Математические аспекты динамики сорбции газов

Ю.И. Фёдоров, *к.ф.-м.н., Оренбургский ГАУ*

Математическая теория динамики сорбции была создана в цикле важных работ по математическому моделированию динамики химических процессов, выполненных выдающимся математиком современности академиком А.Н. Тихоновым. Постановка задачи о сорбции газа была связана с созданием новых систем противогазов. Сейчас математическая теория динамики сорбции составляет основу теории расчёта очистных сооружений и систем, исследований по восстановлению атмосферы. Актуальность этих исследований только возросла, т.к. резко обострились проблемы экологии.

Цель данного исследования – изучение некоторых свойств решений линейных гиперболических уравнений динамики сорбции газов методом, основанным на применении точных дифференциалов и разработанным автором.

Напомним, что математическая модель сорбции газа из потока воздуха слоем зернистого материала сводится к краевой задаче для линейного гиперболического уравнения [1]. Пусть через трубку, заполненную поглощающим веществом (сорбентом), пропускается смесь воздуха и газа. За ось x выбрана ось трубки. Обозначим через y время, $u(x, y)$ – концентрацию газа, находящегося в порах сорбента в слое x, $\alpha(x, y)$ – количество газа, поглощённого единицей объёма сорбента. Скорость ν газа считается достаточно большой, а диффузия не участвует в переносе газа. Сорбент характеризуется изотермой сорбции Генри, справедливой для малых концентраций газа $\alpha(x, y) = \gamma^{-1}\cdot\rho$, где ρ – концентрация газа, находящегося в равновесии с сорбированным количеством газа, γ^{-1} – коэффициент Генри.

В рамках этой модели задача нахождения функции $u(x, y)$ сводится к задаче об определении решения гиперболического уравнения $u_{xy}+\beta\cdot\gamma\cdot u_x+\dfrac{\beta}{\nu}\cdot u_y=0$ с постоянными коэффициентами по заданным значениям решения на характеристиках уравнения: $u(x, 0) = u_0\cdot\exp(-\dfrac{\beta}{\gamma}\cdot x)$, $u(0, y) = u_0$, где β – кинетический коэффициент, u_0 – концентрация газа на входе. Такая задача в теории гиперболических уравнений называется задачей Гурса [2]. А.Н. Тихоновым было найдено решение задачи о сорбции газа [1].

С помощью понятия потенциала сопряжённых пар, введённого нами, исследованы некоторые свойства решений одного класса линейных гиперболических уравнений, который включает линейные уравнения динамики сорбции газа.

Опишем рассматриваемый класс уравнений и область их определения. Пусть односвязная область D – бесконечная вертикальная прямоугольная полоса в первой четверти плоскости XOY, ограниченная характеристиками $x = 0$, $x = d$ и $y = 0$, с вершинами и $O(0, 0)$ и $A(d, 0)$, где d – фиксированное положительное число (длина трубки, заполненной сорбентом), т.е. $D=\{(x,\ y): 0\le x\le d,\ y\ge 0\}$. В области D рассматривается линейное гиперболическое дифференциальное уравнение с частными производными второго порядка:

$$L(u)\equiv u_{xy}+a(x,y)u_x+b(x,y)u_y+ \\ +c(x,y)u=0 \tag{1}$$

с коэффициентами (вообще говоря, переменными), удовлетворяющими условию

$$a(x,y),b(x,y),c(x,y),a_x(x,y), \\ b_y(x,y)\in C(\bar{D}). \tag{2}$$

Условия гладкости функции $u(x, y)$: $u(x, y)\in\tilde{C}$, где $\tilde{C}$ – функциональный класс, $\tilde{C}=C^1(\bar{D})\cap C^2(D)$.

