

УДК 539.217 2:66.084

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ТЕПЛОМАССОПЕРЕНОСА В БИДИСПЕРСНОМ ПОРИСТОМ МАТЕРИАЛЕ

А. И. Мошинский

Санкт-Петербургская химико-фармацевтическая академия, 197376 Санкт-Петербург
E-mail: alex-moshinskij@yandex.ru

Рассматривается модель тепломассообменных процессов в теле с порами двух типов, описывающая начальную стадию проникновения вещества в пористую систему (или обратный процесс — выделение вещества из системы) с учетом конвективного переноса в крупных каналах. Для задачи с дополнительными условиями найдены кинетическая функция пропитки (извлечения) пористой среды и плотность потока вещества из тела.

Ключевые слова: пористое тело, массообмен, пропитка, двухкомпонентность.

Введение. Для описания ряда тепломассообменных процессов, включающих конвективное движение переносимой субстанции, обычно используется двухкомпонентная модель переноса. Данная модель может быть выведена из условий баланса тепла и массы в двух континуумах со специфическими законами переноса энергии и массы и с постулируемым законом обмена энергией и массой между компонентами (см., например, [1–7]). Более общим подходом является применение методов механики сплошных сред для установления связи между характеристиками взаимопроникающих континуумов, когда необходимые замыкающие соотношения выводятся из соответствующих задач в микромасштабах для основных переменных (см., например, [8–11]). Обычно двухкомпонентная (бидисперсная) модель переноса тепла и массы используется в тех случаях, когда результаты расчетов по более простой однокомпонентной модели существенно отличаются от экспериментальных данных вследствие сильно упрощенного представления среды в виде однородного континуума или когда двухкомпонентность лежит в основе рассматриваемого физического явления. Нередко особенности гидродинамики процессов переноса и химической кинетики удается объяснить с использованием модели тела, содержащего поры различного размера (трещиновато-пористые системы) [12, 13]. Например, при переносе массы в ряде сред появляются зоны, в которых массообмен с окружающей средой может различаться как количественно, так и качественно (каверны, карманы, застойные зоны и т. п.). Заметим, что, несмотря на разнообразие явлений переноса (промывка осадков, рассоление грунтов, теплоперенос в гетерогенной среде, фильтрация в бидисперсных или трещиновато-пористых средах, адсорбция и т. п.), предлагаемые модели имеют много общего, что позволяет использовать результаты исследования аналогичных процессов.

При решении задач данного класса обычно используются уравнения, описывающие процессы, происходящие на достаточно больших интервалах времени, тогда как поведение тепломассообменных характеристик на начальной стадии (малые времена) исследовано недостаточно. Кроме того, рассматриваемая задача, как правило, содержит несколько безразмерных параметров (критериев) и характерных времен, поэтому ее анализ является достаточно сложным. В данной работе на основе двухкомпонентной модели анализируется начальная стадия эволюции процесса и находятся аналитические решения.

Построение модели и постановка задачи. При построении моделей гидродинамики и тепломассопереноса многокомпонентных сред используется осреднение, например по объему [8] или по ансамблю конфигураций системы [10]. При любом варианте осреднения необходимо использовать процедуру замыкания полученной системы уравнений, рассматривая соответствующую задачу в микромасштабе при определенных предположениях о структуре смеси. Задачу замыкания удается решить точно [8], лишь применяя дополнительные гипотезы, причем, как правило, для достаточно разреженных систем. При использовании более простых подходов осреднение не проводится, а выбирается конкретная конфигурация системы при некоторых допущениях и гипотезах как о геометрии неоднородной смеси, так и об обменных процессах между фазами (компонентами). Тем не менее, применяя такой подход, можно получить те же уравнения, что и при использовании более сложных и математически обоснованных приемов, связанных с осреднением. В данной работе при выводе основного уравнения осреднение микроуравнений не проводится и используется ряд положений работы [14] с необходимой коррекцией.

Рассмотрим идеализированную систему каналов в полубесконечном теле, представленную на рис. 1 (заимствованном из [14]). В полупространстве $x > 0$ имеются поры двух видов: крупные, выходящие на поверхность $x = 0$, и мелкие, соединяющиеся с крупными. Поскольку в рассматриваемой модели уравнения тепло- и массопереноса имеют один и тот же вид, далее будем исследовать массоперенос. Положим, что в начальный момент времени ($t = 0$) концентрация целевого компонента во всех порах одинакова и равна C_0 . Затем “открывается” крупная пора и начинается процесс перехода целевого компонента в область $x \leq 0$, где его концентрация принимается равной нулю не только при $t = 0$, но и во все последующие моменты времени. В рамках данной модели, в отличие от модели [14], будем учитывать конвективный перенос целевого компонента в крупных каналах с постоянной скоростью. Требуется найти зависимость величины потока целевого компонента в крупной поре при $x = 0$ от времени. Согласно такому представлению пористой среды каналы необязательно являются одинаковыми и прямолинейными. Как крупные, так и мелкие поры могут быть искривлены. При этом координата x представляет собой расстояние, отсчитываемое от сечения $x = 0$ вдоль крупного канала, а координата y — расстояние, отсчитываемое от крупного канала вдоль мелкой поры.

