

Математичне та Комп'ютерне Моделювання Процесів Конвективної Дифузії у Двошарових Засипних Фільтрах Води

О. Ю. Чернуха, Ю. І Білушчак

Відділ математичного моделювання нерівноважних процесів

Центр математичного моделювання

Інституту прикладних проблем механіки і математики ім. Я.С. Підстригача НАН України

Львів, Україна

zalznuchna6@gmail.com, byixx13@gmail.com

Mathematical Modelling and Simulation of Convective Diffusion Processes in Two-layered Filled-up Filters of Water

O. Chernukha, Y. Bilushchak

Department of mathematical modeling nonequilibrium processes

Centre of Mathematical Modeling of Pidstryhach Institute for Applied Problems of Mechanics and Mathematics,

Ukrainian Academy of Sciences

Lviv, Ukraine

zalznuchna6@gmail.com, byixx13@gmail.com

Анотація—Побудовано математичну модель для опису конвективної дифузії у двошаровому фільтрі. Розроблено метод знаходження точних розв'язків контактної-крайових задач масоперенесення з урахуванням дифузійного і конвективного механізмів переносу та сорбційних процесів, який базується на застосуванні інтегральних перетворень за просторовими змінними окремо в контактуючих областях. Побудовано аналітичні розв'язки задачі конвективної дифузії для двошарового фільтра. Розвинено метод числового інтегрування подвійного інтеграла зі змінними верхніми межами. Розроблено комплекс програм та встановлено закономірності процесу конвективної дифузії у двошаровій області.

Abstract—The mathematical model is constructed for description of convective diffusion in a two-layered filter. It is developed the method for determining the exact solutions of contact initial-boundary value problems of mass transfer with provision for both diffusive and convective mechanisms of transfer as well as sorption processes, which is based on integral transformations over space variables in the contacting regions. The analytical solutions are constructed for the problem of convective diffusion for the two-layered filter. The method of numerical calculation of the double integral with variable top limits is developed. Is it designed software and established regularities of convective diffusion process in the two-layered region.

Ключові слова—математичне і комп'ютерне моделювання; конвективна дифузія; двофазний фільтр води; інтегральне перетворення; чисельне інтегрування

Keywords—simulation: mathematical modelling; simulation; convective diffusion; two-phase water filter; integral transformation; numerical integration

I. ВСТУП

На сьогодні серед актуальних завдань важливе місце займає проблема очистки води до стану питної, а також очистка побутових та промислових каналізаційних стоків для вторинного використання. Одним з різновидів механічних фільтрів є насипні фільтри [1, 2], що складаються із зернистих засипок різних фільтраційних властивостей. У таких конструкціях використовують: кварцовий пісок різних розмірів фракцій, гідроантрацит, алюмосилікат, сульфовугілля тощо (рис. 1). Неперемішуваність фільтруючих прошарків забезпечується значною різницею їх густин.

Для очищення води у промислових масштабах зазвичай застосовують каркасно-насипні фільтри, які є різновидом багат шарових фільтрів [1, 3], і слугують для доочищення стічних вод та затримання грубих, колоїдних та розчинених часток [4], зокрема очистки від таких забруднювачів як нафтопродукти, мідь, залізо, цинк тощо.



Рис. 1. Види засипок: алюмосилікат (а), кварцовий пісок (б), сульфовугілля (с)

Дана робота присвячена математичному моделюванню функціонування двошарових фільтрів води на основі математичної моделі міграції домішкової речовини, коли водний розчин є двокомпонентним, а тіло – двошаровим. При цьому запропоновано підхід до математичного опису процесів конвективної дифузії домішкових частинок, які супроводжуються їхньою сорбцією на скелет, у двофазному багатоконпонентному тілі, що складається з етапів:

- побудова математичної моделі у лінеаризованому варіанті; формулювання на цій основі контактної-крайової задачі з урахуванням умов неідеального контакту на концентрацію забруднення, яке переноситься з конвективно рухомих розчинів;
- знаходження точного аналітичного розв'язку сформульованої задачі з допомогою методу інтегральних перетворень окремо в різних пористих шарах фільтра;
- комп'ютерне моделювання отриманих розв'язків, яке містить такі підетапи:
 - побудова алгоритмів для кожної структурної частини розв'язку контактної-крайової задачі для чисельного аналізу:
 - ✦ концентрацій забруднюючих частинок у водному поровому розчині в обох шарах фільтра та відповідних потоків маси з використанням відомого методу чисельного інтегрування, а саме Ньютона-Котеса замкненого типу за 7 і 10 вузлами;
 - ✦ концентрації частинок забруднення сорбованих на скелеті фільтра, для чого розробляємо новий метод чисельного інтегрування подвійного інтеграла зі змінними верхніми межами;
 - ✦ знаходження часу насичення фільтра на основі запропонованого нами алгоритму розв'язання нелінійного функціонального рівняння на відрізку невідомої довжини;
 - розробка програмного забезпечення та використання його для аналізу отриманих результатів.

II. МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ

При формулюванні вихідних співвідношень моделі переносу забруднення в двошаровому фільтрі вважаємо, що довільна область кожного шару складається зі скелету та водного розчину, який заповнює поровий простір. Приймемо, що в процесі фільтрації скелет не деформується, і пористість залишається сталою (не враховуються зміни, пов'язані із сорбцією домішкової речовини). Водний розчин є двокомпонентним і складається з частинок води та забруднюючої субстанції. Частинки забруднення знаходяться у двох станах – конвективно рухомому розчині і поверхні скелету.

Основними процесами, що розглядаються, є конвективна дифузія домішок та їхня сорбція скелетом. Ці про-

цеси описуються з використанням наближення континууму центрів мас [5] для рідкої фази, приймаючи швидкість конвективного руху частинок \vec{v}_ξ наближено рівною істинній швидкості порового розчину при фільтрації. Середовище вважається ізотропним, і поверхнева та об'ємна пористість покладаються рівними.

Рівняння балансу для порового розчину записано у вигляді [5]

$$\rho \frac{dc_i(t, \vec{\xi})}{dt} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_i + \sigma_{mi}, \quad i = \overline{0;2},$$

де $\rho = \sum_i \rho_i$ - сумарна густина розчину, ρ_i - густина компоненти i , $c_i = \rho_i / \rho$ — масова концентрація компоненти i , \vec{J}_i - дифузійний потік i -ї складової розчину, σ_{mi} - потужність виробництва маси i -ї компоненти; $d/dt = \partial/\partial t + \vec{v}_\xi \cdot \vec{\nabla}$ - повна похідна за часом.

Водній компоненті розчину відповідає значення індексу $i = 0$, забруднюючій речовині у розчині - $i = 1$, а у зв'язаному стані - $i = 2$. При цьому $\sigma_{m0} = 0$.

Вважаємо, що дифузійний потік визначається градієнтами хімічних потенціалів μ_i , які лінійно залежать від концентрацій, тобто

$$\vec{J}_i = -L \vec{\nabla} \mu_i = -L^* \vec{\nabla} c_i, \quad i = \overline{0;2},$$

де L , L^* - кінетичні коефіцієнти переносу.

Потужність виробництва маси компоненти i є пропорційна до локальної різниці хімічних потенціалів μ_i ($i = 1; 2$) і, як наслідок, різниці концентрацій c_i . При лінійній концентраційній залежності хімічних потенціалів, якщо знехтувати зворотним переходом частинок забруднюючої речовини зі зв'язаного стану в розчин, то $\sigma_{m1} = -k^* c_1$, $\sigma_{m2} = 0$, $\sigma_{m0} = 0$, де k^* - кінетичний коефіцієнт процесу сорбції.

Концентрації c_i та потоки \vec{J}_i ($i = \overline{0;2}$) задовольняють умови нормування $\sum_i c_i = 1$ і $\sum_i \vec{J}_i = 0$. Перенос у зв'язаному стані відсутній. Густина ρ і коефіцієнти L^* та k^* є сталими. Тоді концентрації c_1 і c_2 визначаємо з рівнянь

$$\frac{\partial c_1(t, \vec{\xi})}{\partial t} = D \Delta c_1(t, \vec{\xi}) - \vec{v}_\xi \cdot \vec{\nabla} c_1(t, \vec{\xi}) - k c_1(t, \vec{\xi}), \quad (1)$$

$$\frac{\partial c_2(t, \vec{\xi})}{\partial t} = k c_1(t, \vec{\xi}), \quad (2)$$

де $D = L^*/\rho_0$ - коефіцієнт дифузії домішки, $k = k^*/\rho_0$ - приведений кінетичний коефіцієнт процесу сорбції, ρ_0 - сталі значення густини розчину.

Приведемо систему рівнянь (1), (2) до безрозмірного вигляду введенням нових змінних [5]

$$\tau = k_* t, \quad x = (k_*/D_*)^{1/2} \xi,$$

де $k_* = \min\{k_1; k_2\}$, $D_* = \max\{D_1; D_2\}$ для розглядуваних шарів фільтра. Тоді отримаємо

$$\frac{\partial c_1(\tau, \bar{r})}{\partial \tau} = d \Delta_r c_1(\tau, \bar{r}) - \bar{v} \cdot \bar{\nabla}_r c_1(\tau, \bar{r}) - a c_1(\tau, \bar{r}),$$

$$\frac{\partial c_2(\tau, \bar{r})}{\partial \tau} = a c_1(\tau, \bar{r}),$$

де $d = D/D_*$, $\bar{v} = (k_* D_*)^{1/2} \bar{v}_\xi$, $a = k/k_*$ - безрозмірні коефіцієнти. Причому потік у безрозмірній формі буде

