



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 84 за 2022 г.



ISSN 2071-2898 (Print)
ISSN 2071-2901 (Online)

Т.А. Кудряшова, Ю.Н. Карамзин,
С.В. Поляков, Н.И. Тарасов

Математическое
моделирование физических
процессов в
электромагнитных фильтрах
воды и теплообменных
установках

Статья доступна по лицензии
[Creative Commons Attribution 4.0 International](https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/)



Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Математическое моделирование физических процессов в электромагнитных фильтрах воды и теплообменных установках / Т.А. Кудряшова [и др.] // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2022. № 84. 24 с.
<https://doi.org/10.20948/prepr-2022-84>
<https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2022-84>

Ордена Ленина
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М.В.Келдыша
Российской академии наук

Т.А. Кудряшова, Ю.Н. Карамзин, С.В. Поляков,
Н.И. Тарасов

Математическое моделирование
физических процессов
в электромагнитных фильтрах воды
и теплообменных установках

Москва — 2022

Кудряшова Т.А., Карамзин Ю.Н., Поляков С.В., Тарасов Н.И.

Математическое моделирование физических процессов в электромагнитных фильтрах воды и теплообменных установках

В работе предлагается комплексная математическая модель, предназначенная для анализа процессов, проходящих в электромагнитных фильтрах воды и теплообменных установках в части образования и удаления накипи. Для учета фильтрационных эффектов формируемая математическая модель включает модели течения жидкости с учетом тепловых эффектов, эволюции концентрации загрязнителя с отражением конвекционно-диффузионных процессов и электростатических эффектов. Программная реализация вычислительного алгоритма для трехмерной геометрии основана на сеточном методе конечного объема и параллельных вычислениях. С помощью разработанного программного пакета были получены результаты модельных расчетов для задачи об электромагнитной очистке водной среды и задачи о загрязнении тепловыделяющего элемента.

Ключевые слова: электрофизическая технология, осаждение карбоната кальция, очистка воды, квазигидродинамическая модель, математическое моделирование

Tatiana Alekseevna Kudryashova, Yuri Nikolaevich Karamzin, Sergey Vladimirovich Polyakov, Nikita Igorevich Tarasov

Mathematical modeling of physical processes in electromagnetic water filters and heat exchangers

The paper proposes a complex mathematical model designed to analyze the processes taking place in electromagnetic water filters and heat exchangers in terms of scale formation and removal. The formed mathematical model includes models of fluid flow taking into account thermal effects, the evolution of pollutant concentration with the reflection of convection-diffusion processes and electrostatic effects to take into account filtration effects. The software implementation of the computational algorithm for three-dimensional geometry is based on the finite volume grid method and parallel computing. The results of model calculations were obtained for the problem of electromagnetic water cleaning and the problem of scale contamination of the heat exchanger using the developed software package.

Key words: electrophysical technology, calcium carbonate precipitation, water purification, quasi-hydrodynamic model, mathematical modelling

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Национального научного фонда Болгарии № 20-51-18004.

1. Введение

Вода является важным компонентом множества общехозяйственных технологий и промышленных производств. Загрязнение воды является глобальной проблемой. Промышленность производит огромное количество жидких отходов, несущей основой которых является вода. В состав этих отходов входят токсичные загрязняющие вещества. Многие отрасли промышленности не имеют надлежащей системы мониторинга и утилизации отходов и сбрасывают их в окрестные водоемы. От этого страдает вся природная среда, в том числе люди, животные, микроорганизмы и растительность. Кроме отравляющих веществ загрязненная вода содержит множество возбудителей различных инфекций [1-3], приводящих к смерти до 2 млн человек каждый год [4]. Выходом из этой ситуации является создание эффективных систем очистки воды и контроля за ее качеством.

Одним из способов решения проблемы очистки воды от загрязнений является создание фильтрационных сооружений, состоящих из многоуровневых систем очистки [5-7]. При этом используются различные методики и физические процессы, включающие фильтры, основанные на механических, тепловых, химических и электромагнитных эффектах, а также смешанный, гибридный подход, их объединяющий.

В данной работе обсуждается технология электромагнитной фильтрации [8-11]. Такой механизм очистки заключается в разделении водного потока на нейтральные, положительно и отрицательно заряженные компоненты. При воздействии на поток магнитного и электрического полей возникает сила Лоренца, которая способствует такому разделению. Технически воздействие магнитного поля реализуется путем применения сильных постоянных магнитов или соленоидов, окружающих трубопровод. Электрическое воздействие реализуется путем погружения в трубопровод необходимого числа электродов. Цель электромагнитной фильтрации – локализация заряженных частиц или растворенных ионов загрязнителей в предсказуемой области, откуда обогащенный ими раствор возможно либо отвести, либо задержать на продолжительное время, получив на выходе из системы очищенную воду. При этом управление качеством очистки осуществляется посредством регулирования силы электромагнитного воздействия. Дополнительным преимуществом данного способа очистки является возможность эффективной регенерации очистной системы, а также извлечение из примесей полезных веществ пригодных для вторичной переработки (например, извлечение из морской воды редкоземельных и благородных металлов). Предложенный способ фильтрации рассматривается в данной работе в рамках первого модельного расчета (Задача 4.1).

Кроме предложенного электромагнитного способа очистки, рассматриваемого в данной работе, эффективной методикой обеззараживания воды является ее нагрев и кипячение. Этот процесс является энергоемкой

процедурой, вследствие чего требуется совершенствование технических систем нагрева и подбор оптимальных параметров их эксплуатации. Последней проблеме посвящено множество трудов, например, работа [12-14]. Вопросы энергетической эффективности нагревательной системы особенно остро стоят в странах Азии, Африки и Латинской Америки.

Из практики хорошо известен эффект образования накипи при нагреве жесткой воды, содержащей высокую концентрацию различных солей. Образование твердого осадка на теплонагревательном элементе (ТЭНе) приводит к падению энергоэффективности системы, а в конечном итоге может привести к выходу из строя ее функциональных блоков [14]. Вопрос образования и удаления накипи отражен в данной работе в рамках второй модельной задачи (Задача 4.2).

В последнее время технологии очистки объединяются в замкнутые циклы фильтрации воды и регенерации очищающей системы [6-13]. Моделирование такого цикла предполагает последовательное решения задач типа 1 и 2.

2. Математические модели

Для анализа процессов, проходящих при очистке воды, требуется отразить следующие процессы: течение жидкости, в том числе с учетом тепловых эффектов, эволюция концентрации загрязнителя с отражением конвекционно-диффузионных процессов, электростатические эффекты. Для этого была разработана комплексная математическая модель, основанная на методе расщепления по физическим процессам, вычислительный алгоритм и программная реализация которой допускает активацию и деактивацию физических процессов в зависимости от поставленной задачи. Приведем далее используемые для анализа рассматриваемых процессов системы уравнений.

