

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ОЧИСТКИ СТОЧНЫХ ВОД ОТ ХРОМА В РЕАКТОРЕ СМЕШЕНИЯ

Д.В. Рязанова, В.Г.Харазов, В.А.Холоднов (СПбГТИ)

Рассматривается имитационная модель процесса обезвреживания шестивалентного хрома в реакторе смешения периодического действия как объекта управления по каналам "расход реагента – концентрация Cr" и "расход щелочи – pH раствора".

Анализируя сложную систему управления процессом очистки сточных вод, как совокупность множества взаимосвязанных подсистем, выполняющих заданные общесистемные функции, рассмотрим подсистему управления процессом очистки сточных вод путем обезвреживания одного из компонентов – шестивалентного хрома. В работе сделана попытка физического моделирования процесса очистки сточных вод от хрома.

Следует сказать, что более 20 лет назад имитационное моделирование сложных систем представляло собой синтез причинно-следственных моделей с большим числом элементов и сложной топологией, и, главное, не поддающихся строгому формализованному описанию [1,2]. Модель такой системы представляла собой системный граф, для исследования которого проводился факторный и дисперсионный анализ, параметрическая и структурная идентификация с возможностью прогнозирования состояния исследуемого объекта.

В настоящее время для компьютерного исследования и моделирования химико-технологических процессов используются современные системы компьютерной математики. С их помощью можно решать практически любые математические прикладные программы. Из всего многообразия таких систем выделим Derive, MathCAD, Maple, Mathematica, Matlab.

В данной работе для имитации процесса была выбрана система MathCAD, которая выгодно отличается от других систем относительной простотой и достаточно большим арсеналом вычислительных средств. Язык среды программирования максималь-

но приближен к математическому, рабочий лист документа позволяет удобно компоновать вычислительные, графические и текстовые материалы. Указанные особенности системы MathCAD позволяют использовать этот пакет как мощный вычислитель для обработки результатов исследования химических процессов и моделирования процессов в жидких средах, газовых смесях, системах пар-жидкость, а также осуществлять расчет статических и динамических режимов в аппаратах химической технологии, моделировать процессы регулирования химико-технологических процессов, осуществлять их оптимизацию.

Таким образом, современная трактовка имитационного моделирования соответствует частному случаю математического моделирования. Существует класс объектов, для которых по различным причинам не разработаны аналитические модели либо методы решения полученной модели. В этом случае математическая модель заменяется имитатором или имитационной моделью.

Схема реактора обезвреживания шестивалентного хрома, как объекта управления по концентрации шестивалентного хрома и pH, представлена на рис. 1.

Для простоты расчетов представим реактор как аппарат идеального смешения. Стоки, содержащие ионы шестивалентного хрома, поступают в реактор периодически, где при интенсивном перемешивании посредством химического насоса происходит обезвреживание хрома с помощью восстанавливающего реагента – сульфата железа $FeSO_4$ заданной концентрации. Одновременно по показанию pH потока в реактор с помощью насоса-дозатора подается серная кислота.

Введем обозначения: G^{ex} , G^{vbx} – массовые расходы стоков на входе/выходе соответственно ($m^3/ч$), G_{FeSO_4} , $G_{H_2SO_4}$, G_{H_2O} – массовые расходы реагента $FeSO_4$, реагента H_2SO_4 , воды ($m^3/ч$), C – концентрации реагентов ($кг/м^3$), pH_{ex} , pH_{vbx} – pH на входе/выходе из реактора, V_{pc} – объем реакционной смеси (m^3).

