



УДК 544

## Программа «CreateScheme» для конструирования, расчета и визуализации ионообменных технологических схем

Прудковский А.Г., Комарова И.В., Галкина Н.К.

*Институт геохимии и аналитической химии им. В.И.Вернадского РАН, Москва*

Поступила в редакцию 28.08.2014 г.

### Аннотация

Описаны возможности созданной нами программы «CreateScheme», способной в интерактивном режиме моделировать многоколоночные схемы и проводить расчёты ионообменных процессов как с постоянными, так и с переменными входными данными. Программа обладает возможностью расчёта технологических циклов, состоящих из разных стадий: сорбции, регенерации и отмывки, а также возможностью последующей визуализации каждой из стадий в виде зависимости от времени содержимого каждой колонки по каждому из компонентов.

**Ключевые слова:** многокомпонентный ионный обмен, технологическая схема, программа, расчет, визуализация

This article describes a computer program «CreateScheme» created by us. The program is able to interactively simulate multi-column charts and ion exchange processes to carry out calculations with both constant and variable input data. The program is capable to calculate the process cycles of the different stages of sorption, regeneration and washing and also has the possibility of subsequent visualization as a function of time of the contents of each column of each of the components.

**Keywords:** multicomponent ion exchange, technological scheme, computer software, calculation, visualization

### Введение

В лаборатории сорбционных методов ГЕОХИ РАН в течение ряда лет проводятся работы по расчету и оптимизации ионообменных фильтров и технологических схем обессоливания и умягчения воды в водоподготовительных установках ТЭС, а также в процессах очистки конденсата АЭС.

Разработан целый ряд программ расчета отдельных фильтров и конкретных технологических схем в процессе обессоливания и умягчения воды [1-7]. Так, для блочной схемы обессоливания воды на Калининской АЭС создана программа расчета и визуализации процесса ионообменной водоочистки при условии регенерации и отмывки по схеме ступенчатого противотока [2], при расчете и визуализации процесса умягчения воды [5] учтено влияние изменения производительности и состава исходного раствора на количество и качество умягченной воды.

Обобщение результатов по использованию разработанных нами программ расчета и оптимизации схем отдельных ионообменных процессов позволило перейти

к созданию обобщенной программы расчета, визуализации и оптимизации ионообменных технологических схем.

### Алгоритм “CreateScheme” и его возможности

В развитие ранее проводимых работ создан принципиально новый подход к конструированию различных технологических схем ионообменных процессов, разработан алгоритм и создана программа расчета схем и отдельных фильтров, основанная на послойной модели динамики ионного обмена многокомпонентных смесей, позволяющая создавать структуру схемы непосредственно перед расчетом.

В качестве определяющих параметров схемы выбраны

- способ соединения фильтров на стадии сорбции
- количество ступеней очистки
- способ подачи регенерационного раствора

Гибкая структура схемы очистки многокомпонентных растворов с графическим изображением каждого элемента схемы и связей его с другими элементами на разных стадиях процесса задается исследователем на экране компьютера.

Элементами схемы являются ионообменные колонны (фильтры), графически изображаемые в виде круга с номером, входной “in” и выходной “out” блоки в виде прямоугольников и связи между элементами в виде стрелок.

Структура может представлять два варианта технологической схемы: с параллельным и последовательным соединением фильтров. Программа поддерживает произвольное количество элементов и произвольный способ их соединения при условии единственности входа в систему и выхода из неё.

В схеме с последовательным включением фильтров (блок фильтров) фильтры соединены последовательно (рис.1), и очищаемая вода подается на вход первого фильтра, с выхода которого поступает на вход следующего. На вход второго и последующих фильтров поступает переменная концентрация целевого компонента.

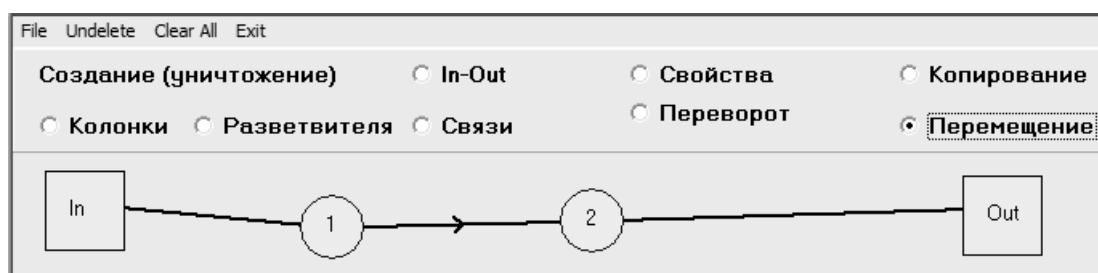


Рис. 1. Последовательное включение фильтров

В схеме с параллельным включением фильтров (параллельная схема) одноименные фильтры каждой ступени очистки соединены параллельно (рис. 2), и на следующую ступень очистки поступает вода с усредненным значением концентрации целевого компонента. Для организации параллельных потоков имеется возможность включения в схему разветвителей, обозначаемых кружками зелёного цвета.

