

04/05 / Мат. модель сорбции газа

\* задачу о поглощении (сорбции) газа. Эта зад. часто встречается на практике. Многие производства сорбуются вытесненными вредными газами. Нельзя такие выбросы пропускать через фильтры, в д. вредный газ поглощается спец. вещ-вом (сорбентом), что приводит к очистке воздушно-газовой смеси.

\* трубу (направленную по оси  $Ox$ ), заполненную пористым спец-вом, поглощающим газ. Обозначим через  $C(x, t)$  конц-цию газа в воздушно-газ. смеси, а через  $\mu(x, t)$  — кол-во газа поглощенного единицей объема сорбента.

В возд.-газ. смеси движется в трубе со скоростью  $v$ . Тогда за время  $\Delta t$  на участок от  $x$  до  $x + \Delta x$  поступает масса газа, равная  $\Delta m_1 = (C(x + \Delta x, t) - C(x, t))Sv\Delta t$



где  $S$  — площадь сечения трубы. Удвоение  
будет получено на этом участке  
концентрации газа  $\Delta m_2 = -(u(x, t + \Delta t) - u(x, t)) S \Delta x$ .

П.к.  $\Delta m_1 = \Delta m_2$ , то при  $\Delta t \rightarrow 0$  и  $\Delta x \rightarrow 0$ ,  
получим  $v \cdot \frac{\partial C}{\partial x} = - \frac{\partial u}{\partial t}$  (1). Кроме того, дол-  
но вып-ся усл-е кинетики сорбции:

$\frac{\partial u}{\partial t} = \beta (C - C^*)$ , (2) где  $\beta$  — кинетич. коэф-т  
сорбции, а  $C^*$  — равновесн. концентрация газа с  
газом в сорбенте. Велич.  $C^*$  связана с  
 $u(x, t)$  в виде  $u(x, t) = f(C^*)$ , где ф-ция  
 $f(C^*)$  наз-ся изотермой сорбции. При ма-  
лых кон-ц-циях  $f(C^*)$  явл-ся лн. ф-цией,  
т.е.  $u(x, t) = \frac{1}{\gamma} C^* \Leftrightarrow C^* = \gamma u(x, t)$  (3) —  
изотерма Тенри,  $\gamma$  — коэф-т Тенри.

Подставив (3) в (2), получим ур-е, д сов-  
местно с (1) дает нам с-му ур-й в част-  
ных производных, д описывает мат.  
модель сорбции газа.



$$\begin{cases} \rho \frac{\partial C(x,t)}{\partial x} = - \frac{\partial u(x,t)}{\partial t}, \end{cases} \quad (4)$$

$$\begin{cases} \frac{\partial u(x,t)}{\partial t} = \beta (C(x,t) - \gamma u(x,t)), \quad 0 \leq x \leq l, \quad 0 \leq t \leq \frac{1}{\beta} \end{cases}$$

с деп. усл-ми  $u(x, t=0) = 0,$   
 $C(x, t=0) = C_0 = \text{const} \quad (5)$

Из (4) можно получить зад. только г/конц-ции газа в возд.-газ. смеси  $C(x,t)$ .  
 Д/этого продифференцируем лев. член в (4) по  $t$  и получим:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \beta \left( \frac{\partial C}{\partial t} - \gamma \frac{\partial u}{\partial t} \right) = \beta \left( \frac{\partial C}{\partial t} + \gamma \rho \frac{\partial C}{\partial x} \right) \quad (6)$$

Продифф-м лев. член в (4) и получим:

$$\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = - \rho \frac{\partial^2 C}{\partial x \partial t}$$

Подставив получ. вырат-е в (6), получим окончательно член г/  $C(x,t)$ :

$$\rho \frac{\partial^2 C}{\partial x \partial t} + \beta \frac{\partial C}{\partial t} + \beta \gamma \rho \frac{\partial C}{\partial x} = 0, \quad x \in [0, l], \quad t \in [0, \frac{1}{\beta}] \quad (7)$$

\* время, необход. г/прохождения всей длины трубы  $l$ , где происходит очистка воздуха. На входе гранич. усл-е:  $C(x=0, t) = C_0$  (8)



где  $C_0$  — const конн-ция газа в воздухе при входе в очистительную с-му.

