

## ТЕПЛОЭНЕРГЕТИКА

---

---

УДК 621.321

**Евгений Николаевич Бушуев**

ФГБОУ ВО «Ивановский государственный энергетический университет имени В.И. Ленина», доктор технических наук, доцент, заведующий кафедрой теоретических основ теплотехники, Россия, Иваново, телефон (4932) 26-97-78, e-mail: zavkaf@tot.ispu.ru

### **Использование преобразованного уравнения электронейтральности при проведении технологических расчетов водоподготовки на ТЭС и АЭС**

#### **Авторское резюме**

**Состояние вопроса.** При выполнении технологического расчета водоподготовительных установок для ТЭС и АЭС необходимо определять показатели качества технологических вод после ступеней обработки. Основные трудности при этом возникают при расчете концентраций слабых электролитов, так как они находятся в химическом равновесии со всеми формами диссоциации. В настоящее время для расчета используют для каждого вида обработки либо упрощенные модели, либо методики, сводящиеся к решению сложной вычислительной задачи. Необходима разработка универсальной математической модели, позволяющей с высокой точностью рассчитывать концентрации слабых электролитов и показатель pH при различных видах обработки воды.

**Материалы и методы.** Разработка модели осуществлена с использованием метода математического моделирования химико-технологических процессов на ТЭС и АЭС.

**Результаты.** Предложена математическая модель, основанная на преобразованном уравнении электронейтральности, которая может быть использована для определения равновесных концентраций форм диссоциации слабых электролитов (прежде всего, самой воды и угольной кислоты) после различных стадий водоподготовки.

**Выводы.** Предложенная модель позволяет при проведении технологического расчета установок водоподготовки более точно и универсально рассчитывать концентрации слабых электролитов и определять показатель pH в технологических водах при различных видах обработки воды. Модель может быть использована для определения необходимых доз химических реагентов для обеспечения требуемых значений технологических показателей (pH и индекса Ланжелье) в обработанной воде.

**Ключевые слова:** ТЭС, водоподготовка, технологический расчет, преобразованное уравнение электронейтральности, расчет показателя pH

**Evgeniy Nikolayevich Bushuev**

Ivanovo State Power Engineering University, Doctor of Engineering Sciences, (Postdoctoral degree), Associate Professor, Head of Theoretical Foundations of Heat Engineering Department, Russia, Ivanovo, telephone (4932) 26-97-78, e-mail: zavkaf@tot.ispu.ru

## Using transformed equation of electroneutrality when carrying out technological calculations of water treatment at thermal power and nuclear power plants

### Abstract

**Background.** When performing technological calculations of water treatment units for thermal power plants (TPP) and nuclear power plants (NPP), it is necessary to determine the quality indicators of process water after the processing steps. The main difficulty is to calculate the concentrations of weak electrolytes since they are in chemical equilibrium with all forms of dissociation. Currently, for each type of processing, either simplified models or methods that solve a complex computational problem are used for calculations. It is necessary to develop a universal mathematical model that allows high accuracy to calculate the concentrations of weak electrolytes and the pH value for various types of water treatment.

**Materials and methods.** To develop the model the authors have applied the method of mathematical modeling of chemical-technological processes at thermal power plants and nuclear power plants.

**Results.** A mathematical model based on the transformed equation of electrical neutrality is proposed. It can be used to determine the equilibrium concentrations of dissociation forms of weak electrolytes (primarily water itself and carbonic acid) after various stages of water treatment.

**Conclusions.** The proposed model allows, when conducting technological calculations of water treatment plants, to more accurately and universally calculate the concentrations of weak electrolytes and determine the pH value in process waters for various types of water treatment. The model can be used to determine the required doses of chemical reagents to ensure the required values of technological indicators (pH and Langelier index) in treated water.

**Key words:** Thermal power plant, water treatment, technological calculation, transformed electroneutrality equation, calculation of pH-value

**DOI:** 10.17588/2072-2672.2024.1.005-011

**Введение.** Водоподготовка на ТЭС и АЭС предназначена для получения из природной воды добавочной и подпиточной вод для восполнения потерь пара и конденсата в основном и вспомогательных контурах [1]. При проектировании водоподготовительных установок выполняются технологический расчет, который, как правило, проводится в два этапа, в силу того что задаются качество поступающей воды и требуемая производительность установки. На первом этапе последовательно по элементам схемы рассчитывается изменение показателей качества воды по стадиям обработки, начиная с источника исходной воды и заканчивая потребителем обработанной воды, а на втором этапе расчет ведется в обратной последовательности по расходу [2].