Работа с программой осуществляется в режиме “on line” с системой окон. Для каждого элемента структуры задаются свойства, которые являются исходными данными для расчета. В окно «Свойства входа» вводятся значения производительности в м<sup>3</sup>/час, времени прохождения одной порции исходного

раствора в мин, максимального времени процесса, а также состава исходного раствора в виде концентраций в моль/л.

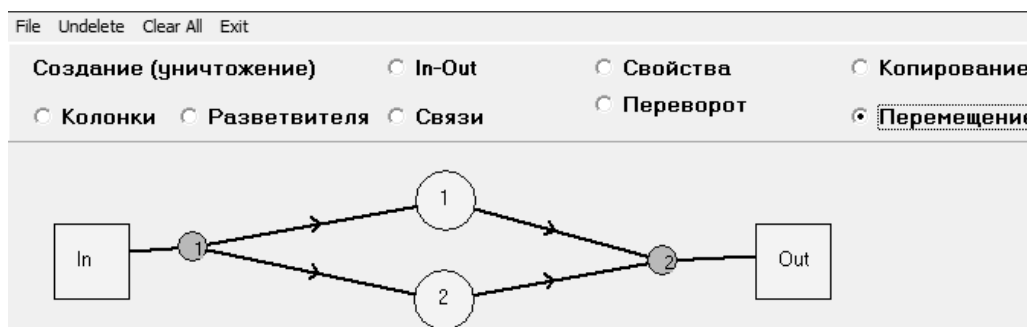


Рис. 2. Параллельное включение фильтров

«Свойства колонки» включает для каждой колонны тип загружаемого ионита, сечение колонны в м<sup>2</sup>, высоту слоя ионита в см, наличие и высоту пространства над слоем ионита («водяной подушки») в колонне в см.

Название компонента и его концентрация, при достижении которой необходимо остановить процесс на регенерацию (концентрация проскока) задаются в окне «свойства выхода».

В случае, если технологическая схема должна быть остановлена по показателям на какой либо промежуточной ступени, концентрация проскока задается в «свойствах» этой колонны. Одновременно может быть задано два значения концентраций проскока (для катионов и для анионов). В этом случае останов произойдет при достижении первой из них, о чем будет выдано сообщение.

В программе используется разработанная нами ранее и пополняемая база данных ионитов, организованная в виде таблицы (tip.tab). В качестве примера приводится часть таблицы с данными для катионита КУ-2.

Таблица 1. Данные для катионита КУ-2

Наименование	Обозначение	Величина
Тип ионита	катионит	
Название	КУ-2	
Константа ионизации	$D_{\text{ион}}$	$1.10^{18}$
Полная обменная емкость	$a_0$	1.9мг-экв/мл
Диаметр зерна	$d$	0.06см
Порозность	$\varepsilon$	0.45
Коэффициент для расчета внешней диффузии	$als$	1
Коэффициент внутренней диффузии	$D$	$1.5 \cdot 10^{-8}$
Параметры для расчета продольной диффузии при регенерации	$K$	1.8
	$n$	0.9
Параметры для расчета продольной диффузии при отмывке	$K$	0.74
	$n$	1.36
Коэффициенты глубокой отмывки	$A$	0.367
	$B$	0.612
	$C$	0.034
	$D$	0.072
Константы обмена катионов на водород	$Na$	1.2
	$Mg$	1.7
	$Ca$	2.3

Перечисленные характеристики при изменении условий проведения процесса не меняются. Расчет технологической схемы включает в себя расчет каждого ионообменного фильтра, включающий последовательность расчета технологических стадий очистки (сорбции), взрыхления, регенерации, отмывки, глубокой отмывки и последующей сорбции на частично регенерированном ионите.

Отдельные стадии связаны между собой через начальное и конечное распределение компонентов по слою ионита - конечное распределение на предыдущей стадии является начальным для последующей.

