ДВИЖЕНИЕ ГАЗОВОЙ СМЕСИ ЧЕРЕЗ ПОРИСТУЮ СРЕДУ ПРИ НАЛИЧИИ СОРБЦИИ

Л. К. ЦАБЕК

(*Москва*)

Рассмотрены решения системы линейных уравнений в частных производных, которые описывают движение газовой (жидкой) смеси через недеформируемую однородную пористую среду при наличии на границе раздела газообразной (жидкой) и твердой фаз сорбции, кинетика которой описывается линейным уравнением.

Для сферических зерен пористой среды в общем случае решение получено в квадратурах. Для симметричных зерен с произвольным параметром симметрии получены различные приближенные решения, причем выражения для начальных и центральных моментов использовались как критерий точности различных приближений.

1. Фильтрация газовой (или жидкой) смеси через пористую среду сопровождается диффузией веществ смеси и массообменом между газовой и твердой фазой пористой среды [1].

Для недеформируемой пористой среды, представляющей собой систему однородных симметричных зерен с параметром симметрии ν, уравнение непрерывности с учетом продольного перемешивания для плоского случая имеет вид (1.1)

$$\frac{\partial c}{\partial t}+u\frac{\partial c}{\partial z}+\delta_0\gamma_0(c-c^\circ|_{r=a})=D\frac{\partial^2 c}{\partial z^2}\qquad\left(\delta_0=\frac{1-\sigma}{\sigma},\quad \gamma_0=\frac{1+\nu}{a}\beta_0\right)$$

Третий член слева в уравнении (1.1) обусловлен диффузией вещества (сорбента) из газовой смеси во внутрь зерна (сорбата) пористой среды.

Уравнение непрерывности внутри симметричного зерна (сорбента) запишем следующим образом:

$$\frac{\partial q^\circ}{\partial t}+\frac{\partial c^\circ}{\partial t}=D_i\left(\frac{\partial^2 c^\circ}{\partial r^2}+\frac{\nu}{r}\frac{\partial c^\circ}{\partial r}\right)\tag{1.2}$$

с граничным условием непрерывности потока вещества на внешней границе зерна

$$\beta_0(c-c^\circ|_{r=a})=D_i\frac{\partial c^\circ}{\partial r}\bigg|_{r=a}\tag{1.3}$$

и условием симметрии в центре

$$\frac{\partial c^\circ}{\partial r}\bigg|_{r=0}=0\tag{1.4}$$

На границе раздела фаз (газовой и твердой) происходит сорбция вещества (сорбата) из газовой смеси. Если концентрация вещества (сорбата) в газовой смеси мала или происходит слабая адсорбция на квазиоднородной поверхности, то кинетика актов сорбции описывается линейным уравнением

$$\partial q^\circ / \partial t = k_1 c^\circ - k_2 q^\circ, \qquad k = k_1 / k_2 \tag{1.5}$$

Здесь c — концентрация вещества (сорбата) в потоке газовой (жидкой) смеси, u — фильтрационная линейная скорость потока, σ — доля свободного пространства недеформируемой пористой среды, γ_0 — кинетический коэффициент (сорбции), учитывающий скорость подвода вещества к поверхности зерна потоком и диффузией (внешней), ν — параметр симметрии ($\nu = 2$ для сферических зерен с радиусом сферы a, $\nu = 1$ для цилиндрических зерен с радиусом цилиндра a, $\nu = 0$ для зерен в виде пластинок толщиной $2a$), D — коэффициент дисперсии, учитывающей эффективное продольное перемешивание, β_0 — коэффициент (внешнего) массообмена на внешней границе зерна, D_i — коэффициент (внутренней) диффузии внутри узких каналов зерна (сорбента), c° — концентрация вещества (сорбата) внутри свободного пространства зерен, q° — концентрация поглощенного вещества твердой фазой зерна, k_1, k_2 — коэффициенты сорбции и десорбции соответственно. Ввиду того что в пористой среде существует нестационарное поле концентраций вещества (сорбата) в газовой (жидкой) смеси, эффективное продольное перемешивание описывается не коэффициентом эффективной диффузии, а коэффициентом дисперсии

$$D = D_g + D_1 u + D_2 u^2 \tag{1.6}$$

Первый член в выражении (1.6) соответствует молекулярной диффузии в узких каналах между зернами недеформируемой пористой среды. Второй член обусловлен наличием турбулентных пульсаций [2], конвективным смешиванием при обтекании зерен, возникающим задолго до турбулентных пульсаций в текущей смеси газа (жидкости) [3], наличием флуктуаций скорости в пористой среде. Третий член обусловлен наличием между зернами застойных зон, которые наиболее существенны для жидкой, а не газовой смеси [4, 5]; неравномерностью распределения фильтрационной скорости потока вблизи границ (плоской или цилиндрической), если последняя имеется, которая называется «тейлоровской» диффузией [6].