Введём основное понятие применяемого метода – понятие потенциала сопряжённых пар. Обозначим $L^*(u)$ дифференциальный оператор, формально сопряжённый с оператором $L(u)$ [3], как:

$$L^*(v)=v_{xy}-(av)_x-(bv)_y+cv. \tag{3}$$

$\forall u(x,y),v(x,y)\in\tilde{C}$ справедливо тождество Грина:

$$2(vL(u)-uL^*(v))=(vu_y-uv_y+2auv)_x- \\ -(uv_x-vu_x-2buv)_y. \tag{4}$$

Введём обозначения $P(x,y)=uv_x-vu_x-2buv,$. $Q(x,y)=vu_y-uv_y+2auv.$

Из тождества (4) следует, что если $L(u) = 0, L^*(\nu) = 0$ в области D, то

$$(uv_x-vu_x-2buv)_y=(vu_y-uv_y+2auv)_x,\ \text{т.е.} \\ P_y(x,y)=Q_x(x,y). \tag{5}$$

Для выражения $P(x,y)dx+Q(x,y)dy$ выполнены условия известного признака полного дифференциала в односвязной области D [4]. Поэтому выражение $(uv_x-vu_x-2buv)dx+(vu_y-uv_y+2auv)dy$ является полным дифференциалом в области D, т.е. существует функция $z(x, y)$, определённая в области D, такая, что $dz=(uv_x-vu_x-2buv)dx+$. $(vu_y-uv_y+2auv)dy$.

В векторном анализе условие (5) является признаком того, что векторное поле $\vec{F}(x,y)=$ $(P(x,y);Q(x,y))$ – безвихревое в D [4]. При этом функцию $\hat{u}(x,y)$ такую, что $P(x,y)dx+Q(x,y)dy=$ $-d\hat{u}(x,y)$, называют скалярным потенциалом безвихревого векторного поля $\vec{F}$. Из этих соображений далее рассматривается $\hat{u}(x,y)$, а не $z(x, y)$:

$$d\hat{u}(x,y) = -P(x,y)dx - Q(x,y)dy \equiv$$
$$(vu_x - uv_x + 2buv)dx + (uv_y - vu_y - 2auv)dy$$

Учитывая форму первого дифференциала функции двух переменных $d\hat{u} = \hat{u}_x \cdot dx + \hat{u}_y \cdot dy$, это дифференциальное равенство преобразуем к системе уравнений

$$\begin{cases} \hat{u}_x = vu_x - uv_x + 2buv, \\ \hat{u}_y = uv_y - vu_y - 2auv. \end{cases} \qquad (6)$$

Здесь $u(x, y)$ и $v(x, y)$ – любые решения из $\tilde{C}$ уравнений $L(u) = 0$ и $L^*(v) = 0$ соответственно. Функция $\hat{u}(x,y)$ восстанавливается по своему полному дифференциалу с точностью до вещественного постоянного слагаемого $\hat{u}_0 = \hat{u}(x_0, y_0)$ по формуле:

$$\hat{u}(x,y) = \hat{u}_0 +$$
$$+\int_{M_0}^{M} (vu_\xi - uv_\xi + 2buv)d\xi + (uv_\eta - vu_\eta - 2auv)d\eta, \qquad (7)$$

где $M_0(x_0, y_0)$ фиксированная, а $M(x, y)$ переменная точки области D, криволинейный интеграл не зависит от формы дуги интегрирования M_0M [5].

Функцию $\hat{u}(x,y)$ будем называть потенциалом сопряжённой пары $u(x, y)$ и $v(x, y)$ в области D, т.к. векторное поле

$$\vec{F}(x,y) = \left(P(x,y); Q(x,y)\right) \equiv$$
$$\equiv (uv_x - vu_x - 2buv; vu_y - uv_y + 2auv),$$

потенциалом которого является $\hat{u}(x,y)$, формируется с помощью решений $u(x, y)$ исходного и $v(x, y)$ сопряжённого уравнений [6].

В теории краевых задач для гиперболических уравнений хорошо известна роль функции Римана [1]. Далее рассматриваются потенциалы сопряжённых пар, построенные с помощью функции Римана.

