На правах рукописи

Вязьмина Елена Андреевна

ИССЛЕДОВАНИЕ НЕЛИНЕЙНЫХ ПРОЦЕССОВ ПЕРЕНОСА В ХИМИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СРЕДАХ

05.17.08 – Процессы и аппараты химических технологий

АВТОРЕФЕРАТ
диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Москва - 2007 г.

Работа выполнена в Институте проблем механики Российской академии наук

Научный руководитель - доктор физико-математических наук, **Полянин Андрей Дмитриевич**

Официальные оппоненты - доктор физико-математических наук, профессор **Тимашев Сергей Федорович**

доктор технических наук, профессор **Холпанов Леонид Петрович**

Ведущая организация - Московский государственный университет инженерной экологии

Защита диссертации состоится «6» ноября 2007 г. в 12 часов на заседании диссертационного совета Д-217.024.03 при Федеральном государственном унитарном предприятии «Научно-исследовательский физико-химический институт им. Л.Я. Карпова» по адресу: 105064, г. Москва, ул. Воронцово поле, д. 10, корп. 5.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ФГУП «НИФХИ им. Л.Я Карпова»

Автореферат разослан «____» _______________ 2007 г.

Ученый секретарь диссертационного совета, кандидат химических наук Н.В. Язвикова

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы. Нелинейные процессы переноса импульса, тепла и массы в химически активных средах часто встречаются в различных областях физики, химии, биологии, но в первую очередь в химической технологии. Основы теории процессов переноса были заложены более двух веков назад и базируются на исследовании свойств решений уравнений или систем уравнений сохранения, которые в большинстве своем являются нелинейными.

Для нелинейных задач химической технологии, гидродинамики, теории тепло- и массопереноса общие решения удается получить крайне редко (в исключительных случаях). Основные причины этого связаны, как правило, с нелинейностью и сложностью самих уравнений (например, за счет одно или многокомпонентной кинетической функции химической реакции) или граничных условий, зависимостью коэффициентов переноса, входящих в уравнения, от координат или подлежащих определению функций (температуры и концентрации), сложностью формы границ и многими другими причинами.

Точные решения нелинейных уравнений и систем уравнений переноса играют важную роль в формировании правильного понимания качественных особенностей многих явлений и процессов. Они позволяют разобраться в механизме таких сложных нелинейных эффектов, как пространственная локализация процессов теплопереноса, множественность или отсутствие стационарных состояний при определенных условиях, существование режимов с обострением, наличие или отсутствие периодических режимов и многих других важных явлений. Точные решения типа бегущей волны и автомодельные решения часто представляют собой асимптотики существенно более широких классов решений, соответствующих другим начальным и граничным условиям. Указанное свойство позволяет делать выводы общего характера и прогнозировать динамику развития различных явлений и процессов в более сложных системах.

Даже те точные решения уравнений переноса, которые не имеют ясного физического смысла, могут быть использованы в качестве тестовых задач при проверке корректности и оценке точности других методов. Кроме того, допускающие точные решения модельные уравнения и задачи служат основой для разработки новых численных, асимптотических и приближенных методов, которые в свою очередь позволяют исследовать уже более сложные задачи, когда априори нельзя рассчитывать на получение точных решений.

Уравнения массо- и теплопереноса и фильтрации, с помощью которых моделируются многие процессы химической технологии, содержат эмпирические зависимости от концентраций или температуры для скоростей химических реакций, коэффициентов теплопроводности и диффузии, коэффициентов фильтрации и т.д. Точные решения позволяют планировать эксперимент для определения этих коэффициентов или зависимостей путем искусственного создания подходящих (граничных и начальных) условий.

При теоретическом рассмотрении задач химической технологии особую важность представляют точные решения нестационарных уравнений переноса, поскольку в реальных и промышленных условиях такие процессы встречаются гораздо чаще стационарных. На их основе появляется возможность моделировать переходные и динамические режимы работы химических реакторов и аппаратов, а также определять оптимальное время контакта фаз, когда обеспечивается большая неравновесность и высокая скорость протекания химико-технологических процессов.

Большое значение представляют собой исследования нелинейных уравнений и систем уравнений массо- и теплопереноса общего вида, когда коэффициенты переноса и кинетическая функция химической реакции произвольно зависят от концентраций или температур, поскольку полученные результаты обладают широким диапазоном применимости.

Для обработки экспериментальных данных (а также данных, полученных путем численного моделирования) весьма полезно использовать новые обобщенные переменные, инвариантные относительно выбора системы единиц измерения и характерных масштабов (длины, скорости, времени и др.). При этом возникает важная задача о выборе таких переменных. Удачное введение обобщенных переменных во многих случаях позволяет сразу получить простые эмпирические зависимости, пригодные для инженерных расчетов.

Все сказанное выше и определяет актуальность выполненных исследований.

Целью исследования являлось определение основных закономерностей переноса импульса, тепла и массы в неоднородных одно- и многокомпонентных химически активных средах на основе точных решений соответствующих нелинейных уравнений сохранения. Основное внимание было сосредоточено на изучении нестационарных макрокинетических диффузионно-кинетических явлений и процессов нелинейной фильтрации. Это, в свою очередь, потребовало, развития аналитических методов решения соответствующих уравнений и систем уравнений, поиска новых классов их точных решений, а также построения на их основе решений краевых задач, моделирующих эти явления.

Научная новизна диссертационной работы связана, прежде всего, с поиском новых классов точных (а в некоторых случаях и общих) решений нелинейных и нестационарных диффузионно-кинетических уравнений и систем уравнений, описывающих перенос тепла и вещества в химически активных средах. Особое внимание уделялось уравнениям общего вида, когда коэффициенты переноса и кинетическая функция химической реакции произвольно зависят от концентраций или температур. Получены решения, содержащие произвольные функции, позволяющие анализировать временную и пространственную динамику распределения тепла или вещества при протекании химической реакции.

Другие новые результаты связаны с разработкой точных методов решения нелинейных уравнений и систем уравнений химической технологии и теории массо- и теплопереноса. Эти методы основаны на нелинейном (обобщенном) разделении переменных. Разработанные методы позволили найти точные решения нестационарных задач теории нелинейной фильтрации для одно- и многокомпонентных сред, когда коэффициенты фильтрации зависят от концентрации дисперсных частиц в фильтруемой суспензии.

Предложен новый метод обработки экспериментальных данных с помощью инвариантных переменных. Метод протестирован на примере обработки степенных и экспоненциальных зависимостей, широко встречающихся в задачах химической технологии.

