

Ідентифікації масообмінного коефіцієнта у процесах очищення рідких середовищ від багатокomпонентного забруднення

<https://doi.org/10.31713/MCIT.2024.099>

Андрій Сафоник

Національний університет водного господарства та природокористування.
м. Рівне, Україна
a.p.safonyk@nuwm.edu.ua

Олег Рогов

Національний університет водного господарства та природокористування.
м. Рівне, Україна
rogovoleg4@gmail.com

Олена Полухович

Національний університет водного господарства та природокористування
м. Рівне, Україна
o.o.poliukhovych@nuwm.edu.ua

Наталія Ковальчук

Національний університет водного господарства та природокористування
м. Рівне, Україна
n.s.kovalchuk@nuwm.edu.ua

Анотація – У роботі запропоновано просторове узагальнення математичної моделі процесу очищення рідини від багатокomпонентних забруднень, де основна увага приділяється домінуванню конвективних складових над дифузійними. Модель враховує зворотний вплив ключових факторів, таких як концентрація забруднень у ріднині та осаді, на характеристики середовища, зокрема пористість і коефіцієнт дифузії. Додатково введено спеціальну умову перевизначення для визначення невідомого малого масообмінного коефіцієнта. Розроблено алгоритм розв'язку нелінійної оберненої задачі типу "конвекція-дифузія-масообмін", на основі якого проведено комп'ютерне моделювання.

Ключові слова – фільтрування, багатокomпонентна концентрація, конвекція, дифузія, масообмін, асимптотика, просторова нелінійна сингулярно збурена задача

I. ВСТУП

Аналіз дослідження [1] показує складну взаємозалежність різних факторів, що впливають на процеси фільтрації через пористі середовища, які не враховувалися в класичних моделях таких систем. У роботі [2] було доведено, що форма фільтра відіграє важливу роль у процесі фільтрування, оскільки вона може як збільшувати, так і зменшувати параметри фільтрації, впливаючи на загальну продуктивність. Однак на сьогодні відсутні моделі, які враховують зворотний вплив характеристик процесу на середовище та дозволяють ідентифікувати невідомі параметри в процесах очищення рідин від багатокomпонентного забруднення. У роботі [3] запропоновано математичну модель очищення рідини через пористу насадку, яка враховує зворотний вплив концентрації осаду на параметри фільтрації, причому деякі коефіцієнти процесу визначалися експериментально.

Метою даної роботи є просторове узагальнення математичної моделі очищення рідини від багатокomпонентного забруднення [4], де домінують

конвективні складові. Модель враховує зворотний вплив ключових факторів (концентрація забруднень і осаду) на характеристики середовища (пористість, дифузія) і містить додаткову умову перевизначення для визначення невідомого масообмінного коефіцієнта, а також побудову асимптотичного розв'язку нелінійної оберненої задачі.

II. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧА

Розглядався зернистий (пористий) фільтр, що має форму криволінійного паралелепіпеда $GZ = ABCDA * B * C * D *$, обмежений гладкими ортогональними між собою в кутових точках і ребрах еквіпотенціальними поверхнями $ABB_* A_* = \{z : f_1(x, y, z) = 0\}$, $CDD_* C_* = \{z : f_2(x, y, z) = 0\}$ та поверхнями течії $ADD_* A_* = \{z : f_3(x, y, z) = 0\}$, $BCC_* B_* = \{z : f_4(x, y, z) = 0\}$, $ABCD = \{z : f_5(x, y, z) = 0\}$, $A_* B_* C_* D_* = \{z : f_6(x, y, z) = 0\}$.

Аналогічно до [3] припускали, що частинки забруднюючих домішок можуть змінювати свій стан (процеси захоплення та відриву, сорбції та десорбції тощо), і при цьому концентрації забруднень впливають на властивості середовища, такого як пористість або коефіцієнт фільтрації. При цьому концентрація забруднень є багатокomпонентною:

$$C = C(x, y, z, t) = (C_1, \dots, C_m) = (C_1(x, y, z, t), \dots, C_m(x, y, z, t))$$

де C_i концентрація i -ої компоненти домішки ($i = \overline{1, m}$) у рідкому фільтруючому середовищі. Відповідний процес фільтрування для області $G = GZ \times (0, \infty)$ було описано наступною модельною задачею:

