

УДК 517.958, 517.962, 519.63

## ЧИСЛЕННЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ ДЛЯ ВТОРОЙ КРАЕВОЙ ЗАДАЧИ СИСТЕМЫ УРАВНЕНИЙ НЕРАВНОВЕСНОЙ СОРБЦИИ

Калиев О.И.

**Аннотация.** В работе рассматривается вторая краевая задача для системы уравнений, моделирующей процесс неравновесной сорбции. Сформулирована разностная аппроксимация дифференциальной задачи по неявной схеме. Решение разностной задачи строится с помощью метода прогонки. Выполнены численные эксперименты. Результаты приведены в виде графиков.

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

## NUMERICAL EXPERIMENTS FOR THE SECOND BOUNDARY VALUE PROBLEM OF A SYSTEM OF EQUATIONS OF NON-EQUILIBRIUM SORPTION

Kaliev O.I.

**Annotation.** We consider the second boundary value problem for the system of equations modeling the process of non-equilibrium sorption. A difference approximation of differential problem by the implicit scheme is formulated. The solution of the difference problem is constructed using the sweep method. Numerical calculations are performed. The results are shown in graphs.

**Keywords:** the system of equations of non-equilibrium sorption, the second boundary value problem, difference approximation, the implicit scheme, sweep method, numerical experiments.

**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).

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  $\tau$  – характерное время релаксации,  $\Gamma$  – постоянная Генри. Концентрация  $c$  вещества в растворе удовлетворяет уравнению

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

где  $D(x, t) > 0$  – коэффициент диффузии,  $\mathbf{v}(x, t)$  – вектор скорости фильтрации, которые считаются известными функциями указанных аргументов;  $\Delta$  – оператор Лапласа,  $\nabla$  – градиент,  $\mathbf{v} \cdot \nabla c$  – означает скалярное произведение векторов  $\mathbf{v}$  и  $\nabla c$ .

В [4] доказана глобальная однозначная разрешимость первой краевой задачи для системы уравнений (1)-(2). В [5, 6, 7] сформулирована разностная аппроксимация дифференциальной задачи по неявной схеме, построено решение

разностной задачи с помощью метода прогонки, приведены результаты численных экспериментов.

Рассмотрим вторую краевую задачу для системы (1)-(2). Пусть  $\Omega$  ограниченная область  $n$ -мерного пространства  $R^n$  с достаточно гладкой границей  $S = \partial\Omega$ ,  $Q_T = \Omega \times (0, T)$ ,  $T > 0$ ;  $S_T = S \times (0, T)$ . Требуется найти функции  $c(x, t)$ ,  $s(x, t)$  определенные в  $\bar{Q}_T$ , 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

$$\frac{\partial c(x, t)}{\partial n} = 0, \quad (x, t) \in S_T, \quad (5)$$

где  $n$  - внешняя нормаль к  $S = \partial\Omega$ .

В настоящей работе приведены результаты численных экспериментов, соответствующих случаю, когда в начальный момент времени, концентрация интересующего нас вещества в растворе была равна нулю, т. е. вещество находилось на сорбенте или в твердой фазе.

**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  $c(x, t)$  вещества в жидкой фазе удовлетворят начальному условию

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

и граничным условиям

$$\frac{\partial c}{\partial x}(0, t) = 0, \quad \frac{\partial c}{\partial x}(1, t) = 0, \quad t \in [0, T], \quad (8)$$

а концентрация твердой фазы  $s(x, t)$  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  $(x, t) \in (0, 1) \times (0, T)$ , удовлетворяющие начальным условиям (7), (9) и граничным условиям (8).

Основным аппаратом численного решения уравнений с частными производными являются разностные методы. Для отыскания приближенного решения сформулированной задачи рассмотрим прямоугольную сетку узлов, образуемую точками пересечения двух семейств параллельных прямых  $x = ih$ ,  $i = \overline{0, k}$ ,  $h = 1/k$ ;  $t = jq$ ,  $j = \overline{0, p}$ ,  $q = T/p$ .

