

ДВИЖЕНИЕ МНОГОКОМПОНЕНТНОЙ СОРБИРУЕМОЙ СМЕСИ В ПОРИСТОЙ СРЕДЕ ПРИ НАЛИЧИИ ПРЕДВАРИТЕЛЬНОГО НАСЫЩЕНИЯ СРЕДЫ НЕКОТОРЫМИ КОМПОНЕНТАМИ СМЕСИ

Л. К. ЦАБЕК

(Москва)

Проанализированы численные и инвариантные решения системы квазилинейных уравнений в частных производных, описывающей движение многокомпонентной сорбируемой смеси газов (жидкостей) через пористую среду, которая предварительно насыщена некоторыми сорбируемыми компонентами смеси; при наличии изотерм сорбции Ленгмюра инвариантные решения получены в инвариантах Римана.

1. Система уравнений движения представляет собой уравнения непрерывности для каждого сорбируемого компонента смеси, уравнения изотерм сорбции, модельные уравнения кинетики массообмена в пористых зернах и соответствующие начальные и граничные условия

$$(1.1) \quad \alpha_k \frac{\partial q_k}{\partial t} + \frac{\partial c_k}{\partial z} = 0, \quad k=1, 2, \dots, n$$

$$(1.2) \quad q_k = f_k(c_1', c_2', \dots, c_n')$$

$$(1.3) \quad \alpha_k \frac{\partial q_k}{\partial t} = \Omega_k(q_k/q_k^*) [f_k(c_1, c_2, \dots, c_n) - q_k]$$

$$\Omega_k(x) = \{\alpha_{0k} + \gamma_k [\omega_k(x)]^{-1}\}^{-1}$$

$$(1.4) \quad c_k(z, 0) = a_k, \quad q_k(z, 0) = f_k(a_1, a_2, \dots, a_n),$$

$$(1.5) \quad c_k(0, t) = F_k(t), \quad q_k(0, t) = F_k^o(t)$$

Здесь c_k — концентрация вещества k -компонента смеси в потоке, c_k' — равновесные значения концентрации вещества k -компонента, q_k — концентрация поглощенного в пористых зернах вещества k -компонента смеси, γ_k — относительный кинетический коэффициент массообмена внутри пористого зерна, α_{0k} — относительный коэффициент эффективного продольного перемешивания, ω_k — функция заполнения пористого зерна k -компонентом смеси.

В работе [1] проанализировано движение сорбируемой смеси через пористую среду, состоящую из пористых зерен, эффективные размеры пор в которых гораздо больше размеров молекул сорбируемой смеси. Уравнения кинетики массообмена в этом случае имеют вид (1.3) [1]. В данной работе рассмотрены уравнения движения сорбируемой смеси через пористую среду, состоящую из пористых зерен, эффективные размеры пор в которых сравнимы с размерами молекул сорбируемой смеси газов (жидкостей), поэтому уравнения кинетики массообмена в пористых зернах в этом случае записываются в виде уравнений (1.3) данной работы. В общем случае для произвольного вида функций f_k и произвольного вида начальных и граничных условий система квазилинейных уравнений

(1.1)–(1.5) может быть проинтегрирована численно с помощью разностных схем [2]. Численное интегрирование уравнений движения позволяет найти решение при любых значениях времени. Запишем неявную итерационную консервативную разностную схему точности $O(h^2 + \tau)$ для системы уравнений движения (1.1)–(1.3) в виде

$$(1.6) \quad \begin{aligned} c_{k,i+1}^{(s+1)} &= c_{k,i}^{(s+1)} - h \Omega_k [q_{k,i+1/2}^{(s+1)} / q_k^*] [f_k(c_{1,i+1/2}^{(s)}, \dots, c_{n,i+1/2}^{(s)}) + \\ &+ (c_{k,i+1/2}^{(s+1)} - c_{k,i+1/2}^{(s)}) \left(\frac{\partial f_k}{\partial c_k} (c_{1,i+1/2}^{(s)}, \dots, c_{n,i+1/2}^{(s)}) - q_{k,i+1/2}^{(s+1)} \right)] \\ q_{k,i+1}^{(s+1)} &= q_{k,i+1}^{(s)} + \frac{\tau}{\alpha_k} \Omega_k [q_{k,i+1/2}^{(s+1)} / q_k^*] [f_k(c_{1,i+1/2}^{(s)}, \dots, c_{n,i+1/2}^{(s)}) - q_{k,i+1}^{(s)}] \end{aligned}$$

