

# ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ЭВМ ПРИ РАСЧЕТЕ ПРОЦЕССОВ МЕМБРАННОГО РАЗДЕЛЕНИЯ

Тушкина Т.М., Овчаренко А.Г., Спиридонов Ф.Ф.  
Бийский технологический институт, Бийск

## *Аннотация*

*В работе описаны возможности ЭВМ в процессе математического моделирования гидродинамических и массообменных процессов в мембранных напорных каналах. Рассмотрена наиболее часто встречающаяся в практике ультрафильтрации схема разделения. Приведены постановка и метод решения гидродинамической и массообменной задач. Уделено внимание вопросу согласованности полученных результатов с известными решениями других исследователей. Данная работа будет полезна студентам технологических специальностей вузов химической и пищевой промышленности (дисциплины “Процессы и аппараты химических производств”, “Охрана окружающей среды и рациональное природопользование”), инженерам-технологам, имеющим дело с решением названных вопросов.*

Внедрение ЭВМ в образовательный процесс высшей школы происходит по двум различным направлениям. Первое из них рассматривает ЭВМ как инструмент преподавания, во втором ЭВМ (точнее расчеты на ЭВМ и их программирование) выступает в качестве предмета изучения. Последний из названных аспектов образования особенно важен для дисциплин с развитым математическим описанием, именно поэтому ему уделяется должное внимание в процессе обучения будущих инженеров-технологов [1]. Достоинства компьютера как расчетного инструмента создают качественно новые условия ведения научных исследований, давая возможность эффективно анализировать математические модели перспективных технологических процессов, которые до настоящего времени в силу своей сложности были недоступны количественному изучению ни на аналитическом уровне, ни методами аналогового моделирования.

В течение последних десятилетий в наиболее развитых странах мира происходит стремительное внедрение мембранных технологий (ультрафильтрации, микрофильтрации, обратного осмоса и др.) в различные отрасли промышленного производства. Успешная разработка мембранных процессов связана с решением ряда задач, одной из которых является поиск оптимальных конструкций аппаратов мембранного разделения и определение условий проведения процессов в них. Как показывает практика, для нахождения путей повышения эффективности разделения необходимо тщательно

исследовать два фактора: селективность и удельную производительность мембраны по раствору [2]. В свою очередь они зависят от распределения полей гидродинамических переменных и концентрации в напорном и дренажном мембранных каналах. Поскольку высота плоского напорного канала не превышает 3-5 мм, а диаметр трубчатого напорного канала 10-15 мм, непосредственное измерение выше указанных величин внутри канала и, в частности, у поверхности мембраны трудоемко и не всегда обеспечивает необходимую точность. Поэтому математическое моделирование полей скоростей и концентраций внутри напорного мембранного канала для разработки методов расчета основных характеристик процесса разделения целесообразно и экономически оправдано [3].

Физические модели процессов двумерного конвективного массопереноса могут быть описаны следующей системой дифференциальных уравнений (в обобщенном виде):

$$\operatorname{div}(\rho \mathbf{u} \Phi - \Gamma_{\Phi} \operatorname{grad} \Phi) = S_{\Phi}, \quad (1)$$

где  $\operatorname{div}$  и  $\operatorname{grad}$  – дифференциальные операторы дивергенции и градиента в цилиндрической системе координат,  $\mathbf{u}$  – вектор скорости с компонентами  $w$  и  $v$  вдоль осей  $z$  и  $y$  соответственно,  $\Phi$  – вектор, компоненты которого соответствуют: 1 – уравнению неразрывности,  $w$  и  $v$  – уравнению переноса вдоль осей  $z$  и  $y$  соответственно,  $c$  – уравнению переноса примеси;  $\Gamma_{\Phi} = \mu / \sigma_{\Phi}$  – коэффициент диффузии;  $\mu$ ,  $\sigma_{\Phi}$  – коэффициент динамической вязкости и число Прандтля (Шмидта) для переменной  $\Phi$ ;  $\rho$  – плотность. Структура членов  $S_{\Phi}$  для уравнений (1) имеет вид:

$$S_{\Phi} = \begin{cases} 0 \\ -\frac{\partial p}{\partial z} \\ -\frac{\partial p}{\partial y} - \mu v / y^2 \\ 0. \end{cases}$$

При соответствующих начально-краевых условиях система уравнений (1) описывает различные задачи массопереноса в напорных мембранных каналах.

Наиболее часто на практике ультрафильтрации встречается разделение, схематично показанное на рис. 1.