Необх. также задать начал. усл-е  $g/$   $C(x, t=0)$ .  $g/$  это заметим, что из 2-го ур-я с-мы (H) имеем:

$$\frac{\partial u}{\partial t} \Big|_{t=0} = \beta (C(x, t=0) - \gamma u(x, t=0)) = \beta C(x, t=0).$$

Подставив это вырат-е в 1-ое ур-е с-мы (H), получим:  $\partial C(x, t=0) / \partial x = -\beta C(x, t=0)$

при  $C(x=0, t) = C_0$

Откуда находим:  $C(x, t=0) = C_0 e^{-\beta x} \quad (9)$

Искомое реш-е ур-я (7) представим в виде:  $C(x, t) = U(x, t) e^{\mu t - \beta x} \quad (10)$ , тогда:

$$\frac{\partial C}{\partial x} = (U_x - \beta U) e^{\mu t - \beta x},$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = (U_t + \mu U) e^{\mu t - \beta x},$$

$$\frac{\partial^2 C}{\partial x \partial t} = (U_{xt} - \beta U_t + \mu U_x - \beta \mu U) e^{\mu t - \beta x}$$

В рез-те получим:  $\partial U_{xt} + \partial(\mu + \gamma\beta) \cdot U_x - \gamma\beta^2 U = 0 \quad (11)$



Коэрр-т и опред-ся из усл-я

$$u + v^2 = 0 \Leftrightarrow u = -v^2$$

If длина трубы  $l$  имеет большое значение, то можно считать, что  $x \geq 0$  и  $t \geq 0$ .

В рез-те имеем зад. на полупрямой:

$$\frac{\partial u}{\partial x \partial t} - \nu \beta^2 u = 0, \quad x \geq 0, \quad t \geq 0. \quad (12)$$

Начальн. граничн. усл-я:

$$u(x=0, t) = C(x=0, t) e^{\nu \beta^2 t} = C_0 e^{\nu \beta^2 t},$$

$$u(x, t=0) = C(x, t=0) e^{\frac{\beta}{2} x} = C_0 e^{-\frac{\beta}{2} x} e^{\frac{\beta}{2} x} = C_0.$$

В начале найдем автомодельное решение ур-я (12):

$$\begin{cases} \frac{\partial^2 u_1}{\partial x \partial t} - \nu \beta^2 u_1 = 0, & x \geq 0, t \geq 0, \\ u_1(x=0, t) = C_0, & u_1(x, t=0) = C_0 \end{cases} \quad (13)$$

Реш-е этой зад. будем искать в виде

$$u_1(x, t) = C_0 w(\xi = \sqrt{x t}), \quad \text{тогда:}$$

$$\frac{\partial u_1}{\partial x} = C_0 w_\xi \xi_x = \frac{1}{2} C_0 \sqrt{\frac{t}{x}} w_\xi$$

$$\frac{\partial^2 u_1}{\partial x \partial t} = C_0 w_{\xi\xi} \xi_x \xi_t + C_0 w_\xi \xi_{xt} = \frac{1}{4} C_0 w_{\xi\xi} + \frac{1}{4\xi} C_0 w_\xi$$

$$\text{Откуда следует: } w_{\xi\xi} + \frac{1}{\xi} w_\xi - \frac{4\nu\beta^2}{w} w = 0 \quad (14)$$

