Моделирование очистки воды от механических примесей методом дискретного элемента

Е.Н. Дьяченко
Томский государственный университет

Рассматривается моделирование седиментации и фильтрации механических примесей в жидкости методом дискретного элемента и при помощи супервычислительной техники. Результаты такого моделирования могут быть использованы для оптимизации параметров очистных сооружений и повышения степени очистки воды.

При моделировании процессов очистки воды, седиментации и фильтрации необходимо учитывать движение множества частиц примесей различной формы и размеров в жидкой среде. Суперкомпьютерное моделирование при этом целесообразно проводить методом дискретного элемента, изначально предложенным Кундаллом и Стреком [1] для задач механики горных пород и впоследствии модифицированным в работах [2 – 3] для приложения к задаче осаждения частиц.

Суть метода дискретного элемента заключается в двойном численном интегрировании уравнения движения (второго закона Ньютона) для каждой частицы.

Поскольку необходимо рассчитывать взаимодействие всех частиц со всеми, то вычислительная сложность метода пропорциональна квадрату количества рассматриваемых элементов, что значительно ограничивает либо продолжительность моделируемого физического процесса по времени, либо количество частиц.

Обозначенная задача в точной постановке сложно поддается математической формализации (в частности, возникает множество проблем при описании частиц сложной и разнообразной формы) и является крайне ресурсоемкой, поэтому в модели используются следующие упрощенные представления: не учитывается сложный характер движения жидкости между частицами; полагается, что все частицы имеют сферическую форму; частицы взаимодействуют при контакте друг с другом.

На рис. 1 показана схема пресс-фильтра – аппарата для разделения под давлением жидких неоднородных систем (суспензий) на жидкую фазу – фильтрат и твердую фазу – осадок. Пресс-фильтры применяются для фильтрации широкого класса суспензий, а также они пригодны для разделения суспензий с небольшой концентрацией твердых частиц

и суспензий с повышенной температурой, охлаждение которых недопустимо вследствие выпадения кристаллов из жидкости.

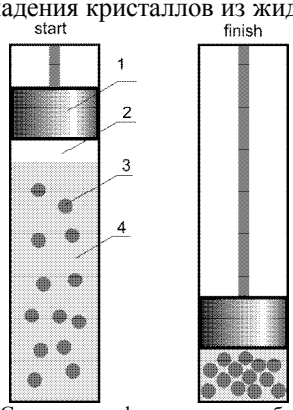


Рис. 1. Схема пресс-фильтра и его работы:
1 – поршень; *2* – воздушный слой;
3 – частицы твердой фазы; *4* – жидкость

Максимальное количество частиц, которое удается просчитать в течение суток на кластерном суперкомпьютере СКИФ Cyberia с пиковой производительностью 12 ТФлопс, – около одного миллиона при продолжительности физического процесса порядка 100 с. Распараллеливание производилось посредством трехмерной динамической пространственной декомпозиции.

На рис. 2 представлена динамика роста слоя – зависимость высоты слоя от времени. Видно, что до момента времени 0,5 с слой растет, потом достигает максимума высоты и далее (для больших значений коэффициента адгезии Kad) происходит медленный процесс усадки слоя. Похожая картина процесса обнаруживается в натурном эксперименте: для сравнения на рис. 3 приводятся данные из работы [4]. Сравнивая рис. 2 и 3, можно обнаружить качественное сходство данных, но при этом наблюдается огромное количественное различие. Это связано с тем, что в численном моделировании не удается просчитать такое большое количество частиц, как в натурном эксперименте. В дальнейшем планируется преодолеть эту проблему посредством введения в рассмотрение безразмерных критериев.

На рис. 4 представлены данные о распределении плотности слоя частиц по высоте. Суспензия вначале седиментировала, а затем слой подвергался воздействию поршня. Момент времени 3 с соответствует окончанию процесса седиментации (поршень еще не коснулся частиц), 4 с – началу процесса сжатия поршнем слоя, 6,8 с – остановке поршня.

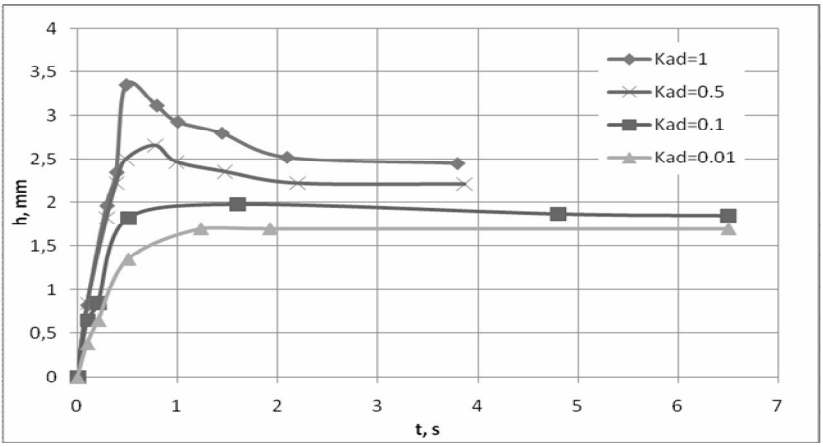


Рис. 2. Динамика роста слоя для различных уровней адгезии частиц (компьютерное моделирование): число частиц – 1910, радиус частиц – 0,05 мм, начальная высота слоя – 10 мм, начальная концентрация – 0,1

