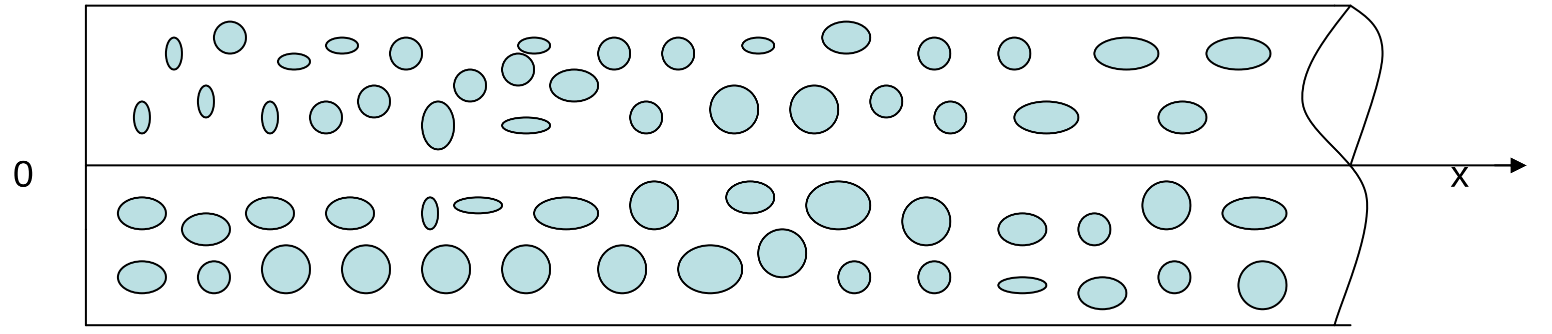
4. Динамика сорбции газа.



***a(x,t)* – количество газа, поглощенного единицей объема сорбента,**
U*(*x,t*)- концентрация газа, находящегося в порах сорбента в слое *x,
***V* -скорость газа.**

Уравнение баланса вещества для слоя сорбента от x_1 до x_2 в течение промежутка времени t_1 до t_2 :

$$\left\{ Vu\Big|_{x_1} - Vu\Big|_{x_2} \right\} S\Delta t = \left\{ (a+u)\Big|_{t_2} - (a+u)\Big|_{t_1} \right\} S\Delta x \qquad (1)$$

$$\Delta x \to 0,\ \Delta t \to 0 \Rightarrow$$

$$-V\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial t}(a+u) \qquad (2)$$

Уравнение кинетики сорбции:

$$\frac{\partial a}{\partial t} = \beta(u-y), \qquad (3)$$

Где β - кинетический коэффицент, *У*-концентрация газа, находящегося в равновесии с сорбированным количеством газа.

Изотерма сорбции:

$$a = f(y) \qquad (4)$$

Изотерма Ленгмюра:

$$f(y) = \frac{yu_0}{\gamma(u_0 + py)}, \qquad (5)$$

Изотерма Генри (справедлива в области малых концентраций):

$$a = \frac{1}{\gamma} y, \qquad (6)$$

где $\frac{1}{\gamma}$ **- коэффицент Генри.**

В этом случае приходим к задаче:

$$-V \frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial a}{\partial t}, \qquad x > 0, t > 0 \qquad (7)$$

$$\frac{\partial a}{\partial t} = \beta\left(u - \gamma a\right), \qquad x > 0, t > 0 \qquad (8)$$

$$a(x,0) = 0, \qquad x \geq 0 \qquad (9)$$

$$u(x,0) = 0, \qquad x > 0 \qquad (10)$$

$$u(0,t) = u_0, \qquad t \geq 0 \qquad (11)$$

где u_0 **- концентрация газа на входе,** $\frac{\partial u}{\partial t}$ **- расход газа на повышение свободной концентрации в порах сорбента,** $\frac{\partial a}{\partial t}$ **- расход газа на увеличение сорбированного количества газа.**