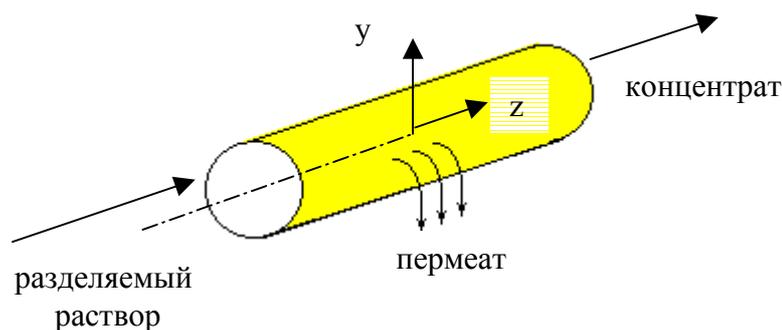


Рис. 1. Принципиальная схема процесса ультраfiltrации

Сформулируем допущения, в рамках которых проводится исследование процессов в канале, показанном на рис.1:

- жидкость несжимаема, то есть ее массовая плотность  $\rho$  постоянна;
- эффективная вязкость  $\mu$  постоянна;
- жидкость, текущая в осевом направлении и через пористую границу однородна;
- осевая скорость жидкости на входе максимальна;
- гравитационные, электрические, магнитные и др. поля пренебрежимо малы;
- концентрация частиц мала.

Для рассматриваемого течения систему (1) в безразмерном виде перепишем следующим образом:

$$\frac{\partial w}{\partial z} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{v}{y} = 0 \quad (2)$$

$$\text{Re} \left( w \frac{\partial w}{\partial z} + v \frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial P}{\partial z} \right) = \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} + \frac{1}{y} \frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2}$$

$$\text{Re} \left( w \frac{\partial v}{\partial z} + v \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial P}{\partial z} \right) = \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} + \frac{1}{y} \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} - \frac{v}{y^2}$$

$$w \frac{\partial \sigma}{\partial z} + v \frac{\partial \sigma}{\partial y} = \frac{1}{\text{Pr} \cdot \text{Re}} \left( \frac{\partial^2 \sigma}{\partial z^2} + \frac{\partial^2 \sigma}{\partial y^2} + \frac{1}{y} \frac{\partial \sigma}{\partial y} \right)$$

где  $w$  и  $v$  – компоненты вектора скорости в направлениях  $z$  и  $y$  соответственно,  $p$  – давление,  $\text{Re} = \rho^* q_+^* R^* / \mu^*$  - характерное число Рейнольдса, вычисленное

по радиусу канала,  $\sigma = \frac{c - c_{min}}{c_{max} - c_{min}}$  - безразмерная концентрация, используемая вместо  $c$  ( $c_{min}$  и  $c_{max}$  - минимальное и максимальное значения концентрации), другие переменные в системе (2) обезразмерены масштабами  $R^*$  и  $q_+^*$  посредством равенств:

$$z = z^*/R^*, \quad y = y^*/R^*, \quad L = L^*/R^*, \\ w = w^*/q_+^*, \quad v = v^*/q_+^*, \quad p = p^*/\rho^*q_+^{*2},$$

индекс  $*$  соответствует размерным переменным.

Для замыкания системы (2) зададим граничные условия в виде:

$$y=0: \quad \frac{\partial w}{\partial y} = \frac{\partial v}{\partial y} = \frac{\partial \sigma}{\partial y} = 0; \quad (3)$$

$$y=R: \quad v=1, w=0, \frac{\partial \sigma}{\partial y} = 0;$$

$$z=0: \quad w=w_{max}, v=0, \sigma=1;$$

$$z=L: \quad \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} = \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} = \frac{\partial^2 \sigma}{\partial z^2} = 0.$$

Как видно из постановки задачи, решение будет зависеть от безразмерных параметров: длины  $L$  и радиуса канала  $R$ , числа Рейнольдса  $Re$ , числа Прандтля  $Pr$ , концентрации частиц  $\sigma$ . Первые два параметра являются геометрическими, третий объединяет физические параметры  $\rho^*$ ,  $\mu^*$ ,  $q_+^*$ .