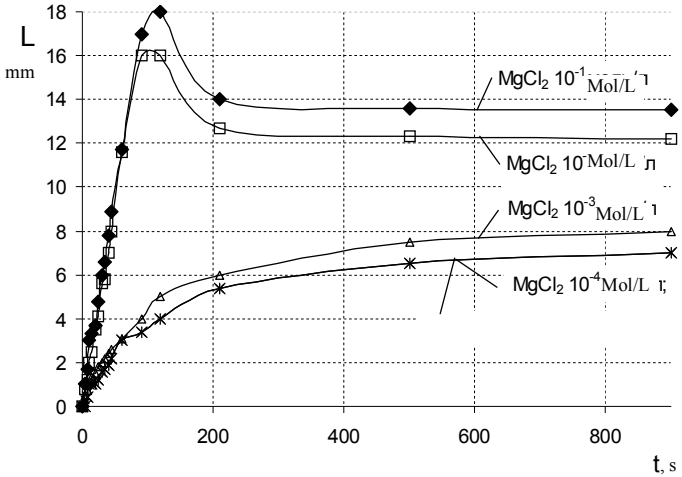


Рис. 3. Динамика роста слоя (натурный эксперимент, взято из [4])

Из рис. 4 видно, что в момент времени 3 с плотность слоя понижается с увеличением высоты. Это связано с тем, что вышележащие частицы давят на частицы внизу и уплотняют их за счет пространственного перераспределения. В момент времени 6,8 с распределение становится практически равномерным, что связано с действием поршня. Стохастические колебания кривых вызваны случайной природой про-

цесса и тем, что в рассмотрении было не так много частиц, как в эксперименте.

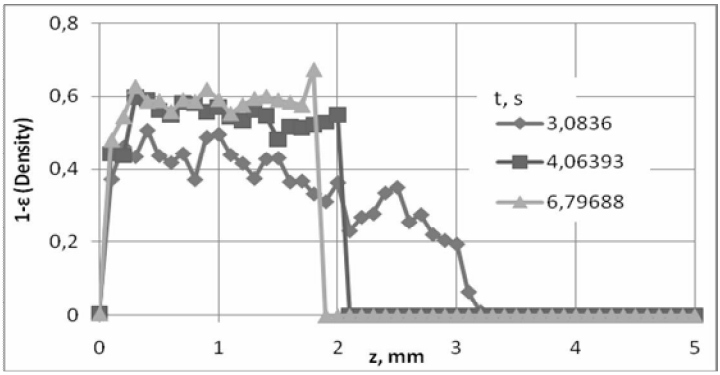


Рис. 4. Распределение плотности слоя по высоте для различных моментов времени

Суперкомпьютерное моделирование находит применение при изучении процессов седиментации и фильтрации частиц механической примеси, позволяет понять физику процессов, дает возможность улучшить степень и скорость очистки воды, увеличивать время работы фильтров без дорогостоящих процедур регенерации и удешевлять строительство очистных сооружений за счет выбора оптимальных размеров и фильтрационных материалов. Но вычислительных ресурсов недостаточно для проведения прямого моделирования, поскольку количество частиц, участвующих в процессах в природе, на много порядков больше, чем позволяют просчитать суперкомпьютеры. Для преодоления в некоторой степени этой проблемы планируется использовать безразмерные критерии.

Литература

1. **Cundall P.A., Strack O.D.L.** A distinct element model for granular assemblies // Geotechnique. 1979. Vol. 29.P. 47-65.
2. **Дик И.Г., Дьяченко Е.Н., Миньков Л.Л.** Моделирование случайной упаковки шаров // Физическая мезомеханика. 2006. Т. 9. №4. С. 63-69.
3. **Neesse T.H., Dueck J., Djatchenko E.** Simulation of filter cake porosity in solid/liquid separation // Powder Technology. 2009. №193. P. 332-336.
4. **Dueck J., Purevjav D., Kilimnik D. Yu.** A contribution to the theory of porosity of fine-grained sediments // Journal of Engineering Physics and Thermophysics. 2004. Vol. 77. № 1. P. 93-102.