

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСУ ОТРИМАННЯ КОАГУЛЯНТУ МЕТОДОМ ЕЛЕКТРОКОАГУЛЯЦІЇ

А.П. Сафоник*, докт.техн.наук, О.В. Присяжнюк**, канд.техн.наук
Національний університет водного господарства і природокористування,
вул. Соборна, 11, Рівне, 33028, Україна, e-mail: safonik@ukr.net

Розроблено підхід до моделювання процесу електрокоагуляції на основі узагальнення рівнянь руху нестискої рідини між електродами в неізотермічних умовах з урахуванням співвідношень між величинами параметрів, які характеризують домінування конвективних та масообмінних складових над дифузійними, а також впливу швидкості теплоутворення внаслідок електродного нагрівання на ефективність утворення коагулянту. Побудовано асимптотичне наближення розв'язків відповідних крайових задач та проведено дослідження впливу сили струму на концентрацію цільового компонента на виході з електрокоагулятора з використанням розробленої математичної моделі. Бібл. 14, рис. 5.

Ключові слова: математичне моделювання, електрокоагуляція, електрофлотація, коагулянт, асимптотика, крайова задача.

Вступ. Скорочення обсягів скидання забруднень у водойми й перехід підприємств до роботи за схемою замкненого циклу водокористування є головним напрямом захисту водного середовища. Для очищення стічних вод текстильного виробництва застосовується реагентний метод, що вимагає використання значного обсягу додаткових хімічних речовин, одним з яких є двовалентне залізо. Для його отримання використовуються різні методи, найбільш ресурсощадним з яких є метод електрокоагуляції. Цей метод має ряд переваг, таких як універсальність, відсутність додаткового сольового забруднення води в процесі очищення, невеликі розміри установок, компактність установок і простота керування, відсутність потреби у реагентах, повна відсутність або спрощення реагентного господарства, простота обслуговування устаткування, слабка чутливість до змін умов проведення процесу, одержання шламу з кращими структурно-механічними властивостями. Серед основних причин, що перешкоджають широкому впровадженню електрокоагуляторів у виробництво, відзначають технологічну складність процесу і відносно високу собівартість через дороговартісні експериментальні дослідження та відсутність системного підходу до проектування електрокоагуляційних установок у технології оброблення стоків, яка дасть змогу створити на підприємстві маловідходні замкнені системи водоспоживання, а також зведе до мінімуму можливість утворення додаткових джерел забруднення та ризик порушення екологічної рівноваги, буде екологічно безпечною та економічно доцільною. У зв'язку з цим актуальним напрямком наукових досліджень є математичне моделювання процесу отримання коагулянту методом електрокоагуляції.

На сьогодні велика кількість наукових досліджень присвячена моделюванню електрокоагуляційного очищення стічних вод [1–3, 8–10]. Так, у [1, 2] здійснено огляд підходів до моделювання електрохімічних реакторів з акцентом на теоретичне розуміння механізмів електрокоагуляції, моделювання на основі обчислювальної гідродинаміки та техніко-економічна оптимізація процесу. В [3] адаптована феноменологічна математична модель процесу електрокоагуляції для дослідження впливу сили струму на якість очищення стічних вод та запропоновано засоби імітаційного моделювання для оцінки динамічних характеристик процесів, що відбуваються в електрокоагуляторі. В роботах [9–11] досліджено процес електрофлотації в електрохімічному реакторі з використанням математичного моделювання на основі обчислювальної гідродинаміки. Авторами також було досліджено вплив різних параметрів, зокрема матеріалу електродів, геометричних характеристик електрокоагулятора, густини струму, кислотності середовища тощо на ефективність процесу електрокоагуляції. Проте запропоновані математичні моделі переважно не описують кінетику процесу всередині електрокоагулятора або не враховують ряд параметрів, наприклад, вплив розміру утворених бульбашок, флотаційної складової процесу та зміни температури води на швидкість протікання електрокоагуляційного процесу.

Враховуючи актуальність створення ресурсозберігаючих технологій водоочистки, метою да-

ної роботи є узагальнення математичної моделі електрокоагуляційної обробки, яка враховує процес утворення двовалентного заліза, вплив технічних характеристик (сила струму, швидкість потоку, вхідна концентрація зважених частинок, температура) на кінетику процесу масо- та теплоперенесення в електрокоагуляторі, а також дослідження впливу зазначених параметрів на ефективність утворення двовалентного заліза. Електрокоагуляційний метод очищення стічних вод засновано на електролізі з використанням металевих (сталевих або алюмінієвих) анодів, що піддаються електролітичному розчиненню. У результаті розчинення анодів вода збагачується відповідними іонами, що утворюють потім у нейтральному або слабколужному середовищі гідроксид алюмінію або гідроксид заліза. Пластівці гідроксиду металу зіштовхуються з пухирцями газу, з'єднуються з ними й спливають на поверхню рідини, після чого відділяються механічно.

На ефективність електрокоагуляції впливають: матеріал електродів, відстань між ними, швидкість руху води між електродами, температура й склад води, напруга та густина струму. Електрокоагуляцію рекомендується проводити у нейтральному або слабколужному середовищі за наступних умов: густина струму 200-260 А/м² при великій об'ємній витраті [14], відстань між електродами – не більше 30 мм, швидкість руху води не менше 0.5 м/с. Застосування електрохімічних методів доцільне за відносно високої електропровідності стічних вод, обумовленої наявністю в них неорганічних кислот, лугів або солей (за мінімальної концентрації солей, що дорівнює 0.5 г/л).

