TMA4195 Matematisk modellering 2003

Øving 9

Veiledning: 2003–11–10

1: (Eksamen august 1990, oppgave 2) *Oppgaveteksten er lang og kan virke overveldende, men det er til dels fordi en god del av selve modelleringsarbeidet gjøres i oppgaveteksten, og eksamenskandidatenes rolle var redusert til å fylle inn en del detaljer. Løsningsforslaget var faktisk ikke særlig mye lengre enn oppgaveteksten!*

En kjemisk reaktor består av en sylinder av høyde L^*, der et fast stoff i finknust form helles i på toppen og tas ut i bunnen, mens et fluid (væske eller gass) injiseres i bunnen og tas ut på toppen. Dette er en kontinuerlig prosess hvor reaktoren alltid er helt full. Hensikten med reaktoren er at et stoff A, som finnes i fluidet, skal omdannes til et stoff B, som følger med fluidet ut av reaktoren. Stoffet A kan, i tillegg til å være oppløst i fluidet, være *adsorbert* eller bundet til overflaten av det faste stoffet. Et adsorbert molekyl kan enten gå tilbake i oppløsning i fluidet (*desorberes* i mangel av et bedre ord), eller det kan reagere med det faste stoffet og produsere B, som umiddelbart løses opp i fluidet og fraktes med det.

Vi regner med at konsentrasjonen c^* av stoff A i fluidet er liten nok til at det ikke påvirker volumet av fluidet, og tilsvarende for konsentrasjonen n^* av A i det faste stoffet. c^* og n^* måles i $\mathrm{mol/m^3}$.

La φ være volumfraksjonen av fluid i reaktoren, det vil si at ethvert delvolum i reaktoren inneholder en volumandel φ som er fluid og en volumandel $1-\varphi$ som er fast stoff. Vi regner problemet som endimensjonalt, og måler posisjon i reaktoren med en koordinat x^* slik at $x^* = 0$ i bunnen av reaktoren og $x^* = L^*$ på toppen. Det faste stoffet beveger seg nedover med en konstant hastighet $-v$, og fluidet beveger seg oppover med konstant hastighet u.

Vi antar at det per tids- og volum-enhet adsorberes en mengde $k_a(N-n^*)c^*$ av stoffet A til det faste stoffet, mens det desorberes en mengde $k_d n^*$ og en mengde $k_r n^*$ omdannes til B. Her er N en metningsverdi for n^*.

(a) Vi får følgende ligninger for konsentrasjonene i reaktoren:

$$
\begin{aligned}
&(1) \qquad & \varphi c^*_{t^*} + \varphi u c^*_{x^*} &= -k_a(N-n^*)c^* + k_d n^* \\
&(2) \qquad & (1-\varphi)n^*_{t^*} - (1-\varphi)v n^*_{x^*} &= k_a(N-n^*)c^* - k_d n^* - k_r n^*
\end{aligned}
$$

Vis hvordan disse ligningene kan utledes fra antagelsene. Det kan hende du må presisere visse antagelser og definisjoner noe. Gi en ekvivalent integralformulering som er mer generelt anvendbar. Under hvilke betingelser må integralformuleringen anvendes?

(b) Det eneste som mangler for at problemet skal være fullstendig spesifisert er rand- og/eller initial-betingelser. Foreslå slike betingelser for å komplettere problemet.

(c) Dersom vi ser bort fra rand- og initialbetingelsene og lengden av reaktoren inneholder problemet parametrene φ, u, v, k_a, k_d, k_r og N. Hvor mange uavhengige dimensjonsløse parametre kan vi danne fra disse?

Neste oppgave er å ikkedimensjonalisere og skalere ligningene. Jeg har valgt å innføre de ikkedimensjonale størrelsene c, n, x og t ved formlene

$$n^* = Nn, \quad c^* = \frac{k_d}{k_a}c, \quad x^* = \frac{u(1-\varphi)}{k_r}x, \quad t^* = \frac{1-\varphi}{k_r}t$$

Dette er delvis motivert ved at vi er interessert i å studere situasjoner der adsorpsjon og desorpsjon er meget raskere enn reaksjonen A $\to$ B, slik at det etterhvert innstiller seg en likevektstilstand der stoffet A er slik fordelt mellom fluid og fast stoff at adsorpsjon og desorpsjon balanserer hverandre. Denne situasjonen skal vi kort kalle likevekt.

