

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА НЕРАВНОВЕСНОЙ СОРБЦИИ

И.А. КАЛИЕВ, С.Т. МУХАМБЕТЖАНОВ, Г.С. САБИТОВА

Аннотация. Фильтрация в пористых средах жидкостей и газов, содержащих ассоциированные с ними (растворенные, взвешенные) твердые вещества, сопровождается диффузией этих веществ и массообменом между жидкой (газовой) и твердой фазами. Наиболее распространенными видами массообмена являются сорбция и десорбция, ионный обмен, растворение и кристаллизация, кольматация, сульфатация и суффозия, парафинизация. В работе рассматривается система уравнений, моделирующая процесс неравновесной сорбции. Сформулирована разностная аппроксимация дифференциальной задачи по неявной схеме. Решение разностной задачи строится с помощью метода прогонки. Опираясь на численные результаты, можно сделать следующий вывод: при уменьшении времени релаксации решение неравновесной задачи стремится с ростом времени к решению равновесной задачи.

Ключевые слова: система уравнений неравновесной сорбции, разностная аппроксимация, неявная схема, метод прогонки, численные эксперименты.

Mathematics Subject Classification: 35Q35, 65M06, 76S05

ВВЕДЕНИЕ

Практически все жидкости, встречающиеся в природе, представляют собой растворы, т.е. смеси двух или более веществ (компонентов). Фильтрация в пористых средах жидкостей и газов, содержащих ассоциированные с ними (растворенные, взвешенные) твердые вещества, сопровождается диффузией этих веществ и массообменом между жидкой (газовой) и твердой фазами. Наиболее распространенными видами массообмена являются сорбция и десорбция, ионный обмен, растворение и кристаллизация, кольматация, сульфатация и суффозия, парафинизация. С учетом особенностей физико-химического взаимодействия растворов с породами пласта рассматриваются задачи равновесной и неравновесной сорбции.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Пусть $m(x, t)$ – пористость среды, $0 < m(x, t) \leq 1$; поровое пространство заполнено раствором и твердой фазой, выпавшей в осадок из раствора; $c(x, t)$ – массовая концентрация определенного вещества в жидкой фазе (на единицу объема раствора); $s(x, t)$ – массовая концентрация твердой фазы этого вещества, выпавшей в осадок (на единицу объема пор).

В равновесных условиях, когда контакт между раствором и твердой фазой поддерживается достаточно длительное время, соотношение между концентрациями $c(x, t)$ в растворе и на сорбенте $s(x, t)$ определяется изотермой сорбции. При малых концентрациях раствора, величина абсорбции определяется линейной зависимостью – изотермой Генри $s = \Gamma c$, где $\Gamma > 0$ – некоторая постоянная величина, зависящая от физико-химических свойств среды (постоянная Генри).

I.A. KALIEV, S.T. MUKHAMBETZHANOV, G.S. SABITOVA, NUMERICAL MODELING OF THE NON-EQUILIBRIUM SORPTION PROCESS.

© Калиев И.А., Мухамбетжанов С.Т., Сабитова Г.С. 2016.

Поступила 18 августа 2015 г.

Уравнения равновесной сорбции не всегда могут полностью характеризовать особенности поглощения и обмена веществ в двухфазной системе раствор – твердая фаза. В работах [1]–[3] были предложены математические модели для описания процессов неравновесной сорбции. При этом концентрация s твердой фазы связывается с концентрацией c в жидкой фазе уравнением

$$\frac{\partial s}{\partial t} = \frac{1}{\tau} (\Gamma c - s), \quad (1)$$

где положительная постоянная τ – характерное время релаксации, Γ – постоянная Генри. Концентрация c вещества в растворе удовлетворяет уравнению

$$m \frac{\partial c}{\partial t} = D \Delta c - v \nabla c - \frac{\partial s}{\partial t}, \quad (2)$$

где $D(x, t) > 0$ – коэффициент диффузии, $v(x, t)$ – вектор скорости фильтрации, которые считаются известными функциями указанных аргументов.

Пусть Ω – ограниченная область n -мерного пространства R^n с достаточно гладкой границей $S = \partial\Omega$, $Q_T = \Omega \times (0, T)$, $T > 0$; $S_T = S \times (0, T)$ – боковая поверхность цилиндра Q_T .