Викладення основного матеріалу дослідження. Моделювання процесів виконано на основі рівнянь, що описують рух нестискої рідини між електродами. Структура потоку в електрокоагуляторі може бути або ламінарною, або турбулентною. В складній геометрії поле швидкості включає випадковий турбулентний компонент, який генерує потоки струменя та турбулентні вихрі.

Рівняння неперервного потоку включають рівняння динаміки рідини, маси, імпульсу та рівняння енергії та забезпечують основу для моделювання процесу. Ці рівняння мають багато спільних рис: так, загальну змінну Q можна використовувати для опису традиційних форм рівняння потоку рідини, включаючи скалярні величини, такі як температура та концентрація. Відповідне загальне рівняння записується у такому вигляді [4]:

$$\frac{\partial(\rho Q)}{\partial t} + \nabla(\rho v Q) = \nabla(D_Q \nabla Q) + S_Q, \quad (1)$$

де змінною Q може бути швидкість у напрямку x , y та z (у подальших викладеннях будемо розглядати плоскопаралельну задачу в координатах x , y , що відповідають ширині та довжині електрокоагулятора), температура або концентрація, ρ – густина рідини, кг/м³, v – усереднений середній вектор швидкості, D_Q – коефіцієнт дифузії, м²/с, S_Q – джерело. Для електрохімічних систем рівняння (1) спрощується через рівняння масової неперервності та рівняння Нав'є-Стокса [4].

Основні рівняння для нестиского турбулентного потоку формулюються наступним чином [5]:

$$\rho(v \nabla)v = -\nabla P + \nabla((\mu + \mu_T)(\nabla v + (\nabla v)^T)), \quad (2)$$

$$\nabla \cdot (\rho v) = 0, \quad (3)$$

де P – тиск, Па, μ – динамічна в'язкість, Па·с. Так звані напруження Рейнольдса, виражені з умови турбулентної в'язкості μ_T відповідно до стандартної моделі k – ε турбулентності, мають вигляд

$$\mu_T = \rho C_\mu k^2 / \varepsilon, \quad (4)$$

$$\rho(v \nabla)k = \nabla((\mu + \mu_T / \sigma_k) \nabla k) + P_k - \rho \varepsilon, \quad (5)$$

$$\rho v \nabla \varepsilon = \nabla((\mu + \mu_T / \sigma_\varepsilon) \nabla \varepsilon) + C_{e1} P_k \varepsilon / k - C_{e2} \rho \varepsilon^2 / k, \quad (6)$$

де k – турбулентна кінетична енергія, ε – швидкість дисипації турбулентної енергії, P_k визначає утворення турбулентної енергії, $C_\mu = 0.09$, $C_{e1} = 1.44$, $C_{e2} = 1.92$, $\sigma_k = 1$, $\sigma_\varepsilon = 1.3$ – безрозмірні константи, які отримують на основі експериментальних даних [6]. Граничні умови для рівнянь (2) – (6)

$$v = -U_0 n, \quad (7)$$

$$[-P + (\mu + \mu_T)(\nabla v + (\nabla v)^T) n] = -P_0 n, \quad (8)$$

де U_0 – середня швидкість потоку на вході, n – одиничний нормальний вектор, P_0 – тиск на виході.

У неізотермічному турбулентному потоці пульсації швидкостей викликають пульсації темпе-

ратур $T = \bar{T} + \theta$, де θ – пульсаційна складова температури T . Для випадку $\rho = \text{const}$ і $\lambda = \text{const}$, застосовуючи до рівняння теплопровідності правило усереднення, отримуємо [7]

$$\frac{\partial \bar{T}}{\partial t} = a \nabla^2 \bar{T} + \frac{q_V}{c\rho} + \text{div}(-\bar{V}\theta). \quad (9)$$

Ввівши поняття турбулентної теплопровідності $\lambda_m = -\frac{\rho \bar{V}\theta}{\partial T / \partial y}$ [7], отримуємо

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a \nabla \left(1 + \frac{\lambda_m}{\lambda} \nabla T \right) + \frac{q_V}{c\rho}, \quad (10)$$

де a – коефіцієнт температуропровідності, $\text{м}^2/\text{с}$, λ – теплопровідність електроліту, $\text{Вт}/\text{м}\cdot\text{с}$, q_V – інтенсивність внутрішніх джерел теплоти, $\text{Вт}/\text{м}^3$, c – теплоємність, $\text{Дж}/\text{кг}$. Під час електрокоагуляції відбувається нагрівання розчину електроліту. Кількість теплоти, яка при цьому виділяється, пропорційна силі струму, часу його проходження і падінню напруги $q_V = I \cdot U \cdot t$, де U – прикладена напруга, В, I – сила струму, А.