Пренебрегаем производной $\frac{\partial u}{\partial t}$:

$$-V\frac{\partial u}{\partial x}=\frac{\partial a}{\partial t}\quad(12)\qquad\qquad \frac{\partial a}{\partial t}=\beta\left(u-\gamma a\right)\quad(13)$$

$$a(x,0)=0,\quad(14)\qquad\qquad u(0,t)=u_0\quad(15)$$

$(12),(13)\Rightarrow$

$$\text{-}Vu_{xt}=\beta u_t-\beta\gamma a_t=\beta u_t+\beta V\gamma u_x\Rightarrow\ u_{xt}+\frac{\beta}{V}u_t+\beta\gamma u_x=0\qquad(16)$$

$$\text{-}Vu_x\left(x,0\right)=\beta u\left(x,0\right),\quad u\left(0,0\right)=u_0\Rightarrow u\left(x,0\right)=u_0\mathrm{e}^{-\frac{\beta}{V}x}\qquad(17)$$

Для нахождения функции *u(x,t)* получается задача (16),(17),(15).

$$u_{xt}+\frac{\beta}{V}u_t+\beta\gamma u_x=0,\qquad(16)$$

$$u\left(x,0\right)=u_0e^{-\frac{\beta}{V}x},\qquad(17)$$

$$u(0,t)=u_0,\qquad(15)$$

Так как характеристиками уравнения (16) являются прямые *x*=const, *t*=const, то дополнительные условия (17) и (15) представляют значения искомой функции *u(x,t)* на характеристиках.

Аналогично ставится задача для функции *a(x,t)*:

$$a_{xt} + \frac{\beta}{V} a + \beta\gamma a_x = 0 \qquad (18) \qquad a(x,0) = 0 \qquad (14)$$

$$a(0,t) = \frac{u_0}{\gamma}\left(1 - e^{-\beta\gamma t}\right) \qquad (19)$$

Решение уравнения (16) имеет вид:

$$u(x_1,t_1) = u_0 e^{-x_1}\left\{ e^{-t_1} I_0\left(2\sqrt{x_1 t_1}\right) + \frac{1}{x_1}\int_0^{x_1 t_1} e^{-\frac{\tau}{x_1}} I_0\left(2\sqrt{\tau}\right) d\tau \right\}, \qquad (20)$$

где $x_1 = \frac{\beta x}{V}, \quad t_1 = \beta\gamma t, \quad I_0$ - функция Инфельда.

Выполнение условий (17) и (15) легко проверяется.

При переходе от (7) к (12) мы положили $\frac{\partial u}{\partial t} = 0$. Введём новые переменные

$$t' = t - \tfrac{x}{V}, \quad x' = x, \qquad (21)$$

где t' - локальное время в точке x, которое отсчитывается от момента $t_0 = \frac{x}{V}$ прихода в эту точку газовоздушной смеси.

В новых переменных уравнения (7) и (8) примут вид:

$$-V\frac{\partial u}{\partial x'}=\frac{\partial a}{\partial t'} \qquad (22)$$

$$\frac{\partial a}{\partial t'}=\beta\left(u-\gamma a\right) \qquad (23)$$

Сделаем замену: $$\xi=\frac{x'\beta}{V},\quad \tau=t'\beta \quad . \qquad (24)$$

Тогда задача (7)-(11) примет вид:

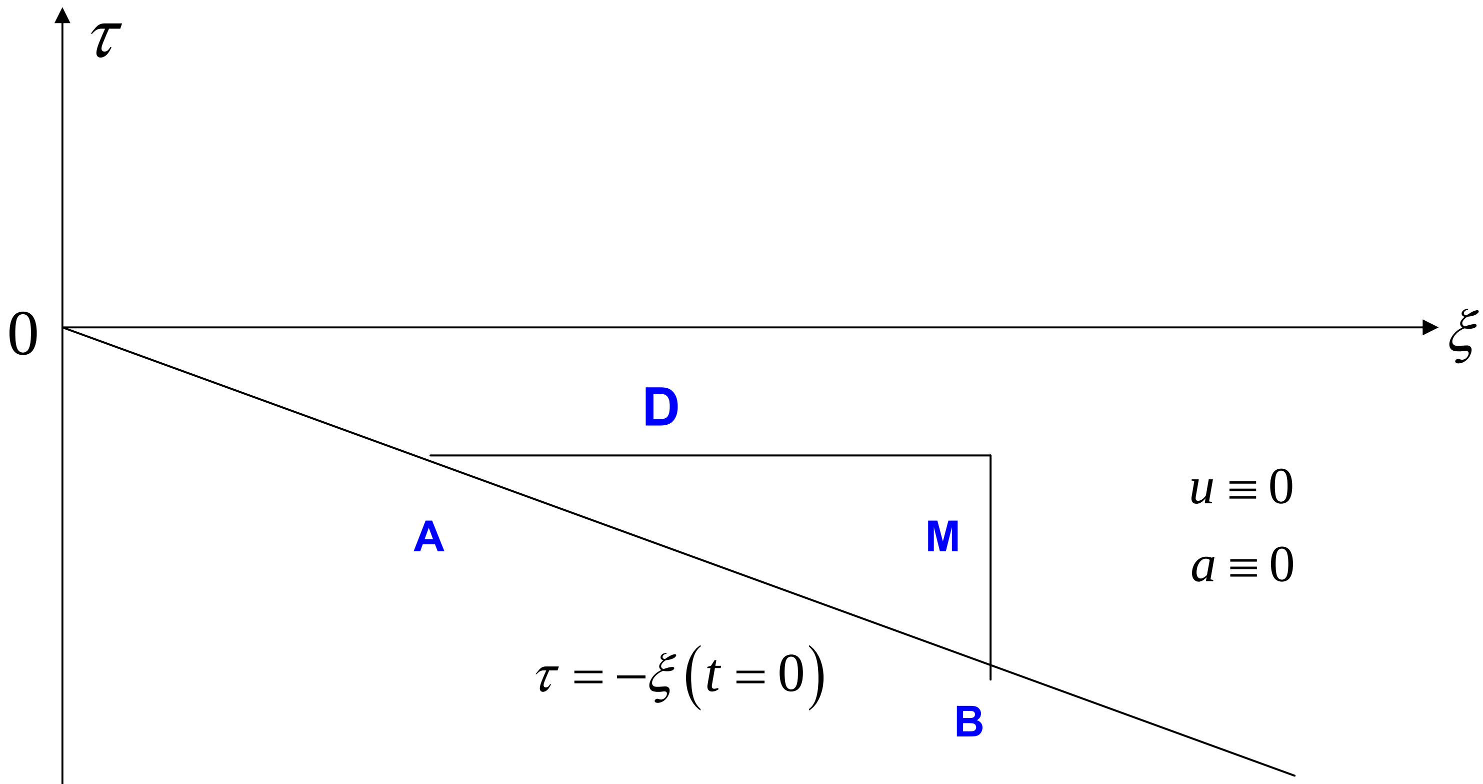
$$\frac{\partial u}{\partial \xi}+\frac{\partial a}{\partial \tau}=0 \qquad (25)$$

$$\frac{\partial a}{\partial \tau}=u-\gamma a \qquad (26)$$

$$a\big|_{\tau=-\xi}=0 \qquad (27)$$

$$u\big|_{\tau=-\xi}=0 \qquad (28)$$

$$u(0,\tau)=u_0 \qquad (29)$$



$(25),(26) \Rightarrow$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial \xi \partial \tau} + \frac{\partial u}{\partial \tau} + \gamma \frac{\partial u}{\partial \xi} = 0, \qquad (30a)$$

$$(7),(8),(9),(10) \Rightarrow \ u(x,0) = 0, \ u_t(x,0) = 0. \qquad (31)$$

$$(30a),(31) \Rightarrow u\big|_{\tau=-\xi} = 0, \qquad \left.\frac{\partial u}{\partial n}\right|_{\tau=-\xi} = 0. \qquad (30b)$$

В области ***D*** получаем общую задачу Коши, причем $u \equiv 0$ в ***D***. Аналогично $a \equiv 0$ в ***D***.