Требуется найти функции $c(x, t)$, $s(x, t)$, определенные в области Q_T , удовлетворяющие в Q_T уравнениям (1), (2), начальным условиям

$$c(x, 0) = c_0(x), \quad x \in \Omega, \quad (3)$$

$$s(x, 0) = s_0(x), \quad x \in \Omega, \quad (4)$$

и граничному условию

$$c(x, t) = c_b(x, t), \quad (x, t) \in S_T. \quad (5)$$

В работе [4] доказана глобальная однозначная разрешимость многомерной начально-краевой задачи (1)–(5), моделирующей процесс неравновесной сорбции.

РАЗНОСТНАЯ АППРОКСИМАЦИЯ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЙ ЗАДАЧИ ПО НЕЯВНОЙ СХЕМЕ

Рассмотрим одномерный случай по переменной x . В этом случае уравнение (2) переписывается в виде

$$m \frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - v \frac{\partial c}{\partial x} - \frac{\partial s}{\partial t}. \quad (6)$$

Пусть концентрация вещества в жидкой фазе – функция $c(x, t)$ удовлетворяет начальному условию

$$c(x, 0) = c_0(x), \quad x \in (0, 1), \quad (7)$$

и граничным условиям

$$c(0, t) = c_{b0}(t), \quad c(1, t) = c_{b1}(t), \quad t \in [0, T], \quad (8)$$

а концентрация твердой фазы – функция $s(x, t)$ удовлетворяет начальному условию

$$s(x, 0) = s_0(x), \quad x \in (0, 1). \quad (9)$$

Требуется найти решение $c(x, t)$, $s(x, t)$ уравнений (1) и (6) в прямоугольнике $(x, t) \in (0, 1) \times (0, T)$, удовлетворяющее начальным условиям (7), (9) и граничным условиям (8).

Основным аппаратом численного решения уравнений с частными производными являются разностные методы. Для отыскания приближенного решения этой задачи рассмотрим прямоугольную сетку узлов, образуемую точками пересечения двух семейств параллельных прямых

$$x = ih, \quad i = \overline{0, k}, \quad h = 1/k; \quad t = jq, \quad j = \overline{0, p}, \quad q = T/p.$$

Для каждого узла (i, j) обозначим $c_{i,j} = c(ih, jq)$, $s_{i,j} = s(ih, jq)$ и запишем разностную аппроксимацию дифференциальных уравнений (1) и (6)

$$\frac{s_{i,j+1} - s_{i,j}}{q} = \frac{1}{\tau} (\Gamma c_{i,j} - s_{i,j}), \quad i = \overline{0, k}, \quad j = \overline{0, p-1}, \quad (10)$$

$$m_{i,j} \frac{c_{i,j+1} - c_{i,j}}{q} = D_{i,j} \frac{c_{i+1,j+1} - 2c_{i,j+1} + c_{i-1,j+1}}{h^2} - v_{i,j} \frac{c_{i+1,j+1} - c_{i-1,j+1}}{2h} - \frac{s_{i,j+1} - s_{i,j}}{q}. \quad (11)$$

Из уравнения (10) выразим $s_{i,j+1}$:

$$s_{i,j+1} = s_{i,j} \left(1 - \frac{q}{\tau}\right) + \frac{q\Gamma}{\tau} c_{i,j}. \quad (12)$$

Из уравнения (11) получим

$$\begin{aligned} \frac{q}{h} \left(\frac{v_{i,j}}{2} - \frac{D_{i,j}}{h} \right) c_{i+1,j+1} + \left(m_{i,j} + \frac{2D_{i,j}q}{h^2} \right) c_{i,j+1} - \\ - \frac{q}{h} \left(\frac{D_{i,j}}{h} + \frac{v_{i,j}}{2} \right) c_{i-1,j+1} = m_{i,j} c_{i,j} + s_{i,j} - s_{i,j+1}. \end{aligned} \quad (13)$$

Для нахождения значений $c_{i,j+1}$ на $(j+1)$ слое из (13) сначала необходимо найти значение функции $s_{i,j+1}$ на этом же слое из (12).

