

УДК 519.6

ПРИМЕНЕНИЕ МНОГОМАСШТАБНОГО ПОДХОДА ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ СОРБЦИОННОЙ ФИЛЬТРАЦИИ ВОЗДУХА

© 2021 г. С. В. Поляков^{1,*}, Т. А. Кудряшова^{1,**}, Н. И. Тарасов^{1,***}

Представлено академиком РАН Б.Н. Четверушкиным 27.07.2021 г.

Поступило 27.07.2021 г.

После доработки 27.07.2021 г.

Принято к публикации 08.08.2021 г.

Рассматривается моделирование процессов фильтрации воздуха посредством гранулированных сорбентов. Задача актуальна для промышленной очистки воздуха от вредных продуктов производства, а также для бытовой очистки. Математическое моделирование полезно для разработки и модернизации фильтров, а также для оптимизации технического обслуживания. Предложен многомасштабный подход для решения комплексной задачи фильтрации в условиях реальной геометрии. Его основу составляет метод расщепления по физическим процессам и пространственно-временным масштабам. Базовыми моделями на макромасштабах являются уравнения квазигидро- и квазигазодинамики и конвекции-диффузии, на микромасштабах — модели частиц, в том числе молекулярной динамики. Численная реализация первых производится сеточным методом конечных объемов на неструктурированных сетках, вторых — с помощью схемы Верле и ее обобщений. Анализ результатов численных экспериментов подтвердил их достоверность и теоретическую обоснованность.

Ключевые слова: очистка воздуха, многомасштабные математические модели, численные методы, экология, фильтрация, сорбенты

DOI: 10.31857/S268695432105009X

Очистка воздуха является одной из наиболее приоритетных задач современной экологии. Причиной высокого загрязнения воздушной среды является деятельность человека, в частности, развитие промышленности, сельского хозяйства, увеличение количества транспортных средств. Среди природных источников загрязнения ведущее место занимают вулканы [1]. Одним из направлений решения данной экологической проблемы является совершенствование систем промышленной и бытовой очистки воздушной среды, для чего проводятся широкие научные исследования и натурные эксперименты. Последние все больше заменяются методами математического и компьютерного моделирования.

Главной проблемой очистки воздушной среды в настоящее время является удаление из потока наноразмерных частиц загрязнителя. Удаление таких частиц на ранних стадиях очистки физиче-

ски невозможно ввиду их особо малого размера. При этом опасность присутствия таких частиц в воздушном потоке связана с тем, что при попадании в легкие человека и животных, они остаются там на продолжительное время и приводят в итоге к развитию необратимых патологий органов дыхания. Для очистки воздушного потока от твердых наночастиц могут применяться системы фильтрации газов с использованием гранулированных сорбентов [2–5] — элементов различной формы, имеющих поверхностный или объемный заряд, позволяющий захватывать загрязняющие частицы малого размера. Данный подход позволяет управлять допустимой концентрацией загрязнителя и режимом работы фильтра с помощью увеличения количества сорбента. Кроме того, подобные очистные системы допускают эффективную регенерацию без опасности нарушения последующей работы.

При попадании загрязненной газовой смеси в активную область фильтра, наполненную гранулами сорбента, в результате взаимодействия с ними загрязнитель удерживается в системе. Для построения адекватной математической модели такого процесса необходимо учитывать:

— течение среды, в том числе в области скопления гранул;

¹ Федеральный исследовательский центр
Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша
Российской академии наук, Москва, Россия

