УДК 519.6
М.Петрик, канд. техн. наук; М.Баб'юк
Тернопільський державний технічний університет імені Івана Пулюя

ОСЕСИМЕТРИЧНА МАТЕМАТИЧНА МОДЕЛЬ АДСОРБЦІЙНОГО МАСОПЕРЕНОСУ ЗІ СПЕКТРАЛЬНИМ ПАРАМЕТРОМ ДЛЯ НАПІВОБМЕЖЕНОГО ДВОСКЛАДОВОГО КУСКОВО-ОДНОРІДНОГО (ПО ВІСІ r) СЕРЕДОВИЩА

Методами гібридних інтеґральних перетворень Фур'є-Бесселя зі спектральним параметром для двоскладового напівобмеженого по радіяльній координаті r та інтеґральних перетворень Фур'є напівобмеженого по осьовій координаті сорбційного середовища отримані головні розв'язки (фундаментальні функції Коші і Ґріна) та побудований аналітичний розв'язок математичної моделі процесу адсорбційного масопереносу з урахуванням нестаціонарності режимів масообміну на масообмінних поверхнях.

Умовні позначення

C - концентрація адсорбованої речовини (адсорбтиву) в рідинній фазі, g/kg;
a - концентрація адсорбованої речовини в твердій фазі (адсорбенті), g/kg;
D - ефективний коефіцієнт дифузії, m^2/s;
γ - константа адсорбції;
β - загальний коефіцієнт масопереносу;
z, r - осьова та радіальна координати, m;
t - часова координата, s;
k - порядковий номер пласту одсорбційного середовища, k=1,2.

Кінетика масообмінних процесів адсорбційного переносу, що складають основу екотехнологій високого ступеня очищення рідинних сумішей та розчинів, в значній мірі визначається умовами неоднорідності та багатоструктурності робочих середовищ переносу. Як підтверджують результати експериментів [2, 3], в залежності від умов експлуатації характеристики робочого середовища (адсорбенту) змінюються вздовж напрямів та ґрадієнтів переносу. З метою інтенсифікації процесу очищення часто для підсилення ґрадієнту певного напряму переносу використовуються багатопластові адсорбційні середовища з різними характеристиками. При цьому ще однією характерною особливістю є нестаціонарність параметрів переносу (концентрацій фаз) та їх ґрадієнтів на масообмінних поверхнях (крайових умовах і умовах контакту середовищ). Врахування таких фізичних чинників призводить до використання у математичних моделях таких процесів переносу спектрального параметру (в крайових умовах та умовах контакту наявні диференціальні оператори $\frac{\partial}{\partial t}, \frac{\partial^2}{\partial t^2}, \frac{\partial^2}{\partial t \partial r}$).

Розглянемо процес дифузійно-адсорбційного масопереносу, який протікає у напівобмеженому циліндричному двоскладовому (по радіяльній координаті r) каналі (рис.1). Математична модель такого процесу може бути описана у вигляді крайової задачі змішаного типу: побудувати обмежений в області

$D = \{(t,r,z): t>0, \quad \mathrm{r} \in (0,R_1) \cup (R_1,\infty), \ 0 < \mathrm{R}_1 < \infty; \ \ \mathrm{z} \in (l_0,\infty), \mathrm{l}_0 \geq 0\}$ розв'язок системи рівнянь:

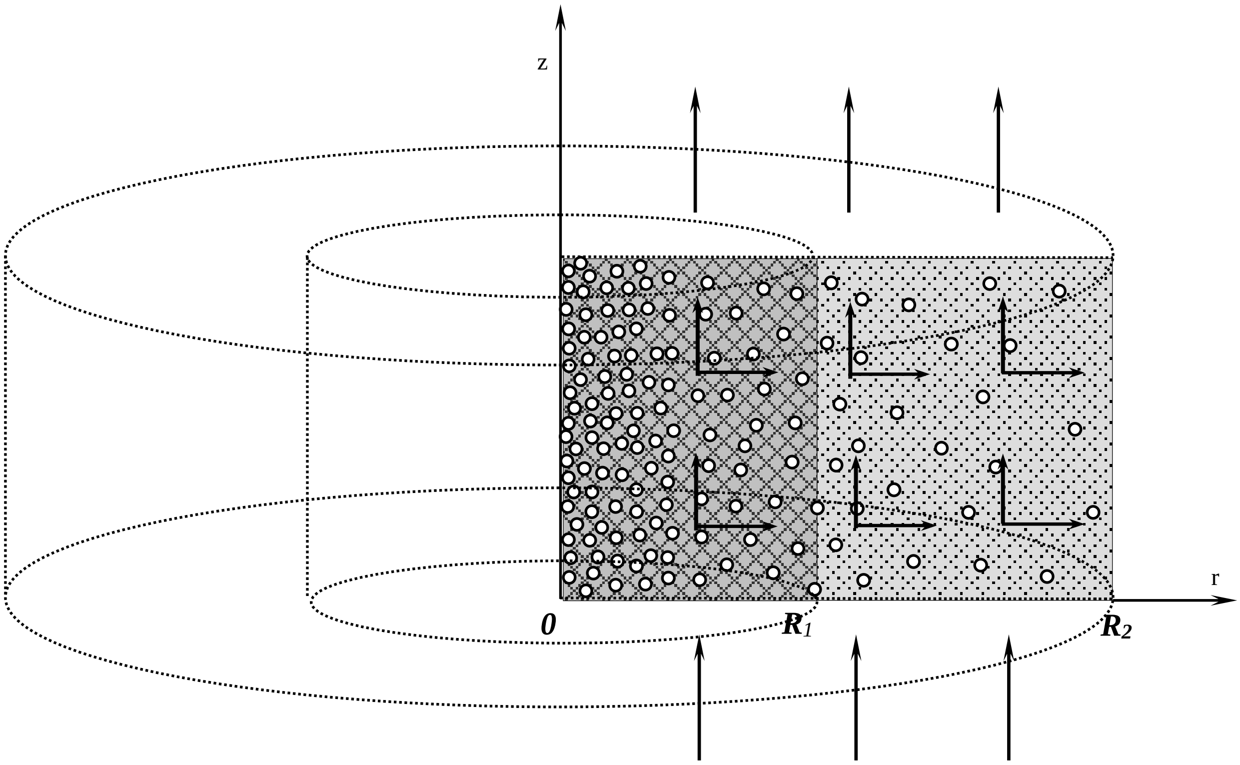

Рис.1. Схематизація двоскладової циліндричної робочої області адсорбційного масопереносу

$$\frac{\partial C_k}{\partial t} + \frac{\partial a_k}{\partial t} + \eta_k^2 C_k = D_{r_k} \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial C}{\partial r}\right) + D_{z_0}\frac{\partial^2 C}{\partial z^2}; \qquad (1)$$

$$\frac{\partial a_k}{\partial t} = \beta_k \left(C_k - \gamma_k a_k\right); \qquad (2)$$

за початковими умовами:

$$C_k(t,r,z)\big|_{t=0} = C_{0_k}(r,z); \quad a_k(t,r,z)\Big|_{t=0} = a_{0_k}(r,z); \qquad (3)$$

умови спряження по геометричній координаті r , що враховують нестаціонарний режим масообміну на радіальній поверхні $r = R_1$:

$$\left\{\left[\left(\alpha_{j1}^1 + \delta_{j1}^1\frac{\partial}{\partial t}\right)\frac{\partial}{\partial r} + \left(\beta_{j1}^1 + \gamma_{j1}^1\frac{\partial}{\partial t}\right)\right]C_1(t,r,z) - \left[\left(\alpha_{j2}^1 + \delta_{j2}^1\frac{\partial}{\partial t}\right)\frac{\partial}{\partial r} + (\beta_{j2}^1 + \gamma_{j2}^1\frac{\partial}{\partial t})\right]C_2(t,r,z)\right\}\Bigg|_{r=R_1} = 0; \ j = \overline{1,2}\ . \qquad (4)$$

