

ДИФФУЗИОН ТИПІНДЕГІ БІР ПАРАМЕТРЛІ АДсорбция мәселесін шешу**Кыргызбай Назгуль Сабитовна**

магистратура, КазНаУ, Қазақстан, г. Алматы қаласы

Пирниязова Периуза Мамбетовна

научный руководитель, PhD, КазНаУ, Қазақстан, г. Алматы қаласы

**РЕШЕНИЕ ОДНОПАРАМЕТРИЧЕСКОЙ ЗАДАЧИ АДсорбции ДИФФУЗИОННОГО
ТИПА****Кыргызбай Назгуль Сабитовна***Казахский национальный аграрный Университет, Республика Казахстан, г. Алматы***Пирниязова Периуза Мамбетовна***PhD, Казахский национальный аграрный Университет, Республика Казахстан, г. Алматы*

Аннотация. Қаралып отырған мақалада бір параметрлі адсорбция мәселесінің диффузион теңдеуінің шешу әдісі қарастырылған, яғни адсорбция мәселесіндегі кинетика бөлігі нөлге теңдеп диффузион теңдеуі шек айырмдылық әдісі мен қарастырылды. Мақалада мәселенің қойылуы берілген, шек айырмдылық әдісі мен сұлбасы дүзіліп, алынған шек айырмдылық сұлба айдау әдісі мен шешілді.

Мәселенің қойылуы. Мелассаның түйіршікті қабатының ерітіндісінен лимон қышқылын алудың адсорбция процессін қарастырайық.

Сонымен, жылжымалы фаза үшін адсорбцияның бір параметрлі математикалық моделін қарастыратын болсақ, бойлық араластыруды ескере отырып, диффузиялық модельді қолданатын боламыз және осы кезде фазалар арасында жаппай алмасу жүреді. Сонда адсорбция процессінің бір фазалық математикалық моделін келесідей ұсына аламыз, яғни жылжымалы фаза үшін материалдық тепе-теңдік теңдеуі [1]:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial l^2} - v \frac{\partial c}{\partial l} - \beta(c - c^*) \quad (1)$$

Жылжымайтын(қозғалмайтын) фазаның материалдық балансының теңдеуі немесе сорғытылу кинетикасы [1]:

$$\frac{\partial C_H}{\partial t} = \beta(C - C^*) \quad (2)$$

Бастапқы шарттар: $t = 0, C(0, l) = C_0; C_H = 0$.

Шекаралық шарттар: $l = 0, C = C_0, \frac{\partial C}{\partial l} = 0$.

Мұндағы $C(l, t)$ – жылжымалы және $C_H(l, t)$ – қозғалмайтын фазалардағы компоненттердің концентрациясы, г/см³

C^* – сорбаттың тепе-теңдік концентрациясы

l – координатная ось, длина диффузорного бака, где производится адсорбция, м

t – уақыт, с

D – диффузия коэффициенті, м²/с

v – адсорбцияланатын ағынның көлемдік шығыны, м³/с;

β – пропорционалдық коэффициенті, кинетикалық коэффициент деп, те аталады, с⁻¹.

Мәселенің шешу әдісі. Шекті айырымдылық әдісінің негізі түсінігі –бұл

теңдеулерді шешуде қолданылатын дискреттеу үздіксіз аймақты оқшауланған нүктелер жиынтығымен (тормен) ауыстыру болып табылады, сонымен қатар, теңдеулерді шешу тек осы нүктелерде (тор түйіндерінде) қарастырылады. Туындыларды шекті айырымдылықтар мен алмастырып, шекті айырымдылық теңдеулерінің шешімі бастапқы есепті шешуге дейін жақындайтын болады. Ол үшін жуықтау қателігі, айырымдылық схемаларының тұрақтылығы мен дәйектілігін талдаймыз. Туындыларды шекті айырымдылық әдісімен жуықтау идеясын

жақсы түсіну үшін, $u(t, x)$ функциясының (t, x) нүктедегі туындысының анықтамасын айтып өтейік [2]

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{u(t, x + \Delta x) - u(t, x)}{\Delta x}$$

Егер $u(t, x)$ функциясы үздіксіз, ал Δx – жеткілікті аз болса, онда $[u(t, x + \Delta x) - u(t, x)]/\Delta x$ айырымдылық мәні $\partial u/\partial x$ туындысының мәніне жақын болады.