$$\bar{J} = -d \bar{\nabla}_r c_1 + \bar{v} c_1. \quad (3)$$

III. ПОСТАНОВКА КОНТАКТНО-КРАЙОВОЇ ЗАДАЧІ

Розглянемо шар безрозмірної товщини x_0 , що складається з двох підшарів товщин x' та δx ($\delta \xi = x_0 - x'$) відповідно. Система декартових координат вибрана так, щоб вісь Ox була перпендикулярна до поверхонь шару з початком на верхній границі і спрямована вглиб тіла. Нехай на верхній і нижній поверхнях тіла відомі сталі значення концентрації домішки $c_1^{(1)}(t, x)$ і $c_1^{(2)}(t, x)$ (нижній індекс позначає стан частинок - $i = 1$ відповідає розчину, $i = 2$ - поверхні скелету; верхній індекс позначає номер підшару фільтра: $j = 1$ - для $\Omega_1 =]0; x'[$, $j = 2$ - для $\Omega_2 =]x'; x_0[$:

$$c_1^{(1)}(t, x)|_{x=0} = c_0 \equiv \text{const}, \quad c_1^{(2)}(t, x)|_{x=x_0} = c_* \equiv \text{const}.$$

Також приймаємо, що в початковий момент часу

$$c_1^{(1)}(\tau, \xi)|_{\tau=0} = c_2^{(1)}(\tau, \xi)|_{\tau=0} = 0 \quad (\text{область } \Omega_1); \quad (4)$$

$$c_1^{(2)}(\tau, \xi)|_{\tau=0} = c_2^{(2)}(\tau, \xi)|_{\tau=0} = 0 \quad (\text{область } \Omega_2). \quad (5)$$

У випадку вертикальної конвективної дифузії масоперенесення домішок описують такі системи рівнянь [5] **у першому шарі** (область Ω_1):

$$\frac{\partial c_1^{(1)}(t, x)}{\partial t} = d_1 \frac{\partial^2 c_1^{(1)}(t, x)}{\partial x^2} - v_1 \frac{\partial c_1^{(1)}(t, x)}{\partial x} - a_1 c_1^{(1)}(t, x), \quad (6)$$

$$\frac{\partial c_2^{(1)}(t, x)}{\partial t} = a_1 c_1^{(1)}(t, x), \quad x \in \Omega_1, \quad (7)$$

у другому шарі (область Ω_2):

$$\frac{\partial c_1^{(2)}(t, x)}{\partial t} = d_2 \frac{\partial^2 c_1^{(2)}(t, x)}{\partial x^2} - v_2 \frac{\partial c_1^{(2)}(t, x)}{\partial x} - a_2 c_1^{(2)}(t, x), \quad (8)$$

$$\frac{\partial c_2^{(2)}(t, x)}{\partial t} = a_2 c_1^{(2)}(t, x), \quad x \in \Omega_2, \quad (9)$$

де d_j і v_j - коефіцієнти дифузії домішки і конвективного перенесення в Ω_j , a_j - коефіцієнт інтенсивності сорбції.

На границі контакту шарів $x = x'$ виконується умова рівності хімічних потенціалів і сумарних масових потоків, які запишемо вигляді

$$\lambda c_1^{(1)}(t, x)|_{x=x'} = c_1^{(2)}(t, x)|_{x=x'}; \quad (10)$$

$$d_1 \frac{\partial c_1^{(1)}}{\partial x} - v_1 c_1^{(1)} \Big|_{x=x'} = d_2 \frac{\partial c_1^{(2)}}{\partial x} - v_2 c_1^{(2)} \Big|_{x=x'}, \quad (11)$$

де $\lambda = \lambda_1/\lambda_2$ - відношення коефіцієнтів концентраційної залежності хімічних потенціалів в станах 1 і 2, які визначають стрибок концентрації на границі контакту.

IV. МЕТОД ПОБУДОВИ РОЗВ'ЯЗКУ ІНТЕГРАЛЬНИМИ ПЕРЕТВОРЕННЯМИ

Другі рівняння систем (7) і (9) можна проінтегрувати. З урахуванням початкових умов (4), (5) маємо

$$c_2^{(j)}(t, x) = a_j \int_0^t c_1^{(j)}(t', x) dt'.$$

Для побудови точного розв'язку задачі (4)-(11) розвинуто метод на основі інтегральних перетворень за просторовою змінною окремо в контактуючих областях Ω_1 і Ω_2 [6]. Для цього на поверхні $x = x'$ доозначимо шукані функції за допомогою першої контактної умови (10), тобто приймемо, що функції $\lambda c_1^{(1)}$ та $c_1^{(2)}$ є рівні між собою і дорівнюють деякій функції часу $g(\tau)$:

$$\lambda c_1^{(1)}(\tau, x)|_{x=x'} = c_1^{(2)}(\tau, x)|_{x=x'} = g(\tau, x') \equiv g(\tau).$$

