

НЕЛІНІЙНА МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ КОНВЕКТИВНОЇ ДИФУЗІЇ ДОМІШКОВИХ КОМПОНЕНТ У ПРОЦЕСІ ПОМ'ЯКШЕННЯ ВОДИ

Запропоновано нелінійний варіант математичної моделі конвективної дифузії для опису зміни жорсткості води при її фільтрації в пористому тілі, скелет якого утворений з іонообмінних смол (каїнітів) або подрібнених цеолітів чи вугілля. Супутні процеси сорбції-десорбції розуміються як нелінійні джерела при обмеженій ємності скелета. Для нелінійних рівнянь моделі сформульовано відповідні задачі математичної фізики та проведено чисельний аналіз розв'язків, що відповідають різним фізичним умовам. Показано, що вклад нелінійних частин в отримані розв'язки для концентрацій у більшості випадків є незначним. Найбільший вплив на значення різниці між розв'язками лінійної і нелінійної крайових задач має коефіцієнт швидкості конвективного перенесення. Встановлено, що вибір нульового наближення при побудові ряду Неймана, у вигляді яких отримано розв'язки вихідної нелінійної крайової задачі, практично не впливає на функції концентрації домішкової речовини для малих часів фільтрації, швидкостей конвективного перенесення та ємності скелета.

Ключові слова: математичне моделювання, фільтрація, сорбція-десорбція іонів, жорсткість води, нелінійна крайова задача, ряд Неймана, пористий шар

Вступ. Технологічний процес очищення води перед її використанням у різних цілях складається, як правило, з багатьох різних етапів [10]. Серед них окремо виділяється етап так званого її пом'якшення, або зменшення твердості, що пов'язана з наявністю кислот карбонатів (гідрокарбонатів) та сульфатів і хлоридів кальцію чи магнію [11]. Для зменшення твердості води, тобто її пом'якшення, з води потрібно видалити іони Ca^{2+} і Mg^{2+} [3, 12, 22].

Тимчасову твердість води можна усунути кип'ятінням. Позбутись сульфатів та хлоридів кальцію і магнію, які не розкладаються при зміні температури, можна шляхом додавання у воду певних реагентів, зокрема карбонату натрію (кальцинована сода), гідроксиду кальцію (вапняна вода) або ортофосфату натрію. При цьому водночас усувається і тимчасова, і постійна твердість води.

Проте практично реалізувати введення необхідної кількості згаданих реагентів часто може виявитись технічно складною задачею. Тому для видалення йонів Ca^{2+} і Mg^{2+} широко використовують фільтри різної фізичної природи [26]. Це зумовлює доцільність побудови та дослідження відповідних нелінійних математичних моделей процесів конвективної дифузії домішкової речовини у водному розчині, що протікає через пористий шар, які супроводжуються процесами типу сорбції-десорбції.

Найчастіше використовують фільтри з іонообмінних смол, таких як катіоніти, подрібнених цеолітів чи вугілля [21].

Катіоніти – це тверді речовини, які не розчиняються в воді і містять рухливі катіони у формі солей органічних кислот. Ці катіони можуть обмінюватися на катіони, які містяться в водному поровому розчині, зокрема такі як Ca^{2+} і Mg^{2+} . Тоді під час фільтрації твердої води через шар із катіонітових зерен іони Ca^{2+} і Mg^{2+} дифундують у ці зерна, а катіони Na^+ переходять у воду.

При тривалій експлуатації спостерігається ефект насичення, тому для відновлення функціональних властивостей катіонітних фільтрів їх слід періодично промивати концентрованим розчином натрій хлориду.

✉ byixx13@gmail.com

1. Вихідні співвідношення нелінійної моделі фільтрації. Загальні підходи до опису процесів масоперенесення в пористих неоднорідних середовищах сформульовано в працях [11–13]. Їхні застосування до конкретних задач вимагає також використання певних континуальних уявлень та положень термодинаміки нерівноважних процесів [4, 10, 14, 21].

У роботі [19], виходячи із законів Фіка [21], отримано систему рівнянь математичної моделі перенесення домішкової речовини з урахуванням процесів сорбції-адсорбції, які відповідають умовам проведення експерименту:

$$\frac{\partial C_1(x, \tau)}{\partial \tau} + v \frac{\partial C_1(x, \tau)}{\partial x} + \frac{\partial C_2(x, \tau)}{\partial \tau} = - \frac{\partial}{\partial x} \left[D(x, \tau) \frac{\partial C_1(x, \tau)}{\partial x} \right],$$

$$C_2(x, \tau) = f(C_1(x, \tau)), \quad (1)$$

де $C_1(x, \tau)$ і $C_2(x, \tau)$ – концентрація іонів у водному розчині та скелеті відповідно, v – швидкість розчину в порах, $D = D(x, \tau)$ – коефіцієнт дифузії домішки в розчині, x – координата, τ – час. Друге з рівнянь системи (1) часто називають рівнянням адсорбції.

Крім цього, у [19] проведено якісний аналіз розв'язків відповідних задач математичної фізики для різних фізичних умов конвективної дифузії йонів домішкових частинок, запропоновано наближені розв'язки з використанням спеціальних функцій. Встановлено оцінку значень коефіцієнтів дифузії ($D = \text{const}$) та сталої Генрі.

Проте в моделі, запропонованій у [19], не враховується ефект насичення скелета мігруючими у розчині йонами, що визначають його твердість. У зв'язку з цим запишемо вихідну систему (1) масоперенесення в середовищі у вигляді рівнянь конвективної дифузії у середовищі з пастками [20], коли масообмін між станами описується нелінійною закономірністю:

$$\frac{\partial C_1(t, x)}{\partial t} + v \frac{\partial C_1(t, x)}{\partial x} = D \frac{\partial^2 C_1(t, x)}{\partial x^2} - \gamma(C_{\text{max}} - C_2(t, x))C_1(t, x),$$

$$\frac{\partial C_2(t, x)}{\partial t} = \gamma(C_{\text{max}} - C_2(t, x))C_1(t, x), \quad (2)$$

де γ і C_{max} – сталі матеріалу скелета фільтра (C_{max} – максимальна концентрація домішки в скелеті). При цьому пористість приймаємо сталою, а вираз $\gamma(C_{\text{max}} - C_2)C_1$ визначає сорбцію (десорбцію) домішкових частинок.

Граничні умови запишемо у вигляді (рис. 1)

$$C_1(t, x)|_{x=0} = C_0, \quad C_1(t, x)|_{x=\ell} = 0, \quad (3)$$

де концентрацію C_0 можемо вважати сталою.

Прийmemo нульові початкові умови

$$C_1(t, x)|_{t=0} = 0, \quad C_2(t, x)|_{t=0} = 0. \quad (4)$$

Відмітимо, що коли $\frac{\partial C_2}{\partial t} = 0$, то $C_2 = \text{const} =$

$= C_{\text{max}}$. Також зазначимо, що крайова задача (2)–(4) сформульована у природній безрозмірній формі [20]:

$$t = \gamma\tau, \quad x = (\gamma/D)^{1/2} \xi,$$

де $[\tau] = \text{с}$, $[\xi] = \text{м}$, $[\gamma] = \text{с}^{-1}$, $[D] = \text{м}^2/\text{с}$.

Точні аналітичні розв'язки нелінійної крайової задачі (2)–(4) знайти складно. Тому для побудови наближених розв'язків цієї системи рівнянь

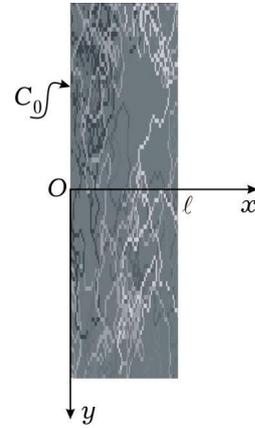


Рис. 1

застосуємо метод послідовних наближень у вигляді інтегральних рядів Неймана, які отримаємо розвиненням відповідних функцій в околах розв'язків двох типів лінеаризованих крайових задач.

2. Лінеаризована постановка I. Лінеаризуємо систему рівнянь (2). Тоді маємо

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{C}_1(t, x)}{\partial t} + v \frac{\partial \bar{C}_1(t, x)}{\partial x} &= D \frac{\partial^2 \bar{C}_1(t, x)}{\partial x^2} - k \bar{C}_1(t, x), \\ \frac{\partial \bar{C}_2(t, x)}{\partial t} &= k \bar{C}_1(t, x), \quad k = \gamma C_{\max}, \end{aligned} \quad (5)$$

де функції концентрації $\bar{C}_1(t, x)$ і $\bar{C}_2(t, x)$ задовольняють граничні (3) і початкові умови (4).

Крайову задачу (2)–(4) зведемо до системи інтегральних рівнянь. Розглядаючи нелінійні доданки у (2) як «джерела», подамо розв'язок крайової задачі у вигляді суми розв'язку однорідної крайової задачі (5), (3), (4) і згортки функцій Гріна з джерелом [18]:

$$\begin{aligned} C_1(t, x) &= C_1^h(t, x) + \int_0^t \int_0^\ell G_1(t, t'; x, x') \gamma C_1(t', x') C_2(t', x') dx' dt', \\ C_2(t, x) &= C_2^h(t, x) - \int_0^t \int_0^\ell G_2(t, t'; x, x') \gamma C_1(t', x') C_2(t', x') dx' dt', \end{aligned} \quad (6)$$

де $C_1^h(t, x)$, $C_2^h(t, x)$ – розв'язки лінеаризованої задачі (5), (3), (4), а $G_1(t, t'; x, x')$, $G_2(t, t'; x, x')$ – функції Гріна задачі (2), (4).

Для знаходження розв'язків однорідної крайової задачі (5), (3), (4) зведемо її до задачі з нульовими граничними умовами і застосуємо інтегральне перетворення Лапласа за часовою змінною [16] і таке скінченне інтегральне перетворення за просторовою координатою [9]:

$$\begin{aligned} \bar{f}(\tau, n) &= \int_0^\ell f(\tau, x) \exp\left(\frac{-vx}{2D}\right) \sin(y_n x) dx, \quad n = 1, 2, \dots, \\ f(t, x) &= \frac{2}{\ell} \exp\left(\frac{vx}{2D}\right) \sum_{n=1}^{\infty} \bar{f}(t, n) \sin(y_n x), \quad y_n = \frac{n\pi}{\ell}. \end{aligned} \quad (7)$$

Виконуючи відповідні обчислення [20], для функції $\bar{C}_1(x, t)$ знайдемо

$$\begin{aligned} \bar{C}_1(t, x) &= C_0 \left(1 - \frac{x}{\ell}\right) e^{v_d x} - \frac{2}{\ell} e^{v_d x} \sum_{n=1}^{\infty} \sin(y_n x) \left\{ C_0 v_{yn} \times \right. \\ &\quad \left. \times \left[1 - \frac{2v_d}{y_n \ell} (1 + (-1)^{n+1} e^{-v_d \ell}) \right] e^{-a_n t} + B_n \frac{1}{a_n} (1 - e^{-a_n t}) \right\}, \end{aligned} \quad (8)$$

де $v_d = v/2B$, $v_{yn} = \frac{y_n}{v_d^2 + y_n^2}$, $a_n = D(y_n^2 + v_d^2) + k$,

$$\begin{aligned} B_n &= v \frac{C_0}{\ell} v_{yn} [1 + (-1)^{n+1} e^{-v_d \ell}] - \\ &\quad - k C_0 v_{yn} \left[1 - \frac{1}{\ell} \frac{2v_d}{v_d^2 + y_n^2} (1 + (-1)^{n+1} e^{-v_d \ell}) \right]. \end{aligned}$$

Для знаходження концентрації частинок у зв'язаному стані підставимо отриману формулу (8) у друге з рівнянь системи (5) та проінтегруємо його.

В результаті, з урахуванням початкових умов (4), маємо

$$\bar{C}_2(t, x) = kC_0 \left(1 - \frac{x}{\ell}\right) t e^{v_d x} - \frac{k}{\ell} e^{v_d x} \sum_{n=1}^{\infty} \sin(y_n x) \left\{ \frac{C_0 v_{y_n}}{a_n} \times \right. \\ \left. \times \left[1 - \frac{2v_d}{y_n \ell} (1 + (-1)^{n+1} e^{-v_d \ell}) + \frac{B_n}{a_n} \right] (1 - e^{-a_n t}) + B_n \frac{t}{a_n} \right\}. \quad (9)$$

Зазначимо, що у виразі (9) для концентрації зв'язаних частинок містяться два доданки, прямо пропорційні до часу тривалості процесу конвективної дифузії, що супроводжується сорбційним процесом.