Для схемы (1.6) сквозной счет сходится в классе разрывных коэффициентов. Условия абсолютной устойчивости и сходимости численных решений можно найти методом, рассмотренным в работе [1]. Для выполнения непрерывности решений начальные условия $c_{k,i}^{(s-1)}$ найдем из системы (1.1)–(1.3)

$$(1.7) \quad \begin{aligned} c_{k,i}^{(s+1)} &= g_{k,i}^{(s)} + (a_k - g_{k,i}^{(s)}) \exp \left[-ih \frac{\partial f_k}{\partial c_k} (c_{1,i}^{(s)}, \dots, c_{n,i}^{(s)}) \Omega_k (q_k^0 / q_k^*) \right] \\ g_{k,i}^{(s)} &= c_{k,i}^{(s)} + [q_{k,i} - f_k(c_{1,i}^{(s)}, \dots, c_{n,i}^{(s)})] \left[\frac{\partial f_k}{\partial c_k} (c_{1,i}^{(s)}, \dots, c_{n,i}^{(s)}) \right]^{-1} \end{aligned}$$

Граничные условия $F_k^0(t)$ получим из интегрирования методом Рунге – Кутты системы обыкновенных дифференциальных уравнений

$$(1.8) \quad \alpha_k \frac{\partial F_k^0}{\partial t} = \Omega_k [F_k^0 / q_k^*] [f_k(F_1, \dots, F_n) - F_k^0], \quad F_k^0(0) = f_k(a_1, \dots, a_n)$$

Метод нахождения функции заполнения Ω_k рассмотрен в работе [3].

2. Система уравнений движения (1.1)–(1.3) допускает инвариантные решения типа бегущих волн ($y = z - w_p t$, w_p – скорость распространения бегущей волны). В этом случае уравнения движения запишем в виде

$$(2.1) \quad \alpha_k w_p \frac{dq_k}{dy} = \frac{dc_k}{dy}, \quad y = z - w_p t$$

$$(2.2) \quad \alpha_k w_p \frac{dq_k}{dy} = \Omega_k (q_k / q_k^*) [q_k - f_k(c_1, \dots, c_n)]$$

Из решения предыдущей системы уравнений можно найти монотонное распределение концентраций q_k , c_k во фронте волны w_p . Если скорость кинетики массобмена велика, то $\Omega_k \rightarrow \infty$ и система уравнений (1.1)–(1.3) превращается в следующую:

$$(2.3) \quad \frac{\partial q_k}{\partial t} + \frac{\partial \Phi_k(q_1, \dots, q_n)}{\alpha_k \partial z} = 0, \quad \Phi_k = f_k^{-1}$$

Система уравнений (2.3) допускает существование только трех типов инвариантных решений: постоянных решений $q_k, c_k = \text{const}$, автомоделных решений типа распадающихся волн, которые находятся из решения системы

$$(2.4) \quad [y \delta_{ik} - A_{ik}(q)] \frac{dq_k}{dy} = 0, \quad y = z/t, \quad A_{ik} = \frac{\partial \Phi_i}{\alpha_i \partial q_k}$$

и разрывных решений типа бегущих волн, которые находятся из решений системы

$$(2.5) \quad [w_p \delta_{ik} - A_{ik}(q)] \frac{dq_k}{dy} = 0, \quad y = z - w_p t$$

Каждое инвариантное решение определяется одним неизвестным параметром. Удобно за неизвестные параметры принимать величины $q_p^{(p+1)}$ или $c_p^{(p+1)}$, причем определение этих параметров для режима бегущих и расплывающихся волн при произвольных начальных и граничных условиях (1.4), (1.5) находится методом последовательных приближений таким образом, чтобы выполнялись условия (1.4), (1.5). Если первоначально пористая среда не насыщена ни одним из сорбируемых компонентов смеси, то неизвестные параметры $q_p^{(p+1)} = 0$. Если первоначально пористая среда насыщена всеми сорбируемыми компонентами смеси, то неизвестные параметры $q_{(1+p)}^{(p)} = 0$. Необходимое условие существования n инвариантных решений типа бегущих или расплывающихся волн — наличие n различных корней λ_i ($i=1, 2, \dots, n$) матрицы A_{ik} , причем