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{\partial(\sigma(P)C_i)}{\partial t} &= \varepsilon\alpha_i(t)\rho_i - \vec{v} \cdot \vec{\nabla} C_i - \beta_i \left(\sum_{p=1}^m q_p C_p \right) - \\ &- \varepsilon f_{m-1} \left(\sum_{p_1, \dots, p_u=1}^m h_{i, p_1, \dots, p_u} C_{i,0}^{y_i} C_{p_1}^{y_{p_1}} \dots C_{p_u}^{y_{p_u}} \right) + D_i \Delta C_i, \quad (1) \\ \frac{\partial P}{\partial t} &= \left(\sum_{i=1}^m \beta_i C_i \right) - \varepsilon \alpha(t) P, \quad i = \overline{1, m}, \end{aligned} \right.$$

$$C_i \Big|_{ABB, A_s} = C_{i,*}(M, t), \quad \frac{\partial C_i}{\partial \bar{n}} \Big|_{CDD, C_s} = 0,$$

$$\frac{\partial C_i}{\partial \bar{n}} \Big|_{ADD, A_s \cup BCC, B_s \cup ABCD \cup A_s B_s C_s D_s} = 0,$$

$$C_i(x, y, z, 0) = C_{i,0}^0(x, y, z), \quad (2)$$

$$P(x, y, z, 0) = P_0^0(x, y, z)$$

$$\vec{v} = \kappa \nabla \varphi, \quad \nabla \cdot \vec{v} = 0, \quad (3)$$

$$\varphi \Big|_{ABB, A_s} = \varphi_*, \quad \varphi \Big|_{CDD, C_s} = \quad (4)$$

$$\varphi^*, \quad \frac{\partial \varphi}{\partial \bar{n}} \Big|_{ADD, A_s \cup BCC, B_s \cup ABCD \cup A_s B_s C_s D_s} = 0$$

$$\alpha(t) \iiint_G P(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z}, t) d\tilde{x} d\tilde{y} d\tilde{z} = \mu(t) \quad (5)$$

де $P(x, y, z, t)$ – концентрація осаду у внутрішній точці (x, y, z) області G (завантаження фільтра) в момент часу t ; β_i – коефіцієнти, що характеризують масові об'єми осадження домішок за одиницю часу, $\alpha(t)$ – шуканий коефіцієнт, що характеризує масові об'єми відірваних від гранул завантаження частинок, $\mu(t)$ – функція, що характеризує масові розподілу осаду з часом (знаходиться експериментальним способом [5]), (4) – умова пере визначення; $\sigma(P)$ – пористість середовища ($\sigma(P) = \sigma_0 - \varepsilon \sigma_* P(x, y, z, t)$); $\vec{\nabla}$ – оператор Гамільтона; $\Delta = \vec{\nabla} \cdot \vec{\nabla}$ – оператор Лапласа; $D_i = d_{0i} \varepsilon$ – коефіцієнт дифузії домішки у рідині; σ_* , d_{0i} , ε – тверді параметри (характеризують відповідний м'який параметр $\sigma(P)$), що знаходяться експериментальним способом, ε – малий параметр (він характеризує переваги одних складників процесу над іншими, а саме, десорбційні складники та явища міжкомпонентної взаємодії цього процесу є малими порівняно з іншими його складниками); $C_i^*(M, t)$, $C_{i,0}^0(x, y, z)$ – достатньо гладкі функції, узгоджені між собою на ребрах області G ; M – довільна точка відповідної поверхні; φ – фільтраційний потенціал ($0 < \varphi_* \leq \varphi \leq \varphi^* < \infty$); $\vec{v}(v_x, v_y, v_z)$ – вектор швидкості фільтрації ($|\vec{v}| > v_* \gg \varepsilon$), κ – коефіцієнт фільтрації.

