

Аналіз підходів до моделювання масопереносу в нестационарному режимі

Ярослав П'янило¹, Галина П'янило²

¹д.т.н., с.н.с., Центр математичного моделювання Інституту прикладних проблем механіки і математики ім. Я. С. Підстригача НАН України, вул. Дудаєва, 15, Львів, 79005, e-mail: pjanlylo@cmm.lviv.ua

² Центр математичного моделювання Інституту прикладних проблем механіки і математики ім. Я. С. Підстригача НАН України, вул. Дудаєва, 15, Львів, 79005

Значна кількість природних та фізичних процесів описується диференціальними рівняннями в частинних похідних або системами диференціальних рівнянь в частинних похідних. Для знаходження їх розв'язків широкого застосування набули числові методи. Системи диференціальних рівнянь в частинних похідних розв'язуються, в основному, зменшення порядку системи рівнянь або зведенням її до одного диференціального рівняння. Така процедура веде до збільшення порядку диференціального рівняння. При цьому виникають різного роду обмеження та похибки, які можуть призвести до появи додаткових розв'язків, необхідності накладання крайових умов на проміжні похідні тощо. Аналізові таких ситуацій і шляхів їх розв'язання присвячена дана робота.

Ключові слова: математичні моделі, крайові задачі, вхідна інформація, диференціальні рівняння, методи розв'язування крайових задач.

Вступ. Природні та фізичні процеси описується, як правило, системами диференціальних рівнянь (СДР) — звичайних або в частинних похідних. Для знаходження їх розв'язків за різних умов задання вхідної інформації побудована велика кількість методів: аналітичних, числових, асимптотичних, наближених тощо. У більшості методів розв'язування СДР використовують зведення системи до одного диференціального рівняння з наступним його вирішенням. При цьому досить часто виникають певні труднощі як математичного, так і обчислювального характеру. Процедура зведення системи диференціальних до одного рівняння веде до зростання порядку диференціального рівняння і вимагає додаткової вхідної інформації про похідні, яку не завжди можна отримати експериментальними вимірюваннями. При використанні числових методів в процесі дискретизації зростає порядок різницевого рівняння внаслідок чого проходить значна втрата значущих цифр і, як наслідок, значно зростає похибка кінцевого результату.

Метою роботи є аналіз проблем, які виникають при моделюванні процесів масопереносу в складних системах, що описуються диференціальними рівняннями параболічного типу.

1. Гетеродифузне перенесення домішок в пористих середовищах

Гетеродифузне переміщення домішок у шарі товщини ξ_0 ($\xi \in [0, \xi_0]$) у вертикальному напрямі описується системою диференціальних рівнянь в частинних похідних [6]:

$$\begin{cases} \frac{\partial c_1}{\partial \tau} + b \frac{\partial c_1}{\partial \xi} = \frac{\partial^2 c_1}{\partial \xi^2} - a c_1 + c_2, \\ \frac{\partial c_2}{\partial \tau} = d \frac{\partial^2 c_2}{\partial \xi^2} + a c_1 - c_2. \end{cases} \quad (1)$$

Початок осі 0ξ знаходиться на верхній поверхні шару, а $c_1(\xi, \tau)$ і $c_2(\xi, \tau)$ — шукані концентрації за таких крайових умов:

$$c_i(0, \xi) = c_{i0}(\xi), \quad c_i(\tau, 0) = c_{i1}(\tau), \quad c_i(\tau, \xi_0) = c_{i2}(\tau), \quad i = 1, 2,$$

де $c_{i0}(\xi)$, $c_{i1}(\tau)$ і $c_{i2}(\tau)$ — відомі функції координати ξ і часу τ . Тут введено позначення: $\xi = (\lambda_{12} / D_{11})^{1/2} x$ — безрозмірна координата, $\tau = \lambda_{12} t$ — безрозмірний час, $\bar{v}_\xi = \bar{v}(\lambda_{12} / D_{11})^{1/2}$, $d = D_{22} / D_{11}$, $a = \lambda_{11} / \lambda_{12}$, $|\bar{v}_\xi| = b \equiv \text{const}$.