Зміну концентрації C двовалентного заліза опишемо із застосуванням скалярного рівняння перенесення з внесками турбулентної дифузії [8]

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -v \nabla C + \nabla(D \nabla C) + S_C, \quad (11)$$

де $D = \bar{D} + D_{turb}$ – сумарний коефіцієнт дифузії, \bar{D} – коефіцієнт молекулярної дифузії, D_{turb} – коефіцієнт турбулентної дифузії, що залежить від турбулентного числа Шмідта Sc_T (згідно з моделлю Кейса-Кроуфорда [8])

$$D_{turb} = \frac{\mu_T}{\rho Sc_T}, \quad Sc_T = \left(\frac{1}{2 Sc_{T\infty}} + \frac{0.3}{\sqrt{Sc_{T\infty}}} \frac{\mu_T}{\rho D} - \left(0.3 \frac{\mu_T}{\rho D} \right) \left(1 - e^{-\frac{\rho D}{0.3 \mu_T \sqrt{Sc_{T\infty}}}} \right) \right)^{-1}, \quad Sc_{T\infty} \approx 0.85.$$

Ефективність утворення флоків (коагулянту) значною мірою залежить від розміру утворених бульбашок [9]. Електрофлотація виробляє велику кількість тонкодисперсних газових бульбашок, розмір яких коливається від 5 до 90 мкм залежно від стану електролізу. Менші розміри бульбашок створюють кращу кінетику флотації через високе співвідношення площі поверхні до об'єму. Більше того, малі бульбашки мають більшу ймовірність отримання меншого кута контакту в трифазній системі (газ-тверде тіло-рідина), ніж більші бульбашки. Менший контактний кут виробляє більш стійкі агрегати. Крім того, час утримання дрібних бульбашок у флотаційному агрегаті довший, ніж час затримання більших бульбашок, оскільки вони мають меншу швидкість руху. Це сприяє збільшенню ймовірності зіткнення газових бульбашок і флоків. І навпаки, зсувні сили більших бульбашок є високими внаслідок високої швидкості руху, що може спричинити розрив флоків.

Сумарну кількість бульбашок в електрокоагуляторі на одиницю часу визначають як [9]

$$N_{bT} = \frac{Q_G}{\pi d_b^3 / 6}, \quad (12)$$

де d_b – діаметр бульбашок, $Q_G = Q_H + Q_O$ – об'ємна витрата газу, л/с, Q_H , Q_O – об'ємні витрати водню та кисню відповідно в нормальному стані, які можна розрахувати згідно із законом Фарадея

$$Q_H = \frac{IV_0}{Fn_H}, \quad Q_O = \frac{IV_0}{Fn_O}, \quad (13)$$

де V_0 – молярний об'єм газів у нормальному стані; F – стала Фарадея; n_H – кількість переносу електронів H_2 (2 моль електронів на моль H_2); а n_O – кількість переносу електронів O_2 (4 моль електронів на моль O_2). Тому загальна швидкість утворення бульбашок пропорційна силі струму [10]

$$Q_G = \frac{IV_0}{F} \left(\frac{1}{n_H} + \frac{1}{n_O} \right) = 1.74 \cdot 10^{-4} I. \quad (14)$$

В [11] описано прилипання броунівських частинок до бульбашок водню. Так, швидкість флотаційної складової процесу електрофлотації кількісно описується наступним чином:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \left(\eta \frac{3R_g T I}{8F d_b A_s P} \right) C, \quad (15)$$

де R_g – газова константа, P – атмосферний тиск, A_s – площа поперечного перерізу камери, η – ефективність накопичення однією бульбашкою (визначається як частка забруднюючої речовини на шляху бульбашки, які фактично налипають на бульбашку). В [11] також запропоновано числові вирази для розрахунку η .

Узагальнюючи викладене вище, для знаходження розподілів концентрації коагулянту C та температури T в електрокоагуляторі отримаємо наступну модельну задачу:

$$\begin{cases} \frac{\partial C}{\partial t} = -v \nabla C + \nabla (D(T) \nabla C) + \left(\eta \frac{3R_g T I}{8F d_b A_s P} \right) C, \\ \frac{\partial T}{\partial t} = a \nabla \left(1 + \frac{\lambda_m}{\lambda} \nabla T \right) + \frac{I U t}{c \rho}, \end{cases} \quad (16)$$

$$C(x, y, 0) = C_0(x, y), T(x, y, 0) = T_0(x, y),$$

$$C(0, y, t) = C_*(y, t), T(0, y, t) = T_*(y, t), C(L, y, t) = C^*(y, t), T(L, y, t) = T^*(y, t),$$

$$\left. \frac{\partial C}{\partial y} \right|_{y=0} = 0, \quad \left. \frac{\partial C}{\partial y} \right|_{y=y^*} = 0, \quad \left. \frac{\partial T}{\partial y} \right|_{y=0} = -\alpha (T(x, 0, t) - T_*^*), \quad \left. \frac{\partial T}{\partial y} \right|_{y=y^*} = -\alpha (T(x, y^*, t) - T_*^*). \quad (17)$$

