# Øving 9

**a)** I et intervall $[a, b]$ finnes en mengde $\int_a^b \varphi c^* dx^*$ oppløst A, og endringen per tidsenhet av dette, pluss det som strømmer ut ved $b$, minus det som strømmer inn ved $a$, er gitt ved hvor mye som adsorberes:

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_a^b \varphi c^* dx^* + \varphi u(c^*(b,t^*) - c^*(a,t^*)) = -\int_a^b (k_a(N-n^*)c^* + k_d n^*)dx^*$$

Tilsvarende gjelder for adsorbert materiale, med tillegg av et ledd for reaksjonen $A \to B$:

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_a^b (1-\varphi)n^* dx^* - (1-\varphi)v(n^*(b,t^*) - n^*(a,t^*)) = \int_a^b (k_a(N-n^*)c^* + k_d n^* - k_r n^*)dx^*$$

Disse ligningene kan overføres til differensiell form på vanlig vis, ved å erstatte $c^*(b,t^*) - c^*(a,t^*)$ med $\int_a^b c^*(x^*,t^*)_{x^*} dx^*$ (ditto for $n^*$), og vi får dermed de ønskede ligningene. Integralformuleringen vi her har funnet må anvendes dersom det forekommer diskontinuiteter i $c^*$ eller $n^*$.

**b)** Fysisk virker det rimelig at man kan spesifisere vilkårlige initialverdier for $c^*$ og $n^*$. Dessuten vil $c^*$ være gitt der fluidet injiseres, altså i $x^* = 0$, og $n^*$ være gitt der det faste stoffet helles på (i $x^* = l^*$).

**c)** Ettersom enheten for $k_a(N-n^*)c^*$, $k_d n^*$ og $k_r n^*$ må være $\mathrm{mol\,m^{-3}s^{-1}}$, får vi følgende tabell for enheten til parametrene i problemet:

| $\varphi$ | $u$ | $v$ | $k_a$ | $k_d$ | $k_r$ | $N$ |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | $\mathrm{m\,s^{-1}}$ | $\mathrm{m\,s^{-1}}$ | $\mathrm{m^3mol^{-1}s^{-1}}$ | $\mathrm{s^{-1}}$ | $\mathrm{s^{-1}}$ | $\mathrm{mol\,m^{-3}}$ |

De gitte parametrene inneholder grunnenhetene mol, m og s. Siden $[k_r^{-1}] = \mathrm{s}$, $[u/k_r] = \mathrm{m}$ og $[N(u/k_r)^3] = \mathrm{mol}$, skal det finnes $7 - 3 = 4$ uavhengige dimensjonsløse kombinasjoner.

**d)** Siden $n^*$ alltid er mindre enn $N$, men må ventes å komme nær $N$ om vi tilfører tilstrekkelig store mengder A, virker $N$ som en rimelig skala for $n^*$. For å finne en tilsvarende rimelig skala for $c^*$, merker vi oss at likevekt mellom adsorpsjon og desorpsjon skjer når $k_a(N-n^*)c^* - k_d n^* = 0$, eller

$$n^*/N = \frac{k_a c^*/k_d}{1 + k_a c^*/k_d}$$

Om vi derfor velger $k_d/k_a$ som skala for $c^*$, og innfører dimensjonløse konsentrasjoner $c$, $n$ ved

$$n^* = Nn \text{ og } c^* = \frac{k_d}{k_a}c$$

så vil altså, ved likevekt, $n = c/(1+c)$, slik at $n \approx c \ll 1$ for små konsentrasjoner, mens $n \approx 1$ når $c \gg 1$. I mangel av noen egentlig øvre grense for $c^*$ virker derfor den valgte skalering i det minste hensiktsmessig: Den viser at $c \ll 1$ tilsvarer "liten konsentrasjon", mens $c \gg 1$ tilsvarer en "stor konsentrasjon".

**e)** En tidsskala for omdanning av A til B kan vi finne ved å ignorere såvel transport som adsorpsjon og desorpsjon, dvs. ignorere leddene med $n^*_{x^*}$, $k_a$ og $k_d$ i (2): Vi står igjen med $(1-\varphi)n^*_t = -k_r n^*$, så denne reaksjonen har tidskonstant $(1-\varphi)/k_r$, slik at skaleringen $t^* = ((1-\varphi)/k_r)t$ virker god dersom reaksjonen $A \to B$ spiller en viktig rolle. Under de gitte betingelser er $u$ den største hastighet i systemet, og derfor en god skala for hastighet. Multipliser skalaen for tid med $u$ for å få en brukbar lengdeskala.