Знайдемо тепер функції Гріна $G_1(t, t'; x, x')$, $G_2(t, t'; x, x')$. За означенням, вони є розв'язком відповідної системи рівнянь з точковим джерелом та нульовими граничними і початковими умовами [22, 23]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial G_1}{\partial t} - D \frac{\partial^2 G_1}{\partial x^2} + v \frac{\partial G_1}{\partial x} + kG_1 &= \delta(x - x') \delta(t - t'), \\ \frac{\partial G_2}{\partial t} - kG_2 &= 0, \\ G_1(t, t'; x, x')|_{x=0} &= 0, \quad G_1(t, t'; x, x')|_{x=\ell} = 0, \\ G_1(t, t'; x, x')|_{t=0} &= 0, \quad G_2(t, t'; x, x')|_{t=0} = 0. \end{aligned} \quad (10)$$

Проінтегруємо друге з рівнянь системи (10):

$$G_2(t, t'; x, x') = k \int_0^t G_1(t, t'; x, x') dt. \quad (11)$$

Для знаходження функції $G_1(t, t'; x, x')$ застосуємо до першого рівняння системи (5) інтегральне перетворення Лапласа за часом і інтегральне перетворення (7) за просторовою координатою. Тоді у просторі зображень отримаємо рівняння

$$[s + a_n] \tilde{G}_1(s, t'; y_n, x') = \exp\left(\frac{-vx'}{2D}\right) \sin(y_n x') e^{-st'}. \quad (12)$$

Тут враховано [2], що

$$\begin{aligned} \int_0^{\ell} \delta(x - x') \exp\left(\frac{-vx}{2D}\right) \sin(y_n x) dx &= \exp\left(\frac{-vx'}{2D}\right) \sin(y_n x'), \\ \int_0^{\infty} e^{-st} \delta(t - t') dt &= e^{-st'}. \end{aligned}$$

Розв'язок рівняння (12) має вигляд

$$\tilde{G}_1 = \frac{1}{s + a_n} \exp\left(\frac{-vx'}{2D}\right) \sin(y_n x') e^{-st'}. \quad (13)$$

Тоді, застосовуючи до виразу (13) обернене перетворення Лапласа з використанням теореми запізнення [17], знайдемо

$$\bar{G}_1(t, t'; y_n, x') = \theta(t - t') \exp\left(\frac{-vx'}{2D}\right) \sin(y_n x') e^{-a_n(t-t')}.$$

До отриманого виразу застосуємо обернене перетворення (7) і врахуємо теорему запізнення:

$$\begin{aligned} G_1(t, t'; x, x') &= \frac{2}{\ell} \theta(t - t') \exp\left(\frac{v(x - x')}{2D}\right) \times \\ &\times \sum_{n=1}^{\infty} e^{-a_n(t-t')} \sin(y_n x) \sin(y_n x'). \end{aligned} \quad (14)$$

Далі шляхом підстановки знаходимо функцію Гріна $G_2(t, t'; x, x')$:

$$G_2(t, t', x, x') = -\theta(t - t') \frac{2k}{\ell} \exp\left(\frac{v(x - x')}{2D}\right) \times \\ \times \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e^{-a_n(t-t')}}{a_n} \sin(y_n x) \sin(y_n x'). \quad (15)$$

3. Ряди Неймана для системи інтегральних рівнянь. Розв'язки системи інтегральних рівнянь (6) побудуємо методом послідовних ітерацій [8, 15], розкладаючи функції $C_1(t, x)$ і $C_2(t, x)$ в ряди в околах розв'язків однорідної лінійної крайової задачі (8), (9). Тобто за нульові наближення приймаємо

$$C_1^h(t, x) = \bar{C}_1(t, x), \quad C_2^h(t, x) = \bar{C}_2(t, x).$$

Щоб отримати першу ітерацію [15], запишемо значення функцій концентрацій $C_1(t, x)$, $C_2(t, x)$ в точці (t', x') , оскільки система інтегральних рівнянь (6) справджується для всіх точок області $\{t \in [0, T), T < \infty, x \in [0, \ell]\}$, зокрема при $t = t'$ і $x = x'$. Отже, маємо

$$C_1(t', x') = C_1^h(t', x') + \int_0^{t'} \int_0^{\ell} G_1(t', t''; x', x'') \gamma C_1(t'', x'') C_2(t'', x'') dx'' dt'', \\ C_2(t', x') = C_2^h(t', x') - \int_0^{t'} \int_0^{\ell} G_2(t', t''; x', x'') \gamma C_1(t'', x'') C_2(t'', x'') dx'' dt''. \quad (16)$$

Підставивши вирази (16) у праву частину рівнянь (6), отримаємо

$$C_1(t, x) = C_1^h(t, x) + \int_0^t \int_0^{\ell} G_1(t, t'; x, x') \gamma C_1^h(t', x') C_2^h(t', x') dx' dt' + \\ + \int_0^t \int_0^{\ell} G_1(t, t'; x, x') \gamma \int_0^{t'} \int_0^{\ell} G_1(t', t''; x', x'') \times \\ \times \gamma C_1^h(t'', x'') C_2^h(t'', x'') dx'' dt'' dx' dt', \\ C_2(t, x) = C_2^h(t, x) - \int_0^t \int_0^{\ell} G_2(t, t'; x, x') \gamma C_1^h(t', x') C_2^h(t', x') dx' dt' + \\ + \int_0^t \int_0^{\ell} G_2(t, t'; x, x') \gamma \int_0^{t'} \int_0^{\ell} G_2(t', t''; x', x'') \times \\ \times \gamma C_1^h(t'', x'') C_2^h(t'', x'') dx'' dt'' dx' dt'. \quad (17)$$

Записавши значення концентрацій $C_1(t, x)$, $C_2(t, x)$ в точці (t'', x'') і підставивши їх у праву частину (17), отримаємо другу ітерацію. Продовжуючи таку операцію нескінченну кількість разів, отримуємо нескінченні інтегральні ряди Неймана [6, 8]:

$$C_1(t, x) = C_1^h(t, x) + \int_0^t \int_0^{\ell} G_1 \gamma C_1^h C_2^h dx' dt' + \\ + \int_0^t \int_0^{\ell} G_1 \gamma \int_0^{t'} \int_0^{\ell} G_1 \gamma C_1^h C_2^h dx'' dt'' dx' dt' + \\ + \int_0^t \int_0^{\ell} G_1 \gamma \int_0^{t'} \int_0^{\ell} G_1 \gamma \int_0^{t''} \int_0^{\ell} G_1 \gamma C_1^h C_2^h dx''' dt''' dx'' dt'' dx' dt' + \dots,$$

$$\begin{aligned}
C_2(t, x) = & C_2^h(t, x) - \int_0^t \int_0^\ell G_2 \gamma C_1^h C_2^h dx' dt' + \\
& + \int_0^t \int_0^\ell G_2 \gamma \int_0^{t'} \int_0^\ell G_2 \gamma C_1^h C_2^h dx'' dt'' dx' dt' - \\
& - \int_0^t \int_0^\ell G_2 \gamma \int_0^{t'} \int_0^\ell G_2 \gamma \int_0^{t''} \int_0^\ell G_2 \gamma C_1^h C_2^h dx''' dt''' dx'' dt'' dx' dt' + \dots \quad (18)
\end{aligned}$$

Зазначимо, що для функції $C_1(t, x)$ ряд Неймана є знакосталим (додатним), а для функції $C_2(t, x)$ – знакозмінним.

Також відмітимо, що формули (18) справджуються для довільних крайових умов, які накладаються у крайових задачах фільтрації з урахуванням сорбційного процесу у пористих шарах.

Для наближених обчислень функцій концентрацій $C_1(t, x)$ і $C_2(t, x)$ обмежимося двома першими членами рядів Неймана (18), тобто обчислення проводимо за формулами (17). Підставивши отримані розв'язки однорідної крайової задачі (8) і (9), а також вирази для функцій Гріна (14) і (15) у співвідношення (16), одержимо

$$C_1(t, x) \approx C_1^h(t, x) + \int_0^t \int_0^\ell G_1(t, t'; x, x') \gamma C_1^h(t', x') C_2^h(t', x') dx' dt', \quad (19)$$

$$C_2(t, x) \approx C_2^h(t, x) - \int_0^t \int_0^\ell G_2(t, t'; x, x') \gamma C_1^h(t', x') C_2^h(t', x') dx' dt'. \quad (20)$$

Формули (19), (20) для концентрацій домішки у розчині $C_1(t, x)$ та сорбованої речовини на скелеті фільтра $C_2(t, x)$ містять «однорідну частину» – розв'язок задачі конвективної дифузії у середовищі з пастками для мігруючих домішкових частинок [19] і «неоднорідну частину», яка описує вплив нелінійної складової сорбційних процесів у тілі. При цьому «неоднорідний» доданок є пропорційним до коефіцієнта γ , який може бути одним з нормуючих коефіцієнтів при переході до безрозмірних змінних, зокрема природної безрозмірної форми [20], тоді $\gamma = 1$.

4. Числові експерименти отриманих розв'язків за лінеаризованої постановки I. Дослідимо розподіли домішкової речовини у пористому тілі за дії джерела маси на поверхні на основі розрахункових формул (19), (20) з урахуванням співвідношень (8), (9), (14), (15). Чисельне інтегрування подвійних інтегралів здійснювали методом кубатур за формулою прямокутників, де розбиття області інтегрування складало 50×50 елементарних підобластей, площа яких дорівнює $t/50 \times \ell/50$ [1, 3, 5, 7]. За базові параметри прийняли такі значення коефіцієнтів: $t = 0.3$, $D = 1$, $v = 3$, $\gamma = 1$, $\ell = 1$, $C_{\max} = 0.7$. При цьому точність обчислення рядів у формулах (8), (9) і (14), (15) по n становить 10^{-7} .

Розподіли концентрації домішкової речовини у тілі в різні моменти безрозмірного часу проілюстровано на рис. 2 (для $v = 3$) і рис. 4 (для $v = 6$). На рис. 2а і рис. 4а показано характерні розподіли концентрації частинок у водному розчині $C_1(t, x)/C_0$ у моменти часу $t = 0.01, 0.05, 0.08, 0.1, 0.3$ (криві 1'/1''–5'/5'' відповідно). На рис. 2б і рис. 4б наведено графіки функції концентрації сорбованої речовини $C_2(t, x)/C_0$ в моменти $t = 0.1, 0.3, 0.5, 0.8, 1.0$ (криві 1'/1''–5'/5'' відповідно). Тут і надалі криві 1'–5'

побудовано з урахуванням нелінійного доданка за відповідними формулами (19), (20), а криві 1''–5'' описують розв'язки $C_1(t, x)/C_0$ або $C_2(t, x)/C_0$ лінійної крайової задачі, обчислені за формулами (8) або (9).

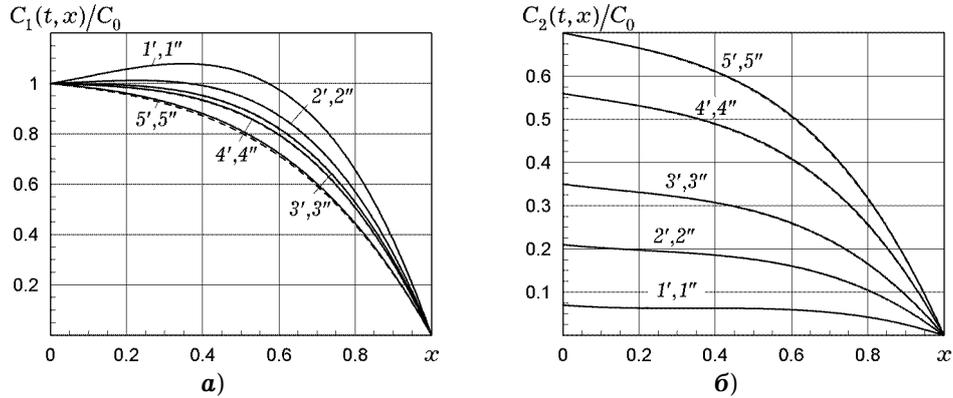


Рис. 2

На рис. 3 (для $v = 3$) та рис. 5 (для $v = 6$) наведено значення нелінійної частини розв'язків $\Delta_1 = (C_1 - C_1^h)/C_0$ (рис. 3а) і $\Delta_2 = (C_2 - C_2^h)/C_0$ (рис. 3б) уздовж осі Ox (криві 1–5) у моменти часу і значення параметрів задачі, що відповідають кривим на рис. 2 і рис. 4.