Айырымдықтың дұрыстығын ресми түрде $u(t, x + \Delta x)$ – функциясын Тейлор қатары бойынша Δx (t, x) нүктесіне қойып, туындыларды жуықтау арқылы тексеруге болады.

$$u(t, x + \Delta x) = u(t, x) + \frac{\Delta x}{1!} \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \dots + \frac{\Delta x^n}{n!} \frac{\partial^n u}{\partial x^n} + \dots \quad (3)$$

Мұнда x және Δx (3)- формулада «Оң жақтағы айырымдық» формуласы берілген:

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{u(t, x + \Delta x) - u(t, x)}{\Delta x} - \frac{\Delta x}{2!} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \dots \quad (4)$$

$\frac{\partial u}{\partial x}$ — туынды жуықтаулар арқылы шексіз көптеген шекті айырымдылықты құруға болады.

$$u(t, x - \Delta x) = u(t, x) - \frac{\Delta x}{1!} \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{(\Delta x)^2}{2!} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \dots + \frac{(-\Delta x)^n}{n!} \frac{\partial^n u}{\partial x^n} + \dots \quad (5)$$

(5) формулада «Сол жақтағы айырымдық» формуласы берілген:

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{u(t, x) - u(t, x - \Delta x)}{\Delta x} - \frac{\Delta x}{2!} \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \dots \quad (6)$$

Мысалы, $u(t, x + \Delta x)$ - «оң жақтағы айырымдық» формуласы мен $u(t, x - \Delta x)$ «сол жақтағы айырымдық» формулаларының Тейлор қатары бойынша Δx (t, x) нүктесінде жайылмасын (4) және (6) қосып, орталық айырымдылық формуласын аламыз[2]:

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{u(t, x + \Delta x) - u(t, x - \Delta x)}{2\Delta x} - \frac{(\Delta x)^2}{3!} \frac{\partial^3 u}{\partial x^3} + \dots + O(h^3) \quad (7)$$

(7) теңдеудегі $\frac{u(t, x + \Delta x) - u(t, x - \Delta x)}{2\Delta x}$ - бұл айырымдық сұлбасы, ал қалған $O(h^3)$ - «туындыны жуықтау қателігі» деп аталады.

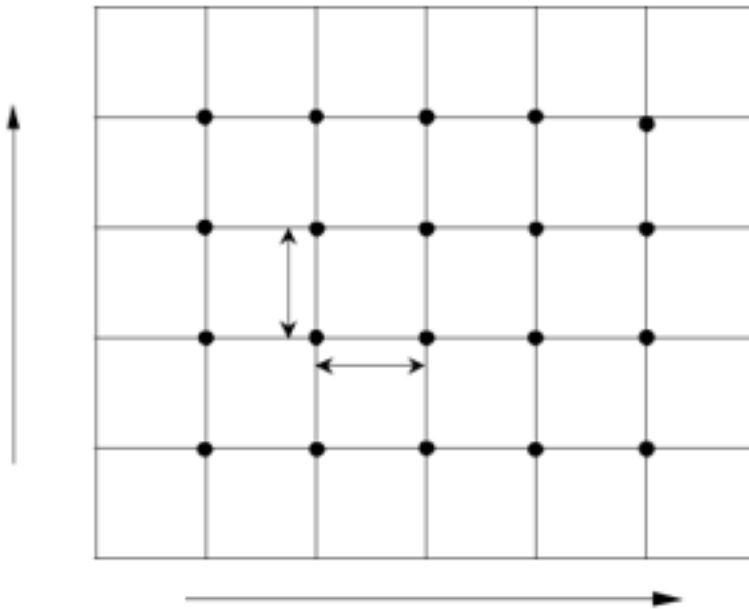
Шекті айырымдылық әдісін жартылай дифференциалдық теңдеуді шешуге қолданудағы алғашқы қадамдардың бірі - үздіксіз шекті айырымдылық торына ауысу болып табылады.

$u(t, x)$ — дербес дифференциалдық теңдеуін шешу үшін

$a \leq x \leq b, 0 \leq t \leq T$ аймағын еңгіземіз, Бұл жерде

$x_j, t_n, \Delta a, \Delta x, \Delta_j, \Delta n, \Delta t$ нүктелер жиынтығын торға еңгіземіз (1-сурет)[2],

мұндағы j және n бүтін сандар.



Сурет 1. Шекті айырымдылықтың торда берілу

Шекті айырымдылықтың торда берілу мысалы j және n шамаларының мәндері арқылы тор ішіндегі нүктелердің орналасуы анықталады, сондықтан да айырымдылық теңдеулері әдетте еркін түйін үшін жазылады (j, n) .