2.1. Модель течения

Для моделирования течения вязкой несжимаемой жидкости применяется квазигидродинамическая (КГиД) модель [15-19], использование которой обеспечивает возможность устойчивого счета даже на очень подробных сетках. Приведем далее систему уравнений для описания изотермического течения:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} = \nabla \left[\frac{1}{\text{Re}} (\nabla \otimes \mathbf{u} + (\nabla \otimes \mathbf{u})^T) + \mathbf{w} \otimes \mathbf{u} + \mathbf{u} \otimes \mathbf{w} - \mathbf{u} \otimes \mathbf{u} - p \right], \quad (1)$$

$$\nabla(\nabla p) = \nabla \left[\frac{1}{\tau} \mathbf{u} - (\mathbf{u}, \nabla) \mathbf{u} \right], \quad (2)$$

$$\mathbf{w} = \tau [(\mathbf{u}, \nabla) \mathbf{u} + \nabla p], \quad (3)$$

где $\frac{\partial}{\partial t}$ – временная производная, $Re = \frac{\rho u_0 L_h}{\eta}$ – число Рейнольдса,

$\nabla = \left\{ \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right\}^T$ – оператор Гамильтона, $\mathbf{u} = \{u_x, u_y, u_z\}^T$ – вектор скорости,

$(\bullet \otimes \bullet)$ – прямое произведение векторов, p – давление, \mathbf{w} – регуляризирующая

поправка, $\tau \sim \frac{1}{Re}$ – параметр регуляризации, ρ – плотность, η – коэффициент

динамической вязкости, u_0 – характерная скорость течения, D_h – характерный линейный размер области (гидродинамический диаметр).

Система уравнений (1) – (3) дополняется граничными и начальными условиями, необходимыми при моделировании внутренних течений.

Течение на входном отверстии может быть задано через известное распределение скорости и перепад давления. В рамках работы в основном будем использовать течение Пуазейля, определяемое следующими соотношениями, полученными из условия нормировки в центре потока $u|_{r=0} = 1$

:

$$\mathbf{u}(r) = \left(1 - \frac{r^2}{R^2}\right) \mathbf{n}, \quad \frac{\partial p}{\partial n} = -\frac{2}{Re R^2}, \quad (4)$$

где R – радиус входного отверстия, \mathbf{n} – нормаль к поверхности отверстия.

На выходе будем использовать стандартные мягкие граничные условия, имеющие форму:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial n} = 0, \quad p = 0. \quad (5)$$

Существуют различные варианты задания граничных условий в задачах внутреннего течения несжимаемой жидкости, основными предельными ситуациями являются прилипание и проскальзывание. При моделировании процессов фильтрации, на масштабах исследовательских и промышленных установок, наиболее корректными будут условия прилипания на стенке, имеющие следующий вид:

$$\mathbf{u} = \mathbf{0}, \quad \frac{\partial p}{\partial n} = 0. \quad (6)$$

Начальным состоянием будем считать покой среды:

$$\mathbf{u} = \mathbf{0}, \quad p = 0.5. \quad (7)$$

Пересчет к размерным переменным данной модели основан на нормировке скорости на входе на рис. 1. Из выражения $Re = \frac{\rho u_0 L_h}{\eta}$ видно, что L_h , соответствующее геометрическому параметру расчетной области, η и ρ , характеризующие среду, являются свободными параметрами. Данный факт, при закреплении числа Рейнольдса, позволяет получить выражение для расчета характерной скорости потока

$$\tilde{\mathbf{u}} = u_0 \mathbf{u} = \frac{Re \eta}{\rho_0 L_h} \mathbf{u}, \quad (8)$$

где $\tilde{\mathbf{u}}$ – скорость в размерных единицах. Выражение для пересчета давления примет следующий вид (из того, что $\frac{p_0}{\rho_0 U_0^2} = 1$):

$$\tilde{p} = p_0 p = \frac{Re^2 \eta^2}{\rho_0 L_h^2} p, \quad (9)$$

где \tilde{p} – давление в размерных единицах. Размерное время вычисляется с помощью выражения

$$\tilde{t} = t_0 t = \frac{\rho L_h^2}{Re \eta} t. \quad (10)$$

2.2. Модель теплопроводности

При необходимости учета теплопроводных эффектов в рамках рассматриваемой КГид модели течения система уравнений (1) – (3) дополняется выражением

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \nabla \left[\frac{1}{Re Pr} \nabla T + (\mathbf{w} - \mathbf{u}) T \right], \quad (11)$$

где $Pr = \frac{\eta c_p}{\kappa}$ – число Прандтля, c_p – удельная теплоемкость при постоянном давлении, κ – коэффициент теплопроводности.

Уравнения (1) – (3) дополняются членами:

$$\mathbf{Gr} T, \nabla \mathbf{Gr} T \text{ и } -\tau \mathbf{Gr} T, \quad (12)$$

соответственно, тут $\mathbf{Gr} = \{Gr_x, Gr_y, Gr_z\}^T$. При учете силы тяжести, действующей вдоль оси OY, $\mathbf{Gr} = \{0, Gr, 0\}^T$, где $Gr = \frac{g \rho^2 L_h^3 \beta \Delta T}{\eta^2}$ – число Грасгофа, g – ускорение свободного падения, β – коэффициент объемного расширения среды, ΔT – характерный перепад температур.

Данная модель также оснащается дополняющими соотношениями. Граничные условия для теплопроводности требуют отражение процессов, происходящих на входных и выходных отверстиях, а также нагревательном элементе (при наличии) и стенках резервуара.

На входном и выходных отверстиях будем считать

$$\frac{\partial T}{\partial n} = 0. \quad (13)$$

На стенке исследуемого объема допустим теплообмен:

$$\frac{\partial T}{\partial n} = \alpha(T - T_0), \quad (14)$$

где α – коэффициент теплообмена, T_0 – температура окружающей среды.

На нагревательном элементе необходимо учесть падение температуры при образовании солевого налета, для этого будем использовать следующее выражение:

$$\frac{\partial T}{\partial n} = F_0 + F_1 \frac{C_{1k} - C_k}{C_{1k}}, \quad (15)$$

где F_0 – поток тепла при максимальном загрязнении, $F_0 + F_1$ – поток при отсутствии загрязнения, C_{1k} – предельная захватываемая концентрация загрязняющего вещества.

В качестве начального состояния будем считать

$$T = 0 \quad (16)$$

во всей области.

В рассматриваемой системе характеристикой вещества является число Прандтля. Отметим, что размерный коэффициент пересчета температуры T_0 является свободным и задается непосредственно. Пересчет осуществляется очевидным образом:

$$\tilde{T} = T_0 T. \quad (17)$$

2.3. Модель эволюции концентрации

При моделировании поведения примесей, содержащихся в потоке жидкости или газа, на макроскопическом уровне вводились концентрации ее компонент. Для получения их распределения и эволюции в исследуемой области очистной системы для учета конвекционно-диффузионного движения компонент примеси использовались классические уравнения конвекции-диффузии, дополненные КГид регуляризацией. Эти уравнения в безразмерной форме имеют следующий вид:

$$\frac{\partial C_k}{\partial t} = \nabla \left[D_k \nabla C_k + (\mathbf{w} - \mathbf{u}) C_k \right], \quad (18)$$

здесь C_k – концентрация частиц (ионов) сорта k , $D_k = \frac{D_{0,k}}{u_0 L_h}$ – безразмерный коэффициент диффузии частиц.

Система уравнений, состоящая из n_c (количество компонент примеси) уравнений, (18) дополняется соответствующими задаче граничными условиями и начальными условиями.

На входе в очистной резервуар граничные условия модели эволюции концентрации будем считать заданными непосредственно:

$$C_k = \frac{C_{0,k}}{\sum_k^{n_c} C_{0,k}}, \quad (19)$$

при условии равновесного выбора C_{0k} .

На входном и выходных отверстиях будем считать

$$\frac{\partial C_k}{\partial n} = 0. \quad (20)$$

Пристеночные эффекты сорбции будем считать с помощью выражения

$$\frac{\partial C_k}{\partial n} = A_k (C_k - C_k^*) \left(1 - \frac{C_k}{C_k^{**}} \right), \quad (21)$$

где C_k^* – равновесное значение концентрации частиц k -го компонента примеси, C_k^{**} – максимальная концентрация k -го компонента, удерживаемая элементом поверхности гранулы сорбента, A_k – интенсивность захвата частиц k -го компонента загрязнителя поверхностью ТЭНа (может зависеть от общего числа вакансий на поверхности гранулы, свободных от всех наночастиц всех сортов загрязнителя).