Практическая значимость приведенных в диссертации результатов обусловлена четырьмя основными причинами. Во-первых, несмотря на то, что последние десятилетия были отмечены бурным развитием вычислительной техники и численных методов исследований, с помощью которых проведено математическое моделирование многочисленных физических явлений, они не всегда обоснованы при решении нелинейных задач переноса в связи с наличием различных осложняющих обстоятельств. К таковым относятся - присутствие сингулярно малых параметров, особенностей в коэффициентах уравнений, неединственность решения, локализованность, обострение процессов и т.д. Точные решения нелинейных уравнений и систем уравнений массо- и теплопереноса позволяют выявлять качественные особенности сложных физико-химических явлений.

В-вторых, результаты, полученные в работе, позволяют установить основные макрокинетические закономерности нелинейных процессов переноса в химически активных средах, которые могут быть использованы для моделирования диффузионно-кинетических процессов, нелинейной фильтрации в пористой среде, динамических режимов работы двухфазных проточных и барботажных химических реакторов и т.д.

В третьих, полученные в диссертационной работе точные решения использованы для пополнения баз данных по точным решениям уравнений и систем уравнений переноса на сайте http://eqworld.ipmnet.ru. Такие базы данных расширяют возможности применения методов компьютерной алгебры при моделировании процессов химической технологии и позволяют тестировать используемые численные методы.

В четвертых, предложен метод обработки экспериментальных данных, основанный на введении инвариантных переменных. Этот метод позволяет получать простые эмпирические соотношения, пригодные для инженерных расчетов в химической технологии.

Апробация работы. Основные результаты диссертационной работы докладывались и обсуждались: на Международных научных конференциях «Математические методы в технике и технологиях» ММТТ-17, Кострома, 2004; ММТТ-18, Казань, 2005; ММТТ-19, Воронеж, 2006; ММТТ-20, Ярославль, 2007; XLVII и XLVIII научных конференциях МФТИ «Современные проблемы фундаментальных и прикладных наук», Долгопрудный, 2004, 2005; Воронежской весенней математической школе «Понтрягинские чтения–XV, Современные методы теории краевых задач», Воронеж, 2004; Воронежских зимних математических школах «Современные методы теории функций и смежные проблемы», Воронеж, 2005, 2007; Международной летней школе «Фундаментальные основы статистической физики - 19», Лёвен, Бельгия, 2005; 8-й Международной зимней школе по физике неравновесных сложных систем, Реховот, Израиль, 2006; а также на семинарах: по механике сплошной среды им. Л.А. Галина ИПМех РАН, Москва, 2007; лаборатории гидродинамики Технического университета Дармштадта, Германия, 2006; лаборатории гидродинамики Технического университет Эйндховена, Голландия, 2006; лаборатории статистической физики Католического университета, Лёвен, Бельгия, 2006; лаборатории гидродинамики Эколь Политекник, Палезё, Франция, 2007.

Публикации. По теме диссертации опубликовано 12 научных работ, список которых приведен в заключительной части автореферата.

Структура и объем работы. Диссертационная работа состоит из введения, пяти глав, заключения, списка используемой литературы и приложения. Работа изложена на 118 страницах машинописного текста, содержит 32 рисунка и 11 таблиц. Список используемой литературы включает 117 наименований.

СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении обоснована актуальность темы диссертационной работы, изложены основные цели, уравнения и задачи, которые решались при проведении исследований.

Первая глава диссертации представляет собой литературный обзор. В ней рассмотрены основные нелинейные уравнения и системы уравнений переноса, проанализирован ряд физико-химических механизмов, обуславливающих возникновение таких нелинейностей, и приведены некоторые построенные на их основе модельные задачи химической технологии. В этой главе кратко описаны основные методы решения таких уравнений. Особое внимание сосредоточено на методе обобщенного и функционального разделения переменных и регулярной процедуре получения точных решений на его основе, поскольку в дальнейшем он был использован в диссертационной работе для решения конкретных задач. Кроме того, в обзоре приводятся некоторые точные решения уравнений и систем уравнений, широко используемые при математическом моделировании процессов химической технологии, теории фильтрации и тепломассопереноса в неоднородных химически активных средах.

Во второй главе, которая состоит из шести разделов, приведены новые точные решения некоторых нелинейных нестационарных уравнений массо- и теплопереноса в химически активных средах и уравнений фильтрации, полученные методом функционального разделения переменных.

В первом разделе ищутся новые точные решения нелинейного уравнения нестационарной диффузии (теплопереноса) в неподвижной среде

$$\frac{\partial w}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left[f(w)\frac{\partial w}{\partial x}\right] + g(w), \tag{1}$$

где t - время, x - пространственная координата, w - концентрация (температура), $f(w)$ - коэффициент диффузии (теплопроводности), $g(w)$ - скорость химической реакции (объемного тепловыделения). Многочисленные точные решения и групповая классификация уравнения (1) для функций $f(w)$ и $g(w)$ различного вида описаны в работах Л.В. Овсянникова (1959, 1978), В.А. Дородницына (1979, 1982), В.А. Галактионова с соавторами (1994, 1995), Н.Х. Ибрагимова (1994 – 1995), А.Д. Полянина и В.Ф. Зайцева (2002, 2004).

В диссертационной работе впервые показано, что нелинейное уравнение диффузии (1) имеет два класса точных решений с функциональным разделением переменных следующих видов:

$$\begin{aligned} &w = w(z), \qquad z = \varphi(t)x^2 + \psi(t); \\ &w = w(z), \qquad z = \varphi(t)e^{\lambda x} + \psi(t). \end{aligned} \tag{2}$$

В результате исследования находятся зависимости $w(z)$, $\varphi(t)$, $\psi(t)$ и условие взаимосвязи между функциями $f(w)$ и $g(w)$, для которых существуют решения указанного вида.

В частности, для первого решения (2) установлено, что для функций $f(w)$ и $g(w)$, определяемых формулами

$$f(w) = a\frac{V(z)}{V'_z(z)}, \qquad g(w) = 2bz^{-1/2}V'_z(z) + bz^{-3/2}V(z),$$

где $V(z)$ - произвольная функция, a и b – произвольные постоянные, а функция $z(w)$ задается неявным выражением

$$w = \int z^{-1/2} V'_z(z)\,dz + B_1,$$

существует решение с функциональным разделением переменных вида (2), где

$$z = -\frac{(x+B_3)^2}{4at+B_2} + 2bt + \frac{bB_2}{2a}.$$

Здесь B_1, B_2, B_3 – произвольные постоянные. Для наиболее распространенных экспоненциальной и степенной зависимостей кинетической функции $g(w)$ от концентрации (температуры) решения построены в явном виде. В частном случае b=B_2=B_3=0 полученное решение переходит в известное автомодельное решение нелинейного уравнения диффузии (теплопроводности) без химической реакции [когда $f(w)$ – произвольная функция, $g(w)$=0].