При выполнении расчета изменения показателей качества воды по стадиям обработки известны концентрации примесей в поступающей воде, необходимо определить содержание этих веществ после обработки. Такой расчет основывается на закономерностях процессов, происходящих на каждой стадии обработки. Сложность таких вычислений обычно состоит в том, что в природной воде кроме ионов сильных электролитов присутствуют формы диссоциации слабых электролитов (сама вода, угольная и кремниевая кислоты). Изменение концентрации любой формы диссоциации слабого электролита в ходе обработки приводит к смещению ионных равновесий, т.е. к изменению концентраций всех участвующих в химическом равновесии ионов и молекулярных форм.

Для расчета концентраций слабых электролитов традиционно используют следующие

основные подходы: получение упрощенных зависимостей (без учета смещения химического равновесия) и расчет через концентрационные изменения [3–5]. При этом для каждой отдельной стадии водообработки составляют свои расчетные зависимости. Эти методики позволяют получить довольно точные результаты для случаев, когда преобладает одна из форм диссоциации угольной кислоты, а другими можно пренебречь из-за малости их содержания.

Расчет концентраций слабых электролитов, основанный на нахождении концентрационных изменений в результате смещения диссоциации, является более точным, однако получается система нелинейных уравнений, которая состоит как минимум из трех уравнений. Для решения этой системы итерационным методом необходимо задать соответствующее число начальных приближений искомых корней. Начальные приближения необходимо задать «удачно», иначе решение системы уравнений может быть не найдено либо оно будет ошибочным. Кроме того, полученные при решении этой системы уравнений корни необходимо проверять по балансовым уравнениям (например, по уравнению электронейтральности). В целях упрощения вычислительной задачи, в зависимости от диапазона изменения показателя pH в ходе рассматриваемого процесса пренебрегается содержанием отдельных форм диссоциации угольной кислоты из-за малости их концентраций [4]. Это приводит к разветвленным расчетам с использованием разных зависимостей в различных промежутках нахождения значения показателя pH.

**Методы исследования.** Для нахождения концентраций слабых электролитов после различных стадий водообработки предложены математические модели, основанные на использовании преобразованного уравнения электронейтральности [2]. Целью расчета является получение значений концентраций слабых электролитов  $C_{ЭК}(i)_{ВЫХ}$  в обработанной воде при известных концентрациях основных ионов в воде, поступающей на стадию обработки  $C_{ЭК}(i)_{ВХ}$ . Применительно к технологическим водам ТЭС преобразованное уравнение электронейтральности может быть получено следующим образом.

Уравнение электронейтральности представляет собой равенство сумм молярных концентраций эквивалентов катионов и анионов, ммоль(экв)/л:

$$\sum_{k \in Kt} C_{ЭК}(k) = \sum_{j \in An} C_{ЭК}(j). \quad (1)$$

Для природной воды с учетом содержания основных ионов уравнение (1) принимает вид

$$\begin{aligned} C_{ЭК}(H^+) + C_{ЭК}(Ca^{2+}) + C_{ЭК}(Mg^{2+}) + C_{ЭК}(Na^+) = \\ = C_{ЭК}(OH^-) + C_{ЭК}(SO_4^{2-}) + C_{ЭК}(Cl^-) + \\ + C_{ЭК}(HCO_3^-) + C_{ЭК}(CO_3^{2-}) + C_{ЭК}(NO_3^-). \end{aligned} \quad (2)$$

Преобразовав уравнение электронейтральности (2) для технологической воды на выходе со стадии обработки к виду, в котором в левой части располагаются равновесные молярные концентрации ионов слабых электролитов, получаем

$$\begin{aligned} [H^+]_{ВЫХ} - [OH^-]_{ВЫХ} - [HCO_3^-]_{ВЫХ} - \\ - 2[CO_3^{2-}]_{ВЫХ} = A, \end{aligned} \quad (3)$$

где  $A$  – постоянная ионного баланса, моль(экв)/л:

$$\begin{aligned} A = C_{ЭК}(SO_4^{2-})_{ВЫХ} + C_{ЭК}(Cl^-)_{ВЫХ} + C_{ЭК}(NO_3^-)_{ВЫХ} - \\ - C_{ЭК}(Ca^{2+})_{ВЫХ} - C_{ЭК}(Mg^{2+})_{ВЫХ} - C_{ЭК}(Na^+)_{ВЫХ}. \end{aligned}$$

Правая часть уравнения (3) содержит концентрации ионов сильных электролитов, которые определяются на основе показателей качества поступающей воды  $C_{ЭК}(i)_{ВХ}$  и закономерностей происходящих процессов на стадии обработки [1].

