4. *Правила* приймання та скиду (водовідведення) стічних вод підприємств у систему каналізації м. Дніпропетровська. – Дніпропетровськ: 2003 р. – 38 с.

5. *Правила* приймання стічних вод підприємств у систему каналізування м. Запоріжжя. – Запоріжжя: 2003 р. – 25 с.

Надійшло до редакції 12.11.2015

УДК 628.34

Н.П. НЕЧИТАЙЛО, кандидат технических наук
Приднепровская государственная академия строительства и архитектуры
Н.Н. БЕЛЯЕВ, доктор технических наук
Днепропетровский национальный университете железнодорожного транспорта имени академика В. Лазаряна

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАКУПОРКИ ПОРЫ МЕМБРАНЫ ПРИ ЕЕ МОДИФИКАЦИИ

Наведено математичне моделювання закупорки пори мембрани з урахуванням масопереносу, зміни поля швидкості та обліку геометричної форми пори. Дане моделювання дозволяє, виробляє прогнозування процесів роботи мембрани з різною структурою пір.

Ключові слова: моделювання, закупорка пір, ультрафільтрація, мембрана, масоперенос, поле швидкості.

Приведено математическое моделирование закупорки поры мембраны с учетом массопереноса, изменения поля скорости и учета геометрической формы поры. Данное моделирование позволяет, производит прогнозирование процессов работы мембраны с различной структурой пор.

Ключевые слова: моделирование, закупорка пор, ультрафильтрация, мембрана, массоперенос, поле скорости.

This paper presents mathematical modeling of clogging the pores of the membrane, taking into account the mass transfer, change of the velocity field and the account of the geometric shape of the pores. This simulation allows predicting the work processes of the membrane with different pore structure.

Key words: modeling, clog the pores of the ultrafiltration membrane, mass transfer, the velocity field.

В последнее время мембранные методы получают все более широкое распространение в сфере обротки воды. Среди таких методов всё большую популярность приобретает ультрафильтрационная обработка. Однако для большей эффективности метода авторами предлагается произвести модификацию поверхности мембраны при помощи обработки ее оксихлоридом алюминия. Данная модификация позволяет произвести частичную закупорку пор и перевести не эффективные поры с большим размером ячейки в эффективные, что позволяет удалять из воды практически полностью гуминовые и фульвокислоты и отказаться от первичного хлорирования.

Однако, не смотря на широкий экспериментальный опыт в настоящий момент, отсутствую модели, которые позволили бы предсказывать ход модификации и позволяли бы более широко раскрыть теорию модификации порового пространства мембраны.

1. Моделирование процесса массопереноса в поре

Рассматривается процесс движения воды содержащей примесь в поре ультрафильтрационной мембраны с точки зрения ее модификации и закупорки. Будем считать, что пора мембраны представляет собой, в общем случае, канал, имеющий сложную геометрическую форму. При движении воды в поре происходит «налипание» примеси на стенки поры, в результате чего на стенках поры формируется осадок и происходит сужение поры. Следует подчеркнуть, что математическое моделирование такого процесса связано с большой трудностью – постоянно происходит изменение формы поры и ее проходного сечения. Это изменение проходного сечения поры заранее – неизвестно и определяется в процессе расчета. В отличие от известной работы [80,1] где на базе одномерной модели процесса массопереноса рассмотрено моделирование процесса закупоривания поры, здесь, при моделировании, учитываются следующие важные факторы.

- Пора имеет сложную геометрическую форму, а не каноническую – цилиндрическую как в работе [81,1]. Расчет осуществляется в двухмерной постановке.
- Пользователь разработанной численной модели может задавать *любую* геометрическую форму поры – это реализуется в численной модели за счет применения метода маркирования.
- Возможно моделирование процесса закупоривания поры, когда в поре находятся *«включения»*, т.е. пора, с математической точки зрения является многосвязной областью и происходит движение воды с примесью между этими включениями и на этих включениях также происходит процесс налипания примеси.

Также необходимо отметить, что в работе [81,1] моделирование процесс закупоривания цилиндрической поры осуществляется в «фильтрационном» приближении. Поэтому в уравнение массопереноса включено слагаемое, представляющее собой стоковый член, который учитывает уменьшение концентрации примеси в потоке, движущемся в поре. То есть, непосредственно взаимодействие примеси со стенками поры здесь не рассматривается[81,1].

