



Российская Академия Наук

Отделение математических наук

**Т.А. Кудряшова, С.В. Поляков,
Д.В. Пузырьков, Н.И. Тарасов**

**Математическое моделирование
процессов очистки воды
от примесей железа**

Москва 2017

УДК 531
ББК 35.11
М33

Аннотация: Рассматриваются проблемы численного моделирования процессов очистки воды от примесей железа. Данная проблема актуальна для многих прикладных задач, включая приготовление ультрачистой воды для медицины. В работе изучается процесс удаления ионов железа и оксидов железа из воды с помощью магнитного поля. В качестве модельной выбрана двумерная задача о течении несжимаемой жидкости в канале с прямоугольным поперечным сечением. Поперечное магнитное поле, воздействующее на заряженные примеси, учитывается с помощью введения в уравнение конвекции-диффузии силы Лоренца. Для решения поставленной задачи разработан оригинальный численный метод и создана параллельная программа. В численных экспериментах получены стационарные распределения концентрации ионов железа под действием поперечного магнитного поля. Данные распределения иллюстрируют эффект очистки и позволяют управлять ее качеством с помощью исходных параметров задачи.

Kudryashova T.A., Polyakov S.V., Puzyrkov D.V., Tarasov N.I. Mathematical modeling of water purification from iron impurities – Moscow, Russian Academy of Sciences, 2017.

Abstract: The problems of numerical simulation of water purification from iron impurities are considered. This problem is relevant for many applications, including the preparation of ultrapure water for medicine. The process of removing iron ions and iron oxides from water by means of a magnetic field is studied. As a model, the two-dimensional problem of the flow of an incompressible fluid in a channel with a rectangular cross-section was chosen. A transverse magnetic field acting on charged impurities is taken into account by introducing the Lorentz force into the convection-diffusion equation. To solve the problem, an original numerical method was developed and a parallel program was created. In numerical experiments, steady-state distributions of the concentration of iron ions under the effect of a transverse magnetic field were obtained. The distribution data illustrate the cleaning effect and allow its quality to be controlled using the original task parameters.

Работа выполнена при финансовой поддержке Программы фундаментальных научных исследований Отделения математических наук РАН на 2017 г. № 1.2 «Современные вычислительные и информационные технологии решения больших задач», проект «Вычислительные основы и программное обеспечение современных суперкомпьютерных систем для решения больших задач нанотехнологии», а также при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (Проекты №№ 15-01-04620-а, 16-07-00206-а).

ISBN 978-5-906906-72-4

© Российская академия наук, 2017
© Т.А. Кудряшова, С.В. Поляков,
Д.В. Пузырьков, Н.И. Тарасов, 2017

Математическое моделирование процессов очистки воды от примесей железа

Т.А. Кудряшова, С.В. Поляков, Д.В. Пузырьков, Н.И. Тарасов

Данная работа посвящена проблеме численного моделирования процессов очистки воды от примесей железа. Указанная проблема связана с разработкой новых способов, технологий и приборов очистки воды, включая приготовление ультрачистой воды для медицины. В рамках данной проблемы возникает несколько задач, предполагающих численный расчет водного потока и перенос примесей в условиях реальной геометрии моделируемой системы. Эти численные аспекты и составляют предмет выполненного исследования. Перед его рассмотрением приведем некоторое краткое введение в проблему.

Очистка воды от примесей и солей жесткости (карбонат, хлорид и сульфат солей Ca^{2+} , Mg^{2+} , Fe^{2+} и Fe^{3+}) осуществляется различными способами, в том числе механическими, химическими, электрофизическими и т.д. В настоящее время одной из наиболее острых проблем является получение питьевой и сверхчистой воды для использования в фармакологии. Для этих целей используются последовательно все способы очистки: механическая очистка от крупных частиц и мусора, химическая очистка от бактерий и биологически активных добавок, структурирование воды и удаление мелкодисперсных солей тяжелых металлов с помощью электромагнитного поля. Магнитная и электромагнитная обработка воды также широко распространена во многих отраслях промышленности и сельском хозяйстве. Так, в строительстве обработка цемента магнитной водой в процессе его гидратации сокращает сроки затвердевания клинкерных составляющих цемента с водой, а мелкокристаллическая структура формирующихся твердых гидратов придает изделиям большую прочность и повышает их стойкость к агрессивным воздействиям окружающей среды [1]. В сельском хозяйстве пятичасовое замачивание семян в омагниченной воде заметно повышает урожай. Полив омагниченной водой стимулирует на 15–20% рост и урожайность

сои, подсолнечника, кукурузы, помидоров [2]. В медицине применение намагниченной воды способствует растворению почечных конкрементов, оказывает бактерицидное действие.