Преобразовав левую часть уравнения (3), выразив молярную концентрацию гидроксид-ионов через ионное произведение воды  $K_w$ , а концентрацию карбонатов через константу диссоциации угольной кислоты по второй ступени  $K_{II}$ , получаем

$$[H^+]_{ВЫХ} - \frac{K_w}{[H^+]_{ВЫХ} \cdot f_I^2} - \left( 1 + \frac{2K_{II}}{[H^+]_{ВЫХ} \cdot f_{II}} \right) [HCO_3^-]_{ВЫХ} = A,$$

где  $f_I$ ,  $f_{II}$  – коэффициенты активности одновалентных и двухвалентных ионов.

Выразив концентрацию гидрокарбонатов через суммарную концентрацию форм диссоциации угольной кислоты и долю гидрокарбонатов и

упростив уравнение, получаем выражение в окончательном виде:

$$\begin{aligned} [H^+]_{ВЫХ} - \frac{K_w}{[H^+]_{ВЫХ} \cdot f_I^2} - \left( [H^+]_{ВЫХ} + \frac{2K_{II}}{f_{II}} \right) \times \\ \times \frac{K_I \Sigma[H_2CO_3]}{[H^+]_{ВЫХ}^2 \cdot f_I^2 + K_I[H^+]_{ВЫХ} + \frac{K_I \cdot K_{II}}{f_{II}}} = A, \end{aligned} \quad (4)$$

где  $K_I$  – константа диссоциации угольной кислоты по первой ступени;  $\Sigma[H_2CO_3]$  – суммарная молярная концентрация форм диссоциации угольной кислоты в исходной воде, моль/л.

В соответствии с уравнением материального баланса, на стадии обработки по формам диссоциации угольной кислоты в поступающей и обработанной водах (для случая, когда их отвод не происходит) имеем

$$\begin{aligned} \Sigma[H_2CO_3] = [H_2CO_3]_{ВХ} + [HCO_3^-]_{ВХ} + [CO_3^{2-}]_{ВХ} = \\ = [H_2CO_3]_{ВЫХ} + [HCO_3^-]_{ВЫХ} + [CO_3^{2-}]_{ВЫХ}. \end{aligned}$$

Уравнение (4), если его правая часть определена в зависимости от качества воды, поступающей на стадию обработки, и закономерностей процессов, происходящих на стадии, имеет только одну неизвестную величину – концентрацию катионов водорода в обработанной воде  $[H^+]_{ВЫХ}$ . Переводя значение найденного корня в показатель pH, можно оценивать корректность полученного результата и, кроме того, обоснованно задавать начальное приближение искомой величины. Концентрации всех остальных форм диссоциации слабых электролитов определяются исходя из того, что они находятся в определенном соотношении, которое зависит от соответствующих констант диссоциации, концентрации катионов водорода и коэффициентов активности ионов. Например, молярная равновесная концентрация гидрокарбонатов в воде после обработки может быть рассчитана как

$$[HCO_3^-]_{ВЫХ} = \Sigma[H_2CO_3] X_{HCO_3^-}^{ВЫХ},$$

где  $X_{HCO_3^-}^{ВЫХ}$  – молярная доля концентрации гидрокарбонатов [1]:

$$X_{HCO_3^-}^{ВЫХ} = \frac{K_I[H^+]_{ВЫХ}}{[H^+]_{ВЫХ}^2 f_I^2 + K_I[H^+]_{ВЫХ} + \frac{K_I K_{II}}{f_{II}}}.$$

Уравнение (4) является универсальным и может быть использовано в таком виде для нахождения равновесных концентраций слабых электролитов для большинства стадий водообработки. Применимость его может быть расширена при учете других электролитов, например форм диссоциации аммиака, при проведении расчетов обработки питательной воды при гидразинно-аммиачном водно-химическом режиме.