Так как a - дифференцируемая по τ функция, то она непрерывна по τ.
Функция u может иметь разрыв при $\tau = 0$.
Так как $a = 0$ при $\tau = 0$, то из (25) и (26) получаем задачу Коши при $\tau = 0$:

$$\frac{\partial u}{\partial \xi} + u = 0, \quad \xi > 0, \quad u\big|_{\xi=0} = u_0. \qquad (32)$$

Следовательно, u имеет разрыв при $\tau = 0$.
Так как $u(\xi, 0) = u_0 e^{-\xi}$ - решение задачи (32), то при $\tau \geq 0$
получаем задачу с данными на характеристиках (задачу Гурса):

$$\begin{cases} \dfrac{\partial^2 u}{\partial \xi \partial \tau} + \dfrac{\partial u}{\partial \tau} + \gamma \dfrac{\partial u}{\partial \xi} = 0, \quad \xi > 0, \ \tau > 0, & (33) \\ u\big|_{\xi=0} = u_0, \quad u\big|_{\tau=0} = u_0 e^{-\xi}. & (34) \end{cases}$$

Аналогичная задача получается и для функции a.

Выведем формулу (20). Запишем уравнение (16) в приведенном виде. Положим в (11) $u_0 = 1$ **и введем новые переменные:**

$$\zeta = \frac{\beta}{V}x, \quad \theta = \beta\gamma t. \qquad (35)$$

Тогда из (15)-(17) получаем:

$$\begin{cases} u_{\zeta\theta} + u_\theta + u_\zeta = 0, & (36) \\ u(\zeta, 0) = e^{-\zeta}, & (37) \\ u(0, \theta) = 1. & (38) \end{cases}$$

Введем новую функцию: $u(\zeta,\theta) = W(\zeta,\theta)e^{-\zeta-\theta}, \qquad (39)$

для которой из (36)-(38) получим задачу:

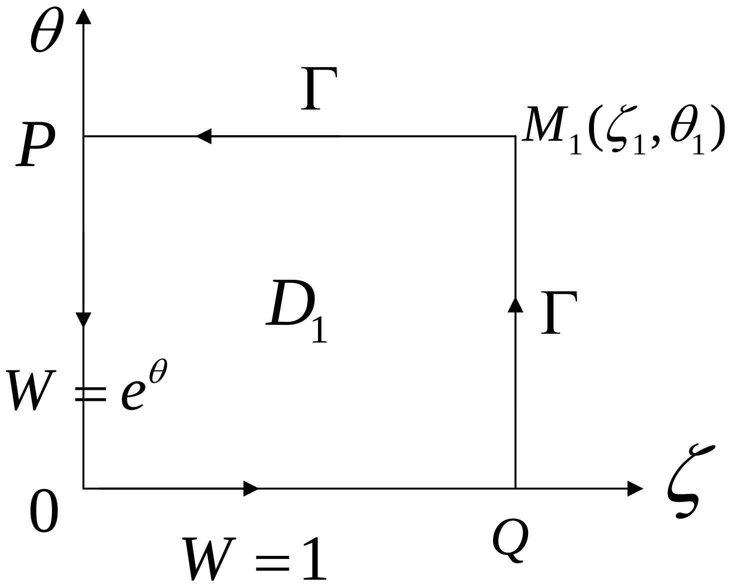
$$\begin{cases} W_{\zeta\theta} - W = 0, & (40) \\ W(\zeta, 0) = 1, & (41) \\ W(0, \theta) = e^{\theta}. & (42) \end{cases}$$

Ранее (гл. 2) была построена функция Римана для оператора $u_{xt} + Cu = 0.$ **Заменой *C* на -1 из неё получим функцию Римана для оператора (40):**

$$V(\zeta,\theta,\zeta_1,\theta_1) = I_0\left(2\sqrt{(\zeta-\zeta_1)(\theta-\theta_1)}\right) \qquad (43)$$

Рассмотрим область *D₁* для которой запишем формулу Грина:

$$\int\limits_{D_1}\left(WV_{\zeta\theta}-VW_{\zeta\theta}\right)d\zeta d\theta=\frac{1}{2}\int\limits_{\Gamma}\left(V_{\zeta}W-VW_{\zeta}\right)d\zeta+\left(VW_{\theta}-V_{\theta}W\right)d\theta \qquad (44)$$



