

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ РАСТВОРЕНИЯ ХИМИЧЕСКИХ РЕАГЕНТОВ В ПОТОКАХ ВОДЫ

Ключевые слова: водные объекты, химическое загрязнение, хлорирование, моделирование, экологический мониторинг, дисперсные частицы, растворитель, концентрация.

В работе обсуждается проблема экологической безопасности источников водоснабжения, и предлагается моделирование процессов растворения химических реагентов в потоках воды как путь ее решения. Рассматриваются кинематика движения частиц, уравнение материального баланса по растворяющемуся веществу, плотность распределения твердой фазы по размерам частиц и проводится проверка экспериментальных данных с расчетными результатами.

Key words: water facilities, chemical pollution, chlorine treatment, modeling, ecological monitoring, dispersed particles, solvent, concentration.

A problem of ecological safety of water supply sources is discussed, and modeling of the dissolution of chemicals in the streams of water is offered as ways of its solution. Kinematics of particles, material balance equation for the solute, distribution density of the solid phase particle size are considered, and experimental data are compared with the calculated results.

В настоящее время в водные объекты поступает большое количество химических загрязнений в основном антропогенного характера. Основные задачи экологического мониторинга водных объектов заключается в анализе, идентификации и количественном определении приоритетных загрязнителей окружающей среды. В целях повышения эффективности контроля водных объектов на промышленных предприятиях достаточно широко применяются газохроматографические методы анализа, которые сочетают в себе достаточно высокую информативность, достоверность и воспроизводимость получаемых результатов [10].

Обычно для улучшения качества воды плавательных бассейнов ее подвергают обработке хлорирующими реагентами, в результате чего в воде образуются галогенорганические соединения, пестициды, ароматические углеводороды и др. Поэтому эффективность и результат хроматографических исследований определяется многими факторами, включая корректность постановки задачи, выбора методики анализа и оптимальной системы пробоподготовки, наличия методического и программного обеспечения, а также квалификацией обслуживающего персонала [9].

Ранее нами были проведены экспериментальные работы по обеззараживанию воды закрытых плавательных бассейнов и разработана методика хроматографического и линейно-коллористического метода анализа легкокипящих хлорорганических соединений [1-3]. Найдены закономерности связывающие зависимость концентрации выделяющихся из препаратов газообразного хлора и легкокипящих хлорорганических соединений, на основании которых проведена оптимизация процесса водоподготовки плавательных бассейнов [4-6]. При этом была учтена адекватность метода решаемых задач с учетом процедуры пробоподготовки, возможности проведения надежной идентификации анализируемых компонентов, чувствительность и точность анализа. В процессе проведения

экспериментальных работ было замечено, что наряду с химическими загрязнениями вода плавательных бассейнов мутнеет, образуются взвешенные дисперсные частицы, которые также могут сорбировать загрязняющие вещества. Эти дисперсные частицы могут растворяться в водных потоках трубопроводов, дисперсироваться и под влиянием технологических и физических факторов претерпевать различные химические изменения.

С целью моделирования процессов непрерывного растворения дисперсных материалов в потоках водного растворителя нами был выбран экспериментальный плавательный бассейн, оборудованный системой водоподготовки, заключающийся в использовании процесса хлорирования водной среды.

При растворении твердых дисперсных частиц в направленных потоках растворителя учитывали существенные факторы переменной скорости растворителя (W) по сечению трубы; изменения скорости (w) осаждения частиц, уменьшающегося радиуса относительно потока

$$(w_2 r / v = Ar / (18 + 0,61 Ar^{0,5}));$$

изменения величины коэффициента массоотдачи

$$\beta(\beta_2 r / D = 2 + 0,72(v / D)^{0,33} (w_2 r / v)^{0,25});$$

изменения объемной концентрации растворяющихся частиц вследствие уменьшения скорости их осаждения

$$N_0(w(r_0) / w(r)),$$

где N_0 – объемная концентрация на входе частиц в трубу, r_0 – начальный радиус частицы.

Кинематика движения отдельных частиц записывается в форме соотношения

$$dl / dt = W(R) + w(r), \quad (1)$$

где dl / dt – скорость перемещения частицы относительно трубы складывается из скорости потока (W)

и скорости осаждения частицы (w), зависящих от текущих значений радиуса в трубе (R) и радиуса растворяющейся частицы (r).