Рассмотрим поведения пористой системы при распространении по ней $\delta(t)$-возмущения. В этом случае при нулевых начальных условиях

$$c(z, t)\,|_{t=0} = 0, \qquad c^\circ(z, r, t)\,|_{t=0} = 0, \qquad q^\circ(z, r, t)\,|_{t=0} = 0 \tag{1.7}$$

запишем граничные условия для полуограниченной задачи в виде

$$c(z, t)\,|_{z=0} = c_0{}^\circ \delta(t), \qquad c_0{}^\circ = \mathrm{const} \tag{1.8}$$

Для приложений наибольший интерес представляет случай $1 < \nu \leqslant 2$; ниже рассмотрим этот случай.

Используя интегральное преобразование Лапласа по времени и условия (1.3), (1.4), (1.7), (1.8), найдем решение системы (1.2), (1.5) в изображениях

$$C^\circ(z, r, p) = \left(\frac{r}{a}\right)^{1/2(1-\nu)} \beta_0 C \frac{I_{1/2(1-\nu)}(\lambda r)}{I_{1/2(1-\nu)}(\lambda a)} (\beta_0 + a^{-1} D_i B)^{-1},$$

$$B = \lambda a \frac{I_{1/2(\nu-3)}(\lambda a)}{I_{1/2(\nu-1)}(\lambda a)} + 1 - \nu \tag{1.9}$$

С учетом (1.9) запишем уравнение (1.1) и его решение в изображениях следующим образом: (1.10)

$$D\frac{d^2C}{dz^2}-u\frac{dC}{dz}-\varphi C=0,\quad C(z,p)=c_0^\circ\exp\left[\frac{uz}{2D}-\frac{uz}{2D}(1+4\varphi Du^{-2})^{1/2}\right]$$

$$\varphi=p+\delta_0D_i(1+\nu)a^{-2}B\left(1+\frac{D_i}{a\beta_0}B\right)^{-1},\qquad \lambda=\left[\frac{1}{D_i}\left(p+\frac{pk_1}{p+k^2}\right)\right]^{1/2}\tag{1.11}$$

2. Для зерен сферической формы ($\nu=2$) из (1.10) можно найти решение для оригинала в квадратуре

$$c(z,t)=\frac{c_0^\circ}{2\pi i}\int\limits_{b-i\infty}^{b+i\infty}\exp\left\{pt+\frac{uz}{2D}[1-(1+4\varphi Du^{-2})^{1/2}]\right\}dp\tag{2.1}$$

$$\varphi=p+\frac{\gamma_0\delta_0(\lambda a\operatorname{cth}\lambda a-1)}{(^1/_3\gamma_0a^2D_i^\circ-1+\lambda a\operatorname{cth}\lambda a)}\tag{2.2}$$

Положим $p+k_2=\sqrt{k_1k_2}e^{i\theta}$. Отсюда после преобразований найдем

$$\lambda a=g_1(\theta)+ig_2(\theta),\qquad g_1(\theta)=\frac{ag(\theta)}{\sqrt{2D_i}}\tag{2.3}$$

$$g_2(\Theta)=\frac{2\sqrt{k_1k_2}\sin\Theta}{\sqrt{2D_i}g(\Theta)},\qquad g(\Theta)=(k_1-k_2+\sqrt{k_1^2-2k_1k_2\cos^2\Theta+k_2^2})^{1/2}\tag{2.4}$$

