



دانشگاه آزاد اسلامی

واحد تهران جنوب

دانشکده تحصیلات تکمیلی

پایان نامه برای دریافت درجه کارشناسی ارشد “M.Sc”
مهندسی شیمی - طراحی فرآیندهای صنایع نفت

عنوان:

مدلسازی استخراج روغن از دانه آفتابگردان با استفاده از CO_2 فوق بحرانی

استاد راهنما:

استاد مشاور:

نگارش:

فهرست مطالب

| عنوان | صفحه |
|-------------|------|
| چکیده | |
| مقدمه | |

فصل اول - کلیات

| | |
|--|----|
| ۱-۱- استخراج | ۱ |
| ۲-۱- به کار بردن سیال فوق بحرانی برای استخراج | ۱ |
| ۳-۱- تاریخچه | ۲ |
| ۴-۱- خصوصیات و مزایای سیال فوق بحرانی | ۶ |
| ۵-۱- سیال ایده آل جهت فرایند SFE | ۸ |
| ۶-۱- قابلیت حلالیت ترکیبات در CO ₂ فوق بحرانی | ۹ |
| ۷-۱- منابع CO ₂ | ۱۰ |

فصل دوم: استخراج روغن آفتابگردان توسط استخراج فوق بحرانی و عوامل موثر بر آن

| | |
|--|----|
| ۱-۲- استخراج روغن آفتابگردان | ۱۱ |
| ۲-۲- عوامل موثر بر استخراج فوق بحرانی | ۱۱ |
| ۱-۲-۲- فشار | ۱۱ |
| ۲-۲-۲- دما | ۱۱ |
| ۳-۲-۲- فلوی CO ₂ فوق بحرانی | ۱۲ |
| ۴-۲-۲- تاثیر سایز هسته | ۱۲ |

