МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования

«ТЮМЕНСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

ИНСТИТУТ МАТЕМАТИКИ И КОМПЬЮТЕРНЫХ НАУК

Кафедра фундаментальной математики и механики

РЕКОМЕНДОВАНО К ЗАЩИТЕ
В ГЭК И ПРОВЕРЕНО НА ОБЪЕМ
ЗАИМСТВОВАНИЯ
Заведующий кафедрой
к.ф.-м.н.
Басинский К.Ю.
1 июля 2019 г.

ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА

(магистерская диссертация)

ОПРЕДЕЛЕНИЕ КОНСТАНТ АДСОРБЦИИ ИЗ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

01.04.01 Математика

Магистерская программа *«Вычислительная механика»*

Выполнил работу Студент 2 курса очной формы обучения	Светус Владимир Александрович
Научный руководитель к.ф.-м.н. доцент	Шевелёв Александр Павлович
Рецензент главный специалист ООО «ТюменьНИИпроект»	Киселев Данила Алексеевич

г. Тюмень, 2019

Оглавление

Введение

Актуальность. Давным-давно известно, что пористые тела имеют все шансы поглощать сравнительно огромные размеры конденсируемых газов. Уже в 1777 году один из ученых по фамилии Фонтана обнаружил, что свежепрокалённый уголь, охлаждённый под ртутью, поглощает газы разного происхождения в размерах, в некоторое количество раз превосходящих его собственный размер. В том же году ученый по фамилии Шееле выяснил, что «воздух», который выделяется из угля при нагревании, при охлаждении поглощается им вновь.

Через небольшой промежуток времени обнаружилось, что от вида угля и происхождения газа зависит размер поглощенного объема. Ученый по фамилии Соссюр в 1814 г. сделал предположение, что объема поверхности, достижимой для газа, зависит от свойства твердого тела к поглощению, и изменил современные взгляды на суть этого явления. А в 1843 году ученый по фамилии Митчерлих дал оценку среднему диаметру пор приблизительно в 10^{-2} мм и выделил их роль в угле. У ученого появилась мысль, которая говорила о том, что слоем, толщина которого составляет $5 \cdot 10^{-3}$ мм, конденсируется диоксид углерода. Он по своей сущности напоминает жидкую углекислоту. Считается, что в наше время парой основных факторов является - пористость (величина пор) и объем поверхности. Они играют очень большую роль в адсорбционных явлениях, происходящих не только на угле, но и на других всевозможных твердых телах. По итогам был сделан вывод, что, получая некоторые значения адсорбции газов и паров, возможно, так же получать сведения о пористой структуре твердых тел, а так же удельной поверхности.

Термин адсорбция, сначала понимали как конденсацию газов на незакрытых поверхностях (в отличие от абсорбции, в результате которой молекулы газа проникали в массу абсорбирующего твердого тела). Адсорбция в наше время принята как международный термин, означающий обогащение или обеднение одного или более компонентов в межфазном слое. Положительной адсорбции или говоря проще просто адсорбции дали такое название как обогащение. Отрицательную же адсорбцию наделили понятием обеднение.

В 1909 году ученому по фамилии Мак-Бэн пришла в голову новая идея, новый термин, который содержал в себе понятия сразу нескольких терминов: адсорбция на поверхности, абсорбция путем проникновения молекул в решетку твердого тела и капиллярная конденсация. Этим термином стала сорбция.

Цель исследования – на основе обработки экспериментов по движению оторочки полимера определить константы абсорбции-удерживания реагентов в керновом материале без его разрушения и недоступный объем пор для фильтрации растворов высокомолекулярных веществ.

Объект исследования – константы адсорбции.

Предмет исследования – определению параметров адсорбции и недоступного объема пор.