III. ВИРІШЕННЯ ПОСТАВЛЕНОЇ ЗАДАЧІ

Розв'язок поставленої задачі з точністю $O(\varepsilon^n)$ знайдено у вигляді асимптотичних рядів [3, 4]:

$$c_i = c_{i,0} + \sum_{j=1}^n \varepsilon^j c_{i,j} + \sum_{j=0}^n \varepsilon^j \Pi_{i,j} + \sum_{j=0}^n \varepsilon^j \tilde{\Pi}_{i,j} + \sum_{j=0}^{n+1} \varepsilon^{j/2} \tilde{\tilde{\Pi}}_{i,j} + \sum_{j=0}^{n+1} \varepsilon^{j/2} \tilde{\tilde{\tilde{\Pi}}}_{i,j} + R_{c,i} \quad (6)$$

$$\rho = \rho_0 + \sum_{j=1}^n \varepsilon^j \rho_j + \sum_{j=0}^n \varepsilon^j \bar{P}_j + \sum_{j=0}^n \varepsilon^j \tilde{P}_j + \sum_{j=0}^{n+1} \varepsilon^{j/2} \tilde{\tilde{P}}_j + \sum_{j=0}^{n+1} \varepsilon^{j/2} \tilde{\tilde{\tilde{P}}}_j + R_\rho \quad (7)$$

$$\alpha = \alpha_0 + \sum_{j=1}^k \varepsilon^j \alpha_j + R_\alpha \quad (8)$$

де $R_{c,i}(\varphi, \psi, \eta, t, \varepsilon)$, $R_\rho(\varphi, \psi, \eta, t, \varepsilon)$, $R_\alpha(\varphi, \psi, \eta, t, \varepsilon)$ – залишкові члени, $c_{i,j}(\varphi, \psi, \eta, t)$, $\rho_j(\varphi, \psi, \eta, t)$, $\alpha_j(t)$ – члени регулярної частини асимптотики ($i = \overline{1, m}$; $j = \overline{0, n}$); $\Pi_{i,j}(\xi, \psi, \eta, t)$, $\bar{P}_j(\xi, \psi, \eta, t)$ – функції типу примежового шару в околі $\varphi = \bar{\varphi}^*$ (поправки на виході з фільтра) ($j = \overline{0, 2}$), $\tilde{\Pi}_{i,j}(\tilde{\xi}, \psi, \eta, t)$, $\tilde{P}_j(\tilde{\xi}, \psi, \eta, t)$ – в околі $\varphi = \bar{\varphi}^*$ (поправки на вході у фільтр) ($j = \overline{0, 2}$), а функції $\tilde{\tilde{\Pi}}_{i,j}(\varphi, \tilde{\psi}, \eta, t)$, $\tilde{\tilde{\tilde{\Pi}}}_{i,j}(\varphi, \tilde{\psi}, \eta, t)$, $\tilde{\tilde{\Pi}}_{i,j}(\varphi, \psi, \tilde{\eta}, t)$, $\tilde{\tilde{\tilde{\Pi}}}_{i,j}(\varphi, \psi, \tilde{\eta}, t)$ та $\tilde{P}_j(\varphi, \tilde{\psi}, \eta, t)$, $\tilde{\tilde{P}}_j(\varphi, \tilde{\psi}, \eta, t)$, $\tilde{P}_j(\varphi, \psi, \tilde{\eta}, t)$, $\tilde{\tilde{P}}_j(\varphi, \psi, \tilde{\eta}, t)$ ($j = \overline{0, 3}$) – в околах $\psi = 0$, $\psi = Q^*$, $\eta = 0$, $\eta = Q^*$ (поправки в околі бічних «стінок» фільтра), відповідно; $\xi = (\varphi^* - \varphi)/\varepsilon$, $\tilde{\xi} = (\varphi - \varphi_*)/\varepsilon$, $\tilde{\psi} = \psi/\sqrt{\varepsilon}$, $\tilde{\tilde{\psi}} = (Q_* - \psi)/\sqrt{\varepsilon}$, $\tilde{\eta} = \eta/\sqrt{\varepsilon}$, $\tilde{\tilde{\eta}} = (Q^* - \eta)/\sqrt{\varepsilon}$ – «розтяги» відповідних змінних.

Для фільтра характерна значна просторовість засипки, «поступове звуження» в напрямку від входу до виходу, що підтверджується практичним досвідом. Крім того, важливою є взаємна ортогональність граней уздовж ребер та в кутових точках, що значно спрощує процес побудови просторового конформного відображення.

