro kterého bylo provedeno následující kinetické měření hydroxidu sodného.

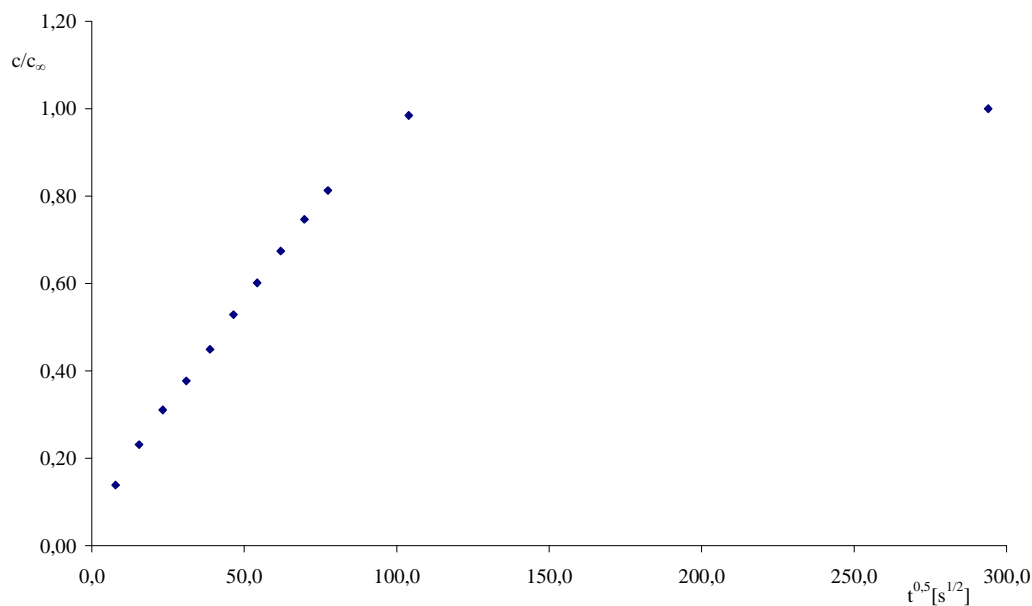
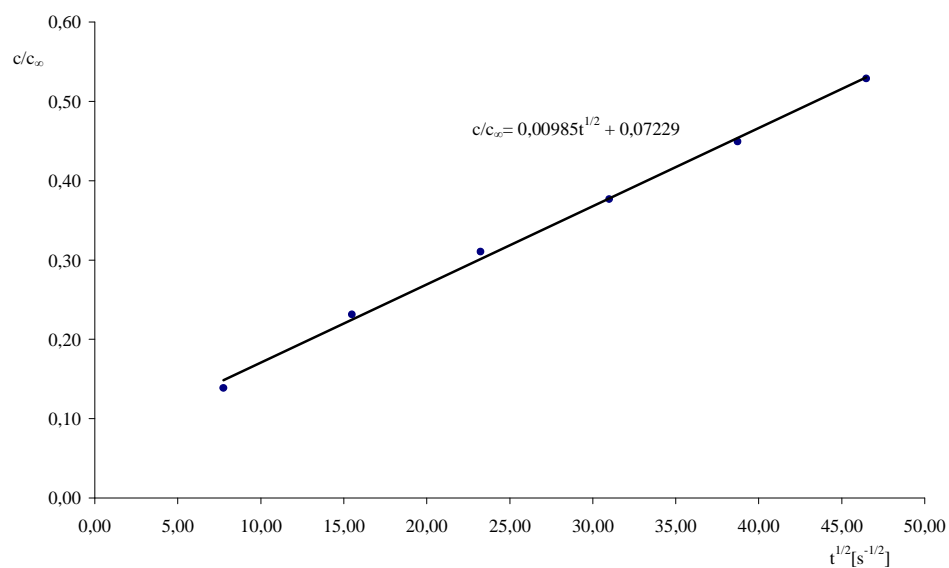
Tabulka 4.1 – naměřené hodnoty kinetického měření extrakce hydroxidu sodného

t[min]	1	4	9	16	25	36	49	64	81	100	180	1440
c[$\text{g}10^{-3}\Gamma^{-1}$]	6,14	10,2	13,7	16,7	19,9	23,4	26,6	29,8	33	35,9	43,5	44,2

Vynesením závislosti bezrozměrné koncentrace na \sqrt{t} a proložením lineární regresí (body do 60 % křivky), jsem vypočítal ze směrnice přímky hodnotu transportního parametru λ

Tabulka 4.2 – hodnoty bezrozměrné koncentrace a \sqrt{t}

\sqrt{t} [s ^{-1/2}]	7,7	15,5	23,2	31,0	38,7	46,5	54,2	62,0	69,7	77,5	103,9	293,9
c/c_∞	0,14	0,23	0,31	0,38	0,45	0,53	0,60	0,67	0,75	0,81	0,98	1,00


 Obrázek 4.1 – Závislost bezrozměrné koncentrace na \sqrt{t}

 Obrázek 4.2 Určení směrnice pro výpočet λ z počáteční fáze měření

Z rovnice regrese $\frac{c}{c_\infty} = 0,00985\sqrt{t} + 0,07229$ jsem určil hodnotu směrnice $\rightarrow 0,00985$ a po

úpravě vztahu (3.43) jsem mohl vypočítat hodnotu transportního parametru

$$\lambda = \left(\frac{0,00985 \cdot \sqrt{\pi} \cdot \alpha}{2(1 + \alpha)} \right)^2 = 4,7169 \cdot 10^{-5} \quad (4.1)$$

kde

$$\alpha = \frac{Na}{\varepsilon} = \frac{V_o}{\varepsilon V} \Rightarrow \frac{0,00019}{0,5} = 0,00038 \quad (4.2)$$

Po úpravě (3.44) získám vztah pro stanovení difuzního koeficientu D

$$D = \lambda b^2 \Rightarrow 4,7169 \cdot 10^{-5} \cdot 0,00221^2 = 2,304 \cdot 10^{-10} m^2 s^{-1} \quad (4.3)$$

Pomocí Crankova vztahu pro krátké časy [18] jsem stanovil hodnotu difuzního koeficientu z naměřených dat $D = 2,304 \cdot 10^{-10} m^2 s^{-1}$.

Dále, po zjištění všech parametrů, mohu vyřešit úkoly pro optimalizaci lázněvé extrakce tj. určit nákladovou funkci a pomocí ní zjistit množství extrakčního činidla, dobu a celkové náklady na proces.

Pro určení nákladové funkce je třeba určit čas, který zjistím z průsečíků křivek závislosti stupně pracího procesu pro různé spotřeby extrakčního činidla Na a přímkou požadovaného stupně extrakce y .

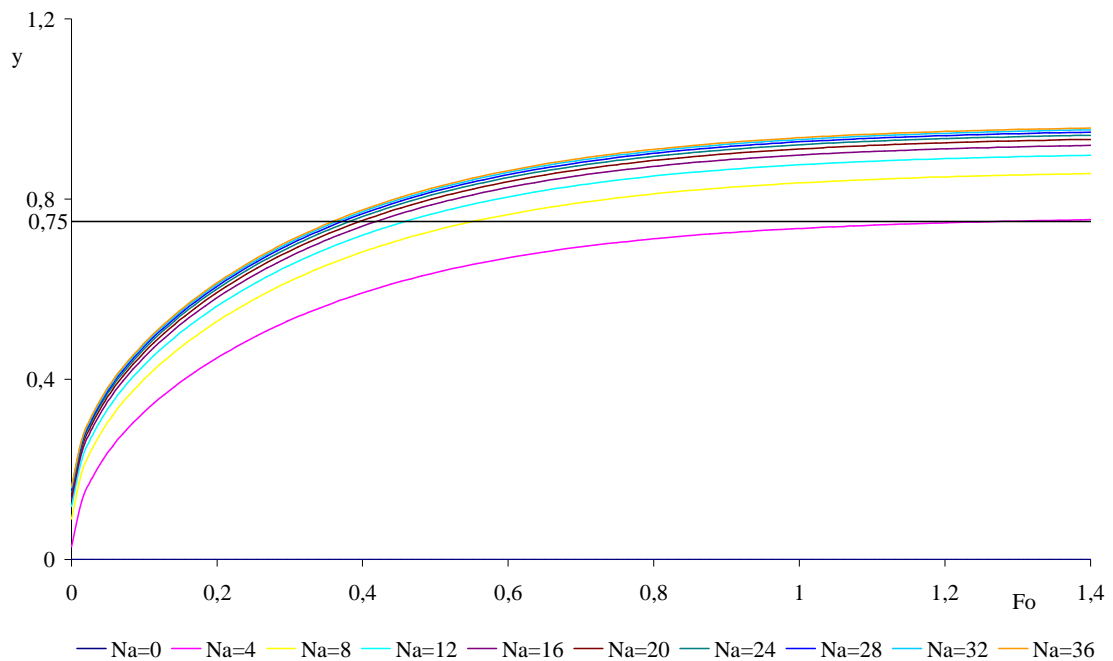
K vykreslení závislostí bylo nutné nejdříve nalézt kořeny transcendentní rovnice (3.30) k tomu jsem využil funkci „Hledání řešení“, která je součástí programu MS EXCEL.

