

УДК 517.955:532.72

**Бомба А. Я., д.т.н., професор, Присяжнюк І. М., к.т.н., доцент, Присяжнюк О. В., аспірант** (Рівненський державний гуманітарний університет, м. Рівне), **Сівак В. М., к.т.н., доцент** (Національний університет водного господарства та природокористування, м. Рівне)

## **МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ ПЕРВИННОЇ ОЧИСТКИ СТИЧНИХ ВОД ІЗ ВИКОРИСТАННЯМ ПОРИСТИХ МІКРОЧАСТИНОК**

**Сформовано математичну модель процесу конвективно-дифузійного масопереносу забруднюючої речовини та адсорбуючих мікрочастинок нанопористої структури із врахуванням масообміну, породженого переходом забруднення з міжчастинкового простору у внутрішньочастинковий. Побудовано алгоритм числово-асимптотичного розвинення розв'язків відповідної сингулярно збуреної крайової задачі. Наведено результати комп'ютерних розрахунків та здійснено їх аналіз.**

**Ключові слова:** конвективна дифузія, нанопористе середовище.

**Вступ.** Процеси адсорбції в мікропористих цеолітних каталізаторах застосовуються в технологіях сепарації та очищення газів в хімічній та нафтопереробній галузях, в інженерній екології і т.п. Завдяки своїм сорбційним властивостям, нанопористі сорбенти повніше можуть бути використані в технологічних схемах очищення води [1-2]. Саме тому важливого значення набуває питання розробки і застосування нових методів і підходів до моделювання процесів масопереносу в неоднорідних нанопористих середовищах. В працях [3-4] розглянуто проблеми математичного моделювання масопереносу різної природи в пористих середовищах. Роботи [5-6] присвячено розвитку асимптотичних методів в теорії сингулярно збурених задач конвективно-дифузійного масопереносу без врахування структури середовища. Масоперенос забрудненої речовини в кристалічних середовищах частинок нанопористої структури розглянуто в працях [7-9]. Математичне моделювання та дослідження процесів масопереносу в різнопористих середовищах у випадку превалювання одних складових процесу над іншими, що призводить до появи малого параметра при відповідних членах рівняння, проведено в роботах [10-11]. Актуальним залишається питання врахування концентрації адсорбуючих частинок при моделюванні процесів конвективно-дифузійного масопереносу в нанопористих середовищах

з метою використання таких середовищ для ефективного очищення стічних вод.

У даній роботі змодельовано сингулярно збурений процес двокомпонентної конвективної дифузії з урахуванням масообміну між мігруючими нанопористими частинками та міжчастинковим простором.

**Постановка задачі.** Розглядається модельна сингулярно збурена задача двокомпонентного конвективно-адсорбційно-дифузійного масопереносу в двопористому середовищі:

$$\sigma_1 c_t = \varepsilon D_c c_{xx} - v(x)c_x - D(u) \int_0^R q_t(x, \tilde{r}, t) d\tilde{r}, \quad (1)$$

$$\sigma_1 u_t = -\alpha v(x)u_x, \quad (2)$$

$$\sigma_2 q_t = D_q \left( q_{rr} + \frac{2}{r} q_r \right), \quad (3)$$

$$c(x, 0) = c_0^0(x), \quad c(0, t) = c_*(t), \quad c(l, t) = c^*(t), \quad (4)$$

$$u(x, 0) = u_0^0(x), \quad u(0, t) = u_*(t), \quad u_x(x, t)|_{x=l} = 0, \quad (5)$$

