

Р. Р. Сафин (Уфа, УГАЭС). **Моделирование процесса образования коллоидной серы при конденсации из газовой фазы.**

Один из способов получения коллоидной серы состоит в каталитическом окислении сероводородсодержащего углеводородного газа кислородом воздуха при температуре 250–300°С. При охлаждении реакционных газов в конденсаторе происходят процессы конденсации молекулярной серы и образуется коллоидная сера [1].

Применительно к процессу конденсации серы задача состоит в определении технологических параметров конденсации — температуры и времени конденсации в соответствии с требованием однородности дисперсной фазы, получение частиц коллоидной (товарной) серы требуемого размера 0,5–5 мкм, получение плотной структуры кластеров серы и селективность процесса.

Описание процессов конденсации кинетическими методами [2] имеет ограничения при расчете распределения дисперсных частиц по размерам. Это, прежде всего, отсутствие кинетических данных для расчета констант скоростей агрегации дисперсной фазы. В настоящей работе предлагается метод имитационного компьютерного моделирования процессов конденсации серы.

Нами реализован следующий алгоритм агрегационной модели. В локальный объем случайным образом запускается большое количество частиц. Генерируются случайные блуждания частиц и моделируются столкновения, агрегирование и фрагментация кластеров, с последующим вовлечением кластеров в процесс блуждания и агрегирования с возможностью образования кластерной сети. Описанный алгоритм реализуется путем компьютерного моделирования.

В указанных постановках задач проведено имитационное моделирование процессов конденсации серы. Вычислительные эксперименты по расчету распределения кластеров по размеру проведены при различных начальных концентрациях серы в газовой фазе на входе в конденсатор — 4; 7; 10% об.; при температурах — от 60 до 100°С с шагом 10; времени конденсации — от 60 до 300 сек. с шагом 30.

В результате имитационного моделирования процессов агрегации были рассчитаны оптимальные параметры конденсации серы: температура 60–70°С; время пребывания газа в конденсаторе 120–180сек. Достоинство метода состоит в возможности расчета распределения коллоидных частиц по размерам и расчета удельной плотности кластеров.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Коншенко Е. В., Балаев А. В., Исмагилов Ф. Р., Спивак С. И., Сафин Р. Р.* Прямое каталитическое окисление сероводорода. — *Химия и технология топлив и масел*, 2001, № 3, с. 50.
2. *Волощук В. М.* Кинетическая теория коагуляции. Л.: Гидрометеиздат, 1984, 282 с.