Во втором разделе рассматривается уравнение диффузии (1) в случае радиальной симметрии

$$\frac{\partial w}{\partial t} = \frac{1}{r^n}\frac{\partial}{\partial r}\left[r^n f(w)\frac{\partial w}{\partial r}\right] + g(w). \tag{3}$$

Здесь значения $n=1$ и $n=2$ соответствуют двух и трехмерным задачам. Точные решения этого нелинейного уравнения были найдены для случая квадратичной зависимости от радиальной координаты

$$w = w(z), \qquad z = \varphi(t)r^2 + \psi(t). \tag{4}$$

Методом функционального разделения переменных показано, что уравнение (3), когда одна из функций $f(w)$ или $g(w)$ может быть произвольной, имеет несколько классов точных решений вида (4), одно из которых по своей структуре подобно рассмотренному ранее в первом разделе.

В третьем разделе рассматривается уравнение, обобщенное для описания процесса нестационарной диффузии, когда коэффициент переноса и кинетическая функция химической реакции зависят не только от концентрации w, но и от температуры среды, которая меняется со временем.

Точное решение этого уравнения найдено методом функционального разделения переменных в виде обобщенной бегущей волны $w = w(z)$, где $z = \varphi(t)x + \psi(t)$. В результате установлен вид зависимостей $w(z)$, $\varphi(t)$, $\psi(t)$. Кроме того, получено условие взаимосвязи функций $f(w)$ и $g(w)$, при выполнении которого существует решение искомого вида.

В четвертом разделе рассматривается нелинейное уравнение диффузии для сред со сложной реологией, которые описываются степенном законом Фика относительно градиента концентрации (подобные процессы имеют место в вязких, стеклоподобных расплавах и концентрированных растворах полимеров). Описаны несколько классов точных решений для случая произвольной кинетической функции.

В пятом разделе рассматривается нелинейное уравнение околозвукового течения газа (в плоском и радиально-симметричном случаях) и получены новые классы его точных решений.

В шестом разделе методом Титова-Галактионова получено точное решение нелинейного уравнения теории фильтрации

$$\frac{\partial w}{\partial t} = f\left(\frac{\partial w}{\partial x}\right)\frac{\partial^2 w}{\partial x^2},$$

в котором коэффициент фильтрации f является произвольной функцией градиента концентрации дисперсной фазы в фильтруемой суспензии. Здесь w – концентрация дисперсной фазы.

Подробно рассмотрен случай степенной зависимости коэффициента фильтрации от градиента концентрации дисперсной фазы $f = a\left(\partial w/\partial x\right)^m$, используемый при моделировании процессов фильтрации. Найдено два точных решения, описывающих динамику распределения концентрации дисперсной фазы в суспензии, которые выражаются через элементарные функции.

В третьей главе, которая состоит из трех разделов, получены новые точные решения ряда систем взаимосвязанных нелинейных уравнений, моделирующих процессы тепло- и массопереноса в двух- и многокомпонентных системах. Как правило, анализ и решение таких систем представляет значительные трудности. В диссертации ставилась задача разработать подходы, позволяющие изучать макрокинетику тепловых или диффузионных процессов в специальных случаях путем сведения исследуемых систем уравнений к линейным уравнениям в частных производных или же к системам обыкновенных дифференциальных уравнений. С этой целью был использован метод функционального разделения переменных.

В первом разделе приводятся общие решения некоторых классов нелинейных систем уравнений первого порядка. К ним сводятся многочисленные задачи по моделированию конвективного массопереноса в двухфазных проточных реакторах и аппаратах без обратного перемешивания при наличии объемных химических реакций (когда продольной диффузией можно пренебречь). Рассмотрим систему уравнений конвективного переноса в двухфазных системах с химическими превращениями

$$\frac{\partial u}{\partial \tau} + a_1\frac{\partial u}{\partial \xi} = F_1(u,w), \qquad \frac{\partial w}{\partial t} + a_2\frac{\partial w}{\partial \xi} = F_2(u,w),$$

где u и w – концентрации переносимого компонента в различных фазах, τ – время, ξ – пространственная координата, a_1 и a_2 – скорости конвективного движения взаимодействующих сред.

Функции $F_1(u,w)$ и $F_2(u,w)$ описывают либо кинетику химической реакции, либо кинетику межфазного переноса. В двухфазных задачах химической технологии, как правило, $F_1(u,w) = -F_2(u,w)$. Более сложные трехфазные или многофазные задачи, когда химические превращения протекают по последовательно-параллельной схеме избирательно в одной из фаз, в некоторых случаях моделируются такой системой уравнений с функциями $F_1(u,w)$ и $F_2(u,w)$ различного вида.

Путем перехода к характеристическим переменным

$$x = \frac{\xi - a_2\tau}{a_1 - a_2}, \quad t = \frac{\xi - a_1\tau}{a_2 - a_1} \quad \left(a_1 \neq a_2\right)$$

рассматриваемая система приводится к каноническому виду

$$\frac{\partial u}{\partial x} = F_1(u,w), \qquad \frac{\partial w}{\partial t} = F_2(u,w). \tag{5}$$

В диссертационной работе для системы уравнений (5) с кинетическими функциями вида $F_1(u,w) = uf(w)$, $F_2(u,w) = u^k g(w)$ была предложена замена переменных

$$U = u^k, \qquad W = \int \frac{dw}{g(w)}, \tag{6}$$

которая приводит ее к более простой системе

$$\frac{\partial U}{\partial x} = \Phi(W)U, \quad \frac{\partial W}{\partial t} = U. \tag{7}$$

Здесь функция $\Phi(W)$ задается параметрически с помощью формулы $\Phi = kf(w)$ и второго соотношения (6) (w играет роль параметра).

Заменив U в первом уравнении системы (7) на левую часть второго уравнения этой системы, приходим к уравнению второго порядка для функции W. Интегрируя его по t, получим уравнение

$$\frac{\partial W}{\partial x} = \int \Phi(W)dW + \theta(x), \tag{8}$$

где $\theta(x)$ – произвольная функция. Уравнение (8) может рассматриваться как обыкновенное дифференциальное уравнение относительно x (постоянная интегрирования в решении будет являться произвольной функцией времени).