Враховуючи вигляд операторів рівнянь (6)-(9), а також те, що задано граничні умови 1-го роду, в області Ω_1 застосуємо таке скінченне інтегральне перетворення [7]:

$$\bar{c}_1(n, \tau) = \int_0^{x'} c_1^{(1)}(x, \tau) \exp\left\{-\frac{v_1 x}{2d_1}\right\} \sin(y_n x) dx; \quad (12)$$

$$c_1^{(1)}(x, \tau) = \frac{2}{x'} \exp\left\{\frac{v_1 x}{2d_1}\right\} \sum_{n=1}^{\infty} \bar{c}_1(n, \tau) \sin(y_n x), \quad n=1, 2, \dots \quad (13)$$

де $y_n = n\pi/x'$ □

Після застосування перетворення (12) крайова задача в зображеннях в області Ω_1 набуде вигляду

$$\frac{d\bar{c}_1}{dt} = -(d_1 y_n^2 + a_1) \bar{c}_1 + d_1 y_n c_0 - d_1 y_n \frac{(-1)^n}{\lambda} g(\tau) e^{-\frac{v_1 x'}{2d_1}},$$

$$\bar{c}_1(n, \tau)|_{\tau=0} = 0.$$

Її розв'язок знаходимо у формі [8]

$$\bar{c}_1(n, \tau) = e^{-(d_1 y_n^2 + a_1)\tau} \int_0^{\tau} d_1 y_n^2 \left[c_0 - \frac{(-1)^n}{\lambda} g(\tau') \exp\left\{-\frac{v_1 x'}{2d_1}\right\} \right] \times e^{(d_1 y_n^2 + a_1)\tau'} d\tau'. \quad (14)$$

Тепер розглянемо крайову задачу конвективної дифузії в області Ω_2 . Введемо скінченне інтегральне перетворення за змінною x таким чином:

$$\bar{c}_2(m, \tau) = \int_{x'}^{x^*} c_1^{(2)}(x, \tau) \exp\left\{-\frac{v_2(x-x')}{2d_2}\right\} \sin(y_m(x-x')) dx, \quad m=1, 2, \dots; \quad (15)$$

де $y_m = m\pi/\delta x$. Формула оберненого перетворення до (15) отримана у вигляді

$$c_1^{(2)}(x, \tau) = \frac{2}{\delta x} \exp\left\{\frac{v_2(x-x')}{2d_2}\right\} \sum_{m=1}^{\infty} \bar{c}_2(m, \tau) \sin(y_m(x-x')). \quad (16)$$

Застосовуючи перетворення (15), отримаємо крайову задачу в зображеннях в області Ω_2 :

$$\frac{d\bar{c}_2}{d\tau} = -(d_2 y_m^2 + a_2) \bar{c}_2 + d_2 y_m \left[g(\tau) - (-1)^m c_* e^{-\frac{v_2 \delta x}{2d_2}} \right],$$

$$\bar{c}_2(m, \tau)|_{\tau=0} = 0,$$

розв'язок якої знаходимо у вигляді [8]

$$\bar{c}_2(m, \tau) = e^{-(d_2 y_m^2 + a_2)\tau} \int_0^{\tau} d_2 y_m^2 \left[g(\tau') - (-1)^m c_* \exp\left\{-\frac{v_2 \delta x}{2d_2}\right\} \right] \times e^{(d_2 y_m^2 + a_2)\tau'} d\tau'. \quad (17)$$

У виразах (14) і (17) залишається невідомою функція $g(\tau)$. Шукаємо її з другої контактної умови рівності потоків на границі розділу областей (11). Після виконання обернених перетворень (13) і (16) виразів (14) і (17), підставляємо формули для концентрацій та їх похідних в точці $x = x'$ у співвідношення (10). Тоді одержимо рівняння

$$d_1 \int_0^{\tau} \frac{2d_1}{x'} \sum_{n=1}^{\infty} y_n^2 \left\{ (-1)^n e^{\frac{v_1 x'}{2d_1}} c_0 - \frac{g(\tau')}{\lambda} \right\} e^{-(d_1 y_n^2 + a_1)(\tau-\tau')} d\tau' =$$

$$= d_2 \int_0^{\tau} \frac{2d_2}{\delta x} \sum_{m=1}^{\infty} y_m^2 \left\{ (-1)^m g(\tau') - c_* e^{-\frac{v_2 \delta x}{2d_2}} \right\} e^{-(d_2 y_m^2 + a_2)(\tau-\tau')} d\tau', \quad (18)$$

яке розв'язуємо відносно функції $g(\tau')$.

Інтегральне рівняння (18) має неєдиний розв'язок, оскільки існують такі функції $F(\tau')$, що $\int_0^{\tau} F(\tau') d\tau' = 0$. У

той же час розв'язок вихідної задачі є єдиним незалежно від способу розв'язання рівняння (18), оскільки функція $g(\tau')$ у виразах для $\bar{c}_1(n, \tau)$ і $\bar{c}_2(m, \tau)$ фігурує тільки під знаком інтеграла за змінною τ' .