$$q(x, r, 0) = q_0^0(x, r), \quad q(0, r, t) = q_*(r, t),$$

$$q(x, R, t) = \kappa c(x, t), \quad q_r(x, r, t)|_{r=0} = 0, \quad (6)$$

де  $c(x, t)$  – концентрація забруднюючої речовини в міжчастинковому просторі в точці з координатою  $x$  в момент часу  $t$ ,  $q(x, r, t)$  – концентрація забруднюючої речовини в мікрочастинках,  $u(x, t)$  – концентрація пористих мікрочастинок,  $D_c$  та  $D_q$  – коефіцієнти дифузії відповідно в міжчастинковому просторі та в порах частинок,  $D(u)$  – коефіцієнт впливу внутрішньочастинкового переносу на міжчастинковий,  $v(x)$  – швидкість конвективного перенесення,  $\varepsilon$  – малий параметр ( $v(x) > v_* \gg \varepsilon > 0$ ),  $0 < \alpha \leq 1$ ,  $\sigma_1, \sigma_2$  – коефіцієнти пористості відповідно макро- та мікросередовищ,  $l$  – товщина середовища,  $R$  – радіус частинки,  $\kappa$  – константа адсорбційної рівноваги. Вважаємо, що всі функції, які фігурують в умовах (4)-(6), є достатньо гладкими та узгодженими між собою в кутових точках відповідної області [2], а також на поверхнях адсорбуючих частинок

$$(q_0^0(x, R) = \kappa c_0^0(x), q_*(R, t) = \kappa c_*(t)).$$

Для знаходження концентрації пористих мікрочастинок  $u(x, t)$  маємо задачу (2), (5), розв'язок якої:

$$u(x, t) = \begin{cases} u_*((t - \frac{\sigma_1}{\alpha} f(x)), t \geq \frac{\sigma_1}{\alpha} f(x), \\ u_0^0(f^{-1}(f(x) - \frac{\alpha t}{\sigma_1})), t < \frac{\sigma_1}{\alpha} f(x), \end{cases} \quad (9)$$

де  $f(x) = \int_0^x \frac{d\tilde{x}}{v(\tilde{x})}$  – час проходження виділеної частинки  $\tilde{x} = 0$  до

$\tilde{x} = x$ ;  $f^{-1}(\cdot)$  – функція, обернена до функції  $f(\cdot)$  (зазначимо, що така функція існує, оскільки підінтегральна функція  $v^{-1}(\tilde{x})$  – неперервно диференційована, обмежена, додатньо визначена).

Розв'язок задач (1), (4) та (3), (6) знаходимо у вигляді асимптотичних рядів:

$$c(x, t) = c_0(x, t) + \varepsilon c_1(x, t) + \dots + \varepsilon^n c_n(x, t) + \Pi_0(\xi, t) + \varepsilon \ddot{I}_1(\xi, t) + \dots + \varepsilon^{n+1} \ddot{I}_{n+1}(\xi, t) + R_n^1(x, t, \varepsilon), \quad (7)$$

$$q(x, r, t) = q_0(x, r, t) + \dots + \varepsilon^n q_n(x, r, t) + R_n^2(x, r, t, \varepsilon), \quad (8)$$

де  $c_i(x, t)$ ,  $q_i(x, r, t)$ , ( $i = \overline{0, n}$ ) – члени відповідних регулярних частин асимптотики,  $\ddot{I}_p(\xi, t)$  ( $p = \overline{0, n+1}$ ) – функції типу примежового шару в околі  $x = l$ ,  $\xi = (l - x) \cdot \varepsilon^{-1}$  – змінна розтягу,  $R_n^1(x, t, \varepsilon)$  та  $R_n^2(x, r, t, \varepsilon)$  – залишкові члени.

Підставляючи (7)-(8) в (1)-(6) та прирівнявши коефіцієнти при однакових степенях  $\varepsilon$  [2], отримуємо такі задачі для знаходження регулярних частин асимптотики для кожного  $i = \overline{0, n}$ :

$$\left\{ \begin{array}{l} \sigma_2 q_{i_t}(x, r, t) = D_q (q_{i_{rr}}(x, r, t) + \frac{2}{r} q_{i_r}(x, r, t)), \\ v(x) c_{i_x}(x, t) + \sigma_1 c_{i_t}(x, t) = g_i(x, t), \\ q_i(x, r, 0) = h_i^1(x, r), \quad q_{i_r}(x, 0, t) = 0, \quad q_i(x, R, t) = h_i^2(x, t), \\ c_i(x, 0) = w_i^1(x), \quad c_i(0, t) = w_i^2(t), \end{array} \right.$$