Воздействие магнитного поля на воду носит комплексный многофакторный характер и в конечном итоге сказывается на изменениях структуры воды, ее физико-химических свойствах и поведении растворенных в ней неорганических солей [1]. При воздействии на воду магнитного поля в ней изменяются скорости химических реакций. Перспективно использование магнитной обработки для умягчения воды, поскольку ускорение процесса кристаллизации накипеобразующих солей в воде при магнитной обработке приводит к значительному уменьшению концентраций растворенных в воде ионов Ca^{2+} и Mg^{2+} за счет процесса кристаллизации и уменьшения размеров кристаллов, осаждающихся из нагреваемой воды. Для удаления из воды трудно осаждаемых тонких взвесей (мути) используется способность омагниченной воды изменять агрегатную устойчивость и ускорять коагуляцию (слипание и осаждение) взвешенных частиц с последующим образованием мелкодисперстного осадка, что способствует извлечению из воды разного рода взвесей.

В данной работе изучается общее влияние магнитного поля на поток воды, протекающий по неметаллической трубе и содержащий ионы железа и/или ионы солей железа (выбор примесей железа обусловлен большой распространенностью этих примесей во многих российских регионах). Для этой цели сформулирована магнитно-гидродинамическая модель, которая учитывает прямое влияние магнитной индукции на поток воды. В этом случае поток ионов генерирует вторичное электрическое поле, которое совместно с магнитным полем управляет движением ионов наряду с механическим движением.

В целях упрощения задачи в работе рассматривается двумерное плоско-параллельное течение. Поток формируется в средней части трубы прямоугольного сечения с сильной анизотропией сторон. Магнитное поле действует в поперечном направлении потока и генерирует круговые движения в данном сечении трубы. В этой ситуации структура потока аналогична двумерной модели и может рассматриваться в качестве начального приближения для решения трехмерной задачи [5–7]. Также для упрощения анализа используется изотермический ламинарный поток жидкости. Для описания изменения концентрации ионов в жидкости использу-

ется дрейфо-диффузионное приближение, которое справедливо для случая мелко-дисперсных примесей, что и имеет место после грубой механической очистки и первичной фильтрации воды.

Математическая формулировка

Рассмотрим изотермический вариант течения воды с примесью железа в неэлектропроводной трубе прямоугольного сечения с сильной разницей в размерах сторон (Рис. 1). В качестве примеси будем рассматривать ионы железа или ионы его солей. Поскольку такие примеси являются мелкодисперсными, то не будем принимать в расчет процессы ассоциации и диссоциации отдельных ионов в кластеры. Также рассмотрим случай изотермического ламинарного потока.

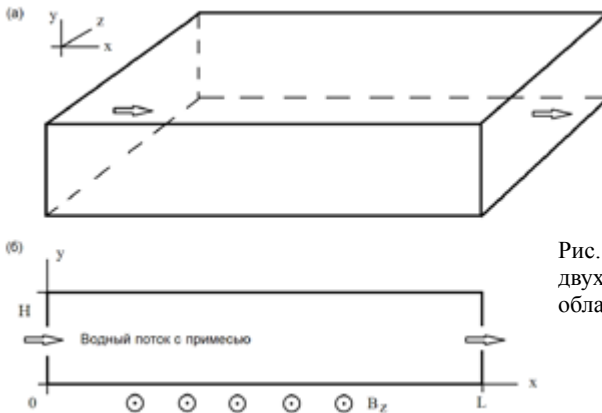


Рис. 1. Трехмерная (а) и двухмерная (б) расчетные области.

Основные уравнения, описывающие процесс движения воды с примесью, в расчетной области Ω , являющейся сечением $z = 0$ исходной трехмерной области и имеющей размеры $L \times H$, в размерных переменных имеют вид [5–7]:

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho(\mathbf{u} \nabla) \mathbf{u} = -\nabla p + \eta \Delta \mathbf{u}, \quad \text{div} \mathbf{u} = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \text{div}(D \nabla C - q \mu \mathbf{F} C) + (u, \nabla C), \quad (2)$$

$$\text{div}(\varepsilon \mathbf{E}) = q(C - C_*), \quad \mathbf{E} = -\nabla \varphi, \quad (3)$$