Процесс удаления целевого компонента из пористого тела называется экстрагированием, процесс проникания — пропиткой.

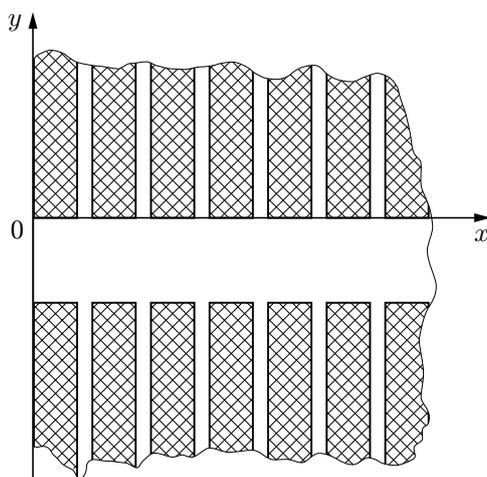


Рис. 1. Идеализированная схема пор в полубесконечном теле

Заметим, что вместо поставленной выше задачи часто удобнее решать следующую задачу. Положим, что в начальный момент времени целевой компонент, имеющий концентрацию C_0 , находится в области $x < 0$, а в области $x > 0$ отсутствует. После “открывания” крупной поры начинается процесс пропитки пористого тела. Так как уравнения переноса являются линейными и в них входят только производные от концентрации по координате и времени, легко установить связь между потоками целевого компонента в сечении $x = 0$ при пропитке и экстрагировании. Действительно, концентрации целевого компонента в крупных и мелких порах при пропитке связаны с соответствующими концентрациями при экстрагировании простыми соотношениями $C_j^n = C_0 - C_j^o$ ($j = 1, 2$). Это приводит к следующей зависимости потоков целевого компонента при $x = 0$ для задач пропитки и экстрагирования:

$$F_s^o = UC_1^o - D_1 \left. \frac{\partial C_1^o}{\partial x} \right|_{x=0} = UC_0 - \left(UC_1^n - D_1 \left. \frac{\partial C_1^n}{\partial x} \right|_{x=0} \right) = UC_0 - F_s^n. \quad (1)$$

Здесь F_s^n, F_s^o — потоки целевого компонента при пропитке и экстрагировании соответственно; индекс 1 соответствует крупным (транспортным) каналам, индекс 2 — мелким порам; U — скорость конвективного переноса целевого компонента. В дальнейшем верхний индекс n опускается.

Процесс переноса целевого компонента в крупной поре будем описывать задачей

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + U \frac{\partial}{\partial x} - D_1 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) C_1 = -q(x, t); \quad (2)$$

$$\begin{aligned} C_1 &= C_1(x, t), & x &\in (0, \infty), & t &\in (0, \infty), \\ C_1(0, t) &= C_0 = \text{const}, & C_1(\infty, t) &< \infty, & C_1(x, 0) &= 0. \end{aligned} \quad (3)$$

Отметим что, по крайней мере, в крупных порах коэффициент переноса обязательно определяется молекулярной диффузией (см., например, [15]). Полагая протяженность (длину) транспортной поры по оси x бесконечной ($l_1 \rightarrow \infty$), получаем соотношение $T_1 = l_1^2/D_1 \rightarrow \infty$.

В уравнение (1) помимо обычных дифференциальных слагаемых включен член q , описывающий отток вещества из крупных пор в мелкие. В общем случае функциональная связь величины q с другими параметрами задачи зависит от процессов массопереноса во всей системе взаимосвязанных каналов в пористом теле и вряд ли может быть определена точно. Поэтому обычно при описании процесса массопереноса в гетерогенной среде принимаются некоторые гипотезы. В данной работе сформулирована зависимость для q , описывающая этот процесс при достаточно малых значениях времени. Запишем уравнение переноса в мелкой поре с соответствующими дополнительными условиями (см. [14]):

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - D_2 \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) C_2 = 0, \quad y \in (0, \infty), \quad t \in (0, \infty), \quad (4)$$

$$C_2 = C_2(y, t), \quad C_2(0, t) = C_1(x, t), \quad C_2(\infty, t) < \infty, \quad C_2(y, 0) = 0.$$

Ясно, что в окрестности стыка каналов диффузионные уравнения нельзя считать одномерными. Принятие одномерности — допущение, упрощающее постановку задачи. Подобные упрощения обосновываются для некоторых гетерогенных сред при использовании метода осреднения по ансамблю конфигураций системы, например в тех случаях, когда диффузионные процессы в сплошной среде происходят значительно быстрее, чем в дисперсной среде [11]. В рассматриваемом случае это имеет место при массообмене в области контакта большого канала с мелкими.