Подробно рассмотрены частные случаи системы (5), когда функции $f(w)$ и $g(w)$, задающие кинетику реакций, описываются экспоненциальными или степенными зависимостями. Кроме того, приведены некоторые точные решения для системы уравнений (5), когда кинетические функции имеют вид $F_1(u,w) = f(a_1u + b_1w)$, $F_2(u,w) = g(a_2u + b_2w)$, а также рассмотрены и другие более общие случаи.

Во втором разделе рассмотрены системы нелинейных диффузионно-кинетических уравнений, описывающих процессы нестационарного диффузионного массопереноса, сопровождающегося химическими реакциями, в двухкомпонентных средах

$$\frac{\partial u}{\partial t} = D_1 \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + F_1(u,w), \qquad \frac{\partial w}{\partial t} = D_2 \frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + F_2(u,w), \tag{9}$$

где D_1 и D_2 - коэффициенты диффузии. Подобные системы уравнений широко используются для моделирования макрокинетики процессов хемосорбции в неподвижных жидких средах, реакционно-диффузионных явлений в зернах катализатора, лежат в основе двухфазных моделей реакционных процессов в неоднородном кипящем слое, применяются при изучении кристаллизации перенасыщенных растворов и т.д. С помощью перехода к каноническим координатам к виду (9) также сводятся системы диффузионно-кинетических уравнений, описывающих конвективный массоперенос в жидких средах, движущихся с постоянной скоростью (если скорость движения обеих фаз одинакова).

В диссертационной работе продемонстрирована возможность нахождения новых точных решений систем уравнений (9) методом обобщенного разделения переменных. Суть подхода заключается в том, что решения ищутся в виде

$$\begin{aligned} u &= \varphi_1(t)\xi(x,t) + \psi_1(t), \\ w &= \varphi_2(t)\xi(x,t) + \psi_2(t), \end{aligned} \tag{10}$$

где на функции $\varphi_1(t)$, $\varphi_2(t)$, $\psi_1(t)$, $\psi_2(t)$ накладываются соотношения, представляющие собой систему обыкновенных дифференциальных уравнений, причем каждое уравнение системы (10) сводится к одному и тому же уравнению для функции $\xi(x,t)$.

Применение этого метода продемонстрируем на примере решения системы уравнений (9) при $D_1 = D_2 = D$, когда $F_1(u,w) = uf(bu - cw) + g_1(bu - cw)$ и $F_2(u,w) = wf(bu - cw) + g_2(bu - cw)$, где f, g_1, g_2 - произвольные функции, а *b, c* – произвольные постоянные. Использование описанной выше процедуры, приводит к обыкновенным дифференциальным уравнениям для функций $\varphi_1(t)$, $\varphi_2(t)$, $\psi_1(t)$, $\psi_2(t)$:

$$\begin{aligned} &\varphi' = \varphi f(b\psi_1 - c\psi_2), \quad \varphi_1 = c\varphi, \quad \varphi_2 = b\varphi; \\ &\psi_1' = \psi_1 f(b\psi_1 - c\psi_2) + g_1(b\psi_1 - c\psi_2), \\ &\psi_2' = \psi_2 f(b\psi_1 - c\psi_2) + g_2(b\psi_1 - c\psi_2), \end{aligned}$$

и линейному уравнению теплопроводности для функции $\xi(x,t)$:

$$\frac{\partial \xi}{\partial t} = D\frac{\partial^2 \xi}{\partial x^2}.$$

Таким образом, полученное решение помимо произвольных постоянных может содержать до трех произвольных функций.

Рассмотренная система может быть использована для построения и решения двухфазной модели пузырькового кипящего слоя. Считая, что *u* концентрация переносимого вещества в твердой фазе, а *w*, соответственно, в пузырьковой, в ней надо положить $f(bu - cw) = 0$ и $g_1(bu - cw) = -g_2(bu - cw) = \alpha(u - w)$, где α – коэффициент массопередачи между твердой и пузырьковой фазой.

Приведены решения также некоторых других систем вида (9).

В третьем разделе получены новые точные решения некоторых классов нелинейных систем из *n* уравнений произвольного порядка. Для их анализа также использован метод обобщенного разделения переменных.

Применение к таким системам процедуры, описанной в предыдущем разделе, позволяет свести их к системе обыкновенных дифференциальных уравнений и одному линейному уравнению в частных производных. Предложенный подход существенно облегчает возможности математического моделирования процессов в многофазных реагирующих средах, заменив необходимость численного решения систем уравнений в частных производных на решение систем обыкновенных дифференциальных уравнений.

В четвертой главе, которая состоит из двух разделов, продемонстрирована возможность построения точных решений начально-краевых задач нелинейной фильтрации общего вида.

В первом разделе получены новые точные решения нестационарных краевых задач, описывающих фильтрацию суспензии через первоначально чистую пористую среду. Основная особенность рассматриваемого процесса заключается в учете захвата фильтруемых частиц пористой средой, забивке ими пор фильтра и постепенном уменьшении его поглощающей способности.

Система уравнений, описывающая временную и пространственную динамику изменения относительной концентраций твердых частиц в фильтруемой суспензии $u(t,x)$ и порах фильтра (в осадке) $w(t,x)$ внутри пористой среды, имеет вид

$$\frac{\partial(u+w)}{\partial t}+\frac{\partial u}{\partial x}=0, \qquad \frac{\partial w}{\partial t}=f(w)u, \tag{11}$$

где $f(w)$ – коэффициент фильтрации. При этом должны выполняться следующие начальные и граничные условия:

$$u=w=0 \quad \text{при} \quad t=0; \qquad u=1 \quad \text{при} \quad x=0. \tag{12}$$

Введение функции потенциала

$$\Phi(w)=\int_0^w \frac{dz}{f(z)} \tag{13}$$

с последующим интегрированием первого уравнения от 0 до t с учетом начального условия (12) приводит к квазилинейному уравнению первого порядка для функции w. Его решение методом характеристик позволяет выписать точное решение краевой задачи (11), (12) в следующем виде:

$$\int_w^{\Phi^{-1}} \frac{dz}{zf(z)}=x, \qquad u=\frac{w}{\Phi^{-1}(t-x)}, \tag{14}$$

где Φ^{-1} - функция обратная к (13). Заметим, что неизвестная функция w определяется первым соотношением (14) в неявном виде. Таким образом, точное решение задачи (11), (12) определяется соотношениями (13), (14) при $x < t$. При $x > t$ функции равны нулю.