$u(t, x)$ емес, $u(t_n, x_j)$ -ді қарастыратын боламыз (қысқартылған түрде u_j^n). Осы жазбаға сәйкес (3), (4) және (5) өрнектер келесідей түрде жазылады[3-5]:

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{u_{j+1}^n - u_j^n}{\Delta x} + O(\Delta x); \quad \frac{\partial u}{\partial x} = \frac{u_j^n - u_{j-1}^n}{\Delta x} + O(\Delta x);$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{u_{j+1}^n - u_{j-1}^n}{2\Delta x} + O(\Delta x^2) \quad (8)$$

Жақындау қателігін $O(\Delta x^n)$ -формада көрсету, абсолюттік шамадағы жуықтау қателігі $K|\Delta x|^n$, $\Delta x \rightarrow 0$ -ге ұмтылатуғын білдіреді. Мұндағы $K > 0$ - тұрақты сан.

Дәл осындай етіп, t - айнымалысы бойынша туындыны келесі түрде жазуға болады:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{u_j^{n+1} - u_j^n}{\Delta t} + O(\Delta t); \quad \frac{\partial u}{\partial t} = \frac{u_j^n - u_j^{n-1}}{\Delta t} + O(\Delta t);$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{u_j^{n+1} - u_j^{n-1}}{2\Delta t} + O(\Delta t)^2. \quad (9)$$

Әрбір дербес дифференциалдық теңдеу үшін оның көптеген айырымдық сұлбалары бар, олардың ішінен әдетте барлық көзқарастар бойынша ең жақсысын таңдау қиынға соғады. Біріншіден, шекті айырмдылықтар әдісін қолданғанда, қойылған есеп теңдеулерін дұрыс жақындатуға ұмтылу керек, екіншіден, «ең жақсы» схеманы таңдап алу керек, яғни оның дәлдігін, тиімділігін ескере отырып оңтайландыру керек және бағдарламалық қамтамасыздандыруды компьютерде жүзеге асырудың ыңғайлылығын қарастырған жөн. Жоғарыда қарап өткендей берілген теңдеудің сұлбасын төмендегіше аламыз, біртекті

мәселесін қарастыралық, яғни $\beta(C - C^*) = 0$. Онда біз диффузия теңдеуін аламыз

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial l^2} - u \frac{\partial C}{\partial l} - \beta(C - C^*)$$

белгілерді еңгіземіз $u_{i,j} = C$, а $u = v$, және жоғарыда алынған сұлбаларды орнына (1) теңдеуіне қойып келесі түрге келтіреміз[2,4,7]:

$$\frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{\Delta t} = D \frac{u_{i-1,j+1} - 2u_{i,j+1} + u_{i+1,j+1}}{\Delta x^2} - v \frac{u_{i+1,j} - u_{i-1,j}}{2\Delta x} \quad (10)$$

Бастапқы шарт : $u(l, 0) = f(x)$

Шекаралық шарттар: $u(0, t) = u_0$ $u_x(l, t) = 0$

(10) теңдеуге белгілеулер кірітіп, яғни $\Delta t = \tau$; $\Delta x = h$, төмендегі түрге келеміз

$$\frac{u_{i,j+1} - u_{i,j}}{\tau} = D \frac{u_{i-1,j+1} - 2u_{i,j+1} + u_{i+1,j+1}}{h^2} - v \frac{u_{i+1,j} - u_{i-1,j}}{2h} \quad (11)$$

(11) теңдеуді шешу үшін сандық әдістердің «Айдау әдісін» қолданамыз. Бұл жерде (11) теңдеуді түрлендіріп төмендегі түрге келтіреміз

$$u_{i,j+1} = u_{i,j} - D \frac{\tau}{h^2} (u_{i-1,j+1} - 2u_{i,j+1} + u_{i+1,j+1}) + v \frac{\tau}{2h} (u_{i+1,j} - u_{i-1,j}) \quad (12)$$

Белгілеулер кірітеміз

$$u_{i,j} = u_m^n$$

$$u_m^{n+1} = u_m^n - D \frac{\tau}{h^2} u_{m-1}^{n+1} + 2D \frac{\tau}{h^2} u_m^{n+1} - D \frac{\tau}{h^2} u_{m+1}^{n+1} + v \frac{\tau}{2h} u_{m+1}^{n+1}$$

$$u_m^n = D \left(1 + \frac{2\tau}{h^2} \right) u_m^{n+1} - D \frac{\tau}{h^2} (u_{m+1}^{n+1} + u_{m-1}^{n+1}) + \vartheta \frac{\tau}{2h} (u_{m+1}^n - u_{m-1}^n) ; \quad (13)$$

Белгілеулер кірітеміз, яғни

$$a_m = D \frac{\tau}{h^2}, \quad b_m = D \left(1 + \frac{2\tau}{h^2} \right), \quad c_m = \vartheta \frac{\tau}{2h},$$