Начальные и граничные условия (7), (9), (8) для функций $c(x, t)$, $s(x, t)$ можно переписать в виде $c_{i,0} = c_0(ih)$, $s_{i,0} = s_0(ih)$, $c_{0,j} = c_{b0}(jq)$, $c_{k,j} = c_{b1}(jq)$, $i = \overline{0, k}$, $j = \overline{0, p}$.

МЕТОД ПРОГОНКИ ДЛЯ РАЗНОСТНЫХ УРАВНЕНИЙ

Введем следующие обозначения: $c_{i,j+1} = y_i$, $c_{i+1,j+1} = y_{i+1}$, $c_{i-1,j+1} = y_{i-1}$, $m_{i,j}c_{i,j} + s_{i,j} - s_{i,j+1} = \varphi_i$, $-\frac{q}{h} \left(\frac{D_{i,j}}{h} + \frac{v_{i,j}}{2} \right) = a_i$, $m_{i,j} + \frac{2D_{i,j}q}{h^2} = b_i$, $-\frac{q}{h} \left(\frac{D_{i,j}}{h} - \frac{v_{i,j}}{2} \right) = d_i$. Тогда (13) можно записать в виде системы $(k+1)$ уравнений:

$$\begin{aligned} y_0 + 0 \cdot y_1 &= c_{0,j+1}, \\ a_i y_{i-1} + b_i y_i + d_i y_{i+1} &= \varphi_i, \quad i = \overline{1, k-1}, \\ 0 \cdot y_{k-1} + y_k &= c_{k,j+1}, \end{aligned}$$

т. е. для каждого $j = \overline{0, p-1}$ – это линейная система с трехдиагональной матрицей относительно переменных y_0, \dots, y_k . Решение существует, единственно и его можно найти с помощью метода прогонки.

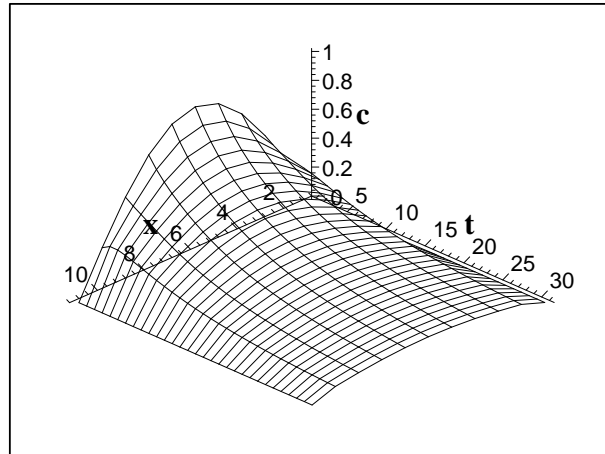


Рис. 1.

ЧИСЛЕННЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ

После построения разностной схемы были проведены численные расчеты. В качестве иллюстрации приведем результаты, соответствующие следующим данным: $m = 0,5$ – пористость среды, $D = 1$ – коэффициент диффузии, $v = 0$ – скорость фильтрации, $\Gamma = 0,2$ – постоянная Генри, $c_0(x) = \sin \pi x$, $x \in (0,1)$; $s_0(x) = 0$, $x \in (0,1)$; $c_{b0}(t) = 0$, $c_{b1}(t) = 0$, $t \in (0, T)$, $T = 0,15$; $h = 0,1$ – шаг по x , $q = 0,005$ – шаг по t ; $\tau_1 = 0,1$, $\tau_2 = 0,01$ – два значения характерного времени релаксации.

Графическая визуализация расчетов при $\tau = 0,1$ для $c(x, t)$ приведена на рис. 1, а для $s(x, t)$ – на рис. 2.

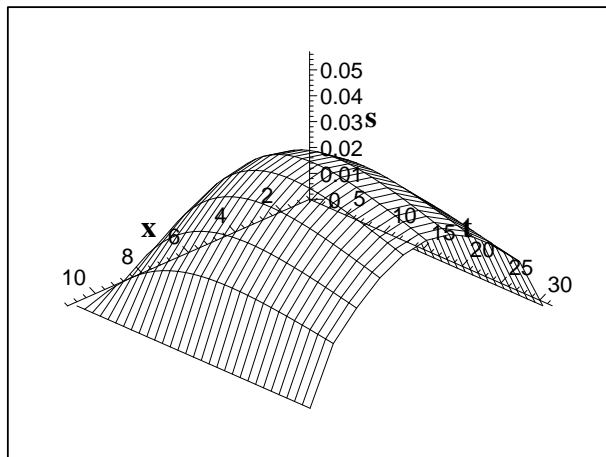


Рис. 2.