На основе полученных решений рассчитаны безразмерные зависимости концентраций твердых частиц в суспензии u от времени t на выходе из фильтра (при $x = 1$) и пространственные поля концентраций внутри фильтра $w(x)$ (при $t = 3$) для различных зависимостей коэффициентов фильтрации от концентрации частиц в осадке: линейной, квадратичной и корень квадратный. Они представлены на рис. 1.

Из рис. 1 следует, что во всех рассмотренных случаях концентрация суспензии на выходе из фильтра (при $x = 1$) со временем достигает значения 1, т.е. фильтр перестает работать. Времена достижения такого состояния сокращаются с ростом показателя степени в коэффициенте фильтрации. При этом заполнение фильтра твердыми частицами становиться более равномерным. Таким образом, можно утверждать, что чем больше показатель степени в коэффициенте фильтрации, тем выше эффективность процесса фильтрования и тем эффективнее используется фильтрующий материал.

Полученные результаты обобщены на случай, когда в пористой среде имеется обратное перемешивание суспензии и в первое уравнение системы (11) входит слагаемое диффузионного типа. Показано, что в этом случае также система уравнений фильтрации может быть сведена к решению одного уравнения для неизвестной функции концентрации твердых частиц в осадке w.

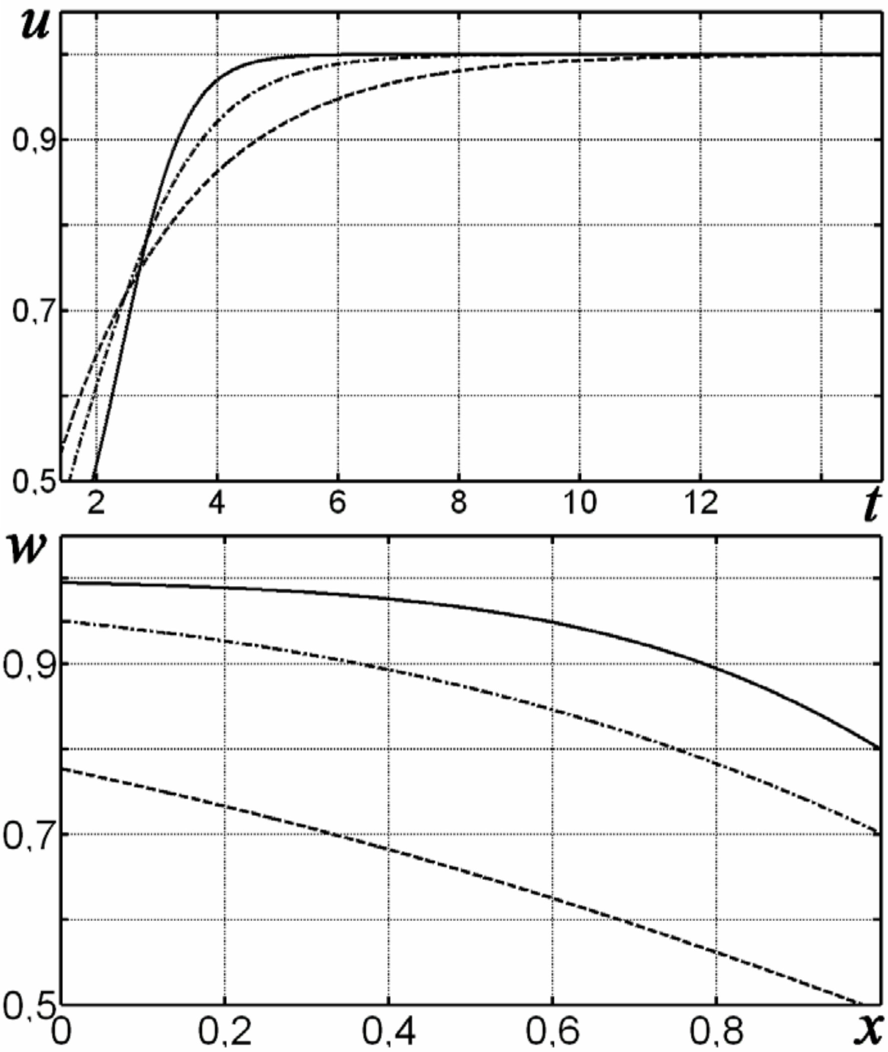

Рис. 1. Зависимости безразмерных концентраций твердых частиц в суспензии u от времени t на выходе из фильтра (при x = 1) и концентрации внутри фильтра w от продольной координаты x (при t = 3) для различных зависимостей коэффициента фильтрации от концентрации частиц в осадке: $f\left(w\right)=1-w$ (штрихпунктирная линия), $f\left(w\right)=1-w^2$ (сплошная линия) и $f\left(w\right)=1-\sqrt{w}$ (пунктирная линия)

Во втором разделе рассмотренная выше задача обобщена на случай фильтрации многокомпонентной суспензии. Многокомпонентность может быть обусловлена как различием пропускной способности фильтра к частицам разного фракционного состава, так и различием физических механизмов поглощения частиц на фильтре, связанных с их природой и природой фильтрующего материала.

Для n компонентной суспензии в рассматриваемом случае вместо системы уравнений (11) приходится иметь дело с системой, содержащей n + 1 уравнение

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(u+\sum_{i=1}^{n} w_i\right)+\frac{\partial u}{\partial x}=0\,, \qquad \frac{\partial w_i}{\partial t}=f_i\left(w_1,\ldots,w_n\right)u\,, \quad i=1,\,\ldots,\,n; \tag{15}$$

где w_i - концентрации частиц i-той фракции в осадке. При этом в начальных условиях задается равенство нулю каждой из величин w_i.

В предположении, что все функции w_i при i = 1, …, n – 1 могут быть выражены через w_n, получена система, состоящая из n – 1 обыкновенных дифференциальных уравнений. После подстановки ее решений в (15), приходим к системе (11), в которой $w=\sum_{i=1}^{n-1} w_i\left(w_n\right)+w_n$ и $f\left(w\right)=\sum_{i=1}^{n}\left(dw/dw_i\right)f_i\left(w_n\right)$. Используя w_n в качестве параметра можно определить общий коэффициент фильтрации. В результате задача многокомпонентной фильтрации сводится к однокомпонентной.