Пусть $\xi O\eta$ – прямоугольная декартова система координат. Зафиксируем произвольную точку $M(x, y)$ области D на плоскости $\xi O\eta$ и проведём через неё характеристики $\xi = x$ и $\eta = y$, пересекающие оси $O\xi$ и $O\eta$ соответственно в точках $R(x, 0)$ и $S(0, y)$. Обозначим через Ω_{xy} характеристический прямоугольник в области D плоскости $\xi O\eta$, ограниченный этими характеристиками и отрезками OR и OS осей ($ORMS$), с вершиной в точке $M(x, y)$. (ξ, η). – текущие координаты точек области Ω_{xy}.

Пусть $v = v(\xi, \eta; x, y)$ в системе уравнений (6) – функция Римана для уравнения (1) в области Ω_{xy} [3]. Эта функция зависит от двух пар переменных: текущих координат $(\xi; \eta)$ точек области Ω_{xy} и фиксированных координат x, y точки M. Как функция текущих координат ξ и η, функция Римана $v(\xi, \eta; x, y)$ является решением сопряжённого уравнения

$$L^*(v) \equiv v_{\xi\eta} - (av)_\xi - (bv)_\eta + cv = 0,$$

удовлетворяющим на границе области Ω_{xy} условиям:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial v(\xi, y; x, y)}{\partial \xi} = b(\xi, y)\cdot v(\xi, y; x, y), \\ \dfrac{\partial v(x, \eta; x, y)}{\partial \eta} = a(x, \eta)\cdot v(x, \eta; x, y), \\ v(x, y; x, y) = 1. \end{cases}$$

При выполнении условий (2) функция Римана уравнения (1) существует и единственна [2]. Потенциал $\hat{u} = \hat{u}(\xi, \eta; x, y)$, определённый в области Ω_{xy} системой уравнений (6) или интегральной формулой (7), где $v(\xi, \eta; x, y)$ – функция Римана, уже будет двухточечным, а роль начальной точки $M_0(x_0, y_0)$ линии интегрирования будет играть точка $M_0 = O(0; 0)$.

С помощью понятия двухточечного потенциала $\hat{u}(\xi, \eta; x, y)$ сопряжённой пары $u(\xi, \eta)$, $v(\xi, \eta; x, y)$ найдены величины

$$\Phi(W;M) \equiv \hat{u}(W;M) - v(W;M)\cdot u(W)$$
$$\Psi(T;M) = \hat{u}(T;M) + v(T;M)\cdot u(T), \qquad (8)$$

сохраняющие свои значения вдоль граничных характеристик SM и RM области Ω_{xy} соответственно:

$$\forall W(\xi, y) \in SM \begin{pmatrix} \hat{u}(W;M) - v(W;M)\cdot u(W) = \\ = \hat{u}(S;M) - v(S;M)\cdot u(S) \end{pmatrix}, \qquad (9)$$

$$\forall T(x, \eta) \in RM \begin{pmatrix} \hat{u}(T;M) + v(T;M)\cdot u(T) = \\ = \hat{u}(R;M) + v(R;M)\cdot u(R) \end{pmatrix}. \qquad (10)$$

Здесь $W(\xi, y)$ и $T(x, \eta)$ – текущие точки отрезков граничных характеристик SM и RM области Ω_{xy}, $S(0, y)$ и $R(x, 0)$ – точки граничных характеристик области D. Эти величины напоминают римановы инварианты $u \pm \dfrac{p}{\rho_0 \cdot c_0}$ для уравнений акустики [5], поэтому функции (8) мы будем называть инвариантами.

Свойство постоянства значений функций $\Phi(W; M)$ и $\Psi(T; M)$ позволяет найти структуру решения системы уравнений (6) в любой точке $M(x, y)$ области D: если в формулах (8)–(10) $W(\xi, y) = T(x, \eta) = M(x, y)$, то

$$\left(\hat{u}(M;M); u(M)\right) =$$
$$= \left(\frac{\Psi(R;M)}{2} + \frac{\Phi(S;M)}{2}; \frac{\Psi(R;M)}{2} - \frac{\Phi(S;M)}{2}\right), \qquad (11)$$

где $\Phi(S; M)$, $\Psi(R; M)$– граничные значения инвариантов (8) в точках $S(0, y)$ и $R(x, 0)$ граничных характеристик области D.