*E-mail: serge@imamod.ru

**E-mail: kudryashova@imamod.ru

***E-mail: nikita_tarasow01@mail.ru

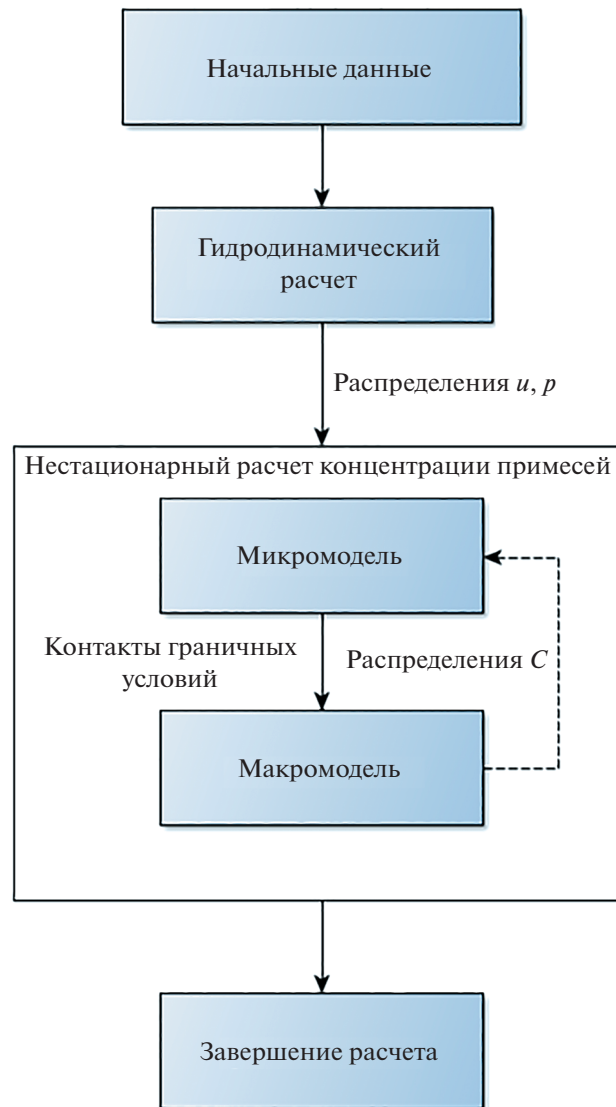


Рис. 1. Алгоритм многомасштабного подхода.

— конвекционно-диффузионный перенос загрязнителя;

— захват примеси сорбционными элементами.

Для моделирования течения воздуха воспользуемся тем фактом, что при небольших перепадах давления и малых скоростях (что справедливо при рассмотрении фильтрационных устройств) допускается описание поведения потока воздуха как несжимаемой среды. Это позволяет использовать либо уравнения Навье—Стокса в гидродинамическом приближении, либо обобщающую их квазигидродинамическую систему [6, 7]. В случае изотермического течения последняя в безразмерной форме имеет вид:

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

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

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

где $(\bullet \otimes \bullet)$ — прямое произведение векторов, p — давление, $\mathbf{w}$ — регуляризирующая поправка, τ —

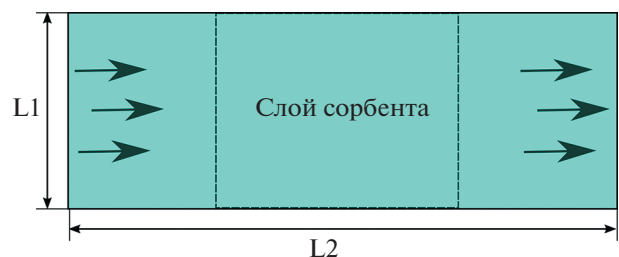


Рис. 2. Схема геометрии расчетной области.

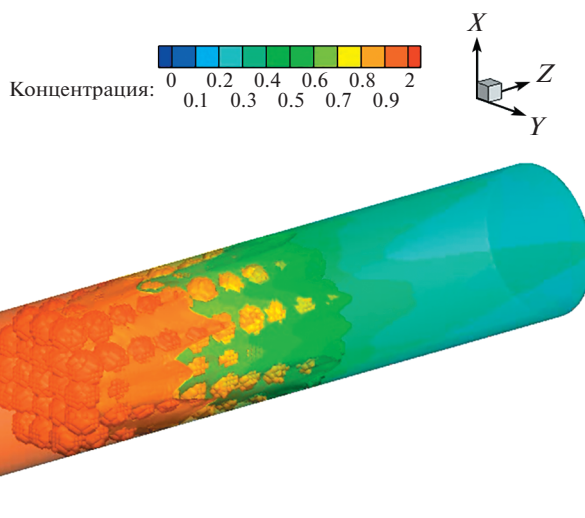


Рис. 3. Распределение полной концентрации примеси, изоповерхности.

параметр регуляризации. Дополним систему уравнений (1)–(3) граничными условиями:

течение Пуазейля на входе:

$$\mathbf{u} = \{U(y, z), 0, 0\}^T, \quad \frac{\partial p}{\partial n} = -C \quad (C = \text{const} > 0), \quad (4)$$

свободный выход на выходе:

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial n} = 0, \quad p = p_0, \quad (5)$$

условия прилипания на стенке:

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

В качестве начальных условий принимаются условия покоя среды:

$$\mathbf{u} = 0, \quad p = p_0. \quad (7)$$

Здесь p_0 — атмосферное давление. Константа C выбирается из условия постоянства расхода жидкости, проходящей через фильтр. Отметим, что мелкодисперсность примеси позволяет вычислять для последующего моделирования нестационарного процесса очитки [8].

