



**Моделирование и оптимизация
химико-технологических процессов**

Москва
МЭИ (ТУ)
2008

Все права на размножение и распространение в любой форме остаются за разработчиком.

Нелегальное копирование и использование данного ресурса запрещено.

Автор: Орлов К.А.

112250, Россия, Москва, Красноказарменная ул., д. 17, В-411, тел. (495) 362-71-71

E-mail: OrlovKA@mpei.ru

<http://twt.mpei.ac.ru/inedu/it97>

Аннотация

Рассматриваются вопросы теории и практики, приведены справочные данные, необходимые для расчетов математического описания процессов водоподготовки. Рассмотрено решение и моделирование некоторых задач в данной области в пакете Mathcad.

Введение

Основным источником получения воды для тех или иных производственных нужд является природная вода - одна из главных составляющих природной среды.

На тепловых электрических станциях воду широко используют в качестве теплоносителя, рабочего тела.

Вода естественных водоёмов редко отвечает требованиям для прямого применения из-за содержания в ней различных примесей, которые удаляют перед ее использованием.

Комплекс технологических процессов удаления примесей для приведения качества воды в соответствие с необходимыми требованиями, называется водоподготовкой.

Технологии получения чистой воды включают ряд сложных физико-химических процессов, состоящих из этапов удаления грубодисперсных примесей, коллоидных веществ, ионов и газов. Предложено множество способов водоподготовки для очистки.

Каждый из способов имеет свои преимущества и недостатки. Однако, отдавая предпочтение какому-либо варианту, всегда приходится жертвовать положительными эффектами других. Поэтому при выборе технологической схемы водоподготовки специалисты обязаны провести в идентичных условиях сравнительный анализ альтернативных вариантов на основе строгого количественного и качественного анализа технико-экономических показателей.

Актуальным становится современный подход к реализации расчетов и математических моделей водоподготовки с использованием компьютерной техники на базе мощных математических пакетов, таких как Mathcad, Excel и т.д.

В настоящем курсе показан возможный подход к решению различных задач в области проектирования и эксплуатации оборудования водоподготовки с применением современных программных продуктов.

1. Оптимизация размеров цилиндрического бака с применением различных критериев оптимизации

Выбор оптимизационного критерия или целевой функции, оптимум которой необходимо определить, является одним из главных вопросов при решении задачи оптимизации. В настоящей главе будет рассмотрен пример того, как использование различных критериев влияет на окончательный ответ. Также будут рассмотрены различные способы решения задачи оптимизации в пакете Mathcad.

Нашей целью будет оптимизация соотношения размеров цилиндрического бака, предназначенного для хранения определенного объема воды. Бак представляет собой правильный цилиндр с нижней и верхней крышками. Исходные данные показаны на рис. 1.1, на котором представлен документ физико-математического пакета Mathcad.

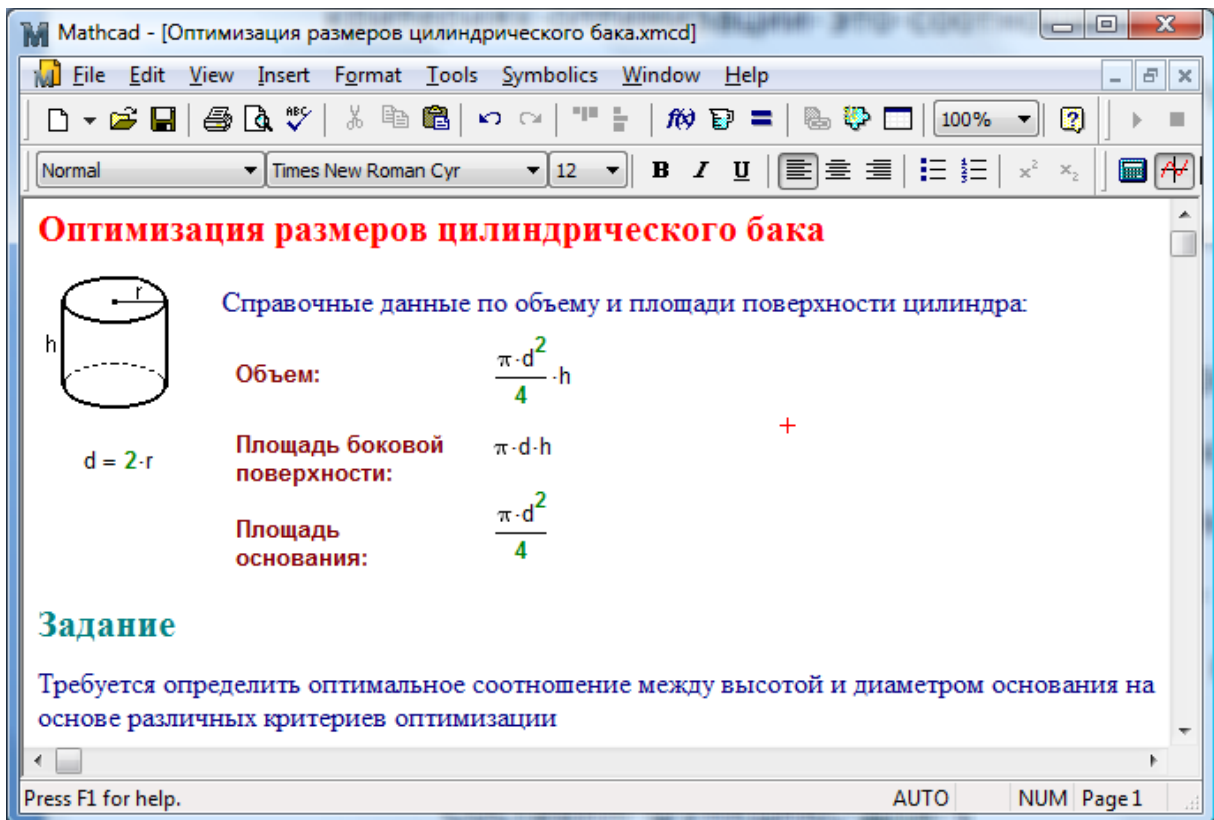


Рис. 1.1. Исходная схема оптимизации размеров цилиндрического бака

Под размерами бака понимается соотношение между диаметром основания d и высотой h . При заданном объеме бака при различных критериях оптимизации это соотношение будет различным.

Для определенности примем требуемый объем бака равным 100 м^3 .

1.1. Оптимизация по принципу минимума суммарной поверхности бака

Самый простой вариант критерия оптимизации в рассматриваемом случае – это использование принципа минимума суммарной поверхности бака. Этот принцип следует из снижения затрат металла на сооружение бака – в первом приближении можно считать, что количество металла пропорционально площади поверхности.

На рис. 1.2 показан пример решения задачи оптимизации самым простым способом – графическим, т.е. с помощью построения графика целевой функции и определением оптимума по графику с использованием таких инструментов Mathcad как трассировка и

масштабирование. В качестве целевой функции используется зависимость суммарной площади бака от диаметра основания при заданном объеме.

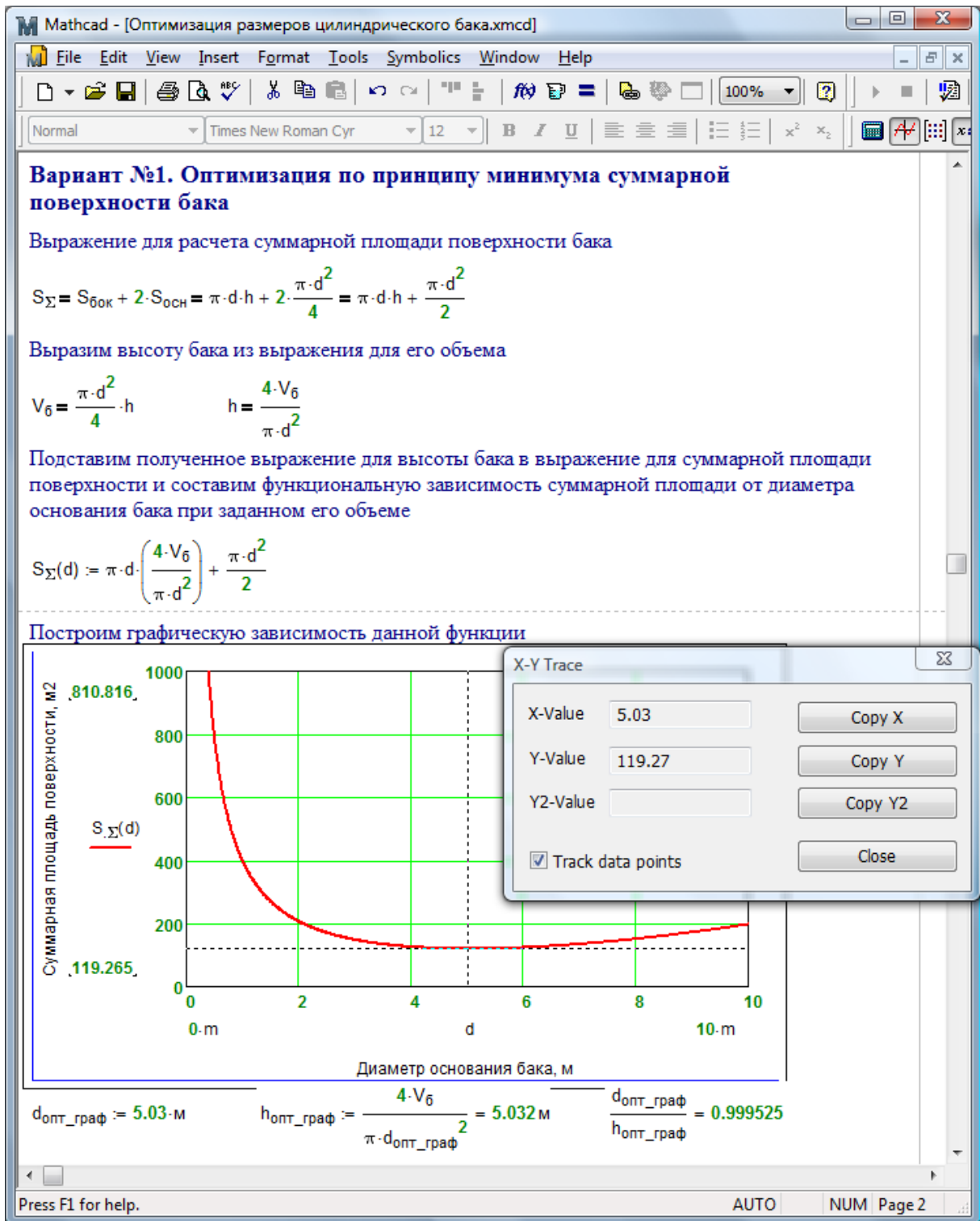


Рис. 1.2. Решение задачи оптимизации графическим способом

Точка оптимума соответствует минимуму целевой функции и определение значений параметров в данной точке и является основной задачей оптимизационного процесса.

Полученное соотношение диаметра и высоты в точке оптимума составляет 0,999525. Это значение, в пределах точности определения диаметра основания бака, не зависит от принятого объема бака, в чем легко можно убедиться, решив данную задачу для другой величины объема, например 300 м^3 (см. рис. 1.3)¹.

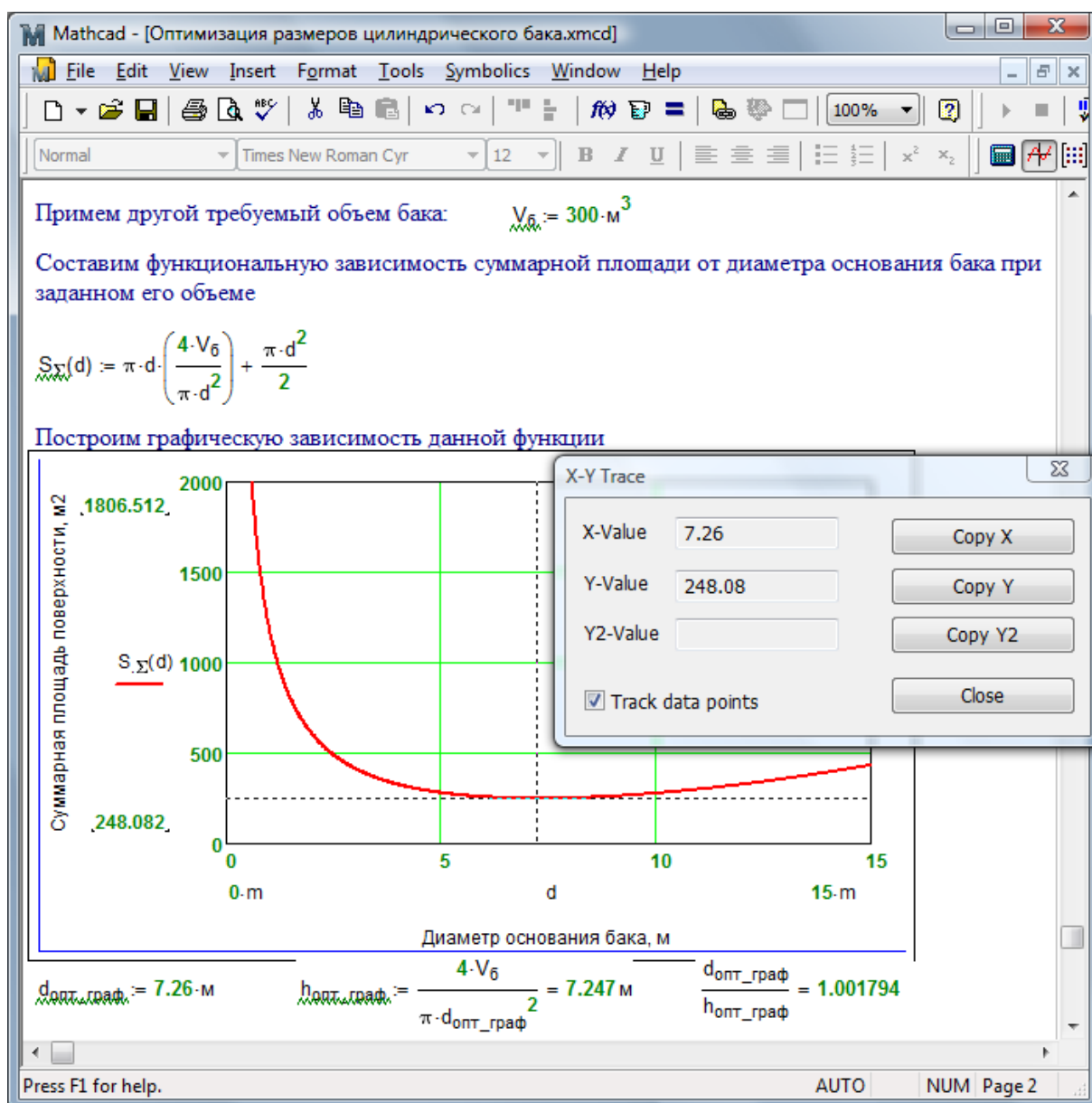


Рис. 1.3. Решение задачи оптимизации графическим способом для бака объемом 300 м^3

¹ Независимость оптимального соотношения диаметра и высоты бака будет выведена более строго далее.

Полученное соотношение диаметра к высоте в точке оптимума составило 1,001794. Это значение очень близко к полученному ранее (см. рис. 1.2).

Графический способ решения задачи оптимизации обладает одним несомненным преимуществом – он очень нагляден. Однако у него есть и несколько недостатков, основные из которых это:

- необходимость построения графика функции, что может занимать достаточно долгое время;
- необходимость ручного определения (человеком) точки оптимума по графику;
- низкая скорость определения точки оптимума по сравнению с автоматизированными расчетами на компьютере;
- низкая точность полученного результата, т.к. для повышения точности временные затраты многократно возрастают.

Вследствие этих недостатков графический способ может применяться в случае предварительного анализа задачи оптимизации или в целях повышения наглядности.

Рассмотрим второй – численный – способ определения точки оптимума с помощью встроенных функций пакета Mathcad. Документ с расчетом показан на рис. 1.4.

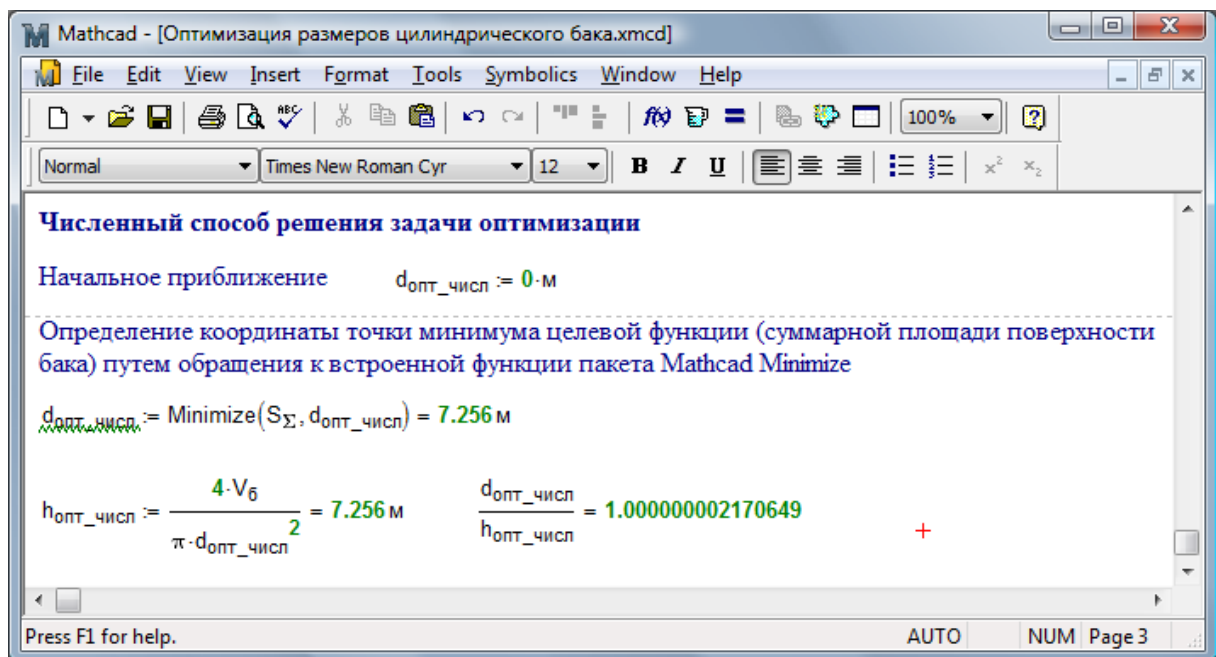


Рис. 1.4. Решение задачи оптимизации численным способом

Задача оптимизации решается путем обращения к встроенной функции пакета Mathcad с именем Minimize, которая определяет значение аргумента заданной функции, при котором эта функция принимает минимальное значение. Аргументы функции Minimize – это имя минимизируемой функции и начальное значение аргумента минимизируемой функции. От выбора начального значения может зависеть ответ или, даже, возможность определения точки минимума. На рис. 1.5 показано решение рассматриваемой задачи при различных начальных приближениях.

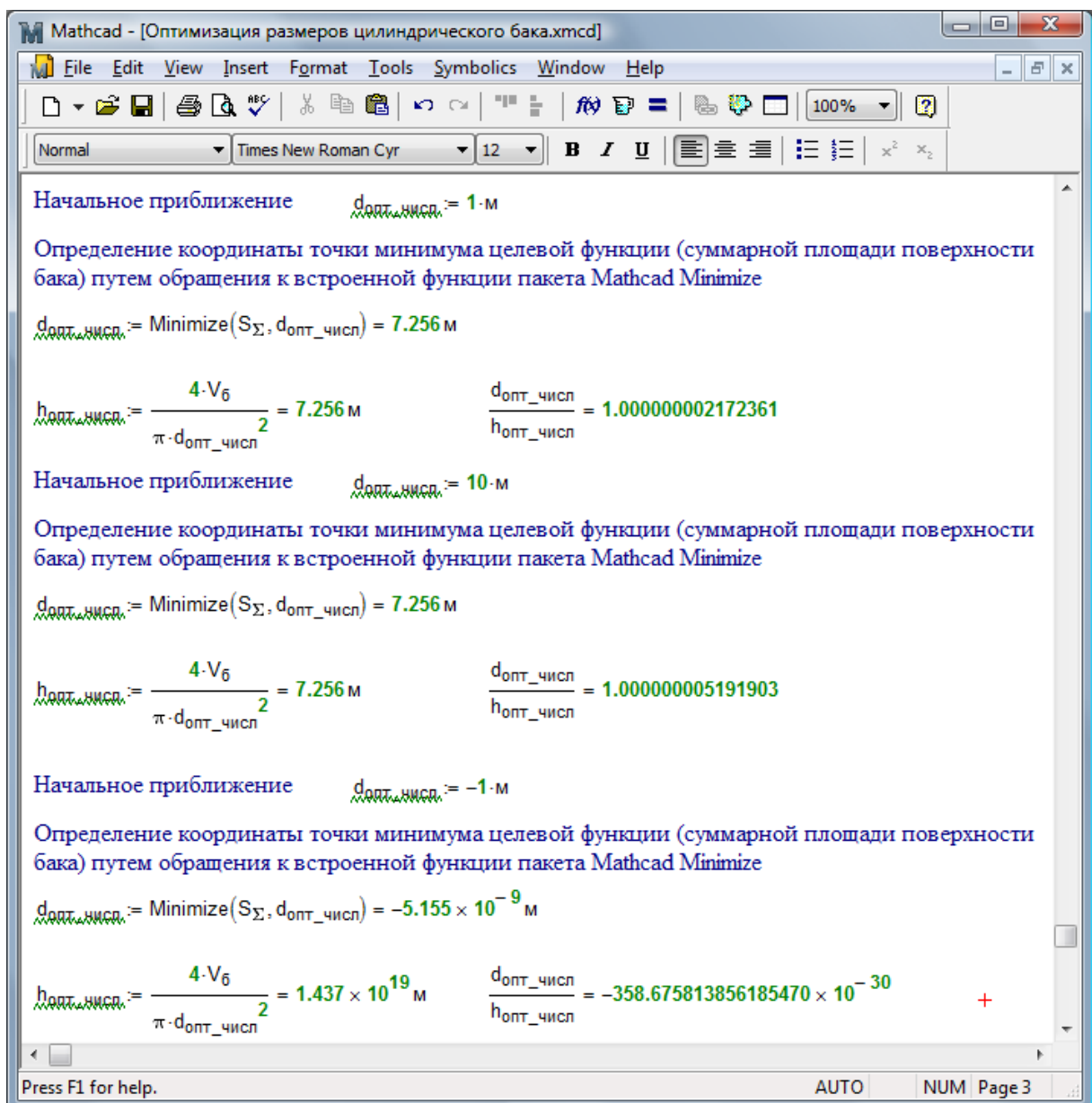


Рис. 1.5. Решение задачи оптимизации численным способом при различных начальных приближениях

При начальном приближении $d=1$ м ответ получился точно таким же, как и на рис. 1.4 (начальное приближение $d=0$ м). Однако при 10 м ответ несколько отличается, что связано с особенностями работы функции Minimize в пакете Mathcad. А при отрицательном начальном приближении (-1 м) ответ получается не имеющий смысла.

Еще один из способов численного решения задачи оптимизации в пакете Mathcad – это использование блока Given...MinErr. В этом случае внутри данного блока записывается условие, что функция равна заведомо меньшему значению, чем она может быть в рассматриваемом диапазоне решений. В данном случае, таким значением может выступать 0 м^2 . После этого вызывается функция MinErr, которая определяет значение аргумента, при котором невязка левой и правой части условия минимальна, т.е. когда целевая функция принимает минимальные значения. Пример использования данного блока с различными начальными приближениями показан на рис. 1.6. В случае начального приближения равном 0 м произошла ошибка, связанная с делением на ноль. Эта ошибка не возникала при использовании функции Minimize, что связано с различными алгоритмами работы функций Minimize и MinErr.

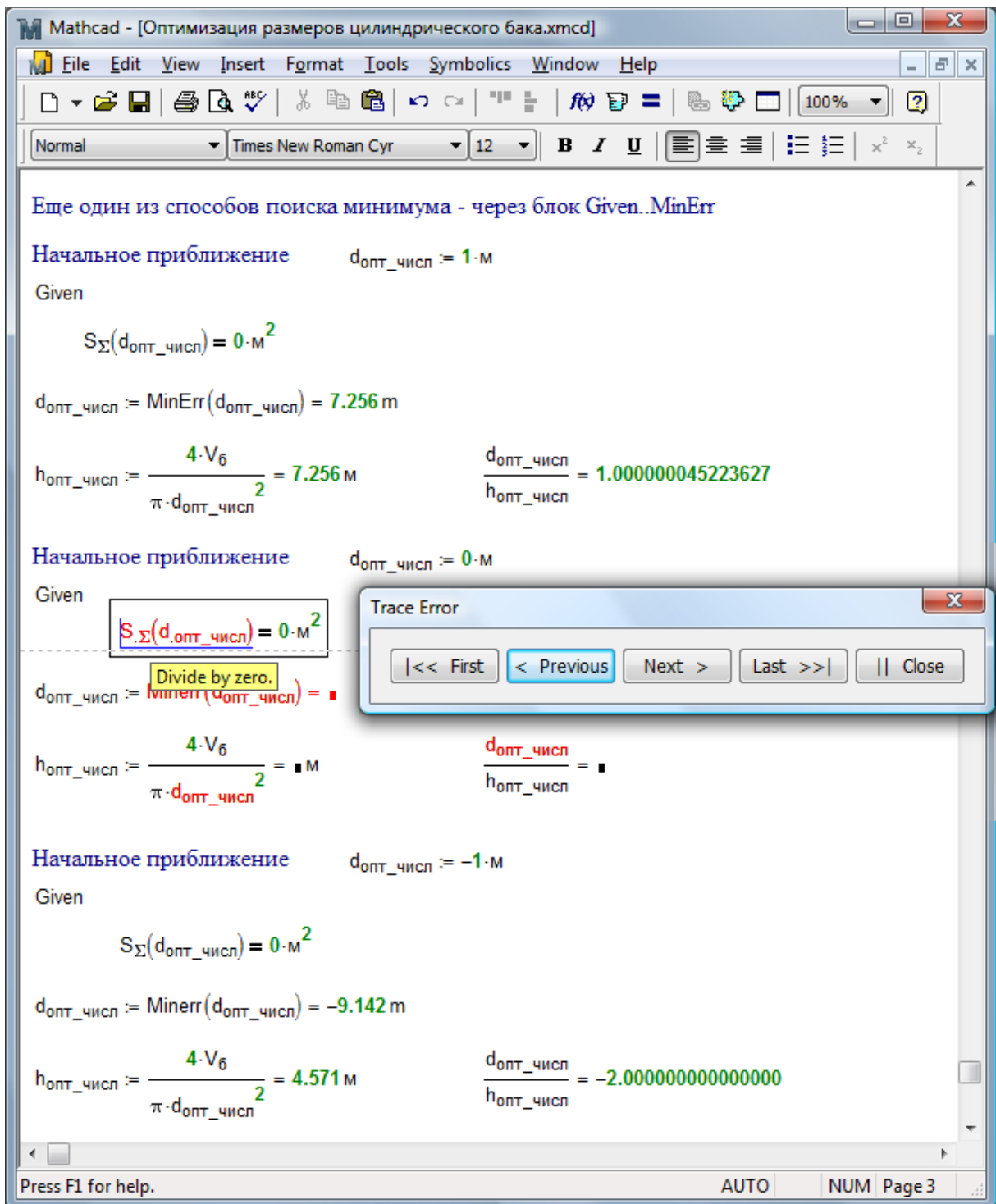


Рис. 1.6. Решение задачи оптимизации с помощью блока Given...MinErr при различных начальных приближениях

В пакете Mathcad есть возможность выполнения аналитических расчетов, в том числе и оптимизационных, с использованием символической математики. На рис. 1.7 показан вывод формулы для зависимости суммарной площади поверхности бака от диаметра. Аналогичные расчеты были сделаны ранее вручную (см. рис. 1.2).