Малые значения времени. Под малыми значениями времени будем понимать интервалы времени, удовлетворяющие неравенству $t \ll T_2$, где $T_2 = l_2^2/D_2$ — характерное

время диффузионного распространения целевого компонента в мелких каналах. В дальнейшем при выводе уравнений полагается, что размер внутренней (мелкой) поры l_2 имеет бесконечное значение ($l_2 \rightarrow \infty$). Таким образом, задача рассматривается в приближении полубесконечного тела по обоим пространственным координатам. В этом случае для величины перетока q в (2) имеет место выражение [14]

$$q = -4\varepsilon d^{-1} D_2 \left. \frac{\partial C_2}{\partial y} \right|_{y=0} = 4\varepsilon d^{-1} D_2^{1/2} L^{1/2} C_1(x, t),$$

следующее из (4), при сформулированных дополнительных условиях. Здесь использовано следующее определение оператора дробного дифференцирования по времени половинного порядка функции f :

$$L^{1/2} f(t) = \frac{d^{1/2} f(t)}{dt^{1/2}} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{d}{dt} \int_0^t \frac{f(\tau) d\tau}{\sqrt{t-\tau}}.$$

В результате задача определения концентрации в пористом теле сводится к одному уравнению

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + U \frac{\partial}{\partial x} + b \frac{\partial^{1/2}}{\partial t^{1/2}} - D_1 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right) C_1 = 0, \quad C_1 = C_1(x, t), \quad (5)$$

где $b = 4\varepsilon d^{-1} D_2^{1/2}$; d — диаметр крупного канала; ε — доля площади поперечного сечения мелких пор на границе с крупными, по которой может осуществляться массообмен (на границе крупного канала имеются не только участки входа в мелкие каналы, но и твердая (непроницаемая для вещества) часть границы, поэтому ε есть отношение жидкой части площади границы крупной поры к общей площади границы включая непроницаемую для вещества твердую часть). Данное выражение определяет характерное время $T_3 = b^{-2}$ — время массообмена между большими и малыми каналами. В зависимости от соотношения времен T_3 и T_2 могут быть выполнены определенные упрощения задачи. Наибольший интерес представляет случай $T_2 \gg T_3$. Отсюда находим $d \ll 4\varepsilon l_2$.

В уравнении (5) четыре слагаемых. В зависимости от ситуации в различных пространственно-временных областях существенными могут быть только некоторые из них. Наиболее полно исследован случай, когда можно пренебречь третьим слагаемым (формально $b \rightarrow 0$). В случае когда можно пренебречь вторым или четвертым слагаемым, получаем задачи, требующие специального рассмотрения. Ниже исследуется задача при $D_1 \rightarrow 0$ в уравнении (5). Основное внимание уделяется случаю, когда необходимо учитывать все слагаемые в этом уравнении.

Анализ задачи. Уравнение (5) и дополнительные условия (3) целесообразно записать в безразмерных переменных:

$$\left(\frac{\partial}{\partial \tau} + 2 \frac{\partial}{\partial z} + 2\gamma \frac{\partial^{1/2}}{\partial \tau^{1/2}} - \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) G = 0, \quad (6)$$

$$G(z, \tau) = C_1/C_0, \quad z \in (0, \infty), \quad \tau \in (0, \infty);$$

$$G(0, \tau) = 1, \quad G(\infty, \tau) = 0, \quad G(z, 0) = 0. \quad (7)$$

Здесь $\tau = t/T_4$; $z = x/l_4$; $T_4 = 4D_1/U^2$; $l_4 = 2D_1/U$; $\gamma = bD_1^{1/2}/U$.

Отметим, что уравнения, подобные (5), (6), по форме близки к уравнениям, предложенным, например, в работах [11, 13, 15, 16], и являются их частными случаями.

Задачу (6), (7) удобно решать операционным методом по переменной τ . Преобразованная задача имеет вид

$$\left(p + 2\gamma p^{1/2} + 2 \frac{d}{dz} - \frac{d^2}{dz^2} \right) G^* = 0, \quad G^*(0, p) = \frac{1}{p}, \quad G^*(\infty, p) = 0, \quad (8)$$

где звездочкой отмечены преобразованные по Лапласу величины; p — переменная преобразования. Решение задачи (8) записывается в виде

$$G^*(z, p) = \exp \{z[1 - (p + 2\gamma p^{1/2} + 1)^{1/2}]\}/p, \tag{9}$$

где для “внутреннего” и “внешнего” квадратного корня выбраны главные ветви, в частности, при $p = 1$ и $\gamma = 1$ имеем $\sqrt{1 + 2\sqrt{1} + 1} = 2$. Представляет интерес определение потока целевого компонента на границе пористого тела, т. е. величина $F_s = 2G - (\partial G/\partial z)|_{z=0}$. Для этой переменной из (9) находим

$$F_s^*(p) = (1 + \sqrt{p + 2\gamma\sqrt{p} + 1})/p. \tag{10}$$

На практике непосредственное измерение мгновенного значения потока $F_s(\tau)$ существенно затруднено. Непосредственно регистрируется только количество вещества, прошедшего через границу $x = 0$ к моменту времени t :

$$Q_s(\tau) = \int_0^\tau F_s(t) dt.$$

Согласно (10) имеем

$$Q_s^*(p) = (1 + \sqrt{p + 2\gamma\sqrt{p} + 1})/p^2. \tag{11}$$

Для того чтобы разложить функцию $Q_s^*(p)$ в ряд по степеням $p^{-1/2}$, используем формулу для производящей функции полиномов Лежандра [17, 18]

