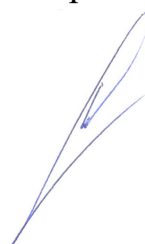


Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«КАЗАНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»

На правах рукописи

Бабилов Олег Евгеньевич



**МОДЕЛИРОВАНИЕ И СОВЕРШЕНСТВОВАНИЕ РАБОТЫ
ИОНИТНЫХ ФИЛЬТРОВ ВОДОПОДГОТОВИТЕЛЬНЫХ УСТАНОВОК
ТЭС НА ОСНОВЕ СИСТЕМНОГО ПОДХОДА**

Специальность: 2.4.5. Энергетические системы и комплексы

Диссертация
на соискание ученой степени кандидата технических наук

Научный руководитель
доктор технических наук, доцент
Филимонова Антонина Андреевна

Казань, 2026

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ	5
ГЛАВА 1. ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР	14
1.1 Технология ионитного обессоливания и ионитные фильтры	14
1.1.1 Регенерация ионообменных фильтров.....	17
1.1.2 Принцип технологии повторно-последовательной регенерации ионитных фильтров «каскад».....	20
1.2. Математическое моделирование работы ионитных фильтров.....	23
1.2.1 Модели реакторов с неидеальной структурой потока	25
1.2.2 Математические модели ионного обмена	28
1.3 Вычислительная гидродинамика (Computational Fluid Dynamics, CFD).....	30
1.3.1 Модель пористой среды (Porous medium model, PMM)	32
1.3.2 CFD модели с разрешением частиц (Particle-Resolved CFD)	33
1.4 Прогностические модели работы водоподготовительных установок	35
1.5 Выводы к Главе 1	36
ГЛАВА 2. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ, ПРОТЕКАЮЩИХ В ИОНООБМЕННЫХ СИСТЕМАХ ВОДОПОДГОТОВИТЕЛЬНЫХ УСТАНОВОК.....	38
2.1 Обзор вопроса, постановка задачи	38
2.2 Выбор математической модели	39
2.3 Допущения однопараметрической диффузионной модели	41
2.4 Граничные условия однопараметрической диффузионной модели	42
2.4.1 Двухэкспоненциальное решение со скачком концентрации в граничных условиях Данквертса.....	44
2.4.2 Одноэкспоненциальное решение со скачком концентрации и материальным балансом в точке пересечения	46
2.4.3 Одноэкспоненциальное решение со скачком концентрации по материальному балансу граничных точек	49
2.4.4 Двухэкспоненциальное решение без скачка концентрации (граничные условия Бояджиева)	51
2.4.5 Влияние граничных условий на вид концентрационных кривых.....	53
2.5 Математическая модель процесса регенерации ионитного фильтра	54
2.6 Компьютерная программа «Регенерация ионитного фильтра»	61
2.7 Выводы к Главе 2	64

ГЛАВА 3. CFD-МОДЕЛИРОВАНИЕ	65
3.1 Стационарная CFD-модель ионитного фильтра	66
3.1.2 Анализ сеточной сходимости.....	72
3.1.3 Результаты численного моделирования гидродинамики потока	73
3.1.4 Подключение модуля химической реакции для CFD-моделирования процесса регенерации ионита.....	74
3.1.5 Результаты CFD-моделирования процесса регенерации ионита с подключенным модулем химической реакции	75
3.2 Нестационарная CFD-модель ионитного фильтра	76
3.2.1 Допущения и ограничения нестационарной CFD-модели.....	77
3.2.2 Начальные и граничные условия нестационарной CFD-модели	78
3.2.3 Результаты и обсуждение	79
3.2.4 Верификация и валидация нестационарной CFD-модели	83
3.3 Исследование влияния конструктивных и технологических параметров на эффективность регенерации ионитного фильтра	86
3.3.1 Влияние геометрических характеристик фильтра на процесс регенерации..	86
3.3.2 Влияние скорости подачи регенерационного раствора	87
3.3.3 Влияние концентрации регенерационного раствора.....	88
3.4 Моделирование стадии отмывки ионитного фильтра.....	91
3.5 Выводы к Главе 3	92
ГЛАВА 4. ПРОГНОСТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ РАБОТЫ ИОНИТНОЙ ВОДОПОДГОТОВИТЕЛЬНОЙ УСТАНОВКИ.....	94
4.1 Разведывательный анализ данных и исходные данные	94
4.1.1 Корреляционный анализ (матрица Пирсона)	95
4.1.2 Анализ значимости признаков.....	98
4.1.3 Выводы по результатам разведывательного анализа	99
4.2 Прогностическая модель на основе искусственной нейронной сети	100
4.2.1 Подготовка данных и разделение на обучающую и тестовую выборки	100
4.2.2 Архитектура и обучение модели	101
4.2.3 Результаты и обсуждение	104
4.3 Прогностические модели на основе CatBoost и XGBoost персептора	105
4.4 Сравнение моделей Keras, CatBoost, XGBoost.....	106
4.5 Выводы к Главе 4	107

ГЛАВА 5. УСОВЕРШЕНСТВОВАНИЕ ПРОТИВОТОЧНОЙ ПОВТОРНО-ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОЙ РЕГЕНЕРАЦИИ БЛОЧНОЙ ИОНИТНОЙ ВОДОПОДГОТОВИТЕЛЬНОЙ УСТАНОВКИ И ОТМЫВКИ ИОНИТНЫХ ФИЛЬТРОВ.....	109
5.1.1 Показатели работы ВПУ при работе по технологии повторно-последовательной регенерации и отмывки «каскад»	111
5.2 Опытно-промышленные исследования работы ионитных фильтров.....	114
5.2.1. Описание ВПУ Нижнекамской ТЭЦ-1	114
5.2.2 Анализ гидродинамического режима на примере Н-катионитных фильтров ВПУ Нижнекамской ТЭЦ-1	116
5.2.3 Пример регенерации цепочки ионитных фильтров от 29.11.2024.....	119
5.2.4 Пример регенерации цепочки ионитных фильтров от 20.01.2024.....	125
5.3 Предлагаемые усовершенствования организации повторно-последовательной регенерации блочной ионитной водоподготовительной установки и отмывки ионитных фильтров.....	130
5.4 Техничко-экономический расчет эффективности технологии.....	138
5.5 Выводы к Главе 5	140
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	142
Рекомендации, перспективы дальнейшей разработки темы исследования диссертационной работы.....	143
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ.....	144
ПРИЛОЖЕНИЯ.....	165
Приложение А. Создание и настройка CFD-модели в программном комплексе COMSOL Multiphysics	165
Приложение Б. Программа разведывательного анализа данных	178
Приложение В. Программа для построения прогностических моделей работы ионитной ВПУ	181
Приложение Г. Показатели работы цепочки ионитных фильтров	202
Приложение Д. Технологическая схема ВПУ ХВО-1 Нижнекамской ТЭЦ-1.....	210
Приложение Е. Технологическая схема ВПУ ХВО-2 Нижнекамской ТЭЦ-1.....	211
Приложение Ж. Акт об использовании результатов диссертационной работы на филиале АО «ТГК-16» – Нижнекамская ТЭЦ (ПТК-1)	212

ВВЕДЕНИЕ

Актуальность темы исследования

Ионитные водоподготовительные установки являются неотъемлемой частью энергетических комплексов России, обеспечивая производство химически обессоленной воды для питания паровых котлов на тепловых электрических станциях. Технология ионитной водоподготовки успешно применяется в энергетике более 80 лет, что подтверждает ее технологическую надежность, универсальность, способность обеспечивать глубокую степень обессоливания при изменяющемся составе исходной воды, а также высокую эффективность при очистке турбинного конденсата. Одним из главных эксплуатационных недостатков ионообменной технологии является перерасход химических реагентов на стадии регенерации, что приводит к увеличению объема высокоминерализованных сточных вод. Так, годовое потребление природной воды только для Нижнекамской ТЭЦ-1 составляет порядка 13 млн м³, а объем сточных вод превышает 4,5 млн м³, что требует значительных экономических затрат на нейтрализацию и утилизацию. Применяемые на сегодняшний день методы регенерации ионитных фильтров не позволяют одновременно достичь максимального качества восстановления обменной емкости ионита и минимального расхода используемых реагентов. Важной и актуальной научно-технической задачей в условиях цифровизации энергетической отрасли является совершенствование технологии регенерации ионитных фильтров с использованием междисциплинарного подхода. Объединяя современные технические решения в области водоподготовки с методами математического моделирования, вычислительной гидродинамики и машинного обучения возможно осуществить переход от жестко регламентированного выбора параметров регенерации к научно-обоснованной цифровой системе управления ионитными водоподготовительными установками (ВПУ). Такой подход позволит достичь целей энерго- и ресурсосбережения и уменьшить вредное воздействие на окружающую среду.

Степень научной разработанности проблемы

Современные направления совершенствования ионообменной технологии включают применение схем противоточной регенерации фильтров, использование ионитов с улучшенными характеристиками, оптимизацию конструкции фильтров и создание малосточных схем. Значительный вклад в развитие противоточных технологий и модернизацию ионитных ВПУ внесли Рябчиков Б.Е., Очков В.Ф., Юрчевский Е.Б., Балаев И.С., Громов С.Л., Жадан А.В., Ларин А.Б., Веселовская Е.В., Фейзиев Г.К. и другие исследователи. Существенный вклад в области математического моделирования ионного обмена и ионитных фильтров внесли Голованчиков А.Б., Натарева С.В., Чичиров А.А., Лапшин Н.А., Груздев А.Н., а также зарубежные авторы Chr. Boyadjiev, Shafeeyan M.S., Lizarralde I., Gomes C.P., Zhang J. С развитием технологий суперкомпьютерного моделирования для исследования структуры потоков в ионитных фильтрах все чаще применяются методы вычислительной гидродинамики (CFD), представленные в работах Dixon A.G., Jurtz N., Wu C.Y., Gao X. Отдельным направлением является применение методов машинного обучения для прогнозирования показателей работы ВПУ. Возможность использования нейросетевых моделей для анализа качества воды, оптимизации режимов работы ВПУ, определения доз реагентов и прогнозирования параметров технологических процессов представлена в работах Al-Ghazawi et al., Jawad et al., Ibrahim et al., Lin et al., Kim et al., Kabuba J.

Выбор и обоснование направления исследований

Анализ литературных данных показал, что противоточные технологии, математические модели, CFD-моделирование и методы машинного обучения исследуются по отдельности и до сих пор не существует подхода, объединяющего указанные методы исследования для научно обоснованного выбора режимов работы, регенерации и отмывки ионитных фильтров. В связи с этим в качестве направления исследования выбрана разработка системного подхода для анализа и совершенствования процессов ионитной водоподготовки. Выбор данного

направления исследований обусловлен необходимостью снижения расхода реагентов и воды на собственные нужды, уменьшения объема сточных вод и повышения эффективности регенерации ионитных фильтров при сохранении требуемого качества обессоленной воды.

Цель работы: разработка системного подхода к моделированию, прогнозированию и совершенствованию процессов работы, регенерации и отмывки ионитных фильтров водоподготовительных установок ТЭС для обеспечения энерго- и ресурсосбережения, снижения негативного воздействия на окружающую среду.

Объект исследования: ионитные водоподготовительные установки ТЭС.

Задачи исследования:

1. Провести анализ современного состояния и направлений совершенствования ионообменных технологий водоподготовки ТЭС и обосновать необходимость разработки системного подхода к моделированию работы, регенерации и отмывки ионитных фильтров.

2. Разработать математическую модель проточного ионитного фильтра на основе однопараметрической диффузионной модели, получить аналитические решения при различных граничных условиях и сопоставить результаты моделирования с экспериментальными данными.

3. Разработать и верифицировать цифровую CFD-модель ионитного фильтра в стационарной и нестационарной постановках.

4. Разработать прогностическую модель работы ионитной ВПУ на основе методов машинного обучения для прогнозирования продолжительности фильтроцикла и удельных расходов реагентов на регенерацию по параметрам исходной воды.

5. Разработать предложения по модернизации технологии повторно-последовательной регенерации и отмывки ионитных фильтров «каскад» на основе методов математического моделирования, CFD-моделирования и нейросетевого прогнозирования для ионитной ВПУ действующей ТЭЦ. Провести технико-

экономический расчет, подтверждающий целесообразность внедрения разработанных решений.

Методология и методы исследования

Для решения задач исследования применялись фундаментальные основы и положения высшей математики, физической химии, гидродинамики, а также методов математического моделирования, вычислительной гидродинамики (CFD) и машинного обучения.

Научная новизна исследования:

1. Разработана математическая модель проточного ионитного фильтра на основе однопараметрической диффузионной модели в стационарной и нестационарной постановке задачи, отличающаяся сравнительным анализом полученных аналитических решений для четырех постановок граничных условий.

2. Разработана и верифицирована цифровая CFD-модель ионитного фильтра в программном комплексе COMSOL Multiphysics, отличающаяся возможностью проведения анализа гидродинамики, массопереноса, степени регенерации и стадии отмывки, а также позволяющая оценить влияние технологических параметров на эффективность процесса регенерации ионита.

3. Разработана и верифицирована нейросетевая прогностическая модель работы ионитной ВПУ, позволяющая прогнозировать продолжительность фильтроцикла и удельные расходы реагентов на регенерацию по параметрам исходной воды.

4. Разработан системный научно-обоснованный подход к интеллектуализации управления процессами работы, регенерации и отмывки ионитных фильтров и совершенствованию технологии повторно-последовательной регенерации и отмывки ионитных фильтров «каскад», основанный на интеграции однопараметрической диффузионной модели, CFD-моделирования, нейросетевого прогнозирования в рамках единой системы – «цифрового помощника».

Теоретическая значимость заключается в обосновании системного подхода к описанию процессов работы, регенерации и отмывки ионитных фильтров на

основе совместного использования однопараметрической диффузионной математической модели, CFD-моделирования и нейросетевого прогнозирования, что дает возможность для совершенствования технологии повторно-последовательной регенерации ионитных фильтров и перехода к цифровому интеллектуальному сопровождению принятия решений при эксплуатации ионитных ВПУ.

Практическая значимость полученных результатов:

1. На основе аналитических решений однопараметрической диффузионной модели разработана компьютерная программа, позволяющая рассчитывать выходные концентрационные кривые и уточнять объем реагентов для регенерации промышленных ионитных фильтров, что способствует снижению удельных расходов реагентов и воды, увеличению фильтроцикла, минимизации рисков гипсования и органического отравления ионитов, а также повышению экологической безопасности ВПУ ТЭС.

2. Разработанная и верифицированная CFD-модель может быть использована для расчета гидравлического сопротивления слоя, определения степени регенерации слоя ионита, объема отмывочных вод и оценки влияния технологических параметров на эффективность процесса регенерации.

3. Предложена концепция системы «цифровой помощник» – предиктивной аналитической системы на основе диффузионной модели, CFD-модели и нейросетевой прогностической модели для расчета необходимого объема и концентрации реагентов для каждого ионитного фильтра, продолжительности регенерации и отмывки, позволяющей осуществлять управление переключениями потоков и оценивать продолжительность последующего фильтроцикла по параметрам исходной воды.

4. На основе системного подхода разработаны предложения по модернизации технологии повторно-последовательной регенерации и отмывки ионитных фильтров, позволяющие добиться целей ресурсосбережения, повышения эффективности работы ионитных ВПУ.

Достоверность основных результатов диссертационной работы подтверждается использованием фундаментальных положений теории процессов химической технологии, высшей математики, вычислительной гидродинамики, методов математического и цифрового моделирования, а также современных методов анализа данных и машинного обучения. Полученные результаты согласуются с аналитическими решениями, результатами промышленных экспериментов и показателями работы действующих ионитных водоподготовительных установок.

Положения, выносимые на защиту:

1. Математическая модель проточного ионитного фильтра на основе однопараметрической диффузионной модели, включающая аналитические решения для четырех вариантов граничных условий, и прикладная компьютерная программа для расчета выходных концентрационных кривых реагента и продуктов обмена в зависимости от характеристик ионитного фильтра, ионитной загрузки, используемого реагента и режима регенерации.

2. Результаты CFD-моделирования ионитного фильтра, подтверждающие возможность применения разработанной цифровой модели для анализа гидродинамики, массопереноса, степени регенерации и стадии отмывки, а также оценки влияния технологических параметров на эффективность регенерации.

3. Нейросетевая прогностическая модель работы ионитной ВПУ, позволяющая прогнозировать продолжительность фильтроцикла и удельных расходов реагентов на регенерацию по показателям качества исходной воды.

4. Научно-обоснованный подход к интеллектуализации управления процессами работы, регенерации и отмывки ионитных фильтров, основанный на интеграции однопараметрической диффузионной модели, CFD-моделирования и нейросетевого прогнозирования в системе «цифровой помощник».

5. Предложения по модернизации технологии повторно-последовательной регенерации и отмывки ионитных фильтров «каскад» для ионитной ВПУ действующей ТЭЦ.

Реализация результатов работы:

Проведены работы по моделированию регенерации ионитных фильтров и опытно-промышленные испытания на блочной ионитной водоподготовительной установке в филиале АО «ТГК-16» – Нижнекамская ТЭЦ (ПТК-1). Разработаны технические решения по совершенствованию противоточной повторно-последовательной регенерации и отмывки промышленных ионитных фильтров.

Соответствие диссертации паспорту специальности

По направлениям исследований диссертационная работа соответствует паспорту специальности 2.4.5. «Энергетические системы и комплексы» в части пп. 1 – Разработка научных основ (подходов), режимов работы энергетических систем, комплексов, энергетических установок на органическом топливе и их основного и вспомогательного оборудования; пп. 2 – Математическое моделирование, численные и натурные исследования физико-химических и рабочих процессов, протекающих в энергетических системах и установках на органическом топливе, их основном и вспомогательном оборудовании и общем технологическом цикле производства электрической и тепловой энергии; пп. 3 – Разработка, исследование, совершенствование действующих технологий и оборудования для производства электрической и тепловой энергии, водоподготовки и водно-химических режимов, способов снижения негативного воздействия на окружающую среду, повышения надежности и ресурса элементов энергетических систем, комплексов и входящих в них энергетических установок; пп. 4 – Разработка научных подходов, технологий конструирования и проектирования, основного и вспомогательного оборудования энергетических систем, энергокомплексов и входящих в них энергетических установок; пп. 5 – Разработки и исследования в области энергосбережения и ресурсосбережения при производстве тепловой и электрической энергии; пп. 7 – Исследование влияния технических решений, принимаемых при эксплуатации энергетических систем, комплексов и установок на их финансово-экономические показатели, региональную экономику и экономику природопользования.

Апробация результатов исследования

Основные результаты диссертационной работы представлены в 4 публикациях в журналах из перечня ВАК РФ и Белого списка, в 9 публикациях, индексируемых в базах данных Scopus и Web of Science. Всего 29 публикаций. Принято очное участие с тезисами докладов по теме диссертационной работы на 14 международных и всероссийских конференциях.

Перечень конференций с очным участием автора: 15-я Международная научно-техническая конференция «Problems of energy systems and thermal power complexes» (г. Саратов, 6-9 октября 2020 г.); Международный научный семинар им. Ю.Н. Руденко «Методические вопросы исследования надежности больших систем энергетики» (г. Казань, ФГБОУ ВО «КГЭУ», 21-26 сентября 2020 г.); XII Всероссийская конференция «Thermophysics and Power Engineering in Academic Centers» (г. Сочи, 25-27 октября 2021 г.); Всероссийская научно-техническая конференция студентов, аспирантов и молодых ученых Энергия-2021 (г. Иваново, ФГБОУ ВО «ИГЭУ», 6-8 апреля 2021 г.); XXVI – XXVIII – XXIX Всероссийский аспирантско-магистерский научный семинар, посвященный дню энергетика. (г. Казань, ФГБОУ ВО «КГЭУ», Казань, 2022 г., 2024 г., 2025 г.); Международная молодежная конференция – 4th и 6th International Youth Conference on Radio Electronics, Electrical and Power Engineering (г. Москва, НИУ «МЭИ», 2022 г., 2024 г.); VIII – IX Национальная научно-практическая конференция «Приборостроение и автоматизированный электропривод в топливно-энергетическом комплексе и жилищно-коммунальном хозяйстве». (г. Казань, ФГБОУ ВО «КГЭУ», 2022 г., 2023 г.); Международная молодежная научная конференция Тинчуринские чтения – 2024-2025 «Энергетика и цифровая трансформация». (г. Казань, ФГБОУ ВО «КГЭУ», 2024 г., 2025 г.); Международная научно-техническая конференция на тему: «Актуальные проблемы и перспективы развития теплоэнергетики: значения парогазовых и когенерационных технологий в энергетике Узбекистана». (Ташкентский государственный технический университет (ТГТУ), 7-8 апреля 2026 г.).

Личный вклад автора

Личный вклад автора состоит в проведении литературного обзора, разработке математической и CFD-моделей ионитного фильтра, проведении промышленных экспериментов, разработке прогностических моделей на основе методов машинного обучения, анализе и обобщении полученных результатов, разработке предложений по совершенствованию технологии регенерации и отмывки ионитных фильтров, апробации результатов и подготовке публикаций по тематике научного исследования.

Объем и структура диссертации

Диссертационная работа представлена на 212 страницах машинописного текста, из которых основной текст составляет 139 страниц, включает 59 рисунков, 25 таблиц. Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения, списка литературы, содержащего 164 источника, и 7 приложений.

ГЛАВА 1. ЛИТЕРАТУРНЫЙ ОБЗОР

Водоподготовительные установки (ВПУ) являются важной составляющей сложного технологического процесса получения тепловой и электрической энергии на тепловых электрических станциях (ТЭС), для работы которых необходима обессоленная вода, а также применяются в процессах умягчения и обессоливания воды для нужд различных отраслей промышленности (нефтегазовая отрасль, металлургия, фармацевтика, пищевая промышленность и др.).

1.1 Технология ионитного обессоливания и ионитные фильтры

Выбор технологических схем ионитных обессоливающих ВПУ основывается на требованиях к качеству теплоносителя, так как с повышением давления в паровых котлах ужесточаются и требования к питательной воде [1]. Обессоливание может проводиться в одну, две, три ступени, а также с применением фильтров смешанного действия (ФСД). В литературе известны основные технологические схемы подготовки умягченной и обессоленной воды (рисунок 1.1–1.3) [1,2].

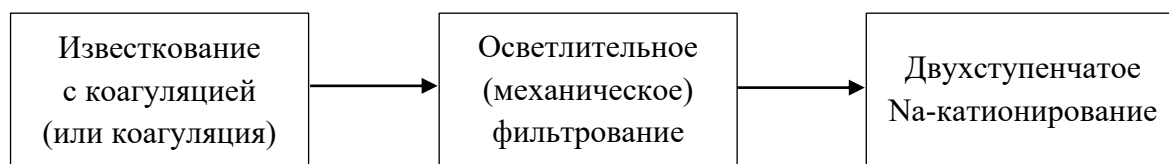


Рисунок 1.1 – Технологическая схема умягчения воды с остаточной жесткостью не более 5 мкмоль-экв/дм³

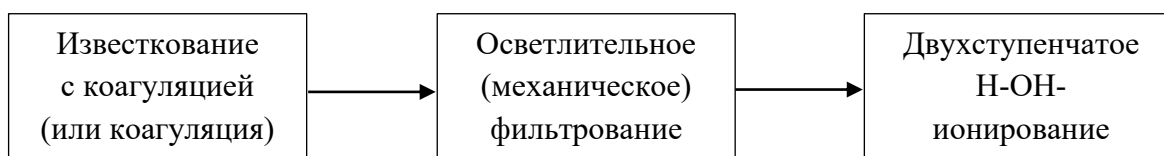


Рисунок 1.2 – Технологическая схема производства обессоленной воды с остаточной удельной электропроводимостью не более 2 мкСм/см

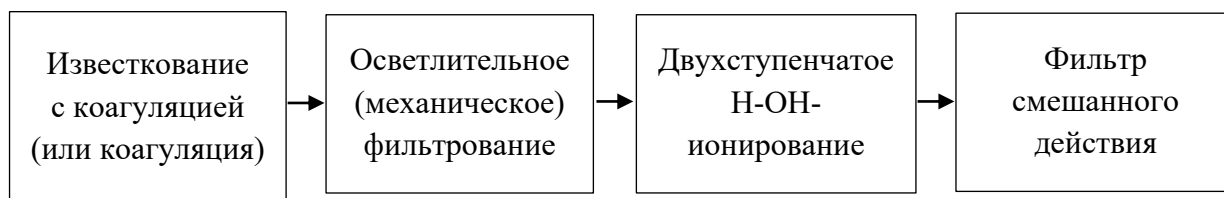


Рисунок 1.3 – Технологическая схема производства обессоленной воды с остаточной удельной электропроводимостью не более 0,1 мкСм/см

Классической технологией, применяемой для деминерализации воды на ТЭС, является ионный обмен на базе проточных аппаратов. Эта технология обладает следующими преимуществами: возможность изменения производительности в широком диапазоне значений; простота проведения регенерации и отмычки ионитов; надежность получения очищенной воды требуемого качества [3]. Главными недостатками традиционных схем на основе проточных аппаратов являются: большой расход воды на собственные нужды, использование сверхстехиометрического объема химических реагентов, большой объем сточных вод, сложность осуществления эффективной и полной регенерации, недостаточная автоматизация процесса, необходимость утилизации высокоминерализованных сточных вод, проблемы удаления органических соединений [4-8].

Совершенствование ионитных технологий обессоливания воды может быть реализовано с использованием следующих направлений: 1) применение противоточной схемы регенерации ионитных фильтров [9-17]; 2) применение современных ионитных смол с увеличенной обменной емкостью и большим сроком службы [18-22]; 3) реконструкция дренажных систем и совершенствование конструкций фильтров [1, 22, 24]; 4) использование более высоких скоростей ионирования [13, 25]; 5) осуществление повторно-последовательной регенерации [26-28]; 6) создание малосточных схем ионитных ВПУ [28-31]; 7) создание комбинированных ионитно-мембранных схем [5, 32-36].

Натареевым С.В. были отмечены пути повышения эффективности работы ионообменных аппаратов [37, 38]: 1) реализация развитого гидродинамического режима, обеспечивающего равномерное распределение фаз в аппарате и устранение застойных зон; 2) увеличение поверхности контакта между ионитом и раствором; 3) секционирование рабочего объема аппарата для исключения обратного перемешивания фаз; 4) применение эффективного разделения ионита и раствора при их переходе из одной секции в другую; 5) снижение удельного потребления ионита; 6) автоматизация работы аппарата; 7) проведение адсорбционно-регенерационного цикла в одном фильтре.

В настоящее время среди множества различных конструкций ионитных фильтров получили распространение 3 основных варианта [1].

1) Фильтры с подачей очищаемой воды сверху вниз, а регенерацией снизу вверх с одновременной подачей блокирующего раствора или воздуха, разработанные компанией «Steinmulfer GmbH», и серийно выпускаемые Таганрогским заводом «Красный котельщик» по чертежам ВНИИАМ.

2) Фильтры с подачей очищаемой воды снизу вверх, а регенерацией сверху вниз. Компанией «Bayer AG» в 1960-х гг. были запатентованы две технологии – «Лифтбед» и «Швебебед», последняя из которых была доработана и получила две вариации – «Амберпак» (фирма Rohm & Haas) и «Пьюропак» (фирма Purolite).

3) Фильтры с подачей очищаемой воды сверху вниз, а регенерацией снизу вверх по технологии UPCORE – АПКОРЕ (UPflow COuntercurrent REgeneration).

Большое количество исследований посвящено сравнению эффективности противоточных технологий. Так, в работе Beltle С. [39] было показано, что технологии «Ринсбед», «Швебебед» и «АПКОРЕ» имеют близкие технологические показатели работы при одинаковой производительности. В работе Рябчикова Б.Е. [40] проведено сравнение технологий «Пьюропак» и «АПКОРЕ» по умягчению воды и показано, что качество получаемой воды, объем сточных вод и реагентов на регенерацию сопоставим, а общая эффективность противоточных технологий примерно в 1,5 выше, чем у прямоточных вариантов.

В работе Балаева И. С. [41] приводится обоснование преимуществ применения технологии «АПКОРЕ» для модернизации отечественных ВПУ по примеру Конаковской и Щекинской ГРЭС, Новгородских ТЭЦ и ГРЭС, ТЭЦ-12 Мосэнерго, Калининградской ТЭЦ-2 Калининской и Белоярской АЭС, Аппатитской ТЭЦ, Оршанской ТЭЦ, Нижнекамской ТЭЦ-2, Ставропольской ГРЭС.

Еще в 2009 г. Громов С.Л. отметил, что лучшими характеристиками по условиям эксплуатации обладает технология «АПКОРЕ», на основе которой специалистами НПК «Медиана-фильтр» и ТКЗ была разработана конструкция и налажено производство противоточных фильтров типа ФИПР-А [42].

Недостатки технологии «АПКОРЕ» отметил Жадан А.В. в своей работе [3], среди которых можно выделить необходимость в увеличенном диаметре трубопроводов подачи воды на блокировку ионита при регенерации и отвода регенерационных стоков. Ларин А.Б. в своей работе [13] отмечает, что переход к перспективным противоточным технологиям ионного обмена на высокоскоростных фильтрах требует глубокой автоматизации. Общие недостатки противоточных технологий приведены в работах [1,6,43].

В работе Веселовской Е. В. [7] поднимается важный вопрос, о котором редко упоминается в исследованиях по модернизации прямоточных фильтров под противоточные технологии. Перевод фильтров с соотношением $H/D = 0,5 - 1$ на противоточное фильтрование сводит достоинства данной технологии на нет, так как во избежание гидравлических нарушений требуется снизить скорость фильтрования, что приводит к отравлению ионообменных смол органическими соединениями и снижает качество фильтрата.

1.1.1 Регенерация ионообменных фильтров

Процесс регенерации фильтров установок химического обессоливания включает в себя три основные стадии: взрыхляющую промывку, ввод регенерационных растворов и отмывку от продуктов регенерации. Слабо

диссоциированные иониты могут быть регенерированы практически без избытка кислоты или щелочи, а сильно диссоциированные иониты требуют избытка регенерирующего агента. От качества регенерации напрямую зависит качество получаемой обессоленной воды.

Для регенерации ОН-анионитных фильтров обессоливающих ВПУ может применяться 2–8% раствор NaOH, 8–10% раствор NaCl, 3–4% раствор NH_3 , 6% раствор NaHCO_3 (гидрокарбонат натрия). При этом образуются высокоминерализованные отработанные щелочные регенерационные растворы.

Регенерация Н-катионитных фильтров проводится серной кислотой (H_2SO_4) различной концентрации (от 0,8 до 4%). Она дешевле, но менее эффективна, чем HCl и HNO_3 . При использовании серной кислоты регенерацию проводят с постепенным увеличением концентрации кислоты от 0,5 до 4% во избежание формирования сульфата кальция.

Прямоточная регенерация является наиболее простой и, как следствие, получившей широкое распространение технологией. Но из-за неравномерного распределения сорбируемых ионов по высоте ионитного слоя для получения требуемой глубины обессоливания на ионообменном фильтре при регенерации в прямоточном режиме необходимо обеспечить 2–8 кратный избыток регенерационного раствора [1].

Противоточная регенерация сложнее с точки зрения технической реализации. Однако из-за того, что наименее истощенный ионит контактирует с наиболее свежей порцией регенерационного раствора, противоточная технология обеспечивает максимальное качество очистки ионитных смол при небольшом избытке (от 1,1) регенерационного раствора. В работе Юрчевского Е. Б. [44] на примере Новочеркасской ГРЭС, Среднеуральной ГРЭС и котельной №3 СЖМ Ростовтеплосети доказано, что противоточные Na-катионитные, Н- катионитные и ОН-анионитные фильтры обеспечивают экономию реагентов на регенерацию в размере от 0,55 моль-экв/моль-экв до 2 моль-экв/ моль-экв.

В процессе регенерации ионитных фильтров химобессоливающих установок (ХОУ) образуются сточные воды, которые состоят из отработанных регенерационных растворов и отмывочных вод. Проблема сокращения агрессивных высокоминерализованных сточных вод после ХОУ является важной задачей для технологии подготовки теплоносителя на ТЭС. Для решения данной проблемы исследователями предлагаются множество различных схемных решений.

Известен способ регенерации ионитных фильтров, предусматривающий ступенчатую регенерацию фильтров сначала раствором поваренной соли, затем после отмывки фильтров водой регенерацию катионита кислотой, а анионита щелочью. После регенерации солью перед отмывкой ионита осуществляют слив раствора поваренной соли до уровня, соответствующего 20 – 30% высоты слоя загрузки ионита. Преимуществами данного способа является уменьшение расхода воды на собственные нужды за счет снижения объема промывных вод, расходуемых при регенерации с 12 до 4,7 м³/м³ ионита, снижение расхода серной кислоты и щелочи на регенерацию [45].

В литературе также представлен способ регенерации анионитных и катионитных фильтров I ступени обессоливающей установки, заключающийся в пропускании через фильтры сначала отработанных регенерационных растворов (ОРР) этих фильтров предыдущей регенерации в количестве, обеспечивающем восстановление 20–80% рабочей обменной емкости ионитов, затем соответствующих ОРР фильтров смешанного действия последней ступени ионирования с выносной регенерацией в количестве, обеспечивающем полное восстановление рабочей емкости ионитов. Данный способ позволяет исключить применение свежих реагентов: серной кислоты и гидроокиси натрия и снизить сброс агрессивных стоков [46].

Известен способ противоточной регенерации ионитов, включающий в себя стадию зажатия слоя ионита потоком жидкой среды, направленным снизу вверх, в котором процесс зажатия осуществляется в импульсном режиме. Использование

данного способа обеспечивает возможность более полного удаления загрязнений из слоя ионита. Затраты времени на регенерацию при этом сокращаются в среднем на 5–7% в зависимости от используемого ионита, а затраты воды на собственные нужды сокращаются на 10–12% [47].

Также в литературе описан способ регенерации ионита в противоточном фильтре [48], предусматривающий подачу регенерационного раствора снизу вверх через основной и вспомогательный слои ионита с последующим использованием смеси отработанного регенерационного раствора и очищаемой воды. Подача потоков может осуществляться с помощью водоструйного насоса при давлении очищаемой воды 0,2–1,0 МПа. Предложенный способ позволяет повысить степень удаления загрязнений и снизить расход регенерационного раствора за счет его повторного использования.

Недостатками перечисленных известных схем являются: 1) повышенный расход воды на взрыхление и отмывку ионитных фильтров; 2) перерасход химических реагентов, применяемых при регенерации ионообменных фильтров; 3) повышенный расход ОРР; 4) сброс кислых и щелочных стоков промывки ионообменных фильтров.

1.1.2 Принцип технологии повторно-последовательной регенерации ионитных фильтров «каскад»

Известна технология повторно-последовательной регенерации ионитных фильтров «каскад» [49]. В основе технологии заложены принципы противоточной регенерации, многократное повторное и повторно-последовательное использование воды разной степени чистоты с аппаратов предыдущих ступеней, переработка *in situ* («по месту»), т.е. в месте получения отходов до последующего смешивания с другими стоками. При этом снижается расход воды на собственные нужды, уменьшаются удельные расходы реагентов (кислоты, щелочи, коагулянта, извести), увеличивается фильтроцикл, снижается вероятность гипсования

Н- катионитных фильтров, уменьшаются сбросы высокоминерализованных сульфатсодержащих сточных вод.

Технологическая схема повторно-последовательной регенерации ионитных фильтров по технологии «каскад» в настоящее время реализована на ВПУ Казанской ТЭЦ-3. На рисунке 1.4 изображена принципиальная схема каскадной регенерации и отмыва ионитного фильтра.

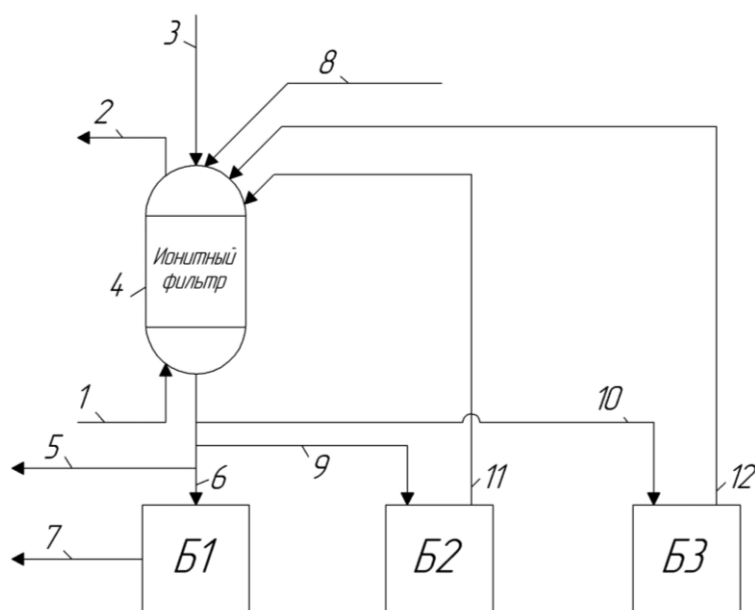


Рисунок 1.4 – Принципиальная схема технологии «каскад»

Цифрами обозначены: 1 – линия подачи воды на взрыхление; 2 – линия слива воды после взрыхления; 3 – линия подачи регенерационного раствора (РР); 4 – ионитный фильтр; 5 – линия слива отработанного регенерационного раствора (ОРР); 6 – линия слива отмывки ионитного фильтра в бак №1; 7 – линия отвода избытка отмывочного раствора на приготовление регенерационного раствора; 8 – линия подачи частично-обессоленной воды (ЧОВ); 9 – линия слива отмывки ионитного фильтра в бак №2; 10 – линия слива отмывки ионитного фильтра в бак №3; 11 – линия подачи отмывочного раствора из бака №2 на отмывку ионитного

фильтра; 12 – линия подачи отмывочного раствора из бака №3 на отмывку ионитного фильтра; Б1 – бак №1; Б2 – бак №2; Б3 – бак №3.

Повторно-последовательная регенерация по технологии «каскад» осуществляется следующим образом. Сначала проводится взрыхление ионитного фильтра 4 путем подачи воды на взрыхление по линии 1 водой обратным током. После взрыхления вода по линии 2 покидает объем ионитного фильтра 4. По возможности рекомендуется полностью слить из ионитного фильтра воду до заполнения регенерационным раствором. Эта операция позволит избежать разбавления и потери вод регенерационных растворов.

Далее по линии 3 осуществляется подача регенерационного раствора, его выдержка и перемешивание воздухом. По окончании регенерации первая фракция отработанного регенерационного раствора по линии 5 поступает на регенерацию предыдущего ионитного фильтра соответствующего типа, а остальная часть отработанного регенерационного раствора по линии 6 поступает в бак №1 (Б1).

После чего начинается процесс отмывки ионитного фильтра 4. По линии 8 подается ЧОВ. Получаемый из ЧОВ отмывочный раствор делится на три части. Первая часть получаемого отмывочного раствора по линии 6 поступает в бак №1 (Б1), из бака №1 (Б1) по линии 7 избыток первой части отмывочного раствора направляется на приготовление регенерационного раствора. Вторая часть отмывочного раствора по линии 9 поступает в бак №2 (Б2). Третья часть отмывочного раствора по линии 10 поступает в бак №3 (Б3).

После окончания пропуска ЧОВ по линии 11 из бака №2 (Б2) отмывочный раствор подается в ионитный фильтр 4, после чего по линии 6 отмывочный раствор направляется в бак №1 (Б1); по линии 12 из бака №3 (Б3) отмывочный раствор подается в ионитный фильтр 4, после чего по линии 9 отмывочный раствор направляется в бак №2 (Б2). Заключительный этап отмывки осуществляется подачей ЧОВ по линии 8, слив производится по линии 10 в бак №3 (Б3).

Проведенный анализ литературы показывает, что, несмотря на технологическую отточенность ионообменных методов водоподготовки, их

дальнейшее развитие остается актуальным. С учетом санкционных ограничений на поставки мембранного оборудования и наличия значительного количества действующих ионообменных установок, совершенствование этой технологии является важным направлением для отечественной энергетики. Дальнейшие исследования должны быть направлены на создание малосточных и бессточных схем водоподготовки, разработку эффективных методов регенерации ионитных фильтров, утилизации ОРР и автоматизацию технологических процессов.

1.2. Математическое моделирование работы ионитных фильтров

Химический реактор, в котором протекают взаимосвязанные гидродинамические, тепловые, диффузионные и химические процессы, является центральным элементом химико-технологической системы. Применение математического моделирования для описания работы таких аппаратов, в том числе ионообменных фильтров, позволяет определить конструктивные и эксплуатационные параметры, обеспечивающие высокую технико-экономическую эффективность.

Математическая модель отражает наиболее значимые свойства объекта с помощью системы уравнений, граничных и начальных условий. При построении математической модели ионитного фильтра требуется учитывать законы химической кинетики, равновесия, массопереноса и гидродинамики потока. Так как ионообменный фильтр является объектом с большим количеством структурных элементов, то для его моделирования целесообразно использовать системный подход, при котором процессы рассматриваются на разных уровнях: молекулярном, локальном и уровне всего аппарата. Объединение соответствующих уравнений на основе законов сохранения массы, импульса и энергии позволяет сформировать полную математическую модель исследуемого фильтра. В общем виде уравнение материального баланса по веществу J может быть записано следующим образом:

$$n_{j,\text{вх.}} - n_{j,\text{вых.}} - n_{j,\text{х.р.}} = n_{j,\text{нак.}}, \quad (1.1)$$

где $n_{j,\text{вх.}}$ – количество вещества J , внесенное в элементарный объем ΔV за время $\Delta \tau$; $n_{j,\text{вых.}}$ – количество вещества J , вынесенное за пределы элементарного объема ΔV за время $\Delta \tau$ с потоком вещества; $n_{j,\text{х.р.}}$ – количество вещества J , образовавшееся или израсходованное на химическую реакцию; $n_{j,\text{нак.}}$ – накопление вещества J в элементарном объеме ΔV за время $\Delta \tau$.

В общем виде уравнение теплового баланса может быть записано следующим образом:

$$Q_{\text{вх.}} - Q_{\text{вых.}} \pm Q_{\text{х.р.}} \pm Q_{\text{т.о.}} = Q_{\text{нак.}}, \quad (1.2)$$

где $Q_{\text{вх.}}$ – теплосодержание веществ, входящих в объем ΔV за время $\Delta \tau$; $Q_{\text{вых.}}$ – теплосодержание веществ, выходящих за пределы объем ΔV за время $\Delta \tau$; $Q_{\text{х.р.}}$ – теплота, пошедшая на осуществление химической реакции; $Q_{\text{т.о.}}$ – теплообмен с окружающей средой за время $\Delta \tau$; $Q_{\text{нак.}}$ – накопление теплоты в элементарном объеме ΔV за время $\Delta \tau$.

Известно общее уравнение материального баланса проточного химического реактора, которое достаточно полно описывает происходящий в нем процесс:

$$-u \cdot \text{grad } C_J + D \cdot \nabla^2 \cdot C_J - w_{rJ} = \frac{\partial C_J}{\partial \tau}, \quad (1.3)$$

где u – скорость потока, м/с; C_J – молярная концентрация вещества J , кмоль/м³; D – коэффициент диффузии; ∇ – оператор Гамильтона; w_{rJ} – скорость реакции.

Основное уравнение (1.3) представляет собой дифференциальное уравнение второго порядка в частных производных и для него достаточно сложно получить

аналитическое решение. Поэтому многие исследователи для решения данного уравнения стремились упростить модель, рассматривая множество частных случаев и задаваясь различными граничными условиями.

Для описания различных гидродинамических режимов в химических реакторах используются модели: идеального смешения; идеального вытеснения; диффузионные модели; ячеечные модели; комбинированные модели [50,51].

1.2.1 Модели реакторов с неидеальной структурой потока

В реальных проточных реакторах существует ряд причин отклонения от идеальных случаев:

1) Наличие застойных зон, в которых реакционная смесь задерживается, а скорость химической реакции мала.

2) Наличие внутренних байпасов, когда часть потока быстрее покидает реактор, чем основной поток.

3) Наличие осевого перемешивания в реакторах, близких к РИВ вследствие молекулярной диффузии за счет наличия градиента концентраций в осевом направлении.

4) Наличие турбулентной диффузии вследствие пульсаций потока в продольном направлении как при турбулентном, так и при ламинарном режиме.

5) Для проточного РИВ могут иметь место зоны циркуляции, в которых реакционная смесь задерживается дольше, чем в ядре потока.

Для математического описания реальных гидродинамических течений в химических реакторах в основном используются однопараметрические (ячеечная и диффузионная) и двухпараметрические модели.

Ячеечные модели используют подход разбиения химического реактора на несколько последовательно соединенных реакторов идеального смешения. Единственным параметром в ячейчных моделях является число ячеек N . В данном подходе несмотря на большое количество уравнений входящих в систему, по

структуре такие уравнения остаются простыми. При $N=1$ ячеечные модели описывают РИС, а при $N \rightarrow \infty$ вырождаются в модель проточного РИВ [50].

При построении диффузионной модели в отличие от моделей, основанных на РИС, учитывается неравномерность распределения параметров (концентрации реагентов) по объему реактора, а в отличие от РИВ учитывается перемешивание потока в продольном направлении вследствие диффузии.

Уравнение материального баланса для однопараметрической диффузионной модели можно получить из уравнения (1.3), учитывая следующие допущения: 1) отсутствие изменений параметров в радиальном направлении, 2) отсутствие застойных зон и байпасных потоков.

$$-u \cdot \frac{\partial C_J}{\partial z} + D_L \cdot \frac{\partial^2 C_J}{\partial z^2} - w_{rJ} = \frac{\partial C_J}{\partial \tau}. \quad (1.4)$$

Уравнение (1.4) описывает нестационарный процесс в реальном реакторе при наличии перемешивания. Первый член уравнения $(-u \cdot \partial C_J / \partial z)$ описывает конвективный перенос. Второй член уравнения $(D_L \cdot \partial^2 C_J / \partial z^2)$ отвечает за перемешивание вдоль оси реактора, интенсивность которого учитывается через коэффициент продольной диффузии D_L .

Вывод аналитического решения для однопараметрической диффузионной модели остается актуальной задачей. Аналитическое решение раскрывает фундаментальные закономерности физико-химических процессов и служит эталоном для верификации численных методов расчета.

Сложность получения аналитических решений объясняет преобладание численных методов в практике расчета химических реакторов и моделирования работы ионитных фильтров. Строгое решение задачи представлено в работах Чичирова А.А. и соавторов [52,53], где получен аналитический вид решения для

линейного однородного уравнения диффузионной модели при заданных граничных условиях.

Известны численные решения математических моделей химических реакторов на основе конечно-разностного метода Кранк-Николсона [54,55], явной конечно-разностной схемы [56,57], метода линеаризации нелинейных членов уравнений [58], метода Фурье [59], метода конечных разностей Эйлера [60].

Большой вклад в создание и исследование диффузионных моделей химических реакторов с неидеальной структурой потока внес профессор Волгоградского государственного технического университета Голованчиков Александр Борисович. В монографии «Моделирование структуры потоков в химических реакторах» в 2009 г. им были решены задачи неоднозначности идентификации структуры потоков по функциям отклика [61]. Также автором рассмотрены и предложены различные градиентные граничные условия [62].

В монографии от 2018 года [63] приведены результаты расчета параметров ионообменной колонны непрерывного действия по диффузионной модели в сравнении с противоточной ионообменной колонной. Голованчиковым А.Б. были исследованы математические модели химического реактора для реакций n -го порядка [64], а также при различных числах Пекле для реагирующих компонентов [65]. Автором был предложен метод двух индикаторов для моделей с различными коэффициентами молекулярной диффузии, позволяющий оценить зависимость структуры потоков и числа Пекле реагирующих компонентов от гидродинамического режима их течения в реакторах [66,67].

Применению математического моделирования для проектирования аппаратов колонного типа, учитывающих неоднородности скорости в радиальном и осевом направлении, а также анализу граничных условий диффузионной модели посвящены работы ученого Chr. Boyadjiev из Болгарской академии наук [68-71].

В исследовании Натарева С.В. [72] предложено математическое описание ионообменного аппарата непрерывного действия с кипящим слоем ионита. Для проверки адекватности математической модели были проведены исследования

процесса ионообменной адсорбции ионов цинка катионитом КУ-2-8 в Н-форме. Отклонение результатов расчета от эксперимента не превысило 12%.

В работе Груздевой А.Н. [73] сделан вывод о том, что единственной моделью, в рамках которой можно учесть все основные эффекты, действующие в кинетике ионного обмена, является нелинейная феноменологическая диффузионная модель. Такого же мнения придерживаются авторы работ [74] и [75], которые предлагают сначала проводить численное решение прямой задачи (например, расчет концентрации компонентов на выходе из фильтра), а затем решать обратную задачу нахождения параметров процесса ионного обмена в неравновесных условиях.

Работы Голованчикова А.Б., Натарева С.В., Чичирова А.А. и других авторов вносят значительный вклад в развитие диффузионных моделей, предлагая новые методы идентификации параметров, алгоритмы расчетов и граничные условия. Впрочем, даже с учетом разнообразия существующих численных методов, получение точных аналитических решений остается актуальной задачей.

1.2.2 Математические модели ионного обмена

Вопросом создания математических моделей для описания процесса ионного обмена, протекающего в ионообменных аппаратах, занимались многие исследователи, начиная с 80-х годов прошлого столетия [76-84].

В работе Shafeeyan M. S. [85] проведен комплексный обзор математического моделирования адсорбции в ионообменных аппаратах, где отражены все основные исследования в данной области за последние три десятилетия. В обзорной статье [86] представлены наиболее часто используемые модели процесса адсорбции (общие модели скорости, модель линейной движущей силы, модель теории распространения волн, модель постоянного шаблона, модель Кларка, модель Томаса, модель Бохарта-Адамса, модель Юна-Нельсона, модель Вана, модель Вольборской и модифицированная модель доза-реакция) и выделены их основные преимущества и недостатки.

Среди множества направлений исследований в области моделирования процесса ионного обмена можно выделить несколько основных:

1) Исследования в области новых численных методов моделирования или моделей химических реакторов [59, 87, 88].

2) Оптимизация типоразмерных характеристик существующих и создание принципиально новых ионообменных аппаратов [38, 79, 82, 83, 89].

3) Применение методов моделирования ионного обмена для различных отраслевых приложений, таких как удаление тяжелых металлов [80, 90-94].

В прикладных задачах очень часто рассматривают переходный процесс, возникающий в аппарате при воздействии единичного ступенчатого возмущения. Так, в своей работе Лапшин Н.А. [95] разработал математическую модель переходного процесса ионного обмена в емкостном аппарате непрерывного действия. Адекватность разработанной модели была проверена на примере пускового режима работы действующего аппарата.

В работах Лапшина Н.А. [96] также была разработана математическая модель описания процесса ионного обмена для емкостного аппарата с мешалкой и экспериментальным методом были определены параметры переходного процесса в емкостном аппарате непрерывного действия в нестационарном режиме работы.

Lizarralde I. [97] разработал и экспериментально верифицировал математическую модель, позволяющую описывать процесс ионного обмена в присутствии конкурирующих ионов.

В работах Голованчикова А.Б. [98-101] описаны физическая и математическая модели ионообменной колонны непрерывного действия с диффузионной моделью структуры потока по жидкой фазе и противоточным движением слоя ионита.

Далеко не во всех математических моделях учитывается или должным образом отражен процесс регенерации ионообменных смол, без которого невозможно представить объективную обобщенную модель работы ионообменного фильтра.

В работе Gomes C. P. и соавторов [102] были осуществлены попытки отразить процесс регенерации в математической модели работы ионитного фильтра. Однако в моделях не учитывалась внутренняя диффузия, а результаты, полученные исходя из расчетной модели регенерации, продемонстрировали слабое сходство с экспериментальными данными.

В работе Zhang J. и соавторов [103] разработана математическая модель, объединяющая процессы ионного обмена и регенерации ионитной смолы. Относительная погрешность расчетов по математической модели от экспериментальных данных в исследовании составила от 0,3% до 13%.

В некоторых работах предлагается использовать нейронные сети для моделирования процессов ионного обмена в ионообменных аппаратах. Так, в работе автора Kabuba J. [104] была предложена математическая модель и проведено моделирование нейронной сети для прогнозирования параметров процесса ионного обмена по удалению ионов Cu (II).

Анализ литературных данных показывает, что современные математические модели, описывающие протекание ионного обмена, стремятся учесть наличие внутренней диффузии, описать переходные процессы и этап регенерации. Несмотря на разнообразие подходов, ключевыми остаются вопросы точности описания нестационарных режимов и универсальности моделей для различных типов ионообменных аппаратов. Особый интерес представляют модели, в которых учтены процессы ионного обмена и регенерации, а также учитывающие влияние безразмерных параметров (таких как числа Пекле и Био) на кинетику процесса.

1.3 Вычислительная гидродинамика (Computational Fluid Dynamics, CFD)

Первоначально для проектирования ионообменных фильтров с неподвижным слоем использовалась двумерная псевдогомогенная модель. При этом исследования ограничивались такими параметрами как пористость слоя, перепад давления и сила сопротивления [105,106].

В последние десятилетия ученые начали активно исследовать возможность воспроизведения структуры пустот в неподвижном слое. Giese M. и соавторы в работе [107] использовали лазер-доплеровскую анемометрию (LDV), также известно использование ядерно-магнитного резонанса [108], велосиметрии изображения частиц (particle image velocimetry – PIV) [109,110] и иных методов отслеживания частиц [111] для измерения профиля скорости потока, проходящего через пористые среды.

Все эти методы имеют определенные ограничения: метод лазер-доплеровской анемометрии требует, чтобы показатель преломления жидкости соответствовал материалу стенки фильтра, скорость потока при использовании метода ядерно-магнитного резонанса должна быть очень низкой, а метод отслеживания частиц требует подсчета трековых меток.

Для создания модели гидродинамики потока жидкости исследователи рассматривали возможность использования дискретных моделей на основе динамических элементов, таких как вероятностные клеточные автоматы [112]. В работе Бобкова С.П. [113] описана общая методика создания модели на основе дискретных динамических элементов, приведено сравнение дискретной стохастической модели с типовой диффузионной моделью.

В настоящее время для исследования структуры потоков в химических реакторах активно применяются методы вычислительной гидродинамики (Computational fluid dynamics, CFD). Для моделирования неподвижных слоев загрузки известны два основных подхода: подход с использованием модели пористой среды (porous medium model, PMM) и подход с разрешением частиц (particle-resolved CFD – PRCFD). Первый подход применим в случае, когда размеры частиц загрузки намного меньше размеров химического реактора, и градиенты температуры и профиля потока могут быть усреднены [114]. Второй подход применяют при соотношениях $N = d/D$ от 1 до 10, когда необходимо учитывать особенности гидродинамики в пристеночных слоях и между частицами [115].

В последние годы большой интерес исследователей был направлен на подход с разрешением частиц. В обзорной статье Dixon A. G. и соавторов [116] рассмотрены исследования, в основном касающиеся периодических сегментов слоев и кластеров частиц, а также химических реакторов с очень низкими значениями числа Нуссельта и малым количеством частиц. В обзорной статье Jurtz N. и соавторы [117] отметили экспоненциальный рост числа публикаций по данной тематике с 2006 по 2017 год.

1.3.1 Модель пористой среды (Porous medium model, PMM)

Из-за различия размеров частиц ионита и диаметра химических реакторов даже современные вычислительные комплексы не позволяют построить качественную сеточную модель без искажений в зонах контакта частиц между собой и со стенками аппарата.

Модель пористой среды (Porous medium model, PMM) рассматривает неподвижный слой как отдельный домен, в котором наличие частиц не учитывается явно, а задается через потерю импульса, путем добавления в уравнения Навье-Стокса таких параметров как сопротивление вязким потерям и сопротивление инерционным потерям. Использование модели пористой среды реализовано в таких программных комплексах как COMSOL, ANSYS-Fluent/CFX и STAR-CCM+.

Jakobsen H. A. и соавторы в своей работе [118] подробно рассмотрели модель пористой среды с помощью 2D CFD модели. Они сравнили 1D и 2D версии с классическими 1D и 2D моделями дисперсии. Изменения в скорости, давлении и плотности смеси, учитываемые в одномерной CFD модели, существенно влияли на химический состав и степень превращения, по сравнению с дисперсионными моделями. Учет неравномерного распределения пористости $\varepsilon(r)$ в 2D CFD модели повлиял на осевое падение давления и скорость потока, но практически не повлиял на температурные профили и профили мольных долей компонентов.

Wu C.Y. и соавторы [119] сравнили CFD модель с разрешением частиц с подходом на основе модели пористой среды. Они отметили, что модель пористой среды не может воспроизводить вторичные потоки и анизотропии потока, но способна корректно предсказывать среднее падение давления и распределение профиля температур.

Gao X. [120] и Zhuang Y-Q [121] использовали двухтемпературную 2D модель пористой среды для моделирования процессов в неподвижных слоях с турбулентным течением потока. Они отметили, что двухтемпературная модель дает результаты более близкие к экспериментальным, по сравнению с однотемпературной моделью, но не представили данных о полученном поле скоростей потока.

Модель пористой среды часто используется для более точного учета поля скоростей по сравнению с более простыми дисперсионными моделями, при этом не требуя высоких вычислительных затрат, как в CFD моделях с полным разрешением частиц, о чем говорится в работе Dixon A.G. [122].

1.3.2 CFD модели с разрешением частиц (Particle-Resolved CFD)

Ранние CFD-исследования химических реакторов были сосредоточены на изучении перепада давления [123-125], оценке зависимости точности результатов моделирования от количества частиц [126] и исследовании влияния свойств частиц (например, формы и распределения по размерам) на структуры потоков [114,127].