Расчеты будем проводить от нулевых начальных условий

$$C_k = 0. \quad (22)$$

Коэффициенты концентрации компонент примесей задается свободно, аналогично температурному. Формула пересчета:

$$\tilde{C}_k = C_{0,k} C_k. \quad (23)$$

При этом безразмерный коэффициент диффузии, посредством подстановки выражения для u_0 :

$$D_k = \frac{D_{0,k}}{u_0 L_h} = \frac{D_{0,k} \rho_0}{\text{Re} \eta}. \quad (24)$$

2.4. Электростатическая модель

Моделирование электромагнитных фильтров требует учет силы Лоренца в уравнении (18) посредством введения члена

$$-\nabla(F_k \mathbf{F} C_k), \quad (25)$$

где $F_k = \frac{q_k \mu_{\varepsilon k} E_0}{u_0}$ – коэффициент нормировки силы Лоренца, q_k – заряд частиц

в относительных единицах с учетом знака, $\mu_{\varepsilon k}$ – коэффициент подвижности

частиц, $E_0 = \frac{\varphi_0}{L_h}$ – константа нормировки напряженности, $\varphi_0 = \frac{\max_k (|q_k C_{0,k}|) L_h^2}{\varepsilon}$

– константа нормировки потенциала, $\mathbf{F} = \mathbf{E} + B_0 \left[\mathbf{u} \times \frac{\mathbf{B}}{|\mathbf{B}|} \right]$ – сила Лоренца, \mathbf{E} –

напряженность электрического поля, $B_0 = \frac{u_0}{E_0} |B|$ – константа нормировки

магнитной индукции, ε – диэлектрическая проницаемость среды, \mathbf{B} – вектор магнитной индукции.

Для определения напряженности будем использовать потенциальную постановку:

$$\nabla(\nabla \varphi) = - \sum_k^{n_c} \frac{q_k C_{0,k}}{\max_k (|q_k C_{0,k}|)} C_k, \quad (26)$$

$$\mathbf{E} = -\nabla \varphi, \quad (27)$$

где φ – потенциал электрического поля.

Исследуемым в диссертационной работе фильтрационным процессам характерно магнитное число Рейнольдса, много меньшее единицы. Этот факт дает возможность считать магнитное поле в системе внешним фактором. Его эволюция в данном случае не учитывается, оно инициируется либо постоянным сильным магнитом, либо соленоидом, по которому течет большой постоянный круговой ток.

Уравнения модели дополняются граничными и начальными условиями. Используемые в рамках работы выражения имеют следующий вид:

– на электронейтральных границах:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial n} = 0; \quad (28)$$

– на электродах:

$$\varphi = \varphi_k, \quad (29)$$

где φ_k – константное значение потенциала на k -ом электроде.

В качестве начальных используются однородные условия.

Формулы пересчета потенциала и напряженности электрического поля, при нормировке по концентрации и заряду примеси, имеют вид

$$\tilde{\varphi} = \varphi_0 \varphi = \frac{\max_k (|q_k C_{0,k}|) L_h^2}{\varepsilon} \varphi, \quad \tilde{E} = E_0 E = \frac{\max_k (|q_k C_{0,k}|) L_h}{\varepsilon} E. \quad (30)$$

При подстановке выражений (8) и (30) в нормировочную константу силы Лоренца получим выражение

$$F_k = \frac{q_k \mu_{\text{эк}} \rho_0 L_h^2}{\eta \varepsilon \text{Re}} \max_k (|q_k C_{0,k}|). \quad (31)$$

3. Численные методы

Численная реализация отобранных для решения уравнений механики сплошной среды базируется на методах расщепления по физическим процессам и сеточных методах конечного объема [20-23].

При аппроксимации пространственных операторов вышеуказанных эллиптических и параболических уравнений макромоделли используются неструктурированные сетки, что определяется сложной реальной геометрией моделируемых систем очистки. В качестве контрольных объемов используются ячейки сетки. Все искомые величины усредняются по объему ячейки и определяются в ее центре, за исключением регуляризирующей поправки \mathbf{w} в КГид уравнениях, определяемой на гранях. Временные производные

аппроксимируются явным образом. Данный подход позволяет использовать адаптивные неструктурированные сетки и достичь высокой степени аппроксимации границ даже геометрически сложной области.

Рассмотрим более подробно вычислительный алгоритм. Для этого введем сеточные параметры и обозначения на примере прямоугольных элементов, изображенных на рис. 1. Здесь V_i – площадь в двухмерном и объем в трехмерном случае текущего i -ого сеточного элемента, P_i – точка центра текущего i -ого элемента, P_{ij} – точка центра j -соседнего к i -ому элемента, l_{ij} – расстояние между центрами соседних ячеек, \mathbf{n}_{ij} – единичный направляющий вектор от центра текущего элемента к центру соседнего, \mathbf{S}_{ij} – направленные длина в двухмерном случае и площадь в трехмерном j -ой грани i -ого элемента, помноженная на внешнюю нормаль.

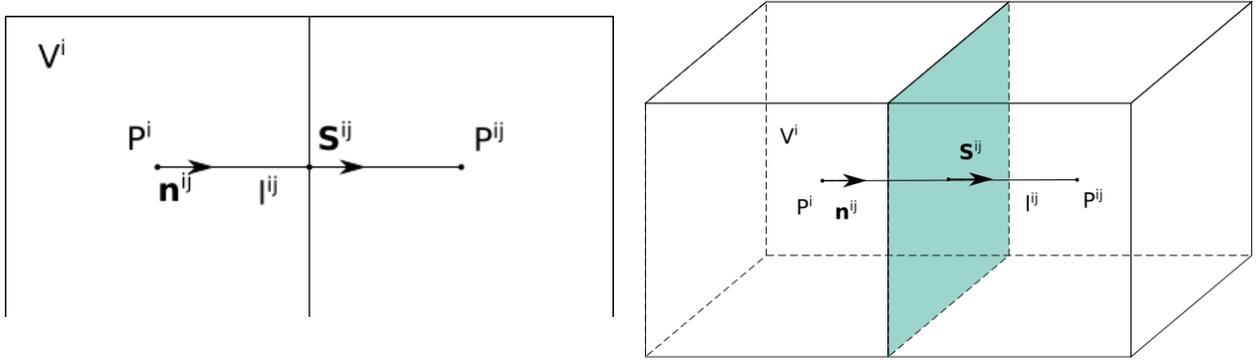


Рис. 1. Характерные сеточные величины для четырехугольных двухмерных (слева) и кубических трехмерных (справа) конечных объемов