Решение задачи проведем с помощью конечно-разностной аппроксимации уравнений (2)-(3) на ортогональной равномерной сетке размерами от  $21 \times 11$  до  $61 \times 31$ . В соответствии с [4] введем функцию тока  $\psi$ , завихренность  $\omega$  посредством соотношений:

$$yw = \partial \psi / \partial y, \quad yv = -\partial \psi / \partial z, \quad \omega = \frac{\partial w}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial z}.$$

Несложно убедиться в том, что последние выражения удовлетворяют уравнению неразрывности (первому в системе (2)). В результате дифференцирования второго и третьего уравнений (2) по  $y$  и  $z$  соответственно, последующего вычитания одного из другого с учетом уравнения неразрывности из системы (2) исключается переменная  $p$ . Указанные выше действия позволили свести задачу (2)-(3) к численному анализу решения уравнений в частных производных второго порядка. При разностной аппроксимации

конвективных членов будем использовать несимметричную схему первого порядка точности, ориентированную против потока. Разностные соотношения для оператора Лапласа построим следующим способом. Оператор Лапласа проинтегрируем по площади ячейки, соответствующей выбранной разностной сетке, полученные таким образом однократные интегралы вычислим по формуле трапеций, а нормальные к контуру производные заменим центральными разностями. Аналогично аппроксимируем источниковые члены. Полученную систему алгебраических уравнений решим методом Гаусса-Зейделя, в результате чего в каждом узле сетки определим значения величин  $\psi$  и  $\omega$ . По известным значениям функции тока найдем  $w$ - и  $v$ -компоненты вектора скорости, по найденному полю скоростей – поле концентраций.

Тестирование метода решения и сравнение полученных результатов с известным решением [5] позволило констатировать работоспособность расчетного алгоритма и практическое совпадение результатов на различных сетках из указанного диапазона. Расчетный алгоритм реализован на алгоритмическом языке Qbasic в виде программного комплекса, включающего в себя программы подготовки данных, построения сетки, решения систем уравнений и др. Структурная схема алгоритма решения системы конечно-разностных уравнений приведена в Приложении.

Численные эксперименты проводились для значений  $Re \in [10, 10000]$ ,  $Pr \in [1, 1000]$ . Полученные результаты свидетельствуют о слабой зависимости структуры течения от числа Рейнольдса, что подтверждает тот факт, что кинематика течения с отсосом через проницаемые стенки консервативна в широком диапазоне изменения значений Рейнольдса [6].

Для визуализации результатов численного моделирования, представленных на рис. 2 – 5, были использованы возможности математических пакетов Mathcad Professional 7 и Maple V R5 [7], позволяющие показать решения не только в виде обыкновенных двумерных графиков, но и в виде графиков линий уровня, плотности, векторных полей, графиков поверхностей и т.д.

На рис. 2 и 3 показаны векторное поле скоростей и линии тока в напорном канале при следующих значениях параметров:  $R=1$ ,  $L=5$ ,  $Re=10$ ,  $Pr=1$ . В процессе анализа зависимостей отмечена хорошая согласованность

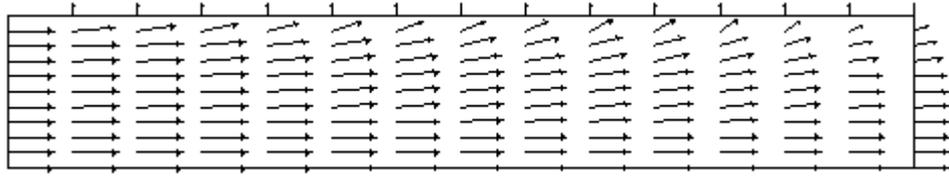


Рис. 2. Векторное поле скоростей в напорном мембранном канале

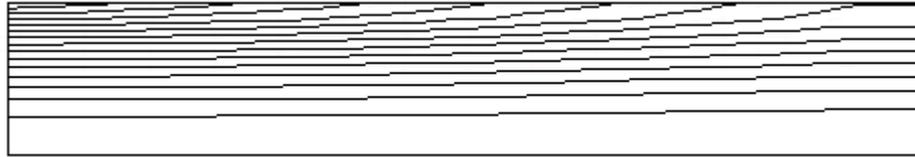


Рис. 3. Линии тока в напорном мембранном канале

полученного решения с результатами других авторов [3,8], а также тот факт, что профиль скорости удовлетворительно согласуется с точным решением [5].

