UN PROBLEMA INVERSO PARA EL MODELO DE WEN EN DIFUSION-REACCION SOLIDO-GAS

Domingo A. TARZIA

PROMAR (CONICET-UNR), Instituto de Matemática "Beppo Levi", Fac. de Ciencias Exactas, Ing. y Agrimensura, Av. Pellegrini 250, 2000 Rosario, Argentina.

Luis T. VILLA

INIQUI (CONICET-UNSa), Facultad de Ciencias Tecnológicas, Buenos Aires 177, 4400 Salta, Argentina.

RESUMEN

Se considera el problema de frontera libre para la ecuación de la difusión unidimensional que corresponde al modelo de Wen para un sistema de reacción-difusión sólido-gas [TaVi, We], consistente en determinar la concentración del gas $C=C(x,t)$ y la posición de la frontera libre $S=S(t)$ (interfase sólido inerte - sólido puro) de manera que satisfagan, en variables adimensionales, el sistema (1).

En el presente trabajo se estudia el problema inverso asociado a (1), llevándolo a la resolución de una ecuación integral de Volterra de primera especie no reducible a la de la segunda especie [Qu]. Por otra parte, se obtiene la solución explícita correspondiente al caso particular en que el orden de reacción para el gas sea $\nu=1$ y $\ddot{S}=0$, mediante una oportuna transformación.

ABSTRACT

A free boundary problem for the one-dimensional diffusion equation, which consist in a Wen's model for a gas-solid reaction-diffusion system is considered. In the citated model, the unknown are the gas concentration $C=C(x,t)$ and the free boundary position $S=S(t)$ (interface inert solid layer-unreacted solid) such that the system (1), in dimensionless variables is satisfied.

In the present paper the inverse problem associate to (1) is analyzed through an integral formulation which leads to the resolution of a first kind Volterra integral equation non-reducible to a second kind one. On the other hand, the explicit solution for the particular case in which the gas reaction order is $\nu=1$ and $\ddot{S}=0$ is obtained, by using a convenient transformation.

1. INTRODUCCION

Se considera el siguiente problema inicial y de contorno para la ecuación unidimensional de la difusión, correspondiente al modelo de Wen para un sistema de reacción-difusión sólido-gas [TaVi, We] :

(1) $C_t - C_{xx}=0$, $0<x<S(t)$, $0<t\leq T$,

(2) $C_x(S(t),t)= -C^{\nu}(S(t),t)$, $0<t\leq T$,

(3) $C_x(S(t),t)= -\dot{S}(t)$, $0<t\leq T$,

(4) $C(x,0)= \Psi(x)$, $0\leq x\leq b$,

(5) $C(0,t)= v_0(t)>0$, $0<t\leq T$,

(6) $S(0)=b$,

donde $S=S(t)$ es una función asignada perteneciente a determinada clase (por ejemplo, $S \in C^2[0,T]$), $\nu > 0$ y $T> 0$ son constantes positivas, y $\Psi = \Psi(x)$ es el dato inicial.

Se quiere entonces encontrar la función $C = C(x,t)$ de tal modo que satisfaga (1)-(4) y la función $v_0 = v_0(t)$, dada por (5), para una frontera móvil conocida $S=S(t)$ con $S(0)=b$.

2. REDUCCION A UNA ECUACION INTEGRAL

Se introduce la función de Green para el semiespacio $x> 0$:

(7) $$G(x,t,\xi,\tau) = K(x,t,\xi,\tau) - K(-x,t,\xi,\tau)$$

donde

(8) $$K(x,t,\xi,\tau) = \frac{1}{2\sqrt{\pi(t-\tau)}} \exp[-\frac{(x-\xi)^2}{4(t-\tau)}] \;, \quad t > \tau$$

es la conocida solución fundamental de la ecuación parabólica (1). Si se supone que $C=C(x,t)$ satisface (1)-(4), se integra la identidad de Green :

(9) $$\frac{\partial}{\partial\xi}(G \frac{\partial C}{\partial\xi} - C \frac{\partial G}{\partial\xi}) - \frac{\partial(GC)}{\partial\tau} = 0$$

sobre el dominio $0 < \xi < S(\tau)$, $0 < \epsilon < \tau < t - \epsilon$, se toma límite cuando $\epsilon \to 0^+$ entonces se obtiene para $C(x,t)$ la siguiente representación integral :

$$C(x,t) = \int_0^b G(x,t,\xi,0)\, \Psi(\xi)\, d\xi + \int_0^t v_0(\tau)\, G_\xi(x,t,0,\tau)\, d\tau + \tag{10}$$

$$+ \int_0^t \left(\dot{S}^{\frac{1}{\nu}}(\tau) \left[G(x,t,S(\tau),\tau)\, \dot{S}(\tau) - G_\xi(x,t,S(\tau),\tau) \right] - \right.$$