В данной работе для расчета процесса закупоривания поры мембраны используется осредненное по ширине канала (профильная задача) уравнение массопереноса

$$\frac{\partial C}{\partial t}+\frac{\partial uC}{\partial x}+\frac{\partial \nu C}{\partial y}=\frac{\partial}{\partial x}\left(\mu_x \frac{\partial C}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(\mu_y \frac{\partial C}{\partial y}\right), \qquad (1)$$

где C – концентрация примеси в воде; u, v, – компоненты вектора скорости движения водного потока внутри поры; μ = (μ_x, μ_y) – коэффициенты диффузии; t – время.

Ось Y направлена вертикально вверх.

Рассмотрим постановку краевых условий для данного уравнения массопереноса. На участке втекания потока воды в пору ставится условие вида:

$$C\big|_{\text{граница}}=C_E\,,$$

где C_E – известное значение концентрации примеси в потоке на входе в пору.

На участке, где поток сточных вод выходит из расчетной области ставится «циклическое» (мягкое) граничное условие, вида

$$C(i+1,\, j)=C(i,\, j),$$

где $C(i,j)$ – предпоследняя разностная ячейка, $C(i+1,j)$ –последняя разностная ячейка..

С физической точки зрения, это условие означает, что в выходном сечении поры мы пренебрегаем процессом диффузии. На стенках поры или «включениях», расположенных внутри поры реализуется условие

$$\frac{\partial C}{\partial n}=aC,$$

где n – единичный вектор внешней нормали к твердой поверхности, a – эмпирический коэффициент, учитывающий процесс взаимодействия примеси со стенками поры (коэффициент сорбции).

2. Моделирование поля скорости внутри поры

Решение уравнения (1) можно получить, если известно поле скорости потока внутри поры, причем, как отмечалось выше, особенностью рассматриваемого процесса является то, что с течением времени происходит процесс закупоривания поры, а значит, меняется геометрическая форма поры и, как результат этого – происходит изменение поля скорости потока внутри нее. Это означает, что при моделировании необходимо постоянно, последовательно решать не только задачу массопереноса, но гидродинамическую задачу – рассчитывать новое значение поля скорости водного потока внутри поры.

Для расчета поля скорости потока с учетом этой особенности используется модель потенциального течения. Для решения задачи в такой постановке необходимо проинтегрировать уравнение [49,2]:

$$\frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 P}{\partial y^2} = 0 \qquad (2)$$

где P – потенциал скорости.

Для уравнения (2) ставятся такие граничные условия:

– на стенках поры (где произошло формирование осадка): $\frac{\partial P}{\partial n} = 0$,

где n - единичный вектор внешней нормали к данному участку границы;

– на входной границе: (граница втекания потока) $\frac{\partial P}{\partial n} = V_n$, где V_n – известное значение скорости на этой границе ;

– на выходной границе расчетной области: $P = P_0 + const.$ (условия Дирихле).

Компоненты вектора скорости водного потока рассчитываются на основе зависимостей [2]:

$$u = \frac{\partial P}{\partial x},\ \ \nu = \frac{\partial P}{\partial y}.$$

Профиль скорости на входе в расчетную область (пору) полагается равномерным.

3. Численное интегрирование моделирующих уравнений

Численное интегрирование уравнений гидродинамики и массопереноса осуществляется на прямоугольной разностной сетке. Для формирования вида расчетной области и ее изменения с течением времени, за счет сорбции примеси на стенках поры используется метод маркирования.

Для численного интегрирования уравнения (2) используется идея установления решения по времени, поэтому численно интегрируется следующее уравнение [126,3]:

$$\frac{\partial P}{\partial \eta} = \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 P}{\partial y^2}, \qquad (3)$$

здесь η – фиктивное время.

При $\eta \to \infty$ решение уравнения (3) будет стремиться к «установлению», т.е. к решению уравнения (2).

Для численного интегрирования уравнения (3) используется неявная схема суммарной аппроксимации. В этом случае, процесс интегрирования разбивается на два шага. Разностные уравнения на каждом дробном шаге имеют вид [3]

$$\frac{P_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} - P_{i,j}^{n}}{\Delta t} = \left[\frac{-P_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} + P_{i-1,j}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta x^2}\right] + \left[\frac{-P_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} + P_{i,j-1}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta y^2}\right],$$

$$\frac{P_{i,j}^{n+1} - P_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta t} = \left[\frac{P_{i+1,j}^{n+1} - P_{i,j}^{n+1}}{\Delta x^2}\right] + \left[\frac{P_{i,j+1}^{n+1} - P_{i,j}^{n+1}}{\Delta y^2}\right].$$

Величина $P_{i,j}$ определяется в центре каждой разностной ячейки. На каждом шаге расщепления расчет идет по явной формуле – методу бегущего счета.