При построении сеточных моделей химических реакторов с неподвижным слоем загрузки, ячейки сетки вблизи точек контакта «частица-частица» и «частица-стенка» зачастую сильно перекошены, что может привести к проблемам со сходимостью во время расчетов, либо сетка в этих областях сильно измельчена, что увеличивает количество ячеек и, как следствие, расчетное время.

Для улучшения сеточной модели в точках контакта известны четыре основных метода построения сетки: «Пустоты» (Gaps) [128-130], «Перекрытия» (Overlaps) [131], «Мосты» (Bridges) [132] и «Отсечения» (Caps) [133].

Для решения проблемы сеточной сходимости Чарльзом Пескиным был предложен метод погруженных границ (immersed boundary method) [134]. В методе погруженной границы жидкость рассчитывается в эйлеровой системе координат, а структура упругого тела представлена в лагранжевых координатах.

В работе Rajat и Gianluca's [135] сообщается, что метод погруженных границ может значительно улучшить качество сетки, но в то же время требует значительных вычислительных мощностей для моделей со сложной геометрией с использованием равномерного, мелкого размера сетки. Yuan и соавторы [136] адаптировали метод погруженных границ для химических реакторов с соотношением D/d в интервале от 2 до 8 (рисунок 1.5). Также данный метод был использован в работе Liu S. [137] для изучения процесса каталитического крекинга олефинов в реакторе, состоящем из 150 частиц.

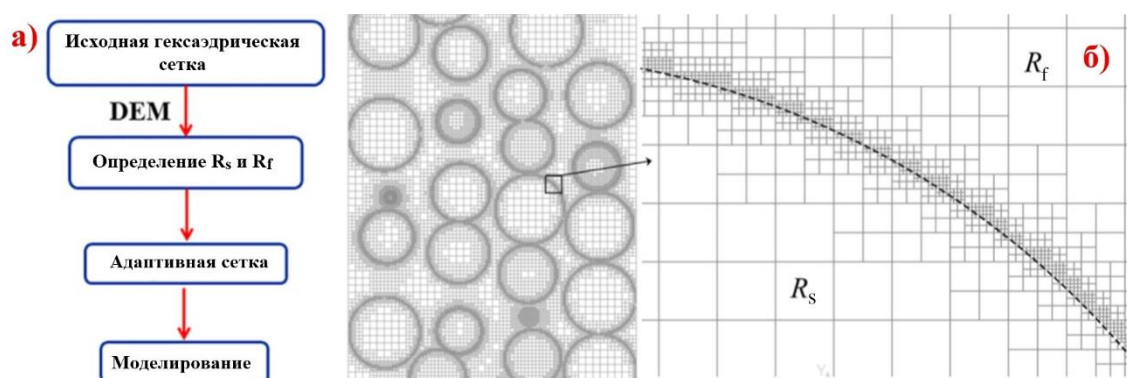


Рисунок 1.5 – Визуализация метода (а) и адаптации сеточной модели (б)

Дальнейшее развитие CFD-моделирования гидродинамики в ионообменных аппаратах, вероятно, будет связано с разработкой гибридных моделей, сочетающих преимущества моделей пористой среды с локальным PRCFD-анализом отдельных зон фильтра.

1.4 Прогностические модели работы водоподготовительных установок

На энергетических предприятиях эксплуатация ионитных водоподготовительных установок осуществляется без применения предиктивных методов анализа. Ионитные фильтры отключаются на регенерацию при достижении предельных значений показателей качества фильтрата, характеризующих проскок контролируемых ионов. Расход кислоты и щелочи на регенерацию ведется по нормативным или эксплуатационно-установленным удельным расходам реагентов. При этом такой подход не всегда обеспечивает оптимальные режимы работы оборудования с точки зрения полноты восстановления обменной емкости ионита и минимизации расхода химических реагентов. В результате возможны как перерасход реагентов, так и неполная регенерация ионитных смол, что приводит к снижению эффективности работы водоподготовительной установки.

В последние годы для анализа данных все более широкое распространение получают методы машинного обучения (Machine Learning (ML) methods) [138]. Применение методов машинного обучения для решения практически значимых задач ионитной водоподготовки представляет собой перспективное направление, обеспечивающее повышение уровня автоматизации и обоснованности принимаемых технологических решений.

Искусственные нейронные сети относятся к моделям машинного обучения. В их основе лежит последовательное преобразование входного вектора признаков в выходной вектор признаков с помощью скрытых (промежуточных) слоев искусственных нейронов. Нейросетевые модели применяются для решения задач регрессии, классификации, обработки временных рядов, компьютерного зрения и анализа сложных технологических процессов [139,140]. В области водоподготовки и энергетики нейронные сети используются, для прогнозирования качества воды, оптимизации режимов работы оборудования и оценки эффективности технологических операций [141-145].

Так, в работе Al-Ghazawi et al. [146] были разработаны нейросетевые модели для прогнозирования качества очищенных сточных вод на действующей водоподготовительной установке. В обзорной статье Jawad et al. [147] показано, что нейросетевые модели могут успешно применяться для моделирования мембранных процессов в очистке сточных вод и опреснении. В обзорной статье Ibrahim et al. [148] отмечена эффективность нейросетевых моделей для прогнозирования, оценки и оптимизации показателей работы установок водоподготовки.

Отдельный интерес представляют исследования, в которых нейросетевые методы применяются непосредственно для определения доз реагентов. Например, в работах Lin et al. [149] и Kim et al. [150] представлена модель глубокого обучения для определения дозы коагулянта и прогнозирования мутности осветленной воды. Анализ литературных данных подтверждает, что нейросетевые модели могут использоваться для анализа качества воды и для задач управления режимами обработки воды и расходом реагентов.

1.5 Выводы к Главе 1

По результатам обзора литературных источников можно сделать вывод, что ионообменные технологии сохраняют актуальность. Их совершенствование осуществляется по нескольким направлениям: применение противоточных схем регенерации, позволяющих снизить расход реагентов в 1,5–3,0 раза и уменьшить объем сточных вод в 2–6 раз по сравнению с прямоточными; использование ионитных смол с увеличенной обменной емкостью; оптимизация конструкции фильтров; создание ионитно-мембранных и малосточных схем; автоматизация технологического процесса.

В области математического моделирования наблюдается переход от упрощенных моделей (идеального смешения и вытеснения) к одно- и двухпараметрическим диффузионным моделям. Современные исследования направлены на учет внутренней диффузии, описание переходных режимов работы, интеграцию процессов ионного обмена, регенерации и отмывки в

единую модель. Важной научной задачей остается получение аналитических решений для верификации численных методов.

Применение методов вычислительной гидродинамики (CFD) для моделирования ионообменных фильтров развивается в двух направлениях: на основании подхода с использованием модели пористой среды (PMM) и подхода с разрешением частиц (PRCFD). Для промышленных аппаратов с малым размером частиц ионита (0,3–1,2 мм) и большим диаметром фильтров (до 3,5 м) наиболее перспективным является совершенствование моделей пористой среды, позволяющих снизить вычислительные затраты при сохранении физической адекватности описания потоков.

Анализ литературных данных показывает, что методы машинного обучения, в том числе нейросетевые модели, являются перспективным инструментом для прогнозирования работы водоподготовительных установок и показателей качества воды, а также для поддержки принятия технологических решений. Поэтому, применение таких методов к задачам ионитной водоподготовки может повысить обоснованность управления процессами регенерации и эффективность эксплуатации оборудования.

Проведенный анализ литературных источников свидетельствует о том, что, несмотря на многолетний опыт промышленной эксплуатации ионообменных технологий водоподготовки на ТЭС и их высокую надежность, сохраняется ряд нерешенных проблем, к числу которых относятся сверхстехиометрический расход реагентов на проведение регенерации и повышенный расход отмывочных вод. Указанные недостатки определяют направления для дальнейших исследований и создают потенциал для совершенствования технологии ионного обмена с использованием методов математического, цифрового и прогностического моделирования работы, регенерации и отмывки ионитных фильтров.

ГЛАВА 2. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ, ПРОТЕКАЮЩИХ В ИОНООБМЕННЫХ СИСТЕМАХ ВОДОПОДГОТОВИТЕЛЬНЫХ УСТАНОВОК

Современные тенденции развития энергетики и промышленности неразрывно связаны с внедрением цифровых технологий. Для водоподготовительных установок ТЭС это особенно актуально, поскольку задачи ресурсосбережения, снижения негативного воздействия на окружающую среду и обеспечения надежности производства обессоленной воды требуют применения научно-обоснованных подходов к управлению технологическим процессом.

В связи с этим в работе рассматривается системный подход к моделированию процесса работы и регенерации ионитных фильтров, объединяющий технические аспекты, методы математического моделирования, CFD-моделирования и методы машинного обучения, что позволяет перейти от традиционного эмпирического подхода к использованию цифровых интеллектуальных систем управления и поддержки принятия решений при эксплуатации ионитных водоподготовительных установок.

2.1 Обзор вопроса, постановка задачи

В системах водоподготовки на ТЭС и химических предприятиях центральное место занимают ионитные фильтры, эффективность работы которых в основном определяет эффективность работы всей водоподготовительной установки.

Режимные характеристики и конструктивные особенности ионитных водоподготовительных установок подбираются эмпирическим путем, который не гарантирует оптимальных решений. До сих пор актуальна проблема создания адекватной математической модели ионитного фильтра, которая позволит оптимизировать конструктивные и режимные параметры ионитного фильтра.

Цель данной главы: математическое моделирование процесса работы ионитных фильтров на основе фундаментальных законов физики, химии, гидродинамики.

Задачи данной главы:

1. Выбрать модель, наиболее полно и адекватно описывающую физико-химические процессы при работе и регенерации ионитных фильтров.
2. Сформулировать условия применимости однопараметрической диффузионной модели ионитного фильтра, установить граничные условия.
3. Используя обоснованные допущения и упрощения, решить уравнение диффузионной модели при различных граничных условиях.
4. Рассчитать выходные концентрационные кривые реагента и продукта.
5. Сопоставить с экспериментальными данными и построить графики.
6. Сформулировать выводы по полученным результатам.

2.2 Выбор математической модели

Ионитный фильтр представляет собой цилиндрический аппарат, в центральной части которого расположен слой ионита. Учитывая конструкцию и условия работы фильтра, оправдано применение диффузионной модели с неподвижным слоем зернистого реагента с продольным переносом. Известно основное уравнение материального баланса для проточного химического реактора по однопараметрической диффузионной модели [50,51]:

$$-u_0 \frac{dC_j}{dl} + D_L \cdot \frac{d^2 C_j}{dl^2} - w = 0, \quad (2.1)$$

где u_0 – линейная скорость, м/с; C_j – концентрация вещества, моль/м³; D_L – коэффициент продольной диффузии, м²/с; l – продольная координата, м; w – скорость химической реакции, моль/(м³·с).

Учитывая, что в реальных условиях работы ионитного фильтра концентрация связанного реагента в твердой фазе ионита много больше концентрации растворенного компонента ($\bar{c}_T \gg c_j$), и полагая, что все коэффициенты диффузии – величины постоянные, правомерно допустить, что единственная переменная – это концентрация растворенного компонента c_j . Поэтому уравнение кинетики процесса вырождается до уравнения 1-го порядка, т.е. ($w_j = k \cdot c_j$), где k – это кажущаяся (эффективная) константа скорости. Считаем процесс стационарным до момента наступления истощения ионита.

Для упрощения решения дифференциального уравнения второго порядка осуществляют переход уравнения (2.1) к безразмерному виду с учетом, что

$$L = \frac{l}{l_0} = \frac{\tau}{\bar{\tau}}, \quad \bar{\tau} = \frac{V}{\nu_0} = \frac{l_0}{u_0}, \quad C = \frac{c}{c_0}, \quad w = k \cdot C:$$

$$\frac{1}{\text{Pe}} \cdot \frac{d^2 C}{dL^2} - \frac{dC}{dL} - k \cdot \bar{\tau} \cdot C = 0. \quad (2.2)$$

$$\frac{u_0 \cdot l_0}{D_L} = \text{Pe}, \quad (2.3)$$

где L – безразмерная координата (длина); l – текущая координата; l_0 – длина зоны реакции; τ – текущее время; $\bar{\tau}$ – характеристическое время; V – объем реактора; ν_0 – объемная скорость на входе в реактор; C – безразмерная концентрация; c – мгновенная концентрация в произвольной точке по длине реактора; c_0 – концентрация на входе и выходе из фильтра; k – константа скорости химической реакции; Pe – число (критерий) Пекле.

2.3 Допущения однопараметрической диффузионной модели

Уравнение (2.1) для однопараметрической диффузионной модели проточного химического реактора с неидеальной структурой потока справедливо при следующих допущениях:

- 1) Отсутствие накопления вещества в реакторе $\left(\frac{\partial C}{\partial \tau} = 0 \right)$.
- 2) Равенство и постоянство скоростей входящего и выходящего потоков $(u_0 = u_{\text{вых}} = \text{const})$.
- 3) Постоянство D_L по длине и сечению потока в каждой зоне.
- 4) Равенство концентрации в поперечном направлении.
- 5) Химическая реакция подчиняется закону необратимой химической реакции первого порядка.
- 6) Изотермичность.

Тогда процесс описывается однородным диффузионным уравнением (2.2) второго порядка с постоянными коэффициентами.

Общее решение уравнения (2.2) записывается как:

$$C(L) = \mu_1 \cdot \exp(\lambda_1 \cdot L) + \mu_2 \cdot \exp(\lambda_2 \cdot L), \quad (2.4)$$

где μ_1 и μ_2 – произвольные константы, которые находятся исходя из граничных условий, λ_1 и λ_2 – корни характеристического уравнения:

$$\frac{1}{\text{Pe}} \lambda^2 - \lambda - k \cdot \bar{\tau} = 0, \quad (2.5)$$

$$\lambda_{1,2} = \frac{\text{Pe}}{2} \left(1 \pm \sqrt{1 + 4 \cdot \frac{k \cdot \bar{\tau}}{\text{Pe}}} \right). \quad (2.6)$$

2.4 Граничные условия однопараметрической диффузионной модели

В проточном ионитном фильтре имеются три зоны с различными условиями (рисунок 2.1).

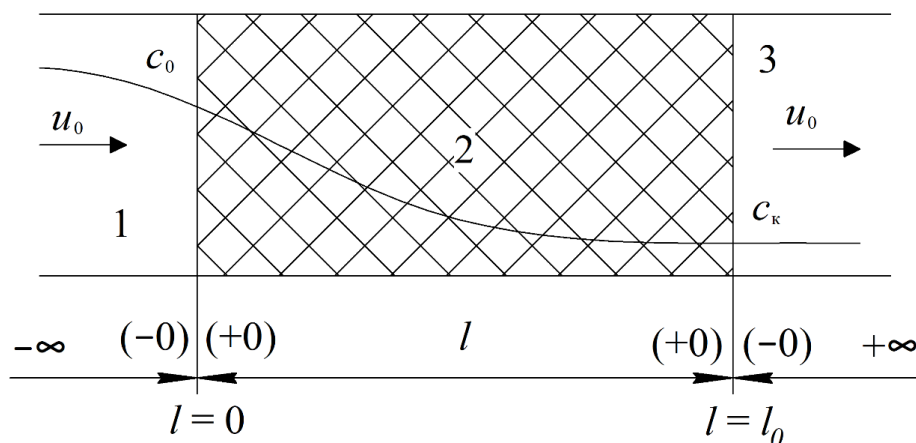


Рисунок 2.1 – Граничные условия в проточном изометрическом фильтре с зернистым слоем ионита: 1 – свободная зона; 2 – зона реакции; 3 – поддерживающий слой инертного материала

Для выявления граничных условий реакционной зоны необходимо решить дифференциальные уравнения для всех зон. Для процесса с единичной реакцией уравнения запишутся как:

для зоны 1:

$$\frac{1}{Pe_1} \cdot \frac{d^2 C}{dL^2} - \frac{dC}{dL} = 0, \text{ при } L \leq 0, \quad (2.7)$$

для зоны 2:

$$\frac{1}{Pe_2} \cdot \frac{d^2 C}{dL^2} - \frac{dC}{dL} - w = 0, \text{ при } 0 \leq L \leq 1, \quad (2.8)$$

для зоны 3:

$$\frac{1}{Pe_3} \cdot \frac{d^2 C}{dL^2} - \frac{dC}{dL} = 0, \text{ при } L \geq 1. \quad (2.9)$$

Для решения уравнений (2.7)–(2.9) требуется 6 граничных условий:

$$\text{при } L \rightarrow \infty \quad C = C(-\infty), \quad (2.10)$$

$$\text{при } L = 0 \quad C = C(-0), \quad (2.11)$$

$$C(0-0) - \frac{1}{\text{Pe}_1} \cdot \frac{dC(0-0)}{dL} = C(0+0) - \frac{1}{\text{Pe}_2} \cdot \frac{dC(0+0)}{dL}, \quad (2.12)$$

$$\text{при } L = 1 \quad C(1+0) = C(1-0), \quad (2.13)$$

$$C(1+0) - \frac{1}{\text{Pe}_2} \cdot \frac{dC(1+0)}{dL} = C(1-0) - \frac{1}{\text{Pe}_3} \cdot \frac{dC(1-0)}{dL}, \quad (2.14)$$

$$\text{при } L \rightarrow +\infty \quad C(+\infty) = C_{\kappa}. \quad (2.15)$$

Аналитическое решение уравнений (2.7)–(2.9) представляет собой сложную или неразрешимую задачу из-за нелинейности уравнений. Поэтому стоит сделать разумные допущения и упрощения.

Считаем, что в зоне I отсутствуют препятствия в виде зернистого слоя и встречный диффузионный поток слабо выражен, т.е. $D_{L1} \ll D_{L2}$. Тогда можно допустить, что $C(-\infty) = C(0-0)$.

Для точки $1+0$ скорость $(dC/dL)_{1+0} \neq 0$, так как точка находится внутри зоны реакции (зона 2) и $w \neq 0$. Для точки $1-0$ напротив $(dC/dL)_{1-0} = 0$, так как точка находится вне зоны реакции (зернистого слоя) и для нее $w = 0$. Но там другие условия ($D_{L3} \neq D_{L2}$) и другое уравнение, поэтому использовать граничное условие $(dC/dL)_{1-0} = 0$ для зоны 2 неправомерно.

Что касается концентрации, то $(C_k)_{1+0} = (C_k)_{1-0}$ и $(C_k)_{1-0} = C(+\infty)$, поскольку при $L \geq 1$ $w = 0$. Эти рассуждения существенно упрощают задачу, так как остается только одно уравнение для зоны 2.

В данной работе получены аналитические решения и проведен сравнительный анализ решений основного уравнения однопараметрической диффузионной модели для четырех различных постановок граничных условий – двухэкспоненциального решения со скачком концентрации в граничных условиях Данквертса; одноэкспоненциального решения со скачком концентрации и балансом в точке пересечения; одноэкспоненциального решения, основанного на материальном балансе граничных точек; двухэкспоненциального решения без скачка концентрации на входе в соответствии с граничными условиями Бояджиева.

2.4.1 Двухэкспоненциальное решение со скачком концентрации в граничных условиях Данквертса

Граничные условия Данквертса на входе (при $L = 0$) и на выходе (при $L = 1$) из фильтра:

$$C_0 - C_{0+0} + \frac{1}{Pe} \left(\frac{dC}{dL} \right)_{L=0+0} = 0, \quad (2.16)$$

$$\left(\frac{dC}{dL} \right)_{L=1} = 0. \quad (2.17)$$

Разрешение уравнения (2.2) в граничных условиях Данквертса дает следующие значения констант μ_1 и μ_2 :

$$\mu_1 = \frac{Pe \cdot C_0 - \mu_2 (\lambda_1 - \lambda_2)}{Pe - \lambda_1} - \mu_2, \quad (2.18)$$

$$\mu_2 = \frac{Pe \cdot C_0 \cdot \lambda_1 \cdot \exp \lambda_1}{Pe(\lambda_1 \cdot \exp \lambda_1 - \lambda_2 \cdot \exp \lambda_2) + \lambda_1 \cdot \lambda_2 (\exp \lambda_2 - \exp \lambda_1)}. \quad (2.19)$$

На рисунке 2.2 представлены результаты расчета полей концентраций при различных значениях числа Pe для конкретных значений $\bar{\tau} = 1 \cdot 10^3$ с и $k = 3 \cdot 10^{-3}$ с $^{-1}$. Следует отметить наличие искажения экспоненты на конечном участке, что является следствием второго граничного условия при $L = 1$. Кроме того, решение имеет экстремум за пределом участка ($L > 1$). В этой связи были предприняты попытки получить аналитическое решение уравнения (2.2) в других граничных условиях.

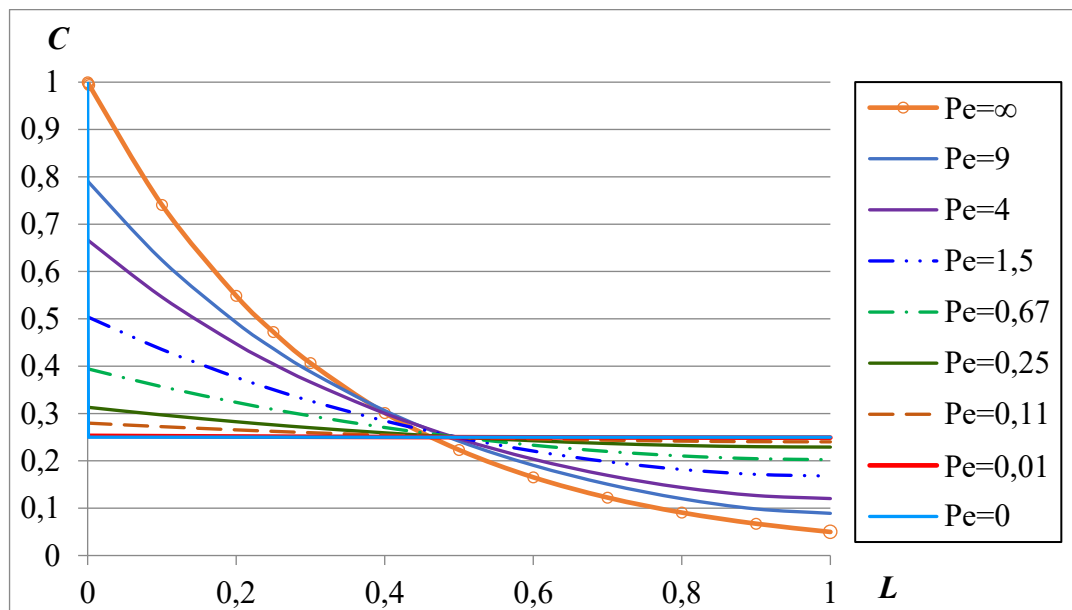


Рисунок 2.2 – Поля концентраций для проточного фильтра по диффузионной модели в граничных условиях Данквертса при $\bar{\tau} = 1 \cdot 10^3$ с и $k = 3 \cdot 10^{-3}$ с $^{-1}$

2.4.2 Одноэкспоненциальное решение со скачком концентрации и материальным балансом в точке пересечения

На кривой зависимости изменения безразмерной концентрации по длине фильтра $C(L) - L$ имеются две особые точки (согласно рисунку 2.1): $l = 0$ и $l = l_0$. Первое граничное условие можно записать как:

$$C_{0-0} = C_0 = 1. \quad (2.20)$$

Данное условие означает, что до входа в реактор в точке $(L = 0 - 0)$ концентрация вещества равна исходной концентрации C_0 . При этом предполагается идеальное смешение входящего и встречного диффузионного потоков в точке $(L = 0 + 0)$. Очевидно, что значение концентрации после входа в реактор C_{0+0} в точке $(L = 0 + 0)$ должно лежать в области, ограниченной крайними случаями $Pe = 0$ или $Pe = \infty$,

$$C(Pe = 0) \leq C_{0+0}(Pe) \leq C_0(Pe \rightarrow \infty). \quad (2.21)$$

Второе граничное условие отражает стабилизацию процесса на бесконечности:

$$\lim_{l \rightarrow \infty} C = 0. \quad (2.22)$$

Условие (2.22) вытекает из особенностей протекающих физических процессов. Для реакции первого порядка зависимость концентрации от времени представлена экспонентой, стремящейся к нулю. При этом встречный диффузионный поток приводит к выравниванию концентрации, а не к ее

уменьшению в пределе. Поэтому для любых значений $Pe \neq 0$: $C(L) \rightarrow 0$ при $L \rightarrow \infty$. Для $Pe = 0$ (режим идеального смешения, РИС) – $C(\infty) = \text{const}$.

Этих условий достаточно для однозначного решения. В принятых граничных условиях в любой точке внутри реактора не подразумевается окончание процессов, т.е. химическая реакция продолжается и присутствует встречный диффузионный поток. Такой вариант возможен, например, для проточного реактора бесконечной длины при условии гомогенной химической реакции и отсутствия разрыва струи на выходе.

Для уравнения (2.2) для всех промежуточных значений $0 < Pe < \infty$, принимая граничные условия (2.20–2.22), получаем, что $\mu_1 = 0$. То есть в общем решении уравнения (2.2) растущая экспонента отсутствует. Это вытекает из третьего граничного условия (2.22). Тогда решение исходного дифференциального уравнения (2.2) будет:

$$C(L) = \mu_2 \cdot \exp(\lambda_2 \cdot L). \quad (2.23)$$

Из условия для $(L = 0 + 0)$ получаем:

$$\mu_2 = C_{0+0}. \quad (2.24)$$

Полагая, что все решения лежат в области, ограниченной крайними случаями для $Pe = 0$ или $Pe = \infty$ получаем дополнительное уравнение координаты точки пересечения кривых (L_+) :

$$\frac{C_0}{k \cdot \bar{\tau} + 1} = C_0 \cdot \exp(-k \cdot \bar{\tau} \cdot L_+), \quad (2.25)$$

$$L_+ = \frac{\ln\left(\frac{1}{1+k \cdot \bar{\tau}}\right)}{k \cdot \bar{\tau}}, \quad (2.26)$$

Используя значение точки (L_+) и граничное условие (2.21), получаем условие пересечения кривых в области $0 < \text{Pe} < \infty$:

$$\mu_2 \cdot \exp(\lambda_2 \cdot L_+) = C_0 / (1 + k \cdot \bar{\tau}). \quad (2.27)$$

Отсюда значение концентрации в точке $(L = 0 + 0)$ при разных Pe :

$$\mu_2 = C_{0+0} = \frac{C_0}{\exp(\lambda_2 \cdot L_+) \cdot (1 + k \cdot \bar{\tau})}. \quad (2.28)$$

Таким образом, решением исходного (2.2) является выражение (2.23), где $\mu_2 = C_{0+0}$ находим по уравнению (2.28), а L_+ по уравнению (2.26).

Профиль распределения концентраций в безразмерных координатах в зависимости от критерия Pe , рассчитанный по уравнениям (2.23–2.28) представлен на рисунке 2.3. Из представленного графика видно, что для промежуточных случаев $(0 < \text{Pe} < \infty)$ значения концентрации находятся внутри области, ограниченной крайними случаями, концентрационные кривые выходят из точки $C(0) = 1$ и в пределе стремятся к 0 или $C(\infty)$.

В методе баланса точки пересечения нет условия отсутствия встречного диффузионного потока при $L > 1$, что означает неизменность условий в $L = 1$ и связь с уходящим потоком, что характерно для реакторов бесконечного размера.

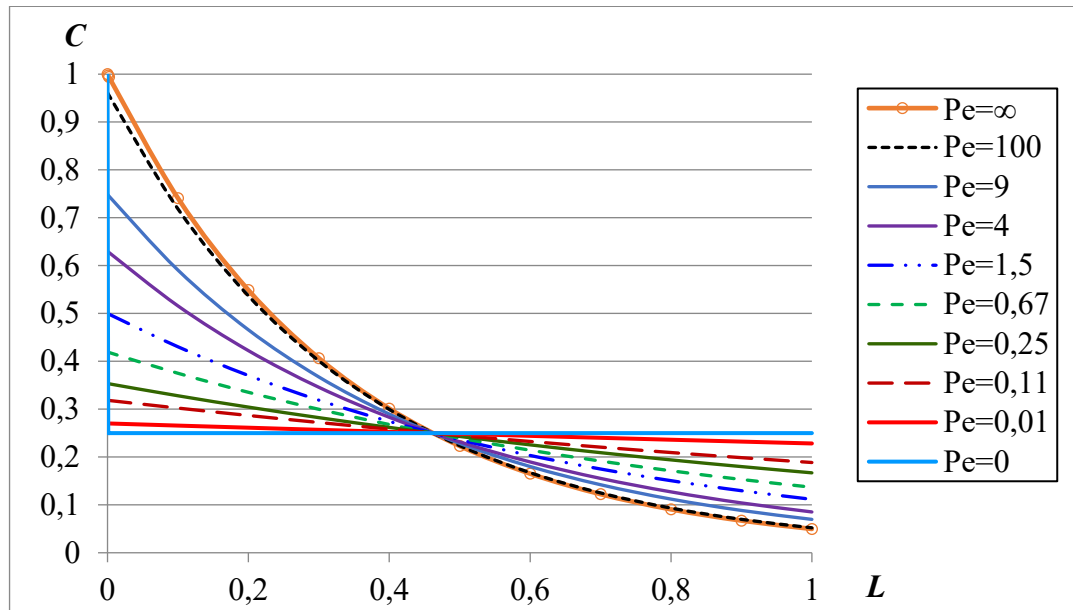


Рисунок 2.3 – Распределение концентраций в проточном фильтре по методу баланса точки пересечения при $\bar{\tau} = 1 \cdot 10^3$ с и $k = 3 \cdot 10^{-3}$ с $^{-1}$

2.4.3 Одноэкспоненциальное решение со скачком концентрации по материальному балансу граничных точек

Соответствующий вариант граничных условий предполагает изменение условий на границе $L=1$, а именно, ненулевая скорость в точке $(L=1+0)$, прекращение действия встречного диффузионного потока вследствие условия $(C_k)_{0+0} = (C_k)_{0-0} = C(+\infty)$.

По методу материального баланса граничных точек первое граничное условие на входе в реактор запишем как:

$$\text{При } L=0 \quad u_0 C_{0-0} = u_0 C_{0+0} - D_L \cdot \frac{dC}{dL}. \quad (2.29)$$

Данное условие похоже на первое граничное условие Данквертса, только в $\frac{dC}{dL}$ безразмерная концентрация C не обязательно $C_{(+0)}$, а относится ко всему внутреннему пространству фильтра. Первое граничное условие означает, что на

границе $L = 0$ соблюдается баланс потоков: конвективного исходного с C_0 и отходящих диффузионных и конвективного потока.

Второе граничное условие записывается как:

$$\left(\frac{dC}{dL}\right)_{L=1+0} \neq 0; \left(\frac{dC}{dL}\right)_{L=1-0} = 0. \quad (2.30)$$

Было найдено решение основного уравнения (2.2) по материальному балансу граничных точек, которое записывается следующим образом:

$$C(L) = \frac{C_0 \cdot \text{Pe} \cdot \exp\left[-k \cdot \bar{\tau} \left(\frac{\text{Pe}}{\text{Pe} + 1}\right) L\right]}{\text{Pe} + 1 - \exp\left[-k \cdot \bar{\tau} \left(\frac{\text{Pe}}{\text{Pe} + 1}\right)\right]}, \quad (2.31)$$

$$C_{0+0} = \frac{\text{Pe} \cdot C_0}{\text{Pe} + 1 - \exp \lambda_2}, \quad (2.32)$$

где

$$\lambda_2 = -k \cdot \bar{\tau} (\text{Pe} / (\text{Pe} + 1)). \quad (2.33)$$

Профиль распределения концентраций в безразмерных координатах в зависимости от критерия Pe , рассчитанный по материальному балансу граничных точек и линейной зависимости градиента концентрации представлен на рисунке 2.4.

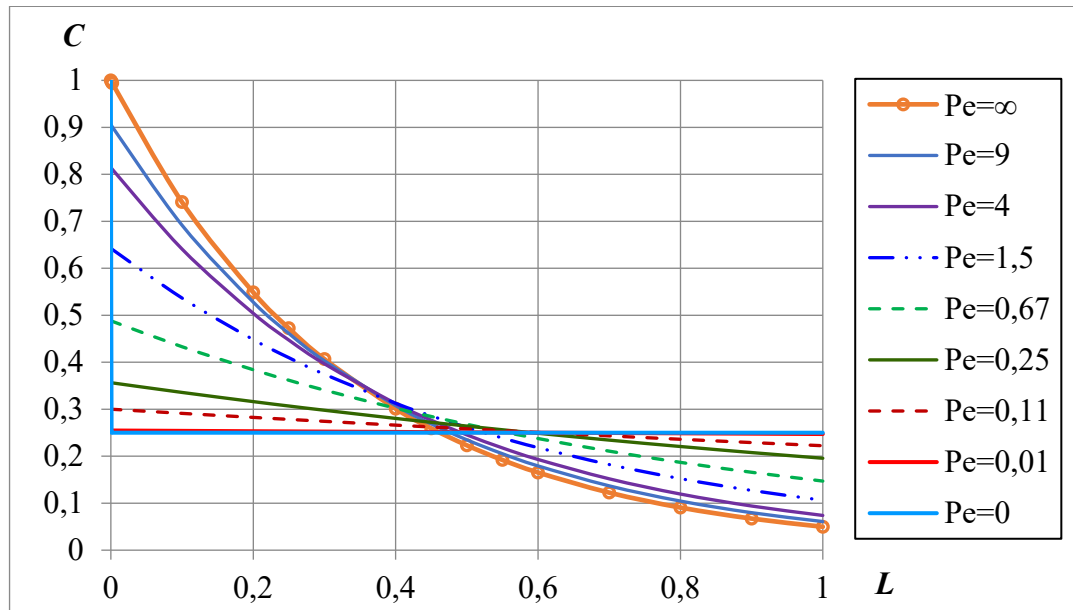


Рисунок 2.4 – Поле распределения концентраций в проточном реакторе по методу материального баланса граничных точек при $\bar{\tau} = 1 \cdot 10^3$ с и $k = 3 \cdot 10^{-3}$ с $^{-1}$

2.4.4 Двухэкспоненциальное решение без скачка концентрации (граничные условия Бояджиева)

Христо Бояджиевым и соавторами [70] для однопараметрической диффузионной модели были предложены следующие граничные условия:

$$C(0) = C_{0-0} = C_{0+0} = 1, \quad (2.34)$$

$$\frac{\partial C}{\partial R} = 0, \text{ при } R=1 \text{ и } R=0, \quad (2.35)$$

$$1 = U - \left(\frac{1}{Pe} \frac{dC}{dL} \right)_{L=0}, \quad (2.36)$$

где U – безразмерная скорость.

Первое граничное условие на входе означает отсутствие скачка концентрации на входе в реактор и учет свободной диффузии.

Нами было найдено аналитическое решение основного уравнения (2.2) однопараметрической диффузионной модели в граничных условиях Бояджиева.

$$C(L) = \frac{\lambda_2 \exp(\lambda_2) \cdot \exp(\lambda_1 L)}{\lambda_2 \exp(\lambda_2) - \lambda_1 \exp(\lambda_1)} - \frac{\lambda_1 \exp(\lambda_1) \cdot \exp(\lambda_2 L)}{\lambda_2 \exp(\lambda_2) - \lambda_1 \exp(\lambda_1)}. \quad (2.37)$$

Профиль распределения концентраций в безразмерных координатах в зависимости от критерия Pe , рассчитанный по граничным условиям Бояджиева без скачка концентрации на входе, представлен на рисунке 2.5.

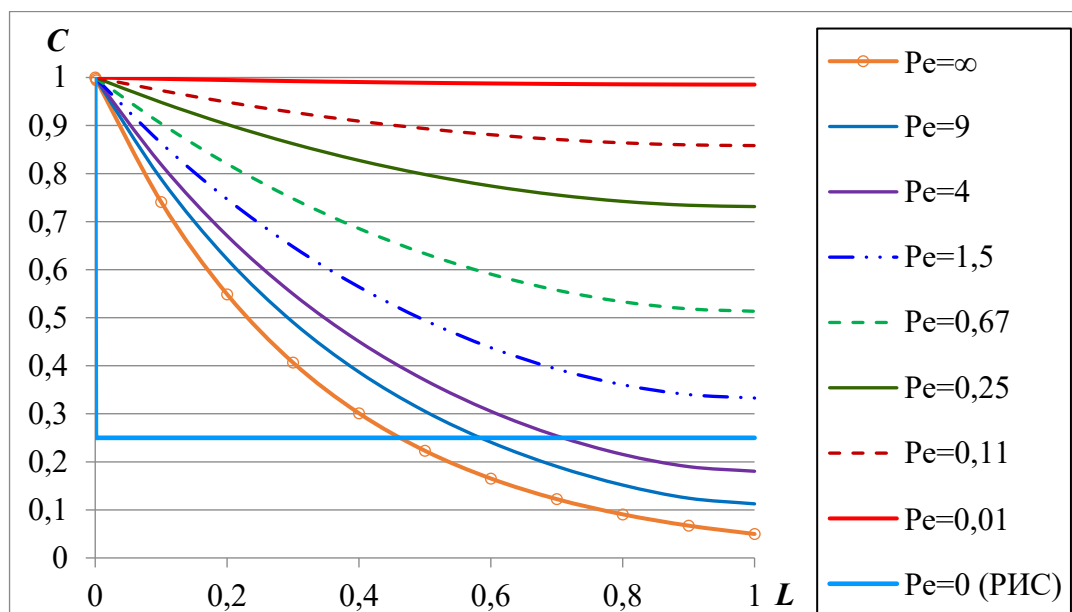


Рисунок 2.5 – Поле распределения концентраций в проточном реакторе в зависимости от числа Pe при $\bar{\tau} = 1 \cdot 10^3$ с и $k = 3 \cdot 10^{-3}$ с⁻¹ (граничные условия Бояджиева)

2.4.5 Влияние граничных условий на вид концентрационных кривых

В моделях и граничных условиях со скачком концентрации решение по методам баланса в точке пересечения и материального баланса кривые зависимости $C_{0+0} - \text{Pe}$ очень близки. При решении в граничных условиях Данквертса для случаев кроме $\text{Pe} = 0$ и $\text{Pe} \rightarrow \infty$ наблюдается существенное завышение безразмерной концентрации. Объясняется это тем, что диффузионный поток учитывается только вблизи $L = 0$. В то время как у методов материального баланса и баланса в точке пересечения значения концентрации согласуются.

По результатам расчетов по четырем способам (граничным условиям) были построены графики зависимости безразмерной концентрации для точки входа в реактор ($L = 0 + 0$) и для точки выхода из реактора ($L = 1 - 0$) от критерия Пекле (рисунок 2.6).

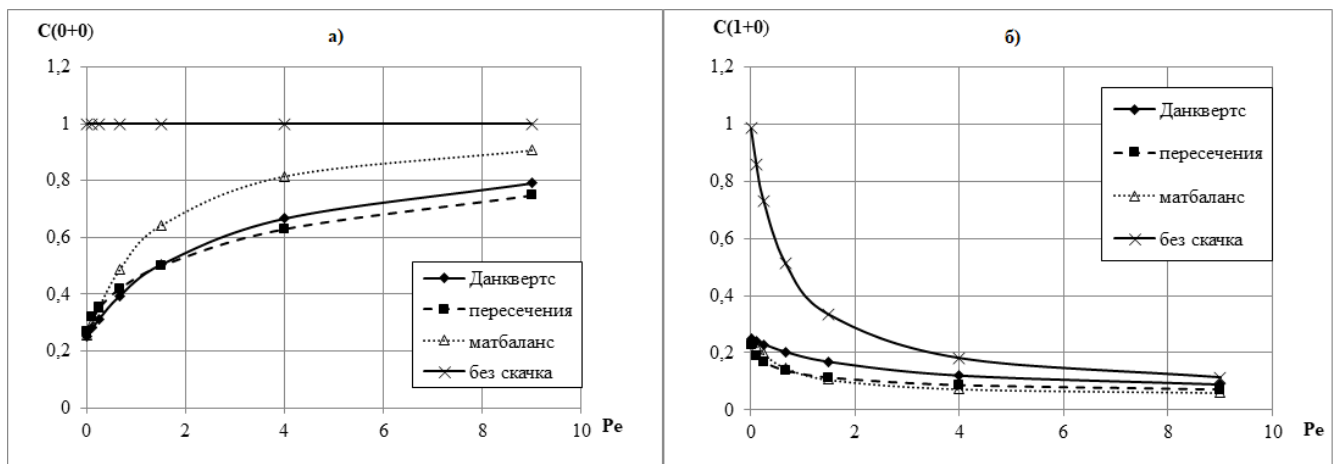


Рисунок 2.6 – Концентрация на входе в реактор (точка $L = 0 + 0$)

Для всех случаев граничных условий со скачком концентрации на входе в реактор получены очень близкие значения для выходной концентрации. Несколько завышенные результаты для граничных условий Данквертса связаны со вторым граничным условием – нулевой скоростью на выходе.

На рисунке 2.7 приведен график зависимости безразмерной концентрации от числа Пекле для середины реактора ($L = 0,5$).

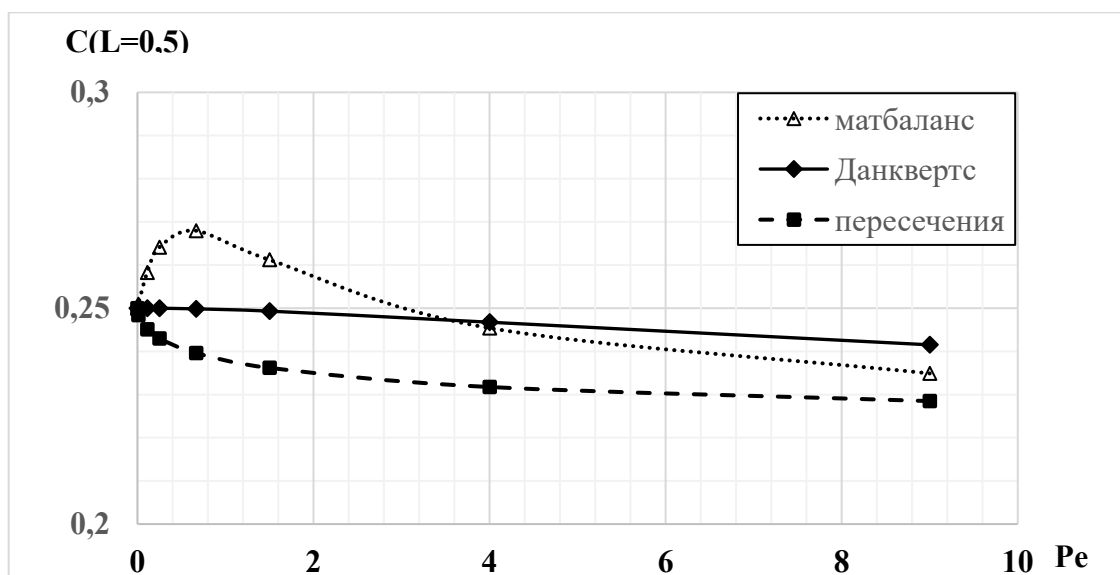


Рисунок 2.7 – Зависимости безразмерной концентрации от числа Пекле для середины реактора ($L = 0,5$)

Основное уравнение ионитного фильтра как проточного реактора с зернистым слоем в стационарном режиме с необратимой химической реакцией 1-го порядка по однопараметрической диффузионной модели применимо только для внутренней области реактора ($L = 0+0$ до $L = 1-0$). На границах области ($L = 0$ и $L = 1$) происходят изменения условий и, соответственно, вид уравнений.

2.5 Математическая модель процесса регенерации ионитного фильтра

Основное усложнение при переходе к нестационарному режиму заключается в том, что концентрация вещества начинает зависеть не только от продольной координаты, но и от времени. Внутри фильтра идет накопление продукта. После прекращения подачи реагента начинается стадия отмывки. Поэтому второе усложнение связано с тем, что нужно учесть вымывание сорбированного вещества реагентом, входящим в состав регенерационного раствора. Поэтому необходимо учитывать и концентрацию внутри твердой фазы.

Математическая модель регенерации ионитного фильтра описывается линейным неоднородным уравнением второго порядка в частных производных с

постоянными коэффициентами. Общее решение такого уравнения представляет собой сумму общего решения однородного дифференциального уравнения и некоторого частного решения неоднородного дифференциального уравнения.

Общие решения однородного уравнения при различных граничных условиях были получены и приведены в разделах 2.4.1–2.4.4. Граничные условия (2.10–2.15) для всех трех рассмотренных зон также остаются справедливыми для математической модели регенерации фильтра.

Основное уравнение сохранения массы компонента согласно уравнению (2.1) по однопараметрической диффузионной модели с учетом накопления вещества имеет вид:

$$\frac{\partial c}{\partial \tau} = D_L \frac{\partial^2 c}{\partial l^2} - u_0 \frac{\partial c}{\partial l} - w_r. \quad (2.38)$$

Для решения уравнения диффузионной модели (2.38) были сделаны обоснованные допущения и упрощения.

Прямая химическая реакция обмена реагента на продукт реакции может быть записана как:

$$w_r = k c_R \tilde{c}_P, \quad (2.39)$$

где $\tilde{c}_P$ – концентрация (содержание, доля) продукта в твердой фазе ионита.

По законам химической термодинамики в случае, если в реакции участвует твердое вещество, то его концентрация принимается равной единице. То есть возможно записать:

$$w_r = K c_R, \quad (2.40)$$

где константа K имеет более сложный смысл, чем константа скорости гомогенной реакции.

Используя безразмерные переменные для координаты $L = l/l_0$ (l_0 – длина фильтра или длина пути), времени $\theta = \tau/\bar{\tau}$ и концентрации $C = c/c_0$, переходим к безразмерной форме записи основного уравнения (2.38) для реагента:

$$\frac{\partial C}{\partial \theta} = \frac{D_L}{u_0 l_0} \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial L^2} - \frac{\partial C}{\partial L} - K \bar{\tau} C, \quad (2.41)$$

$$\frac{1}{Pe} \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial L^2} - \frac{\partial C}{\partial L} - K \bar{\tau} C = \frac{\partial C}{\partial \theta}. \quad (2.42)$$

Для продукта (P) – уравнение аналогичное. Для упрощения задачи примем, что химическая реакция – это эквивалентное замещение продукта на реагент в твердой фазе ионита и отсутствует накопление (сорбции) реагента. Тогда сумма вещества реагента (число молей эквивалентов N_R) и продукта (N_P) в жидкой фазе будут равны количеству введенного реагента: $N_{R,0} = N_R + N_P$.

При решении уравнения (2.42) будем считать ионообменный фильтр как: 1 – жидкофазный с проходной загрузкой твердого ионита; 2 – проточный с постоянной скоростью подачи регенерационного раствора ($u_0 = \text{const}$); 3 – периодического действия (последовательные действия конечного времени); 4 – реактор конечной длины; 5 – с необратимой гетерогенной химической реакцией первого порядка; 6 – изотермический; 7 – $D_L = \text{const}$.

Граничные условия для этого случая задаются из условия материального баланса на границах фильтра. На входе в фильтр сумма потоков вещества, подходящего к границе ($L = 0$), должна быть равна потоку вещества, отходящего от границы ($L = 0 + 0$). В безразмерной форме это может быть записано как:

$$C_0 - C_{0+0} + \frac{1}{\text{Pe}} \left(\frac{dC}{dL} \right)_{L=0+0} = 0. \quad (2.43)$$

Второе граничное условие описано уравнением (2.22), которое было представлено ранее.

Для решения задачи получения функции отклика (выходных концентрационных кривых $c(\theta)$) на выходе из фильтра в исходном уравнении (2.42) координата фиксируется на уровне $L=1$, и единственной переменной остается время (θ) .

Кроме того, поскольку фильтр регенерируется с периодической сменой операций с резким изменением условий на границах, целесообразно зонирование или, в терминах времени, разбиение всего процесса на этапы.

Для процесса регенерации фильтра можно выделить два этапа:

1) регенерация – это поступление в фильтр раствора реагента с постоянной концентрацией $C_{R,0}=1$ (в безразмерной форме), с постоянной скоростью u_0 в течение времени θ_R ;

2) вытеснение реакционной массы водой с концентрацией $C_R=0$, с постоянной скоростью (u_0) при времени $\theta > \theta_R$.

В результате аналитического интегрирования получено решение в виде семейства однотипных уравнений, включающих параметры модели с учетом экспоненциальной зависимости функции отклика от времени. Семейство уравнений вида $C = \exp(\theta, \theta_R, \theta_P, \text{Pe}, K, \bar{\tau})$ составляет математическую модель процесса регенерации – отмывки ионитного фильтра,

Основные параметры для нестационарной математической модели представлены в Таблице 2.5.1.

Таблица 2.5.1 – Параметры нестационарной математической модели

Параметр	Интерпретация	Формула
θ_0	Начало пропуска раствора реагента через фильтр	
θ_L	Время появления продукта и/или реагента на выходе из фильтра	$\theta_L = \frac{\tau_L}{\bar{\tau}} = \frac{Pe}{Pe + 1}$
θ_R	Время пропуска раствора реагента	
θ_P	Количество эквивалентов продукта в ионите	$\frac{N_P}{N_R} = \frac{\theta_P}{\theta_R}$
$\theta_{\max R}$	Время достижения максимальной концентрации реагента на выходе из фильтра	$\theta_{\max R} = \frac{Pe}{Pe + 1} + \theta_R$
$C(\theta_{\max R})$	Максимальная концентрация реагента на выходе	$C(\theta_{\max R}) = 1 - \exp(-(Pe + 1) \cdot (\theta_R - \theta_P))$
$\theta_{\max P}$	Время достижения концентрации продукта на выходе из фильтра максимального значения	$\theta_{\max P} = \frac{\theta_P \cdot (Pe + 1)}{\langle k \bar{\tau} \rangle + Pe}$
$\langle k \bar{\tau} \rangle$	Нормированный показатель скорости гетерогенной реакции	$\langle k \bar{\tau} \rangle = \frac{k \bar{\tau}}{k \bar{\tau} + 1}$
$C_{\max P}$	Максимальная концентрация продукта на выходе	$C_{\max P} = 1 - \exp(-\langle k \bar{\tau} \rangle \cdot (Pe + 1) \cdot \theta_{\max P})$

На рисунке 2.8 представлены расчетные выходные концентрационные кривые реагента и продукта при различных Pe , позволяющие наглядно представить характеристики модели.

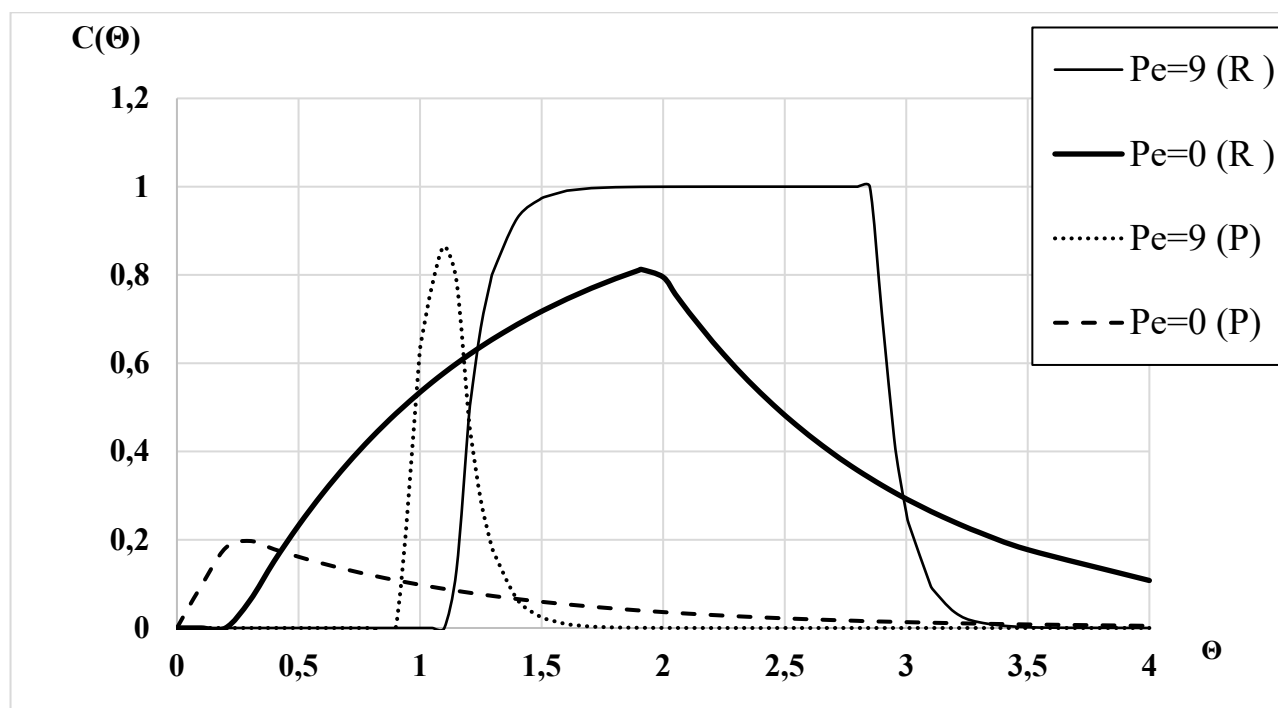


Рисунок 2.8 – Выходные концентрационные кривые реагента (R) и продукта (P) при различных значениях Pe , при условии $k \bar{\tau} \rightarrow \infty$, $\theta_P/\theta_R = 0,1$

Сопоставление расчетных значений выходных концентраций с экспериментальными данными, полученными при регенерации промышленного ионитного фильтра, показывает хорошее соответствие.

На рисунке 2.9 представлены выходные концентрации реагента (NaOH), продукта 1 (SiO_2), продукта 2 (органические вещества) при регенерации анионитного фильтра II ступени химобессоливающей ВПУ Нижнекамской ТЭЦ-1. Линиями представлен расчет по диффузионной модели, фигурами – экспериментальные данные (таблицы 2.5.2–2.5.3).

По диффузионной модели были рассчитаны параметры реального процесса. Значение критерия – $Pe=1,5$. Это означает, что в фильтре с данными конструктивными характеристиками (D_ϕ , l_0 , объем загрузки ионита, диаметр зерна ионита) и режимными характеристиками (u_0 , c_{NaOH} , τ_R) реализуется

гидродинамический режим, промежуточный между идеальным вытеснением и идеальным смешением.

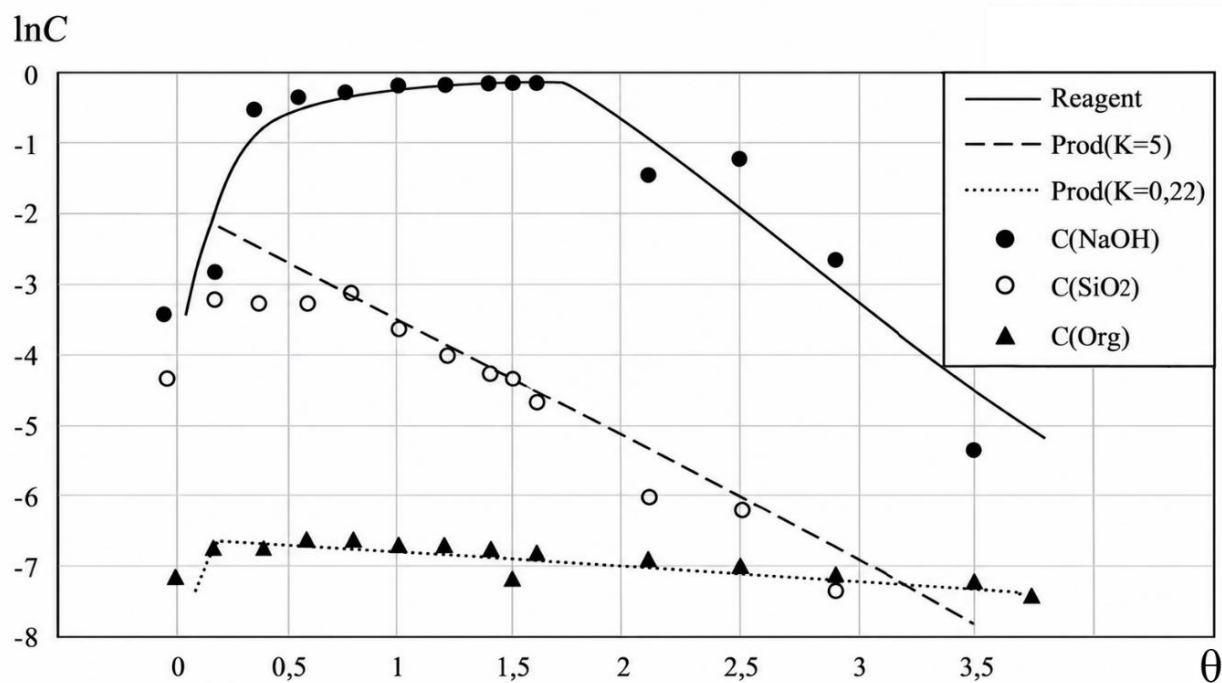


Рисунок 2.9 – Теоретические и экспериментальные данные процесса регенерации ионитного фильтра ВПУ Нижнекамской ТЭЦ-1

Таблица 2.5.2 – Параметры ионитного фильтра

Параметр	Значение
Загрузка фильтра	Высокоосновный анионит
Скорость потока (u_0)	7,08 м/ч
Время подачи регенерационного раствора (τ_R)	60 мин
Диаметр фильтра (D_ϕ)	3 м
Длина пути в фильтре (l_0)	3 м

Таблица 2.5.3 – Рассчитанные параметры работы ионитного фильтра

Параметр	Значение
Относительное количество эквивалентов десорбированного диоксида кремния	0,04
Относительное количество эквивалентов десорбированных органических веществ	0,004
Число Пекле	1,5
Кажущаяся константа скорости десорбции SiO_2	5 ч^{-1}
Время полуреакции (время десорбции половины сорбированного SiO_2)	8,5 мин
Кажущаяся константа скорости десорбции органических веществ	$0,22 \text{ ч}^{-1}$
Время полуреакции органических веществ	3,5 часа

Полученные результаты показывают, что реализуемый режим регенерации и конструкция фильтра не позволяет достичь режима идеального вытеснения, при котором возможны теоретически минимальный расход реагента, минимальный объем стоков и максимальный выход продукта.