Сонымен қатар (13) теңдеудің және (1) теңдеудің жалпы шешімі төмендегі көріністе болады

$$u_m^n = -a_m (u_{m+1}^{n+1} + u_{m-1}^{n+1}) + b_m u_m^{n+1} + c_m (u_{m+1}^n - u_{m-1}^n) \quad (14)$$

$$m \neq 0, n = 0, m = 1$$

$$u_1^0 = a_1 (u_2^1 + u_0^1) + b_1 u_1^1 + c_1 (u_2^0 - u_0^0)$$

$$m = 1, n = 1$$

$$u_1^1 = a_1 (u_2^2 + u_0^2) + b_1 u_1^2 + c_1 (u_2^1 - u_0^1)$$

$$m = 1, n = 2$$

$$u_1^2 = a_1 (u_2^3 + u_0^3) + b_1 u_1^3 + c_1 (u_2^2 - u_0^2)$$

$$m = 1, n = 3$$

$$u_1^3 = a_1 (u_2^4 + u_0^4) + b_1 u_1^4 + c_1 (u_2^3 - u_0^3)$$

$$m = 1, n = 4$$

$$u_1^4 = a_1 (u_2^5 + u_0^5) + b_1 u_1^5 + c_1 (u_2^4 - u_0^4)$$

$$m = 1, n = 5$$

$$u_1^5 = a_1 (u_2^6 + u_0^6) + b_1 u_1^6 + c_1 (u_2^5 - u_0^5)$$

$$m = 2, n = 0$$

$$u_2^0 = a_2 (u_3^1 + u_1^1) + b_2 u_2^1 + c_2 (u_3^0 - u_1^0)$$

$$m = 2, n = 1$$

$$u_2^1 = a_2(u_3^2 + u_1^2) + b_2u_2^2 + c_2(u_3^1 - u_1^1)$$

$$\mathbf{m} = \mathbf{2}, \mathbf{n} = \mathbf{2}$$

$$u_2^2 = a_2(u_3^3 + u_1^3) + b_2u_2^3 + c_2(u_3^2 - u_1^2)$$

$$\mathbf{m} = \mathbf{2}, \mathbf{n} = \mathbf{3}$$

$$u_2^3 = a_2(u_3^4 + u_1^4) + b_2u_2^4 + c_2(u_3^3 - u_1^3)$$

$$\mathbf{m} = \mathbf{2}, \mathbf{n} = \mathbf{4}$$

$$u_2^4 = a_2(u_3^5 + u_1^5) + b_2u_2^5 + c_2(u_3^4 - u_1^4)$$

$$\mathbf{m} = \mathbf{2}, \mathbf{n} = \mathbf{5}$$

$$u_2^5 = a_2(u_3^6 + u_1^6) + b_2u_2^6 + c_2(u_3^5 - u_1^5)$$

$$\mathbf{m} = \mathbf{3}, \mathbf{n} = \mathbf{0}$$

$$u_3^0 = a_3(u_4^1 + u_2^1) + b_3u_3^1 + c_3(u_4^0 - u_2^0)$$

$$\mathbf{m} = \mathbf{3}, \mathbf{n} = \mathbf{1}$$

$$u_3^1 = a_3(u_4^2 + u_2^2) + b_3u_3^2 + c_3(u_4^1 - u_2^1)$$

$$\mathbf{m} = \mathbf{3}, \mathbf{n} = \mathbf{2}$$

$$u_3^2 = a_3(u_4^3 + u_2^3) + b_3u_3^3 + c_3(u_4^2 - u_2^2)$$

$$\mathbf{m} = \mathbf{3}, \mathbf{n} = \mathbf{3}$$

$$u_3^3 = a_3(u_4^4 + u_2^4) + b_3u_3^4 + c_3(u_4^3 - u_2^3)$$

$$\mathbf{m} = \mathbf{3}, \mathbf{n} = \mathbf{4}$$

$$u_3^4 = a_3(u_4^5 + u_2^5) + b_3u_3^5 + c_3(u_4^4 - u_2^4)$$

$$\mathbf{m} = \mathbf{3}, \mathbf{n} = \mathbf{5}$$

$$u_3^5 = a_3(u_4^6 + u_2^6) + b_3u_3^6 + c_3(u_4^5 - u_2^5)$$

$$\mathbf{m} = \mathbf{4}, \mathbf{n} = \mathbf{0}$$

$$u_4^0 = a_4(u_5^1 + u_3^1) + b_4u_4^1 + c_4(u_5^0 - u_3^0)$$

$$\mathbf{m} = \mathbf{4}, \mathbf{n} = \mathbf{1}$$

$$u_4^1 = a_4(u_5^2 + u_3^2) + b_4u_4^2 + c_4(u_5^1 - u_3^1)$$

$$\mathbf{m} = \mathbf{4}, \mathbf{n} = \mathbf{2}$$

$$u_4^2 = a_4(u_5^3 + u_3^3) + b_4u_4^3 + c_4(u_5^2 - u_3^2)$$

$$\mathbf{m} = \mathbf{4}, \mathbf{n} = \mathbf{3}$$