і крайовими умовами по геометричній координаті z:

$$\left[-h_1\frac{\partial}{\partial z} + h_2\right]C_k(t,r,z)\Big|_{z=l_0} = \omega_{0_k}(t,r), \qquad \frac{\partial C_k}{\partial z}\Big|_{z=\infty} = 0, k = 1,2. \qquad (5)$$

$(h_1 \geq 0, \ h_1 \geq 0, \quad \mathrm{h}_1 + \mathrm{h}_2 \neq 0\ ).$

Основні фізичні припущення та детальний опис фізичної постановки задачі подані в роботах [2].

До крайової задачі (1)-(5) застосуємо гібридне інтеґральне перетворення типу Фур'є - Бесселя із спектральним параметром, визначене для необмеженого двоскладового циліндричного середовища в роботі [1]. Оскільки в даному випадку $\nu_k = \alpha_k = 0$ для $k=1,2$, то згідно [1] маємо такі компоненти спектральної функції $V_0(r,\lambda)$:

$$V_{0,1}(r,\lambda) = \frac{2}{\pi}\frac{C_{21,1}}{R_1} J_0(b_1 r), \quad b_{jk} = D_{r_j}^{-1/2}\left(\lambda^2 + k_j^2\right)^{1/2}, \quad k_j^2 \ge 0;$$

$$V_{0,2}(r,\lambda) = \omega_{0,2}(\lambda) J_0(b_2 r) - \omega_{0,1}(\lambda) N_0(b_2 r).$$

Тут прийняті позначення:

$$\tilde{\alpha}_{jk}^m = \alpha_{jk}^m - \delta_{jk}^m\left(\lambda^2 + \eta^2\right), \ \tilde{\beta}_{jk}^m = \beta_{jk}^m - \gamma_{jk}^m\left(\lambda^2 + \eta^2\right),$$

$$\omega_{0,j}(\lambda) = U_{0,11}^{11}(b_1 R_1) U_{0,22}^{1j}(b_2 R_1) - U_{0,21}^{11}(b_1 R_1) U_{0,12}^{1j}(b_2 R_1), \ j = 1,2; \qquad (7)$$

$$U_{0,jk}^{m1}(b_s R_m) = \tilde{\beta}_{jk}^m J_0(b_s R_m) - \tilde{\alpha}_{jk}^m b_s J_1(b_s R_m),$$

$$U_{0,jk}^{m2}(b_s R_m) = \tilde{\beta}_{jk}^m N_0(b_s R_m) - \tilde{\alpha}_{jk}^m b_s N_1(b_s R_m),$$

Ми вважаємо, що для коефіцієнтів виконуються такі умови :

$$C_{11,k} \cdot C_{21,k} > 0, \ \ C_{j1,1} = \alpha_{2j}^1 \beta_{1j}^1 - \alpha_{1j}^1 \beta_{2j}^1, \ \ C_{j2,k} = \delta_{2j}^1 \gamma_{1j}^1 - \delta_{1j}^1 \gamma_{2j}^1 = 0;$$

$$\alpha_{12}^1 \gamma_{22}^1 - \alpha_{22}^1 \gamma_{12}^1 = \beta_{12}^1 \delta_{22}^1 - \beta_{22}^1 \delta_{12}^1 \qquad (8)$$

На умови та початкові дані для будь-якого фіксованого $z \in (l_0, \infty)$ має місце рівність:

$$\left[\delta_{j1}^1 \frac{\partial C_{01}}{\partial r} + \gamma_{j1}^1 C_{01}(r,z)\right]\Bigg|_{r=R_1} = \left[\delta_{j2}^1 \frac{\partial C_{02}}{\partial r} + \gamma_{j2}^1 C_{02}(r,z)\right]\Bigg|_{r=R_1}, \ \ j=1,2 \qquad (9)$$