Уравнение (4) можно адаптировать для случаев, когда в ходе процессов водообработки изменяется суммарная молярная концентрация

угольной кислоты. Например, при декарбонизации воды обычно задается остаточная концентрация  $\text{CO}_2$ , преобразованное уравнение электронейтральности для этого случая примет более простой вид:

$$[\text{H}^+]_{\text{ВЫХ}} - \frac{K_{\text{в}}}{[\text{H}^+]_{\text{ВЫХ}} \cdot f_{\text{I}}^2} - \left( [\text{H}^+]_{\text{ВЫХ}} + \frac{2K_{\text{II}}}{f_{\text{II}}} \right) \times \times \frac{K_{\text{I}} [\text{H}_2\text{CO}_3]_{\text{ВЫХ}}}{[\text{H}^+]_{\text{ВЫХ}} \cdot f_{\text{I}}^2} = A, \quad (5)$$

где  $[\text{H}_2\text{CO}_3]_{\text{ВЫХ}}$  – остаточная концентрация углекислоты в декарбонизированной воде, моль/л.

Преимуществом представленного подхода, основанного на решении преобразованного уравнения электронейтральности, является то, что учитываются все формы диссоциации слабых электролитов. Кроме того, значительно упрощается вычислительная задача – вместо системы нелинейных уравнений решается одно нелинейное уравнение, причем корень можно надежно получить итерационным методом с любой точностью, даже если начальное приближение искомого корня задано очень грубо. Кроме того, полученное решение не нужно проверять по балансовым уравнениям.

Использование в математической модели эмпирических формул по расчету ионного произведения воды и констант диссоциации угольной кислоты [6] позволяет учесть влияние температуры технологической воды на концентрации слабых электролитов.

Упрощенно это уравнение можно решать, если пренебречь взаимным влиянием ионов, считая, что значения коэффициентов активности  $f_{\text{I}} = 1$  и  $f_{\text{II}} = 1$ . Для более точных расчетов необходимо учитывать коэффициенты активности ионов, при этом следует использовать итерационный метод при уточнении ионной силы раствора.

В качестве примера использования преобразованного уравнения электронейтральности для расчета pH можно привести результаты расчета качества фильтрата при H-катионировании воды следующего состава, ммоль(экв)/л:  $C_{\text{ЭК}}(\text{Ca}^{2+})_{\text{ОСВ}} = 1,06$ ;  $C_{\text{ЭК}}(\text{Mg}^{2+})_{\text{ОСВ}} = 0,50$ ;  $C_{\text{ЭК}}(\text{Na}^+)_{\text{ОСВ}} = 1,57$ ;  $C_{\text{ЭК}}(\text{Cl}^-)_{\text{ОСВ}} = 0,98$ ;  $C_{\text{ЭК}}(\text{SO}_4^{2-})_{\text{ОСВ}} = 1,10$ ;  $\text{Щ}_{\text{О,ОСВ}} = 1,05$ ;  $\text{pH}_{\text{ОСВ}} = 6,8$ ;  $t = 28^\circ\text{C}$ . График функции преобразованного уравнения электронейтральности для указанных исходных данных представлен на рис. 1.

Анализ графика (рис. 1) показывает, что в рабочем диапазоне pH имеется один корень, который легко может быть определен с требуемой точностью итерационным методом, например методом секущих [7]. Опыт практического использования такого подхода показал, что в ряде случаев этот численный метод возвращает отрицательное значение искомого корня, что не соответствует физической сущности искомой величины. В этих случаях для поиска решения

может быть применен метод половинного деления [7]. При указанных исходных данных расчетное значение показателя pH с учетом коэффициента активности составило 2,706, а без учета влияния коэффициента активности – 2,692. Результат измерения pH-метром в H-фильтрате – 2,70 [4].

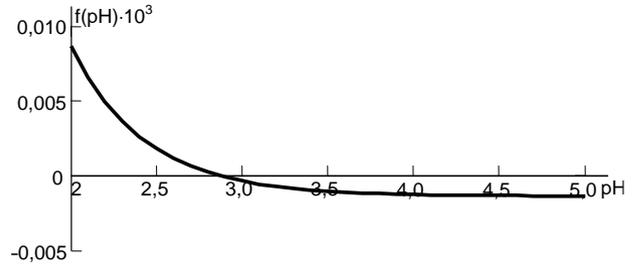


Рис. 1. График функции преобразованного уравнения электронейтральности  $f(\text{pH})$

Каков бы ни был дисбаланс по уравнению электронейтральности в поступающей воде, в обработанной воде этот дисбаланс определяется лишь точностью решения преобразованного уравнения электронейтральности (4). Ошибка анализа ионного состава в поступающей воде переносится на ошибку расчета  $[\text{H}^+]_{\text{ВЫХ}}$ . На рис. 2 представлена зависимость относительной ошибки расчета pH по (4) от дисбаланса в уравнении электронейтральности для поступающей воды.