$$u_4^3 = a_4(u_5^4 + u_3^4) + b_4u_4^4 + c_4(u_5^3 - u_3^3)$$

$$\mathbf{m} = \mathbf{4}, \mathbf{n} = \mathbf{4}$$

$$u_4^4 = a_4(u_5^5 + u_3^5) + b_4u_4^5 + c_4(u_5^4 - u_3^4)$$

$$\mathbf{m} = \mathbf{4}, \mathbf{n} = \mathbf{5}$$

$$u_4^5 = a_4(u_5^6 + u_3^6) + b_4u_4^6 + c_4(u_5^5 - u_3^5)$$

$$\mathbf{m} = \mathbf{5}, \mathbf{n} = \mathbf{0}$$

$$u_5^0 = a_5(u_6^1 + u_4^1) + b_5u_5^1 + c_5(u_6^0 - u_4^0)$$

$$\mathbf{m} = \mathbf{5}, \mathbf{n} = \mathbf{1}$$

$$u_5^1 = a_5(u_6^2 + u_4^2) + b_5u_5^2 + c_5(u_6^1 - u_4^1)$$

$$\mathbf{m} = \mathbf{5}, \mathbf{n} = \mathbf{2}$$

$$u_5^2 = a_5(u_6^3 + u_4^3) + b_5u_5^3 + c_5(u_6^2 - u_4^2)$$

$$\mathbf{m} = \mathbf{5}, \mathbf{n} = \mathbf{3}$$

$$u_5^3 = a_5(u_6^4 + u_4^4) + b_5 u_5^4 + c_5(u_6^3 - u_4^3)$$

$$m = 5, n = 4$$

$$u_5^4 = a_5(u_6^5 + u_4^5) + b_5 u_5^5 + c_5(u_6^4 - u_4^4)$$

$$m = 5, n = 5$$

$$u_5^5 = a_5(u_6^6 + u_4^6) + b_5 u_5^6 + c_5(u_6^5 - u_4^5)$$

Жоғарыда қойылған мәселенің (1.2) аналитикалық шешімі $n=5$ дейінгі қабатында, ал торларды $m=5$ торына дейін қарастырылды.

Пайдаланылған әдебиеттер:

1. Н.В. Ушева, О.Е. Мойзес, О.Е. Митянина, Е.А. Кузьменко . Математическое моделирование химико-технологических процессов.Изд. Томский Политехнический университет С.46-50 [1]
2. Миньков Л.Л., Шрагер Э.Р. Основные подходы к численному решению одномерных уравнений газовой динамики : учеб. пособие. – Томск : STT, 2016. – с.7-10. Изд.Томский университет,2016
3. Коржов Е.Н. Математическое моделирование процессов редокс -сорбции : учебное пособие . – Воронеж : Издательский дом ВГУ , 2016. – с. 8-10[3]
4. Информатика: учебное пособие / О.Е. Мойзес, Е.А. Кузьменко, А.В. Кравцов. – 2-е изд., перераб. и доп. – Томск: Изд- во ТПУ, 2009 – с.96-100[4]
5. А. Г. Коробейников . Разработка и анализ математических моделей с использованием MATLAB и MAPLE. Учебное пособие с.
6. Максимова А.П., Малова Н.А. М 171 Лабораторный практикум по вычислительной математике. Методические указания по выполнению лабораторных работ. – Чебоксары: Волжский филиал МАДИ (ГТУ), 2008. с.80-81[6]
7. Вольф А.В., Самборская М.А. Технологическое проектирование тарельчатых колонн фракционирования нефти: учеб. пособие – Томск: Изд-во ТПУ, 2009. – 16 с.
8. Кравцов А.В., Новиков А.А., Коваль П.И. Компьютерный анализ технологических процессов. – Новосибирск: Наука, 1998. – 212 с.
9. <https://stud.kz/prezentatsiya/id/20433#&gid=1&pid=8> [10]
10. Налимов В.В., Чернова Н.А. Статистические методы планирования экстремального эксперимента. – М.: Наука, 1965. – 340 с