Далее рассмотрена математическая модель сорбции газа, которая описывается задачей Гурса для уравнения (1) с данными на характеристиках

$$u(0, y) = u_0,\ u(x, 0) = u_0 \cdot e^{-b\cdot x},\ 0 \le x \le d,\ y \ge 0, \qquad (12)$$

где $u(0, y) = u_0$ – концентрация газа на входе;

$u(x,\ 0) = u_0 \cdot e^{-b \cdot x}$ – начальное распределение концентрации газа в слое;

$x,\ d$ – длина трубки;

$b(x, y) = b$ – постоянный в области D коэффициент уравнения (1).

Если теперь в формуле (11) $x = d$, т.е. $M = M(d, y)$, $u(M)$ и $\hat{u}\,(M;\ M)$ – концентрация газа и потенциал на выходе в момент времени y, то указанные инварианты, сохраняющие свои значения вдоль граничных характеристик области Ω_{xy}, имеют вид

$$\begin{aligned} &\forall M(d,y) \in SM(\,\hat{u}\,(M;M) - u(M) = \\ &= \hat{u}\,(S;M) - v(S;M)\cdot u(S) \equiv \\ &\equiv \hat{u}\,(O;M) - u_0 \cdot v\big(0,0;d,y\big) - \\ &-2\cdot u_0 \cdot \int_0^y a(0,t)\cdot v\big(0,t;d,y\big)\cdot dt), \end{aligned} \tag{13}$$

$$\begin{gathered} \forall T(x,\eta) \in RM(\,\hat{u}\,(T;M) + \\ +v(T;M)\cdot u(T) = \\ \hat{u}\,(R;M) + v(R;M)\cdot u(R) \\ \equiv\ \hat{u}\ (O;M) + u_0 \cdot v\big(0,0;d,y\big). \end{gathered} \tag{14}$$

С помощью величин (13), (14) по формуле (11) находим концентрацию газа и потенциал на выходе, т.е. решение системы уравнений (6) при $x = d$:

$$\begin{gathered} u(d,y) = u_0 \cdot \\ \cdot\left(v\big(0,0;d,y\big) + \int_0^y a(0,t)\cdot v\big(0,t;d,y\big)\cdot dt\right) \end{gathered} \tag{15}$$

$$\begin{gathered} \hat{u}\ (M;M) = \ \hat{u}\,(O;M) - \\ -u_0 \cdot \int_0^y a(0,t)\cdot v\big(0,t;x,y\big)\cdot dt. \end{gathered} \tag{16}$$

Таким образом, для класса гиперболических уравнений (1) (включающего линейные уравнения динамики сорбции газа) с помощью понятия потенциала сопряжённой пары, введённого автором, найдены функции (8), сохраняющие свои значения вдоль граничных характеристик области Ω_{xy}. Эти функции позволяют найти структуру решений системы уравнений (6), к которой сводится задача о сорбции, выразить основные величины задачи через их граничные характеристические значения, коэффициенты уравнения и функцию Римана.

Литература

1. Тихонов А.Н., Самарский А.А. Уравнения математической физики. М.: Наука, 1972. 736 с.
2. Нахушев А.М. Уравнения математической биологии. М.: Высшая школа, 1995. 304 с.
3. Кошляков Н.С., Глинер Э.Б., Смирнов М.М. Дифференциальные уравнения математической физики. М.: ГИФ-МЛ, 1962. 767 с.
4. Корн Г., Корн Т. Справочник по математике. М.: Наука, 1973. 720 с.
5. Годунов С.К. Уравнения математической физики. М.: ГИФ-МЛ, 1979. 392 с.
6. Фёдоров Ю.И. О свойствах линейных дифференциальных операторов, связанных с полными дифференциалами // Тезисы докладов на 3-й международной конференции, посвящённой 85-летию чл.-корр. РАН, проф. Л.Д. Кудрявцева. М.: МФТИ, 2008. С. 341–344.