Інші позначення подано в роботі [6].

Класичним методом знаходження аналітичного розв'язку сформульованої задачі є використання інтегрального перетворення Лапласа і наступний перехід до одного рівняння відносно невідомого зображення $\bar{c}_1(p, \xi)$, яке є розв'язком рівняння

$$\begin{aligned} d \frac{d^4 \bar{c}_1}{d\xi^4} - b d \frac{d^3 \bar{c}_1}{d\xi^3} - [d(p+a) + p+1] \frac{d^2 \bar{c}_1}{d\xi^2} + b(p+1) \frac{d \bar{c}_1}{d\xi} + \\ + p(p+a+1) \bar{c}_1 = c_{20}(\xi) + (p+1)c_{10}(\xi). \end{aligned} \quad (2)$$

Характеристичне рівняння для диференціального рівняння (2) є

$$dx^4 - bdx^3 - [d(p+a) + p+1]x^2 + b(p+1)x + p(p+a+1) = 0.$$

Особливості, які виникають при переході від системи рівнянь до одного рівняння

1. Перехід від системи (1) до рівняння (2) збільшує порядок диференціального рівняння, що веде, по-перше, до необхідності задання додаткової інформації про проміжні похідні і, по-друге, до значних труднощів при його розв'язуванні числовими методами.

2. Існуючі точні методи, зокрема Декарта-Ейлера та Феррарі [6], не завжди дають можливість знайти розв'язки рівняння (3), оскільки тут наявний малий параметр d і в коефіцієнти входить комплексний параметр p . Зауважимо, що використання аналітичного виразу для знаходження коренів характеристичного рівняння з подальшою побудовою фундаментального розв'язку значно ускладнює перехід від зображень до оригіналів. Для наближеного розв'язування

(3) можна застосувати теорію збурення, що призведе до побудови асимптот коренів за малим параметром d .

3. Виникають додаткові розв'язки, які необхідно або відхилити, або фізично обґрунтувати.

4. Можуть появлятися нові ефекти, які необхідно враховувати при обчисленні параметрів процесу, що вивчається.

2. Нестационарний рух газу в трубопроводах

Для розрахунку параметрів нестационарного ізотермічного процесу руху газу в трубопроводі найчастіше використовують систему взаємозв'язаних диференціальних рівнянь в частинних похідних [1,3-5,10-13]:

$$\begin{cases} \frac{\partial p}{\partial x} + \rho \alpha \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{v^2}{2} \right) + \rho g \frac{\partial h}{\partial x} + \frac{\lambda v^2}{2D} \rho + \frac{\partial(\rho v)}{\partial t} = 0, \\ \frac{\partial(\rho v)}{\partial x} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial p}{\partial t} = 0, \\ p = \rho z R T, \end{cases} \quad (4)$$

де ρ, v та p — відповідно густина, швидкість руху і тиск газу; λ — коефіцієнт гідравлічного опору; T — температура газу; h — глибина залягання труби; g - прискорення вільного падіння; D — діаметр трубопроводу; t — час; $x, x \in [0, l]$ — біжуча координата; l — довжина трубопроводу; z — коефіцієнт стисливості, який характеризує відмінність реального газу від ідеального і визначається на основі побудованих емпіричних залежностей [8,9], зокрема

$$z = \frac{1}{1 + fp},$$

де $f = (24 - 0.21t^\circ C) \cdot 10^4$, а $p(x, y_1, y_2)$ вимірюється в атмосфера; R — газова стала; α - коефіцієнт Коріоліса, який характеризує тип течії газу (ламінарний чи турбулентний).

В першому рівнянні системи (4) враховано втрати енергії на тертя, на подолання різниці перепаду висот трубопроводу і нестационарний опір. Друге рівняння характеризує кількісний баланс газу.