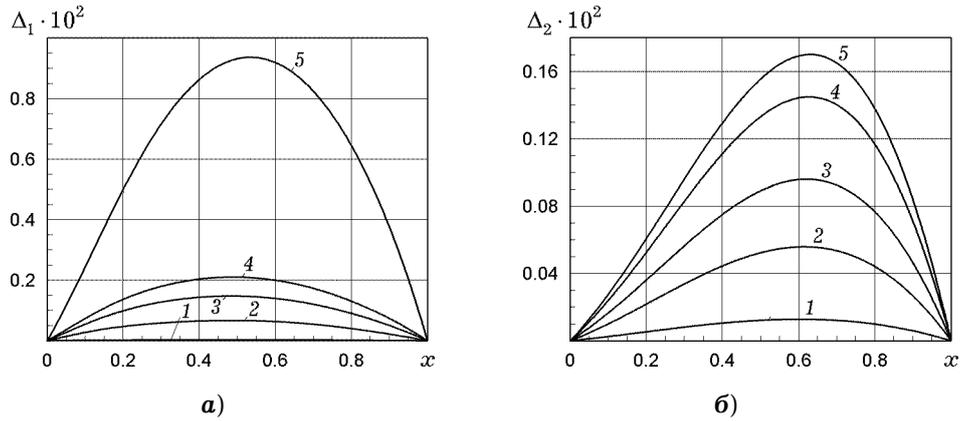


Рис. 3

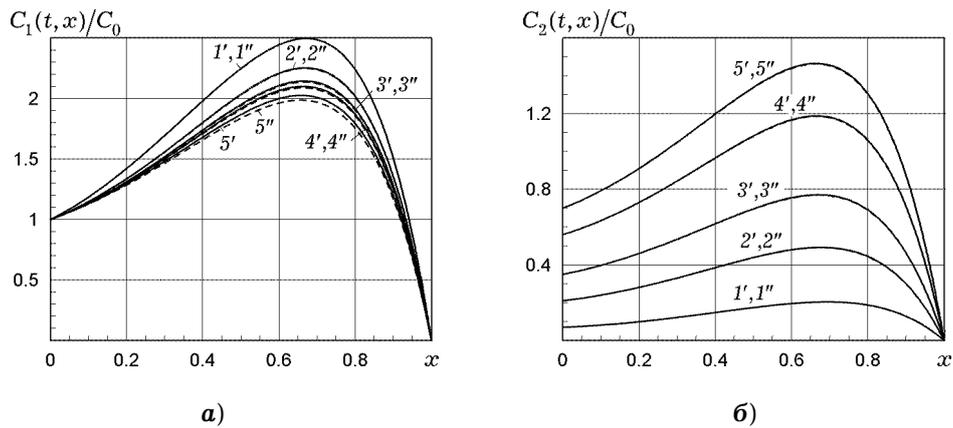


Рис. 4

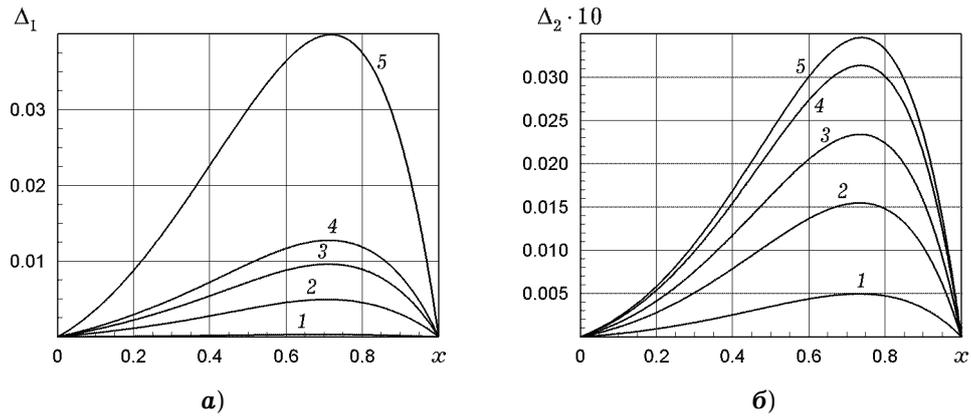


Рис. 5

На рис. 6 показано розподіли концентрацій домішкової речовини $C_1(t, x)/C_0$ (рис. 6а) та $C_2(t, x)/C_0$ (рис. 6б) для різних значень коефіцієнта швидкості конвективного перенесення $v = 1, 3, 4.5, 6, 7.5$ (криві 1'/1''-5'/5'').

На рис. 7 наведено значення нелінійної частини розв'язків $\Delta_1 = (C_1 - C_1^h)/C_0$ (рис. 7а) і $\Delta_2 = (C_2 - C_2^h)/C_0$ (рис. 7б) уздовж осі Ox . Тут криві 1-5 відповідають значенням параметрів кривих на рис. 6.

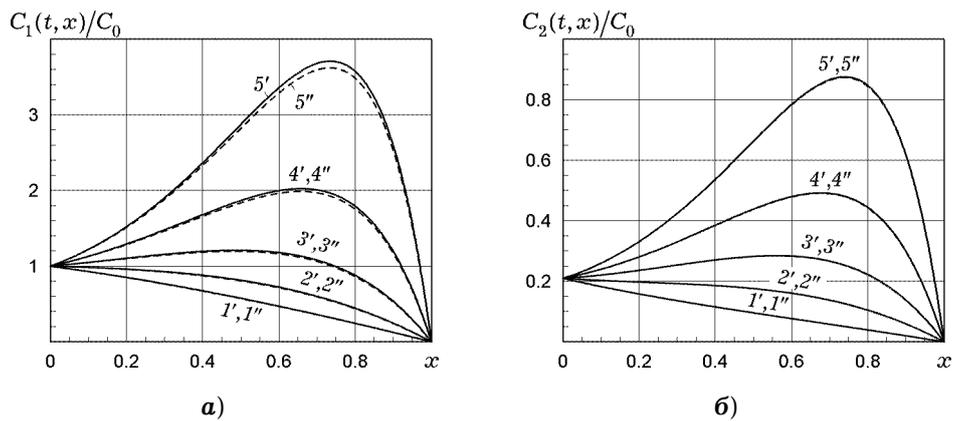


Рис. 6

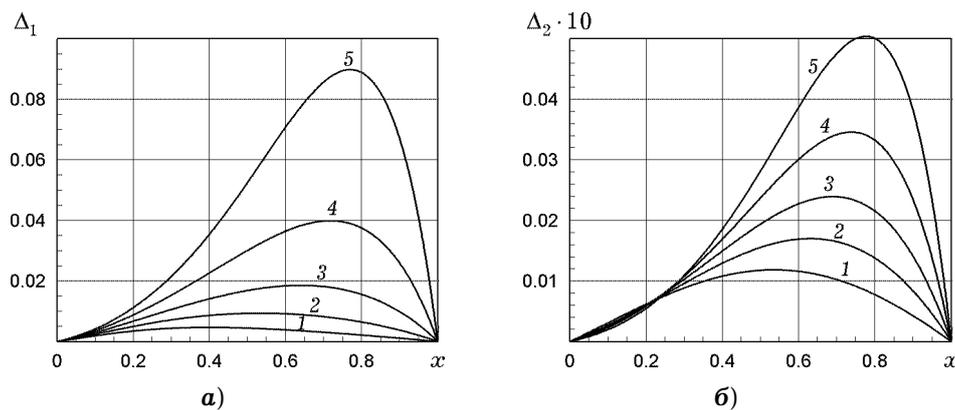


Рис. 7

Рис. 8 ілюструє розподіл концентрацій домішки $C_1(t, x)/C_0$ (рис. 8а) та $C_2(t, x)/C_0$ (рис. 8б) при різних максимальних значеннях концентрації частинок $C_{\max} = 0.4, 0.5, 0.6, 0.7, 0.8$, здатних сорбуватися на скелеті тіла (криві 1'/1''-5'/5'').

На рис. 9 наведено значення нелінійної частини розв'язків Δ_1 (рис. 9а) і Δ_2 (рис. 9б) уздовж осі Ox . Криві 1-5 відповідають значенням параметрів кривих на рис. 8.

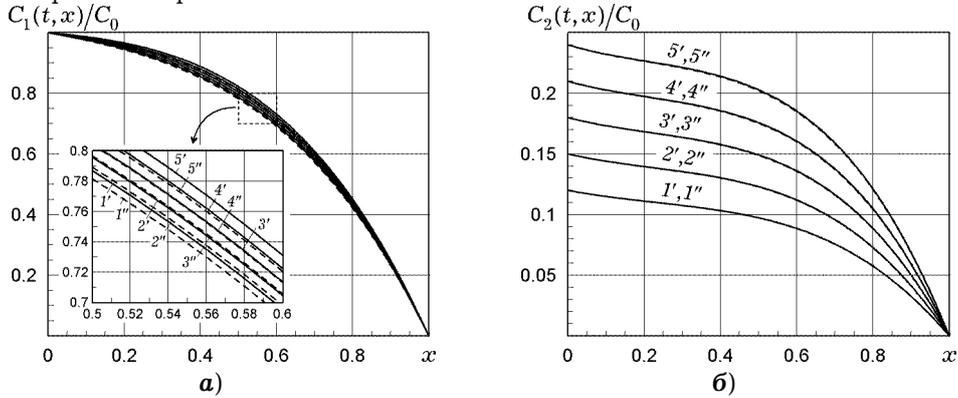


Рис. 8

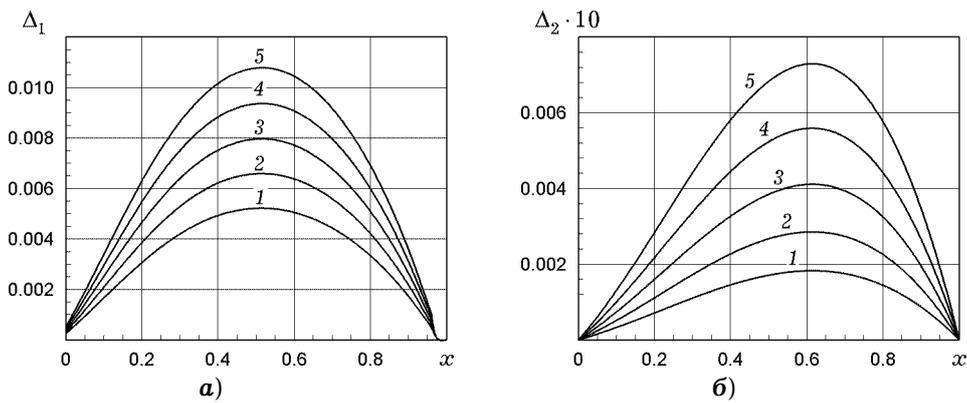


Рис. 9

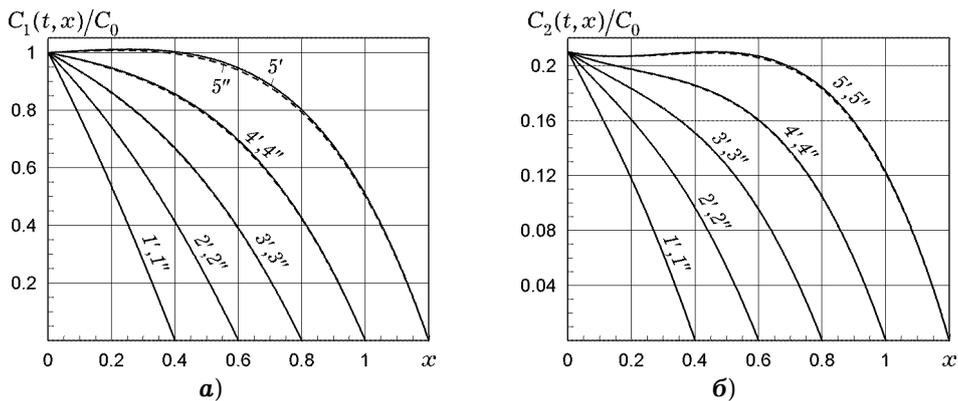


Рис. 10

На рис. 10 наведено розподіли функцій концентрацій домішки $C_1(t, x)/C_0$ (рис. 10а) та $C_2(t, x)/C_0$ (рис. 10б) для різних значень товщини

фільтра $\ell = 0.4, 0.6, 0.8, 1.0, 1.2$ (криві $1'/1''-5'/5''$) при значеннях $\nu = 3$ та $t = 0.3$.