где $\mathbf{u} = (u_x, u_y, 0)$ – вектор скорости водного потока, $\rho = \rho_0 \rho(T)$ – плотность воды при заданной температуре T , p – давление в потоке воды, $\eta = \eta_0 \eta(T)$ – динамический коэффициент вязкости потока воды при заданной температуре T , C_* и C – равновесная и неравновесная концентрация ионов примеси в воде, $D = D_0 D(T)$, $\mu = \mu_0 \mu(T)$ – коэффициенты диффузии и подвижности ионов, q – заряд ионов в относительных единицах, $\mathbf{F} = \mathbf{E} + [\mathbf{u} \times \mathbf{B}]$ – суммарное векторное поле, действующее на ионы, $\mathbf{E} = (E_x, E_y, 0)^T$ и φ – напряженность и потенциал электрического поля, $\mathbf{B} = B_0 \mathbf{e}_z$ – вектор напряженности магнитного поля ($\mathbf{e}_z = (0, 0, 1)^T$ – соответствующий орт), div и ∇ – операторы дивергенции и градиента в пространственных координатах (x, y) , ε – нормированная диэлектрическая проницаемость воды.

Система уравнений (1)–(3) дополняется следующими начальными и граничными условиями:

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_0, \quad C = C_0, \quad t = 0, \quad (x, y) \in \Omega; \quad (4)$$

$$x = 0: \quad u_x = u_n(y), \quad u_y = 0, \quad C = C_0, \quad \frac{\partial \varphi}{\partial x} = 0; \quad (5)$$

$$x = L: \quad \frac{\partial u_x}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial u_y}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial C}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial \varphi}{\partial x} = 0; \quad (6)$$

$$y = 0, H: \quad \frac{\partial u_x}{\partial y} = 0, \quad u_y = 0, \quad \frac{\partial C}{\partial y} = 0, \quad \frac{\partial \varphi}{\partial y} = 0. \quad (7)$$

При небольших скоростях течение становится стационарным и может быть определено с помощью перехода к переменным ψ (функция тока) и ω (вихрь). Если считать течение безвихревым [5], можно рассчитать водный поток из уравнения Лапласа:

$$\Delta \psi \equiv \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = 0, \quad (x, y) \in \Omega; \quad (8)$$

$$u_x = \frac{\partial \psi}{\partial y}, \quad u_y = -\frac{\partial \psi}{\partial x}, \quad (x, y) \in \Omega. \quad (9)$$

Граничные условия для функции тока в этом случае выглядят следующим образом:

$$\psi(0, y) = \int_0^y u_n(y) dy; \quad \frac{\partial \psi}{\partial x}(L, y) = 0; \quad (10)$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial x}(x, 0) = 0; \quad \frac{\partial \psi}{\partial x}(x, H) = 0. \quad (11)$$

Уравнение для концентрации удобно представить в следующем эквивалентном виде:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \operatorname{div} \mathbf{W} + (\mathbf{R}, \mathbf{W}) + QC, \quad (12)$$

где $\mathbf{W} = D(\nabla C - \mathbf{P}C)$, $\mathbf{P} = q\mu D^{-1}\mathbf{F}$, $\mathbf{R} = D^{-1}\mathbf{u}$, $Q = q\mu D^{-1}(\mathbf{u}, \mathbf{F})$.

В заключение пункта перейдем к безразмерным переменным $x' = x/H$, $y' = y/H$, $t' = t/t_0$, $\psi' = \psi/u_0$, $\mathbf{u}' = \mathbf{u}/u_0$, $C' = C/C_0$, $\varphi' = \varphi/\varphi_0$, $\mathbf{E}' = \mathbf{E}/E_0$, $\Omega' = \{(x', y') \in (0, L) \times (0, 1)\}$, $t_0 = H/u_0$, $\varphi_0 = qn_0 H^2/\varepsilon$, $E_0 = \varphi_0/H$, $C_*' = C_*/C_0$. В дальнейшем зависимостями коэффициентов диффузии и подвижности от температуры будем пренебрегать. Тогда, окончательная формулировка задачи примет имеет вид:

$$\Delta \psi = 0, \quad u_x = \frac{\partial \psi}{\partial y}, \quad u_y = -\frac{\partial \psi}{\partial x}, \quad (13)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \operatorname{div} \mathbf{W} + (\mathbf{u}, \mathbf{W}) + QC, \quad (14)$$

$$\Delta \varphi = -(C - C_*), \quad E = -\nabla \varphi, \quad (15)$$

где $\mathbf{W} = D_n(\nabla C - P_n \mathbf{F}C)$, $D_n = D_0/(Hu_0)$, $P_n = q\mu_0 E_0 u_0^{-1}$, $Q = Q_n(\mathbf{u}, \mathbf{F})$, $Q_n = q\mu_0 E_0 H D_0^{-1}$, $\mathbf{F} = \mathbf{E} + B_n[\mathbf{u} \times \mathbf{e}_z]$, $B_n = u_0 B_0 E_0^{-1}$. Тогда основными безразмерными параметрами задачи будут: L , D_n , P_n , Q_n , B_n .