Mathcad - [Оптимизация размеров цилиндрического бака.xmcd]

File Edit View Insert Format Tools Symbolics Window Help

Normal Times New Roman Cyr 12 B I U

Аналитический способ решения задачи оптимизации с помощью символьной математики пакета Mathcad

Запишем исходные выражения для суммарной площади поверхности бака и его объема

$$S_{\Sigma} = \pi \cdot d \cdot h + 2 \frac{\pi \cdot d^2}{4} \quad V_{\text{б}} = \frac{\pi \cdot d^2}{4} \cdot h$$

Выразим с помощью ключевых команд символьной математики зависимость суммарной площади поверхности бака от диаметра основания

а) Для начала выразим высоту бака из его объема и высоты

$$V_{\text{б}} = \frac{\pi \cdot d^2}{4} \cdot h \text{ solve, } h \rightarrow \frac{1200 \cdot \text{m}^3}{\pi \cdot d^2}$$

численное значение 1200 м³ появилось из значения ранее определенного объема бака умноженного на 4. Для того, чтобы "скрыть" численное значение объема бака достаточно записать следующее:

$$V_{\text{б}} := V_{\text{б}}$$

и тогда

$$V_{\text{б}} = \frac{\pi \cdot d^2}{4} \cdot h \text{ solve, } h \rightarrow \frac{4 \cdot V_{\text{б}}}{\pi \cdot d^2}$$

б) Выражение для суммарной площади поверхности

$$S_{\Sigma} = \pi \cdot d \cdot h + 2 \frac{\pi \cdot d^2}{4} \text{ substitute, } h = \frac{4 \cdot V_{\text{б}}}{\pi \cdot d^2} \rightarrow \text{function} = \frac{\pi \cdot d^3 + 8 \cdot V_{\text{б}}}{2 \cdot d}$$

Аналогично предыдущему пункту, "скроем" значение S_{Σ} :

$$S_{\Sigma} := S_{\Sigma}$$

$$S_{\Sigma} = \pi \cdot d \cdot h + 2 \frac{\pi \cdot d^2}{4} \text{ substitute, } h = \frac{4 \cdot V_{\text{б}}}{\pi \cdot d^2} \rightarrow S_{\Sigma} = \frac{\pi \cdot d^3 + 8 \cdot V_{\text{б}}}{2 \cdot d}$$

Symbolics

→	▪→	Modifiers
float	rectangular	assume
solve	simplify	substitute
factor	expand	coeffs
collect	series	parfrac
fourier	laplace	ztrans
invfourier	invlaplace	invztrans
m ^T →	m ⁻¹ →	m →
explicit	combine	confrac
rewrite		

Press F1 for help. AUTO NUM Page 4

Рис. 1.7. Вывод зависимости суммарной площади поверхности бака от диаметра с помощью символьной математики пакета Mathcad

На рис. 1.8 показан алгоритм решения задачи оптимизации аналитическим способом. Он заключается в следующем:

- с помощью команд символьной математики пакета Mathcad производится дифференцирование выражения для суммарной площади поверхности бака по диаметру бака;
- полученное выражение решается относительно диаметра бака (в точке минимума, как точке экстремума, производная функции равна нулю);

- из трех вариантов выбирается подходящий по физическому смыслу задачи (диаметр бака не может быть комплексным числом).

Mathcad - [Оптимизация размеров цилиндрического бака.xmcd]

File Edit View Insert Format Tools Symbolics Window Help

Normal Times New Roman Cyr 12 B I U

Для определения точки минимума найдем производную функциональной зависимости суммарной площади поверхности бака по диаметру бака

$$\frac{d}{dd} \frac{\pi \cdot d^3 + 8 \cdot V_6}{2 \cdot d} \rightarrow \frac{3 \cdot \pi \cdot d}{2} - \frac{\pi \cdot d^3 + 8 \cdot V_6}{2 \cdot d^2}$$

И решим данное выражение относительно диаметра основания бака. Т.е. найдем значения диаметра бака, при которых производная равна нулю:

$$\frac{d}{dd} \frac{\pi \cdot d^3 + 8 \cdot V_6}{2 \cdot d} \text{ solve, } d \rightarrow \left[\begin{array}{l} \left(\frac{4 \cdot V_6}{\pi} \right)^{\frac{1}{3}} \\ \frac{\left(\frac{4 \cdot V_6}{\pi} \right)^{\frac{1}{3}}}{2} + \frac{\sqrt{3} \cdot \left(\frac{4 \cdot V_6}{\pi} \right)^{\frac{1}{3}}}{2} \cdot i \\ \left(\frac{4 \cdot V_6}{\pi} \right)^{\frac{1}{3}} \\ \frac{\left(\frac{4 \cdot V_6}{\pi} \right)^{\frac{1}{3}}}{2} - \frac{\sqrt{3} \cdot \left(\frac{4 \cdot V_6}{\pi} \right)^{\frac{1}{3}}}{2} \cdot i \end{array} \right]$$

Комплексные значения не удовлетворяют физическому смыслу задачи и могут быть отброшены. Поэтому можем записать:

$$d_{\text{опт_симв}} := \left(\frac{4 \cdot V_6}{\pi} \right)^{\frac{1}{3}} \quad h_{\text{опт_симв}} := \frac{4 \cdot V_6}{\pi \cdot d_{\text{опт_симв}}^2}$$

$$\frac{d_{\text{опт_симв}}}{h_{\text{опт_симв}}} = 1.0000000000000000 \quad \frac{d_{\text{опт_симв}}}{h_{\text{опт_симв}}} \rightarrow \frac{\pi \cdot \left(\frac{4 \cdot V_6}{\pi} \right)^{\frac{1}{3}}}{4 \cdot V_6}$$

Calculus

Symbolic

Press F1 for help. AUTO NUM Page 5

Рис. 1.8. Решение задачи оптимизации аналитическим способом

В результате получено, что оптимальное соотношение диаметра основания бака к его высоте равно единице и это соотношение не зависит от объема бака.

Недостатком аналитического способа следует назвать необходимость ручного копирования математических выражений из одной формулы в другую. На рис. 1.9 показана попытка преодоления этого недостатка путем записи в одну формулу. Однако при этом возникают две проблемы: первая – полученные выражения очень громоздки, а вторая – наличие ошибки в символьных преобразованиях в пакете Mathcad, которая приводит к отрицательным значениям. Эта ошибка может быть решена в будущих версиях пакета Mathcad.

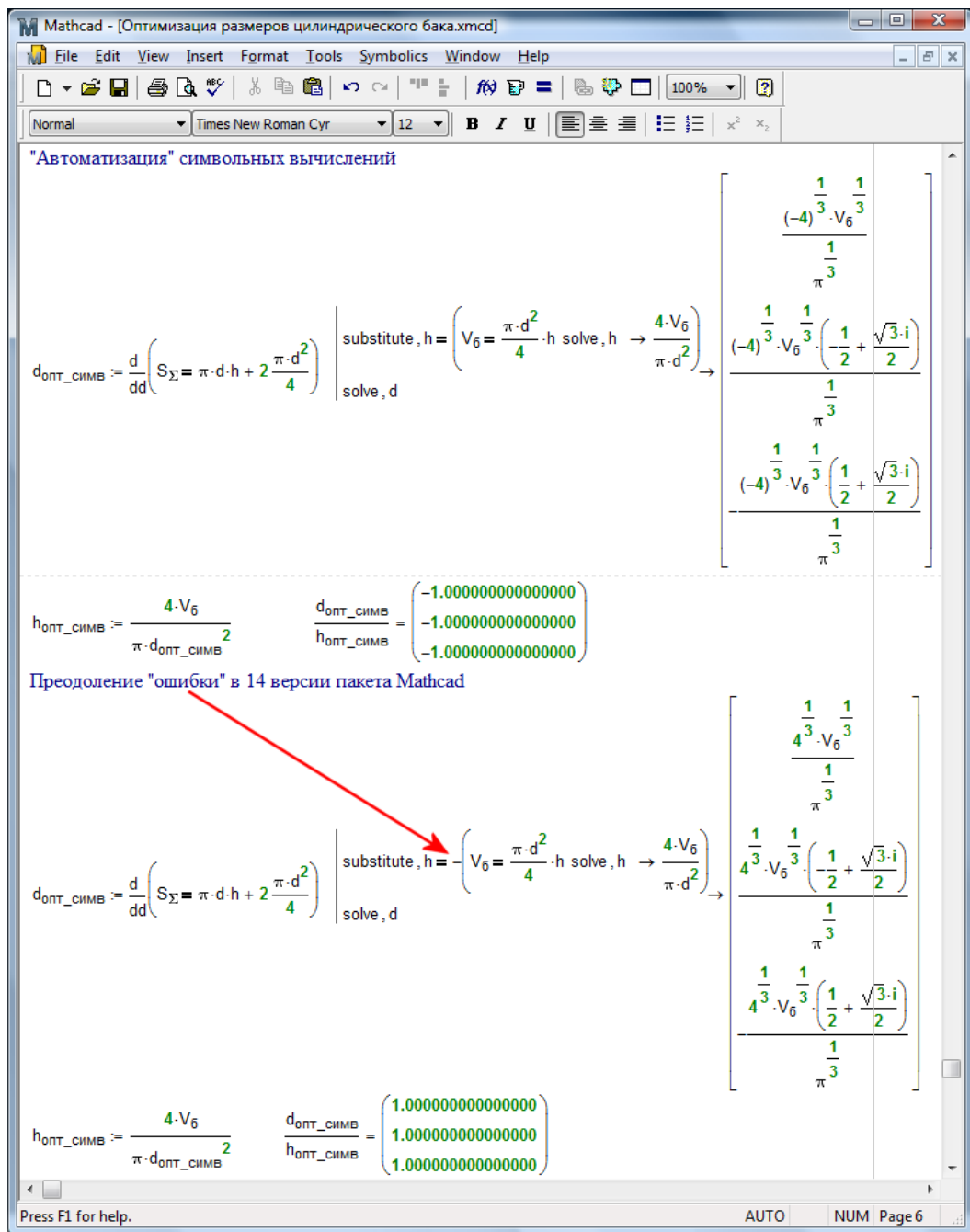


Рис. 1.9. Автоматизация решения задачи оптимизации аналитическим способом

Подведем итоги сравнения различных способов решения задачи оптимизации в пакете Mathcad. Графический способ наиболее наглядный, наименее точный, требует построения графика целевой функции и не может быть автоматизирован, т.е. необходимы действия вручную по определению точки оптимума.

Аналитический способ наиболее точный, не требует начального приближения, однако он самый громоздкий и требует тщательной проверки ответа, т.к. в реализации символьной математики в Mathcad есть ошибки. Стоит отметить, что в более сложных задачах символьные преобразования не всегда выполнимы, что ограничивает область применения аналитического способа. Также данный способ нельзя использовать, когда, например, целевая функция задана таблично.

Численный способ решения задачи оптимизации по точности занимает положение между графическим и аналитическим. Однако его главное преимущество в том, что при правильно подобранных начальных приближениях, он легко «автоматизируется» и может применяться для решения широкого круга задач, в том числе, когда сложно построить график функции или невозможны символьные преобразования.

Использование одновременно нескольких различных способов решения задачи оптимизации в пакете Mathcad может быть рекомендовано для проверки, т.к. при этом возрастает степень уверенности в правильности решения.

1.2. Оптимизация по принципу минимума тепловых потерь

Несколько изменим задачу и будем минимизировать не капитальную составляющую стоимости бака – количество металла, идущего на изготовление бака, а эксплуатационные затраты, которые могут быть связаны, например, с потерями тепла через стенки бака, что связано с тем, что обычно вода в баке имеет большую температуру, чем окружающая среда.

Тепловой поток пропорционален площади поверхности бака. То есть можно сделать вывод, что оптимальное значение соотношения диаметра бака и его высоты будет таким же, как и в предыдущем случае. Однако тепловой поток может быть разным через отдельные поверхности бака – через боковые стенки и крышку он может быть сильнее, чем через дно бака. Это может быть, например, объяснено наличием ветра около боковых стенок бака, что приводит к увеличению коэффициента теплоотдачи от стенок бака к воздуху. Попробуем учесть данные различия путем введения интегрального коэффициента неравномерности a , значение которого зададим в качестве примера равным 0,5. Этот коэффициент будет учитывать разность усредненных тепловых потоков через различные поверхности бака.

На рис. 1.10 показано решение данной задачи численным и аналитическим способами. Оптимальное соотношение размеров бака в данном варианте отличается от предыдущего: при таком критерии оптимизации выгоднее строить бак более приземистый, т.е. чтобы диаметр был больше, чем высота.

Mathcad - [Оптимизация размеров цилиндрического бака.xmcd]

File Edit View Insert Format Tools Symbolics Window Help

Normal Times New Roman Cyr 12 B I U

Вариант №2. Оптимизация по принципу минимума тепловых потерь

Коэффициента неравномерности, учитывающий неравномерность теплового потока через дно и другие поверхности бака

$a := 0.5$

Выражение для расчета площади поверхности бака, относительно которой пропорциональны тепловые потери

$$S_{\Sigma_теп} = S_{бок} + S_{дно} + S_{крышк} = \pi \cdot d \cdot h + a \cdot \frac{\pi \cdot d^2}{4} + \frac{\pi \cdot d^2}{4} = \pi \cdot d \cdot h + \frac{\pi \cdot d^2}{4} \cdot (a + 1)$$

Составим функциональную зависимость площади поверхности бака, относительно которой пропорциональны тепловые потери, от диаметра основания бака при заданном его объеме

$$S_{\Sigma_теп}(d) := \pi \cdot d \cdot \left(\frac{4 \cdot V_б}{\pi \cdot d^2} \right) + \frac{\pi \cdot d^2}{4} \cdot (a + 1)$$

Численный способ решения задачи оптимизации

Начальное приближение $d_{опт_числ} := 0 \cdot m$

Определение координаты точки минимума целевой функции (суммарной площади поверхности бака) путем обращения к встроенной функции пакета Mathcad Minimize

$$d_{опт_числ} := \text{Minimize}(S_{\Sigma_теп}, d_{опт_числ}) = 7.986 \text{ м}$$

$$h_{опт_числ} := \frac{4 \cdot V_б}{\pi \cdot d_{опт_числ}^2} = 5.989 \text{ м}$$

$$\frac{d_{опт_числ}}{h_{опт_числ}} = 1.333333327971930$$

Аналитический способ решения задачи оптимизации

$a := a$

$$\frac{d}{dd} \left[\pi \cdot d \cdot \left(\frac{4 \cdot V_б}{\pi \cdot d^2} \right) + \frac{\pi \cdot d^2}{4} \cdot (a + 1) \right] \text{ solve, } d \rightarrow \begin{bmatrix} \left(\frac{8 \cdot V_б}{\pi + \pi \cdot a} \right)^{\frac{1}{3}} \\ \frac{\left(\frac{8 \cdot V_б}{\pi + \pi \cdot a} \right)^{\frac{1}{3}}}{2} + \frac{\sqrt{3} \cdot \left(\frac{8 \cdot V_б}{\pi + \pi \cdot a} \right)^{\frac{1}{3}}}{2} \cdot i \\ \left(\frac{8 \cdot V_б}{\pi + \pi \cdot a} \right)^{\frac{1}{3}} \\ \frac{\left(\frac{8 \cdot V_б}{\pi + \pi \cdot a} \right)^{\frac{1}{3}}}{2} - \frac{\sqrt{3} \cdot \left(\frac{8 \cdot V_б}{\pi + \pi \cdot a} \right)^{\frac{1}{3}}}{2} \cdot i \end{bmatrix}$$

$$d_{опт_симв} := \left(\frac{8 \cdot V_б}{\pi + \pi \cdot a} \right)^{\frac{1}{3}} \quad h_{опт_симв} := \frac{4 \cdot V_б}{\pi \cdot d_{опт_симв}^2} \quad \frac{d_{опт_симв}}{h_{опт_симв}} \text{ simplify } \rightarrow \frac{2}{a + 1} \quad \frac{d_{опт_симв}}{h_{опт_симв}} = 1 \frac{1}{3}$$

Press F1 for help. AUTO Page 7

Рис. 1.10. Решение задачи о минимизации тепловых потерь

1.3. Оптимизация по принципу минимума затрат на сооружение и эксплуатацию бака

Еще раз усложним задачу и попробуем учесть различные факторы, влияющие одновременно на капитальные и эксплуатационные затраты:

- стоимость землеотвода;
- земельный налог;
- стоимость металла;
- стоимость изоляции;
- тепловые потери;
- стоимость сооружения бака.

То есть будем определять оптимальные размеры бака исходя из общей стоимости владения. В качестве целевой функции будет использоваться сумма затрат по отдельным статьям.

Остальные факторы, влияющие на полную стоимость владения баком, такие как амортизационные отчисления, текущий и капитальный ремонт и т.д. учитываться не будут. Оценка их влияния оставляется для самостоятельной проработки студентами.

На рис. 1.11-1.14 показаны исходные зависимости для учета различных составляющих затрат на сооружение и эксплуатацию бака. Значения, характеризующие отдельные затраты приняты только в качестве примера для более наглядного разбора задачи и могут не отражать реальную ситуацию.

Mathcad - [Оптимизация размеров цилиндрического бака.xmcd]

File Edit View Insert Format Tools Symbolics Window Help

Normal Times New Roman Cyr 12 B I U

Вариант №3. Оптимизация по принципу минимума затрат на сооружение и эксплуатацию бака

Будем учитывать следующие составляющие:

- стоимость землеотвода;
- земельный налог;
- стоимость металла;
- стоимость изоляции;
- тепловые потери;
- стоимость сооружения бака.

а) Стоимость землеотвода

Курс доллара \$US := 26.2-руб

Примем коммерческую стоимость выкупа земли $C_{земли} := 10^5 \cdot \frac{\$US}{100 \cdot m^2}$

Тогда затраты на землеотвод с учетом организации подхода к баку (2 м) будут составлять

$$C_{зем}(d) := (d + 2 \cdot m)^2 \cdot C_{земли}$$

б) Земельный налог

Ставка земельного налога: $K_{зем.нал} := 0.75 \cdot \frac{\%}{год}$

В качестве упрощения примем исчисление земельного налога как процент от коммерческой стоимости земли. Тогда годовые затраты на земельный налог будут составлять

$$C_{зем.нал}(d) := K_{зем.нал} \cdot C_{зем}(d)$$

Press F1 for help. AUTO NUM Page 7

Рис. 1.11. Затраты на землеотвод и земельный налог

Mathcad - [Оптимизация размеров цилиндрического бака.xmcd]

File Edit View Insert Format Tools Symbolics Window Help

Normal Times New Roman Cyr 12 B I U

в) Стоимость металла

Цена металла $C_{\text{ме}} := 400000 \cdot \frac{\text{руб}}{\text{м}^3}$

Толщина крышки бака $\delta_{\text{крышк}} := 5 \cdot \text{мм}$

Толщину стенок и дна будем определять из условия надежной работы:

Коэффициент прочности швов $\phi := 0.9$

Допустимое напряжение металла $\sigma_{\text{ме}} := 500 \cdot \text{МПа}$

Прибавка к расчетной толщине стенки на утонение за счет коррозии, с учетом срока службы $C1 := 2 \cdot \text{мм}$

Техническая прибавка, предусматривающая утонение стенки при технологических операциях $C2 := 0.5 \cdot \text{мм}$

Допуск на толщину стенки $C3 := 2 \cdot \text{мм}$

Барометрическое давление $P_{\text{б}} := 760 \cdot \text{мм}_\text{рт}_\text{ст}$

Плотность воды $\rho_{\text{в}} := \text{wspDENSPT}(P_{\text{б}}, 40 \text{ }^\circ\text{C}) = 992.2 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}$

Тогда толщина стенок бака будет рассчитываться по следующему выражению:

$$\delta_{\text{металла}} = C1 + C2 + C3 + \frac{(P_{\text{б}} + \rho_{\text{в}} \cdot g \cdot h) \cdot d}{2\sigma_{\text{ме}} \cdot \phi + (P_{\text{б}} + \rho_{\text{в}} \cdot g \cdot h)}$$

Подставив выражение для высоты бака получим, с учетом округления

$$\delta_{\text{металла}}(d) := \text{Ceil} \left[C1 + C2 + C3 + \frac{\left[P_{\text{б}} + \rho_{\text{в}} \cdot g \cdot \left(\frac{4 \cdot V_{\text{б}}}{\pi \cdot d^2} \right) \right] \cdot d}{2\sigma_{\text{ме}} \cdot \phi + \left[P_{\text{б}} + \rho_{\text{в}} \cdot g \cdot \left(\frac{4 \cdot V_{\text{б}}}{\pi \cdot d^2} \right) \right]} \right], \text{мм}$$

Тогда объем металла будет составлять

$$C_{\text{тме}} = (S_{\text{бок}} + S_{\text{дно}}) \cdot \delta_{\text{металла}}(d) + S_{\text{крышк}} \cdot \delta_{\text{крышк}}$$

А затраты на металл

$$C_{\text{тме}}(d) := \left[\left[\pi \cdot d \cdot \left(\frac{4 \cdot V_{\text{б}}}{\pi \cdot d^2} \right) + \frac{\pi \cdot d^2}{4} \right] \cdot \delta_{\text{металла}}(d) + \frac{\pi \cdot d^2}{4} \cdot \delta_{\text{крышк}} \right] \cdot C_{\text{ме}}$$

Press F1 for help. AUTO NUM Page 7

Рис. 1.12. Затраты на стоимость металла

Mathcad - [Оптимизация размеров цилиндрического бака.xmcd]

File Edit View Insert Format Tools Symbolics Window Help

Normal Times New Roman Cyr 12 B I U

г) Стоимость изоляции

Примем толщину изоляции $\delta_{\text{изол}} := 30\text{-см}$

Цена изоляции $C_{\text{изол}} := 600 \cdot \frac{\text{руб}}{0.3 \cdot \text{м}^3}$

Затраты на изоляцию при условии ее равномерного нанесения

$$C_{\text{Тизол}} = (V_{\text{изол_бок}} + V_{\text{изол_дно}} + V_{\text{изол_крышк}}) \cdot C_{\text{изол}}$$

$$C_{\text{Тизол}} = \left[h \cdot \delta_{\text{изол}} \cdot \pi \cdot \left(d + \frac{\delta_{\text{изол}}}{2} \right) + \frac{\pi \cdot (d + \delta_{\text{изол}} \cdot 2)^2}{4} \cdot \delta_{\text{изол}} + \frac{\pi \cdot (d + \delta_{\text{изол}} \cdot 2)^2}{4} \cdot \delta_{\text{изол}} \right] \cdot C_{\text{изол}}$$

$$C_{\text{Тизол}}(d) := \left[\left(\frac{4 \cdot V_{\text{б}}}{\pi \cdot d^2} \right) \cdot \delta_{\text{изол}} \cdot \pi \cdot \left(d + \frac{\delta_{\text{изол}}}{2} \right) + \frac{\pi \cdot (d + \delta_{\text{изол}} \cdot 2)^2}{4} \cdot \delta_{\text{изол}} + \frac{\pi \cdot (d + \delta_{\text{изол}} \cdot 2)^2}{4} \cdot \delta_{\text{изол}} \right] \cdot C_{\text{изол}}$$

д) Тепловые потери

Средняя разность температур воды и окружающего воздуха $\Delta t := 30\text{-К}$

Коэффициент теплоотдачи от воды к стенкам бака $\alpha_1 := 500 \frac{\text{Вт}}{\text{м}^2 \cdot \text{К}}$

Коэффициент теплопроводности изоляции $\lambda_{\text{изол}} := 0.056 \frac{\text{Вт}}{\text{м} \cdot \text{К}}$

Коэффициент теплоотдачи от стенок бака к воздуху $\alpha_2 := 15 \frac{\text{Вт}}{\text{м}^2 \cdot \text{К}}$

Тариф на тепло $C_{\text{теп}} := 1000 \frac{\text{руб}}{\text{Гкал}}$

Коэффициент теплопередачи от воды к воздуху:

$$k := \frac{1}{\frac{1}{\alpha_1} + \frac{\delta_{\text{изол}}}{\lambda_{\text{изол}}} + \frac{1}{\alpha_2}} = 0.184 \frac{\text{Вт}}{\text{м}^2 \cdot \text{К}}$$

Тогда тепловые потери можно оценить как

$$C_{\text{Ттеп}}(d) := \left[\pi \cdot (d + \delta_{\text{изол}}) \cdot \left(\frac{4 \cdot V_{\text{б}}}{\pi \cdot d^2} \right) + a \cdot \frac{\pi \cdot d^2}{4} + \frac{\pi \cdot d^2}{4} \right] \cdot k \cdot \Delta t \cdot C_{\text{теп}}$$

Press F1 for help. AUTO NUM Page 7

Рис. 1.13. Затраты на изоляцию и тепловые потери

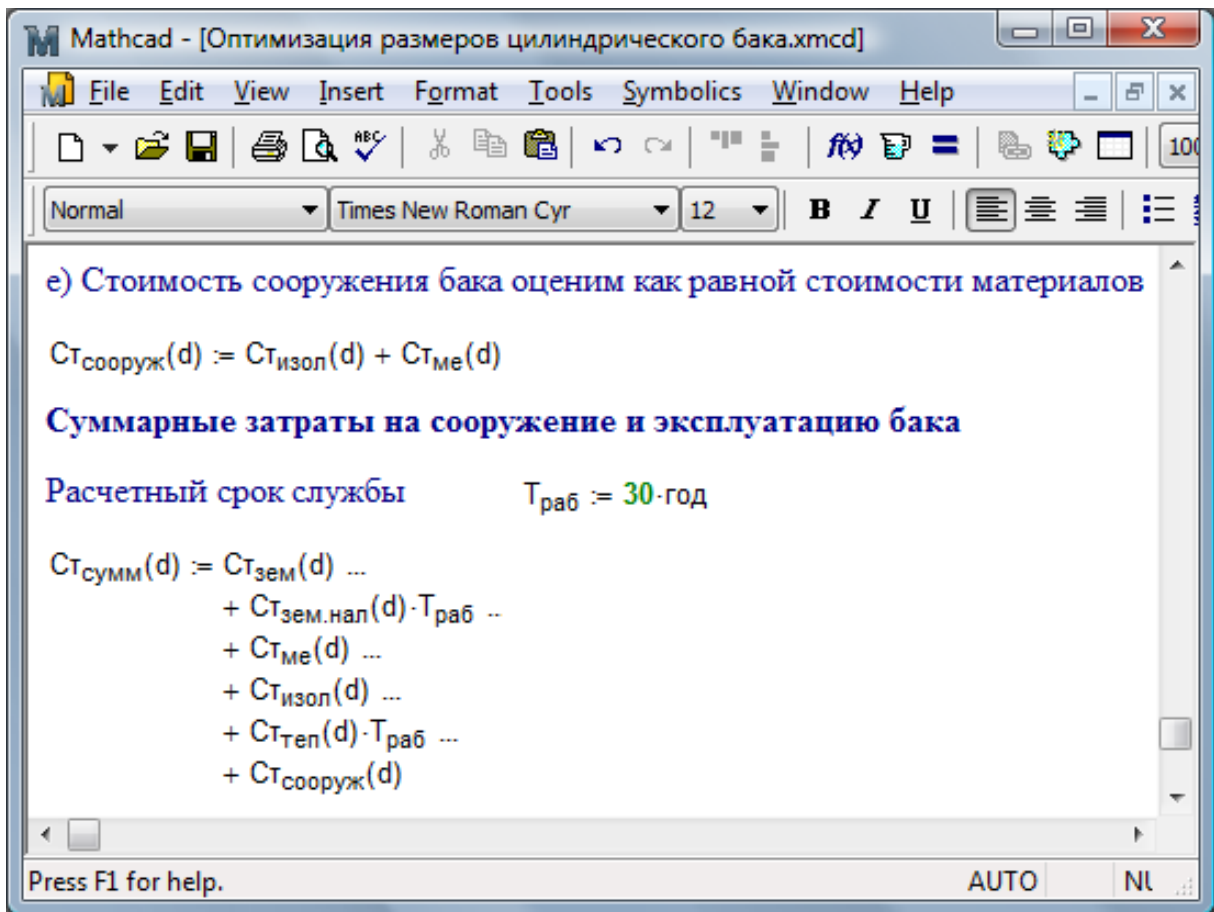


Рис. 1.14. Затраты на сооружение и суммарные затраты

На рис. 1.15 показана графическая зависимость как отдельных видов затрат, так и суммарных. Ступенчатый вид некоторых зависимостей связан с изменением толщины стенок бака, которая кратна 1 мм. На рис. 1.15 также показано численное решение задачи оптимизации, из которого следует, что для данной задачи при таких исходных данных следует использовать бак с высотой практически в 5 раз больше, чем диаметр основания.

