

УДК 681.5+66.011+66.063.

*Асламов Александр Анатольевич,**к.т.н., доцент кафедры «Машины и аппараты химических производств»**ФГБОУ ВО «Ангарский государственный технический университет»,**e-mail: aaa\_mx@angtu.ru**Асламова Вера Сергеевна,**д.т.н., профессор кафедры «Техносферная безопасность»**ФГБОУ ВО «Иркутский государственный университет путей и сообщения»,**e-mail: aslamovav@yandex.ru**Головкова Елена Александровна,**к.т.н., доцент кафедры «Промышленная электроника и информационно-**измерительная техника» ФГБОУ ВО «Ангарский государственный технический университет»**тел.: +7(924)825-34-77, e-mail: temnikova\_ea@bk.ru**Шнейгельбергер Евгения Александровна,**инженер-эколог ООО «АйкьюЭкологджи»**e-mail: chern5218@yandex.ru*

## АВТОМАТИЗАЦИЯ ТЕПЛООВОГО РАСЧЁТА РЕАКТОРА ДЛЯ СИНТЕЗА СЕРОСОДЕРЖАЩИХ СОРБЕНТОВ

*Aslamov A.A., Aslamova V.S., Golovkova E.A., Shneigelberger E.A.*

## AUTOMATION OF THERMAL CALCULATION OF THE REACTOR FOR SYNTHESIS SULFUR-CONTAINING SORBENTS

**Аннотация.** Рассматривается задача автоматизации теплового расчёта реактора для синтеза серосодержащего сорбента для очистки сточных вод от соединений тяжёлых металлов с использованием хлорлигнина. Приводятся формальное описание алгоритма и блок-схема расчёта; интерфейс программы, написанной на языке C#, отображающий результаты теплового расчёта нагрева рабочей смеси, определения количества теплоты для нагрева суспензии, коэффициента теплоотдачи от рабочей среды к стенке реактора, массового расхода воды и её затраты, скорости воды в рубашке, а также выбор режима в рубашке.

**Ключевые слова:** автоматизация расчёта, алгоритм расчёта, синтез сорбентов, хлорлигнин.

**Abstract.** The problem of automating the thermal calculation of a reactor for the synthesis of a sulfur-containing sorbent for wastewater treatment from heavy metal compounds using chlorlignin is considered. A formal description of the algorithm and a block diagram of the calculation are given; the interface of the program written in C#, displaying the results of the thermal calculation of heating the working mixture, determining the amount of heat for heating the suspension, the heat transfer coefficient from the working medium to the reactor wall, the mass flow rate of water and its costs, the water velocity in the jacket, and also the choice of the mode in the jacket.

**Keywords:** automation of calculation, calculation algorithm, synthesis of sorbents, chlorlignin.

Серосодержащий сорбент для очистки сточных вод от соединений тяжелых металлов [1] получают на основе использования отходов производства эпихлоргидрина, хлорированного лигнина и полисульфидов натрия, получаемых из элементной серы и гидроксида натрия в водном растворе в присутствии гидразингидрата [2, 3]. Получение сульфидированного лигнина и серосодержащего сорбента на основе лигнина осуществляется в одном реакционном сосуде при непрерывном перемешивании. Масса достаточно вязкая, поэтому достижение равномерного распределения фаз в суспензии

очень затруднительно и возможно только при механическом перемешивании. Для обеспечения необходимой эффективности целесообразно правильно подобрать тип перемешивающего устройства, а также размер, число оборотов и мощность двигателя мешалки [4, 5], для поддержания назначенной интенсивности перемешивания.

В качестве химического реактора выбираем ёмкостной, идеального смешения периодического действия, снабжённый трёхлопастной пропеллерной мешалкой, которая облегчает процесс перемешивания и увеличивает его эффективность [6].

Расчёт химических реакторов для приготовления новых сорбентов основан на:

- математическом моделировании;
- методе С. Д. Дьяконова (сопряженного математического и физического моделирования);
- гидродинамическом моделировании.

Расчёт установки с трёхлопастной пропеллерной мешалкой периодического действия из условия идеального перемешивания среды, включает тепловой расчёт реактора и гидродинамический расчёт.