Взрыхление проводится для каждого фильтра независимо. В результате взрыхления средние концентрации всех компонентов в твердой фазе равномерно распределены по высоте слоя. Концентрации компонентов в жидкой фазе соответствуют концентрациям компонентов в воде, подающейся на взрыхление. Стадия взрыхления может вообще отсутствовать.

Схема регенерации и отмывки собирается отдельно для катионитовой и анионитовой части фильтров. В программе реализована возможность различной организации потоков на стадии регенерации и отмывки. На рисунках приведены структуры для регенерации ионита при подаче регенерационного раствора потоком, (рис. 3), противотоком (рис. 4). При регенерации противотоком необходимо перевернуть распределение по слою, полученное после сорбции, для чего в структуре существует команда «переворот», после выполнения которой изображение колонны на схеме меняет цвет с желтого на синий.



Рис. 3. Схема для прямого потока



Рис. 4. Схема для противотока

Схема регенерации ступенчатым противотоком представлена на рис. 5 для двух ионитов, когда регенерационный раствор сначала поступает на вход второго ионита сверху, а выходящий снизу фильтра раствор подается на вход первого ионита сверху.

Перед началом следующего цикла регенерированные и отмытые фильтры снова собираются в технологическую схему очистки, и процесс повторяется. Расчет процесса можно проводить для нескольких последовательных циклов,

осуществляемых при одинаковых исходных данных, до выхода на стационарный режим, т.е. пока количество и качество очищенной воды, а также степени регенерации ионитов не совпадут между собой с заданной точностью.

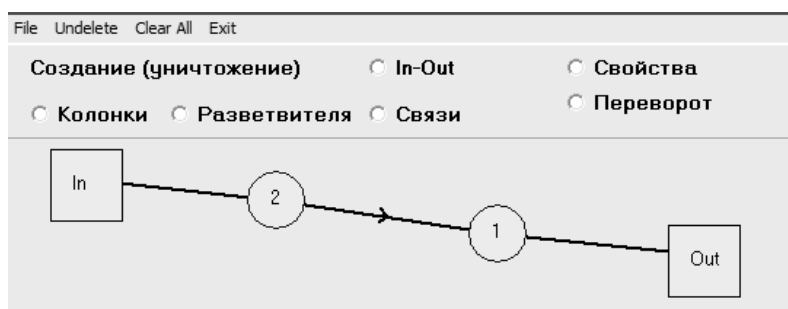


Рис. 5. Схема ступенчатого противотока

Очевидно, что в реальных промышленных условиях состав очищаемой воды и производительность фильтра могут меняться в течение рабочего цикла. На рисунке 6 показано изменение входа по производительности и составу воды

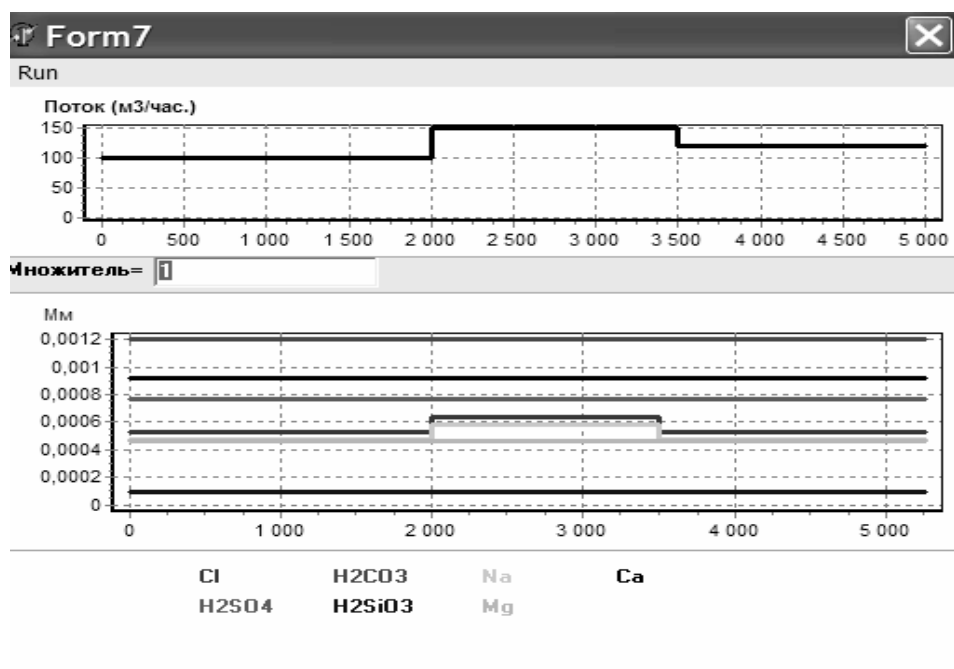


Рис.6 Изменение производительности и состава очищаемой воды во время рабочего цикла