Відповідні їм значення нелінійних частин розв'язків Δ_1 та Δ_2 наведено на рис. 11.

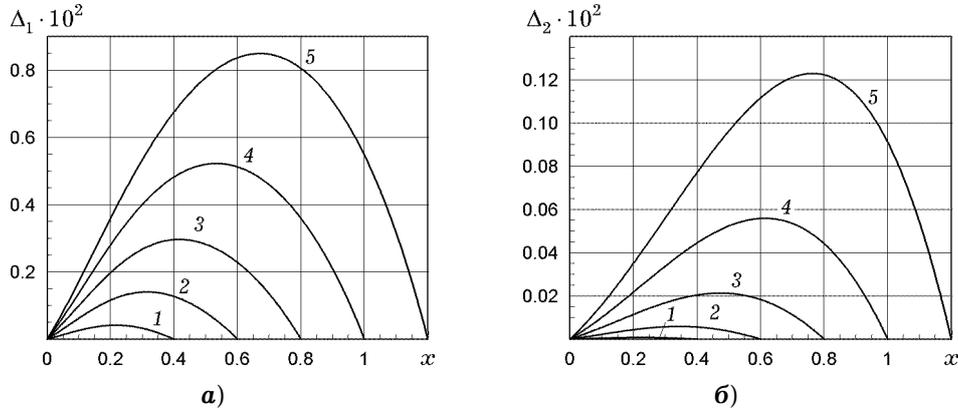


Рис. 11

5. Лінеаризована постановка II. При використанні ітераційних методів нульове наближення розв'язку вибирають, виходячи з певних математичних або фізичних міркувань. При цьому, як правило, залежність процедури побудови розв'язку або швидкості збіжності отриманого ряду від нульового наближення є суттєвою [1, 3, 5, 7, 8, 15]. Тому доцільно дослідити ряди Неймана (18) також для іншого нульового наближення, тобто побудовані в околах розв'язків іншої лінеаризованої постановки вихідної крайової задачі.

У системі рівнянь (2) доданок $\gamma(C_{\max} - C_2)C_1$ (з відповідним знаком) приймемо за «джерело». Тоді одержимо таку систему інтегральних рівнянь:

$$\begin{aligned} C_1(t, x) &= C_1^h(t, x) - \int_0^t \int_0^\ell \tilde{G}_1(t, t'; x, x') \gamma C_1(t', x') (C_{\max} - C_2(t', x')) dx' dt', \\ C_2(t, x) &= C_2^h(t, x) + \int_0^t \int_0^\ell \tilde{G}_2(t, t'; x, x') \gamma C_1(t', x') (C_{\max} - C_2(t', x')) dx' dt'. \end{aligned} \quad (21)$$

Розв'язок системи інтегральних рівнянь (21) будемо методом послідовних ітерацій, розкладаючи функції $C_1(t, x)$ і $C_2(t, x)$ в ряди Неймана в околах розв'язків однорідної лінійної крайової задачі для рівнянь

$$\frac{\partial \tilde{C}_1(t, x)}{\partial t} + \nu \frac{\partial \tilde{C}_1(t, x)}{\partial x} = D \frac{\partial^2 \tilde{C}_1(t, x)}{\partial x^2}, \quad \frac{\partial \tilde{C}_2(t, x)}{\partial t} = 0 \quad (22)$$

за нульових граничних і початкових умов (3), (4).

За нульове наближення ітераційної процедури методу послідовних наближень приймаємо $C_1^h(t, x) = \tilde{C}_1(t, x)$, $C_2^h(t, x) = \tilde{C}_2(t, x)$. Тоді ряди Неймана для функцій $C_1(t, x)$ і $C_2(t, x)$ набудуть вигляду

$$\begin{aligned} C_1(t, x) &= C_1^h(t, x) - \int_0^t \int_0^\ell G_1(t, t'; x, x') \gamma C_1^h(t', x') (C_{\max} - C_2^h(t', x')) dx' dt' + \\ &+ \int_0^t \int_0^\ell G_1(t, t'; x, x') \gamma \int_0^{t'} \int_0^\ell G_1(t', t''; x', x'') \times \\ &\times \gamma C_1^h(t'', x'') (C_{\max} - C_2^h(t'', x'')) dx'' dt'' dx' dt' - \dots, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
C_2(t, x) = & C_2^h(t, x) + \int_0^t \int_0^\ell G_2(t, t'; x, x') \gamma C_1^h(t', x') (C_{\max} - C_2^h(t', x')) dx' dt' + \\
& + \int_0^t \int_0^\ell G_2(t, t'; x, x') \gamma \int_0^{t'} \int_0^\ell G_2(t', t''; x', x'') \times \\
& \times \gamma C_1^h(t'', x'') (C_{\max} - C_2^h(t'', x'')) dx'' dt'' dx' dt' + \dots \quad (23)
\end{aligned}$$

Зауважимо, що для функції $C_1(t, x)$ отриманий тут ряд Неймана є зна-
козмінним, а для функції $C_2(t, x)$ ряд Неймана є знакосталим (додатним).

Як і в попередньому випадку, обмежимося двома першими членами
рядів (23).

Із другого рівняння системи рівнянь (22) і нульової початкової умови
(4) випливає, що $\tilde{C}_2 = 0$. Тоді наближені вирази (23) для концентрацій
 $C_1(t, x)$ і $C_2(t, x)$ можемо сконкретизувати так:

$$C_1(t, x) \approx \tilde{C}_1(t, x) - \int_0^t \int_0^\ell \tilde{G}_1(t, t'; x, x') \gamma C_{\max} \tilde{C}_1(t', x') dx' dt', \quad (24)$$

$$C_2(t, x) \approx \int_0^t \int_0^\ell \tilde{G}_2(t, t'; x, x') \gamma C_{\max} \tilde{C}_1(t', x') dx' dt'. \quad (25)$$

Розв'язок крайової задачі (22), (3), (4) має вигляд [20]

$$\begin{aligned}
\tilde{C}_1(t, x) = & C_0 e^{v_d x} \left\{ \left(1 - \frac{x}{\ell} \right) - \frac{v_d}{D} \left(1 - \frac{x}{\ell} - \frac{\sinh \eta (\ell - x)}{\sinh \eta \ell} \right) - \right. \\
& \left. - \frac{2}{\ell} \sum_{n=1}^{\infty} y_n \sin(y_n x) \left[1 + \frac{v_d}{D y_n^2 + v_d} \right] e^{-(D y_n^2 + v_d) t} \right\}, \quad (26)
\end{aligned}$$

де $\eta = \sqrt{v_d/D}$.

Функції Гріна задачі (22), (3), (4) задовольняють такі крайові задачі
конвективної дифузії з точковими джерелами за нульових крайових умов
першого роду:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \tilde{G}_1(t, x)}{\partial t} - D \frac{\partial^2 \tilde{G}_1(t, x)}{\partial x^2} + v \frac{\partial \tilde{G}_1(t, x)}{\partial x} = & \delta(t - t') \delta(x - x'), \\
\tilde{G}_1(t, t'; x, x') \Big|_{x=0} = 0, \quad \tilde{G}_1(t, t'; x, x') \Big|_{x=\ell} = 0, \quad \tilde{G}_1(t, t'; x, x') \Big|_{t=0} = 0, \quad (27)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \tilde{G}_2}{\partial t} = & \delta(t - t') \delta(x - x'), \\
\tilde{G}_2(t, t'; x, x') \Big|_{t=0} = & 0. \quad (28)
\end{aligned}$$

Функцію Гріна $\tilde{G}_1(t, t'; x, x')$, тобто розв'язок задачі (27), отримуємо за
формулою (14), поклавши $k = 0$. Тоді маємо

$$\begin{aligned}
\tilde{G}_1(t, t'; x, x') = & \frac{2}{\ell} \theta(t - t') \exp\left(\frac{v(x - x')}{2D}\right) \times \\
& \times \sum_{n=1}^{\infty} e^{-D(y_n^2 + v_d^2)(t-t')} \sin(y_n x) \sin(y_n x'). \quad (29)
\end{aligned}$$

Розв'язком задачі (28) є функція:

$$\tilde{G}_2(t, t'; x, x') = \theta(t - t') \delta(x - x').$$

Якщо підставити цей вираз $\tilde{G}_2(t, t'; x, x')$ у формулу (25), то в результаті
отримаємо

$$\begin{aligned}
C_2(t, x) &\approx \gamma C_{\max} \int_0^t \tilde{C}_1(t', x) dt' = \\
&= \gamma C_{\max} C_0 e^{v_d x} \left\{ \left(1 - \frac{x}{\ell}\right) t - \frac{v_d}{D} \left(1 - \frac{x}{\ell} - \frac{\sinh \eta(\ell - x)}{\sinh \eta \ell}\right) - \right. \\
&\quad \left. - \frac{2}{\ell} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{y_n \sin(y_n x)}{D y_n^2 + v_d} \left[1 + \frac{v_d}{D y_n^2 + v_d}\right] \left(1 - e^{-(D y_n^2 + v_d)t}\right) \right\}. \quad (30)
\end{aligned}$$

Проведемо числові експерименти наближених розв'язків (24), (30) вихідної нелінійної крайової задачі, побудованих у вигляді рядів Неймана в околах розв'язків лінеаризованої постановки II вихідної крайової задачі, і порівняємо з відповідними результатами, отриманими для лінеаризованої постановки I вихідної крайової задачі.

6. Числові експерименти отриманих розв'язків за лінеаризованої постановки II. Для порівняння розв'язків нелінійних крайових задач, отриманих у вигляді розвинень у ряди Неймана в околах розв'язків лінійних крайових задач (5), (3) і (4), де за джерело приймаємо вираз $\gamma C_1(t', x') C_2(t', x')$, і в околах розв'язків задачі (22), (3) і (4), коли за джерело розглядаємо вираз $\gamma(C_{\max} - C_2) C_1$, проведемо числові експерименти для тих самих базових значень параметрів задачі.

На рис. 12, 14, 16, 18, 20 наведено порівняльні розподіли функцій концентрацій $C_1(t, x)/C_0$ і $C_2(t, x)/C_0$, обчислені за формулами (19) і (24) (криві 1'–5') і за формулами (20) і (30) (криві 1''–5''). Рис. 12а для $v = 3$ і рис. 14а для $v = 6$ ілюструють порівняльні розподіли концентрацій домішок у водному розчині у моменти безрозмірного часу $t = 0.01, 0.05, 0.08, 0.1, 0.3$ (криві 1'/1''–5'/5''). На рис. 12б і рис. 14б наведено графіки функції концентрації сорбованої речовини в моменти $t = 0.1, 0.3, 0.5, 0.8, 1.0$ (криві 1'/1''–5'/5'').

На рис. 13 (для $v = 3$) та рис. 15 (для $v = 6$) наведено різниці $\tilde{\Delta}_1(t, x)$ між значеннями $C_1(t, x)$, обчисленими за формулами (19), і значеннями $C_1(t, x)$, обчисленими за формулами (24) (рис. 13а, рис. 15а), і різниці $\tilde{\Delta}_2(t, x)$ між значеннями $C_2(t, x)$, обчисленими за формулами (20) і за формулами (30) (рис. 13б, рис. 15б), уздовж осі Ox . Криві 1–5 на рис. 13, рис. 15 відповідають значенням параметрів кривих на рис. 12 та рис. 14.