$$\frac{1}{\sqrt{1 - 2xt + t^2}} = \sum_{n=0}^\infty P_n(x)t^n, \tag{12}$$

где $P_n(x)$ — полиномы Лежандра. Значения данных полиномов можно рассчитать по ряду формул [17, 18]. Заметим, что радиус сходимости степенного по t ряда (12) зависит от x при $|x| \geq 1$. Выражение (11) разобьем на два слагаемых, после чего числитель и знаменатель второго слагаемого умножим на $\sqrt{p + 2\gamma\sqrt{p} + 1}$. Учитывая выражение (12) и используя разложение в ряд по степеням $p^{-1/2}$, находим

$$Q_s^*(p) = \frac{1}{p^2} + \frac{p + 2\gamma\sqrt{p} + 1}{p^2\sqrt{p}} \sum_{n=0}^\infty \frac{(-1)^n P_n(\gamma)}{p^{n/2}}. \tag{13}$$

Далее используем соответствие образа p^{-n} и оригинала $\tau^{n-1}/\Gamma(n)$ ($n > 0$; $\Gamma(z)$ — гамма-функция Эйлера) [17, 18]. В результате из (13) получаем решение, применимое для вычислений при достаточно малых значениях времени:

$$Q_s(\tau) = \tau + \sum_{k=0}^\infty (-1)^k P_k(\gamma) \tau^{k/2} \left[\frac{\tau\sqrt{\tau}}{\Gamma(k/2 + 5/2)} + \frac{2\gamma\tau}{\Gamma(k/2 + 2)} + \frac{\sqrt{\tau}}{\Gamma(k/2 + 3/2)} \right]. \tag{14}$$

Ряд (14) имеет бесконечный радиус сходимости, поэтому в практически значимом диапазоне значений времени при $\gamma < 1$ для расчета требуется небольшое число его слагаемых. При $\gamma > 1$ возникают сложности расчета, что обусловлено асимптотическим поведением при $k \rightarrow \infty$ полиномов Лежандра с аргументом, превышающим единицу. С помощью известных формул [17, 18] все входящие в ряд (14) гамма-функции могут быть выражены через факториалы определенных целых чисел. Первое слагаемое в (14) описывает конвективный приток целевого компонента в пористое тело. При малых значениях времени

наиболее существенным является третье слагаемое в квадратных скобках суммы (14) при $k = 0$, соответствующее диффузионной пропитке (без мелких каналов). Физический смысл этого доминирующего при $\tau \rightarrow 0$ слагаемого — отсутствие влияния внутренних пор на процесс пропитки при малых значениях времени. Следующие слагаемые в (14) вносят поправки в массоперенос, учитывающие влияние внутренних каналов и конвективного переноса целевого компонента. Отметим также, что в результате несложных преобразований разложения (13) решение задачи определения потока целевого компонента на границе области при заданной граничной функции общего вида можно записать через дробные производные этой функции.

Из (14) легко получить формулу для величины Q_s при экстрагировании. С учетом связи переменных F_s и Q_s : $dQ_s/d\tau = F_s$ и формулы (1) в безразмерных переменных легко заметить, что в случае экстрагирования в выражении для Q_s (14) первое слагаемое такое же, как в случае пропитки, а перед суммой стоит знак “минус”.

При больших значениях времени ($t \gg T_4$, $T_4 \ll T_2$) для расчетов удобно получить асимптотическое (при $t \rightarrow \infty$) представление решения, разложив выражение (11) в ряд Тейлора по степеням $p^{1/2}$ и затем почленно обратив полученное выражение. При этом используем формулу соответствия изображения p^{-n} и оригинала $\tau^{n-1}/\Gamma(n)$ преобразования Лапласа при $n < 0$, несмотря на то что в рамках классического математического анализа она обоснована при $n > 0$. Проведенные преобразования приводят к верному асимптотическому разложению, поскольку алгоритм его поиска удовлетворяет условиям соответствующей теоремы операционного исчисления [18, 19]. В результате находим

$$Q_s(\tau) = 2\tau + \frac{1 - \gamma^2}{2} - \frac{1}{\pi\sqrt{\tau}} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{\tau^k} P_{2k+1}(\gamma)\Gamma(k - 1/2)(k - 1/2 - \tau) - \\ - \frac{2\gamma\sqrt{\tau}}{\pi} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{\tau^k} P_{2k}(\gamma)\Gamma(k - 1/2), \quad \tau \rightarrow \infty. \quad (15)$$

Заметим, что функция $\Gamma(n - 1/2)$ выражается через факториалы [17, 18].

Выражений (14) и (15) достаточно для получения полного описания кинетической кривой пропитки. Однако следует отметить, что при больших значениях параметра γ (по-видимому, даже при $\gamma \geq 2$) целесообразно иначе масштабировать переменные задачи и использовать метод возмущений [20], приняв в качестве главного приближения решение задачи пропитки полубесконечного тела в отсутствие конвективного переноса. Дело в том, что при $\gamma \geq 2$ значения полиномов Лежандра $P_n(\gamma)$ в формуле (14) становятся весьма значительными при больших n . Это затрудняет использование решения в виде ряда (14) при таких значениях γ . По-видимому, в этом случае проявляется эффект конечного числа значащих цифр при проведении вычислений на компьютере, аналогичный описанному в работе [21] при решении задачи об отошедшей от тела ударной волне. В процессе вычисления слагаемых ряда возникают числа, на много порядков превышающие сумму ряда, в результате чего при конечном числе значащих цифр ошибки округления существенно превышают значение искомой суммы [21. С. 464].