فهرست مطالب

۱۲-۲-۵- نقش کمک حلال ۱۲

فصل سوم: فرایند استخراج فوق بحرانی روغن آفتابگردان

۱۳-۱- فرآیند استخراج فوق بحرانی روغن در مقیاس آزمایشگاهی ۱۳

۱۳-۱-۱- شرایط و ابعاد دستگاه ۱۳

۱۴-۱-۲- فرآیند استخراج ۱۴

۱۵-۲- فرآیند استخراج فوق بحرانی روغن آفتابگردان در مقیاس صنعتی ۱۵

۱۵-۲-۱- اجزا یا دستگاههای تشکیل دهنده فرآیند در مقیاس صنعتی ۱۵

فصل چهارم: مدل‌های متداول فرآیند استخراج فوق بحرانی

۱۷-۱- مدلسازی فرآیند ۱۷

۱۸-۱-۱- مدل ۱۹۹۷ M. perrut (مدلسازی استخراج فوق بحرانی روغن آفتابگردان) ۱۸

۱۸-۱-۱-۱- فرضیات مدل ۱۸

۱۸-۱-۱-۲- مدلسازی با استفاده از موازنه جرم ۱۸

۱۹-۱-۱-۳- حل عددی ۱۹

۲۰-۱-۱-۴- مدل تعادلی ۲۰

۲۲-۱-۲- مدل گودرزینیا ۱۹۹۷ (استخراج فوق بحرانی روغن‌ها) ۲۲

۲۲-۱-۲-۱- فرضیات مدل ۲۲

۲۲-۱-۲-۲- معادلات حاصل از مدلسازی ۲۲

۲۳-۱-۲-۳- روش حل (تکنیک حل) ۲۳

۲۵-۱-۲-۴- نتیجه ۲۵

فهرست مطالب

| | |
|--|----|
| ۳-۱-۴- مدل 2000 Garcia Cocero (مدلسازی ریاضی استخراج فوق بحرانی دانه | |
| روغنی به کمک الکل اشباع) | ۲۸ |
| ۳-۱-۴-۱- فرضیات مدل | ۲۸ |
| ۳-۱-۴-۲- معادلات حاصل از مدلسازی | ۲۸ |
| ۳-۱-۴-۳- حل تحلیلی - عددی | ۳۰ |
| ۴-۱-۴- مدل 2005 Machmudah (مدلسازی استخراج فوق بحرانی روغن جوز هندی | |
| (Nutmeg oil) به دو روش BIC و Shrinking Core | ۳۱ |
| ۴-۱-۴-۱- مدل BIC (Broken and In act Cells) | ۳۱ |
| ۴-۱-۴-۱-۱- فرضیات مدل BIC | ۳۱ |
| ۴-۱-۴-۲- مدل ریاضی | ۳۲ |
| ۴-۱-۴-۲- مدل هسته کوچک شونده (Shrinking Core model) | ۳۴ |
| ۴-۱-۴-۱-۲- فرضیات | ۳۴ |
| ۴-۱-۴-۲-۲- مدل ریاضی | ۳۴ |
| ۴-۱-۴-۳- نتایج | ۳۷ |
| فصل پنجم : مدل در نظر گرفته شده برای پروژه | |
| ۱-۵- مدل با فرض هسته کوچک شونده | ۴۱ |
| ۱-۵-۱- فرضیات مدلسازی | ۴۱ |
| ۱-۵-۲- ابعاد دستگاه و خصوصیات فیزیکی | ۴۲ |
| ۱-۵-۳- مدلسازی ریاضی | ۴۵ |

فهرست مطالب

| | |
|----|--|
| ۵۱ | ۵-۱-۴- حل مدل ریاضی |
| | ۵-۱-۴-۱- حل مدل بوسیله متد کرانک نیکولسون |
| ۵۱ |(Crank- Nicolson Implicit) |
| ۵۴ | ۵-۱-۵- حل کامپیوتری و بحث و نتایج حاصل از آن |
| ۵۶ | ۵-۱-۶- اجرا و نتایج برنامه |
| ۵۷ | ۵-۱-۶-۱- اثر تغییرات فشار روی بازده استخراج |
| ۶۲ | ۵-۱-۶-۲- اثر تغییرات دما روی بازده استخراج |
| ۶۸ | ۵-۱-۶-۳- اثر تغییرات فلوی سیال فوق بحرانی روی بازده استخراج |
| ۷۰ | ۵-۱-۶-۴- اثر تغییرات سایز هسته (شعاع یا قطر) روی بازده استخراج |
| ۷۲ | ۵-۱-۶-۵- نتیجه گیری |
| ۷۳ | ۵-۱-۷- پیشنهاد برای تحقیقات بعدی |
| ۷۴ | پیوست |
| ۹۹ | منابع |

فهرست جداول

| صفحه | عنوان |
|----------------------|----------------------|
| | فصل اول |
| جدول ۱-۱-۱-۱ ۸ | جدول ۱-۱-۱-۱ ۸ |
| جدول ۱-۲-۱ ۹ | جدول ۱-۲-۱ ۹ |
| | فصل دوم |
| | فصل سوم |
| جدول ۱-۳-۱ ۱۳ | جدول ۱-۳-۱ ۱۳ |
| | فصل چهارم |
| | فصل پنجم |
| جدول ۱-۵-۱ ۴۳ | جدول ۱-۵-۱ ۴۳ |
| جدول ۲-۵-۱ ۴۴ | جدول ۲-۵-۱ ۴۴ |
| جدول ۳-۵-۱ ۴۴ | جدول ۳-۵-۱ ۴۴ |

فهرست نمودارها

عنوان صفحه

فصل اول

نمودار ۱-۱- نمودار فازی (کلی) ۶

نمودار ۲-۱- نمودار فازی CO₂ ۷

فصل دوم

فصل سوم

فصل چهارم

نمودار ۱-۴- منحنی تعادلی ارایه شده توسط Perrut ۲۱

نمودار ۲-۴- تاثیر سایز ذره برای روغن باسیل بر روی میزان بازده استخراج در فشار ۱۰۰

بار، دمای ۴۰ درجه ۲۵

نمودار ۳-۴- منحنی بازده مرزنجوش برحسب زمان در فشار ۱۰۰ بار و دمای ۴۰ درجه ۲۶

نمودار ۴-۴- تاثیر فشار بر میزان استخراج روغن زیره در فشارهای ۱۰۰ و ۹۰ بار و دمای

۴۰ درجه ۲۷

نمودار ۵-۴- منحنی تعادلی ۳۳

نمودار ۶-۴- بررسی تاثیر دما بر روی بازده استخراج روغن جوز هندی در فشار ۱۵Mpa

سایر ۰,۵۵۶mm و فلوی $1.39 \times 10^{-4} m^3 / sec$ ۳۷

فهرست نمودارها

نمودار ۴-۷- تاثیر فشار بر بازده استخراج روغن جوز هندی - مقایسه مدل با مقادیر

آزمایشگاهی در دمای ۳۱۳k, سایز هسته ۰,۵۵۶m و فلوی $1.39 \times 10^{-4} m^3 / sec$ ۳۸

