

УДК 517.958:536.2

МОДЕЛИРОВАНИЕ КОНВЕКТИВНОЙ ДИФФУЗИИ РАСТВОРИМЫХ ВЕЩЕСТВ В КАПИЛЛЯРНО-ПОРИСТЫХ СРЕДАХ ПРИ НЕИЗОТЕРМИЧЕСКОМ ВЛАГОПЕРЕНОСЕ

Н. Н. Гринчик¹, И. А. Гишкелюк², С. П. Кундас²

¹Институт тепло- и массообмена им. А. В. Лыкова НАН Беларуси. Минск, Беларусь

²Международный государственный экологический университет им. А. Д. Сахарова. Минск, Беларусь

Введение. На процесс конвективной диффузии растворимых веществ в капиллярно-пористых средах большое влияние оказывают капиллярные и поверхностные силы, которые вызывают капиллярное и пленочное течение жидкости, фазовые переходы между жидкой и газообразной фазой. Кроме того, изменение влагосодержания капиллярно-пористой среды, которое существенно влияет на перенос растворимых соединений, может быть вызвано не только капиллярным и пленочным движением влаги, но и испарением водяного пара с поверхности среды и переконденсацией его в холодные участки среды. Таким образом, конвективная диффузия растворимых веществ в капиллярно-пористых средах будет во многом обусловлена неизотермическим влагопереносом. Это подтверждается и экспериментальными исследованиями, проведенными в работе [1], где показано, что даже только испарение влаги с поверхности почвы уже оказывает влияние на перераспределения растворимых веществ в почвенной колонке.

В тоже время существующие подходы для моделирования переноса растворимых соединений в капиллярно-пористых средах [2, 3] базируются на использовании уравнения конвективной диффузии и уравнения движения влаги, в котором не учитываются фазовые переходы и поток водяного пара в среде. Поэтому использование такого подхода может приводить к значительным погрешностям при расчете конвективной диффузии растворимых веществ в неизотермических условиях. Кроме этого в случае использования уравнений неизотермического влагопереноса [4] без учета фазовых переходов и потока водяного пара не возможно корректно описать испарение влаги с поверхности капиллярно-пористой среды, так как в эти уравнения не входит давление водяного пара.

Поэтому в настоящей работе авторами ставилась цель создания физико-математической модели взаимосвязанного теплообмена в капиллярно-пористых средах с учетом влияния интенсивности массообмена между фазами, давления пара и жидкости на кинетику сорбции и перенос растворимых веществ.

Конвективная диффузия растворимых соединений в капиллярно-пористой среде с учетом неравновесной сорбции в условиях изменения насыщенности среды влагой. Рассмотрим закономерности перемещения растворимого вещества через поровое пространство капиллярно-пористой среды, содержащей жидкость. Для элементарного объема ΔV пористой среды, линейный масштаб которого l много меньше внешнего масштаба L задачи, но много больше характерного размера капилляров r , из которых состоит изучаемая среда (т. е. $L \gg l \gg r$), справедливо балансовое уравнение

$$\frac{\partial(\theta_{\text{liq}} C)}{\partial t} = \nabla J_s. \quad (1)$$

При переносе вещества потоком влаги могут происходить процессы, адсорбции растворимых соединений на поверхности твердой фазы капиллярно-пористой среды [5, 6]. Для учета адсорбции задается интенсивность поглощения вещества, которая связана с концентрацией растворимого вещества в жидкой фазе уравнением кинетики сорбции

$$\rho_b \frac{\partial a}{\partial t} = \beta(C - S), \quad (2)$$

где S – равновесное значение концентрации, при котором интенсивность перетока вещества между жидкой и твердой фазами обращается в нуль, и при малых значениях концентраций растворимых веществ может быть вычислена из линейного уравнения (изотермы сорбции Генри): $a = K_d S$.

Для учета изменения концентрации растворимого вещества за счет химического превращения и других процессов, связанных с истоком и стоком вещества в уравнение баланса (1) введем функцию F , характеризующую интенсивность этих процессов.

С учетом изложенного выше баланс вещества в капиллярно-пористой среде можно записать в виде системы уравнений

$$\frac{\partial(\theta_{liq} C)}{\partial t} + \rho_b \frac{\partial a}{\partial t} = \nabla J_s + F, \quad (3)$$

$$\rho_b \frac{\partial a}{\partial t} = \beta(C - S).$$

Рассмотрим поток растворимого вещества в капиллярно-пористой среде. Для описания переноса растворенных веществ в пористых средах обычно используется уравнение конвективной диффузии

$$J_s = \theta_{liq} D_{eff} \nabla C - \mathbf{u} C. \quad (4)$$

В уравнении (4) первый член определяет вклад диффузионного потока вещества под действием градиента концентрации, а второй – конвективный перенос растворенных веществ. Поскольку перенос вещества в капиллярно-пористой среде осуществляется через поровое пространство, заполненное водой, в уравнение конвективной диффузии (4) введена объемная влажность среды: θ_{liq} .