Врахування співвідношення між величинами параметрів, які характеризують основні складові процесу, зокрема домінування конвективних та масообмінних складових над дифузійними, призводить до ускладнення математичної моделі процесу сингулярностями, породженими малими параметрами. Одним із ефективних шляхів розв’язання відповідних задач у випадку переважання конвективних складових процесу над дифузійними в модельних областях, обмежених еквіпотенціальними або квазіеквіпотенціальними лініями та лініями течії, є: поетапна фіксація характеристик і складових процесу та середовища; розв’язання задач фільтрації з використанням конформних або квазіконформних відображень області комплексного потенціалу або квазіпотенціалу на фізичну область; перехід у рівняннях конвективної дифузії і граничних та початкових умовах від фізичних змінних до координат області комплексного потенціалу або квазіпотенціалу, що значно спрощує їх запис і забезпечує можливість проведення автономних досліджень, розпаралелювання обчислень. Врахувавши, що задача на знаходження поля швидкостей (2) – (8) є розв’язаною [12], зокрема, обчислено поле швидкостей v і ряд інших величин, наприклад, фільтраційну витрату, та, здійснивши заміну змінних $x = x(\varphi, \psi)$, $y = y(\varphi, \psi)$ у системі (16) та умовах (17), отримано відповідну “дифузійну задачу” [12]–[13], розв’язок якої з точністю $O(\delta^{n+1})$, де δ – малий параметр, що характеризує переважання конвективної та масообмінної складової процесу масоперенесення ($D(T) = \delta d(T)$, $|v| > v_* \gg \delta$), шукатимемо у вигляді асимптотичних рядів [13]

$$C(\varphi, \psi, t) = \sum_{i=0}^n \delta^i C_i(\varphi, \psi, t) + \sum_{i=0}^{n+1} \delta^i \bar{C}_i(\xi, \psi, t) + \sum_{i=0}^{2n+1} \delta^{i/2} \underline{C}_i(\varphi, \zeta, t) + \sum_{i=0}^{2n+1} \delta^{i/2} \widehat{C}_i(\varphi, \phi, t) + R_C(\varphi, \psi, t, \delta), \quad (18)$$

$$T(\varphi, \psi, t) = \sum_{i=0}^n \delta^i T_i(\varphi, \psi, t) + \sum_{i=0}^{n+1} \delta^i \bar{T}_i(\xi, \psi, t) + \sum_{i=0}^{2n+1} \delta^{i/2} \underline{T}_i(\varphi, \zeta, t) + \sum_{i=0}^{2n+1} \delta^{i/2} \widehat{T}_i(\varphi, \phi, t) + R_T(\varphi, \psi, t, \delta), \quad (19)$$

де R_C, R_T – залишкові члени розкладів, $C_i(\varphi, \psi, t)$, $T_i(\varphi, \psi, t)$ – регулярні частини асимптотики, $\bar{C}_i(\xi, \psi, t)$, $\bar{T}_i(\xi, \psi, t)$ – функції типу примежового шару на виході, $\underline{C}_i(\varphi, \zeta, t)$, $\underline{T}_i(\varphi, \zeta, t)$, $\widehat{C}_i(\varphi, \phi, t)$, $\widehat{T}_i(\varphi, \phi, t)$ – функції типу примежового шару в околах бокових стінок електрокоагулятора, $\xi = (L - x) \cdot \delta^{-1}$, $\zeta = y \cdot \delta^{-1/2}$, $\phi = (y^* - y) \cdot \delta^{-1/2}$ – відповідні регуляризуючі перетворення.

Вирази для регулярних частин асимптотики знайдено в результаті застосування процедури підстановки рядів (18) – (19), прирівняння коефіцієнтів за однакових степенів малого параметра і розв’язання відповідних задач:

$$T_i(\varphi, \psi, t) = \begin{cases} \int_0^t \tilde{T}_i(f^{-1}(\tilde{t} - t + f(\varphi, \psi), \psi), \tilde{t}) d\tilde{t} + \tau_{*i}^*(\varphi, \psi), & t \leq f(\varphi, \psi), \\ \int_{\varphi_n}^{\varphi} \frac{\tilde{T}_i(\tilde{\varphi}, f(\tilde{\varphi}, \psi) + t - f(\varphi, \psi))}{v(\tilde{\varphi}, \psi)} d\tilde{\varphi} + \tau_i^*(\varphi, \psi), & t > f(\varphi, \psi), \quad i = \overline{0, n}, \end{cases}$$

$$C_0(\varphi, \psi, t) = \begin{cases} e^{\int_{\varphi_n}^{\varphi} \frac{g_0(\tilde{\varphi}, f(\tilde{\varphi}, \psi) - f(\varphi, \psi) + t)}{v(\tilde{\varphi}, \psi)} d\tilde{\varphi}} C_0(t - f(\varphi, \psi)), & t > f(\varphi, \psi), \\ e^{\int_0^t g_0(f^{-1}(\tilde{t} + f(\varphi, \psi) - t), \psi, \tilde{t}) d\tilde{t}} C_* (f^{-1}(f(\varphi, \psi) - t, \psi)), & t \leq f(\varphi, \psi), \end{cases}$$