Nalezené kořeny q_n pro různá námoková čísla Na zobrazuje Tabulka 4.3

Tabulka 4.3 – nalezené kořeny transcendentní rovnice v programu MS EXCEL

Na	4	8	12	16	20
q1	1,748	1,664	1,634	1,619	1,610
q2	4,778	4,745	4,734	4,729	4,726
q3	7,894	7,874	7,867	7,864	7,862
q4	11,024	11,010	11,005	11,003	11,001
q5	14,159	14,148	14,145	14,143	14,142

Po dosazení bezrozměrného času Fo a kořenů transcendentní rovnice pro různé hodnoty Na do vztahu (3.33) jsem vykreslil závislosti pracího stupně y


 Obrázek 4.3 – Závislost stupně pracího procesu y na Fo

Z jejich průsečíků a úpravou vztahu (3.23 c) spočítám čas t , výsledky viz. Tabulka 4.4

$$t = \frac{Fob^2}{D} \frac{1}{1+K} \quad (4.4)$$

 Tabulka 4.4 – vypočítané hodnoty času t z Fo

Fo	1,2727	0,55152	0,46667	0,42424	0,4101	0,38182	0,38182	0,36768	0,36768
t [s]	67449	29228	24731	22483	21734	20235	20235	19485	19485

Dále mohu vykreslit nákladovou funkci procesu. Celkové náklady N_k jsou dány součtem nákladů na spotřebovanou energii N_e a nákladů na spotřebované extrakční činidlo N_c .

$$N_k = N_e + N_c \quad (4.5)$$

Náklady energie jsou dány součinem ceny elektrické energie k_e , příkonu motoru P pro pohon míchadla a času t

$$N_e = k_e P t \quad (4.6)$$

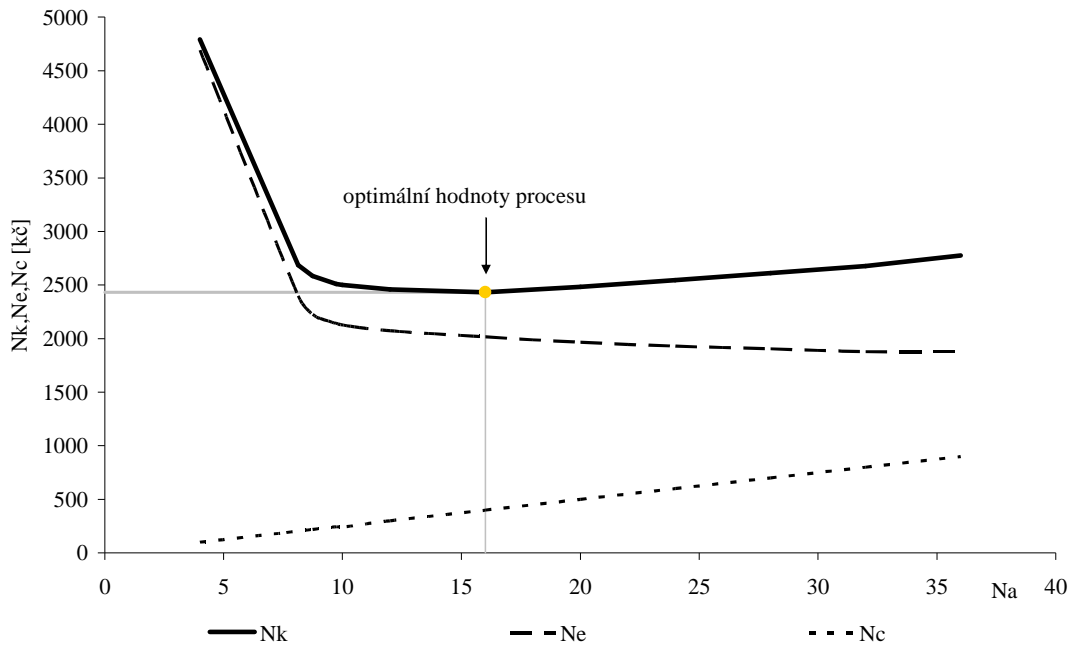
Náklady na spotřebované činidlo jsou dány součinem ceny činidla k_c a jeho objemu V_o

$$N_c = k_c V_o \quad (4.7)$$

Nákladová funkce je tedy závislost celkových nákladů N_k na množství spotřebovaného rozpouštědla V_o , popř. námokového čísla N_a , protože $N_a = \frac{V_o}{V}$ a $V = \text{konstantní}$ – objem pevné fáze.

Tabulka 4.5 – hodnoty pro vykreslení nákladové funkce

t [s]	67567	34534	30780	29279	28528	27777	27777	27027	27027
N_a	4	8	12	16	20	24	28	32	36
N_k [kč]	4792	2598	2438	2433	2481	2529	2629	2677	2777
N_e [kč]	4692	2398	2138	2033	1981	1929	1929	1877	1877
N_c [kč]	100	200	300	400	500	600	700	800	900



Obrázek 4.4 – Nákladová funkce sestavená v programu MS Excel

Z nákladové funkce lze vyčíst, že optimální hodnota námokového čísla je 16, což při známém objemu pevné fáze znamená, že objem lázně V_o

$$V_o = NaV \Rightarrow 16 \cdot (0,00442 \cdot 0,0233) = 1,65 \cdot 10^{-3} m^3 = 1,65l \quad (4.8)$$

a celkové náklady na proces činí 2433 Kč. Úpravou vztahu (4.5) vypočítám dobu trvání daného procesu

$$t = \frac{N_c - k_c Na}{Pk_e} \Rightarrow \frac{2433 - 25 \cdot 16}{50 \cdot 5} = 8,132h \quad (4.9)$$

II. PRAKTICKÁ ČÁST

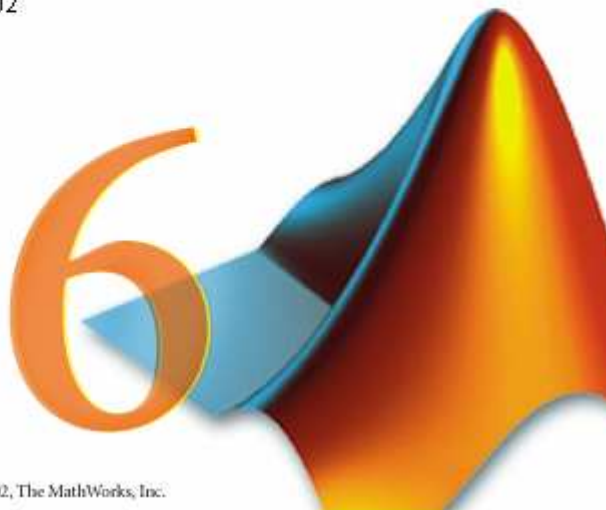
5 PROGRAMOVÁ APLIKACE

Cílem v této části, je vytvoření funkční programové aplikace v prostředí MATLAB, pro výpočet koncentrace vypírané složky v tuhé fázi a její odzkoušení na vzorovém příkladě.

MATLAB

(MATrix LABoratory = maticová laboratoř) je výkonné integrované prostředí pro vědeckotechnické výpočty, modelování, návrhy algoritmů, simulace, měření a zpracovávání signálu aj. MATLAB vychází z filozofie, že vše je matice – má-li jeden řádek nebo jeden sloupec mluví se o vektoru, má-li právě jeden řádek a jeden sloupec jedná se o skalár. Pro numerické operace s maticemi je důležité výpočetní jádro, jenž je základním komponentem MATLABu. Snadné zobrazení výsledků výpočtů umožňuje tzv. grafický podsystém. Pomocí něj je práce s grafy rychlá a snadná. Rozšiřujícími možnostmi jádra MATLABu jsou tzv. toolboxy. Toolboxy jsou knihovny funkcí orientované na konkrétní vědní a technické obory. Každý uživatel si je může dokoupit jako přídatné moduly.

Z výše uvedeného je zřejmé, že máme k dispozici mohutný matematicko-grafický systém, který disponuje značným výkonem a možnostmi.

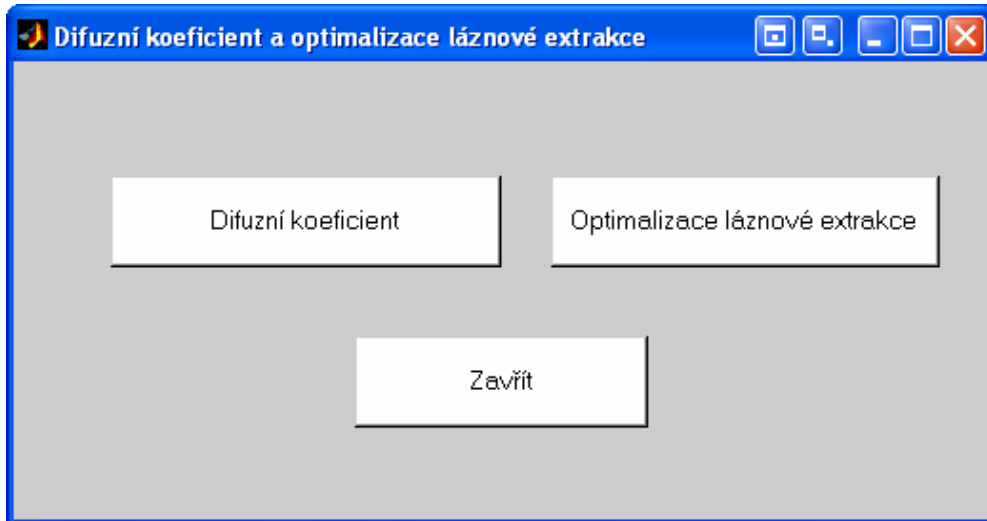


Copyright 1984–2002, The MathWorks, Inc.