Оскільки вихідна система є нелінійною, то отримати аналітичний розв'язок можна тільки в окремих випадках. При числово-аналітичних дослідженнях можна йти двома шляхами:

- 1) вихідну систему рівнянь лінеаризують з подальшою побудовою алгоритму для визначення неув'язки лінеаризації;
- 2) будується дискретний аналог нелінійної системи, який зводиться до розв'язування нелінійних алгебраїчних рівнянь.

Кожен з цих підходів має свої плюси та мінуси. Процедура лінеаризації, як правило, виводить рівняння за межі закону збереження і є ефективною на

проміжку лінеаризації. Чим менший проміжок лінеаризації, тим точнішими будуть результати. Процедура дискретизації вносить похибку, яка важко піддається оцінюванню. Ітераційний метод розв'язування вихідної нелінійної задачі з використанням процедури лінеаризації (зокрема його швидкість збіжності) залежить від початкового (нульового) наближення. Як правило, за початкове наближення приймається розв'язок лінеаризованої задачі.

Зауважимо, що в багатьох практичних задачах лінеаризовані системи з достатньою для практики точністю описують процеси, що вивчаються. Тому актуальною є задача лінеаризації системи (4) і отримання розв'язку її при заданих крайових умовах.

Деякі способи лінеаризації системи (4) подано в роботах [3,6,8,9]. Параболічна функціональна залежність $f_2(v) = v^2$ апроксимується прямою виду

$$f_2(v) \sim av + b \equiv f_1(v),$$

де коефіцієнти a та b визначаються як в роботі [6].

Нехай v_1 та v_2 граничні значення швидкості руху газу, тобто $v \in [v_1, v_2]$. Для прямої $f_1(v)$, що проходить через точки $(v_1, f_2(v_1))$, $(v_2, f_2(v_2))$ коефіцієнти a_{1v} та b_{1v} будуть $a_{1v} = (v_1 + v_2)$, $b_{1v} = v_1 v_2$. Якщо $f_3(v)$ дотична до кривої $f_2(v)$ і паралельна до $f_1(v)$, то $a_{3v} = v_1 + v_2$, $b_{3v} = -(v_1^2 + v_2^2)/4$. Криву $f_2(v)$ будемо апроксимувати прямою $f_4(v)$, яка лежить посередині між $f_1(v)$ та $f_3(v)$. При такій лінеаризації $a_v = v_1 + v_2$ та $b_v = -v_1 v_2 - \frac{1}{8}(v_2 - v_1)^2$, тобто

$$f_4(v) = (v_1 + v_2)v - v_1 v_2 - \frac{1}{8}(v_2 - v_1)^2.$$

Відомо, що процес руху газу в трубопроводі залежить від відношення p/z . В цьому випадку, якщо для обчислення коефіцієнта стисливості використовувати подану вище формулу, то поряд з нелінійністю за функцією швидкості вноситься нелінійність за функцією тиску виду $p(1 + f p)$. Як і у випадку лінеаризації системи (4) за швидкістю, покладемо

$$p(1 + f p) \approx a_p + b_p p.$$

Тут $p \in [p_1, p_2]$, де p_1 та p_2 — межі зміни тиску, які є відомими.

Якщо в системі (4) врахувати введені вище апроксимації, то перше рівняння можна записати у вигляді

$$\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \omega}{\partial t} + b_1 p + b_2 \omega + b_3 \frac{\partial \omega}{\partial x} = -b_0 \frac{a_p}{RT} + \varphi(p, v),$$

де $\omega = \rho v$ — масова швидкість,

$$b_0 = \frac{\lambda a_v}{2D} + g \frac{\partial h}{\partial x}, \quad b_1 = b_0 \frac{b_p}{RT}, \quad b_2 = \frac{\lambda d_v}{2D}, \quad b_3 = \frac{\alpha d_v}{2},$$