Начальные условия принимают вид:

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_0 = u_n(y) \times (1, 0), \quad C = 1, \quad u_n(y) \equiv 1 - (2y - 1)^2. \quad (16)$$

Граничные условия для $x = 0$ теперь имеют вид:

$$\psi = \int_0^y u_n(y') dy', \quad u_x = u_n(y), \quad u_y = 0, \quad C = 1, \quad \frac{\partial \varphi}{\partial x} = 0. \quad (17)$$

Граничные условия для $x = L$ преобразуются к виду:

$$\frac{\partial \psi}{\partial x}, \frac{\partial u_x}{\partial x}, \frac{\partial u_y}{\partial x}, \frac{\partial C}{\partial x}, \frac{\partial \varphi}{\partial x} = 0. \quad (18)$$

Граничные условия для $y = 0, 1$ имеют вид:

$$\frac{\partial \psi}{\partial x}, \frac{\partial u_x}{\partial y}, u_y, \frac{\partial C}{\partial y}, \frac{\partial \varphi}{\partial y} = 0. \quad (19)$$

Численный подход

Для решения поставленной задачи предлагается использовать метод конечных разностей. Для этого введем в области Ω равномерную узловую сетку $\Omega_h = \omega_x \times \omega_y$, являющуюся произведением одномерных сеток

$$\omega_x = \{x_i = h_x \cdot i, i = 0, \dots, N_x, h_x = L / N_x\},$$

$$\omega_y = \{y_j = h_y \cdot j, j = 0, \dots, N_y, h_y = 1 / N_y\},$$

где N_x, N_y – число сегментов сетки по x и y , сетку $\bar{\Omega}_h = \bar{\omega}_x \times \bar{\omega}_y$, получающуюся в результате произведения одномерных сеток

$$\bar{\omega}_x = \{x_{i-1/2} = 0.5(x_{i-1} + x_i), i = 1, \dots, N_x\},$$

$$\bar{\omega}_y = \{y_{j-1/2} = 0.5(y_{j-1} + y_j), j = 1, \dots, N_y\},$$

а также равномерную сетку по времени

$\omega_t = \{t_k = \tau \cdot k, k = 0, \dots, N_t\}$ (здесь τ – шаг по времени, N_t – число шагов по времени до момента $t_{\max} = N_t \tau$).

Определим на сетке Ω_h функцию тока (то есть в узлах), а остальные функции – на сетке $\bar{\Omega}_h$ (то есть в центрах ячеек). Для функции тока, вектора скорости и потенциала электрического поля запишем следующие стандартные разностные уравнения [5, 8, 9], дополняя их при необходимости граничными условиями:

$$\Lambda_h \psi_h \equiv (\psi_h)_{x\bar{x}} + (\psi_h)_{y\bar{y}} = 0, \quad (x, y) \in \Omega_h; \quad (20)$$

$$\begin{cases} u_{x,h} = +0.5(\psi_{h,y} + \psi_{h,\bar{y}}), \\ u_{y,h} = -0.5(\psi_{h,x} + \psi_{h,\bar{x}}), \end{cases} \quad (x, y) \in \bar{\Omega}_h; \quad (21)$$

Для аппроксимации уравнения для концентрации запишем его в преобразованном виде, применив двойное интегральное преобразование [10]:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{1}{g_x} \frac{\partial}{\partial x} (g_x W_x) + \frac{1}{g_y} \frac{\partial}{\partial y} (g_y W_y) + QC, \quad (22)$$

где

$$Q = Q_n (u_x F_x + u_y F_y), \quad F_x = E_x + B_n u_y, \quad F_y = E_y - B_n u_x,$$

$$g_x = \exp \left[\int_0^x u_x dx' \right], \quad g_y = \exp \left[\int_0^y u_y dy' \right],$$

$$W_x = D_n \frac{1}{e_x} \frac{\partial}{\partial x} (e_x C), \quad W_y = D_n \frac{1}{e_y} \frac{\partial}{\partial y} (e_y C),$$

$$e_x = \exp \left[- \int_0^x P_n F_x dx' \right], \quad e_y = \exp \left[- \int_0^y P_n F_y dy' \right].$$