Алґоритм побудови математичного розв'язку. Із рівняння (2) знаходимо, що

$$a_k = (t,r,z) = \beta_k \int_0^t e^{-\beta_k \gamma_k (t-\tau)} C_k(t,r,z)\, d\tau + a_{0k}(r,z). \qquad (10)$$

Тоді крайову задачу (1)-(5) з урахуванням вказаних умов достатньо розв'язати для вектор функції $C(t,r,z) = \{C_1(t,r,z); C_2(t,r,z)\}$.

Із врахуванням рівності (2) диференціальне рівняння (1) запишемо в стандартній для інтеґральних перетворень формі:

$$\frac{\partial C_k}{\partial t} + \bar{\gamma}_k^2 C_k - D_{r_k}\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) C_k - D_{z_0}\frac{\partial^2 C_k}{\partial z^2} = f_k(t,r,z),$$

де $\bar{\gamma}_k^2 = \beta_k + \eta_k^2, \quad f_k(t,r,z) = \beta_k \gamma_k a_k(t,r,z).$

Покладемо

$$\sigma_1 = \frac{C_{11,1}}{C_{21,1} D_{r_1}^{1/2}}, \quad \sigma_2 = \frac{1}{D_{r_2}^{1/2}}, \quad \Omega_0(\lambda) = \lambda\left(\left[\omega_{0,1}(\lambda)\right]^2 + \left[\omega_{0,2}(\lambda)\right]^2\right)^{-1}.$$

Наявність спектральної функції

$$V_0(r,\lambda) = \theta(r)\theta(R_1 - r)V_{0,1}(r,\lambda) + \theta(r - R_1)V_{0,2}(r,\lambda),$$

вагової функції

$$\sigma(r) = \left[\theta(r)\theta(R_1 - r)\sigma_1 + \theta(r - R_1)\sigma_2\right]r$$

і спектральної щільності $\Omega_0(\lambda)$ дає можливість визначити пряме $H_{0,1}$ і обернене $H_{0,1}^{-1}$ інтеґральне перетворення типу Фур'є-Бесселя на полярній вісі з однією точкою спряження:

$$H_{0,1}\left[g(r)\right] = \int_0^\infty g(r)V_0(r,\lambda)\sigma(r)dr = \int_0^{R_1} g_1(r)V_{0,1}(r,\lambda)\sigma_1(r)dr + \\ + \int_{R_1}^\infty g_2(r)V_{0,2}(r,\lambda)\sigma_2(r)dr \equiv \tilde{g}(\lambda), \qquad (12)$$

$$H_{0,1}^{-1}\left[\tilde{g}(\lambda)\right] = \int_0^\infty \tilde{g}(\lambda)\cdot V_0(r,\lambda)\cdot\Omega_0(\lambda)d\lambda \equiv g(r); \qquad (13)$$

При цьому справджується для вектор-функцій

$$g(r) = \theta(r)\theta(R_1 - r)g_1(r) + \theta(r - R_1)g_2(r)$$

із області визначення диференціального оператора

$$\mathrm{M}_{0,1} = \left[D_{r_1}\theta(r)\theta(R_1 - r) + D_{r_2}\theta(r - R_1)\right]B_0, \quad B_0 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r},$$

основна тотожність інтеґрального перетворення диференціального оператора $\mathrm{M}_{0,1}$:

$$H_{0,1}\left[\mathrm{M}_{0,1}\left[g(r)\right]\right] = -\lambda^2\tilde{g}(\lambda) - k_1^2\int_0^{R_1} g_1(r)V_{0,1}(\lambda,r)\sigma_1 r dr - \\ - k_2^2\int_{R_1}^\infty g_2(r)V_{0,2}(\lambda,r)\sigma_2 r dr \qquad (14)$$