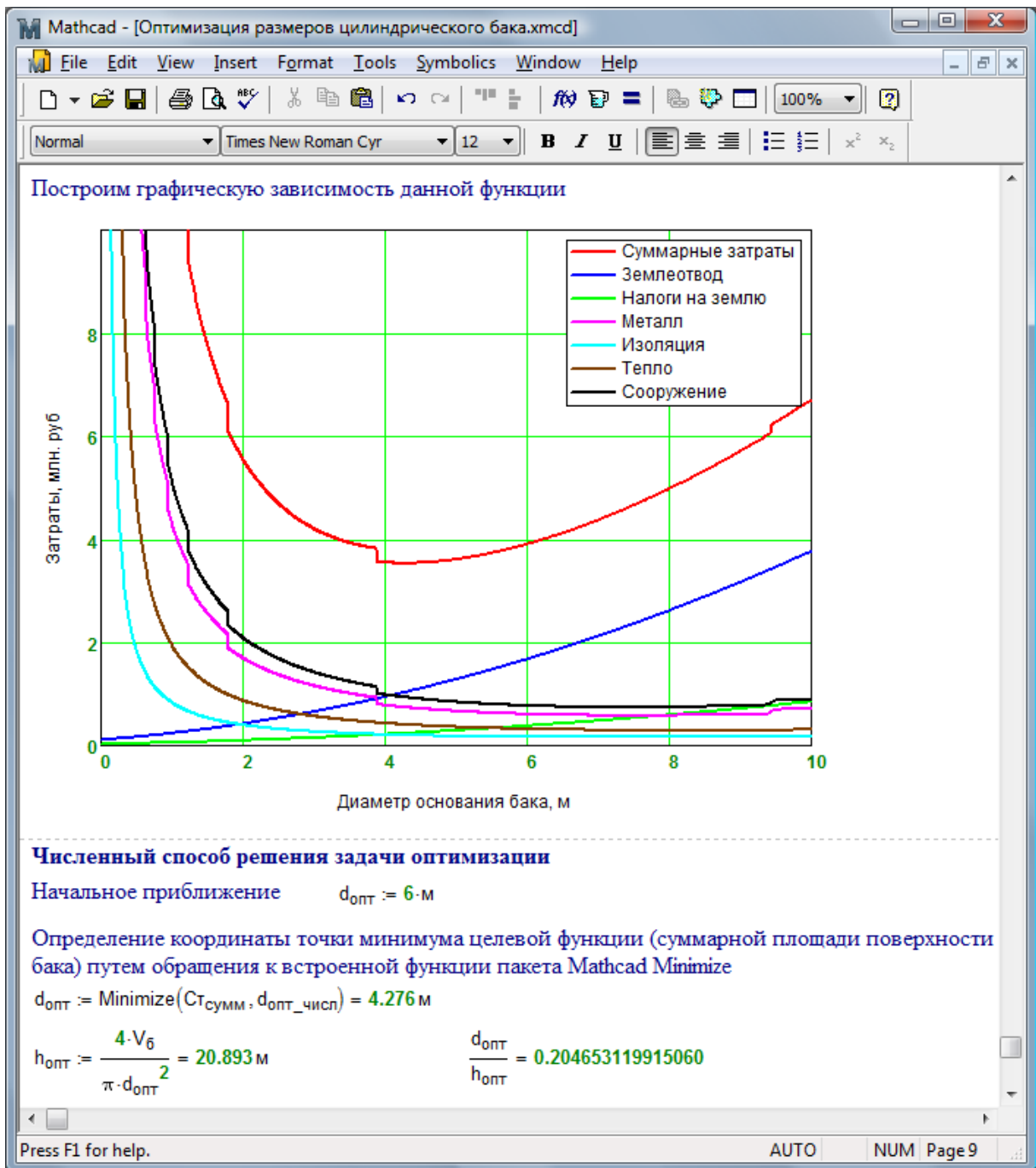


Рис. 1.15. График затрат на сооружение и эксплуатацию бака

На рис. 1.16 показан вариант решения данной задачи при отсутствии затрат на землеотвод и земельный налог. В этом случае вывод об оптимальном соотношении размеров бака совсем другой и следует сооружать бак с диаметром на 11,5% большим, чем высота.

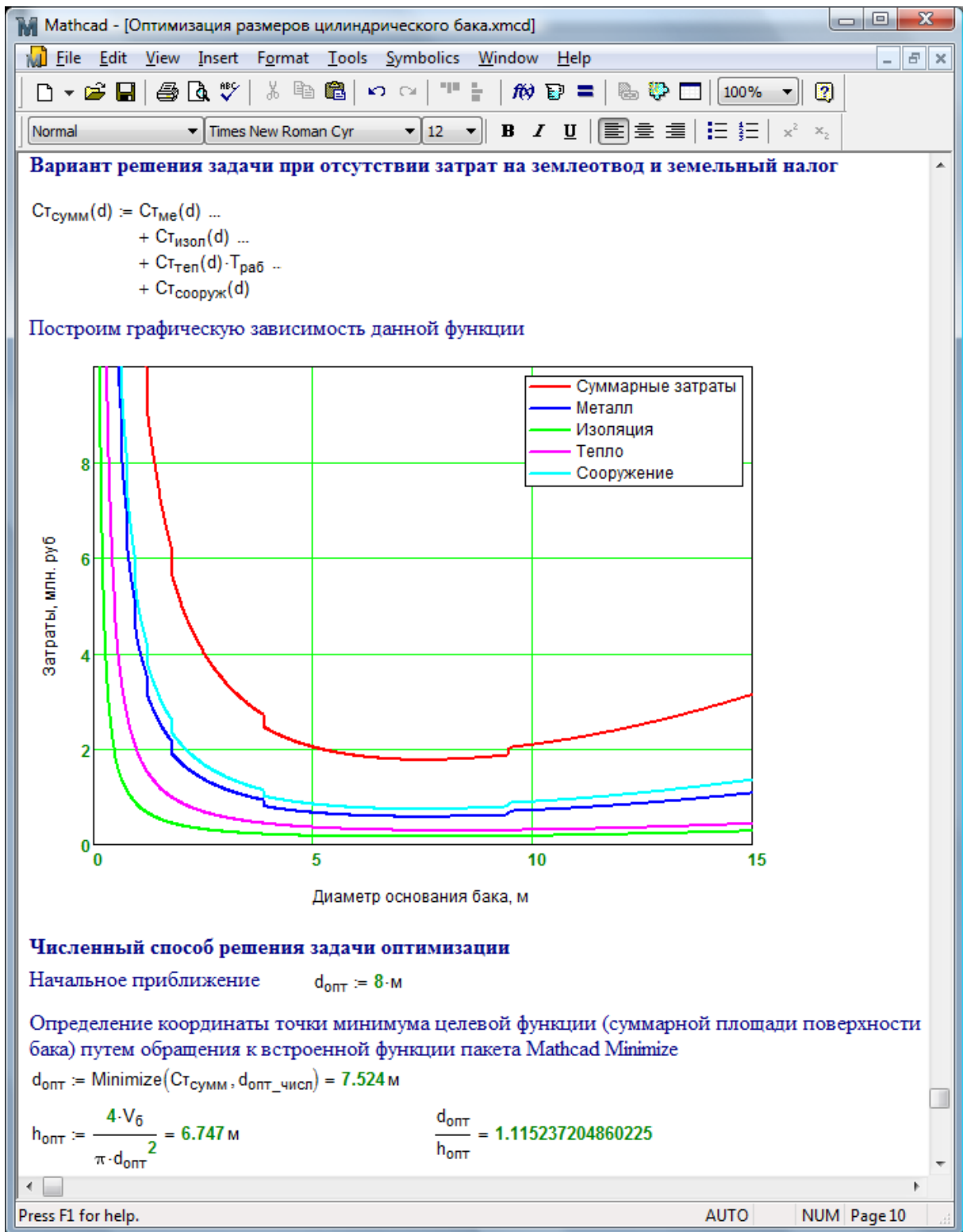


Рис. 1.15. График затрат на сооружение и эксплуатацию бака без землеотвода и налога на землю

Стоит отметить, что в этом варианте оптимизационной задачи применение аналитического способа невозможно. Этому препятствует использование функции *Ceil* пакета Mathcad, которая делает толщину стенки бака кратной 1 мм, что, в свою очередь, приводит к

ступенчатости графической зависимости суммарных затрат от диаметра бака.

1.4. Выводы

В данной главе был рассмотрен пример решения оптимизационной задачи по выбору соотношения размеров бака. Были рассмотрены различные способы проведения оптимизационных расчетов в пакете Mathcad, описаны их достоинства и недостатки.

На основе рассмотрения различных вариантов критериев оптимизации было показано, что решение оптимизационной задачи зависит от выбора целевой функции. При различных критериях оптимизации решения задачи оптимизации могут значительно отличаться.

2. Решение задач водной химии в среде Mathcad с использованием размерных величин

В настоящем разделе будут рассмотрены основы решения задач водной химии в пакете Mathcad. Основной упор будет сделан на использование размерных величин.

2.1. Расчет pH раствора серной кислоты

На рис. 2.1 показан документ Mathcad с примером расчета pH раствора серной кислоты. В начале документа производится импорт русифицированных размерностей, что связано с их отсутствием по умолчанию в английской версии Mathcad. Далее производится ввод заданной концентрации серной кислоты с указанием ее размерности, рассчитывается концентрация ионов H^+ и определяется значение pH. В выражении для pH концентрация ионов H^+ делится на размерность моль/дм³. В противном случае пакет Mathcad выдаст ошибку о попытке взятия логарифма от размерной величины – подлогарифмическое выражение должно быть безразмерным.

Решение задач водной химии в среде Mathcad с использованием размерных величин

Подключение русских размерностей

Подключение русских размерностей:

Ссылка: D:\OKApp\Common\watersteampro.mcd

Подключение русских размерностей

Задача №1. Расчет pH раствора серной кислоты при заданной концентрации серной кислоты

Исходные данные: $C_{\text{H}_2\text{SO}_4} := 1 \cdot \frac{\text{ммоль}}{\text{л}} = 1 \frac{\text{моль}}{\text{дм}^3}$

Концентрация ионов H^+ $C_{\text{H}^+} := 2 \cdot C_{\text{H}_2\text{SO}_4} = 0.002 \frac{\text{моль}}{\text{дм}^3}$

pH раствора $\text{pH} := -\log \left(\frac{C_{\text{H}^+}}{\frac{\text{моль}}{\text{дм}^3}} \right) = 2.699$

Нажмите F1, чтобы открыть справку. АВТО NI

Рис. 2.1. Расчет pH раствора серной кислоты

2.2. Расчет pH раствора серной кислоты с использованием ионной силы раствора

На рис. 2.2 показан документ Mathcad с примером расчета pH раствора серной кислоты, аналогичный представленному на рис. 2.1. однако при определении pH учитывается активность ионов водорода.

Mathcad - [Решение задач водной химии в среде Mathcad с использ...

Файл П_р_а_в_к_а В_и_д В_с_т_а_в_к_а Ф_о_р_м_а_т С_е_р_в_и_с С_и_м_в_о_л_ь_н_ы_е_ _о_п_е_р_а_ц_и_и
О_к_н_о С_п_р_а_в_к_а

Normal Times New Roman Cyr 12 **B** *I* U

Задача №2. Расчет pH раствора серной кислоты при заданной концентрации серной кислоты с использованием ионной силы раствора

Исходные данные:

$$C_{\text{H}_2\text{SO}_4} = 1 \frac{\text{ммоль}}{\text{дм}^3}$$

Концентрация ионов H⁺

$$C_{\text{H}^+} = 2 \frac{\text{ммоль}}{\text{дм}^3}$$

Концентрация ионов SO₄²⁻

$$C_{\text{SO}_4^{2-}} := C_{\text{H}_2\text{SO}_4} = 1 \frac{\text{ммоль}}{\text{дм}^3}$$

Ионная сила раствора

$$\mu := \frac{1}{2} \cdot (C_{\text{H}^+} \cdot 1^2 + C_{\text{SO}_4^{2-}} \cdot 2^2) = 3 \frac{\text{ммоль}}{\text{дм}^3}$$

Коэффициент активности однозарядных ионов

$$f_1 := 10^{-0.510 \cdot 1^2 \cdot \sqrt{\frac{\mu}{\frac{\text{моль}}{\text{дм}^3}}}} = 0.941$$

Активность ионов H⁺

$$a_{\text{H}^+} := f_1 \cdot C_{\text{H}^+} = 1.882 \frac{\text{ммоль}}{\text{дм}^3}$$

pH раствора

$$\text{pH} := -\log\left(\frac{a_{\text{H}^+}}{\frac{\text{моль}}{\text{дм}^3}}\right) = 2.725$$

Нажмите F1, чтобы открыть справку. АВТО N

Рис. 2.2. Расчет pH раствора серной кислоты с использованием ионной силы раствора

2.3. Углекислотное равновесие: вывод выражений для зависимости существования форм угольной кислоты от pH

На рис. 2.3-2.4 показаны расчетные формулы в Mathcad для вывода с помощью символьной математики функциональных зависимостей долей различных форм существования угольной кислоты в растворе от концентрации ионов H^+ и значений констант диссоциации по первой и второй ступеням.

Задача №3. Углекислотное равновесие: вывод выражений для зависимости существования форм угольной кислоты от pH

Константа диссоциации угольной кислоты по первой ступени $K_1 = \frac{C_{H^+} \cdot C_{HCO_3^-}}{C_{H_2CO_3}}$

Константа диссоциации угольной кислоты по второй ступени $K_2 = \frac{C_{H^+} \cdot C_{CO_3^{2-}}}{C_{HCO_3^-}}$

Общая концентрация различных форм угольной кислоты $C_{общ} = C_{H_2CO_3} + C_{HCO_3^-} + C_{CO_3^{2-}}$

Требуется найти выражения зависимостей долей различных форм угольной кислоты от pH раствора, т.е. требуется определить следующие величины:

$$x_{H_2CO_3} = \frac{C_{H_2CO_3}}{C_{общ}} = \frac{C_{H_2CO_3}}{(C_{H_2CO_3} + C_{HCO_3^-} + C_{CO_3^{2-}})}$$

$$x_{HCO_3^-} = \frac{C_{HCO_3^-}}{C_{общ}} = \frac{C_{HCO_3^-}}{(C_{H_2CO_3} + C_{HCO_3^-} + C_{CO_3^{2-}})}$$

$$x_{CO_3^{2-}} = \frac{C_{CO_3^{2-}}}{C_{общ}} = \frac{C_{CO_3^{2-}}}{(C_{H_2CO_3} + C_{HCO_3^-} + C_{CO_3^{2-}})}$$

Вспользуемся символьной математикой пакета Mathcad

$C_{H^+} := C_{H^+}$ $K_1 := K_1$ $K_2 := K_2$

$$C_{общ} = C_{H_2CO_3} + C_{HCO_3^-} + C_{CO_3^{2-}}$$

substitute, $C_{H_2CO_3} = \frac{C_{H^+} \cdot C_{HCO_3^-}}{K_1}$

substitute, $C_{HCO_3^-} = \frac{C_{H^+} \cdot C_{CO_3^{2-}}}{K_2} \rightarrow \frac{K_1 \cdot K_2 \cdot C_{общ}}{C_{H^+}^2 + K_1 \cdot C_{H^+} + K_1 \cdot K_2}$

solve, $C_{CO_3^{2-}}$

Т.е. можем записать, что

$$x_{CO_3^{2-}} = \frac{C_{CO_3^{2-}}}{C_{общ}} = \frac{\frac{K_1 \cdot K_2 \cdot C_{общ}}{C_{H^+}^2 + K_1 \cdot C_{H^+} + K_1 \cdot K_2}}{C_{общ}} = \frac{K_1 \cdot K_2}{C_{H^+}^2 + K_1 \cdot C_{H^+} + K_1 \cdot K_2}$$

Нажмите F1, чтобы открыть справку. АВТО NUM Страница 2

Рис. 2.3. Вывод выражения для доли карбонат-ионов

Mathcad - [Решение задач водной химии в среде Mathcad с использованием размерных величин...]

Файл Правка Вид Вставка Формат Сервис Символьные операции Окно Справка

Normal Times New Roman Cyr 12 B I U

Аналогично для остальных форм угольной кислоты:

$$C_{\text{общ}} = C_{\text{H}_2\text{CO}_3} + C_{\text{HCO}_3^-} + C_{\text{CO}_3^{2-}}$$

$$\begin{array}{l} \text{substitute, } C_{\text{H}_2\text{CO}_3} = \frac{C_{\text{H}^+} \cdot C_{\text{HCO}_3^-}}{K_1} \\ \text{substitute, } C_{\text{CO}_3^{2-}} = \frac{K_2 \cdot C_{\text{HCO}_3^-}}{C_{\text{H}^+}} \rightarrow \frac{C_{\text{H}^+} \cdot K_1 \cdot C_{\text{общ}}}{C_{\text{H}^+}^2 + K_1 \cdot C_{\text{H}^+} + K_1 \cdot K_2} \\ \text{solve, } C_{\text{HCO}_3^-} \end{array}$$

$$x_{\text{HCO}_3^-} = \frac{C_{\text{HCO}_3^-}}{C_{\text{общ}}} = \frac{\frac{C_{\text{H}^+} \cdot K_1 \cdot C_{\text{общ}}}{C_{\text{H}^+}^2 + K_1 \cdot C_{\text{H}^+} + K_1 \cdot K_2}}{C_{\text{общ}}} = \frac{C_{\text{H}^+} \cdot K_1}{C_{\text{H}^+}^2 + K_1 \cdot C_{\text{H}^+} + K_1 \cdot K_2}$$

Из выражения, что сумма долей всех форм угольной кислоты должна быть равна 1 получим:

$$x_{\text{H}_2\text{CO}_3} = 1 - x_{\text{HCO}_3^-} - x_{\text{CO}_3^{2-}} = 1 - \frac{C_{\text{H}^+} \cdot K_1}{C_{\text{H}^+}^2 + K_1 \cdot C_{\text{H}^+} + K_1 \cdot K_2} - \frac{K_1 \cdot K_2}{C_{\text{H}^+}^2 + K_1 \cdot C_{\text{H}^+} + K_1 \cdot K_2}$$

$$x_{\text{H}_2\text{CO}_3} = \frac{C_{\text{H}^+}^2}{(C_{\text{H}^+}^2 + K_1 \cdot C_{\text{H}^+} + K_1 \cdot K_2)}$$

Нажмите F1, чтобы открыть справку. АВТО NUM Страница 2

Рис. 2.4. Вывод выражения для доли гидрокарбонат-ионов и свободной углекислоты

На основе полученных выражений в документе, представленном на рис. 2.5 составлены функциональные зависимости и построены их графики.

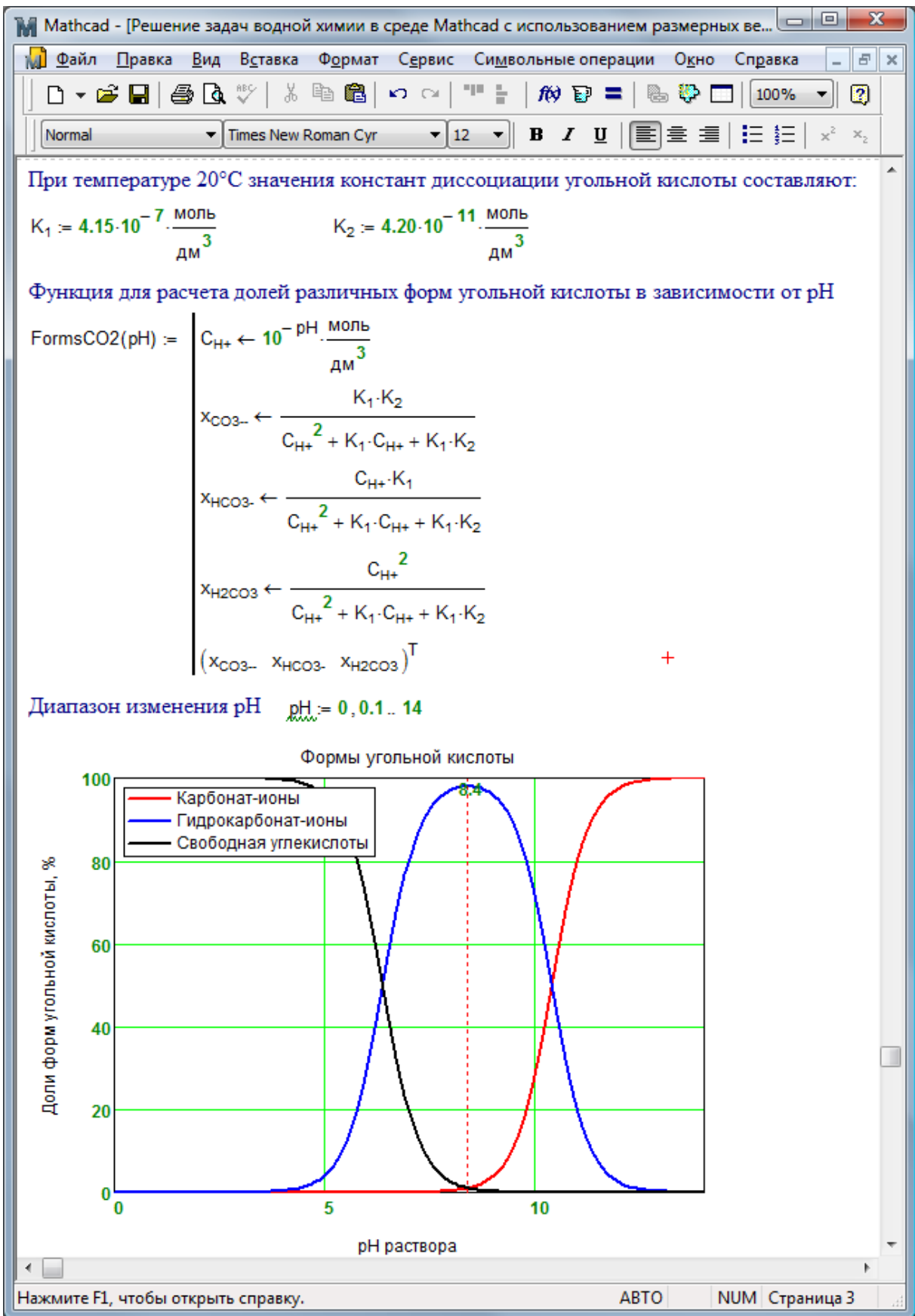


Рис. 2.5. Графики существования различных форм угольной кислоты в зависимости от pH раствора

Значение pH раствора, при котором достигается максимальное значение доли концентрации гидрокарбонат-ионов, можно определить с помощью встроенной функции Maximize пакета Mathcad, как это представлено на рис. 2.6.

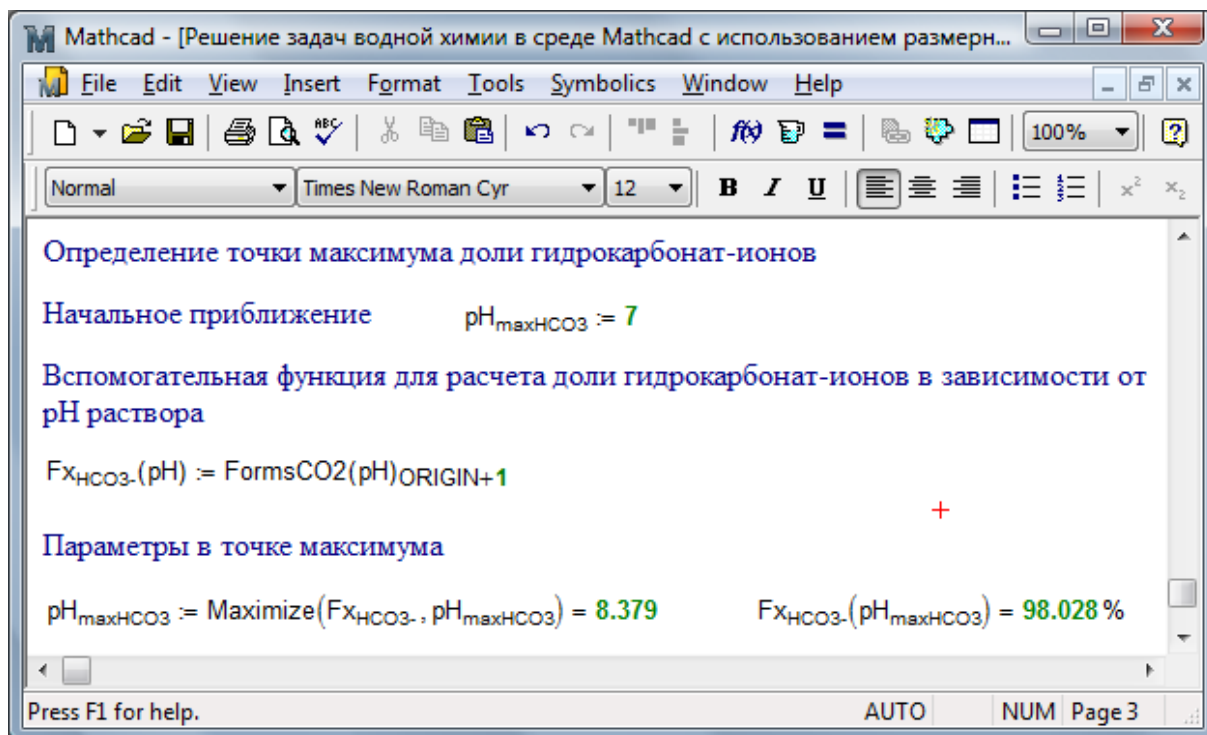


Рис. 2.6. Определение точки максимума концентрации гидрокарбонат-ионов

3. Константное обеспечение расчетов химико-технологических процессов

Для решения различных задач оптимизации и моделирования процессов водоподготовки совершенно необходимо знание значений различных физико-химических констант. Среди них можно отметить такие величины как, ионное произведение воды, константы диссоциации различных веществ и т.д.

Теплофизические параметры и ионное произведение воды можно определять с помощью пакета WaterSteamPro, доступного для скачивания с Интернет-сайта <http://www.wsp.ru>. На рис. 3.1 показан документ Mathcad с примером расчета ионного произведения воды.

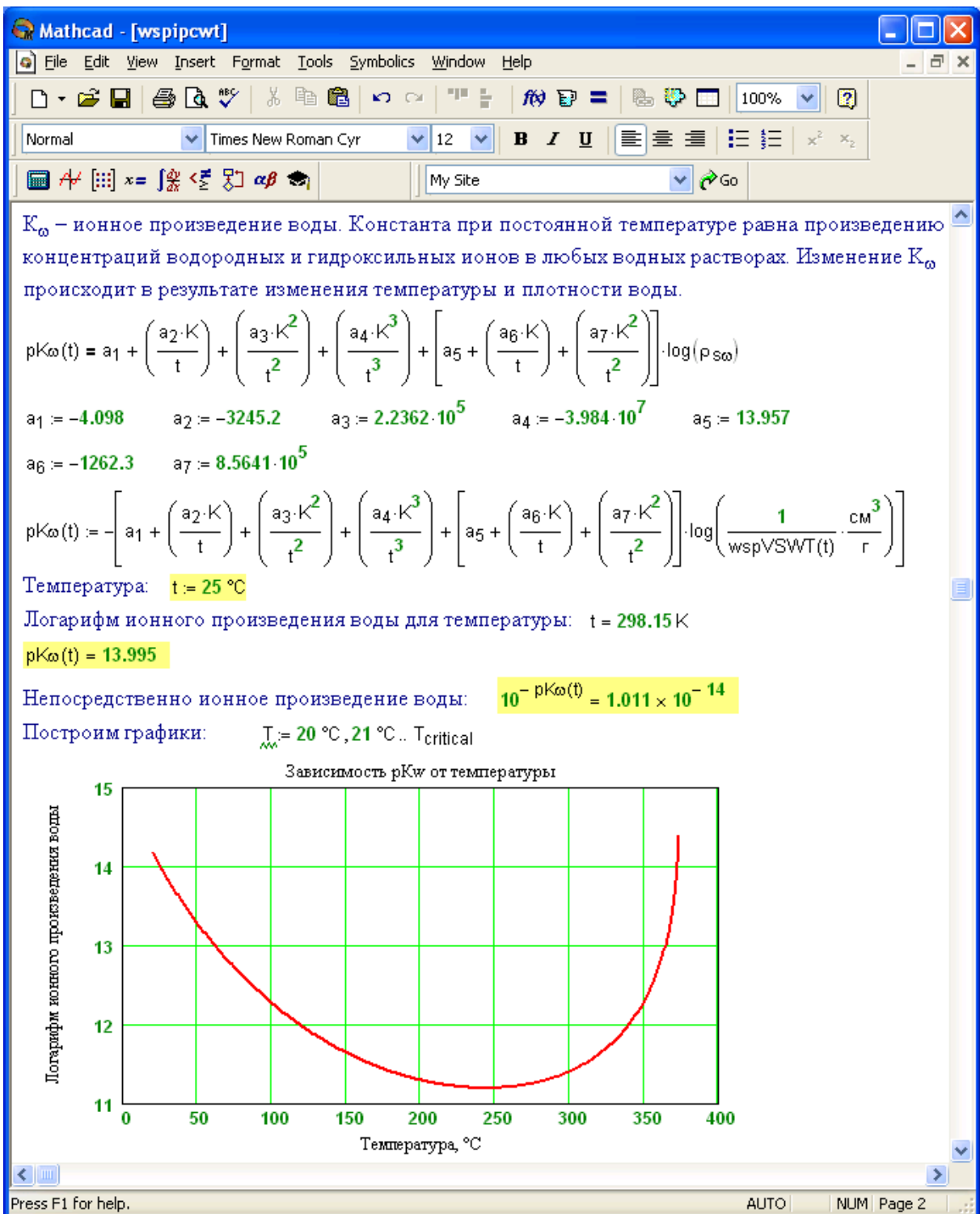


Рис. 3.1. Пример расчета ионного произведения воды с помощью пакета WaterSteamPro

Для расчета некоторых других величин можно разработать отдельный документ Mathcad, который будет содержать набор формул для расчета и который можно будет подключать к другим документам с помощью команды меню Insert/Reference. На рис. 3.2 показан пример организации такого файла, в который для начала занесем функцию

расчета распределения форм угольной кислоты в водном растворе в зависимости от pH.