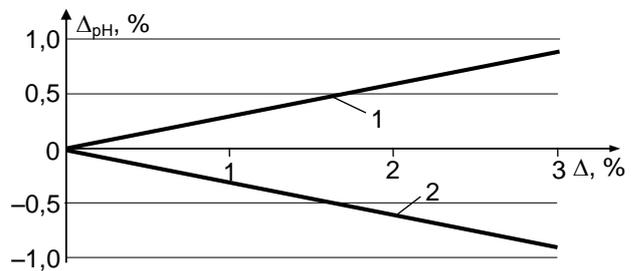


Рис. 2. Зависимость относительной ошибки расчета pH ( $\Delta_{\text{pH}}$ ) от дисбаланса в уравнении электронейтральности для поступающей на обработку воды ( $\Delta$ ): 1 – при превышении суммы эквивалентных концентраций катионов  $\sum_{k \in Kt} C_{\text{ЭК}}(k) > \sum_{j \in An} C_{\text{ЭК}}(j)$ ; 2 – при превышении суммы эквивалентных концентраций анионов  $\sum_{k \in Kt} C_{\text{ЭК}}(k) < \sum_{j \in An} C_{\text{ЭК}}(j)$

Анализ зависимости (рис. 2) показывает, что при максимально допустимом значении относительного дисбаланса в уравнении электронейтральности для поступающей воды 2 % ошибка расчета pH по (4) не превышает 0,6 %.

Представленный подход по определению концентраций слабых электролитов является универсальным, позволяющим рассчитать качество воды практически после любого воздействия на водную систему: ввода раствора аммиака, кислоты, щелочи; пропуска через ионит; смешения с другим водным потоком и т.д.

**Результаты исследования.** Использование преобразованного уравнения электронейтральности расширяет возможности метода математического моделирования химико-технологических процессов. Чаще всего для расчета качества воды при коагуляции сульфатом алюминия используют упрощенную модель [1], которая довольно точно позволяет определить концентрации основных ионов в коагулированной воде, но не позволяет обоснованно рассчитать уменьшение показателя pH в ходе этого процесса. Использование преобразованного уравнения электронейтральности (4) позволяет рассчитать значение этого показателя, в отличие от традиционной модели.

Задавая остаточные концентрации удаляемых в ходе ионного обмена сорбируемых ионов в рабочем режиме и при истощении ионитов и используя математическую модель по расчету удельной электропроводности для технологических вод ТЭС [8], можно оценивать эффективность системы автоматического химического контроля, использующей pH-метры и кондуктометры, определять диапазон их работы [9, 10].

При проведении технологического расчета часто необходимо решать следующую задачу: по заданному качеству исходной (обрабатываемой) воды определить необходимую дозу корректирующего реагента для обеспечения требуемых значений отдельных показателей (pH, индекса Ланжелье LSI и др.) в обработанной воде. Для подобных расчетов в основном используют либо упрощенные подходы, которые характеризуются невысокой точностью, либо специализированные компьютерные программы, например программу ROSA (разработчик фирма Dow Chemical) [11]. Сложность решения такой задачи объясняется необходимостью учета смещения углекислотного равновесия в воде при реагентной обработке.

Наиболее просто решается задача по расчету необходимой дозы корректирующего реагента ( $H_2SO_4$ ,  $HCl$ ,  $NaOH$ ) для обеспечения требуемого значения показателя  $pH_{\text{треб}}$  в обработанной воде. В состав математической модели кроме преобразованного уравнения электронейтральности (4) входят также следующие зависимости:

– выражение по расчету показателя pH

$$pH_{\text{треб}} = -\lg([H^+]_{\text{вых}} \cdot f_I); \quad (6)$$

– уравнение по нахождению концентрации  $k$ -го иона, образующегося при диссоциации корректирующего реагента в обработанной воде:

$$C_{\text{ЭК}}(k)_{\text{вых}} = C_{\text{ЭК}}(k)_{\text{вх}} + D_{\text{реаг}}, \quad (7)$$

где  $D_{\text{реаг}}$  – доза корректирующего реагента, ммоль(экв)/л.