Obrázek 5.1 – Startovací okno Matlabu

Programová aplikace, kterou jsem vytvořil, obsahuje dva programy a to:

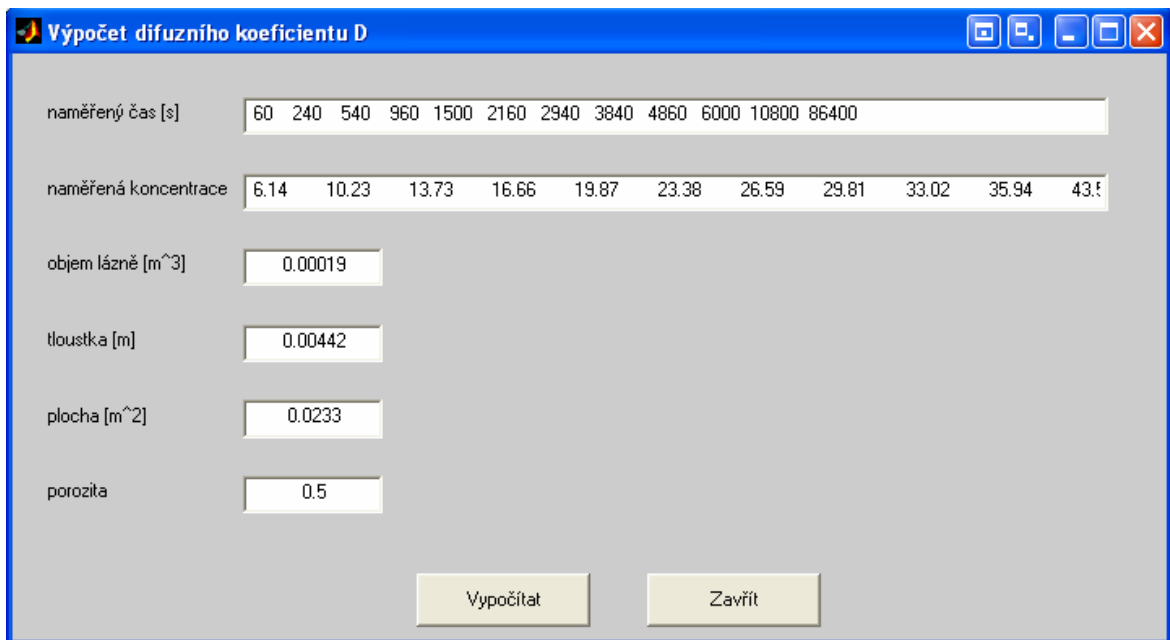
- pro výpočet difuzního koeficientu z naměřených dat v laboratořích
- pro optimalizaci procesu lázněové extrakce



Obrázek 5.2 – Úvodní okno programové aplikace

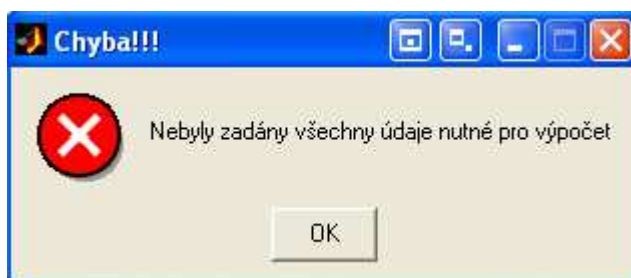
5.1 Výpočet difuzního koeficientu

Spuštěním programu pro výpočet difuzního koeficientu se zobrazí úvodní obrazovka



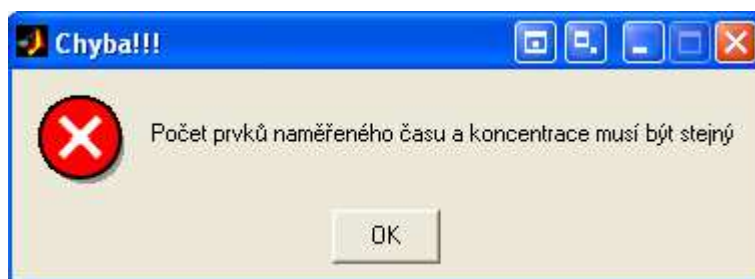
Obrázek 5.3 – Úvodní okno pro výpočet difuzního koeficientu

V tomto okně je zapotřebí vyplnit všechna pole, která jsou nutná pro výpočet difuzního koeficientu, pokud tomu tak není a nebo byly zadány znaky místo číslic, dojde po stisku tlačítka „Vypočítat“ k zobrazení chybového hlášení, kterou zobrazuje, Obrázek 5.4, upozorňující na daný problém.



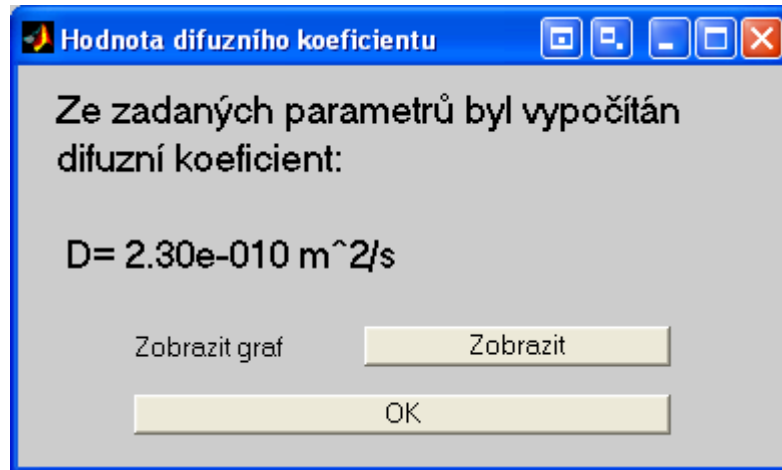
Obrázek 5.4 – Chybové hlášení-nevyplněny údaje

Další chybové hlášení se objeví v případě, pokud počet prvků, zadávaných do pole pro naměřený čas a koncentraci látky v lázni, není stejný.



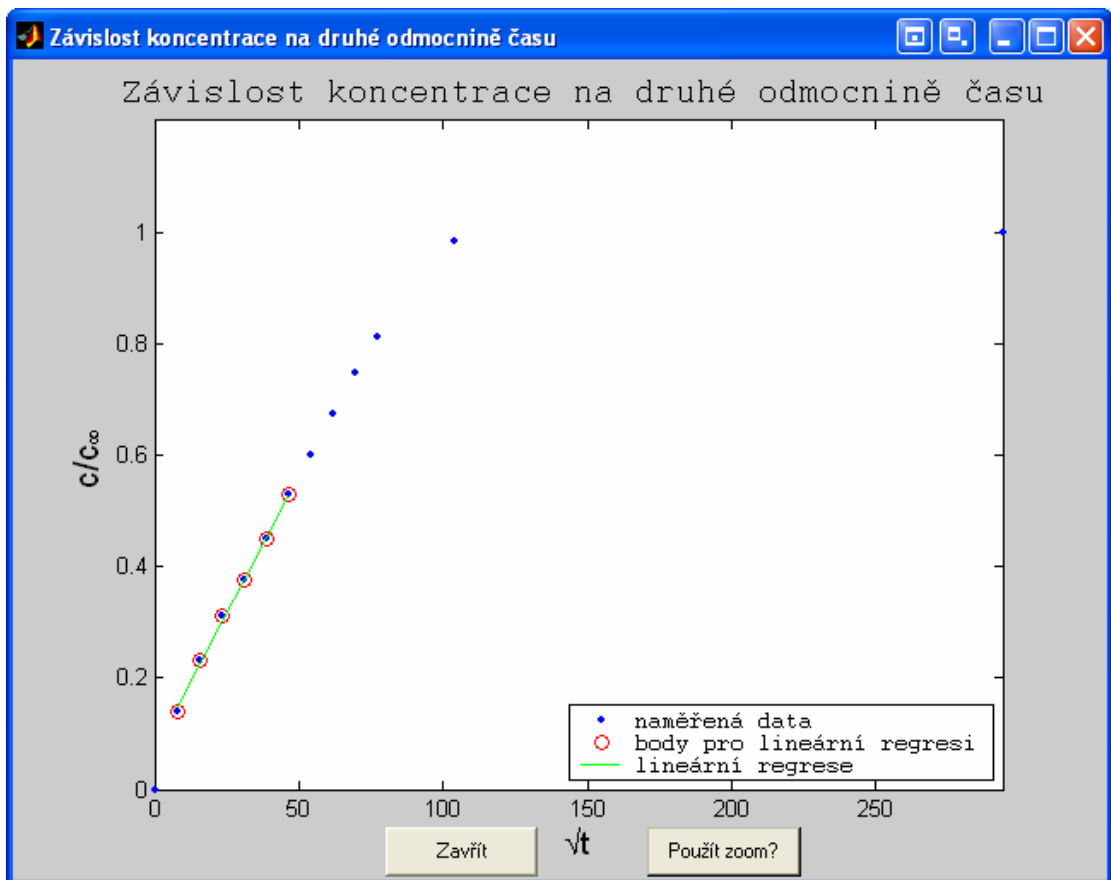
Obrázek 5.5 – Chybové hlášení-nestejný počet prvků zadávaných polí

Při správně zadaných parametrech se po stisku tlačítka „Vypočítat“ zobrazí okno s vypočítaným difuzním koeficientem D



Obrázek 5.6 – Zobrazení hodnoty difuzního koeficientu

Aktivní okno s výsledkem výpočtu nabízí možnost zobrazení grafu a to stiskem tlačítka „Zobrazit“.