а

$$\begin{aligned} \varphi(\rho, v) = & v \frac{\alpha b_v}{2} \frac{\partial \rho}{\partial x} - \frac{\alpha \rho}{2} \frac{\partial}{\partial x} (v^2 - a_v - b_v v) - \frac{\lambda \rho}{2D} (v^2 - a_v - b_v v) - \\ & - \frac{b_0}{RT} (p(1 + f p) - a_p - b_p p) \end{aligned}$$

— нев'язка, що виникає за рахунок лінеаризації системи (4). З врахуванням цього вихідна система рівнянь (4) запишеться так:

$$\begin{cases} \frac{\partial \omega}{\partial t} + \frac{\partial p}{\partial x} + b_1 p + b_2 \omega + b_3 \frac{\partial \omega}{\partial x} = -b_0 \frac{a_p}{RT} + \varphi(\rho, v), \\ \frac{\partial \omega}{\partial x} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial p}{\partial t} = 0. \end{cases} \quad (5)$$

Зведення вихідної системи до одного рівняння.

Для простоти викладок розглянемо лінеаризований варіант системи (5).

$$\begin{cases} \frac{\partial \omega}{\partial t} + \frac{\partial p}{\partial x} + b_1 p + b_2 \omega + b_3 \frac{\partial \omega}{\partial x} = 0, \\ \frac{\partial \omega}{\partial x} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial p}{\partial t} = 0. \end{cases} \quad (6)$$

Якщо продиференціювати перше рівняння по x , а друге по t , то прийдемо до одного рівняння, яке містить лише невідому функцію тиску $p(x, t)$:

$$\frac{\partial^2 p}{\partial x^2} + b_1 \frac{\partial p}{\partial x} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 p}{\partial t^2} - \frac{b_2}{c^2} \frac{\partial p}{\partial t} = 0. \quad (7)$$

Зауважимо, що рівняння гіперболічного типу переходить в рівняння параболічного типу. Функції, що описують розподіл тиску в трубі в стаціонарному режимі та на границях вибираються у вигляді $p(x, 0) = P_A + \Delta P e^{-ax}$ та $p(x, t) = P_A + \Delta P e^{-ax - bt}$, які при відповідно підібраних a і b , будуть задовольняти це рівняння.

Розв'язок сформульованої крайової задачі побудуємо різницевим методом. Для цього на функцію $P(x, t)$ було накладено сітку $(M - 1)$ частин вздовж труби і $(N - 1)$ інтервалів по часу. Тепер значенню функції $p(x_m, t_n)$ відповідає деяке число p_{mn} . Для знаходження розв'язку відповідної алгебраїчної системи

необхідно задати M значень тиску в початковому стаціонарі, M значень в кінцевому, та $2(N - 2)$ граничних тисків.

В залежності від того, як представити першу та другу похідну через різниці в рівнянні (7) будемо мати різні співвідношення, що зв'язують p_{mn} , тобто різні числові схеми. Результати обчислювального експерименту подано на рис. 1.

З аналізу результатів, що при зведенні системи (6) до одного рівняння (7) з'являються крайові ефекти. Оскільки процес транспортування газу вздовж трубопроводу залежать від граничних умов, то поява крайових ефектів може значно вплинути на обчислення режимних параметрів.

Обчислювальний експеримент проводився за наступних параметрів трубопроводу: довжина — 122км, внутрішній діаметр — 1.388м, стала газу — $R = 500$, температура газу — $T = 290\text{K}$. По довжині труба розбивалась на 100 частин, крок по часу вибирався 10 хв.