После расчета поля потенциала скорости осуществляется расчет компонент вектора скорости потока на сторонах разностных ячеек:

$$u_{ij} = \frac{P_{i,j} + P_{i-1,j}}{\Delta x}; \qquad (4)$$
$$\nu_{ij} = \frac{P_{i,j} + P_{i-1,j}}{\Delta y}.$$

Перед началом численного интегрирования уравнения (3) задается поле потенциала скорости для «начального» момента фиктивного времени, например, можно положить $P_{ij} = 0$.

Процесс расчета заканчивается при выполнении условия

$$\left|P_{i,j}^{n+1} - P_{i,j}^{n}\right| \le \varepsilon,$$

где $P_{i,j}^{n+1}$ – новое приближение величины потенциала скорости; $P_{i,j}^{n}$ – предыдущее значение величины потенциала скорости; ε – малое число (например, $\varepsilon \approx 0{,}001$).

Для численного интегрирования уравнения массопереноса используется попеременно – треугольная разностная схема [214,4]

Неизвестное значение концентрации примеси определяется в центре разностных ячеек.

Рассмотрим аппроксимацию производных, входящих в данное уравнение. Производную за временем аппроксимируем разделенной разностью «назад»:

$$\frac{\partial C}{\partial t} \approx \frac{C_{ij}^{n+1} - C_{ij}^{n}}{\Delta t}.$$

Конвективные производные запишем в виде

$$\frac{\partial uC}{\partial x} = \frac{\partial u^+ C}{\partial x} + \frac{\partial u^- C}{\partial x}; \quad \frac{\partial vC}{\partial y} = \frac{\partial v^+ C}{\partial y} + \frac{\partial v^- C}{\partial y},$$

где $u^+ = \frac{u + |u|}{2}$; $u^- = \frac{u - |u|}{2}$; $v^+ = \frac{v + |v|}{2}$; $v^- = \frac{v - |v|}{2}$.

Аппроксимируем конвективные производные разделенными разностями «против потока» на верхнем временном слое следующим образом:

$$\frac{\partial u^+ C}{\partial x} \approx \frac{u_{i+1,j}^+ C_{ij}^{n+1} - u_{ij}^+ C_{i-1,j}^{n+1}}{\Delta x} = L_x^+ C^{n+1}$$

$$\frac{\partial u^- C}{\partial x} \approx \frac{u^-_{i+1,j} C^{n+1}_{i+1,j} - u^-_{ij} C^{n+1}_{ij}}{\Delta x} = L^-_x C^{n+1},$$

$$\frac{\partial v^+ C}{\partial y} \approx \frac{v^+_{i,j+1} C^{n+1}_{ij} - v^+_{il} C^{n+1}_{i,j-1}}{\Delta y} = L^+_y C^{n+1},$$

$$\frac{\partial v^- C}{\partial y} \approx \frac{v^-_{i,j+1} C^{n+1}_{i,j+1} - v^-_{ij} C^{n+1}_{ij}}{\Delta y} = L^-_y C^{n+1}$$

Компоненты скорости u определяются на вертикальных гранях разностных ячеек, а компоненты скорости v – на горизонтальных гранях по формулам (4). Индексы этих граней отвечают индексам ячеек, расположенных правее или выше соответствующей грани.

Для аппроксимации вторых производных используются такие зависимости:

$$\frac{\partial}{\partial x}(\mu_x \frac{\partial C}{\partial x}) \approx \mu_x \frac{C^{n+1}_{i+1,j} - C^{n+1}_{ij}}{\Delta x^2} - \mu_x \frac{C^{n+1}_{ij} - C^{n+1}_{i-1,j}}{\Delta x^2} = M^-_{xx} C^{n+1} + M^+_{xx} C^{n+1};$$

$$\frac{\partial}{\partial y}(\mu_y \frac{\partial C}{\partial y}) \approx \mu_y \frac{C^{n+1}_{i,j+1} - C^{n+1}_{ij}}{\Delta x^2} - \mu_y \frac{C^{n+1}_{ij} - C^{n+1}_{i,j-1}}{\Delta x^2} = M^-_{yy} C^{n+1} + M^+_{yy} C^{n+1}.$$