$$C_i(\varphi, \psi, t) = \begin{cases} e^{\int_{\varphi_n}^{\varphi} \frac{g_i(\varphi, \psi, f(\tilde{\varphi}, \psi) - f(\varphi, \psi) + t)}{v(\tilde{\varphi}, \psi)} d\tilde{\varphi}} \int_{\varphi_n}^{\varphi} \frac{h_i(\varphi, \psi, f(\tilde{\varphi}, \psi) - f(\varphi, \psi) + t)}{v(\tilde{\varphi}, \psi)} e^{-\int_{\varphi_n}^{\tilde{\varphi}} \frac{g_i(\tilde{\varphi}, \psi, f(\tilde{\varphi}, \psi) - f(\varphi, \psi) + t)}{v(\tilde{\varphi}, \psi)} d\tilde{\varphi}} d\tilde{\varphi}, & t > f(\varphi, \psi), \\ e^{\int_0^t g_i(f^{-1}(\tilde{t} + f(\varphi, \psi) - t), \psi, \tilde{t}) d\tilde{t}} \int_0^t h_i(f^{-1}(\tilde{t} + f(\varphi, \psi) - t, \psi), \tilde{t}) e^{-\int_0^{\tilde{t}} g_i(f^{-1}(\tilde{t} + f(\varphi, \psi) - t), \psi, \tilde{t}) d\tilde{t}} d\tilde{t}, & t \leq f(\varphi, \psi), \quad i = \overline{1, n}, \end{cases}$$

$$f(\varphi, \psi) = \int_{\varphi_n}^{\varphi} \frac{d\tilde{\varphi}}{v(\tilde{\varphi}, \psi)}, \quad \tilde{T}_0(\varphi, \psi, t) = \frac{I \cdot U \cdot t}{c\rho}, \quad \tau_0^*(\varphi, \psi) = T^*(f^{-1}(f(\varphi, \psi) - t, \psi)), \quad \tau_{*0}^*(\varphi, \psi) = T_0(t - f(\varphi, \psi), \psi),$$

$$\tilde{T}_i(\varphi, \psi, t) = \bar{d}_T \left(\frac{\partial^2 T_{i-1}}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 T_{i-1}}{\partial \psi^2} \right), \quad \bar{d}_T = \frac{a\lambda_m}{\delta\lambda}, \quad \tau_i^*(\varphi, \psi) = \tau_{*i}^*(\varphi, \psi) = 0 \quad (i = \overline{1, n}), \quad g_i(\varphi, \psi, t) = \eta \frac{3R_g I T_i(\varphi, \psi, t)}{8F d_b A_s P},$$

$$h_i(\varphi, \psi, t) = \bar{d}_{ic} \left(\frac{\partial^2 C_{i-1}}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2 C_{i-1}}{\partial \psi^2} \right), \quad \bar{d}_{ic} - \text{відомі функції, які є сумою добутків членів ряду (18)–(19), їх-}$$

ніх частинних похідних, а також коефіцієнти при i -их степенях малого параметра у розкладі відповідних функцій $d(L - \xi\delta, \psi, t)$ у ряд Тейлора в околі $\varphi = L$. Функції типу прилежового шару знаходимо аналогічно до [13].

Камера електорокоагулятора складається з дванадцяти пар залізних пластин розміром 75×83.5 см і товщиною 0.4 см. Відстань між суміжними електродами становить 2.3 см. Пластини з'єднані як біполярні та розміщені в електрокоагуляторі довжиною 0.9 м, шириною 0.95 м (схематично представлено на рис. 1). Об'ємна витрата становить $6 \text{ м}^3/\text{год}$.

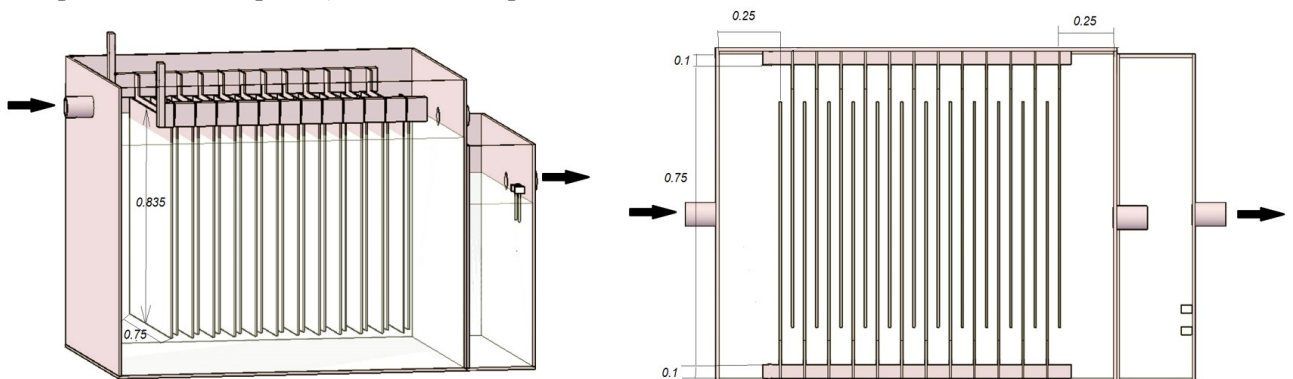


Рис. 1

Комп'ютерне моделювання проводилося за таких значень вхідних даних: $U = 24$ В, $T_* = 294$ К, $\eta = 0.8$, $c = 3.31 \cdot 10^3$ Дж/кг, $\rho = 1060$ кг/м³, $\lambda = 0.2$ Вт/м·с, $\lambda_m = 0.39$ Вт/м·с, $a = 1.39 \cdot 10^{-8}$ м²/с, $R_g = 8.31$ Дж/(моль·К), $F = 9.65 \cdot 10^4$ Кл/моль, $I = 70$ А, $A_s = 15$ м², $d_b = 1.5 \cdot 10^{-6}$ м, $D = 10^{-9}$ м²/с.