Исходя из информационной схемы объекта (рис. 2), реактор имеет перекрестные каналы управления. Переменными состояниями являются $C_{Na_2Cr_2O_7}$ и pH стока. Кроме того, на управляемые переменные G_{FeSO_4} и $G_{H_2SO_4}$ накладывается ряд неконтролируемых

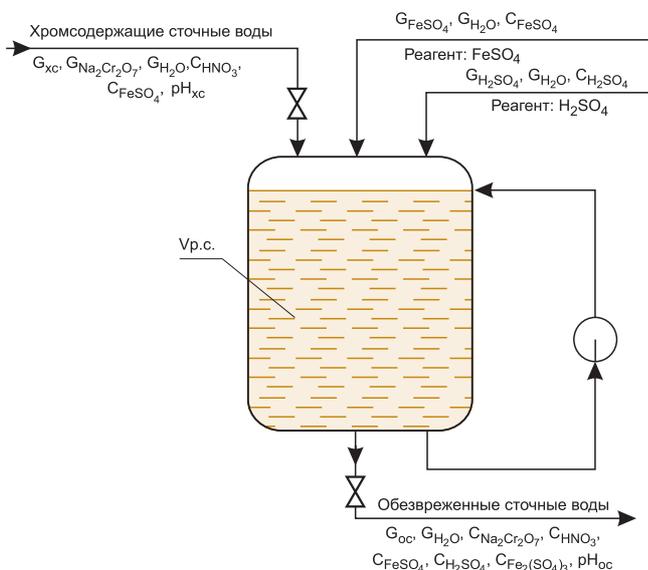


Рис. 1. Схема реактора обезвреживания шестивалентного хрома как объекта управления по концентрации шестивалентного хрома и pH

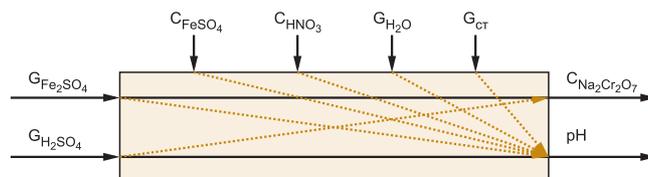


Рис. 2. Информационная схема реактора обезвреживания шестивалентного хрома

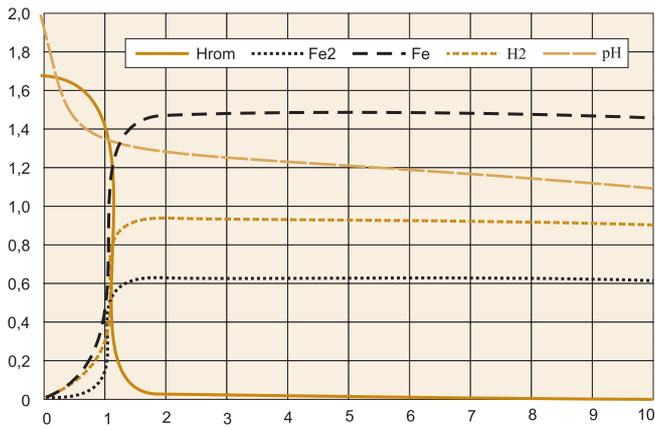
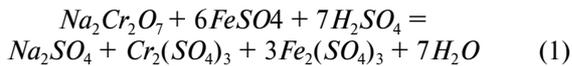


Рис. 3

возмущений таких, как концентрация сульфата железа C_{FeSO_4} , содержащегося в промывных сточных водах, концентрация азотной кислоты C_{HNO_3} , расход воды в сточных водах G_{H_2O} . Целью управления является обеспечение на выходе из реактора концентрации $C_{Na_2Cr_2O_7} = 0$ и поддержание $pH = 2...3$.

Реакция восстановления хрома (6+) протекает в кислой среде по уравнению:



Дифференциальное уравнение материального баланса реактора идеального смешения по каналу управления $G_{FeSO_4} - C_{Na_2Cr_2O_7}$ с учетом кинетики химической реакции запишем в виде:

$$V_{pc} \cdot dC_{Na_2Cr_2O_7}^{вых} / dt = G^{вх} \cdot C_{Na_2Cr_2O_7}^{вх} - G^{вых} \cdot C_{Na_2Cr_2O_7}^{вых} - V_{pc} \cdot r, \quad (2)$$

где r — скорость химической реакции, которая была определена по литературным данным, и далее устанавливалось ее соответствие экспериментальным данным.

$$r = k \cdot (C_{Na_2Cr_2O_7}^{вх})^{1.7} \cdot (C_{FeSO_4}^{вх})^2 \cdot (2 \cdot C_{H_2SO_4}^{вх}) / 2 \cdot C_{Fe(SO_4)_3}^{вх} \quad (3)$$

Обезвреживание шестивалентного хрома с помощью сульфата железа относится к классу неэлементарных реакций, ее механизм достаточно сложен. В процессе реакции образуется $Fe_2(SO_4)_3$, который уменьшает скорость химической реакции.