С учетом введенных обозначений сеточный аналог уравнений (1) – (3) примет вид

$$\hat{\mathbf{u}}^i = \mathbf{u}^i + \frac{\tau_{time}}{V^i} \sum_{j=1}^m \left[\frac{1}{\text{Re}} \left\{ \frac{\mathbf{n}^{ij}}{l^{ij}} \otimes (\mathbf{u}^{ij} - \mathbf{u}^i) + (\mathbf{u}^{ij} - \mathbf{u}^i) \otimes \frac{\mathbf{n}^{ij}}{l^{ij}} \right\} \cdot \mathbf{S}^{ij} + \right. \\ \left. + \{ \mathbf{w}^{ij} \otimes \bar{\mathbf{u}}^{ij} + \bar{\mathbf{u}}^{ij} \otimes \mathbf{w}^{ij} \} \cdot \mathbf{S}^{ij} - \{ \bar{\mathbf{u}}^{ij} \otimes \bar{\mathbf{u}}^{ij} \} \cdot \mathbf{S}^{ij} - \bar{p}^{ij} \mathbf{S}^{ij} \right], \quad (32)$$

$$\hat{p}^i = \left[\sum_{j=1}^m \left(p^{ij} \frac{\mathbf{n}^{ij}}{l^{ij}} - \frac{1}{\tau} \bar{\mathbf{u}}^{ij} + (\bar{\mathbf{u}}^{ij}, \mathbf{n}^{ij}) \frac{\mathbf{u}^{ij} - \mathbf{u}^i}{l^{ij}}, \mathbf{S}^{ij} \right) \right] \left[\sum_{j=1}^m \frac{(\mathbf{n}^{ij}, \mathbf{S}^{ij})}{l^{ij}} \right]^{-1}, \quad (33)$$

$$\mathbf{w}^{ij} = \tau \left[(\bar{\mathbf{u}}^{ij}, \mathbf{n}^{ij}) \frac{\mathbf{u}^{ij} - \mathbf{u}^i}{l^{ij}} + \frac{p^{ij} - p^i}{l^{ij}} \mathbf{n}^{ij} \right], \quad (34)$$

где $\hat{\mathbf{u}}^i$ – сеточный аналог скорости в i элементе на следующем временном шаге, \mathbf{u}^i – аналог скорости в выделенном элементе на текущем временном шаге, τ_{time} –

шаг по времени, $\bar{\mathbf{u}}^{ij} = 0.5(\mathbf{u}^{ij} + \mathbf{u}^i)$ – интерполяция скорости на центр грани сеточного элемента, \mathbf{u}^{ij} – сеточный аналог скорости в соседнем элементе, m – количество соседних к выделенному элементов (в случае треугольной сетки равное 3, квадратной сетки – 4, в случае кубической – 6), $\bar{p}^{ij} = 0.5(p^{ij} + p^i)$ – интерполяция давления на центр грани сеточного элемента, \hat{p}^i – сеточный аналог давления в центре выделенной ячейки, p^{ij} – аналог давления в соседней ячейке, \mathbf{w}^{ij} – сеточный аналог регуляризующей поправки.

Сеточные аналоги (1) – (3) дополняются естественным образом соответствующими граничными условиями (4) – (6). Расчет начинается с начальных условий (7). При этом вычисление одного временного шага скорости подразумевает последовательное вычисление выражений (32) – (34), выполняемое вплоть до установления стационарного режима течения. Отметим – в рамках временного шага скорости пересчет давления происходит единожды, что позволяет существенно ускорить расчет, при этом течение устанавливается по скорости и давлению совместно.

Уравнение модели теплопроводности (11) примут следующую разностную форму:

$$\hat{T}^i = T^i + \frac{\tau_{time}}{V^i} \sum_{j=1}^m \left(\frac{1}{\text{RePr}} \frac{(T^{ij} - T^i)}{l^{ij}} \mathbf{n}^{ij} + \bar{T}^{ij} (\mathbf{w}^{ij} - \bar{\mathbf{u}}^{ij}), \mathbf{S}^{ij} \right), \quad (35)$$

где \hat{T}^i , T^i – температура в текущей i ячейке на следующем и текущем шагах по времени, T^{ij} – температура в соседней ячейке, $\bar{T}^{ij} = 0.5(T^{ij} + T^i)$ – интерполяция температуры на грань сеточного элемента.

Разностные аналоги добавок (12) для выражений (32) – (34) примут вид

$$\text{Gr} T^i, \left[\sum_{j=1}^m \bar{T}^{ij} (\text{Gr}, \mathbf{S}^{ij}) \right] \left[\sum_{j=1}^m \frac{(\mathbf{n}^{ij}, \mathbf{S}^{ij})}{l^{ij}} \right]^{-1} \text{ и } -\tau \text{Gr} T^i. \quad (36)$$

Распространение компонент загрязнителя будем рассчитывать с помощью разностных аналогов уравнений конвекции-диффузии (18):

$$\hat{C}_k^i = C_k^i + \frac{\tau_{time}}{V^i} \sum_{j=1}^m \left(D_k \frac{C_k^{ij} - C_k^i}{l^{ij}} \mathbf{n}^{ij} + \bar{C}^{ij} (\mathbf{w}^{ij} - \bar{\mathbf{u}}^{ij}), \mathbf{S}^{ij} \right), \quad (37)$$

где \hat{C}_k^i , C_k^i – концентрация k компонента примеси в i текущей ячейке на следующем и текущем временных шагах, C_k^{ij} – концентрация k компонента в соседней ячейке, $\bar{C}^{ij} = 0.5(C_k^{ij} + C_k^i)$ – интерполяция концентрации k компоненты на грань сеточного элемента.

Эволюция концентрации рассчитывается покомпонентно посредством выражений (37), с учетом граничных условий (19) – (21), от начальных условий (22) при моделировании сорбционной фильтрации. При проведении численного эксперимента по задачам электромагнитной очистки набор уравнений дополняется моделью электростатики.

Электростатическая модель (26), (27) в разностной форме будет иметь следующий вид:

$$\hat{\phi}^i = \left[V^i \sum_{k=1}^p \frac{q_k C_{k0}}{\max_k (|q_k C_{k0}|)} C_k^i + \sum_{j=1}^m \frac{\varphi^{ij}}{I^{ij}} (\mathbf{n}^{ij}, \mathbf{S}^{ij}) \right] \left[\sum_{j=1}^m \frac{(\mathbf{n}^{ij}, \mathbf{S}^{ij})}{I^{ij}} \right]^{-1}, \quad (38)$$

$$\hat{\mathbf{E}}^i = -\frac{1}{V^i} \sum_{j=1}^m \bar{\varphi}^{ij} \mathbf{S}^{ij}, \quad (39)$$

где $\hat{\phi}^i$, $\hat{\mathbf{E}}^i$ – значения потенциала и напряженности электрического поля на следующей итерации в i ячейке, φ^i , φ^{ij} – значение потенциала в текущей i ячейке и j соседней, $\bar{\varphi}^{ij} = 0.5(\varphi^{ij} + \varphi^i)$ – интерполяция потенциала на грань элемента.

Силу Лоренца будем определять на гранях сеточных элементов как

$$\mathbf{F}^{ij} = \bar{\mathbf{E}}^{ij} + B_0 [\bar{\mathbf{u}}^{ij} \times \mathbf{B}^{ij}], \quad (40)$$

где $\bar{\mathbf{E}}^{ij} = 0.5(\mathbf{E}^{ij} + \mathbf{E}^i)$ – интерполяция напряженности на грань сеточного элемента, \mathbf{B}^{ij} – вектор магнитной индукции на грани ячейки.

Дискретный аналог добавки (25) к выражению (37) примет вид

$$-\frac{\tau_{time}}{V^i} F_k \sum_{j=1}^m (\bar{C}_k^{ij} \mathbf{F}^{ij}, \mathbf{S}^{ij}). \quad (41)$$

Выражения (38) – (39) последовательно вычисляются для каждого временного шага при расчете концентрации единожды вплоть до искомого значения времени с учетом граничных условий (28), (29).

Программная реализация предложенного вычислительного алгоритма основана на языке программирования C++ с использованием шаблонного и объектно-ориентированного подходов [24]. Для обеспечения параллельности применялись библиотеки OpenMP [25] и OpenMPI [26] с применением геометрического параллелизма, основанного на разбиении расчетной сетки на домены.