Реакция регенерации ионита протекает со средней скоростью, достаточной для выделения и отмыва большей части SiO_2 . За время регенерации удаляется только часть органических веществ, что объясняет происходящее со временем «отравление» ионита. Следовательно, есть большой простор для совершенствования как конструкции, так и технологии регенерации.

2.6 Компьютерная программа «Регенерация ионитного фильтра»

На основе полученных во второй главе аналитических решений дифференциального уравнения второго порядка в частных производных по однопараметрической диффузионной модели для нестационарного режима была создана компьютерная программа, которая моделирует процесс регенерации ионитного фильтра [151]. Программа предназначена для вычисления гидродинамических, кинетических характеристик проточного ионитного фильтра

с неподвижной загрузкой гранулированного ионита в нестационарном режиме работы, а также позволяет производить расчет выходных концентрационных кривых реагента и продуктов обмена в зависимости от характеристик ионитного фильтра, ионитной загрузки, используемого реагента и режима регенерации. Программа позволяет просчитать параметры проведения регенерации для трех различных задач: 1) без химической реакции; 2) с быстрой ограниченной химической реакцией; 3) с медленной ограниченной химической реакцией.

Алгоритм программы реализован с помощью языка Visual Basic for Applications (VBA) в среде Microsoft Excel. Программа состоит из четырех листов, каждый из которых представляет собой отдельный этап расчета, прописанным с помощью макросов через отдельные модули.

Лист 1 «Исходные данные» предназначен для ввода исходных данных, необходимых для проведения расчетов (рисунок 2.10). Исходные данные поделены на 5 блоков: 1) характеристики фильтра; 2) режим работы фильтра; 3) данные по реагенту; 4) данные по продукту; 5) нормированные величины; 6) подбираемые параметры модели. После ввода исходных данных, приведенных в синих ячейках, программа автоматически просчитывает значения расчетных данных, необходимых для дальнейших расчетов.

На листе 2 («Задача 1») выполняются расчеты выходных концентрационных кривых для реагента без учета химической реакции. Результаты расчетов представлены в виде таблицы значений безразмерной концентрации в зависимости от безразмерного времени для различных значений критерия Пекле. По результатам рассчитанных значений строится график функции $C(\theta)$.

На листе 3 («Задача 2») выполняются расчеты выходных концентрационных кривых для реагента и продукта с учетом быстрой химической реакции. Результаты расчетов представляются в виде таблицы значений безразмерной концентрации в зависимости от безразмерного времени для различных значений критерия Пекле. По результатам рассчитанных значений строятся два графика (для реагента и продукта).

1	ПРОГРАММА "РЕГЕНЕРАЦИЯ ИОНИТНОГО ФИЛЬТРА"			
2				
3		ячейка для ввода первичных исходных данных		
4		ячейка с рассчитанными значениями по исходным данным		
5				
6	ИСХОДНЫЕ ДАННЫЕ			
7				
8	Характеристики фильтра		Обозначение	Величина
9	Высота загрузки ионита, м		H(загр)	1,1
10	Диаметр фильтра (внутренний), м		Dф	3
11	Высота фильтра (длина пути), м		Lф	3
12	Площадь фильтрования, м2		Sф	7,065
13	Объем загрузки ионита, м3		V(загр)	7,7715
14	Внутренний объем фильтра, м3		Vф	19,0755
15	Объем жидкой фазы в фильтре, м3		Vжф	12,8583
16				
17	Режим работы фильтра		Обозначение	Величина
18	Объемный расход жидкой фазы, м3/ч		v0	50
19	Линейная скорость жидкой фазы, м/ч		u0	7,07714084
20	Козф-т прямого потока, м2/ч		u0*Lф	21,2314225
21	Реагент		R	NaOH
22	Массовая концентрация реагента, %		c(R)	2
23	Молярная масса эквивалента вещества, (г/моль-экв)		Mэ	40
24	Конц-я эквивалентов реагента, моль/л		сэ(R)	0,5
25	Время пропуска РР реагента, мин (час)		τ(R)	50
26	Число молей эквивалентов реагента (кг 100%)		N(R)	20833,3333
27	Продукт		P	SiO2
28	Число молей эквивалентов продукта в ионите		N(P)	2500
29				
30	Нормированные значения		Обозначение	Величина
31	Характеристическое время, час (мин)		τ(хар)	0,4239
32	Безразмерное время пропуска РР реагента		Θ(R)	1,96587245
33	Безразмерное время на реакцию обмена		Θr	0,23590469
34				
35	Подбираемые параметры модели		Обозначение	Величина
36	Константа скорости реакции 1, 1/час		k	1
37	Время полуреакции, час (мин)		τ(1/2)	0,69314718
38	Показатель скорости реакции 1		kt/(kt+1)	0,29770349
39	Константа скорости реакции 2, 1/час		K	100
40	Время полуреакции, час (мин)		τ(1/2)	0,00693147
41	Показатель скорости реакции 2		Kt/(Kt+1)	0,97695322

Рисунок 2.10 – Компьютерная программа «Регенерация ионитного фильтра»

На листе 4 («Задача 3») выполняются расчеты выходных концентрационных кривых для случая с медленной ограниченной химической реакцией для реагента и продукта с учетом взаимного влияния массопереноса и кинетики реакции. Расчеты ведутся в безразмерных величинах, однако всегда можно перейти к размерному виду и вычислить точное значение концентрации реагента и продукта на выходе из проточного ионитного фильтра в любой момент времени.

2.7 Выводы к Главе 2

На основании фундаментальных законов физики, химии и гидродинамики для математического моделирования процесса работы проточного ионитного фильтра с необратимой реакцией первого порядка выбрана и описана однопараметрическая диффузионная модель, для которой введены необходимые допущения и упрощения, а также обозначены условия применимости.

Получены и проанализированы аналитические решения основного уравнения однопараметрической диффузионной модели для четырех различных постановок граничных условий: двухэкспоненциальное решение со скачком концентрации в граничных условиях Данквертса; одноэкспоненциальное решение со скачком концентрации и балансом в точке пересечения; одноэкспоненциальное решение, основанное на материальном балансе граничных точек; двухэкспоненциальное решение без скачка концентрации на входе в соответствии с граничными условиями Бояджиева.

Описана математическая модель процесса регенерации ионитного фильтра для нестационарных условий и разработана компьютерная программа «Регенерация ионитного фильтра».

По диффузионной модели для анионитного фильтра II ступени химобессоливающей ВПУ Нижнекамской ТЭЦ-1 были рассчитаны концентрационные кривые для реагента (NaOH), продукта 1 (SiO_2), продукта 2 (органические вещества) при проведении регенерации. Проведено сравнение полученных результатов с экспериментальными данными.

Применение математического моделирования на основе диффузионной модели позволяет рассчитать технологические параметры ионитных фильтров (гидродинамический режим, время полуреакции, состав выходных потоков) и может быть использовано для наладки режимов работы ионитных фильтров с целью снижения расхода реагентов и воды на отмывку фильтров.

ГЛАВА 3. CFD-МОДЕЛИРОВАНИЕ

Численное моделирование методом вычислительной гидродинамики (computational fluid dynamics, CFD) представляет собой современный инструмент для анализа физико-химических процессов и отладки режимных характеристик ионитных фильтров. CFD-моделирование позволяет интегрировать в единую расчетную область уравнения Навье-Стокса, уравнения, описывающие течения в пористой среде (например, закон Дарси, закон Дарси-Форхгеймера, уравнение Бринкмана и др.), и уравнения конвективно-диффузионного переноса.

Целью данной главы является разработка и применение цифровой CFD-модели ионообменного фильтра в стационарной и нестационарной постановках для анализа гидродинамики, массопереноса, процессов регенерации и отмывки ионитного фильтра.

Для достижения поставленной цели решаются следующие задачи:

- разработка стационарной CFD-модели и ее верификация с аналитическим решением;
- разработка нестационарной CFD-модели процесса регенерации ионообменного фильтра;
- моделирование процесса регенерации ионообменного фильтра в нестационарной постановке с учетом гидродинамики потока, массопереноса и кинетики ионного обмена;
- определение динамики изменения концентраций реагента и продуктов реакции в объеме фильтра, включая построение выходных кривых;
- определение характерных временных параметров процесса, включая время достижения заданной степени регенерации и продолжительности стадии отмывки фильтра;
- исследование влияния конструктивных и технологических параметров на эффективность регенерации, включая: геометрические характеристики фильтра (отношение длины к диаметру); скорость подачи регенерационного раствора;

концентрацию регенерационного раствора; режим регенерации (прямоточный и противоточный);

– сопоставление результатов моделирования с экспериментальными данными и известными закономерностями процессов ионного обмена.

Разработанная CFD-модель позволяет анализировать работу ионитного фильтра в различных режимах эксплуатации и может быть использована для уточнения технологических параметров процесса регенерации.

CFD-моделирование проводилось в программном комплексе COMSOL Multiphysics (v. 5.6) с использованием стационарного компьютера с шестиядерным процессором AMD Ryzen 5 5600G и оперативной памятью с частотой 3200 МГц на 64 GB.

3.1 Стационарная CFD-модель ионитного фильтра

На первом этапе была разработана стационарная CFD-модель, позволяющая проводить анализ гидродинамики потока в пористой среде, рассчитать падение давления на слое и получить распределение концентраций компонентов по длине фильтра. Схема CFD-модели приведена на рисунке 3.1.

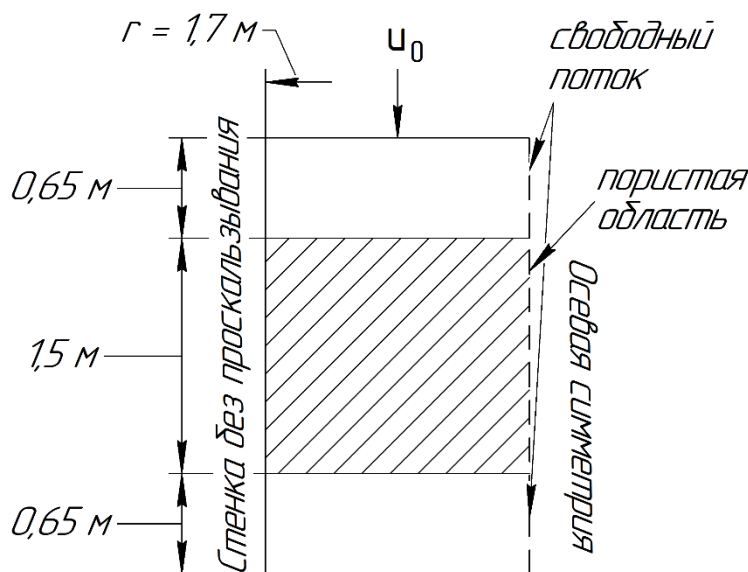


Рисунок 3.1 – Схема CFD-модели ионообменного фильтра

Прототипом для цифровой модели служит цилиндрический ионообменный фильтр диаметром $D_{\text{ф}} = 3,4$ м. Для численного моделирования была выбрана двумерная осесимметричная постановка задачи.

Исходные данные для цифровой модели приведены в таблице 3.1. Создание и поэтапная настройка CFD-модели в программном комплексе COMSOL Multiphysics приведена в Приложении А.

Таблица 3.1 – Исходные данные для расчетной стационарной CFD-модели

Наименование показателя	Величина
Геометрические размеры расчетной области	
Тип геометрии модели	2D осесимметричная
Общая высота фильтра, м	2,8
Радиус фильтра, м	1,7
Высота входной/выходной области свободного течения, м	0,65
Высота слоя пористой загрузки, м	1,5
Настройка модели	
Активные расчетные модули	Laminar Flow, Transport of Concentrated Species
Режим течения	Ламинарный
Тип жидкости	Несжимаемая
Референсная температура, К	293,15
Плотность жидкости, кг/м ³ [152]	1018,4
Динамическая вязкость, Па·с [152]	0,001
Боковая стенка	Стенка без проскальзывания
Скорость на входе в фильтр, м/с	0,0015
Давление на выходе (избыточное), Па	0
Пористость (ϵ)	0,3751
Проницаемость среды, м ²	$7,508 \cdot 10^{-10}$
Константа скорости реакции (k), моль/(м ³ ·с)	$1 \cdot 10^{-3}$
Относительная погрешность (relative tolerance)	10^{-6}
Решатель	PARDISO

Стоит отметить, что настройка каждого расчетного модуля проводилась последовательно. На первом этапе по CFD-модели были рассчитаны гидродинамические параметры, а именно распределение скорости и падение давления по длине фильтра. На втором этапе после верификации результатов на основании расчетных данных по основным аналитическим уравнениям пористой среды для градиента давления был подключен модуль химических реакций.

Течение жидкости в пористой среде подчиняется закону Дарси, который отражает зависимость между объемным расходом и перепадом давления на слое пористой загрузки. Для случая однородной пористой среды без учета влияния гравитации закон Дарси может быть записан как:

$$Q = \frac{k \cdot S}{\mu \cdot L} \Delta p, \quad (3.1)$$

где Q – объемный расход, $\text{м}^3/\text{с}$; k – проницаемость среды (permeability), м^2 ; S – площадь поперечного сечения фильтра, м^2 ; μ – динамическая вязкость жидкости, $\text{Па} \cdot \text{с}$; L – длина фильтра в продольном направлении, м ; Δp – перепад давления на слое, Па .

В гидродинамике существует понятие объемной скорости и согласно закону Дарси ее также называют скоростью фильтрации или superficial velocity (v_s). Тогда уравнение (3.1) может быть записано как:

$$\frac{\Delta p}{L} = -\frac{\mu}{k} v_s. \quad (3.2)$$

Закон Дарси не учитывает инерционные и диффузионные эффекты и является одной из форм записи уравнения проницаемости пористой среды для

случая ламинарного течения жидкости ($Re < 10$) через упорядоченный слой однородной загрузки.

Согласно Н.Н. Павловскому [153], верхний предел применимости закона Дарси, при котором течение через пористую среду можно считать ламинарным, находится в пределах $7,5 \leq Re \leq 9$. Также известна формула Н.Н. Павловского для расчета числа Рейнольдса в пористых средах:

$$Re = \frac{u \cdot d_{\text{эф}}}{(0,75 \cdot \varepsilon + 0,23)} \cdot \frac{\rho}{\mu}, \quad (3.3)$$

где u – скорость фильтрации, $d_{\text{эф}}$ – эффективный диаметр частиц загрузки, ε – пористость слоя загрузки.

Для рассматриваемой CFD-модели скорость потока на входе $u_0 = 0,0015$ м/с была рассчитана исходя из реальных данных по регенерации ионитного фильтра на ВПУ Нижнекамской ТЭЦ-1.

Пористость среды ($\varepsilon = 0,3751$) рассчитывалась по уравнению Furnas С.С. [154]:

$$\varepsilon = 0,375 + 0,34 \frac{d}{D_{\text{ф}}}. \quad (3.4)$$

Для CFD-модели число Рейнольдса в пористой среде для заданных условий ($Re = 2,98$) не превышает верхний предел по уравнению Н.Н. Павловского и течение жидкости в CFD-модели может рассматриваться как ламинарное.

Для нахождения проницаемости среды применяется уравнение Kozeny-Carman [155]:

$$K = \frac{\rho g}{5\mu} \cdot \frac{\varepsilon^3}{(1-\varepsilon)^2} \cdot \left(\frac{d}{6}\right)^2, \quad (3.5)$$

которое с учетом уравнения (3.2) преобразуется к виду:

$$v_s = \frac{d^2}{180} \cdot \frac{\varepsilon^3}{(1-\varepsilon)^2} \cdot \frac{\Delta p}{\mu L}. \quad (3.6)$$

Сопоставляя уравнение закона Дарси (3.2) и уравнение (3.6) получаем формулу для расчета проницаемости среды для CFD-модели:

$$k = \frac{d^2}{180} \cdot \frac{\varepsilon^3}{(1-\varepsilon)^2}. \quad (3.7)$$

Так как в CFD-моделях для случая, когда $D_\phi \gg d$, пористые среды не могут быть смоделированы с разрешением отдельных частиц (particle-resolved model), о чем было упомянуто в Главе 1, для расчетов используется модель пористой среды (porous medium model, PMM). Согласно данной модели, пористая среда задается в определенном домене (области), в котором к уравнениям массопереноса добавляется источник импульса (S_i), включающий в себя два слагаемых: член вязких потерь, рассчитываемый по закону Дарси, и член инерционных потерь.

Для гомогенной пористой среды источник импульса записывается как:

$$S_i = -\left(\frac{\mu}{k} \cdot v_s + C_2 \cdot \frac{\rho(v_s)^2}{2} \right), \quad (3.8)$$

где k – проницаемость среды, C_2 – коэффициент инерционных потерь.

Для описания ламинарного течения жидкости в пористой среде используется модель Бринкмана, которая обобщает закон Дарси и дополнительно учитывает вязкостные потери:

$$\frac{1}{\varepsilon} \rho (u \cdot \nabla) u = \nabla \cdot \left[-pI + \frac{\mu}{\varepsilon} \left(\nabla u + (\nabla u)^T \right) - \frac{2\mu}{3\varepsilon} (\nabla u)I \right] - \left(\frac{\mu}{k} + \beta \rho |u| + \frac{Q_m}{\varepsilon^2} \right) \cdot u + F, \quad (3.9)$$

$$u = \frac{k}{\mu \cdot L} \Delta p, \quad (3.10)$$

где u – скорость фильтрации; Q_m – источник массы; ε – пористость среды; I – единичный тензор; β – коэффициент Форхгеймера; F – вектор массовых сил.

Уравнение конвективно-диффузионного переноса для i -го компонента смеси определяется как:

$$\nabla \cdot J_i + \rho (u \cdot \nabla) \cdot w_i = R_i, \quad (3.11)$$

где w_i – массовая доля i -го компонента смеси; J_i – плотность потока для i -го компонента; R_i – источник массы для i -го компонента химической реакции.

Массовая скорость образования i -го компонента рассчитывается как:

$$R_i = \nu_i M_i \cdot r, \quad (3.12)$$

где ν_i – стехиометрический коэффициент i -го компонента; M_i – молярная масса i -го компонента; r – скорость реакции.

Процессы диффузии химических веществ описываются законом Фика:

$$J_i = -\rho w_i \sum_{j \neq i} D_{ij} \nabla x_j, \quad (3.13)$$

где D_{ij} – коэффициенты бинарной диффузии; x_j – мольная доля j -го компонента.

3.1.2 Анализ сеточной сходимости

Для расчетной сетки было проведено исследование на сеточную сходимость (рисунок 3.2), по результатам которого были найдены размеры и параметры сеточной модели, обеспечивающие необходимую точность решения при наименьших вычислительных затратах.

В результате было определено, что для задачи моделирования ионообменного фильтра заданных геометрических размеров оптимальное значение «Maximum element size» равно 0,011 и число квадратичных элементов расчетной сетки составило 41377. Относительная погрешность при уменьшении значения параметра «Maximum element size» до 0,0055 и одновременном увеличении числа расчетных ячеек до 161476 составила менее 0,0001%, что подтверждает достижение сеточной сходимости решения.

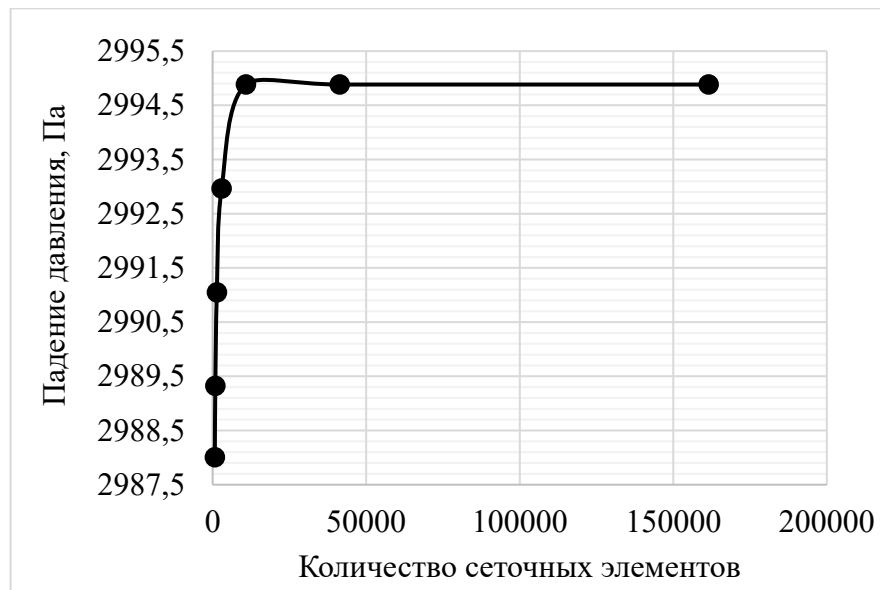


Рисунок 3.2 – Сеточная сходимость (по давлению)

Количество пограничных слоев со сгущением – 6. Параметры и показатели качества сетки, а также график относительной межитерационной ошибки приведены на рисунке 3.3.

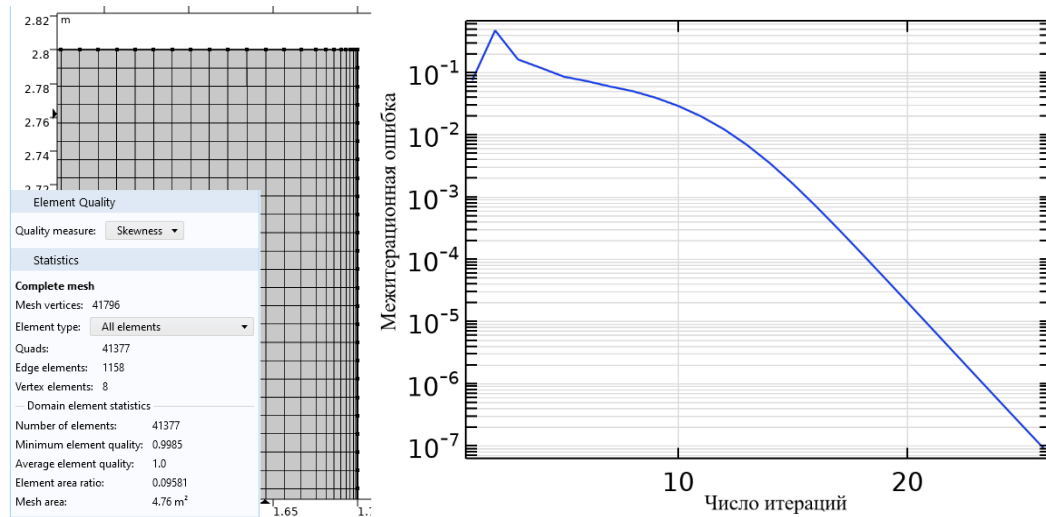


Рисунок 3.3 – Сеточная модель и график невязок

3.1.3 Результаты численного моделирования гидродинамики потока

По результатам численного моделирования гидродинамики потока в программном комплексе COMSOL Multiphysics был построен и проанализирован профиль и график распределения давления (рисунок 3.4) по центральному продольному сечению моделируемой части фильтра.

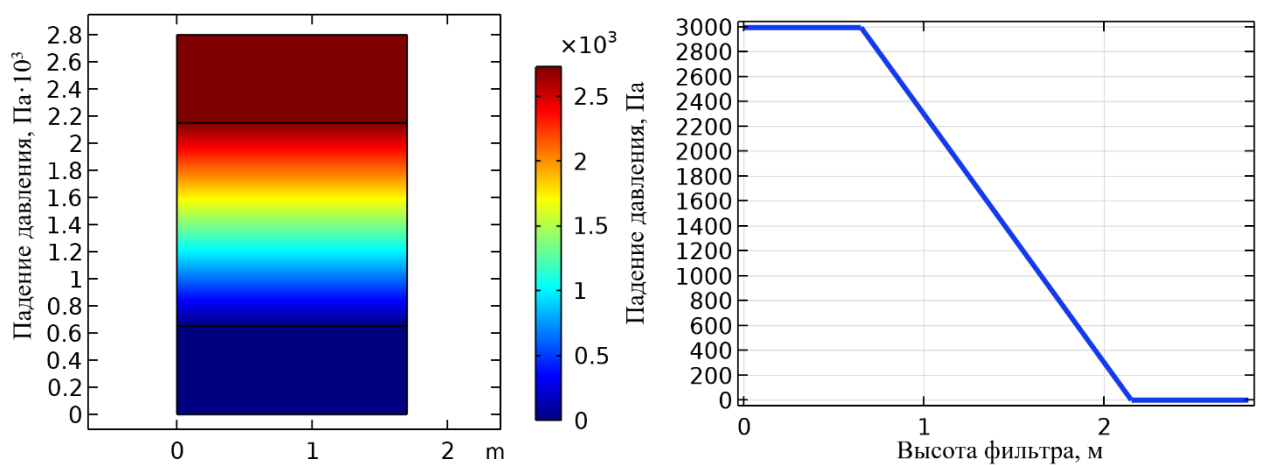


Рисунок 3.4 – Падение давления на пористом слое ионита

Величина падения давления на слое ионообменной смолы по CFD-модели составила 2995,8 Па. В то время как перепад давления, рассчитанный по закону Дарси (3.2), составил 2996,8 Па. Относительная погрешность между найденными величинами составила 0,03%, что говорит о корректной настройке и работе модели.

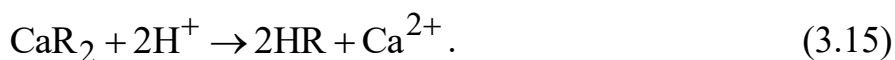
3.1.4 Подключение модуля химической реакции для CFD-моделирования процесса регенерации ионита

Регенерация катионитного фильтра для модели описывается уравнением:



Примем, что для регенерации используется 3% раствор H_2SO_4 .

Ионообменная смола рассматривается не как реагент, а как твердая фаза, и поэтому в уравнении реакции применяем стехиометрический коэффициент равный единице. Тогда химическую реакцию, протекающую при регенерации, можно записать как:



При настройке модели в параметре «Diffusion model» выбираем «Mixture-average», а также добавляем 4 компонента (Species), которые участвуют в процессах массопереноса и химической реакции (H^+ , Ca^{2+} , H_2O , SO_4).

В качестве исходных данных для расчетной модели задаем на входе в фильтр массовую долю каждого компонента, входящего в состав исходной смеси. Массовая доля ионов кальция на входе задается равной нулю, так как в модели принято, что все ионы кальция изначально закреплены на матрице ионита.

В параметрах протекания химической реакции расставляем стехиометрические коэффициенты для каждого компонента, участвующего в реакции, и задаем значения константы скорости химической реакции.

3.1.5 Результаты CFD-моделирования процесса регенерации ионита с подключенным модулем химической реакции

По результатам численного моделирования были построены графики распределения массовых долей компонентов по длине фильтра (рисунок 3.5).

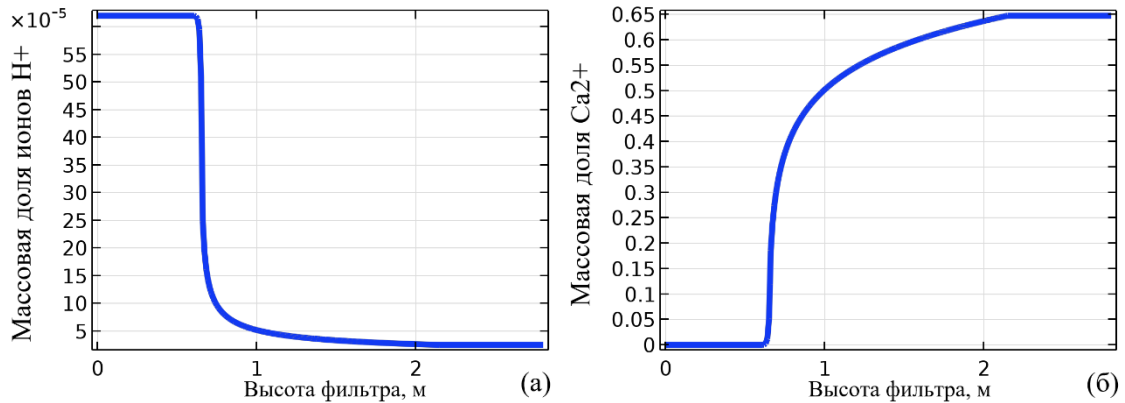


Рисунок 3.5 – Графики распределения массовой доли ионов водорода (а) и кальция (б) по длине фильтра

На 1 участке ($h < 0,65$ м) массовая доля ионов водорода остается постоянной $\omega_{H^+} = 0,00062$, а ионы Ca^{2+} отсутствуют. На входе в пористый домен серная кислота вступает в обменную реакцию с ионами Ca^{2+} .

Сумма массовых долей всех компонентов в любой точке расчетной области фильтра остается равной единице с учетом погрешности численного решения. Построенная модель корректно инициализирует движущийся фронт реакции при соблюдении основных законов массопереноса.

На выходе из фильтра имеем концентрированный раствор сульфата кальция $CaSO_4$ со следовым количеством непрореагировавшей серной кислоты. Фактически по численной модели на выходе получаем концентрированный раствор солей жесткости.

3.2 Нестационарная CFD-модель ионитного фильтра

Реальный процесс регенерации ионообменных фильтров имеет нестационарный характер и сопровождается изменением концентраций реагентов и продуктов реакции во времени. Стационарная постановка задачи не позволяет описать данные явления и, следовательно, ограничена в применении для анализа динамических режимов работы фильтра.

Поэтому на втором этапе был выполнен переход к нестационарной постановке задачи, основные формулы для которой приведены в таблице 3.2. Нестационарная CFD-модель позволяет рассчитывать выходные кривые, оценивать степень регенерации смолы, анализировать процесс отмывки фильтра после отключения подачи регенерационного раствора, а также исследовать влияние конструктивных и технологических параметров на эффективность процесса регенерации.

Таблица 3.2 – Основные расчетные формулы нестационарной CFD-модели

Наименование	Формула
Гидродинамика потока в пористой среде. Уравнение Бринкмана	$\frac{1}{\varepsilon} \rho \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{1}{\varepsilon} \rho (u \cdot \nabla) u =$ $= \nabla \cdot \left[-pI + \frac{\mu}{\varepsilon} \left(\nabla u + (\nabla u)^T \right) - \frac{2\mu}{3\varepsilon} (\nabla u)I \right] -$ $- \left(\frac{\mu}{k} + \beta \rho u + \frac{Q_m}{\varepsilon^2} \right) \cdot u + F$
Массоперенос	$\varepsilon \cdot \frac{\partial c_i}{\partial t} + \nabla \cdot (-\varepsilon D_i \cdot \nabla c_i + u c_i) = R_i$
Диффузионный перенос. Закон Фика	$J_i = -D_i \cdot \nabla c_i$
Скорость реакции	$r = k_f \cdot q \cdot c$
Эффективная скорость реакции	$r_{eff} = r \cdot (1 - \varepsilon)$

В основе нестационарной модели лежит обменная реакция регенерации анионитной смолы, насыщенной хлорид-ионами, раствором щелочи:



Изменение концентрации сорбированных ионов хлора на матрице ионита во времени реализовано через подключение дополнительного модуля Domain ODEs через обыкновенное дифференциальное уравнение первого порядка:

$$\frac{\partial q}{\partial t} = -r. \quad (3.17)$$

3.2.1 Допущения и ограничения нестационарной CFD-модели

Разработанная нестационарная CFD-модель процесса регенерации ионообменного фильтра основана на ряде допущений, позволяющих упростить математическое описание и обеспечить численное решение задачи.

Допущения с точки зрения гидродинамики: 1) течение жидкости – ламинарное; 2) однородность и изотропность среды в пористом домене (ионит); 3) отсутствие байпасов в пористом домене; 4) равномерное распределение параметров в радиальном направлении.

Допущения, связанные с массопереносом: 1) перенос компонентов в жидкой фазе описывается уравнением конвективно-диффузионного переноса с использованием эффективных коэффициентов диффузии; 2) не учитывается пористость самих гранул ионита; 3) изотермичность; 4) свойства раствора (плотность, вязкость, коэффициенты диффузии) не зависят от времени.

Допущения с точки зрения химических процессов: 1) не учитываются конкурирующие ионы и многокомпонентный состав реального раствора; 2) кинетика реакции задается с использованием эффективной константы скорости; 3) обменная емкость смолы считается постоянной и одинаковой по всему объему пористого домена.

3.2.2 Начальные и граничные условия нестационарной CFD-модели

Начальные условия для CFD-модели в нестационарной постановке задачи приведены в таблице 3.3.

Таблица 3.3 – Начальные условия для нестационарной задачи

Параметр	Обозначение	Величина
Константа скорости реакции	k_f	$1\text{e-}3$ [1/с]
Начальная концентрация ионов Cl в пористом домене	q_{Cl_0}	1400 [моль/м ³]
Пористость слоя	ϵ	0,3751
Проницаемость среды	K	$7,508\text{e-}10$ [м ²]
Температура	T	293,15 [K]
Скорость на входе	u_0	0,00137 [м/с]
Концентрация OH и Na на входе в фильтр	$c_{\text{NaOH_in}}$	725 [моль/м ³]
Время подачи регенерационного раствора	t_{reg}	2400 [с]
Плотность раствора	ρ	1018,4 [кг/м ³]
Динамическая вязкость	μ	0,001 [Па·с]
Коэффициент диффузии	D	$1\text{e-}9$ [м ² /с]
Общее время расчета	t	5400 [с]

На входной границе в модуле Laminar Flow задается скорость равная u_0 , а для модуля Transport of Diluted Species задается концентрация ионов, входящих в состав регенерационного раствора (inflow): $c_{\text{OH}} = c_{\text{Na}} = c_{\text{NaOH_in}} \cdot \text{stepNaOH}(t)$, $c_{\text{Cl}} = 0$. Step-функция используется для ступенчатого отключения подачи регенерационного раствора через время t_{reg} .

На выходной границе задано избыточное давление $p = 0$ Па, и данная граница указана для выхода вещества (outflow). На боковой стенке задано отсутствие проскальзывания (wall no slip) и стока (no flux).

3.2.3 Результаты и обсуждение

В результате проведенного CFD-моделирования процесса регенерации анионитного фильтра получены зависимости изменения концентрации регенерационного раствора NaOH на выходе из пористого домена, степени регенерации ионита, а также концентрация закрепленных хлорид-ионов в слое загрузки в безразмерной форме от времени (рисунок 3.6).

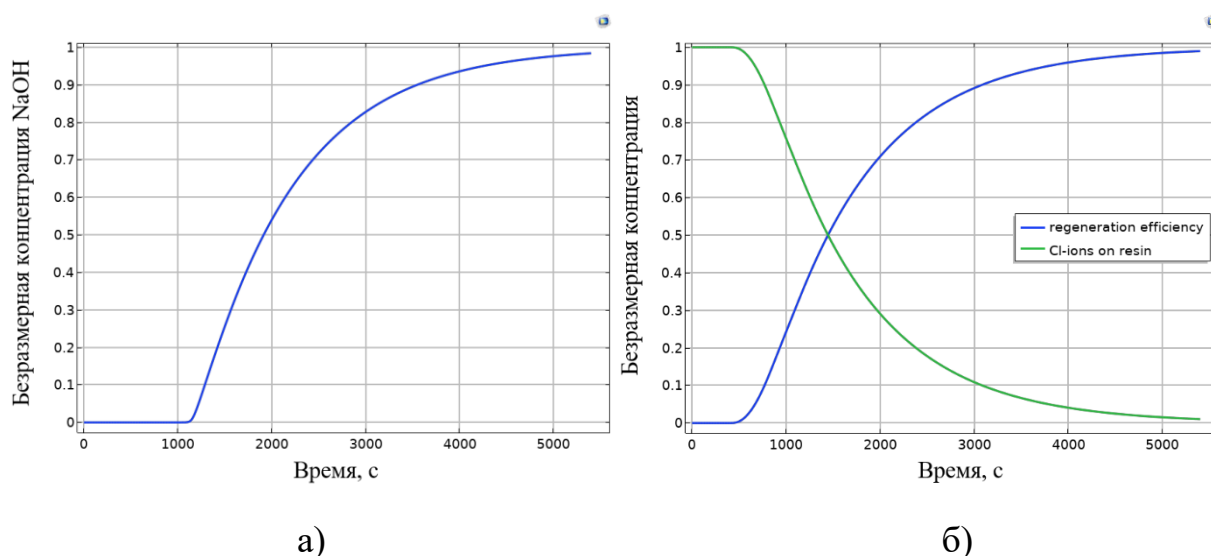


Рисунок 3.6 – а) Изменение концентрации NaOH на выходе из пористого домена;

б) эффективность регенерации и концентрация ионов Cl^- на ионите

На основе анализа выходной кривой концентрации NaOH (рисунок 3.6, а) видно, что по мере продвижения фронта регенерации вдоль пористого домена концентрация NaOH на выходе растет. Данный участок кривой характеризует прощок реагента ($t \approx 1200$ с).

Как видно из графика (рисунок 3.6, б) степень регенерации ионита монотонно возрастает от нуля до значений близких к единице, что соответствует окончанию процесса регенерации. Одновременно с этим безразмерная концентрация хлорид-ионов, закрепленных на смоле, убывает. Данные зависимости являются взаимно согласованными, удовлетворяют условию материального баланса и кинетике обменной реакции, что подтверждает корректность реализованной модели и полученного численного решения.

Пространственные распределения безразмерной концентрации Cl^- -ионов в пористом слое загрузки (рисунок 3.7) позволяют визуализировать динамику движения фронта регенерации.

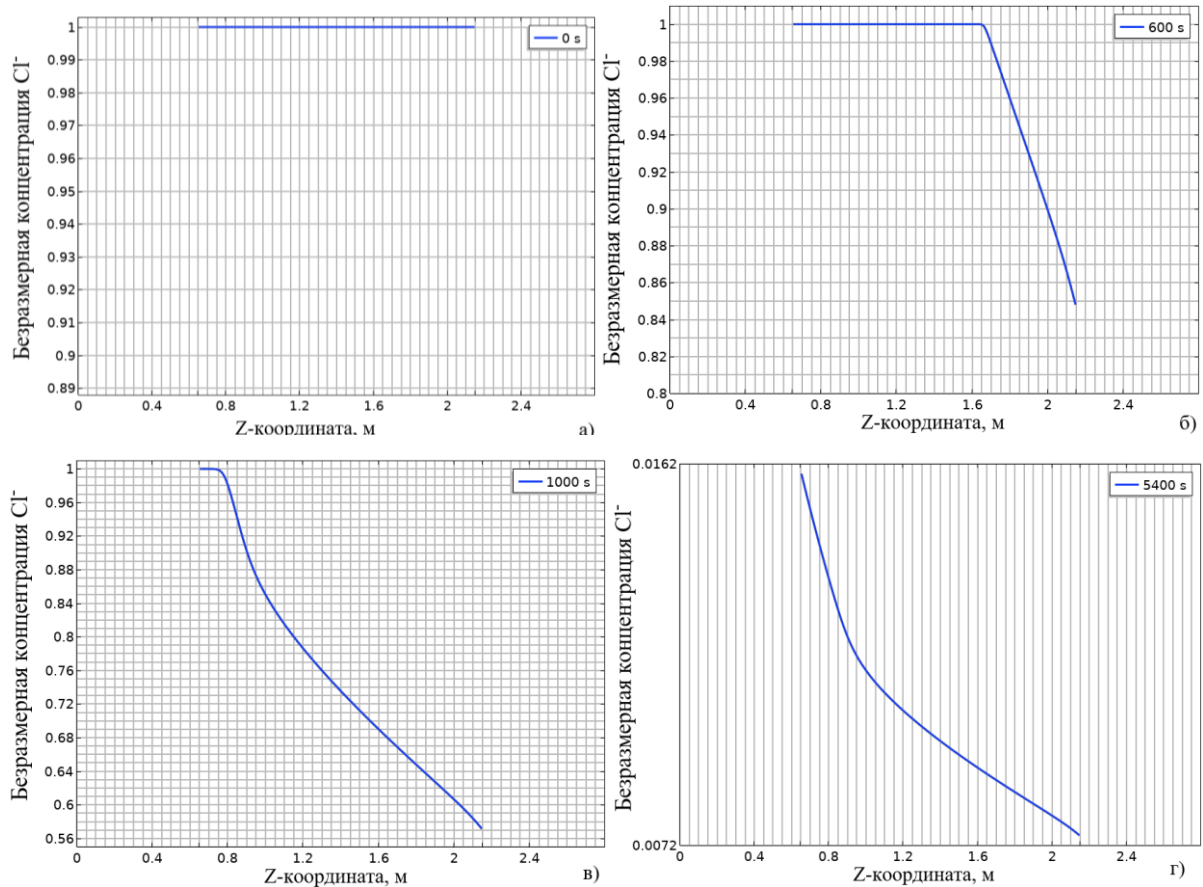


Рисунок 3.7 – Графики пространственного распределения не вступивших в обменную реакцию хлорид-ионов в слое ионита: а) $t = 0$ с; б) $t = 600$ с; в) $t = 1000$ с; г) $t = 5400$ с

В начальный момент времени слой ионита полностью насыщен хлорид-ионами $q_{\text{Cl}}/q_{\text{Cl}_0} = 1$. С течением времени в верхней части фильтра формируется зона, в которой происходит интенсивный ионный обмен. Данная зона представляет собой фронт регенерации, и следует отметить, что фронт регенерации имеет конечную толщину и не является идеально резким. Это обусловлено совместным влиянием конвективного переноса, молекулярной диффузии и протекающей химической реакцией. Таким образом, в фильтре реализуется гидродинамический

режим, находящийся между идеальным вытеснением и идеальным смешением, что соответствует ранее полученным оценкам числа Пекле для реального промышленного фильтра.

По мере продвижения фронта происходит постепенное вытеснение хлорид-ионов из смолы, и к концу расчетного времени ($t = 5400$ с) практически весь слой оказывается в ОН-форме. Это позволяет определить время завершения регенерации, которое может быть использовано при уточнении технологических режимов регенерации ионитного фильтра.

По CFD-модели были построены поля распределения скорости, давления (рисунок 3.8) и концентраций компонентов в различные моменты времени.

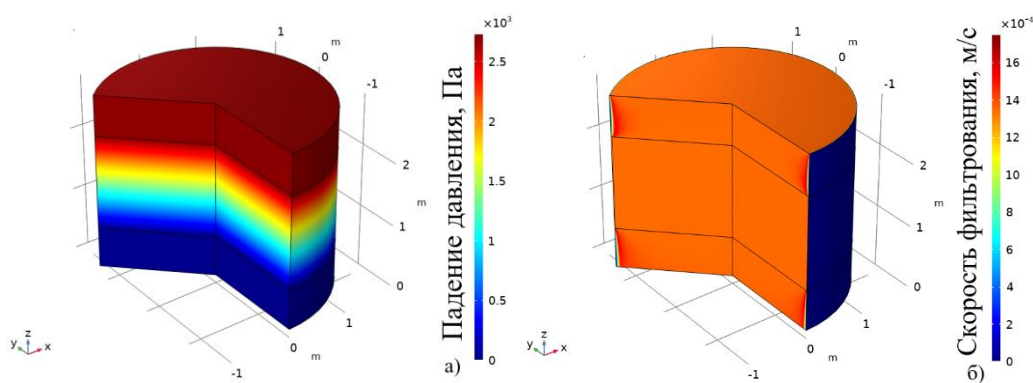


Рисунок 3.8 – Распределение полей скорости (а) и давления (б)

Поле скоростей в объеме фильтра является однородным, за исключением локальных областей вблизи входа в пористый домен и пристеночной области, где прослеживаются градиенты скорости. Падение давления на пористом слое соответствует классическим представлениям о фильтрации через пористую среду.

Из рисунка 3.9 видно, что в начальный момент реагент поступает через верхнюю часть фильтра и движется вместе с потоком жидкости. Примерно через 480 секунд регенерационный раствор достигает пористого домена и вступает в обменную реакцию с закрепленными Cl-ионами на смоле. К концу расчета ($t = 5400$ с) обменная реакция прекращается и фильтр полностью заполнен регенерационным раствором.

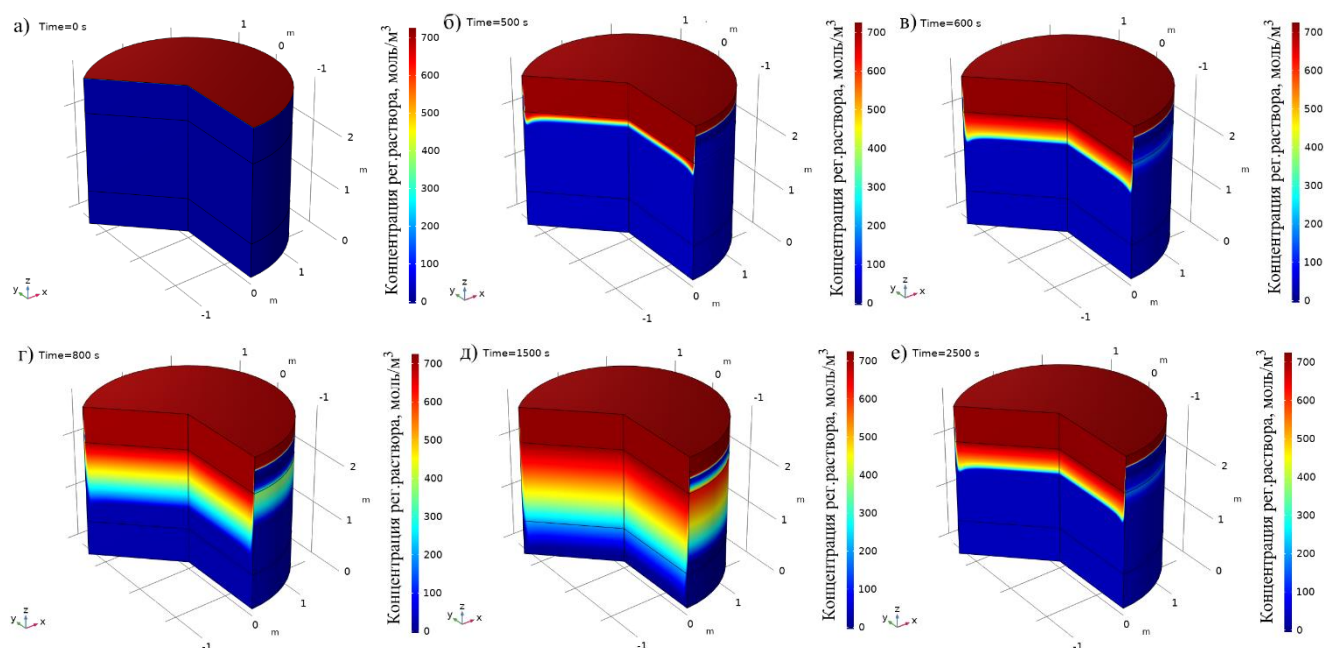


Рисунок 3.9 – Распределение концентрации регенерационного раствора NaOH по объему ионитного фильтра: а) $t = 0$ с; б) $t = 500$ с; в) $t = 600$ с; г) $t = 800$ с; д) $t = 1500$ с; е) $t = 2500$ с

Распределение концентрации хлорид-ионов в растворе (рисунок 3.10) отражает процесс их вытеснения из ионита.

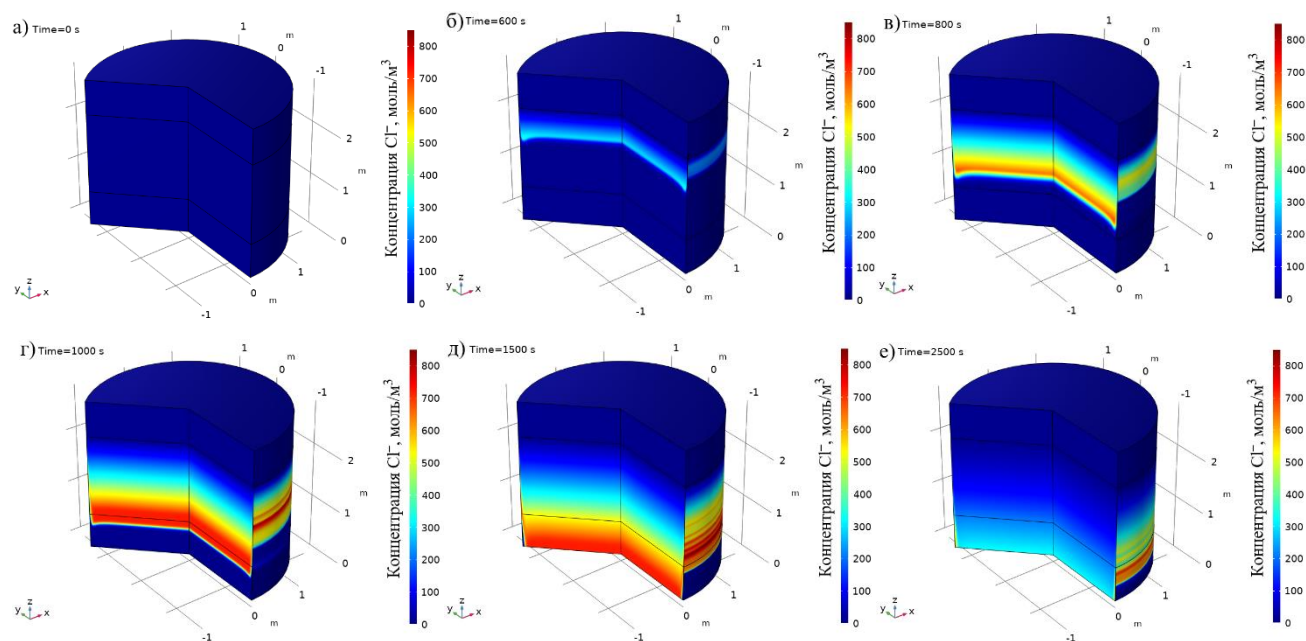


Рисунок 3.10 – Концентрация ионов Cl^- , покинувших ионит: а) $t = 0$ с; б) $t = 600$ с; в) $t = 800$ с; г) $t = 1000$ с; д) $t = 1500$ с; е) $t = 2500$ с

На рисунке 3.11 видно, что в начальный момент времени смола насыщена ионами Cl^- . По мере подачи раствора NaOH фронт регенерации перемещается вниз по слою и к концу процесса концентрация закрепленных на ионите хлорид-ионов становится минимальной во всем объеме ионита, что говорит о завершении процесса регенерации.

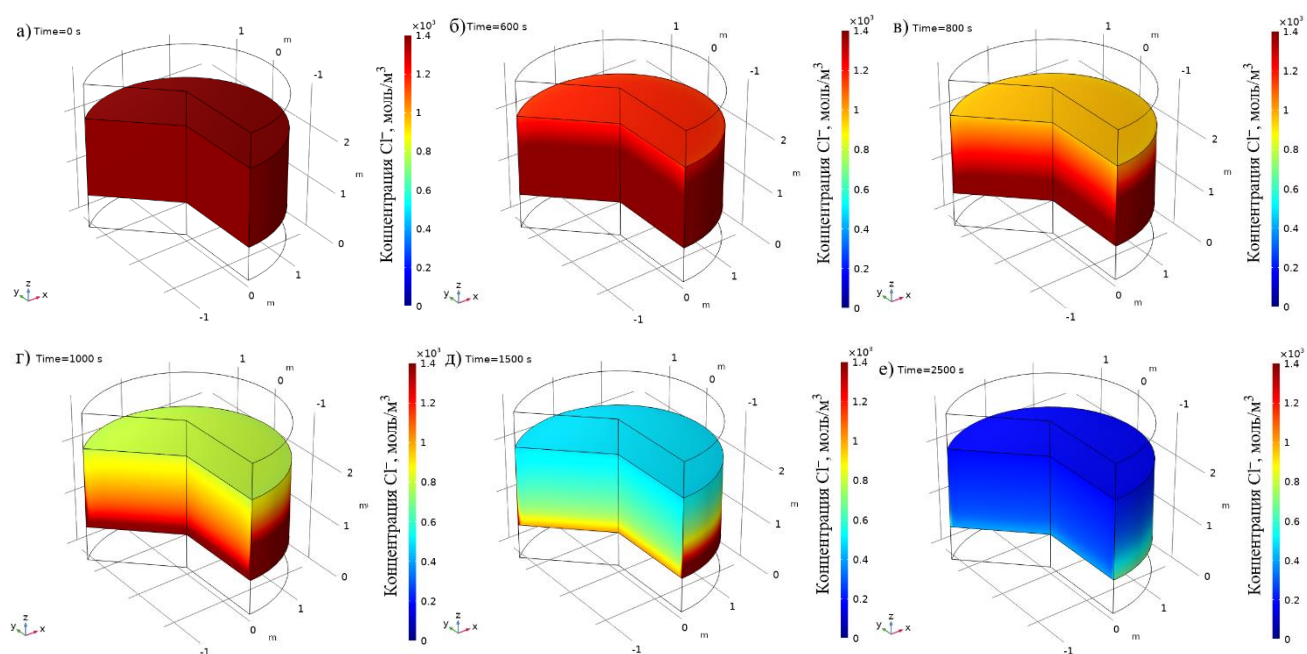


Рисунок 3.11 – Концентрация ионов Cl^- , закрепленных на ионите: а) $t = 0$ с; б) $t = 600$ с; в) $t = 800$ с; г) $t = 1000$ с; д) $t = 1500$ с; е) $t = 2500$ с

3.2.4 Верификация и валидация нестационарной CFD-модели

На этапе верификации модели была проверена согласованность уравнений гидродинамики, массообмена и кинетики ионного обмена. Также была проведена проверка размерностей всех параметров и переменных, используемых при получении численного решения. Важным этапом верификации являлась проверка материального баланса. Уменьшение содержания хлорид-ионов на ионитной смоле соответствует их выходу в жидкую фазу и выносу из фильтра. Модель воспроизводит формирование и движение фронта регенерации, наличие зоны протекания ионного обмена и характерную форму выходных кривых реагентов.

Дополнительно подтверждена устойчивость и сходимость численного решения: отсутствуют отрицательные концентрации и численные артефакты. Среднее время на расчет модели составляет 50 минут.

Валидация работы модели проводилась при сравнении с результатами промышленных экспериментов, проводимых на анионитном фильтре ФИПа - 3,4 - 6 ВПУ Нижнекамской ТЭЦ-1 (рисунок 3.12). Объем загрузки – 18 м³. На вход ионитного фильтра для регенерации подавался 2,9% раствор NaOH с объемным расходом 45 м³/ч в течение 40 минут. На выходе из фильтра определялась концентрация NaOH.

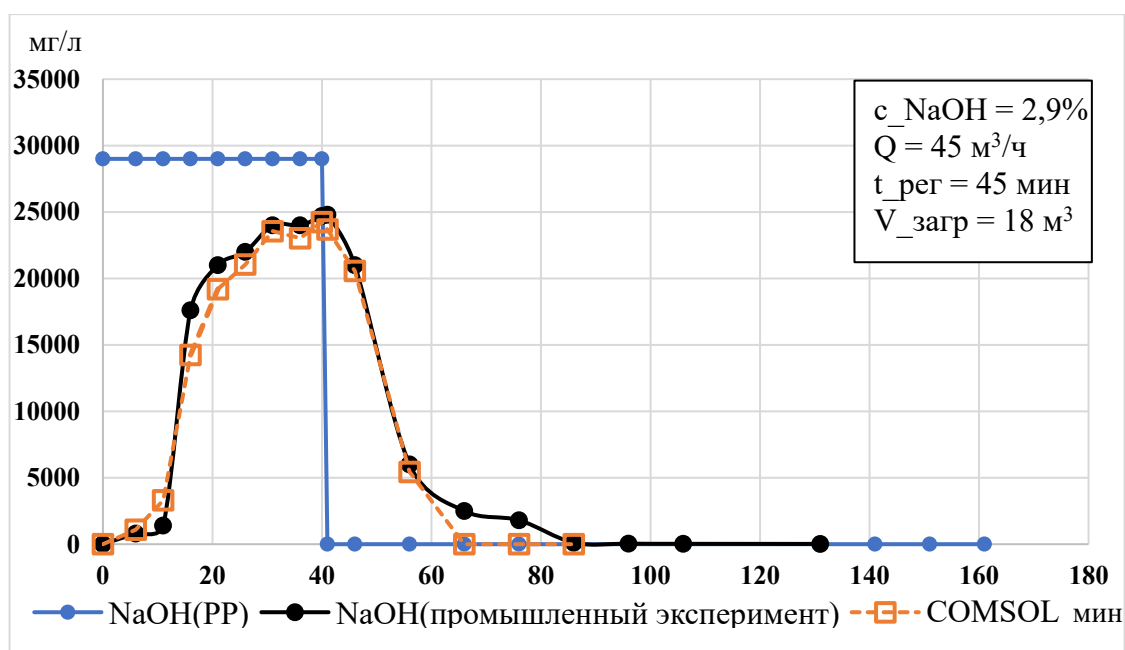


Рисунок 3.12 – Выходная концентрационная кривая при щелочной регенерации ионитного фильтра (концентрация NaOH = 2,9%)

Анализ графика показывает, что модель в целом корректно воспроизводит протекание процесса регенерации. В частности, наблюдается совпадение основных стадий: задержка появления щелочи на выходе фильтра, последующий рост концентрации и ее снижение после прекращения подачи реагента. Максимальные значения концентрации NaOH, а также момент достижения пика в CFD-модели согласуются с экспериментальными данными.