При $\gamma = 1$ обращение зависимости (11) существенно упрощается:

$$Q_s(\tau) = 2[\tau + (\tau/\pi)^{1/2}]. \quad (16)$$

Из формулы (16) следует, что конвективное движение приводит к линейному по времени увеличению массы целевого компонента при $\tau \rightarrow \infty$. В соответствии со сказанным выше при малых значениях времени преобладает диффузионная пропитка (без учета мелких каналов).

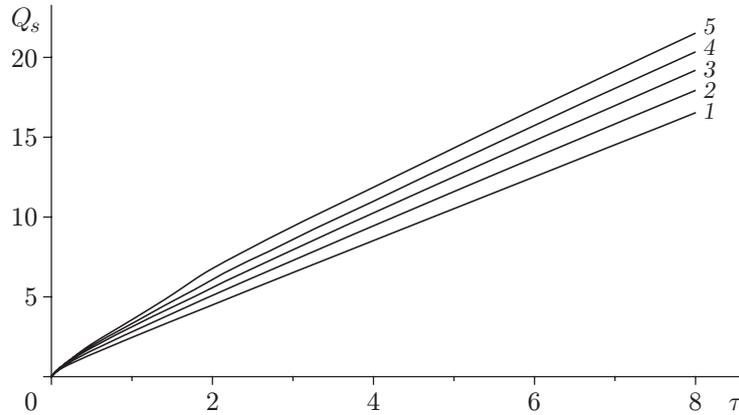


Рис. 2. Зависимость $Q_s(\tau)$ при различных значениях γ :
 1 — $\gamma = 0,01$; 2 — $\gamma = 0,5$; 3 — $\gamma = 1,0$; 4 — $\gamma = 1,5$; 5 — $\gamma = 2,0$

На рис. 2 представлена зависимость $Q_s(\tau)$ при различных значениях параметра γ . Для контроля расчетов по формулам (14), (15) использовалась зависимость (16).

Из формулы (14) следует, что можно получить единый ряд по степеням τ , содержащий в качестве множителей некоторые другие полиномы — линейные комбинации полиномов Лежандра. Запишем соотношение (14) в более компактном виде.

Проинтегрировав по x выражение (12) для производящей функции полиномов Лежандра в пределах от 1 до z , получим производящую функцию для полиномов $\Phi_k(z)$

$$\frac{1}{t} - 1 - \frac{\sqrt{1 - 2zt + t^2}}{t} = \sum_{k=0}^{\infty} \Phi_k(z)t^k, \quad \Phi_k(z) = \int_1^z P_k(x) dx. \tag{17}$$

Эти полиномы можно представить через полиномы $P_k(z)$ не только в виде интеграла в (17), но и в виде алгебраической формулы

$$\Phi_k(z) = [P_{k+1}(z) - P_{k-1}(z)] / (2k + 1), \quad k = 0, 1, 2, \dots, \tag{18}$$

которая следует из рекуррентной зависимости [17, 18], связывающей полиномы Лежандра с их производными. В соответствии со свойствами сферических функций в соотношении (18) принято $P_{-1}(z) = P_1(z) = z$ [17]. Используя рекуррентные формулы для полиномов Лежандра, можно получить соответствующие формулы для полиномов $\Phi_k(z)$, в частности

$$\begin{aligned} \Phi_0(z) &= z - 1, & \Phi_1(z) &= (z^2 - 1)/2, & \Phi_2(z) &= (z^3 - z)/2, \\ (k + 2)\Phi_{k+1}(z) + (k - 1)\Phi_{k-1}(z) &= (2k + 1)z\Phi_k(z), & k &= 1, 2, \dots \end{aligned}$$

Функции $\Phi_k(z)$ введены таким образом, чтобы выполнялось равенство $\Phi_k(1) = 0$.

Используя полученные выражения, соотношения (14) можно записать следующим образом:

$$Q_s(\tau) = 2\left(\tau + \sqrt{\frac{\tau}{\pi}}\right) + \tau \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k \Phi_k(\gamma) \tau^{k/2}}{\Gamma(k/2 + 2)}. \tag{19}$$

В силу указанных выше свойств полиномов $\Phi_k(z)$ ($\Phi_k(1) = 0$) при $\gamma = 1$ формула (19) переходит в зависимость (16). Аналогично в терминах полиномов $\Phi_k(z)$ в более компактном виде можно записать асимптотическое разложение (15):

$$Q_s(\tau) = 2\left(\tau + \sqrt{\frac{\tau}{\pi}}\right) + \frac{1 - \gamma^2}{2} - \frac{\sqrt{\tau}}{\pi} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{\tau^k} \Phi_{2k}(\gamma) \Gamma(k - 1/2), \quad \tau \rightarrow \infty. \tag{20}$$