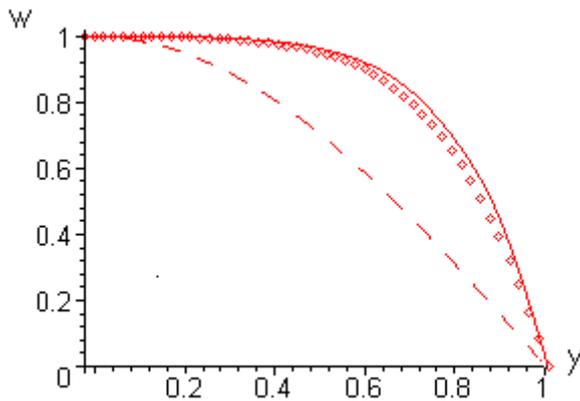


Рис. 4. Зависимость продольной скорости от радиуса канала;  $R=1$ ,  $L=5$ ,  $Re=10$

Отмеченные факты отражены, например, на рис. 4, где сплошной линией показан расчетный профиль продольной скорости при тех же значениях параметров, знаком  $\square$  - результаты численного решения [8], штриховой линией показано решение [5] при  $Re \rightarrow \infty$ . Как видно из рисунка, полученное решение практически совпадает с решением [8].

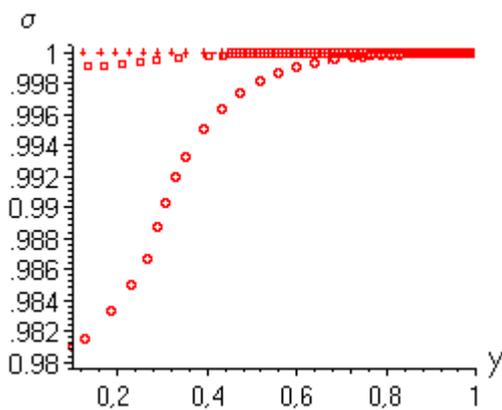


Рис. 5. Зависимость концентрации от высоты канала в различных сечениях по оси  $z$ ;  $R=1$ ,  $L=5$ ,  $Re=2300$ ,  $Pr=1000$

На рис. 5 представлены результаты расчета концентрации в разных сечениях по длине канала при тех же значениях геометрических параметров и значениях чисел Рейнольдса и Прандтля  $Re=2300$ ,  $Pr=1000$  (что характерно для турбулентного потока в мембранном напорном канале, а значит представляет большой интерес с практической точки зрения), знаки  $+$ ,  $\square$ ,

° соответствуют профилям концентрации на входе в канал, на расстоянии  $0,3L$  от входа в канала, на выходе из канала. При сравнении полученного поля концентрации с известным из работы [3] решением также отмечено удовлетворительное соответствие.

На основании всего выше изложенного можно утверждать, что описанная методика может быть применена к расчету течений в рассматриваемом трубчатом канале, а в случае внесения необходимых изменений (см. Приложение), плоском симметричном канале.

В данной работе описаны возможности ЭВМ при решении некоторых из задач в области мембранных технологий, а также при обработке экспериментального материала. Использование ЭВМ здесь оправдывается не только необходимостью проведения многократных трудоемких вычислений. Программное обеспечение позволяет оптимизировать постановку натурального эксперимента, резко снизить инструментальные и исполнительские погрешности. Наконец, немаловажным является воздействие компьютеров как средств оргтехники на общий облик инженерного труда. "Компьютерная среда" становится нормальной рабочей средой современного исследователя и инженера.

#### Список литературы

1. Штенгелов Р.С., Веселова В.Л., Гриневский С.О. и др. Гидрогеодинамические расчеты на ЭВМ. М: Изд-во Московского ун-та, 1994. 335 с.
2. Хванг С.-Т., Камермейер К. Мембранные процессы разделения. М.: Химия, 1981. 464 с.
3. Гуцалюк В.М. Вариационные методы в решении задач мембранной технологии. К.: Выща шк., 1991. 59 с.
4. Госман А.Д., Пан В.М., Ранчел Д.Б. и др. Численные методы исследования течений вязкой жидкости. М. -: Мир, 1972. 328 с.
5. Bergman A.S. Laminar flow in channels with porous walls// J. Appl. Phys.- 1953.- V.24, N9.- P.1232-1235.
6. Morduchov M. On Laminar Flow Through a Channel or Tube With Injection: Application of averages//Quart.Appl.Math.-1956.-V.14.,N4.-P.361-368.
7. Дьяконов В.П. Математическая система MAPLE V R3/R4/R5.: СОЛОН, 1998. - 400 с.
8. Yuan S.W., Finkelstein A.B. Laminar Pipe Flow With Injection and Suction Through a Porous Walls// Trans. A.S.M.E. J. of heat transfer.- 1956.- V.78, N4.- P. 719-724.

Приложение. Структурная схема алгоритма решения задачи