Для уравнения (22) запишем следующую явно-неявную разностную схему, дополняемую соответствующими граничными условиями:

$$\frac{\hat{C}_h - C_h}{\tau} = \bar{\Lambda}_h \hat{C}_h + Q_h \hat{C}_h, \quad C_h|_{t=0} = 1, \quad (23)$$

$$\bar{\Lambda}_h \hat{C}_h = \frac{1}{g_{x,h}} \left((g_{x,h} \hat{W}_{x,h})_x \right)_{\bar{x}} + \frac{1}{g_{y,h}} \left((g_{y,h} \hat{W}_{y,h})_x \right)_{\bar{x}}, \quad (24)$$

где

$$g_{x,h} = \exp \left[\sum_{0 \leq x' \leq x} u_x h_x \right], \quad g_{y,h} = \exp \left[\sum_{0 \leq y' \leq y} u_y h_y \right],$$

$$\hat{W}_{x,h} = D_n \frac{1}{e_{x,h}} \left(e_{x,h} \hat{C}_h \right)_x, \quad \hat{W}_{y,h} = D_n \frac{1}{e_{y,h}} \left(e_{y,h} \hat{C}_h \right)_y,$$

$$e_{x,h} = \exp \left[- \sum_{0 \leq x' \leq x} P_n F_{x,h} h_x \right], \quad e_{y,h} = \exp \left[- \sum_{0 \leq y' \leq y} P_n F_{y,h} h_y \right].$$

Реализация построенных схем выполняется с помощью итерационных алгоритмов переменных направлений и методов немоноотонной прогонки [11]. Параллельная реализация алгоритма базируется на методах разделения области [12] и параллельных алгоритмах прогонки [8]. Компьютерная реализация выполнена с помощью технологий MPI и OpenMP [13, 14].

Рассмотрим преимущества и недостатки предложенного метода.

Во-первых, предлагаемая модель, конечно, является неполной, поскольку она не учитывает обратного влияния от изменения концентрации ионов в характеристиках потока. Тем не менее, во многих случаях эти поправки мало значительны. В то же время, отказ от них позволяет сравнительно легко смоделировать основной процесс электромагнитной обработки воды.

Во-вторых, переход к функции тока позволяет не беспокоиться об условии $\operatorname{div} \mathbf{u} = 0$, что в альтернативных численных алгоритмах является большой проблемой.

В-третьих, отказ от расчета вихревой структуры потока при низких его скоростях не вносит больших ошибок, но существенно экономит время расчета.

В-четвертых, использование разнесенных сеток позволяет сократить количество ошибок в процессе интерполяции решения от одной сетки к другой.

В-пятых, использование экспоненциальной схемы освобождает от проблемы устойчивости алгоритма решения уравнения для концентрации и разделения пограничных слоев. Конечно, реализация экспоненциальной схемы увеличивает время вычислений. Однако это увеличение не является катастрофическим и компенсировано использованием параллельных вычислений.

Таким образом, предлагаемый подход имеет следующие преимущества: является относительно низкокзатратным по времени вычислений и имеет высокую устойчивость расчетов.

Результаты расчетов

В данном разделе описываются результаты численных экспериментов. Для тестирования предложенного численного подхода, был выбран базовый вариант расчета с безразмерными параметрами $L = 6$, $D_n = 1$, $P_n = 1$, $Q_n = 1$, $B_n = 1$. Параметры сетки: $N_x = 300$, $N_y = 50$, $h_x = h_y = 0.02$, $\tau = 10^{-4}$.

Результаты расчетов, показанные на Рис. 2–5, представляют соответственно распределения функции тока, модуля скорости в расчетной области, а также стационарные распределения концентрации примесей и электрического потенциала. Анализ приведенных данных показывает следующее. Во-первых, основные параметры ламинарного течения воды с примесью, а также стационарные распределения концентрации примеси и электрического потенциала соответствуют теоретическим представлениям. Во-вторых, влияние магнитного поля действительно приводит к уменьшению концентрации ионов в верхней части области для положительных значений параметра B_n и формированию повышенной концентрации ионов в нижнем слое. Таким образом, реализуется очистка верхнего слоя жидкости.