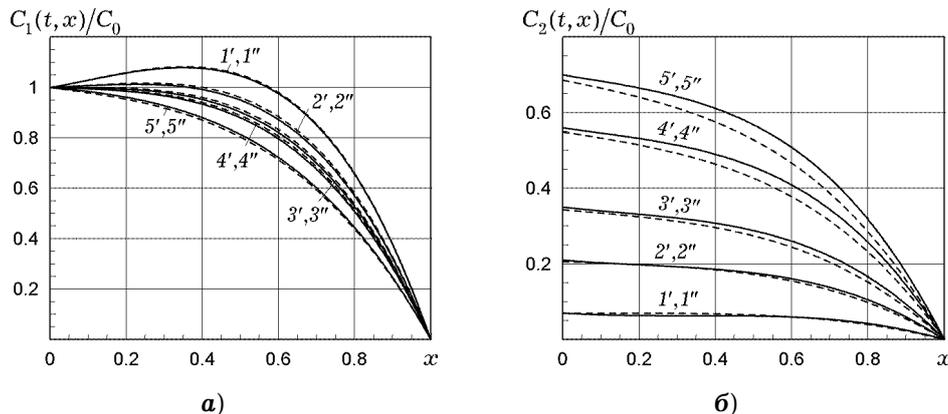


Рис. 12

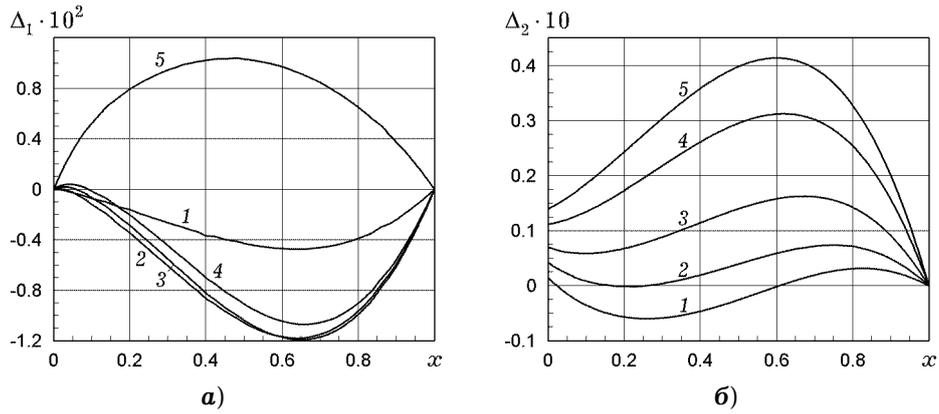


Рис. 13

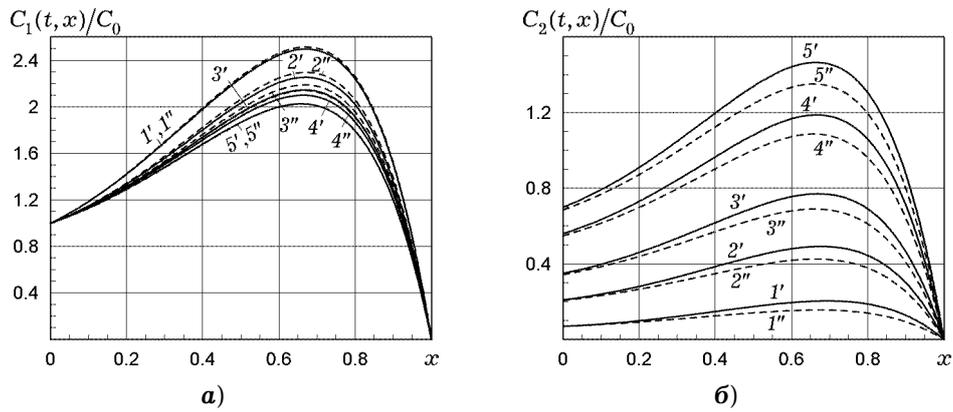


Рис. 14

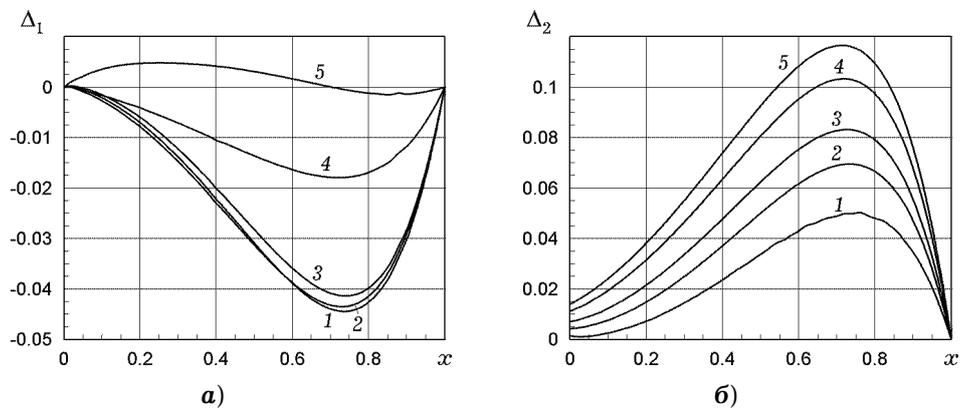


Рис. 15

Рис. 16 демонструє порівняльні розподіли функцій концентрації домішок у водному розчині $C_1(t, x)/C_0$ (рис. 16а) та сорбованої речовини $C_2(t, x)/C_0$ (рис. 16б), обчислені за різних нульових наближень побудови рядів Неймана, для значень коефіцієнта швидкості конвективного перенесення $v = 1.0, 3.0, 4.5, 6.0, 7.5$ (криві 1'/1''-5'/5'').

На рис. 17 наведено різниці $\tilde{\Delta}_1(t, x)$ між розв'язками (19) і (24) (рис. 17а) і різниці $\tilde{\Delta}_2(t, x)$ між розв'язками (20) і (30) (рис. 17б) уздовж осі Ox . Криві 1-5 відповідають значенням параметрів кривих на рис. 16.

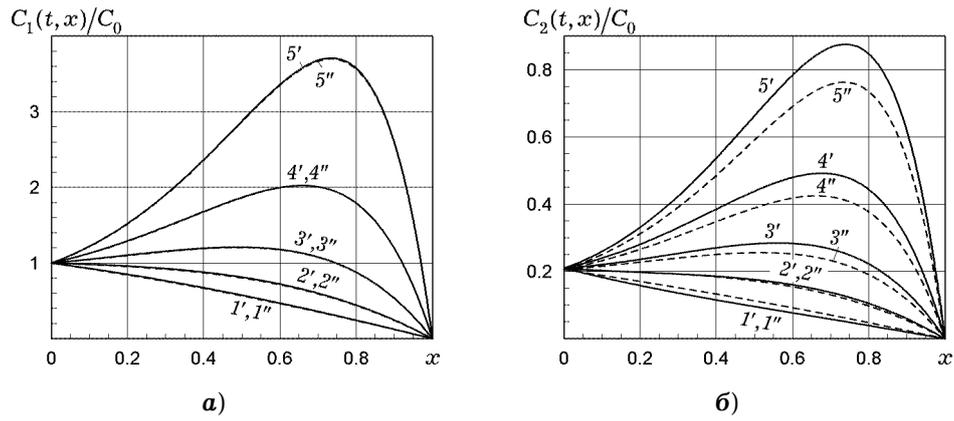


Рис. 16

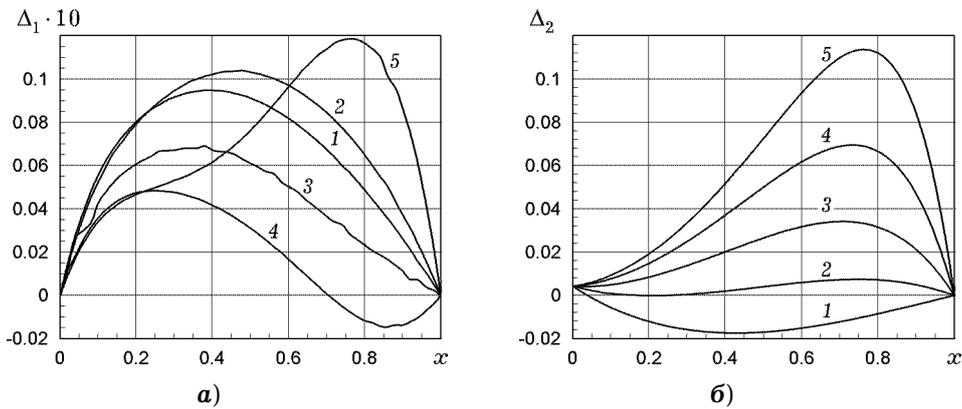


Рис. 17

На рис. 18 показано порівняльні розподіли функцій концентрації домішок $C_1(t,x)/C_0$ у водному розчині (рис. 18а) та $C_2(t,x)/C_0$ у скелеті (рис. 18б), обчислені за різних нульових наближень побудови рядів Неймана, для значень $C_{\max} = 0.4, 0.5, 0.6, 0.7, 0.8$ (криві 1'/1''–5'/5'').

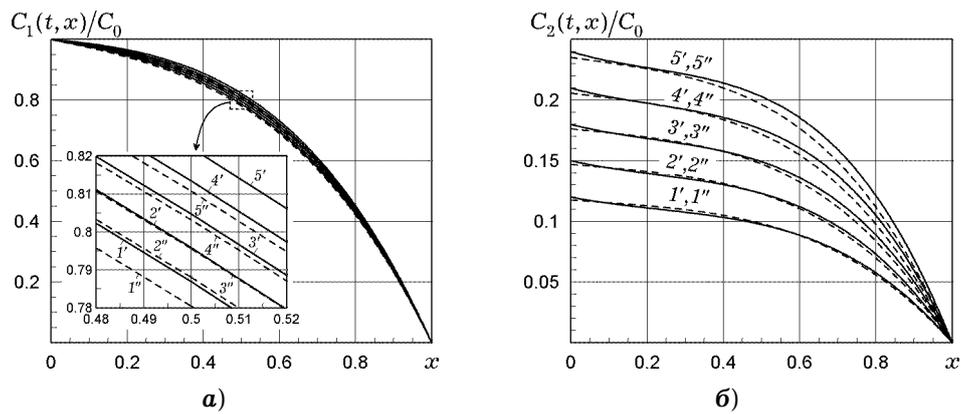


Рис. 18

На рис. 19 наведено різниці $\tilde{\Delta}_1(t,x)$ між розв'язками (19) і (24) (рис. 19а) і різниці $\tilde{\Delta}_2(t,x)$ між розв'язками (20) і (30) (рис. 19б) уздовж осі Ox . Криві 1–5 відповідають значенням параметрів кривих на рис. 18.

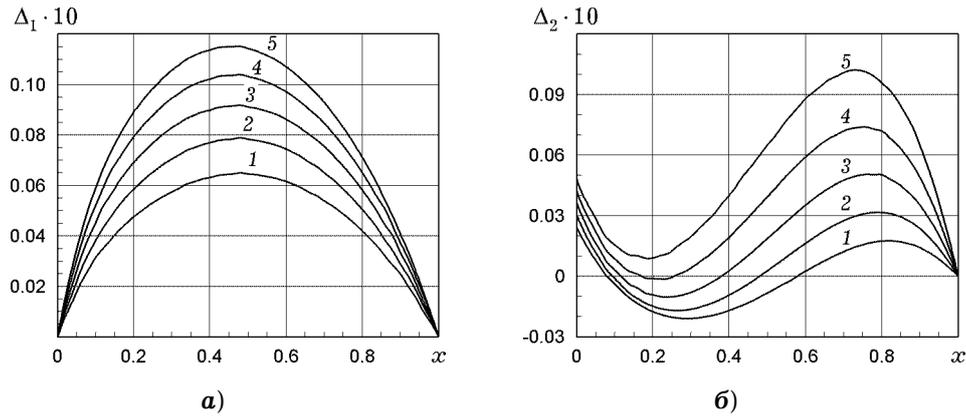


Рис. 19

На рис. 20 проілюстровано розподіли функцій концентрації домішок $C_1(x,t)/C_0$ у водному розчині (рис. 20а) та $C_2(x,t)/C_0$ сорбованої речовини (рис. 20б), обчислені для різних нульових наближень побудови рядів Неймана, для значень товщини пористого шару $\ell = 0.4, 0.6, 0.8, 1.0, 1.2$ (криві 1'/1''–5'/5'').