Obrázek 5.7 – Graf závislosti koncentrace na \sqrt{t}

Graf vykresluje – modře naměřená data, pomocí mnou vytvořeného algoritmu vybírá vhodné body v lineární části funkce pro proložení lineární regresi, body označeny červenou barvou, a zelenou barvou vykresluje lineární regresi vybraných bodů.

Algoritmus programu pro vybrání vhodných bodů:

```

1 for i=2:length(c);
2     koncentrace(i)=c(i)/c(length(c));
3     if koncentrace(i-1)<0.6
4         rozdil_K(i-1)=koncentrace(i)-koncentrace(i-1);
5         rozdil_cas(i-1)=odmocnina_t(i)-odmocnina_t(i-1);
6         der(i-1)=rozdil_K(i-1)/rozdil_cas(i-1);
7     end
8 end
9 mez=median(der);
10 body_grafu=find((der>(mez*(1-
    (rozmezi_bodu/100))))&(der<mez*(1+(rozmezi_bodu/100))));

```

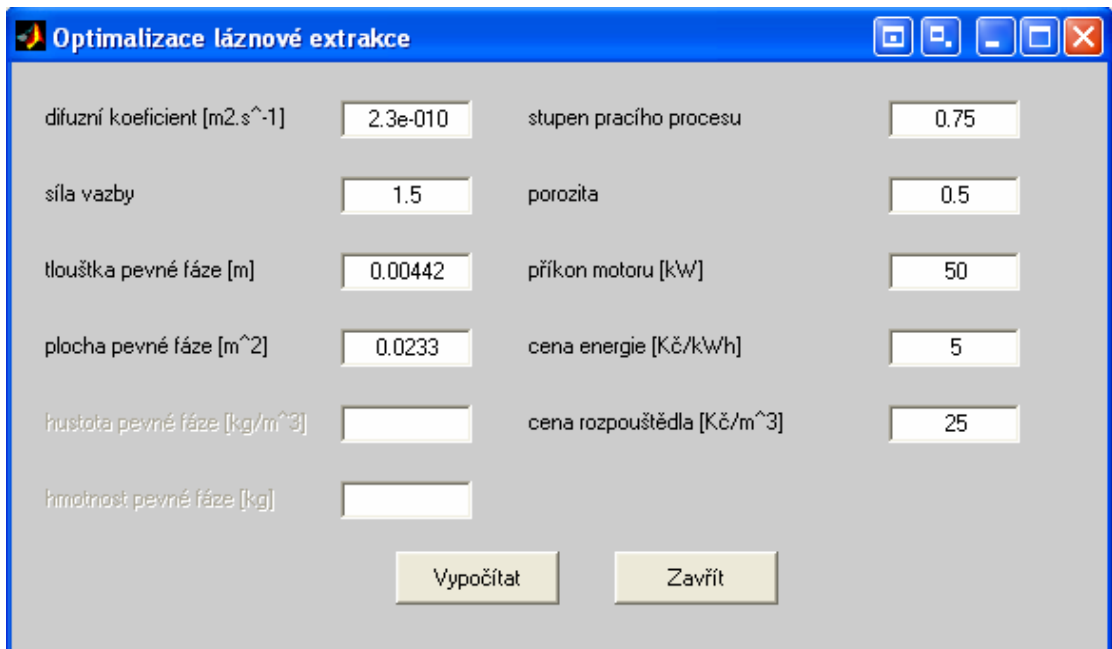
Určením směrnice z lineární regrese mohou spočítat hodnotu transportního parametru λ pomocí upraveného vztahu (3.43) a jeho následným dosazením do (3.44) stanovit hodnotu difuzního koeficientu z naměřených dat $D = 2,3024 \cdot 10^{-10} m^2 s^{-1}$.

Srovnáním difuzního koeficientu vypočítaného pomocí aplikace Microsoft Excel $D = 2,304 \cdot 10^{-10} m^2 s^{-1}$, s hodnotou zjištěnou pomocí mnou vytvořeného programu $D = 2,3024 \cdot 10^{-10} m^2 s^{-1}$ lze usoudit, že obě metody výpočtu dávají téměř totožné výsledky, nepatrné rozdíly jsou způsobeny zaokrouhlováním. Avšak použití mého programu je po zadání všech důležitých hodnot jednoduché a hlavně rychlé.

5.2 Optimalizace lázněové extrakce

Druhá část programové aplikace je zaměřena na optimalizaci procesu lázněové extrakce. Protože extrakce je součástí mnoha technologických procesů, vede její optimalizace k úsporám nákladů na proces, úsporám množství extrakčního činidla a následně k snížení vzniklých kapalných odpadů během operace extrakce, což vede k ochraně životního prostředí.

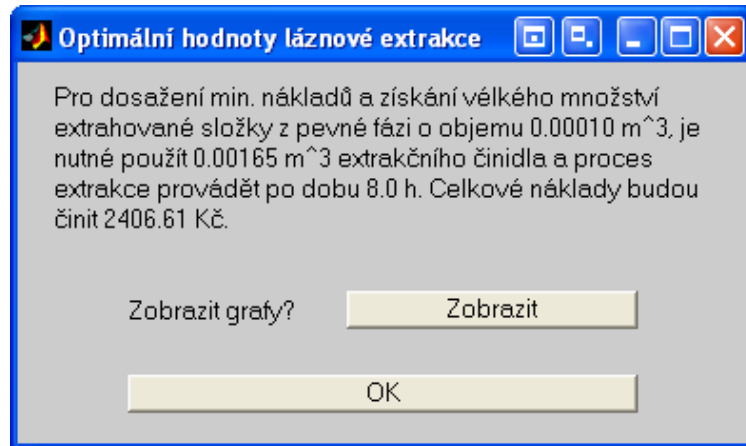
Po spuštění programu se zobrazí úvodní okno pro zadávání parametrů pro výpočet optimalizace procesu



Parameter	Value
difuzní koeficient [m ² .s ⁻¹]	2.3e-010
síla vazby	1.5
tloušťka pevné fáze [m]	0.00442
plocha pevné fáze [m ²]	0.0233
hustota pevné fáze [kg/m ³]	
hmotnost pevné fáze [kg]	
stupeň pracího procesu	0.75
porozita	0.5
příkon motoru [kW]	50
cena energie [Kč/kWh]	5
cena rozpouštědla [Kč/m ³]	25

Obrázek 5.8 – Úvodní obrazovka programu pro optimalizaci extrakce

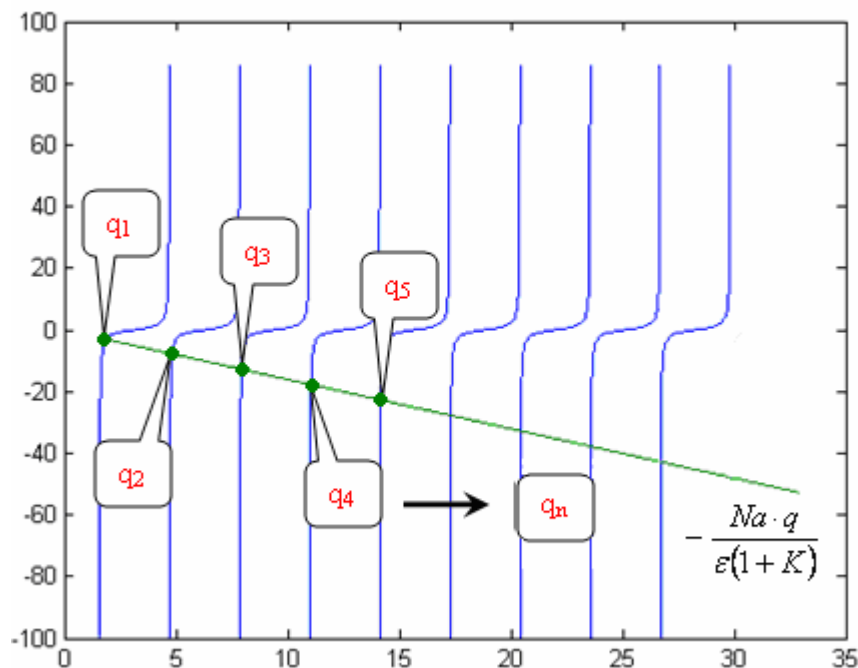
Vyplněním všech polí důležitých pro výpočet se po stisku tlačítka “Vypočítat” zobrazí v dalším okně vypočítané optimální hodnoty procesu – Obrázek 5.9. V opačném případě, kdy nebyla vyplněna řádně všechna pole, se zobrazí chybová zpráva – Obrázek 5.4, upozorňující na nutné doplnění chybějících údajů.