Ранее авторами уже были реализованы расчёт физических свойств ингредиентов реакционной смеси, определён объём химического реактора [7], гидродинамический расчёт, который необходим для определения осевой и радикальной сил, действующих на мешалку, усреднённых характеристик полей скоростей в объёме реактора, мощности перемешивания и глубины образующейся воронки [8]. На рисунке 1 представлены результаты автоматизации гидродинамического расчёта. Программная форма реализована на языке С#.

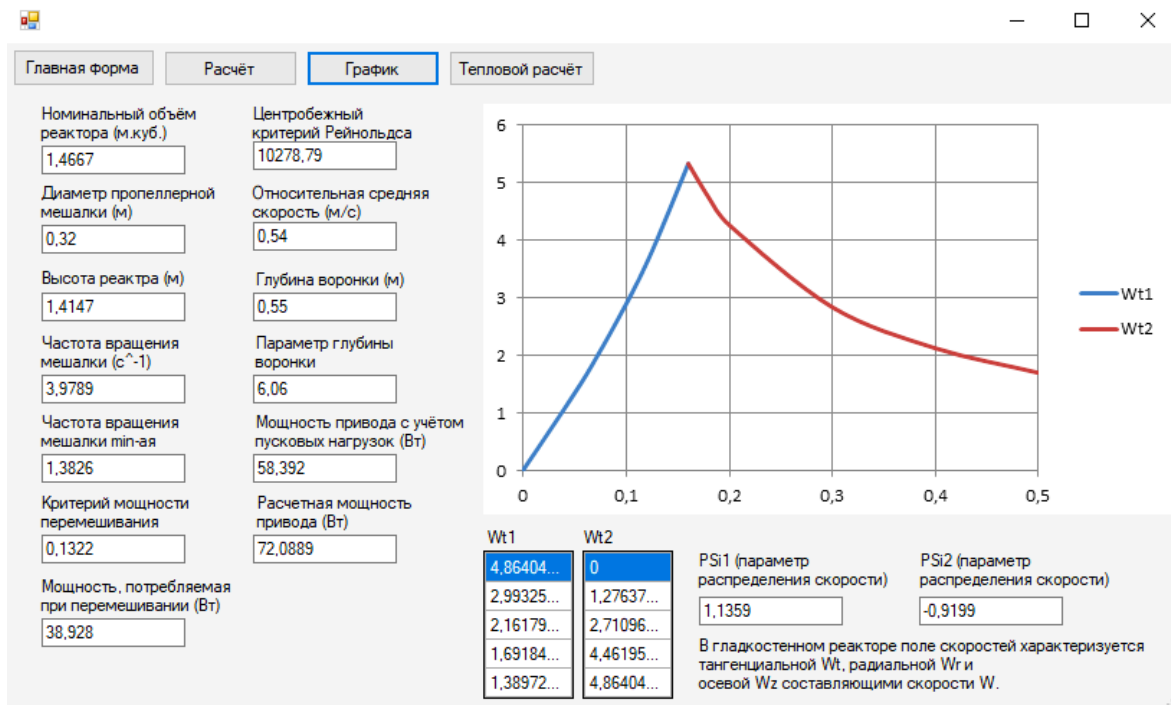


Рисунок 1 – Интерфейс программы гидродинамического расчёта

Далее описан алгоритм теплового расчёта реактора. Для корректности его выполнения программой необходимо определить начальные значения, на основании которых будут осуществляться расчеты реактора с пропеллерной мешалкой, выполненного из стали 20. Зададим объём реактора  $V_n = 1,6 \text{ м}^3$ , внутренний диаметр реактора  $D = 1,2 \text{ м}$ , выберем стандартное эллиптическое днище с площадью поверхности  $F_d$  и объёмом  $V_d$ :

$$F_d = 1,24 \cdot D^2 = 1,24 \cdot 1,2^2 = 1,785 \text{ м}^2,$$

$$V_d = \pi \cdot D^3 / 24 = \pi \cdot 1,2^3 / 24 \approx 0,226 \text{ м}^3.$$

Объём цилиндрической части реактора:

$$V_u = V_n - V_d = 1,6 - 0,226 = 1,374 \text{ м}^3.$$

Длина цилиндрической части реактора,

которая является определяющим размером при конвективной теплоотдаче:

$$L_{ум} = V_u / S_u = 4 \cdot V_u / (\pi \cdot D^2) \approx 1,214 \text{ м}.$$

Толщину стенки реактора назначаем  $s = 6 \text{ мм}$ , тогда наружный диаметр реактора (внутренний диаметр пространства тепловой рубашки)  $D_1 = D + 2s = 1,212 \text{ м}$ .