Однако в реальных капиллярно-пористых средах размытие фронта концентрации происходит не только за счет молекулярной диффузии, но и в связи с неоднородностью порового пространства, приводящей к изменению скорости жидкости в сравнении со средней скоростью. Варьирование скорости на микроскопическом уровне может происходить из-за разности толщин капилляров, из-за трения между частицами пористой среды и жидкостью, из-за искривления линий тока и т. п. Флуктуации скорости приводят к изменениям концентрации растворимого вещества. Для учета этого механизма в уравнении потока растворимого вещества в пористых средах вместо коэффициента диффузии D_{eff} используют тензор гидродинамической дисперсии \mathbf{D} . В настоящее время существует несколько подходов его определения [7], а наиболее широкое распространение получило следующее выражение [5]:

$$\mathbf{D} = (\alpha_x - \alpha_y) \frac{u_x u_y}{|\mathbf{u}|} + \alpha_y |\mathbf{u}| \delta_{xy} + \tau D_m. \quad (5)$$

При этом в уравнении (5) $\alpha_y / \alpha_x \approx 0.1$ т. е. продольная дисперсия больше поперечной, поскольку поперечная диффузия контролируется молекулярным

переходом частиц с одной линии тока на другую.

Отметим также, что коэффициент молекулярной диффузии зависит от температуры среды:

$$D_m = D_0 \exp\left(\frac{-E}{RT}\right). \quad (6)$$

Скорость переноса вещества \mathbf{u} жидкостью связана с потоком жидкости в капиллярно-пористой среде q_{liq} , рассчитываемому по закону Дарси, уравнением [2]

$$\mathbf{u} = \rho_{\text{liq}} \frac{q_{\text{liq}}}{\theta_{\text{liq}}}, \quad (7)$$

Представив левую часть уравнения баланса массы (3) в виде

$$\frac{\partial(\theta_{\text{liq}} C)}{\partial t} + \rho_b \frac{\partial a}{\partial t} = \theta_{\text{liq}} \frac{\partial C}{\partial t} + C \frac{\partial \theta_{\text{liq}}}{\partial t} + \rho_b \frac{\partial a}{\partial t} \quad (8)$$

и учитывая, что поток растворимого вещества в капиллярно-пористой среде определяется гидродинамической дисперсией и конвекцией, получаем систему уравнений, математически описывающую перенос растворимого соединения в капиллярно-пористой среде с учетом кинетики сорбции в условиях изменения насыщенности среды влагой

$$\theta_{\text{liq}} \frac{\partial C}{\partial t} + C \frac{\partial \theta_{\text{liq}}}{\partial t} + \rho_b \frac{\partial a}{\partial t} = \nabla(\theta_{\text{liq}} \mathbf{D} \nabla C - \mathbf{u} C) + F, \quad (9)$$
$$\rho_b \frac{\partial a}{\partial t} = \beta(C - S).$$

Таким образом, как видно из (9) в уравнение конвективной диффузии явным образом входит влагосодержание капиллярно-пористой среды. Физический смысл влияния влагосодержания пористой среды на перенос растворимых соединений заключается в следующем: изменение влагосодержания приводит к изменению толщины пленок влаги, по которым осуществляется молекулярная диффузия вещества, следовательно, чем больше влагосодержание, тем больше поток вещества (поток вещества – это количества вещества проходящего в единицу времени через единицу площади) и наоборот. Отметим, что влагосодержание капиллярно-пористой среды может изменяться не только за счет движения влаги под действием градиента влагосодержания, но и за счет переконденсации пара и термокапиллярных течений. Поэтому для моделирования переноса растворимых веществ в капиллярно-пористой среде уравнение конвективной диффузии необходимо дополнить уравнениями неизотермического влагопереноса, которые на основании гидрологических свойств среды и климатических факторов позволяют рассчитать динамику полей влагосодержания и скорости движения воды в среде.

Неизотермический влагоперенос в капиллярно-пористых средах. Рассмотрим капиллярно-пористую среду, в которой содержится водяной пар и жидкость. При этом предполагается, что скелет пористой среды является жестким твердым телом, не растворяющимся в воде и не вступающим с ней в химические реакции. Тогда справедливы уравнения переноса тепла:

$$C_{\text{eff}} \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla(\lambda_{\text{eff}} \nabla T) + r_{\text{ev}} I_{\text{liq}}, \quad (10)$$

и уравнения сохранения массы водяного пара и жидкости:

$$\frac{\partial(\rho_v \theta_v)}{\partial t} = \nabla(\rho_v q_v) + I_v, \quad (11)$$

$$\frac{\partial(\rho_{\text{liq}} \theta_{\text{liq}})}{\partial t} = \nabla(\rho_{\text{liq}} q_{\text{liq}}) - I_{\text{liq}}. \quad (12)$$

Суммируя уравнения (11) и (12), и учитывая, что интенсивности массообмена между фазами I_v и I_{liq} , в соответствии с принципом локального термодинамического равновесия могут быть вычислены как:

$$I_{\text{liq}} = \frac{\partial(\rho_{\text{liq}} \theta_e)}{\partial t}, \quad I_v = \frac{\partial(\rho_v \theta_e)}{\partial t}. \quad (13)$$

получим следующее уравнение неизотермического влагопереноса:

$$\frac{\partial w}{\partial t} = \nabla(\rho_v q_v) + \nabla(\rho_{\text{liq}} q_{\text{liq}}). \quad (14)$$

Здесь $w = \rho_v \theta_v + \rho_{\text{liq}} \theta_{\text{liq}}$ – влагосодержание капиллярно-пористой среды, которое показывает отношение массы воды и водяного пара к полному объему пористой среды.