$$(2.6) \quad \lambda_1 < \lambda_2 < \lambda_3 < \dots < \lambda_n$$

Если условия (2.6) нарушаются, то не выполняются условия единственности инвариантных решений. Гиперболическая система (2.3), для которой выполняются условия (2.6) — гиперболическая в узком смысле. При $\Omega_k \rightarrow \infty$ монотонные решения типа бегущих волн для уравнений движения (2.1), (2.2) переходят в разрывные решения системы (2.5). Гиперболическая система (2.3) удобна для нахождения необходимых условий существования инвариантных решений. Дополнительные условия существования инвариантных решений типа бегущих волн можно найти из анализа условий существования однозначных решений системы (2.1), (2.2). Проинтегрировав систему уравнений (2.1), получим

$$(2.7) \quad q_k = q_k^{(p)} + [c_k - c_k^{(p)}] (\alpha_k w_p)^{-1}$$

$$(2.8) \quad \alpha_k w_p = [c_k^{(p+1)} - c_k^{(p)}] [q_k^{(p+1)} - q_k^{(p)}]^{-1}$$

где $q_k^{(p)}$, $c_k^{(p)}$ и $q_k^{(p+1)}$, $c_k^{(p+1)}$ — значения равновесных концентраций слева и справа соответственно вдоль пористой среды для бегущей p волны. С учетом (2.7), (2.8) систему (2.1), (2.2) перепишем в виде

$$(2.9) \quad \frac{dc_k}{dy} = \Omega_k (q_k/q_k^*) \{q_k^{(p)} + [c_k - c_k^{(p)}] (\alpha_k w_p)^{-1} - f_k(c_1, \dots, c_n)\} = H_k(c)$$

$$(2.10) \quad H_k(c^{(p)}) = H_k(c^{(p+1)}) = 0, \quad H_k(c) = H_k(c_1, c_2, \dots, c_n)$$

Чтобы решения $c_k(y)$ при наличии условий (2.10) были монотонными, функции $H_k(c)$ не должны изменять знак при $c_k^{(p)} \leq c_k \leq c_k^{(p+1)}$. Умножив

(2.9) последовательно на $[c_k - c_k^{(p)}]$ и $[c_k^{(p+1)} - c_k]$, после преобразований получим

$$(2.11) \quad \frac{f_k(c_1, \dots, c_n) - q_k^{(p)}}{c_k - c_k^{(p)}} \geq \frac{1}{\alpha_k w_p} \geq \frac{f_k(c_1, \dots, c_n) - q_k^{(p+1)}}{c_k - c_k^{(p+1)}},$$

$$(c_k^{(p+1)} > c_k^{(p)})$$

При $c_k^{(p+1)} < c_k^{(p)}$ знаки в неравенствах (2.11) необходимо изменить на противоположные. При выполнении условий (2.6), (2.11) в пористой среде могут распространяться волны, бегущие со скоростью w_p . Отметим, что условия существования монотонных инвариантных решений, описываемых системой (2.1) — (2.2), и разрывных решений типа бегущих волн,

описываемых системой (2.5), одинаковы. При выполнении условий (2.6) и нарушении условий (2.11) в пористой среде могут распространяться расплывающиеся волны, описываемые автомодельными инвариантными решениями. Для определения распределения концентраций в бегущей волне разделим уравнения (2.9) на k -е уравнение (2.9)

$$(2.12) \quad \frac{dc_m}{dc_k} = H_m(c)/H_k(c), \quad m \neq k$$

Интегрируя систему обыкновенных дифференциальных уравнений методом Рунге — Кутты, пайдём $c_m = G_m(c_k)$. При численном интегрировании системы (2.12) при каждом последующем шаге интегрирования необходимо проверять выполнение условий (2.6), (2.11). Если условия (2.11) нарушились, то необходимо прекратить на предыдущем шаге интегрировать систему (2.12), а интегрировать систему уравнений (2.18). Подставим решения $G_m(c_k)$ в правую часть k -го уравнения (2.9)

$$(2.13) \quad \frac{dc_k}{dy} = H_k(G_1(c_k), \dots, c_k, \dots, G_n(c_k))$$

Отсюда найдём инвариантное решение типа бегущей волны

$$(2.14) \quad c_k = \Phi_k(y - y_0), \quad c_m = G_m(\Phi_k(y - y_0)), \quad \Phi_k^{-1} = \int [H_k(G(c_k))]^{-1} dc_k.$$