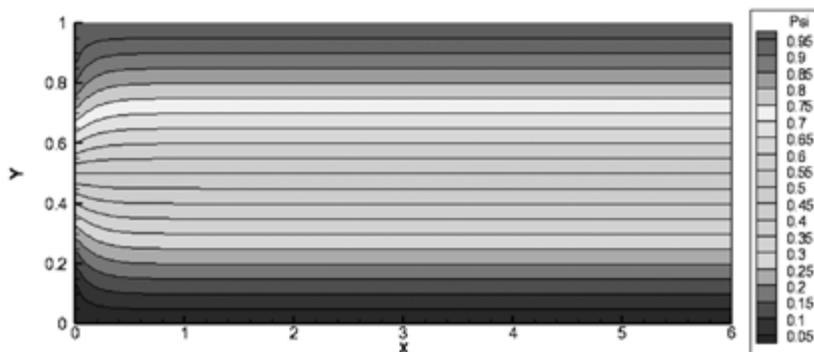


Рис. 2. Распределение функции тока.

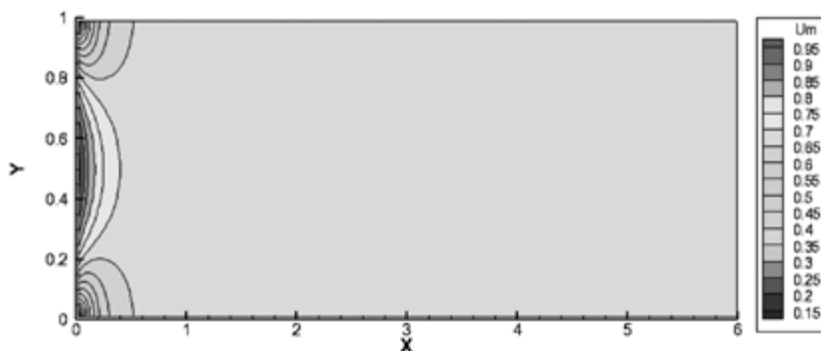


Рис. 3. Распределение модуля скорости.

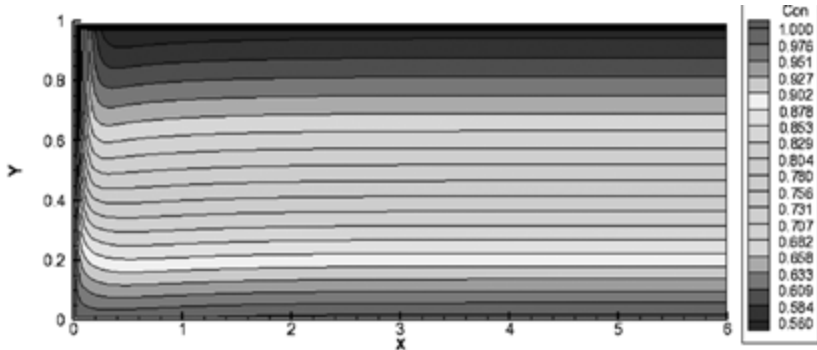


Рис. 4. Стационарное распределение концентрации примесей.

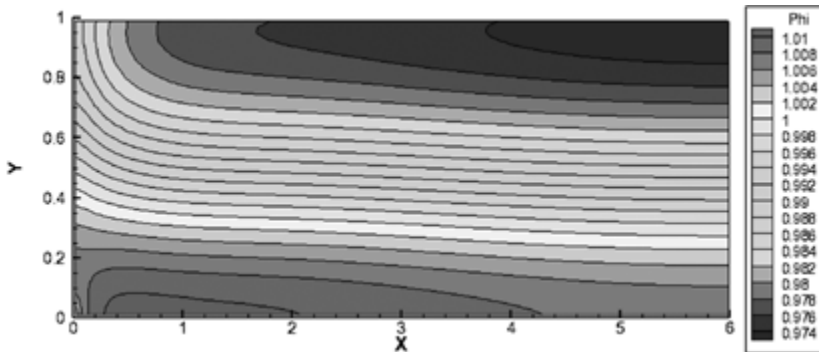


Рис. 5. Стационарное распределение электрического потенциала.

К сказанному выше следует добавить, что величина очистки зависит от параметра B_n . Очистка становится заметной, когда сила Лоренца сравнима с силой гидродинамического давления, то есть $B_n \sim 1$. Выполненные расчеты показывают, что снижение концентрации примеси в верхнем слое жидкости достигает примерно 2 раз для $B_n = 1$. Если параметр $B_n = 2$, то на выходе из среды достигается снижение концентраций примерно в 3,5 раза (Рис. 6).