$$g_0(x, t) = -D(u) \int_0^R q_{0t}(x, \tilde{r}, t) d\tilde{r}, \quad w_0^1(x) = c_0^0(x), \quad w_0^2(t) = c_*(t), \\ h_0^1(x, r) = q_0^0(x, r), \quad h_0^2(x, t) = \kappa c_0(x, t), \quad h_i^1(x, r) = 0, \quad w_i^1(x) = 0, \\ w_i^2(t) = 0, \quad g_i(x, t) = D_c c_{(i-1)_{xx}}(x, t) - D(u) \int_0^R q_{it}(x, \tilde{r}, t) d\tilde{r}, \\ h_i^2(x, t) = \kappa c_i(x, t) \text{ при } i > 0.$$

Для чисельного розв'язування отриманих вище задач введемо рівномірну сітку  $x_j = j \cdot \Delta x$ ,  $r_m = m \cdot \Delta r$ ,  $t_k = f(x_k)$  при  $k \leq N$  і  $t_k = t_N + (T - t_N)(k - N) / K$  при  $k = \overline{N+1, N+K}$ , де  $\Delta x = l / N$ ,  $\Delta r = R / M$ ,  $j = \overline{1, N}$ ,  $m = \overline{1, M}$ . Задаємо початкові умови  $c_i(x, t_0) = w_i^1(x)$ ,  $q_i(x, r, t_0) = h_i^1(x, r)$ . Для кожного  $k = \overline{1, N+K}$  почергово знаходимо  $q_i(x, r, t_k)$  (методом сіток при умові на границі  $q_i(x, R, t_k) = h_i^2(x, t_{k-1})$ ) та  $c_i(x, t_k)$  згідно методу характеристик:

$$c_i(x, t_k) = \left[ \begin{array}{l} \int_0^x v^{-1}(\tilde{x}) g_i(\tilde{x}, (t_k - \sigma_1 f(x) + \sigma_1 f(\tilde{x}))) d\tilde{x} + \\ + \varphi_i^1(t_k - \sigma_1 f(x)), t_k \geq \sigma_1 f(x), \\ (1 / \sigma_1) \int_{t_{k-1}}^{t_k} g_i(f^{-1}(\tilde{t} / \sigma_1 - t / \sigma_1 + f(x)), \tilde{t}) d\tilde{t} + \\ + c_i(f^{-1}(f(x) - \frac{t_k}{\sigma_1}), t_{k-1}), t_k < \sigma_1 f(x), \end{array} \right.$$

де  $\varphi_0(t_k) = c_*(t_k)$ ,  $\varphi_i(t_k) = 0$  при  $i > 0$ .

На кожному часовому проміжку враховуємо зміщення адсорбуючих

частинок за рахунок конвективного перенесення:

$$q_i(x, r, t_k) = \begin{cases} q_*(r, t_k - \frac{\sigma_1}{\alpha} f(x)), t_k \geq \frac{\sigma_1}{\alpha} f(x), \\ q_i(f^{-1}(f(x) - \frac{\alpha t_k}{\sigma_1}), r, t_k), t_k < \frac{\sigma_1}{\alpha} f(x). \end{cases}$$

Для досягнення необхідної точності, збільшуємо кількість кроків розбиття відрізка  $[0, l]$  до тих пір, поки норма різниці розв'язків, отриманих на двох сусідніх сітках, не стане меншою за задану точність.

Функції  $\Pi(\xi, t) = \sum_{p=0}^{n+1} \mathcal{E}^p \Pi_p(\xi, t)$  призначені для усунення неузгодженостей, внесених побудованими регулярними частинами  $c(x, t) = \sum_{i=0}^n \mathcal{E}^i c_i(x, t)$  в околі ділянки  $x = l$  (виходу фільтраційної течії). Таким чином, повинна виконуватись умова:  $(c(l, t) + \ddot{I}(0, t))|_{x=l} = c^*(t) + O(\mathcal{E}^n)$ . Дані функції знаходимо, аналогічно до [10], в результаті розв'язку наступних задач:

$$\begin{cases} D_c \Pi_{p\xi\xi}(\xi, t) + v(x) \Pi_{p\xi}(\xi, t) = \mu_p(\xi, t), \\ \Pi_p(0, t) = v_p(t), \Pi_p(\xi, t)|_{\xi \rightarrow \infty} \rightarrow 0, \end{cases}$$

$$\mu_0(\xi, t) = 0, \mu_p(\xi, t) = \sigma_1 \Pi_{p-1, t}(\xi, t) + v'(l) \xi \Pi_{p-1, \xi}(\xi, t) - \frac{1}{2} v''(l) \xi^2 \Pi_{p-2, \xi}(\xi, t) + \dots + (-1)^p v^{(p)}(l) \xi^p \Pi_{0, \xi}(\xi, t) \text{ при } p > 0,$$

$$v_p(t) = -c_p(l, t) \text{ при } p = \overline{0, n}, v_{n+1}(t) = 0.$$

Оцінка залишкових членів проводиться аналогічно до [10].

**Числові розрахунки.** Наведемо результати розрахунку розглянутого вище процесу в середовищі довжиною  $l = 1$ , яке в початковий момент часу  $t = 0$  заповнене адсорбуючими частинками радіусом  $R = 10^{-5}$  з концентрацією  $u_0^0(x) = 0.5$  при сталій швидкості конвективного перенесення  $v(x) = 1$ . Початковий розподіл забруднення в

міжчастинковому середовищі та в порах частинок відповідно дорівнюють  $c_0^0(x) = 0.1$  та  $q_0^0(x, r) = (2/\pi) \arctg(1+100(r-R)/R)kc_0^0(x)$ . На вході в область маємо:  $q_*(r, t) = (2/\pi) \arctg(1+100(r-R)/R)kc_*(t)$ ,  $c_*(t) = 0.1$ ,  $u_*(t) = 0.5$ . Комп'ютерний експеримент проводився при таких значеннях коефіцієнтів системи (1)-(6) та параметрах розбиття області:  $\sigma_1 = 0.8$ ,  $\sigma_2 = 0.7$ ,  $D_c = 0.4$ ,  $D_q = 10^{-10}$ ,  $\varepsilon = 10^{-4}$ ,  $k = 1$ ,  $\alpha = 1$ ,  $N = 250$ ,  $M = 20$ ,  $K = 50$ .

На рис. 1. наведено графіки розподілу концентрації забруднюючої речовини в міжчастинковому просторі в моменти часу  $t_1 = 0$ ,  $t_2 = 0.048$ ,  $t_3 = 0.128$ ,  $t_4 = 0.256$ ,  $t_5 = 0.32$ ,  $t_6 = 0.48$ ,  $t_7 = 0.8$  (криві 1-7 відповідно). Залежність розподілу концентрації шкідливих домішок від кількості частинок, що їх поглинають зображено на рис. 2. Так, крива 1 відображає розподіл  $c(x, t)$  при  $D(u) = 10^4$ , крива 2 – при  $D(u) = 2 \cdot 10^4$ , крива 3 – при  $D(u) = 5 \cdot 10^4$ , крива 4 – при  $D(u) = 10^5$ .

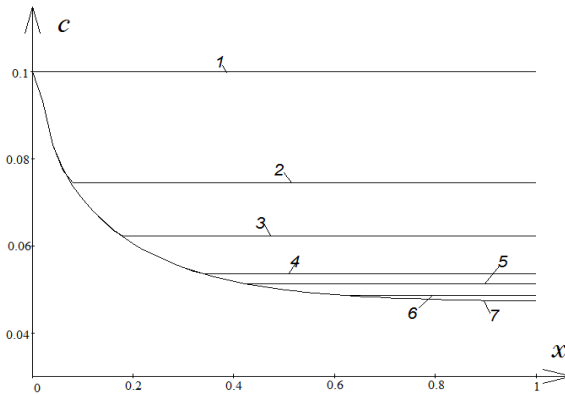


Рис. 1. Розподіл концентрації забруднюючої речовини  $c(x, t)$  у різні моменти часу  $t$

Як показав експеримент при  $t > 0.8$  год процес стабілізується, тому для подальшого зменшення концентрації забруднюючої речовини в середовищі доцільним є збільшення концентрації адсорбуючих мікрочастинок, що подаються на вході.