Отметим, что система уравнений (10) и (14) не замкнута. Однако в соответствии с теорией двухфазной фильтрации для вычисления потоков водяного пара и жидкости можно использовать обобщенный закон Дарси:

$$q_v = \frac{KK_v(\theta_v)}{\eta_v} \nabla[P_v(w, T) - \rho_v g z], \quad (15)$$

$$q_{\text{liq}} = \frac{KK_{\text{liq}}(\theta_{\text{liq}})}{\eta_{\text{liq}}} \nabla[P_{\text{liq}}(w, T) - \rho_{\text{liq}} g z]. \quad (16)$$

Для вычисления зависимости давления пара от влагосодержания и температуры предлагается использовать изотермы сорбции (десорбции) влаги при различных температурах [8].

Изотерма сорбции представляет собой экспериментально получаемую зависимость равновесного влагосодержания среды от относительной влажности: $\theta_e = f(\varphi, T)$. При этом для моделирования неизотермического влагопереноса необходимы данные об изотермах сорбции при различных температурах (рис. 1), которые могут быть аппроксимированы функцией вида

$$\theta_e = (p_1 + p_2 \varphi^{p_3}) (p_4 + p_5 T). \quad (17)$$

Относительная влажность и давление водяного пара связаны между собой выражением

$$\varphi = \frac{P_v}{P_{\text{sat}}}. \quad (18)$$

При этом зависимость давления насыщенного пара от температуры описывается простым аналитическим уравнением [9]

$$P_{\text{sat}} = 10^5 \left(\frac{T}{373} \right)^{15}. \quad (19)$$

Тогда учитывая, что плотность воды много больше плотности водяного пара и как следствие $w \approx \rho_{\text{liq}} \theta_{\text{liq}}$, и используя изотерму сорбции (17), выражения (18), (19), получаем функциональную зависимость, определяющую изменение давления пара от влагосодержания и температуры: $P_v = f(w, T)$ и обратную зависимость $w_e = F(P_v, T)$.

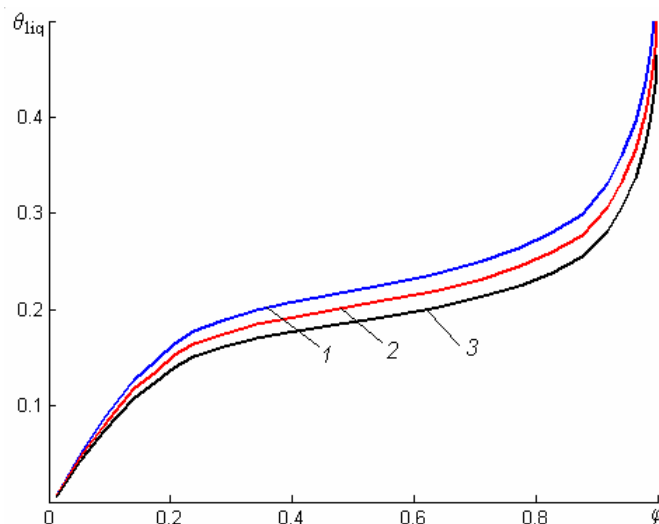


Рис. 1. Изотермы сорбции влаги капиллярно-пористой среды при различных температурах: 1 – $T = 275$ К; 2 – 295; 3 – 315

С использованием уравнения Кельвина имеем зависимость давления жидкости от влагосодержания и температуры:

$$P_{\text{liq}}(w, T) = P_{\text{sat}} + \frac{RT\rho_{\text{liq}}}{M} \ln \frac{P_v(w, T)}{P_{\text{sat}}}. \quad (20)$$

Полученное соотношение (20) отражает физико-химические свойства жидкости, структурные характеристики пористого тела и необходимо при решении уравнения переноса влаги (14) в качестве зависимости между давлением жидкости, влагосодержанием и температурой.

Удельная теплота фазовых превращений вода-пар в уравнении теплопроводности определяется соотношением Клапейрона – Клаузиуса с учетом зависимости давления пара от влагосодержания и температуры:

$$r_{\text{ev}} = r_0 - \frac{RT^2}{M} \left(\frac{\partial \ln P_v(w, T)}{\partial T} \right), \quad (21)$$

где последний член определяет вклад теплоты сорбции.