Obrázek 5.9 – Okno zobrazující vypočítané optimální hodnoty

Hledání kořenů transcendentní rovnice

Abych se dopočítal k optimálním výsledkům, musel jsem nejdřív nalézt kořeny transcendentní rovnice ,tzn. nalézt průsečíky přímky s tangentoidami:



Obrázek 5.10 – Průsečíky přímky s tangentoidami

Pro hledání průsečíků jsem nejdříve chtěl využít příkazu *fzero*, jenž zde jsem narazil na problém, protože tento příkaz hledá průsečík v okolí zadaného bodu. Po několika nezdařených pokusů o úspěšné nalezení kořenů, jsem přemýšlel zda neexistuje i jiná možnost a tak se mi nakonec podařilo sestavit vlastní algoritmus

```

11 for i=1:Q
12     x=i*pi+(-pi/2)+0.00001:0.0001:i*pi+(pi/2)-0.1;
13     ya=tan(x)+((Na(a)*x)/(porozita*(1+K)));
14     A=[ya;x];
15     B=find(A==min(ya(ya>=0)));
16     q(i)=A(B+1);
17 end

```

kde Q – počet hledaných kořenů transcendentní rovnice, x – hodnoty pro výpočet tangentoid, ya – upravený vztah (3.30) na tvar $y = \tan(q) + \frac{Na \cdot q}{\varepsilon(1+K)}$, matice A , B – pomocné matice výpočtu, $q(i)$ – nalezené kořeny.

Vysvětlení:

Do pomocné matice A jsem uložil vypočítané hodnoty tangentoid ya spolu s dosazovanými hodnotami proměnné x . A v této matici hledám takovou hodnotu ya , která splňuje danou podmínku a do matice B ukládám její pozici. Nalezený kořen q_n je takový, který je v matici A na pozici o $B+1$. Tato metoda nalézá kořeny ve zlomcích sekundy.

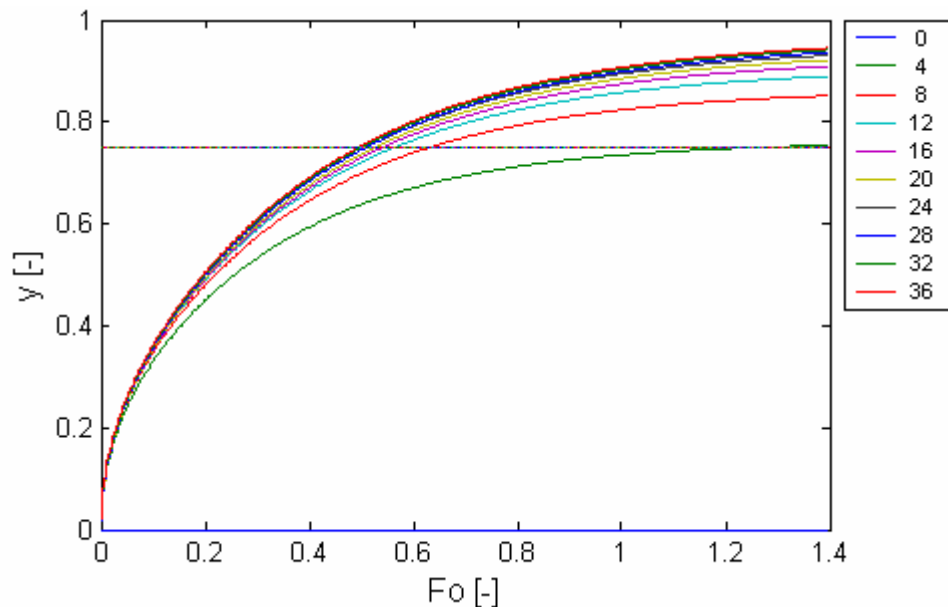
Hodnoty nalezených kořenů pomocí metody „Hledání řešení“ (MS EXCEL) a zjištěné z výše zmíněné metody jsou stejné popř. se liší desetitisícinami, což lze považovat za velmi dobré výsledky.

Tabulka 5.1 – Srovnání hodnot nalezených kořenů

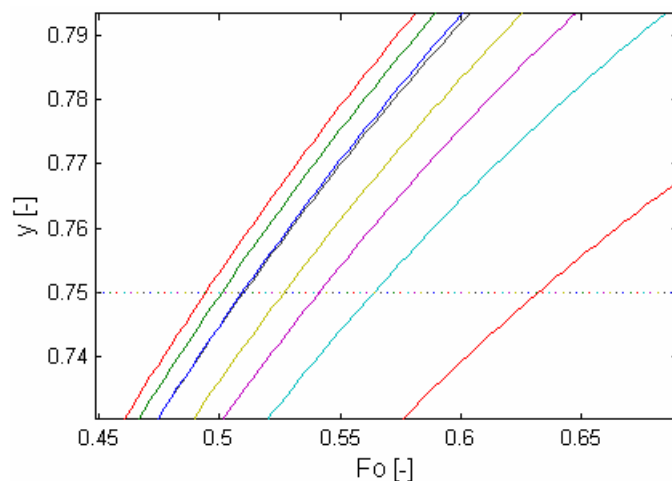
Na	4		8		12		16	
	EXCEL	Program	EXCEL	Program	EXCEL	Program	EXCEL	Program
q1	1,748	1,748	1,664	1,664	1,634	1,635	1,619	1,619
q2	4,778	4,778	4,745	4,745	4,734	4,734	4,729	4,729
q3	7,894	7,894	7,874	7,874	7,867	7,867	7,864	7,864
q4	11,024	11,024	11,010	11,010	11,005	11,005	11,003	11,003
q5	14,159	14,159	14,148	14,148	14,145	14,145	14,143	14,143

Závislost stupně extrakčního procesu na bezrozměrném čase

Po nalezení těchto kořenů $q(i)$, jsem do vztahu (3.33), pro výpočet stupně extrakčního procesu, dosazoval hodnoty Na a bezrozměrného času Fo z předem definovaného intervalu, za účelem zisku několika závislostí pracího procesu na bezrozměrném čase Fo



Obrázek 5.11 – Závislosti pracího procesu na bezrozměrném čase pro různé spotřeby číidel Na

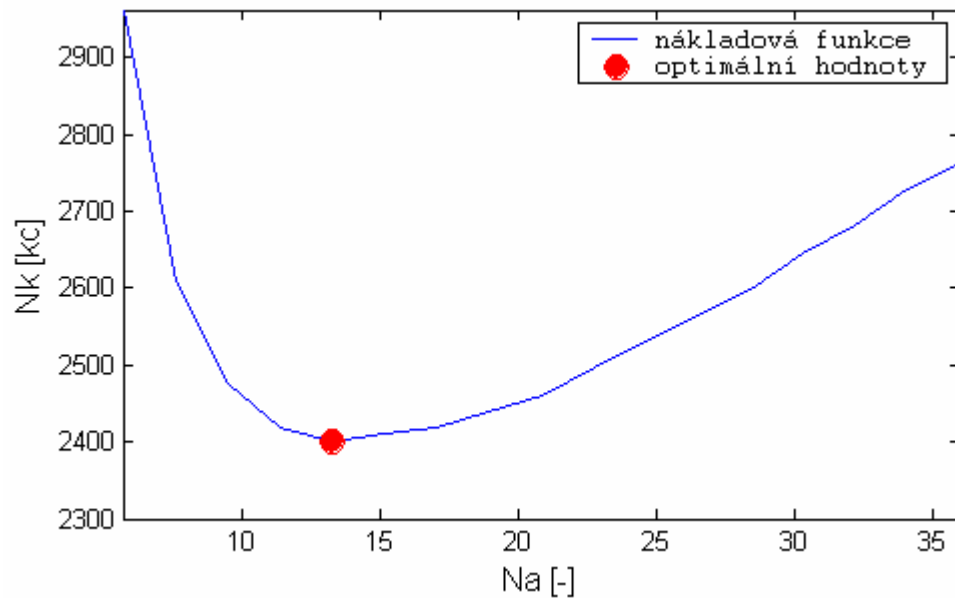


Obrázek 5.12 – Detail grafu Obrázku 4.11

Z průsečíků závislostí a požadovaného stupně extrakčního procesu (0,75) jsem pomocí vztahu (4.4) určil časy, které jsou nutné pro vykreslení nákladové funkce.