Для остальных ионов сильных электролитов, не участвующих в химических процессах при реагентной обработке балансовое уравнение имеет вид

$$C_{\text{ЭК}}(i)_{\text{вых}} = C_{\text{ЭК}}(i)_{\text{вх}}. \quad (8)$$

После преобразования зависимостей, входящих в состав математической модели, можно получить выражение, позволяющее вычислить необходимую дозу реагента  $D_{\text{реаг}}$ , ммоль(экв)/л, для обеспечения требуемого значения показателя pH в обработанной воды:

$$D_{\text{реаг}} = [H^+]_{\text{вых}} - \frac{K_B}{[H^+]_{\text{вых}} \cdot f_I^2} - \left( [H^+]_{\text{вых}} + \frac{2K_{II}}{f_{II}} \right) \times \frac{K_I \Sigma [H_2CO_3]}{[H^+]_{\text{вых}}^2 \cdot f_I^2 + K_I [H^+]_{\text{вых}} + \frac{K_I \cdot K_{II}}{f_{II}}} - A. \quad (9)$$

В качестве примера на рис. 3 представлен график изменения расчетного значения показателя pH в зависимости от дозы кислоты, добавляемой в обрабатываемую воду.

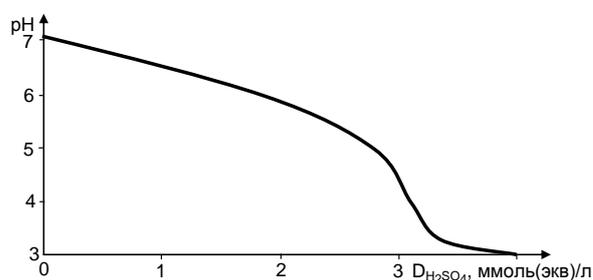


Рис. 3. Зависимость расчетного показателя pH воды от дозы серной кислоты, вводимой в технологическую воду

Представленная математическая модель позволяет учесть ионный состав воды, на основе которой готовится раствор реагента.

Преобразованное уравнение электронейтральности было использовано для расчета необходимого расхода реагента ( $H_2SO_4$ ,  $NaOH$ ,  $Ca(OH)_2$ ) для нейтрализации в баке-нейтрализаторе смешанного кислого и щелочного стока, образующегося после регенерации H-катионитных и OH-анионитных фильтров. Подобный расчет традиционно проводится по количеству ионов  $H^+$  и  $OH^-$ , содержащихся в этих водах. Например, для случая преобладания гидроксид-ионов в смешиваемых стоках расчетное уравнение имеет вид

$$C_{\text{ЭК}}(H^+)_{\text{КС}} V_{\text{КС}} + C_{\text{ЭК}}(H^+)_{\text{НРК}} V_{\text{НРК}} = C_{\text{ЭК}}(OH^-)_{\text{ЩС}} V_{\text{ЩС}},$$

где  $C_{\text{ЭК}}(H^+)_{\text{КС}}$ ,  $C_{\text{ЭК}}(H^+)_{\text{ЩС}}$ ,  $C_{\text{ЭК}}(H^+)_{\text{НРК}}$  – молярная концентрация эквивалентов ионов  $H^+$  в кислом, щелочном стоках и нейтрализующем растворе кислоты соответственно, ммоль(экв)/л;  $V_{\text{КС}}$ ,  $V_{\text{ЩС}}$  – объем кислого и щелочного стоков, направляемых в бак-нейтрализатор,  $m^3$ ;  $V_{\text{НРК}}$  – необходимый объем нейтрализующего раствора кислоты,  $m^3$ .

Однако такой расчет дает погрешность, так как не учитывает содержания в сточных водах форм диссоциации слабых электролитов, а также того, что значение показателя pH в нейтрализованном стоке должно составлять 6,5–8,5.

В состав математической модели входят зависимости (6)–(9), а также выражение, описывающее нейтральность воды:

$$[H^+]_{\text{вых}} = \sqrt{\frac{K_w(t)}{f_i^2}}$$

Уравнение (9) позволяет вычислить необходимую дозу нейтрализующего реагента для обеспечения требуемого значения показателя pH в нейтрализованных сточных водах. Предложенная математическая модель позволяет учитывать температуру нейтрализованного стока и определять дозу реагента для обеспечения требуемого диапазона показателя pH.

В качестве примера на рис. 4 представлен график изменения расчетного значения показателя pH в зависимости от дозы кислоты, вводимой для нейтрализации щелочного стока.