Вместе с тем, имеются и количественные расхождения: модель демонстрирует несколько более сглаженный характер кривой и незначительное смещение фронта регенерации по времени. Это связано с упрощениями модели, описанными ранее.

Также был проверен второй вариант проведения регенерации с подачей на вход ионитного фильтра для регенерации 2,4% раствора NaOH с объемным расходом $37 \text{ м}^3/\text{ч}$ в течение 60 минут. Как видно из рисунка 3.13, результаты по CFD-модели также имеют отличия на начальном этапе проведения регенерации, но после 25 минуты достаточно точно повторяют тренд выхода на пик и дальнейшего снижения концентрации реагента.

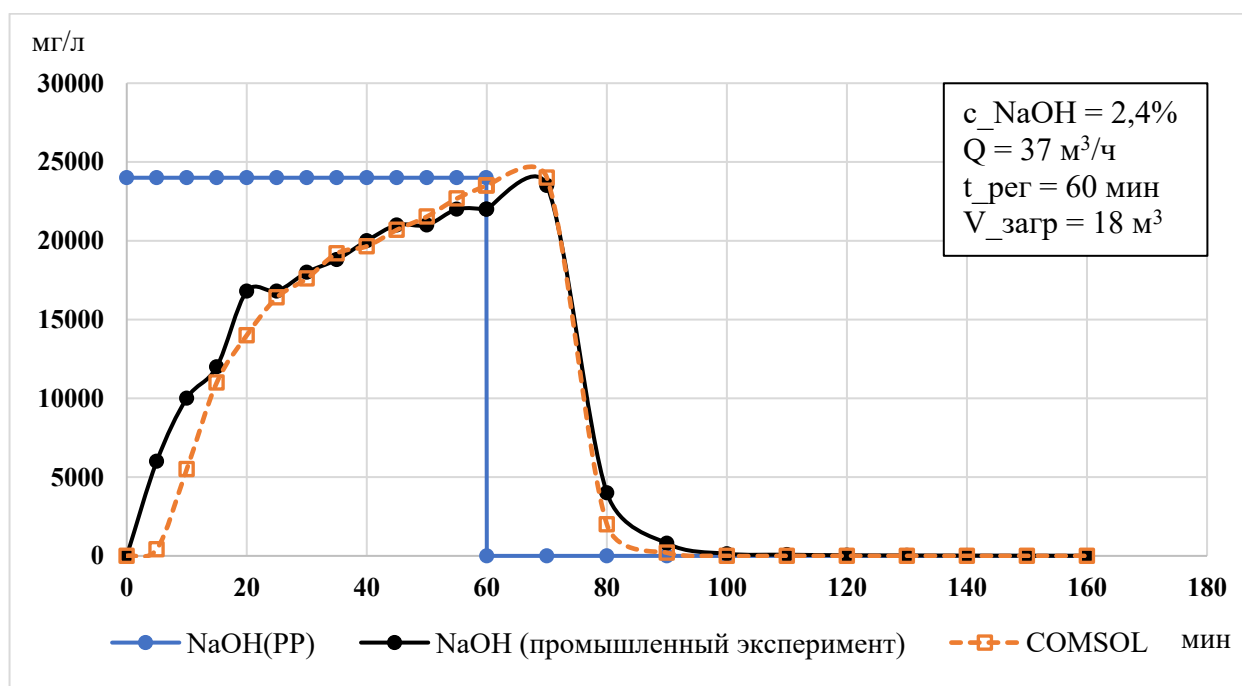


Рисунок 3.13 – Выходная концентрационная кривая при щелочной регенерации ионитного фильтра (концентрация NaOH = 2,4%)

Среднеквадратичное отклонение между расчетными и экспериментальными данными составляет 3824 мг/л, что соответствует нормированной ошибке порядка

15%, что является хорошим результатом для задачи моделирования ионного обмена в промышленном аппарате.

3.3 Исследование влияния конструктивных и технологических параметров на эффективность регенерации ионитного фильтра

Разработанная нестационарная CFD-модель позволяет не только анализировать динамику процесса регенерации ионитного фильтра, но и проводить исследования, направленные на оценку влияния основных конструктивных и технологических факторов на эффективность процесса регенерации.

В данной работе на примере анионитного фильтра исследовались такие параметры, как геометрические характеристики фильтра (отношение длины к диаметру), скорость подачи регенерационного раствора, концентрация регенерационного раствора, метод регенерации (прямоточный и противоточный).

3.3.1 Влияние геометрических характеристик фильтра на процесс регенерации

Для оценки влияния геометрических характеристик фильтра на процесс регенерации была проведена серия расчетов при постоянном объеме ионообменной загрузки. Варьировалось отношение высоты слоя к диаметру фильтра (L/D), при этом начальная концентрация хлорид-ионов, закрепленных на смоле, концентрация регенерационного раствора и линейная скорость его подачи оставались неизменными. При этом целью расчетов не являлось воспроизведение типоразмерного ряда реально эксплуатируемых промышленных фильтров. Результаты расчетов представлены в таблице 3.4.

Исходя из полученных результатов, увеличение отношения (L/D) приводит к увеличению времени, необходимого для достижения заданной степени регенерации. Например, при ($L/D = 0,25$) время достижения 50% регенерации составляет 1280 с, а 95% регенерации – 3620 с. При увеличении (L/D) до 1,50 данные значения возрастают до 2360 с и 4930 с соответственно.

Таблица 3.4 – Результаты влияния соотношения (L/D) на процесс регенерации

Вариант	(L/D)	Высота слоя (L), м	Диаметр фильтра (D), м	Высота фильтра, м	$t(0,5)$, с	$t(0,95)$, с	Время на расчет, мин
1	0,25	0,80	4,65	2,1	1280	3620	48
2	0,44	1,50	3,40	2,8	1450	3790	48
3	0,75	2,18	2,90	3,48	1790	4160	51
4	1,00	2,58	2,58	3,88	2020	4440	51
5	1,50	3,20	2,13	4,5	2360	4930	56

Наибольший расход реагента соответствует варианту с ($L/D = 0,25$). Для достижения 95% регенерации в этом случае требуется примерно в 1,8 раза больше регенерационного раствора по сравнению с базовым вариантом ($L/D = 0,44$). Напротив, вариант с ($L/D = 1,50$) требует наименьшего количества реагента, однако характеризуется наибольшим временем регенерации, а также увеличением высоты фильтра до 4,5 метров.

3.3.2 Влияние скорости подачи регенерационного раствора

Результаты расчетов, проведенных для оценки влияния скорости подачи регенерационного раствора на эффективность процесса регенерации, представлены в таблице 3.5. CFD-модель показывает, что увеличение скорости подачи приводит к сокращению времени на регенерацию фильтра. Однако при скоростях $u > u_0$ эффект ускорения процесса становится менее выраженным. Так, увеличение скорости с $(1,0u_0)$ до $(1,5u_0)$ сокращает время достижения 95% регенерации только на 8%. При этом возрастает объемный расход NaOH, а также на 50,3% увеличивается перепад давления на слое.

При высоких скоростях продолжительность регенерации сокращается, но часть реагента неэффективно проходит через слой ионита.

При увеличении скорости с $(1,0u_0)$ до $(1,25u_0)$ расход NaOH возрастает примерно на 19%, а при увеличении до $(1,5u_0)$ – примерно на 39%. Но при этом время регенерации сокращается с 3790 до 3500 с, то есть всего на 7,7%.

Таблица 3.5 – Результаты влияния скорости подачи регенерационного раствора на процесс регенерации

Вариант	Относительная скорость	Скорость, м/с	$t(0,5)$, с	$t(0,95)$, с	Перепад давления на слое, Па	Время на расчет, мин
1	$(0,25u_0)$	0,0003425	5370	8970	682	55
2	$(0,5u_0)$	0,000685	2720	5240	1364	50
3	$(0,75u_0)$	0,00103	1850	4200	2051	50
4	$(1,0u_0)$	0,00137	1450	3790	2728	49
5	$(1,25u_0)$	0,00171	1270	3600	3405	49
6	$(1,5u_0)$	0,00206	1160	3500	4101,9	50

3.3.3 Влияние концентрации регенерационного раствора

Результаты расчетов для оценки влияния концентрации регенерационного раствора на эффективность процесса регенерации представлены в таблице 3.6.

Таблица 3.6 – Результаты влияния концентрации регенерационного раствора на процесс регенерации

Вариант	c_{NaOH} , %	$c_{\text{OH}_{\text{in}}}$, моль/м ³	$t(0,5)$, с	$t(0,95)$, с
1	1,5%	375	1990	4460
2	2,0%	500	1680	4060
3	2,9%	725	1450	3790
4	3,5%	875	1400	3740
5	4,0%	1000	1390	3720
6	10,0%	2500	1360	3670

При повышении концентрации раствора с 1,5% до 2,9% время достижения 95% регенерации уменьшается с 4460 с до 3790 с. Однако дальнейшее повышение концентрации оказывает все менее заметное влияние на продолжительность процесса регенерации. Так, при увеличении концентрации NaOH с 2,9 до 10% время достижения 95% регенерации уменьшается всего на 120 с, а реагента расходуется в 3,5 раза больше.

Анализ полученных выходных кривых (рисунок 3.14) показывает, что увеличение концентрации NaOH позволяет ускорить процесс регенерации, однако после достижения определенного уровня дальнейший рост концентрации приводит преимущественно к увеличению расхода реагента, а не к существенному сокращению продолжительности процесса.

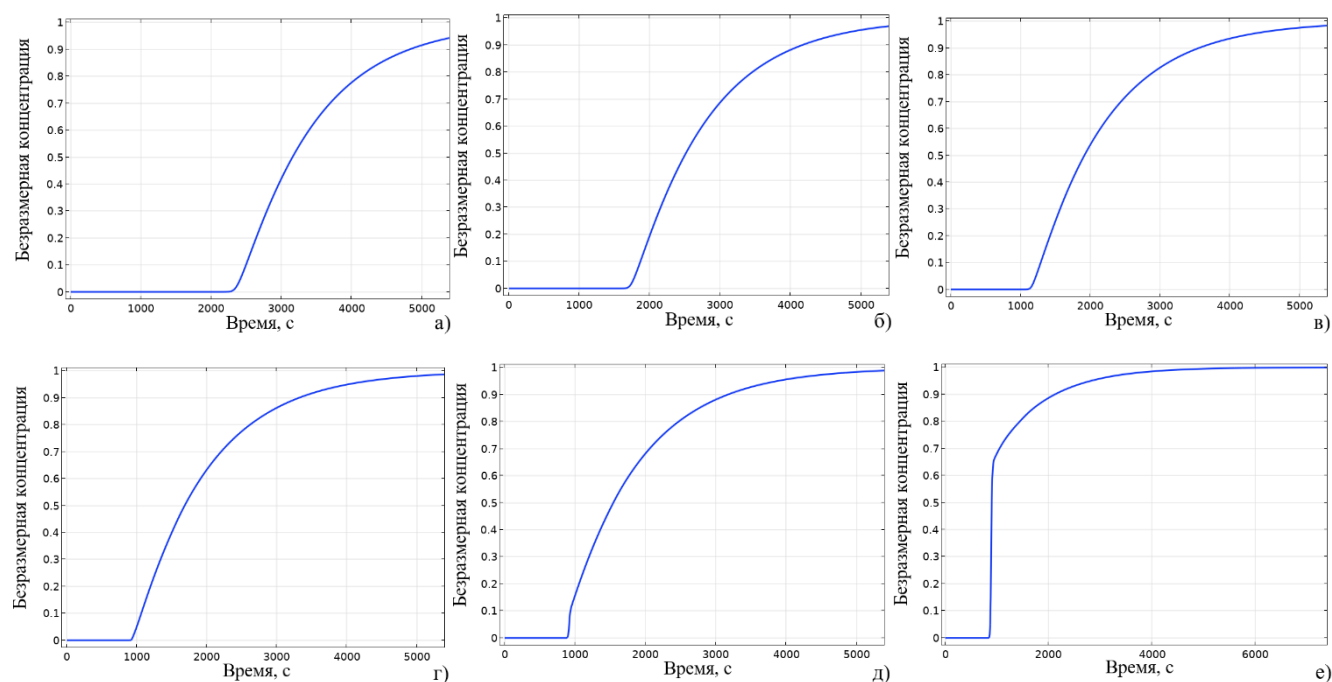


Рисунок 3.14 – Выходные концентрационные кривые реагента:

а) $c(\text{NaOH}) = 1,5\%$; б) $c(\text{NaOH}) = 2\%$; в) $c(\text{NaOH}) = 2,9\%$; г) $c(\text{NaOH}) = 3,5\%$;

д) $c(\text{NaOH}) = 4\%$; е) $c(\text{NaOH}) = 10\%$

Увеличение концентрации NaOH до 10% является технологически неэффективным, так как приводит к существенному перерасходу химического реагента при минимальном выигрыше во времени, так как реагент не успевает прореагировать в пористой области.

3.3.4 Сравнение прямоточной и противоточной регенерации

Для сравнения двух технологий регенерации начальное распределение хлорид-ионов на ионите задавалось неравномерным по высоте слоя, что соответствует неоднородному насыщению ионита после рабочего цикла.

Результаты расчета, представленные в таблице 3.7, показали, что к моменту отключения подачи NaOH степень регенерации составила 0,836 для прямоточного режима и 0,829 для противоточного. К концу расчета, после стадии отмывки, оба режима обеспечили степень регенерации около 0,92.

Таблица 3.7 – Результаты расчетов по CFD-модели для разных режимов протекания регенерационного раствора

Режим	% регенерации ионита при 2400 с	% регенерации ионита при 5400 с	t(0,5), с
Прямоток	0,836	0,92	1260
Противоток	0,829	0,92	1310

Анализ пространственного распределения остаточного загрязнения (рисунок 3.15) по результатам CFD-моделирования не противоречит литературным данным о преимуществах противоточной регенерации. Несмотря на близкие интегральные значения средней степени регенерации, к моменту окончания подачи регенерационного раствора нижняя часть слоя ионита была отрегенирована на 94% при противоточном режиме и только на 89% при прямоточном варианте. Более глубокое восстановление обменной емкости выходной зоны ионита имеет важное практическое значение, поскольку именно эта область в последующем рабочем цикле обеспечивает доочистку воды и задерживает проскок нормируемых ионов.

Противоточная регенерация позволяет повысить рабочую обменную емкость фильтра, увеличить фильтроцикл, уменьшить расход реагента при неполной регенерации и повысить качество очистки воды в последующем рабочем цикле.

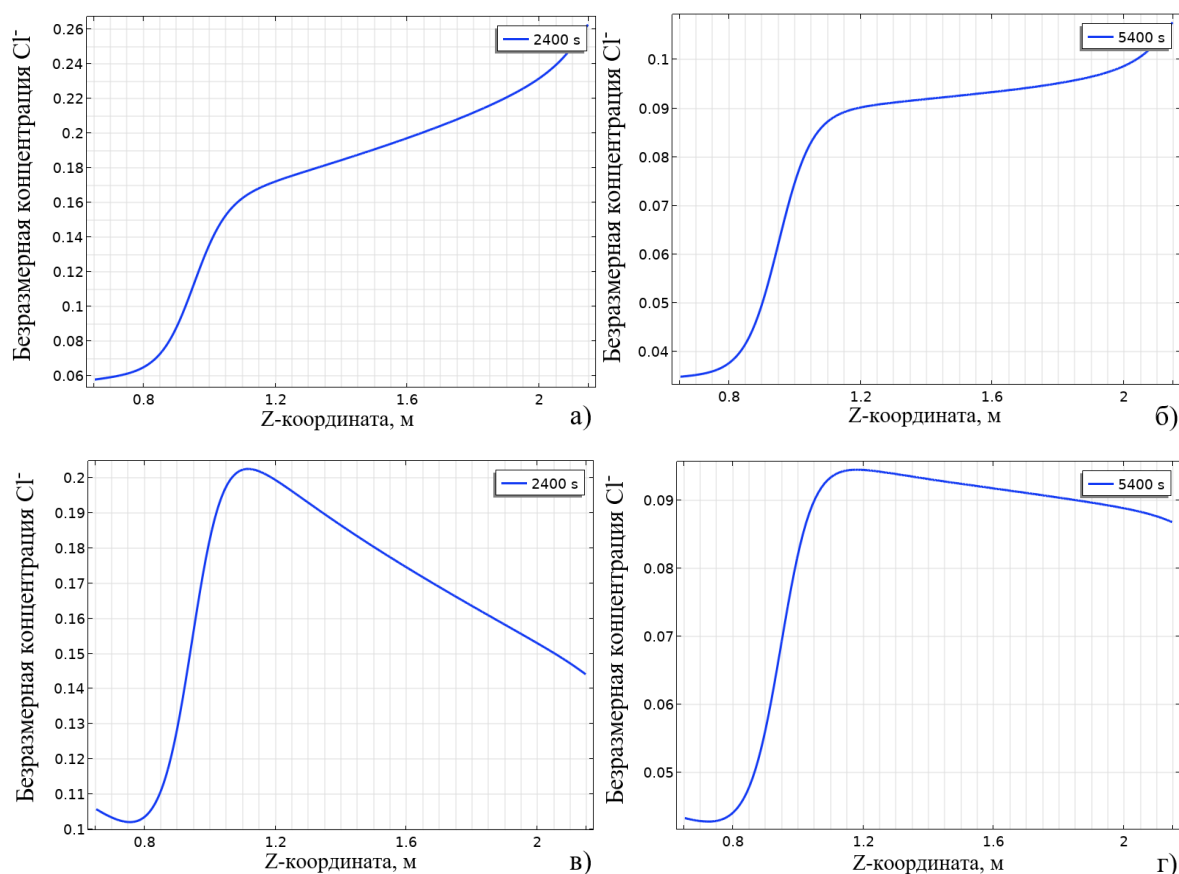


Рисунок 3.15 – Распределение хлорид-ионов на ионите: а) противоток, $t = 2400$ с; б) противоток, $t = 5400$ с; в) прямоток, $t = 2400$ с; г) прямоток, $t = 1000$ с

3.4 Моделирование стадии отмывки ионитного фильтра

CFD-модель позволяет определить снижение концентрации NaOH на выходе из фильтра после отключения подачи регенерационного раствора, а также оценить выход хлорид-ионов, перешедших из ионита в раствор в процессе регенерации. По результатам расчета можно определить продолжительность отмывки до достижения заданного остаточного содержания реагента в объеме ионита.

На рисунке 3.16 представлена динамика изменения безразмерной концентрации NaOH на выходе из фильтра для прямоточного и противоточного режимов. После отключения подачи регенерационного раствора ($t = 2400$ с) концентрация NaOH на выходе не снижается мгновенно, так как часть щелочи остается в слое ионита, участвует в обменной реакции и продолжает выноситься потоком воды.

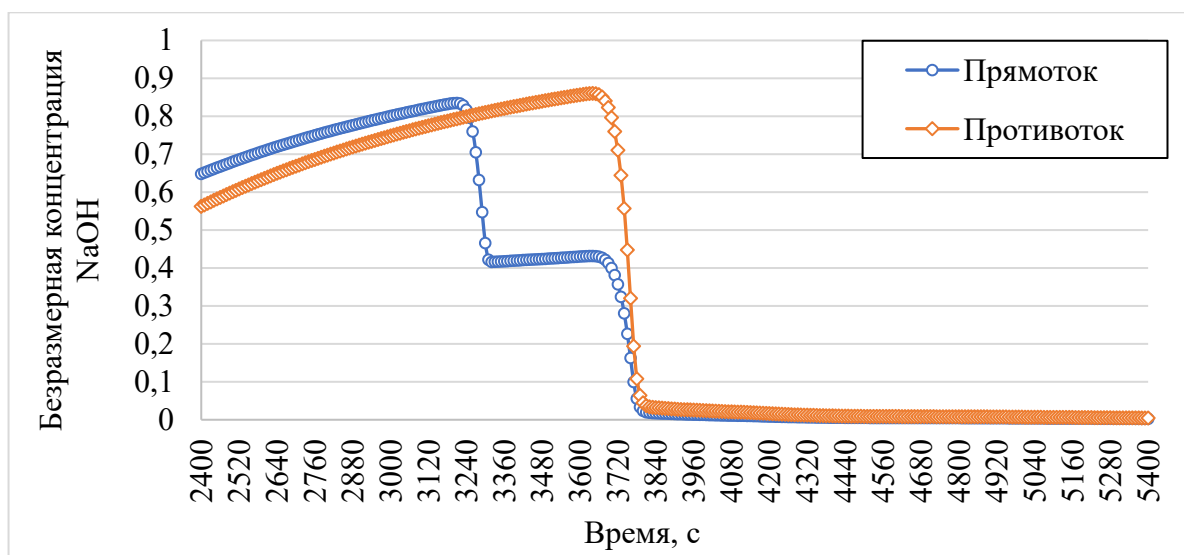


Рисунок 3.16 – Динамика выхода щелочи при отмывке ионитного фильтра

Для прямоточного режима снижение относительной концентрации NaOH до уровня 5% достигается примерно к 4440 с, то есть продолжительность отмывки ≈ 34 мин. Для противоточного режима тот же уровень достигается примерно к 5290 с, а продолжительность отмывки составляет ≈ 48 мин. При расходе воды на отмывку в $45 \text{ м}^3/\text{ч}$ результаты соответствуют расходу воды на отмывку около $25,5 \text{ м}^3$ для прямоточного режима и $36,1 \text{ м}^3$ для противоточного режима.

3.5 Выводы к Главе 3

В данной главе разработана и настроена цифровая CFD-модель ионообменного фильтра в стационарной и нестационарной постановках в программном комплексе COMSOL Multiphysics.

Полученные результаты показали физически корректное протекание процесса: формируется зона ионного обмена, происходит вытеснение хлорид-ионов из смолы, а выходная кривая NaOH имеет характерную S-образную форму.

Выполнено сопоставление результатов нестационарной CFD-модели с промышленными экспериментальными данными для анионитного фильтра ФИПа- 3,4-6 ВПУ Нижнекамской ТЭЦ-1. Среднеквадратичное отклонение между

расчетной и экспериментальной кривыми составило 3824 мг/л, что соответствует нормированной ошибке порядка 15%.

С помощью нестационарной CFD-модели исследовано влияние конструктивных и технологических параметров на эффективность регенерации. Показано, что геометрия фильтра, скорость подачи и концентрация регенерационного раствора влияют на время достижения заданной степени регенерации. Например, при увеличении (L/D) с 0,25 до 1,50 время достижения 95% регенерации возрастает с 3620 до 4930 с.

Установлено, что увеличение скорости подачи регенерационного раствора сокращает продолжительность регенерации, но повышает гидравлическое сопротивление слоя и может наблюдаться снижение эффективности использования реагента. Например, при увеличении скорости подачи регенерационного раствора с $0,25u_0$ до $1,5u_0$ время достижения 95% регенерации сокращается с 8970 до 3500 с, однако перепад давления на слое возрастает с 682 до 4101,9 Па.

Нестационарная CFD-модель позволяет сравнивать прямоточный и противоточный режимы регенерации. В рассматриваемой постановке оба режима обеспечили близкую степень регенерации, однако отличались распределением остаточного загрязнения по высоте слоя. Дополнительно продемонстрирована возможность моделирования стадии отмывки фильтра после отключения подачи регенерационного раствора с возможностью расчета объема отмывочных вод.

Таким образом, разработанная CFD-модель позволяет проводить комплексный анализ работы ионообменного фильтра: рассчитывать гидравлическое сопротивление слоя, описывать перенос реагента и продуктов реакции, определять степень регенерации ионита, моделировать стадию отмывки и оценивать влияние технологических параметров на эффективность процесса. Полученные результаты подтверждают возможность использования модели как инструмента для анализа и уточнения режимов регенерации промышленных ионообменных фильтров.

ГЛАВА 4. ПРОГНОСТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ РАБОТЫ ИОНИТНОЙ ВОДОПОДГОТОВИТЕЛЬНОЙ УСТАНОВКИ

В современных условиях развития и цифровизации энергетики все более актуальной становится задача повышения эффективности эксплуатации оборудования водоподготовительных установок, в частности ионитных фильтров. Надежность и экономичность их работы во многом определяют эксплуатационные и технико-экономические показатели тепловых и атомных электростанций, а также влияют на ресурс основного оборудования.

В рамках настоящей работы рассматривается возможность применения методов анализа данных и разработки прогностической модели, позволяющей по значениям параметров исходной воды прогнозировать показатели работы ионитной ВПУ, такие как продолжительность фильтроцикла и удельные расходы реагентов на регенерацию (кислоты и щелочи).

4.1 Разведывательный анализ данных и исходные данные

Массив эксплуатационных данных включал информацию о 111 регенерациях ионитных фильтров ВПУ Нижнекамской ТЭЦ-1. В среднем для одного фильтроцикла формировалось 10 записей. Общий объем выборки (датасет) составил порядка 1110 строк, что позволило учесть изменчивость состава исходной воды и повысить достоверность последующего анализа и прогнозирования.

На первом этапе исследования было принято решение провести разведывательный анализ данных (Exploratory Data Analysis, EDA), чтобы получить первичное представление о структуре данных, а также заложить основу для дальнейшей разработки полноценной прогностической модели работы и регенерации ионитных ВПУ.

Перед проведением разведывательного анализа была проведена процедура препроцессинга исходных данных. В результате был сформирован набор входных признаков (рисунок 4.1).

При построении модели машинного обучения в качестве целевых признаков (target features) были выбраны продолжительность фильтроцикла и удельные расходы реагентов, поскольку именно эти параметры отражают эффективность работы ионитного фильтра и экономичность процесса регенерации.

[3]:

	pH	Alkal	hardness	Cl	SO2	Ca2	Mg2_max	Na_K_max	Fe_total	total_sal	PO	SiO2
1	8.03	0.72	1.44	8.48	21.75	23.56	3.81	4.63	0.08	170.00	5.16	5.67
2	8.02	0.73	1.55	11.33	29.71	24.19	3.78	6.20	0.10	170.00	4.90	6.32
3	7.96	0.77	1.54	12.29	29.07	24.82	4.24	5.48	0.10	173.85	5.57	5.70
4	7.97	0.71	1.79	13.68	31.43	28.40	5.50	5.51	0.11	174.48	6.06	6.65
5	8.04	0.74	1.64	10.46	30.91	25.41	4.47	6.07	0.08	170.22	5.54	4.96
...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...	...
1106	7.69	0.81	1.38	17.87	42.42	23.60	3.34	6.09	0.33	172.00	8.55	7.93
1107	7.86	0.94	2.75	25.62	50.58	41.57	7.93	7.10	0.29	236.15	8.05	8.17
1108	7.89	0.76	1.71	12.33	36.93	24.74	4.82	5.92	0.27	175.87	6.20	7.53
1109	7.83	0.68	1.88	17.08	39.07	28.90	5.47	5.22	0.27	180.43	7.90	7.43
1110	7.75	0.69	1.38	11.61	27.17	21.80	3.71	5.32	0.28	172.20	6.40	6.84

1110 rows × 12 columns

Рисунок 4.1 – Фрагмент датасета для разведывательного анализа

Обработка данных и проведение анализа осуществлялись с использованием языка программирования Python (v 3.12.4). В качестве среды разработки использовался Jupyter Notebook (v 7.0.8). Для реализации поставленных задач были использованы и загружены следующие библиотеки: 1) NumPy (v 1.26.4); 2) pandas (v 2.2.2); 3) seaborn (v 0.13.2); 4) matplotlib (v 3.8.4); 5) CatBoost (v 1.2.10).

4.1.1 Корреляционный анализ (матрица Пирсона)

Для количественной оценки зависимости между переменными в данной работе для каждого из трех целевых признаков через единую функцию (Листинг 2. Приложение Б) строилась матрица коэффициентов Пирсона (Pearson correlation

matrix). Она позволяет выявить линейные зависимости между параметрами и определить степень их влияния на целевые признаки.

Анализ корреляционной матрицы для фильтроцикла (рисунок 4.2) показал, что наиболее выраженная отрицательная корреляция наблюдается для Ca^{2+} ($r \approx -0,73$) и общей жесткости ($r \approx -0,71$), что указывает на ускоренное истощение ионита при росте содержания этих компонентов.

Также значимыми являются Mg^{2+} , Cl^- , SO_4^{2-} и общая минерализация, что подтверждает влияние суммарного солесодержания на снижение фильтроцикла. При этом показатели pH и Fe_{total} практически не влияют на целевой признак в рамках рассматриваемого датасета.

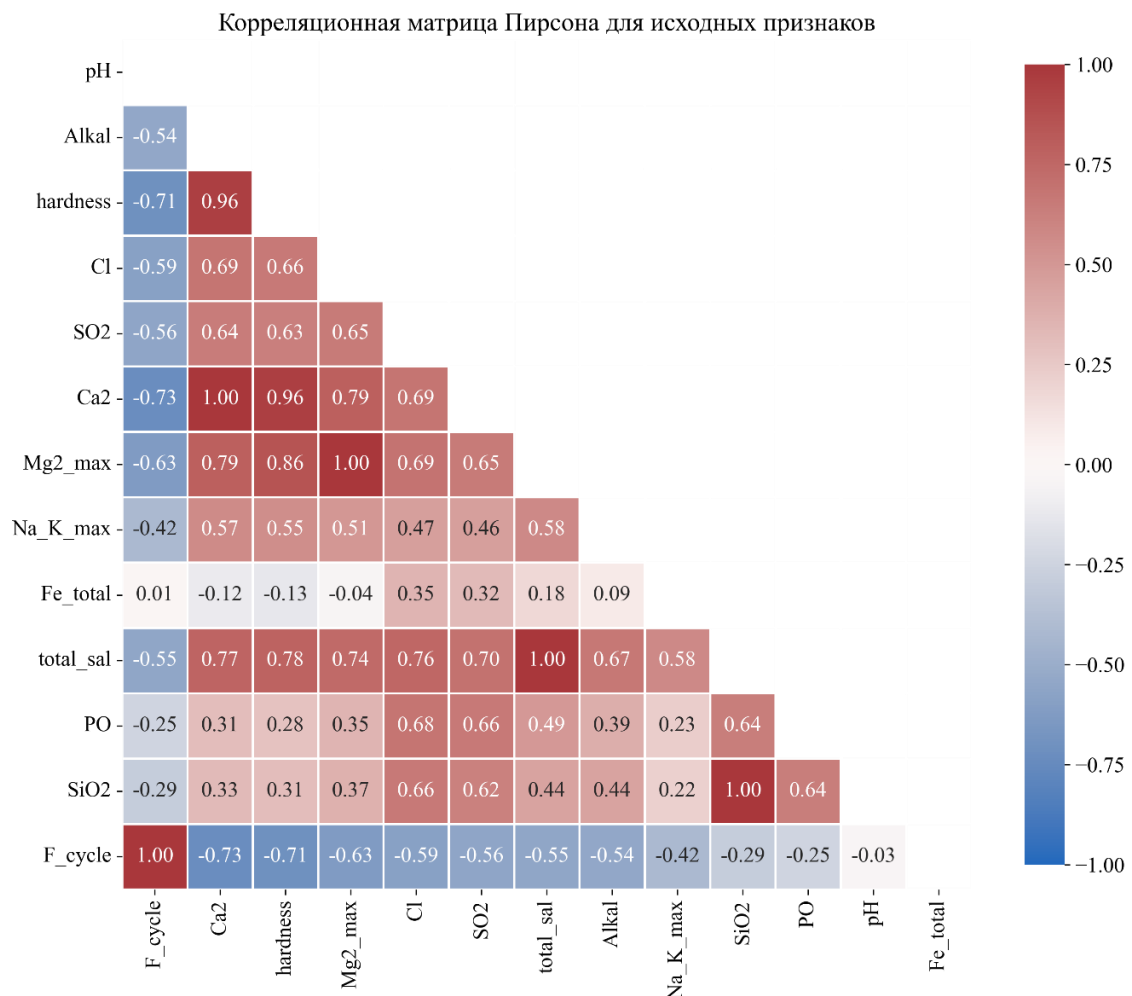


Рисунок 4.2 – Корреляционная матрица Пирсона для фильтроцикла

Анализ корреляционной матрицы для удельного расхода кислоты (рисунок 4.3) показал, что наибольшая степень корреляции целевого признака с исходными признаками наблюдается для концентрации кальция (Ca^{2+}) ($r \approx 0,83$) и общей жесткости воды ($r \approx 0,82$). Высокая корреляция также наблюдается с показателем общей минерализации воды (total_sal) ($r \approx 0,80$), концентрацией магния (Mg^{2+}) ($r \approx 0,73$), хлоридов (Cl^-) ($r \approx 0,74$) и сульфатов (SO_4^{2-}) ($r \approx 0,70$).

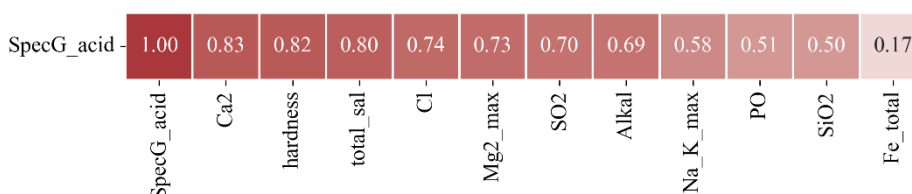


Рисунок 4.3 – Матрица Пирсона для удельного расхода кислоты

Анализ корреляционной матрицы для удельного расхода щелочи (рисунок 4.4) показал, что наибольшая степень корреляции целевого признака наблюдается с концентрацией сульфатов (SO_4^{2-}) ($r \approx 0,72$) и хлорид ионов (Cl^-) ($r \approx 0,71$), с показателем общей минерализации (total_sal) ($r \approx 0,70$), перманганатной окисляемостью (PO) ($r \approx 0,66$).

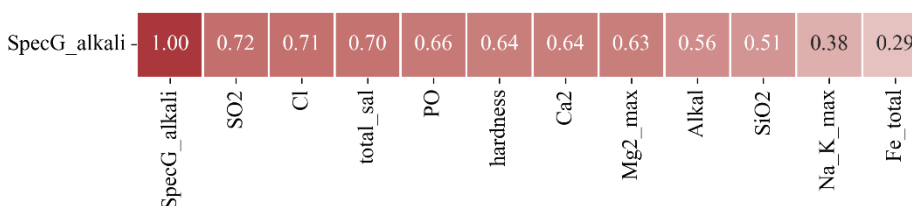


Рисунок 4.4 – Матрица Пирсона для удельного расхода щелочи

Умеренные значения корреляции наблюдаются для кремниевой кислоты (SiO_2) ($r \approx 0,51$), кальция (Ca^{2+}) ($r \approx 0,64$), магния (Mg^{2+}) ($r \approx 0,63$), ($\text{Na}^+ \text{K}^+$) ($r \approx 0,56$), жесткости воды (hardness) ($r \approx 0,64$).

4.1.2 Анализ значимости признаков

Для оценки значимости признаков (feature importance) в работе был использован алгоритм градиентного бустинга на основе решающих деревьев, реализованный в библиотеке CatBoost (Листинг 3. Приложение Б).

Анализ значимости признаков для целевого признака фильтроцикла (F_cycle) показывает, что наибольшее влияние на продолжительность работы ионитного фильтра оказывают концентрация кальция (Ca^{2+}) и общая жесткость воды (рисунок 4.5). Существенный вклад для исследуемого датасета также вносят содержание магния (Mg^{2+}), кремниевой кислоты (SiO_2), железа (Fe_total) и общая минерализация ($total_sal$).

Следует отметить, что в отличие от корреляционного анализа, где зависимости рассматриваются попарно, оценка значимости признаков в модели учитывает их совместное влияние.

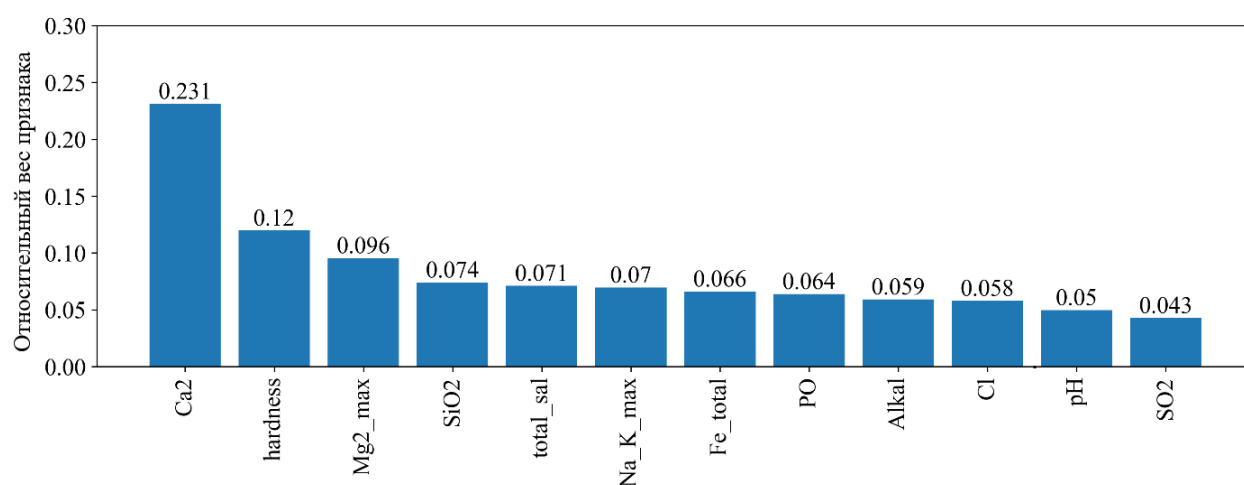


Рисунок 4.5 – Важность признаков для фильтроцикла (F_cycle)

Анализ значимости признаков для удельного расхода кислоты ($SpecG_acid$), выполненный с использованием алгоритма CatBoost (рисунок 4.6), показывает, что наибольшее влияние на данный целевой показатель оказывают концентрация кальция (Ca^{2+}), общая жесткость, содержание магния (Mg^{2+}) и общая минерализация ($total_sal$), отражающие суммарную ионную нагрузку на фильтр.

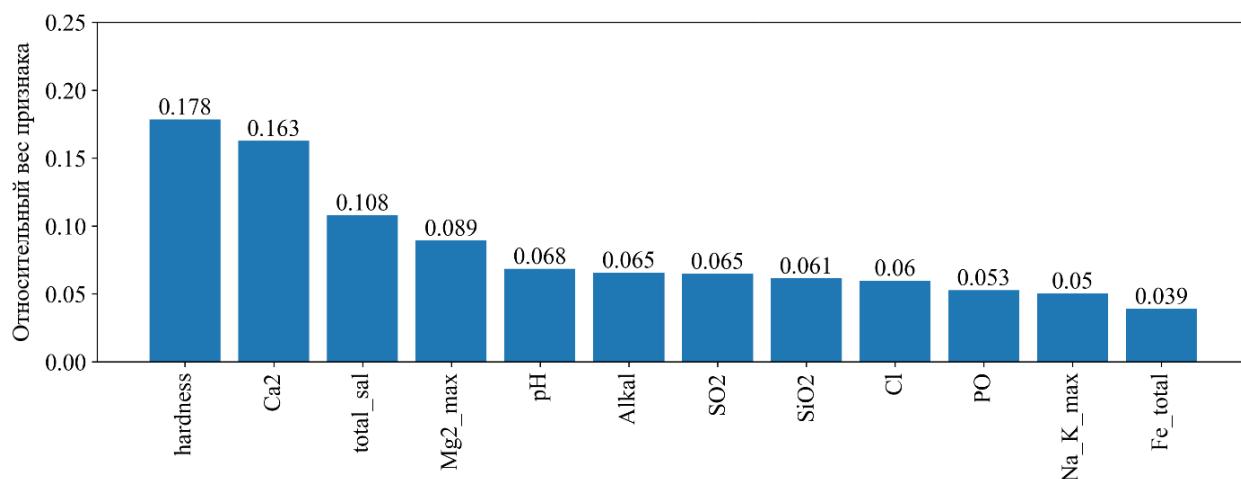


Рисунок 4.6 – Важность признаков для удельного расхода кислоты

Анализ значимости признаков для удельного расхода щелочи (SpecG_alkali) показывает, что определяющим фактором является анионный состав исходной воды (рисунок 4.7). Наибольший вклад вносят перманганатная окисляемость (PO), сульфаты (SO_4^{2-}) и хлориды (Cl^-), а также общая минерализация.

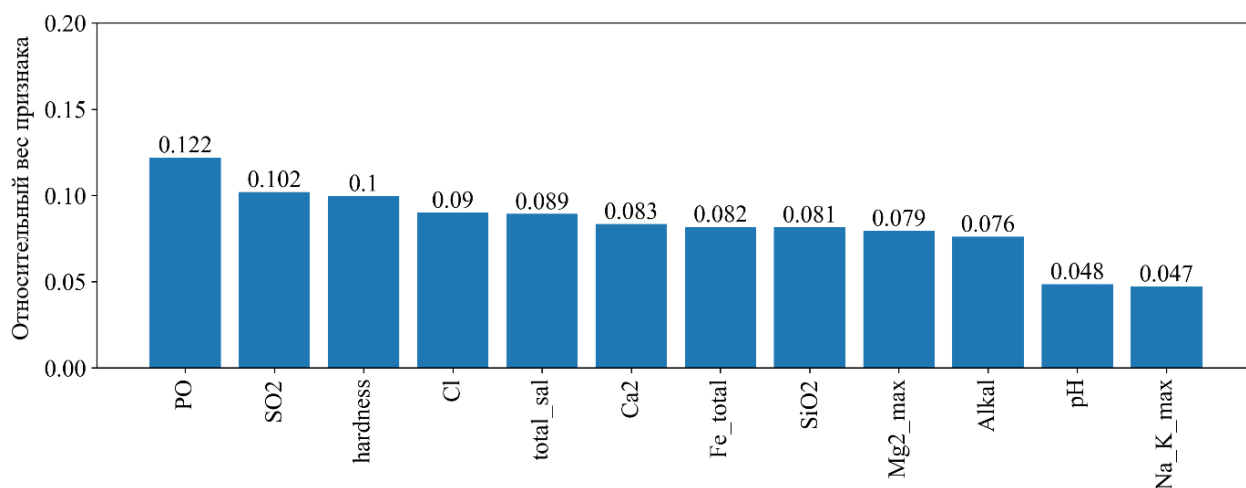


Рисунок 4.7 – Важность признаков для удельного расхода щелочи

4.1.3 Выводы по результатам разведывательного анализа

В результате проведенного разведывательного анализа данных (Exploratory Data Analysis, EDA) были выявлены основные закономерности, описывающие влияние показателей качества исходной воды на эксплуатационные параметры

ионитной ВПУ. Использование методов корреляционного анализа, оценки значимости признаков позволило установить наличие устойчивых и физически обоснованных зависимостей между составом воды и целевыми признаками.

Следующим этапом является разработка прогностической модели на основе методов машинного обучения. Реализация такой модели позволит создать и внедрить интеллектуальный инструмент – «цифрового помощника», обеспечивающего поддержку принятия решений при управлении процессами регенерации ионитных фильтров, включая прогнозирование расходов реагентов и анализ эффективности работы водоподготовительной установки в целом.

4.2 Прогностическая модель на основе искусственной нейронной сети

В данной работе для построения нейросетевой модели для прогнозирования работы ионитной ВПУ использовалась библиотека TensorFlow (v 2.21.0), а в качестве интерфейса применялся API Keras (v 3.13.2), позволяющий формировать архитектуру нейронной сети, задавать функции потерь, метрики и алгоритм оптимизации, а также осуществлять процесс обучения модели.

Созданная в работе модель относится к типу многослойного персептрона (Multilayer Perceptron, MLP). В отличие от ансамблевых регрессионных моделей, таких как CatBoost и XGBoost, основанных на композиции решающих деревьев, MLP-модель аппроксимирует зависимость между входами и выходами через систему весов, обновляемых в процессе обучения методом обратного распространения ошибки [156].

Таким образом, решаемая задача формулируется как регрессионная, в которой по набору входных параметров требуется предсказать несколько выходных величин.

4.2.1 Подготовка данных и разделение на обучающую и тестовую выборки

На первом этапе построения нейросетевой модели была проведена подготовка исходных данных и разделение на обучающую и тестовую выборки в

соотношении 75% / 25%. В качестве входных признаков (вектор (X)) использовались показатели качества исходной воды, а в качестве целевых признаков (вектор (y)) рассматривались величина фильтроцикла, а также удельные расходы кислоты и щелочи на проведение регенерации.

Обучающая выборка использовалась для настройки параметров нейронной сети, а тестовая выборка – для проверки качества прогноза. Разделение данных проводилось с использованием функции `train_test_split` из библиотеки Scikit-Learn (v 1.4.2) [157], при этом параметр `random_state = 42` фиксировался для обеспечения воспроизводимости результатов. Дополнительно была выполнена нормализация данных с использованием метода стандартизации (`StandardScaler`) [158].

4.2.2 Архитектура и обучение модели

Архитектура модели для задачи одновременного прогнозирования трех целевых признаков включает входной слой нейронов, несколько скрытых слоев и выходной слой (рисунок 4.8). Количество нейронов на первом слое равно количеству входных признаков. Далее следуют три скрытых слоя, содержащие соответственно 12, 6 и 4 нейрона. Цвет векторов соответствует знаку весового коэффициента (красный – положительное влияние, синий – отрицательное), а их толщина характеризует относительную значимость связи между нейронами.

В качестве функции активации для скрытых слоев используется функция ReLU (Rectified Linear Unit) [159]. Выходной слой содержит количество нейронов, равное числу целевых признаков, то есть трем: фильтроцикл, удельный расход кислоты и удельный расход щелочи.

Полный листинг программного кода для нейронной модели приведен в Приложении В.

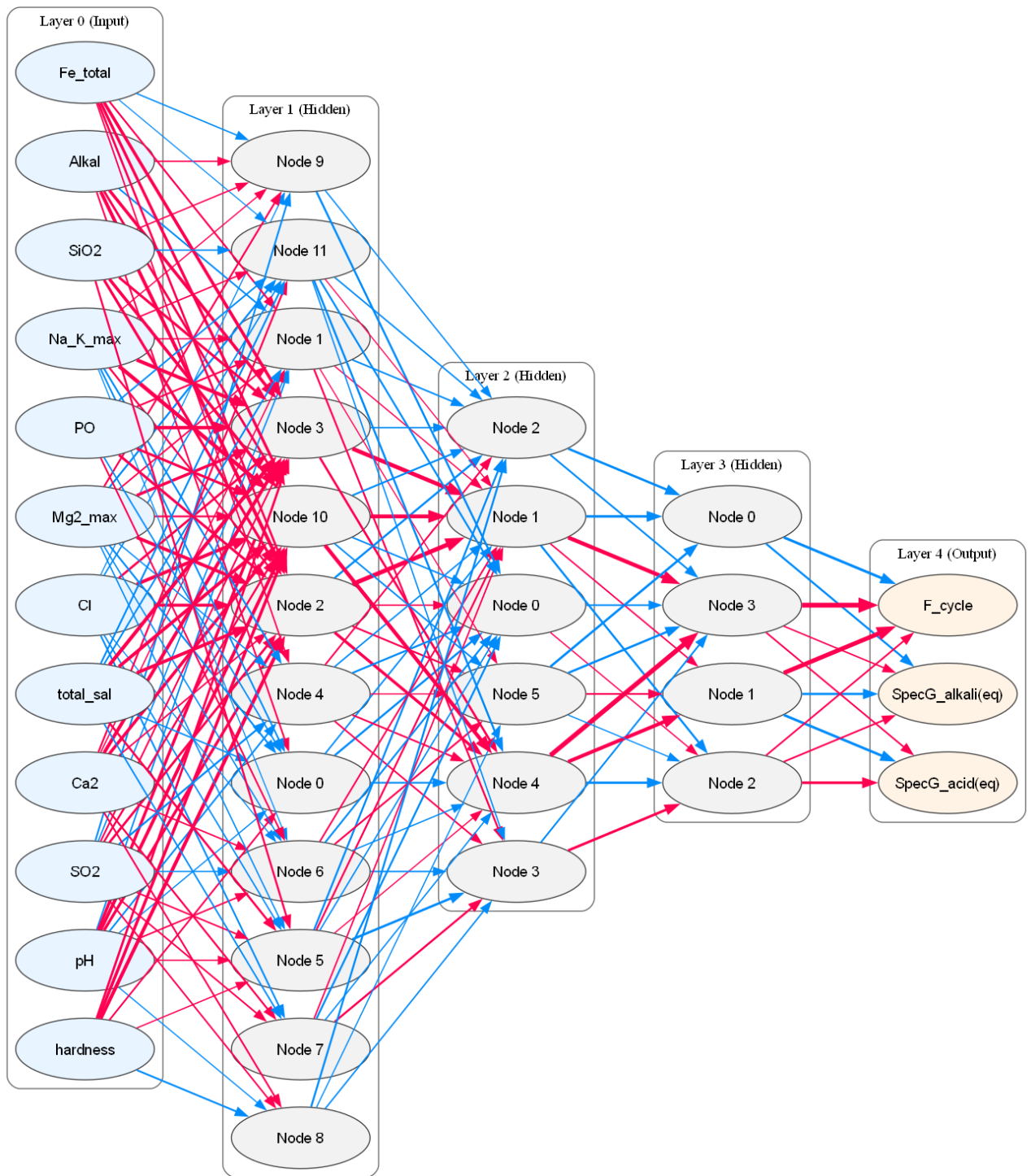


Рисунок 4.8 – Графическая визуализация работы нейронной сети при одновременном прогнозировании трех целевых признаков («Layer» – слой; «Node» – узел; «Input» – входной; «Output» – выходной; «Hidden» – скрытый)

Обучение модели осуществлялось с использованием оптимизатора Adam [160]. В качестве функции потерь выбрана среднеквадратичная ошибка (Mean Squared Error, MSE), метрики модели – коэффициент детерминации (R^2), средняя абсолютная ошибка (Mean Absolute Error, MAE) и средняя абсолютная процентная ошибка (Mean Absolute Percentage Error, MAPE):

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (F_i - P_i)^2}{\sum_{i=1}^n (\bar{F}_i - P_i)^2}, \quad (4.1)$$

$$MSE = \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n (F_i - P_i)^2, \quad (4.2)$$

$$MAE = \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n |F_i - P_i|, \quad (4.3)$$

$$MAPE = \frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^n \frac{|F_i - P_i|}{F_i}, \quad (4.4)$$

где F_i , P_i – фактические и прогнозные значения целевых признаков соответственно; $\bar{F}_i$ – среднее выборочное; n – размер валидационной выборки.

В процессе обучения нейросетевой модели осуществляется настройка весовых коэффициентов сети с целью минимизации функции потерь. В данной работе обучение модели проводилось в течение 140 эпох (рисунок 4.9), размер итерируемых блоков (*batch size*) – 11.

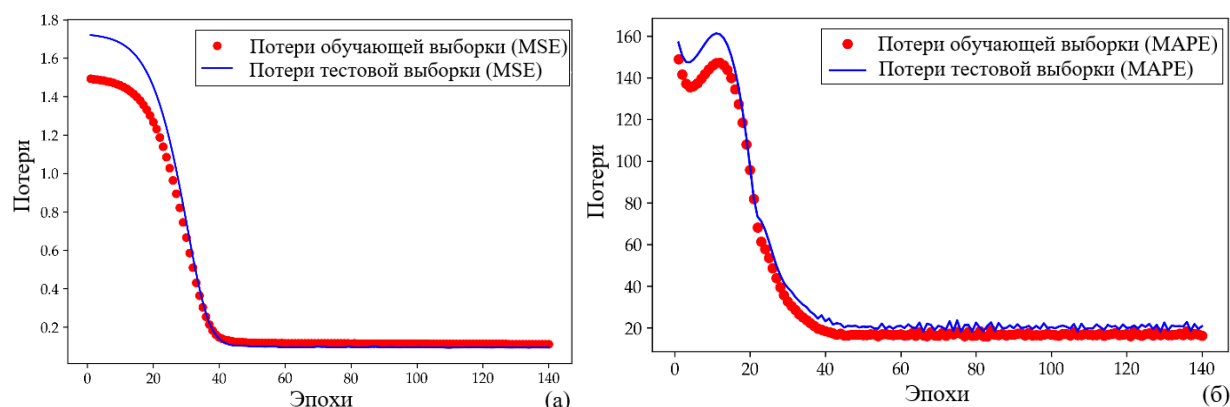


Рисунок 4.9 – Функции потерь MSE (а) и MAPE (б) при обучении MLP-модели

4.2.3 Результаты и обсуждение

При первоначальной постановке задачи для нейросетевой модели, предусматривающей одновременное прогнозирование трех целевых признаков, было получено значение средней относительной ошибки $\text{MAPE} \approx 20\%$, что является достаточно грубым для практического применения. Поэтому было принято решение перейти к раздельному обучению нейросетевой модели для каждого целевого признака по отдельности. Дополнительно для предотвращения переобучения было решено использовать механизм Early Stopping [161].

Результаты раздельного обучения нейросетевых моделей для каждого целевого признака представлены в таблице 4.1.

Таблица 4.1 – Метрики нейросетевой модели (Keras) при раздельном обучении

Целевой признак	R^2	MSE	MAE	MAPE, %
F_cycle	0,45	798831,72	676,25	9,15
SpecG_acid(eq)	0,49	161,56	10,72	10,22
SpecG_alkali(eq)	0,39	388,87	14,84	19,30

Наилучшая точность прогноза достигается для удельного расхода кислоты и фильтроцикла ($R^2 > 0,45$, $\text{MAPE} < 10,22\%$). Наибольшие отклонения наблюдаются при прогнозировании удельного расхода щелочи, для которого значение $\text{MAPE} \approx 19,3\%$.

Для оценки качества построенной нейросетевой модели было проведено сравнение прогнозируемых значений с фактическими данными из тестовой выборки (Листинг 3,6,9. Приложение В), а также была реализована возможность использования модели в режиме прогноза при задании параметров качества исходной воды вручную (Листинг 4,7,10. Приложение В).

4.3 Прогностические модели на основе CatBoost и XGBoost регрессора

В дополнение к нейросетевой MLP модели, созданной на основе TensorFlow, в работе были построены альтернативные прогнозные модели с использованием методов градиентного бустинга – CatBoost и XGBoost [162], листинг программного кода для которых приведен в Приложении В (Листинг 13-20).

Алгоритмы CatBoost и XGBoost – ансамблевые методы, которые основаны на последовательном построении решающих деревьев (Decision Trees). При этом CatBoost реализует усовершенствованный подход, что обеспечивает устойчивость обучения и эффективную обработку данных за счет специальных механизмов регуляризации и случайных перестановок [163].

Обучение моделей CatBoost и XGBoost осуществлялось на одном и том же наборе данных, что и нейросетевая модель. Использовалось идентичное разбиение на обучающую и тестовую выборки (75/25). В качестве входных параметров использовались показатели качества исходной воды, а в качестве целевых признаков – величина фильтроцикла, а также удельные расходы реагентов на регенерацию (кислоты и щелочи).

Для модели CatBoost и XGBoost были выбраны следующие основные гиперпараметры: число итераций (iterations) – 1000, глубина деревьев (depth) – 6, скорость обучения (learning_rate) – 0,05, функции потерь – RMSE.

В результате для прогнозирования величины фильтроцикла модель CatBoost продемонстрировала умеренную точность ($R^2 \approx 0,3$, MAPE $\approx 10,6\%$), а XGBoost оказался более точен ($R^2 \approx 0,45$ при сопоставимом уровне относительной ошибки около 10,5%).

Наиболее высокая точность прогнозирования была достигнута для удельного расхода кислоты. Модель XGBoost показала наилучшие результаты среди всех рассмотренных моделей ($R^2 \approx 0,61$, MAPE $\approx 8,8\%$), тогда как CatBoost оказался менее точен ($R^2 \approx 0,48$, MAPE $\approx 10,2\%$).

Для удельного расхода щелочи обе модели показали сопоставимые результаты.

В целом модель XGBoost показала более высокую точность и устойчивость прогнозирования по большинству целевых признаков по сравнению с CatBoost.

4.4 Сравнение моделей Keras, CatBoost, XGBoost

Для оценки эффективности разработанных моделей было проведено сравнение нейросетевой модели (Keras MLP) и моделей градиентного бустинга (CatBoost и XGBoost) по значениям основных метрик качества, а также по результатам прогнозирования для отдельных наблюдений из тестовой выборки. Результаты сравнения метрик качества представлены в таблице 4.2.

Таблица 4.2 – Сравнение метрик качества моделей

Модель	Целевой признак	R^2	RMSE	MAE	MAPE, %
Keras (MLP)*	F_cycle	0,4527	893,77	676,25	9,15
CatBoost		0,3030	1008,60	777,19	10,58
XGBoost		0,4517	894,61	741,87	10,51
Keras (MLP)	SpecG_acid(eq)	0,4913	12,71	10,72	10,22
CatBoost		0,4815	12,83	10,68	10,21
XGBoost		0,6109	11,12	9,36	8,83
Keras (MLP)	SpecG_alkali(eq)	0,3969	19,72	14,84	19,30
CatBoost		0,3339	20,58	16,46	21,99
XGBoost		0,3094	20,96	16,63	21,83

*полужирное выделение – лучшие метрики для целевого признака

Анализ таблицы показывает, что нейросетевая модель на основе Keras в большинстве случаев демонстрирует сопоставимое или более высокое качество прогнозирования по сравнению с моделями градиентного бустинга. Особенно это заметно при прогнозировании фильтроцикла и удельного расхода кислоты.

Для более детального анализа в таблице 4.3 приведено сравнение фактических и прогнозных значений для отдельных строк из тестовой выборки.