Nákladová funkce

Nákladovou funkci jsem stanovil pomocí (4.5) a to dosazením zjištěných časů t a různých hodnot námokového čísla Na



Obrázek 5.13 – Nákladová funkce stanovena pomocí programové aplikace

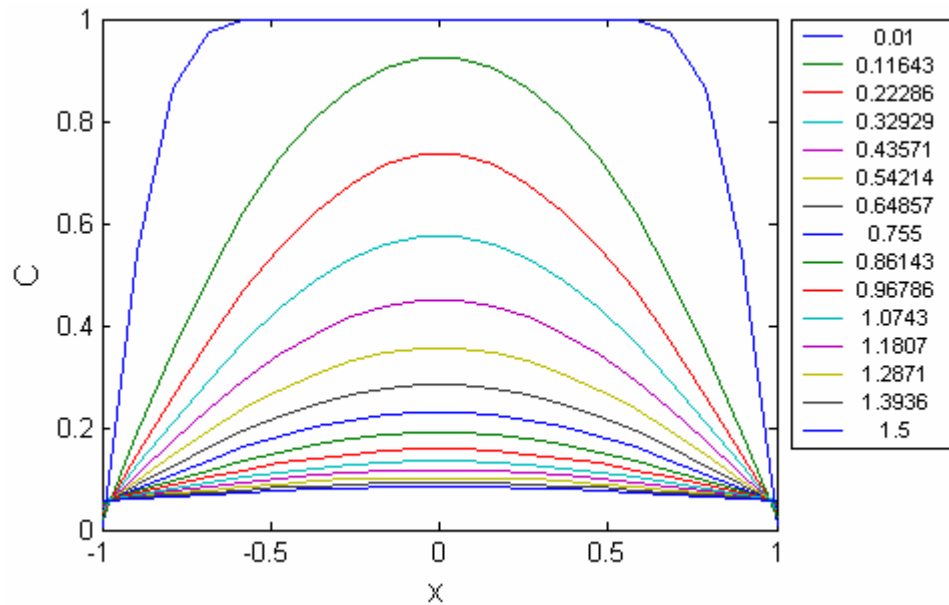
Z nákladové funkce vyplývá, že optimální hodnota námokového čísla je 16, jelikož znám objemu pevné fáze mohu vypočítat množství extrakčního činidla V_o

$$V_o = NaV \Rightarrow 16 \cdot (0,00442 \cdot 0,0233) = 1,65 \cdot 10^{-3} m^3 = 1,65l \quad (5.1)$$

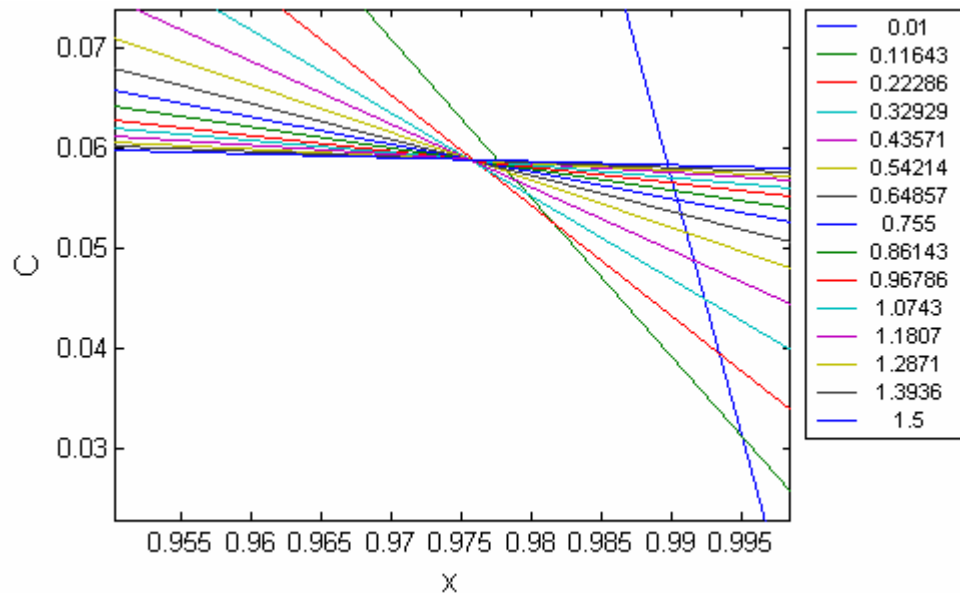
a celkové náklady na proces činí 2406 Kč. Pomocí vztahu (4.9) jsem vypočítal, dobu trvání procesu na 8h.

Bezrozměrné koncentrační pole vypírané složky z tuhé fáze

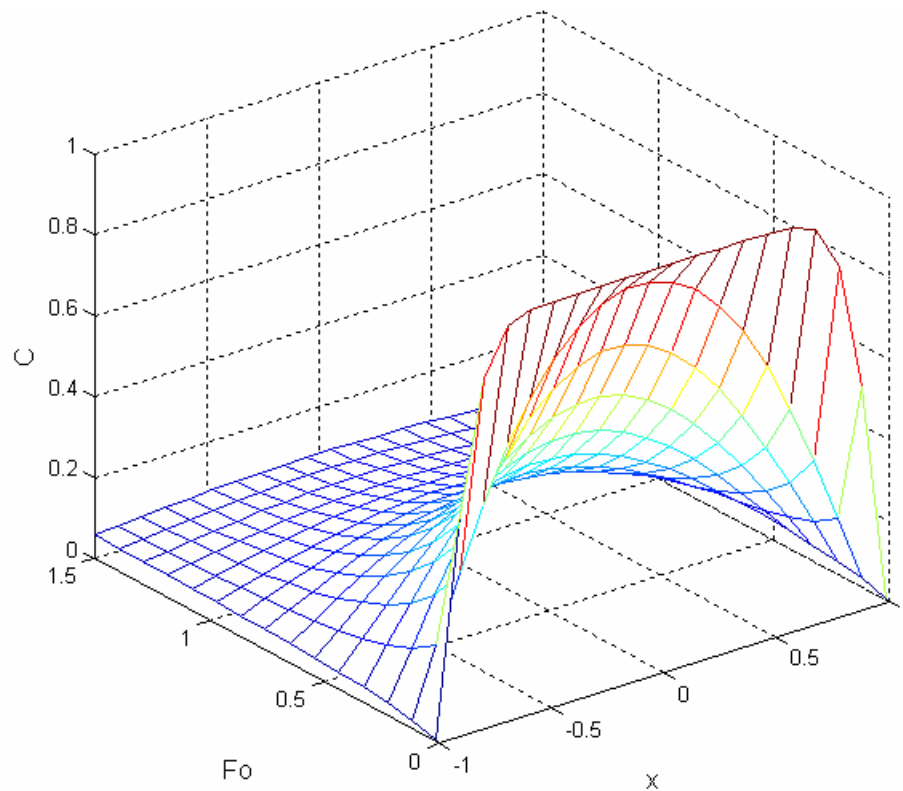
Dosazením hodnot do vztahu (3.31), jsem schopen vytvořit 2D a 3D graf bezrozměrného koncentračního pole v tuhé fázi - Obrázek 5.14



Obrázek 5.14 – 2D graf bezrozměrného koncentračního pole vypírané složky v tuhé fázi



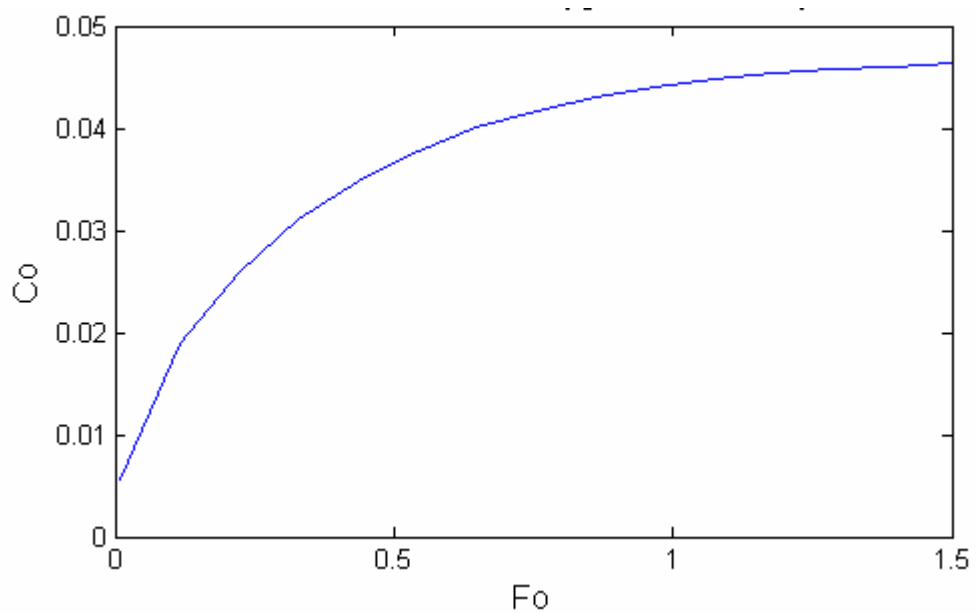
Obrázek 5.15 – Detail grafu z Obrázek 5.14



Obrázek 5.16 – 3D graf bezrozměrného koncentračního pole vypírané složky v tuhé fázi

Bezrozměrná koncentrace vypírané složky v lázni

Bezrozměrnou koncentraci vypírané složky získám s použitím vztahu (3.32)



Obrázek 5.17 – Bezrozměrná koncentrace vypírané složky v lázni

ZÁVĚR

Bakalářská práce je zaměřena na matematickém modelování jednostupňové extrakce. V první části jsem provedl literární studii týkající se extrakce a důkladněji se seznámil s problematikou extrakčních procesů, tj. operací pro získávání žádoucích popř. nežádoucích složek z kapalných či pevných fází, mezi které se řadí i prací procesy, jenž jsou součástí mnoha technologických operací v různých odvětví průmyslu a to i několikrát, a proto je velmi významné se zabývat jejich optimalizací. Uvedl jsem několik často používaných, ale i nově se zařazujících metod extrakce a popsal jejich výhody a nevýhody.