У результаті отримаємо вираз для функції $g(\tau')$:

$$g(\tau') = \frac{A_1 c_0 \exp\left\{\frac{v_1 x'}{2d_1}\right\} \Sigma_n^- + A_2 c_* \exp\left\{-\frac{v_2 \delta x}{2d_2}\right\} \Sigma_m^+}{A_1 \lambda^{-1} \Sigma_n^+ + A_2 \Sigma_m^-},$$

$$\text{де } A_1 = 2d_1^2/x', \quad \Sigma_n^{\pm} = \sum_{n=1}^{\infty} (\pm 1)^n y_n^2 e^{-(d_1 y_n^2 + a_1)(\tau-\tau')},$$

$$A_2 = 2d_2^2/\delta x, \quad \Sigma_m^{\pm} = \sum_{m=1}^{\infty} (\pm 1)^m y_m^2 e^{-(d_2 y_m^2 + a_2)(\tau-\tau')}.$$

Таким чином ми отримали точний розв'язок вихідної контактної-крайової задачі в інтегральному вигляді.

Отримання аналітичного розв'язку для концентрації забруднених частинок у водному поровому розчині в обох шарах фільтра дало можливість знайти за формулою (3) вирази для відповідних потоків маси. На цій основі розроблені програмні модулі з використанням методу чисельного інтегрування, а саме Ньютона-Котеса замкнутого типу за 7 і 10 вузлами.

V. МЕТОД ЧИСЕЛЬНОГО ІНТЕГРУВАННЯ ПОДВІЙНОГО ІНТЕГРАЛА ЗІ ЗМІННИМИ МЕЖАМИ

Структура розв'язків для сорбованої домішки у шарі j у компактному вигляді має вигляд

$$c_2^{(j)} = F_j(x) - \frac{2d_2}{\delta x} e^{-\frac{v_2(x-x')}{2d_2}} \times$$

$$\times \sum_{m=1}^{\infty} B_m(x) \int_0^{\tau'} \int_0^{\tau''} g(\tau'') f(\tau' - \tau'') d\tau'' d\tau' \quad (19)$$

Для знаходження подвійних інтегралів зі змінними верхніми межами у співвідношенні (19), запропоновано числовий метод для їх обрахунку.

Зазначимо, що область інтегрування підінтегральної функції (19) у просторі $O\tau\tau''$ має вигляд нахиленого трикутника (рис. 2).

Враховуючи, що τ - це час, тобто змінна неперервно змінюється від нуля до ∞ , зі зміною τ область інтегрування в просторі $O\tau\tau''$ залишається трикутником. При цьому зміна τ призводить до зміни максимальних значень τ' і τ'' . Для $\tau = \tau_1$ маємо $\max \tau' = \max \tau'' = \tau_1$, а для $\tau = \tau_2$ - $\max \tau' = \max \tau'' = \tau_2$. Ці області є подібними трикутниками, які знаходяться в паралельних площинах, тобто під однаковим кутом нахилу θ до $O\tau\tau''$ (рис. 2). При цьому змінюється площа поверхні інтегрування. Для $\tau = 0$ область інтегрування є точкою $(0, 0, 0)$.

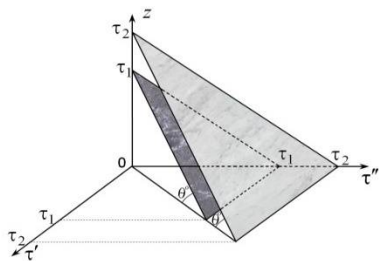


Рис. 2. Область інтегрування в просторі $O\tau\tau''$

Зробимо проекцію поверхні інтегрування на площину $O\tau\tau''$ (рис. 3а). Тоді ми отримуємо множину областей інтегрування в просторі $O\tau\tau''z$.

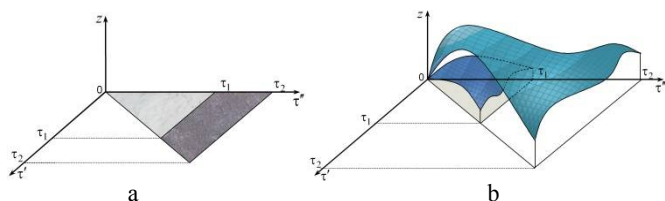


Рис. 3. Схематичне зображення множини областей інтегрування в просторі $O\tau\tau''z$ (а) та відповідних підінтегральних функцій (б)

Зазначимо, що площа області P_a інтегрування є $P_a = \cos(\theta)P_{pr}$, де P_{pr} - площа проекції області інтегрування. Враховуючи, що для нашої задачі $\theta = 45^\circ$, маємо

$$P_{pr} = \frac{1}{\sqrt{2}} P_a.$$

В результаті ми отримуємо сімейство підінтегральних функцій, параметризованих змінною τ (рис. 3б).

На проекцію області інтегрування накладаємо квадратну сітку (рис. 4). Враховуємо адитивну властивість ін-

теграла. Тоді справедлива формула

$$\int_0^{\tau} \int_0^{\tau'} g(\tau'') f(\tau' - \tau'') d\tau'' d\tau' = \sum_{el} \iint_{V_{el}} g(\tau'') f(\tau' - \tau'') d\tau'' d\tau', \quad (20)$$

де V_{el} - об'єм окремого елемента розбиття проекції області інтегрування. Сумування відбувається по всіх елементах $\bigcup_{el} V_{el} = [0, \tau'] \times [0, \tau]$.