Согласно ГОСТ Р 52857.8-2007 внутренний диаметр обечайки наружной цилиндрической рубашки  $D_2 \leq 1,2 \cdot D_1$ . Примем  $D_2 = 1,3 \text{ м}$ .

Объём донной части рубашки:

$$V_{рубд} = \pi \cdot D_2^3 / 24 - \pi \cdot D_1^3 / 24 \approx 0,054 \text{ м}^3.$$

Полный объём рубашки  $V_{руб}$ :

$$V_{руб} = \pi(D_2^2 - D_1^2) \cdot L_u / 4 + V_{рубд} \approx 0,265 \text{ м}^3.$$

Общая площадь теплообмена со сторо-

ны рубашки  $F_1$ :

$$F_1 = L_{\text{ц}} \cdot \pi \cdot D_1 + 1,24 \cdot D_1^2 \approx 6,444 \text{ м}^2.$$

Рабочая среда нагревается от  $T_{11} = 20$  °С до  $T_{12} = 45$  °С (318 К) горячей водой, которая охлаждается от  $T_{21} = 90$  °С до  $T_{22} = 80$  °С. Средняя разность температур  $\Delta T_{\text{ср}}$  в процессе нагрева равна:

$$\Delta T_{\text{ср}} = \frac{\Delta T_1 - \Delta T_2}{\ln\left(\frac{\Delta T_1}{\Delta T_2}\right)} \approx 50,494, \quad (1)$$

где  $\Delta T_1$  – начальная разность температур на входе теплоносителя в рубашку;  $\Delta T_2$  – конечная разность температур на выходе теплоносителя из рубашки.

Количество теплоты  $Q$ , кДж, необходимое для нагрева суспензии и стенки реактора:

$$Q = 0,001 \cdot [V_{\text{р}} \cdot \rho_{\text{ср}} \cdot c_{\text{рср}} \cdot (T_{12} - T_{11}) + F_1 \cdot s \cdot \rho_{\text{с}} \cdot c_{\text{рс}} \cdot (T_{22} - T_{11})] = 942837 \quad (2)$$

где  $V_{\text{ср}} = 1,097 \text{ м}^3$ ,  $\rho_{\text{ср}} = 1444,3 \text{ кг/м}^3$  и  $c_{\text{рср}} = 2166,057 \text{ Дж/(кг} \cdot \text{К)}$  – объём, плотность и удельная теплоёмкость загружаемой смеси;  $\rho_{\text{с}} = 7800 \text{ кг/м}^3$  и  $c_{\text{рс}} = 469 \text{ Дж/(кг} \cdot \text{К)}$  – плотность и удельная теплоёмкость стали 20.

Время нагрева среды:

$$\tau_{\text{нагр}} = \frac{1000 \cdot Q}{k \cdot F_1 \cdot \Delta T_{\text{ср}}} = 317313 \text{ с}, \quad (3)$$

при этом коэффициент теплопередачи  $k$ :

$$k = \frac{1}{\frac{1}{\alpha_{\text{с}}} + \frac{s}{\lambda_{\text{м}}} + \frac{1}{\alpha_{\text{т}}}} = 91,28 \frac{\text{Вт}}{\text{м}^2 \cdot \text{К}}, \quad (4)$$

где  $\alpha_{\text{с}}$  – коэффициент теплоотдачи от суспензии к стенке реактора;  $\alpha_{\text{т}}$  – коэффициент теплоотдачи горячей воды (теплоноситель) к стенке реактора;  $\lambda_{\text{м}} = 79,64 \text{ Вт/(м} \cdot \text{К)}$  – коэффициент теплопроводности стали 20 при 80 °С.