С учетом (2.3) запишем выражения

$$\sqrt{1+4\varphi Du^{-2}}=\sqrt{f_1+if_2}=h_1(\Theta)+ih_2(\Theta)\tag{2.5}$$

$$h_1(\Theta)=\sqrt{^1/_2(f_1+\sqrt{f_1^2+f_2^2})},\qquad h_2(\Theta)=f_2[2(f_1+\sqrt{f_1^2+f_2^2})]^{-1/2}$$

$$f_1(\Theta)=1+4\gamma_0\delta_0Du^{-2}-F(\Theta)H(\Theta)[(g_1\operatorname{sh}2g_1+g_2\sin 2g_2)+\tag{2.6}$$
$$+2H(\Theta)(^1/_3\gamma_0a^2D_i^{-1}-1)]+4Du^{-2}(\sqrt{k_1k_2}\cos\Theta-k_2)$$

$$f_2(\Theta)=1+F(\Theta)H(\Theta)(g_2\operatorname{sh}2g_1-g_1\sin 2g_2)+4Du^{-2}\sqrt{k_1k_2}\sin\Theta$$
$$H(\Theta)=\sin^2g_2\operatorname{ch}^2g_1+\cos^2g_2\operatorname{sh}^2g_1$$

$$F(\Theta)={}^8/_3Da^2\gamma_0^2\delta_0D_i^{-1}u^{-2}\{[2H(\Theta)(^1/_3\gamma_0a^2D_i^{-1}-1)+$$
$$+g_1\operatorname{sh}2g_1+g_2\sin 2g_2]^2+(g_2\operatorname{sh}2g_1-g_1\sin 2g_2)^2\}^{-1}$$

Так как $h(\Theta)$ — четная, а $h_2(\Theta)$ — нечетная функция, то с учетом (2.5) запишем решение (2.1) следующим образом:

$$c(z,t)=\frac{c_0^\circ}{\pi}\sqrt{k_1k_2}\exp\left(\frac{uz}{2D}-k_2t\right)\int\limits_0^\pi\exp\left[-\frac{uz}{2D}h_1(\Theta)+\right.\tag{2.7}$$
$$\left.+t\sqrt{k_1k_2}\cos\Theta\right]\cos\left[\frac{uz}{2D}h_2(\Theta)-t\sqrt{k_1k_2}\sin\Theta+\Theta\right]d\Theta$$

Численные значения из решения (2.7) можно легко найти с помощью ЦВМ.

3. Представляет интерес рассмотреть различные приближения оригиналов решений (1.10). Ввиду того что изучается распространение по пористой среде возмущения в виде $\delta(t)$-функций, можно использовать выражения для начальных и центральных моментов как критерий точности различных приближений. Форма кривой, близкой к гауссовской, определяется в основном заданием первого начального (α_1) и трех центральных моментов (μ_2, μ_3, μ_4) [7]. Перепишем решение (1.10) следующим образом:

$$C(z,p)=c_0^\circ \exp\left[\sum_{n=1} v_n(-1)^n p^n\right] \tag{3.1}$$

Для построения первых четырех приближений решения (3.1) достаточно знать только v_1, v_2, v_3, v_4, v_5, поэтому запишем

$$v_1=\frac{[1+(1+k)\delta]z}{u}, \qquad v_2=v_1\left(\frac{1}{k_2}+\tau_i+\frac{1}{\gamma_0^*}+\tau_l\right),$$

$$v_3=\frac{v_2^2}{v_1}+v_1\left[\tau_l^2+\frac{(\nu+1)}{(\nu+5)}\tau_i^2\right] \qquad v_4=\frac{v_2^3}{v_1^2}+v_1\tau_l^3+3\tau_l^2v_2+ \tag{3.2}$$

$$+\frac{2(1+\nu)}{(\nu+5)}\tau_i^2v_2+\frac{(1+\nu)}{(\nu+5)}\frac{\tau_i^2}{k_2}v_1+\frac{2(1+\nu)^2\tau_i^3v_1}{(\nu+5)(\nu+7)}$$

$$v_5=\frac{v_2^4}{v_1^3}+3\tau_l^4v_1+4\tau_l^3v_2+6\tau_l^2\frac{v_2^2}{v_1}+6\tau_l^2\tau_i^2v_1\frac{(1+\nu)}{(\nu+5)}+$$

$$+2\tau_l\tau_i^2v_1\frac{(1+\nu)}{(\nu+5)}\left(\frac{4}{k_2}+\frac{3}{\gamma_0^*}+\frac{(5\nu+23)}{(\nu+7)}\tau_i\right)+\frac{2\tau_i^2v_1}{(\nu+5)}\left[\frac{4(1+\nu)}{k_2\gamma_0^*}+\right.$$

$$\left.+\frac{3(\nu+1)}{k^2}-3\left(\frac{1}{\gamma_0^*}\right)^2\right]+\frac{2\tau_i^3v_1}{(\nu+5)(\nu+7)}\left[\frac{5\nu^2+28\nu+23}{\gamma_0^*}+\right.$$

$$\left.+\frac{8(\nu^2+5\nu+4)}{k_2}+\frac{13\nu^3+107\nu^2+355\nu+243}{2(\nu+9)}\tau_i\right] \tag{3.3}$$

$$\tau_i=\frac{a^2(1+k)}{(\nu+1)(\nu+3)D_i}, \quad \gamma_0^*=\frac{\beta_0(1+\nu)}{a(1+k)}, \quad \tau_l=\frac{(1+k)\delta D}{u^2}, \quad \delta=\frac{\delta_0}{\nu-1}$$