Тогда с учетом выше изложенного получаем следующую систему уравнений неізотермического влагопереноса:

$$C_{\text{eff}} \frac{\partial T}{\partial t} = \nabla(\lambda_{\text{eff}} \nabla T) + \left(r_0 - \frac{RT^2}{M} \left[\frac{\partial \ln P_v(w, T)}{\partial T} \right] \right) \frac{\partial w_e}{\partial t}, \quad (22)$$

$$\frac{\partial w}{\partial t} = \rho_{\text{liq}} \frac{KK_{\text{liq}}(\theta_{\text{liq}})}{\eta_{\text{liq}}} \nabla [P_{\text{liq}}(w, T) - \rho_{\text{liq}} gz] + \rho_v \frac{KK_v(\theta_v)}{\eta_v} \nabla [P_v(w, T) - \rho_v gz]. \quad (23)$$

Таким образом, с использованием системы уравнений (22), (23) и замыкающих соотношений (17)–(21), которые связывают давление пара и жидкости с влагосодержанием и температурой можно рассчитать динамику полей влагосодержания и скорости жидкости в капиллярно-пористой среде при неизотермических условиях. При этом полученные значения влагосодержания и скорости жидкости можно использовать для расчета конвективной диффузии растворимых веществ в капиллярно-пористых средах при неизотермическом влагопереносе в соответствии с уравнениями (9).

Численные исследования переноса растворимых веществ в капиллярно-пористой среде при неизотермическом влагопереносе. С помощью разработанной математической модели проведем численное исследование влияния неизотермического влагопереноса на миграцию растворимых веществ в почве. Предположим, что в начальный момент времени в почвенном слое 0–0.1 м содержится раствор несорбируемого вещества-метки. Рассмотрим два случая вертикальной миграции этого вещества. В первом случае на поверхности почвы выпадают дождевые осадки с интенсивностью $H = 5 \cdot 10^{-7}$ м/с, при этом начальная влажность составляет $\theta_{\text{liq}0} = 0.15$ м³/м³, а температура в почве равна $T_{\text{top}} = 293$ К у поверхности и $T_{\text{bot}} = 273$ К на глубине 1.5 м. Во втором случае происходит испарение влаги и при этом относительная влажность воздуха у поверхности почвы составляет $\varphi_{\text{env}} = 10\%$, а начальные распределения влажности и температуры такие, как в первом случае.

При этом система уравнений неизотермического влагопереноса решается со следующими граничными условиями. В случае выпадения дождевых осадков при $z = 0$ для уравнения движения влаги (23), когда $\theta_{\text{liq}} < \theta_{\text{sat}}$, на границе записывается условие вида

$$\rho_{\text{liq}} \frac{KK_{\text{liq}}(\theta_{\text{liq}})}{\eta_{\text{liq}}} \nabla [P_{\text{liq}}(w, T) - \rho_{\text{liq}} gz] + \rho_v \frac{KK_v(\theta_v)}{\eta_v} \nabla [P_v(w, T) - \rho_v gz] = H, \quad (24)$$

и $w = w_{\text{sat}}(\theta_{\text{sat}}, T)$ при $\theta_{\text{liq}} \geq \theta_{\text{sat}}$, а для уравнения переноса тепла (22) задается граничное условие:

$$T_{z=0} = T_{\text{top}}. \quad (25)$$

При $z = 1.5$ м для уравнений влагопереноса и теплопроводности записываются граничные условия

$$\rho_{\text{liq}} \frac{KK_{\text{liq}}(\theta_{\text{liq}})}{\eta_{\text{liq}}} \nabla [P_{\text{liq}}(w, T) - \rho_{\text{liq}} gz] + \rho_v \frac{KK_v(\theta_v)}{\eta_v} \nabla [P_v(w, T) - \rho_v gz] = 0, \text{ и} \quad (26)$$

$$T_{z=1.5} = T_{\text{bot}}.$$

В случае испарения влаги с поверхности почвы при $z = 0$ для уравнения движения влаги (23) на границе задается значение влагосодержания $w_{z=0}$, которое вычисляется из изотермы сорбции при значении температуры равной T_{top} и давлении пара:

$$P_{v z=0} = \varphi_{\text{env}} P_{\text{sat}}(T), \quad (27)$$

Для уравнения переноса тепла (22) в этом случае на границе задается температура

$$T_{z=0} = T_{\text{top}}. \quad (28)$$

При $z = 1.5$ м для уравнений неізотермического влагопереноса записываются такие же граничные условия, как и в случае выпадения дождевых осадков.

Аналитическое решение приведенной выше системы уравнений не представляется возможным, поэтому для математического моделирования необходимо использовать численные методы (метод конечных элементов, метод конечных разностей и т. д.) [10]. Для решения рассматриваемой задачи полученная система уравнений решалась методом конечных элементов в постановке Галеркина (метод проекций) [10], с помощью программы реализованной авторами в математическом пакете MATLAB [11]. При этом при дискретизации по времени использовалась разностная схема Кранка – Николсона (схема с центральной разностью) [12], а решение нелинейной системы алгебраических уравнений осуществлялось методом Ньютон – Рафсона [13].

С помощью рассмотренной математической модели неізотермического влагопереноса рассчитывалось изменение полей влажности и потока жидкости в почве (рис. 2, 3). Гидрологические и теплофизические свойства почвы, при которых производился расчет, приведены в табл. 1. Остальные параметры, определяющие процесс переноса несорбируемого вещества-метки, задавались следующим образом: плотность твердой фазы почвы $\rho_b = 1200 \text{ кг/м}^3$; коэффициент молекулярной диффузии $D_m = 4 \cdot 10^{-8} \text{ м}^2/\text{с}$; параметры почвы, определяющие гидродинамическую дисперсию: $\alpha_x = 0.005 \text{ м}$ и $\tau = 0.75$.