Смоченный периметр сечения рубашки в цилиндрической части:

$$\Pi = \pi \cdot (D_2 + D_3) = 7,892 \text{ м}.$$

Живое сечение рубашки в цилиндрической части:

$$S_{\text{ж}} = \pi \cdot (D_3^2 - D_2^2) / 4 = 0,174 \text{ м}^2.$$

Эквивалентный диаметр рубашки в цилиндрической части:

$$D_{\text{экв}} = 4 \cdot S_{\text{ж}} / \Pi = 0,088 \text{ м}.$$

Зададим скорость воды в рубашке  $W = 0,02 \text{ м/с}$ . Тогда значение критерия Рейнольдса:

$$\text{Re} = D_{\text{экв}} \cdot W / \nu = 2866450. \quad (5)$$

где коэффициент кинематической вязкости воды  $\nu = 0,614 \cdot 10^{-6} \text{ м}^2/\text{с}$  при температуре 45 °С,

Так как  $\text{Re} > 2320$ , то режим движения горячей воды в рубашке переходный. Физические свойства воды для средней температуры 85 °С определяли методом линейной интерполяции. Значение критерия Прандтля равно:

$$\text{Pr} = \mu \cdot c_p / \lambda_{\text{в}} = 2,079. \quad (6)$$

Критерий Нуссельта для переходного режима:

$$\text{Nu} = 0,33 \cdot \text{Re}^{0,5} \cdot \text{Pr}^{0,33} = 22,495 \quad (7)$$

Коэффициент теплоотдачи  $\alpha_{\text{т}}$  в рубашке от воды к стенке, учитывая, что коэффициент теплопроводности воды при 112 °С  $\lambda_{\text{в}} = 0,677 \text{ Вт/(м} \cdot \text{К)}$ :

$$\alpha_{\text{т}} = \frac{\text{Nu} \cdot \lambda_{\text{в}}}{D_{\text{экв}}} = 173,055 \frac{\text{Вт}}{\text{м}^2 \cdot \text{К}}. \quad (8)$$

При применении быстроходных ( $\Gamma_{\text{D}} > 1,5$ ) пропеллерных мешалок коэффициент теплоотдачи  $\alpha_{\text{с}}$  от суспензии к стенке реактора вычисляется по формуле:

$$\alpha_{\text{с}} = a_2 \cdot N^{0,29} \cdot D^{-0,71} + a_3 \cdot N^{0,18} \cdot D^{0,82} = 196,011,$$

где  $N$  – мощность, израсходованная на перемешивание суспензии, Вт.

$$a_1 = (c_{\text{рс}} \cdot \lambda_{\text{см}}^2)^{0,33} = 14,594.$$

$$a_2 = 0,0237 \cdot a_1 \cdot \rho_{\text{с}}^{0,58} \cdot \mu_{\text{с}}^{-0,54} = 8,743.$$

$$a_3 = 0,93 \cdot a_1 \cdot \rho_{\text{с}}^{0,36} \cdot \mu_{\text{с}}^{-0,24} = 77,422.$$

Массовый расход воды (кг/с) вычисляется по формуле:

$$M_{\text{в}} = \frac{1000 \cdot Q}{c_{\text{в}} \cdot \Delta T_{\text{ср}} \cdot \tau_{\text{нагр}}}, \quad (9)$$

где  $c_{\text{в}}$  – удельная теплоемкость воды Дж/(кг·К) при температуре 85 °С.

Затраты  $Z$  горячей воды (кг) с учетом 5% тепловых потерь определяются по формуле:

$$Z = M_{\text{в}} \cdot \tau_{\text{нагр}} / 0,95. \quad (10)$$

Скорость воды  $W$  в рубашке рассчитывается по формуле:

$$W = V / S_{\text{ж}}, \quad (11)$$

где  $V$  – объёмный расход воды, м<sup>3</sup>/с, определяемый по формуле (12).

$$V = M_{\text{в}} / \rho_{\text{в}}, \quad (12)$$

где  $\rho_{\text{в}}$  – плотность воды при средней температуре 85 °С, найденная методом линейной интерполяции и равная 968,7 кг/м<sup>3</sup>.

