

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА РАСТВОРЕНИЯ ВЕЩЕСТВ В КАМЕРЕ СМЕШЕНИЯ

Розроблено двовимірну математичну модель розчинення речовини у камері змішування. Модель заснована на чисельному інтегруванні рівняння переносу домішки та моделі течії невязкої рідини. Наведено результати обчислювального експерименту.

Разработана двухмерная математическая модель растворения вещества в камере смешения. Модель основана на численном интегрировании уравнения миграции примеси и модели течения невязкой несжимаемой жидкости. Приводятся результаты вычислительного эксперимента.

A 2-D computer model has been developed to simulate a dissolution process in a mixing chamber. The model is based on the gradient transport model and potential flow model numerical integration. Results of numerical experiments are presented.

Во многих областях техники существуют устройства, в состав которых входят камеры смешения, в которых происходит растворение тех или иных веществ. В водоснабжении примером таких камер является устройства, в которых происходит растворение различных реагентов. При проектировании, реконструкции этих устройств всегда возникает задача прогнозирования качества процесса растворения в камере смешения. В самой общей постановке теоретическое решение такой задачи является очень сложным. Поэтому на практике для расчета камер смешения обычно используют два подхода [2; 3].

Первый подход базируется на использовании простых балансовых соотношений, при этом вводится понятие «аппарат идеального вытеснения», аппарат не идеального вытеснения» [2]. Во втором направлении для расчета камеры смешения используется аналитическое решение одномерного уравнения конвективно-диффузионного переноса примесей [2].

Оба эти подхода обладают рядом существенных недостатков, и в первую очередь следует отметить что они не дают возможности учесть при расчете влияние гидродинамики потока на процесс растворения и смешения, т. е. форма камеры, где реализуется процесс не учитывается. Принимая во внимание, то что конструкция камер смешения может иметь сложную геометрическую форму, которая оказывает влияние на формирование поля скорости внутри камеры, становится очевидным, что возможности перечисленных выше подходов существенно ограничены. Возрастающие требования к качеству расчетной информации, способствуют созданию новых эффективных методов расчета камер смешения.

Целью настоящей работы является разработка численной модели гидродинамики течения и переноса примесей в областях сложной геометрической формы и создания на основе этой модели метода расчета процесса растворения веществ в камере смешения.

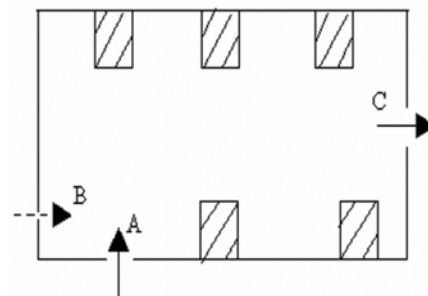


Рис. 1. Схема камеры смешения:
A, B – участок втекания жидкости;
C – участок вытекания потока из камеры

В качестве исходной базовой модели для описания миграции вещества в камере смешения используется уравнение конвективно-диффузионного переноса примеси, осредненное по ширине камеры смешения [1]

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

где C – концентрация вещества в жидкой среде (т. е. нерастворенного); u, v – компоненты вектора скорости жидкой среды в декартовой системе координат X, Y ; σ – коэффициент, учитывающий скорость процесса растворения; μ_x, μ_y – коэффициенты диффузии; t – время.

Будем считать что известно время растворения вещества – t_p , $\sigma = f(t_p)$.

Постановка краевых условий для уравнения (1) рассмотрена в работе [1]. Будем считать, что движение водной среды является потенциальным, тогда компоненты скорости определяются соотношениями

$$u = \frac{\partial P}{\partial x}, \quad v = \frac{\partial P}{\partial y},$$

где P – потенциал скорости.

Уравнение для определения потенциала имеет вид

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

Для численного интегрирования уравнений модели применяется прямоугольная разностная сетка. Для уравнения (2) ставятся следующие граничные условия: на выходящей границе (см. рис. 1) задается значение потенциала; верхняя и нижняя границы считаются твердыми непроницаемыми стенками и на них ставится условие

$$\frac{\partial P}{\partial n} = 0,$$

где n – единичный вектор внешней нормали к границе; на границах, где в расчетную область входит поток ставится условие Неймана

$$\frac{\partial P}{\partial n} = V,$$

где V – скорость втекания.

Метод решения. Для численного интегрирования уравнения (1) применяется на прямоугольная разностная сетка. Рассмотрим неявную разностную схему расщепления [1], которая положена в основу разработанного алгоритма расчета.