В диссертационной работе в качестве примера приведен расчет общего коэффициента двухкомпонентной фильтрации, когда один из индивидуальных коэффициентов постоянен, а другой зависит от концентрации линейно.

В пятой главе, которая состоит из трех разделов, изложены основы нового метода обработки экспериментальных данных и результатов численного моделирования с целью получения эмпирических соотношений, пригодных для инженерных расчетов. Следует заметить, что простые приближенные формулы часто более удобны для интерпретации и практического использования, чем таблицы и графики. Показано, что в целях общности экспериментальные данные во многих случаях предпочтительно обрабатывать в специальных инвариантных координатах, которые сравнительно просто позволяют выявлять универсальные зависимости.

В первом разделе рассматриваются различные аспекты обоснования метода. Пусть $y=y(x)$ - искомая зависимость, которая определяется экспериментальным путем. Обобщенную переменную ищем в виде $\Phi\left(x,y,y'_x,y''_{xx}\right)$. Потребуем, чтобы она была инвариантна относительно операций масштабирования по обеим переменным ($x\to ax,\ y\to by$) и сдвига по независимой переменной ($x\to x+c$), где a, b и c – постоянные. В результате приходим к функциональному уравнению

$$\Phi\left(x,y,y'_x,y''_{xx}\right)=\Phi\left(ax+c,by,\frac{b}{a}y'_x,\frac{b}{a^2}y''_{xx}\right),$$

общее решение которого имеет вид

$$\Phi=F\left(\frac{yy''_{xx}}{(y'_x)^2}\right),$$

где $F\left(Z\right)$ - произвольная функция. Выбирая зависимость простейшего вида $F\left(Z\right)=Z$, приходим к соотношению

$$\Phi=\frac{yy''_{xx}}{(y'_x)^2}. \qquad (16)$$

Помимо (16) будем рассматривать также более простую обобщенную переменную первого порядка

$$\Psi=\frac{xy'_x}{y}, \qquad (17)$$

которая инвариантна относительно операций масштабирования по обеим переменным, но не инвариантна относительно сдвига по независимой переменной.

Инвариантные обобщенные переменные (16) и (17) полезно использовать для обработки экспериментальных данных и результатов численного моделирования.

В инженерной практике часто встречаются трехпараметрические степенные и двухпараметрические экспоненциальные зависимости

$$y = A\left(x + C\right)^{k}, \qquad y = A\exp\left(kx\right), \tag{18}$$

где A, C и k – постоянные, определяемые из экспериментальных данных. Для кривых (18) переход к обобщенной переменной (16) в плоскости (x, Φ) приводит к прямым линиям, параллельным оси x со значениями

$$\Phi = \left(k-1\right)/k, \quad \Phi = 1, \tag{19}$$

соответственно. Параметрические области значений k для указанных зависимостей в координатах (x, Φ) приведены на рис. 2.

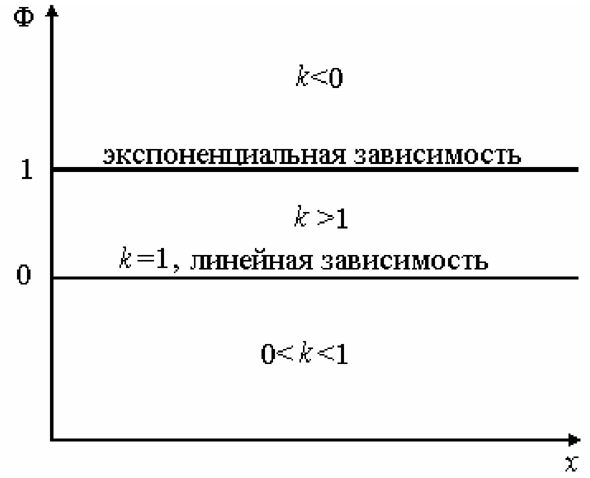

Рис. 2. Параметрические области значений k в координатах (x, Φ) для степенных и экспоненциальных зависимостей

Для сложных экспериментальных (численных) зависимостей, состоящих из разных участков, переход от одной степенной зависимости в плоскости (x, y) к другой соответствует переходу между параллельными линиями в плоскости (x, Φ). Такие экспериментальные (или численные) данные могут быть интерполированы, например, кусочно-гладкими линейными зависимостями или другими элементарными функциями. Формулы (18) могут быть использованы, если кривая в плоскости (x, Φ) медленно меняется при изменении x, что соответствует слабой зависимости коэффициента k от x.

Если в плоскости (x, Φ) определена зависимость $\Phi = f\left(x\right)$, то исходная зависимость в координатах (x, y) восстанавливается из решения дифференциального уравнения (16) при $\Phi = f\left(x\right)$. Общее решение этого уравнения имеет вид

$$y\left(x\right) = A_1 \exp\left[\int \frac{dx}{x - F\left(x\right) + A_2}\right], \quad F\left(x\right) = \int f\left(x\right) dx \tag{20}$$

где A_1 и A_2 - постоянные, определяемые их экспериментальных (численных) данных в двух точках.

Во втором разделе приведены результаты оценок точности предложенного метода на примере тестовой обработки степенных и экспоненциальных зависимостей. Этот этап исследования необходим для выбора наилучших апроксимационных формул для вычисления первых и вторых производных в (16) по имеющимся экспериментальным данным.

В координатах (x, y) выбранные для теста зависимости $y = y(x)$ представлялись в виде двух массивов точек

$$x_1, x_2, \ldots, x_{n-1}, x_n;$$

$$y_1, y_2, \ldots, y_{n-1}, y_n.$$

Исследовались широко известные в вычислительной математике левая, правая и центральная разностные схемы, а также их комбинации. Напомним, что в левой и правой схемах вычисление второй производной ведется по трем точкам, а в центральной – по пяти.

В результате обсчета исходных массивов точек в координатах (x, Φ) были получены новые массивы точек

$$x_1, x_2, ..., x_{n-1}, x_n;$$
$$\Phi_1, \Phi_2, ..., \Phi_{n-1}, \Phi_n. \tag{21}$$

Исходя из них, определялось значение показателя степени *k,* которое сравнивалось с результатом аналитического расчета по формулам (19). Установлено, что наилучшее соответствие между аналитическими и численными расчетами показателя степени *k* достигается при использовании центральной разностной схемы. Увеличение числа тестовых точек на заданном отрезке оси *x* во всех случаях приводит к улучшению точности. Наибольшая погрешность для степенных функций наблюдается при малых *x*.