На рисунках 2, 3 представлены результаты автоматизированного теплового расчёта химического реактора по описанному алгоритму, а также интерфейс программы, созданной на языке C#.

В результате исследований был описан алгоритм теплового расчёта реактора для приготовления нового сорбента. На основе предложенного алгоритма разработаны блок-схема и компьютерная программа.

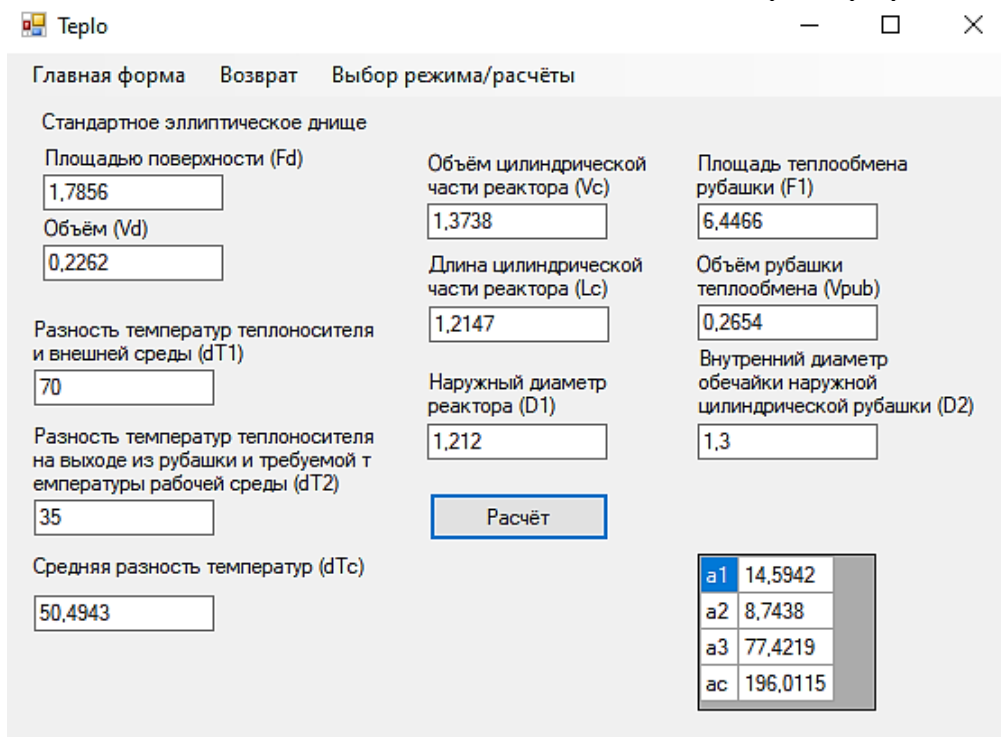


Рисунок 2 – Интерфейс программы теплового расчёта химического реактора

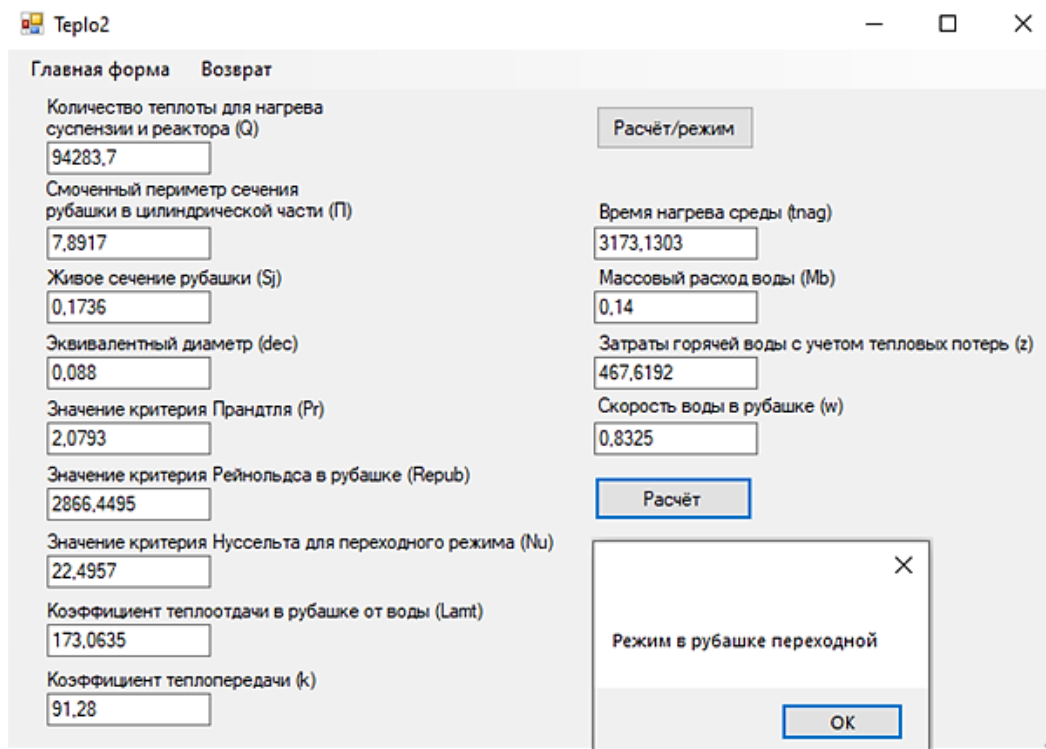


Рисунок 3 – Интерфейс программы теплового расчёта химического реактора. Определение  $Q$ , массового расхода воды, времени нагрева среды, режима и др.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Пат. № 2558896. Российская Федерация. Способ получения сорбента для очистки сточных вод от соединений тяжелых металлов / Е.А. Чернышева, В.А. Грабельных, Е.П. Леванова, О.Н. Игнатова, И.Б. Розенцвейг, Н.В. Руссавская [и др.]; заявл. 06.06.2014, опубл. 10.08.2015 г. Бюл. № 22.
2. **Домрачева, В.А., Вещева, Е.Н.** Модифицирование углеродных сорбентов для повышения эффективности извлечения тяжелых металлов из сточных вод и техногенных образований // Вестник ИрГТУ. 2010. № 4 (44). С. 134-138.