Все три модели в целом адекватно воспроизводят тенденции изменения целевых параметров, однако точность прогноза варьируется в зависимости от рассматриваемого показателя.

Таблица 4.3 – Сравнение прогноза моделей для тестовых данных

№ строки из датасета	Параметр	Факт	Keras (MLP)	CatBoost	XGBoost
9200	F_cycle	7757	7379,43	6411,98	6366,66
	SpecG_acid(eq)	101,02	109,20	116,73	118,62
	SpecG_alkali(eq)	70,85	76,71	78,07	81,77
9800	F_cycle	6835	6424,51	6138,83	6207,08
	SpecG_acid(eq)	121,14	126,48	124,82	128,46
	SpecG_alkali(eq)	78,38	84,15	89,78	87,62
10 000	F_cycle	7142	6980,59	6622,88	6621,18
	SpecG_acid(eq)	102,97	111,07	114,39	114,95
	SpecG_alkali(eq)	72,88	77,33	78,18	84,90

4.5 Выводы к Главе 4

На основании проведенного исследования были сформулированы следующие основные выводы:

1) Разведывательный анализ данных (EDA), в рамках которого были выявлены взаимосвязи между параметрами, а также проведена оценка значимости исходных признаков, позволил обосновать выбор признаков и повысить качество последующего прогнозирования на 5%.

2) Нейросетевая MLP модель, реализованная с использованием API Keras, доказала свою применимость для решения задачи прогнозирования параметров работы ионитной водоподготовительной установки. При раздельном обучении модели для каждого целевого признака были получены следующие значения относительной ошибки: для фильтроцикла $MAPE = 9,15\%$, для удельного расхода кислоты $MAPE = 10,22\%$, для удельного расхода щелочи $MAPE = 19,3\%$.

3) Нейросетевая модель в 82% случаев обеспечивает более высокую точность прогнозирования целевых признаков по сравнению с моделями градиентного бустинга (CatBoost и XGBoost).

4) Качество и точность прогнозирования для моделей в значительной степени определяется качеством исходного датасета (объем исходных данных, репрезентативность, наличие информативных признаков).

5) Разработанная нейросетевая модель может быть использована в качестве основы для интеллектуального инструмента поддержки принятия решений при эксплуатации ионитных водоподготовительных установок, позволяя прогнозировать важные эксплуатационные параметры на основе характеристик исходной воды.

ГЛАВА 5. УСОВЕРШЕНСТВОВАНИЕ ПРОТИВОТОЧНОЙ ПОВТОРНО-ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОЙ РЕГЕНЕРАЦИИ БЛОЧНОЙ ИОНИТНОЙ ВОДОПОДГОТОВИТЕЛЬНОЙ УСТАНОВКИ И ОТМЫВКИ ИОНИТНЫХ ФИЛЬТРОВ

На ВПУ Казанской ТЭЦ-3 цепочки ионитных фильтров эксплуатируются по «каскадной» технологии повторно-последовательной регенерации и отмывки. Однако прямой перенос данной технологии на схемы ионитной ВПУ Нижнекамской ТЭЦ-1 без дополнительного анализа будет неэффективным, так как «каскадная» технология имеет потенциал к улучшению и модернизации за счет более точного управления режимами регенерации и отмывки.

В связи с этим по результатам анализа работы цепочек ионитных фильтров ВПУ Казанской ТЭЦ-3 было принято решение рассмотреть возможность модернизации технологии «каскад» с использованием системного подхода, включающего математическое моделирование, CFD-моделирование и нейросетевое прогнозирование. Для этого на действующей ионитной водоподготовительной установке Нижнекамской ТЭЦ-1 были организованы опытно-промышленные исследования, результаты которых использовались для идентификации параметров разработанных моделей, их верификации и последующего расчета параметров регенерации и отмывки фильтров. На основе анализа результатов моделирования и промышленных экспериментов был сформулирован ряд предложений по адаптации и усовершенствованию технологии «каскад» для условий ионитной ВПУ Нижнекамской ТЭЦ-1.

5.1 Основные принципы технологии «каскад»

Основные принципы повторно-последовательной регенерации и отмывки ионитных фильтров по технологии «каскад» заключаются в следующем:

1) Каскадное включение фильтров – регенерационные потоки последовательно пропускаются через группы из двух, реже трех фильтров ($A_{n1} \rightarrow$

$H_{\text{пред}}, A_{\text{HII}} \rightarrow A_{\text{HI}}; H_{\text{I}} \rightarrow H_{\text{пред}}, H_{\text{II}} \rightarrow H_{\text{I}}$), что позволяет использовать отработанный раствор для регенерации наиболее загрязненных фильтров.

2) Противоток реагентов – свежие реагенты (щелочь, кислота) подаются на наиболее чистые фильтры заключительных ступеней ($A_{\text{HII}}, H_{\text{II}}$) снизу вверх, что обеспечивает максимальную полноту проведения регенерации и уменьшает вероятность проскока примесей.

3) Повторное использование отработанных регенерационных растворов – концентрированные щелочные и кислые отработанные растворы не сбрасываются, а накапливаются в промежуточных баках собственных нужд ($БСН_1, БСН_2, БКВ_1, БКВ_2$) и используются для последующих регенераций. В технологии «каскад» также используются и вспомогательные баки накопители ($КрН, БН2-3, БН7-8, БПМФ$).

4) Фракционный сбор отмывочных вод – отмывка фильтров ведется с разделением потоков по степени загрязнения: первые порции – нейтральные солевые растворы направляются на предварительную регенерацию Н-катионитных фильтров, последующие – условно чистые – в баки для приготовления свежих регенерационных растворов, что позволяет сократить объем сточных вод.

5) Замкнутость водного цикла в пределах цепочки – объем воды, используемой на регенерацию, сокращается за счет того, что отмывочные воды повторно применяются для приготовления регенерационных растворов, а также для вытеснения отработанных регенерационных растворов из ионитных фильтров.

6) Переключение между технологическими операциями осуществляется оператором вручную. Объемы подаваемых регенерационных растворов определяются исходя из теоретически необходимой дозы реагентов для каждого фильтра (или цепочки фильтров) и контролируются по времени и скорости подачи раствора.

Реализация технологии повторно-последовательной регенерации ионитных фильтров на Казанской ТЭЦ-3 позволила снизить удельный расход серной кислоты на 20–25%, уменьшить удельный расход едкого натра на 15–20%, сократить объем

высокоминерализованных сточных вод в 1,7 раза, увеличить фильтроцикл на 10–15%, исключить использование товарной поваренной соли для регенерации.

Технология «каскад» была интегрирована в существующую схему блочных цепочек №5-7 ВПУ КТЭЦ-3 без замены основного оборудования, что подтверждает ее высокую адаптивность и экономическую эффективность.

5.1.1 Показатели работы ВПУ при работе по технологии повторно-последовательной регенерации и отмывки «каскад»

Анализ данных по основным показателям за год работы цепочки №5 ионитной ВПУ Казанской ТЭЦ-3 (рисунок 5.1) показал, что в течение года можно выделить несколько периодов, отличающихся по эффективности.

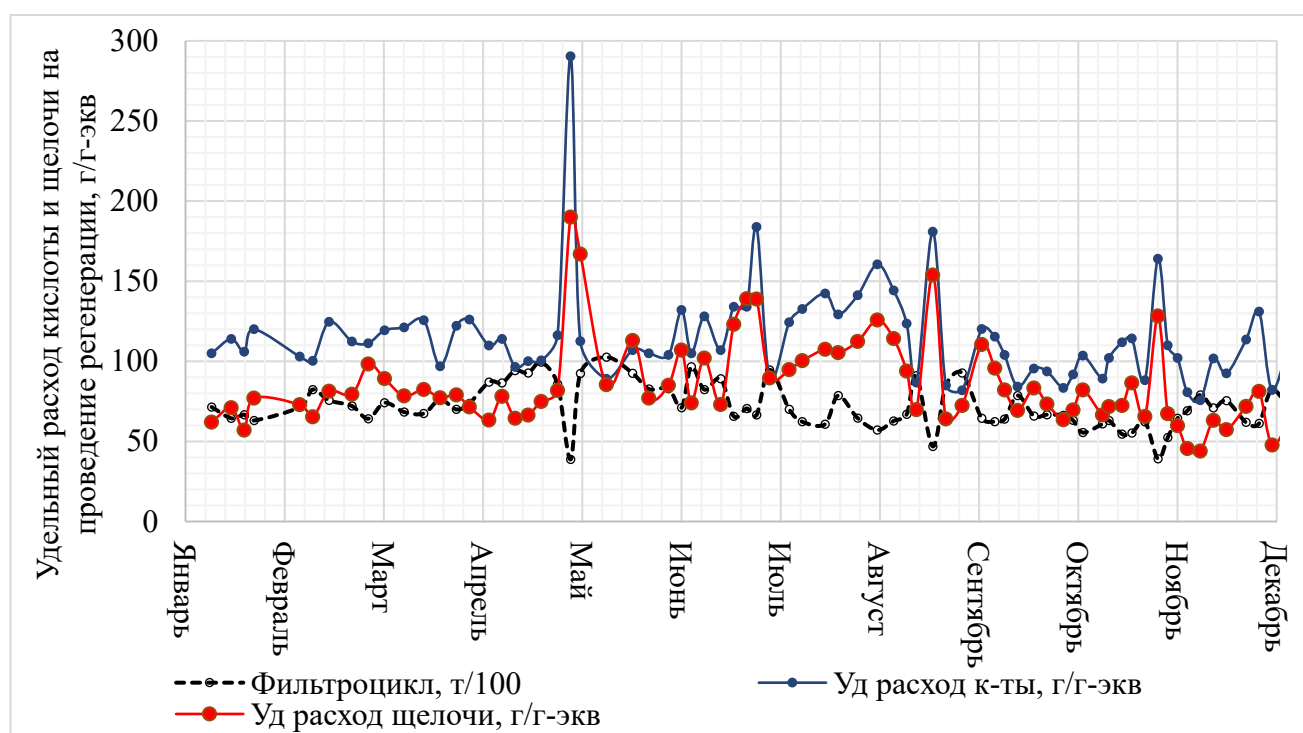


Рисунок 5.1 – Показатели работы «цепочки» № 5 КТЭЦ-3 в 2024 году

С января по май эффективность работы держалась на достаточно высоком уровне по удельным расходам реагентов. При этом фильтроцикл постепенно увеличивался от 6000 т и достиг максимума в конце апреля (≈ 10000 т). Однако, с

конца апреля показатели после забивки смолы органическими соединениями (30 апреля 2024 г.) ухудшились, особенно по удельным расходам щелочи.

Средний удельный расход кислоты на проведение регенерации составил 118,4 г/моль-экв, а минимальное значение удельного расхода кислоты – 75,71 г/моль-экв. Средний удельный расход щелочи на проведение регенерации составил 87,44 г/моль-экв, а минимальное значение удельного расхода кислоты – 43,96 г/моль-экв.

Для комплексной оценки эффективности внедренной технологии каскадной регенерации ионообменных фильтров цепочки №5 ВПУ Казанской ТЭЦ-3 за период с 10.01.2023 по 26.05.2024 г. были систематизированы и обобщены технологические показатели работы цепочек (Приложение Г).

Для отражения динамики изменения рабочей обменной емкости катионитных ($H_{пред}$, H_I , H_{II}) и анионитных ($Ан_I$, $Ан_{II}$) фильтров по результатам каждой серии экспериментов были построены графики (рисунок 5.2–5.3).

Среднее значение рабочей обменной емкости (Γ_v) для $H_{пред}$ составило 737,6 моль-экв/м³; для H_I – 575,5 моль-экв/м³, для H_{II} – 454,7 моль-экв/м³; для $Ан_I$ – 852,2 моль-экв/м³; для $Ан_{II}$ – 214,5 моль-экв/м³.

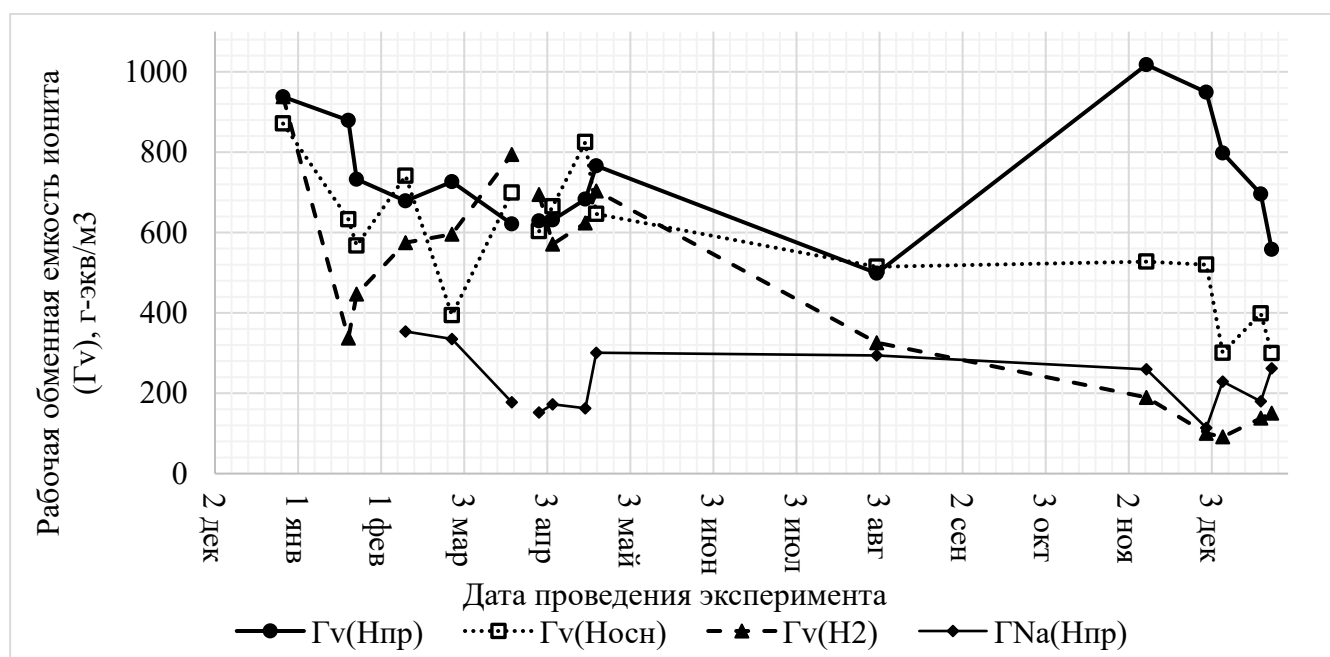


Рисунок 5.2 – Изменение рабочей обменной емкости катионитных фильтров

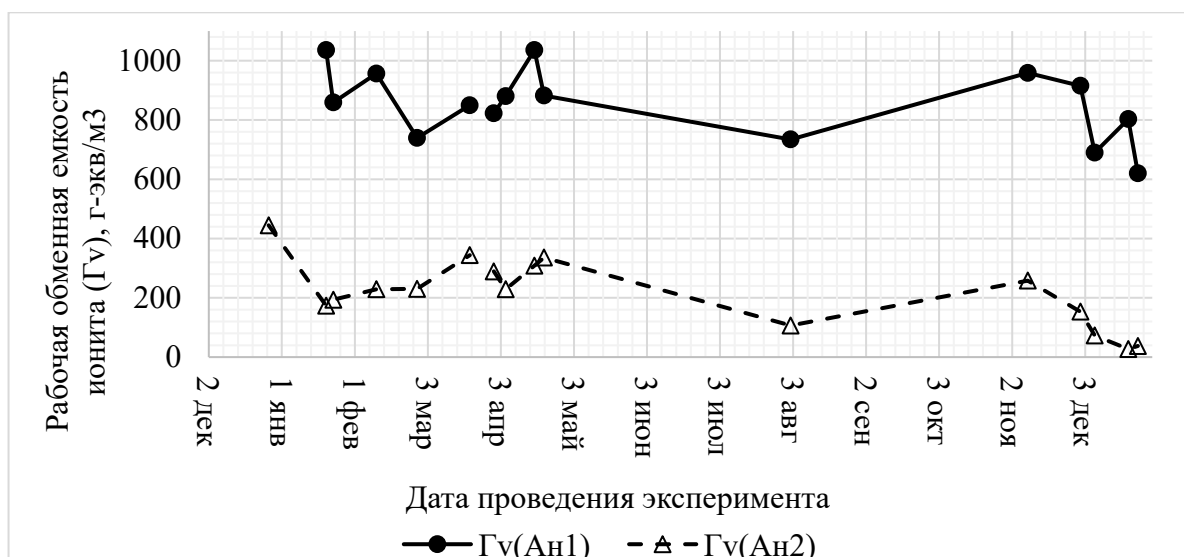


Рисунок 5.3 – Изменение рабочей обменной емкости анионитных фильтров

По результатам анализа технологических показателей работы цепочки №5 были построены графики изменения фильтроцикла, а также удельных и абсолютных расходов реагентов на проведение регенерации (рисунок 5.4).

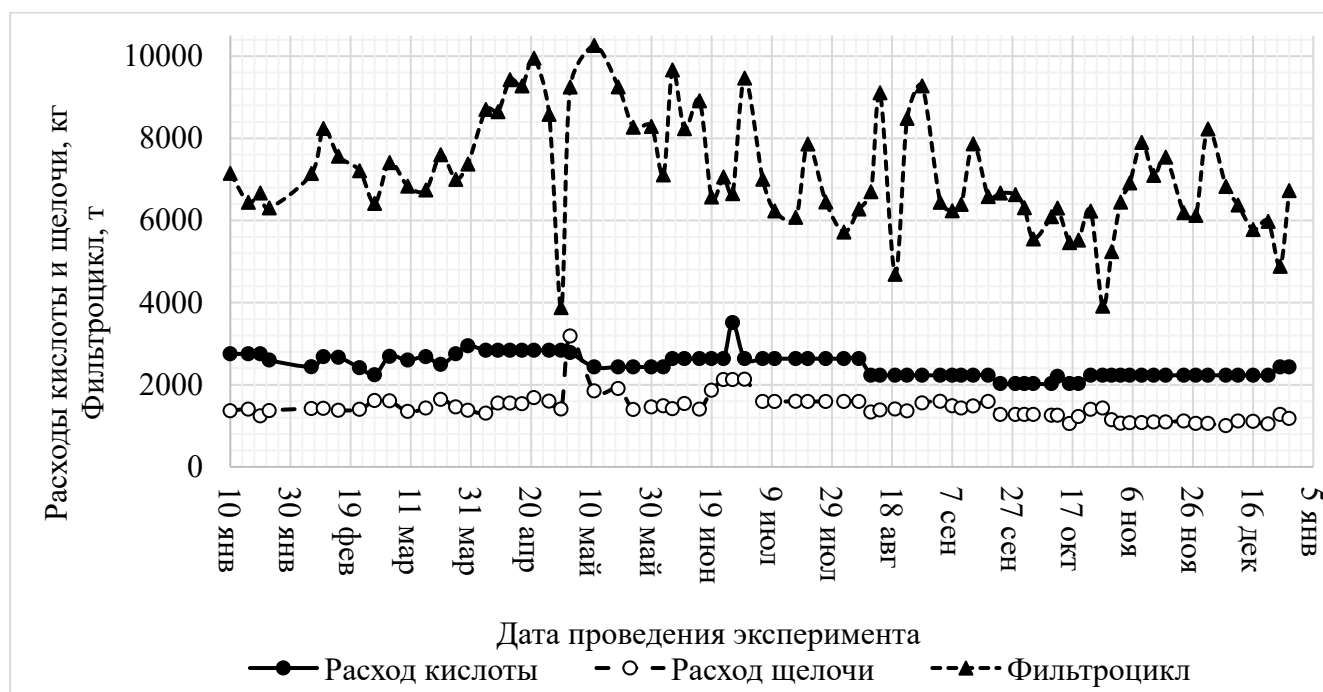


Рисунок 5.4 – Расход кислоты и щелочи, а также фильтроцикл цепочки ионитных фильтров №5 на период с 10.01.2024 по 28.12.2024

Несмотря на ресурсосберегающий эффект и устойчивую работу цепочки № 5 по технологии «каскад» в течение года, данная схема имеет ряд недостатков: сложность бакового хозяйства, необходимость точного фракционного разделения потоков, зависимость эффективности технологии от своевременных переключений, выполняемых оперативным персоналом вручную при управлении стадиями регенерации и отмывки.

В связи с этим дальнейшее развитие технологии «каскад» целесообразно связать с ее модернизацией на основе системного подхода, включающего предварительные экспериментальные исследования, расчеты по математической и CFD-моделям, а также использование нейросетевой прогнозной модели в составе «цифрового помощника» для интеллектуализации ведения режимов работы ионитных фильтров.

5.2 Опытно-промышленные исследования работы ионитных фильтров

Сотрудниками ФГБОУ ВО «Казанский государственный энергетический университет» были проведены опытно-промышленные исследования на ВПУ Нижнекамской ТЭЦ-1 с целью отработки технологии повторно-последовательной регенерации и отмывки ионитных фильтров, а также для получения экспериментальных данных, необходимых для идентификации параметров, верификации и практического применения разработанных математической, CFD- и нейросетевой моделей. Полученные результаты использовались для определения гидродинамических характеристик фильтров, уточнения кинетических параметров и оценки точности расчета продолжительности регенерации, объема реагентов, объема отмывочных вод и фильтроцикла.

5.2.1. Описание ВПУ Нижнекамской ТЭЦ-1

Внедрение и наладка модернизированной технологии «каскадной» регенерации требует проведения исследований на предмет возможности реализации данной технологии на действующем предприятии энергетики.

Предварительные исследования проводились на ВПУ Нижнекамской ТЭЦ- 1 и заключались в исследовании гидродинамического режима работы фильтров и выхода фракций при регенерации и отмывке анионитных фильтров.

ВПУ Нижнекамской ТЭЦ- 1 имеет проектную мощность 3500 м³/ч по химобессоленной воде. Годовое потребление природной воды из р. Кама составляет 13 млн м³, а годовой объем сточных вод превышает 4,5 млн м³ [164]. Технологические схемы ВПУ ХВО-1 и ХВО-2 приведены в Приложениях Д и Е.

Исходная вода, согласно схеме ХВО-1, направляется в осветлитель, после чего собирается в баке осветленной воды (БОВ) и затем насосами осветленной воды подается на механические фильтры. Исходная вода на ХВО-1 и ХВО-2 для химического цеха (ХЦ) Нижнекамской ТЭЦ- 1 забирается из системы оборотного охлаждения (СОО).

После прохождения механических фильтров очищенная вода подается на установку обессоливания, которая состоит из последовательно расположенных ионитных фильтров первой и второй ступени (Н_I, АН_I, Н_{II}, АН_{II}). Затем обессоленная вода проходит через декарбонизатор и поступает в бак химически очищенной воды (БХОВ), после чего поступает на третью ступень ионитного обессоливания, состоящую из последовательно установленных катионитного и ионитного фильтра третьей ступени. После третьей ступени обессоливания вода поступает в бак химически обессоленной воды (БХОВ). Также баковое хозяйство включает в себя баки шламовых (БШВ) и промывочных вод (БПВ), баки накопители (БН1-БН6), бак отмывочных вод (БОТВ) и бак щелочных регенерационных вод (БЩРВ).

Очистка воды на ХВО-2 происходит по схожей схеме. Исходная вода проходит стадию осветления в осветлителе, затем собирается в баке известково-коагулированной воды (БИКВ), после чего проходит через механические фильтры и поступает на установку обессоливания, проходя через предвключенный катионитный фильтр (Н_{пред}), катионитный фильтр первой ступени (Н_I), направляется в декарбонизатор и собирается в баке декарбонизированных вод (БДВ). Затем насосом прокачивается последовательно через анионитный фильтр

первой ступени (A_{H1}), катионитный фильтр второй ступени (H_{II}) и анионитный фильтр второй ступени (A_{HII}), после чего направляется в бак химически обессоленной воды (БХОВ).

Для регенерации катионитных фильтров ВПУ Нижнекамской ТЭЦ-1 используется серная кислота, а для регенерации анионитных фильтров – натриевая щелочь.

При проведении опытно-промышленных экспериментов на действующей ионитной ВПУ решались две задачи: исследование эффективности предлагаемых технологических решений и получение экспериментальных данных для проверки адекватности разработанных моделей. Результаты измерений использовались для определения характеристического времени, числа Пекле, оценки кинетических параметров процесса и последующей верификации расчетных зависимостей.

5.2.2 Анализ гидродинамического режима на примере Н-катионитных фильтров ВПУ Нижнекамской ТЭЦ-1

В июле 2024 г. на ВПУ Нижнекамской ТЭЦ-1 проводились эксперименты по регенерации цепочки ионитных фильтров кислотным раствором по линии $H_{II} - H_I - H_{пред}$ с целью исследования гидродинамического режима катионитных фильтров. В катионитный фильтр H_I раствор кислоты подавался снизу через нижнее распределительное устройство (НРУ). В качестве блокирующего потока сверху через верхнее распределительное устройство (ВРУ) подавался отработанный регенерационный раствор (ОРР) после анионитного фильтра A_{H1} с операции предварительной регенерации. Выход ОРР с фильтра H_I осуществлялся со среднего распределительного устройства (СРУ). Объемные скорости подачи кислотного регенерационного раствора (РР) и нейтрального ОРР с фильтра A_{H1} – $50 \text{ м}^3/\text{ч}$.

Характеристики работы фильтра H_{II} при кислотной регенерации были рассчитаны с помощью однопараметрической диффузионной модели и приведены в таблице 5.1.

Таблица 5.1 – Характеристики работы фильтра Н_{II} при кислотной регенерации

№	Показатель	Обозначение и ед. изм.	Значение
1	Характеристическое время (определено по результатам эксперимента и использовано при верификации математической модели)	$\bar{\tau}$, ч	0,6
2	Время прохождения фильтра суммарным потоком	τ_L , ч	0,16
3	Приведенное время прохождения фильтра суммарным потоком (использовано при расчете продолжительности регенерации)	θ_L	0,25
4	Число Пекле (использовано при построении и верификации CFD-модели)	Pe	0,33

Динамика выхода кислоты с фильтра Н_{II} при подаче «свежей» кислоты с объемной скоростью $V = 50 \text{ м}^3/\text{ч}$ представлена на рисунке 5.5. На этом рисунке для сравнения приведены теоретические кривые выхода кислоты для режима идеального смешения (РИС) и идеального вытеснения (РИВ).

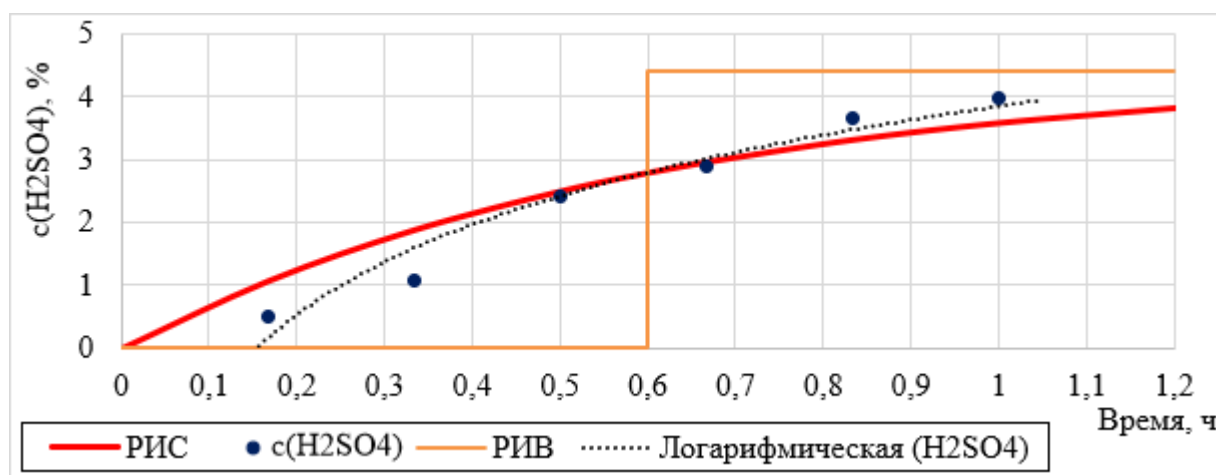


Рисунок 5.5 – Динамика выхода кислоты при регенерации Н_{II} – фильтра 4% раствором H_2SO_4 с объемной скоростью $50 \text{ м}^3/\text{ч}$

Характеристики теоретической кривой указывают на смешанный гидродинамический режим работы фильтра, который близок к РИС. Из полученных результатов можно сделать вывод, что обычная регенерация

одиноким H_{II} фильтра будет не эффективна по удельным характеристикам (удельные расходы кислоты и воды). На рисунке 5.6 представлены кривые выхода кислоты, сульфатов, жесткости и натрия с фильтра H_I при кислотной регенерации.

Время прохождения фильтра нейтральным ОРР после фильтра A_{H_I} (τ_L) меньше, чем кислотного ОРР после фильтра H_{II} , что следует из того факта, что первоначальные порции выходящего ОРР обогащены сульфатом натрия – основным компонентом нейтрального ОРР, который подается с ВРУ. Это вполне объяснимо, так как верхняя часть фильтра в отличие от нижней не заполнена ионитной загрузкой, тормозящей встречный поток.

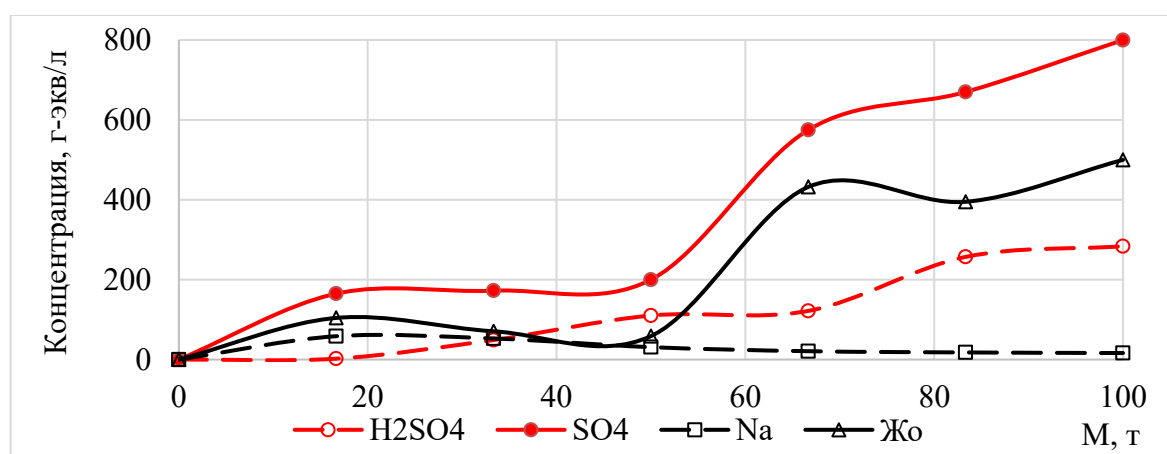


Рисунок 5.6 – Динамика выхода основных компонентов ОРР с противоточного $H_{осн}$ – фильтра при кислотной регенерации по линии $H_{II} - H_I - H_{пред}$ с объемной скоростью подачи кислотного РР – $50 \text{ м}^3/\text{ч}$ и ОРР с A_{H_I} – $50 \text{ м}^3/\text{ч}$

Из полученных результатов можно сделать выводы, что в результате реализации преимущественно РИС в катионитном фильтре H_I регенерация осуществляется смешанным кислотно-нейтральным (натрий сульфатным) раствором. Это приводит к снижению эффективности регенерации фильтра H_I . Часть катионита фильтра может остаться в Na-форме. Кроме того, смешанный кислотно-нейтральный ОРР с фильтра H_I подается на фильтр $H_{пред}$. Соответственно, высока вероятность неполной регенерации фильтра $H_{пред}$.

Было предложено изменить схему регенерации фильтра H_I . Вариант с подачей в качестве блокирующего потока частично-обессоленной воды (ЧОВ) был признан неудачным из-за разбавления кислотного РР. Предпочтительным вариантом оказалась схема с подачей кислоты и снизу, и сверху.

Ниже приведены примеры экспериментов, проводимых на цепочке ионитных фильтров ВПУ Нижнекамской ТЭЦ-1, которые необходимы для модернизации работы ионитной ВПУ с использованием новых технологических решений.

5.2.3 Пример регенерации цепочки ионитных фильтров от 29.11.2024

Эксперименты проводились на выделенной цепочке ионитных фильтров. Перед началом проведения регенерации было осуществлено взрыхление фильтров. При этом для каждого фильтра вода для взрыхления использовалась с предыдущей ступени. Сбор вод взрыхления осуществлялся в баки БН5 и БН6 (рисунок 5.7).

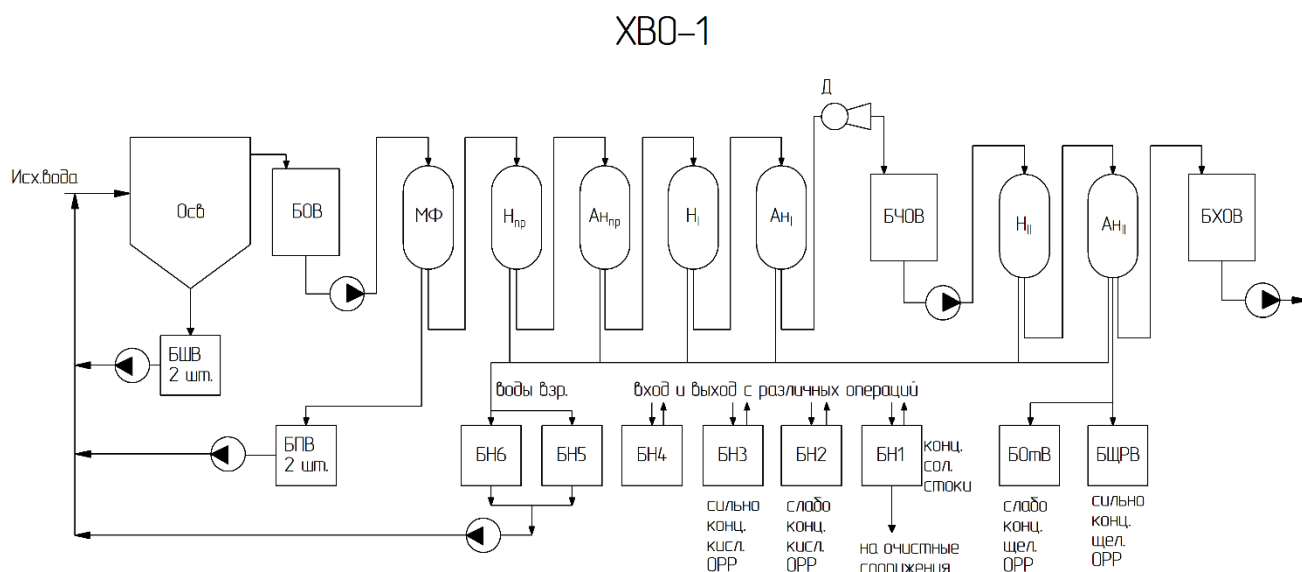


Рисунок 5.7 – Схема ионитной цепочки и баковое хозяйство

Также при проведении экспериментов было изменено назначение некоторых баков. В баки БЩРВ и БОТВ осуществлялся сбор сильно и слабо концентрированных щелочных отработанных регенерационных растворов, соответственно. БН1 служил для сбора высоко концентрированных солевых

нейтральных растворов; БНЗ и БН2 – для сбора сильно и слабо концентрированных кислотных отработанных регенерационных растворов. Далее последовательно представлены основные операции, характеризующие процесс регенерации и отмывки ионитных фильтров в рамках рассматриваемой технологии.

Операция 1. Регенерация по линии БЩРВ–Ан_{пред}–Н_{пред}–БН1 концентрированным щелочным отработанным регенерационным раствором (КЩОРР). По результатам эксперимента, отраженным в таблице 5.2, был построен график изменения УЭП и pH (рисунок 5.8) на выходе с Ан_{пред} и Н_{пред}.

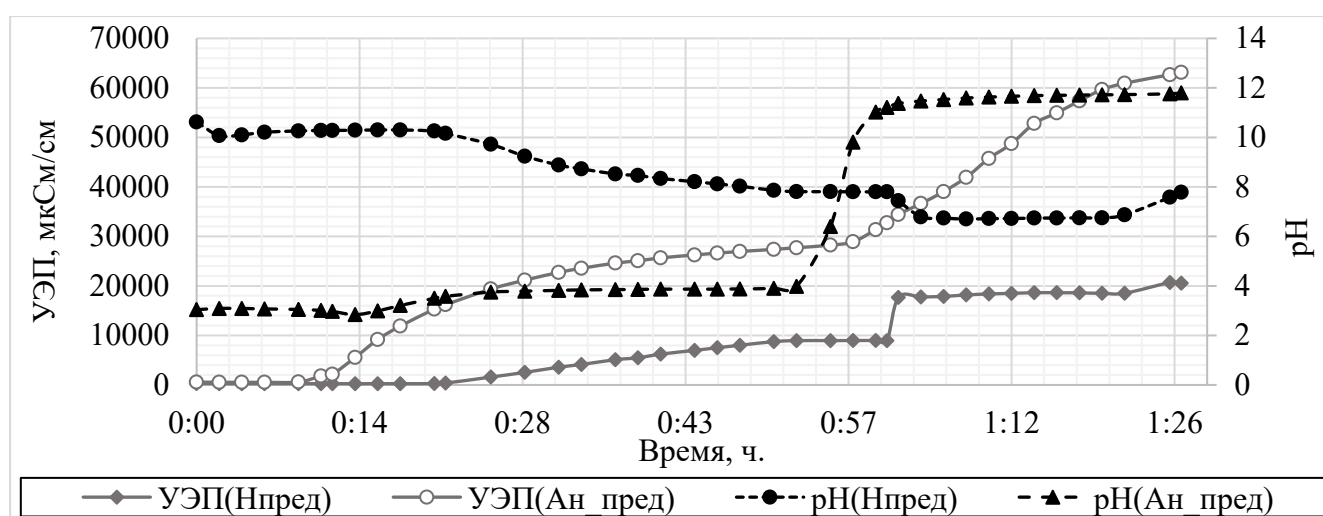


Рисунок 5.8 – Изменение УЭП и pH на выходе с Ан_{пред} и Н_{пред}

Таблица 5.2 – Результаты операции №1

Скорость подачи щелочного раствора	65 м ³ /ч
Концентрация щелочи	1,52–1,6%
Характеристическое время (использовано при идентификации параметров математической модели)	$\tau_{\text{хар.}} = 34,6$ мин
Нормированное время (использовано при расчете продолжительности регенерации)	$\tau_{\text{норм.}} = 0,29$ мин
Число Пекле (использовано при построении и верификации CFD-модели)	$Pe = 0,41$
Расход КЩОРР на регенерацию	65 м ³
Расход щелочи на регенерацию	1020,5 кг
Дополнительный расход воды	22 м ³

Продолжение таблицы 5.2.

Время выхода темноокрашенной органической фракции со щелочью из $A_{H_{пред}}$	20 мин
Непродуктивный расход щелочи	96,8 кг
Суммарный расход КЩОРР на регенерацию	87 м ³
Объем сточных вод	87 м ³
Время на регенерацию	1 ч 27 мин

Операция 2. Отмыв $H_{пред}$ осветленной водой (БОВ – $H_{пред}$ – БН1). Окончание отмывки осуществлялось по значению общей жесткости менее 3,5 ммоль-экв/л и УЭП менее 750 мкСм/см. По результатам эксперимента, представленным в таблице 5.3, был построен график изменения УЭП и pH (рисунок 5.9) на выходе с $H_{пред}$.

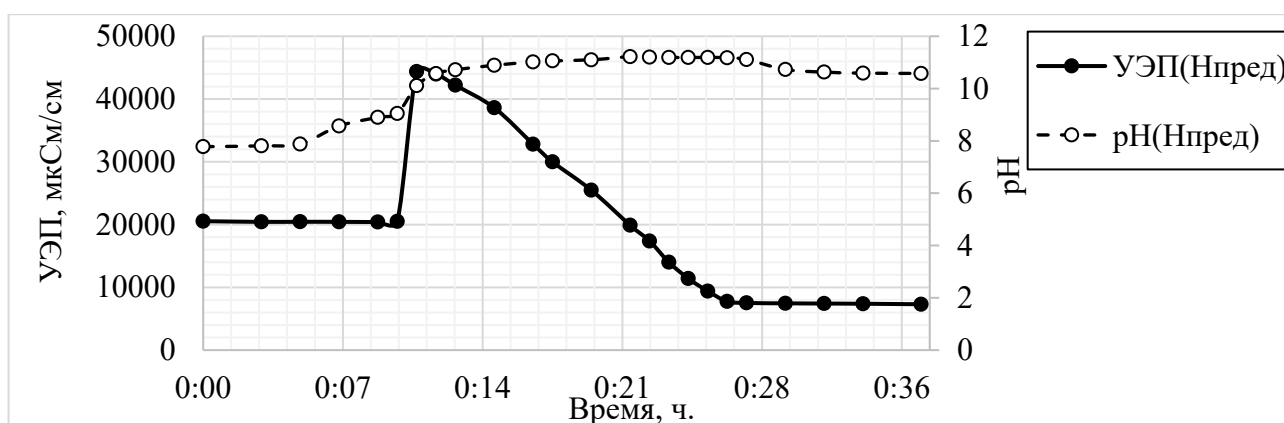


Рисунок 5.9 – Изменение УЭП и pH на выходе с $H_{пред}$

Таблица 5.3 – Результаты операции №2

Скорость подачи воды на отмывку фильтров	103,4 м ³ /ч
Время вытеснения ОРР с $H_{пред}$ (использовано для верификации CFD-модели процесса отмывки)	27 мин
Расход осветленной воды на отмыв	46,5 м ³
Характеристическое время (использовано при идентификации параметров математической модели)	$\tau_{хар.} = 21,8$ мин
Нормированное время (использовано при расчете продолжительности отмывки)	$\tau_{норм.} = 0,46$ мин
Число Пекле (использовано при построении и верификации CFD-модели)	$Pe = 0,85$

Операция 3. Регенерация $H_{II} - H_I - H_{пред}$ раствором из слабо концентрированного отработанного регенерационного раствора с добавлением кислоты (бак БН2). Слив первой фракции осуществлялся в бак БН1, а затем в бак БН3, содержащий сильно концентрированный кислотный отработанный регенерационный раствор. Отмыв фильтра состоял из двух операций: 1) вытеснение отработанного регенерационного раствора потоком из БН2 со сбором в бак БН3; 2) отмыв ЧОВ и сбор в бак БН2.

По результатам эксперимента, представленным в таблице 5.4, был построен график изменения УЭП и pH (рисунок 5.10) на выходе с $H_{пред}$ и динамики отмыва кислоты (рисунок 5.11).

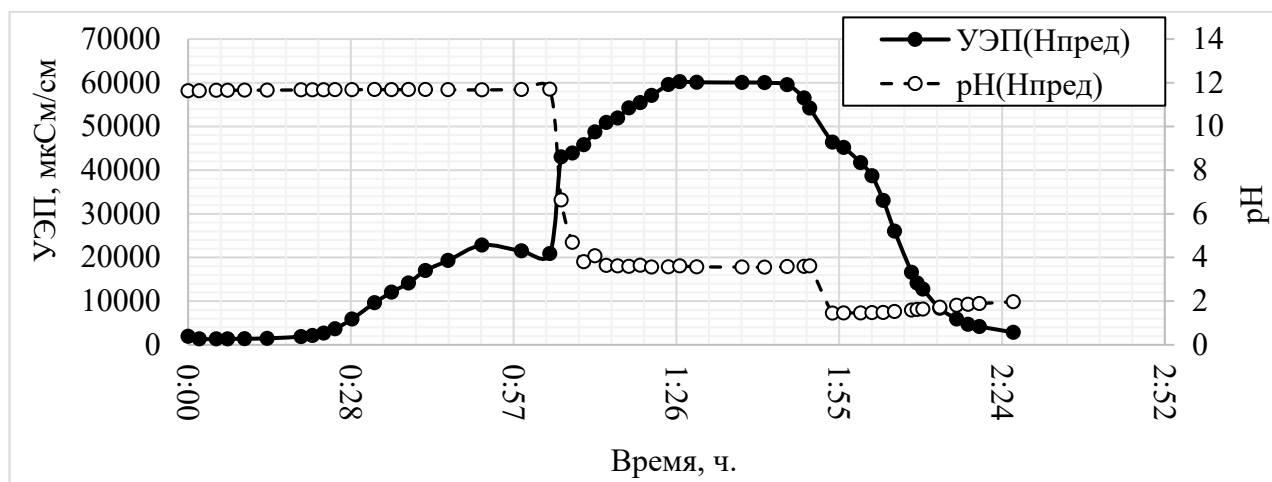


Рисунок 5.10 – Изменение УЭП и pH на выходе с $H_{пред}$

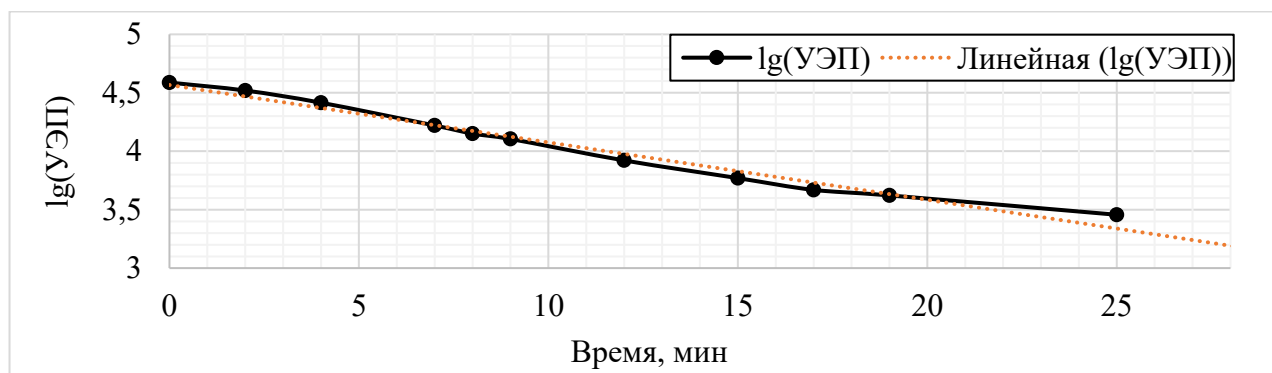


Рисунок 5.11 – Динамика отмыва кислоты

Таблица 5.4 – Результаты операции №3

Скорость подачи регенерационного раствора	59 м ³ /ч
Концентрация кислоты	3,5 – 3,6%
Характеристическое время для Н _{II}	$\tau_{\text{хар.}} = 26$ мин
Характеристическое время для Н _{II} – Н _I	$\tau_{\text{характ.}} = 64$ мин
Нормированное время для Н _{II} – Н _I	$\tau_{\text{норм.}} = 0,28$ мин
Число Пекле для Н _{II} – Н _I	$Pe = 0,39$
Характеристическое время для фильтров Н _{II} – Н _I – Н _{пред}	$\tau_{\text{характ.}} = 102$ мин
Время регенерации (расчет по математической модели)	66 мин
Объем кислотного регенерационного раствора (КРР)	65 т
Расход кислоты на регенерацию	2307,5 кг
Расход ЧОВ на отмыв	104 т
Объем сточных вод	141,55 т
Количество кислоты в стоках	1480 кг
Запасенная кислота	69 кг
Выход кислоты с Н _I	2007,5 кг
Расход кислоты на регенерацию Н _{II} и Н _I	300 кг
Выход кислоты с Н _I	1551,2 кг
Коэффициент использования кислоты	33%

Операция 4. Последовательная регенерация по схеме БОТВ–АН_I–АН_{пред}–БЩРВ. При этом в баке БОТВ находился слабо концентрированный отработанный регенерационный раствор. По результатам эксперимента, представленным в таблице 5.5, был построен график изменения УЭП и рН (рисунок 5.12) в пробах на выходе с АН_{пред}.

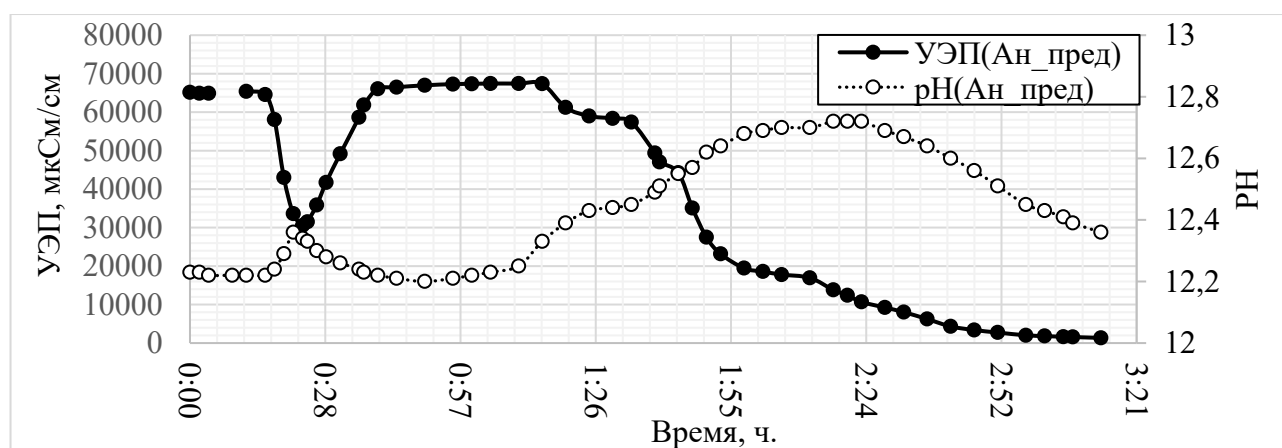
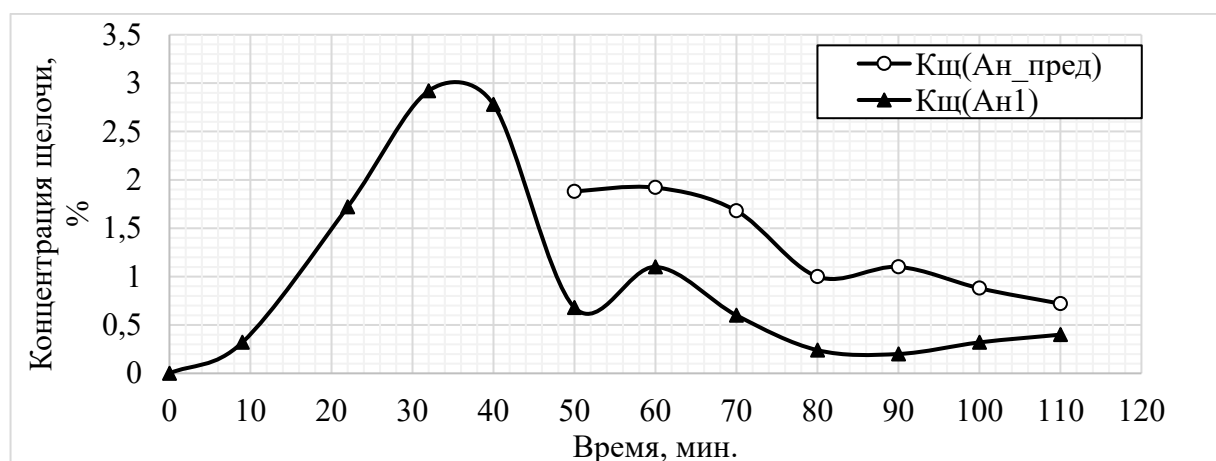
Рисунок 5.12 – Изменение УЭП и рН на выходе с АН_{пред}

Таблица 5.5 – Результаты операции №4

Скорость подачи щелочного раствора	60,5 м ³ /ч
Концентрация щелочи в БСН	0,28%
Время регенерации	37 мин
Объем щелочного регенерационного раствора (ЩРР)	37,3 т
Концентрация щелочи в ЩРР	3,9%
Общий расход щелочи на регенерацию	1455 кг
Расход свежей щелочи на регенерацию	1343 кг
Расход СЩОРР из БОТВ на отмывку	62,5 т
Объем воды из БОТВ в БЩРВ	99,8 т
Расход ХОВ на отмывку	100,5 т
Выход щелочи с А _{нI}	1165 кг
Выход щелочи с А _{нпред} на БЩРВ	1437,5 кг
Выход щелочи с А _{нпред} на БОТВ	196 кг
Объем сточных вод	228,55 т
Фильтроцикл (проверка прогностической модели)	10095 т
Собственные нужды на ионитную ВПУ	2,26%

Через 37 минут после начала операции была прекращена подача щелочного раствора. Через 1 час 39 минут процесс был остановлен для переключения на двухступенчатую отмывку фильтров А_{нI}–А_{нпред}: 1) вытеснение отработанного регенерационного раствора потоком из бака БОТВ со сбором в бак БЩРВ; 2) отмыв ЧОВ и сбор в бак БОТВ. Был построен график изменения концентрации щелочи в пробах воды после А_{нI} и А_{нпред} (рисунок 5.13), а также график, демонстрирующий динамику отмыва щелочи с анионитных фильтров (рисунок 5.14).

Рисунок 5.13 – Изменение концентрации щелочи после А_{нпред} и А_{нI}

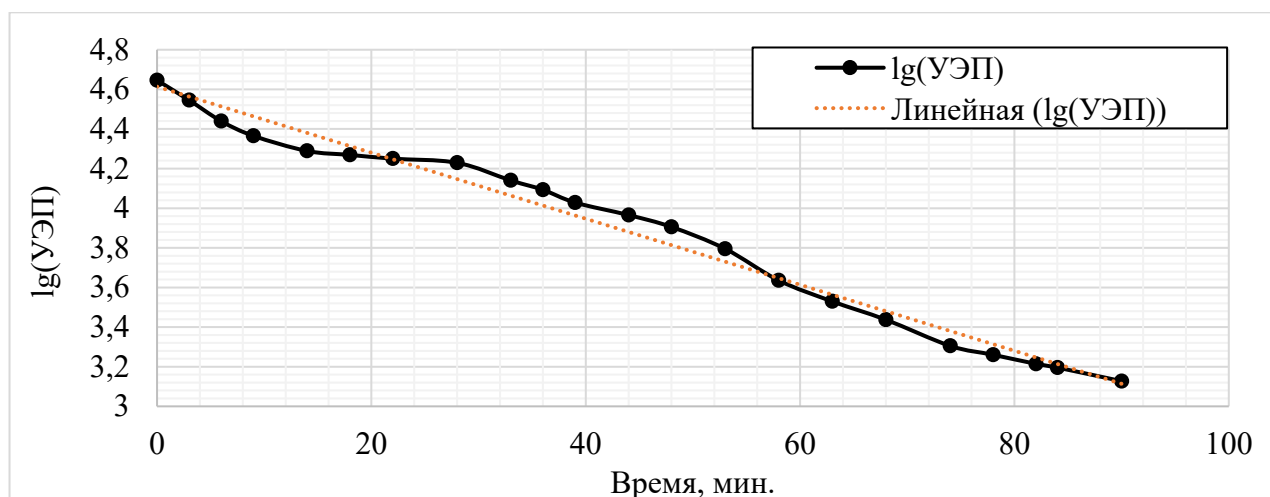


Рисунок 5.14 – Динамика отмыва щелочи с анионитных фильтров

5.2.4 Пример регенерации цепочки ионитных фильтров от 20.01.2024

Начиная с 20.12.2023 г. дополнительно была введена операция предварительной регенерации Н-катионитных фильтров для снижения вероятности гипсования. Цель серии экспериментов от 20.01.2024 заключалась в проведении параллельной предварительной регенерации трех фильтров по линии БОТВ–Ан_{пред}–Н₁–Н_{пред}–БЩРВ, а затем проведение кислотной регенерации со ступенчатым повышением концентрации кислоты от 1,5 до 4,6%.

Предварительная регенерация проводилась в течение 64 минут. Параметры работы ионитных фильтров до регенерации, а также параметры предварительной регенерации представлены в таблице 5.6 и 5.7.

Таблица 5.6 – Параметры работы ионитных фильтров до регенерации (20.01.24)

Фильтроцикл (до регенерации)	6444 т
Сумма задержанных катионов	24068,34 моль-экв /ФЦ
Сумма задержанной жесткости	18043,2 моль-экв/ФЦ
Потребность в кислоте	1179,35 кг
Потребность в кислоте по математической модели	1203,5 кг

Таблица 5.7 – Результаты предварительной регенерации (20.01.24)

Общее время на предварительную регенерацию	64 мин
Средний расход КЩОПР из БОТВ	66,2 м ³ /ч
Общий объем КЩОПР из БОТВ на Н-фильтры	70,61 т
Средняя концентрация щелочи в БОТВ	1,64%
Суммарный расход вторичной щелочи	1158,05 кг
Суммарный расход вторичной щелочи	28951,47 моль-экв
Время на предрегенерацию $A_{H\text{пред}}$	46 мин
Средний расход КЩОПР из БОТВ (на регенерацию $A_{H\text{пред}}$)	66,4 м ³ /ч
Расход КЩОПР из БОТВ на регенерацию $A_{H\text{пред}}$	50,91 т
Концентрация щелочи в БОТВ	1,78 %
Расход вторичной щелочи на регенерацию $A_{H\text{пред}}$	24023,97 моль-экв
Время подачи КЩОПР на катионитные фильтры	18 мин
Средний расход КЩОПР из БОТВ на Н-фильтры	65,7 м ³ /ч
Расход КЩОПР из БОТВ на катионитные фильтры	19,71 т
Расход вторичной щелочи на катионитные фильтры	4927,5 моль-экв
Потеря вторичной щелочи на катионитные фильтры	197,1 кг
Концентрация Na после $A_{H\text{пред}}$ (средняя)	3,28 в % NaOH
Поток Na с $A_{H\text{пред}}$ на катионитные фильтры	57902,93 моль-экв
Выход жесткости с H_I за счет Na с $A_{H\text{пред}}$	15521 моль-экв
Объем стоков с операции 1 на БЦРВ	70,61 т

Результаты экспериментов по основной кислотной регенерации каскада фильтров по линии БН2–Н_{II} – Н_I – Н_{пред} – БН3 представлены в таблице 5.8.