Mathcad - [Константное обеспечение расчетов химико-технологических процессов.xmcd]

File Edit View Insert Format Tools Symbolics Window Help

Normal Times New Roman Cyr 12 B I U

Константное обеспечение расчетов химико-технологических процессов

Подключение русских размерностей

Подключение русских размерностей:
 Reference:D:\OKApp\Common\watersteampro.mcd

Подключение русских размерностей

При температуре 20°C значения констант диссоциации угольной кислоты составляют:

$$K_1 := 4.15 \cdot 10^{-7} \frac{\text{моль}}{\text{дм}^3} \quad K_2 := 4.20 \cdot 10^{-11} \frac{\text{моль}}{\text{дм}^3}$$

Функция для расчета долей различных форм угольной кислоты в зависимости от pH

$$\text{FormsCO}_2(\text{pH}) := \begin{pmatrix} C_{\text{H}^+} \leftarrow 10^{-\text{pH}} \frac{\text{моль}}{\text{дм}^3} \\ X_{\text{CO}_3^{2-}} \leftarrow \frac{K_1 \cdot K_2}{C_{\text{H}^+}^2 + K_1 \cdot C_{\text{H}^+} + K_1 \cdot K_2} \\ X_{\text{HCO}_3^-} \leftarrow \frac{C_{\text{H}^+} \cdot K_1}{C_{\text{H}^+}^2 + K_1 \cdot C_{\text{H}^+} + K_1 \cdot K_2} \\ X_{\text{H}_2\text{CO}_3} \leftarrow \frac{C_{\text{H}^+}^2}{C_{\text{H}^+}^2 + K_1 \cdot C_{\text{H}^+} + K_1 \cdot K_2} \\ (X_{\text{CO}_3^{2-}} \quad X_{\text{HCO}_3^-} \quad X_{\text{H}_2\text{CO}_3})^T \end{pmatrix}$$

Press F1 for help. AUTO NUM Page 1

Рис. 3.2. Пример создания документа с константами

Функции из документа с константным обеспечением могут быть затем использованы в других расчетах. Примеры приведены в следующих главах.

Мощный математический аппарат пакета Mathcad позволяет очень легко создавать вспомогательные функции для расчета различных справочных данных. Например, интерполяционные

функции позволяют легко создать функции для расчета констант диссоциации угольной кислоты в зависимости от температуры (см. рис. 3.3).

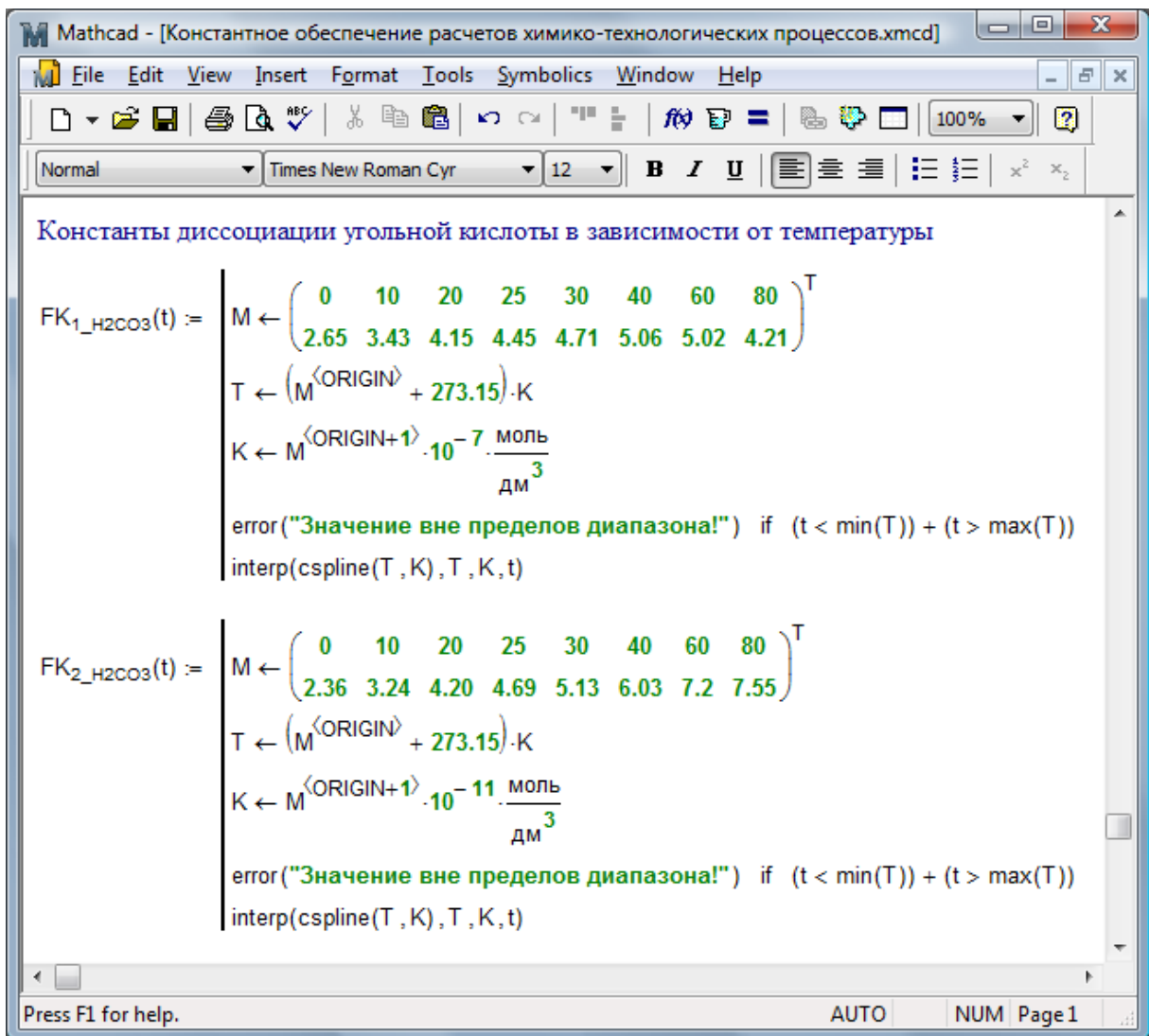


Рис. 3.3. Использование интерполяции для расчета констант диссоциации угольной кислоты в зависимости от температуры

Пример создания других справочных функций показан на рис. 3.4, на котором используется не интерполяция, а расчет с помощью аппроксимирующих зависимостей.

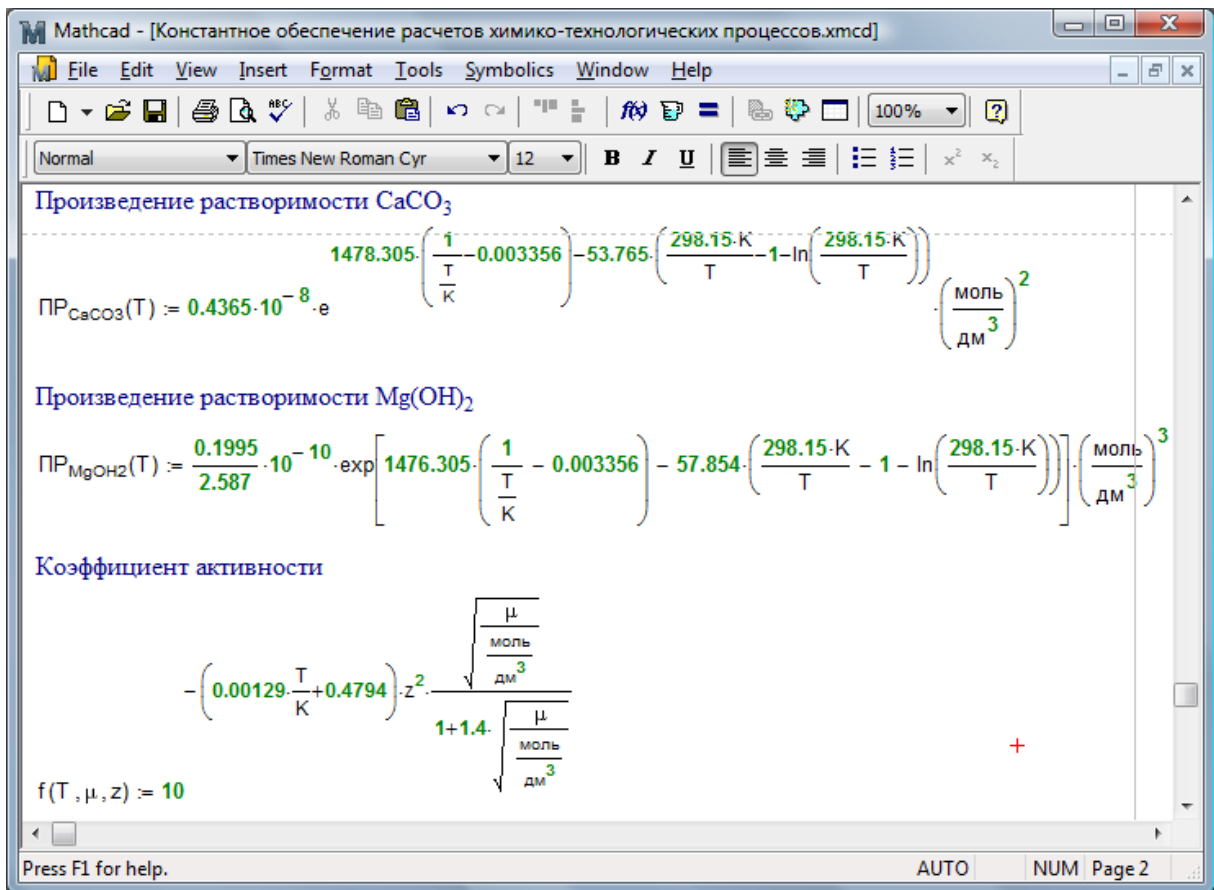


Рис. 3.4. Дополнительные справочные функции

4. Определение равновесных концентраций в водных растворах

4.1. Определение pH раствора угольной кислоты

Разберем обратную задачу относительно п. 2.3 о растворе угольной кислоты. Исходными данными будут не значение pH раствора, а общее содержание уголекислоты, добавляемое в воду. Необходимо определить значение pH раствора и распределение форм угольной кислоты.

На рис. 4.1 показаны исходные данные для расчета. В документе дополнительно используется документ со вспомогательными функциями из главы 3 путем импорта содержимого файла через меню Reference пакета Mathcad.

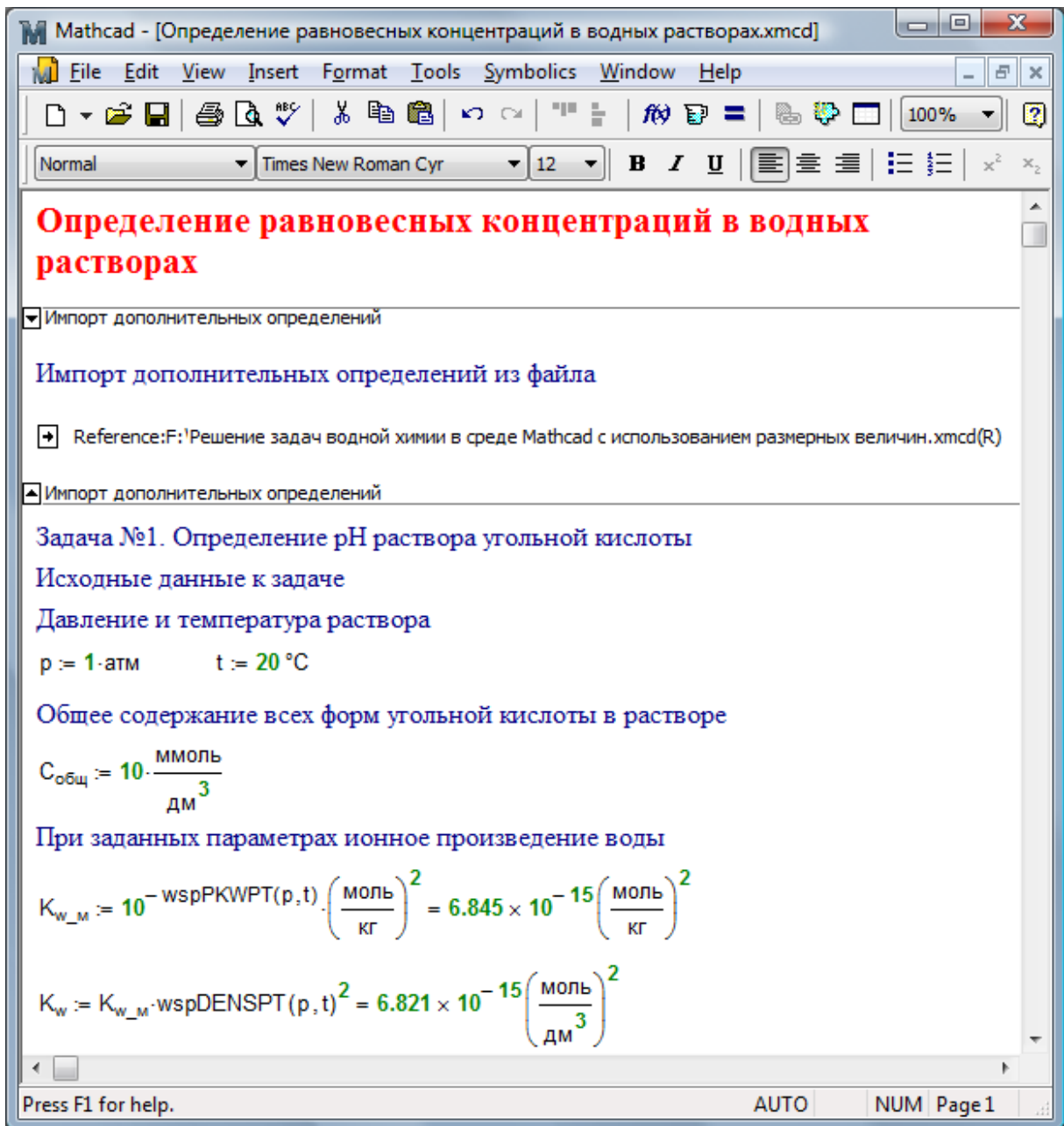


Рис. 4.1. Исходные данные для расчета pH раствора угольной кислоты

Прямое выражение для определения pH раствора в зависимости от общего содержания угольной кислоты в данном случае определить аналитически очень сложно. Гораздо проще решить данную задачу с помощью численного метода.

Для решения задачи численным методом понадобится составить уравнения, описывающие условия равновесия в растворе и задать начальные приближения. Решение таких задач удобно производить с помощью блока Given...Find пакета Mathcad. На рис. 4.2 показан документ Mathcad с таким блоком для решения задачи определения pH раствора угольной кислоты. Внутри блока Given...Find записано пять

уравнений, характеризующих равновесие в рассматриваемом растворе: два уравнения для констант диссоциации; уравнение связывающее общее количество всех форм угольной кислоты; уравнение электронейтральности раствора и уравнение для ионного произведения воды. Запись величин в квадратных скобках означает равновесные концентрации и вводится путем нажатия комбинации клавиш Ctrl-Shift-J. В качестве начальных приближений используются наиболее простые зависимости – концентрации ионов H^+ и OH^- соответствуют чистой воде без примесей, а распределение по формам угольной кислоты равномерно.

Результаты, полученные из расчетов на рис. 4.2 не подходят по физическому смыслу задачи – отрицательные значения концентраций недопустимы. Для решения данной проблемы можно сделать следующие шаги:

- изменить начальные приближения, что, однако, не приведет к правильному решению в данном случае;
- добавить дополнительные неравенства в блок Given...Find.

На рис. 4.3 представлен несколько модифицированный расчет, учитывающий оба из вышеупомянутых шагов.

Mathcad - [Определение равновесных концентраций в водных растворах.xmcd]

File Edit View Insert Format Tools Symbolics Window Help

Normal Times New Roman Cyr 12 **B** *I* U 100%

Начальные приближения

$$[H^+] := \sqrt{K_w} = 8.259 \times 10^{-8} \frac{\text{моль}}{\text{дм}^3} \quad [OH^-] := \sqrt{K_w} = 8.259 \times 10^{-8} \frac{\text{моль}}{\text{дм}^3}$$

$$[H_2CO_3] := \frac{C_{\text{общ}}}{3} = 3.333 \frac{\text{ммоль}}{\text{дм}^3}$$

$$[HCO_3^-] := \frac{C_{\text{общ}}}{3} = 3.333 \frac{\text{ммоль}}{\text{дм}^3}$$

$$[CO_3^{2-}] := \frac{C_{\text{общ}}}{3} = 3.333 \frac{\text{ммоль}}{\text{дм}^3}$$

Составление системы уравнений

Given

$$K_1 = \frac{[H^+] \cdot [HCO_3^-]}{[H_2CO_3]}$$

$$K_2 = \frac{[H^+] \cdot [CO_3^{2-}]}{[HCO_3^-]}$$

$$[H_2CO_3] + [HCO_3^-] + [CO_3^{2-}] = C_{\text{общ}}$$

$$[H^+] = [OH^-] + 2 \cdot [CO_3^{2-}] + [HCO_3^-]$$

$$[H^+] \cdot [OH^-] = K_w$$

$$\begin{pmatrix} [H^+] \\ [OH^-] \\ [H_2CO_3] \\ [HCO_3^-] \\ [CO_3^{2-}] \end{pmatrix} := \text{Find}([H^+], [OH^-], [H_2CO_3], [HCO_3^-], [CO_3^{2-}]) = \begin{pmatrix} -8.434E-011 \\ -8.087E-005 \\ -4.050E-006 \\ 1.993E-002 \\ -9.923E-003 \end{pmatrix} \frac{\text{моль}}{\text{дм}^3}$$

pH := $-\log\left(\frac{[H^+]}{\frac{\text{моль}}{\text{дм}^3}}\right) = 10.074 - 1.364i$

Press F1 for help. AUTO NUM Паг

Рис. 4.2. Использование блока Given...Find для определения pH раствора угольной кислоты

Mathcad - [Определение равновесных концентраций в водных растворах.xmcd]

File Edit View Insert Format Tools Symbolics Window Help

Normal Times New Roman Cyr 12 B I U

Начальные приближения

$$[H^+] := \sqrt{K_w} = 8.259 \times 10^{-8} \frac{\text{моль}}{\text{дм}^3} \quad [OH^-] := \sqrt{K_w} = 8.259 \times 10^{-8} \frac{\text{моль}}{\text{дм}^3}$$

$$\text{pH} := -\log\left(\frac{[H^+]}{\frac{\text{моль}}{\text{дм}^3}}\right) \quad \text{pH} = 7.083$$

$$[H_2CO_3] := C_{\text{общ}} \cdot \text{FormsCO2}(\text{pH})_{\text{ORIGIN}+2} = 1.659 \frac{\text{ммоль}}{\text{дм}^3}$$

$$[HCO_3^-] := C_{\text{общ}} \cdot \text{FormsCO2}(\text{pH})_{\text{ORIGIN}+1} = 8.337 \frac{\text{ммоль}}{\text{дм}^3}$$

$$[CO_3^{2-}] := C_{\text{общ}} \cdot \text{FormsCO2}(\text{pH})_{\text{ORIGIN}} = 0.004 \frac{\text{ммоль}}{\text{дм}^3} \quad +$$

Составление системы уравнений

Given

$$K_1 = \frac{[H^+] \cdot [HCO_3^-]}{[H_2CO_3]} \quad [H^+] > 0$$

$$K_2 = \frac{[H^+] \cdot [CO_3^{2-}]}{[HCO_3^-]} \quad [OH^-] > 0$$

$$[H_2CO_3] + [HCO_3^-] + [CO_3^{2-}] = C_{\text{общ}} \quad [H_2CO_3] > 0$$

$$[H^+] = [OH^-] + 2 \cdot [CO_3^{2-}] + [HCO_3^-] \quad [HCO_3^-] > 0$$

$$[H^+] \cdot [OH^-] = K_w \quad [CO_3^{2-}] > 0$$

$$\begin{pmatrix} [H^+] \\ [OH^-] \\ [H_2CO_3] \\ [HCO_3^-] \\ [CO_3^{2-}] \end{pmatrix} := \text{Find}([H^+], [OH^-], [H_2CO_3], [HCO_3^-], [CO_3^{2-}]) = \begin{pmatrix} 6.421E-005 \\ 1.062E-010 \\ 9.936E-003 \\ 6.421E-005 \\ 4.200E-011 \end{pmatrix} \frac{\text{моль}}{\text{дм}^3}$$

$$\text{pH} := -\log\left(\frac{[H^+]}{\frac{\text{моль}}{\text{дм}^3}}\right) = 4.192$$

Press F1 for help. AUTO NUM P:

Рис. 4.3. Использование модифицированного блока Given...Find для определения pH раствора угольной кислоты

Каждые результаты расчетов должно быть проверены. На рис. 4.4 показаны значения левых и правых частей исходных уравнений, описывающих равновесное состояние раствора угольной кислоты. Значения совпадают, вследствие чего можно сделать вывод о правильном решении задачи.

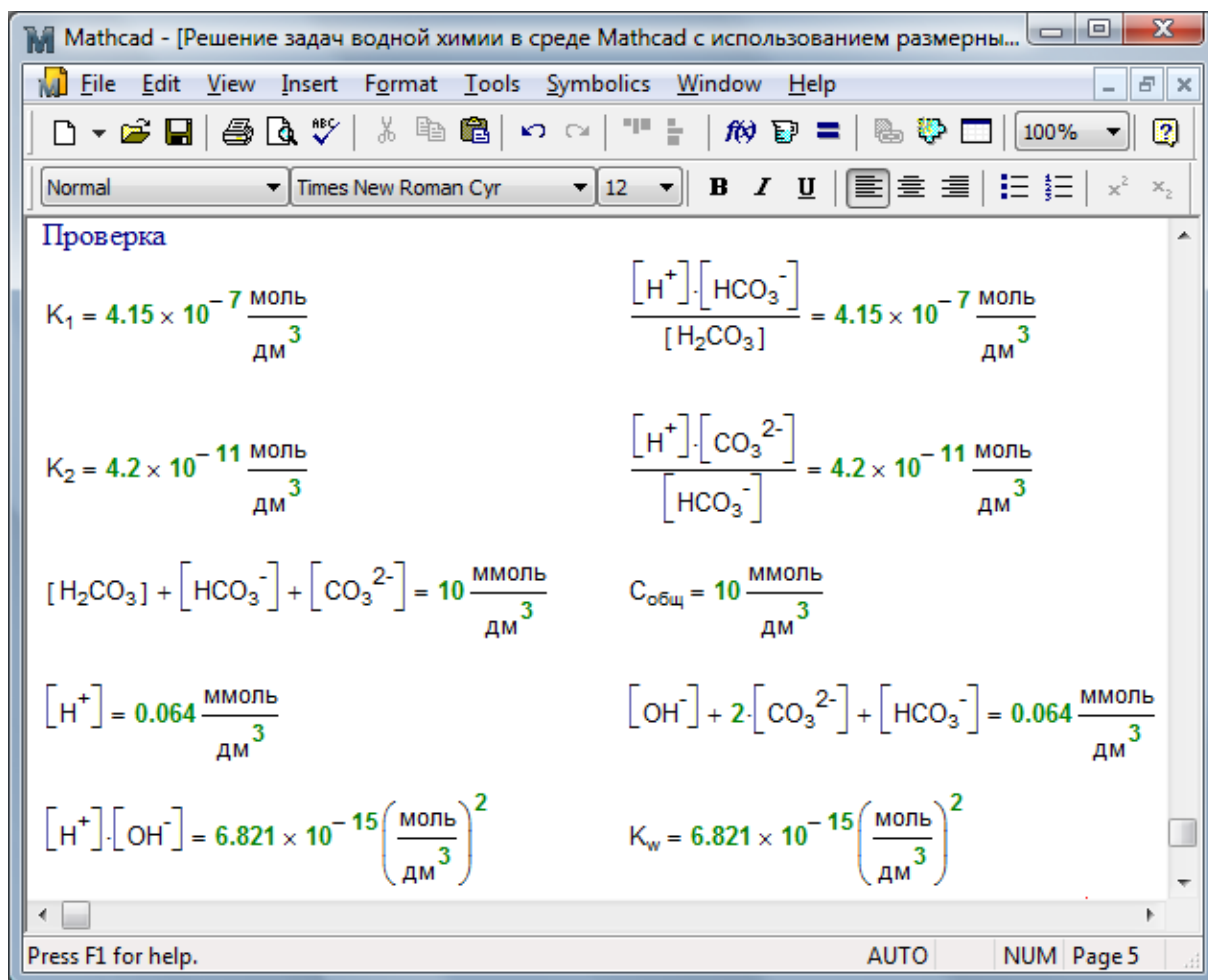


Рис. 4.4. Проверка результатов расчета

Построим графическую зависимость pH водного раствора угольной кислоты от общего содержания всех форм угольной кислоты. На рис. 4.5 показаны расчетные формулы, а на рис. 4.6 – графические зависимости pH и концентраций составляющих раствора.

Mathcad - [Определение равновесных концентраций в водных растворах.xmcd]

File Edit View Insert Format Tools Symbolics Window Help

Normal Times New Roman Cyr 12 B I U

Дополнительные выражения для построения графической зависимости рН водного раствора угольной кислоты от общего содержания всех форм угольной кислоты

Given

$$K_1 = \frac{[H^+][HCO_3^-]}{[H_2CO_3]} \quad [H^+] > 0$$

$$K_2 = \frac{[H^+][CO_3^{2-}]}{[HCO_3^-]} \quad [OH^-] > 0$$

$$[H_2CO_3] + [HCO_3^-] + [CO_3^{2-}] = C_{\text{общ}} \quad [H_2CO_3] > 0$$

$$[H^+] = [OH^-] + 2[CO_3^{2-}] + [HCO_3^-] \quad [HCO_3^-] > 0$$

$$[H^+][OH^-] = K_w \quad [CO_3^{2-}] > 0$$

Состав(C_{общ}) := Find([H⁺],[OH⁻],[H₂CO₃],[HCO₃⁻],[CO₃²⁻])

$$F_{\text{pH}}(C_{\text{общ}}) := -\log\left(\frac{\text{Состав}(C_{\text{общ}})\text{ORIGIN}}{\frac{\text{моль}}{\text{дм}^3}}\right)$$

$$C_{\text{общ}} := 0.1 \cdot \frac{\text{ммоль}}{\text{дм}^3}, 0.12 \cdot \frac{\text{ммоль}}{\text{дм}^3} \dots 10 \cdot \frac{\text{ммоль}}{\text{дм}^3}$$

Press F1 for help. AUTO NUM Page 2

Рис. 4.5. Расчетные формулы для построения графической зависимости рН водного раствора угольной кислоты от общего содержания всех форм угольной кислоты

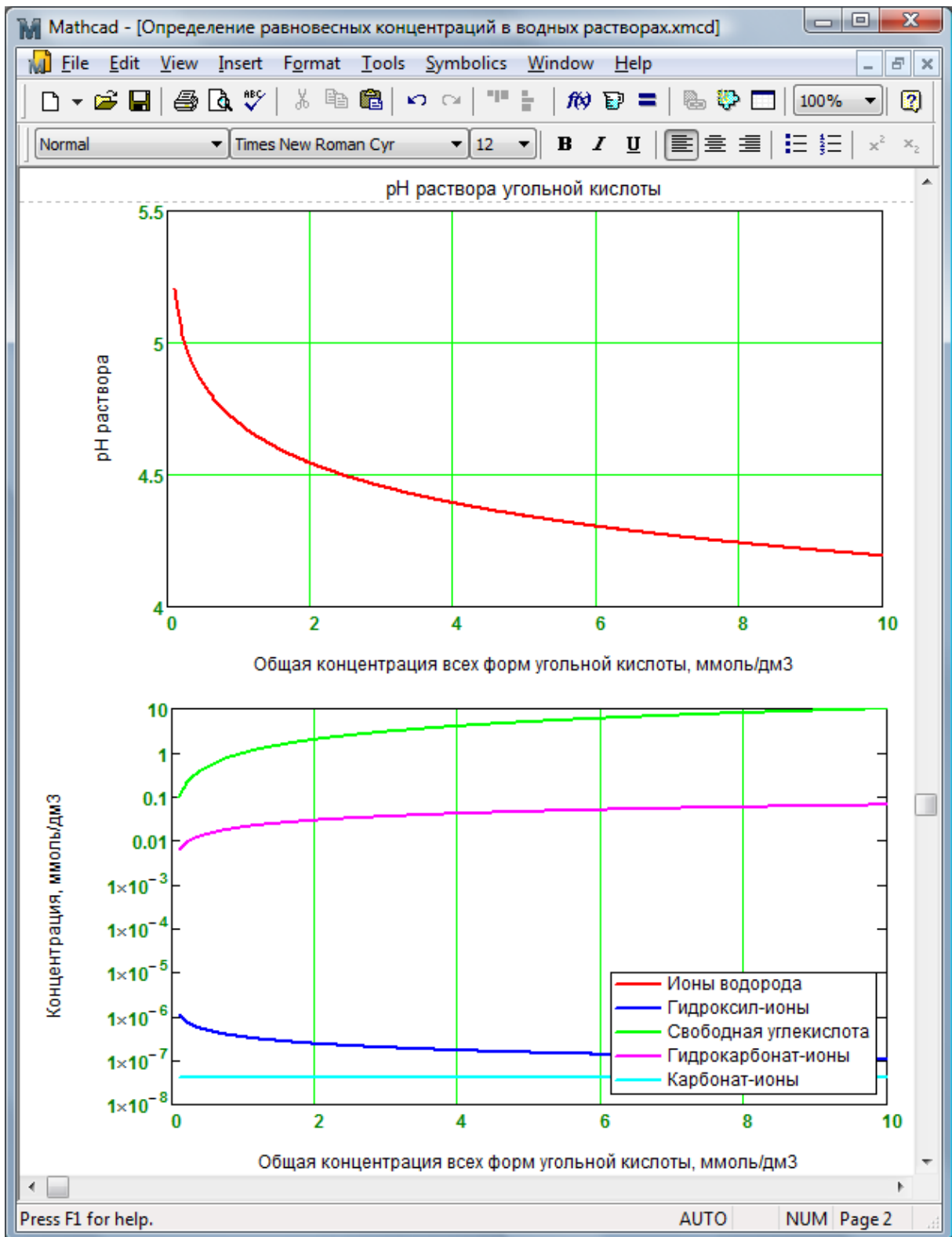


Рис. 4.6. Графическая зависимость pH водного раствора угольной кислоты от общего содержания всех форм угольной кислоты

4.2. Определение pH раствора Na_2CO_3

Усложним несколько задание и разберем задачу об определении pH раствора Na_2CO_3 . На рис. 4.7 показан расчет, аналогичный представленному на рис. 4.3.