نمودار ۴-۸- تاثیر فلو بر بازده استخراج روغن جوز هندی - مقایسه مدل ها با مقادیر

آزمایشگاهی در دمای ۳۱۳k, سایز هسته ۰,۵۵۶m و فشار ۱۵Mpa ۳۹

نمودار ۴-۹- تاثیر سایز هسته بر میزان بازه استخراج روغن جوز هندی - مقایسه مدلها با

مقادیر آزمایشگاه در دمای ۳۲۳k, فشار ۱۵Mpa و فلوی $8.33 \times 10^{-5} m^3 / sec$ ۴۰

فصل پنجم

نمودار ۵-۱- تاثیر فشار بر بازده استخراج در فلوی $4cm^3 / min$, سایز هسته ۰,۲۳mm و دمای

..... ۳۱۳k ۵۸

نمودار ۵-۲- تاثیر فشار بر بازده استخراج در فلوی $4cm^3 / min$ سایز هسته ۰,۲۳mm و دمای

..... ۳۳۳k ۵۹

نمودار ۵-۳- تاثیر فشار بر بازده استخراج در فلوی $4cm^3 / min$ سایز هسته ۰,۲۳mm و دمای

..... ۳۵۳k ۶۰

نمودار ۵-۴- تاثیر دما بر بازده استخراج در فلوی $4cm^3 / min$, سایز هسته ۰,۲۳mm و فشار

..... ۲۰Mpa ۶۲

نمودار ۵-۵- تاثیر دما بر بازده استخراج در فلوی $4cm^3 / min$, سایز هسته ۰,۲۳mm و فشار

..... ۳۰Mpa ۶۴

فهرست نمودارها

نمودار ۵-۶- تاثیر دما بر بازده استخراج در فلوی $4\text{cm}^3 / \text{min}$ ، سایز هسته $0,23\text{m}$ و فشار

۴۰Mpa ۶۵

نمودار ۵-۷- تاثیر فلوی بر میزان بازده استخراج در فشار 40Mpa دمای 313k و سایز هسته