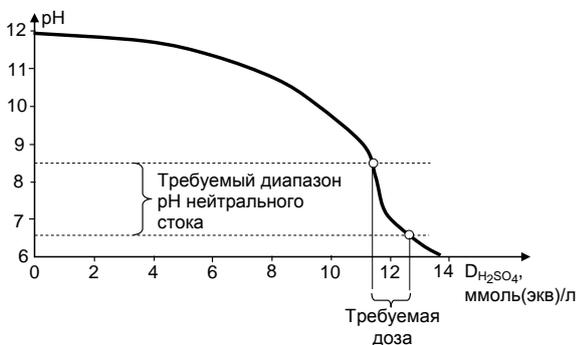


Рис. 4. Зависимость расчетного показателя pH стока от дозы кислоты, используемой для нейтрализации щелочного стока (доза, рассчитанная через эквивалентные количества кислоты и щелочи в стоках составляет 11,59 ммоль(экв)/л с учетом смещения углекислого равновесия – 12,01 ммоль(экв)/л)

При выполнении расчета установок обратного осмоса и нанофильтрации часто необходимо определить требуемую дозу кислоты для предотвращения образования отложений на поверхности мембраны и обеспечения допустимого значения индекса Ланжелье (LSI) в различных водных потоках, который определяется как [11, 12]

$$LSI = pH - pH_s,$$

где  $pH_s$  – показатель pH равновесного раствора, насыщенного  $CaCO_3$ . Значение этого показателя определяют с использованием номограмм, а также аналитических выражений или эмпирических формул [11, 12] в зависимости от характеристик воды: температуры, концентрации катионов кальция и общей щелочности. При этом перечисленные химические показатели зависят от дозы вводимого реагента, а также от концентрации ионов водорода. Используя преобразованное уравнение электронейтральности (4), можно составить функцию по расчету показателя LSI в зависимости от качества обрабатываемой воды и дозы вводимого реагента:  $LSI(D_{\text{реаг}})$ . Для решения вычислительной задачи

по нахождению требуемой дозы реагента  $D_{\text{реаг}}$  необходимо решить итерационным методом уравнение

$$LSI(D_{\text{реаг}}) - LSI_{\text{треб}} = 0,$$

где  $LSI_{\text{треб}}$  – требуемое значение индекса Ланжелье в рассматриваемой воде.

Адекватность представленных математических моделей проверялась путем сопоставления результатов расчета и данных, полученных по программе ROSA [11].

**Выводы.** Предложенная математическая модель стадий обработки воды, основанная на преобразованном уравнении электронейтральности, позволяет с требуемой точностью рассчитывать равновесные концентрации форм диссоциации слабых электролитов и определять значение показателя pH в технологических водах при различных видах обработки воды и может быть использована для решения ряда практических задач в рамках технологического расчета, например для определения необходимых доз химических реагентов для обеспечения в обработанной воде требуемых значений технологических показателей – pH и индекса Ланжелье.

#### Список литературы

1. **Водоподготовка** в энергетике: учебник / С.Л. Громов, Е.К. Долгов, К.А. Орлов, В.Ф. Очков. – М.: НИУ МЭИ, 2021. – 576 с.
2. **Бушуев Е.Н.** Исследование и математическое моделирование химико-технологических процессов водообработки на ТЭС: дис. ... д-ра техн. наук: 05.14.14. – Иваново, 2010. – 359 с.
3. **Кострикин Ю.М., Мещерский Н.А.** Водоподготовка и водный режим энергообъектов низкого и среднего давления. – М.: Энергоатомиздат, 1990. – 248 с.
4. **Ларин Б.М.** Расчет значений pH по стадиям обессоливания воды на ХВО // Известия вузов. Энергетика. – 1978. – № 11. – С. 101–105.
5. **Солодяников В.В.** Расчет и математическое моделирование процессов водоподготовки. – М.: Энергоатомиздат, 2003. – 384 с.
6. **Бушуев Е.Н.** Расчет температурной зависимости ионного произведения, удельной электропроводности воды и предельно разбавленных растворов электролитов // Вестник ИГЭУ. – 2007. – Вып. 2. – С. 49–52.
7. **Амосов А.А., Дубинский Ю.А., Копченова Н.В.** Вычислительные методы для инженеров. – М.: Изд-во МЭИ, 2003. – 596 с.
8. **Бушуев Е.Н.** Разработка математической модели электропроводности технологических вод ТЭС // Вестник ИГЭУ. – 2009. – Вып. 2. – С. 56–61.
9. **Мещерский Н.А.** Эксплуатация водоподготовительных установок электростанций высокого давления. – М.: Энергоатомиздат, 1984. – 408 с.
10. **Ларин Б.М., Бушуев Е.Н., Бушуева Н.В.** Технологическое и экологическое совершенствование водоподготовительных установок на ТЭС // Теплоэнергетика. – 2001. – № 8. – С. 23–27.
11. **Технологии** мембранного разделения в промышленной водоподготовке // А.А. Пантелеев,

Б.Е. Рябчиков, О.В. Хоружий и др. – М.: Изд-во «ДеЛи плюс», 2012. – 429 с.