4. Задачи очистки водной среды

4.1. Задача об электромагнитной очистке водной среды

При рассмотрении задач очистки водной среды интересной оказалась фильтрация с помощью электромагнитного воздействия. В практическом плане ее преимущество состоит в простоте конструкции и технического обслуживания установки, широком диапазоне и простой настройке режимов очистки. В научном плане здесь еще остается широкое поле для исследований, связанных с геометрическими особенностями существующих и будущих очистных систем, то есть имеется запрос на повышение точности проектных расчетных исследований.

Схема вычислительного эксперимента представлена на рис. 2. Расчетная область имеет одно входное отверстие в левой части и два выходных, первое из которых находится в нижней части области (на рис. 2 обозначено бирюзовым цветом), второе расположено справа. Радиусы отверстий одинаковы и равны $R1 = 0.5$. Радиус расширения $R2 = 1.0$. Характерные длины расчетной области: $L1 = 6.0$, $L2 = 1.5$, $L3 = 3.0$. Вектор магнитной индукции \mathbf{B} направлен вдоль оси Z . В качестве рассчитываемых параметров примем скорость и давление внутри области, а также объемную концентрацию примеси при установившемся течении.

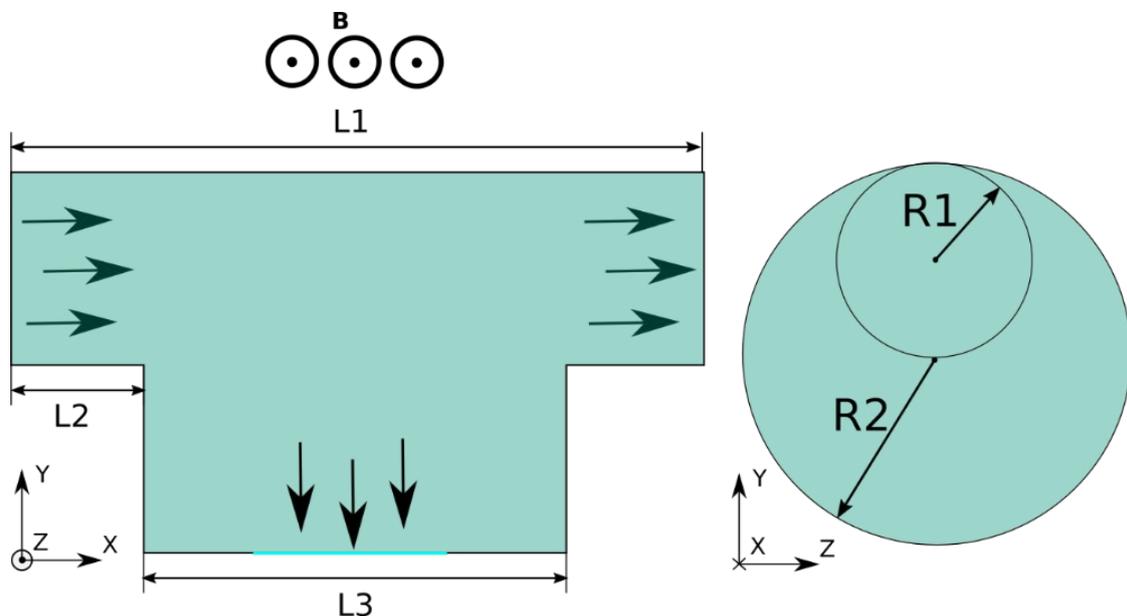


Рис. 2. Геометрия фильтрационного резервуара при электромагнитной очистке

Для проведения вычислительного эксперимента использовалась сетка, содержащая 131 296 треугольных призм. Характеристики потока (скорости и давление), представленные на рис. 3 – 6, полученные при численном расчете сеточных уравнений (32) – (34), были получены для числа Рейнольдса 100.

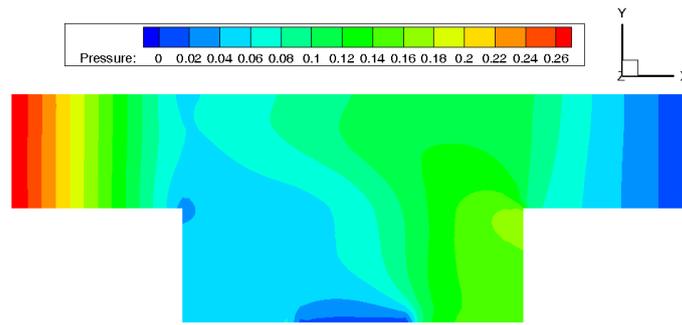


Рис. 3. Распределение давления в центральном сечении

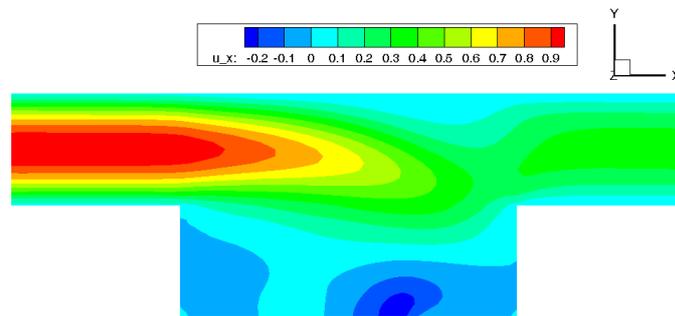


Рис. 4. Распределение продольной скорости в центральном сечении

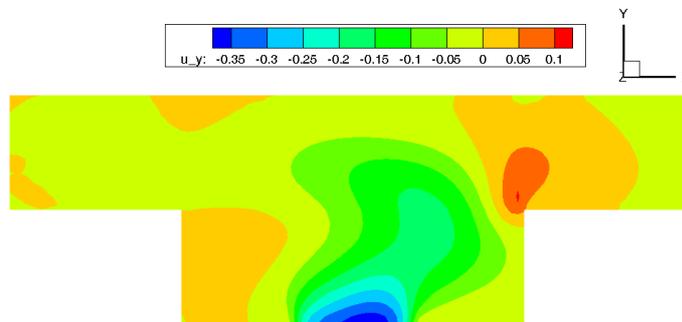


Рис. 5. Распределение поперечной скорости в центральном сечении

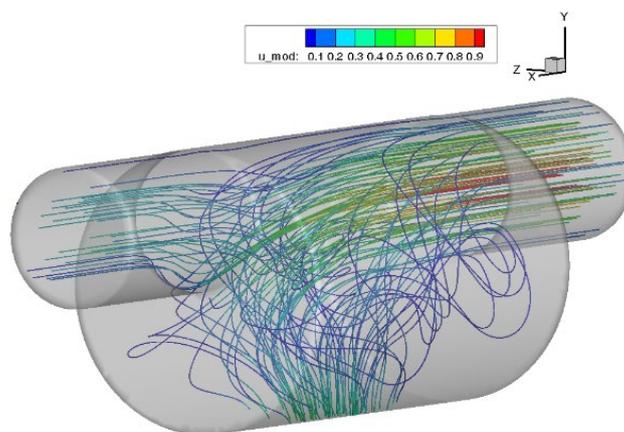


Рис. 6. Линии тока, общий вид

Моделирование эволюции концентрации в соответствии с выражением (37), дополненным (38) – (41), проводилось для однокомпонентного загрязнителя с параметрами $D_k = 1.0$, $\varphi_0 = 1.0$, $B_0 = 3.0$, $F_k = 1.0$. На рис. 7, 8 изображено стационарное распределение загрязняющего вещества в исследуемой области.