Произведем следующую аппроксимацию производных, входящих в уравнение (1):

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

$$\frac{\partial u C}{\partial x} = \frac{\partial u^+ C}{\partial x} + \frac{\partial u^- C}{\partial x};$$

$$\frac{\partial v C}{\partial y} = \frac{\partial v^+ C}{\partial y} + \frac{\partial v^- C}{\partial y};$$

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

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

$$\frac{\partial v^+ C}{\partial y} \approx \frac{v_{i,j+1}^+ C_{ij}^{n+1} - v_{ij}^+ C_{i,j-1}^{n+1}}{\Delta y} = L_y^+ C^{n+1};$$

$$\frac{\partial v^- C}{\partial y} \approx \frac{v_{i,j+1}^- C_{i,j+1}^{n+1} - v_{ij}^- C_{ij}^{n+1}}{\Delta y} = L_y^- C^{n+1},$$

где

$$u^+ = \frac{u + |u|}{2}; \quad u^- = \frac{u - |u|}{2};$$

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

Следуя работе [1], компоненты скорости потока u будем задавать на вертикальных гранях разностной ячейки, а компоненты скорости v – на горизонтальных гранях. Вторые производные аппроксимируем так:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) \approx \tilde{\mu}_x \frac{C_{i+1,j}^{n+1} - C_{ij}^{n+1}}{\Delta x^2} -$$

$$\frac{\partial}{\partial y} \left(\mu_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) \approx \tilde{\mu}_y \frac{C_{i,j+1}^{n+1} - C_{ij}^{n+1}}{\Delta y^2} -$$

$$-\tilde{\mu}_y \frac{C_{ij}^{n+1} - C_{i,j-1}^{n+1}}{\Delta y^2} = M_{yy}^- C^{n+1} + M_{yy}^+ C^{n+1}.$$

В используемых выражениях L_x^+ , L_x^- , L_y^+ , L_y^- , M_{xx}^+ , M_{xx}^- , M_{yy}^+ , M_{yy}^- – обозначения разностных операторов.

С учетом этих обозначений разностный аналог уравнения (1) будет иметь вид:

$$\frac{C_{ij}^{n+1} - C_{ij}^n}{\Delta t} + L_x^+ C^{n+1} + L_x^- C^{n+1} +$$

$$L_y^+ C^{n+1} + L_y^- C^{n+1} + \sigma C_{ij}^{n+1} =$$

$$= (M_{xx}^+ C^{n+1} + M_{xx}^- C^{n+1} + M_{yy}^+ C^{n+1} + M_{yy}^- C^{n+1}).$$

Решение данного разностного уравнения расщепляется на 4 шага при интегрировании на временном интервале dt :

- на первом шаге $k = \frac{1}{4}$:

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

$$= \frac{1}{4} (M_{xx}^+ C^k + M_{xx}^- C^k + M_{yy}^+ C^k + M_{yy}^- C^k);$$

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

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

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

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

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

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

В данные разностные соотношения входит «возмущенный» коэффициент диффузии $\tilde{\mu}$. Численное интегрирование уравнения для потенциала скорости осуществляется с использованием метода Либмана.

Алгоритм решения задачи о расчете процесса растворения вещества в камере смешения заключается в следующем:

- 1) вводится информация о размерах расчетной области, форме камеры смешения;
- 2) задается место втекания и вытекания потока, скорость потока на входе в камеру;
- 3) вводится информация о концентрации вещества на входе в камеру смешения;
- 4) выполняется расчет уравнения для потенциала и определяется значение поля потенциала в расчетной области;
- 5) рассчитывается результирующее поле скорости потока жидкости внутри камеры;
- 6) рассчитывается уравнение миграции вещества в камере смешения и процесс растворения этого вещества.

Алгоритм решения задачи реализован в виде пакета прикладных программ. Рассмотрим применение разработанной численной модели для решения следующей прикладной задачи.

Рассмотрим камеру смешения, имеющую длину 4 м, высоту 1 м и ширину 1 м. Внутри камеры расположено пять перегородок, оказывающих влияние на деформацию скорости течения (см. рис. 1).