12. Юрчевский Е.Б., Солодяников В.В. Описание математической модели процесса деминерализации воды с применением мембранных технологий и узлом утилизации концентрата // Энергосбережение и водоподготовка. – 2020. – № 1. – С. 55–62.

### References

1. Gromov, S.L., Dolgov, E.K., Orlov, K.A., Ochkov, V.F. *Vodopodgotovka v energetike* [Water treatment in energy sector]. Moscow: NIU MEI, 2021. 576 p.

2. Bushuev, E.N. *Issledovanie i matematicheskoe modelirovanie khimiko-tekhnologicheskikh protsessov vodoobrabotki na TES*. Diss. ... d-ra tekhn. nauk [Research and mathematical modeling of chemical-technological processes of water treatment at thermal power plants. Dr. tech. sci. diss.]. Ivanovo, 2010. 359 p.

3. Kostrikin, Yu.M., Meshcherskiy, N.A. *Vodopodgotovka i vodnyy rezhim energoob"ektov nizkogo i srednego davleniya* [Water treatment and water regime of low and medium pressure energy facilities]. Moscow: Energoatomizdat, 1990. 248 p.

4. Larin, B.M. *Raschet znacheniy rN po stadiyam obessolivaniya vody na KhVO* [Calculation of pH values by stages of water desalination at water treatment plant]. *Izvestiya vuzov. Energetika*, 1978, no. 11, pp.101–105.

5. Solodyannikov, V.V. *Raschet i matematicheskoe modelirovanie protsessov vodopodgotovki* [Calculation and mathematical modeling of water treatment processes]. Moscow: Energoatomizdat, 2003. 384 p.

6. Bushuev, E.N. *Raschet temperaturnoy zavisimosti ionnogo proizvedeniya, udel'noy elektroprovodnosti vody i predel'no razbavlennykh rastvorov elektrolitov* [Calculation of temperature dependence of the ionic product,

specific electrical conductivity of water and extremely dilute electrolyte solutions]. *Vestnik IGEU*, 2007, issue 2, pp. 49–52.

7. Amosov, A.A., Dubinskiy, Yu.A., Kopchenova, N.V. *Vychislitel'nye metody dlya inzhenerov* [Computational methods for engineers]. Moscow: Izdatel'stvo MEI, 2003. 596 p.

8. Bushuev, E.N. *Razrabotka matematicheskoy modeli elektroprovodnosti tekhnologicheskikh vod TES* [Development of a mathematical model of electrical conductivity of process waters at thermal power plants]. *Vestnik IGEU*, 2009, issue 2, pp. 56–61.

9. Meshcherskiy, N.A. *Ekspluatatsiya vodopodgotovitel'nykh ustanovok elektrostantsiy vysokogo davleniya* [Operation of water treatment plants of high-pressure power plants]. Moscow: Energoatomizdat, 1984. 408 p.

10. Larin, B.M., Bushuev, E.N., Bushueva, N.V. *Tekhnologicheskoe i ekologicheskoe sovershenstvovanie vodopodgotovitel'nykh ustanovok na TES* [Technological and environmental improvement of water treatment plants at thermal power plants]. *Teploenergetika*, 2001, no. 8, pp. 23–27.

11. Panteleev, A.A., Ryabchikov, B.E., Khoruzhiy, O.V., Gromov, S.L., Sidorov, A.R. *Tekhnologii membrannogo razdeleniya v promyshlennoy vodopodgotovke* [Membrane separation technologies in industrial water treatment]. Moscow: Izdatel'stvo DeLi plus, 2012. 429 p.

12. Yurchevskiy, E.B., Solodyannikov, V.V. *Opisaniye matematicheskoy modeli protsessa demineralizatsii vody s primeneniem membrannykh tekhnologiy i uzlom utilizatsii konsentrata* [Description of mathematical model of water demineralization process using membrane technologies and concentrate recycling unit]. *Energobere-zhenie i vodopodgotovka*, 2020, no. 1, pp. 55–62.