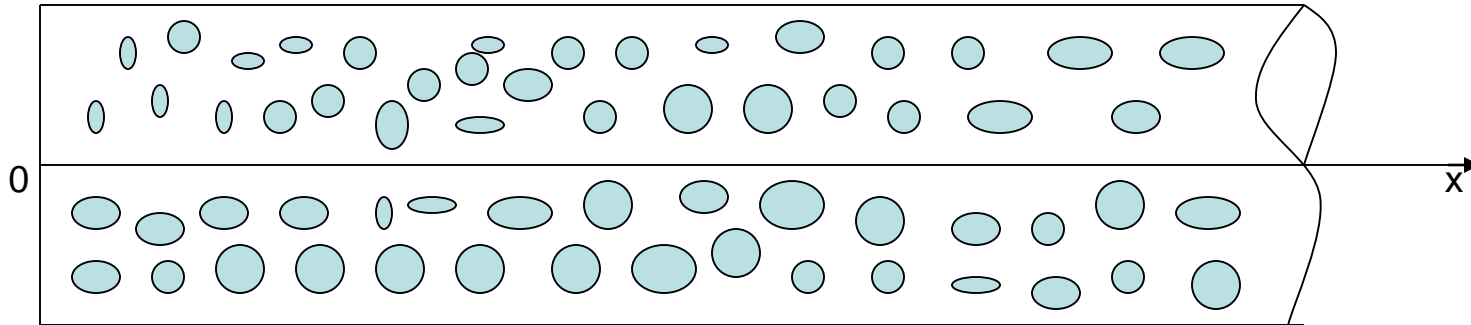


4. Динамика сорбции газа



$a(x,t)$ – 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 :

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

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

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

Уравнение кинетики сорбции:

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

где β - кинетический коэффициент, Y -концентрация газа находящегося в равновесии с сорбированным количеством газа.

Изотерма сорбции:

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

Изотерма Ленгмюра:

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

Изотерма Генри (справедлива в области малых концентраций):

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

где $\frac{1}{\gamma}$ - коэффициент Генри.

В этом случае приходим к задаче:

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

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

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

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

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

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

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

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

(12),(13) \Rightarrow

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

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

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

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

$$u(x, 0) = u_0 e^{-\frac{\beta}{V}x}, \quad (17)$$

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

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

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

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

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

Решение уравнения (16) имеет вид:

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

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

Для проверки выполнения условия (15) нужно сделать замену $\theta = \frac{\tau}{x_1}$ и затем положить $x_1 = 0$. Выполнение условия (17) очевидно.

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

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

где t' - локальное время в точке x , которое отчитывается от момента

$t_0 = \frac{x}{V}$ прихода в эту точку газовой смеси.

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

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

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

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

Тогда задача (7)-(11) примет вид $(t = \frac{1}{\beta}(\tau + \xi))$:

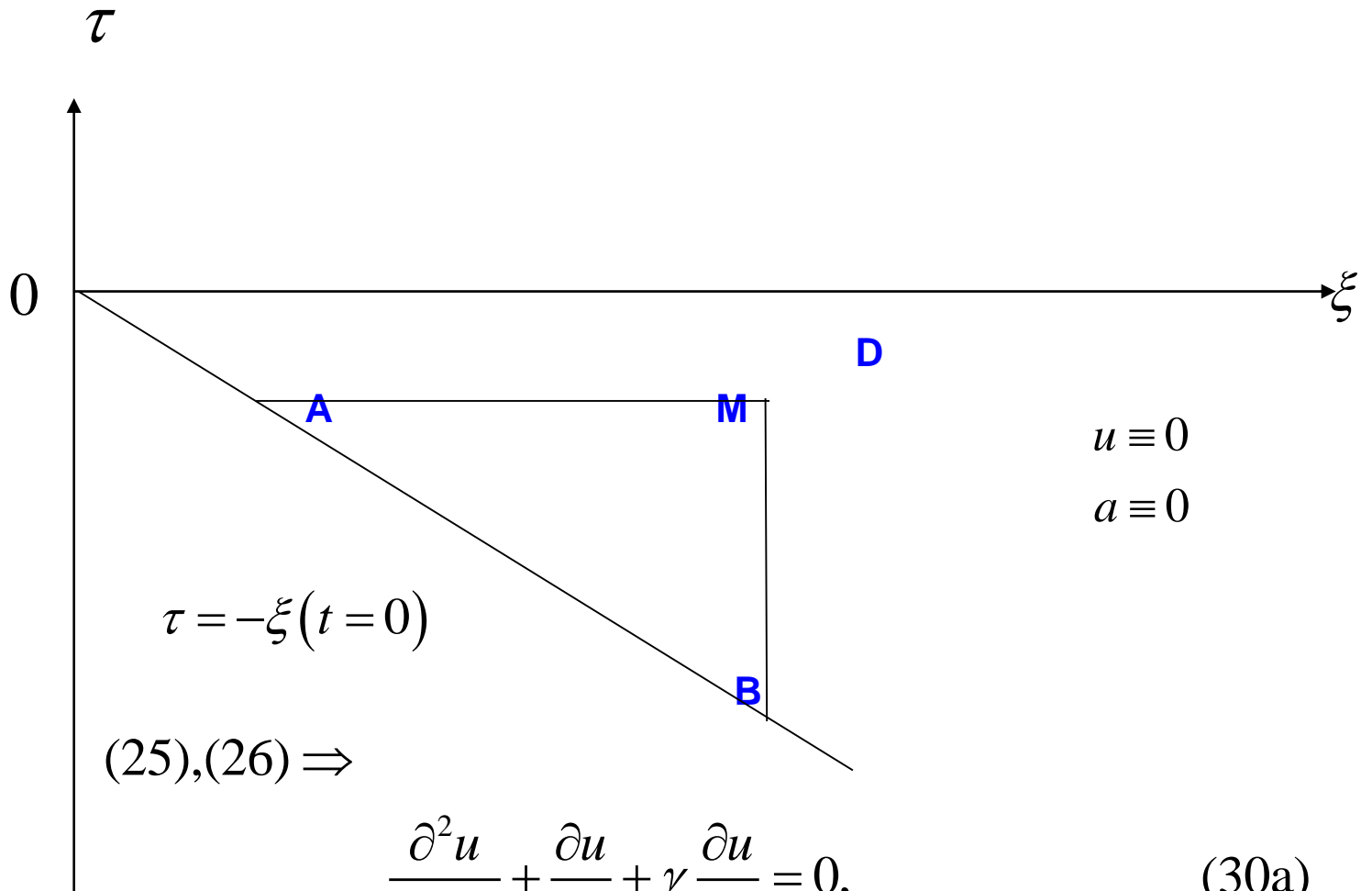
$$\frac{\partial u}{\partial \xi} + \frac{\partial a}{\partial \tau} = 0 \quad (25)$$

