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:

φ	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 λ 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 differensiallgninginger, (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 αn 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 λ^{-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 λ. Et tilsvarende argument kan føres for (4), og vi kan tenke oss å forsøke å bruke λ^{-1} som skala for både t og x, det vil innføre reskalert variable τ og ξ 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.