Mathcad - [Определение равновесных концентраций в водных растворах.xmcd]

Файл Правка Вид Вставка Формат Сервис Символьные операции Окно Справка

Normal Times New Roman Cyr 12 B I U

Задача №2. Определение pH раствора Na_2CO_3

Концентрация Na_2CO_3 $C_{\text{Na}_2\text{CO}_3} := 10 \cdot \frac{\text{ммоль}}{\text{дм}^3}$

$[\text{Na}^+] := 2 \cdot C_{\text{Na}_2\text{CO}_3} = 20 \frac{\text{ммоль}}{\text{дм}^3}$ $C_{\text{общ.уг.к}} := C_{\text{Na}_2\text{CO}_3} = 10 \frac{\text{ммоль}}{\text{дм}^3}$

Начальные приближения

$[\text{H}^+] := \sqrt{K_w} = 8.259 \times 10^{-8} \cdot \frac{\text{моль}}{\text{дм}^3}$ $[\text{OH}^-] := \sqrt{K_w} = 8.259 \times 10^{-8} \cdot \frac{\text{моль}}{\text{дм}^3}$

$\text{pH} := -\log\left(\frac{[\text{H}^+]}{\frac{\text{моль}}{\text{дм}^3}}\right) = 7.083$

$[\text{H}_2\text{CO}_3] := C_{\text{общ.уг.к}} \cdot \text{FormsCO}_2(\text{pH})_{\text{ORIGIN}+2} = 1.659 \cdot \frac{\text{ммоль}}{\text{дм}^3}$

$[\text{HCO}_3^-] := C_{\text{общ.уг.к}} \cdot \text{FormsCO}_2(\text{pH})_{\text{ORIGIN}+1} = 8.337 \cdot \frac{\text{ммоль}}{\text{дм}^3}$

$[\text{CO}_3^{2-}] := C_{\text{общ.уг.к}} \cdot \text{FormsCO}_2(\text{pH})_{\text{ORIGIN}} = 0.004 \cdot \frac{\text{ммоль}}{\text{дм}^3}$

Given

$K_1 = \frac{[\text{H}^+] \cdot [\text{HCO}_3^-]}{[\text{H}_2\text{CO}_3]}$ $K_2 = \frac{[\text{H}^+] \cdot [\text{CO}_3^{2-}]}{[\text{HCO}_3^-]}$ $[\text{H}^+] > 0$ $[\text{OH}^-] > 0$

$[\text{H}_2\text{CO}_3] + [\text{HCO}_3^-] + [\text{CO}_3^{2-}] = C_{\text{общ.уг.к}}$ $[\text{H}_2\text{CO}_3] > 0$

$[\text{H}^+] + [\text{Na}^+] = [\text{OH}^-] + 2 \cdot [\text{CO}_3^{2-}] + [\text{HCO}_3^-]$ $[\text{HCO}_3^-] > 0$

$[\text{H}^+] \cdot [\text{OH}^-] = K_w$ $[\text{CO}_3^{2-}] > 0$

$\begin{pmatrix} [\text{H}^+] \\ [\text{OH}^-] \\ [\text{H}_2\text{CO}_3] \\ [\text{HCO}_3^-] \\ [\text{CO}_3^{2-}] \end{pmatrix} := \text{Find}\left([\text{H}^+], [\text{OH}^-], [\text{H}_2\text{CO}_3], [\text{HCO}_3^-], [\text{CO}_3^{2-}]\right) = \begin{pmatrix} 0.000\text{E}+000 \\ 10.000\text{E}+000 \\ -5.204\text{E}-014 \\ 10.000\text{E}+000 \\ 9.853\text{E}-009 \end{pmatrix} \frac{\text{ммоль}}{\text{дм}^3}$

$\text{pH} := -\log\left(\frac{[\text{H}^+]}{\frac{\text{моль}}{\text{дм}^3}}\right) = 20.666 - 1.364i$

Нажмите F1, чтобы открыть справку. АВТО NUM Страница 4

Рис. 4.7. Расчет pH раствора Na_2CO_3

В результате расчета были получены отрицательные значения некоторых концентраций. Это связано с особенностями работы блока Given...Find в пакете Mathcad применительно к рассматриваемому типу задач: при решении задач равновесия в водных растворах значения концентраций могут изменяться в очень больших пределах и устойчивость решения очень мала. Одним из способов решения проблемы является применение логарифмирования левых и правых частей уравнений. На рис. 4.8 показан пример такого подхода применительно к решаемой задаче.

Mathcad - [Определение равновесных концентраций в водных растворах.xmcd]

Файл Правка Вид Вставка Формат Сервис Символьные операции Окно Справка

Normal Times New Roman Cyr 12 B I U

Применение логарифмирования левых и правых частей уравнений

$$[H^+] := \sqrt{K_w} = 8.259 \times 10^{-8} \frac{\text{моль}}{\text{дм}^3} \quad [OH^-] := \sqrt{K_w} = 8.259 \times 10^{-8} \frac{\text{моль}}{\text{дм}^3} \quad pH := -\log \left(\frac{[H^+]}{\frac{\text{моль}}{\text{дм}^3}} \right) = 7.083$$

$$[H_2CO_3] := C_{\text{общ_уг.к}} \cdot \text{FormsCO2}(pH)_{\text{ORIGIN}+2} = 1.659 \frac{\text{ммоль}}{\text{дм}^3}$$

$$[HCO_3^-] := C_{\text{общ_уг.к}} \cdot \text{FormsCO2}(pH)_{\text{ORIGIN}+1} = 8.337 \frac{\text{ммоль}}{\text{дм}^3}$$

$$[CO_3^{2-}] := C_{\text{общ_уг.к}} \cdot \text{FormsCO2}(pH)_{\text{ORIGIN}} = 0.004 \frac{\text{ммоль}}{\text{дм}^3}$$

Given

$$\log \left(\frac{K_1}{\frac{\text{моль}}{\text{дм}^3}} \right) = \log \left(\frac{[H^+]}{\frac{\text{моль}}{\text{дм}^3}} \right) + \log \left(\frac{[HCO_3^-]}{\frac{\text{моль}}{\text{дм}^3}} \right) - \log \left(\frac{[H_2CO_3]}{\frac{\text{моль}}{\text{дм}^3}} \right)$$

$$\log \left(\frac{K_2}{\frac{\text{моль}}{\text{дм}^3}} \right) = \log \left(\frac{[H^+]}{\frac{\text{моль}}{\text{дм}^3}} \right) + \log \left(\frac{[CO_3^{2-}]}{\frac{\text{моль}}{\text{дм}^3}} \right) - \log \left(\frac{[HCO_3^-]}{\frac{\text{моль}}{\text{дм}^3}} \right)$$

$$\log \left(\frac{[H_2CO_3] + [HCO_3^-] + [CO_3^{2-}]}{\frac{\text{моль}}{\text{дм}^3}} \right) = \log \left(\frac{C_{\text{общ_уг.к}}}{\frac{\text{моль}}{\text{дм}^3}} \right)$$

$$\log \left(\frac{[H^+] + [Na^+]}{\frac{\text{моль}}{\text{дм}^3}} \right) = \log \left(\frac{[OH^-] + 2 \cdot [CO_3^{2-}] + [HCO_3^-]}{\frac{\text{моль}}{\text{дм}^3}} \right)$$

$$\log \left(\frac{[H^+]}{\frac{\text{моль}}{\text{дм}^3}} \right) + \log \left(\frac{[OH^-]}{\frac{\text{моль}}{\text{дм}^3}} \right) = \log \left(\frac{K_w}{\left(\frac{\text{моль}}{\text{дм}^3} \right)^2} \right)$$

$$\begin{pmatrix} [H^+] \\ [OH^-] \\ [H_2CO_3] \\ [HCO_3^-] \\ [CO_3^{2-}] \end{pmatrix} := \text{Find}([H^+], [OH^-], [H_2CO_3], [HCO_3^-], [CO_3^{2-}]) = \begin{pmatrix} 5.704E-009 \\ 1.196E+000 \\ 1.644E-005 \\ 1.196E+000 \\ 8.804E+000 \end{pmatrix} \frac{\text{ммоль}}{\text{дм}^3}$$

$$pH := -\log \left(\frac{[H^+]}{\frac{\text{моль}}{\text{дм}^3}} \right) = 11.244$$

Нажмите F1, чтобы открыть справку. АВТО NUM Страница 5

Рис. 4.8. Расчет pH раствора Na₂CO₃ с использованием логарифмирования

Использование логарифмирования левых и правых частей уравнения позволило получить требуемый результат решения задачи и

отказаться от использования дополнительных неравенств. На рис. 4.9 показана графическая зависимость pH раствора Na_2CO_3 от концентрации Na_2CO_3 , а на рис. 4.10 – концентрации ионных примесей и свободной углекислоты.

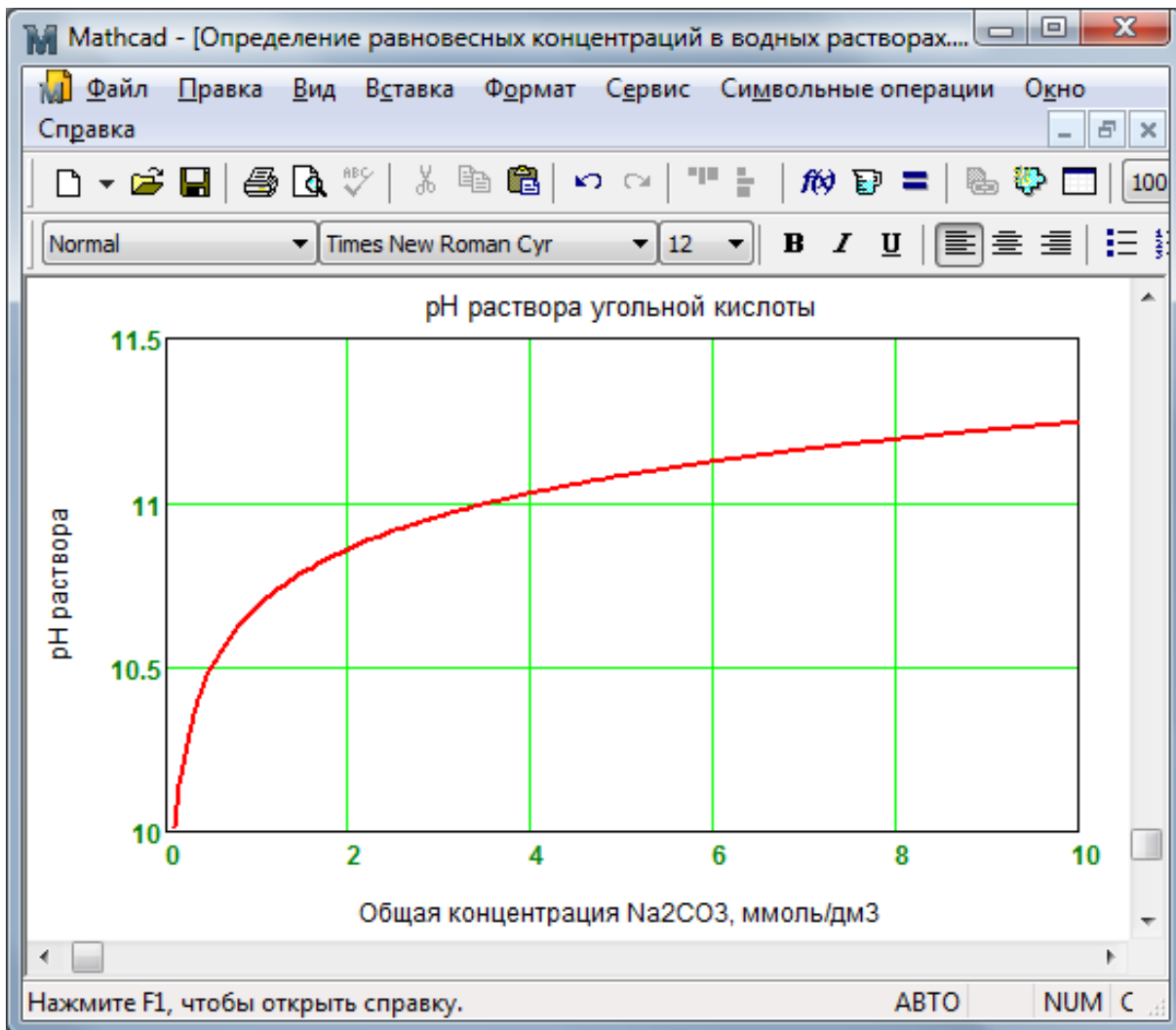


Рис. 4.9. Графическая зависимость pH водного раствора Na_2CO_3

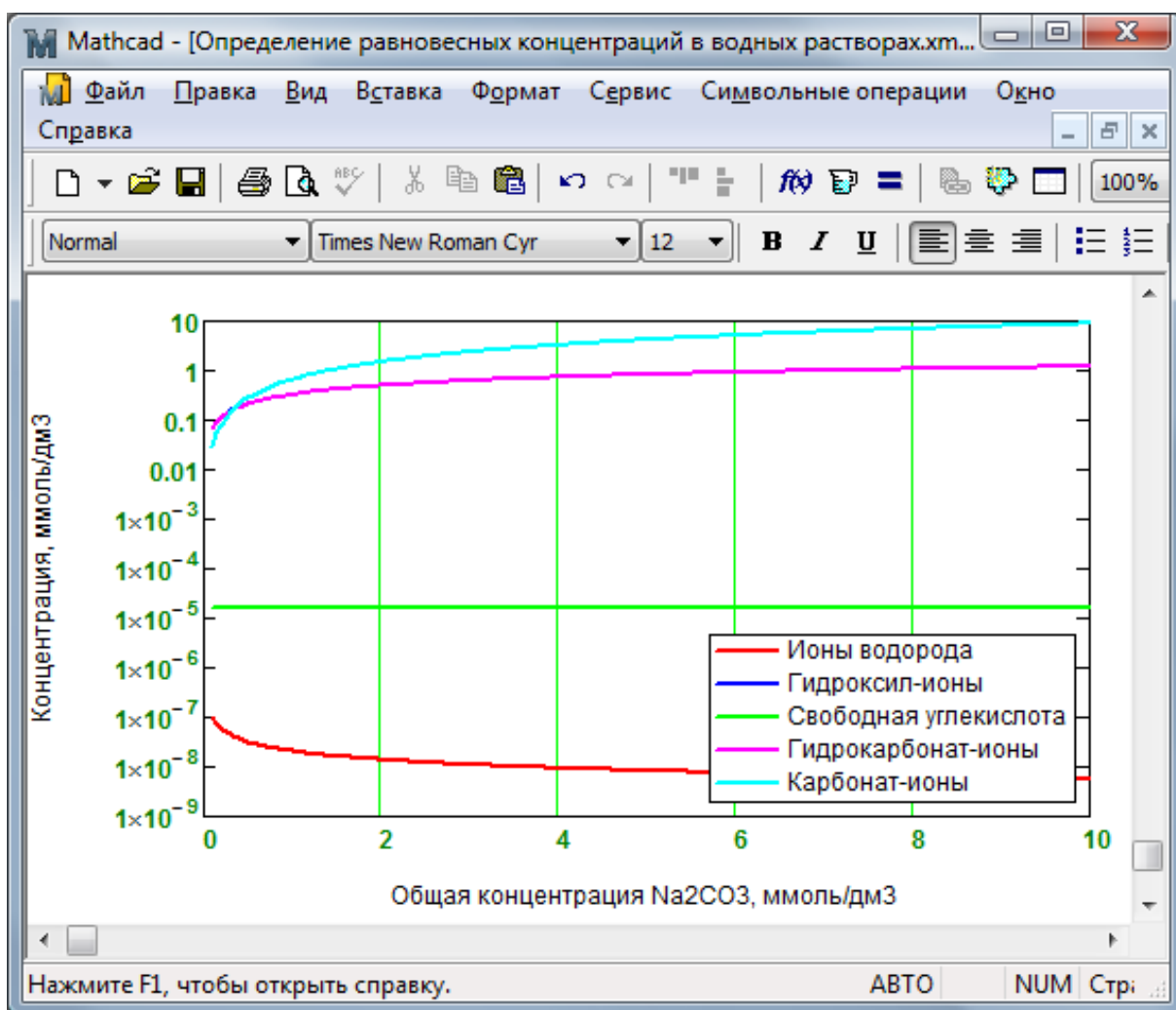


Рис. 4.10. Графическая зависимость концентрации ионных примесей и свободной углекислоты в водном растворе Na_2CO_3

Использование логарифмирования позволило решить поставленную задачу, однако у данного метода есть несколько недостатков, среди которых стоит отметить следующие:

- невозможность контроля над вычислениями в процессе поиска корней системы уравнений. Это может быть необходимо, например, для решения – будет ли выпадать в осадок какое-либо вещество или нет. Или в случае учета ионной силы раствора.
- необходимость хорошего начального приближения, что может привести к невозможности решения при большем количестве различных веществ в растворе, т.е. при переходе к более сложной задаче.

Исходя из вышеперечисленных недостатков желательно найти другой метод решения задач равновесия в водных растворах с

большим контролем расчетов и с большей устойчивостью решения. Такой метод рассмотрен в следующем разделе.

4.3. Построение кривой титрования буферного раствора

Одним из методов решения задач равновесия в водных растворах является метод подбора такого значения pH, при котором раствор электронейтрален. Поиск значения может быть осуществлен методом деления отрезка пополам, т.к. диапазон изменения pH раствора при данных давлении и температуре известен. Тогда задавшись серединой диапазона pH можно рассчитать величины концентраций ионных примесей и сравнивая суммы концентраций катионов и анионов можно выбрать требуемую половину диапазона pH, в которой нужно уточнять решение и т.д. Т.е. процесс решения итерационный.

На рис. 4.11 представлены исходные данные для задачи построения кривой титрования буферного раствора с угольной кислотой. На рис. 4.12 представлена программа на встроенном языке программирования Mathcad для определения концентраций веществ при различных дозах кислоты, а на рис. 4.13-4.14 – графики зависимостей pH и концентраций веществ при различных дозах кислоты. Для расчетов используются справочные данные из главы 3.

Mathcad - [Определение равновесных концентраций в водных растворах.xmcd]

Файл Правка Вид Вставка Формат Сервис Символьные операции Окно Справка

Normal Times New Roman Cyr 12 В I U

Задача №3. Построение кривой титрования буферного раствора

Параметры раствора: $p = 0.101 \text{ МПа}$ $t_w := 18 \text{ °C}$

Дозы веществ в растворе: $C_{\text{NaHCO}_3} := 2 \cdot \frac{\text{ммоль}}{\text{дм}^3}$ $C_{\text{Na}_2\text{CO}_3} := 2 \cdot \frac{\text{ммоль}}{\text{дм}^3}$ $C_{\text{NaOH}} := 0.5 \cdot \frac{\text{ммоль}}{\text{дм}^3}$

Известные величины:

$$[\text{Na}^+] := C_{\text{NaHCO}_3} + 2 \cdot C_{\text{Na}_2\text{CO}_3} + C_{\text{NaOH}} = 6.5 \cdot \frac{\text{ммоль}}{\text{дм}^3}$$
$$C_{\text{общ.уг.к.}} := C_{\text{NaHCO}_3} + C_{\text{Na}_2\text{CO}_3} = 4 \cdot \frac{\text{ммоль}}{\text{дм}^3}$$

Нажмите F1, чтобы открыть справку. АВТО NUM Страница 7

Рис. 4.11. Исходные данные для построения кривой титрования буферного раствора

Mathcad - [Определение равновесных концентраций в водных растворах.xmcd]

Функция для определения ионного состава раствора в зависимости от дозы HCl

$$FCompTitr(C_{HCl}, t) := \left(\left[\text{Cl}^- \right] \leftarrow C_{HCl} \quad \mu \leftarrow 0.001 \cdot \frac{\text{моль}}{\text{дм}^3} \quad \mu_1 \leftarrow \mu \cdot 2 \right)$$

$$K_w \leftarrow 10^{-\text{wspPKWPT}(p, t)} \cdot \left(\frac{\text{моль}}{\text{кг}} \right)^2 \cdot \text{wspDENSPT}(p, t)^2$$

while $\left| \frac{\mu - \mu_1}{\mu} \right| > \text{TOL}$

$$\left[\begin{aligned} f_1 &\leftarrow f(t, \mu, 1) \quad f_2 \leftarrow f(t, \mu, 2) \quad \text{pH}_{\min} \leftarrow 0 \quad \text{pH}_{\max} \leftarrow -\log \left[\frac{K_w}{\left(\frac{\text{моль}}{\text{дм}^3} \right)^2} \right] \end{aligned} \right]$$

while $(|\text{pH}_{\max} - \text{pH}_{\min}| > \text{TOL})$

$$\text{pH} \leftarrow \frac{\text{pH}_{\max} + \text{pH}_{\min}}{2}$$

$$\left(\left[\text{H}^+ \right] \leftarrow \frac{10^{-\text{pH}}}{f_1} \cdot \frac{\text{моль}}{\text{дм}^3} \quad \left[\text{OH}^- \right] \leftarrow \frac{K_w}{\left[\text{H}^+ \right] \cdot f_1^2} \right)$$

$$\left[\text{HCO}_3^- \right] \leftarrow C_{\text{общ_уг.к}} \cdot \frac{K_1 \cdot f_2 \cdot \left[\text{H}^+ \right]}{f_2 \cdot \left(\left[\text{H}^+ \right] \right)^2 \cdot f_1^2 + K_1 \cdot f_2 \cdot \left[\text{H}^+ \right] + K_1 \cdot K_2}$$

$$\left[\text{CO}_3^{2-} \right] \leftarrow C_{\text{общ_уг.к}} \cdot \frac{K_1 \cdot K_2}{f_2 \cdot \left(\left[\text{H}^+ \right] \right)^2 \cdot f_1^2 + K_1 \cdot f_2 \cdot \left[\text{H}^+ \right] + K_1 \cdot K_2}$$

$$\Sigma_{\text{кат}} \leftarrow \left[\text{H}^+ \right] + \left[\text{Na}^+ \right]$$

$$\Sigma_{\text{ан}} \leftarrow \left[\text{OH}^- \right] + \left[\text{HCO}_3^- \right] + 2 \cdot \left[\text{CO}_3^{2-} \right] + \left[\text{Cl}^- \right]$$

$$\text{pH}_{\min} \leftarrow \text{pH} \quad \text{if } \Sigma_{\text{кат}} > \Sigma_{\text{ан}}$$

$$\text{pH}_{\max} \leftarrow \text{pH} \quad \text{otherwise}$$

$$\left[\begin{aligned} \mu_1 &\leftarrow \mu \quad \mu \leftarrow \frac{1}{2} \cdot \left(\left[\text{H}^+ \right] \cdot 1^2 + \left[\text{Na}^+ \right] \cdot 1^2 + \left[\text{OH}^- \right] \cdot 1^2 + \left[\text{Cl}^- \right] \cdot 1^2 + \dots \right) \\ &\quad + \left[\text{HCO}_3^- \right] \cdot 1^2 + \left[\text{CO}_3^{2-} \right] \cdot 2^2 \end{aligned} \right]$$

$$\left[\text{H}_2\text{CO}_3 \right] \leftarrow C_{\text{общ_уг.к}} \cdot \frac{f_2 \cdot \left(\left[\text{H}^+ \right] \right)^2 \cdot f_1^2}{f_2 \cdot \left(\left[\text{H}^+ \right] \right)^2 \cdot f_1^2 + K_1 \cdot f_2 \cdot \left[\text{H}^+ \right] + K_1 \cdot K_2}$$

$$\left(\left[\text{H}^+ \right] \quad \left[\text{OH}^- \right] \quad \left[\text{HCO}_3^- \right] \quad \left[\text{CO}_3^{2-} \right] \quad \left[\text{CO}_3^{2-} \right] \right)^T$$