Графическая визуализация расчетов при $\tau = 0,01$ для $c(x, t)$ приведена на рис. 3, а для $s(x, t)$ – на рис. 4.

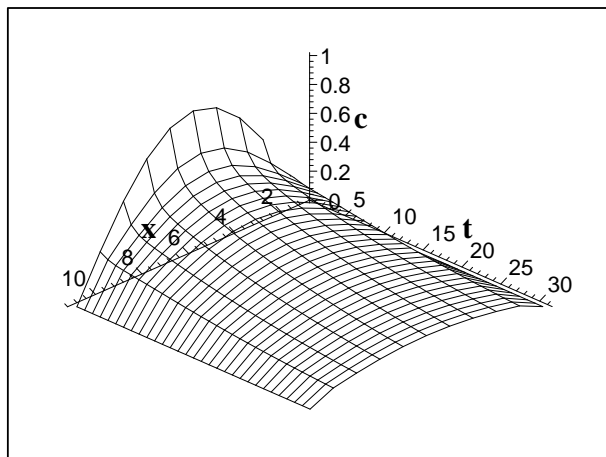


Рис. 3.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Опираясь на численные результаты и их визуализацию в виде графиков, можно сделать следующие выводы. При уменьшении времени релаксации τ решение неравновесной задачи стремится с ростом времени к решению равновесной задачи, т. е. $s \rightarrow \Gamma c$. Полученные результаты позволяют подтвердить прогнозы теоретических исследований и результаты, полученные аналитическим путем.

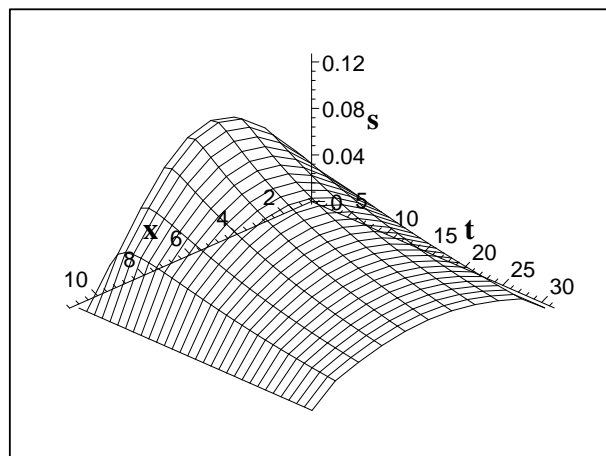


Рис. 4.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. L. Lapidus, W.R. Amundson *Mathematics of adsorption in beds. VI. The effect of longitudinal diffusion in ion exchange and chromatographic columns* // J. Phys. Chem. 1952. V. 56. P. 984–988.
2. К.Н. Coats, В.Д. Smith *Dead and pore volume and dispersion in porous media* // Soc. Petrol. Eng. J. 1964. V. 4, N 1. P. 73–84.
3. *Развитие исследований по теории фильтрации в СССР* // под ред. П.Я. Полубариновой-Кочиной. М.: Наука, 1969. 546 с.
4. Калиев И.А., Сабитова Г.С. *Об одной задаче неравновесной сорбции* // Сибирский журнал индустриальной математики. 2003. Том VI, № 1 (13). С. 35–39.

Ибрагим Адиевич Калиев,
 Стерлитамакский филиал
 Башкирского государственного университета,
 проспект Ленина, 47а,
 453103, г. Стерлитамак, Россия
 E-mail: kalievia@mail.ru

Салтанбек Талapedенович Мухамбетжанов,
 Казахский национальный университет имени аль-Фараби,
 проспект аль-Фараби, 71,
 050040, г. Алматы, респ. Казахстан
 E-mail: mukhambetzhanov@mail.ru

Гульнара Сагындыковна Сабитова,
 Стерлитамакский филиал
 Башкирского государственного университета,
 проспект Ленина, 47а,
 453103, г. Стерлитамак, Россия
 E-mail: sabitovags@mail.ru