Оскільки в результаті розбиття області інтегрування ми отримали квадратні і трикутні елементи, то формулу (20) можна подати у вигляді

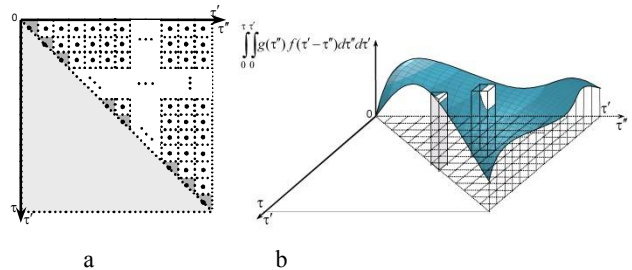


Рис. 4. Розбиття області інтегрування (а) та схема чисельного подвійного інтегрування зі змінними верхніми межами (б)

$$\sum_{el} \iint_{V_{el}} g(\tau'') f(\tau' - \tau'') d\tau'' d\tau' = \sum_{sq_{el}} \iint_{V_{sq_{el}}} g(\tau'') f(\tau' - \tau'') d\tau'' d\tau' + \sum_{tr_{el}} \iint_{V_{tr_{el}}} g(\tau'') f(\tau' - \tau'') d\tau'' d\tau', \quad (21)$$

де sq_{el} - квадратний елемент, tr_{el} - трикутний елемент; $V_{sq_{el}}$ і $V_{tr_{el}}$ - об'єми квадратного і трикутного елементів. У правій частині (21) перша сума знаходиться за всіма квадратними елементами sq_{el} , а друга - за всіма трикутними tr_{el} .

Відберемо з множини ті елементи V_{el} , які є квадратами (рис. 5а), що відмічені білим кольором на рис. 4а. І до цих елементів застосовуємо чисельне інтегрування в квадратурах [9, 10]. Тоді інтеграл (20) з квадратними елементами буде мати вигляд

$$\iint_{\bigcup_{sq_{el}} V_{el}} g(\tau'') f(\tau' - \tau'') d\tau'' d\tau' = \sum_{sq_{el}} \iint_{V_{sq_{el}}} g(\tau'') f(\tau' - \tau'') d\tau'' d\tau' = \sum_{i=1}^n \sum_{j=i-1}^n w^2 g(\tau_j'') f(\tau_i' - \tau_j'').$$

Тут $w = \tau'/n$. Зазначимо, що висота виділеного елемента інтегрування з квадратною основою (рис. 4б) є $h_{ij} = g(\tau_j'') f(\tau_i' - \tau_j'')$, і це значення береться в центрі квадрата, що позначено крапками на рис. 4а.

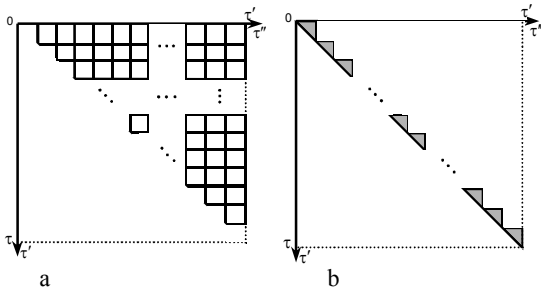


Рис. 5. Области, які складаються з квадратних (а) і трикутних (б) елементів

Враховуючи (21), потрібно знайти сумарний об'єм елементів, в основі яких є трикутники (рис. 5б), причому приймаючи, що сітка є рівномірною.

Суму об'ємів елементів із трикутною основою знаходимо у вигляді

$$\sum_{\tau_{el}} \iint_{V_{\tau_{el}}} g(\tau'') f(\tau' - \tau'') d\tau'' d\tau' = \frac{\sqrt{2}}{2} \sum_{i=1}^n w^2 g(\tau_i'') f(\tau_i' - \tau_i''), \quad (22)$$

де n - кількість трикутних елементів; $\tau_{i+1}' = \tau_i' + w$; τ_i' - значення τ' у i -му вузлі (трикутному елементі); τ'' - значення τ'' у i -му вузлі (трикутному елементі), а висота виділеного елемента інтегрування з трикутною основою $h_{ij} = g(\tau_j'') f(\tau_i' - \tau_j'')$ обчислюється у точці, що знаходиться на діагоналі (рис. 4а).

У результаті отримаємо наступну формулу чисельного інтегрування для подвійного інтегралу зі змінними верхніми межами, з урахуванням в тому числі формул (21) та (22)

$$\iint_{0,0}^{\tau,\tau'} f(\tau', \tau'') dx dy \approx \frac{1}{2} \sum_{i=1}^n w^2 g(\tau_i'') f(\tau_i' - \tau_i'') + \sum_{i=2}^n \sum_{j=i-1}^{n-1} w^2 g(\tau_j'') f(\tau_i' - \tau_j''), \quad (23)$$

де $\tau_{i+1}' = \tau_i' + w$; $\tau_{i+1}'' = \tau_i'' + w$.