Припустимо, що $\left(\bar{\gamma}_1^2 - \bar{\gamma}_2^2\right) \geq 0$. Покладемо всюди $k_1^2 = 0$, $k_2^2 = \bar{\gamma}_1^2 - \bar{\gamma}_2^2 \geq 0$ $\left(\mathrm{b}_1 = D_{r_1}^{-1/2}\lambda, \quad \mathrm{b}_2 = D_{r_2}^{-1/2}\left(\lambda^2 + \bar{\gamma}_1^2 - \bar{\gamma}_2^2\right)^{-1/2}\right)$. Застосуємо інтеґральний оператор $H_{0,1}$ до крайової задачі стосовно вектор - функції $C(t,r,z)$.

Внаслідок тотожності (14) маємо таку крайову задачу: побудувати обмежений в області
$D_1 = \{(t,z):\ t>0,\ \ z\in(l_0,\infty)\}$ розв'язок диференціального рівняння дифузії

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + \bar{\gamma}_1^2 + \lambda^2 - D_{z_0}\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\tilde{C}(t,\lambda,z) = \tilde{f}(t,\lambda,z) \tag{15}$$

за початковою умовою

$$\tilde{C}(t,\lambda,z)\big|_{t=0} = \tilde{C}_0(\lambda,z), \tag{16}$$

та крайовими умовами

$$\left(-h_1\frac{\partial}{\partial z} + h_2\right)\tilde{C}(t,\lambda,z)\big|_{z=l_0} = \tilde{\omega}_0(t,\lambda), \quad \frac{\partial\tilde{C}}{\partial z}\big|_{z=\infty} = 0. \tag{17}$$

Тут прийняті позначення:

$$\tilde{C}(t,\lambda,z) = \tilde{C}_1(t,\lambda,z) + \tilde{C}_2(t,\lambda,z) \equiv \int_0^{R_1} C_1(t,r,z)V_{0,1}(r,\lambda)\sigma_1(r)dr +$$

$$+\int_{R_1}^{\infty} C_2(t,r,z)(r)V_{0,2}(r,\lambda)\sigma_2 rdr,$$

$$\tilde{f}(t,\lambda,z) = \tilde{f}_1(t,\lambda,z) + \tilde{f}_2(t,\lambda,z) \equiv \int_0^{R_1} f_1(t,r,z)V_{0,1}(r,\lambda)\sigma_1 rdr +$$

$$+\int_{R_1}^{\infty} f_2(t,r,z)V_{0,2}(r,\lambda)\sigma_2 rdr,$$

$$\tilde{\omega}_0(t,\lambda) = \tilde{\omega}_{01}(t,\lambda) + \tilde{\omega}_{02}(t,\lambda) \equiv \int_0^{R_1} \omega_{0_1}(t,r)V_{0,1}(r,\lambda)\sigma_1 rdr +$$

$$+\int_{R_1}^{\infty} \omega_{0_2}(t,r)V_{0,2}(r,\lambda)\sigma_2 rdr,$$

До крайової задачі (15)-(17) застосуємо інтеґральне перетворення Фур'є на декартовій піввісі $z \ge l_0$ стосовно z[1]:

$$F_+\left[f(z)\right] = \int_{l_0}^{\infty} f(z)V_z(z,\mu)dz \equiv \tilde{f}(\mu) \tag{18}$$

$$F_+^{-1}\left[\tilde{f}(\mu)\right] = \frac{2}{\pi}\int_{l_0}^{\infty} \tilde{f}(\mu)V_z(z,\mu)\Omega(\mu)d\mu \equiv f(z) \tag{19}$$

$$F_+\left[\frac{d^2 f}{dz^2}\right] = -\mu^2\tilde{f}(\mu) + \mu\left(-h_1\frac{df}{dz} + h_2 f\right)\Big|_{z=l_0} \tag{20}$$

У рівностях (18), (19) бере участь спектральна функція $V_z(z,\mu) = h_1\mu\cos\mu(z-l_0) + h_2\sin\mu(z-l_0)$ і спектральна густина $\Omega(\mu) = \left(h_2^2 + h_1^2 + \mu^2\right)^{-1}$.