В третьем разделе приведены некоторые конкретные примеры обработки экспериментальных данных с помощью предложенного метода для установления эмпирических зависимостей. Массив экспериментальных точек представлялся с помощью соотношений (17) и (16) в виде (21). Далее с помощью метода наименьших квадратов вычислялись соответственно величины Ψ и Ф, по которым рассчитывался соответствующий показатель степени.

По описанной выше методике обработаны экспериментальные данные Никурадзе (приведенные им в форме таблиц) по профилям скорости в пристенном слое для турбулентного течения вязкой жидкости в круглых гладких трубах при больших числах Рейнольдса с целью проверки степенной аппроксимации продольной скорости от расстояния от стенки степенными зависимостями. Результаты для $\mathrm{Re} = 4 \cdot 10^3$ в координатных плоскостях (x, Ψ) и (x, Φ) представлены на рис. 3.

Из рис. 3 видно, что для всех чисел Рейнольдса экспериментальные данные достаточно хорошо аппроксимируются прямыми $\Psi = \mathrm{const}$ и $\Phi = \mathrm{const}$. Это показывает, что профили продольной скорости вблизи стенки трубы могут быть представлены в виде степенной зависимости $u = ax^n$, где показатель степени $n = 0{,}164$ для преобразования первого порядка (17) и $n = 0{,}148$ для преобразования второго порядка (16), что удовлетворительно соответствует оценкам, выполненным Никурадзе ($n = 1/6 \approx 0{,}167$). Значительный разброс экспериментальных данных в плоскостях (x, Ψ) и (x, Φ) обусловлен невысокой точностью вычисления производных ввиду недостаточно большого количества экспериментальных точек, которые далеко расположены друг от друга (при этом первая производная вычисляется лучше, что приводит к более точным результатам при использовании преобразования первого порядка). Однако даже такие достаточно грубые вычисления позволяют получить работоспособные аппроксимации для профиля скорости.

Предложенным методом обработаны экспериментальные данные для зависимости длины окрашенной трассы l за счет присутствия фотохромных соединений в жидкости от энергии импульсного лазерного излучения E, которым они первоначально облучаются для создания их вторичного свечения. Показано, что экспериментальные точки в обобщенных координатах (E, Φ) достаточно близко расположены от прямой линии с постоянным значением $\Phi \approx 2$, что позволяет использовать степенную аппроксимацию с показателем $k = -1$.

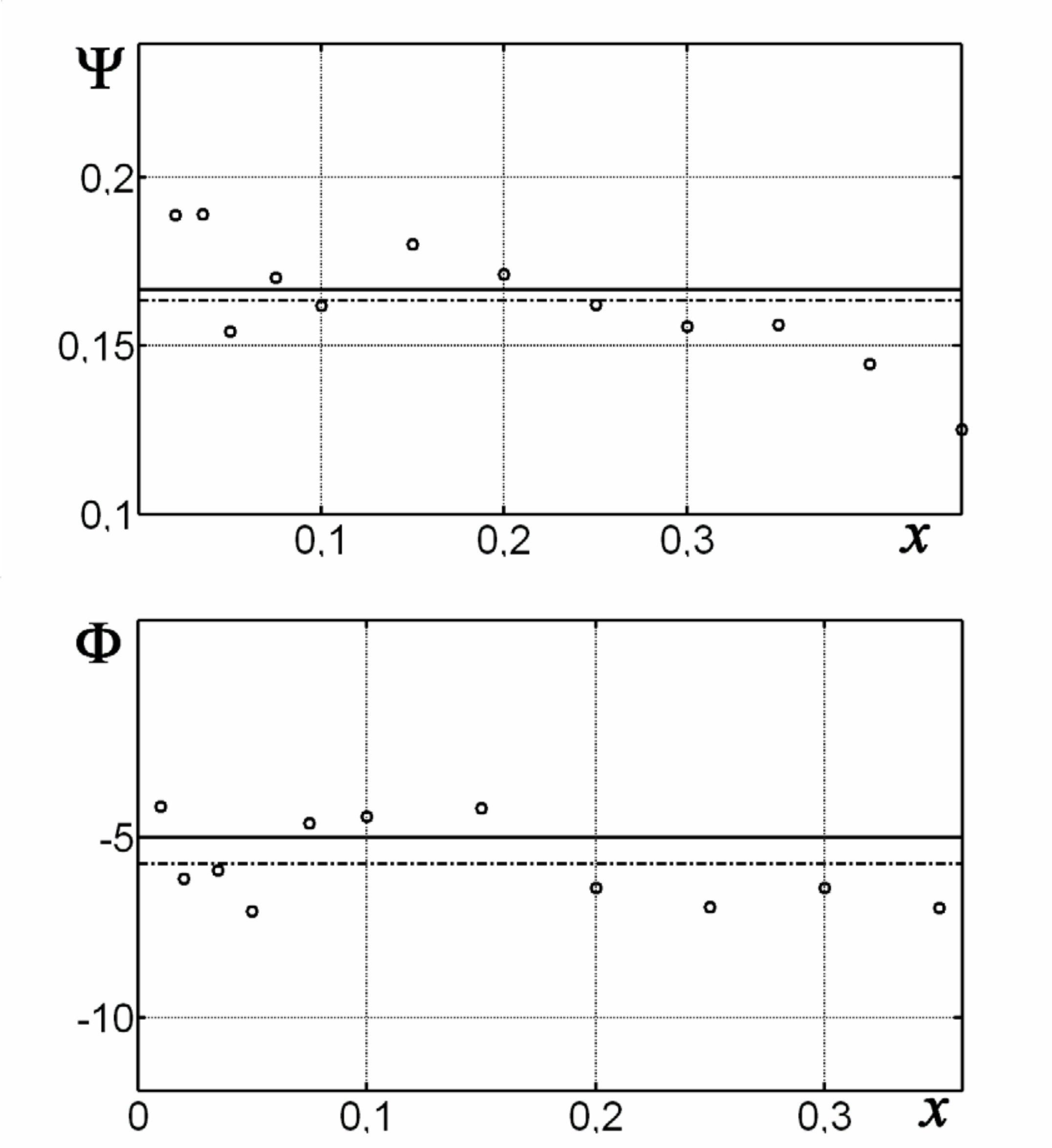

Рис. 3. Экспериментальные данные Никурадзе для турбулентного течения вязкой жидкости в круглых гладких трубах для $\mathrm{Re} = 4 \cdot 10^3$ в плоскостях (x, Ψ) и (x, Φ), где x - расстояние от стенки (в сантиметрах). Сплошные линии – закон скорости Никурадзе (k=1/6), штрих-пунктирые – обработка экспериментальных точек методом наименьших квадратов

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Методом функционального разделения переменных получены новые точные решения различных классов нелинейных уравнений тепло- и массопереноса с объемной химической реакцией для плоского и радиально-симметричного случаев. Рассмотренные классы уравнений содержат произвольные кинетические функции, поэтому полученные решения обладают значительной общностью. Найдены новые точные решения нелинейного уравнения диффузии для сред со сложной реологией, которые описываются степенном законом Фика относительно градиента концентрации.