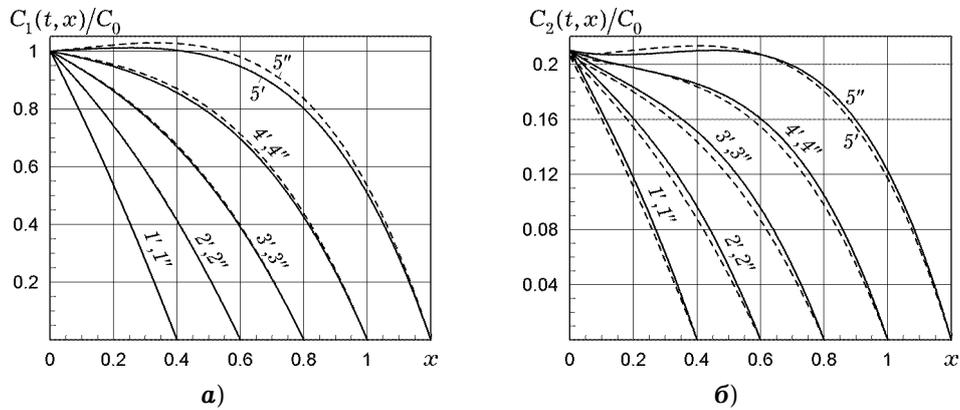


Рис. 20

На рис. 21 наведено різниці $\tilde{\Delta}_1(t,x)$ між розв'язками за формулами (19) і (24) (рис. 21а) і різниці $\tilde{\Delta}_2(t,x)$ між розв'язками за формулами (20) і (30) (рис. 21б) для різних значень товщини пористого шару. Криві 1–5 відповідають значенням параметрів кривих на рис. 20.

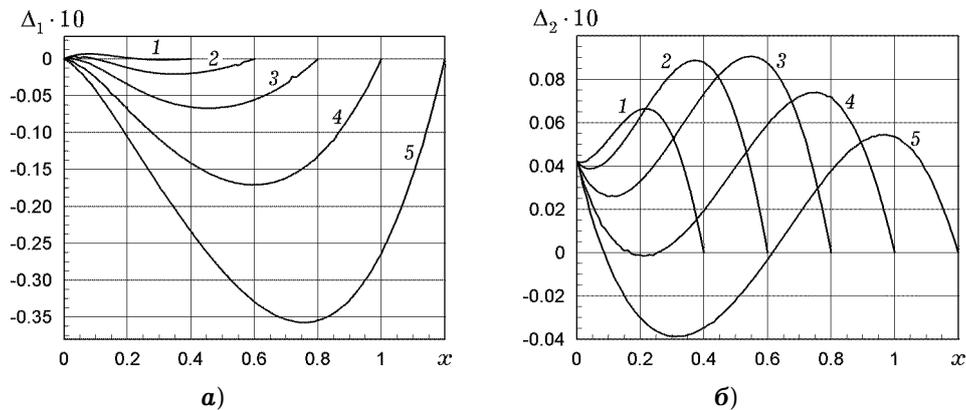


Рис. 21

7. Потоки маси. Оскільки маємо наближену аналітичну формулу (19) для концентрації $C_1(t, x)$ домішкової речовини у водному розчині, то аналітичний вираз для визначення масових потоків через одиницю площі поверхні $x = x_*$ можемо знайти за формулою [21]

$$J(t, x_*) = vC_1(t, x_*) - D \left. \frac{\partial C_1(t, x)}{\partial x} \right|_{x=x_*}. \quad (31)$$

Підставивши вираз (19) у співвідношення (31), отримаємо

$$\begin{aligned} J(t, x_*) = & vC_1^h(t, x_*) - D \left. \frac{\partial C_1^h(t, x)}{\partial x} \right|_{x=x_*} + \\ & + \int_0^t \int_0^\ell \left(vG_1(t, t'; x_*, x') - D \left. \frac{\partial G_1(t, t'; x, x')}{\partial x} \right|_{x=x_*} \right) \times \\ & \times \gamma C_1^h(t', x') C_2^h(t', x') dx' dt'. \end{aligned} \quad (32)$$

Загальну формулу (32) можна сконкретизувати, врахувавши одержані вирази для концентрації домішкової речовини у водному розчині (8) та відповідної функції Гріна (14). При цьому похідні від функції $C_1^h(t, x)$ і від функції Гріна $G_1(t, t'; x, x')$ набудуть вигляду

$$\begin{aligned} \frac{\partial C_1^h(t, x)}{\partial x} = & C_0 e^{v_d x} \frac{1}{\ell} (v_d(\ell - x) - 1) - \frac{2}{\ell} e^{v_d x} \times \\ & \times \sum_{n=1}^{\infty} (v_d \sin(y_n x) + y_n \cos(y_n x)) \left\{ C_0 v_{yn} \left[1 - \frac{2v_d}{y_n \ell} \times \right. \right. \\ & \left. \left. \times (1 + (-1)^{n+1} e^{-v_d \ell}) \right] e^{-a_n t} + B_n \frac{1}{a_n} (1 - e^{-a_n t}) \right\}, \\ \frac{\partial G_1(t, t'; x, x')}{\partial x} = & \frac{2}{\ell} \theta(t - t') e^{v_d(x-x')} \times \\ & \times \sum_{n=1}^{\infty} e^{-a_n(t-t')} \sin(y_n x') (v_d \sin(y_n x) + y_n \cos(y_n x)). \end{aligned}$$

Визначимо потік маси через нижню границю шару $x = \ell$. Враховуючи граничні умови для функцій $C_1^h(t, x)$ і $G_1(t, t'; x, x')$ на цій поверхні, одержимо

$$\begin{aligned} J(t, \ell) = & -D \left. \frac{\partial C_1^h(t, x)}{\partial x} \right|_{x=\ell} - \\ & - \int_0^t \int_0^\ell D \left. \frac{\partial G_1(t, t'; x, x')}{\partial x} \right|_{x=\ell} \gamma C_1^h(t', x') C_2^h(t', x') dx' dt', \end{aligned} \quad (33)$$

де

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial G_1(t, t'; x, x')}{\partial x} \right|_{x=\ell} = & \frac{2}{\ell} \theta(t - t') e^{v_d(\ell-x')} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n y_n e^{-a_n(t-t')} \sin(y_n x'), \\ \left. \frac{\partial C_1^h(t, x)}{\partial x} \right|_{x=\ell} = & -\frac{1}{\ell} e^{v_d \ell} C_0 \left(1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n y_n \times \right. \\ & \left. \times \left\{ v_{yn} \left[1 - \frac{2v_d}{y_n \ell} (1 + (-1)^{n+1} e^{-v_d \ell}) \right] e^{-a_n t} + \frac{B_n}{a_n C_0} (1 - e^{-a_n t}) \right\} \right). \end{aligned}$$

На рис. 22 і рис. 23 проілюстровано вплив характеристик середовища на розподіл потоку маси через нижню границю шару $x = \ell$. Так, залеж-

ності розподілу $J(t, \ell)/C_0$ від часу τ для різних значень коефіцієнта швидкості конвективного перенесення $v = 1.0, 3.0, 4.5, 6.0, 7.5$ демонструє рис. 22а (криві 1–5), а рис. 22б – для різних значень товщини пористого шару, через який відбувається процес фільтрації, $\ell = 0.4, 0.6, 0.8, 1.0, 1.2$ (криві 1–5).

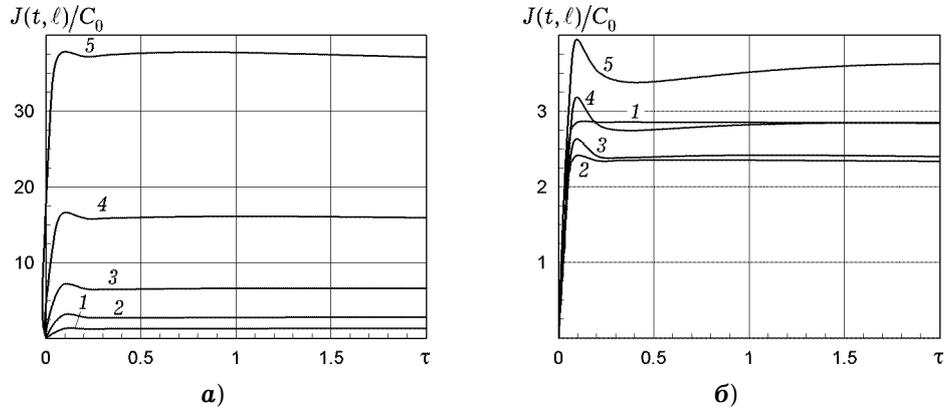


Рис. 22

На рис. 23 показано залежність розподілу потоку $J(t, \ell)/C_0$ від часу τ для різних значень параметра $C_{\max} = 0.4, 0.5, 0.6, 0.7, 0.8$ (криві 1–5).

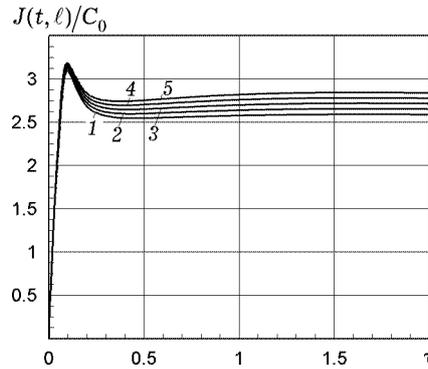


Рис. 23

8. Сумарна кількість речовини, яка пройшла через пористий шар за проміжок часу t^* . Обчислимо сумарну кількість речовини, яка пройшла через пористий шар за деякий проміжок часу t^* , за такою формулою [20]:

$$Q(t^*, \ell) = \int_0^{t^*} J(\tau, \ell) d\tau. \quad (34)$$

Якщо підставити вираз (33) для масового потоку $J(t, \ell)$ через нижню границю шару $x = \ell$ у співвідношення (34), отримаємо

$$Q(t^*, \ell) = - \int_0^{t^*} D \frac{\partial C_1^h(\tau, x)}{\partial x} \Big|_{x=\ell} d\tau - \int_0^{t^*} \int_0^{\tau} \int_0^{\ell} D \frac{\partial G_1(\tau, t'; x, x')}{\partial x} \Big|_{x=\ell} \gamma C_1^h(t', x') C_2^h(t', x') dx' dt' d\tau. \quad (35)$$

Нижче для ілюстрації проведених аналітичних досліджень наведемо графіки кількості $Q(t^*, \ell)$ домішкової речовини, що пройшла через нижню границю шару $x = \ell$. На рис. 24а показано залежність розподілу кількості

$Q(t^*, \ell)$ від часового інтервалу t^* (це проміжок часу, за який ця кількість речовини пройшла через пористий шар) для різних значень $v = 1, 3, 4.5, 6, 7.5$ (криві 1–5). На рис. 24б продемонстровано залежність величини $Q(t^*, \ell)$ від часового інтервалу t^* для різних значень товщини пористого шару, через який відбувається процес фільтрації: $\ell = 0.4, 0.6, 0.8, 1.0, 1.2$ (криві 1–5).

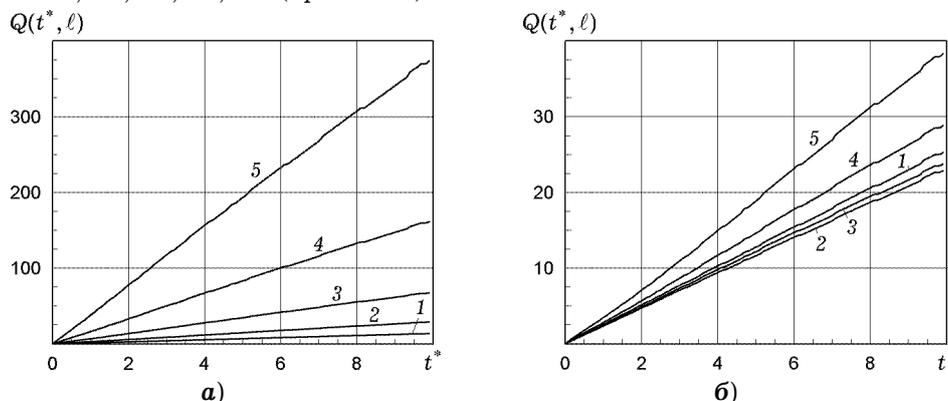


Рис. 24

9. Аналіз розв'язків нелінійної крайової задачі. Зупинимось спочатку на аналізі розподілів концентрацій, побудованих за формулами (19), (20). Зазначимо, що зі збільшенням часу тривалості процесу фільтрації концентрація частинок, що визначають твердість води у розчині, зменшується (рис. 2а, рис. 3а), а концентрація сорбованих частинок збільшується (рис. 2б, рис. 3б). У водному розчині для відносно малих значень швидкості конвективного перенесення ($v = 3$) при збільшенні безрозмірного часу від $t = 0.01$ до $t = 0.3$ значення концентрації $C_1(t, x)/C_0$ зменшуються до 16 % (рис. 2а). При цьому подальше зростання часу тривалості процесу практично не впливає на значення концентрації частинок у розчині, тобто криві 5' і 5'' на рис. 2а характеризують певний усталений розподіл. Для відносно великих значень швидкості конвективного перенесення ($v = 6$) характерним є істотне зростання функції $C_1(t, x)/C_0$ від верхньої поверхні фільтра $x = 0$, досягнення максимуму в точці $x = 0.68$ (причому зі зміною часу точка максимуму завжди знаходиться в околі $x = 0.66$) і спадання до нуля на нижній межі тіла $x = \ell$, що забезпечує виконання граничної умови (3) (рис. 3а). Тут різниця між значеннями $C_1(t, x)/C_0$ в моменти $t = 0.01$ і $t = 0.3$ досягає 19 %. Зі збільшенням часу тривалості процесу зменшення концентрації $C_1(t, x)/C_0$ сповільнюється, доки не досягне усталеного розподілу при $t = 4$.