На рис. 1 проілюстровано розподіл концентрації c_1, c_2 і ρ з часом вздовж ліній течії для $L = 1\text{ м}$, $\beta_i = 0.28 \text{ м}^2/\text{с}$, $\alpha_0 = 0.0053 \text{ м}^2/\text{с}$, $\sigma_0 = 0.51$, $\varepsilon = 0.00097$; $k = 1$; $c_{1,0}^0(\varphi, \psi, \eta) = 0.016 \exp(-\varphi^2)$, $c_{2,0}^0(\varphi, \psi, \eta) = 0.022 \exp(-\varphi^2)$, $c_1^*(\psi, \eta, t) = 0.016$, $c_2^*(\psi, \eta, t) = 0.022$, $\rho_0^0(\varphi, \psi, \eta) = 0$.

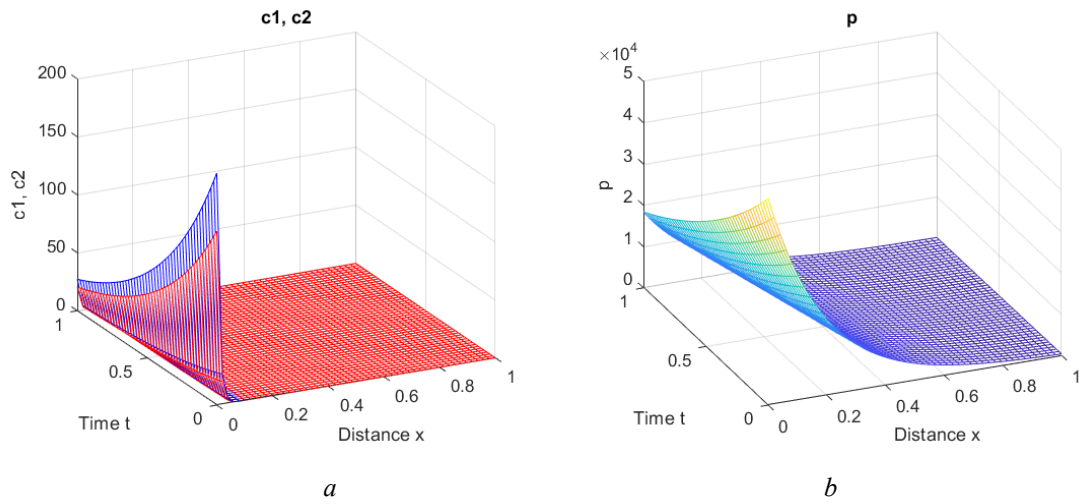


Рис. 1. Просторовий розподіл концентрації c_1, c_2 - (a) і ρ - (b)