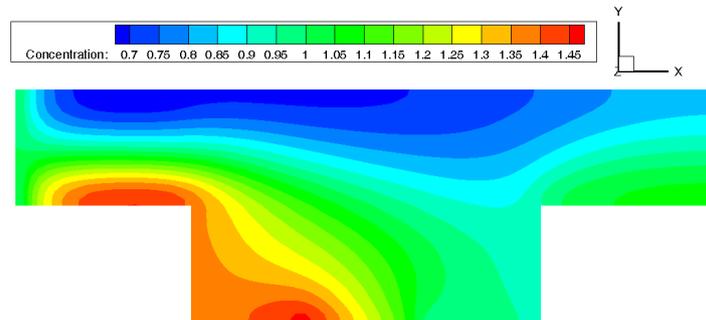


Рис. 7. Распределение концентрации примеси в центральном сечении

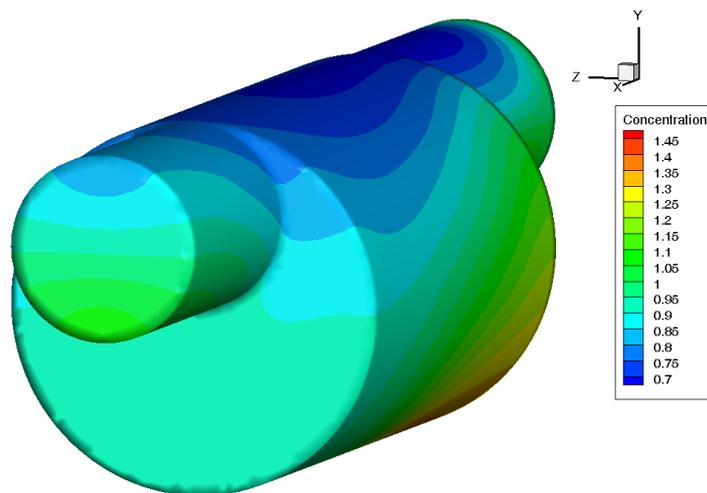


Рис. 8. Распределение концентрации примеси, общий вид

Проведенный вычислительный эксперимент позволяет установить степень очистки жидкости электромагнитным способом, составившую при использовании параметров из условия порядка 5% [27]. Варьируя данные параметры, возможно добиться оптимального по энергоэффективности очистной системы напряженности магнитного поля. Достижения требуемой степени очистки возможно добиться не только увеличением напряженности магнитного поля, но и последовательным соединением представленных резервуаров.

4.2 Задача о загрязнении тепловыделяющего элемента

При длительном периоде эксплуатации тепловыделяющего элемента (ТЭН) в условиях жесткой воды, эффективность его работы существенно

падает. Это связано в первую очередь с образованием накипи, получаемой из прокачиваемого раствора вследствие падения растворимости солей с увеличением температуры среды. Падение эффективности ТЭН приводит к увеличению энергопотребления, а в предельном случае – к выходу из строя данного элемента. Для предотвращения подобных ситуаций, а также установления циклов эксплуатации-регенерации необходимо иметь возможность моделирования процесса образования накипи [28].

Будем рассматривать нагревательную установку, геометрия которой изображена на рис. 9. Характерные размеры области, в соответствии с обозначениями рис. 9: $L1 = 4.5$, $L2 = 0.5$, $L3 = 3.5$, $R1 = 0.5$, $R2 = 3.0$. ТЭН представляет собой цилиндрическую трубку с радиусом 0.1 и габаритными размерами $1.5 \times 2.0 \times 0.2$ по X, Y, Z соответственно.

Вычислительный эксперимент будем проводить в три стадии. В рамках первой стадии рассчитаем стационарные распределения скоростей, давления и температуры в области. На второй стадии проведем модельный расчет образования накипи из жесткой воды в соответствии со следующей формулой химической реакции:



Третья стадия будет заключаться в очистке нагревательного элемента от накипи прокачкой раствора соляной кислоты с формулой реакции

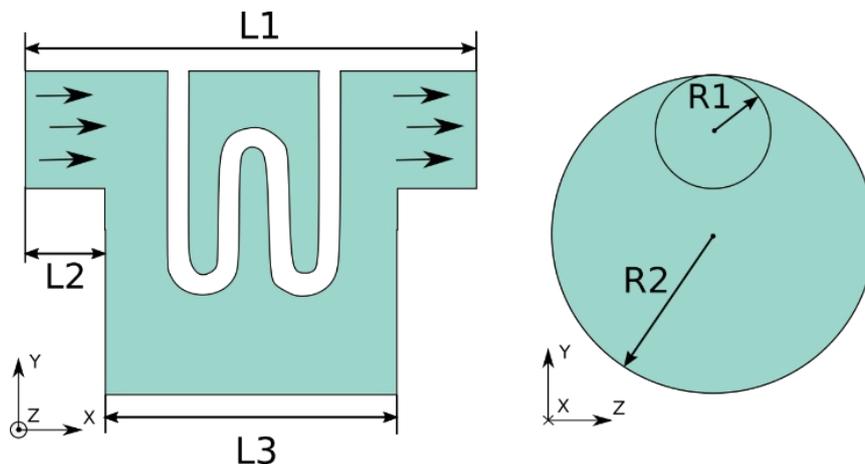


Рис. 9. Геометрия третьей модельной задачи

Серия вычислительных экспериментов проводилась на тетраэдральной сетке, состоящей из 140 634 элементов. Стационарные распределения параметров потока, полученные вычислением выражений (32) – (36) с параметрами $Re = 700$, $Pe = 10$ и $Gr = 0$, представлены на рис. 10 – 12.

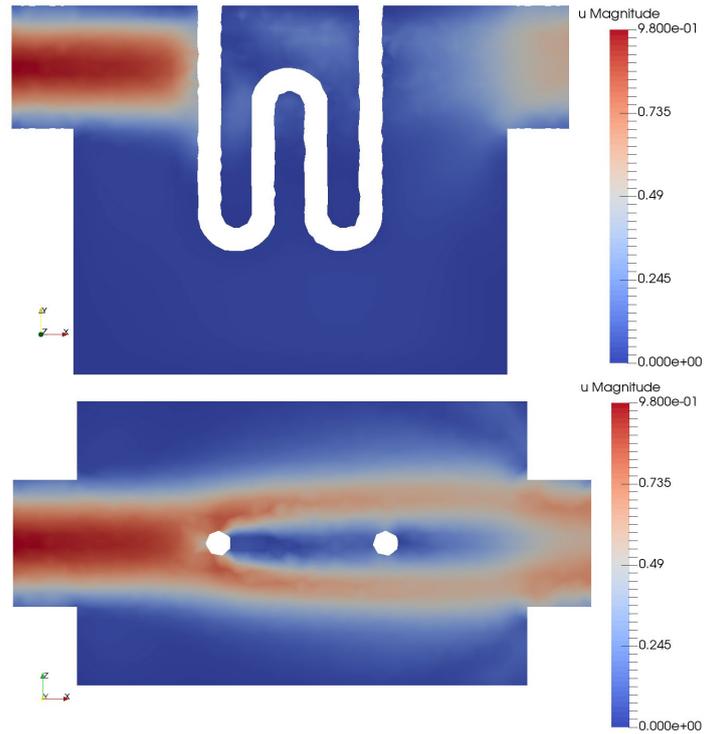


Рис. 10. Модуль скорости: сечение $Z=0$ (сверху) и сечение $Y=0.5$ (снизу)

