

ИНЖЕНЕРНЫЕ СИСТЕМЫ ЖИЗНЕОБЕСПЕЧЕНИЯ НАСЕЛЕННЫХ МЕСТ, ЗДАНИЙ И СООРУЖЕНИЙ. ЭКОЛОГИЧЕСКАЯ БЕЗОПАСНОСТЬ СТРОИТЕЛЬСТВА



УДК 628.16.001.24

**Д.Д. ВОЛКОВ, Л.А. ИВАНОВА, Т.А. КРАСНОВА, Н.В. ГОРА,
Ю.Л. СКОЛУБОВИЧ, Д.В. КОЗЛОВ**

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СОРБЦИОННЫХ ПРОЦЕССОВ ОЧИСТКИ ПРИРОДНЫХ И СТОЧНЫХ ВОД ОТ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

В статье представлены исследования по адсорбции растворенных в воде органических соединений. Обоснована целесообразность применения математического моделирования при разработке технологии и системы управления процессами водоочистки. Предложена математическая модель сорбционной очистки природных и сточных вод от органических соединений. Полученные экспериментальные и расчетные данные хорошо согласуются, что подтверждает эффективность предложенной математической модели.

К л ю ч е в ы е с л о в а: очистка сточных вод, адсорбционные установки, адсорбционный процесс, моделирование очистки, органические соединения.

DOI 10.32683/0536-1052-742-10-27-32

Моделирование стало эффективным средством исследования и проектирования систем жизнеобеспечения. Актуальность математических моделей непрерывно возрастает из-за их гибкости, адекватности реальным системам, невысокой стоимости реализации на базе современных ЭВМ. Особенно эффективно применение моделирования на этапах проектирования изделий, технологического оборудования и систем управления, когда высока цена ошибочных решений. Использование ресурсов современной вычислительной техники позволило увеличить сложность моделей при исследовании систем жизнеобеспечения, учитывающих многообразие факторов, имеющих место в реальных технологических системах.

Адсорбция растворенных веществ при фильтровании жидкостей через плотный слой зерен адсорбента, загруженного в колонну, представляет собой один из наиболее распространенных методов извлечения органических веществ из воды. Такая адсорбционная колонна работает до тех пор, пока в фильтрате не наблюдается «проскок» вещества, загрязняющего очищаемую воду.

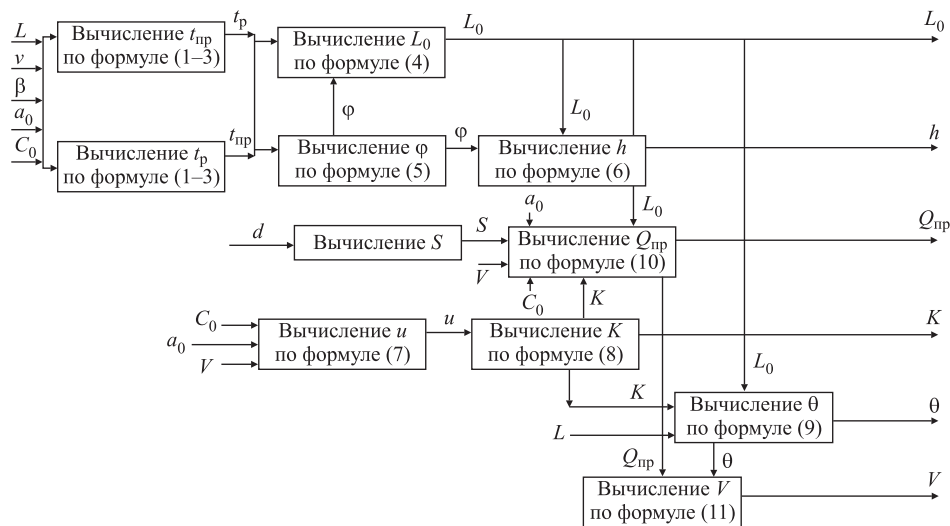
© Волков Д.Д., Иванова Л.А., Краснова Т.А., Гора Н.В., Сколубович Ю.Л., Козлов Д.В., 2020

Несмотря на все многообразие существующих технических решений организации процессов адсорбционной очистки воды от органических загрязнителей, основным этапом в процессе разработки адсорбционных установок является физическое моделирование. Изменение режимов и параметров оказывает непосредственное влияние на качественные показатели адсорбционного процесса. Полноценный учет перечисленных факторов в условиях физического моделирования приводит к значительным затратам: финансовым, времени и трудовых ресурсов.