Примеры предельных случаев. Кривые на рис. 2 качественно подобны и в рассматриваемом диапазоне значений переменных достаточно близки друг к другу. Зависимости $Q_s(\tau)$, соответствующие этим кривым, слабо зависят от параметра γ в диапазоне $\gamma \in (0, 2]$. Кроме того, следует отметить, что при $\gamma = 1$ решение значительно упрощается. Отсюда следует целесообразность исследования решения задачи в окрестности точки $\gamma = 1$ с помощью метода малого параметра. Это означает, что полученное решение задачи пропитки следует разложить по степеням параметра $\gamma - 1$. Заметим, что, поскольку многие выведенные формулы содержат полиномы ($P_k(z)$ или $\Phi_k(z)$), разложения представляют собой конечные суммы. В результате расчетов получены формулы

$$\Phi_k^{(n+1)}(1) = P_k^{(n)}(1) = \frac{1}{2^n n!} \frac{(k+n)!}{(k-n)!}, \quad n \leq k,$$

где верхний индекс в скобках означает порядок производной соответствующей величины по параметру γ . После несложных преобразований решение задачи (19) можно представить в виде

$$Q_s(\tau) = 2\left(\tau + \sqrt{\frac{\tau}{\pi}}\right) + \tau(\gamma - 1) \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!} \frac{(\gamma - 1)^k \tau^{k/2}}{2^k} \Omega_k(\tau),$$

где

$$\Omega_k(\tau) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n \tau^{n/2}}{\Gamma(n/2 + k/2 + 2)} \frac{(2k+n)!}{n!}.$$

Ограничимся поправкой первого порядка по параметру $\gamma - 1$. Для этого просуммируем ряд, определяющий функцию $\Omega_0(\tau)$. В результате получаем соотношение

$$Q_s(\tau) = 2[\tau + \gamma(\tau/\pi)^{1/2}] + (1 - \gamma)[1 - \exp(\tau) \operatorname{erfc}(\tau^{1/2})], \quad (21)$$

где $\operatorname{erfc}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_z^{\infty} \exp(-t^2) dt$ — дополнительный интеграл вероятности ($\operatorname{erfc}(\tau) = 1 - \operatorname{erf}(\tau)$).

Заметим, что различные представления для функций $\Omega_k(\tau)$ (в частности, для $\Omega_0(\tau)$) можно получить путем разложения в ряд по степеням $\gamma - 1$ преобразованной по Лапласу функции $Q_s^*(p)$ (20) с последующим обращением полученных коэффициентов разложения (функций параметра p).

Расчеты по формуле (21) показывают, что данная зависимость удовлетворительно описывает точное решение, представленное на рис. 2 в исследуемом диапазоне значений $\gamma \in (0, 2]$.

Рассмотрим предельный вариант $\gamma \rightarrow 0$, который, так же как и случай $\gamma \rightarrow 1$, легко анализировать на основе полученных в данной работе зависимостей. В частности, достаточно просто вывести двучленное разложение для плотности потока $F_s(\tau)$ и величины $Q_s(\tau)$:

$$F_s(\tau) = 1 + \frac{\exp(-\tau)}{\sqrt{\pi\tau}} + \operatorname{erf}(\sqrt{\tau}) + \gamma \exp\left(\frac{-\tau}{2}\right) I_0\left(\frac{\tau}{2}\right) + O(\gamma^2),$$

$$Q_s(\tau) = \tau + \sqrt{\frac{\tau}{\pi}} \exp(-\tau) + \left(\frac{1}{2} + \tau\right) \operatorname{erf}(\sqrt{\tau}) + 2\gamma \int_0^{\tau/2} \exp(-\xi) I_0(\xi) d\xi + O(\gamma^2) \quad (22)$$

($I_0(z)$ — функция Бесселя мнимого аргумента [17, 18]). Поправки в формулах (22) равномерно пригодны во всем диапазоне $\tau \in (0, \infty)$, хотя, как отмечено выше, сама модель применима в ограниченном интервале времени.

Обобщение полученного решения. С учетом полученных результатов решение общей задачи определения количества целевого компонента, поступившего в пористое тело, при граничном условии $G(0, \tau) = f(\tau)$ можно представить в виде интеграла свертки функций

$$Q_s(\tau) = \int_0^\tau f(\tau - \xi) F_s(\xi) d\xi, \tag{23}$$

где $F_s(\tau)$ — плотность потока при единичном (см. (7)) граничном условии в случае $z = 0$:

$$F_s(\tau) = 2 + \frac{1}{\sqrt{\pi\tau}} + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k \Phi_k(\gamma) \tau^{k/2}}{\Gamma(k/2 + 1)}.$$