2. С помощью замены переменных получены интегралы и общие решения некоторых нелинейных систем уравнений первого порядка, описывающих конвективный перенос в двухфазных системах с химическими превращениями, когда скорость реакции произвольным образом зависит от одной из компонент. Предложена модификация метода обобщенного разделения переменных, позволяющая исследовать системы диффузионно-кинетических уравнений. Получены новые классы точных решений нелинейных уравнений массо- и теплопереноса с объемной реакцией. Рассмотрены как двухфазные, так и многофазные системы.

3. Полученные результаты пополняют информационную базу данных по точным решениям нелинейных уравнений и систем уравнений теории тепло- и массопереноса с химическими реакциями и могут использоваться для тестирования численных, асимптотических и приближенных аналитических методов, используемых в химической технологии.

4. Исследованы нестационарные задачи о фильтрации суспензии через первоначально чистую пористую среду. Особенность рассматриваемого процесса заключается в учете захвата фильтруемых частиц пористой средой и постепенном уменьшении его поглощающей способности. Получены точные решения этой задачи для случаев одно- и многокомпонентной суспензии. Показано, что при выборе фильтрующего материала с более высокими показателями степени в коэффициенте фильтрации эффективность использования фильтрующего материала возрастает.

5. Предложен новый метод обработки экспериментальных данных и результатов численного моделирования, основанный на введении инвариантных переменных. Вид этих переменных определялся путем решения соответствующих функциональных уравнений. Показано, что трехпараметрические степенные и двухпараметрические экспоненциальные зависимости, которые часто встречаются в инженерной практике, при переходе к инвариантной переменной преобразуются в прямые линии, параллельные оси абцисс. Это автоматически позволяет выявлять зависимости указанного типа и получать простые приближенные формулы. Проведено тестирование метода и выбрана разностная схема для вычисления производных, позволяющая достичь максимальной точности. Эффективность метода проиллюстрирована путем обработки экспериментальных данных: 1) по профилям скорости в пристенном слое для турбулентного течения вязкой жидкости в круглых трубах и 2) по длине окрашенной трассы в жидкости, содержащей фотохромные соединения.

ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ ОПУБЛИКОВАНО В СЛЕДУЮЩИХ РАБОТАХ

1. Полянин А.Д., Вязьмина Е.А. Новые классы точных решений нелинейных уравнений теплопроводности (диффузии) общего вида.// Докл. АН.- 2005.- Т. 404.- № 2.- С. 173-176.

2. Вязьмина Е.А., Полянин А.Д. Новые классы точных решений нелинейных диффузионно-кинетических уравнений и систем общего вида.// Теор. основы хим. технологии.- 2006.- Т. 40.- № 6.- С. 595-603.

3. Полянин А.Д., Вязьмина Е.А. Новые классы точных решений нелинейных систем уравнений реакционно-диффузионного типа.// Докл. АН.- 2006.- Т. 409.- № 4.- С. 455-460.

4. Вязьмина Е.А., Бедриковецкий П.Г., Полянин А.Д. Новые классы точных решений нелинейных систем уравнений теории фильтрации и конвективного массопереноса.// Теор. основы хим. технологии.- 2007.- Т. 41.- № 5.- С. 580-588.

5. Вязьмина Е.А., Полянин А.Д. Решение нелинейного уравнения диффузии методом функционального разделения переменных.// Матер. Воронежской весенней математической школы «Понтрягинские чтения – XV, Современные методы теории краевых задач».- Воронеж: Изд-во ВГУ, 2004.- С. 52-53.

6. Вязьмина Е.А., Полянин А.Д. Новые точные решения нестационарного уравнения диффузии с объемной химической реакцией в случае радиальной симметрии.// Сб. трудов. XLVII научн. конф. «Современные проблемы фундаментальных и прикладных наук».- Москва-Долгопрудный: Изд-во МФТИ, 2004.- Ч. III.- С. 183-186.

7. Вязьмина Е.А., Полянин А.Д. Новое точное решение нелинейного уравнения диффузии для сред со сложной реологией.// Матер. Воронежской зимней математической школы «Современные методы теории функций и смежные проблемы».- Воронеж: Изд-во ВГУ, 2005.- С. 63-64.

8. Вязьмина Е.А., Полянин А.Д. О точных решениях нестационарного нелинейного уравнения диффузии в случае радиальной симметрии.// Сб. трудов Междунар. научн. конф. «Математические методы в технике и технологиях - ММТТ-18».- Казань: Изд-во КГТУ, 2005.- Т. 1.- С. 49-50.

9. Вязьмина Е.А., Полянин А.Д. Новые точные решения нелинейного диффузионно-кинетического уравнения общего вида.// Сб. трудов. XLVIII научн. конф. «Современные проблемы фундаментальных и прикладных наук».- Москва-Долгопрудный: Изд-во МФТИ, 2005.- Ч. III.- С. 240-243.

10. Вязьмина Е.А. Применение метода Титова-Галактионова для решения нелинейных уравнений математической физики.// Сб. трудов Междунар. научн. конф. «Математические методы в технике и технологиях - ММТТ-19».- Воронеж: Изд-во ВГТА, 2006.- Т. 1.- С. 58-61.

11. Вязьмина Е.А. Применение метода Титова-Галактионова для решения нелинейного уравнения фильтрации.// Матер. Воронежской зимней математической школы «Современные методы теории функций и смежные проблемы».- Воронеж: Изд-во ВГУ, 2007.- С. 50-51.

12. Вязьмина Е.А. О новых точных решениях нелинейного нестационарного уравнения диффузионно-кинетического типа.// Сб. трудов Междунар. научн. конф. «Математические методы в технике и технологиях - ММТТ-20».- Ярославль: Изд-во ЯГТУ, 2007.- Т. 1.- С. 71-74.