Нажмите F1, чтобы открыть справку. АВТО NUM Страница 8

Рис. 4.12. Программа для построения кривой титрования буферного раствора

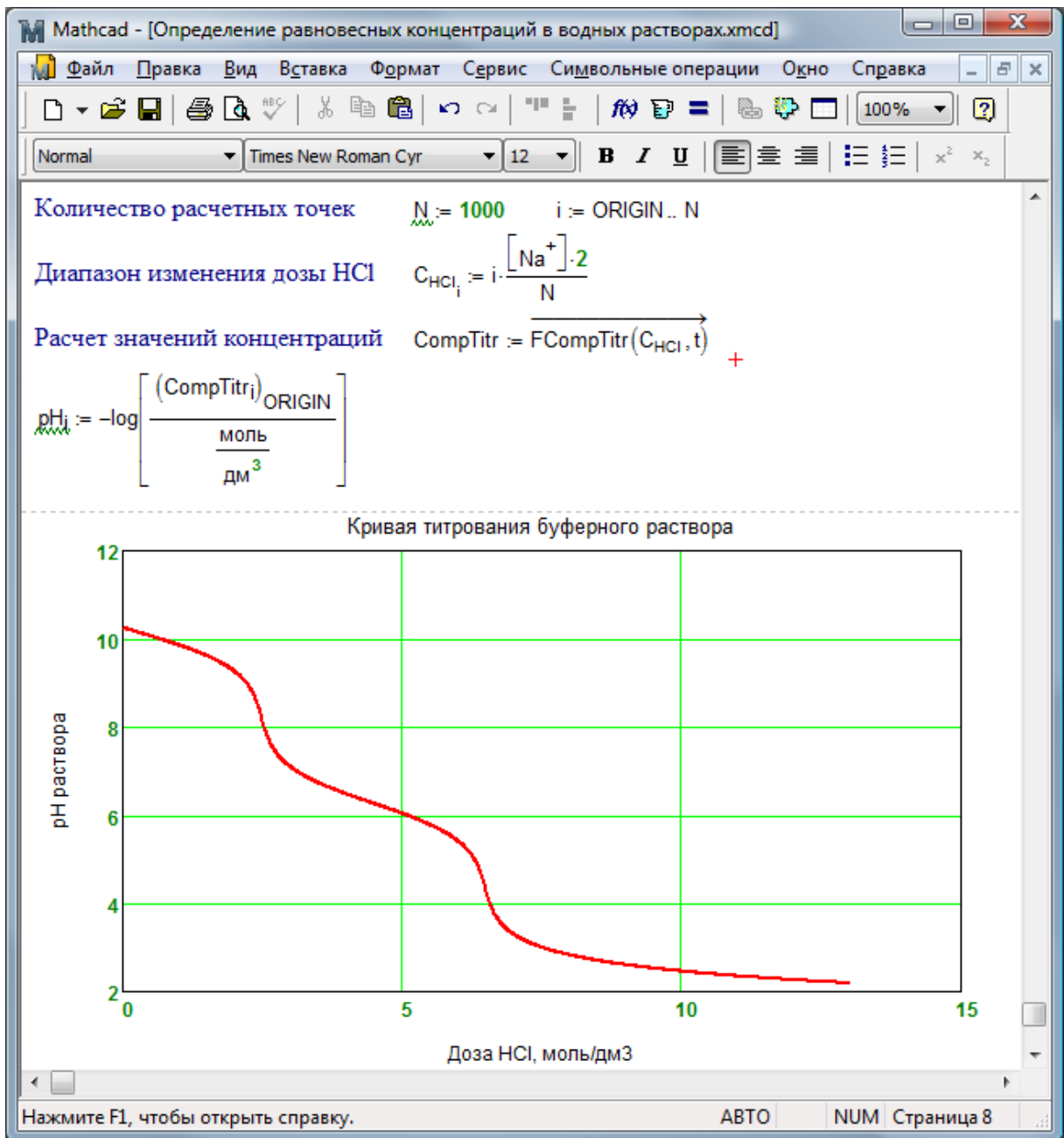


Рис. 4.13. Кривая титрования буферного раствора: pH раствора

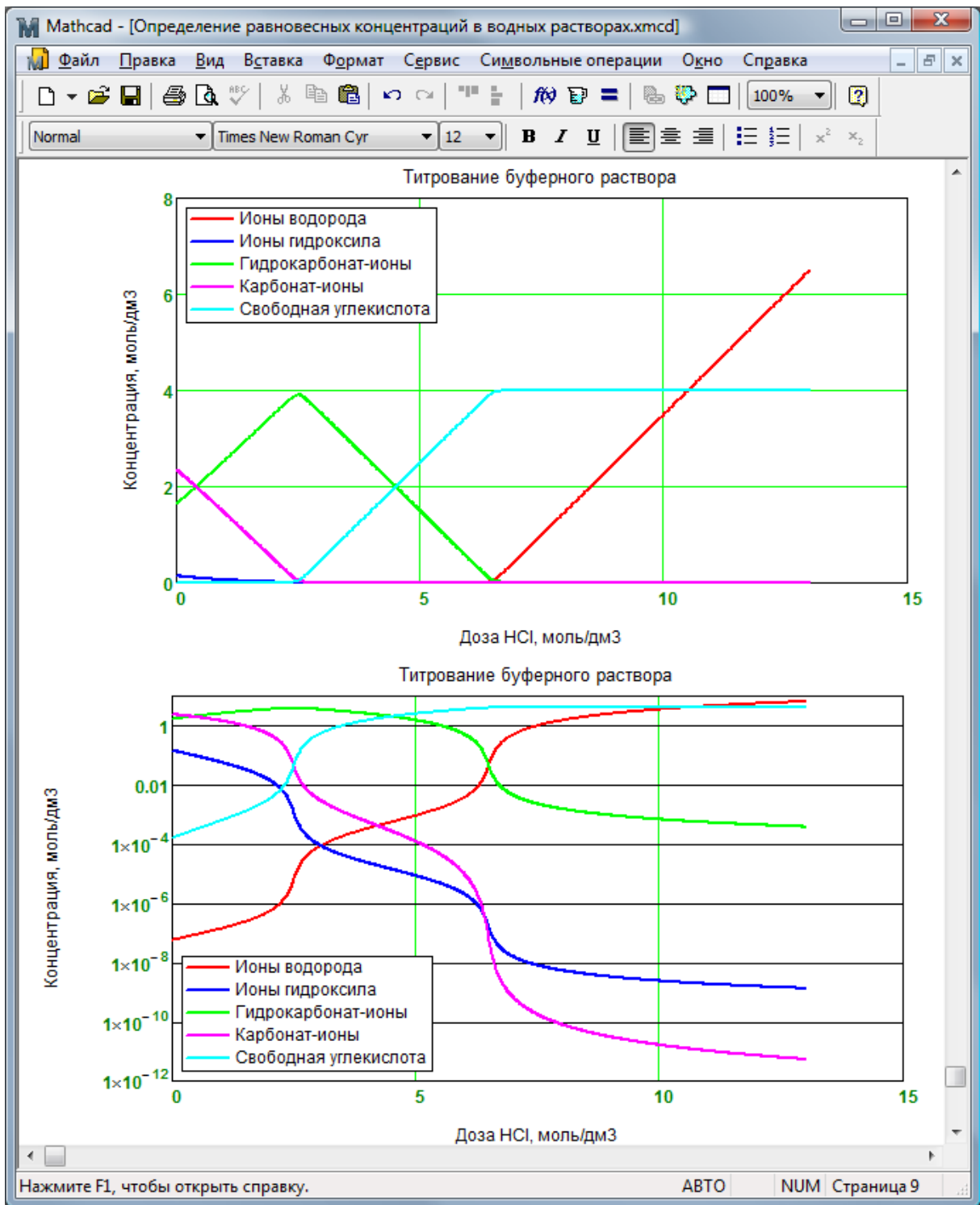


Рис. 4.14. Кривая титрования буферного раствора: концентрации

Разработанные функции позволяют рассчитывать кривую титрования для различных температур. На рис. 4.15 показаны кривые титрования для двух значений температур: 5°C и 40°C.

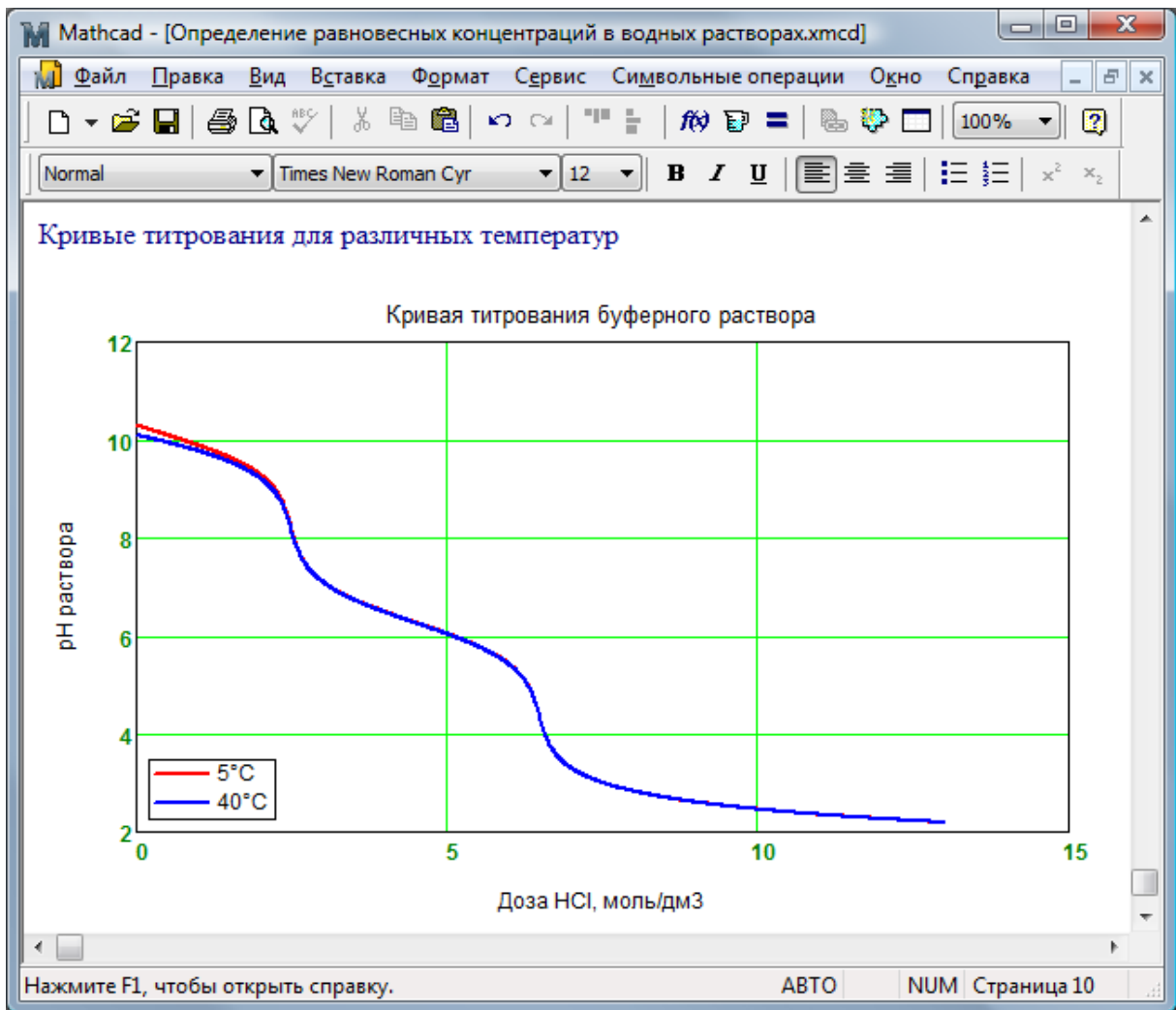


Рис. 4.15. Кривая титрования буферного раствора для двух температур

При отсутствии буферности раствора, что в рассматриваемом случае соответствует отсутствию NaHCO_3 и Na_2CO_3 , кривая титрования будет выглядеть аналогично представленной на рис. 4.16.

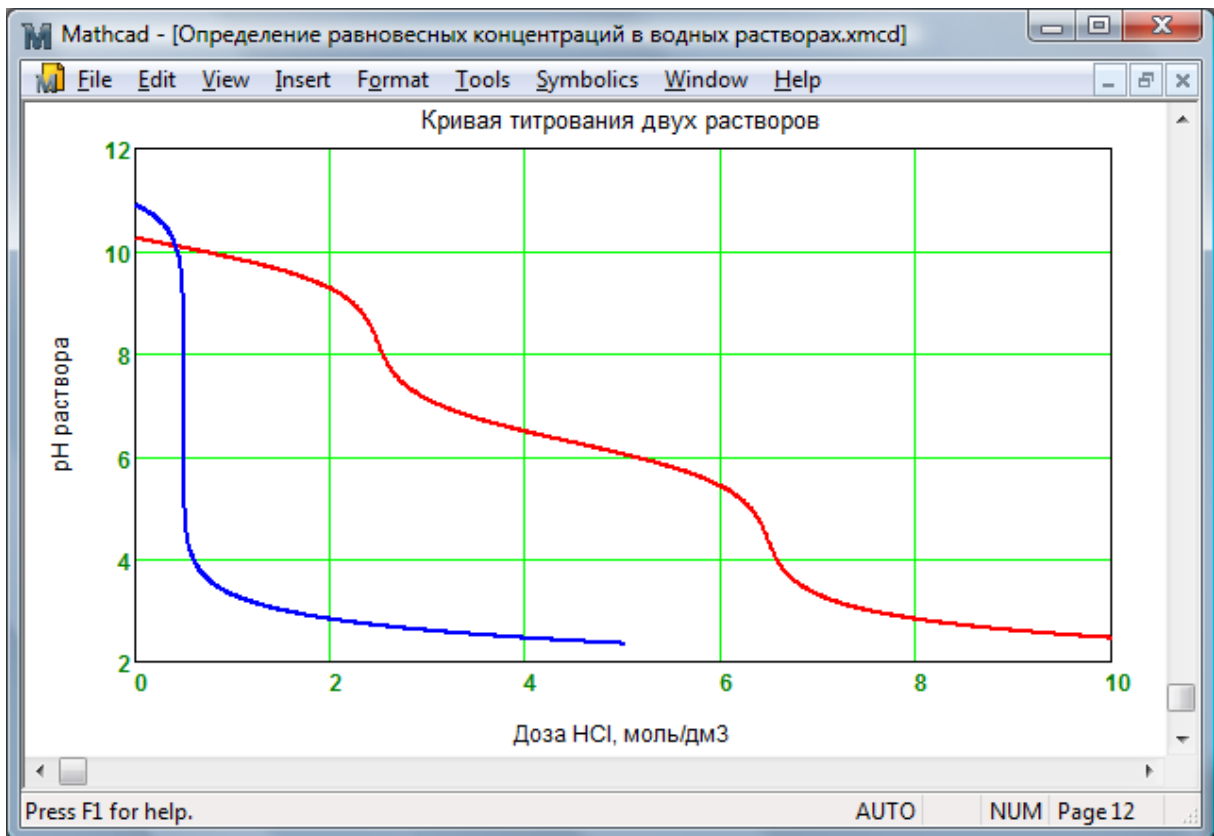


Рис. 4.16. Кривая титрования при отсутствии буферности

5. Оптимизация процессов коагуляции и известкования

На основе разработанных функций и алгоритмов из предыдущих глав разработан документ Mathcad с расчетом состава воды после совместного проведения коагуляции и известкования в осветлителе на основе равновесных концентраций. На рис. 5.1-5.4 показаны исходные данные и функция для определения состава известково-коагулированной воды и требуемой дозы извести для достижения заданного pH.

Mathcad - [Оптимизация процессов коагуляции и известкования.xmcd]

File Edit View Insert Format Tools Symbolics Window Help

Оптимизация процессов коагуляции и известкования

Импорт дополнительных определений
 Импорт дополнительных определений из файла
 Reference:F:\Константное обеспечение расчетов химико-технологических процессов.xmcd(R)
 Импорт дополнительных определений

Исходные данные для расчета

Параметры: $p := 1 \cdot \text{атм}$ $t := 35 \text{ }^\circ\text{C}$

Доза коагулянта $D_k := 0.5 \cdot \frac{\text{МГЭКВ}}{\text{ДМ}^3}$

Источник водоснабжения: р. Москва
 Концентрации примесей в исходной воде

$m_{\text{Na.исх}} := 2.8 \cdot \frac{\text{МГ}}{\text{ДМ}^3}$	$\text{Щ}_{\text{исх}} := 3.3 \cdot \frac{\text{МГЭКВ}}{\text{ДМ}^3}$
$m_{\text{SO}_4.\text{исх}} := 13.5 \cdot \frac{\text{МГ}}{\text{ДМ}^3}$	$\text{Ж}_{\text{о.исх}} := 4.3 \cdot \frac{\text{МГЭКВ}}{\text{ДМ}^3}$
$m_{\text{Cl.исх}} := (25.5 + 4.337) \cdot \frac{\text{МГ}}{\text{ДМ}^3}$	$\text{Ж}_{\text{Ca.исх}} := 3.0 \cdot \frac{\text{МГЭКВ}}{\text{ДМ}^3}$
$m_{\text{SiO}_2.\text{исх}} := 10 \cdot \frac{\text{МГ}}{\text{ДМ}^3}$	

Press F1 for help. AUTO NUM

Рис. 5.1. Исходные данные для расчета процесса коагуляции и известкования

Mathcad - [Оптимизация процессов коагуляции и известкования.xmcd]

File Edit View Insert Format Tools Symbolics Window Help

Расчет молярных концентраций в исходной воде

$$C_{\text{Na.исх}} := \frac{m_{\text{Na.исх}}}{23 \cdot \frac{\text{г}}{\text{моль}}} = 0.122 \cdot \frac{\text{ммоль}}{\text{дм}^3}$$

$$C_{\text{Cl.исх}} := \frac{m_{\text{Cl.исх}}}{35.5 \cdot \frac{\text{г}}{\text{моль}}} = 0.84 \cdot \frac{\text{ммоль}}{\text{дм}^3}$$

$$C_{\text{SO4.исх}} := \frac{m_{\text{SO4.исх}}}{96 \cdot \frac{\text{г}}{\text{моль}}} = 0.141 \cdot \frac{\text{ммоль}}{\text{дм}^3}$$

$$C_{\text{Ca.исх}} := \frac{Ж_{\text{Ca.исх}}}{2 \cdot \frac{\text{МГЭКВ}}{\text{ммоль}}} = 1.5 \cdot \frac{\text{ммоль}}{\text{дм}^3}$$

Концентрации эквивалентов в исходной воде

$$\text{Na}_{\text{исх}} := C_{\text{Na.исх}} \cdot 1 \cdot \frac{\text{МГЭКВ}}{\text{ммоль}} = 0.122 \cdot \frac{\text{МГЭКВ}}{\text{дм}^3}$$

$$\text{SO4}_{\text{исх}} := C_{\text{SO4.исх}} \cdot 2 \cdot \frac{\text{МГЭКВ}}{\text{ммоль}} = 0.281 \cdot \frac{\text{МГЭКВ}}{\text{дм}^3}$$

$$\text{Cl}_{\text{исх}} := C_{\text{Cl.исх}} \cdot 1 \cdot \frac{\text{МГЭКВ}}{\text{ммоль}} = 0.84 \cdot \frac{\text{МГЭКВ}}{\text{дм}^3}$$

$$\text{Ca}_{\text{исх}} := Ж_{\text{Ca.исх}} = 3 \cdot \frac{\text{МГЭКВ}}{\text{дм}^3}$$

$$\text{Mg}_{\text{исх}} := Ж_{\text{O.исх}} - Ж_{\text{Ca.исх}} = 1.3 \cdot \frac{\text{МГЭКВ}}{\text{дм}^3}$$

$$\text{HCO3}_{\text{исх}} := Щ_{\text{исх}} = 3.3 \cdot \frac{\text{МГЭКВ}}{\text{дм}^3}$$

$$C_{\text{Mg.исх}} := \frac{(Ж_{\text{O.исх}} - Ж_{\text{Ca.исх}})}{2 \cdot \frac{\text{МГЭКВ}}{\text{ммоль}}} = 0.65 \cdot \frac{\text{ммоль}}{\text{дм}^3}$$

$$C_{\text{HCO3.исх}} := \frac{Щ_{\text{исх}}}{1 \cdot \frac{\text{МГЭКВ}}{\text{ммоль}}} = 3.3 \cdot \frac{\text{ммоль}}{\text{дм}^3}$$

Press F1 for help. AUTO NUM

Рис. 5.2. Определение концентраций примесей в исходной воде

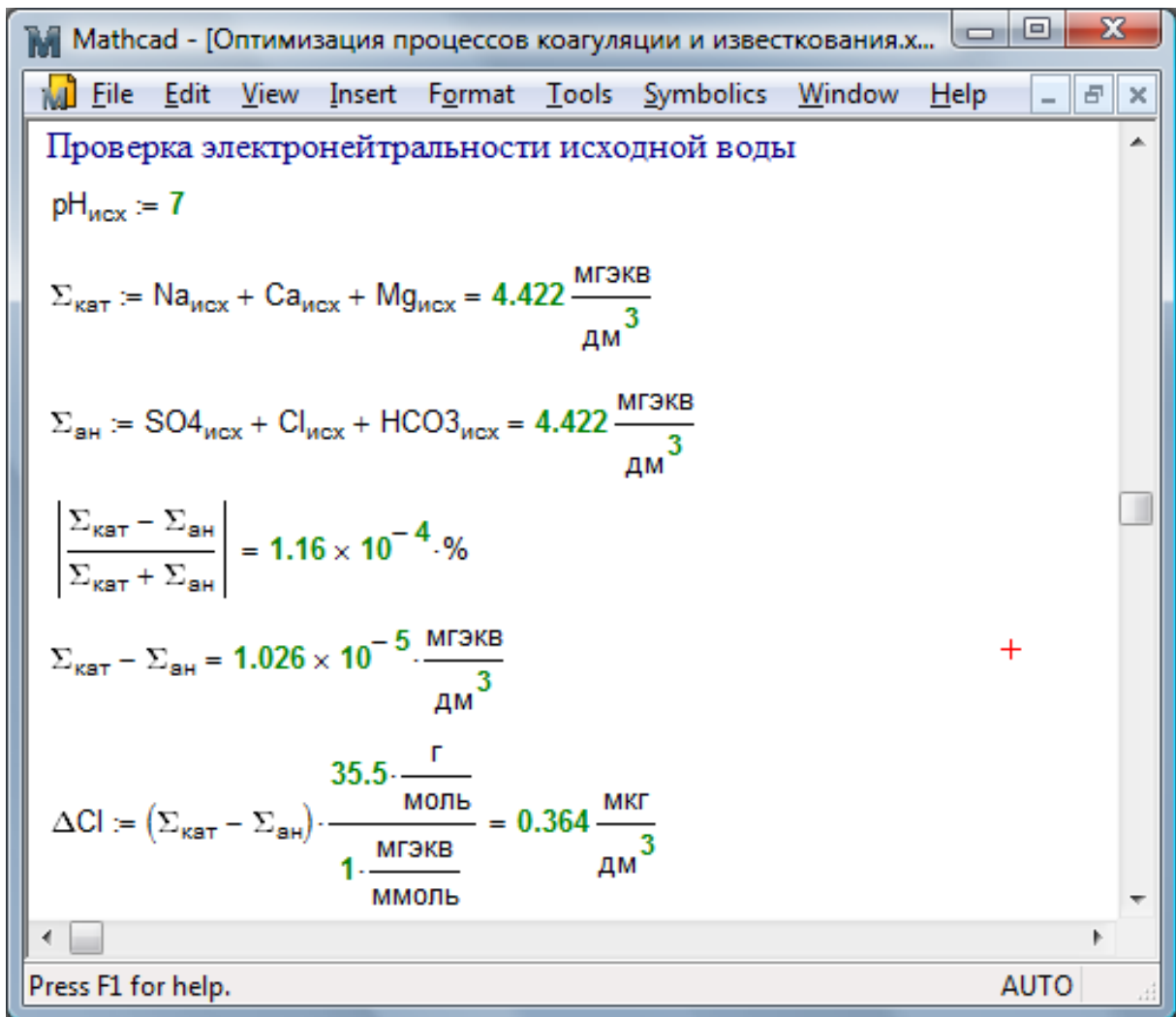


Рис. 5.3. Проверка электронейтральности исходной воды

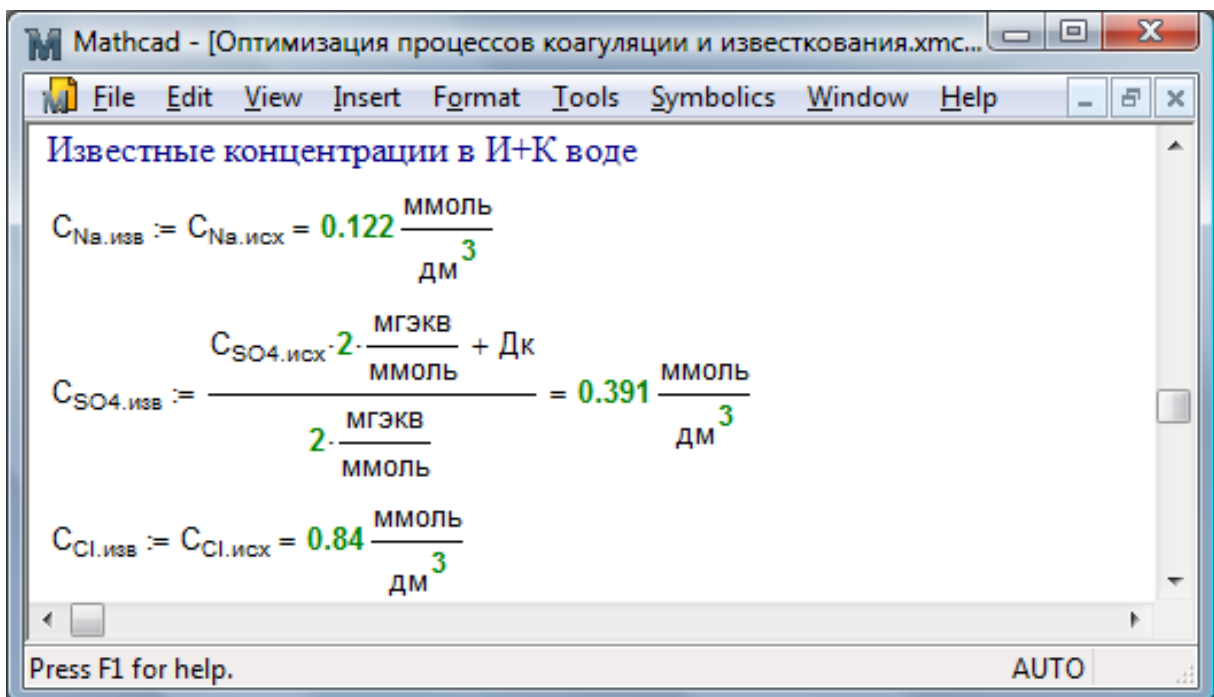


Рис. 5.4. Заранее известные концентрации примесей в известково-коагулированной воде

Mathcad - [Оптимизация процессов коагуляции и известкования.xmcd]

File Edit View Insert Format Tools Symbolics Window Help

Функция для расчета ионного состава после коагуляции и известкования

$$F_{ик}(pH) := \left(\mu_1 \leftarrow 3 \cdot \frac{\text{ммоль}}{\text{дм}^3} \quad \mu_2 \leftarrow \mu_1 \cdot 2 \right)$$

$$\text{while } \left| \frac{\mu_1 - \mu_2}{\mu_1} \right| > \text{TOL}$$

$$\left(\begin{array}{l} (f_1 \leftarrow f(t, \mu_1, 1) \quad f_2 \leftarrow f(t, \mu_1, 2)) \\ \left(a_{H^+, \text{изв}} \leftarrow 10^{-pH} \cdot \frac{\text{моль}}{\text{дм}^3} \quad C_{H^+, \text{изв}} \leftarrow \frac{a_{H^+, \text{изв}}}{f_1} \right) \\ \left(a_{OH^-, \text{изв}} \leftarrow 10^{pH - \text{wspPKWPT}(p, t)} \cdot \frac{\text{моль}}{\text{дм}^3} \quad C_{OH^-, \text{изв}} \leftarrow \frac{a_{OH^-, \text{изв}}}{f_1} \right) \\ \text{ПрMg} \leftarrow \text{Пр}_{MgOH_2}(t) \\ \left(\begin{array}{l} C_{Mg, \text{равн}} \leftarrow \frac{\text{ПрMg}}{a_{OH^-, \text{изв}}^2} \quad C_{Mg, \text{изв}} \leftarrow \begin{cases} C_{Mg, \text{исх}} & \text{if } C_{Mg, \text{равн}} > C_{Mg, \text{исх}} \\ C_{Mg, \text{равн}} & \text{otherwise} \end{cases} \end{array} \right) \\ C_{CO_3, \text{изв}} \leftarrow 10^{-5} \cdot \frac{\text{моль}}{\text{дм}^3} \\ C_{CO_3, \text{изв}} \leftarrow \text{root} \left[\begin{array}{l} C_{H^+, \text{изв}} + C_{Na, \text{изв}} + 2 \cdot \frac{\text{Пр}_{CaCO_3}(t)}{f_2^2 \cdot C_{CO_3, \text{изв}}} + 2 \cdot C_{Mg, \text{изв}} \dots, C_{CO_3, \text{изв}} \\ + \left(C_{OH^-, \text{изв}} + C_{Cl, \text{изв}} + 2 \cdot C_{SO_4, \text{изв}} \dots \right) \\ + 2 \cdot C_{CO_3, \text{изв}} + \frac{C_{H^+, \text{изв}} \cdot C_{CO_3, \text{изв}} \cdot f_2}{FK_2_H_2CO_3(t)} \end{array} \right] \\ \left(\begin{array}{l} C_{Ca, \text{изв}} \leftarrow \frac{\text{Пр}_{CaCO_3}(t)}{f_2^2 \cdot C_{CO_3, \text{изв}}} \quad C_{HCO_3, \text{изв}} \leftarrow \frac{C_{H^+, \text{изв}} \cdot C_{CO_3, \text{изв}} \cdot f_2}{FK_2_H_2CO_3(t)} \end{array} \right) \\ \left[\begin{array}{l} \mu_2 \leftarrow \mu_1 \quad \mu_1 \leftarrow \frac{1}{2} \cdot \left(C_{H^+, \text{изв}} \cdot 1^2 + C_{Na, \text{изв}} + C_{Ca, \text{изв}} \cdot 2^2 + C_{Mg, \text{изв}} \cdot 2^2 + C_{OH^-, \text{изв}} \dots \right) \\ + C_{Cl, \text{изв}} + C_{SO_4, \text{изв}} \cdot 2^2 + C_{CO_3, \text{изв}} \cdot 2^2 + C_{HCO_3, \text{изв}} \end{array} \right] \\ \left(\begin{array}{l} C_{CO_2, \text{изв}} \leftarrow \frac{C_{H^+, \text{изв}} \cdot C_{HCO_3, \text{изв}} \cdot f_1}{FK_1_H_2CO_3(t)} \quad C_{CO_2, \text{исх}} \leftarrow \frac{10^{-pH_{\text{исх}}} \cdot \frac{\text{моль}}{\text{дм}^3} \cdot C_{HCO_3, \text{исх}} \cdot f_1}{FK_1_H_2CO_3(t)} \end{array} \right) \\ C_{CaCO_3, T} \leftarrow C_{CO_2, \text{исх}} + C_{HCO_3, \text{исх}} - (C_{CO_2, \text{изв}} + C_{HCO_3, \text{изв}} + C_{CO_3, \text{изв}}) \\ \left(\begin{array}{l} CaCO_{3T} \leftarrow C_{CaCO_3, T} \cdot 2 \cdot \frac{\text{МГЭКВ}}{\text{ММОЛЬ}} \quad Ca_{\text{изв}} \leftarrow C_{Ca, \text{изв}} \cdot 2 \cdot \frac{\text{МГЭКВ}}{\text{ММОЛЬ}} \quad \text{Ди} \leftarrow Ca_{\text{изв}} + CaCO_{3T} - Ca_{\text{исх}} \end{array} \right) \\ \left(\begin{array}{l} C_{Ca, \text{изв}} \quad C_{Mg, \text{изв}} \quad C_{HCO_3, \text{изв}} \quad C_{CO_3, \text{изв}} \quad \frac{\text{Ди}}{\frac{\text{МГЭКВ}}{\text{ММОЛЬ}}} \end{array} \right)^T$$

Press F1 for help. AUTO NUM Page 3

Рис. 5.5. Функция для расчета качества известково-коагулированной воды и требуемой дозы извести

На рис. 5.6 представлены вспомогательные функции для построения графических зависимостей, а сами графические зависимости представлены на рис. 5.7-5.8.