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

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

Из уравнения (11) с учетом (12) получим

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

Начальные и граничные условия (7), (9), (8) для функций  $c(x, t)$ ,  $s(x, t)$  можно переписать в виде

$$c_{i,0} = c_0(ih), \quad s_{i,0} = s_0(ih), \quad c_{0,j} = c_{1,j}, \quad c_{k-1,j} = c_{k,j}, \quad i = \overline{0, k}, \quad j = \overline{0, p}.$$

**Метод прогонки для разностных уравнений.** Введем следующие обозначения:

$$c_{i,j+1} = y_i, \quad c_{i+1,j+1} = y_{i+1}, \quad c_{i-1,j+1} = y_{i-1}, \quad \left( m_{i,j} - \frac{q\Gamma}{\tau} \right) c_{i,j} + \frac{q}{\tau} s_{i,j} = \varphi_i,$$

$$-\frac{q}{h} \left( \frac{D_{i,j}}{h} + \frac{v_{i,j}}{2} \right) = a_i, \quad m_{i,j} + \frac{2D_{i,j}q}{h^2} = b_i, \quad -\frac{q}{h} \left( \frac{D_{i,j}}{h} - \frac{v_{i,j}}{2} \right) = d_i.$$

Тогда (13) можно записать в виде системы  $(k+1)$  уравнений:

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

т. е. для каждого  $j = \overline{0, p-1}$  – это линейная система с трехдиагональной матрицей относительно переменных  $y_0, y_1, \dots, y_k$ . Решение этой системы можно найти с помощью метода прогонки.

**Численные эксперименты.** После построения модели были проведены численные расчеты. В качестве иллюстрации приведем результаты численных экспериментов, соответствующих случаю, когда в начальный момент времени концентрация интересующего нас вещества в растворе равна нулю:  $c_0(x) = 0, x \in [0, 1]$ , а твердая фаза распределена на сорбенте равномерно  $s_0(x) = 1, x \in [0, 1]$ . Остальные данные взяты следующие:  $m = 0.1$  – пористость среды,  $D = 1$  – коэффициент диффузии,  $v(x, t) = x$  – скорость фильтрации,  $T = 0.15$ ,  $\Gamma = 2$  – постоянная Генри,  $h = 0.1$  – шаг по  $x$ ,  $q = 0.005$  – шаг по  $t$ ,  $\tau_1 = 0.7, \tau_2 = 0.07$  – два значения характерного времени релаксации.

Графическая визуализация расчетов для  $\tau = 0.7$  приведена на рисунках 1, 2, а для  $\tau = 0.07$  приведена на рисунках 3, 4.

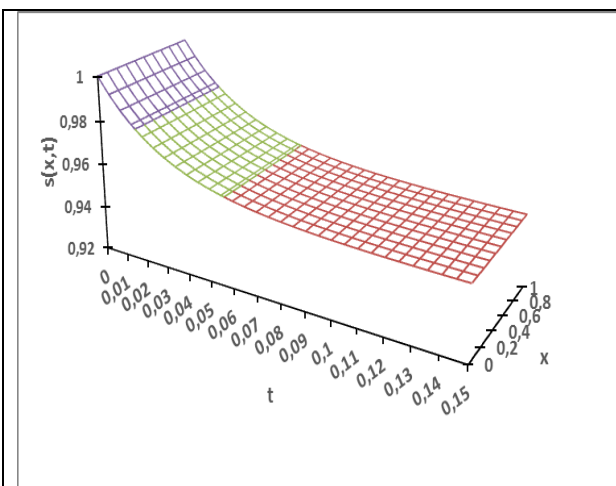


Рис. 1. Концентрация  $s(x, t)$  вещества в твердой фазе для случая  $s_0(x) = 1, \tau = 0.7$