Следующая серия расчетов иллюстрирует пространственную локализацию эффекта очистки. Такая ситуация имеет место в промышленных системах очистки, где магнитное поле инициируется постоянными магнитами или индукционными катушками, имеющими фиксированные геометрические размеры.

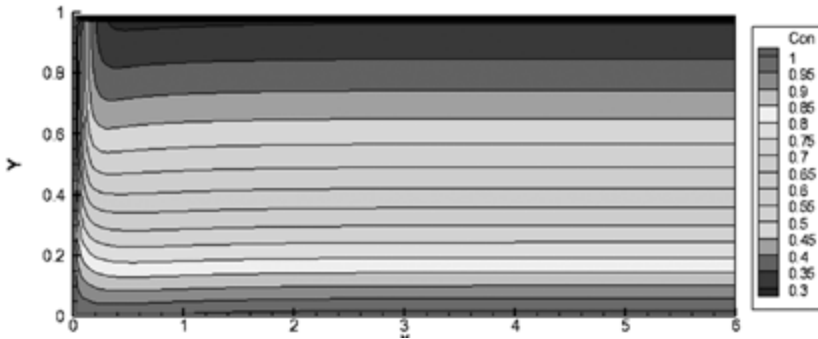


Рис. 6. Стационарное распределение концентрации примесей для значения параметра $B_n = 2$.

В данной работе для иллюстрации эффекта локализации была введена зависимость параметра B_n от продольной координаты x . Для примера была рассмотрена локализация магнитного поля в области $x \in [1.5, 4.5]$ при значении $B_n = 1$. Результаты расчетов концентрации примеси представлены на Рис. 7. Они показывают, что слой очищенной воды расположен в верхней части локализованной области. Забор очищенной воды при этом может осуществляться из области локализации через специальную мембрану. Стационарные распределения потенциала и модуля напряженности электрического поля внутри и вблизи локализованной области для этого случая показаны на Рис. 8, 9. Они подтверждают выход режима очистки на стационар, что важно для приложений.

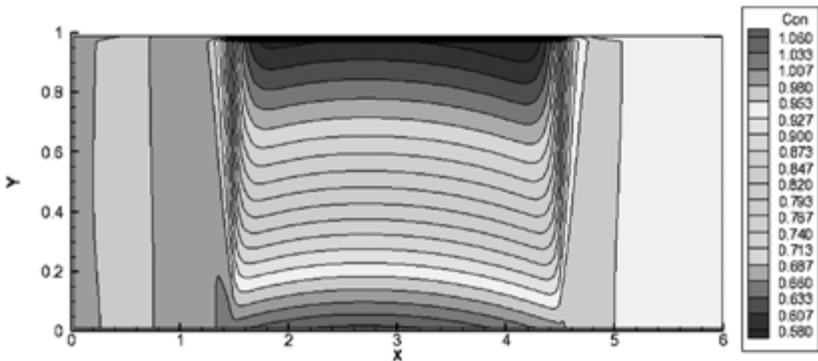


Рис. 7. Стационарное распределение концентрации примесей внутри и вблизи локализованной области.

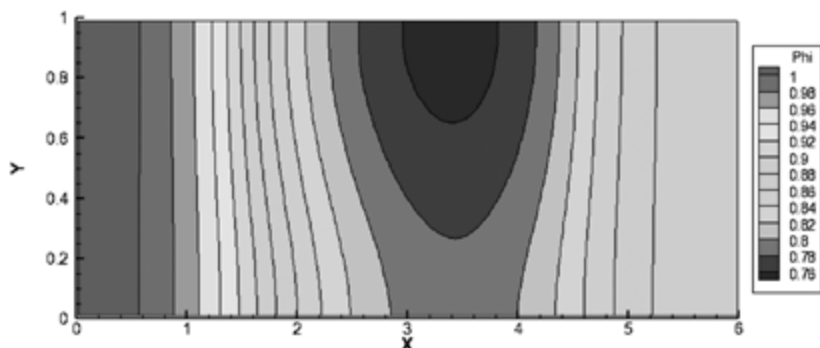


Рис. 8. Стационарное распределение электрического потенциала внутри и вблизи локализованной области