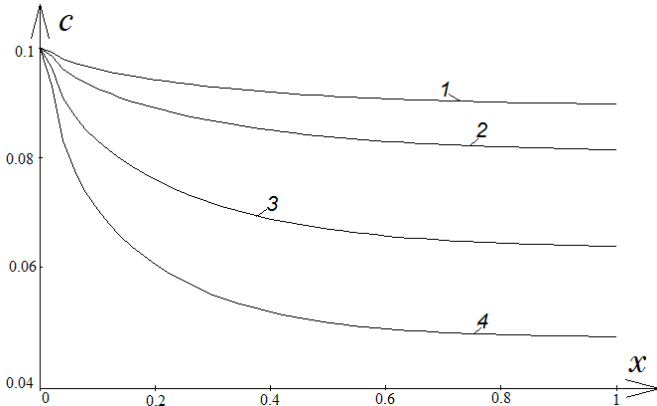


Рис. 2. Вплив коефіцієнта  $D(u)$  на розподіл концентрації забруднюючої речовини  $c(x, t)$  при  $t=0.8$

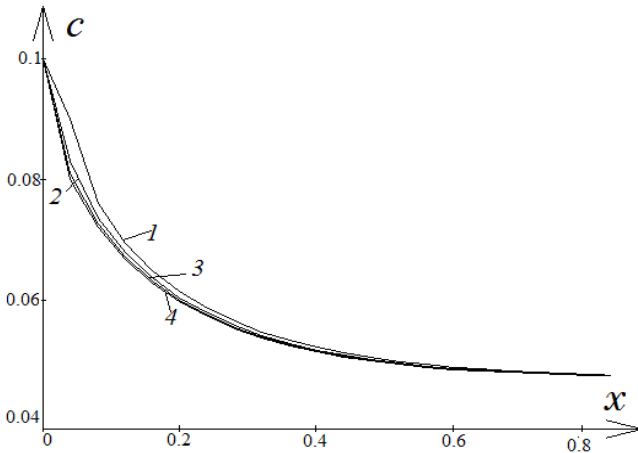


Рис. 3. Залежність розв'язку  $c(x, t)$  від кількості точок розбиття відрізка  $[0, l]$

На рис. 3 зображено розподіл концентрації забруднюючої речовини  $c(x, t)$ , що був отриманий при різних кроках розбиття відрізка  $[0, l]$ . Криві 1-4 відповідають розв'язку при кількості вузлів розбиття  $N$  відповідно 50, 100, 200 та 250 точок. Максимальне відхилення між шуканими значеннями концентрації, отриманими при  $N = 50$  і  $N = 100$  становить  $2.8 \times 10^{-4}$ , при  $N = 100$  і  $N = 200$  –  $1.2 \times 10^{-4}$ , при  $N = 200$  і  $N = 250$  –  $3 \times 10^{-5}$ .

**Висновки і зауваження.** Змодельовано процес конвективно-дифузійного масопереносу забруднюючої речовини разом з адсорбуючими мікрочастинками нанопористої структури та встановлено ефективність використання таких частинок з метою первинного очищення стічних вод від забруднень.

У перспективі – дослідження такого роду процесів у двовимірних та просторових областях та у випадку багатокомпонентного забруднення а також з урахуванням терморезиму.