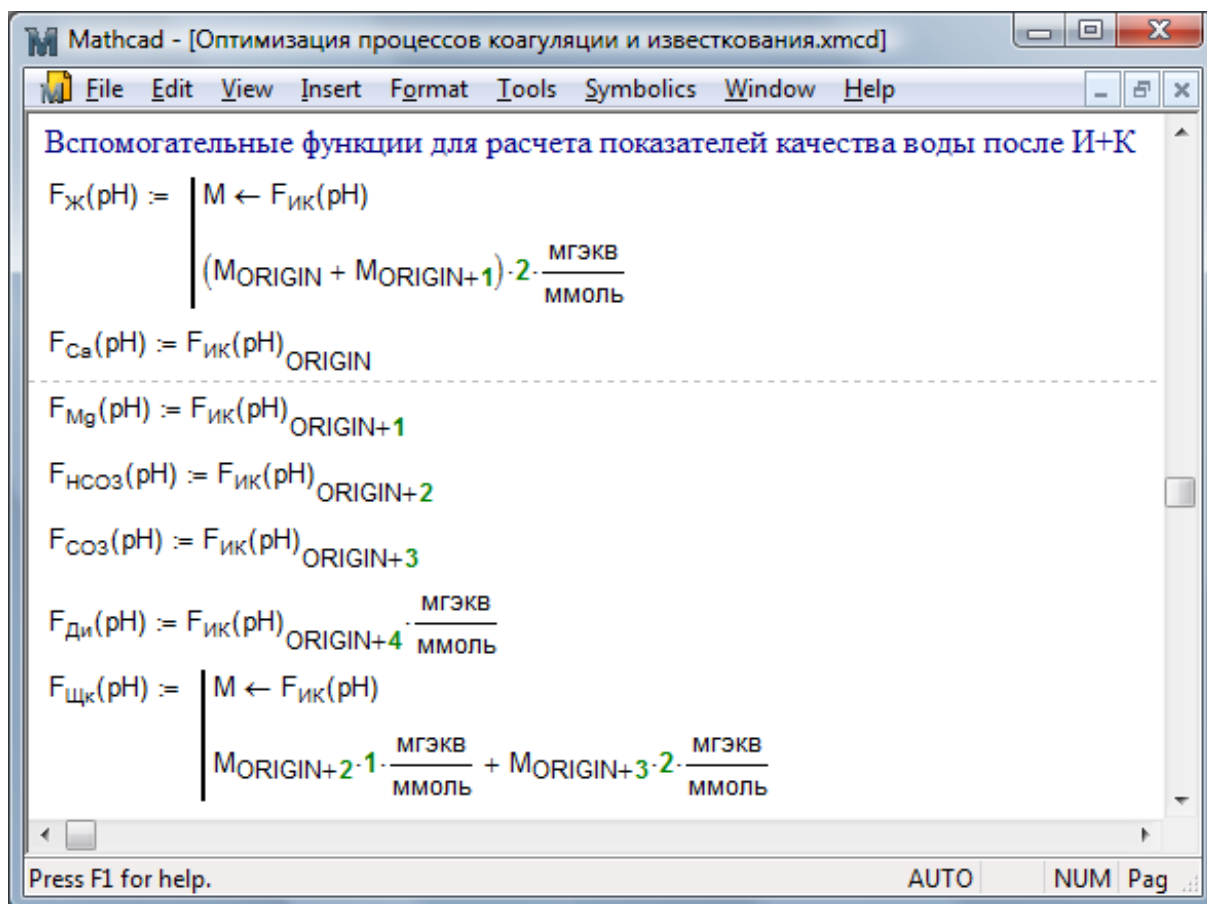


Рис. 5.6. Вспомогательные функции для построения графических зависимостей

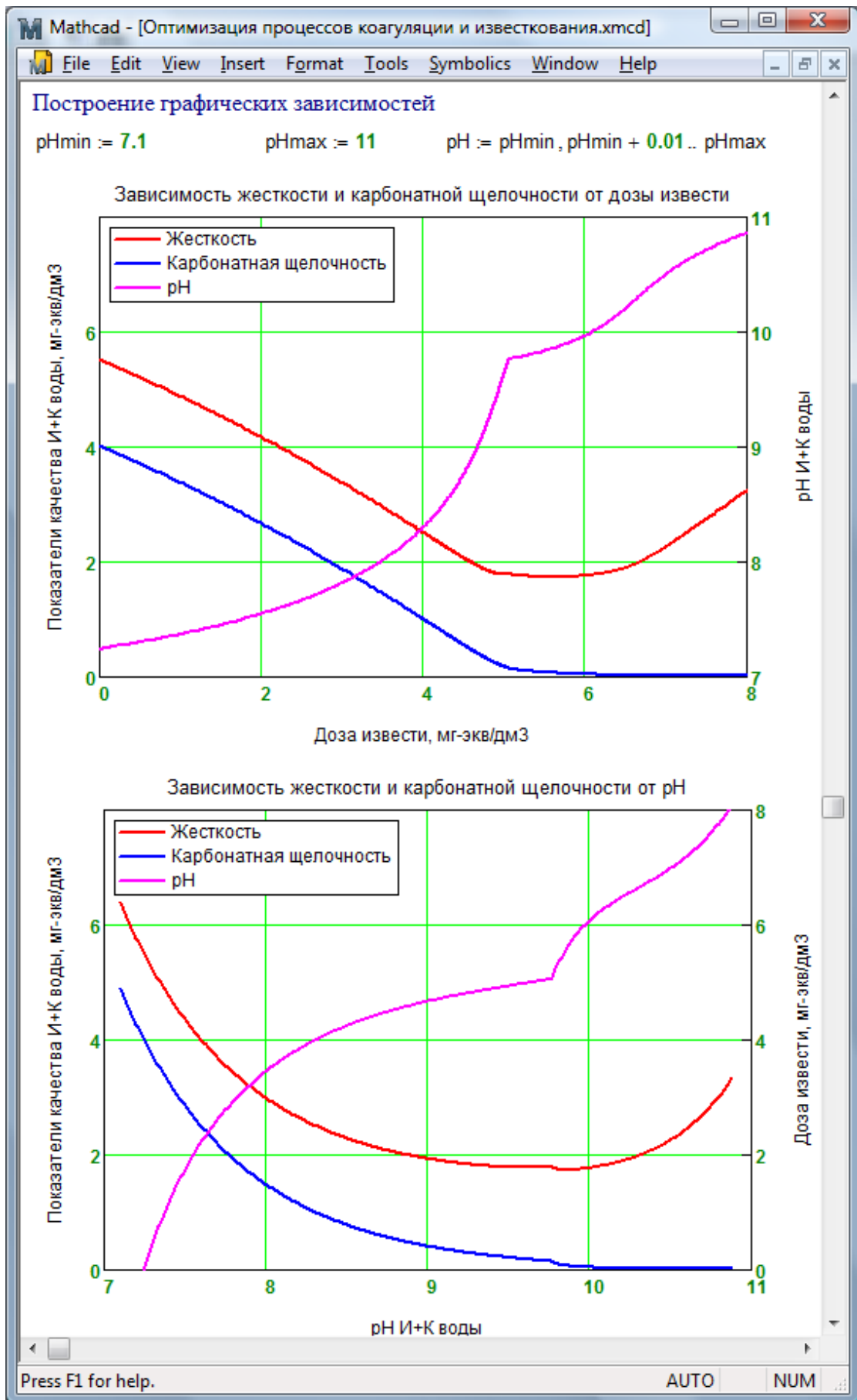


Рис. 5.7. Графические зависимости показателей качества известково-коагулированной воды

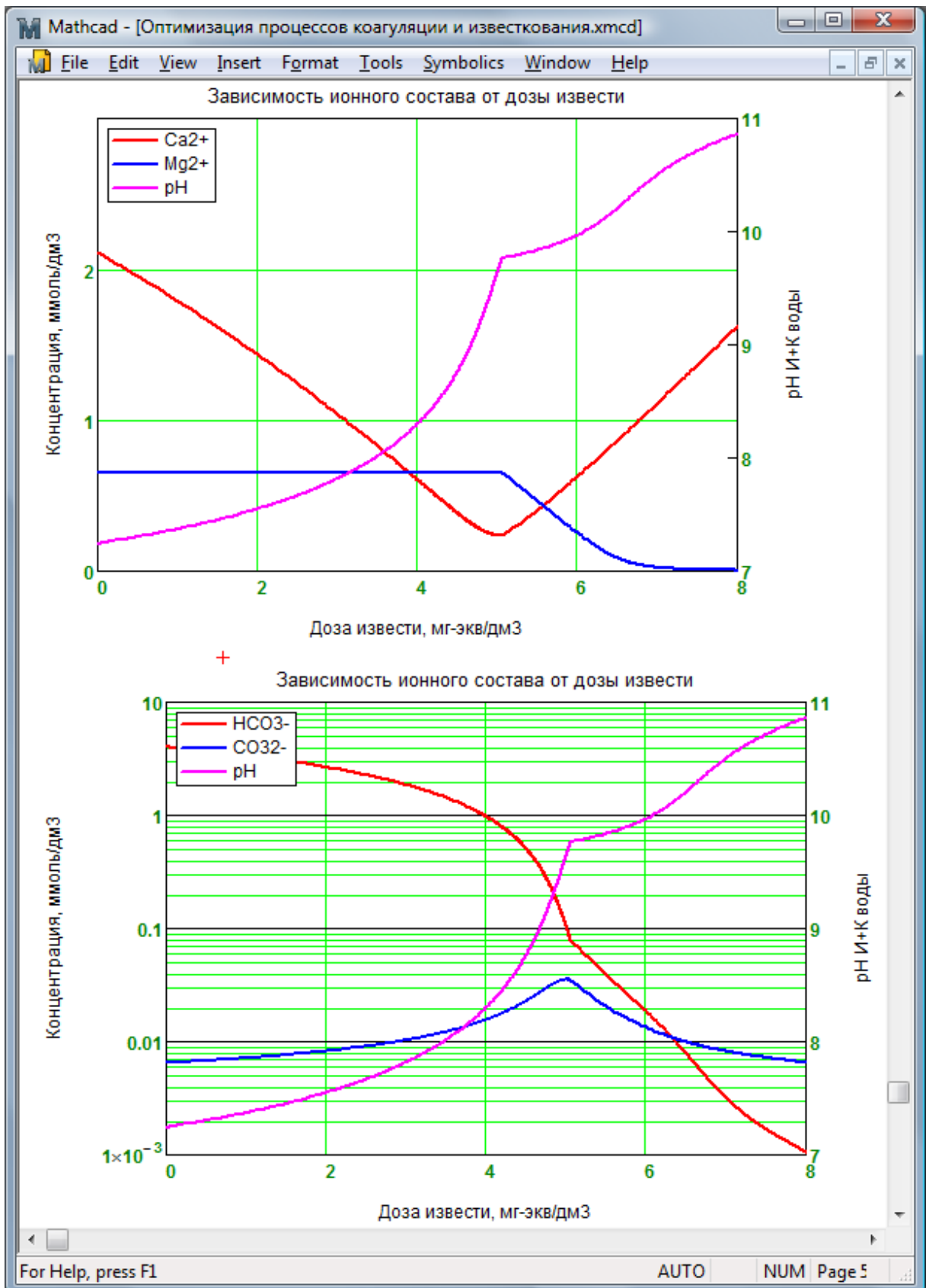


Рис. 5.8. Графические зависимости ионного состава известково-коагулированной воды

Исходя из анализа представленных на рис. 5.8-5.9 графиков, можно сделать следующие выводы:

- значения pH , при которых достигается минимум жесткости известково-коагулированной воды рассматриваемого водного источника, находится в пределах от 9 до 10,5;
- величина дозы извести при этом находится в диапазоне от 5 до 7 мг-экв/дм³;
- для минимизации расхода реагентов (извести) и снижения карбонатной щелочности и жесткости известково-коагулированной воды наиболее оптимален режим при $pH = 9,7$ и $D_i = 5$ мг-экв/дм³.

6. Оптимизационный выбор типоразмера и количества фильтров

В данном разделе будет рассмотрен один из методов решения задачи оптимизации, который получил название метод перебора. Это наименее эффективный метод, он требует много памяти для хранения промежуточных данных и большого количества вычислений, и применение метода перебора настоятельно не рекомендуется для решения сложных практических задач.

Задачей же, поставленной в настоящем разделе, будет являться выбор количества и типоразмер фильтров для обеспечения заданной производительности. Критерием оптимизации может быть как минимизация количества фильтров, так и стоимость фильтра вместе с его обвязкой (арматура).

Применение метода перебора в рассматриваемом случае оправдано, т.к. общее число вариантов относительно мало, а вычисления тривиальны.

На рис. 6.1 показаны исходные данные для расчета.

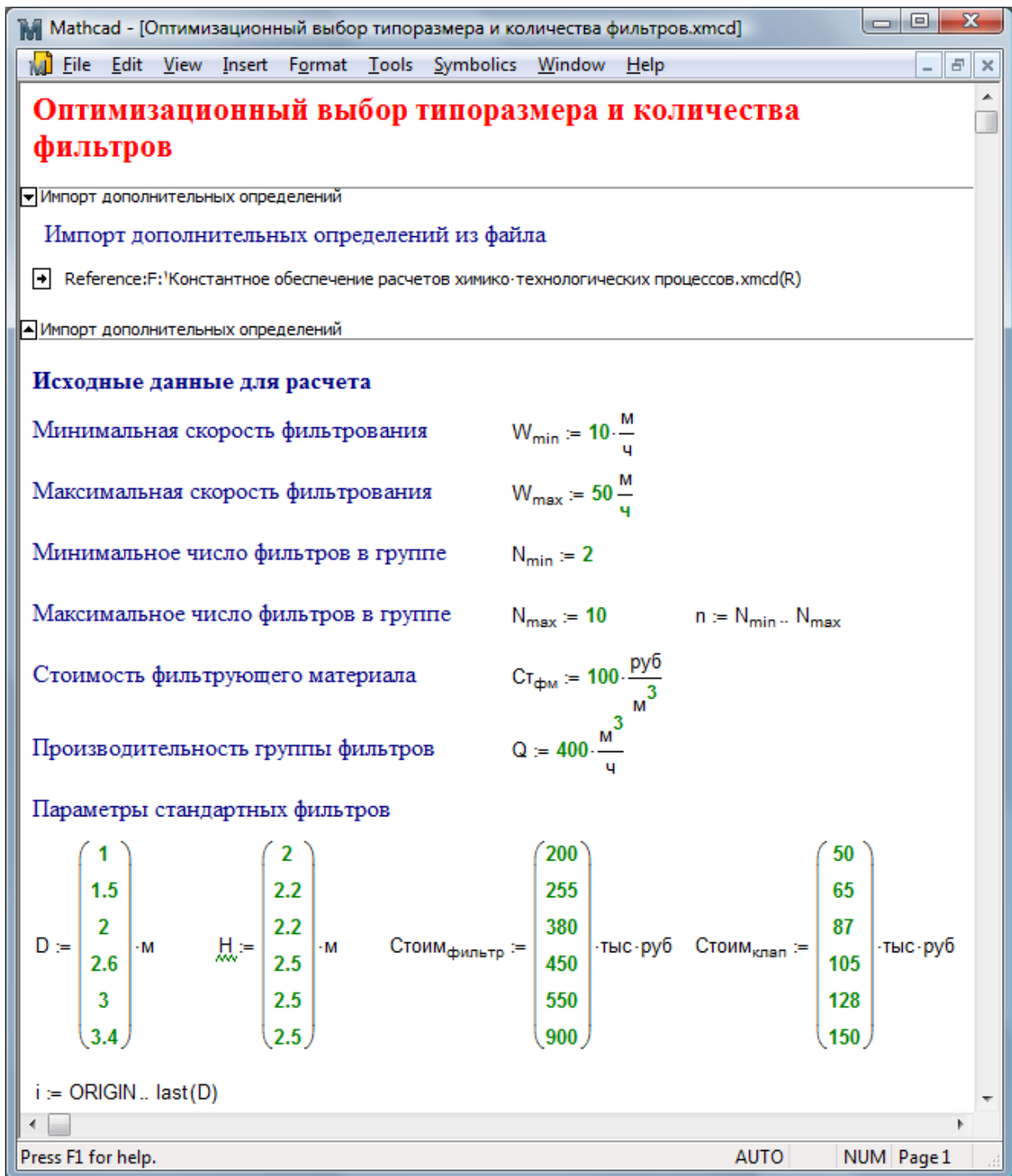


Рис. 6.1. Исходные данные для оптимизации количества фильтров

На рис. 6.2 показан следующий этап решения задачи оптимизации – это составление матрицы стоимости вариантов установки фильтров. По строкам откладывается количество фильтров, а по столбцам – типоразмер фильтра. Далее производится наложение ограничений по максимальной и минимальной скорости фильтрации на матрицу стоимости вариантов.

Mathcad - [Оптимизационный выбор типоразмера и количества фильтров.xmcd]

File Edit View Insert Format Tools Symbolics Window Help

1. Заполнение матрицы стоимости вариантов

$$M_{n,i} := n \cdot \left[\text{Ст}_{\text{фм}} \cdot \frac{\pi \cdot (D_i)^2}{4} \cdot H_i + \text{Стоим}_{\text{фильтр}_i} + 6 \cdot \text{Стоим}_{\text{клав}_i} \right]$$

2. Отбраковывание вариантов, где скорость фильтрования меньше минимальной допустимой

$$M_{n,i} := \text{if} \left[\frac{Q}{\frac{\pi \cdot (D_i)^2}{4} \cdot n} > W_{\text{min}}, M_{n,i}, 0 \right]$$

3. Отбраковывание вариантов, где скорость фильтрования больше максимально допустимой (один фильтр выключен на регенерацию)

$$M_{n,i} := \text{if} \left[\frac{Q}{\frac{\pi \cdot (D_i)^2}{4} \cdot (n-1)} < W_{\text{max}}, M_{n,i}, 0 \right]$$

4. Визуальный анализ стоимости вариантов компоновки фильтров

0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	0
0	0	0	0	0	3604.54
0	0	0	3243.982	3959.301	5406.809
0	0	3610.765	4325.309	5279.069	7209.079
0	0	4513.456	5406.637	6598.836	0
0	3872.333	5416.147	6487.964	0	0
0	4517.721	6318.838	7569.291	0	0
0	5163.11	7221.529	0	0	0
0	5808.499	8124.22	0	0	0
0	6453.888	9026.912	0	0	0

тыс.-руб

Press F1 for help. AUTO NUM Page 1

Рис. 6.2. Составление матрицы стоимости вариантов установки фильтров

На третьем этапе решения задачи, представленном на рис. 6.3, производится перебор всех вариантов компоновки фильтров и определяется вариант с наименьшей стоимостью.

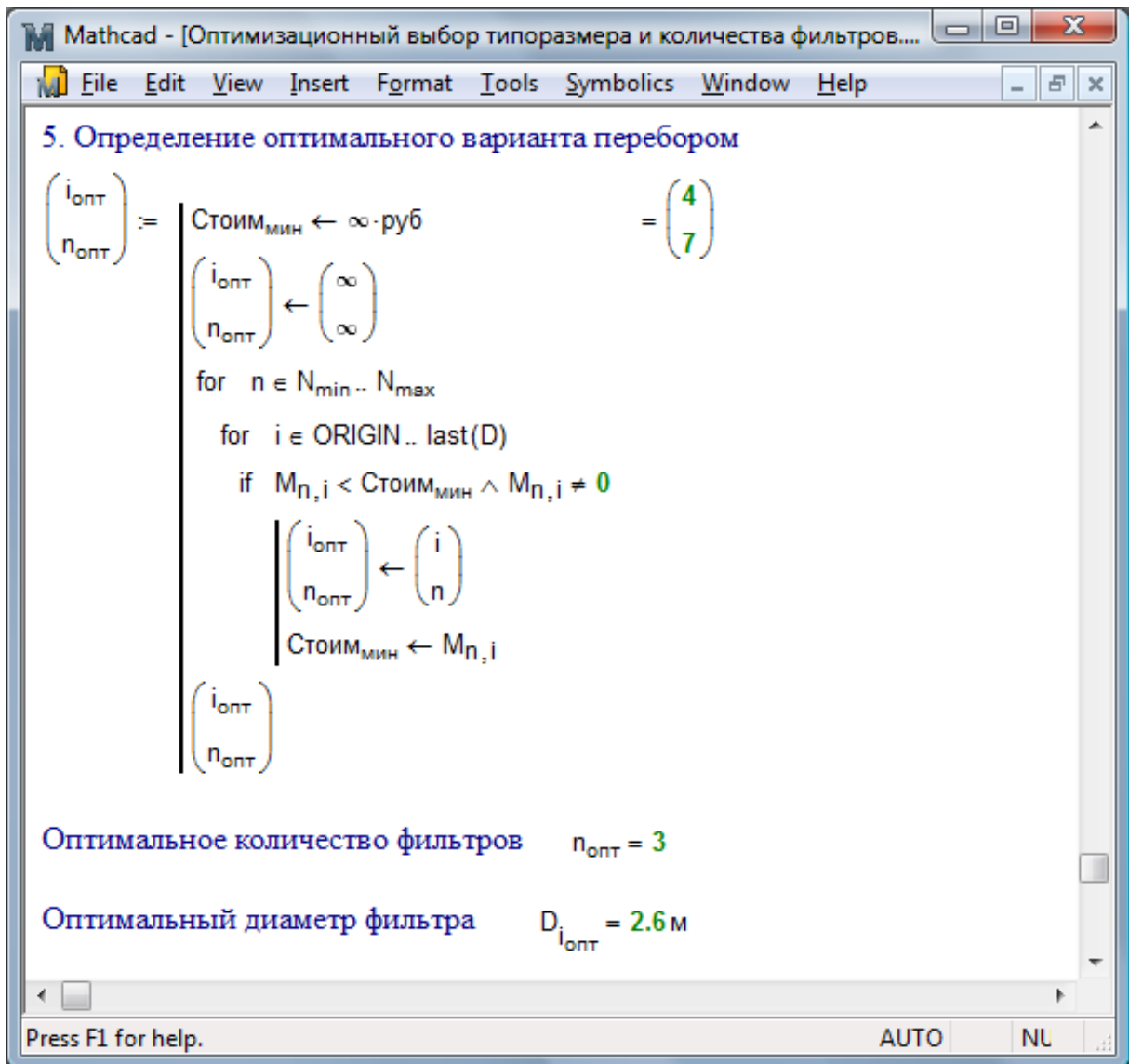


Рис. 6.3. Определение оптимального варианта установки фильтров

7. Интерполяция и аппроксимация при выводе зависимостей рабочей обменной емкости

ИОНИТОВ

Мощный математический аппарат пакета Mathcad позволяет достаточно легко и просто использовать аппроксимацию и интерполяцию при решении различных задач водоподготовки.

В настоящем разделе будут рассмотрены примеры разработки аппроксимирующих и интерполирующих функций для зависимостей рабочей обменной емкости ионитов.

На рис. 7.1 показана аппроксимирующая функция для расчета рабочей обменной емкости анионита АН-31 в анионитном фильтре

первой ступени. На рис. 7.2 и 7.3 показаны графические зависимости рабочей обменной емкости анионита АН-31 от качества поступающей воды и удельного расхода щелочи при регенерации.