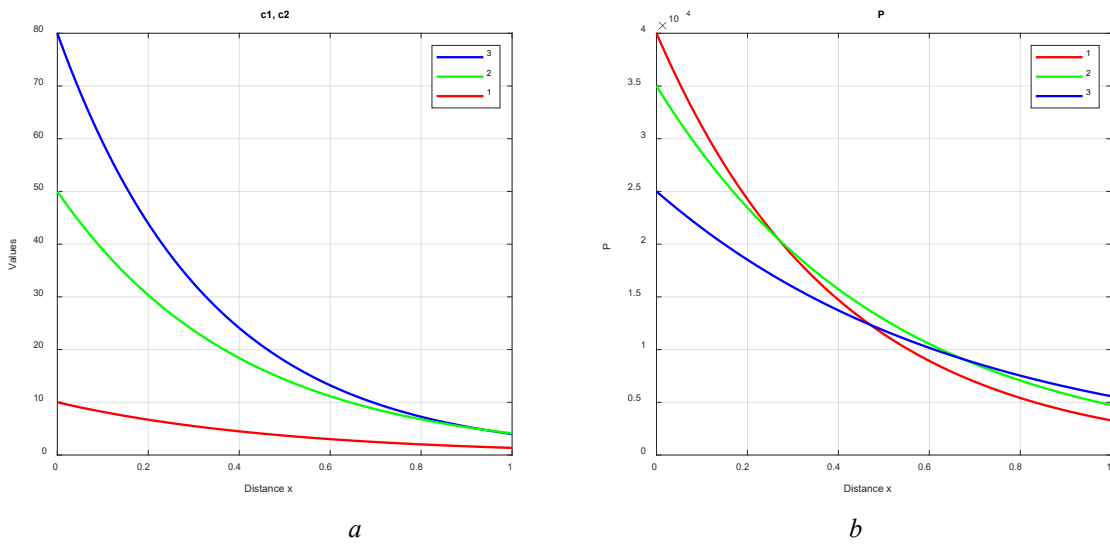


Рис.2. Розподіл концентрації c_1, c_2 - (a) і ρ - (b) вздовж фільтра в різні моменти часу (для $t_1 = 10$ год, $t_2 = 20$ год, $t_3 = 30$ год)

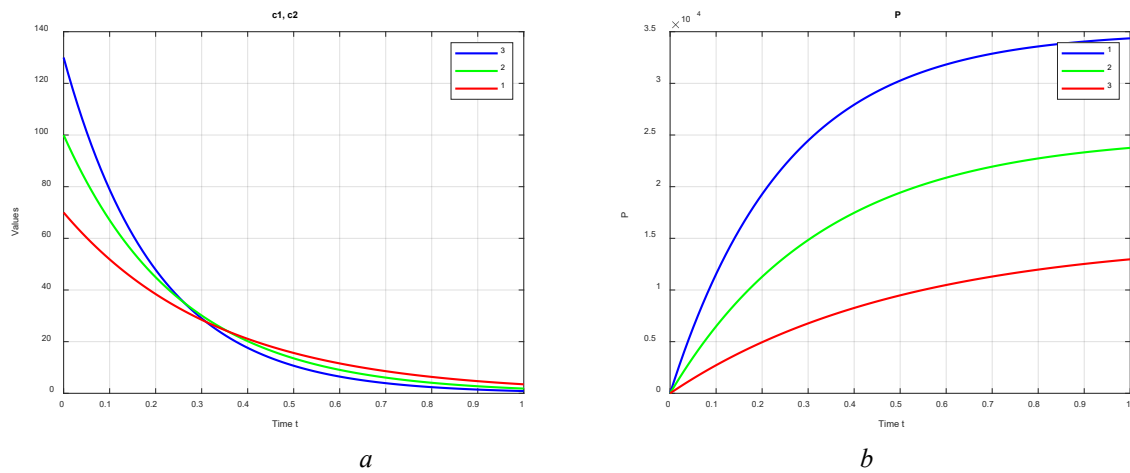


Рис.3. Розподіл концентрації c_1, c_2 - (a) і ρ - (b) з часом в різних поперечних перерізах фільтра (для $x_1 = 25$ см, $t_2 = 50$ см, $t_3 = 75$ см)

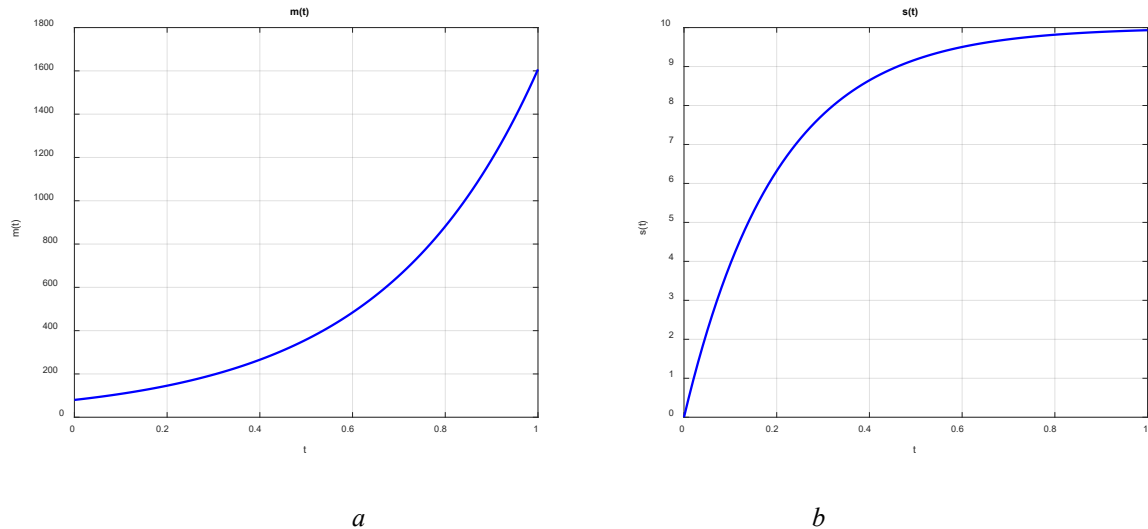


Рис.4. Масовий розподіл осаду $\mu(t)$ - (a) і відповідного масо обмінного коефіцієнта $\alpha(t)$ - (b) з часом