Значимо, що кількість трикутних елементів на 1 менше ніж квадратних в найдовшому рядку.

З використанням формули (23) для чисельного інтегрування зі змінними верхніми межами аналітичний розв'язок для сорбованої домішкової речовини у шарі j можна записати у такому наближеному вигляді

$$c_2^{(j)}(t, x) \approx F_j(x) - \frac{2d_2}{\delta x} e^{\frac{v_2(x-x')}{2d_2}} \sum_{m=1}^{\infty} B_m(x) \times \left(\frac{1}{2} \sum_{i=1}^n w^2 g(\tau_i'') f(\tau_i' - \tau_i'') + \sum_{i=2}^n \sum_{j=i-1}^{n-1} w^2 g(\tau_j'') f(\tau_i' - \tau_j'') \right). \quad (24)$$

На рис. 5 показано обчислені за формулою (24) розподіли сумарної концентрації домішкової речовини, сорбо-

ваної на скелеті фільтра, у різні моменти безрозмірного часу $\tau = 0, 1; 0,6; 1; 2$ (криві 1-4, рис. 6а) та для різних значень стрибка концентрації в розчині на границі контакту $\lambda = 0,5; 1; 2; 3$ (криві 1-4, рис. 6б).

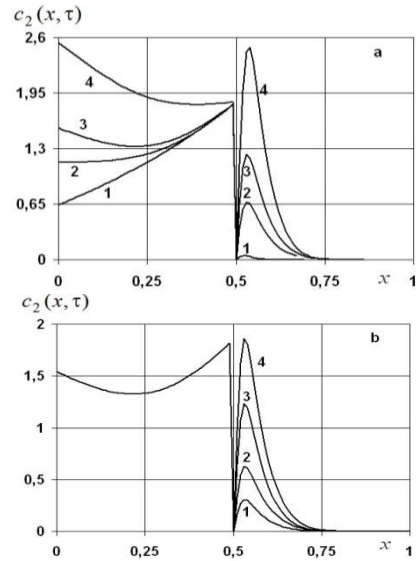


Рис. 6. Розподіли концентрації сорбованої домішкової речовини у двошаровому фільтрі в різні моменти часу (а) та для різних значень коефіцієнта λ (б)

Встановлено, що збільшення часу протікання процесу конвективної дифузії призводить до зростання концентрації сорбованої домішкової речовини у кожному з підшарів фільтра (рис. 6а). При цьому з часом змінюється поведінка функції концентрації в області Ω_1 : так для малих часів $c_2^{(1)}(x, \tau)$ є монотонно зростаючою функцією, для часів близьких до стаціонарних $c_2^{(1)}(x, \tau)$ монотонно спадає до границі контакту підобластей. У випадку коефіцієнтів дифузії забруднення, більших у першому шарі ($d_1 > d_2$), збільшення стрибка функції концентрації сорбованих на скелеті частинок на границі контакту викликає зростання локального максимуму концентрації в цієї околі границі (рис. 6б). Водночас поведінка функції концентрації у першій області не змінюється.

VI. ДОВГОВІЧНІСТЬ РОБОТИ ФІЛЬТРІВ

Якщо відоме максимальне значення концентрації частинок домішкової речовини, спроможної адсорбуватися скелетом тіла, то можна проаналізувати довговічність роботи фільтра. Зокрема, за умови $a_1 \ll a_2$ знайдемо час насичення τ_* , розв'язуючи нелінійне рівняння

$$\sup_{\xi \in \Omega_2} c_2^{(2)}(\xi, \tau_*) = N_2, \quad (25)$$

де N_2 - максимальна концентрація частинок домішки, здатних адсорбуватися на скелеті.

Для розв'язання рівняння (25) розвинуто метод на основі композиції методу простої ітерації та модифікації методу дихотомії. Алгоритм є наступним (рис. 7):

1. Задається початкове значення часу τ_0 , кроку розбиття

h_0 , точності обчислень ε та $k \in \mathbb{N}$.

2. Перевіряється умова зупинки алгоритму $|N_2 - c_2^2(\xi, \tau_i)| < \varepsilon$. Якщо вона справджується, то поточне значення τ_i є наближеним розв'язком необхідної точності і алгоритм завершується. У протилежному випадку здійснюється перехід на наступний крок.

3. Визначається знак виразу $N_2 - c_2^2(\xi, \tau_i)$. Якщо $N_2 - c_2^2(\xi, \tau_i) > 0$, то $\tau_i = \tau_{i-1} + h_j$. Протилежний випадок означає, що алгоритм вийшов за область значень функції $c_2^{(j)}(\xi, \tau)$ (оскільки $c_2^{(j)}(\xi, \tau) > 0$), і повертаємось до попередньої точки τ_{i-1} . Після чого застосовуємо метод простої ітерації, зменшуючи крок розбиття $h_j = h_{j-1}/k$. Тоді $\tau_i = \tau_{i-2} + h_{j+1}$.