$$\left. - \; G(x,t,S(\tau),\tau)\, \dot{S}(\tau) \right) d\tau$$

Si se toma límite cuando $x \to S^-(t)$ en ambos lados de (10), se usa la fórmula del salto [Fr] y se tiene presente que

$$C(S(t),t) = \dot{S}^{\frac{1}{\nu}}(t) \quad ,$$

se obtiene para la función $v_0 = v_0(t)$ la siguiente ecuación integral de Volterra de primera especie :

$$f(t) = \int_0^t H(t,\tau)\, V_0(\tau)\, d\tau \quad , \tag{11}$$

siendo el núcleo $H = H(t,\tau)$ dado como

$$H(t,\tau) = \frac{S(t)}{2\sqrt{\pi}} \; \frac{\exp\left[\dfrac{-S^2(t)}{4(t-\tau)} \right]}{(t-\tau)^{\frac{3}{2}}} \tag{12}$$

y la función $f = f(t)$ viene dada por

$$f(t) = \frac{1}{2}\, \dot{S}^{\frac{1}{\nu}}(t) - \int_0^b G(S(t),t,\xi,0)\, \Psi(\xi)\, d\xi - \int_0^t \dot{S}^{\frac{\nu+1}{\nu}}(\tau) \quad G(S(t),t,S(\tau),\tau)\, d\tau \tag{13}$$

$$+ \int_0^t \dot{S}(\tau) \quad G(S(t),t,S(\tau),\tau)\, d\tau + \int_0^t \dot{S}^{\frac{1}{\nu}}(t) \quad G_\xi(S(t),t,S(\tau),\tau)\, d\tau$$

La ecuación (11) es del tipo de la estudiada en [Qu]. Llevando $v_0=v_0(\tau)$, solución de (11), a la expresión (10) se obtiene la $C=C(x,t)$ buscada.

3. CASOS PARTICULARES.

Se considera que la constante ν, introducida en la ecuación (2), es

(14) $$\nu = 1$$

Entonces, si se introduce la transformación

(15) $$V(x,t) = C(x,t) - \dot{S}(t)$$

se obtienen las siguientes condiciones :

(16) $V_t - V_{xx} = -\ddot{S}(t)$, $0<x<S(t)$, $0<t\leq T$,

(17) $V(S(t),t)= 0$, $0<t\leq T$,

(18) $V_x(S(t),t)= -\dot{S}(t)$, $0<t\leq T$,

(19) $V(x,0)=\Psi(x)-\dot{S}(0)=\phi(x)$, $0\leq x\leq b$,

(20) $V(0,t)= v_0(t) - \dot{S}(t)$, $0<t\leq T$,

(21) $S(0)=b$.

El problema (16)—(21) constituye un problema de tipo Stefan para la ecuación del calor-difusión con una fuente o sumidero de energía térmica distribuída uniformemente en el dominio dada por $-\ddot{S}(t)$.

En particular, si $S=S(t)$ está dada como

(22) $$S(t)=\sigma t$$

es decir, que se tiene

(23) $$b=0 , \qquad \ddot{S}(t)=0$$

entonces (16)—(21) (nótese que en este caso la condición (19) es superflua) puede resolverse explícitamente (ver, por ejemplo, [Vi]), obteniéndose :

(24) $\quad V(x,t) = \exp[\sigma(\sigma t - x)] - 1$

(25) $\quad V(0,t) = \exp(\sigma^2 t) - 1$.

Por lo tanto, para el respectivo problema inverso asociado a (1)–(6) con $S(t)=\sigma t$, se encuentra que $C=C(x,t)$ y $v_0 = v_0(t)$ vienen dados por :

(26) $\quad C(x,t) = \exp[\sigma(\sigma t - x)] - (1 - \sigma)$

(27) $\quad v_0(t) = \exp(\sigma^2 t) - (1-\sigma)$.

REFERENCIAS

[Fr] A. FRIEDMAN, "Partial differential equations of parabolic type", Prentice Hall, Englewood Cliffs, N. J. (1964).

[Qu] D. QUILGHINI, "Sul problema inverso di quello di Stefan", Riv. Mat. Univ. Parma, 8 (1967), 131-142.

[Rv] I.L. RUBINSTEIN, "The Stefan problem", trans. Math. Monographs - Vol. 27, Amer. Math. Soc., Providence (1971).

[TaVi] D.A. TARZIA – L.T. VILLA, "On The free boundary problem in the Wen–Langmuir shrinking core model for noncatalytic gas-solid reactions", Sometido a Meccanica.

[Vi] L.T. VILLA, "El problema inverso de Stefan", CUADERNOS del Instituto de Matemática "Beppo Levi", Universidad Nacional de Rosario, N° 11 (1984), 105-131.

[We] C.Y. WEN, "Noncatalytic heterogeneous solid fluid reaction models", Industrial Eng. Chem., 60 N°9 (1968), 33-54