Таблица 5.8 – Результаты регенерации (20.01.24)

Время на регенерацию (по математической модели)	72 мин
Средний расход КРР	75,5 м ³ /ч
Расход 1,55% кислоты	43,5 т
Расход 3,06% кислоты	37,7 т
Расход 4,63% кислоты	9,5 т
Общий расход кислоты	2267,72 т
Стоки с операции №2 на БН3	90,6 т

Результаты экспериментов по отмыву каскада фильтров $H_{II} - H_I - H_{пред}$ по линии БН2/ЧОВ – $H_{II} - H_I - H_{пред}$ – БН3/БН2 представлены в таблице 5.9.

Таблица 5.9 – Результаты отмывки каскада фильтров (20.01.24)

Общее время отмывки (по CFD-модели)	137 мин
Время на отмыв из БН2 и слив на БН3	52 мин
Время на отмыв ЧОВ и слив в БН2	85 мин
Поток из БН2 на отмыв (средний)	67,3 м ³ /ч
Расход из БН2 на отмыв	58,33 т
Поток ЧОВ на отмыв (средний)	75 м ³ /ч
Расход ЧОВ на отмыв и слив в БН2	106,25 т
Средняя концентрация кислоты в отмывке на БН2 (верификация CFD-модели массопереноса)	0,66%
Выход кислоты на БН2	704,40 кг
Стоки с операции 3 на БН2	58,33 т

Результаты экспериментов по регенерации ионитных фильтров от 20.01.2024 приведены в таблице 5.10, и дополнительно были построены графики изменения концентрации кислоты на выходе из фильтров (рисунок 5.15), графики изменения кислотности и жесткости на выходе из катионитных фильтров (рисунок 5.16) в зависимости от количества поданной кислоты.

Таблица 5.10 – Итоговые результаты экспериментов (20.01.2024)

Фильтроцикл (после регенерации)	6669 т
Фильтроцикл (по прогнозной модели)	7012 т
Объем сточных вод (всего)	219,54 т
Собственные нужды ионитного обессоливания	3,29 % от ХОВ
Расход кислоты (по мернику)	2760 кг (100%)
Расход кислоты (по прогнозной модели)	2820 кг (100%)
Выход кислоты с $H_{пред}$ (всего)	1795,53 кг (100%)
Из них:	
выход кислоты со стоками с $H_{пред}$	1091,13 кг (100%)
выход кислоты с $H_{пред}$ на БН2	704,40 кг (100%)
Расход кислоты на реакцию (всего)	964,46 кг (100%)

Продолжение таблицы 5.10.

Эффективность использования кислоты	34,9%
Выход кислоты с H_1	1845,01 кг (100%)
Расход кислоты на реакцию в $H_{пред}$	49,47 кг (100%)
Выход жесткости с $H_{пред}$ (всего). Из них:	25997 моль-экв
выход жесткости со стоками $H_{пред}$	25687 моль-экв
выход жесткости с $H_{пред}$ на БН2	310 моль-экв
Выход жесткости с H_1 (всего)	21553,3 моль-экв

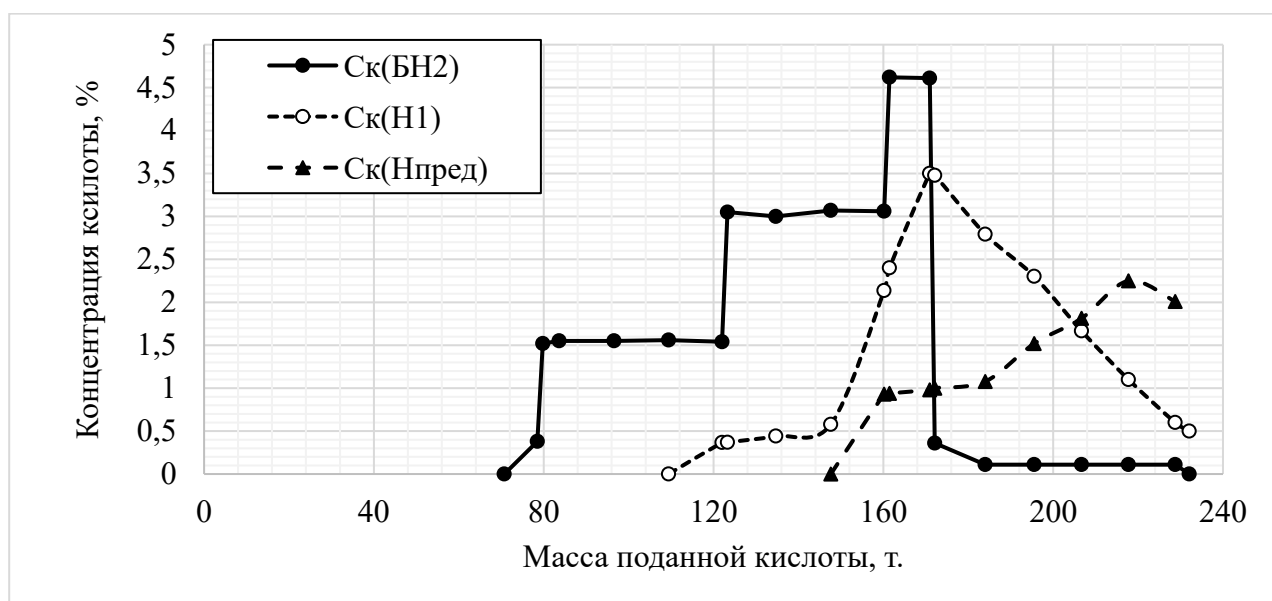


Рисунок 5.15 – Изменение концентрации кислоты на выходе из фильтров

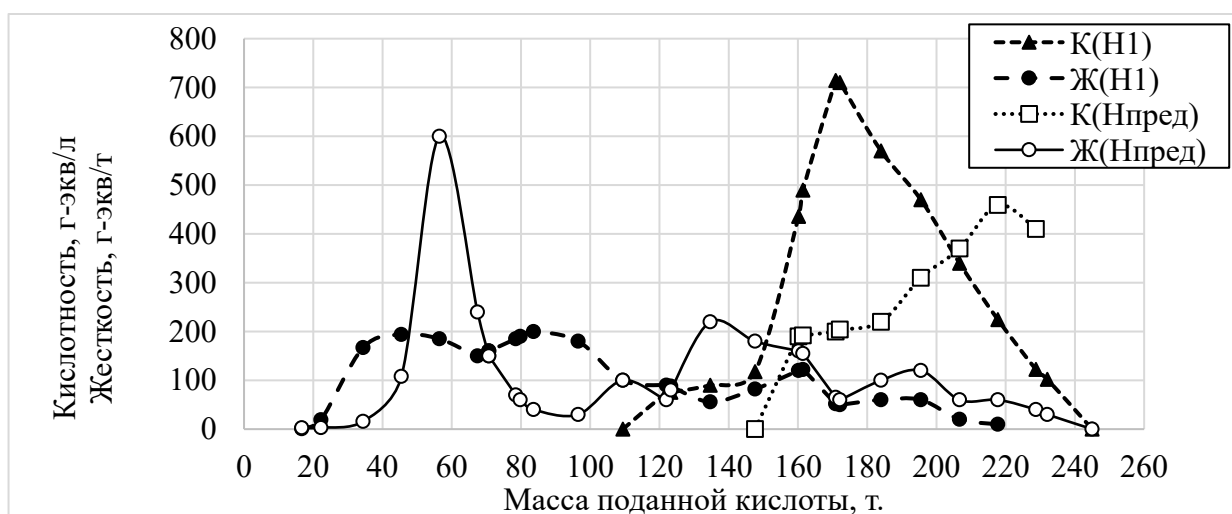


Рисунок 5.16 – Изменение кислотности и жесткости на выходе из H_1 и $H_{пред}$

Через два дня после проведения успешной регенерации были проведены эксперименты по измерению показателей работы цепочки ионитных фильтров в течение 55 часов. На графиках представлены изменение щелочности в пробах воды после анионитного фильтра (рисунок 5.17), а также изменение кислотности проб воды после катионитных фильтров от объема пропущенной воды (рисунок 5.18).

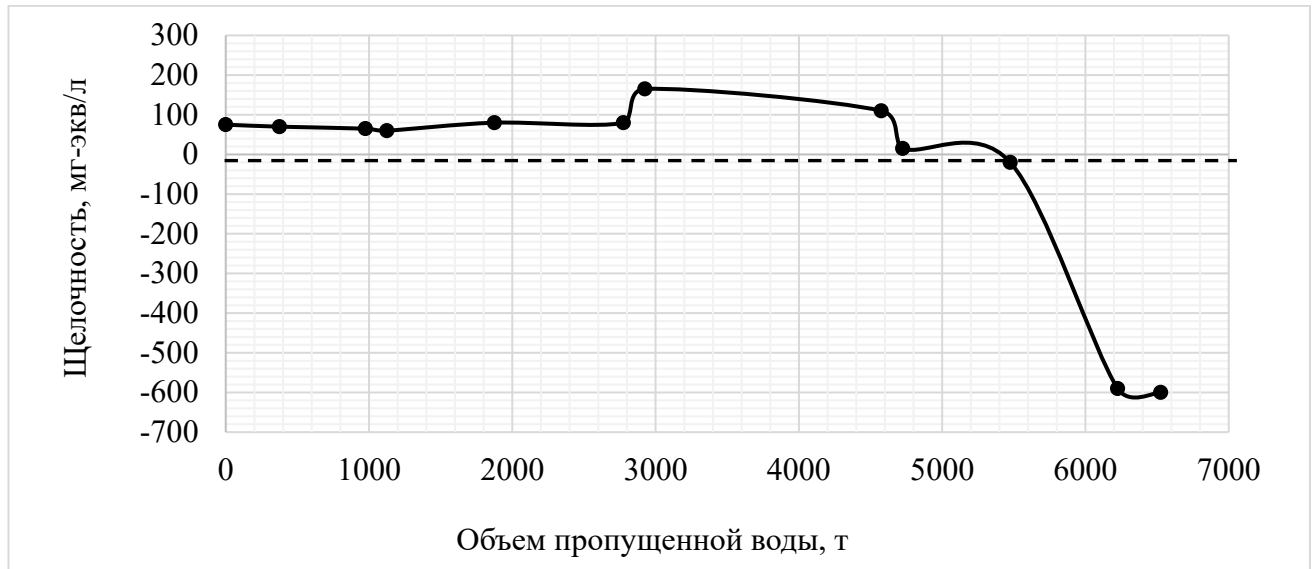


Рисунок 5.17 – Изменение щелочности после анионитного фильтра

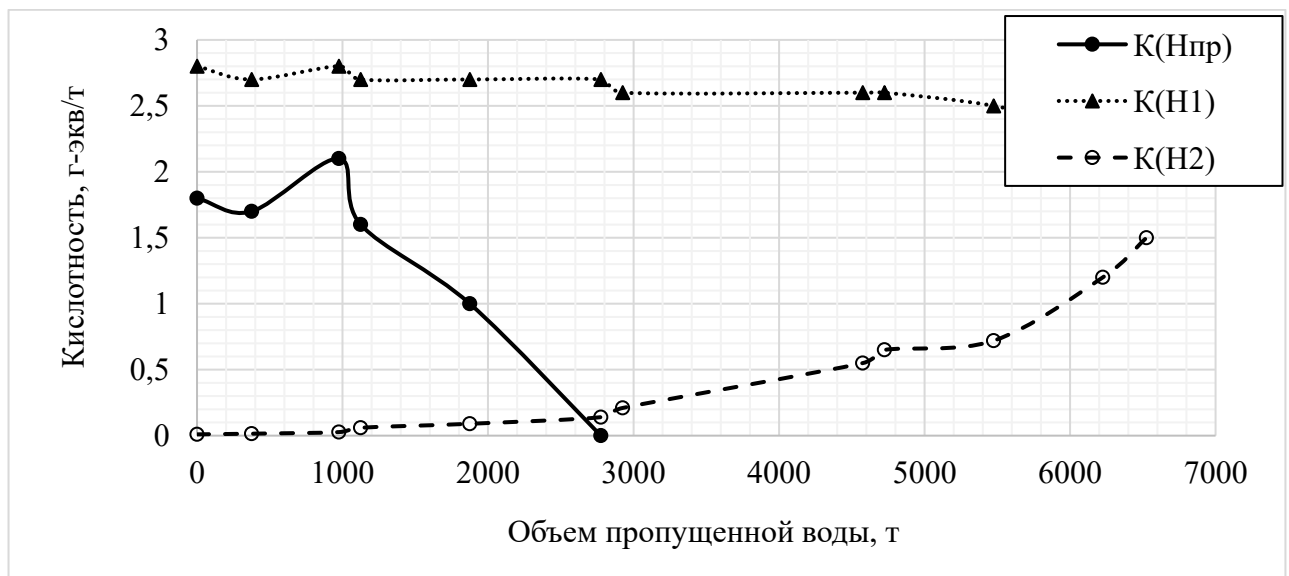


Рисунок 5.18 – Изменение кислотности проб воды после катионитных фильтров

Таким образом, опытно-промышленные исследования на ВПУ Нижнекамской ТЭЦ-1 позволили не только подтвердить эффективность предлагаемых технологических решений, но и выполнить верификацию разработанных математической, CFD- и нейросетевой моделей. Полученные модели использовались для расчета продолжительности регенерации и отмывки, определения необходимого объема реагентов и отмывочных вод, а также прогнозирования продолжительности последующего фильтроцикла. Совместный анализ результатов моделирования и промышленных экспериментов послужил основой для разработки предложений по совершенствованию технологии «каскад».

5.3 Предлагаемые усовершенствования организации повторно-последовательной регенерации блочной ионитной водоподготовительной установки и отмывки ионитных фильтров

Существующую технологию повторно-последовательной регенерации «каскад» можно улучшить по нескольким направлениям, которые разделены по логическим блокам и представлены далее по тексту.

Цель модернизации – снижение расхода реагентов и воды на собственные нужды, увеличение фильтроцикла и минимизация рисков, например, гипсования.

1. Создание «цифрового помощника» для управления регенерацией.

В технологии «каскад» подача регенерационного раствора или отмывочных вод задается по времени или объему, например, подача 50 м³ в течение 60 мин. Это не учитывает изменение состава исходной воды или степени истощения ионита.

В рамках диссертационной работы разработаны три взаимодополняющих инструмента, которые могут быть использованы для модернизации технологии «каскад»: расчетная программа на основе однопараметрической диффузионной модели, нестационарная CFD-модель регенерации ионитного фильтра и прогностическая модель на основе нейронной сети MLP. Их совместное использование позволяет перейти к созданию системы «цифрового помощника»

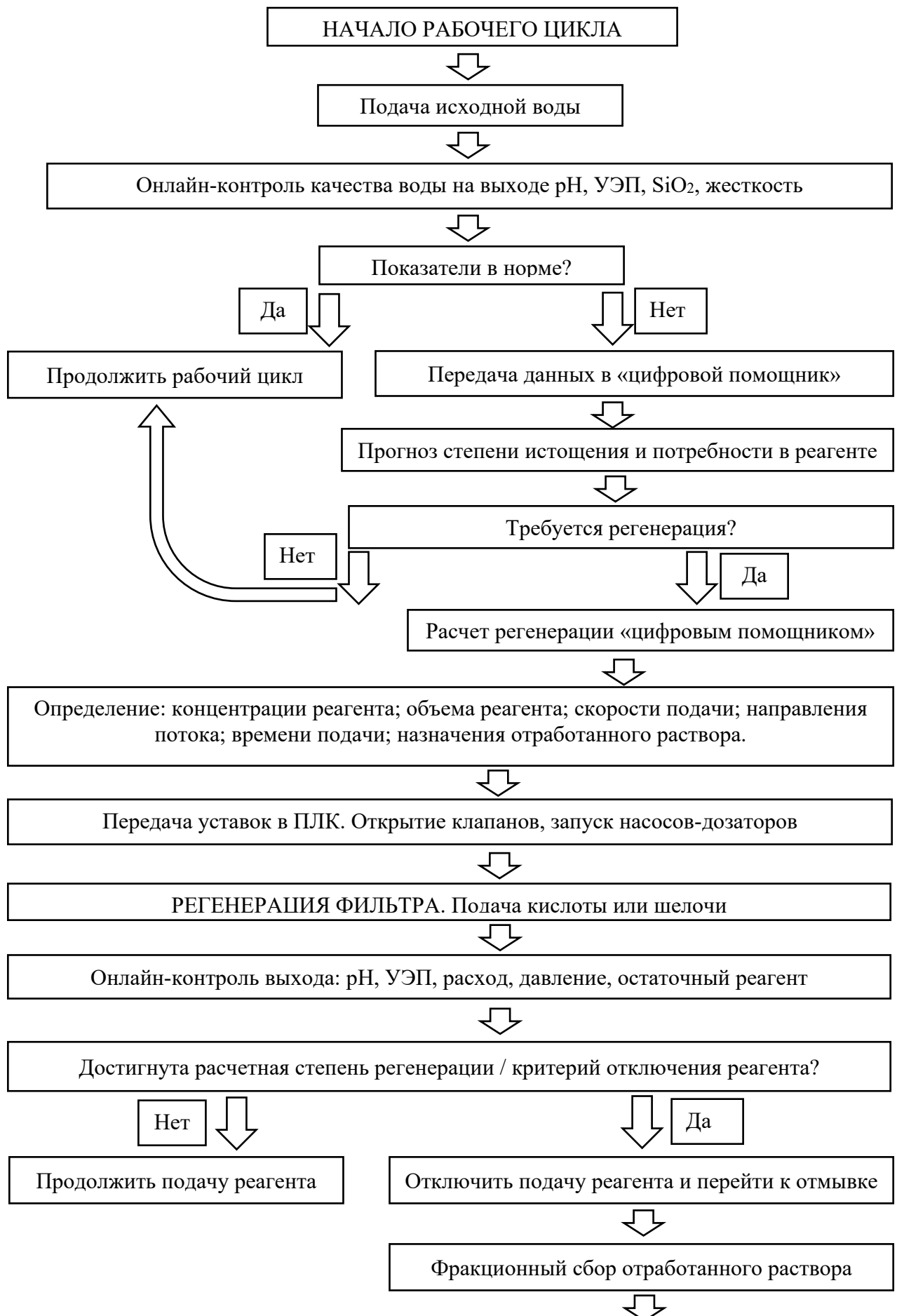
для поддержки принятия решений при эксплуатации ионитных водоподготовительных установок.

Прогностическая модель может использоваться для предварительной оценки фильтроцикла и удельных расходов кислоты и щелочи на основе характеристик исходной воды. Используя диффузионную модель, система в реальном времени будет рассчитывать оптимальный объем и концентрацию регенерационного раствора для текущей загрузки фильтра, а не использовать усредненные значения. Это позволит избежать как недомывки, так и перерасхода щелочи.

Результаты CFD-моделирования показали, что увеличение концентрации регенерационного раствора выше определенного уровня не приводит к пропорциональному сокращению времени регенерации. При высоких концентрациях возрастает вероятность раннего проскока реагента на выходе, то есть часть химического реагента проходит через ионит без эффективного участия в ионообменной реакции.

Поэтому для модернизированной технологии «каскад» целесообразно использовать не фиксированную, а расчетно-обоснованную дозу свежего реагента. Подача кислоты или щелочи должна прекращаться в момент, когда дальнейшее увеличение расхода реагента уже не приводит к существенному приросту степени регенерации. Такой подход позволит уменьшить перерасход реагентов и повысить эффективность их использования.

Для предлагаемой системы адаптивного управления работой, регенерацией и отмывкой ионитного фильтра с использованием «цифрового помощника» разработана технологическая блок-схема, приведенная на рисунке 5.19.



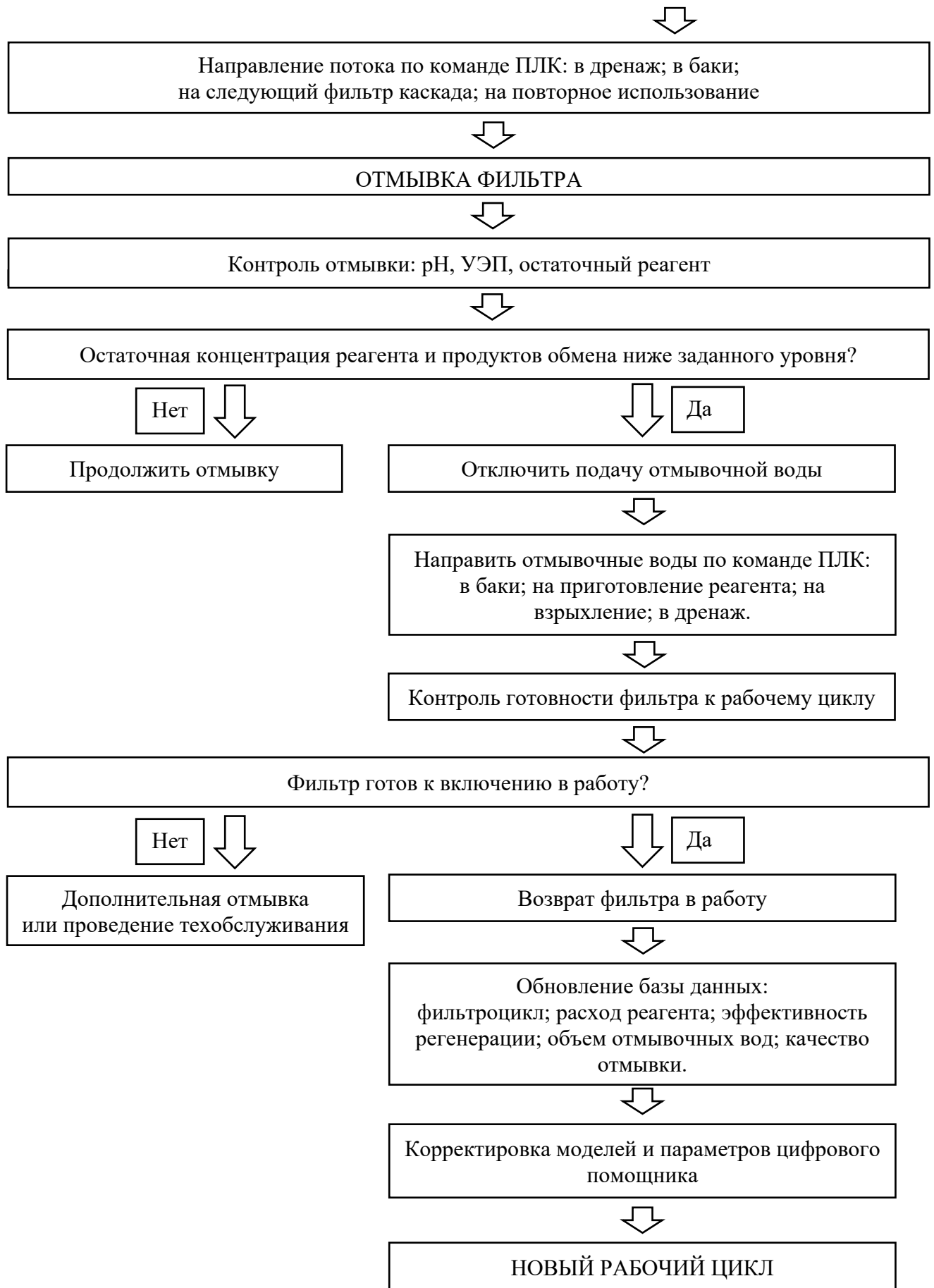


Рисунок 5.19 – Блок-схема реализации системы «цифровой помощник»

Используя модель в реальном времени, можно корректировать подачу свежей кислоты и щелочи. Например, зная ионную нагрузку за фильтроцикл и эффективность предыдущей регенерации, система может рассчитать оптимальное количество свежего реагента, минимизируя его избыток, который может составлять до 50%. Для стадии отмывки можно использовать нестационарную CFD-модель для прогнозирования момента, когда концентрация примесей (органических веществ и SiO_2) в отмывочной воде достигнет приемлемого уровня, чтобы прекратить слив в БСН и перейти к рециркуляции.

Таким образом, «цифровой помощник» может выдавать рекомендации по объему и концентрации регенерационного раствора, продолжительности подачи регенерационного раствора и отмывочных вод, моменту перехода от регенерации к отмывке, моментам переключения потоков между дренажом, баками собственных нужд и баками приготовления реагентов, ожидаемой эффективности регенерации и продолжительности следующего фильтроцикла.

2. Автоматизация узлов переключения на базе промышленных контроллеров (ПЛК).

Для практической реализации адаптивного управления необходима автоматизация узлов переключения потоков. Предлагается добавить интеллектуальный блок управления (контроллер), который получает сигналы от всех датчиков (УЭП, рН, расходомеры) на выходах фильтров и баков. Этот блок должен быть связан с исполнительными механизмами (задвижки, насосы-дозаторы) для автоматического переключения потоков. Дополнительно к имеющимся проточным анализаторам рН, УЭП, расходомерам на входе в «каскад» (для $\text{Ан}_{\text{пред}}$) предлагается установить онлайн-анализаторы органических соединений и анионов. ПЛК можно запрограммировать на автоматическое открытие/закрытие задвижек при достижении заданных значений.

3. Разделение фракций щелочи при регенерации $\text{Ан}_{\text{I}} \rightarrow \text{Ан}_{\text{пред}}$.

Низкоосновный анионит Ан_{I} активно поглощает органические примеси, а сильноосновный $\text{Ан}_{\text{пред}}$ – кремниевую кислоту. При регенерации по технологии

«каскад» $А_{Н1} \rightarrow А_{Нпред}$ фракция потока с высоким содержанием органики с $А_{Н1}$ проходит через $А_{Нпред}$, частично осаждаясь на нем.

Поэтому для модернизированной технологии предлагается вместо того, чтобы пропускать весь объем ЩРР через $А_{Н1} \rightarrow А_{Нпред}$, первые фракции «грязной» щелочи после $А_{Н1}$, насыщенного органическими соединениями, направлять не в $А_{Нпред}$, а в специальный бак-накопитель для последующей утилизации.

Оставшуюся «чистую» щелочь из $А_{Н1}$ предлагается направить на $А_{Нпред}$. Это предотвратит повторное осаждение агрессивных органических соединений на $А_{Нпред}$ и продлит ресурс ионитной смолы. Эта идея уже неявно заложена в разделении выходных потоков на фракции, но требует аппаратного оформления.

4. Управление риском гипсования Н-катионитных фильтров.

При регенерации Н-катионитных фильтров кислотой особенно на $Н_{пред}$ в зоне смешения кислоты с водой, содержащей ионы Ca^{2+} , образуется гипс ($CaSO_4$), который может приводить к забивке слоя и распределительных устройств.

Для снижения риска гипсования предлагается использовать ступенчатую или программно-изменяемую подачу кислотного регенерационного раствора с контролем жесткости. Нужно внедрить алгоритм, при котором в начале подачи кислоты на $Н_{пред}$ или в момент, когда кислота доходит до зоны, насыщенной Ca^{2+} , скорость подачи временно увеличивается, а концентрация кислоты снижается за счет разбавления концентрированного отработанного регенерационного раствора. Это увеличит скорость потока, которая не даст ионам Ca^{2+} и закристаллизоваться на зернах, и смоем микро-зародыши гипса.

5. Совершенствование конструкции фильтров на основе CFD-модели.

CFD-модель показала наличие зон замедления потока в пристеночной области. Это снижает эффективность использования всего объема смолы. В диссертации показано, что гидродинамический режим в фильтрах далек от идеального вытеснения (РИВ) и близок к режиму идеального смешения (РИС), что снижает эффективность регенерации.

Поэтому предлагается использовать верифицированную CFD-модель для точечной оптимизации. Оптимизировать конструкцию нижнего распределительного устройства (НРУ) и верхнего распределительного устройства (ВРУ) предлагается таким образом, чтобы поле скоростей было более равномерным по сечению фильтра. Это может быть достигнуто изменением геометрии лучей дренажной системы или использованием новых типов распределителей, например, щелевых колпачков с переменным шагом. Следует отметить, что в настоящей работе использовалась упрощенная осесимметричная постановка, позволяющая оценить основные закономерности течения и массопереноса. Для детальной оптимизации конструкции распределительных устройств необходимо дальнейшее развитие модели в трехмерной постановке с учетом реальной геометрии верхнего и нижнего распределительных устройств.

Также CFD-модель позволяет подобрать оптимальный гранулометрический состав ионита и инертных слоев для минимизации застойных зон и выравнивания фронта регенерации.

6. Утилизация стоков из бака концентрированных солей.

Сточные воды, насыщенные сульфатом кальция после отмывки фильтра, предлагается не сливать, а осуществлять рециклинг.

Это возможно осуществить путем добавления в схему фильтр-пресса для выделения кристаллического гипса из стоков. Осадок гипса может быть использован как товарный продукт в строительстве или для рекультивации почв, а осветленную воду предлагается направить в осветлитель или использовать для приготовления реагентов. Это позволит замкнуть водный цикл по сульфатам.

7. Рециркуляция и доиспользование отмывочных вод.

В технологии «каскад» вода с отмывки собирается в баки собственных нужд. Потенциал использования этих баков можно расширить. Предлагается использовать слабощелочную воду не только для отмывки, но и для взрыхления. Замена осветленной воды (ОсВ) или частично-обессоленной воды (ЧОВ) на

слабощелочную воду из баков собственных нужд на операциях взрыхления позволит сэкономить чистую воду и вернуть часть щелочи в цикл.

8. Организация непрерывного противоточного движения регенерационных потоков по цепочкам фильтров $A_{II} \rightarrow A_{I} \rightarrow A_{пред} \rightarrow H_{пред}$ и $H_{II} - H_I - H_{пред}$ без промежуточного хранения.

Отказ от баков собственных нужд для модернизированной технологии «каскад» позволяет уменьшить энергозатраты на перекачку, избежать смешивания фракций щелочи, что повышает качество регенерации последующих фильтров.

Для перехода к непрерывной противоточной модернизированной «каскадной» технологии требуется: 1) дополнительная обвязка фильтров трубопроводами, позволяющими независимо направлять потоки реагентов снизу вверх и сверху вниз, с возможностью переключения в зависимости от стадии; 2) установка автоматических клапанов для точного поддержания расходов и давлений в каждом фильтре; 3) внедрение системы автоматического контроля (кондуктометры, рН-метры, анализаторы кремниевой кислоты) на выходе каждого фильтра для определения момента завершения регенерации и переключения потоков без ручного отбора проб.

При модернизации противоточной технологии регенерации и отмывки ионитных фильтров повышается степень использования реагентов (щелочи и кислоты). Это достигается за счет движения раствора от более чистого к более загрязненному иониту без его разбавления и перемешивания в баках. Также за счет уменьшения числа используемых насосов уменьшаются потери на собственные нужды. Организация непрерывного противоточного движения регенерационного раствора по цепочкам $A_{II} \rightarrow A_I \rightarrow A_{пред} \rightarrow H_{пред}$ и $H_{II} - H_I - H_{пред}$ без промежуточного хранения является развитием технологии «каскад». Она позволяет приблизиться к гидродинамическому режиму идеального вытеснения, повысить эффективность использования реагентов, достичь целей энерго- и ресурсосбережения.

Дальнейшее развитие технологии «каскад» должно быть связано с переходом от жестко регламентированной схемы к адаптивной системе управления процессами регенерации и отмывки на основе «цифрового помощника». Это позволит определять объем химических реагентов и отмывочных вод, управлять переключением потоков, определять параметры регенерации и отмывки с учетом фактического состояния фильтров и качества исходной воды.

5.4 Технико-экономический расчет эффективности технологии

Поскольку технико-экономическая эффективность технологии повторно-последовательной регенерации ионитных фильтров «каскад» для ВПУ Нижнекамской ТЭЦ-1 была ранее подтверждена в работе Филимоновой А.А. [164], в настоящем исследовании указанная технология рассматривается в качестве базового варианта. Целью проведения технико-экономического расчета в данной диссертационной работе является оценка дополнительного ожидаемого эффекта от предложенных мероприятий по совершенствованию технологии «каскад» для ВПУ Нижнекамской ТЭЦ-1, а также актуализация экономических показателей с учетом данных на 2026 год.

В таблице 5.11 приведено сравнение технологических показателей регенерации цепочки ионитных фильтров ВПУ Нижнекамской ТЭЦ-1 для различных технологий регенерации.

Таблица 5.11 – Сравнение основных технологических показателей регенерации цепочки ионитных фильтров для различных технологий

Показатели	Существующая технология	«Каскад»	Модернизированный «каскад»
Расход ЧОВ	2868 м ³ /ч	2724 м ³ /ч	2575 м ³ /ч
Расход ХОВ	2449 м ³ /ч	2302,5 м ³ /ч	2215 м ³ /ч
Расход соли (NaCl)	1040 т/год	—	—
СН и стоки	20%	5%	3,7%
Время регенерации	8 ч	6,5 ч	5,5 ч (расчет по мат. модели)
Расход кислоты (H ₂ SO ₄)	5163 т/год	2065 т/год	1960 т/год
Расход щелочи (NaOH)	3323 т/год	2658 т/год	2525 т/год
Объем сточных вод	419 м ³ /ч	126 м ³ /ч	121 м ³ /ч

Таким образом, модернизация технологии «каскад» обеспечивает дополнительное снижение расхода частично-обессоленной воды, удельного расхода реагентов и высокоминерализованных сточных вод. В таблице 5.12 приведены технико-экономические показатели эффективности технологии модернизированного «каскада» для ВПУ Нижнекамской ТЭЦ-1. Дополнительный ожидаемый экономический эффект при внесении усовершенствований в технологию регенерации и отмывки составляет порядка 4,2%.

Таблица 5.12 – Техничко-экономический расчет эффективности модернизированной технологии «каскад»

№	Позиция	Экономия в год по «каскадной» технологии относительно «традиционной» технологии	Стоимость ед., руб. (в ценах на 2020 г. / 2026 г.)	Экономия по «каскадной» технологии (в ценах на 2020 г./2026 г.) млн. руб./год	Дополнительная экономия по модернизированной «каскадной» технологии (в ценах на 2026 г.) млн. руб./год
1	ЧОВ	1261,4 тыс. м ³	36,6 / 54,2	4,276 / 10,48	0,572
2	ХОВ	1283,3 тыс. м ³	68 / 92	87 / 118	4,48
3	Щелочь (40 %)	665 т	16 700 / 58 000	11,1 / 38,6	1,93
4	Кислота (96 %)	3098 т	3 500 / 15 000	10,84 / 46,5	2,3
5	Соль	1040 т	3 200 / 6 100	3,32 / 6,3	–
6	Исходная вода (р. Волга)	7120 тыс. м ³	3,3 / 4,46	23,5 / 31,75	1,36
7	Сточные воды	2566,7 тыс. м ³	10,34 / 12,08	26,53 / 31	1,23
Итого в год:				166,57 / 282,63	11,872 (+4,2%)

Годовая экономия i -го ресурса (ΔG_i) определялась как разность между его расходом для сравниваемых технологий:

$$\Delta G_i = G_i^{\text{баз}} - G_i^{\text{сравн}}, \quad (5.1)$$

где $G_i^{\text{баз}}$ и $G_i^{\text{сравн}}$ – годовые расходы ресурса для соответствующих вариантов технологии (базовая и сравниваемая). Годовой экономический эффект по каждой статье затрат ($\mathcal{E}_i$) определялся по формуле:

$$\mathcal{E}_i = \Delta G_i \cdot C_i, \quad (5.2)$$

где C_i – стоимость единицы ресурса или реагента.

Суммарный экономический эффект ($\mathcal{E}_\Sigma$) рассчитывался как сумма экономии по всем рассматриваемым статьям затрат:

$$\mathcal{E}_\Sigma = \sum_{i=1}^n \mathcal{E}_i. \quad (5.3)$$

Стоимость воды, химических реагентов и услуг по обращению со сточными водами для технологии «каскад» приведена в ценах 2020 года и по состоянию на 2026 год. Дополнительный экономический эффект модернизированной технологии определялся как разность между экономическим эффектом модернизированного и базового варианта технологии «каскад». Дополнительный экономический эффект определялся с учетом совместного применения прогностической, математической и CFD-моделей в рамках предлагаемой системы «цифрового помощника», в которой результаты и параметры каждой модели взаимно уточняются, что позволяет обеспечить относительную погрешность итогового расчета порядка 4%.

5.5 Выводы к Главе 5

В главе рассмотрена технология повторно-последовательной регенерации и отмывки ионитных фильтров «каскад», основанная на противоточном движении регенерационных растворов, их повторном использовании и фракционном сборе отмывочных вод. Показано, что данная технология позволяет добиться целей

ресурсосбережения: снижает расход кислоты и щелочи, уменьшает объем высокоминерализованных стоков и способствует увеличению фильтроцикла.

На основе анализа опытно-промышленных данных и результатов моделирования предложена модернизация технологии «каскад» за счет перехода от нормированных режимов регенерации к адаптивному управлению процессом на основе системного подхода. Центральным элементом модернизации выступает «цифровой помощник», объединяющий диффузионную модель, CFD-модель и нейросетевое прогнозирование. Такая система может использоваться для расчета объема и концентрации реагента, продолжительности регенерации и отмывки, а также моментов переключения потоков.

Предложенные мероприятия по модернизации технологии включают автоматизацию узлов переключения на базе ПЛК, уточнение фракционного сбора отработанных растворов, разделение фракций щелочи, управление риском гипсования, рециркуляцию отмывочных вод и использование CFD-модели для совершенствования конструкции фильтров.

Модернизация технологии «каскад» направлена на снижение расхода реагентов и воды, уменьшение объема сточных вод, повышение стабильности регенерации и увеличение фильтроцикла путем применения системного подхода к расчету параметров регенерации и отмывки ионитных фильтров.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Разработана и верифицирована математическая модель проточного ионитного фильтра на основе однопараметрической диффузионной модели. Получены и проанализированы аналитические решения для четырех постановок граничных условий. На основе математической модели разработана компьютерная программа и рассчитаны выходные концентрационные кривые реагента и продуктов обмена при регенерации анионитного фильтра ВПУ действующей ТЭЦ. Расхождение расчетных и экспериментальных данных не превышает 5%.

2. Разработана и верифицирована цифровая CFD-модель ионитного фильтра в стационарной и нестационарной постановках. Сопоставление результатов CFD-моделирования с промышленными экспериментальными данными для анионитного фильтра ВПУ действующей ТЭЦ показало удовлетворительное согласие при нормированной среднеквадратичной ошибке по выходной концентрационной кривой NaOH порядка 15%.

3. Разработана и верифицирована прогностическая модель работы ионитной ВПУ на основе нейросетевой MLP-модели. Получены значения средней абсолютной процентной ошибки прогнозирования: для фильтроцикла – 9,15%, для удельного расхода кислоты – 10,22%, для удельного расхода щелочи – 19,3%.

4. Разработаны предложения по модернизации технологии повторно-последовательной регенерации и отмывки ионитных фильтров «каскад» для ионитной ВПУ действующей ТЭЦ. Предложенный подход основан на интеграции однопараметрической диффузионной модели, CFD-моделирования и нейросетевого прогнозирования в рамках единой системы «цифрового помощника», предназначенной для расчета объема и концентрации реагента, продолжительности регенерации и отмывки, а также моментов переключения технологических потоков. Выполнен технико-экономический расчет, подтверждающий целесообразность внедрения разработанных решений для снижения расхода реагентов и воды, уменьшения объема сточных вод и повышения эффективности эксплуатации ионитной ВПУ.

**Рекомендации, перспективы дальнейшей разработки темы исследования
диссертационной работы**

Практическое внедрение предложенного системного подхода на действующей ионитной ВПУ ТЭС Нижнекамской ТЭЦ-1; дальнейшее развитие системы «цифрового помощника» для поддержки принятия решений при выборе режимов регенерации и отмывки; накопление эксплуатационных данных для повышения точности нейросетевого прогнозирования; совершенствование CFD-модели с учетом геометрии распределительных устройств.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Рябчиков, Б. Е. Ионный обмен в водоподготовке: производственно-практическое пособие / Б. Е. Рябчиков, А. А. Пантелеев, С. Ю. Ларионов. – Москва: ДеЛи плюс, 2018. – 398 с. – ISBN 978-5-9909883-9-2. – Текст: электронный. – URL: <https://znanium.com/catalog/product/1838786> (дата обращения: 14.08.2024). – Режим доступа: по подписке.
2. Громов, С. Л. Опыт применения интегрированных мембранных технологий для водоподготовки на тепловых электростанциях / С. Л. Громов, А. А. Пантелеев // Новое в российской электроэнергетике. – 2011. – № 11. – С. 46-54.
3. Жадан, А. В. Практическая реализация противоточной технологии ионного обмена / А. В. Жадан, Е. Н. Бушуев // Вестник Ивановского государственного энергетического университета. – 2012. – № 5. – С. 10-15.
4. Седлов, А. С. Современные технологии водоподготовки на ТЭС и их экологическая оценка / А. С. Седлов, Б. С. Федосеев, В. В. Шищенко // Современные природоохранные технологии в электроэнергетике : Информационный сборник / Под общей редакцией В.Я. Путилова. – Москва : Издательский дом МЭИ, 2007. – С. 126-148..
5. Бушуев, Е. Н. Анализ современных технологий водоподготовки на ТЭС / Е. Н. Бушуев, Н. А. Еремина, А. В. Жадан // Вестник Ивановского государственного энергетического университета. – 2013. – № 1. – С. 8-14.
6. Малахов, И.А. Технологические аспекты выбора оптимальных схем обессоливания питательной воды парогенераторов ТЭС и промышленных предприятий / И. А. Малахов, А. А. Аскерния, И. И. Боровкова, Г. И. Малахов // Теплоэнергетика. – 2004. – № 7. – С. 19-24.
7. Веселовская, Е. В. Современные проблемы реконструкции водоподготовительных установок теплоэнергетических предприятий / Е. В. Веселовская, О. В. Луконина, А. Г. Шишло // Известия высших учебных заведений. Северо-Кавказский регион. Технические науки. – 2012. – № 2(166). – С. 63-66.

8. Власова, А. Ю. Анализ очистки воды на комбинированных водоподготовительных установках ТЭС УФ-спектрофотометрическим методом / А. Ю. Власова, О. Е. Бабинов // Вестник Казанского государственного энергетического университета. – 2023. – Т. 15, № 3(59). – С. 82-93.

9. Громов, С. Л. Технологии противоточной регенерации ионитов для водоподготовки. Часть 2 / С. Л. Громов, А. А. Пантелеев // Теплоэнергетика. – 2006. – № 11. – С. 50-55.

10. Юрчевский Е. Б. и др. Прогнозирование технологических характеристик противоточных ионообменных фильтров с использованием математического моделирования / Е. Б. Юрчевский, И. В. Комарова, Н. К. Галкина [и др.] // Теплоэнергетика. – 2003. – №. 7. – С. 29-34.

11. Оптимизация ионообменной технологии водоподготовки: фильтрование с противоточной регенерацией / Я. Е. Резник // Новости теплоснабжения. – 2003. – Т. 48. – №. 50. – С. 51.

12. Ларин, А. Б. Анализ технологической эффективности схем химического обессоливания воды в условиях промышленной эксплуатации / А. Б. Ларин // Вестник Ивановского государственного энергетического университета. – 2005. – № 1. – С. 29-34.

13. Ларин, А. Б. Вопросы и проблемы энерго- и ресурсосбережения на ТЭС / А. Б. Ларин, Е. А. Карпычев // Энергосбережение и водоподготовка. – 2018. – № 1(111). – С. 3-11.

14. Володина, Е. В. Повышение эффективности химводоподготовки путем внедрения противоточной схемы «АПКОРЕ» / Е. В. Володина // Инновации. Наука. Образование. – 2020. – № 24. – С. 1314-1324.

15. Кныш, М. В. Анализ современных подходов к проектированию эффективных технологических схем подготовки воды на ТЭС / М. В. Кныш, Ю. М. Глумов, Е. В. Самаркина // Повышение эффективности производства и использования энергии в условиях Сибири : Материалы Всероссийской научно-практической конференции с международным участием, Иркутск, 19–22 апреля

2022 года. Том 2. – Иркутск: Иркутский национальный исследовательский технический университет, 2022. – С. 151-159.

16. Gorshkov, V. I. Ion exchange in countercurrent columns //Ion Exchange and Solvent Extraction. – CRC Press, 2021. – С. 29-92.

17. Hendry, B. A. Continuous countercurrent ion exchange for desalination and tertiary treatment of effluents and other brackish waters/ B. A. Hendry //Water Science and Technology. – 1982. – Т. 14. – №. 6-7. – С. 535-552.

18. Кривченкова, Е. А. Анализ ассортимента и качества катионитов, представленных на российском рынке и предназначенных для применения на водоподготовительных установках ТЭС / Е. А. Кривченкова, Л. А. Панфилова, И. А. Чернова // Теплоэнергетика. – 2021. – № 10. – С. 63-72. – DOI 10.1134/S0040363621090046.

19. Первов, А. Г. Совершенствование мембранных систем водоподготовки-исключение реагентов и стоков / А. Г. Первов, А. П. Андрианов, Е. Б. Юрчевский //Водоочистка. Водоподготовка. Водоснабжение. – 2012. – №. 5. – С. 44-50.

20. Киреева, В. Д. Ионогенные характеристики ионитов и области их использования / В. Д. Киреева, Н. А. Сундеева, А. И. Иванов, Е. А. Егоров // Наука и образование: сохраняя прошлое, создаем будущее : сборник статей XLII Международной научно-практической конференции, Пенза, 15 марта 2023 года. – Пенза: Наука и Просвещение (ИП Гуляев Г.Ю.), 2023. – С. 12-15.

21. Korkisch J. CRC Handbook of Ion Exchange Resins, Volume VI. – Routledge, 2017.

22. Zhang, T. Y. Research Progress of Preparation Technology of Ion-Exchange Resin Complexes / T. Yi. Zhang, R. F. Du, Y. J. Wang [et al.] // AAPS PharmSciTech. – 2022. – Т. 23. – №. 4. – С. 1-14. – DOI 10.1208/s12249-022-02260-6.

23. Ларин, Б. М. Опыт освоения новых технологий обработки воды на ТЭС / Б. М. Ларин, А. Н. Коротков, М. Ю. Опарин, А. Б. Ларин // Теплоэнергетика. – 2010. – № 8. – С. 8-13.

24. Ларин, Б. М. Технологическое и экологическое совершенствование водоподготовительных установок на ТЭС / Б. М. Ларин, Е. Н. Бушуев, Н. В. Бушуева // Теплоэнергетика. – 2001. – № 8. – С. 23-27.

25. Тунакова, Ю. А. Исследование сорбционных характеристик полимерных ионитов, используемых в водоподготовке / Ю. А. Тунакова, А. Р. Галимова, А. А. Кулаков // Вестник Казанского технологического университета. – 2013. – Т. 16, № 10. – С. 141-145.

26. Чичиров, А. А. Разработка энергоэффективных ресурсосберегающих систем водопользования на объектах большой энергетики / А. А. Чичиров, Н. Д. Чичирова, А. А. Филимонова [и др.] // Строительство и техногенная безопасность. – 2018. – № 12(64). – С. 71-79.

27. Власова, А. Ю. Ресурсосберегающие технологии утилизации высокоминерализованных кислых отходов с ионитной части комбинированной водоподготовительной установки на Стерлитамакской ТЭЦ / А. Ю. Власова // Известия высших учебных заведений. Проблемы энергетики. – 2022. – Т. 24. – № 6. – С. 25-36. – DOI 10.30724/1998-9903-2022-24-6-25-36.

28. Адиканко, И. И. Проблемы сокращения сброса высокоминерализованных сточных вод на объектах теплоэнергетики / И. И. Адиканко, С. А. Дубенок // Труды БГТУ. Серия 2: Химические технологии, биотехнология, геоэкология. – 2018. – № 2(211). – С. 213-221.

29. Громов, С. Л. Безреагентная водоподготовка в отечественной энергетике: миф или реальность? / С. Л. Громов // Теплоэнергетика. – 2020. – № 6. – С. 40-46. – DOI 10.1134/S0040363620060041.

30. Римашевская, Е. Д. Разработка малосточной ВПУ ТЭЦ / Е. Д. Римашевская // Электроэнергетика глазами молодежи : труды VI международной научно-технической конференции, Иваново, 09–13 ноября 2015 года. Том 2. – Иваново: Ивановский государственный энергетический университет им. В.И. Ленина, 2015. – С. 358-363.

31. Высоцкий, С. П. Совершенствование экологических показателей технологий обессоливания воды / С. П. Высоцкий, М. В. Коновальчик // Вести Автомобильно-дорожного института. – 2016. – № 1(18). – С. 77-87.

32. Ларин, Б. М. Совершенствование водоподготовки на ТЭС / Б. М. Ларин, Е. Н. Бушуев, А. Б. Ларин [и др.] // Теплоэнергетика. – 2015. – № 4. – С. 58. – DOI 10.1134/S0040363615020058.

33. Мадаева, А. Д. Современные методы водоподготовки на ТЭС / А. Д. Мадаева, М. Х. Умарова, А. А. Джамалуева, Л. Саидова // Заметки ученого. – 2020. – № 3. – С. 34-39.

34. Ларин, Б. М. Модернизация типовой водоподготовительной установки ТЭС / Б. М. Ларин, Е. Н. Бушуев, Н. А. Еремина, М. Э. Колодяжная // Электрические станции. – 2020. – № 11(1072). – С. 2-8.

35. Филимонова, А. А. Современные возможности подготовки ультрачистой воды для питания высокопроизводительных котельных установок / А. А. Филимонова, Н. Д. Чичирова, А. А. Чичиров [и др.] // Труды Академэнерго. – 2020. – № 3(60). – С. 74-84.

36. Кандрушин, А. А. Совершенствование технологии водоподготовки на тепловых электростанциях / А. А. Кандрушин, Л. Ф. Комарова, В. А. Сомин // Ползуновский вестник. – 2024. – № 1. – С. 186-190. – DOI 10.25712/ASTU.2072-8921.2024.01.022.

37. Натареев, С. В. Ионообменная очистка воды от ионов тяжелых металлов в аппаратах периодического и непрерывного действия / С. В. Натареев, Д. Е. Захаров, Н. А. Лапшин // Современные наукоемкие технологии. Региональное приложение. – 2019. – № 2(58). – С. 150-159.

38. Натареев, С. В. Основные тенденции развития ионообменного оборудования периодического действия / С. В. Натареев, Д. Е. Захаров, Д. Г. Снегирев // Актуальные вопросы естествознания : Материалы VI Всероссийской научно-практической конференции с международным участием, Иваново, 23 марта 2021 года. – Иваново: Федеральное государственное бюджетное образовательное

учреждение высшего образования «Ивановская пожарно-спасательная академия Государственной противопожарной службы Министерства Российской Федерации по делам гражданской обороны, чрезвычайным ситуациям и ликвидации последствий стихийных бедствий», 2021. – С. 199-204.

39. Beltle, C. Comparison of Three Different Counterflow Regeneration Systems in a 640 m³/h Water Plant / C. Beltle, G. A. Lisson // International Water. – 2002. – №. 16.

40. Рябчиков, Б. Е. Сравнительные исследования эффективности регенерации ионообменного фильтра различными способами / Б. Е. Рябчиков, А. В. Сибирев, Ю. Е. Корзина, С. Ю. Ларионов // Энергосбережение и водоподготовка. – 2006. – № 5(43). – С. 2-6.

41. Балаев, И. С. Десятилетний опыт внедрения технологии АПКОРЕ / И. С. Балаев, О. Б. Яковенко, И. И. Боровкова // Энергосбережение и водоподготовка. – 2005. – № 4(36). – С. 6-7.

42. Копылов, А. С. Второй Международный водно-химический форум / А. С. Копылов, В. Ф. Очков // Новое в российской электроэнергетике. – 2009. – № 7. – С. 41-47.

43. Федосеев, Б. С. Современное состояние водоподготовительных установок и водно-химических режимов ГЭС / Б. С. Федосеев // Теплоэнергетика. – 2005. – № 7. – С. 2-9.

44. Юрчевский, Е. Б. Разработка, исследование и внедрение водоподготовительного оборудования для ТЭС с улучшенными экологическими характеристиками : специальность 05.14.14 «Тепловые электрические станции, их энергетические системы и агрегаты» : автореферат диссертации на соискание ученой степени доктора технических наук / Юрчевский Евгений Борисович. – Иваново, 2004. – 34 с.

45. Авторское свидетельство 1627245 СССР. Способ регенерации катионитовых и анионитовых фильтров в установке для обессоливания и умягчения воды / Трофименко М.А., Кульминская Л.И., Плужник Т.И., Ребрик

В.А.; заявитель Днепродзержинский индустриальный институт им. М.И. Арсничева. – №4417103/26; заявл. 03.03.1988; опубл. 15.02.1991, Бюл. №6.

46. Авторское свидетельство 1766501 СССР. Способ регенерации анионитных и катионитных фильтров первой ступени обессоливающей установки / Высоцкий С.П., Дворников Е.П.; заявитель Государственный проектно-изыскательский и научно-исследовательский институт «Укрэнергопроект». – №4910343/26; заявл. 19.12.1990; опубл. 07.10.1992, Бюл. №37.

47. Пат. 2149685 Российская Федерация. Способ противоточной регенерации ионитов / Малышев Р.М., Золотников А.Н., Бомштейн В.Е., Громов С.Л., Ньюэлл Пол, Сиверс Рейнальдо, Медет Андре.; заявитель и патентообладатель Общество с ограниченной ответственностью «Объединение ИРЕА-ПЕНЗМАШ», ДАУ ДОЙЧЛАНД ИНК. – № 99124616/12; заявл. 26.11.1999; опубл. 27.05.2000, Бюл. № 15.

48. Пат. 2185883 Российская Федерация. Способ регенерации ионита в противоточном фильтре / Балаев И.С. ; заявитель и патентообладатель Балаев И.С. – № 2000130608/12; заявл. 07.12.2000; опубл. 27.07.2002, Бюл. № 21.

49. Пат. 2817630 Российская Федерация. Ресурсосберегающая ионитная водоподготовительная установка / Филимонова А. А., Бабилов О. Е., Чичирова Н. Д., Чичиров А. А.; заявитель и патентообладатель Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Казанский государственный энергетический университет». – № 2023109104; заявл. 07.02.2023; опубл. 17.04.2024, Бюл. № 11.

50. Денбиг К. Г. Теория химических реакторов. – Наука, Москва, 1968. – 191 с.

51. Закгейм А. Ю., Глебов М. Б. Математическое моделирование основных процессов химических производств. – М.: Высшая школа, 1991. – 400 с.

52. Чичиров, А.А. Однопараметрическая диффузионная модель системы ТЭЦ - открытая тепловая сеть / А. А. Чичиров, Н. Д. Чичирова, И. Е. Филиппов, С. М. Власов // Труды Академэнерго. – 2012. – № 3. – С. 75-85.

53. Чичиров, А. А. Анализ процессов в системе ТЭЦ - открытая тепловая сеть с использованием модели реактора вытеснения с рециркуляцией / А. А. Чичиров, Н. Д. Чичирова, А. И. Ляпин, И. Е. Филиппов // Промышленная энергетика. – 2014. – № 11. – С. 21-26.
54. Burkert, C. A. V. Mathematical modeling and experimental breakthrough curves of cephalosporin C adsorption in a fixed-bed column / C. A. V. Burkert, G. N. Barbosa, M. A. Mazutti, F. Maugeri // Process Biochemistry. – 2011. – Т. 46. – №. 6. – С. 1270-1277.
55. Hekmatzadeh, A. A. Modeling of nitrate removal for ion exchange resin in batch and fixed bed experiments / A. A. Hekmatzadeh, A. Karimi-Jashani, N. Talebbeydokhti, B. Klove // Desalination. – 2012. – Т. 284. – С. 22-31.
56. Gitis, V. Deep-bed filtration model with multistage deposition kinetics / V. Gitis, I. Rubinstein, M. Livshits, G. Ziskind // Chemical Engineering Journal. – 2010. – Т. 163. – №. 1-2. – С. 78-85.
57. Babu, B. V. Modeling and simulation of fixed bed adsorption column: effect of operating variables/ B. V. Babu, S. Gupta // Proceedings of International Congress Chemistry and Environment (ICCE-2005), Indore. – 2005. – С. 391-394.
58. Lucas, S. Mathematical model of supercritical CO₂ adsorption on activated carbon: Effect of operating conditions and adsorption scale-up/ S. Lucas, M. P. Calvo, C. Palencia, M. J. Cocero // The Journal of supercritical fluids. – 2004. – Т. 32. – №. 1-3. – С. 193-201.
59. Slizneva, T. E. Mathematical modeling of ion exchange in an apparatus with a fixed bed of granular ion-exchange resin/ T. E. Slizneva, S. V. Natariev // Theoretical Foundations of Chemical Engineering. – 2004. – Т. 38. – №. 2. – С. 169-172.
60. Yusuff, A. S. Mathematical modelling of fixed bed adsorption column for liquid phase solute: effect of operating variables / A. S. Yusuff, L. T. Popoola, O. O. Omitola, A. O. Adeodu, I. A. Daniyan // International Journal of Scientific & Engineering Research. – 2013. – Т. 4. – №. 8. – С. 811-822.