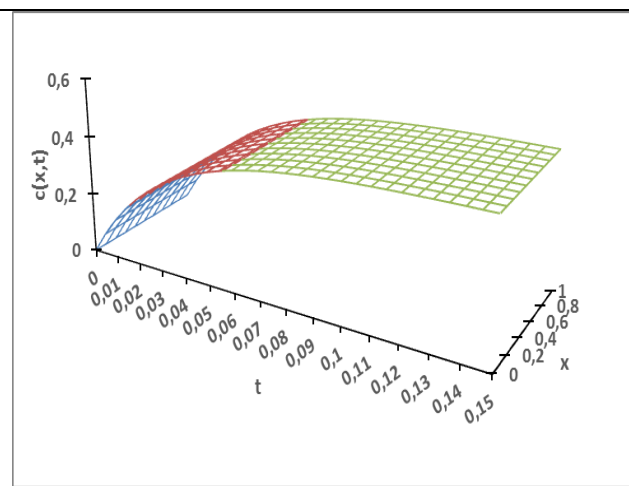


Рис. 2. Концентрация  $c(x, t)$  вещества в жидкой фазе для случая  $s_0(x) = 1, \tau = 0.7$

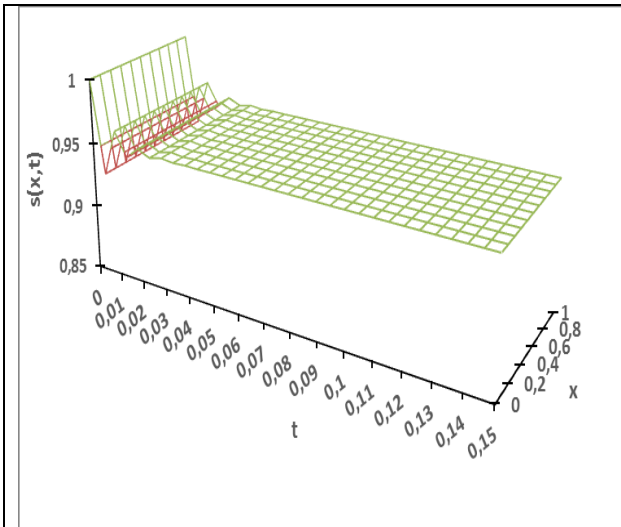


Рис. 3. Концентрация  $s(x,t)$  вещества в твердой фазе для случая  $s_0(x) = 1, \tau = 0.07$

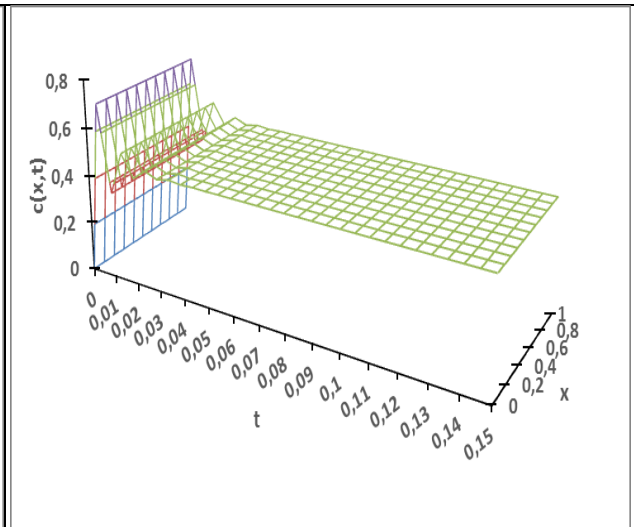


Рис. 4. Концентрация  $c(x,t)$  вещества в жидкой фазе для случая  $s_0(x) = 1, \tau = 0.07$

На рисунках 5, 6 приведены графики расчетов для случая  $s_0(x) = \sin(\pi x)$ ,  $\tau = 0.7$ , а на рисунках 7, 8, для случая  $s_0(x) = \sin(\pi x)$ ,  $\tau = 0.07$ . Остальные данные те же, что и для рисунков 1-4.