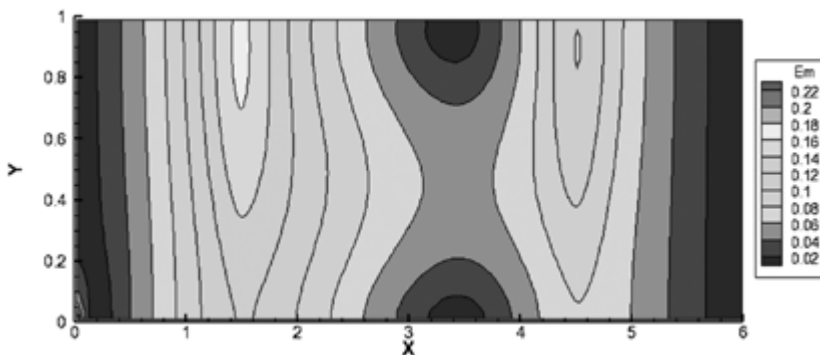


Рис. 9. Стационарное распределение электрического поля внутри и вблизи локализованной области

Заключение

В данной работе рассмотрена актуальная проблема очистки воды от примесей железа с помощью электро-магнитных методов. Для модельной задачи, описывающей процесс очистки, разработана упрощенная математическая модель, предложен численный алгоритм ее анализа и параллельная программа для проведения компьютерных экспериментов. Тестирование программы на ряде наборов параметров подтвердило работоспособность и адекватность предложенного вычислительного подхода. Полученные предварительные результаты соответствуют теоретическим оценкам и подтверждают высокую эффективность разработанной методологии.

Список литературы

1. *Shvets V.I., Yurkevich A.M., Mosin O.V., Skladnev D.A.* Preparation of deuterated inosine suitable for biomedical application // *Journal of Medical Sciences*. 1995. V. 8, N. 4. P. 231–232.
2. *Polyakov S.V.* Exponential Difference Schemes with Double Integral Transformation for Solving Convection-Diffusion Equations. // *Mathematical Models and Computer Simulations*. 2013. V. 5, N. 4. P. 338–340.
3. *Mosin O.V., Karnaukhova E.N., Pshenichnikova A.B., Reshetova O.S.* Electron impact spectrometry in bioanalysis of stable isotope labeled bacteriorhodopsin // *Sixth International Conference on Retinal Proteins, Leiden, The Netherlands, 19–24 June 1994*. P. 115.
4. *Мосин О.В., Складнев Д.А., Егорова Т.А., Юркевич А.М., Швец В.И.* Исследование биосинтеза аминокислот факультативным метилотрофом *Brevibacterium methylicum* на средах, содержащих тяжелую воду // *Биотехнология*. 1996. № 3. С. 3–12.
5. *Роуч П.* Вычислительная гидродинамика. – М.: Мир, 1980.
6. *Chetverushkin B.N.* Kinetic Schemes and Quasi-Gasdynamic System of Equations. Barcelona: CIMNE, 2008.
7. *Elizarova T.G.* Quasi-Gas Dynamic Equations. Berlin-Heidelberg-New York: Springer-Verlag, 2009.
8. *Самарский А.А.* Теория разностных схем. – М.: Наука, 1977.
9. *Самарский А.А., Вабищевич П.Н.* Аддитивные схемы для задач математической физики. – М.: Наука, 1999.
10. *Поляков С.В.* Экспоненциальные разностные схемы с двойным интегральным преобразованием для решения уравнений конвекции-диффузии // *Математическое моделирование*. 2012. Т. 24, № 12. С. 29–32.
11. *Самарский А.А., Николаев Е.С.* Методы решения сеточных уравнений. – М.: Наука, 1978.
12. *Toselli A., Widlund O.* Domain Decomposition Methods – Algorithms and Theory. Berlin: Springer, 2004.
13. Official documentation and manuals on MPI. [Online]. Available from: <http://mpi-forum.org/>
14. Official documentation and manuals on OpenMP. [Online]. Available from: <http://www.openmp.org>, <http://www.llnl.gov/computing/tutorials/openMP>

Содержание

Математическая формулировка	5
Численный подход	8
Результаты расчетов	10
Заключение	14
Список литературы	15

Отделение математических наук

Т.А. Кудряшова, С.В. Поляков,
Д.В. Пузырьков, Н.И. Тарасов

**Математическое моделирование
процессов очистки воды от примесей железа**

Формат 60 x 84/16
Гарнитура Таймс
Усл. печ. л. 1,05. Усл. изд. л. 0,5
Тираж 20 экз.

Издатель – Российская академия наук

Подготовлено к печати
Управлением научно-издательской деятельности РАН

Отпечатано на оборудовании Управления делами РАН

Издано в авторской редакции

Издается в соответствии с распоряжением
президиума Российской академии наук
от 24 октября 2017 г. №10106-765,
распространяется бесплатно.