**f)** Divider (3) og (4) med $\lambda$ og la $\lambda \to \infty$. Da ser vi at grensen blir den samme i begge tilfeller, nemlig $(1-n)c - n = 0$, eller

$$n = \frac{c}{1+c}$$

Summen av de to ligningene gir $(c + \alpha n)_t + (c - \sigma n)_x + \alpha n = 0$, og om vi setter inn for $n$ uttrykt ved $c$ fra ligningen ovenfor og bruker kjerneregelen på de deriverte får vi umiddelbart (5).

**g)** I det stasjonære tilfellet står vi igjen med

$$\left(1-\frac{\sigma}{(1+c)^2}\right)\frac{dc}{dx}+\frac{\alpha c}{1+c}=0$$

som er en separabel ligning. Vi får

$$\frac{(1+c)^2-\sigma}{c(1+c)}dc=-\alpha dx$$

som integreres til

$$c+\ln c-\sigma\ln\frac{c}{1+c}=-\alpha x+\text{konstant}$$

Vi kan ikke finne noe analytisk uttrykk for den omvendte funksjonen. Men den deriverte av venstresiden med hensyn på $c$ er jo nettopp $((1+c)^2-\sigma)/(c(1+c))>0$ om $\sigma<1$, så venstresiden er en en-til-en funksjon av $c$, og den omvendte funksjonen eksisterer derfor. Vi kan uten videre se at $x\to\pm\infty$ når $c\to 0$ og $c\to\infty$, slik at den omvendte funksjonen er definert for alle $x$. Om $\sigma>1$ får venstresiden et ekstrempunkt for $c=\sqrt{\sigma}-1$, og den omvendte funksjonen finnes ikke.

**h)** Det er et singulært perturbasjonsproblem. For det første har problemet en helt annen karakter når $\lambda=\infty$ (det er den algebraiske ligningen $n=c/(1+c)$ sammen med differensialligningen (5)) enn når $\lambda<\infty$ (to differensiallginginger, (4) og (5)). En annen indikasjon er at det ikke går å tilpasse randbetingelsene: Ved å justere den ene tilgjengelige konstanten i løsningen fra **g** kan vi nemlig tilpasse løsningen til en randbetingelse, for eksempel oppgitt $c$ ved $x=0$, og løsningen er da entydig gitt. Vi har dermed ingen mulighet til å tilpasse løsningen til den andre randbetingelsen (oppgitt $n$ ved $x=L$), siden $n=c/(1+c)$ er gitt ut fra $c$. Vi har riktignok ikke vist matematisk at vi skal kunne tilpasse begge randbetingelser når $\lambda<\infty$, men det virker rimelig ut fra betraktningene i **c**. Så de randbetingelsene som passer for problemet når $\lambda<\infty$ passer ikke når $\lambda=\infty$, noe som er typisk for singulære problemer. En mulig forklaring er at mens det faste stoffet, i det det helles i på toppen, riktignok har en gitt konsentrasjon av A, men denne konsentrasjonen endres øyeblikkelig når stoffet kommer i kontakt med fluidet. (Se for øvrig **i**).

**i)** At reaksjonen $A\to B$ spiller liten rolle betyr at leddet $\alpha n$ er lite i forhold til de andre leddene i (4). Vi venter at adsorpsjon og desorpsjon dominerer, slik at høyresiden i (3) ikke er neglisjerbar i forhold til $c_t$ og $c_x$. I så fall må enten $c_t$ eller $c_x$ (eller begge) være av samme størrelsesorden som høyresiden i (3), hvilket vil si at $c$ endrer seg vesentlig over en tids- og/eller lengdeskala av størrelsesorden $\lambda^{-1}$. Etter at en stasjonær tilstand er oppnåd er selvsagt $c_t$ og $n_t$ neglisjerbare, så tidsskalaaen er uvesentlig, men i startfasen kan vi regne med at både $c_t$ og $c_x$ er like store so $\lambda$. Et tilsvarende argument kan føres for (4), og vi kan tenke oss å forsøke å bruke $\lambda^{-1}$ som skala for både $t$ og $x$, det vil innføre reskalert variable $\tau$ og $\xi$ ved

$$\tau=\lambda t,\quad \xi=\lambda x$$

De reskalerte ligningene blir

$$\begin{aligned}c_\tau+c_\xi &= -[(1-n)c-n]\\ \alpha n_\tau-\sigma n_\xi &= [(1-n)c-n]-\alpha\lambda^{-1}n\end{aligned}$$

I grensen når $\lambda\to\infty$ blir det bare å stryke det siste leddet i annen ligning.