$0,23\text{m}$ ۶۸

نمودار ۵-۸- تاثیر اندازه سایز ذره بر میزان استخراج در فشار 40Mpa دمای 313k و

فلوی $4\text{cm}^3 / \text{min}$ ۷۰

فصل اول

شکل ۱-۱-۱- دستگاه بکار رفته هوگارت و هانی ۳

شکل ۱-۱-۱-a- تیوب شیشه ای همراه مانومتر

شکل ۱-۱-۱-b- تیوب شیشه ای با مانومتر همراه حمام

شکل ۱-۲- مخازن بکار رفته در استخراج فوق بحرانی به کمک CO_2 ۴

شکل ۱-۳- دیاگرام فرآیند نیمه پیوسته استخراج قهوه ۵

شکل ۱-۴- استخراج چای به کمک سیال فوق بحرانی ۵

فصل دوم

فصل سوم

شکل ۱-۳-۱- دیاگرام فرآیند آزمایشگاهی استخراج فوق بحرانی روغن آفتابگردان ۱۳

شکل ۱-۳-۲- دیاگرام فرآیند صنعتی استخراج فوق بحرانی روغن آفتابگردان ۱۵

فصل چهارم

فصل پنجم

شکل ۱-۵-۱- المان استخراج کننده ۴۵

شکل ۱-۵-۲- المان کلی ذره جامد ۴۷

علایم اختصاری

| | |
|-----------|--|
| a | ثابت مدل $\left(\frac{vR^2}{D_e L}\right)$ |
| a_p | سطح مخصوص - سطح به ازای واحد حجم $\left(\frac{m^2}{m^3}\right)$ |
| b | ثابت مدل |
| b | در قسمت مدلسازی شده $\left(\frac{q_0}{C^{sat}}\right)$ |
| b | در مقاله S. Machmuda et al [20] $\left(\frac{x_s}{y_0}\right)$ |
| Bi | عدد Biot $\left(\frac{k_f R}{D_e}\right)$ |
| c | غلظت در فاز سیال $\left(\frac{g_{solute}}{cm^3 fluid}\right)$ |
| c^* | غلظت تعادلی در سطح $\left(\frac{g_{solute}}{cm^3 fluid}\right)$ |
| c_0 | غلظت اولیه $\left(\frac{g_{solute}}{cm^3 fluid}\right)$ |
| C^b | غلظت حل شونده در فاز سیال (kg / m^3) |
| C^p | غلظت حل شونده در فاز جامد (kg / m^3) |
| C^{sat} | میزان حلالیت در CO_2 (kg / m^3) |
| C_f | غلظت در فاز فوق بحرانی $(kmol / m^3)$ |
| C_{fs} | غلظت در فاز فوق بحرانی در سطح ذره $(kmol / m^3)$ |
| d_p | قطر هسته (m) |
| D_e | ضریب نفوذ داخل ذره (m^2 / s) توضیح: D_e در مقاله I. Goodarznia et al [7] بیانگر نفوذ در فیلم در برگیرنده ذره است. |
| D_L | ضریب بخش محوری (m^2 / s) |
| D_m | ضریب نفوذ در داخل ذره (m^2 / s) |
| D_r | ضریب بخش شعاعی (cm^2 / min) |
| D_{az} | ضریب بخش محوری (cm^2 / min) |

| | |
|-----------|--|
| E | بازده استخراج بی بعد $\frac{F}{Ng_i}$ |
| f | Broken cell در شونده در |
| F | میزان استخراج شده |
| F_1 | Goodarznia et al مقاله در حل معادله پارامتر $\left(\frac{2L\Delta\tau}{Pe_p R\Delta\zeta^2}\right)$ |
| F_2 | Goodarznia et al مقاله در حل معادله پارامتر $\left(\frac{\Delta\tau}{Pe_b \Delta Z^2}\right)$ |
| F_3 | Goodarznia et al مقاله در حل معادله پارامتر $\left(\frac{\Delta\tau}{2\Delta Z}\right)$ |
| F_4 | Goodarznia مقاله در حل معادله پارامتر $\left(\frac{6(1-\varepsilon)LBi\Delta\tau}{\varepsilon RPe_p}\right)$ |
| h | پارامتر تعادل |
| k_f | ضریب انتقال جرم فیلمی $\left(\frac{m}{s}\right)$ |
| k_p | ضریب نسبی حجم |
| k_s | ضریب انتقال جرم فیلمی در فاز جامد $\left(\frac{m}{s}\right)$ |
| L | (m) طول بستر |
| M | جرم مولکولی |
| ML | تعداد تقسیم بندی ها در فاز بستر |
| NR | تعداد تقسیم بندی ها در فاز ذره |
| Pe | عدد بی بعد پکلت $\left(\frac{Lv}{D_L}\right)$ |
| Pe_b | عدد بی بعد پکلت برای بستر $\left(\frac{u_0 L}{D_L \varepsilon}\right)$ |
| Pe_p | عدد بی بعد پکلت برای جامد $\left(\frac{u_0 d_p}{D_m \varepsilon}\right)$ |
| Pe_{pd} | عدد بی بعد پکلت برای جامد $\left(\frac{u_0 d_p}{D_L \varepsilon}\right)$ |
| q | غلظت در فاز جامد $\left(\frac{kg}{m^3}\right)$ |

| | |
|---------|---|
| q_0 | غلظت اولیه در فاز جامد $\left(\frac{kg}{m^3}\right)$ |
| q_s^+ | غلظت حل شونده در جامد در تعادل با فاز سیال |
| r | m مولفه شعاعی در ذره |
| r_c | m شعاع بحرانی هسته (شعاع هسته کوچک شونده) |
| R | m شعاع هسته |
| T | زمان (s) |
| x^b | غلظت بی بعد حل شونده در فاز سیال $\left(\frac{C^b}{C^{sat}}\right)$ |
| x^p | غلظت بی بعد حل شونده در داخل فاز (خلل و فرج) $\left(\frac{C^p}{C^{sat}}\right)$ |
| x | غلظت بی بعد در فاز سیال $\left(\frac{kg\ solute}{kg\ solvent}\right)$ |
| x_i | غلظت فاز سیال در خلل و فرج ذره $\left(\frac{kg\ solute}{kg\ solvent}\right)$ |
| x_s | حلالیت $\left(\frac{kg\ solute}{kg\ solvent}\right)$ |
| x_0 | غلظت اولیه فاز سیال $\left(\frac{kg\ solute}{kg\ solvent}\right)$ |
| x^* | غلظت تعادلی فاز سیال $\left(\frac{kg\ solute}{kg\ solvent}\right)$ |
| X | غلظت بی بعد فاز سیال $\left(\frac{x}{x_0}\right)$ |
| X_i | غلظت بی بعد فاز سیال در خلل و فرج $\left(\frac{x_i}{x_0}\right)$ |
| X^* | غلظت تعادلی بی بعد $\left(\frac{x^*}{x_0}\right)$ |
| y | غلظت بی بعد فاز جامد $\left(\frac{q}{q_0}\right)$ |