Величина F_s получена почленным дифференцированием ряда (19). При небольших значениях τ интеграл в (23) легко рассчитать численно, например с помощью формулы трапеций. В случае $\tau \rightarrow 0$ особенность функции $F_s(\tau)$ легко устраняется при расчете интеграла в (23) с помощью замены переменной интегрирования $\xi = x^2$. При расчете может оказаться полезным асимптотическое (при $\tau \rightarrow \infty$) разложение функции $F_s(\tau)$, которое можно получить дифференцированием асимптотического ряда (20) или с помощью зависимости (10):

$$F_s(\tau) = 2 + \frac{1}{\sqrt{\pi\tau}} + \frac{1}{\pi\sqrt{\tau}} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{\tau^k} \Phi_{2k}(\gamma) \Gamma(k + 1/2), \quad \tau \rightarrow \infty.$$

Распределение вещества по крупным и мелким каналам. Представляет интерес исследование распределения целевого компонента по каналам различного типа. Общее количество целевого компонента в большом канале можно определить, проинтегрировав выражение (9):

$$Q_1^*(p) = \int_0^\infty \frac{\exp [z(1 - \sqrt{p + 2\gamma\sqrt{p} + 1})]}{p} dz = \frac{1 + \sqrt{p + 2\gamma\sqrt{p} + 1}}{p(p + 2\gamma\sqrt{p})}.$$

Из закона сохранения вещества находим количество целевого компонента в мелких порах:

$$Q_2^*(p) = Q_s^*(p) - Q_1^*(p) = 2\gamma/[p^{3/2}(\sqrt{p + 2\gamma\sqrt{p} + 1} - 1)].$$

Аналогично зависимостям (14), (15) можно получить расчетные формулы для $Q_1(\tau)$ и $Q_2(\tau)$:

$$Q_1(\tau) = \tau \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k (2\gamma)^k}{\Gamma(2 + k/2)} \tau^{k/2} + \sqrt{\tau} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k P_k(\gamma)}{\Gamma(k/2 + 3/2)} \tau^{k/2} + \tau^{3/2} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k R_k(\gamma)}{\Gamma(k/2 + 5/2)} \tau^{k/2},$$

$$R_n(x) = \sum_{k=0}^n P_k(x) (2x)^{k-n},$$

$$Q_1(\tau) \simeq 1 - \frac{1}{(2\gamma)^2} - \frac{1}{\pi\sqrt{\tau}} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{\tau^k} P_{2k+1}(\gamma) \Gamma(k + 1/2) - \frac{\sqrt{\tau}}{2\gamma\pi} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{\tau^k} \frac{\Gamma(k - 1/2)}{(2\gamma)^{2k}} - \frac{\sqrt{\tau}}{2\gamma} \left(\gamma + \frac{1}{2\gamma} + \frac{1}{\pi} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{\tau^k} S_{2k}(\gamma) \Gamma(k - 1/2) \right), \quad S_n(x) = \sum_{k=0}^n \frac{P_k(x)}{(2x)^{k-n}}, \quad \tau \rightarrow \infty,$$

$$Q_2(\tau) = 2\gamma\tau \left(\sqrt{\tau} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k (2\gamma)^k}{\Gamma(5/2 + k/2)} \tau^{k/2} + \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k P_k(\gamma)}{\Gamma(k/2 + 2)} \tau^{k/2} + \tau \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k R_k(\gamma)}{\Gamma(k/2 + 3)} \tau^{k/2} \right),$$

$$Q_2(\tau) \simeq 2\tau - \frac{\gamma^2}{2} + \frac{1}{2\gamma^2} - \frac{2\gamma\sqrt{\tau}}{\pi} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{\tau^k} P_{2k}(\gamma) \Gamma(k - 1/2) + \frac{\sqrt{\tau}}{2\gamma\pi} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{\tau^k} \frac{\Gamma(k - 1/2)}{(2\gamma)^{2k}} +$$

$$+ \frac{\sqrt{\tau}}{\pi} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{\tau^k} S_{2k+1}(\gamma) \Gamma(k - 1/2), \quad \tau \rightarrow \infty.$$

На практике, в случае когда перемещение жидкой фазы в пористом теле обусловлено импульсом давления на его границе (например, при схлопывании газового пузырька), при кратковременном импульсе давления предлагаемую модель с $U \neq 0$ следует применять в ограниченном интервале времени $t < T_5$ (T_5 — длительность импульса). Затем необходимо перейти к более простому уравнению (5) с $U = 0$. В этом случае в начале процесса имеет место ненулевое распределение начальной концентрации целевого компонента по объему пор. По-видимому, на практике представляет интерес случай, когда в результате воздействия импульса давления в мелких порах еще не произошло значительного накопления целевого компонента, в то время как в проточном канале его количество необходимо учитывать. В этом случае, как правило, рассматривается начальная стадия процесса пропитки, описываемая моделью (6), (7), т. е. соотношение (14) или (19).

В заключение рассмотрим случай $D_1 \rightarrow 0$ в уравнении (5). При этом в качестве масштабов времени и длины целесообразно принять $T_3 = b^{-2}$ и $l_3 = U/b^2$. Введя число Пекле $Pe = Ul_3/D_1 = U^2/(D_1 b^2)$, легко заметить, что случай $D_1 \rightarrow 0$ соответствует предельному варианту $Pe \rightarrow \infty$ и масштабам времени и длины $T_4/T_3 = O(\gamma^2)$, $l_4/l_3 = O(\gamma^2)$ ($\gamma = bD_1^{1/2}/U \rightarrow 0$), более крупным, чем в уравнении (6).