(d) Finn en sammenheng mellom n^* og c^* for det tilfelle at adsorpsjon og desorpsjon balanserer hverandre eksakt, og forsøk å begrunne det ovenstående valget av skalering for n^* og c^* i lys av denne sammenhengen. Uttrykk dette også som en sammenheng mellom n og c ved likevekt, og vis at da er spesielt $n \approx c$ når $c \ll 1$, og $n \approx 1$ når $c \gg 1$.

(e) Tidsskalaen anvendt ovenfor er bestemt ved å betrakte reaksjonen A $\to$ B isolert sett, uavhengig av adsorpsjon, desorpsjon og transporteffekter. Lengdeskalaen er deretter motivert ut fra at vi sannsynligvis har $u > v$ ved normal drift av reaktoren. Fyll ut detaljene i denne begrunnelsen for skaleringen av x og t.

Den skalerte, ikkedimensjonale formen av (1) og (2) blir

$$c_t + c_x = -\lambda[(1-n)c - n] \tag{3}$$

$$\alpha n_t - \sigma n_x = \lambda[(1-n)c - n] - \alpha n \tag{4}$$

der

$$\lambda = \frac{1-\varphi}{\varphi}\frac{k_a N}{k_r}, \quad \alpha = \frac{1-\varphi}{\varphi}\frac{k_a N}{k_d} = \lambda\frac{k_r}{k_d}, \quad \sigma = \alpha\frac{v}{u}$$

Vi skal behandle tilfellet der vi har likevekt mellom adsorpsjon og desorpsjon i nærmere detalj. Nærmere bestemt skal vi se på tilfellet der $\lambda \to \infty$, siden $\lambda \gg \alpha$ ser ut (i følge (4)) til å være en presis versjon av utsagnet "adsorpsjon og desorpsjon går mye raskere enn reaksjonen $A \to B$".

(f) Ligningene (3) og (4) reduseres begge til samme ligning når $\lambda \to \infty$ (dersom vi forutsetter at c, n og deres deriverte har endelige grenser), men summen av de to inneholder ikke λ, og bør derfor holde i grensen. Vis at de to ligningene vi får med dette kan kombineres til

$$\left(1 + \frac{\alpha}{(1+c)^2}\right)c_t + \left(1 - \frac{\sigma}{(1+c)^2}\right)c_x + \frac{\alpha c}{1+c} = 0 \tag{5}$$

La oss forenkle dette enda mer. Vi kan håpe på at når reaktoren har gått lenge nok har den nådd en stasjonær tilstand, slik at $c_t = 0$.

(g) Finn et generelt uttrykk for løsningen i dette tilfellet. Det er nok å uttrykke x som funksjon av c; du klarer neppe å finne den omvendte funksjonen. Vis at c kan uttrykkes som en funksjon av x om $\sigma < 1$. Hva kan gå galt om $\sigma > 1$?

(h) Vi betrakter det generelle problemet (3), (4) som en perturbasjon av tilfellet $\lambda = \infty$. Er dette et regulært eller singulært perturbasjonsproblem? Kan løsningen fra **g** tilpasses randbetingelsene du fant i **b**? Kommenter svaret.

(i) Når λ er stor, venter vi at massen vi heller i på toppen av reaktoren raskt vil komme i likevekt med fluidet. I denne (kortvarige) fasen er det adsorpsjon og desorpsjon som teller, mens reaksjonen A $\to$ B ikke kan ventes å ha noe videre betydning over et så kort tidsintervall. Foreslå en skalering av (3) og (4) som egner seg til å studere denne overgangssonen, og angi hvordan de reskalerte ligningene kommer til å se ut i grensen $\lambda \to \infty$ (men ikke forsøk å løse dem).