Физическое моделирование динамики адсорбционного процесса предполагает последовательный подбор параметров (тип сорбента, длина неподвижного слоя, продолжительность работы колонны, коэффициент защитного действия и др.) и получение экспериментальных выходных кривых, зависящих от одной варьируемой переменной (например, скорость потока раствора) при фиксированных значениях остальных. Расчет параметров колонны и режима непрерывной очистки на основе теоретических зависимостей, описывающих массоперенос, значительно сокращает объем экспериментальных исследований. Поэтому целесообразным является включение в процесс разработки технологии и системы управления этапа математического моделирования на основе теории адсорбционных и гидромеханических процессов, теории автоматического управления. Наличие адекватной математической модели в широком спектре управляющих и возмущающих воздействий позволит найти новые пути повышения эффективности адсорбционных установок.

Целью исследования является разработка методики расчета оптимальных параметров работы производственной адсорбционной колонны и режимов очистки природных и сточных вод от органических соединений с использованием промышленных углеродных сорбентов для обеспечения заданного качества питьевой воды. Это может быть осуществлено на основе математического моделирования сорбционного процесса.

Построение алгоритмической схемы расчета векторов конструктивных параметров колонны (рисунок) основано на использовании уравнений, при-



Алгоритмическая схема расчета вектора конструктивных параметров колонны

веденных ниже. Расчеты динамики адсорбции проводятся на основе модели слоя равновесной адсорбции с использованием фундаментальных уравнений внешнедиффузионной динамики адсорбции, экспериментально полученных адсорбционных констант уравнения Дубинина – Радужкевича и кинетических характеристик [1, 2].

В зависимости от величины начальной концентрации адсорбируемого вещества могут быть использованы три фундаментальных уравнения внешнедиффузионной динамики адсорбции.

В первой области, где изотерма адсорбции считается прямолинейной и приближенно отвечает закону Генри, пользуются формулой

$$\sqrt{t} = \sqrt{\frac{k_{\Gamma}}{\nu}} \sqrt{L} - b \sqrt{\frac{k_{\Gamma}}{\beta}}, \quad (1)$$

где t – время работы слоя L , с;

ν – средняя скорость потока, м/с;

L – длина слоя сорбента, м;

β – коэффициент внешнего массообмена, с⁻¹;

k_{Γ} – коэффициент Генри.

Для второй области изотермы адсорбции применяют уравнение

$$t = \frac{a_0 p}{\nu C_0} \left\{ L - \frac{\nu}{\beta} \left[\frac{1}{p} \ln \left(\frac{C_0}{C} - 1 \right) + \ln \frac{C_0}{C} - 1 \right] \right\}, \quad (2)$$

здесь $p = C_0/C_{0,5}$; $C_{0,5}$ – содержание поглощенного вещества в потоке, равновесное с количеством вещества, равным половине a_{∞} .

Для третьей области изотермы адсорбции

$$t = \frac{a_0 p}{\nu C_0} \left[L - \frac{\nu}{\beta} \left(\ln \frac{C_0}{C} - 1 \right) \right]. \quad (3)$$

Выбор уравнения для расчетов основан на совпадении экспериментально полученной выходной кривой с рассчитанной по одному из фундаментальных уравнений внешнедиффузионной динамики адсорбции (при заданных параметрах извлечения).

В случае сорбционной очистки смесей органических компонентов расчет производится по веществу, просок которого наблюдается первым (как правило, это доминирующий по концентрации компонент).

Формулы для расчета параметров и режимов работы колонны приведены ниже.

Длина работающего слоя L_0 и длина неиспользованного слоя h определяются по формуле

$$L_0 = L \frac{t_p - t_{np}}{t_p - (1 - \varphi)(t_p - t_{np})}, \quad (4)$$

где t_{np} – время появления адсорбируемого вещества за слоем проскоковой концентрации, равной $0,05 C_0$;

t_p – время появления адсорбируемого вещества за слоем концентрации $0,95 C_0$;

φ – фактор симметричности выходной кривой определяется графически (как отношение площадей)

$$\varphi = Sa/(Sa + Sb). \quad (5)$$

Длина неиспользованного слоя находится по формуле

$$h = L_0\varphi. \quad (6)$$

Скорость перемещения рабочей зоны, м/с

$$u = \frac{vC_p}{a_0 + C_p}. \quad (7)$$

Коэффициент защитного действия

$$K = 1/u. \quad (8)$$

Продолжительность работы неподвижного плотного слоя адсорбента в колонне до проскока описывается уравнением Шилова

$$\theta = K(L - h) = KL - \tau_0. \quad (9)$$

Количество воды, очищенной до проскока загрязнений в фильтрат в колонне периодического действия (m^3), рассчитывается в соответствии с выражением

$$Q_{пр} = vS [(a_0/vC_p)L - \tau_0], \quad (10)$$

где S – площадь поперечного сечения колонны, m^2 .