Информация об изменении входных параметров, поступившая в программу, позволяет провести расчет с новыми данными, на основании которого оператор технолог принимает решение по изменению режима отключения фильтра на регенерацию, условий регенерации. Предусмотрено изменение данных для каждой стадии при циклическом процессе сорбции, регенерации, отмывки, что позволяет рассчитывать реальный эксперимент в промышленных условиях.

Кроме того, впервые представлена возможность в рамках одной программы рассчитывать стадию регенерации ионитов с переменной концентрацией на входе. На рис. 7 показаны выходные кривые регенерации катионита первой ступени, отработанного по иону кальция, 0.179М серной кислотой, а на рис.8 регенерация

катионита при ступенчатом изменении концентрации серной кислоты. Необходимость такого изменения концентрации связано с повышением степени регенерации при повышении концентрации кислоты и необходимостью уменьшения образования малорастворимого сульфата кальция в процессе регенерации. Возможность варьирования концентрации кислоты на входе позволяет выбрать оптимальные значения.

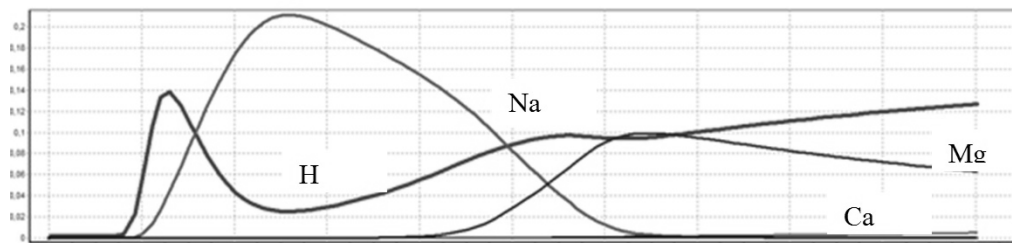


Рис. 7. Выходные кривые регенерации катионита КУ-2 0.179M H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>

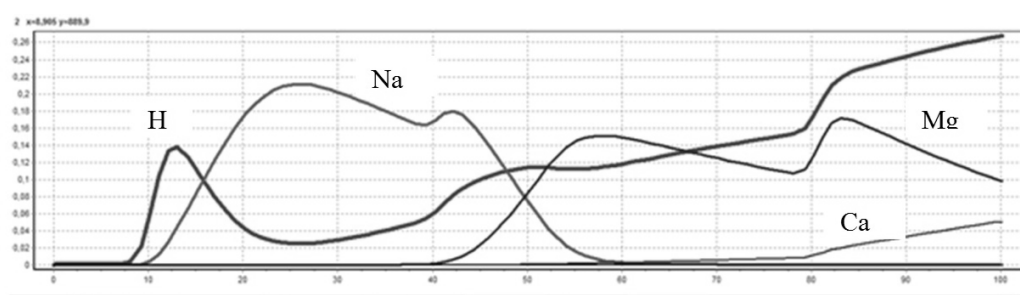


Рис. 8. Выходные кривые регенерации катионита КУ-2 при условии изменения концентрации серной кислоты: 0 - 30 мин - 0.179M, 30 - 70 мин - 0.25M, 70 - 100 мин - 0.4 M

Предусмотрена также возможность организации регенерации последовательно двумя разными реагентами (например, хлоридом натрия и серной кислотой). Расчет технологической схемы производится командой “RUN” после создания структуры и задания свойств элементов.

Результаты расчета представлены в виде таблиц выходных кривых всех компонентов после каждой колонны и на выходе из схемы, а также для каждой колонны распределений в виде всех компонентов по слою ионов и в пространстве между зернами.

Визуализация процесса на всех стадиях осуществляется командой “GRAF”. В режиме “on line” на экране выдаются графики выходных кривых выбранных компонентов на входе и на выходе заданных колонн. Распределение в твердой и жидкой фазах в этих колоннах можно показать для любого момента времени. На рис. 9 показан процесс визуализации при сорбции воды на катионите в Н-форме в виде распределения по слою в два разных момента времени. На рис. 10 показан процесс визуализации при сорбции воды на анионите АН-31 в ОН-форме в виде распределения по слою и выходных кривых анионов в два разных момента времени.