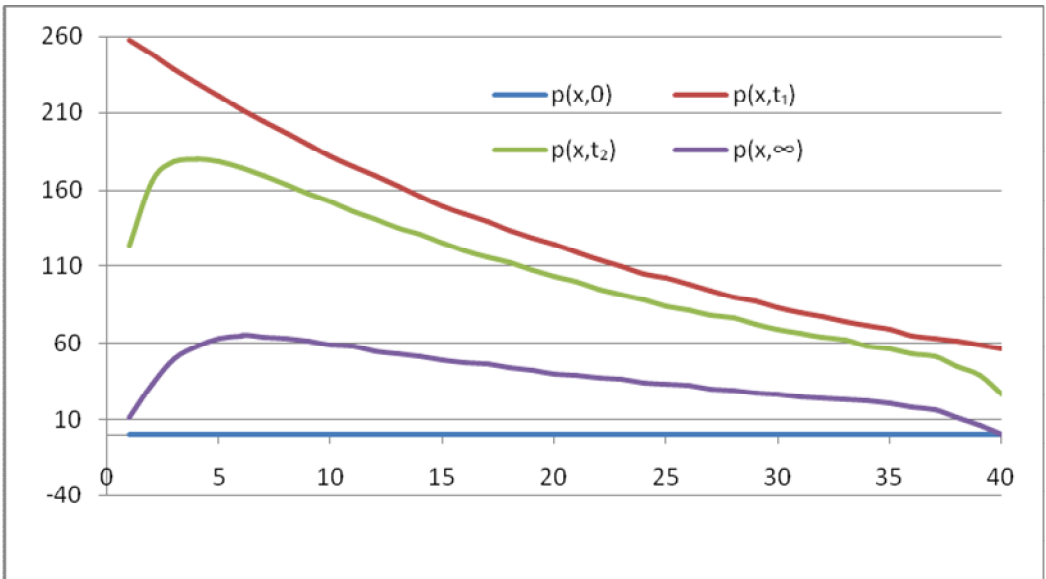


Рис.1. Залежність тисків від координати для різних значень часів, обчислених за 9-точковою схемою, де середня точка є середнім арифметичним сусідніх.

З отриманих результатів можна зробити наступні висновки.

1. Для таких параметрів час, за який встановлюється новий стаціонарний режим течії газу, виявився приблизно 1год. 20 хв. При цьому похибка ω становить 0.08%. Сама величина $\omega = 584$ [SI]
2. Перехід від системи, яка описує реальну трубу, до одного рівняння (6) супроводжується, в загальному, втратами знань про реальний об'єкт (виникають крайові ефекти).

3. Із збільшенням вузлів розбиття вздовж довжини труби зменшується мінімальний крок по часу, при якому метод ще може порахувати систему рівнянь.

4. При розв'язуванні системи рівнянь використовувався метод Гауса. За похибку розв'язку вибрана величина

$$\sum_{j=1}^{2M-2} Matrix[i][j]X[j] - Vertex[i] = \varepsilon_i.$$

З аналізу проведених досліджень випливає, що чим більша розмірність матриці - M , тим більше ε_i відрізняється від нуля. Крім того, для кожного M , відхилення ε_i тим більше, чим більший крок за часом Δt .

3. Вплив процедури дискретизації на відповідність різницевої моделі диференціальній

Для розв'язування широкого класу прикладних задач використовуються різного роду методи скінченних різниць в різних модифікаціях. Їх достовірність та точність в значній мірі залежить від кроків дискретизації. У випадку аналітичного задання вхідної інформації величину кроку можна змінювати в достатньо широких межах. Однак, якщо вхідною інформацією служать дискретні дані в довільних точках з невисокою точністю, то це значно обмежує можливість управління кроками дискретизації, зокрема в області границь зміни аргументу. Тим більше, що в багатьох задачах розв'язок крайових задач є важливим в областях границь. Так при транспортуванні газу трубопроводами зміна режиму роботи КС має основний вплив на розподіл тиску на незначній віддалі від КС та на протязі порівняно короткого часу.

Вплив процедури дискретизації та використання методу прогонки (метод скінченних різниць) на розв'язок рівнянь типу теплопровідності проаналізовано на наступній модельній задачі.