Таблица 1. Значения параметров в уравнениях неізотермического влагопереноса

Свойства почвы	Значение параметров
Пористость почвы	$m = 0.4 \text{ м}^3/\text{м}^3$
Теплоемкость почвы	$C_{\text{eff}} = (1.92 \cdot 10^6 (1 - m) + 4.18 \cdot 10^6 \theta_{\text{liq}})$
Теплопроводность	$\lambda_{\text{eff}} = 0.925 + 1.68 \theta_{\text{liq}} + 0.643 \exp(-[\theta_{\text{liq}}]^4)$
Проницаемость почвы	$K = 1.61 \cdot 10^{-12}$
Относительная фазовая проницаемость воды	$K_{\text{liq}} = \left(\frac{\theta_{\text{liq}}}{m}\right)^{10.7}$
Относительная фазовая проницаемость водяного пара	$K_v = \left(1 - \frac{\theta_{\text{liq}}}{m}\right)^{10.7}$
Зависимость давления водяного пара от влагосодержания и температуры	$P_v = P_{\text{sat}}(T) \exp\left[\frac{M}{R \rho_{\text{liq}}}\left(2.1 - \frac{1601}{T}\right)\left(\frac{m}{\theta_{\text{liq}}}\right)^{3.85}\right]$
Зависимость давления жидкости от влагосодержания и температуры	$P_{\text{liq}} = (2.1T - 1601)\left(\frac{m}{\theta_{\text{liq}}}\right)^{3.85}$

Из результатов моделирования (рис. 2, 3) видно, что поток влаги в почве обусловлен неравномерным распределением влажности и температуры по профилю почвы. В случае выпадения дождевых осадков влажность поверхностного слоя почвы

возрастет и появится поток влаги, направленный с поверхности в глубь почвы (рис. 3, а, кривая 2). В то же время температура на поверхности почвы выше температуры на глубине 1.5 м на 10 К, следовательно, капиллярно-сорбционное давление у поверхности почвы будет выше, чем в глубине (с учетом знака) и влага будет двигаться от точки с более высокой температурой к точке с более низкой температурой. Это обуславливает термокапиллярный поток жидкости (рис. 3, а, кривая 1). Отметим, что при выпадении дождевых осадков термокапиллярный поток вносит небольшой вклад в результирующий поток жидкости (рис. 3, а, кривая 3), поэтому распределения вещества-метки по профилю почвы, вычисленные с использованием модели, учитывающей неизотермический влагоперенос, практически совпадают с результатами, полученными без учета влияния температуры на перераспределения влаги (рис. 4, а).

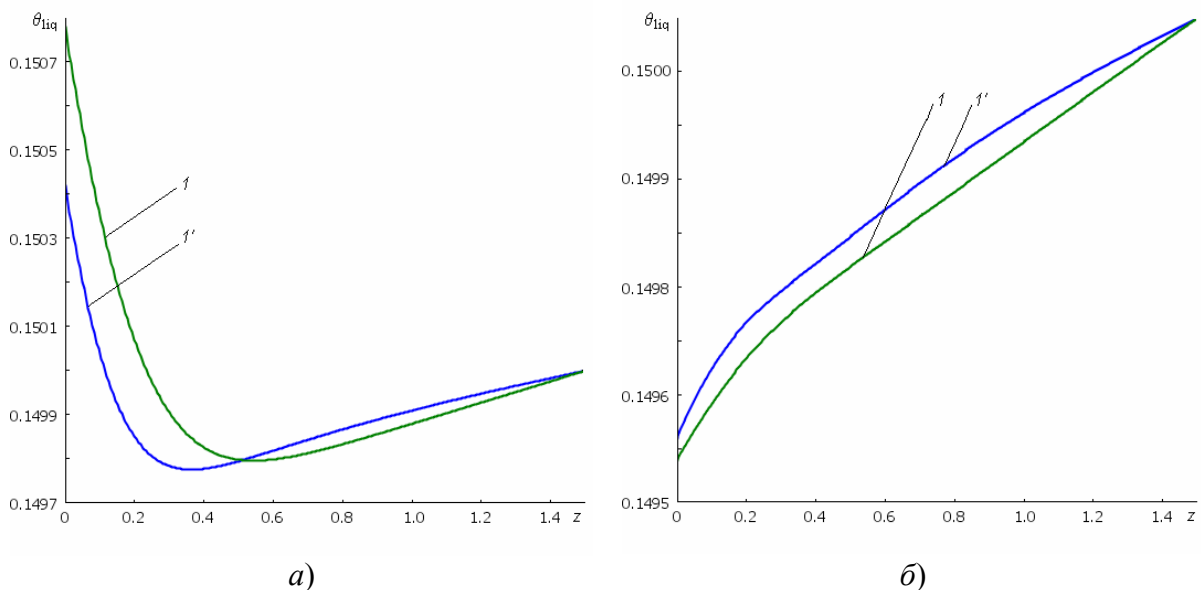


Рис. 2. Распределение влаги по профилю почвы для различных моментов времени: 1 – через 10 дней, 1' – через 5 дней; а) в случае выпадения дождевых осадков, б) в случае испарения