Производительность работы колонны, $m^3/ч$

$$V = Q_{пр}/\theta. \quad (11)$$

Предложенная математическая модель сорбционной очистки природных и сточных вод от органических соединений (фенола, хлорфенола, хлороформа, трихлорэтилена, формальдегида, ацетальдегида, капролактама, анилина, пиридина и смеси веществ, наблюдающихся в практике водоподготовки при различных дезинфектантах и сточных водах различных производств) показала свою адекватность для сорбентов различной природы, структуры и способа получения [3–10]. Экспериментальные и расчетные данные имеют хорошее согласование, что подтверждает возможность осуществления оптимизации сорбционного процесса очистки путем математического моделирования, значительно сократив объем экспериментальных исследований динамики сорбции.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Дубинин М.М. Кинетика и динамика физической адсорбции. М.: Наука, 1973. 117 с.
2. Ларин А.В., Поляков Н.С. Выходные кривые динамики адсорбции в зависимости от констант уравнения изотермы адсорбции Дубинина–Радускевича // Журн. физ. химии. 1996. Т. 70, № 1. С. 128–131.
3. Краснова Т.А., Тимошук И.В. Разработка адсорбционных процессов подготовки воды для пищевых производств в промышленно развитых регионах. Кемерово: КемТИПП, 2014. 212 с.
4. Краснова Т.А., Беляева О.В., Голубева Н.С. Очистка промышленных сточных вод от азотсодержащих органических соединений. Кемерово: Кемеров. технол. ин-т пищ. пром-сти, 2011. 146 с.

5. Сколубович Ю.Л., Краснова Т.А. Питьевое водоснабжение города Кемерово из подземных источников. М.: Спутник+, 2001. 98 с.
6. Сколубович Ю.Л., Краснова Т.А., Самойлова Н.А. Исследование процесса адсорбции фенола активными углями в динамических условиях // Изв. вузов. Строительство. 2001. № 12. С. 79–83.
7. Сколубович Ю.Л., Краснова Т.А., Самойлова Н.А., Сапина Н.В. Изучение адсорбции фенола в статических условиях на углеродных сорбентах // Изв. вузов. Строительство. 2001. № 11. С. 98–102.
8. Сколубович Ю.Л., Краснова Т.А., Самойлова Н.А., Кирсанов М.П. Исследование кинетики адсорбции фенола активными углями // Изв. вузов. Строительство. 2002. № 3. С. 82–85.
9. Сколубович Ю.Л. Подготовка питьевой воды из подземных источников. Новосибирск: НГАСУ (Сибстрин), 2008. 188 с.
10. Сколубович Ю.Л., Войтов Е.Л. Подготовка питьевой воды из поверхностных источников с повышенным природным и антропогенным загрязнением. Новосибирск: НГАСУ (Сибстрин), 2010. 216 с.

Волков Дмитрий Дмитриевич, зам. ген. директора
ОАО «Северо-Кузбасская энергетическая компания», г. Кемерово
Иванова Людмила Анатольевна, асп.
Кемеровский государственный университет
Краснова Тамара Андреевна, д-р техн. наук, проф.
Кемеровский государственный университет
Гора Наталья Вячеславовна, асп.
Кемеровский государственный университет
Сколубович Юрий Леонидович, д-р техн. наук, проф.
Новосибирский государственный архитектурно-строительный университет (Сибстрин)
Козлов Денис Владимирович, д-р хим. наук, проф. РАН
Институт катализа СО РАН, г. Новосибирск

Получено 25.09.2020

Volkov Dmitriy Dmitrievich, Deputy General Director
JSC «North-Kuzbass Energy Company», Kemerovo, Russia
Ivanova Lyudmila Anatolyevna, Post-graduate Student
Kemerovo State University, Russia
Krasnova Tamara Andreevna, DSc, Professor
Kemerovo State University, Russia
Gora Natalya Vyacheslavovna, Post-graduate Student
Kemerovo State University, Russia
Skolubovich Yuriy Leonidovich, DSc, Professor
Novosibirsk State University of Architecture and Civil Engineering (Sibstrin), Russia
Kozlov Denis Vladimirovich, DSc, Professor RAS
Institute of Catalysis SB RAS, Novosibirsk, Russia