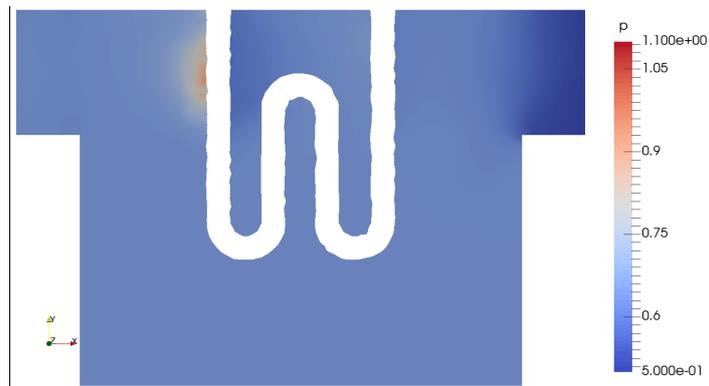


Рис. 11. Давление в сечении $Z=0$

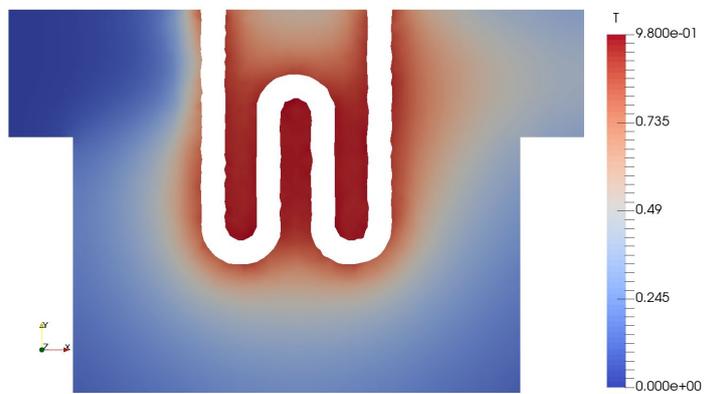


Рис. 12. Температура в сечении $Z=0$

Результаты моделирования протока жесткой воды, насыщенной $\text{Ca}(\text{HCO}_3)_2$, при коэффициенте диффузии $D=0.005$ для обеих объемных величин – CO_2 и $\text{Ca}(\text{HCO}_3)_2$, для расчета которых используются выражения (37). Начальное распределение примеси принималось равным нулю. На момент времени $t=50$, распределение $\text{Ca}(\text{HCO}_3)_2$ представлено на рис. 13. Концентрация осадка CaCO_3 на нагревательном элементе изображена на рис. 14, а распределение температуры в сечении $Z=0$ на рис. 15. Для расчета концентрации осадка на нагревательном элементе использовалось ОДУ, подобное (21), с источником, зависящим от температуры и концентрации $\text{Ca}(\text{HCO}_3)_2$. Падение тепловыделения на границе получено в соответствии с выражением (15). Из сравнения рис. 12 и 15 видно существенное падение температуры в исследуемой области.



Рис. 13. Распределение $\text{Ca}(\text{HCO}_3)_2$ в сечении $Z=0$

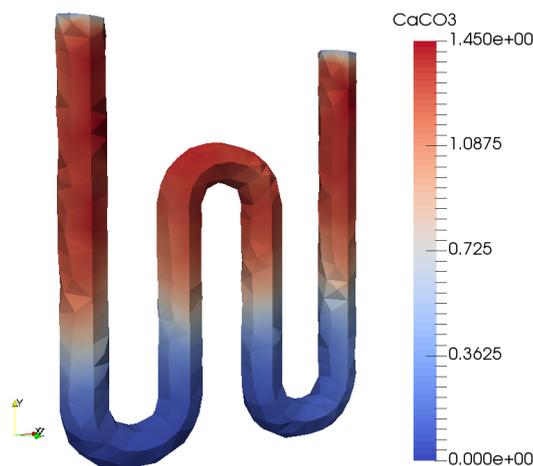


Рис. 14. Распределение концентрации CaCO_3 на поверхности нагревательного элемента

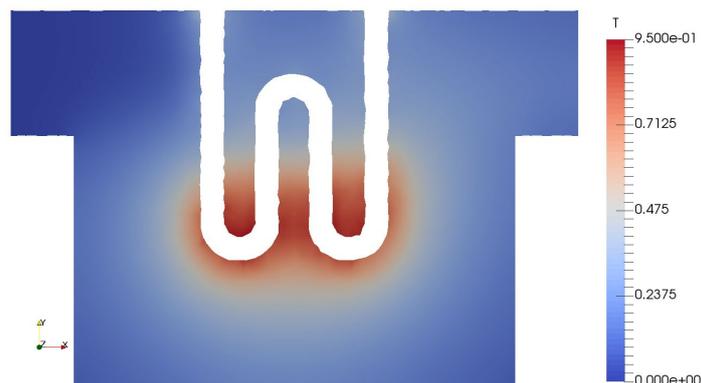


Рис. 15. Распределение температуры в сечении $Z=0$

Последующая прокачка раствора соляной кислоты на протяжении $t = 50$ позволила восстановить функциональность нагревательного элемента и избавиться от большей части осадка. Результаты данного вычислительного эксперимента приведены на рис. 16 и 17.

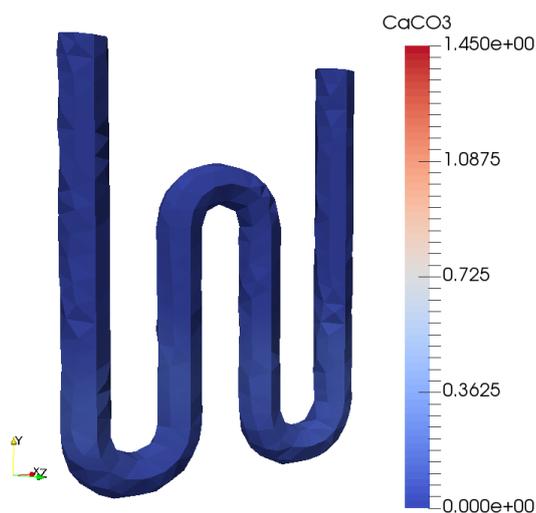


Рис. 16. Распределение концентрации CaCO_3 на поверхности нагревательного элемента после регенерации устройства

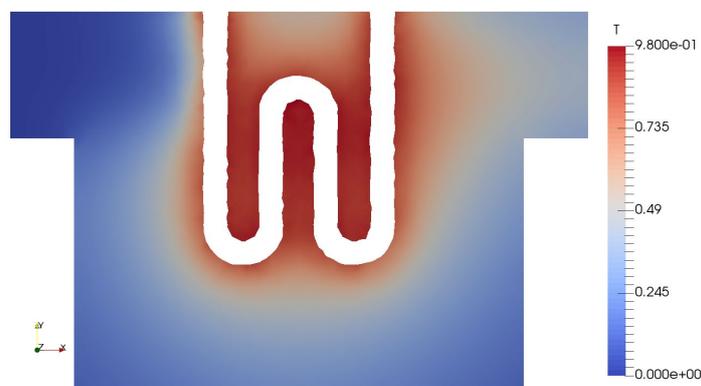


Рис. 17. Распределение температуры в сечении $Z=0$ после регенерации устройства

В рамках проведенного численного расчета были получены распределения температуры в исследуемом объеме, отражено падение эффективности ТЭНа при образовании накипи, а также его последующая очистка и восстановление функциональности. Возможность исследования геометрий, близким к реальным, позволяет подбирать режимы течения, варьируя число Рейнольдса, а также оптимизировать геометрию нагревательной системы.