Начальные моменты найдем из выражения

$$\alpha_n=\lim_{p\to 0}\left[\frac{(-1)^n}{C(p)}\frac{d^{(n)}C(p)}{dp^n}\right]. \tag{3.4}$$

причем начальные и центральные моменты связаны соотношениями

$$\mu_n=\sum_{k=0}^{n} C_n^k(-\alpha_1)^k\alpha_{n-k} \tag{3.5}$$

Подставим (3.1) в (3.4) и после преобразований получим

$$\alpha_1=v_1, \quad \mu_2=2v_2, \quad \mu_3=6v_3, \quad \mu_4=24v_4+12v_2^2$$
$$\mu_5=120v_5+120v_2v_3 \tag{3.6}$$

Коэффициент асимметрии кривой, близкой к гауссовской, S_k и коэффициент островершинности кривой эксцесс определяются соответственно v_3 и v_4

$$S_k = \frac{\mu_3}{\mu_2^{3/2}} = \frac{3v_3}{\sqrt{2}\, v_2^{3/2}}, \qquad E_x = \frac{\mu_4}{\mu_2^2} - 3 = 6\frac{v_4}{v_2^2}$$

В общем случае оригинал решения (3.1) в квадратурах имеет вид

$$c(z,t) = \frac{c_0^\circ}{2\pi}\int\limits_0^\infty \exp\left[\sum_{n=1}(-1)^n v_{2n} s^{2n}\right]\cos\left[v_1^\circ s + \sum_{n=1}(-1)^n v_{2n+1} s^{2n+1}\right] ds \tag{3.7}$$

$$v_1^\circ = t - v_1 \tag{3.8}$$

Нулевое приближение для изображения (3.1) найдем в виде

$$c_0(z,t) = \frac{c_0^\circ}{2\pi i}\int\limits_{b-i\infty}^{b+i\infty} e^{v_1^\circ p}\, dp = \frac{c_0^\circ}{2\pi i}\int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{iv_1^\circ s}\, ds = c_0^\circ \delta(t - v_1) \tag{3.9}$$

Из (3.9) видно, что в нулевом приближении по пористой среде распространяется нерасплывшееся $\delta(t)$-образное возмущение со скоростью $w = u / [1 + (1 + k)\delta]$, которая находится из условия $t - v_1 = \text{const}$.

В первом приближении из (3.1) запишем

$$c_1(z,t) = \frac{c_0^\circ}{2\pi i}\int\limits_{b-i\infty}^{b+i\infty} e^{v_2 p^2 + v_1^\circ p}\, dp =$$

$$= \frac{c_0^\circ}{\pi}\int\limits_0^\infty e^{-v_2 s^2}\cos v_1^\circ s\, ds = \frac{c_0^\circ}{2\sqrt{\pi v_2}}\exp\left[\frac{-(v_1^\circ)^2}{4v_2}\right] \tag{3.10}$$

Во втором приближении из (3.1) получим

$$c_2(z,t) = \frac{c_0^\circ}{2\pi i}\int\limits_{b-i\infty}^{b+i\infty} \exp(-v_3 p^3 + v_2 p^2 + v_1^\circ p)\, dp = \frac{c_0^\circ e^h}{\pi v_3^{1/3}}\int\limits_0^\infty \cos(x^3 + g^\circ x)\, dx \tag{3.11}$$

$$h = \frac{v_2 v_1^\circ}{3v_3} + \frac{2v_2^3}{27v_3^2}, \qquad g^\circ = v_3^{-1/3}\left(v_1^\circ + \frac{v_2^2}{3v_3}\right) \tag{3.12}$$

Используя интегральное представление для функции Макдональда [8]

$$K_\nu(x) = \frac{1}{\cos {}^1/_2 \nu\pi}\int\limits_0^\infty \cos(x \operatorname{sh} t)\operatorname{ch}\nu t\, dt \tag{3.13}$$