Подача в камеру смешения воды, содержащей частицы вещества, которое будет растворяться внутри камеры, осуществляется снизу (см. рис. 1, зона А) и сбоку (см. рис. 1, зона С). Таким образом исследуется влияние места подачи воды на процесс растворения. Концентрации частиц растворяемого вещества на входе в камеру растворения $C=1$. Кроме этого, при проведении вычислительного эксперимента, рассматривается два варианта скорости растворения вещества – время растворения $t_p = 10$ с и $t_p = 10$ с. Рассмотрим результаты вычислительного эксперимента.

На рис. 2, 3 показано распределение концентрации растворяемого вещества внутри камеры смешения ($t_p = 70$ с) для двух вариантов места подачи воды.

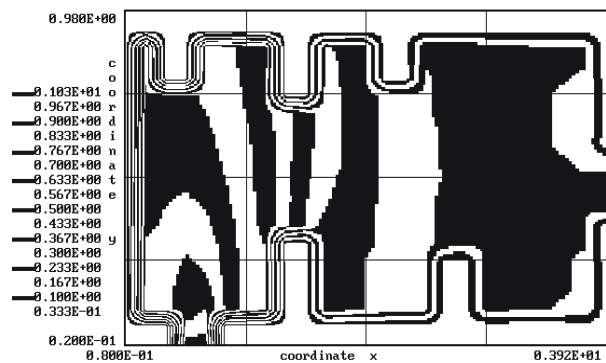


Рис. 2. Распределение концентрации растворяемого вещества в камере смешения (подача воды снизу, время растворения 30 с, момент времени $t = 75$ с)

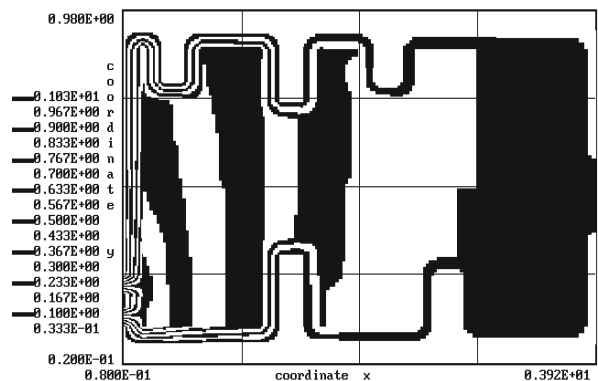


Рис. 3. Распределение концентрации растворяемого вещества в камере смешения (подача воды сбоку, время растворения 30 с, момент времени $t = 75$ с)

В таблице представлены расчетные значения концентрации растворяемого вещества вдоль оси камеры смешения на уровне $y = 0,5$ м. Варианту 1 соответствует время растворения вещества –

10 с (подача воды снизу); варианту 2 – время растворения вещества – 30 с (подача воды снизу); варианту 3 – время растворения вещества – 30 с (подача воды сбоку).

Таблица

**Распределение концентрации
растворимого вещества (%)
вдоль оси камеры смещения ($t = 75$ с)**

X , м	Вариант 1	Вариант 2	Вариант 3
0,15	54	73	49
0,60	56	72	39
1,05	39	59	30
1,50	18	38	19
1,95	10	28	14
2,85	4	18	8
3,95	3	16	8

Данные таблицы позволяют оценить эффективность протекания процесса растворения для каждого рассматриваемого варианта. Хорошо видно, что наибольшее растворение достигается при времени растворения равном 10 с, однако если сравнить процесс растворения, характеризующийся временем растворения равном 30 с. то видно, что лучшее «качество» растворения имеет место при подаче воды сбоку. Так, например, в точке $x = 2,85$ м концентрация

вещества не растворившегося при подаче снизу, составляет 18 %, а при подаче сбоку – 8 %.

Выводы

Разработана численная модель процесса растворения вещества в камере смешения с учетом процесса гидродинамики. Для расчета поля скорости в областях сложной геометрической формы используется двухмерная модель движения безотрывных потоков невязкой несжимаемой жидкости. Процесс движения и растворения вещества в камере смешения описывается моделью градиентного типа.

Расчет одного варианта задачи требует около 2 с машинного времени, что позволяет оперативно выполнить расчет проектируемой камеры смешения. Дальнейшее развитие данного подхода следует осуществлять в направлении создания математической модели, учитывающей вязкостные эффекты.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Згуровский М. З. 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.
2. Кичин В. И. Моделирование процессов очистки воды. – М: Изд-во АСВ, – 2003. – 230 с.
3. Кульский Л. А. Теоретические основы и технология кондиционирования воды. – К.: Наук. думка, 1983. – 528 с.

Поступила в редколлегию 14.12.2005.