Концентрація домішкової речовини, сорбованої на скелеті фільтра, зі збільшенням часу тривалості процесу конвективної дифузії завжди зростає в усій області тіла. При цьому зі збільшенням t на порядок (від $t = 0.1$ до $t = 1$) для $v = 3$ максимальне значення концентрації $C_2(t, x)/C_0$ також зростає на порядок (рис. 2а). Для $v = 6$ маємо $\frac{\max_{x \in [0, \ell]} C_2(t, x) \Big|_{t=1}}{\max_{x \in [0, \ell]} C_2(t, x) \Big|_{t=0.1}} = 7.16$. Функція концентрації $C_2(t, x)/C_0$ для малих швидкостей v конвективного перенесення є монотонно спадною (рис. 2б), тоді як при великих значеннях v формується максимум $C_2(t, x)/C_0$, який з часом зростає і зсувається до середини тіла (рис. 4б). Зазначимо, що для функції $C_2(t, x)/C_0$ усталеного режиму немає.

Найбільший вплив на поведінку і значення функцій концентрацій має зміна коефіцієнта швидкості конвективного перенесення v (рис. 6). Для малих значень v характерними є монотонно спадні розподіли функцій $C_1(t, x)/C_0$ і $C_2(t, x)/C_0$, які є близькими до лінійних (рис. 6, криві 1). Зі збільшенням значення v починають формуватися максимуми концентрацій всередині тіла (рис. 6, криві 3), які з подальшим збільшенням v зростають і зсуваються до нижньої границі шару. Так, для $v = 4.5$ точками максимуму концентрацій частинок є $x_{\max C_1} = 0.48$ і $x_{\max C_2} = 0.56$, а для $v = 7$ – $x_{\max C_1} = x_{\max C_2} = 0.74$ (рис. 6а і рис. 6б). При цьому максимальні значення концентрацій зростають у рази, наприклад,

$$\max_{x \in [0, \ell]} C_1(t, x) \Big|_{\substack{v=7 \\ t=0.3}} / \max_{x \in [0, \ell]} C_1(t, x) \Big|_{\substack{v=4.5 \\ t=0.3}} = 3.07,$$

$$\max_{x \in [0, \ell]} C_2(t, x) \Big|_{\substack{v=7 \\ t=0.3}} / \max_{x \in [0, \ell]} C_2(t, x) \Big|_{\substack{v=4.5 \\ t=0.3}} = 3.48.$$

Вплив параметра задачі C_{\max} – максимального значення концентрації домішки, здатної сорбуватися на скелеті тіла, – є істотним для концентрації $C_2(t, x)/C_0$ і незначним для концентрації $C_1(t, x)/C_0$ (рис. 8). При цьому збільшення параметра C_{\max} приводить до зростання обох концентрацій. Так, збільшення значення C_{\max} від $C_{\max} = 0.4$ до $C_{\max} = 0.8$ веде до зростання значень $C_2(t, x)/C_0$ у два рази на всьому проміжку і на 5% значень $C_1(t, x)/C_0$ всередині тіла ($x = 0.5$).

Величина товщини фільтра ℓ також впливає на значення концентрації домішок у водному розчині і концентрації частинок, сорбованих на скелеті (рис. 10). Зазначимо, що чим більша товщина фільтра, тим більших значень набувають концентрації $C_1(t, x)/C_0$ і $C_2(t, x)/C_0$, і на тим більших глибинах починається спадання цих функцій. Також, чим менша товщина ℓ фільтра, тим ближче до лінійного розподілу наближаються функції $C_1(t, x)/C_0$ і $C_2(t, x)/C_0$.

Проаналізуємо тепер вклад нелінійних частин Δ_1 та Δ_2 в отримані розв'язки для концентрацій $C_1(t, x)/C_0$ і $C_2(t, x)/C_0$. Для більшості випадків значення Δ_1 знаходяться в інтервалі $[0, 0.01C_0]$ для $x \in [0, \ell]$, $t \geq 0$. І лише для великих значень коефіцієнта швидкості конвективного перенесення v і значного часу тривалості t процесу конвективної дифузії значення Δ_1 зростають до $0.04C_0$ (крива 5, рис. 5а). Для функції концентрації сорбованої речовини $C_2(t, x)$ (20) величина нелінійної частини розв'язку Δ_2 є на порядок меншою, ніж Δ_1 : $\Delta_2 \in [0, 0.003C_0]$. Для великих значень v і t значення Δ_2 можуть вийти за межі цього інтервалу. Так, $\max_{x \in [0, \ell], t \geq 0} \Delta_2(t, x) = 0.003462C_0$ досягається у точці $x = 0.74$, $t = 1$ (крива 5, рис. 5б).

Зі зростанням часу t збільшується різниця між відповідними розв'язками лінійної і нелінійної крайових задач (рис. 3 і рис. 5), досягаючи свого максимуму на інтервалі $[0.55\ell, 0.8\ell]$. Причому збільшення t від $t = 0.1$ до $t = 0.3$ веде до зростання цієї різниці в рази, наприклад, для $v = 6$:

$$\max_{x \in [0, \ell]} \Delta_1(t, x) \Big|_{\substack{t=0.3 \\ v=6}} / \max_{x \in [0, \ell]} \Delta_1(t, x) \Big|_{\substack{t=0.1 \\ v=6}} = 4.47$$

або на 77.8 % (рис. 5а) і

$$\max_{x \in [0, \ell]} \Delta_2(t, x) \Big|_{\substack{t=0.3 \\ v=6}} / \max_{x \in [0, \ell]} \Delta_2(t, x) \Big|_{\substack{t=0.1 \\ v=6}} = 3.13$$

або на 68 % (рис. 5б). При цьому точки, в яких функції Δ_1 та Δ_2 досягають свого максимуму з часом не змінюються.

Найбільший вплив на значення різниці між розв'язками лінійної і нелінійної крайових задач має величина коефіцієнта конвективного перенесення v . Зі збільшенням значення v максимумами функцій Δ_1 та Δ_2 зростають і зсуваються до нижньої границі тіла. Так, для $v = 4.5$ точками максимумів цих функцій є $x_{\max \Delta_1} = 0.64$ і $x_{\max \Delta_2} = 0.68$, а для $v = 7$ – $x_{\max \Delta_1} = 0.76$ і $x_{\max \Delta_2} = 0.8$ (рис. 7а і рис. 7б). При цьому максимальні значення функцій Δ_1 та Δ_2 зростають у рази, наприклад,

$$\max_{x \in [0, \ell]} \Delta_1(t, x) \Big|_{\substack{v=7 \\ t=0.3}} / \max_{x \in [0, \ell]} \Delta_1(t, x) \Big|_{\substack{v=4.5 \\ t=0.3}} = 4.83,$$

$$\max_{x \in [0, \ell]} \Delta_2(t, x) \Big|_{\substack{v=7 \\ t=0.3}} / \max_{x \in [0, \ell]} \Delta_2(t, x) \Big|_{\substack{v=4.5 \\ t=0.3}} = 2.09.$$

Зміна значення коефіцієнта C_{\max} змінює значення функцій Δ_1 та Δ_2 , проте не змінює їхньої поведінки (рис. 9). Збільшення значення від $C_{\max} = 0.4$ до $C_{\max} = 0.8$ веде до зростання значень $\Delta_1(t, x)$ у два рази і зростання значень $\Delta_2(t, x)$ у чотири рази на всьому проміжку. Проте абсолютні значення Δ_1 і Δ_2 залишаються малими: $\Delta_1 \in [0, 0.0005]$, $\Delta_2 \in [0, 0.01]$.

Величина товщини фільтра ℓ істотно впливає на значення різниці між розв'язками лінійної і нелінійної крайових задач (рис. 11). Зазначимо, що чим більша товщина фільтра, тим більших значень набувають функції Δ_1 і Δ_2 , і на тим більших глибинах функції досягають свого максимуму. При цьому, якщо товщина фільтра ℓ зростає в рази, то значення Δ_1 і Δ_2 зростають на порядки:

$$\max_{x \in [0, \ell]} \Delta_1(t, x) \Big|_{\substack{\ell=0.4 \\ t=0.3}} / \max_{x \in [0, \ell]} \Delta_1(t, x) \Big|_{\substack{\ell=1.2 \\ t=0.3}} = 20.49$$

(рис. 11а),

$$\max_{x \in [0, \ell]} \Delta_2(t, x) \Big|_{\substack{\ell=0.4 \\ t=0.3}} / \max_{x \in [0, \ell]} \Delta_2(t, x) \Big|_{\substack{\ell=1.2 \\ t=0.3}} = 157.43$$

(рис. 11б).

З наведених результатів випливає, що розв'язки лінійної задачі конвективної дифузії домішкової речовини у пористому шарі, що супроводжується сорбційним процесом, загалом добре описують розподіли концентрації домішок як у водному розчині, так і сорбованих на скелеті частинок. Проте для великих товщин фільтрів, особливо за великих значень швидкості конвективного перенесення, коли потрібно отримувати достатньо точні оцінки ефективності роботи водних фільтрів, необхідно розв'язувати нелінійні крайові задачі конвективної дифузії.

10. Порівняльний аналіз розв'язків для різних нульових наближень.

Зазначимо, що вибір нульового наближення при побудові рядів Неймана, у поданні яких містяться розв'язки вихідної нелінійної крайової задачі (36)–(38), не впливає на функції концентрації домішкової речовини для малих часів тривалості процесу фільтрації, $t \in [0, 0.4]$ (рис. 12, 13), малих швид-

костей конвективного перенесення, $v \in (0, 4.5]$ (рис. 16, 17) та значень параметра $C_{\max} \leq 0.5$ (рис. 18, 19). В інших випадках значень характеристик середовища різниця між розподілами функцій концентрації домішок у розчині та сорбованої речовини, обчисленими за різних нульових наближень, може досягати значення $0.12C_0$ (криві 5, рис. 17). Тоді для покращення точності обчислень у випадку нульового наближення (16) потрібно враховувати наступні члени рядів Неймана (14).

Для різних значень параметрів задачі функції $\tilde{\Delta}_1(t, x)$ і $\tilde{\Delta}_2(t, x)$ можуть бути додатними, від'ємними та знакозмінними (наприклад, рис. 15, рис. 19). Тобто функції концентрації $C_1(t, x)$, обчислені за формулою (24), і функції $C_2(t, x)$, пораховані за (30), є більшими або меншими від функцій $C_1(t, x)$, обчислених за формулою (19), та $C_2(t, x)$ – за формулою (20), відповідно. При цьому абсолютні значення різниці $\tilde{\Delta}_1(t, x)$ концентрацій у розчині є більшими від абсолютних значень $\tilde{\Delta}_2(t, x)$ концентрацій сорбованих на скелеті частинок домішки для невеликих часових інтервалів (рис. 12, рис. 13) незалежно від величин інших параметрів задачі. Для великих часів тривалості процесу конвективної дифузії характерним є співвідношення $|\tilde{\Delta}_1(t, x)| \leq |\tilde{\Delta}_2(t, x)|$ (див. рис. 14, рис. 15).

Вплив зміни значень параметрів C_{\max} та ℓ на величину різниць функцій концентрацій, обчислених за різних нульових наближень, є неістотним. Наприклад, збільшення товщини шару від $\ell = 0.4$ до $\ell = 1.2$ приводить до зростання $|\tilde{\Delta}_1(t, x)|$ до $0.036C_0$ і $|\tilde{\Delta}_2(t, x)|$ до $0.009C_0$ (див. рис. 21).