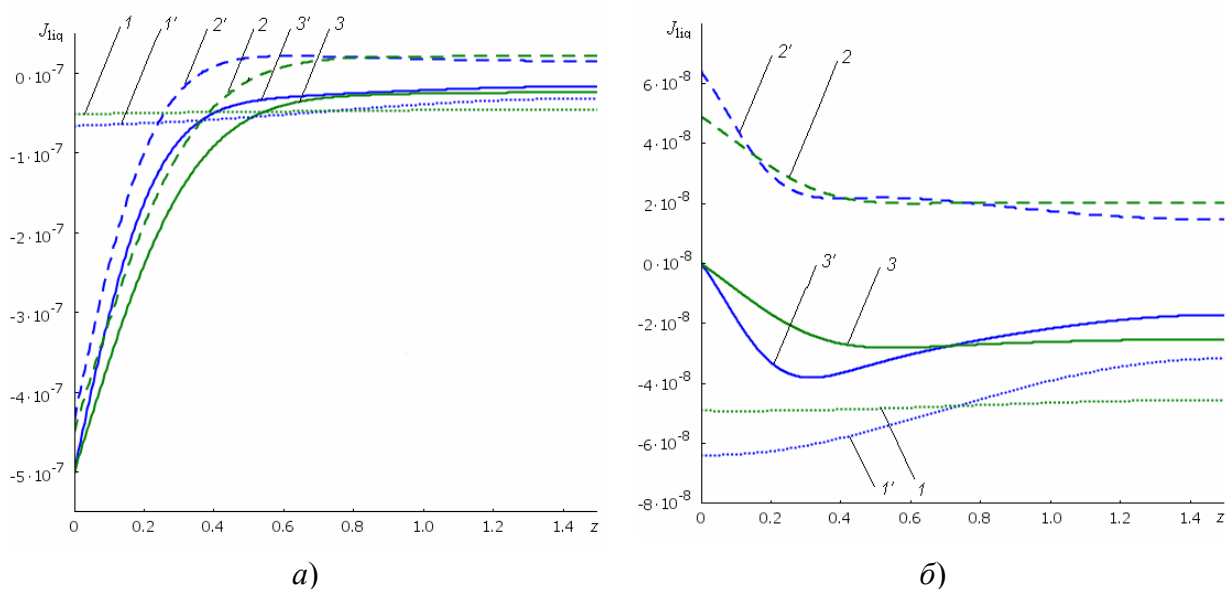


Рис. 3. Распределение потока жидкости по профилю почвы для различных моментов времени: 1 и 1' – поток жидкости обусловленный температурным градиентом через 10 и 5 дней соответственно, 2 и 2' – поток жидкости обусловленный градиентом влаги через 10 и 5 дней соответственно, 3 и 3' – результирующий поток жидкости через 10 и 5 дней соответственно; а) в случае выпадения дождевых осадков, б) в случае испарения

Однако в случае испарения влаги с поверхности почвы наблюдается совершенно иная картина. В результате испарения влагосодержание верхнего слоя почвы уменьшается. Это вызывает поток влаги из нижних слоев к поверхности почвы (рис. 3, б, кривая 2). В то же время неравномерное распределения температуры вызывает термокапиллярный поток влаги (рис. 3, б, кривая 1) из верхнего слоя почвы в глубину. Как видно из результатов моделирования (рис. 3, б), в случае испарения влаги с поверхности почвы термокапиллярный поток влаги вносит существенный вклад в результирующий поток жидкости в почве.