Заключение

В работе представлены комплексная математическая модель и вычислительный алгоритм, предназначенный для анализа процесса фильтрации водной среды электромагнитным способом, а также процесса образования и удаления накипи на ТЭНах теплообменных установок. В качестве элементов комплексной модели использовалась квазигидродинамическая система уравнений для описания течения, уравнения конвекции-диффузии для описания эволюции концентрации, а также дополнительные уравнения электростатики для учета электромагнитных эффектов и теплопроводности. Численная методика основана на методе конечных объемов, допускающем использование неструктурированных сеток, позволяющих подробно описать области сложной геометрии, характерные для фильтрационных устройств и теплообменных установок. Программная реализация вычислительного алгоритма, представляемая комплексом расчетных и вспомогательных программ, была апробирована на расчетах характеристик физических процессов, проходящих в технологических резервуарах, предназначенных для очистки или умягчения водной среды. Как показали численные эксперименты, разработанный численный подход и его программная реализация позволяют эффективно решать задачи очистки водной среды в различных технических условиях с учетом реальной геометрии и параметров очистной системы. Полученные результаты работы могут быть использованы для практического применения при оптимизации конструкций и режимов эксплуатации теплообменных аппаратов очистки воды.

Библиографический список

1. K. Yang, J. LeJeune, D. Alsdorf D, Lu B, C.K Shum, S. Liang. Global distribution of outbreaks of water-associated infectious diseases. PLoS Negl Trop Dis. 2012;6(2):e1483. doi: 10.1371// Journal.pntd.0001483. Epub 2012 Feb 14. PMID: 22348158; PMCID: PMC3279334.
2. D.N. Magana-Arachchi, R.P. Wanigatunge. Ubiquitous waterborne pathogens. Waterborne Pathogens. doi: 10.1016/B978-0-12-818783-8.00002-5. Epub 2020 Feb 14. PMCID: PMC7173459. 2020:15–42
3. M. Iaccarino. Water, Population Growth and Contagious Diseases. Water 2019, 11, 386. <https://doi.org/10.3390/w11020386>

4. High Population Density Is Greatest Risk Factor For Water-linked Diseases — Ohio State Research and Innovation Communications URL: <https://news.osu.edu/high-population-density-is-greatest-risk-factor-for-water-linked-diseases---ohio-state-research-and-innovation-communications/>
5. V. I. Shvets, A. M. Yurkevich, O. V. Mosin, D. A. Skladnev. Preparation of deuterated inosine suitable for biomedical application // *Journal of Medical Sciences*. – 1995. – Vol. 8. – № 4. – P. 231-232.
6. A. Szkatula, M. Balanda, M. Kopec. Magnetic treatment of industrial water. Silica activation. // *The European Physical Journal Applied Physics*. – 2002. – № 18. – P. 41-49.
7. Zh. Jia, K. Peng, Ya. Li, R. Zhu. Preparation and application of novel magnetically separable γ -Fe₂O₃/activated carbon sphere adsorbent. // *Materials Science and Engineering: B*. – 2011. – № 176 (11) – P. 861-865.
8. F. Alimi, M.M. Tlili, M. Ben Amor, G. Maurin, C. Gabrielli. Effect of magnetic water treatment on calcium carbonate precipitation: Influence of the pipe material // *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*. – 2009. – № 48 (8). – P. 1327-1332.
9. J.M.D. Coey, S. Cass. Magnetic Water Treatment. // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. – 2000. – № 209(1). – P.71-74.
10. R. M. Crooks, K. N. Knust, M. R. Stanley, F. J. Carrillo, D. Hlushkou, U. Tallarek. Electrochemically mediated desalination. *Proc. of 18th International Conference on Miniaturized Systems for Chemistry and Life Sciences*. – 2014. – P. 156-159.
11. K.N. Knust, D. Hlushkou, R.K. Anand, U. Tallarek, R.M. Crooks. Electrochemically Mediated Seawater Desalination // *Angew. Chem. Int. Ed.* – 2013 – Vol. 52, Issue 31 – P. 8107-8110
12. W. Salameh, J. Faraj, E. Harika, R. Murr, M. Khaled. On the Optimization of Electrical Water Heaters: Modelling Simulations and Experimentation. *Energies* 2021, 14, 3912. <https://doi.org/10.3390/en14133912>.
13. P.A. Hohne, K. Kusakana, B.P. Numbi. A review of water heating technologies: An application to the South African context, *Energy Reports*, Volume 5, 2019, Pages 1-19, ISSN 2352-4847, <https://doi.org/10.1016/j.egy.2018.10.013>.
14. D. Dobersek, D. Goricanec. Influence of Water Scale on Thermal Flow Losses of Domestic Appliances. // *Int. J. Math. Models Methods Appl. Sci.* - 2007. – Vol. 1, Issue 2. – P. 55-61.
15. Т.Г. Елизарова, И.С. Калачинская, А.В. Ключникова, Ю.В. Шеретов. Использование квазигидродинамических уравнений для моделирования тепловой конвекции при малых числах Прандтля // *ЖВМиМФ*. – 1998. – Т. 34, №10. – С. 1732-1742.
16. B.N. Chetverushkin. Kinetic schemes and quasi-gasdynamical system of equations / B.N. Chetverushkin – Barcelona: CIMNE. – 2008. – 298 p.
17. T.G. Elizarova. Quasi-gas dynamic equations. Berlin, Heidelberg, NY: Springer-Verlag. – 2009. – 286 p.

18. Ю.В. Шеретов. Динамика сплошных сред при пространственно-временном осреднении М.-Ижевск: НИЦ "Регулярная и хаотическая динамика" – 2009. – 400 с.
19. Д.А. Рязанов. Квазигидродинамический алгоритм в задаче моделирования аттракторов внутренних волн / Д.А. Рязанов // Математическое моделирование. – 2021. – Т. 33, №12. – С. 3-20.
20. А.А. Самарский, А.В. Колдоба, Ю.А. Повещенко, В.Ф. Тишкин, А.П. Фаворский. Разностные схемы на нерегулярных сетках. – Минск, ЗАО «Критерий», 1996. – 196 с.
21. В.П. Ильин. Методы конечных разностей и конечных объемов для эллиптических уравнений. – Новосибирск, Изд-во Ин-та математики СО РАН, 2000. – 345 с.
22. Eymard, R. The finite volume method / R. Eymard, T. R. Gallouet, R. Herbin // Handbook of Numerical Analysis, Elsevier. – 2000 – Vol. 7 – P. 713-1020.
23. R.J. LeVeque. Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems. – Cambridge University Press, 2002. – 558 p.
24. B. Stroustrup. The C++ Programming Language (4th. ed.). Addison-Wesley Professional. 2013. P. 1368.
25. Open MPI: Open Source High Performance Computing URL: <https://www.openmpi.org/>.
26. Specifications – OpenMP URL: <https://www.openmp.org/specifications/>.
27. Н.И. Тарасов, С.В. Поляков, Ю.Н. Карамзин, Т.А. Кудряшова, В.О. Подрыга, Д.В. Пузырьков. Моделирование потока вязкой несжимаемой жидкости с помощью квазигидродинамической системы уравнений // Математическое моделирование. Т.31, №12, 2019, с. 33-43.
28. Н.И. Тарасов, С.В. Поляков, Т.А. Кудряшова. Моделирование образования и удаление известкового налета в системах водоочистки // Доклады Российской Академии Наук. Математика, информатика, процессы управления, 2022, том 505, с.79-85. N. I. Tarasov, T. A. Kudryashova, and S. V. Polyakov // Doklady Mathematics, © Pleiades Publishing, Ltd., 2022, Vol. 106, No. 1, pp. 279–285.

Оглавление

1. Введение	3
2. Математические модели	4
2.1. Модель течения	4
2.2. Модель теплопроводности	6
2.3. Модель эволюции концентрации	8
2.4. Электростатическая модель	9
3. Численные методы	10
4. Задачи очистки водной среды	14
4.1. Задача об электромагнитной очистке водной среды	14
4.2 Задача о загрязнении тепловыделяющего элемента	16
Заключение	21
Библиографический список	21