Dále jsem se věnoval lánžové extrakci vázané a nevázané složky, která je popsána difuzním matematickým modelem, který vychází z řešení II. Fickova zákona, což je parciální diferenciální rovnice parabolického typu pro zadané počáteční a okrajové podmínky, jehož řešením se získají vztahy pro výpočet bezrozměrného koncentračního pole vypírané složky v tuhé fázi, bezrozměrné koncentrace v lánži a vztah pro určení stupně extrakčního procesu. Obeznámil jsem se se způsoby řešení takových to úloh za účelem optimalizace procesu, která vede k úsporám nákladů na proces, úsporám množství extrakčního činidla a následně též ke snížení vznikajících kapalných odpadů během operace extrakce, což vede k ochraně životního prostředí.

Pomocí programu MS EXCEL jsem provedl konkrétní výpočet optimálních hodnot lánžové extrakce tj. množství extrakčního činidla, dobu trvání procesu a celkové náklady spojené s procesem a tím jsem si zajistil kontrolu při ověřování funkčnosti programové aplikace.

V praktické části jsem na základě řešení deterministického difuzního modelu extrakce vytvořil funkční programovou aplikaci v prostředí MATLAB pro stanovení nákladové funkce, která je dána součtem nákladů na spotřebovanou elektrickou energii míchacího zařízení a množství spotřebovaného extrakčního rozpouštědla. Pomocí níž lze nalézt optimální hodnoty daného extrakčního procesu. Program umožňuje zobrazit nejen nákladovou křivku, ale i 2D a 3D graf bezrozměrného koncentračního pole vypírané složky v tuhé fázi a koncentraci vypírané složky v lánži.

Protože při výpočtech optimálních hodnot je nutné znát hodnotu difuzního koeficientu, tak pro případ, kdy není koeficient zadán, jsem s využitím Crankova vztahu vytvořil

program pro jeho stanovení z naměřených hodnot koncentrace v laboratorních podmínkách.

Programová aplikace bude využívána nejen při výuce, ale také jí bude možno využít při řešení extrakce vázané a nevázané složky v praxi, protože hodnoty vypočítává ve zlomcích vteřiny na rozdíl od počítání pomocí MS EXCEL, kdy jsou výpočty kvůli rozsáhlým vztahům komplikované a časově náročné, což považuji za hlavní přínos mé bakalářské práce.

Stanovený matematický model pro jednostupňovou extrakci byl již v laboratorních a provozních podmínkách ověřen za uvažovaných podmínek. Výhoda matematického modelování je ta, že pokud je platnost navrženého matematického modelu již ověřena, nemusí být následně řešení verifikováno nákladnými laboratorními experimenty.

SUMMARY

Bachelor's thesis is focused on mathematical modeling of single-stage extraction. In the first part, I made a literary study on the extraction and I am closely acquainted with the problems of extraction processes, i.e. the operations for obtain desired or undesired substances from the liquid and solid phases, which include the washing processes, which are part of many technological operations in different industries and even a few times and it is very important to deal with the optimization. I am introduced a few frequently used, as well as newly entering the extraction methods and describe their advantages and disadvantages.

Thereinafter, I devoted bath's extraction of bound and unbound substance, which is described diffuse mathematical model, which is based on the solution II. Fickova Act, which is a partial differential equation of parabolic type for the specified initial and boundary conditions, whose solutions are obtained for calculating the relations dimensionless washing concentration field substance in the solid phase, dimensionless concentration in the bath and the relationship to determine the degree of extraction process. I am familiar with the ways of resolution such exercises in order to optimize the process, which leads to savings in the cost of the process, saving the quantity of extraction agent and subsequently, also to reduce the liquid waste produced during the extraction operation, which leads to environmental protection.

Using program MS Excel, I made a specific calculation of optimal values bath's i.e. the amount extraction agent of extraction, duration of the process and the overall costs associated with this process and I got to ensure the verification of the functionality of software application.

In the practical part I am on the basis of solutions deterministic diffuse model created by functional programming in MATLAB application for the determination of the cost function, which is given by the sum of the cost of consumed energy mixing equipment and the quantity consumed by the extraction solvent. Using it can find the optimal values of the extraction process. The program allows you to view not only the cost function, as well as 2D and 3D graph dimensionless concentration field washing substances in a solid phase and concentration of substances in the washing bath.

Because the calculations of optimal values is necessary to know the value of the coefficient of diffuse, and the case where the value is not specified, I created, using Crank's relationship, program for the determination his value of the values measured of the concentration in laboratory conditions.

Software application won't be used to only in teaching but also it can be used in the extraction solution and the unbound and bound substance in practice., because the values are calculated in fractions of seconds as opposed to counting using MS Excel, the calculations are complicated due to extensive relationships and time-consuming, which considered the main contribution of my bachelor's thesis.

The specific mathematical model for single-stage extraction was already in the laboratory and operating conditions verified for the considered conditions. The advantage of mathematical modeling is that if the force proposed mathematical model is already verified, the subsequent solution may not be verified costly laboratory experiments.

SEZNAM POUŽITÉ LITERATURY

- [1] HOVORKA, František, *Technologie chemických látek*, 1.vydání, Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Praha 2005, ISBN 80-7080-588-9
- [2] KASATKIN, Andrei, G., *Základní pochody a přístroje chemické technologie II*, 1.vydání, Praha: Technicko-vědecké vydavatelství, 1954, 354s.
- [3] PILAŘ, Antonín, NÝVLT, Jaroslav, MACHAČ, Ivan, *Chemické inženýrství III*, 1.vydání, SNTL-Nakladatelství technické literatury, Praha 1, 1972, 344s.
- [4] *Extrakce a vyluhování*, [cit. 14.5.2009]
<http://www.vscht.cz/uchi/ped/chi/chi.ii.text.k20.extrakce.vyluhovani.pdf>
- [5] *Příprava vzorku k analýze*, [cit. 14.5.2009]
<http://analyt.wz.cz/Priprava/1.%20Priprava%20vzorku.pdf>
- [6] *Extrakční techniky*, [cit. 14.5.2009]
<http://ach.upol.cz/ulohy/extrakce.pdf>
- [7] *Extrakce*, [cit. 14.5.2009]
<http://www.natur.cuni.cz/~opekar/analchem/anchem7.doc>
- [8] DOBIÁŠ, Petr, ADAM, Martin, VENTURA, Karel, *Mikroextrakce jednou kapkou*, [cit. 14.5.2009]
<http://www.primat.cz/download.php?id=20807>
- [9] SOVOVÁ, Helena, *Oxid uhličitý, tentokrát v kladné roli*, s.46-49, [cit. 14.5.2009]
<http://www.vscht.cz/document.php?docId=234>
- [10] *Technologie superkritické extrakce oxidem uhličitým*, [cit. 14.5.2009]
<http://www.link.cz/flaveko/czpage1.html>
- [11] *Extrakce na tuhou fázi*, [cit. 14.5.2009]
http://www.sigmaaldrich.com/etc/medialib/docs/Sigma-Aldrich/General_Information/01.Par.0001.File.dat/01
- [12] Soxhletovy extraktory, [cit. 14.5.2009]
<http://www.jergym.hiedu.cz/~canovm/nadobi/extrakto/extrakto.htm>