توضیح: در تحقیق [20] Machmudah et al y به عنوان غلظت فاز جامد به صورت

$$\text{تعریف می شود.} \left(\frac{kg\ solute}{kg\ insoluble\ solid}\right)$$

| | |
|-----------------|--|
| y_0 | غلظت اولیه بی بعد فاز جامد |
| y_0 | توضیح: در تحقیق [4] Perrot et al , [29] Machmudah et al به عنوان غلظت اولیه حل شونده در جامعه به صورت $\left(\frac{kg\ solute}{kg\ inso\ lub\ le\ solid}\right)$ تعریف می شود. |
| y_c | غلظت گذرا |
| y_u | غلظت Untreated Solid |
| y_i | جزء حل شونده Untreated Solute |
| y_1 | غلظت جامد در Broken cells $\left(\frac{kg\ solute}{kg\ inso\ lub\ le\ solid}\right)$ |
| y_{10} | غلظت اولیه Broken cells |
| y_2 | غلظت Inact cells $\left(\frac{kg\ solute}{kg\ inso\ lub\ le\ solid}\right)$ |
| y_{20} | غلظت اولیه inact cells |
| Y | غلظت بی بعد فاز جامد $\left(\frac{y}{y_0}\right)$ |
| Y_1 | غلظت بی بعد Broken cells $\left(\frac{y_1}{y_{10}}\right)$ |
| Y_2 | غلظت بی بعد inact cells $\left(\frac{y_2}{y_{20}}\right)$ |
| z | (m) مولفه محوری در استخراج کننده |
| Z | مولفه محوری بی بعد $\left(\frac{z}{L}\right)$ |
| ε | تخلخل بستر |
| ε_p | تخلخل جامد یا ذره |
| θ | زمان بی بعد $\left(\frac{D_e t}{R^2}\right)$ |
| ζ | شعاع بی بعد $\left(\frac{r}{R}\right)$ |
| ζ_c | شعاع بحرانی بی بعد (شعاع بی بعد هسته کوچک شونده) $\left(\frac{r_c}{R}\right)$ |
| ν | سرعت حلال در بستر $\left(\frac{m}{s}\right)$ |
| τ | زمان بی بعد $\left(\frac{\nu t}{L}\right)$ |

ρ_f دانسیتہ سیال $\left(\frac{kg}{m^3}\right)$ ρ_s دانسیتہ جامد $\left(\frac{kg}{m^3}\right)$ ρ_c دانسیتہ کلی دانہ $\left(\frac{kg}{m^3}\right)$

چکیده:

استفاده از سیال فوق بحرانی در فرآیندهای صنعتی در سالیان اخیر افزایش چشمگیری داشته است و امروزه از دی اکسید کربن فوق بحرانی در فرآیندهای صنعتی استفاده فراوانی میشود که از جمله میتوان به استفاده از این سیال در صنایع داروسازی و غذایی اشاره کرد. فرآیند استخراج فوق بحرانی روغن آفتابگردان یکی از فرآیندهای مهمی است که امروزه مطرح میشود. در این تحقیق مدلسازی ریاضی استخراج روغن آفتابگردان از هسته آن با استفاده از فرض هسته کوچک شونده (Shrinking core) انجام شده و تأثیر پارامترهای دما، فشار، فلو و سایز هسته بر بازده استخراج مورد بررسی قرار گرفته. پس از بررسی تأثیر، دما در بازه 313 K تا 353 K ، فشار از 20 MPa تا 60 MPa ، سایز هسته از 0.23 mm تا 2.18 mm و فلو از $1\text{ cm}^3/\text{min}$ تا $6\text{ cm}^3/\text{min}$ این نتیجه بدست آمده که شرایط بهینه فشار 40 MPa یا بیشتر، دما 353 K یا بیشتر، فلو $4\text{ cm}^3/\text{min}$ یا بیشتر و سایز هسته 0.23 mm است که بهتر است فرآیند در این شرایط انجام شود.