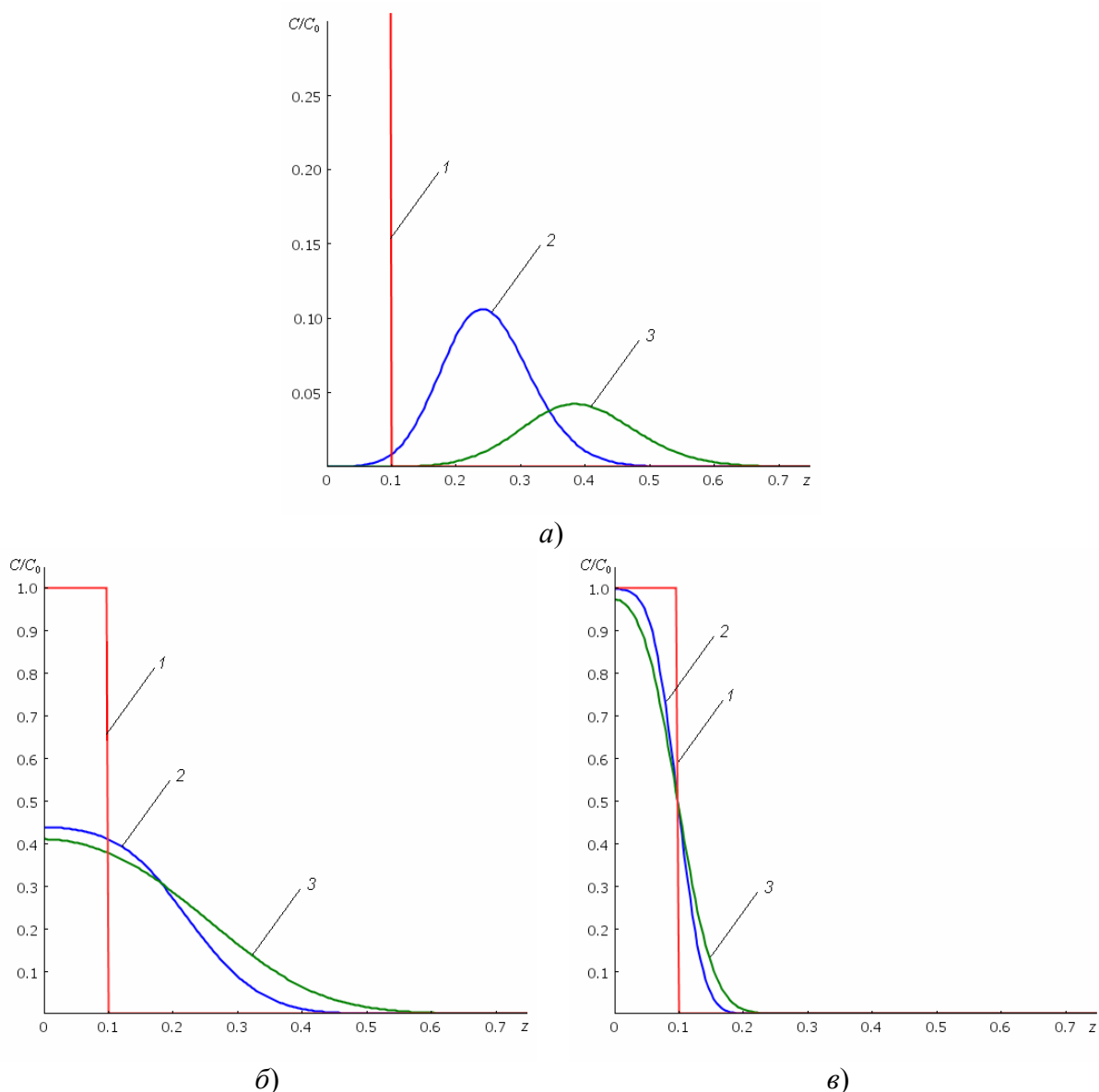


Рис. 4. Результаты моделирования переноса растворимых соединений в почве: 1 – начальное распределение, 2 – распределение через 5 дней, 3 – распределение через 10 дней; а) в случае выпадения дождевых осадков, б) в случае испарения с учетом неизотермического влагопереноса, в) в случае испарения без учета неизотермического влагопереноса

Следует заметить, что в моделях переноса вещества в почве, приведенных в работах [2, 3, 14], при определении потока жидкости в уравнении конвективной диффузии не учитывается поток влаги, вызванный температурным градиентом и переcondенсацией водяного пара (для случая испарения влаги с поверхности почвы в

этих моделях поток жидкости в уравнении конвективной диффузии будет равен нулю). Однако, как видно из приведенных выше результатов моделирования (рис. 4, б и 4, в), это может привести к значительным погрешностям. Отметим также, что в реальных природных условиях наряду с процессами инфильтрации дождевых осадков всегда имеют место процессы испарения влаги с поверхности почвы и термокапиллярное движение влаги. Все это однозначно подтверждает, что при моделировании процесса переноса растворимых веществ в почве значения влагосодержания и потока жидкости в уравнении конвективной диффузии должны рассчитываться с учетом неизотермического влагопереноса.

Заключение. Предложена математическая модель переноса растворимых соединений в капиллярно-пористой среде с учетом неизотермического влагопереноса, которая базируется на уравнениях конвективной диффузии, кинетики сорбции, двухфазной фильтрации, изотермах сорбции влаги и термодинамических законах.

Проведенные численные исследования показали, что для получения более достоверных результатов прогнозирования массопереноса в капиллярно-пористой среде, применяемые математические модели должны учитывать процессы влагопереноса связанные как с движением влаги за счет градиентов влаги и температуры, так и переконденсацию водяного пара и подток влаги к поверхности в результате испарения.