Константу интегрирования y_0 определим из интегральной формы уравнения непрерывности

$$(2.15) \quad y_0 = \int_a^b \Phi_k^{-1}(c_k) dc_k, \quad a = c_k^{(p)}, \quad b = c_k^{(p+1)}.$$

Автомодельные инвариантные решения найдём из системы уравнений (2.4). Если $q_k \neq \text{const}$ (соответственно $c_k \neq \text{const}$), то

$$(2.16) \quad y = \lambda_p(q) = \Lambda_p(c)$$

так как

$$\lambda_p(q) = \lambda_p(q_1, q_2, \dots, q_n) = \lambda_p[f_1(c_1, c_2, \dots, c_n), \dots, f_n(c_1, \dots, c_n)] = \Lambda_p(c_1, c_2, \dots, c_n) = \Lambda_p(c)$$

Если на каком-либо интервале y величина $y = \lambda_p(q)$, то нетривиальные решения системы (2.4) можно найти из уравнений

$$(2.17) \quad \frac{dq_k}{dy} = br_{p,k}(q), \quad b^{-1} = \sum_{k=1}^n (\partial \lambda_p / \partial q_k) r_{p,k}$$

где $r_{p,k}(q)$ — правый собственный вектор матрицы $A(q)$, соответствующий собственному числу λ_p .

Разделим уравнения (2.17) на k -е уравнение (2.17)

$$(2.18) \quad \frac{dq_m}{dq_k} = r_{p,m}(q) / r_{p,k}(q)$$

Интегрируя систему обыкновенных дифференциальных уравнений, находим $q_m = G_m^*(q_k)$. При численном интегрировании системы (2.18) необходимо при каждом последующем шаге интегрирования проверять условия (2.6), (2.11). Если условия (2.11) выполняются, то вместо системы уравнений (2.18) необходимо интегрировать систему уравнений (2.12). Подставим решения $G_m^*(q_k)$ в уравнение (2.16). Отсюда автомодельные решения системы (2.3) запишем в виде

$$(2.19) \quad y = \lambda_p(G_1^*(q_k), G_2^*(q_k), \dots, q_k, \dots, G_n^*(q_k)) = \Psi_p^{-1}(q_k) \\ q_k = \Psi_p(y), \quad q_m = G_m^*(\Psi_p(y)) = G_m^\circ(y), \quad m \neq k$$

Используя условия (2.6), (2.11) и инвариантные решения (2.14), (2.19), можно найти распределение концентраций в пористой среде для изотерм f_k произвольного вида. Для уточнения приближенных автомодельных инвариантных решений (2.19) из системы уравнений (1.1)–(1.3) при конечной величине скорости кинетики массообмена запишем следующую приближенную систему уравнений

$$(2.20) \quad \alpha_k y \frac{dq_k}{dy} = P_k(q, c) = \Omega_k(q_k/q_k^*) [q_k - f_k(c)]$$

$$\frac{dc_k}{dy} = P_k(q, c), \quad y = \frac{z}{t}$$

с краевыми условиями

$$(2.21) \quad q_k(y_0) = q_k^{(p)}, \quad c_k(y_0) = c_k^{(p)}, \quad y \geq y_0$$

Величина y_0 неизвестна, поэтому ее определить можно методом последовательных приближений. Уточнение величины y_0 производится из уравнений

$$(2.22) \quad y = (dc_k/dy) / (\alpha_k dq_k/dy)$$

или из интегральной формы уравнений непрерывности (1.1)

$$(2.23) \quad c_k = c_k^{(p)} + \alpha_k \int_a^b y dq_k, \quad a = q_k^{(p)}, \quad b = q_k$$

При наличии в смеси только одной компоненты ($n=1$) систему уравнений (2.20) можно свести к одному уравнению второго порядка

$$(2.24) \quad \frac{d^2 q_1}{dc_1^2} + \frac{\alpha_1}{P_1(q_1, c_1)} \left(\frac{dq_1}{dc_1} \right)^2 = 0, \quad q_1(c_1) = q_1^{(1)}$$

которое интегрируется численно методом Рунге–Кутты. Из решения уравнения (2.24) находим $q_1 = G(c_1)$. С учетом (2.22) решение запишем в виде

$$(2.25) \quad c_1 = \Psi(y), \quad q_1 = G(\Psi(y)), \quad \Psi^{-1}(c_1) = [dG/dc_1]^{-1}$$

Сравнение численных решений по разностной схеме (1.6) с автомодельными решениями (2.25) для одноконпонентной смеси показывает, что эти решения практически совпадают при $t \geq 1$.