Расчет рабочей обменной емкости анионита АН-31 в фильтре А1

Импорт дополнительных определений

Импорт дополнительных определений из файла

Reference:F:\Константное обеспечение расчетов химико-технологических процессов.xmcd(R)

Импорт дополнительных определений

Аппроксимация

Аппроксимирующая функция для расчета рабочей обменной емкости анионита АН-31 в анионитном фильтре первой ступени (по данным из "Технология проектирования тепловых электростанций и методы ее компьютеризации". -М.: Энергоатомиздат, 1977 г. (стр. 108)).

$$E_p(q_{\text{NaOH}}, \text{SO}_4, \text{Cl}) := \begin{cases} \text{error}(\text{"Ошибка! } q \text{ должно быть } \geq 25 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}\text{"}) & \text{if } q_{\text{NaOH}} < 25 \cdot \frac{\text{кг}}{\text{м}^3} \\ \text{error}(\text{"Ошибка! } q \text{ должно быть } \leq 100 \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}\text{"}) & \text{if } q_{\text{NaOH}} > 100 \cdot \frac{\text{кг}}{\text{м}^3} \\ n \leftarrow \frac{\text{SO}_4}{\text{SO}_4 + \text{Cl}} \\ \left[(885 + 328 \cdot n) \cdot \left(0.01 \cdot \frac{q_{\text{NaOH}}}{\frac{\text{кг}}{\text{м}^3}} \right)^{0.34} \right] \cdot \frac{\text{ГЭКВ}}{\text{м}^3} \end{cases}$$

Пример обращения к функции

$$\text{SO}_4 := 10 \cdot \frac{\text{МГ}}{\text{л}} \quad \text{Cl} := 10 \cdot \frac{\text{МГ}}{\text{л}}$$

$$E_p\left(25 \cdot \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}, \text{SO}_4, \text{Cl}\right) = 654.749 \frac{\text{МГЭКВ}}{\text{ДМ}^3}$$

Press F1 for help. AUTO NUM Page 1

Рис. 7.1. Аппроксимирующая функция для расчета рабочей обменной емкости анионита АН-31 в анионитном фильтре первой ступени

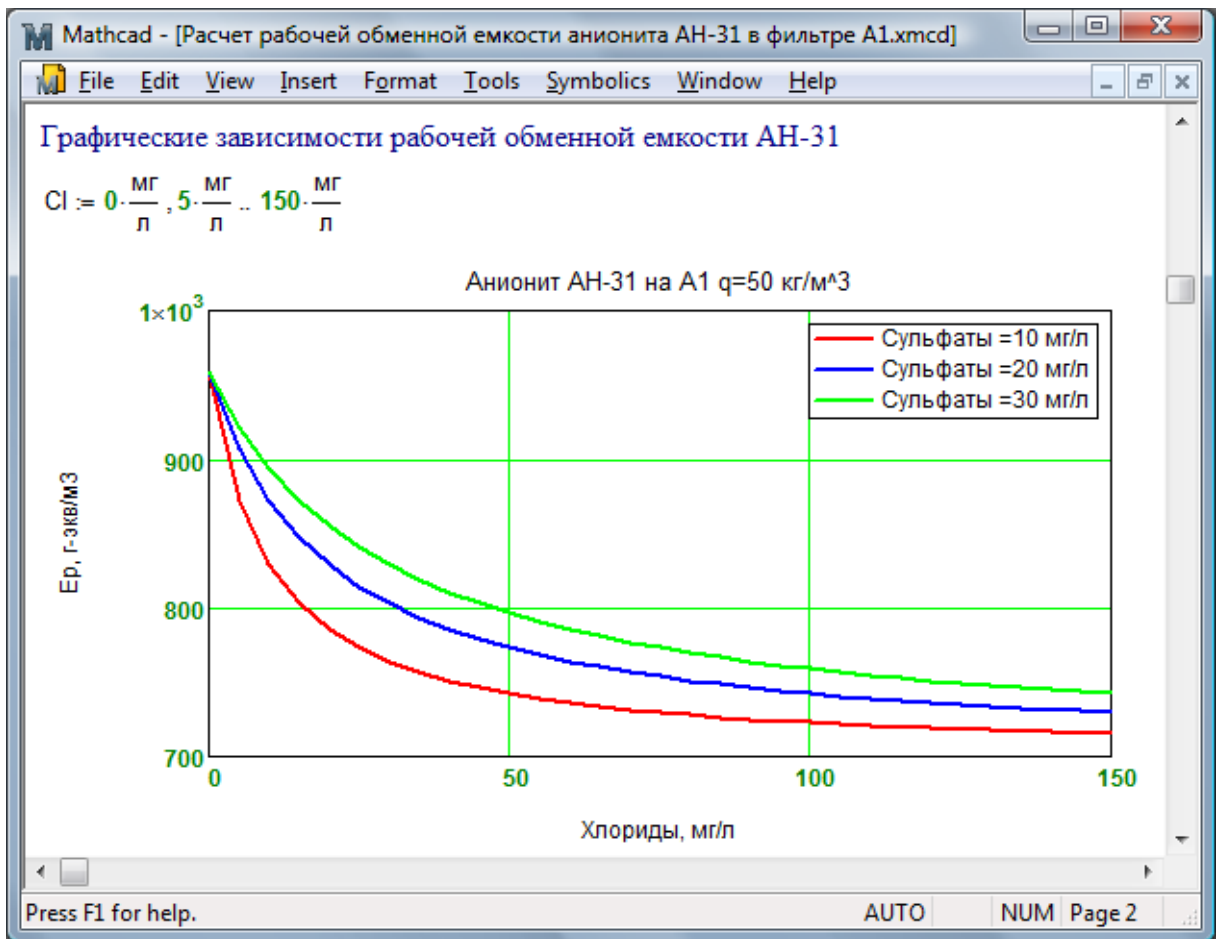


Рис. 7.2. Рабочая обменная емкость анионита АН-31 в анионитном фильтре первой ступени при различном содержании хлоридов в исходной воде

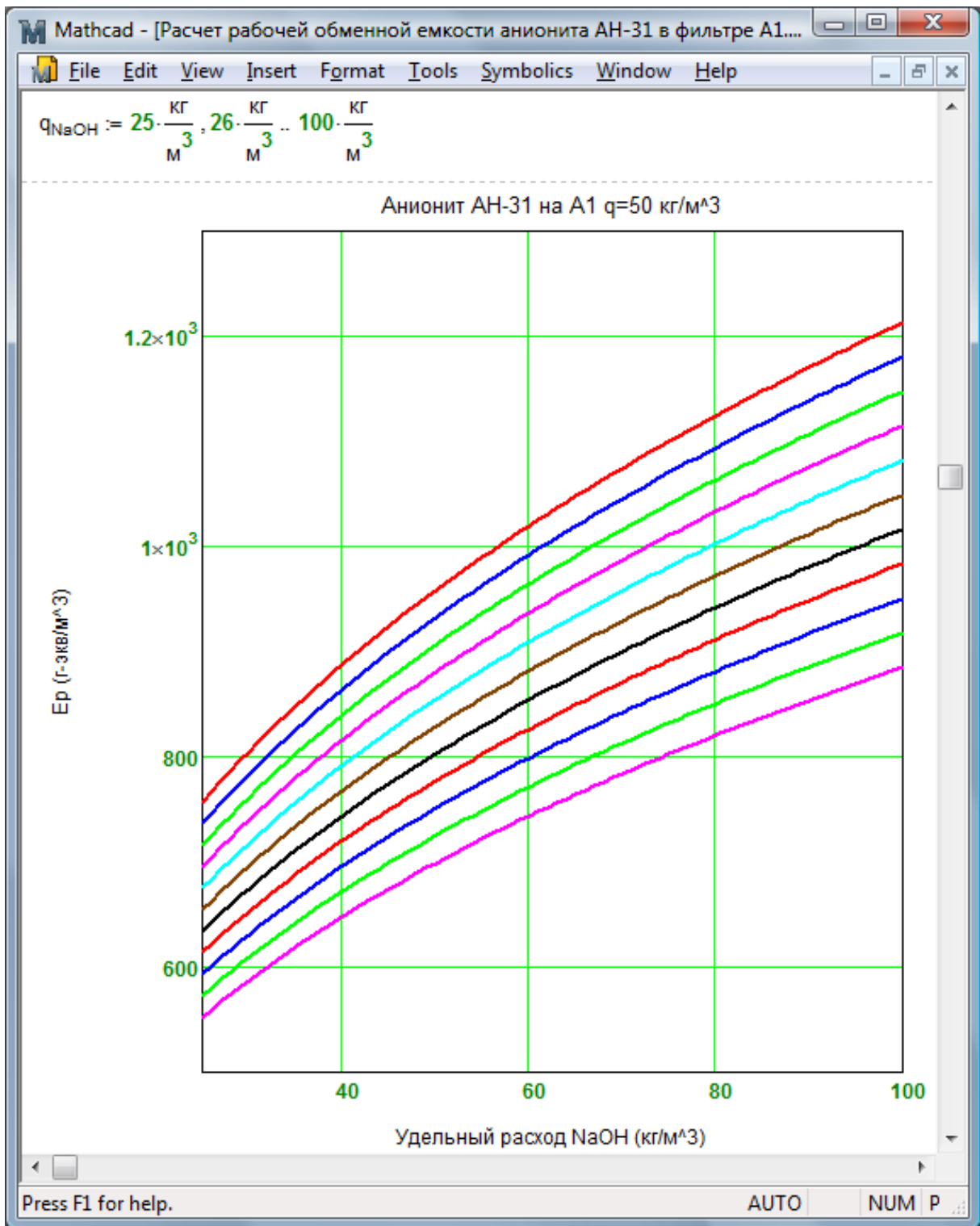


Рис. 7.3. Рабочая обменная емкость анионита АН-31 в анионитном фильтре первой ступени при различном удельном расходе щелочи на регенерацию

На рис. 7.4 и 7.5 показана аналогичная по аргументам и возвращаемому результату интерполирующая функция.

Mathcad - [Расчет рабочей обменной емкости анионита АН-31 в фильтре А1.xmcd]

File Edit View Insert Format Tools Symbolics Window Help

Интерполяция

Интерполирующая функция для расчета рабочей обменной емкости анионита АН-31 в анионитном фильтре первой ступени (по данным из "Технология проектирования тепловых электростанций и методы ее компьютеризации". -М.: Энергоатомиздат, 1977 г. (стр. 107)).

$$E_p(q_{\text{NaOH}}, \text{SO}_4, \text{Cl}) := q \leftarrow \frac{q_{\text{NaOH}}}{\frac{\text{кг}}{\text{м}^3}}$$

error("Ошибка! q должно быть >= 25 кг/м^3") if q < 25
 error("Ошибка! q должно быть <= 100 кг/м^3") if q > 100

$$n \leftarrow \frac{\text{SO}_4}{\text{SO}_4 + \text{Cl}}$$

error("Ошибка в исходных концентрациях!") if n < 0
 error("Ошибка в исходных концентрациях!") if n > 1

"q n"	0.0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1.0
25	410	460	460	465	500	520	550	590	600	650	670
37.5	515	570	580	590	610	650	690	720	760	800	860
50	630	680	690	705	740	770	800	860	890	920	980
62.5	710	750	770	800	825	860	900	940	970	1000	1050
75	780	805	840	880	905	930	970	1000	1040	1080	1110
87.5	825	860	900	925	965	990	1015	1050	1090	1130	1170
100	870	905	940	975	1000	1025	1060	1100	1120	1180	1210

$$M \leftarrow$$

b2 ← submatrix(M, ORIGIN + 1, rows(M) - 1 + ORIGIN, ORIGIN, ORIGIN)
 C2 ← (submatrix(M, ORIGIN, ORIGIN, ORIGIN + 1, cols(M) - 1 + ORIGIN))^T
 B ← submatrix(M, ORIGIN + 1, rows(M) - 1 + ORIGIN, ORIGIN + 1, cols(M) - 1 + ORIGIN)^T
 for i ∈ ORIGIN.. cols(B) - 1 + ORIGIN
 E_i ← interp(cspline(C2, B⁽ⁱ⁾), C2, B⁽ⁱ⁾, n)
 interp(cspline(b2, E'), b2, E', q) · $\frac{\text{ГЭКВ}}{\text{м}^3}$

Пример обращения к функции

$$\text{SO}_4 := 3 \cdot \frac{\text{мг}}{\text{л}} \quad \text{Cl} := 5 \cdot \frac{\text{мг}}{\text{л}}$$

$$E_p\left(55 \cdot \frac{\text{кг}}{\text{м}^3}, \text{SO}_4, \text{Cl}\right) = 769.2 \frac{\text{мгЭКВ}}{\text{дм}^3}$$

Press F1 for help. AUTO NUM Page 2

Рис. 7.4. Интерполирующая функция для расчета рабочей обменной емкости анионита АН-31 в анионитном фильтре первой ступени

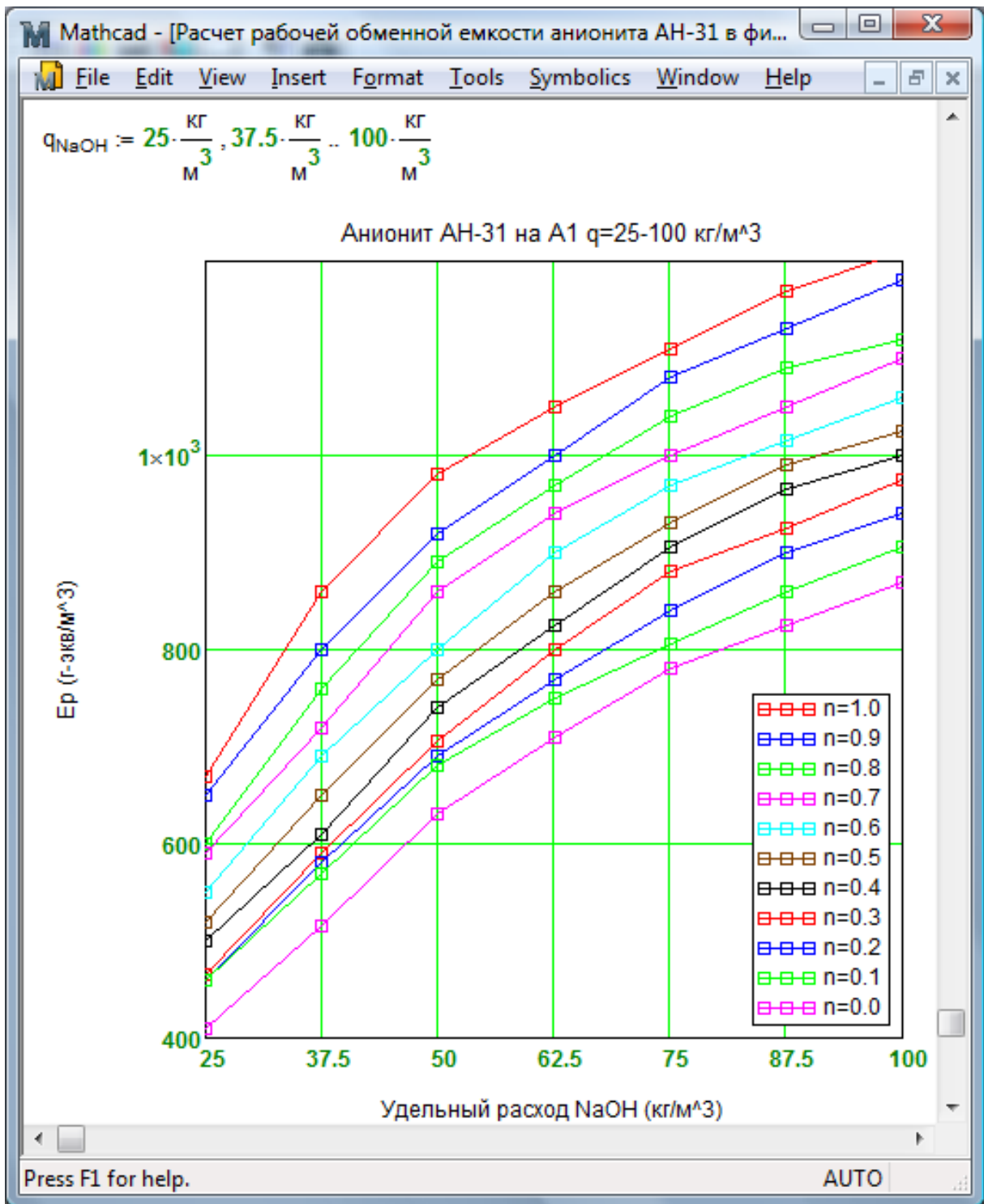


Рис. 7.5. Рабочая обменная емкость анионита АН-31 в анионитном фильтре первой ступени при различном удельном расходе щелочи на регенерацию

8. Методика расчета и оптимизации ВПУ

На основе подходов, изложенных в предыдущих главах, разработан расчетный документ в пакете Mathcad для расчета водоподготовительной установки по схеме МФ-Н1-А1-Н2-Д-А2.

Вследствие его значительного объема, распечатка документа приведена в Приложении №1.

9. Математическая модель работы осветлительного фильтра

Для математического описания закономерностей процессов удаления взвешенных веществ фильтрованием выделяют двумя сечениями 1 – 1 и 2 – 2 элементарный слой загрузки толщиной Δx на расстоянии x от ее поверхности (рис. 9.1). Площадь поверхности горизонтального сечения слоя примем равной 1. К сечению 1 – 1 подходит вода с массовой концентрацией частиц c_1 , а через сечение 2 – 2 вода выходит из слоя с концентрацией c_2 . Уменьшение концентрации частиц в элементарном слое составляет:

$$\Delta C = -(C_2 - C_1) = -\frac{\partial C}{\partial x} \Delta x. \quad (9.1)$$

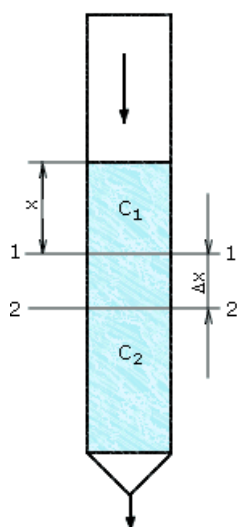


Рис. 9.1. Модель фильтровальной колонны

Градиент концентрации выражен частной производной, т.к. концентрация частиц в каждом сечении зависит не только от x , но и от τ – продолжительности процесса фильтрования. Знак "-" показывает на уменьшение концентрации при увеличении x .

Рассматривая эффект осветления воды как суммарный результат двух противоположных процессов – изъятия частиц из воды

вследствие адгезии к зернам и отрыва ранее прилипших частиц под влиянием гидродинамического воздействия потока, – выразим:

$$\Delta C = \Delta C_1 - \Delta C_2, \quad (9.2)$$

где ΔC_1 – уменьшение концентрации частиц за счет их прилипания; ΔC_2 – увеличение концентрации за счет отрыва частиц.

Величина ΔC_1 пропорциональна средней концентрации частиц в объеме выделенного слоя c , толщине слоя Δx и параметру фильтрования b , определяющего интенсивность прилипания частиц и зависящего от условий фильтрования:

$$\Delta C_1 = b \cdot C \cdot \Delta x. \quad (9.3)$$

Величина ΔC_2 пропорциональна количеству накопившегося к данному моменту времени осадка $\rho \Delta x$, параметру фильтрования a , определяющего интенсивность отрыва частиц, зависящего от условий фильтрования, и обратно пропорциональна скорости фильтрования ω :

$$\Delta C_2 = a \cdot \frac{\rho \cdot \Delta x}{\omega}, \quad (9.4)$$

где ρ – количество осадка, накопившегося к данному моменту времени в единице объема элементарного слоя загрузки (плотность насыщения загрузки осадком).

Подставляя значения ΔC , ΔC_1 и ΔC_2 в (9.2), получим:

$$-\frac{\partial C}{\partial x} = b \cdot C - \frac{a}{\omega} \cdot \rho. \quad (9.5)$$

Уравнение (9.5), являясь основным уравнением процесса фильтрования, содержит две переменные величины c и ρ , поэтому его недостаточно для описания процесса.

Вторым уравнением, дополняющим (9.5), является уравнение баланса вещества. Через единицу площади поверхности слоя, принятого равной 1, за единицу времени проходит объем воды, равный скорости фильтрования ω . Следовательно, массовое количество вещества, задерживаемого слоем с единичной площадью за единицу времени, равно:

$$\Delta Q = \omega \cdot \Delta C = -\omega \cdot \frac{\partial C}{\partial x} \Delta x. \quad (9.6)$$

Скорость накопления отложений в слое, или количество вещества, накопившегося в нем за единицу времени, равно:

$$\Delta Q = \frac{\partial \rho}{\partial \tau} \Delta x. \quad (9.7)$$

Приравнявая выражения (9.6) и (9.7), получим:

$$\frac{\partial \rho}{\partial \tau} = -\omega \cdot \frac{\partial C}{\partial x}. \quad (9.8)$$

Это дифференциальное уравнение является уравнением баланса массы. Оно показывает, что количество вещества, извлеченного слоем Δx из воды за единицу времени, равно количеству накопившегося в этом слое вещества за тот же промежуток времени.

Дифференцируя уравнение (9.5) по времени и учитывая уравнение баланса массы (9.8), получим:

$$\frac{\partial^2 C}{\partial x \partial \tau} + a \cdot \frac{\partial C}{\partial x} + b \cdot \frac{\partial C}{\partial \tau} = 0. \quad (9.9)$$

Это уравнение в дифференцируемой форме описывает ход процесса осветления при фильтровании суспензий.

Аналогично уравнению (9.9) выводится дифференциальное уравнение для плотности насыщения:

$$\frac{\partial^2 \rho}{\partial x \partial \tau} + a \cdot \frac{\partial \rho}{\partial x} + b \cdot \frac{\partial \rho}{\partial \tau} = 0, \quad (9.10)$$

описывающее в дифференциальной форме процесс изменения плотности насыщения загрузки осадком по ее поверхности и с течением времени.

Значение параметров фильтрования b и a обычно находят экспериментально из-за многообразия совокупных физических и физико-химических факторов, характеризующих свойств взвеси, воды и материала загрузки.

На рис. 9.2-9.4 представлен листинг расчетного документа Mathcad с математической моделью работы осветлительного фильтра.

Исходными данными для моделирования работы осветлительного фильтра являются качество воды после осветлителя (обычно $C_{гдп} = 10$ мг/л), требуемый расход воды на выходе из группы осветлительных фильтров. Определению подлежат затраты воды на собственные нужды осветлительных фильтров и, вследствие этого,

требуемый расход на выходе из предыдущей ступени водоочистки – осветлителя.

Расчет осветлительного фильтра

Импорт дополнительных определений

Исходные данные

$$Q_{\text{ст_ВПУ_МФ}} := 170 \cdot \frac{\text{М}^3}{\text{ч}} \quad Q_{\text{ст_ПТС_МФ}} := 580 \cdot \frac{\text{М}^3}{\text{ч}}$$

Расчетная производительность:

$$Q_{\text{ст_МФ}} := Q_{\text{ст_ВПУ_МФ}} + Q_{\text{ст_ПТС_МФ}} = 750 \cdot \frac{\text{М}^3}{\text{ч}}$$

Скорость фильтрования: $V_{\text{вп}} := 10 \cdot \frac{\text{М}}{\text{ч}}$

Требуемая площадь фильтрования:

$$F_{\text{треб}} := \frac{Q_{\text{ст_МФ}}}{V_{\text{вп}}} = 75 \text{ М}^2$$

Принятый диаметр фильтра: $d := 3.4 \cdot \text{М}$

Площадь одного фильтра:

$$f_{\text{МФ}} := \frac{\pi \cdot d^2}{4} = 9.079 \text{ М}^2$$
$$n_{\text{раб}} := \frac{F}{f_{\text{МФ}}} \quad n_{\text{раб}} = 8.261$$

Число фильтров (в работе +регенерации+резерве)

$$n_{\text{раб}} := 9 \quad n_{\text{рег}} := 1 \quad n_{\text{рез}} := 1$$
$$n := n_{\text{раб}} + n_{\text{рег}} + n_{\text{рез}} \quad n = 11$$

Действительная скорость фильтрования:

$$\omega_{\text{д}} := \frac{Q_{\text{ст_МФ}}}{f_{\text{МФ}} \cdot n_{\text{раб}}} = 9.178 \cdot \frac{\text{М}}{\text{ч}}$$

Press F1 for help.

Рис. 9.2. Расчет осветлительного фильтра

Mathcad - [Расчет осветлительного фильтра.xmcd]

File Edit View Insert Format Tools Symbolics Window Help

Грязеемкость: $\Gamma_{\text{м}} := 2 \cdot \frac{\text{КГ}}{\text{М}^3}$

Принятая высота слоя: $h_{\text{сл}} := 1 \cdot \text{М}$

Продолжительность фильтроцикла:

$$c_{\text{м}} := 10 \cdot \frac{\text{МГ}}{\text{ДМ}^3}$$

$$T_{\text{м}} := \frac{h_{\text{сл}} \cdot f_{\text{МФ}} \cdot \Gamma_{\text{м}} \cdot n_{\text{раб}}}{Q_{\text{СТ_МФ}} \cdot c} = 21.8 \text{ ч}$$

Суточное число регенераций всех фильтров:

$$m_{\text{м}} := \frac{n_{\text{раб}}}{T} = 10 \frac{1}{\text{сут}}$$

Удельный расход воды на взрыхление фильтра: $i_{\text{взр_МФ}} := 12 \cdot \frac{\text{КГ}}{\text{С} \cdot \text{М}^2}$

Время взрыхления: $T_{\text{взр}} := 15 \cdot \text{МИН}$

Расход воды на взрыхление:

$$V_{\text{взр_МФ}} := \frac{f_{\text{МФ}} \cdot i_{\text{взр_МФ}} \cdot T_{\text{взр}}}{1000 \cdot \frac{\text{КГ}}{\text{М}^3}} = 98.1 \text{ М}^3$$

Удельный расход воды на отмывку: $a := 1 \cdot \frac{\text{М}^3}{\text{М}^3}$

Press F1 for help. AUTO NUM | I

Рис. 9.3. Расчет осветлительного фильтра

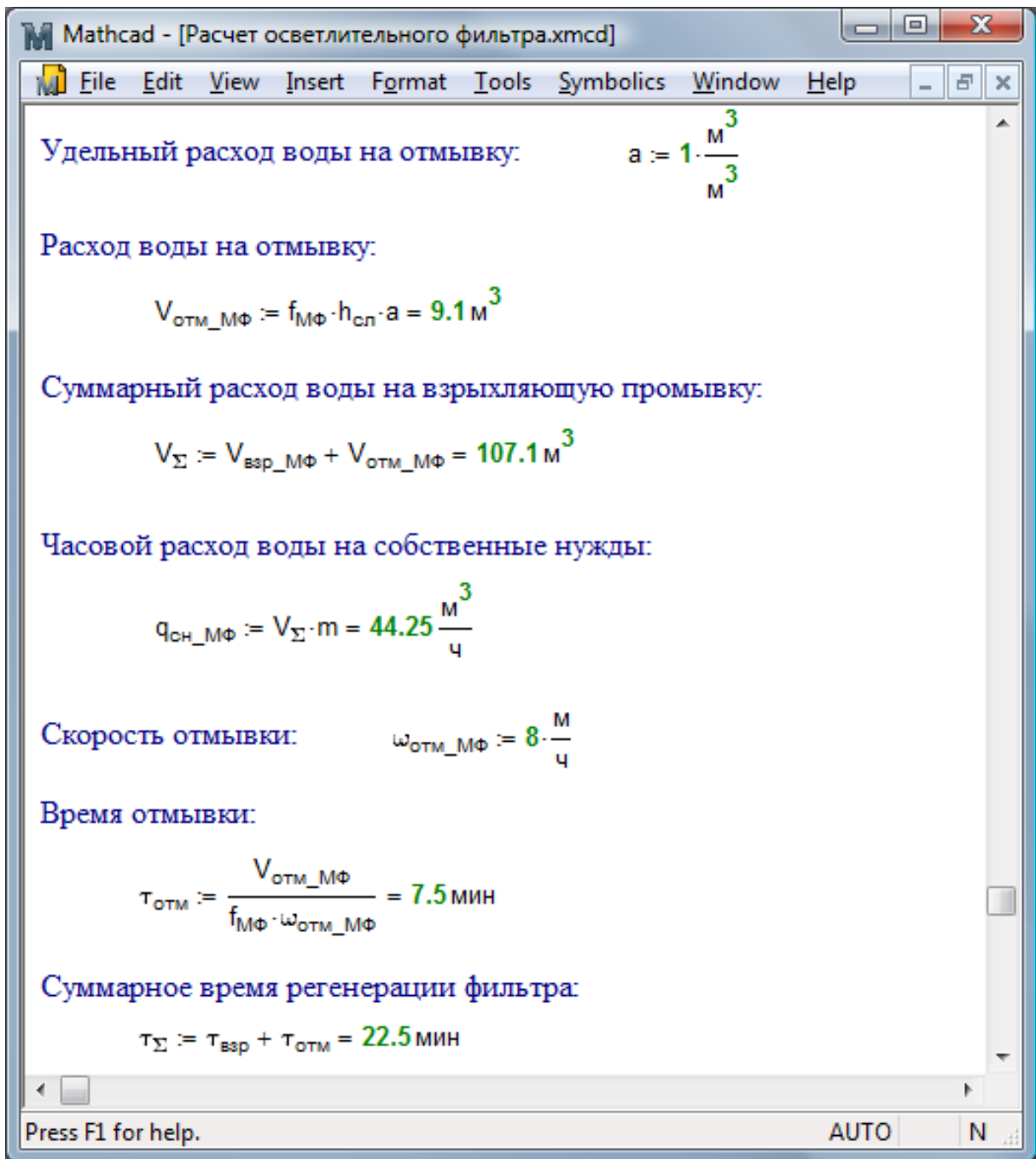


Рис. 9.4. Расчет осветлительного фильтра

Литература

1. Физические величины: Справочник. М.: Энергоатомиздат, 1991 г.
2. Степин Б.Д. Применение Международной системы единиц физических величин в химии: Практ. пособие. – М.: Высшая школа, 1990 г.
3. Очков В.Ф. «Физические и экономические величины в Mathcad и Maple». М.: «Финансы и статистика», 2002 г.

4. Мартынова О.И., Никитин А.В., Очков В.Ф. Водоподготовка: Расчеты на персональном компьютере. М.: Энергоатомиздат, 1990.
5. Копылов А.С., Лавыгин В.М., Очков В.Ф. Водоподготовка в энергетике. М.: Изд-во МЭИ, 2003.
6. Солодянников В.В. Расчет и математическое моделирование процессов водоподготовки. – М.: Энергоатомиздат, 2003. – 384 с.: ил.
7. Очков В.Ф., Пильщиков А.П., Солодов А.П., Чудова Ю.В. Анализ изотерм ионного обмена с использованием пакета Mathcad // Теплоэнергетика, № 7, 2003 г.
8. Очков В.Ф. Открытые расчеты процессов водоподготовки в интернете // Энергосбережение и водоподготовка, № 3, 2004.
9. Александров А.А., Очков В.Ф., Орлов К.А. Уравнения и программы для расчета свойств газов и продуктов сгорания // Теплоэнергетика, № 3, 2005.
10. Очков В.Ф. Mathcad 12 для студентов и инженеров. С-Пб.: БХВ-Петербург, 2005.
11. Очков В.Ф., Пильщиков А.П., Чудова Ю.В. Открытые расчеты по ионитам // Энергосбережение и водоподготовка. 2006. № 1.
12. Очков В.Ф. Математические пакеты и сетевой интерактивный теплотехнический справочник: проблемы и решения // Теплоэнергетика. 2006. № 6.
13. Очков В.Ф. Новые информационные технологии в энергетике: направления, решения, проблемы // Новое в российской электроэнергетике, № 11, 2005 г., С. 22-31.
14. Александров А.А., Орлов К.А., Очков В.Ф. Математические пакеты – новые подходы при расчетах процессов термодинамики и других научных дисциплин. // Известия высших учебных заведений. Проблемы энергетики. №11-12. 2005 г., С. 80-86.
15. Очков В.Ф., Пильщиков А.П., Чудова Ю.В. Открытые расчеты по ионитам // Энергосбережение и водоподготовка, № 1, 2006 г., С. 15-17.

**Приложение №1. Листинг документа с расчетом
ВПУ**