Обозначения

a – концентрация сорбируемого вещества в пористой среде на единицу массы среды, кг/кг; C – объемная концентрация растворимого вещества в жидкой фазе в расчете на единицу объема пористой среды, кг/м³; C_{eff} – эффективная объемная теплоемкость пористой среды, Дж/(м³·К); \mathbf{D} – тензор гидродинамической дисперсии, м²/с; D_0 – коэффициент численно равный коэффициенту диффузии при отсутствии энергетического барьера для диффундирующих ионов, м²/с; D_{eff} – эффективный коэффициент диффузии растворенного вещества в пористой среде, м²/с; D_m – коэффициентом молекулярной диффузии вещества в свободной жидкости, м²/с; E – энергия активации, Дж/моль; F – функция стока и истока растворимого вещества в пористой среде за счет процессов химического и радиоактивного превращения, поглощения вещества растениями и т. д., кг/(м³·с); g – ускорение свободного падения, м/с²; H – интенсивности выпадения дождевых осадков, м/с; I_{liq} – интенсивность массообмена между жидкой и газообразной фазой, кг/(м³·с); I_v – интенсивность массообмена между газообразной и жидкой фазой, кг/(м³·с); J_s – поток растворимого вещества, (кг/м³)·(м/с); K – коэффициент проницаемости пористой среды, м²; K_d – коэффициент распределения между веществом растворимым в жидкости и твердой фазой, м³/кг; K_{liq} – относительная фазовая проницаемость жидкости; K_v – относительная фазовая проницаемость пара; L – линейный масштаб задачи, м; l – линейный размер элементарного объема пористой среды, м; M – молярная масса воды, кг/моль; P_{liq} – давление жидкости, Па; P_{sat} – давление насыщенного пара над поверхностью воды, Па; P_v – давление пара, Па; p_1, p_2, p_3, p_4 и p_5 – эмпирические коэффициенты в уравнении изотермы сорбции; R – универсальная газовая постоянная, Дж/(моль·К); q_{liq} – поток жидкости в пористой среде, (кг/м³)·(м/с); q_v – поток водяного пара в пористой среде, (кг/м³)·(м/с); r – характерный размер капилляра, м; r_{ev} – удельная теплота фазовых превращений вода-пар, Дж/кг; S – равновесное значение концентрации, при котором интенсивность перетока вещества между жидкой и твердой фазами обращается в нуль кг/м³; T – температура, К; t – время, с; \mathbf{u} – вектор скорости переноса вещества в пористой среде потоком жидкости, м/с; u_x и u_y – компоненты вектора скорости переноса вещества в пористой среде потоком жидкости, м/с; w – влагосодержание пористой среды, которое показывает отношение массы воды и водяного пара к полному объему пористой среды, кг/м³; w_e – равновесное влагосодержание, кг/м³; x, y и z – декартовы координаты; ΔV – элементарный объем пористой среды, м³; α – параметр рассеивания пористой среды, м; β – скорость сорбции, 1/с; δ – единичный тензор; η_{liq} –

коэффициент динамической вязкости жидкости, Па·с; η_v – коэффициент динамической вязкости пара, Па·с; θ_e – равновесное объемное влагосодержание пористой среды, м³/м³; θ_{liq} – объемное влагосодержание пористой среды, м³/м³; θ_{sat} – максимальное объемное влагосодержание пористой среды, м³/м³; θ_v – объемное содержание водяного пара в пористой среде, м³/м³; λ_{eff} – эффективная теплопроводность пористой среды, Вт/(м·К); ρ_b – плотность твердой фазы пористой среды, кг/м³; ρ_{liq} – плотность жидкости, кг/м³; ρ_v – плотность водяного пара, кг/м³; τ – параметр, характеризующий «извилистость» диффузионных путей в поровом пространстве; φ – относительная влажность. Индексы: b – основная масса; bot – нижний; s – растворимое вещество; d – распределение; e – равновесный; eff – эффективное значение; env – внешняя среда; liq – жидкость; m – молекулярный; sat – насыщенный; top – верхний; v – пар; 0 – начальный.

Литература

- [1]. Öztürk H.S., Özkan I. Effects of Evaporation and Different Flow Regimes on Solute Distribution in Soil // *Transport in Porous Media*. Vol. 56, No 5. P. 469–473.
- [2]. Bear J. and Verruijt A. *Modeling Groundwater Flow and Pollution*. D. Reidel Publishing Co, 1987.
- [3]. Simunek J., van Genuchten M. Th., and Sejna M. *The HYDRUS-1D Software Package for Simulating the One-Dimensional Movement of Water, Heat and Multiple Solutes in Variably-Saturated Media*. Version 3.0. Department of Environmental Sciences, University of California, Riverside, 2005.
- [4]. Лыков А. В. *Теория сушки*. М.: Энергия, 1968.
- [5]. Николаевский В. М. *Движение углеводородных смесей в пористой среде*. М.: Недра, 1968.
- [6]. Рощина Т. М. Адсорбционные явления и поверхность. // *Соросовский образовательный журнал*. 1998. № 2, С. 89–94.
- [7]. Павлюкевич Н. В. *Введение в теорию тепло- и массопереноса в пористых средах*. Минск: ИТМО, 2001.
- [8]. Кундас С. П., Гринчик Н. Н., Гишкелюк И. А., Адамович А. Л. *Моделирование процессов термовлагодпереноса в капиллярно-пористых средах: Монография*. Минск: ИТМО НАНБ, 2007. 292 с.
- [9]. Вукалович М. П. *Таблицы теплофизических свойств воды и водяного пара*. М.: изд-во стандартов, 1969.
- [10]. Зенкевич О., Морган К. *Конечные элементы и аппроксимация*. М.: Мир, 1986.
- [11]. *Matlab 6.5 User's Guide*, MathWorks Inc, 2002.
- [12]. Сегерлинд Л. *Применение метода конечных элементов*. / Пер. с англ. М.: Мир, 1979.
- [13]. Кулон Ж.-Л., Сабоннадьер САПР в электротехнике. / Пер. с франц. М.: Мир, 1988.
- [14]. Штейн Е. В. *Курс физики почв: Учебник*. М.: Изд-во МГУ. 2005.