61. Голованчиков, А. Б. Моделирование структуры потоков в химических реакторах / А. Б. Голованчиков, Н. А. Дулькина; Волгоградский государственный технический университет. – Волгоград: Волгоградский государственный технический университет, 2009. – 240 с. – ISBN 978-5-9948-0322-6.

62. Голованчиков, А. Б. Градиентные граничные условия для диффузионной модели структуры потоков / / А. Б. Голованчиков, Ю. В. Аристова, Н. А. Дулькина, В. Н. Карев // Известия Волгоградского государственного технического университета. – 2015. – №. 1. – С. 94-99.

63. Голованчиков, А. Б. Моделирование сорбционных процессов с учетом структуры потока / А. Б. Голованчиков, О. А. Залипаева, Н. А. Меренцов. – Волгоград : Волгоградский государственный технический университет, 2018. – 128 с. – ISBN 978-5-9948-3113-7.

64. Голованчиков, А. Б. Математическое моделирование химического реактора с диффузионной структурой потока для реакции n -го порядка / А. Б. Голованчиков, Н. А. Дулькина, Ю. В. Аристова, Н. Н. Дикарева // Известия Волгоградского государственного технического университета. – 2013. – № 22(125). – С. 25-29.

65. Голованчиков, А. Б. Математическое моделирование химического реактора с различными диффузионными структурами потока по реагирующим компонентам / А. Б. Голованчиков, Н. А. Дулькина, Ю. В. Аристова // Химическая промышленность сегодня. – 2013. – № 3. – С. 51-55.

66. Голованчиков, А. Б. Двухкомпонентная диффузионная модель структуры потока для реакции II порядка и градиентными граничными условиями / А. Б. Голованчиков, Ю. В. Аристова // Вестник Технологического университета. – 2018. – Т. 21.– № 10. – С. 83-87.

67. Голованчиков, А. Б. Моделирование химического реактора с диффузионной структурой потока для реакции II порядка и градиентными граничными условиями / А. Б. Голованчиков, Ю. В. Аристова // Вестник Технологического университета. – 2018. – Т. 21. – № 11. – С. 143-145.

68. Doichinova, M. On the column apparatuses modeling / M. Doichinova, C. Boyadjiev // International journal of heat and mass transfer. – 2012. – Т. 55. – №. 23-24. – С. 6705-6715.

69. Boyadjiev, B. Computer modeling of column apparatuses: 1. Two-coordinate systems approach / B. Boyadjiev, M. Doichinova, C. Boyadjiev // Journal of Engineering Thermophysics. – 2015. – Т. 24. – №. 3. – С. 247-258.

70. Boyadjiev, B. New approach to modeling of industrial catalytic columns / B. Boyadjiev, C. Boyadjiev // Journal of Engineering Thermophysics. – 2018. – Т. 27. – №. 4. – С. 593-612.

71. Boyadjiev, B. New models of industrial column absorbers. 1. Co-current absorption processes / B. Boyadjiev, C. Boyadjiev // Bulg Chem Commun. – 2017. – Т. 49. – №. 3. – С. 711-719.

72. Натареев, С. В. Ионный обмен в аппарате кипящего слоя непрерывного действия / С.В. Натареев, А.А. Быков, Д.Е. Захаров, Т.Е. Никифорова // Известия высших учебных заведений. Химия и химическая технология. – 2017. – Т. 60. – №. 2. – С. 85-90.

73. Груздева, А.Н. О теоретическом описании процессов внутридиффузионной сорбции и десорбции в ионообменных сорбентах / А.Н. Груздева, Р.Х. Хамизов, П.П. Золотарев // Сорбц. и хроматограф. процессы. – 2008. – Т. 8. – Вып. 1. – С. 99-105.

74. Mukanova, B. Nonlinear Inverse Problem for an Ion-Exchange Filter Model: Numerical Recovery of Parameters / B. Mukanova, N. Glazyrina // Mathematical Problems in Engineering. – 2015. – Т. 2015. – №. 1. – С. 357829.

75. Натареев, С. В. Ионообменная очистка воды в аппарате с неподвижным плотным слоем природного сорбента / С. В. Натареев, Д. Е. Захаров, А. А. Рябиков // Современные наукоемкие технологии. Региональное приложение. – 2023. – №. 3 (75). – С. 77-83.

76. Dechapunya A. The simulation of multicomponent ion exchange in fixed-bed columns / A. Dechapunya – 1981.

77. Schwartz, F. W., Milne-Home W. A. Modeling mass transport with competitive ion exchange / F. W. Schwartz, W. A. Milne-Home // Proceedings of the NWWA Conference on Solving Ground Water Problems with Models. National Water Well Association, Dublin OH. – 1987. – C. 11-27.
78. Robinson, S. M. Mass-transfer mechanisms for zeolite ion exchange in wastewater treatment / S. M. Robinson, W. D. Arnold, C. H. Byers // AIChE journal. – 1994. – T. 40. – №. 12. – C. 2045-2054.
79. Hwang, S. J. Ion exchange in a semifluidized bed / S. J. Hwang, W. J. Lu // Industrial & engineering chemistry research. – 1995. – T. 34. – №. 4. – C. 1434-1439.
80. Juang, R. S. Removal of metal ions from the complexed solutions in fixed bed using a strong-acid ion exchange resin / R. S. Juang, S. H. Lin, T. Y. Wang // Chemosphere. – 2003. – T. 53. – №. 10. – C. 1221-1228.
81. Lu, J. G. Mathematical modeling of salt-gradient ion-exchange simulated moving bed chromatography for protein separations / J. G. Lu // Journal of Zhejiang University-SCIENCE A. – 2004. – T. 5. – №. 12. – C. 1613-1620.
82. Boyer, T. H. Modeling the removal of dissolved organic carbon by ion exchange in a completely mixed flow reactor / T. H. Boyer, C. T. Miller, P. C. Singer // Water research. – 2008. – T. 42. – №. 8-9. – C. 1897-1906.
83. Boyer, T. H. Advances in modeling completely mixed flow reactors for ion exchange / T. H. Boyer, C. T. Miller, P. C. Singer // Journal of Environmental Engineering. – 2010. – T. 136. – №. 10. – C. 1128-1138.
84. Vassilis, I. J. Ion exchange and adsorption fixed bed operations for wastewater treatment-Part I: modeling fundamentals and hydraulics analysis / I. J. Vassilis // Journal of Engineering Studies and Research. – 2010. – T. 16. – №. 3. – C. 29-41.
85. Shafeeyan, M. S. A review of mathematical modeling of fixed-bed columns for carbon dioxide adsorption / M. S. Shafeeyan, W. M. A. W. Daud, A. Shamiri // Chemical engineering research and design. – 2014. – T. 92. – №. 5. – C. 961-988.

86. Xu, Z. Mathematically modeling fixed-bed adsorption in aqueous systems / Z. Xu, J. Cai, B. Pan // *Journal of Zhejiang University SCIENCE A*. – 2013. – Т. 14. – № 3. – С. 155-176.

87. Kaczmarski, K. Modeling fixed-bed adsorption columns through orthogonal collocations on moving finite elements / K. Kaczmarski, M. Mazzotti, G. Storti, M. Morbidelli // *Computers & chemical engineering*. – 1997. – Т. 21. – №. 6. – С. 641-660.

88. Koh, J. H. Ion exchange of phenylalanine in fluidized/expanded beds / J. H. Koh, N. H. L. Wang, P. C. Wankat // *Industrial & engineering chemistry research*. – 1995. – Т. 34. – №. 8. – С. 2700-2711.

89. Блиничев, В. Н. Проблемы разработки энерго- и ресурсосберегающих процессов, реакторных систем и оборудования интенсивного действия, моделирования и оптимального управления / В. Н. Блиничев, А. Н. Лабутин, Г. А. Зуева [и др.] // *Известия высших учебных заведений. Серия: Химия и химическая технология*. – 2023. – Т. 66, № 7. – С. 185-202. – DOI 10.6060/ivkkt.20236607.6845j.

90. Menoud, P. Modelling of heavy metals adsorption to a chelating resin in a fluidized bed reactor / P. Menoud, L. Cavin, A. Renken // *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*. – 1998. – Т. 37. – №. 1. – С. 89-101.

91. Дубкова, Е. А. Математическое описание процесса ионообменного извлечения тяжелых металлов на природном и синтетическом сорбентах / Е. А. Дубкова, С. В. Натарева, Т. Е. Никифорова, И. С. Харченко // *Известия высших учебных заведений. Серия: Химия и химическая технология*. – 2013. – Т. 56. – № 11. – С. 124-127.

92. Rivero, M. J. Modelling of Cr (VI) removal from polluted groundwaters by ion exchange / M. J. Rivero, O. Primo, M. I. Ortiz // *Journal of Chemical Technology & Biotechnology: International Research in Process, Environmental & Clean Technology*. – 2004. – Т. 79. – №. 8. – С. 822-829.

93. Fatemi, S. Ion exchange column performance model for separation of Zr (IV) and Hf (IV) in elution process / S. Fatemi, H. Feizy Zarnagh, M. Kalantari, Z. Salehi //

Iranian Journal of Chemistry and Chemical Engineering. – 2007. – Т. 26. – №. 3. – С. 61-71.

94. Aribike, D. S. Modeling of fixed bed adsorption of phenols on granular activated carbon / D. S. Aribike, O. A. Olafadehan // Theoretical Foundations of Chemical Engineering. – 2008. – Т. 42. – №. 3. – С. 257-263.

95. Лапшин, Н. А. Переходные процессы ионообменной сорбции в непрерывно действующем ёмкостном аппарате / Н. А. Лапшин, С. В. Натарева // Приоритетные направления инновационной деятельности в промышленности : Сборник научных статей по итогам одиннадцатой международной научной конференции, Казань, 29–30 ноября 2020 года. Том Часть 1. – Казань: Общество с ограниченной ответственностью "КОНВЕРТ", 2020. – С. 151-153.

96. Лапшин, Н. А. Переходный режим работы ионообменного емкостного аппарата непрерывного действия / Н. А. Лапшин, Т. А. Николаева, С. В. Натарева // Современные наукоемкие технологии. Региональное приложение. – 2021. – № 2(66). – С. 76-83. – DOI 10.6060/snt.20216602.00010.

97. Lizarralde, I. Development and calibration of a new mathematical model for the description of an ion-exchange process for ammonia removal in the presence of competing ions / I. Lizarralde, S. Guida, J. Canellas, B. Jefferson, P. Grau, A. Soares // Water Research. – 2021. – Т. 206. – С. 117779.

98. Голованчиков, А. Б. Моделирование ионообмена в аппарате непрерывного действия с диффузионной структурой потока по жидкости / А. Б. Голованчиков, О. А. Залипаева, Н. А. Меренцов, А. А. Коберник // Экологические системы и приборы. – 2015. – № 10. – С. 15-23.

99. Голованчиков, А. Б. Моделирование и алгоритм расчета ионообменной колонны с диффузионной структурой потока по жидкой фазе / А. Б. Голованчиков, А. А. Коберник, О. А. Залипаева, Н. А. Меренцов // Известия Волгоградского государственного технического университета. – 2015. – №. 1. – С. 43-46.

100. Голованчиков, А. Б. Ионообмен в аппарате непрерывного действия с диффузионной структурой потока по жидкости / А. Б. Голованчиков, А. А.

Коберник, О. А. Залипаева, Н. А. Меренцов // Известия Волгоградского государственного технического университета. – 2015. – № 1(154). – С. 39-43.

101. Голованчиков, А. Б. Влияние диффузионной структуры потока по жидкой фазе на ионообмен в противоточном аппарате непрерывного действия / А. Б. Голованчиков, О. А. Залипаева, Н. А. Меренцов, А. А. Коберник // Водоснабжение и санитарная техника. – 2016. – № 3. – С. 57-63.

102. Gomes, C. P. Gold recovery with ion exchange used resins / C. P. Gomes, M. F. Almeida, J. M. Loureiro // Separation and Purification Technology. – 2001. – Т. 24. – №. 1-2. – С. 35-57.

103. Zhang, J. Development and validation of a novel modeling framework integrating ion exchange and resin regeneration for water treatment / J. Zhang, A. Amini, J.A. O'Neal, T.H. Boyer, Q. Zhang // Water research. – 2015. – Т. 84. – С. 255-265.

104. Kabuba, J. Comparison between Neural Network Technique and Mathematical Modelling for Ion-Exchange Process / J. Kabuba // Proceedings of the World Congress on Engineering and Computer Science. – 2016. – Т. 2.

105. Dixon, A. G. Correlations for wall and particle shape effects on fixed bed bulk voidage / A. G. Dixon // The Canadian Journal of Chemical Engineering. – 1988. – Т. 66. – №. 5. – С. 705-708.

106. Leva M. Pressure drop through packed tubes. III. Prediction of voids in packed tubes / M. Leva // Chem. Eng. Prog. – 1947. – Т. 43. – С. 713-718.

107. Giese, M. Measured and modeled superficial flow profiles in packed beds with liquid flow / M. Giese, K. Rottschäfer, D. Vortmeyer // American Institute of Chemical Engineers. AIChE Journal. – 1998. – Т. 44. – №. 2. – С. 484.

108. Seymour, J. D. Generalized approach to NMR analysis of flow and dispersion in porous media / J. D. Seymour, P. T. Callaghan // AIChE Journal. – 1997. – Т. 43. – № 8. – С. 2096-2111.

109. Beguin, R. Pore-scale flow measurements at the interface between a sandy layer and a model porous medium: Application to statistical modeling of contact erosion

/ R. Beguin, P. Philippe, Y. H. Faure // Journal of Hydraulic Engineering. – 2013. – Т. 139. – №. 1. – С. 1-11.

110. Bigillon, F. Measurements of turbulence characteristics in an open-channel flow over a transitionally-rough bed using particle image velocimetry / F. Bigillon, Y. Nino, M. H. Garcia // Experiments in Fluids. – 2006. – Т. 41. – С. 857-867.

111. Rashidi, M. 3-D microscopic measurement and analysis of chemical flow and transport in porous media / M Rashidi, A Tompson, T Kulp, L Peurrung // Journal of fluids engineering. – 1996. – Т. 118. – № 3. – С. 470-480.

112. Бобков, С. П. Особенности использования систем клеточных автоматов при моделировании основных процессов переноса / С. П. Бобков, И. А. Астраханцева // Современные наукоемкие технологии. Региональное приложение. – 2023. – №2 (74). – С. 49-59.

113. Бобков, С. П. Исследование структуры потоков в технологических аппаратах с использованием дискретных динамических моделей / С. П. Бобков, Р. Г. Астраханцев, Е. А. Павлова // Современные наукоемкие технологии. Региональное приложение. – 2024. – № 1(77). – С. 95-101.

114. Nijemeisland, M. CFD study of fluid flow and wall heat transfer in a fixed bed of spheres / M. Nijemeisland, A. G. Dixon // AIChE journal. – 2004. – Т. 50. – №. 5. – С. 906-921.

115. Allen, K. G. Packed bed pressure drop dependence on particle shape, size distribution, packing arrangement and roughness / K. G. Allen, T. W. Von Backström, D. G. Kröger // Powder technology. – 2013. – Т. 246. – С. 590-600.

116. Dixon, A. G. Packed tubular reactor modeling and catalyst design using computational fluid dynamics / A. G. Dixon, M. Nijemeisland, E. H. Stitt // Advances in Chemical Engineering. – 2006. – Т. 31. – С. 307-389.

117. Jurtz, N. Advances in fixed-bed reactor modeling using particle-resolved computational fluid dynamics (CFD) / N. Jurtz, M. Kraume, G. D. Wehinger // Reviews in Chemical Engineering. – 2019. – Т. 35. – №. 2. – С. 139-190.

118. Jakobsen, H. A. A numerical study of the interactions between viscous flow, transport and kinetics in fixed bed reactors / H. A. Jakobsen, H. Lindborg, V. Handeland // *Computers & chemical engineering*. – 2002. – T. 26. – №. 3. – C. 333-357

119. Wu, C. Y. Investigating the advantages and disadvantages of realistic approach and porous approach for closely packed pebbles in CFD simulation / C.Y. Wu, Y.M. Ferng, C.C. Chieng, C.C. Liu // *Nuclear Engineering and design*. – 2010. – T. 240. – №. 5. – C. 1151-1159.

120. Gao, X. CFD modeling of gas flow in porous medium and catalytic coupling reaction from carbon monoxide to diethyl oxalate in fixed-bed reactors / X. Gao, Y. P. Zhu, Z. Luo // *Chemical Engineering Science*. – 2011. – T. 66. – №. 23. – C. 6028-6038.

121. Zhuang, Y. Q. et al. CFD modeling of methanol to olefins process in a fixed-bed reactor / Y.Q. Zhuang, X. Gao, Y. Zhu, Z. Luo // *Powder technology*. – 2012. – T. 221. – C. 419-430.

122. Dixon, A. G. Computational fluid dynamics for fixed bed reactor design / A. G. Dixon, B. Partopour // *Annual review of chemical and biomolecular engineering*. – 2020. – T. 11. – №. 1. – C. 109-130.

123. Reddy, R. K. CFD modeling of pressure drop and drag coefficient in fixed and expanded beds / R. K. Reddy, J. B. Joshi // *Chemical engineering research and design*. – 2008. – T. 86. – №. 5. – C. 444-453.

124. Li, Y. DEM-CFD modeling and simulations of hydrodynamic characteristics and flow resistance coefficient in fixed-bed reactors / Y. Li, G. He, B. Yu, S. Yan, L. Xie // *Chemical Engineering Journal Advances*. – 2021. – T. 8. – C. 100167.

125. Dixon A. G. Particle-resolved CFD simulation of fixed bed pressure drop at moderate to high Reynolds number / A. G. Dixon // *Powder Technology*. – 2021. – T. 385. – C. 69-82.

126. Guardo, A. Influence of the turbulence model in CFD modeling of wall-to-fluid heat transfer in packed beds / A. Guardo, M. Coussirat, M. A. Larrayoz, F. Recasens, E. Egusquiza // *Chemical Engineering Science*. – 2005. – T. 60. – №. 6. – C. 1733-1742.

127. Jurtz, N. Validation of pressure drop prediction and bed generation of fixed-beds with complex particle shapes using discrete element method and computational fluid dynamics / N. Jurtz, G. D. Wehinger, U. Srivastava, T. Henkel, M. Kraume // *AIChE Journal*. – 2020. – T. 66. – №. 6. – C. 16967.

128. Dixon, A. G. CFD as a design tool for fixed-bed reactors / A. G. Dixon, M. Nijemeisland // *Industrial & Engineering Chemistry Research*. – 2001. – T. 40. – №. 23. – C. 5246-5254

129. Calis, H. P. A. CFD modelling and experimental validation of pressure drop and flow profile in a novel structured catalytic reactor packing / H. P. A. Calis, J. P. B. C. Nijenhuis, B. C. Paikert, F. M. Dautzenberg, C. M. Van Den Bleek // *Chemical Engineering Science*. – 2001. – T. 56. – №. 4. – C. 1713-1720.

130. Dixon, A. G. Systematic mesh development for 3D CFD simulation of fixed beds: Contact points study / A. G. Dixon, M. Nijemeisland, E. H. Stitt // *Computers & Chemical Engineering*. – 2013. – T. 48. – C. 135-153

131. Guardo, A. CFD flow and heat transfer in nonregular packings for fixed bed equipment design / A. Guardo, M. Coussirat, M. A. Larrayoz, F. Recasens, E. Egusquiza // *Industrial & Engineering Chemistry Research*. – 2004. – T. 43. – №. 22. – C. 7049-7056.

132. Ookawara, S. High-fidelity DEM-CFD modeling of packed bed reactors for process intensification / S. Ookawara, M. Kuroki, D. Street, K. Ogawa // *Proceedings of European Congress of Chemical Engineering (ECCE-6), Copenhagen*. – 2007. – C. 16-20.

133. Eppinger, T. A generalized contact modification for fixed-bed reactor CFD simulations / T. Eppinger, G. D. Wehinger // *Chemie Ingenieur Technik*. – 2021. – T. 93. – №. 1-2. – C. 143-153.

134. Peskin, C. S. The immersed boundary method / C. S. Peskin // *Acta numerica*. – 2002. – T. 11. – C. 479-517.

135. Mittal, R. Immersed boundary methods / R. Mittal, G. Iaccarino // *Annu. Rev. Fluid Mech.* – 2005. – T. 37. – №. 1. – C. 239-261.

136. Yuan, B. Particle-resolved simulation of packed beds by non-body conforming locally refined orthogonal hexahedral mesh / B. Yuan, J. Xu, Z. Mao, Y. Zhang, C. Yang // Chinese Journal of Chemical Engineering. – 2019. – T. 27. – №. 11. – C. 2635-2642.

137. Liu, S. Porous-media model based particle-resolved simulation of a fixed bed with olefin catalytic cracking reaction / S. Liu, F. Xu, B. Lu, W. Wang, Z. Liu, Y. Wang // Powder Technology. – 2024. – T. 431. – C. 119099.

138. Abiodun, O. I. State-of-the-art in artificial neural network applications: A survey / O. I. Abiodun, A. Jantan, A. E. Omolara, K. V. Dada, N. A. Mohamed, H. Arshad // Heliyon. – 2018. – T. 4. – №. 11.

139. Dastres, R., Soori M. Artificial neural network systems / R. Dastres, M. Soori // International Journal of Imaging and Robotics (IJIR). – 2021. – T. 21. – №. 2. – C. 13-25.

140. Madhiarasan, M. Analysis of artificial neural network: architecture, types, and forecasting applications / M. Madhiarasan, M. Louzazni // Journal of Electrical and Computer Engineering. – 2022. – T. 2022. – №. 1. – C. 5416722.

141. Zulkifli, S. N. Artificial Neural Network-Based Prediction of Water Quality for Pollution Assessment in Freshwater Ecosystems / S. N. Zulkifli, H. A. Rahim, N. A. S. Noramli, M. S. M. Ali, R. A. Rahim, I. Amirullah // Water, Air, & Soil Pollution. – 2026. – T. 237. – №. 9. – C. 522.

142. Palabıyık, S. Evaluation of water quality based on artificial intelligence: performance of multilayer perceptron neural networks and multiple linear regression versus water quality indexes / S. Palabıyık, T. Akkan // Environment, Development and Sustainability. – 2024. – C. 1-24.

143. A. Helaly, M. Advancements in water quality prediction: a practical review of machine learning and deep learning approaches / M. A. Helaly, S. Rady, M. Mabrouk, , M. M. Aref, S. Villarroya, J. M. Cotos, D. Mera // Cluster Computing. – 2025. – T. 28. – №. 9. – C. 598.

144. Beloev, H. I. Prediction of Pipe Failure Rate in Heating Networks Using Machine Learning Methods / H. I. Beloev, S. R. Saitov, A. A. Filimonova, N. D. Chichirova, O. E. Babikov, I. K. Iliev // *Energies*. – 2024. – Т. 17. – №. 14. – С. 3511.

145. Saitov, S. R. Forecasting Peak Hours for Energy Consumption in Regional Power Systems / S. R. Saitov, N. D. Chichirova, A. A. Filimonova, N. B. Karnitsky // *ENERGETIKA. Proceedings of CIS higher education institutions and power engineering associations*. – 2024. – Т. 67. – №. 1. – С. 78-91.

146. Al-Ghazawi, Z. Use of artificial neural network for predicting effluent quality parameters and enabling wastewater reuse for climate change resilience—A case from Jordan / Z. Al-Ghazawi, R. Alawneh // *Journal of Water Process Engineering*. – 2021. – Т. 44. – С. 102423.

147. Jawad, J. Artificial neural network modeling of wastewater treatment and desalination using membrane processes: A review / J. Jawad, A. H. Hawari, S. J. Zaidi // *Chemical Engineering Journal*. – 2021. – Т. 419. – С. 129540.

148. Ibrahim, M. Artificial neural network modeling for the prediction, estimation, and treatment of diverse wastewaters: A comprehensive review and future perspective / M. Ibrahim, A. Haider, J. W. Lim, B. Mainali, M. Aslam, M. Kumar, M. K. Shahid // *Chemosphere*. – 2024. – Т. 362. – С. 142860.

149. Lin S. et al. Coagulant dosage determination using deep learning-based graph attention multivariate time series forecasting model // *Water Research*. – 2023. – Т. 232. – С. 119665.

150. Kim, J. Deep learning-based coagulant dosage prediction for extreme events leveraging large-scale data / S. Lin, J. Kim, C. Hua, M.H. Park, S. Kang // *Journal of Water Process Engineering*. – 2024. – Т. 66. – С. 105934.

151. Баби́ков О.Е. Регенера́ция ионитного филь́тра / Баби́ков О.Е., Чичи́ров А.А., Чичи́рова Н.Д., Сайто́в С.Р., Филимо́нова А.А.// Програ́мма для ЭВМ но́мер регистра́ции №2026666104 Рос. Федера́ция. Зая́вка: №2026664637 от 05.05.2026. Дата публи́кации 28.05.2026.

152. Oca, L. Review and analysis of thermophysical properties of a sulfuric acid–water electrolyte / L. Oca, J. M. Campillo-Robles, M. M. Bou-Ali // *Journal of Chemical & Engineering Data*. – 2018. – Т. 63. – №. 9. – С. 3572-3583.

153. Павловский, Н. Н. Теория движения грунтовых вод под гидротехническими сооружениями и ее основные приложения / Н. Н. Павловский. – 1956, собр.соч. Т.2, –М.: Издательство АН СССР, –352 с.

154. Furnas, C. C. The relations between specific volume, voids, and size composition in Systems of Broken Solids of mixed sized, Department of Commerce, Bureau of Mines/ C. C. Furnas // *Reports of investigations*. – 1928. – С. 1-10.

155. Rehman, M. A comprehensive review: Applications of the Kozeny–Carman model in engineering with permeability dynamics / M. Rehman, M. B. Hafeez, M. Krawczuk // *Archives of Computational Methods in Engineering*. – 2024. – Т. 31. – № 7. – С. 3843-3855.

156. Liu, Y. A stochastic computational multi-layer perceptron with backward propagation / Y. Liu, S. Liu, Y. Wang, F. Lombardi, J. Han // *IEEE Transactions on Computers*. – 2018. – Т. 67. – №. 9. – С. 1273-1286.

157. Kramer, O. Scikit-Learn / O. Kramer// – Springer: New York, USA, – 2016. – С. 45–53.

158. Çetin, V. comprehensive review on data preprocessing techniques in data analysis / V. Çetin, O. Yıldız // *Pamukkale Üniversitesi Mühendislik Bilimleri Dergisi*. – 2022. – Т. 28. – №. 2. – С. 299-312.

159. Youn, Y. R. Optimization of model based on Relu activation function in MLP neural network model / Y. R. Youn, J. Hong // *The International Journal of Advanced Smart Convergence*. – 2024. – Т. 13. – №. 2. – С. 80-87.

160. Zhang, Z. Improved adam optimizer for deep neural networks / Z. Zhang // In *Proceedings of the 2018 IEEE/ACM 26th International Symposium on Quality of Service (IWQoS)*, Banff, AB, Canada. – 2018. С. 1-2.

161. Doan, C. D. Generalization for multilayer neural network bayesian regularization or early stopping / C. D. Doan, S. Liong // Proceedings of Asia Pacific association of hydrology and water resources 2nd conference. – 2004. – С. 5-8.

162. Zhang, L. Enhanced short-term load forecasting with hybrid machine learning models: CatBoost and XGBoost approaches / L. Zhang, D. Jánošík //Expert Systems with Applications. – 2024. – Т. 241. – С. 122686.

163. Hancock, J. T. CatBoost for big data: an interdisciplinary review: JT Hancock, TM Khoshgoftaar / J. T. Hancock, T. M. Khoshgoftaar //Journal of big data. – 2020. – Т. 7. – №. 1. – С. 94.

164. Филимонова, А. А. Научно-технологическое обеспечение ресурсосбережения системы водопользования для индустриально-энергетического комплекса Республики Татарстан : специальность 05.14.01 «Энергетические системы и комплексы» : диссертация на соискание ученой степени доктора технических наук / Филимонова Антонина Андреевна, – 2022. – 388 с.

ПРИЛОЖЕНИЯ

Приложение А. Создание и настройка CFD-модели в программном комплексе COMSOL Multiphysics

1. Запускаем программный комплекс COMSOL Multiphysics и создаем новую модель, выбирая Model Wizard (рисунок 1).

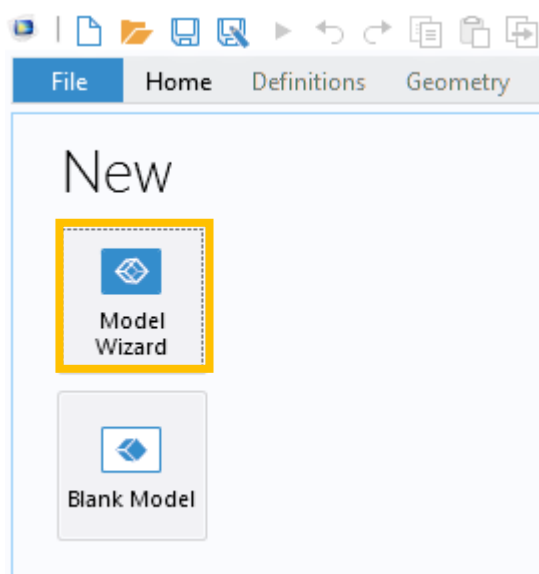


Рисунок 1. Запуск COMSOL Multiphysics

2. Далее выбираем 2D осесимметричную модель (рисунок 2).

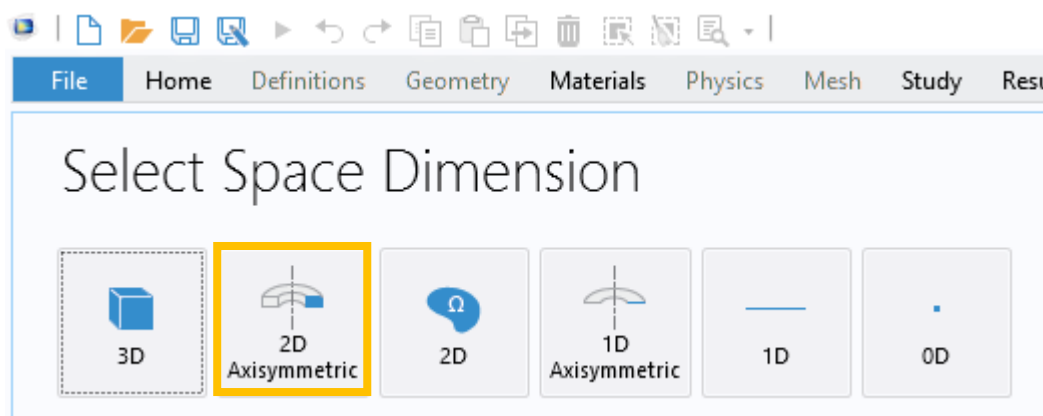


Рисунок 2. Выбор типа модели

3. Теперь необходимо выбрать и подключить для модели расчетные физические модули (Single-phase flow – Laminar Flow, и Chemical Species Transport – Transport of Concentrated Species) (рисунок 3).

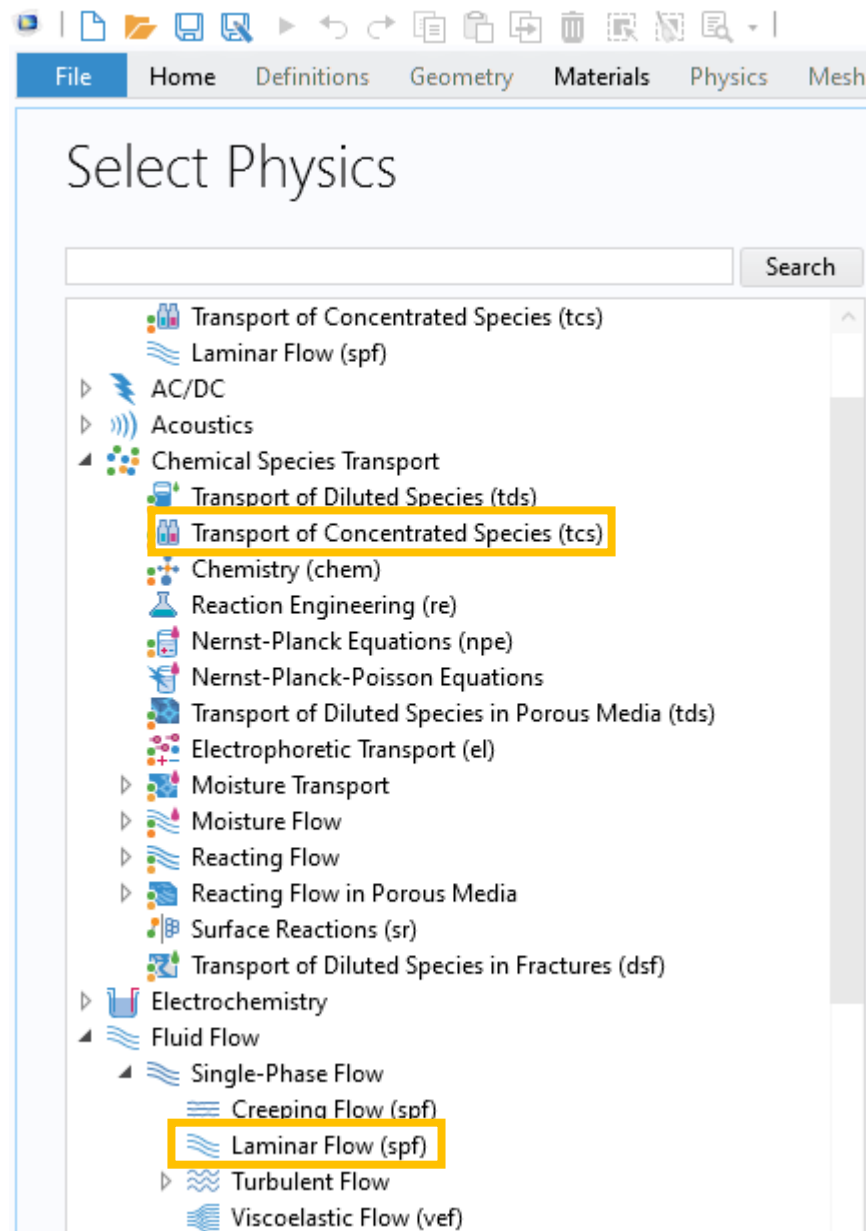


Рисунок 3. Подключаемые расчетные модули

4. Далее выбираем тип решателя – стационарный (рисунок 4) и нажимаем на кнопку Study.

5. Попадая в основное рабочее окно программы, после уточнения используемых единиц измерения, переходим к созданию геометрической модели, используя встроенные инструменты (рисунок 4).

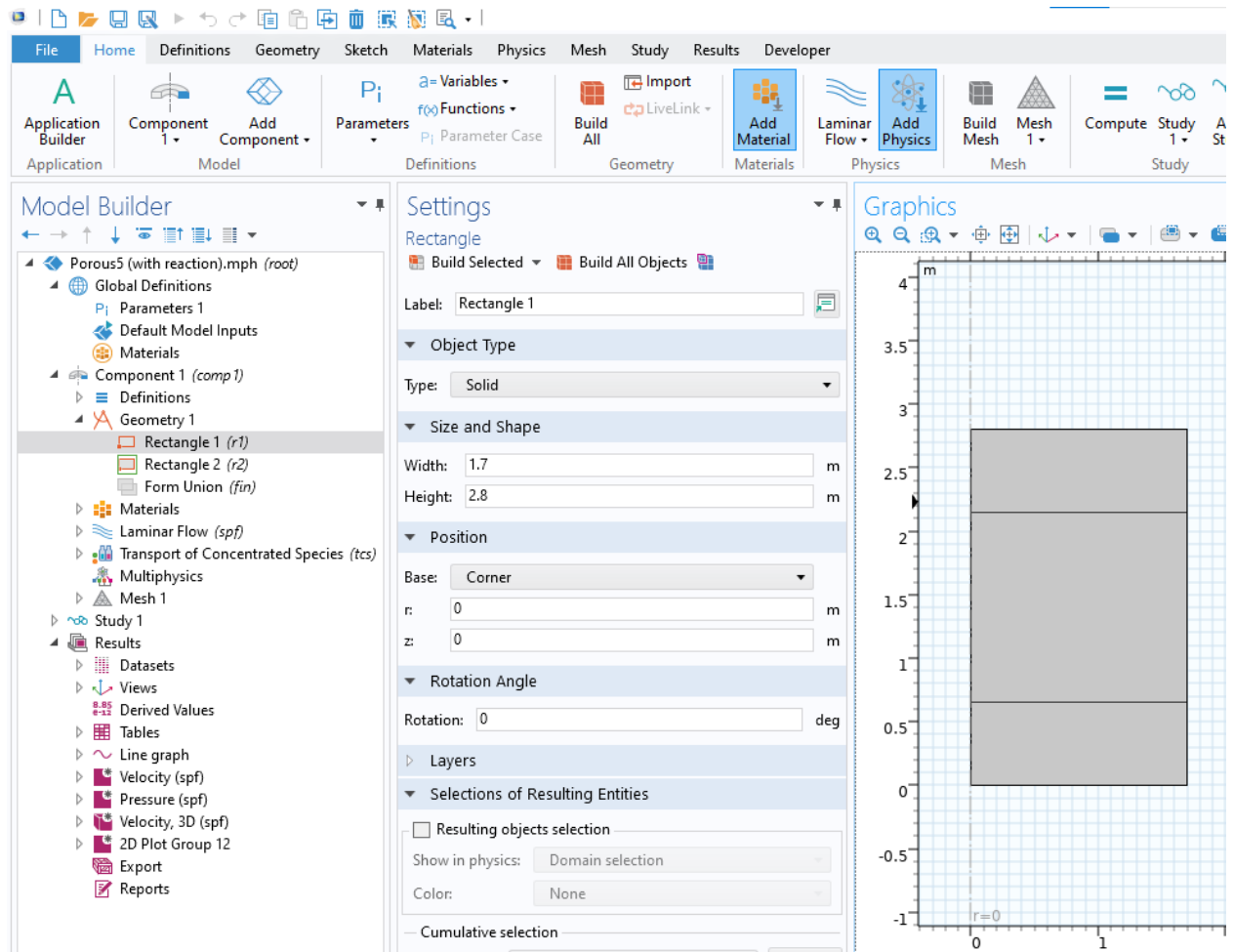


Рисунок 4. Определение геометрии модели

6. Далее из библиотеки материалов выбираем жидкость – water, liquid, и присваиваем данный материал для всей расчетной области.

7. Переходим к настройке гидродинамики потока (рисунок 5). Для потока выбираем параметр – несжимаемый поток (incompressible flow). Активируем область (домен), в которой будет располагаться пористая среда. Задаем референсные значения давления и температуры.

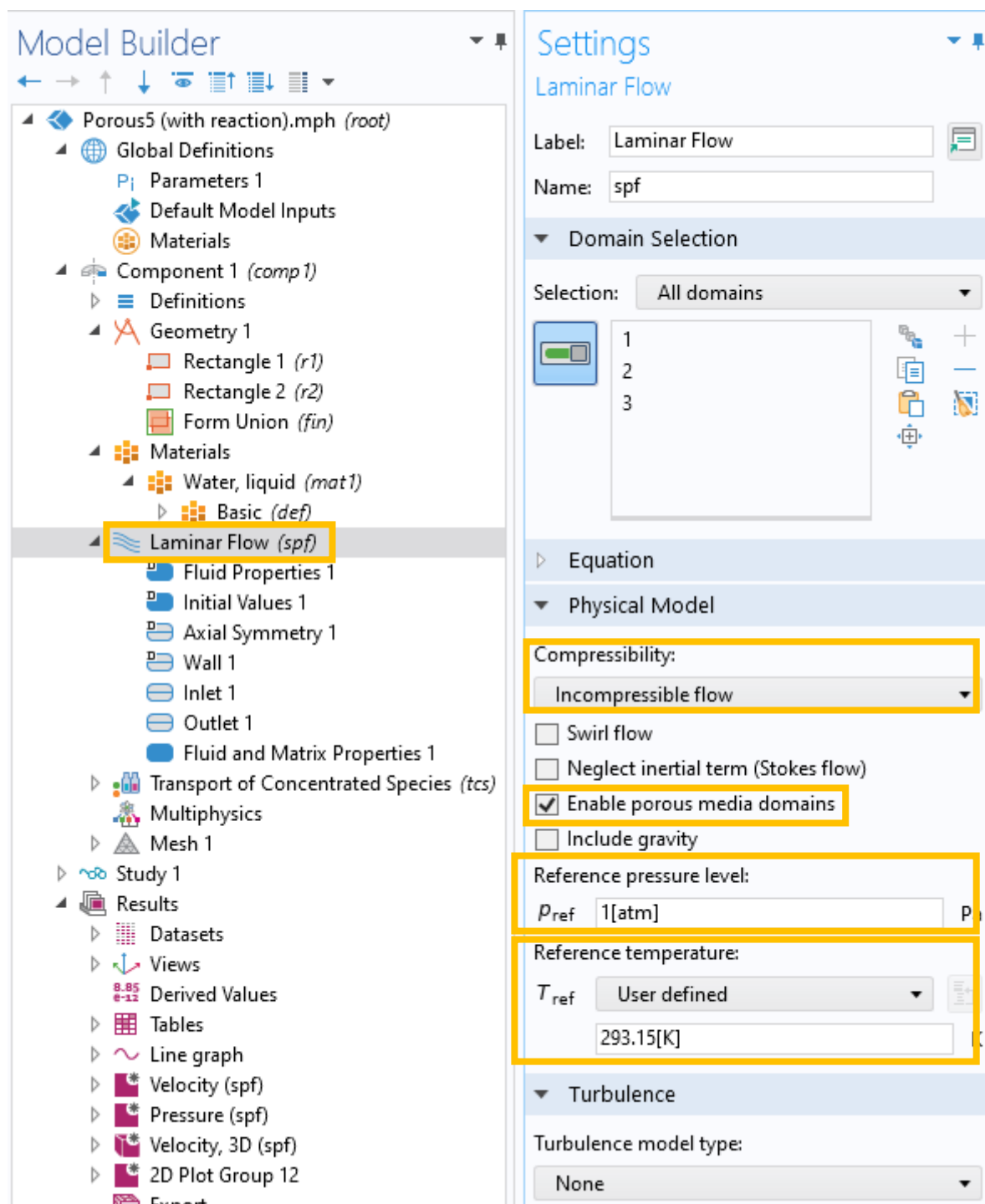


Рисунок 5. Настройка ламинарного потока

8. В параметре «Свойства жидкости» (Fluid properties) указываем значения плотности и динамической вязкости (рисунок 6). Температуру по всему фильтру будем считать постоянной.

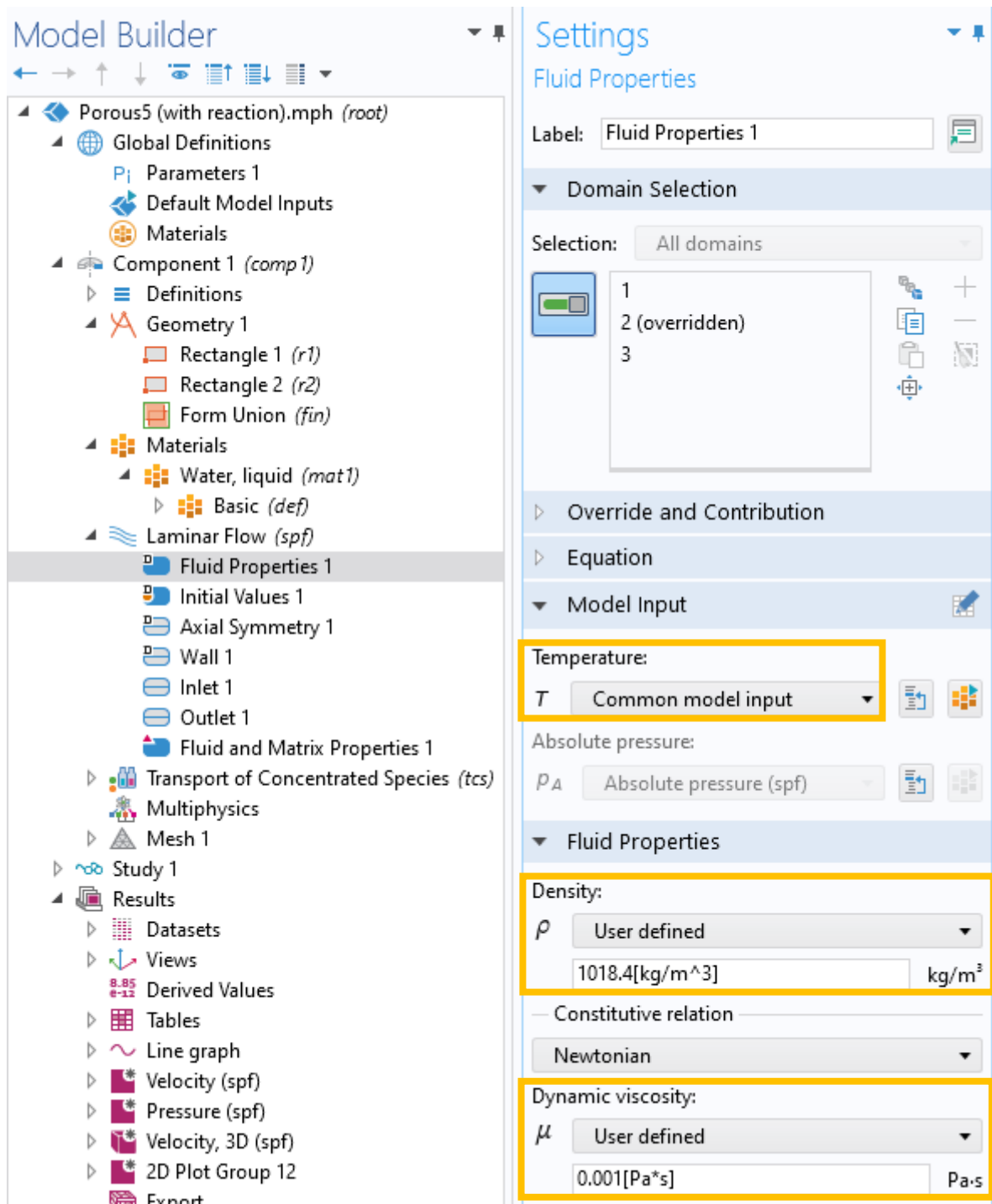


Рисунок 6. Настройка свойств жидкости

9. В параметрах «Исходные значения» (Initial Values) настройки оставляем по умолчанию. Далее в параметре «Осесимметричность» (Axial symmetry) выбираем левую боковую грань в качестве оси симметрии, относительно которой будет рассматриваться геометрия фильтра. У противоположной грани указываем условия для стенки без проскальзывания (Wall – no slip).

10. В качестве исходных данных на входе задаем скорость фильтрования (скорость Дарси) и выбираем верхнюю грань для определения входного потока жидкости (рисунок 7).

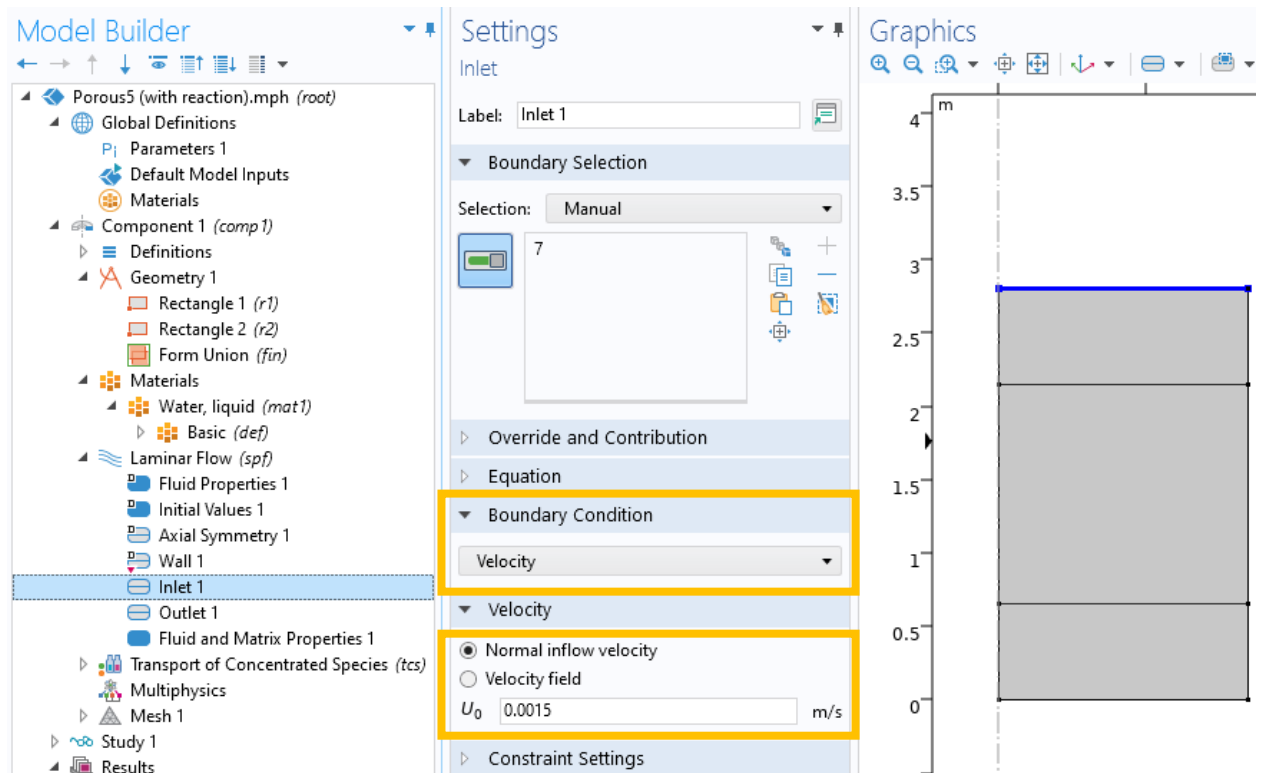


Рисунок 7. Исходные данные для потока

11. Для выходных граничных условий выбираем давление (pressure) и оставляем по умолчанию значение в 0 Па (рисунок 8).

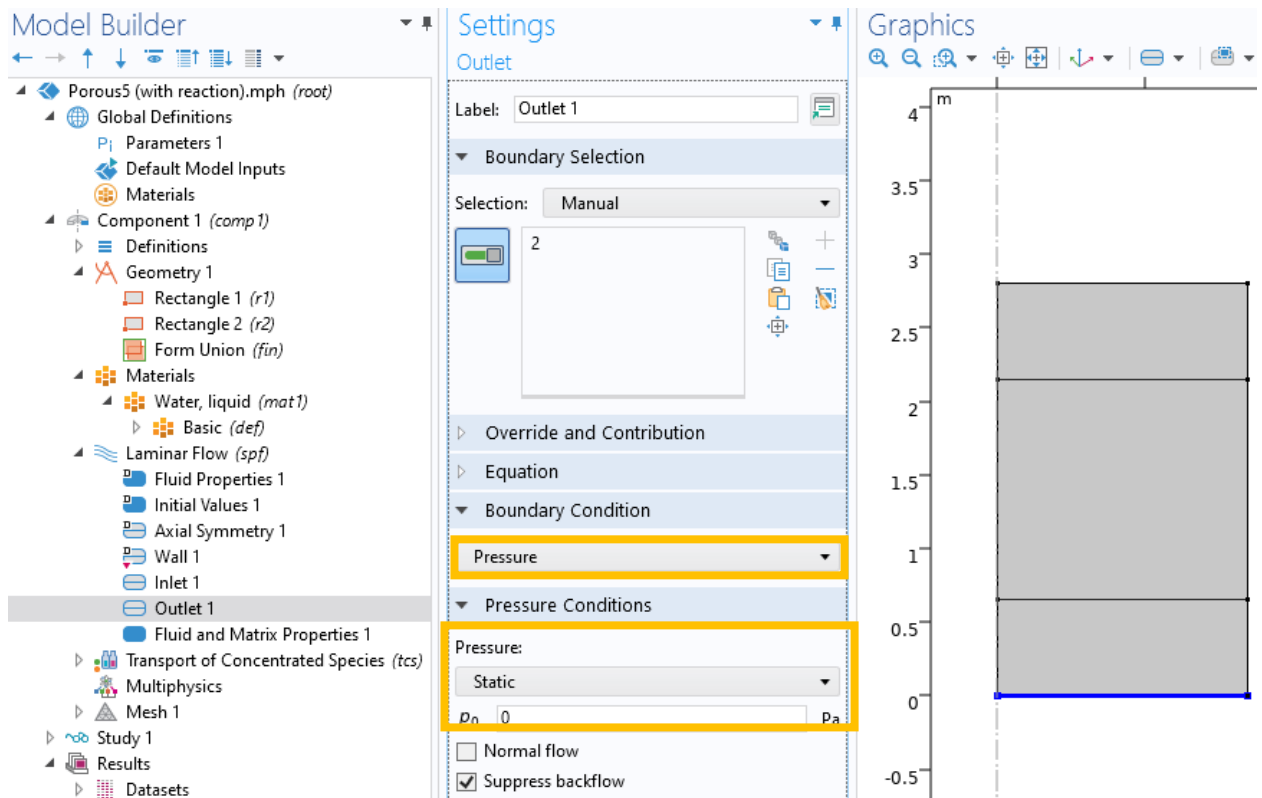


Рисунок 8. Граничные условия на выходе

12. В настройках пористой среды задаем значение пористости и проницаемости как показано на рисунке 9.

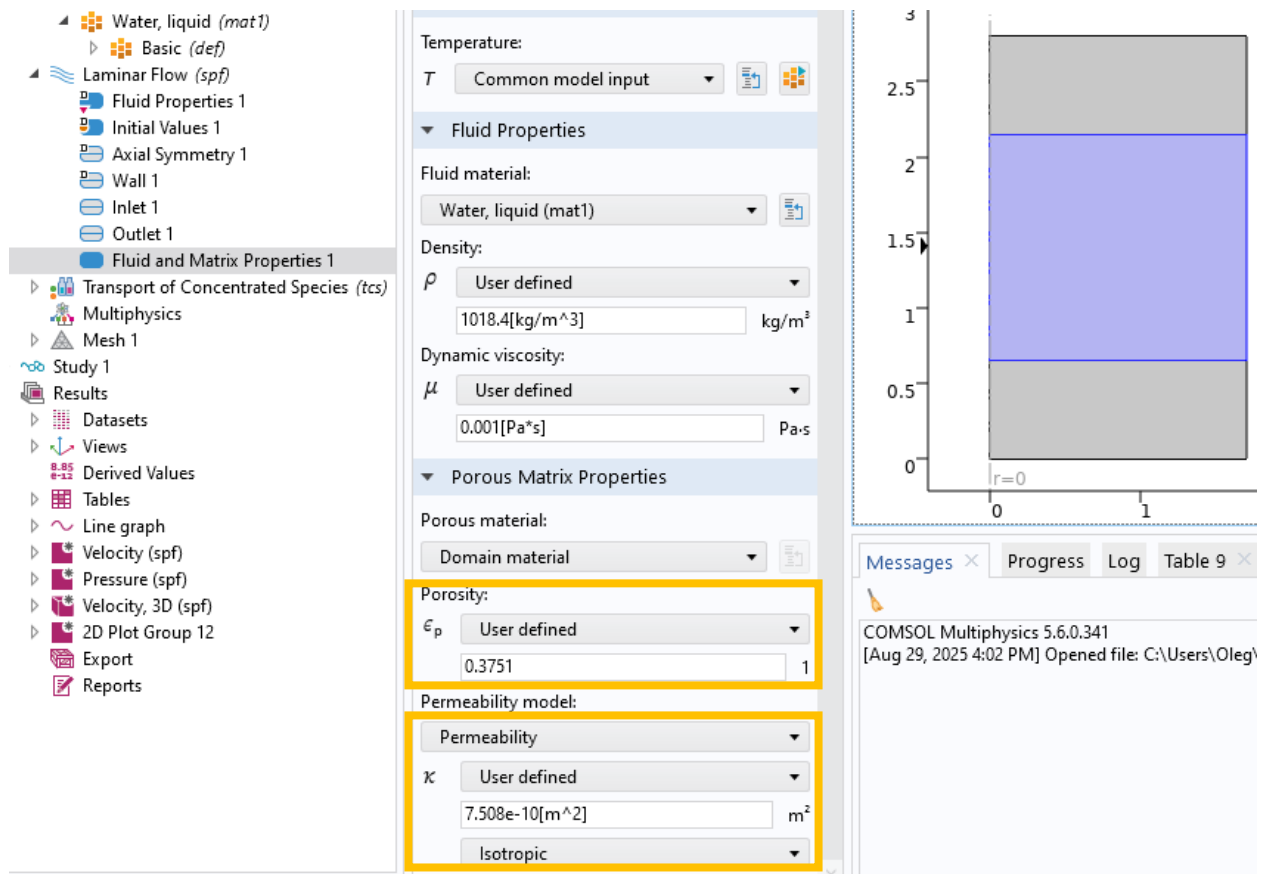


Рисунок 9. Настройка пористой среды

13. Переходим к настройке модуля, отвечающего за протекание химической реакции и массоперенос компонентов смеси (Transport of Concentrated Species). В исходном окне выбираем тип диффузионной модели – «Mixture-averaged», далее активируем массоперенос в пористой среде. В переменных (dependent variables) задаем число компонентов реакции, активируем параметры регуляризации. И выбираем в качестве основного компонента – H_2O (рисунок 10).