Таким образом, реализация программы дает возможность создавать оптимальную схему для очистки вод различного состава, предсказывать результаты ее работы при изменении исходных данных, на основе чего менять режим работы в соответствии с рассчитанными данными при изменившихся условиях.

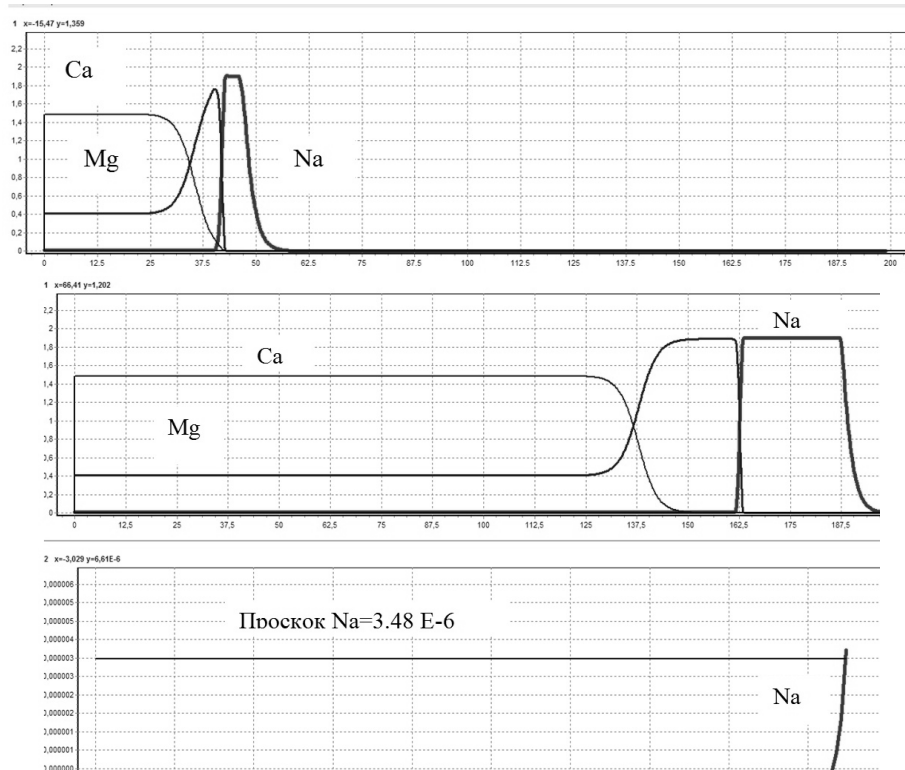


Рис. 9. Распределение по слою катионита и выходная кривая натрия в начале рабочего цикла и в момент проскока натрия