На рисунках 2 і 3 показано розподіл концентрацій c_1, c_2 і ρ у часі та в різних поперечних перерізах фільтра вздовж ліній потоку. В результаті інтерполяції експериментальних даних [5], нами отримано масовий розподіл осаду $\mu(t)$ у часі (рис. 4a). Залежність масообмінного коефіцієнта $\alpha(t)$ від часу представлено на рисунку 4b. Збільшення масообмінного коефіцієнта з часом пояснюється тим, що в даному випадку, при експериментально визначеному значенні $\mu(t)$, під час осадження частинок гранули пористого матеріалу максимально насичуються домішковими частинками. Під дією гідравлічного напору зростає ймовірність відриву частинок від гранул до моменту завершення ефективної роботи фільтра.

Порівнюючи ці результати з розрахунковими даними, отриманими в [4], видно, що розрахунки, засновані на просторово узагальненій математичній моделі процесу очищення рідини, можуть як позитивно, так і негативно характеризувати процес фільтрації, в залежності від форми просторового фільтра.

IV. ВИСНОВКИ

Запропоновано просторове узагальнення математичної моделі очищення рідини від багатоконпонентних забруднень, де домінують конвективні складові. Модель враховує зворотний вплив ключових факторів (концентрації забруднень і осаду) на властивості середовища, такі як коефіцієнт пористості та дифузії, і включає спеціальну умову перевизначення для визначення невідомого масообмінного коефіцієнта. Розв'язок оберненої задачі дозволяє суттєво наблизити числові

результати до експериментальних даних у порівнянні з класичними моделями [5], що забезпечує точніше прогнозування та розрахунок ефективності осадження домішок у різних водно-дисперсних системах. Аналіз показав, що форма фільтра значно впливає на параметри фільтрації та загальну продуктивність. У подальших дослідженнях планується моделювання фільтраційних процесів за умов неповних даних та їх автоматизація (див. [4, 5, 6]).

ЛІТЕРАТУРА

- [1] Маринець, В & Когутич, О & Питьовка, О. (2023). Один підхід дослідження математичної моделі поширення вологи у пористих середовищах. Науковий вісник Ужгородського університету. Серія: Математика і інформатика. 43. 42-51. 10.24144/2616-7700.2023.43(2).42-51.
- [2] Бомба А.Я. Числово-асимптотичне наближення розв'язків просторових модельних задач процесу фільтрування / Андрій Бомба, Юрій Климук, Андрій Сафоник, Віктор Сівак. // Фізико-математичне моделювання та інформаційні технології. – 2010. – Вип. 11. – С. 29-38.
- [3] Бомба А.Я. Нелінійні задачі типу фільтрація-конвекція-дифузія-масообмін за умов неповних даних / Бомба А. Я., Гаврилюк В.І., Сафоник А.П., Фурсачик О.А. // Монографія. – Рівне : НУВГП, 2011. – 276 с.
- [4] Бомба А.Я. Математическое моделирование процесса фильтрования жидкости от многокомпонентного загрязнения с учетом обратного влияния характеристик процесса на характеристики среды / Бомба А.Я., Сафоник А.П. // Проблемы управления и информатики. 2013. – № 2. – С. 49—54.
- [5] Volk, Liubov & Безусьяк, Олександр. (2023). Коефіцієнт гідравлічного опору в трубах з однорідною зернистою шорсткістю. Modeling Control and Information Technologies. 210-211. 10.31713/MCIT.2023.064.
- [6] Сергиенко І.В., Дейнека В.С. Идентификация градиентными методами параметров задач диффузии вещества в нанопористой среде // Проблемы управления и информатики. – 2010. – №6. С. – 5-18.