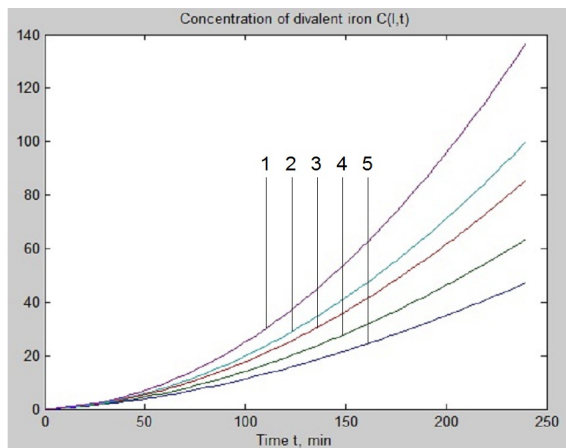


Рис. 2

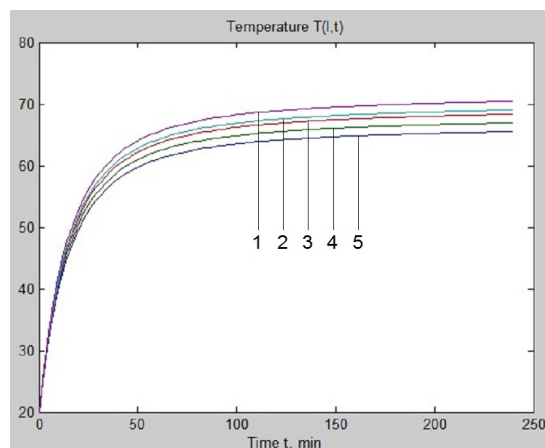


Рис. 3

На практиці струм є єдиним робочим параметром у той час, як інші такі, як pH , об'ємна витрата води, конструктивні розміри електрокоагулятора, є відрегульовані, що впливає на кінетику процесу утворення коагулянту. За розробленою методикою було розраховано зміну концентрації заліза за значень сили струму 1 – 72 А; 2 – 70 А; 3 – 69 А; 4 – 67 А; 5 – 65 А (рис. 2) та зміну відповідної температури води з часом на виході з електрокоагулятора (відвід із зони електрокоагулятора) (рис. 3). Для перевірки розробленої моделі на адекватність було проведено порівняння розрахованих згідно з моделлю (16) – (17) даних із експериментальними [3]. За умови, що сила струму дорівнює 70 А, отримано концентрацію іонів двовалентного заліза на виході з електрокоагулятора в моменти часу: 90 хв – 16.5 мг/л, 180 хв – 68.4 мг/л, 240 хв – 101.8 мг/л. Відповідні модельні дані наведено на рис. 2 (крива 2). Коефіцієнт кореляції експериментальних та модельних даних становить 0.997. Як видно із отриманих графіків, ефективність утворення коагулянту (двовалентного заліза) значною мірою залежить від температури води. На початковій стадії температура електроліту швидко зростає, в цей час ефективність утворення коагулянту низька. Після досягнення деякого стабільного значення (близько 40 хв у заданих умовах) процес переходить у фазу активного утворення двовалентного заліза. Зі збільшенням сили прикладеного струму швидкість утворення коагулянту значно збільшується, відповідно зменшується час перебування електроліту в установці для отримання необхідної концентрації заліза.