перепишем выражение (3.11) с учетом (3.13) следующим образом:

$$c_2(z,t) = \frac{c_0^\circ}{3\pi}\left(\frac{v_1^\circ}{v_3} + \frac{v_2^2}{3v_3^2}\right)^{1/2} e^h K_{1/3}\left[\frac{2}{3\sqrt{3v_3}}\left(v_1^\circ + \frac{v_2^2}{3v_3}\right)^{3/2}\right] \tag{3.14}$$

Для приближенных расчетов по формуле (3.14) разумно использовать асимптотическое разложение функции Макдональда

$$K_\nu(x) \approx \left(\frac{\pi}{2x}\right)^{1/2} e^{-x}\sum_{k=0}\frac{\Gamma(\nu + k + {}^1/_2)}{(2x)^k k!\,\Gamma(\nu - k + {}^1/_2)}$$

Чтобы найти решение в третьем приближении, перепишем (3.1) в виде

$$c_4(z,t)=\frac{c_0^\circ}{2\pi i}\int\limits_{b-i\infty}^{b+i\infty}\exp(-v_5p^5+v_4p^4-v_3p^3+v_2p^2+v_1^\circ p)\,dp=$$

$$=\frac{c_0^\circ}{2\pi i}\int\limits_{a-i\infty}^{a+i\infty}\exp(-v_5p_1^5-h_3p_1^3+h_2p_1^2+h_1p_1+h_0)\,dp_1$$

Отсюда

$$c_3(z,t)=\frac{c_0^\circ}{2\pi i}e^{h_0}\int\limits_{a-i\infty}^{a+i\infty}\exp(-h_3p_1^3+h_2p_1^2+h_1p_1)\,dp_1 \tag{3.15}$$

$$h_0=\frac{v_4^2v_2}{25v_5^2}-\frac{v_4^3v_3}{125v_5^3}+\frac{v_1^\circ v_4}{5v_5},\qquad h_1=v_1^\circ+\frac{v_4^4}{125v_5^3}-\frac{3v_4^2v_3}{25v_5^2}+\frac{2v_4v_2}{5v_5}$$

$$h_2=v_2-\frac{3v_4v_3}{5v_5}+\frac{4v_4^3}{25v_5^2},\qquad h_3=v_3-\frac{2v_4^2}{5v_5} \tag{3.16}$$

Воспользовавшись решением (3.11), найдем решение в третьем приближении в виде

$$c_3(z,t)=\frac{c_0^\circ}{3\pi}\left(\frac{h_1}{h_3}+\frac{h_2^2}{3h_3^2}\right)^{1/2}\times$$

$$\times\exp\left(h_0+\frac{h_1h_2}{3h_3}+\frac{2h_2^3}{27h_3^2}\right)K_{1/3}\left[\frac{2}{3\sqrt{3h_3}}\left(h_1+\frac{h_2^2}{3h_3}\right)^{3/2}\right] \tag{3.17}$$

Из различных приближений решений (3.9), (3.10), (3.14), (3.17) видно, что для описания квазисимметричных кривых можно воспользоваться первым приближением (3.10), а асимметричных кривых — вторым (3.14) и третьим (3.17) приближениями. Причем для описания кривых очень асимметричных, которые встречаются в приложениях, третьего приближения (3.17) вполне достаточно и неразумно находить приближения порядка выше третьего.

Поступило 23 II 1970

ЛИТЕРАТУРА

1. Развитие исследований по теории фильтрации в СССР (1917—1967). М., «Наука», 1969.
2. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Механика сплошных сред. М., Гостехиздат, 1953.
3. Николаевский В. Н. Конвективная диффузия в пористых средах. ПММ, 1959, т. 23, вып. 6.
4. Левич В. Г., Письмен Л. М., Кучанов С. И. О гидродинамическом перемешивании в зернистом слое. Физическая модель застойных зон. Докл. АН СССР, 1966, т. 168, вып. 2.
5. Aris R. D. On the dispersion of a solute in a fluid flowing througth a tube. Proc. Soc. London (A), 1956, vol. 235, No. 1200.
6. Taylor G. J. Dispersion of soluble matter in solvent flowing slowly througth a tube. Proc. Roy. Soc., 1953, vol. 219, No. 1137.
7. Гнеденко Б. В. Курс теории вероятностей. М., «Наука», 1965.
8. Ватсон Г. Н. Теория бесселевых функций, ч. 1, 2. М., Изд-во иностр. лит., 1949.