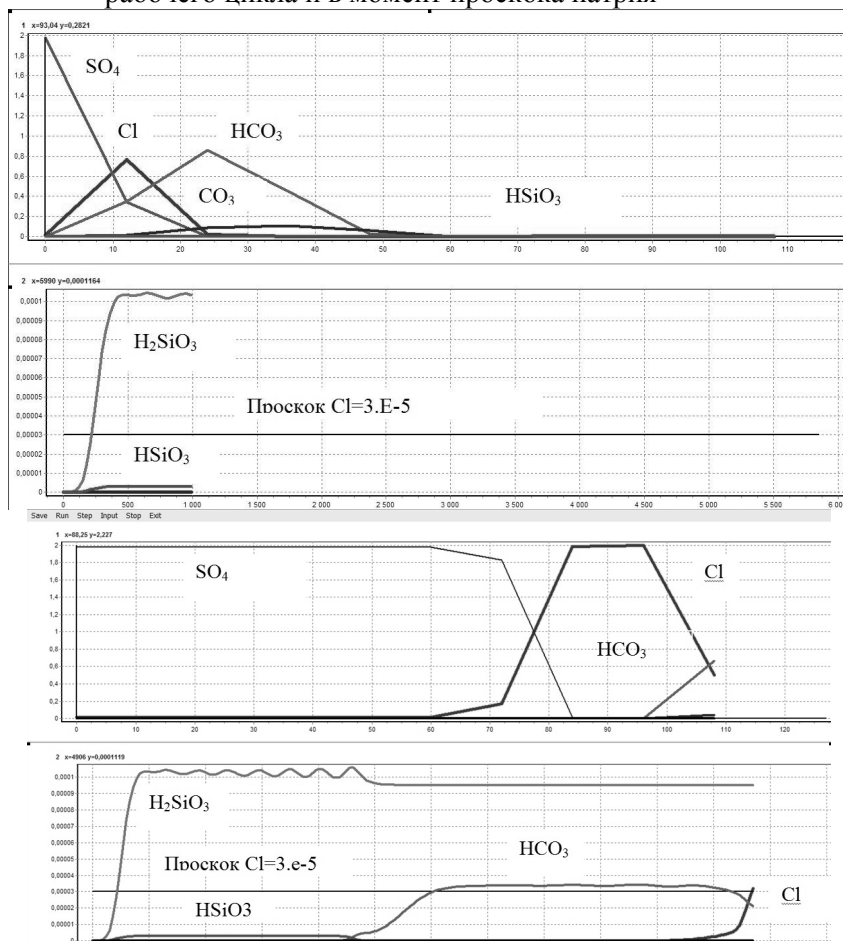


Рис.10 Распределение по слою анионита и выходные кривые анионов в начале рабочего цикла и в момент проскока натрия

Использование разработанной программы позволяет рассчитывать процесс для разных составов воды, при разном качестве очищенной воды. Возникают также возможности для варьирования в широком диапазоне параметров, таких как размеры фильтров и производительность установки, концентрация и количество регенерационных растворов, состав и расход отмывочной воды. В заключение следует добавить, что программа "CreateScheme" способна работать в программируемом циклическом режиме, автоматически рассчитывая многостадийные технологические циклы.

### Список литературы

1. Аргин М.А., Комарова И.В., Галкина Н.К., Закова И.М. и др. Применение математической модели для описания процесса конденсатоочистки в целях выбора оптимальных соотношений ионитов на АЭС // Атомная энергия. 1985. Т.59. С. 137-138.
2. Комарова И.В., Галкина Н.К., Анфилов Б.Г., Свечинский В.Б. и др. Комплекс программ расчета процесса химводоочистки на основе математической модели. // Наука производству. 1988. №2 (4). С.53-56.
3. Комарова И.В., Галкина Н.К., Махалов Е.М., Ипполитова О.Д. и др. Решение задач ионообменной водоподготовки на основе математического моделирования с применением ЭВМ // Теория и практика сорбционных процессов.1989. Вып.20. С.30-41.
4. Юрчевский Е.Б., Комарова И.В., Галкина Н.К., Яковлев А.В. и др. Прогнозирование технологических характеристик противоточных ионообменных фильтров с использованием математического моделирования // Теплоэнергетика 2003. №7. С.29-34.
5. Комарова И.В., Галкина Н.К., Анфилов Б.Г., Шептовецкая К.И. Визуализация процесса ионообменного умягчения воды с целью прогнозирования и управления // Сорбционные и хроматографические процессы. 2008. Т. 8. Вып. 1. С. 30-36.
6. Галкина Н.К. Вычислительный эксперимент как способ исследования многокомпонентных ионообменных систем // Сорбционные и хроматографические процессы. 2012. Т. 12. Вып. 3. С. 409-418.
7. Комарова И.В. Универсальный подход к расчету и оптимизации схем ионообменной водоподготовки //Сорбционные и хроматографические процессы. 2012. Т. 12. Вып. 5 С. 683-692.

---

**Прудковский Андрей Гаральдович** – к.ф.-м.н., старший научный сотрудник, лаборатория сорбционных методов, ГЕОХИ РАН, Москва

**Комарова Ирина Владимировна** – к.х.н., старший научный сотрудник, лаборатория сорбционных методов, ГЕОХИ РАН, Москва

**Галкина Надежда Константиновна** – к.х.н., старший научный сотрудник, лаборатория сорбционных методов, ГЕОХИ РАН, Москва

**Prudkovskii Andrei G.** – Ph.D. (Phys.-Math.), Senior researcher, Lab of Sorption Methods, GEOKHI, Moscow, [RASprudkovsky@gmail.com](mailto:RASprudkovsky@gmail.com)

**Komarova Irina** – Ph.D. (Chem.), Senior researcher, Lab of Sorption Methods, GEOKHI RAS, Moscow

**Galkina Nadezda** – Ph.D. (Chem.), Senior researcher, Lab of Sorption Methods, GEOKHI RAS, Moscow