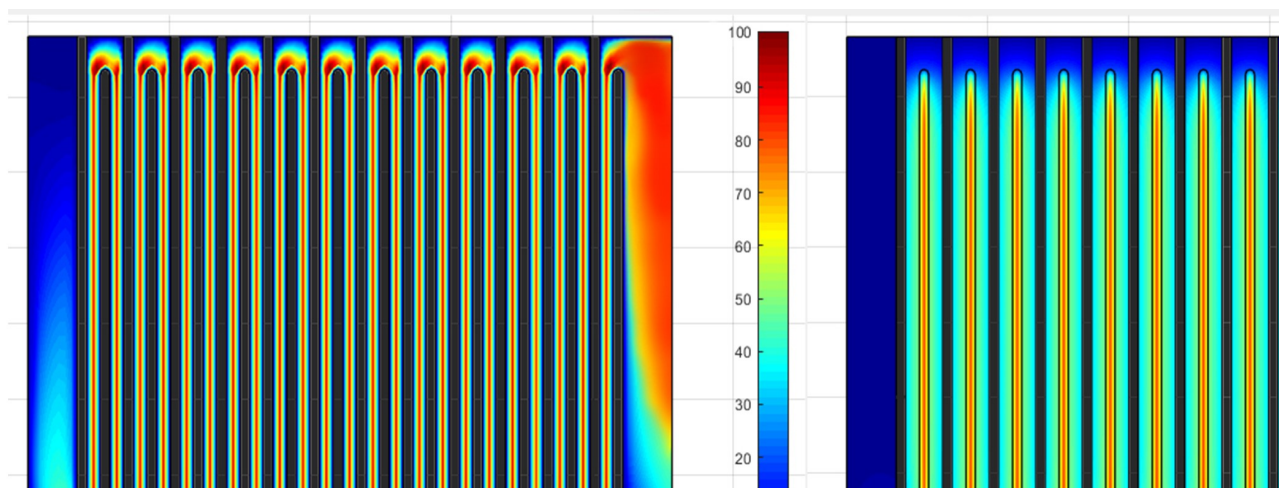


Рис. 4

Рис. 5

Розподіл концентрації заліза та температури води в електрокоагуляторі в момент часу $t=240$ хв у площині поперечного перерізу електрокоагулятора показано відповідно на рис. 4 та рис. 5. Як і очікувалося, в просторі між електродами зростає концентрація заліза, яка конвективно зноситься до виходу з електрокоагулятора, де концентрація його найвища. Аналогічно температура електроліту зростає рівномірно вздовж електрокоагулятора, і через конвективне перенесення поступаючої на вхід стічної води та охолодження за рахунок стінок отримуємо максимальні значення температури біля електродів та на виході електрокоагулятора (рис. 5). Аналіз розподілу концентрації заліза всередині електрокоагулятора дає змогу спрогнозувати різні гідродинамічні явища, такі як внутрішня рециркуляція і мертві зони, які впливають на формування коагулянту.

Висновки. Побудовано математичну модель, що описує закономірності протікання процесів тепло- та масообміну в електрокоагуляційній установці. Знайдено розв'язок відповідної модельної задачі з використанням асимптотичного наближення розв'язку відповідної крайової задачі та наведено результати розрахунків розподілу концентрації двовалентного заліза та температури води в електрокоагуляторі, а також на виході з коагулятора залежно від сили струму. Запропонована методологія розрахунку розподілу концентрації може бути використана для аналізу впливу тепло- та масопереносу в електроліті на кінетику реакції на електродах, а також як основа для експериментально-теоретичних досліджень оптимізації та автоматизації процесу утворення коагулянту методом електрокоагуляції.

1. Hakizimana J., Gourich B., Chafi M., Stiriba Y., Vial C., Drogui P., Naja J. Electrocoagulation process in water treatment: A review of electrocoagulation modeling approaches. *Desalination*. 2017. Vol. 404. Pp. 1–21.
2. Khandegar V., Saroha A.K. Electrocoagulation for the treatment of textile industry effluent A Review. *Journal of Environmental Management*. 2013. Vol. 128. Pp. 949–963.
3. Safonyk A., Bomba A., Tarhoni I. Modeling and automation of the electrocoagulation process in water treatment. *Advances in Intelligent Systems and Computing*. 2019. Vol. 871. Pp. 451–463.
4. Versteeg H.K., Malalasekera W. An introduction to computational fluid dynamics: the finite volume method. New York, USA: Pearson Education, 2007. 503 p.
5. Sandoval M., Fuentes R., Walsh F.C., Nava J.L. Ponce de León C. Computational fluid dynamics simulations of single-phase flow in a filter-press flow reactor having a stack of three cells. *Electrochim Acta*. 2016. Vol. 216. Pp. 490–498.
6. Enciso R., Padilla L., Ojeda C., Delgadillo J., Rodriguez I. Computational fluid dynamics characterization of a rotating cylinder electrochemical reactor using an RANS-RNG turbulence model. *International Journal of Electrochemical Science*. 2012. Vol. 7. Pp. 12181–12192.
7. Кулінченко В.Р., Ткаченко С.Й. Теплопередача з елементами масообміну (теорія і практика процесу). Київ: Фенікс, 2014. 917 с.
8. Naje A.S., Chelliapan S., Zakaria Z., Ajeel M.A., Alaba P.A. A review of electrocoagulation technology for the treatment of textile wastewater. *Reviews in Chemical Engineering*. 2016. Vol. 33. Pp. 263–292.
9. Alam R., Shang J. Electrochemical model of electro-flotation. *Journal of Water Process Engineering*. 2016. Vol. 12. Pp. 78–88.
10. Chen, X., Chen, G. *Electroflotation in Electrochemistry for the Environment*. Springer Science+Business Media, LLC, 2010. Pp. 263–279.
11. Fukui, Y., Yuu, S. Collection of submicron particles in electro-flotation. *Chemical Engineering Science*. 1980. No 35(5). Pp. 1097-1105.
12. Бомба А.Я., Каштан С.С., Пригорницький Д.О., Ярошак С.В. Методи комплексного аналізу. Рівне: НУВГП, 2013. 415 с.
13. Bomba A., Klymiuk Yu., Prysiazhniuk I., Prysiazhniuk O., Safonyk A. Mathematical modeling of wastewater treatment from multicomponent pollution by using microporous particles. Proc. 8th International Conference on *Promoting the Application of Mathematics in Technical and Natural Sciences* MiTaNS'16 Sofia, Bulgaria, July, 4-9. 2016. Pp. 1–11. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.4964966>
14. Родионов А.И., Клушин В.Н., Торочешников Н.С. Техника защиты окружающей среды. М.: Химия, 1989. 512 с.