В данных зависимостях $L^+_x, L^-_x, L^+_y, L^-_y, M^+_{xx}, M^-_{xx}, M^+_{yy}, M^-_{yy}$ – условные обозначения разностных операторов. Используя эти обозначения, запишем разностную аппроксимацию уравнения переноса:

$$\frac{C^{n+1}_{ij} - C^n_{ij}}{\Delta t} + L^+_x C^{n+1} + L^-_x C^{n+1} + L^+_y C^{n+1} + L^-_y C^{n+1} + \sigma C^{n+1}_{ij} =$$
$$= (M^+_{xx} C^{n+1} + L^-_{xx} C^{n+1} + L^+_{yy} C^{n+1} + L^-_{yy} C^{n+1})$$

Выполним расщепление полученного разностного уравнения на четыре разностных уравнения следующим образом:

– на первом шаге расщепления $k = \frac{1}{4}$:

$$\frac{C^{n+k}_{ij} - C^n_{ij}}{\Delta t} + \frac{1}{2}(L^+_x C^k + L^+_y C^k) + \frac{\sigma}{4} C^k_{ij} = \frac{1}{4}(M^+_{xx} C^k + M^-_{xx} C^n + M^+_{yy} C^k + M^-_{yy} C^n);$$

– на втором шаге расщепления $k = n + \frac{1}{2}$; $c = n + \frac{1}{4}$:

$$\frac{C^k_{ij} - C^c_{ij}}{\Delta t} + \frac{1}{2}(L^-_x C^k + L^-_y C^k) + \frac{\sigma}{4} C^k_{ij} =$$
$$= \frac{1}{4}(M^-_{xx} C^k + M^+_{xx} C^c + M^-_{yy} C^k + M^+_{yy} C^c)$$

– на третьем шаге расщепления $k = n + \frac{3}{4}$; $c = n + \frac{1}{2}$:

$$\frac{C^k_{ij} - C^c_{ij}}{\Delta t} + \frac{1}{2}(L^+_x C^k + L^-_y C^k) + \frac{\sigma}{4} C^k_{ij} = \frac{1}{4}(M^-_{xx} C^c + M^+_{xx} C^k + M^-_{yy} C^k + M^+_{yy} C^c);$$

– на четвертом шаге расщепления $k = n + 1;\ c = n + \frac{3}{4}$:

$$\frac{C_{ij}^{k} - C_{ij}^{c}}{\Delta t} + \frac{1}{2}(L_x^- C^k + L_y^+ C^k) + \frac{\sigma}{4} C_{ij}^{k} = \frac{1}{4}(M_{xx}^- C^k + M_{xx}^+ C^c + M_{yy}^- C^c + M_{yy}^+ C^k)$$

На каждом шаге расщепления шаблон разностных уравнений имеет треугольную форму на верхнем временном слое, поэтому неизвестное значение функции *C* можно найти по методу «бегущего счета».

Список литературы

1. *Поляков Ю. С.* Неравномерное осаждение частиц внутри полупроницаемых мембран [Текст] / Ю. С. Поляков // Теоретические основы химической технологии. – 2008. – Т. 42, N 1. – С. 80-87.

2. *Лойцянский Л. Г.* Механика жидкости и газа / Лойцянский Л. Г. – М.: Наука, 1978. – 735 с.

3. *Самарский А. А.* Теория разностных схем / Самарский А. А. – М.: Наука, 1983. – 616 с.

4. *Численное* моделирование распространения загрязнения в окружающей среде / М. З. Згуровский, В. В. Скопецкий, В. К. Хрущ, Н. Н. Беляев. – К.: Наук. думка, 1997. – 368 с.

УДК 628.168.3

Надійшло до редакції 15.11.2015

УДК 628.168.3

Н.П. НЕЧИТАЙЛО, кандидат технических наук
Е.Н. КОСЮК, аспирант
Приднепровская государственная академия строительства и архитектуры

РЕАГЕНТНАЯ ОБРАБОТКА ВОДЫ В ОБОРОТНЫХ СИСТЕМАХ ВОДОСНАБЖЕНИЯ

Вивчено вплив фосфоровмісних комплексонів на відкладення малорозчинних солей і корозійних утворень. Досліджена ефективність використання біоцидів неокислювального типу.

Ключові слова: корозія, солі, біоциди, зворотні системи водопостачання.

Изучено влияние фосфорсодержащих комплексонов на отложения малорастворимых солей и коррозионных образований. Исследована эффективность применения биоцидов неокислительного типа.

Ключевые слова: коррозия, соли, биоциды, оборотные системы водоснабжения.