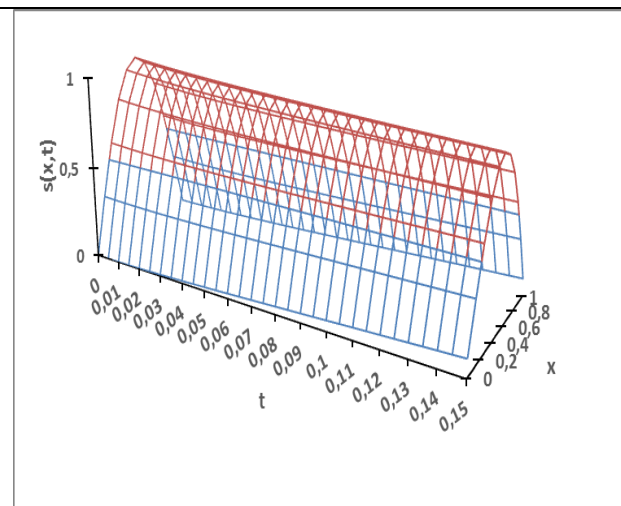


Рис. 5. Концентрация  $s(x,t)$  вещества в твердой фазе для случая  $s_0(x) = \sin \pi x, \tau = 0.7$

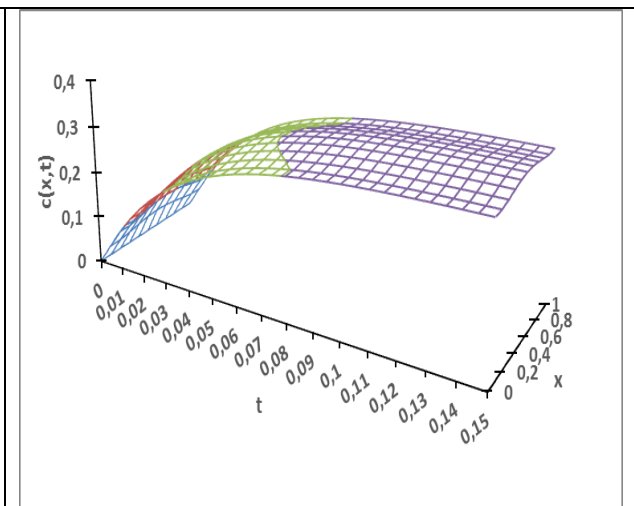


Рис. 6. Концентрация  $c(x,t)$  вещества в жидкой фазе для случая  $s_0(x) = \sin \pi x, \tau = 0.7$

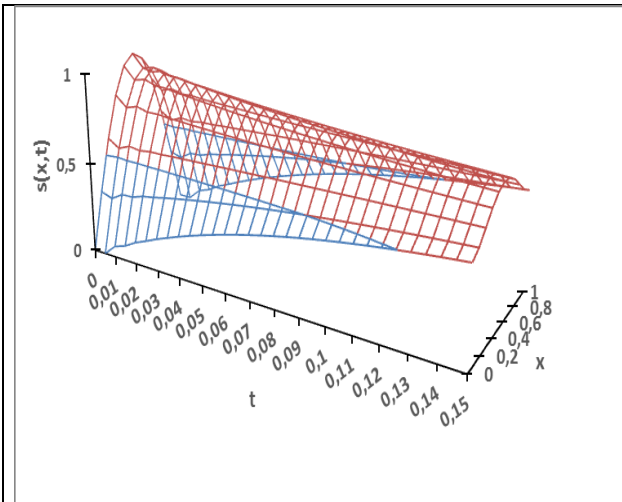


Рис. 7. Концентрация  $s(x,t)$  вещества в твердой фазе для случая  $s_0(x) = \sin \pi x$ ,  $\tau = 0.07$