4. Обчислюється значення функції $c_2^{(j)}(\xi, \tau)$ у новій точці τ_i та повертаємось до кроку 2.

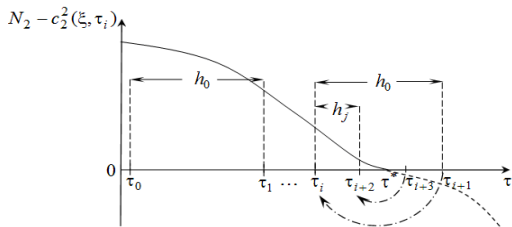


Рис. 7. Схема методу розв'язання нелінійного рівняння (25)

На рис.8 показані розподіли часу, за який відбувається насичення забрудненням другого шару фільтра, для різних значень відношення коефіцієнтів концентраційної залежності хімічних потенціалів в станах 1 і 2

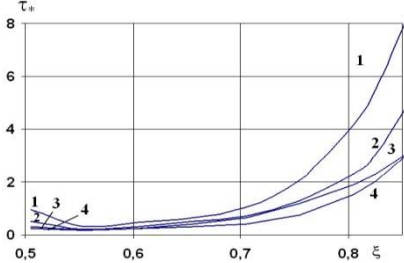


Рис. 8. Час насичення для різних значень відношення коефіцієнтів концентраційної залежності хімічних потенціалів в станах 1 і 2

значень відношення коефіцієнтів концентраційної залежності хімічних потенціалів в станах 1 і 2 $\lambda = 0,5; 1; 2; 3$ (криві 1-4). Тут прийнято наступні значення параметрів задачі $d_1 = 1; d_2 = 0,02; a_1 = 1; a_2 = 1,2; v_1 = 1; v_2 = 0,01$

Зазначимо, що час насичення збільшується в околі границі контакту і значно зростає біля нижньої границі фільтруючої установки (рис. 8).

Таким чином:

- Сформульовано основні модельні співвідношення процесів конвективної дифузії у двошаровому фільтрі з урахуванням двох станів частинок – у конвективно рухомому розчині і на поверхні скелету.

- Розроблено метод знаходження точних розв'язків контактнo-крайових задач масопереносу з урахуванням дифузійного і конвективного механізмів переносу та сорбції, який базується на застосуванні інтегральних перетворень окремо в контактуючих областях.

- Побудовано аналітичні розв'язки задачі конвективної дифузії для двошарового фільтра.

- Розроблено комплекс програм, модулі якого дозволяють розраховувати:

- концентрацію забруднення, яка переноситься із водним розчином через двошаровий фільтр;
- потік частинок через довільний переріз фільтра;
- концентрацію домішкової речовини, яка сорбована на скелеті;
- час насичення забруднюючою речовиною фільтра

- Встановлено основні закономірності процесу конвективної дифузії у двошаровій області та проаналізовано вплив фізичних і геометричних параметрів на досліджувані функції.

ЛІТЕРАТУРА REFERENCES

[1] Advanced Wastewater Treatment Technologies [Електрон. ресурс]. – Режим доступу: <http://www.waterform.com.au/Products/10004/nextSand.aspx>

[2] М. Журба, Основы процессов доочистки сточных вод фильтрованием // Тепло- и массообмен в капиллярнопористых телах. – 1965. – № 1. – С. 60-73.

[3] V. Lyulyu, D. Uhryn, A. Fityo, Modeling of territorial community formation as a graph partitioning problem // Eastern European J. of Enterprise Technologies. – 2016. -79, No 1/4. – P.47-52.

[4] А. Бомб, А. Сафоник, Числово-асимптотичне наближення розв'язків просторових модельних задач процесу аеробного очищення стічної води. // Вісник КрНУ ім. М. Остроградського. - 2011. - Вип. 6 (11), С. 31-36.

[5] С. Чапля, О. Чернуха, Фізико-математичне моделювання гетеродифузного масопереносу. – Львів: СПОЛЮМ, 2003. – 128 с.

[6] С. Чапля, О. Чернуха, Математичне моделювання дифузійних процесів у випадкових і регулярних структурах. – Київ: Наукова думка, 2009. – 302 с.

[7] Н. Мартыненко, Л. Пустыльников, Конечные интегральные преобразования и их применение к исследованию систем с распределенными параметрами. – М.: Наука, 1985. – 304 с.

[8] Э. Камке, Справочник по обыкновенным дифференциальным уравнениям. – М.: Наука, 1985. – 304 с.

[9] Справочник по специальным функциям / Под ред. М. Абрамовица и И. Стиган. – М.: Мир, 1979. – 830 с.

[10] А. Г. Блюмин, А. А. Федотов, П. В. Храпов, Численные методы вычисления интегралов и решения задач для обыкновенных дифференциальных уравнений. — М.: МГТУ им. Н.Э.Баумана, 2008. - 74 с.