В безразмерных координатах $\zeta = t/T_3$, $\xi = x/l_3$ при $D_1 = 0$ уравнение (5) записывается в виде

$$\left(\frac{\partial}{\partial \zeta} + \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial^{1/2}}{\partial \zeta^{1/2}} \right) G = 0, \quad G = G(\xi, \zeta), \quad (24)$$

при дополнительных условиях — в виде

$$G(0, \zeta) = 1, \quad G(\xi, 0) = 0. \quad (25)$$

В данной задаче протяженность области вдоль оси x необязательно бесконечна, т. е. l_1 можно считать конечной величиной.

Решение задачи (24), (25) легко находится операционным методом и имеет вид

$$G(\xi, \zeta) = \operatorname{erfc} \left(\frac{\xi}{2\sqrt{\zeta - \xi}} \right) H(\zeta - \xi),$$

где $H(z)$ — функция Хевисайда ($H(z) = 1$ при $z > 0$; $H(z) = 0$ при $z < 0$). Следует отметить, что полученное решение имеет волновой характер. Результаты решения данной задачи могут быть использованы при решении проблемы удаления примесей из пористого тела при его промывке (например, в случае замены искомым функций, описанных в соотношении (1)).

Заключение. Для описания начальной стадии процесса пропитки пористой системы предложено уравнение (5), из которого получены аналитические выражения для определения количества вещества, проникшего в пористое тело, — зависимости (14), (19) и (15), (20), применимые для расчета при малых и больших значениях времени соответственно. Рассмотрен один из возможных предельных вариантов модели, предложенных в данной работе.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Развитие** исследований по теории фильтрации в СССР (1917–1967) / Под ред. П. Я. Полубариновой-Кочиной и др. М.: Наука, 1969.
2. **Tondeur D.** Le lavage des gateaux de filtration // *Chimie industrie. Genie chimique.* 1970. V. 103, N 21. P. 2799–2808.
3. **Кафаров В. В.** Основы массопередачи. М.: Высш. шк., 1979.
4. **Пеньковский В. И., Постнов В. А.** К задаче о промывке засоленной почвы // *ПМТФ.* 1968. № 2. С. 158–160.
5. **Пеньковский В. И.** Две модельные задачи о движении агрессивной жидкости в пористой среде // *ПМТФ.* 1968. № 6. С. 155–158.
6. **Гамаюнов Н. И., Шульгин Д. Ф.** Задача о прогнозе солевого режима орошаемых земель при наличии дренажа // *ПМТФ.* 1972. № 6. С. 113–117.
7. **Пеньковский В. И.** К вопросу о математическом моделировании процесса рассоления грунтов // *ПМТФ.* 1975. № 5. С. 186–191.
8. **Нигматулин Р. И.** Основы механики гетерогенных сред. М.: Наука, 1978.
9. **Буевич Ю. А., Корнеев Ю. А.** О переносе тепла и массы в дисперсной среде // *ПМТФ.* 1974. № 4. С. 79–87.
10. **Буевич Ю. А., Корнеев Ю. А., Щелчкова И. Н.** О переносе тепла и массы в дисперсном потоке // *Инж.-физ. журн.* 1976. Т. 30, № 6. С. 979–985.
11. **Буевич Ю. А.** К теории переноса в гетерогенных средах // *Инж.-физ. журн.* 1988. Т. 54, № 5. С. 770–779.
12. **Баренблатт Г. И.** Теория нестационарной фильтрации жидкости и газа / Г. И. Баренблатт, В. М. Ентов, В. М. Рыжик. М.: Недра, 1972.
13. **Ромм Е. С.** Структурные модели порового пространства горных пород. Л.: Недра. Ленингр. отд-ние, 1985.
14. **Бабенко Ю. И., Иванов Е. В.** Математическая модель экстрагирования из тела с бидисперсной пористой структурой // *Теорет. основы хим. технологии.* 2005. Т. 39, № 6. С. 644–650.
15. **Мошинский А. И.** О дисперсии тепла в потоке жидкости при теплообмене со стенкой // *Теплофизика высоких температур.* 1992. Т. 30, № 6. С. 1118–1123.
16. **Кокотов Ю. А.** Теоретические основы ионного обмена. Сложные ионообменные системы / Ю. А. Кокотов, П. П. Золотарев, Г. Е. Елькин. Л.: Химия. Ленингр. отд-ние, 1986.
17. **Лебедев Н. Н.** Специальные функции и их приложения. М.: Физматгиз, 1963.
18. **Лаврентьев М. А.** Методы теории функций комплексного переменного / М. А. Лаврентьев, Б. В. Шабат. М.: Наука, 1973.
19. **Деч Г.** Руководство к практическому применению преобразования Лапласа и Z-преобразования. М.: Наука, 1971.
20. **Коул Дж.** Методы возмущений в прикладной математике. М.: Мир, 1972.
21. **Рихтмайер Р.** Принципы современной математической физики. М.: Мир, 1982.

*Поступила в редакцию 22/V 2008 г.,
в окончательном варианте — 10/XI 2008 г.*