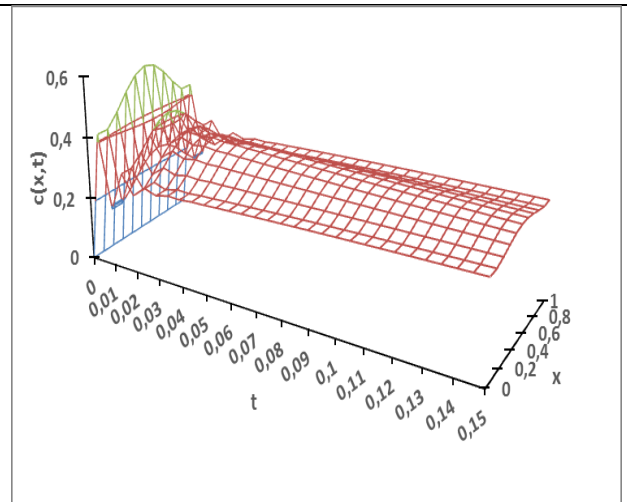


Рис. 8. Концентрация  $c(x,t)$  вещества в жидкой фазе для случая  $s_0(x) = \sin \pi x$ ,  $\tau = 0.07$

На рисунках 9, 10 приведены графики расчетов для случая  $s_0(x)=x$ ,  $\tau=0.7$ , а на рисунках 11, 12, для случая  $s_0(x)=x$ ,  $\tau=0.07$ . Остальные данные те же, что и для рисунков 1-4.

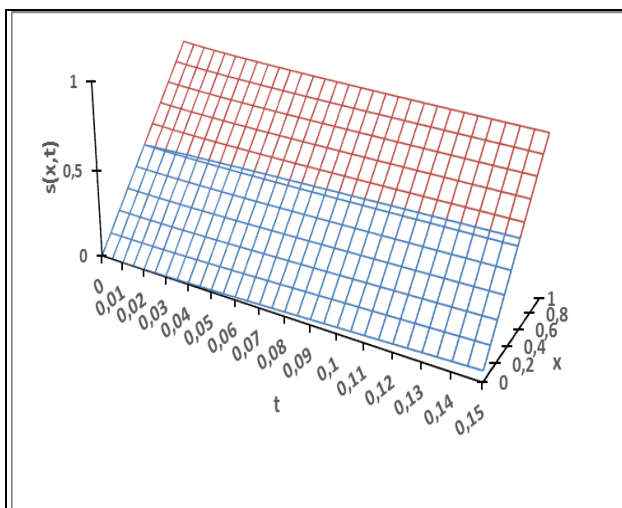


Рис. 9. Концентрация  $s(x,t)$  вещества в твердой фазе для случая  $s_0(x)=x$ ,  $\tau=0.7$

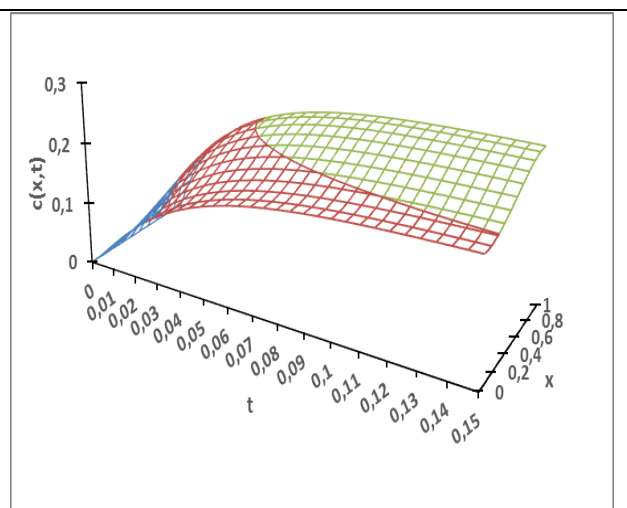


Рис. 10. Концентрация  $c(x,t)$  вещества в жидкой фазе для случая  $s_0(x)=x$ ,  $\tau=0.7$