Получили ур-е Бесселя лишнего ар-



элемента нулевого пор-ка:  $w(\xi) = w(x, t) =$   
 $= J_0(2\beta \sqrt{\frac{\nu}{\rho}} \sqrt{x t})$ ;  $w(0) = 1 \Rightarrow$

$$\Rightarrow u_1(x, t) = C_0 J_0(2\beta \sqrt{\frac{\nu}{\rho}} \sqrt{x t}), \text{ тогда}$$

$$u(x, t) = C_0 (w(x, t) + u_2(x, t))$$

Заг. г/  $u_2(x, t)$ :

$$\begin{cases} \nu \frac{\partial^2 u_2}{\partial x \partial t} - \gamma \beta^2 u_2 = 0, & x > 0, t > 0, \\ u_2(x=0, t) = e^{\gamma \beta t} - 1, \\ u_2(x, t=0) = 0 \end{cases} \quad (15)$$

If  $u_2(x, t)$  — реш-е ур-я (15), то и  $\frac{\partial u_2}{\partial t}$  — тоже реш-е ур-я (15), но тогда  $\varphi(x, t) =$   
 $= \frac{\partial u_2}{\partial t} - \gamma \beta u_2(x, t)$  — тоже реш-е ур-я (15), но  
 при этом это есть ДУ 1-го пор-ка отно-  
 сит.  $u_2(x, t)$ . Напишем его реш-е:

$$u_2(x, t) = \int_0^t e^{\gamma \beta (t-\tau)} \varphi(x, \tau) d\tau$$

В кав-ве  $\varphi(x, t)$  можно взять

$$\varphi(x, t) = \gamma \beta J_0(2\beta \sqrt{\frac{\nu}{\rho}} \sqrt{x t}) \Rightarrow$$

$$\Rightarrow u_2(x, t) = \int_0^t \gamma \beta e^{\gamma \beta (t-\tau)} J_0(2\beta \sqrt{\frac{\nu}{\rho}} \sqrt{x \tau}) d\tau$$

Д/окончательного реш-я нужно про-  
 верить выполнение начал. и гранич. усл-й



зад. (15)

$$u_2(x, t=0) = 0,$$

$$u_2(x=0, t) = \int_0^t \nu \beta e^{-\nu \beta(t-\tau)} d\tau = e^{-\nu \beta t} - 1$$

Отсюда  $\Rightarrow$ , что  $u_2(x, t)$  — есть решение

зад. (15). Тогда  $C(x, t) = C_0 e^{-\frac{\beta}{2}x} (e^{-\nu \beta t} - 1)$

$$C(x, t) = C_0 e^{-\frac{\beta}{2}x} (e^{-\nu \beta t} - 1) + \nu \beta \int_0^t e^{-\nu \beta(t-\tau)} \gamma_0(2\beta \sqrt{\frac{x}{\nu}} \sqrt{t-\tau}) d\tau \quad (16)$$

Наша зад. состоит в определении степени очистки с помощью сорбции газа.

Длина очистной установки  $= l$ . Этот путь газ пройдет за время  $t = \frac{l}{v}$ , где  $v$  — скорость движения газа в установке.

Подставив  $x=l$  и  $t = \frac{l}{v}$  в (16), получим:

$$C_l = C(x=l, t=\frac{l}{v}) = C_0 e^{-\frac{\beta}{2}l} (e^{-\nu \beta \frac{l}{v}} - 1) + \nu \beta \cdot \int_0^{\frac{l}{v}} e^{-\nu \beta(t-\tau)} \gamma_0(2\beta \sqrt{\frac{x}{\nu}} \sqrt{t-\tau}) d\tau, \quad (17)$$

где параметр  $\rho = \frac{\beta l}{v}$  наз-ся пар-ром очистки,  $\rho$  определяет эффективность очистки.

Отношение  $\delta = \frac{C_l}{C_0}$  ав-ся показателем

очистки. Показатель очистки  $\delta \xrightarrow{\rho \rightarrow \infty} 0$ ,



поэтому надо получить асимптотич.  
поведение  $\delta(r)$  при больших  $r$ . При  
этом же надо помнить, что  $\gamma < 1$ .