Распределение и эволюцию компонентов примеси в фильтре будем описывать с помощью уравнений конвекции-диффузии, учитывающих сорбционные процессы посредством введения специальных граничных условий [9]. В безразмерной форме система имеет следующий вид:

$$\frac{\partial C_k}{\partial t} = \nabla (D_k \nabla C_k + \mathbf{u} C_k), \quad (8)$$

здесь C_k — концентрация частиц сорта k , $D_k = \frac{D_{0,k}}{u_0 H}$ — константа нормировки, $D_{0,k}$ — безразмерный коэффициент диффузии частиц. Система уравнений (8) дополняется граничными условиями:

на входе в среду:

$$C_k = \frac{1}{n_k}, \quad (9)$$

где n_k — количество компонент загрязнителя;

на выходе из среды:

$$\frac{\partial C_k}{\partial n} = 0; \quad (10)$$

на стенках (поверхность резервуара или сорбционного элемента):

$$\frac{\partial C_k}{\partial n} = A_k (C_k - C_k^*) \left(1 - \frac{C_k}{C_k^{**}} \right), \quad (11)$$

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 гранулы сорбента (может зависеть от общего числа вакансий на поверхности гранулы, свободных от всех наночастиц всех сортов загрязнителя).

Системы уравнений (1)–(3) и (8) будем называть макромоделами. Микромоделами первого приближения будем считать методики расчета параметров $D_{0,k}$, A_k , C_k^{**} , на основе методов частиц и молекулярной динамики [10]. Тогда итого-

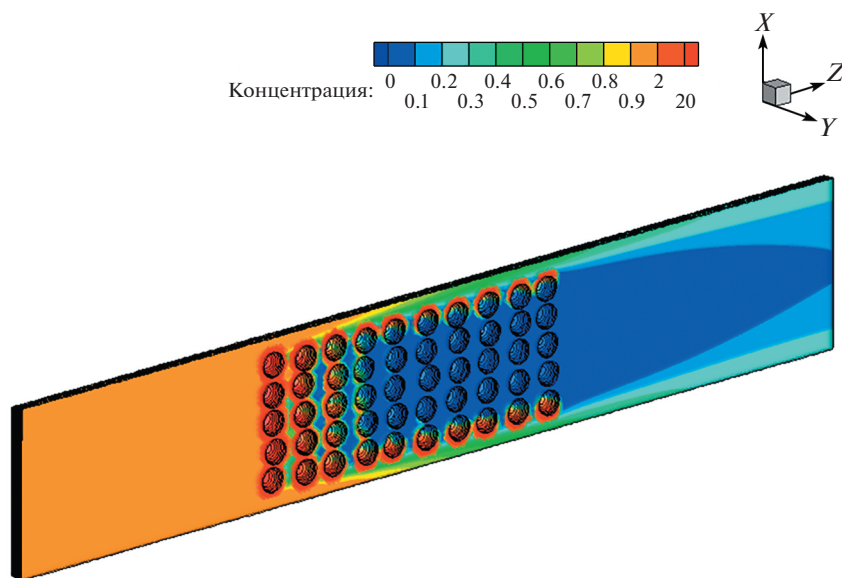


Рис. 4. Распределение полной концентрации примеси, набор сечений.

вый многомасштабный подход можно представить схемой, изображенной на рис. 1.

Дискретизация уравнений (1)–(3) выполнена в соответствии с работой [11]. Естественные переменные определялись в центрах ячеек, регулирующая поправка — на гранях сеточных элементов. Сеточные аналоги уравнений (8) были получены на основе метода конечных объемов [12–14], где в качестве контрольных объемов использовались ячейки пространственной сетки. Для аппроксимации по времени использовалась явная схема.

В модельном численном эксперименте рассматривалась область с размерами $L_1 = 2$, $L_2 = 12$, содержащая 210 сферических гранул радиуса 0.15, схема которой изображена на рис. 2. На входе фильтра задавалось постоянное распределение скорости $u_x = 1.0$. Течение рассчиталось для $Re = 150$. Коэффициент D_k принимался равным 1.0. Начальное состояние $\mathbf{u} = 0$, $p = p_0$ и $C = 0.0$ с равновесной концентрацией примеси равной 0.0. Скорость захвата загрязнителя принималась равной $A = 1.0$. Критерий насыщения — $C^{**} = 1000$. В численном расчете использовалась тетраэдральная сетка, содержащая 1780727 элементов. Результаты проведенных расчетов представлены на рис. 3, 4. Они подтверждают наличие эффекта очистки — прилипания частиц к поверхности гранул сорбента.