Функция Римана в области *D* является решением задачи:

$$\begin{cases} V_{\zeta\theta}-V=0 & \text{в } D_1, \quad (45) \\ V=1 & \text{на } PM_1 \text{ и } M_1Q \quad (46) \end{cases}$$

Из (40),(44),(45) получаем:

$$0=\int\limits_{0}^{Q}Pd\zeta+\int\limits_{Q}^{M_1}Qd\theta+\int\limits_{M_1}^{P}Pd\zeta+\int\limits_{0}^{P}Qd\theta, \qquad (47)$$

где $$\mathrm{P}\left[W,V\right]=V_{\zeta}W-VW_{\zeta},\quad \mathrm{Q}\left[W,V\right]=VW_{\theta}-V_{\theta}W \qquad (48)$$

Интегрируем по частям:

$$\int_0^Q \left(V_\zeta \cdot W - V \cdot W_\zeta\right) d\zeta = \int_0^Q W \cdot V_\zeta d\zeta = W \cdot V\Big|_0^Q - \int_0^Q W_\zeta \cdot V d\zeta = 1 - I_0\left(2\sqrt{\zeta_1 \theta_1}\right), \qquad (49)$$

$$\int_Q^{M_1} \left(VW_\theta - V_\theta W\right) d\theta = \int_Q^{M_1} VW_\theta d\theta = WV\Big|_Q^{M_1} - \int_Q^{M_1} V_\theta W d\theta = W\left(M_1\right) - 1, \qquad (50)$$

$$\int_{M_1}^P \left(V_\zeta W - VW_\zeta\right) d\zeta = -WV\Big|_{M_1}^P + \int_P^{M_1} WV_\zeta d\zeta = W(M_1) - e^{\theta_1}, \qquad (51)$$

$$\int_P^0 \left(VW_\theta - V_\theta W\right) d\theta = -WV\Big|_P^0 +$$

$$+2\int_P^0 VW_\theta d\theta = -I_0\left(2\sqrt{\zeta_1 \theta_1}\right) + e^{\theta_1} + 2\int_P^0 e^\theta I_0\left(2\sqrt{(\zeta - \zeta_1)(\theta - \theta_1)}\right) d\theta. \qquad (52)$$

$$\left(49\right)-\left(52\right)\Rightarrow$$

$$W(M_1)=I_0\left(2\sqrt{\zeta_1\theta_1}\right)+\int_0^{\theta_1}e^{\theta}I_0\left(2\sqrt{\zeta_1(\theta_1-\theta)}\right)d\theta \qquad (53)$$

$$\left(39\right)\Rightarrow \quad u\left(M_1\right)=u\left(\zeta_1,\theta_1\right)=e^{-\zeta_1-\theta_1}W\left(M_1\right), \qquad (54)$$

$$(53),\left(54\right)\Rightarrow \quad u\left(\zeta_1,\theta_1\right)=e^{-\zeta_1}\left\{e^{-\theta_1}I_0\left(2\sqrt{\zeta_1\theta_1}\right)+\int_0^{\theta_1}I_0\left(2\sqrt{\zeta_1\left(\theta_1-\theta\right)}\right)e^{\theta-\theta_1}d\theta\right\} \qquad (55)$$

$$\left(55\right)\Rightarrow \quad \tau=\zeta_1\left(\theta_1-\theta\right)\Rightarrow \theta-\theta_1=-\frac{\tau}{\zeta_1}\Rightarrow d\theta=-\frac{d\tau}{\zeta_1}\Rightarrow$$

$$u\left(\zeta_{1,}\theta_1\right)=e^{-\zeta_1}\left\{e^{-\theta_1}I_0\left(2\sqrt{\zeta_1\theta_1}\right)+\frac{1}{\zeta_1}\int_0^{\zeta_1\theta_1}e^{-\frac{\tau}{\zeta_1}}I_0\left(2\sqrt{\tau}\right)d\tau\right\}. \qquad (56)$$

Поскольку в обозначениях формулы (20) $\zeta_1=x_1$ **и** $\theta_1=t_1$ **то, заменяя 1 на** u_0**, получим, что из (56) следует (20).**