11. Аналіз потоків маси та кількості домішкової речовини, що пройшла через шар. Зазначимо, що поведінка функції потоку маси є однаковою незалежно від величин параметрів задачі: функція $J(t, \ell)/C_0$ різко зростає від початку процесу, досягаючи свого максимуму в околі моменту $t = 0.1$, а потім відбувається спадання до 15 % і вихід на усталений режим (рис. 22а, рис. 23). Причому, чим більше значення швидкості конвективного перенесення v , тим більших значень набуває потік домішкової речовини через нижню поверхню шару (рис. 22а). Наприклад, при зростанні v від $v = 4.5$ до $v = 7.5$ величина потоку зростає у п'ять разів на всьому часовому проміжку і $\max_{t \geq 0} J(t, \ell) \Big|_{v=7} / \max_{t \geq 0} J(t, \ell) \Big|_{v=4.5} = 5.26$. Зміна значення максимальної концентрації C_{\max} , яка здатна сорбуватися на скелеті фільтра, не змінює максимальної величини потоку (рис. 23), проте незначно змінює значення $J(t, \ell)/C_0$ в усталеному режимі – до 7 %.

Щодо впливу товщини фільтра, то для малих значень товщини пористого шару є характерним майже миттєвий вихід масового потоку на усталений режим (рис. 22б, крива 1). Зі збільшенням товщини шару спочатку значення функції $J(t, \ell)/C_0$ зменшуються на всьому часовому проміжку (рис. 22б, крива 2), а потім поступово зростають (рис. 22б, криві 3–5).

Проаналізуємо тепер закономірності щодо кількості домішкової речовини, яка пройшла через шар за проміжок часу t^* . Для поведінки функції $Q(t^*, \ell)$ характерним є рівномірне зростання зі збільшенням часового інтервалу t^* , за який речовина пройшла через пористий шар (рис. 24). Як і для потоків маси, чим більшим є значення швидкості конвективного перенесення v , тим більше речовини проходить через нижню поверхню шару

(рис. 24а). Так, при зростанні v від $v = 4.5$ до $v = 7.5$ значення $Q(t^*, \ell)$ зростає більше, ніж у п'ять разів, зокрема, $Q(t^*, \ell)|_{v=7, t^*=1} / Q(t^*, \ell)|_{v=4.5, t^*=1} = 5.64$.

Зауважимо, що зі зростанням t^* різниця між цими кривими збільшується: $Q(t^*, \ell)|_{v=7, t^*=8.6} / Q(t^*, \ell)|_{v=4.5, t^*=8.6} = 5.72$ (криві 3 та 5, рис. 24а).

Зазначимо, що зі збільшенням товщини шару ℓ , через який мігрує домішкова речовина, спочатку спостерігається зменшення значень $Q(t^*, \ell)$ (рис. 24б, криві 1–3), а потім – зростання (рис. 24б, криві 3–5). Так, для $t^* = 8.6$ збільшення ℓ від $\ell = 0.4$ до $\ell = 0.8$ приводить до зменшення значення $Q(t^*, \ell)$ на 6 %, а зростання ℓ від $\ell = 0.8$ до $\ell = 1.2$ веде до збільшення значення $Q(t^*, \ell)$ на 38 %. Зміна значення максимальної концентрації C_{\max} , яка здатна сорбуватися на скелеті фільтра, практично не впливає на кількість речовини, що пройшла через нижню границю $x = \ell$. Наприклад, зі збільшенням значення C_{\max} від $C_{\max} = 0.4$ до $C_{\max} = 0.8$ значення $Q(t^*, \ell)$ зростають до 8 % для $\forall t^*$.

Висновки. У роботі запропоновано нелінійний варіант математичної моделі конвективної дифузії для опису зміни жорсткості води при її фільтрації в пористому тілі, скелет якого утворений з іонообмінних смол (каїнітів) або подрібнених цеолітів чи вугілля. Супутні процеси сорбції-десорбції розуміються як нелінійні джерела при обмеженій ємності скелета. Для нелінійних рівнянь моделі поставлено відповідні задачі математичної фізики та отримано розв'язки у вигляді рядів Неймана в околі двох різних лінеаризованих постановок крайових задач.

Проведено чисельний аналіз розв'язків нелінійної крайової задачі, що відповідають різним фізичним умовам, та зроблено порівняльний аналіз з розв'язками лінеаризованих крайових задач.

Встановлено, що у водному розчині для відносно малих значень швидкості конвективного перенесення зі зростанням часу концентрація домішок зменшується і виходить на ustalений режим. Найбільший вплив на функції концентрацій має швидкість конвективного перенесення, так для малих значень швидкості характерні монотонно спадні розподіли відповідних функцій, які є близькими до лінійних. Зі збільшенням швидкості формуються максимуми концентрацій всередині шару, які з подальшим ростом збільшуються і зсуваються до нижньої границі шару.

Вплив максимального значення концентрації домішки, здатної сорбуватися на скелеті тіла, є істотним для концентрації зв'язаних зі скелетом домішок і незначним для частинок у розчині. При цьому збільшення ємності скелета вдвічі приводить до зростання значень концентрації на скелеті у два рази на всьому проміжку і незначно всередині тіла. Величина товщини фільтра якісно не змінює розподілу досліджуваних концентрацій.

Вклад нелінійних частин в отримані розв'язки для концентрацій для більшості випадків є незначними. Найбільший вплив на значення різниці між розв'язками лінійної і нелінійної крайових задач має коефіцієнт швидкості конвективного перенесення. Величина товщини фільтра також істотно впливає на величину різниці між розв'язками лінійної і нелінійної крайових задач. При цьому, коли товщина фільтра зростає в рази, то значення нелінійних частин зростають на порядки.

Із проведених досліджень можемо зробити висновок, що розв'язки лінійної задачі конвективної дифузії домішкової речовини у пористому шарі, що супроводжується сорбцією, загалом добре описують розподіли концентрації домішок як у водному розчині, так і сорбованих на скелеті частинок.

Проте для великих значень товщини фільтрів та швидкості конвективного перенесення, коли потрібно отримувати достатньо точні оцінки ефективності роботи водних фільтрів, необхідно розв'язувати нелінійні крайові задачі конвективної дифузії.

Зазначимо, що вибір нульового наближення при побудові рядів Неймана, в які входять розв'язки вихідної нелінійної крайової задачі, практично не впливає на функції концентрації домішкової речовини для малих часів фільтрації, конвективного перенесення та ємності скелета. Вплив ємності та товщини на величину різниць функцій концентрацій, обчислених за різних нульових наближень, є неістотним.

Поведінка функції потоку маси є однаковою незалежно від величин параметрів задачі – різко зростає від початку процесу, досягаючи певного максимуму, а потім спадає і виходить на усталений режим. Для кількості речовини, що пройшла через шар, характерним є рівномірне зростання. При цьому, як і для потоків маси, чим більше значення швидкості конвективного перенесення, тим більше речовини проходить через нижню поверхню шару. Зі збільшенням товщини шару, через який мігрує домішкова речовина, спочатку спостерігається зменшення її значень, а потім – зростання. Зміна значення максимальної концентрації, яка здатна сорбуватися на скелеті фільтра, практично не впливає на кількість речовини, що пройшла через нижню границю шару.

1. Бахвалов Н. С., Жидков Н. П., Кобельков Г. М. Численные методы. – Москва: Физматлит, 2002. – 632 с.
2. Гельфанд И. М., Шилов Г. Е. Обобщенные функции и действия над ними. Физматгиз, 1959. – 470 с.
3. Де Гроот С., Мазур П. Неравновесная термодинамика. – Москва: Мир, 1964. – 456 с.
4. Дьярмати И. Неравновесная термодинамика. Теория поля и вариационные принципы. – Москва: Мир, 1975. – 304 с.
5. Каханер Д., Моулер К., Нэш С. Численные методы и программное обеспечение. – Москва: Мир, 2001. – 575 с.
6. Корн Г., Корн Т. Справочник по математике для научных работников и инженеров. – Москва: Наука, 1970. – 832 с.
7. Краснов М. Л. Интегральные уравнения. Введение в теорию. – Москва: Наука, 1975. – 300 с.
8. Крылов В. И. Приближенное вычисление интегралов. – Москва: Наука, 1967. – 500 с.
9. Мартыненко Н. А., Пустыльников Л. М. Конечные интегральные преобразования и их применение к исследованию систем с распределенными параметрами. – Москва: Наука, 1986. – 304 с.
10. Мюнстер А. Химическая термодинамика. – Москва: Мир, 1974. – 295 с.
11. Нигматуллин Р. И. Динамика многофазных сред. Ч. 1. – Москва: Наука, 1987. 464 с.
12. Николаевский В. Н. Механика пористых и трещиноватых сред. – Москва: Недра, 1984. – 232 с.
13. Полубаринова-Кочина П. Я. Теория движения грунтовых вод. – Москва: Недра, 1977. – 664 с.
14. Пригожин И. Введение в термодинамику необратимых процессов. – Москва: Изд-во иностр. лит., 1960. – 127 с.
15. Рытов С. М., Кравцов Ю. А., Татарский В. И. Введение в статистическую радиофизику. Ч. II. Случайные поля. – Москва: Наука, 1978. – 463 с.
16. Самарский А. А., Гулин А. В. Численные методы. – Москва: Наука, 1989. – 430 с.
17. Снеддон И. Преобразования Фурье. – Москва: Изд-во иностр. лит., 1955. – 667 с.
18. Справочник по специальным функциям с формулами, графиками и математическими таблицами / Под ред. М. Абрамовица, И. Стиган. – Москва: Наука, 1979. – 832 с.
19. Тихонов А. Н., Самарский А. А. Уравнения математической физики. – Москва: Наука, 1972. – 735 с.

20. Чапля Є. Я. Математичне моделювання процесів пом'якшення води при фільтрації в пористих середовищах // *Мат. методи та фіз.-мех. поля.* – 2022. – **65**, № 3-4. – С. 224–231.
21. Чапля Є. Я., Чернуха О. Ю. Фізико-математичне моделювання гетеродифузного масопереносу. – Львів: Сполом, 2003. – 128 с.
22. Al-Asheh S., Aidan A. A comprehensive method of ion exchange resins regeneration and its optimization for water treatment // *Promising Techniques for Wastewater Treatment and Water Quality Assessment* / Eds. I. A. Moujдин and J. K. Summers. – Chapter 8. – 2020. – 460 p.
– <https://doi.org/10.5772/intechopen.93429>.
23. Corriou J.-P. Numerical methods and optimization: Theory and practice for engineers. – Springer Int. Publ., 2021. – 715 p.
– <https://link.springer.com/book/10.1007/978-3-030-89366-8>.
24. Duffy D. G. Green's functions with applications. – London: Chapman & Hall/Boca Raton: CRC Press, 2001. – 464 p.
25. Stakgold I., Holst M. J. Green's functions and boundary value problems. – New York: John Wiley & Sons, 2011. – xxi+855p.
– <https://doi.org/10.1002/9780470906538>.
26. Wang Z., Feng Z., Yang L., Wang M. Effective removal of calcium and magnesium ions from water by a novel alginate-citrate composite aerogel // *Gels.* – 2021. – **7**, No. 3. – Article 125. – <https://doi.org/10.3390/gels7030125>.

NONLINEAR MATHEMATICAL MODEL OF CONVECTIVE DIFFUSION OF ADMIXTURE COMPONENTS IN THE PROCESS OF WATER SOFTENING

A nonlinear variant of the mathematical model of convective diffusion is proposed to describe changes in water hardness during its filtration in a porous body whose skeleton is formed of ion-exchange resins (kainites) or crushed zeolites or coal. The accompanying sorption-desorption processes are understood as nonlinear sources with the limited skeleton capacity. For the nonlinear equations of the model, the corresponding problems of mathematical physics are formulated and numerical analysis of their solutions corresponding to various physical conditions is carried out. It is shown that the contribution of nonlinear parts to the obtained solutions for the concentrations is insignificant in most cases. The greatest influence on the difference between the solutions of linear and nonlinear initial-boundary value problems is exerted by the coefficient of convective transfer rate. It is established that the choice of the zero approximation in the construction of the Neumann series, which are the solutions of the original nonlinear initial-boundary value problem, has practically no effect on the impurity concentration functions for small filtration times, convective transfer rate, and skeleton capacity.

Key words: *mathematical modeling, filtration, ions sorption-desorption, water hardness, nonlinear initial-boundary value problem, Neumann series, porous layer.*

¹ Ін-т прикл. проблем механіки і математики
ім. Я. С. Підстригача НАН України, Львів,

Одержано
27.11.22

² Нац. ун-т «Львів. політехніка», Львів