3. **Асламова, В.С., Шнейгельбергер, Е.А., Асламов, А.А.** Технология и оборудование производства серодержащих сорбентов для извлечения тяжёлых металлов из сточных вод // Сб. статей междунауч.-практ. конф. «Проблемы технико-технологических систем и физико-математических моделей» (1 марта 2020, г. Самара). Уфа: Аэтерна, 2020. С. 18–22.
4. **Барабаш, В.М., Абиев, Р.Ш., Кулов, Н.Н.** Обзор работ по теории и практике перемешивания // Теоретические основы химической технологии. 2018. Т. 52. № 4. С. 367–383.
5. **Немтинов, В.А., Мокрозуб, А.В., Ерохина, И.Н.** Автоматизированный расчет заготовок днищ емкостных аппаратов. URL: <https://elibrary.ru/item.asp?id=28372757&ysclid=15p9s61ldw160140536> (accessed: 07.06.2016).
6. **Малявко, О.И., Елагин, М.С., Орешкин, А.С.** Автоматизация механических расчетов валов технологического оборудования. URL: <https://elibrary.ru/item.asp?id=28372753&ysclid=15p9laa8mj214796164> (accessed: 7.06.2016).
7. **Асламова, В.С., Головкова, Е.А., Шнегельбергер, Е.А.** Алгоритм автоматизации выбора типа мешалки и расчета физических свойств гетерогенной смеси // Математические методы в технологиях и технике. 2022. №2. С. 31–34.
8. **Асламова, В.С., Асламов, А.А., Головкова, Е.А., Шнегельбергер, Е.А.** Автоматизированный расчет трехлопастной пропеллерной мешалки для производства серосодержащего сорбента на основе хлорлигнина, селективного к ионам тяжелых металлов // Современные технологии. Системный анализ. Моделирование. 2021. № 4(72). С. 48–58.