Уравнение материального баланса по растворяющемуся веществу для элементарного кольца площадью $2\pi R dr$ и длиной dl в интегральной форме имеет вид [7]: (2)

$$\frac{D}{\rho_s} l = \int_r^{r_0} \frac{w + a_2 r^2 / (18 + b_2 r^{3/2}) dr}{(C^* - C)} \times \frac{1}{\left(\frac{1}{r} + 0,51(v/D)^{0,33} \sqrt{a_2 r / (18 + b_2 r^{3/2})} \right)}, \quad (2)$$

где C^* , C и C_0 – равновесная, текущая и начальная концентрации вещества в растворителе;

$W = 2W|1 - R^2/R_0^2|$ – при ламинарном режиме;

$W = 1,22W|1 - R^2/R_0^2|^{1/7}$ – при турбулентном режиме;

$a_2 = 4g\Delta\rho/|\nu\rho|$; $b_2 = 2,98g\Delta\rho/|\nu^2\rho|$; $\Delta\rho = \rho_s - \rho$ ν и ρ – кинематическая вязкость и плотность растворителя; D – коэффициент молекулярной диффузии растворяемого вещества.

Решение уравнений (1) и (2) позволяет получить зависимость радиуса частиц и концентрации в растворе от l и от R и средней по сечению трубы концентрации от l .

Плотность распределения твердой фазы по размерам частиц $p|r|$, m^{-1} характеризует неодинаковую степень растворения частиц в любом сечении потока [8]:

$$p|r| = \left[\frac{W + w(r)}{w(r)} \right] 2\pi R dr / \left[\int_0^{(R_0 - r_0)} \left[\frac{W + w(r)}{w(r)} \right] 2\pi R dr \right]. \quad (3)$$

В общем случае функция $p|r|$ вычисляется численными методами по соотношениям (1)-(3).

В упрощенных случаях, если, например, считать $w = Ar$, в формуле для β можно пренебречь первым слагаемым, а концентрацию вещества в растворе считать неизменной по длине трубы, то из соотношений (1)-(3), для ламинарного режима течения растворителя, получено уравнение:

$$p|r| = \frac{A^2 R_0^2}{16WJ} \frac{\left| \frac{2r}{r_0} - \frac{r^2}{r_0^2} + \frac{2La}{|Ar_0^2|} - 1 \right|^2}{\left| \frac{r}{r_0} \right| \cdot \left| 1 - \frac{r}{r_0} \right|^3}, \quad (4)$$

где J – определенный интеграл выражения (3); L – полная длина трубы;

$$a = 0,5\sqrt{A} \left(\frac{\nu}{D} \right)^{0,33} D(C^* - C) / (\rho_s \nu^{0,5}).$$

В рамках тех же упрощений получены явные выражения для $p|r|$ при турбулентном профиле скорости, а также для случая подачи в трубу полидисперсного материала.

Экспериментальная проверка полученных соотношений проводилась на системе NaCl-вода в трубах диаметром 50 мм и длиной 400 мм при ламинарных режимах, скоростях растворителя до 0,1 м/с и начальном размере частиц 0,25 мм.

Сравнение опытных кривых $p|r|$ с расчетными результатами показало их удовлетворительное совпадение.

Литература

1. Д.Н. Лебедев. Автореф. дисс. канд. техн. наук, Пензенский гос. ун-т архитектуры и строительства. Пенза, 2008. 16 с.
2. Д.А. Корнева, Л.Н. Куров, *Успехи современного естествознания*, 7, 129-130 (2011).
3. Т.А. Сидоренко, *Экологическая безопасность в АПК. Реферативный журнал*, 4, 1049-1053 (2004).
4. А.Б. Адельшин, Ж.С. Нуруллин, А.В. Бусарев, А.С. Селюгин, *Известия Казан. гос. архитектурно-строительного ун-та*, 14, 2, 206-212 (2010).
5. Е.С. Перикова, О.Р. Каратаев, В.А. Танеева, В.Ф. Новиков, *Теория и практика физической культуры*, 2, 87-90 (2008).
6. Л.И. Козубова, С.В. Морозов *Органические загрязнения питьевой воды. Аналитический обзор*. Изд-во СО РАН, Новосибирск, 1993. 289 с.
7. Б.И. Броунштейн, В.И. Фишбейн *Гидродинамика, массо и теплообмен в дисперсных системах*. Химия, Ленинград, 1997. 279 с.
8. П.Г. Романков, В.Ф. Фролов *Массообменные процессы химической технологии*. Химия, Ленинград, 1990. 384 с.
9. А.В. Михалицын, О.В. Панченко, *Вестн. Казан. технол. ун-та*, 10, 78-80 (2013).
10. О.Р. Каратаев, В.Ф. Новиков, З.Р. Шамсутдинова, *Вест. Казан. технол. ун-та*, 14, 14, 52-55 (2013).