3. Если изотермы сорбции компонент сорбируемой смеси описываются уравнением Ленгмюра

$$(3.1) \quad f_k = p_k c_k \left[1 + \sum_{k=1}^n p_k c_k \right]^{-1}, \quad \varphi_k = \frac{q_k}{p_k} \left(1 - \sum_{k=1}^n q_k \right)^{-1}$$

то систему уравнений (2.3) можно записать в инвариантах Римана R_i

$$(3.2) \quad \frac{\partial R_p}{\partial t} + \lambda_k \frac{\partial R_p}{\partial z} = 0, \quad p \neq k$$

$$(3.3) \quad R_p = \lambda_p V, \quad V = 1 - \sum_{k=1}^n q_k$$

Собственные значения матрицы A_{ik} системы (2.3) найдем из характеристического уравнения

$$(3.4) \quad H(\lambda, q) = \sum_{k=1}^n q_k (V - \alpha_k p_k V^2 \lambda)^{-1} = -1$$

Так как функция $H(\lambda, q)$ монотонно возрастающая ($\partial H/\partial \lambda > 0$), имеет полюсы в точках $\lambda_i^* = (\alpha_i p_i V)^{-1}$ и $H|_{\lambda \rightarrow \pm \infty} \rightarrow 0$, $H(\lambda_1^* - 0, q) \rightarrow +\infty$,

$H(\lambda_n^* + 0, q) \rightarrow -\infty$, $H(0, q) = \sum_{k=1}^n q_k/V > 0$, то уравнение (3.4) допускает су-

ществование n различных корней. Запишем коэффициенты

$$(3.5) \quad \alpha_n p_n < \alpha_{n-1} p_{n-1} < \dots < \alpha_2 p_2 < \alpha_1 p_1$$

запишем ограничения на собственные числа

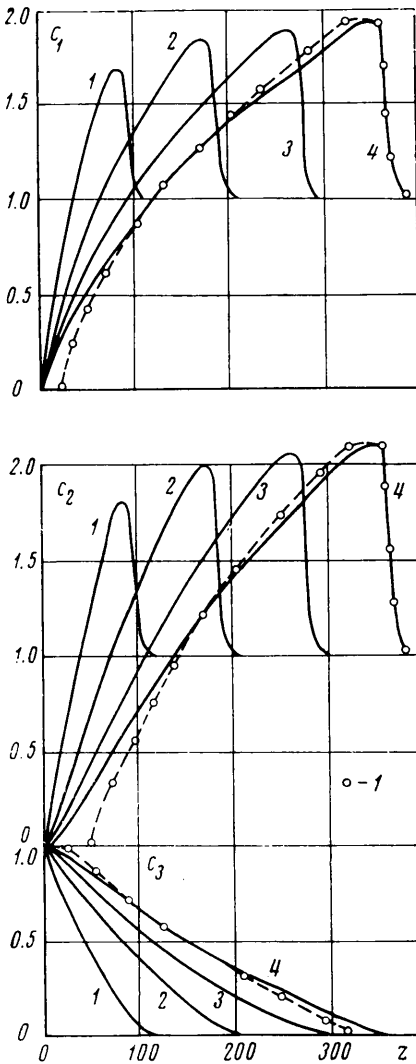
$$(3.6) \quad 0 < \lambda_1^* < \lambda_1 < \lambda_2^* < \lambda_2 < \dots < \lambda_n^* < \lambda_n < \infty$$

Из условий (3.6) следует, что система уравнений (2.3) и (3.2) для изотерм Ленгмюра допускает существование n инвариантных решений. Если $dq_m/dy \neq 0$, то инвариантные решения имеют вид

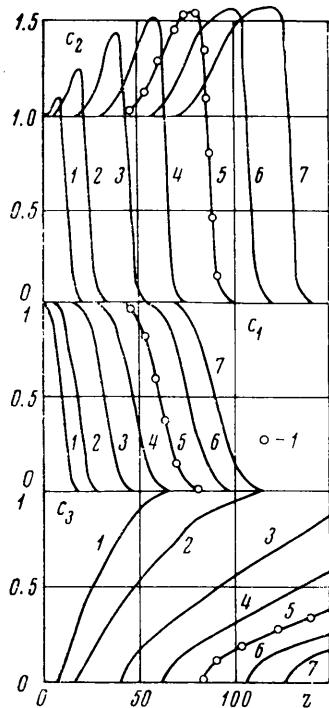
$$(3.7) \quad R_p = \text{const} \quad (p \neq k)$$

Решение (3.7) описывает распределение концентраций в расплывающейся волне p или бегущей разрывной волне p при наличии изотерм Ленгмюра.