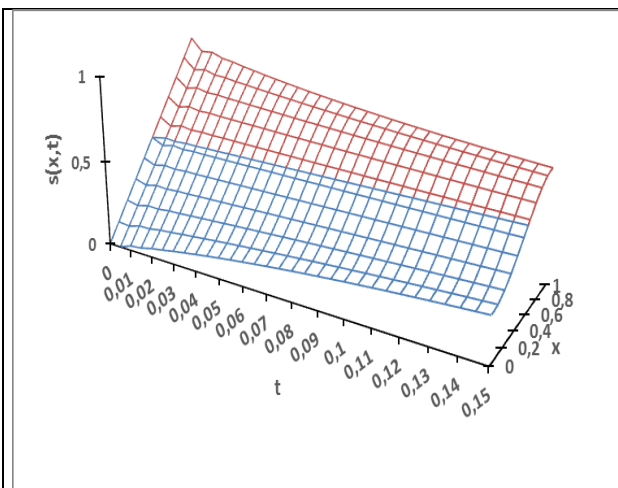


Рис. 11. Концентрация  $s(x,t)$  вещества в твердой фазе для случая  $s_0(x)=x$ ,  $\tau=0.07$

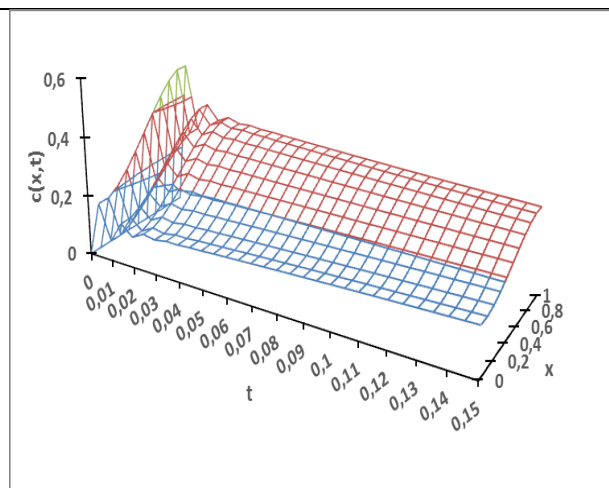


Рис. 12. Концентрация  $c(x,t)$  вещества в жидкой фазе для случая  $s_0(x)=x$ ,  $\tau=0.07$

**Закключение.** Опираясь на численные результаты и их визуализацию в виде графиков, можно сделать следующие выводы. Во всех случаях, несмотря на отсутствие интересующего нас вещества в начальный момент времени в растворе, вещество переходит в раствор из твердой фазы. При уменьшении времени релаксации  $\tau$ , 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.

#### Список литературы

1. Lapidus L., Amundson W.R. Mathematics of adsorption in beds. VI. The effect of longitudinal diffusion in ion exchange and chromatographic columns / L. Lapidus, W.R. Amundson // J. Phys. Chem. – 1952. – V. 56. – P. 984-988.
2. Coats K.H., Smith B.D. Dead and pore volume and dispersion in porous media / K.H. Coats, B.D. Smith // 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 / И.А. Калиев, Г.С. Сабитова // Сибирский журнал индустриальной математики. – 2003. – Т. VI, № 1 (13). – С. 35–39.

5. Калиев И.А., Мухамбетжанов С.Т., Сабитова Г.С. Численное моделирование процесса неравновесной сорбции / И.А. Калиев, С.Т. Мухамбетжанов, Г.С. Сабитова // Уфимский математический журнал. – 2016. – Т. 8, № 2. – С. 39-43.

6. Kaliev I.A., Mukhambetzhonov S.T., Sabitova G.S. Mathematical Modeling of Non-Equilibrium Sorption / I.A. Kaliev, S.T. Mukhambetzhonov, G.S. Sabitova // Far East Journal of Mathematical Sciences (FJMS). – 2016. – V. 99, N 12. – P. 1803-1810.

7. Калиев И.А., Мухамбетжанов С.Т., Сабитова Г.С. Математическое моделирование процесса неравновесной сорбции / И.А. Калиев, С.Т. Мухамбетжанов, Г.С. Сабитова // Прикладная физика и математика – М.: Научтехлитиздат, 2017. – № 8. – С. 44-47.

#### **Сведения об авторе**

Калиев Орал Ибрагимович – старший разработчик ПО, Компания Rock Flow Dynamics; Россия, г. Москва.

#### **About the author**

Kaliev Oral Ibragimovich – Senior Software Developer, Rock Flow Dynamics Company; Russia, Moscow.