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ПОЛУЧЕНИЯ КОАГУЛЯНТА МЕТОДОМ ЭЛЕКТРОКОАГУЛЯЦИИ

А.П. Сафоник, докт.техн.наук, **Е.В. Присяжнюк**, канд.техн.наук

Национальный университет водного хозяйства и природопользования,

ул. Соборная, 11, Рівне, 33028, Украина,

e-mail: safonik@ukr.net

Разработан подход к моделированию процесса электрокоагуляции на основе обобщения уравнений движения несжимаемой жидкости между электродами в неизотермических условиях с учетом соотношений между значениями параметров, характеризующих доминирование конвективных и массообменных составляющих процесса над диффузионными, а также влияния скорости теплообразования от электродного нагрева на эффективность образования коагулянта. Построено асимптотическое приближение решений соответствующих краевых задач и проведено исследование влияния силы тока на концентрацию целевого компонента на выходе из электрокоагулятора с использованием разработанной математической модели. Библ. 14, рис. 5.

Ключевые слова: математическое моделирование, электрокоагуляция, электрофлотация, коагулянт.

MATHEMATICAL MODELING OF THE PROCESS OF OBTAINING COAGULANT BY ELECTROCOAGULATION METHOD

A. Safonyk, O. Prysiazhniuk
National University of Water and Environmental Engineering,
Soborna str., 11, Rivne, 33028, Ukraine,
e-mail: safonik@ukr.net

This paper presents an approach to modeling the electrocoagulation process based on the generalization of the equations of motion of an incompressible fluid between electrodes in nonisothermal conditions taking into account the ratio between the values of the parameters which characterize the domination of convective and mass-exchange components of the process over diffusion. An asymptotic approximation of solutions of corresponding boundary value problems is constructed. Based on the found solutions, it was conducted a computer simulation of the distribution of iron concentration inside the reactor that allows predicting various hydrodynamic phenomena such as internal recirculation and dead zones that affects the formation of a coagulant. In this case study, were studied the effect of current strength on the concentration of the target component at the exit from the electrocoagulator using the developed mathematical model. The study tested the influence of the rate of heat formation from electrode heating on the efficiency of obtaining of coagulant. References 14, figures 5.

Key words: mathematical modeling, electrocoagulation, electroflotation, coagulant.

1. Hakizimana J., Gourich B., Chafi M., Stiriba Y., Vial C., Drogui P., Naja J. Electrocoagulation process in water treatment: A review of electrocoagulation modeling approaches. *Desalination*. 2017. Vol. 404. Pp. 1–21.
2. Khandegar V., Saroha A.K. Electrocoagulation for the treatment of textile industry effluent - A Review *Journal of Environmental Management*. 2013. Vol. 128. Pp. 949–963.
3. Safonyk A., Bomba A., Tarhonii I. Modeling and automation of the electrocoagulation process in water treatment. *Advances in Intelligent Systems and Computing*. 2019. Vol. 871. Pp. 451–463.
4. Versteeg H.K., Malalasekera W. An introduction to computational fluid dynamics: the finite volume method. New York, USA: Pearson Education, 2007. 503 p.
5. Sandoval M., Fuentes R., Walsh F.C., Nava J.L. Ponce de León C. Computational fluid dynamics simulations of single-phase flow in a filter-press flow reactor having a stack of three cells. *Electrochim Acta*. 2016. Vol. 216. Pp. 490–498.
6. Enciso R., Padilla L., Ojeda C., Delgadillo J., Rodriguez I. Computational fluid dynamics characterization of a rotating cylinder electrochemical reactor using an RANS-RNG turbulence model *International Journal of Electrochemical Science*. 2012. Vol. 7. Pp. 12181–12192.
7. Kulinchenko V.R., Tkachenko S.I. Heat transfer with elements of mass transfer (theory and practice of the process). Kyiv: Feniks, 2014. 917 p. (Ukr)
8. Naje A.S., Chelliapan S., Zakaria Z., Ajeel M.A., Alaba P.A. A review of electrocoagulation technology for the treatment of textile wastewater. *Reviews in Chemical Engineering*. 2016. Vol. 33. Pp. 263–292.
9. Alam R., Shang J. Electrochemical model of electro-flotation. *Journal of Water Process Engineering*. 2016. Vol. 12. Pp. 78–88.
10. Chen, X., Chen, G. *Electroflotation in Electrochemistry for the Environmen*. Springer Science+Business Media, LLC, 2010. Pp. 263-279.
11. Fukui, Y., Yuu, S. Collection of submicron particles in electro-flotation. *Chemical Engineering Science*. 1980. No 35(5). Pp. 1097–1105.
12. Bomba A., Kashtan S., Pryhomytskyi D., Yaroshchak S. *Complex Analysis Methods*. Rivne: NUVHP, 2013. 415 p. (Ukr)
13. Bomba A., Klymiuk Yu., Prysiazhniuk I., Prysiazhniuk O., Safonyk A. Mathematical modeling of wastewater treatment from multicomponent pollution by using microporous particles. Proc. 8th International Conference on *Promoting the Application of Mathematics in Technical and Natural Sciences MiTaNS'16*. Sofia, Bulgaria, July, 4–9, 2016. Pp. 1–11. DOI: <https://doi.org/10.1063/1.4964966>
14. Rodionov A., Klushin V., Torosheshnikov N. *Environmental Engineering*. Moskva: Khimiia, 1989. 512 p. (Rus)

Надійшла 30.01.2019
Остаточний варіант 25.03.2019