Знайти розв'язок рівняння

$$\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} - \frac{1}{a^2} \frac{\partial f}{\partial t} = 0, \tag{8}$$

за нульової початкової умови та при $f(0,t) = \sqrt{\pi}/a\sqrt{t}$, $x \in [0,1]$, $t \in [0,\infty)$.

Точний розв'язок даного рівняння задається формулою

$$f(x,t) = \frac{\sqrt{\pi}}{a\sqrt{t}} \exp\left(-\frac{x^2}{4a^2t}\right). \tag{9}$$

Якщо сформульовану задачу розв'язувати методом скінченних різниць, то диференціальний оператор у рівнянні (8) дискретизується і записується наступним чином (різницевий варіант):

$$\frac{f_{m+1}^{n+1} - 2f_m^{n+1} + f_{m-1}^{n+1}}{h^2} - \frac{1}{a^2} \frac{f_m^{n+1} - f_m^n}{\tau} = 0. \quad (10)$$

Отже, в результаті дискретизації отримуємо однорідне різницеве рівняння. Введемо позначення:

$$\Delta_r(f) = \frac{f_{m+1}^{n+1} - 2f_m^{n+1} + f_{m-1}^{n+1}}{h^2} - \frac{1}{a^2} \frac{f_m^{n+1} - f_m^n}{\tau}. \quad (11)$$

Оскільки точний розв'язок задачі відомий і задається формулою (9), то можемо обчислити точні значення шуканої функції f_n^m і підставити її у вираз (11). Результати обчислень для $a = 0,5$ з кроками дискретизації $\tau = h = 0,01$ та при $n = m = 70$ подано на рис. 2. З приведених результатів видно, що заміна диференціального оператора різницеvim призводить до значної похибки для малих значень часу та координати, тобто в примежових зонах. З відходом цих параметрів (часу та координати) від примежової зони похибка дискретизації суттєво зменшується.

Приведена вище поведінка похибки дискретизації за умови, що всі параметри обчислюються в межах розрядної сітки обчислювальної машини. Однак, на практиці вхідні дані задаються з деякою похибкою (так, при дослідженні процесів транспортування газу похибка вхідних даних складає близько 3%). Тому доцільно перевірити похибку дискретизації в кожному випадку. На рис. 3 показано залежність функції (11) від координати при тих же значеннях вхідних параметрів, що і на рис. 2, за винятком того, що в значення функції $f(x,t)$ внесено систематичну похибку порядку 0,1%. Аналіз цих залежностей показує, що наявність похибки вхідних даних значно збільшує як похибку дискретизації, так і ширину примежової зони, в якій ця похибка є значною.

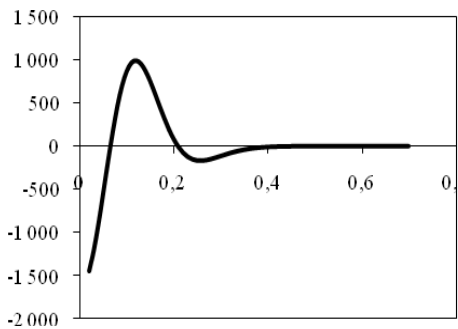


Рис. 2. Залежність функції $\Delta_r(f)$ від координати для $t = 0,02$ с

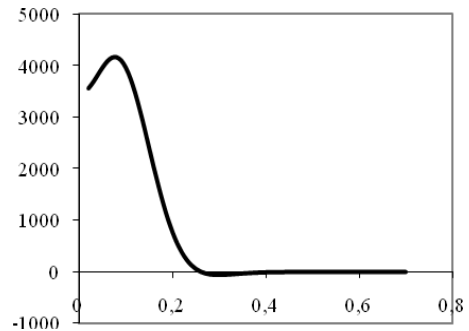


Рис. 3. Залежність функції $\Delta_r(f)$ від координати для $t = 0,02$ с у разі наявності вхідної похибки.