Інтеґральний оператор F_+ ставить задачі (15)-(17) у відповідність задачу Коші:

$$\left(\frac{d}{dt}+\bar{\gamma}_1^2+\lambda^2+D_{z_0}\mu^2\right)\tilde{\tilde{C}}(t,\lambda,\mu)=\tilde{\tilde{f}}(t,\lambda,\mu)+D_{z_0}\mu\tilde{\omega}_0(t,\lambda) \tag{21}$$

$$\tilde{\tilde{C}}(t,\lambda,\mu)\Big|_{t=0}=\tilde{\tilde{C}}_0(t,\mu). \tag{22}$$

Безпосередньо перевіряється, що розв'язком задачі Коші (21)-(22) є функція

$$\begin{gathered}\tilde{\tilde{C}}(t,\lambda,\mu)=e^{-qt}\tilde{\tilde{C}}_0(\lambda,\mu)+\int_0^t e^{-q(t-\tau)}\left[\tilde{\tilde{f}}(t,\lambda,\mu)+D_{z_0}\mu\tilde{\omega}_0(\tau,\lambda)\right]d\tau,\\ q\equiv q\left(\lambda^2,\mu^2\right)=\bar{\gamma}_1^2+\lambda^2+D_{z_0}\mu^2.\end{gathered} \tag{23}$$

Якщо припустити (в першому наближенні), що $\tilde{\tilde{f}}$ не залежить від t, то згідно формули (23)

$$\tilde{\tilde{C}}(t,\lambda,\mu)=e^{-qt}\tilde{\tilde{C}}_0(\lambda,\mu)+\frac{1}{q}\left(1-e^{-qt}\right)\tilde{\tilde{f}}_0(\lambda,\mu)+D_{z_0}\mu\int_0^t e^{-q(t-\tau)}\tilde{\omega}_0(\tau,\lambda)d\tau. \tag{24}$$

Визначимо головні розв'язки задачі (15)-(17):

а) функцію Ґріна

$$\tilde{W}(t,\lambda,z)=\frac{2}{\pi}\int_0^\infty e^{-qt}\cdot V_z(z,\mu)\Omega(\mu)\mu d\mu, \tag{25}$$

породжену крайовою умовою на поверхні $z=l_0$,

б) функцію впливу початкових умов (фундаментальну функцію Коші)

$$\tilde{H}(t,\lambda,z,\xi)=\frac{2}{\pi}\int_0^\infty e^{-qt}\cdot V_z(z,\mu)V_z(\xi,\mu)\Omega(\mu)d\mu. \tag{26}$$

Застосувавши до функції $\tilde{\tilde{C}}(t,\lambda,\mu)$, визначеної формулою (23) інтеґральний оператор F_+^{-1}, що діє за правилом (19), отримаємо єдиний розв'язок задачі (15)-(17):

$$\begin{aligned}\tilde{\tilde{C}}(t,\lambda,\mu)&=\int_{l_0}^\infty \tilde{H}(t,\lambda,z,\xi)\cdot\tilde{C}_0(\lambda,\xi)d\xi+\\ &+\int_0^t\int_{l_0}^\infty \tilde{H}(t-\tau,\lambda,z,\xi)\cdot\tilde{f}(\tau,\lambda,\xi)d\xi d\tau+\\ &+D_{z_0}\int_0^t\tilde{W}(t-\tau,\lambda,z)\tilde{\omega}_0(\tau,\lambda)d\tau\end{aligned} \tag{27}$$