Харазов Виктор Григорьевич — д-р техн. наук, проф. кафедры автоматизации процессов химической промышленности,

Холоднов Владислав Алексеевич — д-р техн. наук, проф., зав. кафедрой математического моделирования Санкт-Петербургского государственного технологического института (технического университета).

Контактный телефон (812) 495-74-53. E-mail: kharazov@vh8465.spb.edu

Концентрация $Fe_2(SO_4)_3$ меняется во времени и определяется уравнением:

$$V_{pc} \cdot dC_{FeSO_4}^{вых} / dt = 3 \cdot V_{pc} \cdot r - G^{вх} \cdot C_{FeSO_4}^{вх}, \quad (4)$$

где "3" — стехиометрический коэффициент, входящий в уравнение (1).

Введем обозначения:

- изменение концентрации дихромата натрия $dC_{Na_2Cr_2O_7}^{вых} / dt = dx_1 / dt$,
- концентрация дихромата натрия на выходе $C_{Na_2Cr_2O_7}^{вх} = x_1$ и на входе $C_{Na_2Cr_2O_7}^{вх} = x_1^{вх}$ из/в реактора,
- концентрация сульфата железа $C_{FeSO_4} = x_3$ и серной кислоты $C_{H_2SO_4} = x_2$,
- концентрация сульфата железа два $C_{Fe(SO_4)_3} = x_4$.

Разделим обе части уравнения (2) на расход реакционной смеси V_{pc} , и введем обозначения: $G^{вх} / V_{pc} = 1/\phi$, тогда (2) и (4) примут вид:

$$dx_1 / dt = 1/\phi \cdot (x_1^{вх} - x_1) - k \cdot x_1^{1.7} \cdot x_3^2 \cdot 2 \cdot x_4 / 2 \cdot x_2, \quad (5)$$

$$dx_2 / dt = 1/\phi \cdot (x_2^{вх} - x_2) + 3 \cdot k \cdot x_1^{1.7} \cdot x_3^2 \cdot 2 \cdot x_4 / 2 \cdot x_2, \quad (6)$$

где x_3, x_4 — переменные управления. Управление процессом происходит по ПИ-закону. Поэтому:

$$dx_3 / dt = -K1 \cdot dx_1 / dt + K1 \cdot (x_1 \Delta d - x_1) / T_{уз} \cdot 2, \quad (7)$$

$$dx_4 / dt = -K2 \cdot dx_1 / dt + K2 \cdot (x_1 \Delta d - x_1) / T_{уз} \cdot 2. \quad (8)$$

Выражение для расчета pH имеет вид:

$$pH = -\lg(2 \cdot C_{H_2SO_4}). \quad (9)$$

Продифференцируем (9) и запишем с учетом принятых обозначений:

$$dx_5 / dt = -2/x_4, \quad (10)$$

где x_5 — значение параметра pH.

Расчет, выполненный в среде MathCAD, позволил на основе решений уравнений (5-10) получить требуемые показатели качества регулирования.

Результаты расчета представлены графически на рис. 3, где показана зависимость концентрации тяжелых металлов от времени в секундах.

Список литературы

1. Имитационное моделирование производственных систем. М.: Машиностроение, 1983.
2. Холоднов В.А., Дьяконов В.П., Иванова Е.Н., Кирьянова Л.С. Математическое моделирование и оптимизация химико-технологических процессов: Практическое руководство. СПб.: АНО НПО "Профессионал". 2003.

Рязанова Дарья Владимировна — инженер,



Измерение уровня интеллекта порою показывает, каким умницей ты был бы, если бы не позволил измерять свой интеллект.

Быть на расстоянии какого-нибудь шага от цели или же совсем не приблизиться к ней - это, в сущности, одно и то же.

Г. Лессинг

П. Питер