Оскільки при моделюванні газотранспортних мереж необхідно знати значення тисків на вході ($x = 0$) та виході ($x = L$) трубопроводу, то отримані результати показують, що використання різницевих методів для розрахунку режимів роботи газотранспортних мереж може призвести до значних похибок. Окрім цього, враховуючи, що значення вхідних гідродинамічних параметрів, які входять у рівняння руху газу, відомі з певною похибкою, то, як видно з рис. 3, використання різницевих методів призводить до значного збільшення похибки шуканого розв'язку. Це особливо важливо в тих випадках, коли на основі знайдених розв'язків обчислюються різного роду балансові величини, зокрема об'єми газу, що перекачується.

При використанні різницевих методів аналіз функції $\Delta_r(f)$ дає змогу визначити вплив примежового шару, в якому розв'язок відповідної задачі математичної фізики різницевим способом має значну похибку. Варіація кроків дискретизації допомагає зменшити величину функції $\Delta_r(f)$ і тим самим уточнити розв'язок задачі.

У тому випадку, коли примежові зони є невеликими, балансові величини, обчислені на основі знайденого числового розв'язку, будуть незначно відрізнятися від реальних величин. У протилежному випадку необхідно знаходити розв'язок задачі математичної фізики іншим способом, наприклад, на основі теорії збурення.

Література

- [1] *Pryanlyo Ya. D., Prytula M. G., Prytula N. M., Lopuh N. B.* Models of mass transfer in gas transmission systems // *Mathematical modeling and computing*. — 2014. — Vol. 1, No 1. — P. 84-96.
- [2] *Ya.D.Pryanlyo, S.V.Gladun* Optimization of energy costs for gas transportation in complex gas transmission systems // *ANNALS of Faculty Engineering Hunedoara — International Journal of Engineering* 31 | Fascicule 3 Tome XIII [2015] — Fascicule 3 [August].
- [3] *Бобровський С. А., Щербаков С. Г., Яковлев Е. И. и др* Трубопроводный транспорт газа / — М.: Наука, 1976. — 495 с.
- [4] Математичне моделювання нерівноважних процесів у складних системах / *Білуцак Ю., Гайвась Б., Гера Б.* та інші. Під ред. Чаплі Є. — Львів: НАН України, Растр-7, 2019. — 256 с. — 48 іл.
- [5] *П'янило Я., П'янило Г.* Дослідження впливу теплофізичних параметрів на процес руху газу в трубопроводах // *Фізико — математичне моделювання та інформаційні технології*. — 2009. — Вип. 10. — С. 58-69.
- [6] *П'янило Я. Д.* Проекційно-ітераційні методи розв'язування прямих та обернених задач переносу. — Львів: Слайн, 2011. — 248 с.
- [7] *Прийтла Н.* Математичне моделювання перехідних процесів в системах транспортування газу // *Вісник Національного університету "Львівська політехніка". Комп'ютерні науки та інформаційні технології*. — 2012. — № 744. — С. 169-172.
- [8] *Сарданашвили С. А.* Расчетные методы и алгоритмы / Сарданашвили С. А. — М. : Изд — во "Нефть и газ", 2005. — 577 с.
- [9] *Чарный И.А.* Неустановившееся движение реальной жидкости в трубах. — М.: Недра, — 1975. — 240 с.

Analysis of approaches to mass-transfer modeling in non-stationary mode

Yaroslav Pyanylo¹, Galyna Pyanylo²

A significant number of natural and physical processes are described by differential equations in partial derivatives or systems of differential equations in partial derivatives. Numerical methods have been found to find their solutions. Partial derivatives systems are solved mainly by reducing the order of the system of equations or reducing it to one differential equation. This procedure leads to an increase in the order of the differential equation. There are various restrictions and errors that can lead to additional solutions, boundary conditions for intermediate derivatives, and so on. The work is devoted to the analysis of such situations and ways of exit.

Отримано 12.02.19