Якщо $\tilde{f}=\tilde{f}_0(\lambda,\xi)$, то другий доданок набуває вигляду:

$$\int_{l_0}^\infty \tilde{H}_1(t,\lambda,z,\xi)=f_0(\lambda,\xi)d\xi,$$

$$\tilde{H}_1(t,\lambda,z,\xi)=\frac{2}{\pi}\int_0^\infty\frac{1}{q}\left(1-e^{-qt}\right)\cdot V_z(z,\mu)V_z(\xi,\mu)\Omega(\mu)d\mu.$$

Застосуємо до функції $\tilde{C}(t,\lambda,z)$, визначеною формулою (27) обернене інтегральне перетворення $H_{0,1}^{-1}$ за правилом (13). В результаті елементарних перетворень одержуємо єдиний розв'язок задачі (11), (3)-(5):

$$C_k(t,r,z)=\int_0^\infty C(t,\lambda,z)\cdot V_{0,k}(r,\lambda)\Omega_0(\lambda)d\lambda=$$

$$=\int_{l_0}^\infty\left[\int_0^{R_1}H_{k1}(t,r,\rho,z,\xi)\cdot C_{01}(\rho,\xi)\sigma_1\rho d\rho+\right.$$

$$\left.+\int_{R_1}^\infty H_{k2}(t,r,\rho,z,\xi)\cdot C_{02}(\rho,\xi)\sigma_2\rho d\rho\right]d\xi+$$

$$+\int_0^t\int_{l_0}^\infty\left[\int_0^{R_1}H_{k1}(t-\tau,r,\rho,z,\xi)\cdot f_1(\tau,\rho,\xi)\sigma_1\rho d\rho+\right.$$

$$\left.+\int_{R_1}^\infty H_{k2}(t-\tau,r,\rho,z,\xi)\cdot f_2(\tau,\rho,\xi)\sigma_2\rho d\rho\right]d\xi d\tau+$$

$$+\int_0^t\left[\int_0^{R_1}W_{k1}(t-\tau,r,\rho,z)\cdot\omega_{01}(\tau,\rho)\sigma_1\rho d\rho+\right.$$

$$\left.+\int_0^{R_1}W_{k2}(t-\tau,r,\rho,z)\cdot\omega_{02}(\tau,\rho)\sigma_2\rho d\rho\right]d\tau,\quad k=1,2 \tag{28}$$

У рівностях (28) беруть участь функції Ґріна

$$W_{kj}(t,r,\rho,z)=D_{z_0}\int_0^\infty\tilde{W}(t,\lambda,z)\cdot V_{0,k}(z,\lambda)V_{0,j}(\rho,\lambda)\Omega_0(\lambda)d\lambda;\ k,j=1,2, \tag{29}$$

породжені крайовою умовою на поверхні $z=l_0$.

Отриманий нами аналітичний розв'язок (28), (10) математичної моделі адсорбційного масопереносу з урахуванням поданих вище припущень є зручним як для символьного, так і для чисельного аналізу процесу.

The mathematics model of process of adsorption masstransfer are develope by method of gybrid integral transformations of Bessel- Fourier with spectral parameter for two-composed nonregular cylinder media and integral transformations of Fourier for halflimited media. Modeling of process was put into practice and adequacy of model according to results of next experiments are defined inhomogeneous physical peculiarities of surroundings, work regions .

Література

1. Ленюк М.П., Петрик М.Р. Інтегральні перетворення Фур'є, Бесселя із спектральним параметром в задачах математичного моделювання масопереносу в неоднорідних середовищах. — К.: Наукова думка, 2000.— 372 с.
2. Петрик М.Р. Математичне моделювання нелінійних динамічних задач адсорбції та дифузії для нерухомого шару адсорбенту (ізотермічний випадок) // Інтегральні перетворення та їх застосув. до крайових задач: Зб. наук. пр. — К.: Ін-т. матем. НАНУ, 1993. Вип. 5. — С. 201-215.
3. Федоткин И. М.. Математическое моделирование технологических процессов—К.: Вища школа, 1988. — 415 с.

Одержано 31.05.2001 р.