MATHEMATICAL MODELING OF SORPTION PROCESSES OF PURIFICATION OF NATURAL AND WASTE WATER FROM ORGANIC COMPOUNDS

The research on the adsorption of organic compounds dissolved in water is presented in the article. The expediency of the mathematical modeling using in the technology and control system development for water treatment processes has been justified. A mathematical model of natural and waste waters' sorption purification from organic

compounds is proposed. The obtained experimental and calculated data are in good agreement, which confirm the effectiveness of the proposed mathematical model.

Key words: waste water treatment, adsorption plants, adsorption process, treatment modeling, organic compounds.

REFERENCES

1. *Dubinina M.M.* Kinetika i dinamika fizicheskoy adsorbtsii [Kinetics and dynamics of physical adsorption]. Moscow, Nauka, 1973. 117 p. (in Russian)
2. *Larin A.V., Polyakov N.S.* Vykhodnye krivye dinamiki adsorbtsii v zavisimosti ot constant uravneniya izotermy adsorbtsii Dubinina–Radushkevicha [Output curves of adsorption dynamics depending on the constants of the Dubinin-Radushkevich adsorption isotherm equation]. Zhurnal fizicheskoy khimii [Physical Chemistry Journal]. 1996. Vol. 70, No. 1. Pp. 128–131. (in Russian)
3. *Krasnova T.A., Timoshchuk I.V.* Razrabotka adsorbtsionnykh protsessov podgotovki vody dlya pishchevykh proizvodstv v promyshlenno razvitykh regionakh [Development of water preparation adsorption processes for food production companies in well-developed industrial regions]. Kemerovo, Kemerovo Institute of Food Science and Technology, 2014. 212 p. (in Russian)
4. *Krasnova T.A., Belyaeva O.V., Golubeva N.S.* Ochistka promyshlennykh stochnykh vod ot azotsoderzhashchikh organicheskikh soedineniy [Purification of industrial wastewater from nitrogen-containing organic compounds]. Kemerovo, Kemerovo Institute of Food Science and Technology, 2011. 146 p. (in Russian)
5. *Skolubovich Yu.L., Krasnova T.A.* Pit'evoye vodosnabzheniye goroda Kemerovo iz podzemnykh istochnikov [Drinking water supply of the city of Kemerovo from underground sources]. Moscow, Sputnik +, 2001. 98 p. (in Russian)
6. *Skolubovich Yu. L., Krasnova T.A., Samoylova N.A.* Issledovaniye protsessa adsorbtsii fenola aktivnymi uglyami v dinamicheskikh usloviyakh [Investigation of the process of phenol adsorption by active carbons under dynamic conditions]. Izvestiya vuzov. Stroitel'stvo [News of Higher Educational Institutions. Construction]. 2001. No. 12. Pp. 79–83. (in Russian)
7. *Skolubovich Yu.L., Krasnova T.A., Samoylova N.A., Sapina N.V.* Izucheniye adsorbtsii fenola v staticheskikh usloviyakh na uglerodnykh sorbentakh [Study of phenol adsorption under static conditions on carbon sorbents]. Izvestiya vuzov. Stroitel'stvo [News of Higher Educational Institutions. Construction]. 2001. No. 11. Pp. 98–102. (in Russian)
8. *Skolubovich Yu.L., Krasnova T.A., Samoylova N.A., Kirsanov M.P.* Issledovaniye kinetiki adsorbtsii fenola aktivnymi uglyami [Investigation of the kinetics of phenol adsorption by active carbons]. Izvestiya vuzov. Stroitel'stvo [News of Higher Educational Institutions. Construction]. 2002. No. 3. Pp. 82–85. (in Russian)
9. *Skolubovich Yu.L.* Podgotovka pit'evoy vody iz podzemnykh istochnikov [Preparation of drinking water from underground sources]. Novosibirsk, NGASU (Sibstrin), 2008. 188 p. (in Russian)
10. *Skolubovich Yu.L., Voytov E.L.* Podgotovka pit'evoy vody iz poverkhnostnykh istochnikov s povyshennym prirodnyim i antropogennym zagryazneniyem [Preparation of drinking water from surface sources with increased natural and anthropogenic pollution]. Novosibirsk, NGASU (Sibstrin), 2010. 216 p. (in Russian)