- [13] *Extrakce tuhé látky kapalinou*, slajd 62, [cit. 14.5.2009]
<http://ekologie.upol.cz/ku/ekozcho/ZakladychemieII.pdf>
- [14] *Mikroextrakce na tuhou fázi*, [cit. 14.5.2009]
<http://www.primat.cz/download.php?id=20810>
- [15] KOLOMAZNÍK, Karel, *Modelování zpracovatelských procesů*, 1.vydání, Brno: Vysoké učení technické v Brně, 1990, 191s. ISBN 80-214-01141
- [16] JANÁČOVÁ, Dagmar, *Modelování extrakční procesů*, Zlín: UTB ve Zlíně, teze habilitační práce, 2002. s.20, ISBN 80-248-0194-9
- [17] *Dvousložková difuze*, [cit. 14.5.2009]
https://www.stag.utb.cz/apps/stag/dipfile/index.php?download_this_unauthorized=1397
- [18] CRANK, John, *The Mathematics of Diffusion*, Oxford: Oxford University Press, 1979, 414s. ISBN 978-0-19-853411-2
- [19] KOLOMAZNÍK, Karel, BAILEY, David G, a TAYLOR, Maryann E., *Delimiting of Bound and Un-bound Lime from White Hide*. In 102nd Annual Meeting, Hyatt Regency, 1. vydání, Eastern Regional Research Center, Wyndmoor, PA: United States Department of Agriculture, 2006, s. 309-316. ISBN 0002-9726.
- [20] KOLOMAZNÍK, Karel, *Analýza dynamických systémů*, 1.vydání, Brno: Vysoké učení technické v Brně, 1988, 213s.
- [21] ZAPLATÍLEK, Karel, DOŇAR, Bohuslav, *MATLAB pro začátečníky*. Praha 2007, 152s. ISBN 80-7300-175-6
- [22] ZAPLATÍLEK, Karel, DOŇAR, Bohuslav, *MATLAB tvorba uživatelských aplikací*. Praha 2005, 216s. ISBN 80-7300-133-0
- [23] PERŮTKA, Karel, *MATLAB – základy pro studenty automatizace a informační technologie*. UTB ve Zlíně 2005, ISBN 80-7318-355-2
- [24] KOVÁŘÍK, Martin, *Počítačové zpracování dat v programu MATLAB*, Bučovice 2008, 278s. ISBN 978-8087106-09-9
- [25] KOVÁŘÍK, Martin, *Matematické aplikace v Matlabu*, Zlín: Univerzita Tomáše Bati ve Zlíně, 2008, 278s. ISBN 978-80-7318-753-8

SEZNAM POUŽITÝCH SYMBOLŮ A ZKRATEK

<i>Symbol</i>	Význam	Jednotka
α	parametr námoku	[1]
b	poloviční tloušťka extrahované tuhé fáze	[m]
β_{CA}	Selektivita rozpouštědla	[1]
c	Koncentrace nevázané složky v pevné fázi	[kg·m ⁻³]
C	Bezrozměrné koncentrační pole extrahované složky v tuhé fázi	[1]
c_A	Koncentrace vázané složky	[kg·m ⁻³]
c_0	Koncentrace extrahované složky v lázni	[kg·m ⁻³]
C_0	Bezrozměrné koncentrace složky v lázni	[1]
c_p	Počáteční koncentrace složky v tuhé fázi	[kg·m ⁻³]
$c(t)$	Koncentrace složky, která difuzí přejde do námokové kapaliny	[kg·m ⁻³]
c_∞	Koncentrace složky, která difuzí přejde do námokové kapaliny v nekonečném čase	[kg·m ⁻³]
D	Hodnota difuzního koeficientu	[m ² ·s ⁻¹]
D_{ef}	Efektivní hodnota difuzního koeficientu	[m ² ·s ⁻¹]
E	Hmotnost extraktu	[kg]
ε	Porozita	[1]
ε_C	Extrakční faktor extrahované složky	[1]
ε_A	Extrakční faktor pevné fáze	[1]
F	Plošný obsah	[m ²]
Fo	Fourierovo kritérium, bezrozměrný čas	[1]
G	Množství prodifundované látky	[kg]
K	Rovnovážná konstanta sorpce (síla vazby sorbované složky na tuhou fázi)	[1]
K_R	Rozdělovací koeficient	[1]

k	Konstanta, $k = \frac{D}{1+K}$	[1]
k_E	Měrná cena elektrické energie	[Kč·kWh ⁻¹]
k_C	Měrná cena extrakčního činidla	[Kč·m ⁻³]
λ	Transportní parametr	[s ^{-1/2}]
M_A	Molární hmotnost složky A	[kg·mol ⁻¹]
M_B	Molární hmotnost složky B	[kg·mol ⁻¹]
$m(t)$	Hmotnost složky, která difuzí přejde do námokové kapaliny	[kg]
m_∞	Hmotnost složky, která difuzí přejde do námokové kapaliny v nekonečném čase	[kg]
N_c	Náklady na extrakční činidla	[kč]
N_e	Náklady na elektrickou energii	[kč]
N_k	Celkové provozní náklady	[kč]
N_a	Námokové číslo, bezrozměrná spotřeba extrakční kapaliny	[1]
η_B	Dynamická viskozita rozpouštědla	[N·s·m ⁻²]
P	Příkon elektromotoru pro pohon míchadla	[kWh]
p	Tlak	[Pa]
q_n	n .tý kořen transcendentní rovnice	[1]
R	Hmotnost rafinátu	[kg]
S	Plocha pevné fáze	[m ²]
Sc	Schmidtovo kritérium	[1]
t	Čas	[s]
T	teplota	[K]
V	Objem pevné fáze	[m ³]
V_A	Molární objem složky A	[m ³ ·mol ⁻¹]
V_B	Molární objem složky B	[m ³ ·mol ⁻¹]
V_0	Objem extrakční kapaliny	[m ³]

ν	kinematická viskozita	$[10^{-6}\text{m}^2\text{s}^{-1}]$
w_{AA}	Hmotnostní zlomek pevné fáze v rafinátu	[1]
w_{AB}	Hmotnostní zlomek pevné fáze v extraktu	[1]
w_{CA}	Hmotnostní zlomek extrahované složky v rafinátu	[1]
w_{CB}	Hmotnostní zlomek extrahované složky v extraktu	[1]
x	Souřadnice polohy	[m]
X	Bezrozměrná vzdálenost	[1]
y	Stupeň pracího procesu	[1]
ψ	součinitel difuzního odporu	[1]

SEZNAM OBRÁZKŮ

Obrázek 1.1 – Schéma extrakčního procesu	10
Obrázek 2.1 – Extrakce kapalinou a) vytřepáváním nebo b) tzv. perforátory	15
Obrázek 2.2 – Princip mikroextrakce kapalina-kapalina.....	16
Obrázek 2.3 – Princip superkritické fluidní extrakce	17
Obrázek 2.4 – Soxhletovy extraktory	18
Obrázek 2.5 – Mikroextrakce z tuhé fáze	19
Obrázek 3.1 – Rozdělení extrakčních procesů,	20
Obrázek 3.2 – Obecná sorpční izoterma	21
Obrázek 3.3 – Závislost jakosti praní na síle vazby vypírané složky s pevnou fází pro různá námoková čísla	23
Obrázek 4.1 – Závislost bezrozměrné koncentrace na \sqrt{t}	32
Obrázek 4.2 Určení směrnice pro výpočet λ z počáteční fáze měření	32
Obrázek 4.3 – Závislost stupně pracího procesu y na Fo	34
Obrázek 4.4 – Nákladová funkce sestavená v programu MS Excel	36
Obrázek 5.1 – Startovací okno Matlabu	38
Obrázek 5.2 – Úvodní okno programové aplikace	39
Obrázek 5.3 – Úvodní okno pro výpočet difuzního koeficientu.....	39
Obrázek 5.4 – Chybové hlášení-nevyplněny údaje	40
Obrázek 5.5 – Chybové hlášení-nestejný počet prvků zadávaných polí.....	40
Obrázek 5.6 – Zobrazení hodnoty difuzního koeficientu	41
Obrázek 5.7 – Graf závislosti koncentrace na \sqrt{t}	41
Obrázek 5.8 – Úvodní obrazovka programu pro optimalizaci extrakce	43
Obrázek 5.9 – Okno zobrazující vypočítané optimální hodnoty	44
Obrázek 5.10 – Průsečíky přímký s tangentoidami	44
Obrázek 5.11 – Závislosti pracího procesu na bezrozměrném čase pro různé spotřeby činidel Na	46
Obrázek 5.12 – Detail grafu Obrázku 4.11	46
Obrázek 5.13 – Nákladová funkce stanovena pomocí programové aplikace	47
Obrázek 5.14 – 2D graf bezrozměrného koncentračního pole vypírané složky v tuhé fázi.....	48
Obrázek 5.15 – Detail grafu z Obrázek 5.14	48

Obrázek 5.16 – 3D graf bezrozměrného koncentračního pole vypírané složky v tuhé fázi	49
Obrázek 5.17 – Bezrozměrná koncentrace vypírané složky v lázni	49

SEZNAM TABULEK

Tabulka 4.1 – naměřené hodnoty kinetického měření extrakce hydroxidu sodného	31
Tabulka 4.2 – hodnoty bezrozměrné koncentrace a \sqrt{t}	32
Tabulka 4.3 – nalezené kořeny transcendentní rovnice v programu MS EXCEL	34
Tabulka 4.4 – vypočítané hodnoty času t z F_0	34
Tabulka 4.5 – hodnoty pro vykreslení nákladové funkce	35
Tabulka 5.1 – Srovnání hodnot nalezených kořenů	45