1. Karger J. Diffusion in zeolites and other microporous solids / Karger J., Ruthven D. – New York : John Wiley & Sons, 1992. – 605 p.
2. Edvard L. Cussler. Diffusion – mass trasfert in fluid systems / Edvard L. Cussler. – Cambridge : Cambridge Univ. Press, 2008. – 656 p.
3. Ляшко И. И. Численное решение задач тепло– и массопереноса в пористых средах / И. И. Ляшко, Л. И. Демченко, Г. Е. Мистецкий – Киев : Наук. думка, 1991. – 264 с.
4. Булавацький В. М. Некласичні математичні моделі процесів тепло – та масопереносу / В. М. Булавацький, Ю. Г. Кривонос, В. В. Скопечський – Київ : Наукова думка, 2005. – 282 с.
5. Бомба А. Я. Об асимптотическом методе приближенного решения одной задачи массопереноса при фильтрации в пористой среде / А. Я. Бомба // Укр. матем. журн. – 1982. – Т. 4, № 4. – С. 493-496.
6. Бомба А. Я. Нелінійні сингулярно збурені задачі типу «конвекція-дифузія» / А. Я. Бомба, С. В. Барановський, І. М. Присяжнюк. – Рівне : НУВГП, 2008. – 254 с.
7. Петрик М. Р. Математична модель процесу фільтраційного масопереносу неоднорідних середовищ у сферично-конічних необмежених каналах / М. Р. Петрик // Нелинейные задачи математической физики и их применение: 36. наук. пр. – К. : Ін – т. математики НАН України, 1999. – С. 184–188.
8. Петрик М. Р. Моделирование и анализ концентрационных полей нелинейной компетитивной двухкомпонентной диффузии в среде нанопористых частей / М. Р. Петрик, Ж. Фрессард, Д. М. Михалик // Проблемы управления и информатики. – 2009. – № 4. – С. 73-83.
9. Сергиенко И. В. Идентификация градиентными методами параметров задач диффузии вещества в нанопористой среде / И. В. Сергиенко, В. С. Дейнека // Пробл. управления и информатики. – 2010. – № 6. – С. 5–18.
10. Бомба А. Я. Асимптотичний метод розв'язання одного класу модельних сингулярно збурених задач процесу масопереносу в різнопористих середовищах / А. Я. Бомба, І. М. Присяжнюк, О. В. Присяжнюк // Доповіді НАН України. – 2013. – № 3. – С. 28-34.
11. Присяжнюк О. В. Ідентифікація параметрів сингулярно збурених задач типу «конвекція-дифузія-масообмін» в різнопористих середовищах / А. Я. Бомба, І. М. Присяжнюк, О. В. Присяжнюк // Вісник ХНУ. – № 1063. – Вип. 22. – 2013. – С. 36-44. – Серія «Математичне моделювання. Інформаційні технології. Автоматизовані системи управління».

Рецензент: д.т.н., професор Орлов В. О. (НУВГП)

---



**Bomba A. Y., Doctor of Engineering, Professor, Prysiazhniuk I. M., Candidate of Engineering, Associate Professor, Prysiazhniuk O. V., Post-graduate Student (Rivne State Humanitarian University, Rivne), Sivak V. M., Candidate of Engineering, Associate Professor (National University of Water Management and Nature Resources Use, Rivne)**

#### **MATHEMATICAL MODELING OF PRIMARY TREATMENT OF WASTEWATER USING POROUS MICROPARTICLE**

**Mathematical model of convection-diffusion mass transfer of pollutants and adsorbing micro-particles of nanoporous structure taking into account the mass transfer generated by transfer of pollution from interparticle space in the intra particle is formed. The algorithm of asymptotic expansions of solutions of singularly perturbed boundary value corresponding task is constructed. The results of numerical researches are given and analyzed.**

**Keywords: convective diffusion, nanoporous environment.**

---

**Бомба А. Я., д.т.н., профессор, Присяжнюк И. Н., к.т.н., доцент, Присяжнюк А. В., аспирант (Ровенский государственный гуманитарный университет, г. Ровно), Сивак В. М., к.т.н., доцент (Национальный университет водного хозяйства и природопользования, г. Ровно)**

#### **МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ПЕРВИЧНОЙ ОЧИСТКИ СТОЧНЫХ ВОД С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПОРИСТЫХ МИКРОЧАСТИЦ**

**Сформирована математическая модель процесса конвективно-диффузионного массопереноса загрязняющего вещества и адсорбирующих микрочастиц нанопористой структуры с учетом массообмена, порожденного переходом загрязнения из межчастичного пространства во внутрочастичное. Построен алгоритм асимптотического разложения решений соответствующей сингулярно возмущенной краевой задачи. Приведены результаты компьютерных расчетов и осуществлен их анализ.**

**Ключевые слова: конвективная диффузия, нанопористая среда.**

---