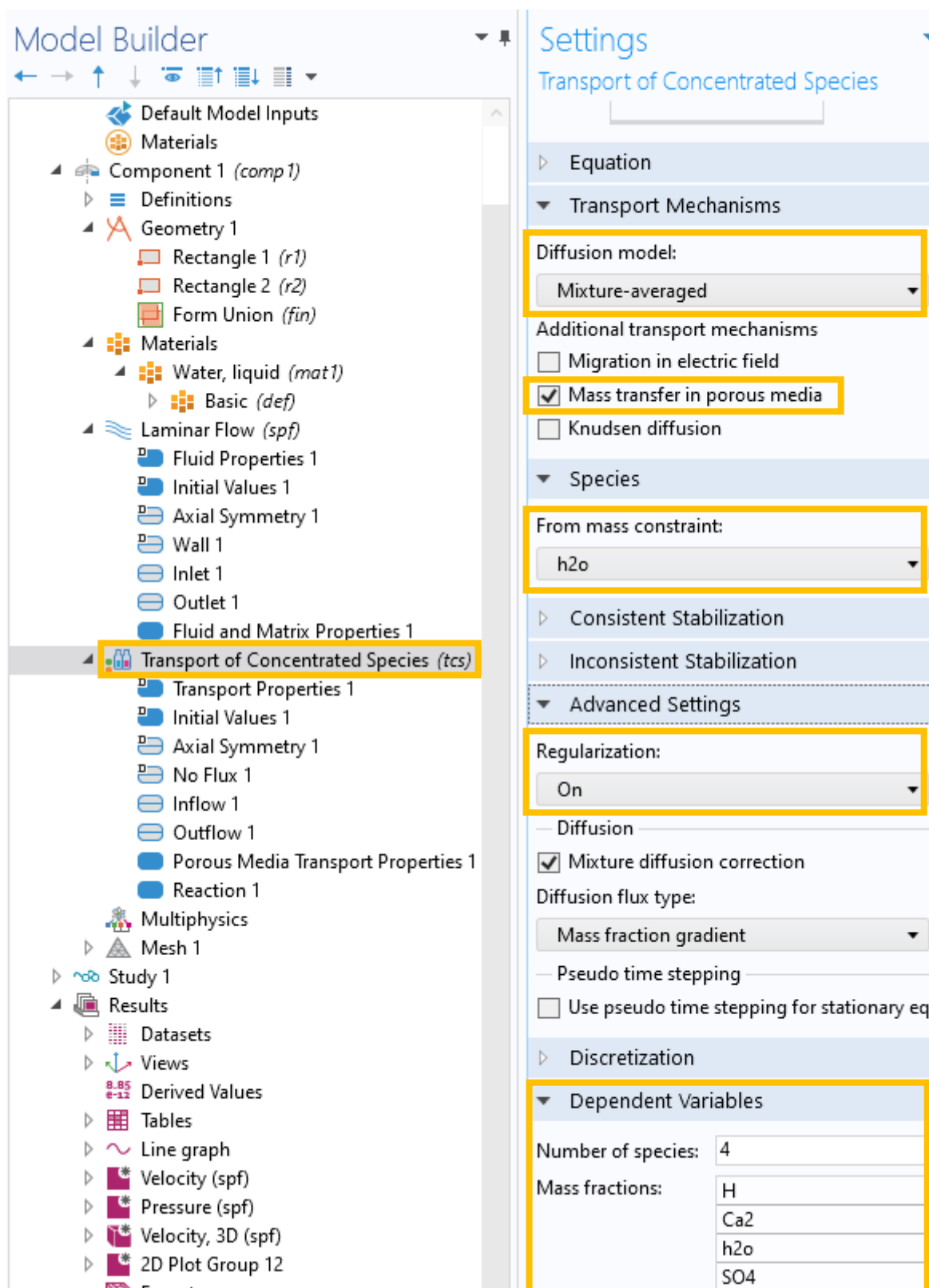


Рисунок 10. Настройка модуля «Transport of Concentrated Species»

14. В параметрах свойств массопереноса задаем плотность жидкости и молярные массы компонентов смеси, как показано на рисунке 11.

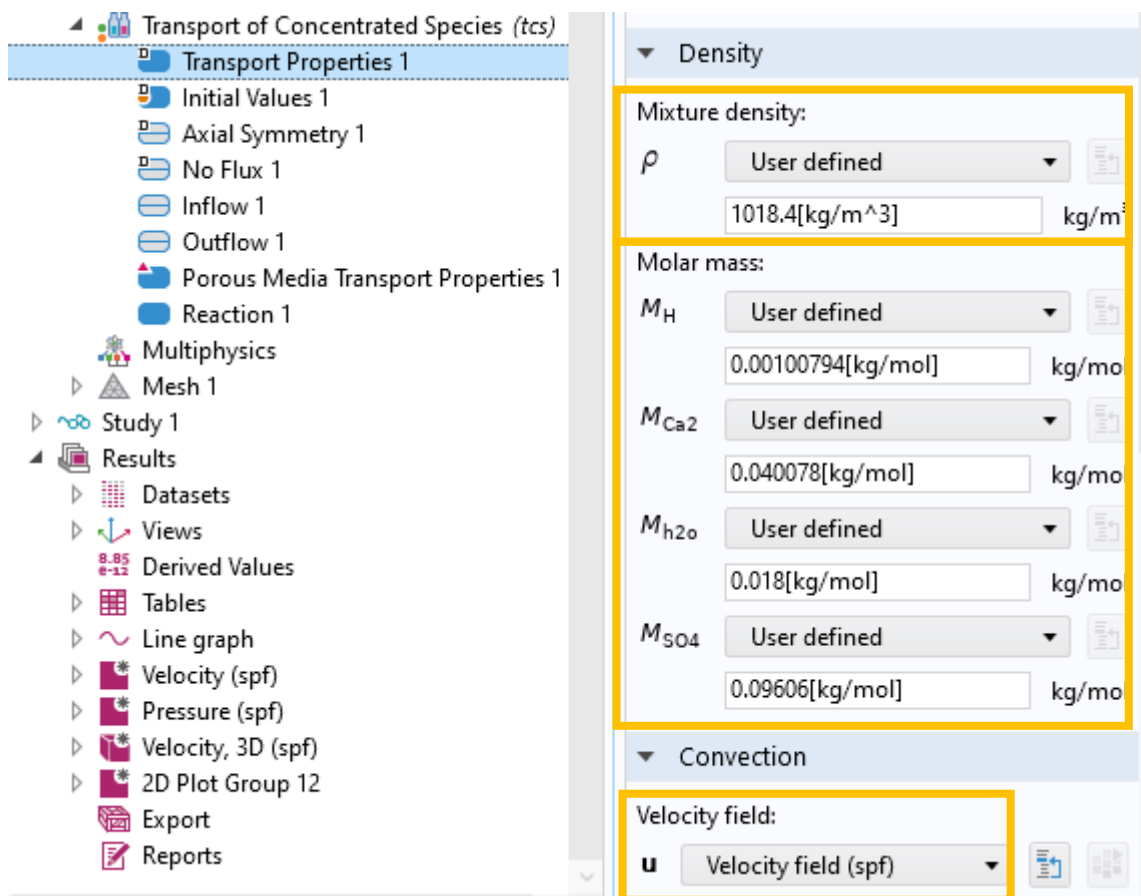


Рисунок 11. Настройка параметров массопереноса

15. В качестве исходных значений входящего в фильтр потока (Initial values и Inflow) задаем массовыми долями компонента за исключением H₂O (рисунок 12).

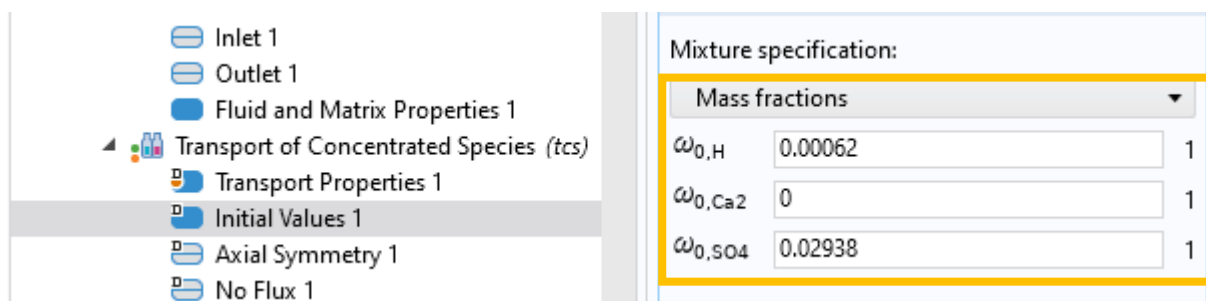


Рисунок 12. Настройка исходных параметров входящего потока

16. В параметрах пористой среды еще раз указываем плотность смеси, молярные массы компонентов и пористость слоя.

17. В настройках параметров протекания химической реакции задаемся стехиометрическими коэффициентами для компонентов реакции, а также задаем коэффициент скорости реакции, как показано на рисунке 13.

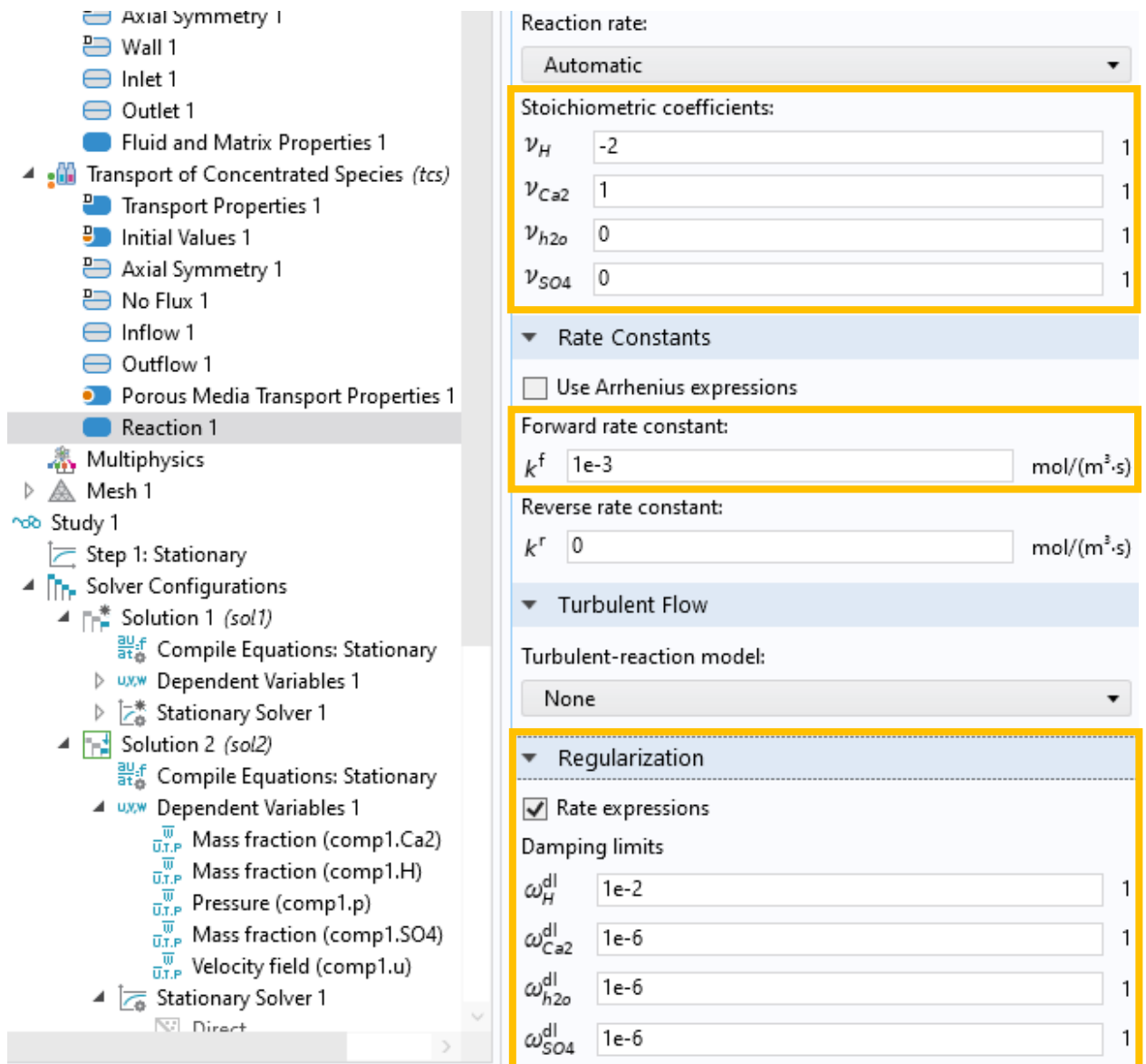


Рисунок 13. Настройка модуля химической реакции

18. После настройки расчетных модулей переходим к созданию сеточной модели. По результатам проведенного анализа сеточной сходимости были определены основные параметры сеточной модели, которые обеспечивают

необходимую точность решателя и устойчивость сходимости численного решения. Сетка также откалибрована для расчетов гидродинамики. Количество пограничных слоев со сгущением – 6. Параметры сетки и показатели качества сетки приведены на рисунке 14.

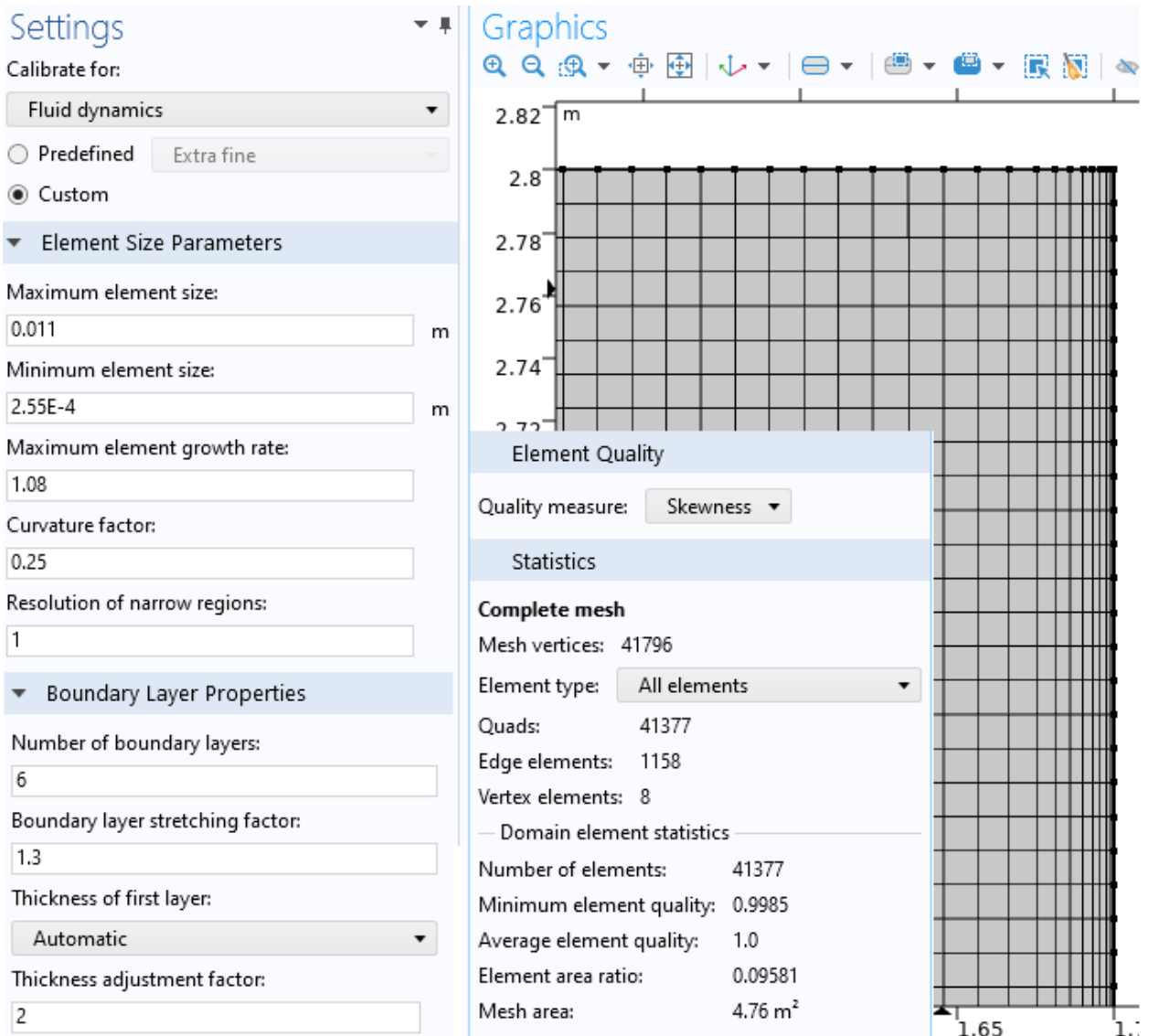


Рисунок 14. Настройки сеточной модели и качество сетки

19. В настройках решателя задаем относительную межитерационную погрешность (10^{-6}) и выбираем тип решателя – PARDISO. Остальные параметры оставляем по умолчанию (рисунок 15).

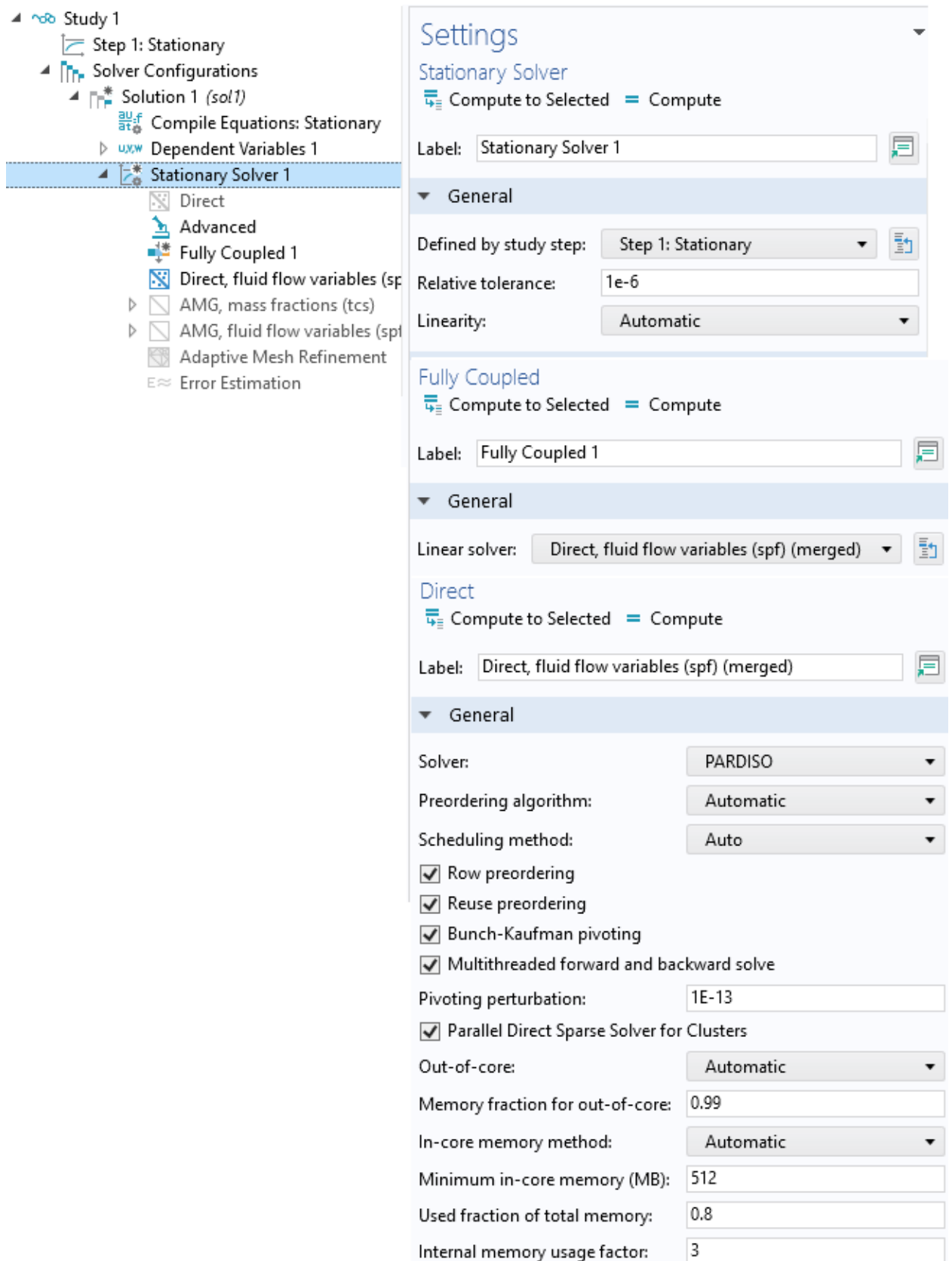


Рисунок 15. Настройки параметров решателя

Приложение Б. Программа разведывательного анализа данных

Листинг 1. Импорт используемых библиотек для Python

```
import numpy as np
import pandas as pd
import seaborn as sns
import xgboost
import catboost
import matplotlib.pyplot as plt
```

Листинг 2. Функция построения корреляционной матрицы

```
df_raw = pd.read_excel('for_analyses_kama.xlsx')
df = df_raw.copy()

def corr_matrix(df, target, method):

    df_corr = df.corr(method)
    df_corr.sort_values(by=target, axis='columns',
                        ascending=False, inplace=True, key=lambda col: abs(col))

    mask = np.triu(np.ones_like(df_corr, dtype=bool))

    fig, ax = plt.subplots(figsize=(11, 10))

    dict_method = {'pearson': 'Пирсона', 'kendall':
                  'Кенделла', 'spearman': 'Спирмана'}

    # Draw the heatmap with the mask and correct aspect ratio
    sns.heatmap(df_corr,
                annot=True,
                mask=mask,
                cmap=sns.color_palette("vlag",
                as_cmap=True),
                fmt=".2f",
```

```

vmax=1.0,
vmin=-1.0,
center=0,
square=True,
linewidths=1,
cbar_kws={"shrink": .8}).set(
title=f'Корреляционная матрица
{dict_method[method]} для исходных
признаков')

plt.tight_layout()
plt.savefig(f'pictures/full_corr_matrix_{target}_{
method}.png', dpi = 300, transparent = True)
plt.show()

```

Листинг 3. Функция оценки значимости признаков

```

def feature_importance_selector(X, y, engine='catboost'):

    if engine=='catboost':
        selector = catboost.CatBoostRegressor(silent=True)
    elif engine=='xgboost':
        selector = xgboost.XGBRegressor()

    selector.fit(X, y)

    feature_importances = pd.DataFrame({'importance' :
selector.feature_importances_, index=X.columns)
.sort_values (by='importance', ascending=False)

    if engine=='catboost':
        feature_importances.importance /= 100

    plt.rcParams['font.size'] = 16
    plt.figure(figsize=(12, 5))

```

```

    for bar in plt.bar(range(len(feature_importances.index))
,feature_importances.importance, align='center',
width=0.8):
        yval = bar.get_height()
        plt.text(bar.get_x() + bar.get_width()/2, yval,
            round(yval, 3), ha='center', va='bottom')

    plt.xticks(range(len(feature_importances.index)),
feature_importances.index, rotation=90)
    plt.ylim(0, (((feature_importances.importance.max()
*100 // 5) + 2) * 5) / 100)

    plt.ylabel('Feature weight')
    plt.title(f'Features importance for {y.name}',
        fontsize=16)
    plt.tight_layout()
plt.savefig(f'pictures/standard_feature_important_{y.name}
.png', dpi = 300, transparent = True)
    plt.show()

```

Приложение В. Программа для построения прогностических моделей работы ионитной ВПУ

Листинг 1. Предиктивная MLP модель

```

from sklearn.model_selection import train_test_split
from sklearn.preprocessing import StandardScaler
from sklearn.metrics import (
    r2_score,
    mean_squared_error,
    mean_absolute_error,
    mean_absolute_percentage_error )

def train_keras_selected_features(X, y, model_name='target',
epochs=140, batch_size=11):
    # split
    X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(
        X, y,
        test_size=0.25,
        random_state=42 )

    # reshape y
    y_train_2d = np.array(y_train).reshape(-1, 1)
    y_test_2d = np.array(y_test).reshape(-1, 1)

    # scaling
    scaler_X = StandardScaler()
    scaler_y = StandardScaler()

    X_train_scaled = scaler_X.fit_transform(X_train)
    X_test_scaled = scaler_X.transform(X_test)

    y_train_scaled = scaler_y.fit_transform(y_train_2d)
    y_test_scaled = scaler_y.transform(y_test_2d)

```

```

# model tuning
model = tf.keras.Sequential([
    tf.keras.Input(shape=(X_train_scaled.shape[1],)),
    tf.keras.layers.Dense(12, activation='relu'),
    tf.keras.layers.Dense(6, activation='relu'),
    tf.keras.layers.Dense(4, activation='relu'),
    tf.keras.layers.Dense(1) ])

model.compile(
    optimizer='adam',
    loss='mean_squared_error',
    metrics=['mae', 'mape'])

early_stop = tf.keras.callbacks.EarlyStopping(
    monitor='val_loss',
    patience=15,
    restore_best_weights=True)

history = model.fit(
    X_train_scaled,
    y_train_scaled,
    validation_data=(X_test_scaled, y_test_scaled),
    epochs=epochs,
    batch_size=batch_size,
    callbacks=[early_stop],
    verbose=0)

# prediction
y_pred_scaled = model.predict(X_test_scaled, verbose=0)
y_pred = scaler_y.inverse_transform(y_pred_scaled).flatten()
y_test_real = y_test_2d.flatten()

# metrics
r2 = r2_score(y_test_real, y_pred)

```

```

mse = mean_squared_error(y_test_real, y_pred)
rmse = np.sqrt(mse)
mae = mean_absolute_error(y_test_real, y_pred)
mape = mean_absolute_percentage_error(y_test_real, y_pred)

print(f'=== Результаты для {model_name} ===')
print(f'R2      : {r2:.4f}')
print(f'MSE     : {mse:.4f}')
print(f'RMSE    : {rmse:.4f}')
print(f'MAE     : {mae:.4f}')
print(f'MAPE    : {mape:.4f}')
print()

return {
    'model': model,
    'history': history,
    'scaler_X': scaler_X,
    'scaler_y': scaler_y,
    'X_train': X_train,
    'X_test': X_test,
    'y_train': y_train,
    'y_test': y_test,
    'y_pred': y_pred,
    'metrics': {
        'R2': r2,
        'MSE': mse,
        'RMSE': rmse,
        'MAE': mae,
        'MAPE': mape }}

```

Листинг 2. Расчет метрик MLP модели для фильтроцикла

```

features_F_keras = ['Ca2', 'hardness', 'Mg2_max', 'total_sal',
'SiO2', 'Na_K_max', 'Fe_total', 'PO', 'Alkal', 'Cl' ]
target_F = df_raw['F_cycle']

```

```

result_F_keras_sel = train_keras_selected_features(
    df[features_F_keras],
    target_F,
    model_name='F_cycle')

```

Листинг 3. Прогноз по MLP модели для фильтроцикла

```

test_idx_F_keras = result_F_keras_sel['X_test'].index[0]

example_test_F_keras =
result_F_keras_sel['X_test'].loc[[test_idx_F_keras]]
example_test_F_scaled =
result_F_keras_sel['scaler_X'].transform(example_test_F_keras)

pred_test_F_scaled =
result_F_keras_sel['model'].predict(example_test_F_scaled, verbose=0)
pred_test_F =
result_F_keras_sel['scaler_y'].inverse_transform(pred_test_F_scaled)
[0, 0]

fact_test_F = result_F_keras_sel['y_test'].loc[test_idx_F_keras]

comparison_test_F_keras = pd.DataFrame({
    'Target': ['F_cycle'],
    'Index_in_test': [test_idx_F_keras],
    'Fact': [fact_test_F],
    'Prediction': [pred_test_F],
    'Absolute_error': [abs(pred_test_F - fact_test_F)],
    'Relative_error_%': [abs(pred_test_F - fact_test_F) /
abs(fact_test_F) * 100]
})

print("Keras: сравнение для строки из тестовой выборки (F_cycle)
")

display(comparison_test_F_keras.round(4))

```

Листинг 4. Прогноз по MLP модели для фильтроцикла по данным исходной ВОДЫ

```

manual_example_F_keras = pd.DataFrame({
    'Ca2': [20.25],
    'hardness': [1.24],
    'Mg2_max': [2.5],
    'total_sal': [170],
    'SiO2': [6.0],
    'Na_K_max': [4.0],
    'Fe_total': [0.30],
    'PO': [4.5],
    'Alkal': [0.6],
    'Cl': [11.0]})

manual_example_F_scaled =
result_F_keras_sel['scaler_X'].transform(manual_example_F_keras)
manual_pred_F_scaled =
result_F_keras_sel['model'].predict(manual_example_F_scaled,
verbose=0)
manual_pred_F =
result_F_keras_sel['scaler_y'].inverse_transform(manual_pred_F_scaled)[0, 0]

manual_result_F_keras = pd.DataFrame({
    'Predicted_F_cycle': [manual_pred_F]
})

print("Keras: ручной прогноз для F_cycle")
display(manual_example_F_keras)
display(manual_result_F_keras.round(4))

```

Листинг 5. Расчет метрик MLP модели для удельного расхода кислоты

```

features_acid_keras = ['hardness', 'Ca2', 'total_sal', 'Mg2_max',
'pH', 'Alkal', 'SO2', 'SiO2', 'Cl', 'PO']

```

```
target_acid = df_raw['SpecG_acid(eq)']

result_acid_keras_sel = train_keras_selected_features(
    df[features_acid_keras],
    target_acid,
    model_name='SpecG_acid(eq)')
```

Листинг 6. Прогноз по MLP модели для удельного расхода кислоты

```
test_idx_acid_keras = result_acid_keras_sel['X_test'].index[0]

example_test_acid_keras =
result_acid_keras_sel['X_test'].loc[[test_idx_acid_keras]]
example_test_acid_scaled =
result_acid_keras_sel['scaler_X'].transform(example_test_acid_keras)

pred_test_acid_scaled =
result_acid_keras_sel['model'].predict(example_test_acid_scaled,
verbose=0)
pred_test_acid =
result_acid_keras_sel['scaler_y'].inverse_transform(pred_test_acid_scaled)[0, 0]

fact_test_acid =
result_acid_keras_sel['y_test'].loc[test_idx_acid_keras]

comparison_test_acid_keras = pd.DataFrame({
    'Target': ['SpecG_acid(eq)'],
    'Index_in_test': [test_idx_acid_keras],
    'Fact': [fact_test_acid],
    'Prediction': [pred_test_acid],
    'Absolute_error': [abs(pred_test_acid - fact_test_acid)],
    'Relative_error_%': [abs(pred_test_acid - fact_test_acid) /
abs(fact_test_acid) * 100]})
```

```

print("Keras: сравнение для строки из тестовой выборки
(SpecG_acid(eq))")
display(comparison_test_acid_keras.round(4))

```

Листинг 7. Прогноз по MLP модели для удельного расхода кислоты по данным исходной воды

```

manual_example_acid_keras = pd.DataFrame({
    'hardness': [1.24],
    'Ca2': [20.25],
    'total_sal': [170],
    'Mg2_max': [2.5],
    'pH': [8.0],
    'Alkal': [0.6],
    'SO2': [28.0],
    'SiO2': [6.0],
    'Cl': [11.0],
    'PO': [4.5]})

manual_example_acid_scaled =
result_acid_keras_sel['scaler_X'].transform(manual_example_acid_keras)

manual_pred_acid_scaled =
result_acid_keras_sel['model'].predict(manual_example_acid_scaled,
verbose=0)

manual_pred_acid =
result_acid_keras_sel['scaler_y'].inverse_transform(manual_pred_acid_scaled)[0, 0]

manual_result_acid_keras = pd.DataFrame({
    'Predicted_SpecG_acid(eq)': [manual_pred_acid]
})

print("Keras: ручной прогноз для SpecG_acid(eq)")
display(manual_example_acid_keras)
display(manual_result_acid_keras.round(4))

```

Листинг 8. Расчет метрик MLP модели для удельного расхода щелочи

```

features_alkali_keras = ['PO', 'SO2', 'hardness', 'Cl',
'total_sal', 'Ca2', 'Fe_total', 'SiO2', 'Mg2_max', 'Alkal' ]
target_alkali = df_raw['SpecG_alkali(eq)']
result_alkali_keras_sel = train_keras_selected_features(
    df[features_alkali_keras],
    target_alkali,
    model_name='SpecG_alkali(eq)')

```

Листинг 9. Прогноз по MLP модели для удельного расхода щелочи

```

test_idx_alkali_keras =
result_alkali_keras_sel['X_test'].index[0]

example_test_alkali_keras =
result_alkali_keras_sel['X_test'].loc[[test_idx_alkali_keras]]
example_test_alkali_scaled =
result_alkali_keras_sel['scaler_X'].transform(example_test_alkali_keras)

pred_test_alkali_scaled =
result_alkali_keras_sel['model'].predict(example_test_alkali_scaled,
verbose=0)
pred_test_alkali =
result_alkali_keras_sel['scaler_y'].inverse_transform(pred_test_alkali_scaled)[0, 0]

fact_test_alkali =
result_alkali_keras_sel['y_test'].loc[test_idx_alkali_keras]

comparison_test_alkali_keras = pd.DataFrame({
    'Target': ['SpecG_alkali(eq)'],
    'Index_in_test': [test_idx_alkali_keras],
    'Fact': [fact_test_alkali],
    'Prediction': [pred_test_alkali],

```

```

        'Absolute_error':          [abs(pred_test_alkali -
fact_test_alkali)],
        'Relative_error_%':        [abs(pred_test_alkali -
fact_test_alkali) / abs(fact_test_alkali) * 100]
    })

    print("Keras:   сравнение   для   строки   из   тестовой   выборки
(SpecG_alkali(eq)) ")
    display(comparison_test_alkali_keras.round(4))

```

Листинг 10. Прогноз по MLP модели для удельного расхода щелочи по данным исходной воды

```

manual_example_alkali_keras = pd.DataFrame({
    'PO': [8.08],
    'SO2': [23.0],
    'hardness': [1.24],
    'Cl': [7.0],
    'total_sal': [170],
    'Ca2': [20.25],
    'Fe_total': [0.30],
    'SiO2': [6.0],
    'Mg2_max': [2.5],
    'Alkal': [0.6]})

manual_example_alkali_scaled =
result_alkali_keras_sel['scaler_X'].transform(manual_example_alkali_
keras)

manual_pred_alkali_scaled =
result_alkali_keras_sel['model'].predict(manual_example_alkali_scale
d, verbose=0)

manual_pred_alkali =
result_alkali_keras_sel['scaler_y'].inverse_transform(manual_pred_al
kali_scaled)[0, 0]

```

```

manual_result_alkali_keras = pd.DataFrame({
    'Predicted_SpecG_alkali(eq)': [manual_pred_alkali]})
print("Keras: ручной прогноз для SpecG_alkali(eq) ")
display(manual_example_alkali_keras)
display(manual_result_alkali_keras.round(4))

```

Листинг 11. Функция построения графа для MLP модели для фильтроцикла

```

def keras_graph(
    model,
    feature_names=None,
    target_names=None,
    weight_threshold=0.05,
    graph_name='Keras Architecture',
    node_width='1.8',
    node_height='0.8'):

    # Проверка
    if not hasattr(model, "layers") or len(model.layers) == 0:
        raise ValueError("Модель не содержит слоев или еще не
была построена.")

    # Входная размерность
    try:
        input_dim = model.input_shape[-1]
    except Exception:
        try:
            input_dim = model.inputs[0].shape[-1]
        except Exception:
            raise ValueError(
                "Не удалось определить входную размерность
модели. "

                "Убедись, что модель уже обучена или построена.")

    # Dense-слои

```

```

dense_layers = [layer for layer in model.layers if
isinstance(layer, tf.keras.layers.Dense)]
if len(dense_layers) == 0:
    raise ValueError("В модели не найдено Dense-слоев.")
# Размеры слоев: вход + все dense
layer_sizes = [int(input_dim)] + [int(layer.units) for layer
in dense_layers]

dot = graphviz.Digraph(
    comment=graph_name,
    graph_attr={
        'rankdir': 'LR',
        'splines': 'line',
        'nodesep': '0.35',
        'ranksep': '1.0' })

# Сбор весов
kernels = []
max_abs_weight = 0.0

for layer in dense_layers:
    weights = layer.get_weights()
    if len(weights) == 0:
        continue
    kernel = weights[0] # матрица весов без bias
    kernels.append(kernel)
    max_abs_weight = max(max_abs_weight,
np.max(np.abs(kernel)))

if max_abs_weight == 0:
    max_abs_weight = 1.0

# Создание узлов
for i, size in enumerate(layer_sizes):

```

```

with dot.subgraph(name=f'cluster_{i}') as c:
    if i == 0:
        layer_label = f'Layer {i} (Input)'
    elif i == len(layer_sizes) - 1:
        layer_label = f'Layer {i} (Output)'
    else:
        layer_label = f'Layer {i} (Hidden)'

    c.attr(label=layer_label,                      color='gray40',
style='rounded')

    for j in range(size):
        node_id = f'l{i}n{j}'

        # Подписи и цвета узлов
        if i == 0:
            if feature_names is not None and j <
len(feature_names):
                label = str(feature_names[j])
            else:
                label = f'In {j}'
                fillcolor = '#e8f4ff'

        elif i == len(layer_sizes) - 1:
            if isinstance(target_names, (list, tuple,
pd.Index)):
                if j < len(target_names):
                    label = str(target_names[j])
                else:
                    label = f'Out {j}'
            else:
                label = str(target_names) if
target_names is not None else f'Out {j}'
                fillcolor = '#fff3e6'

```

```

else:
    label = f'Node {j}'
    fillcolor = '#f2f2f2'

c.node(
    node_id,
    label=label,
    shape='ellipse',
    style='filled',
    fillcolor=fillcolor,
    color='gray25',
    fontname='Arial',
    width=node_width,
    height=node_height,
    fixedsize='true'
)

# Добавление ребер
for i, kernel in enumerate(kernels):
    for start_node in range(kernel.shape[0]):
        for end_node in range(kernel.shape[1]):
            weight_val = kernel[start_node, end_node]

            if abs(weight_val) >= weight_threshold:
                color = '#ff0051' if weight_val > 0 else
'#008bfb'

                penwidth = 0.5 + 4.0 * abs(weight_val) /
max_abs_weight

            dot.edge(
                f'l{i}n{start_node}',
                f'l{i+1}n{end_node}',
                color=color,

```

```

        penwidth=str(penwidth)
    )

    return dot

```

Листинг 12. Выполнение построения графа для MLP модели для фильтроцикла

```

model_F_graph = result_F_keras_sel['model']
feature_names_F = features_F_keras
target_name_F = ['F_cycle']

graph_F = keras_graph(
    model_F_graph,
    feature_names=feature_names_F,
    target_names=target_name_F,
    weight_threshold=0.2,    # можно 0.15-0.25
    node_width='1.8',
    node_height='0.8')

graph_F.render('pictures/Keras_structure_F_cycle', format='pdf',
view=True)

graph_F.render('pictures/Keras_structure_F_cycle', format='png')
graph_F

```

Листинг 13. Предиктивная CatBoost модель

```

from catboost import CatBoostRegressor
from sklearn.model_selection import train_test_split
from sklearn.metrics import (
    r2_score,
    mean_squared_error,
    mean_absolute_error,
    mean_absolute_percentage_error)

def train_catboost_model(X, y, model_name='target'):

```

```

X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(
    X, y,
    test_size=0.25,
    random_state=42)

model = CatBoostRegressor(
    iterations=1000,
    depth=6,
    learning_rate=0.05,
    loss_function='RMSE',
    verbose=False,
    random_seed=42)

model.fit(X_train, y_train)
y_pred = model.predict(X_test)

r2 = r2_score(y_test, y_pred)
mse = mean_squared_error(y_test, y_pred)
rmse = np.sqrt(mse)
mae = mean_absolute_error(y_test, y_pred)
mape = mean_absolute_percentage_error(y_test, y_pred)
print(f'=== Результаты для {model_name} ===')
print(f'R2      : {r2:.4f}')
print(f'MSE     : {mse:.4f}')
print(f'RMSE    : {rmse:.4f}')
print(f'MAE     : {mae:.4f}')
print(f'MAPE    : {mape:.4f}')
print()

return {
    'model': model,
    'X_train': X_train,
    'X_test': X_test,
    'y_train': y_train,

```

```

'y_test': y_test,
'y_pred': y_pred,
'metrics': {
    'R2': r2,
    'MSE': mse,
    'RMSE': rmse,
    'MAE': mae,
    'MAPE': mape }}

```

Листинг 14. Расчет метрик CatBoost модели для фильтроцикла

```

features_F = ['Ca2', 'hardness', 'Mg2_max', 'total_sal', 'SiO2',
'Na_K_max', 'Fe_total', 'PO', 'Alkal', 'Cl']
target_F = df_raw['F_cycle']

result_F = train_catboost_model(df[features_F], target_F,
'F_cycle')
model_F = result_F['model']

```

Листинг 15. Расчет метрик CatBoost модели для удельного расхода кислоты

```

features_acid = ['hardness', 'Ca2', 'total_sal', 'Mg2_max', 'pH',
'Alkal', 'SO2', 'SiO2', 'Cl', 'PO' ]
target_acid = df_raw['SpecG_acid(eq)']

result_acid = train_catboost_model(df[features_acid],
target_acid, 'SpecG_acid(eq)')
model_acid = result_acid['model']

```

Листинг 16. Расчет метрик CatBoost модели для удельного расхода щелочи

```

features_alkali = ['PO', 'SO2', 'hardness', 'Cl', 'total_sal',
'Ca2', 'Fe_total', 'SiO2', 'Mg2_max', 'Alkal']
target_alkali = df_raw['SpecG_alkali(eq)']
result_alkali = train_catboost_model(df[features_alkali],
target_alkali, 'SpecG_alkali(eq)')
model_alkali = result_alkali['model']

```

Листинг 17. Предиктивная XGBoost модель

```

def train_xgboost_model(X, y, model_name='target'):
    X_train, X_test, y_train, y_test = train_test_split(
        X, y,
        test_size=0.25,
        random_state=42)

    model = XGBRegressor(
        n_estimators=1000,
        max_depth=6,
        learning_rate=0.05,
        objective='reg:squarederror',
        subsample=0.9,
        colsample_bytree=0.9,
        random_state=42)

    model.fit(X_train, y_train)
    y_pred = model.predict(X_test)

    r2 = r2_score(y_test, y_pred)
    mse = mean_squared_error(y_test, y_pred)
    rmse = np.sqrt(mse)
    mae = mean_absolute_error(y_test, y_pred)
    mape = mean_absolute_percentage_error(y_test, y_pred)

    print(f'=== Результаты для {model_name} ===')
    print(f'R2      : {r2:.4f}')
    print(f'MSE     : {mse:.4f}')
    print(f'RMSE    : {rmse:.4f}')
    print(f'MAE     : {mae:.4f}')
    print(f'MAPE    : {mape:.4f}')
    print()

    return {

```

```

'model': model,
'X_train': X_train,
'X_test': X_test,
'y_train': y_train,
'y_test': y_test,
'y_pred': y_pred,
'metrics': {
    'R2': r2,
    'MSE': mse,
    'RMSE': rmse,
    'MAE': mae,
    'MAPE': mape }}

```

Листинг 18. Расчет метрик XGBoost модели для фильтроцикла

```

features_F = ['Ca2', 'hardness', 'Mg2_max', 'total_sal', 'SiO2',
'Na_K_max', 'Fe_total', 'PO', 'Alkal', 'Cl']
target_F = df_raw['F_cycle']

result_F_xgb = train_xgboost_model(df[features_F], target_F,
'F_cycle')
model_F_xgb = result_F_xgb['model']

```

Листинг 19. Расчет метрик XGBoost модели для удельного расхода кислоты

```

features_acid = ['hardness', 'Ca2', 'total_sal', 'Mg2_max', 'pH',
'Alkal', 'SO2', 'SiO2', 'Cl', 'PO']
target_acid = df_raw['SpecG_acid(eq)']

result_acid_xgb = train_xgboost_model(df[features_acid],
target_acid, 'SpecG_acid(eq)')
model_acid_xgb = result_acid_xgb['model']

```

Листинг 20. Расчет метрик XGBoost модели для удельного расхода щелочи

```

features_alkali = ['PO', 'SO2', 'hardness', 'Cl', 'total_sal',
'Ca2', 'Fe_total', 'SiO2', 'Mg2_max', 'Alkal']

```

```

target_alkali = df_raw['SpecG_alkali(eq)']

result_alkali_xgb = train_xgboost_model(df[features_alkali],
target_alkali, 'SpecG_alkali(eq)')
model_alkali_xgb = result_alkali_xgb['model']

```

Листинг 21. Сравнение метрик для трех моделей

```

metrics_rows = [
    # ----- F_cycle -----
    {'Target': 'F_cycle', 'Model': 'Keras',
**result_F_keras_sel['metrics']},
    {'Target': 'F_cycle', 'Model': 'CatBoost',
**result_F['metrics']},
    {'Target': 'F_cycle', 'Model': 'XGBoost',
**result_F_xgb['metrics']},

    # ----- SpecG_acid(eq) -----
    {'Target': 'SpecG_acid(eq)', 'Model': 'Keras',
**result_acid_keras_sel['metrics']},
    {'Target': 'SpecG_acid(eq)', 'Model': 'CatBoost',
**result_acid['metrics']},
    {'Target': 'SpecG_acid(eq)', 'Model': 'XGBoost',
**result_acid_xgb['metrics']},

    # ----- SpecG_alkali(eq) -----
    {'Target': 'SpecG_alkali(eq)', 'Model': 'Keras',
**result_alkali_keras_sel['metrics']},
    {'Target': 'SpecG_alkali(eq)', 'Model': 'CatBoost',
**result_alkali['metrics']},
    {'Target': 'SpecG_alkali(eq)', 'Model': 'XGBoost',
**result_alkali_xgb['metrics']},
]

metrics_table = pd.DataFrame(metrics_rows)

```

```

metrics_table = metrics_table[['Target', 'Model', 'R2', 'MSE',
'RMSE', 'MAE', 'MAPE']]
metrics_table = metrics_table.round(4)

print("=== Сводная таблица метрик ===")
display(metrics_table)

```

Листинг 22. Функция для сравнения прогнозов для трех моделей

```

def make_prediction_comparison_table(
    target_name,
    sample_indices,
    y_true_series,
    keras_result,
    cat_model,
    xgb_model,
    X_full,
    feature_names,
    round_digits=3
):

    table = pd.DataFrame(index=sample_indices)

    # Фактические значения
    table['Actual'] = y_true_series.loc[sample_indices].values

    # Keras
    X_keras = X_full.loc[sample_indices, feature_names]
    X_keras_scaled = keras_result['scaler_X'].transform(X_keras)
    keras_pred_scaled = \
keras_result['model'].predict(X_keras_scaled, verbose=0)
    keras_pred = \
keras_result['scaler_y'].inverse_transform(keras_pred_scaled).flatten()

    table['Keras'] = keras_pred

```

```

# CatBoost
table['CatBoost']
cat_model.predict(X_full.loc[sample_indices, feature_names])

# XGBoost
table['XGBoost']
xgb_model.predict(X_full.loc[sample_indices, feature_names])

table = table.reset_index().rename(columns={'index':
'Sample_ID'})
return table.round(round_digits)

```

Приложение Г. Показатели работы цепочки ионитных фильтров

Таблица Г.1 – Итоговые результаты регенерации цепочки ионитных фильтров №5

[illegible]

Продолжение таблицы Г.1

[illegible]

Продолжение таблицы Г.1

[illegible]

Продолжение таблицы Г.1

[illegible]

Продолжение таблицы Г.1

[illegible]

Продолжение таблицы Г.1

[illegible]

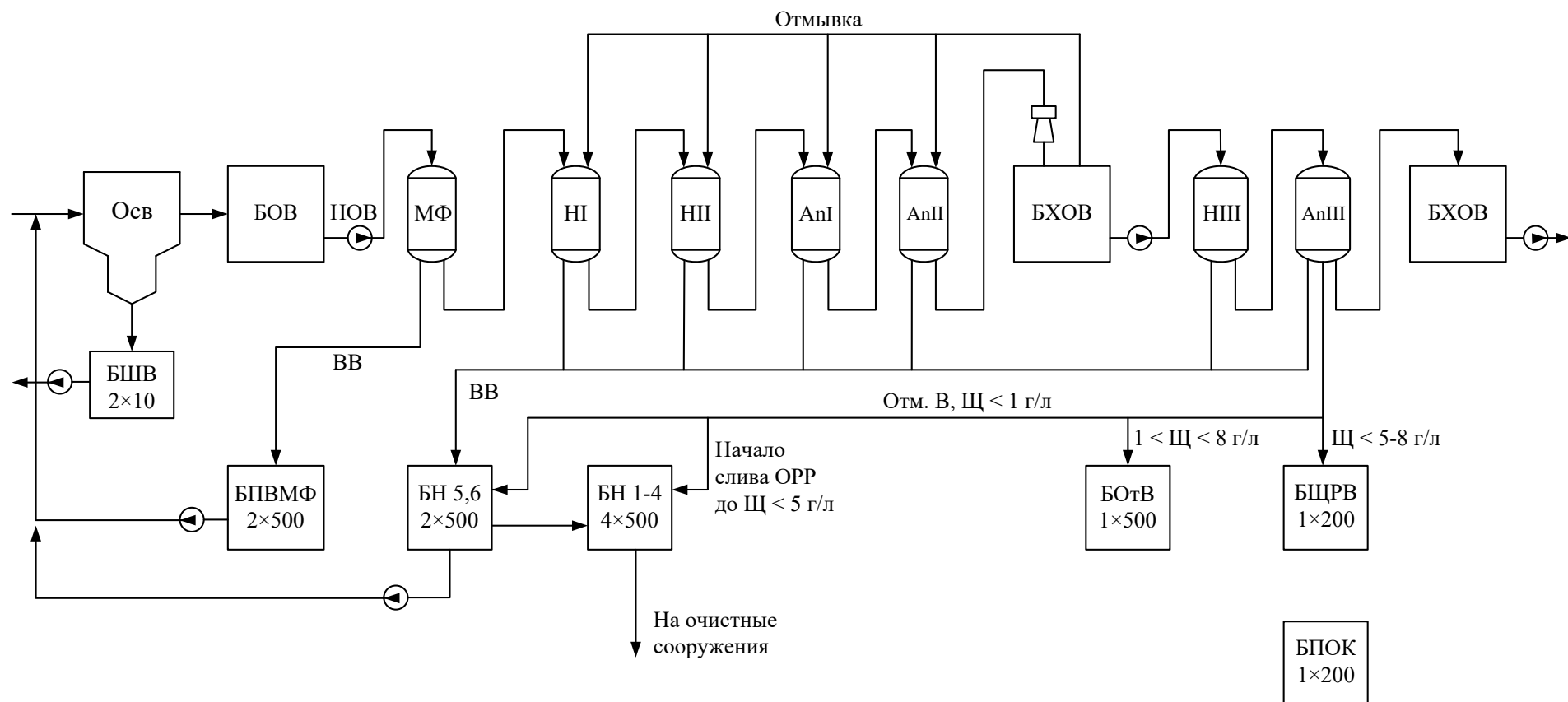
Продолжение таблицы Г.1

[illegible]

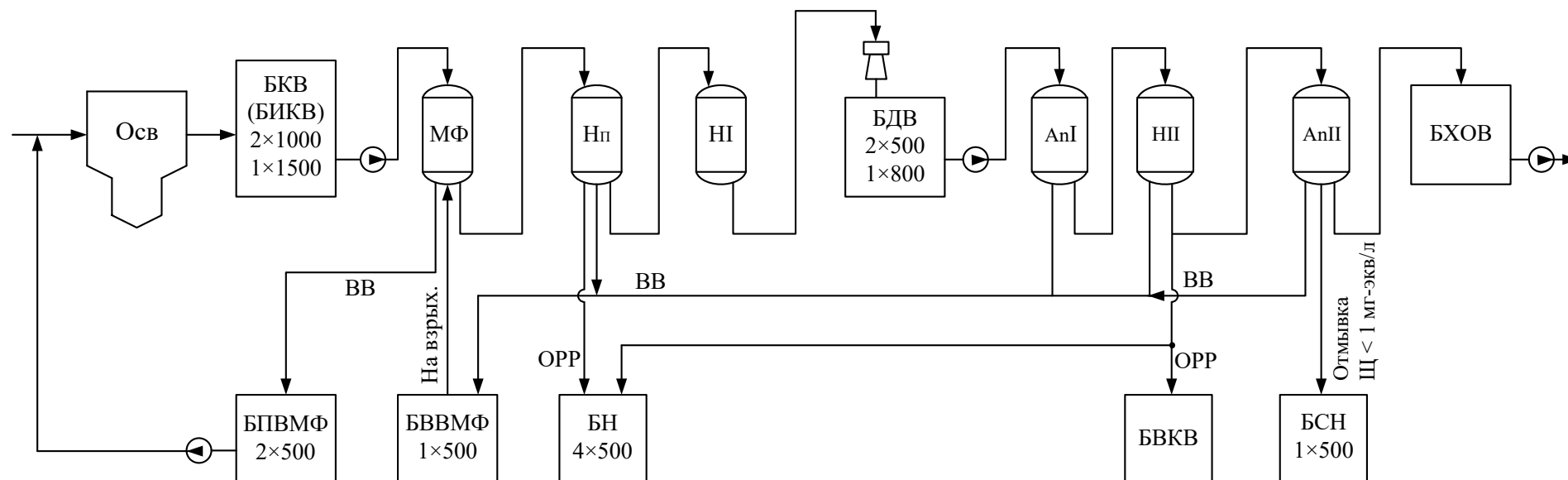
Продолжение таблицы Г.1

Дата регенерации	30.04.24	04.05.24	08.05.24	12.05.24	16.05.24	26.05.24
Расход кислоты (100%) на рег, кг	2029	2029	2029	2029	2029	2029
Расход щелочи (100%) на рег, кг	1274	1274	1274	1274	1274	1274
Фильтроцикл, т	5344	5655	2991	6357	5184	5752
Фильтроцикл, т/100	53,44	56,55	29,91	63,57	51,84	57,52
Содержание катионов, г-экв/т	2,933	2,957	2,965	2,707	2,983	2,962
Содержание анионов, г-экв/т	2,335	2,327	2,325	2,107	2,431	2,325
Уд. расход к-ты, г/г-экв	129,45	121,34	228,79	117,91	131,21	119,09
Уд. расход щелочи, г/г-экв	102,10	96,81	183,20	95,12	101,09	95,26
Уд. расход к-ты, кг/м3	50,01	50,01	50,01	50,01	50,01	50,01
Уд. расход щелочи, кг/м3	40,00	40,00	40,00	40,00	40,00	40,00
Отношение к-ты и щел. на рег, моль/моль	1,30	1,30	1,30	1,30	1,30	1,30
УЭП, нач.						
УЭП, кон.	2,56	3,89	4,65	4,4	1,78	1,89
SiO2, кон.	98	98	81	78	79	98
SiO2 кон./100	0,98	0,98	0,81	0,78	0,79	0,98
Отношение Кат/Ан	1,26	1,27	1,28	1,28	1,23	1,27
Норма УЭП	2	2	2	2	2	2

Приложение Д. Технологическая схема ВПУ ХВО-1 Нижнекамской ТЭЦ-1



Приложение Е. Технологическая схема ВПУ ХВО-2 Нижнекамской ТЭЦ-1



Приложение Ж. Акт об использовании результатов диссертационной работы на филиале АО «ТГК-16» – Нижнекамская ТЭЦ (ПТК-1)



Акт об использовании результатов диссертационной работы Бабикова О.Е. по теме «Моделирование и совершенствование работы ионитных фильтров водоподготовительных установок ТЭС на основе системного подхода»

Филиал АО «ТГК-16» – Нижнекамская ТЭЦ (ПТК-1) подтверждает использование результатов диссертационной работы на соискание ученой степени кандидата технических наук по теме «Моделирование и совершенствование работы ионитных фильтров водоподготовительных установок ТЭС на основе системного подхода», выполненной в ФГБОУ ВО «Казанский государственный энергетический университет», с целью совершенствования режимов работы, регенерации и отмывки ионитных фильтров действующей водоподготовительной установки.

Важность данной работы обусловлена разработкой комплексного подхода к исследованию и совершенствованию процессов работы, регенерации и отмывки ионитных фильтров на основе математического моделирования, вычислительной гидродинамики и методов машинного обучения. Разработаны математическая и CFD-модель ионитного фильтра, а также прогностическая модель, позволяющая оценивать продолжительность фильтроцикла и удельные расходы реагентов на регенерацию по показателям качества исходной воды. Полученные результаты согласуются с аналитическими решениями и результатами промышленных экспериментов, проведенных на действующей ионитной водоподготовительной установке.

На основании результатов исследований разработаны предложения по совершенствованию противоточной повторно-последовательной регенерации и отмывки промышленных ионитных фильтров. Разработанные технические решения могут быть использованы при совершенствовании режимов эксплуатации ионитной водоподготовительной установки, снижении расхода реагентов и воды, уменьшении объема сточных вод и повышении эффективности работы оборудования.

Директор

С. Ю. Олюнин

**«Нижнекамская ТЭЦ (ПТК-1)»
ФИЛИАЛ АКЦИОНЕРНОГО ОБЩЕСТВА «ТГК-16»**

423570, Российская Федерация, Республика Татарстан, г. Нижнекамск, а/я 66, п/о 11,
телефон (8555) 321-359, факс (8555) 321-310, E-mail: office@nktcc1.tgc16.ru ИНН 1655189422 КПП 165143001
АО Банк «Аверс» г. Казань БИК 049205774 ИНН 1655500084 корр. счет 30101810500000000774
расчетный счет 40702810400090008256