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

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

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

$$u|_{\xi=0} = u_0 \quad (29)$$



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

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

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

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 $\tau = 0$:

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

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):

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial^2 u}{\partial \xi \partial \tau} + \frac{\partial u}{\partial \tau} + \gamma \frac{\partial u}{\partial \xi} = 0, \quad \xi > 0, \quad \tau > 0, \end{array} \right. \quad (33)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} u|_{\xi=0} = u_0, \quad u|_{\tau=0} = u_0 e^{-\xi}. \end{array} \right. \quad (34)$$

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:

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

Тогда из (15)-(17) получаем:

$$\begin{cases} u_{\zeta\theta} + u_{\theta} + u_{\zeta} = 0, \end{cases} \quad (36)$$

$$\begin{cases} u(\zeta, 0) = e^{-\zeta}, \end{cases} \quad (37)$$

$$\begin{cases} u(0, \theta) = 1. \end{cases} \quad (38)$$

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

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

$$\begin{cases} W_{\zeta\theta} - W = 0, \end{cases} \quad (40)$$

$$\begin{cases} W(\zeta, 0) = 1, \end{cases} \quad (41)$$

$$\begin{cases} W(0, \theta) = e^{\theta}. \end{cases} \quad (42)$$

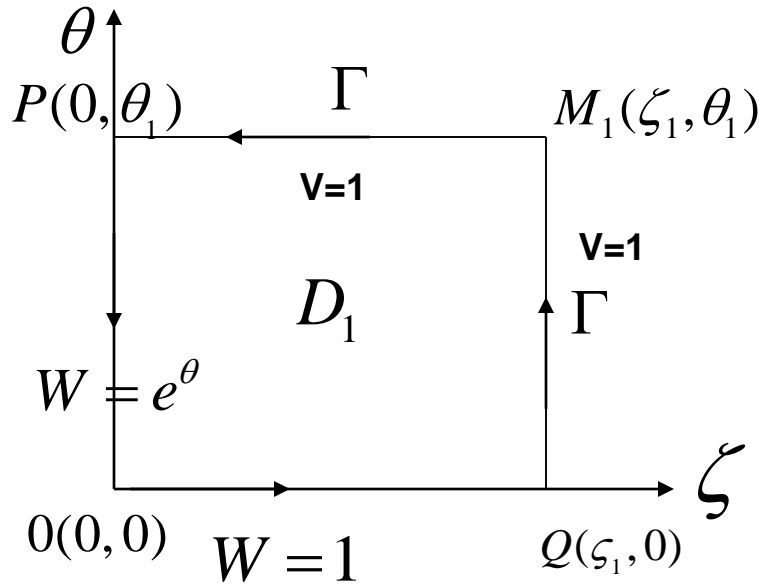
Ранее была построена функция Римана для оператора $u_{xt} + Cu = 0.$

Заменой C на -1 из неё получим функцию Римана для оператора (40):

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

Рассмотрим область D_1 для которой запишем формулу Грина:

$$\int_{D_1} (WV_{\zeta\theta} - VW_{\zeta\theta}) d\zeta d\theta = \frac{1}{2} \int_{\Gamma} (V_{\zeta}W - VW_{\zeta}) d\zeta + (VW_{\theta} - V_{\theta}W) d\theta \quad (44)$$



Функция Римана в области D является решением задачи:

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

$$\begin{cases} V = 1 & \text{на } PM_1 \text{ и } M_1Q \end{cases} \quad (46)$$

Из (40),(44),(45) получаем:

$$0 = \int_0^{Q} Pd\zeta + \int_Q^{M_1} Qd\theta + \int_{M_1}^P Pd\zeta + \int_0^P Qd\theta, \quad (47)$$

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

Интегрируем по частям:

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

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

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

$$\begin{aligned} \int_P^0 (VW_\theta - V_\theta W) d\theta &= -WV \Big|_P^0 + \\ &+ 2 \int_P^0 VW_\theta d\theta = -I_0 \left(2\sqrt{\zeta_1 \theta_1} \right) + e^{\theta_1} + 2 \int_P^0 e^\theta I_0 \left(2\sqrt{(\zeta - \zeta_1)(\theta - \theta_1)} \right) d\theta. \end{aligned} \quad (52)$$

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

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

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

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

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

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

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).