4. Инвариантные решения являются в некотором смысле асимптотическими, так как ре-



Фиг. 1



Фиг. 2

шения системы (1.1) — (1.3) или (2.3) превращаются в инвариантные при $z, t \rightarrow \infty$. Автомоделные решения (2.19) и (3.7) получены при бесконечно большой скорости кинетки массообмена $\Omega_k \rightarrow \infty$, поэтому представляет интерес сравнить при небольших временах и конечных значениях скорости массообмена решения системы (1.1) — (1.3) и инвариантные решения (2.14), (2.19) и (3.7). Для приложений представляет интерес рассмотреть движение сорбируемой смеси в пористой среде при следующих вариантах начальных условий: пористая среда предварительно насыщена сильносорбируемыми компонентами смеси и вымывается одним слабосорбируемым компонентом

$$(4.1) \quad a_i = 1, \quad a_n = 0 \quad (i=1, 2, \dots, n-1)$$

пористая среда предварительно насыщена слабосорбируемым компонентом смеси и вымывается сильносорбируемыми компонентами

$$(4.2) \quad a_i = 0, \quad a_n = 1 \quad (i=1, 2, \dots, n-1)$$

В качестве примера по разностной схеме (1.6) для изотерм Ленгмюра на ЭВМ БЭСМ-6 была численно проинтегрирована система уравнений движения трехкомпонентной сорбируемой смеси при следующих параметрах: $\alpha_1=6$, $\alpha_2=4.17$, $\alpha_3=2$, $p_1=2$, $p_2=1.5$, $p_3=1$, $n=3$, $F_k(t)=1-a_k$, $\gamma_1=1$, $\gamma_2=1$, $\gamma_3=1$, $\alpha_{ок}=0.05$.

Результаты численного интегрирования для случая (4.1) показаны на фиг. 1 ($1-t=20$, $2-t=40$, $3-t=60$, $4-t=80$). При $y_1^0 \leq y \leq y_1$ в пористой среде для этого случая распространяется распыливающаяся возрастающая волна c_1 и спадающая волна c_3 ($y_1^0=0.33$, $y_1=0.63$). При $y_1 \leq y \leq y_2$ в пористой среде распространяются две возрастающие распыливающиеся волны c_1 и c_2 и спадающая волна c_3 ($y_2=4$). При $y_2 \leq y \leq w_1$ $c_1^{(2)}=1.88$, $c_2^{(2)}=2.06$, $c_3^{(2)}=0$, а при $y=w_1$ в пористой среде распространяются две бегущие волны c_1 и c_2 со скоростью $w_1=4.4$.

Для случая (4.2) результаты численного интегрирования показаны на фиг. 2 ($1-t=20$, $2-t=40$, $3-t=80$, $4-t=120$, $5-t=160$, $6-t=200$, $7-t=240$).

При $y=w_1$ в пористой среде в этом случае распространяются спадающая бегущая волна c_1 и возрастающая волна c_2 ($w_1=0.375$), а при $y=w_2$ — спадающая бегущая волна c_2 ($w_2=0.54$). При $y > w_2$ в пористой среде распространяется возрастающая распыливающаяся волна c_3 .

Из сравнения численных решений и инвариантных решений (2.14), (2.19), которые обозначены на фиг. 1, 2 точками 1 следует, что инвариантными решениями можно приближенно описывать распределение концентраций при движении сорбируемых смесей через пористые среды при относительно небольших временах.

Поступила 29 IV 1975

ЛИТЕРАТУРА

1. Цабек Л. К. Движение неизотермической многокомпонентной сорбируемой смеси в пористой среде. Изв. АН СССР, МЖГ, 1975, № 3.
2. Самарский А. А., Гулин А. В. Устойчивость разностных схем. М., «Наука», 1973.
3. Цабек Л. К. Интегрирование квазилинейных уравнений движения смеси через пористую недеформируемую среду. Изв. АН СССР, МЖГ, 1974, № 2.