В заключение отметим, что использование многомасштабного подхода позволяет получать эволюцию концентрации примеси в областях различной сложности, в том числе реальной геометрии. С практической точки зрения проведение подобных численных расчетов может стать

полезным инструментом для разработки и оптимизации фильтрационных устройств, а также их эффективной эксплуатации.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Джувеликян Х.А., Черепухина И.В. Современные проблемы природного и техногенного загрязнения окружающей среды // “Живые и биокосные системы”. 2017. № 22. URL: <http://www.jbks.ru/archive/issue-22/article-8>
2. Штокман Е.А. Очистка воздуха. Москва: АСВ, 2007. 313 с.
3. Xu Zh. Fundamentals of Air Cleaning Technology and Its Application in Cleanrooms. B., Heidelberg: Springer, 2014. 871 p.
4. Sparks T., Chase G. Filters and Filtration Handbook (Sixth Edition). Butterworth-Heinemann, 2015. 431 p.
5. Гладышев Н.Ф., Гладышева Т.Г., Дворецкий С.И. Системы и средства регенерации и очистки воздуха обитаемых герметичных объектов. Москва: Издательский дом «Спектр», 2016. 204 с.
6. Elizarova T.G. Quasi-Gas Dynamic Equations. B., Heidelberg: Springer-Verlag, 2009. 286 p.
7. Elizarova T.G., Zlotnik A.A., Chetverushkin B.N. On quasi-gasdynamic and quasi-hydrodynamic equations for binary gas mixtures // Doklady Mathematics. 2014. V. 90. № 3. P. 719–723.
8. Поляков С.В., Кудряшова Т.А., Тарасов Н.И. Метод двойного потенциала для моделирования внутреннего течения вязкой несжимаемой жидкости // Доклады РАН. Математика, информатика, процессы управления. 2020. Т. 494. № 1. С. 73–76.
9. Karamzin Yu.N., Kudryashova T.A., Polyakov S.V. On a class of flux schemes for convection-diffusion equa-

- tions // Computational Mathematics and Information Technologies. 2017. V. 1. № 2. P. 169–179.
10. Подрыга В.О., Вихров Е.В., Поляков С.В. Молекулярно-динамический расчет коэффициента диффузии газов на примере аргона, азота, водорода, кислорода, метана и углекислого газа // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша. 2019. № 96. 24 с.
 11. Тарасов Н.И., Поляков С.В., Карамзин Ю.Н., Кудряшова Т.А., Подрыга В.О., Пузырьков Д.В. Моделирование потока вязкой несжимаемой жидкости с помощью квазигидродинамической системы уравнений // Матем. моделирование. 2019. Т. 31. № 12. С. 33–43.
 12. Ильин В.П. Методы конечных разностей и конечных объемов для эллиптических уравнений. Новосибирск: Изд-во Ин-та математики СО РАН, 2000. 345 с.
 13. Eymard R., Gallouet T.R., Herbin R. The finite volume method // Handbook of Numerical Analysis, Elsevier. 2000. V. 7. P. 713–1020.
 14. LeVeque R.J. Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems. Cambridge University Press. 2002. 558 p.

APPLICATION OF THE MULTI-SCALE APPROACH FOR AIR SORBENT FILTRATION SIMULATION

S. V. Polyakov^a, T. A. Kudryashova^a, and N. I. Tarasov^a

^a Keldysh Institute of Applied Mathematics of Russian Academy of Sciences, Moscow, Russian Federation

Presented by Academician of the RAS B.N. Chetverushkin

The problem of numerical modeling air filtration by granular sorbents is considered. The task of cleaning air is relevant for industrial purification from harmful products of manufacturing, as well as for household cleaning air. Mathematical modeling can be useful both for the development and modernization of filters, and for optimizing maintenance. A multiscale approach is proposed for solving a complex filtration problem in real geometry conditions. It is based on the method of splitting into physical processes and space-time scales. The basic models on the macroscale are the equations of quasihydro- and quasi-gasdynamics and convection-diffusion, on the microscale are models of particles, including the molecular dynamics. The numerical implementation of the former is carried out by mesh method of the finite-volumes on unstructured meshes, and the latter, using the Verlet scheme and its generalizations. Analysis of the results of numerical experiments confirmed their reliability and theoretical validity.

Keywords: air purification, multi-scale mathematical models, numerical methods, ecology, filtration, sorbents