Для достижения поставленной цели в работе решаются следующие *задачи исследования*:

1. Изучить имеющиеся наработки в области адсорбции и удерживания высокомолекулярных реагентов при фильтрации в пористой среде, определения недоступного объема пор, фактора сопротивления при фильтрации раствора полимера;
2. Решить задачу о движении оторочки реагента при известных параметрах адсорбции и недоступного объема пор;
3. Решить обратную задачу по определению параметров адсорбции и недоступного объема пор по известному характеру движения оторочки, произвести обработку экспериментальных данных и определить искомые параметры.

Теоретическая значимость заключается в том, что была решена обратная задача по определению параметров адсорбции и недоступного объема пор образцов горной пароды.

Практическая значимость заключается в том, что были получены правильные константы адсорбции без разрушения образца горной пароды.

Этапы исследования:

1. Поисково-теоретический. Целью данного этапа было изучение и анализ наработок по теме «Адсорбция». Введение проблемы, постановка цели, объекта, предмета и формирование задач исследования.

2. Опытно-экспериментальный. Подробно изучен опыт экспериментальных исследований зарубежных авторов.

3. Заключительно-обобщающий. Обработка полученных данных, доработка программы для нахождения исходных данных, а так же оформление выпускной квалификационной работы.

Структура выпускной квалификационной работы определена логикой и решением задач исследования. Работа состоит из введения, двух глав, заключения, выводов, списка использованной литературы (20 наименований).

Глава №1 Физико-математическая модель адсорбции

1.1. Теоретические основы процесса адсорбции

Под словом адсорбция понимают такой процесс при котором из газовой смеси или раствора поверхностным слоем твердого тела или жидкости поглощаются пары, газы и разнообразные вещества. В мире всему есть противоположность. Адсорбция не является исключением. Процесс обратный адсорбции называют десорбцией. Так же можно сказать что адсорбцию считают частным случаем сорбции.

Адсорбат – вещество, которое адсорбируется на поверхности адсорбента (на границе раздела фаз перераспределяется).

Адсорбенты – высокодисперсные искусственно созданные или же природные материалы с огромной удельной поверхностью. На ней и происходит адсорбция веществ.

Выборочное извлечение примесей из газа на этом и основана адсорбция, конечно же, не без помощи адсорбентов твердых тел с хорошо развитой поверхностью.

Термическая, а также механическая стойкость, лёгкая отдача адсорбированного вещества, низкий уровень сопротивления потоку газа, избирательность и высокая поглотительная способность - вот основные характеристики которыми должны обладать адсорбенты.

Адсорберы периодического действия, в основном именно в них осуществляется адсорбция. Через слой адсорбента сверху в низ проходит очищаемый газ. С верхнего слоя сорбента начинается процесс поглощения адсорбтива, постепенно фронт поглощения передвигается в низ, поглощая все большее количество слоев, когда же все поглотительные способности всех слоев исчерпывают себя начинается так называемы «проскок» поглощаемого компонента. Именно «проскок» показывает, что аппарат должен быть переключен на процесс обратный адсорбции – десорбцию.

Десорбцию протекает обычно по средствам острого пара, который подается, конечно же, снизу. Он выносит из сорбента поглощенный им адсорбат, после чего направляется в холодильник конденсатор, где продукт и вода отделяются друг от друга.

Надежность и простота вот главные качества, которые определяют адсорберы повторяющихся действий. Низкая производительность, небольшая эффективность и периодичность процесса, к сожалению, являются недостатками адсорберов повторяющихся действий. Так же известно, что в кипящем слое адсорбента осуществляются непрерывные процессы адсорбционной очистки газов.

Существует множество способов очистки парообразных и газообразных примесей. Но все эти способы можно разделить на две основные группы:

- адсорбция твердыми поглотителями;
- адсорбция жидкостями.

1.2. Адсорбционные силы

Взаимодействие сил притяжения между некоторыми молекулами газа и ионами, атомами или теми же молекулами твердого тела и стали называть адсорбция газа твердым телом. Данные силы принято делить на две разные группы, такие как:

- физические силы – вызывают физическую адсорбцию;
- химические силы – вызывают химическую адсорбцию (хемосорбцию).

Если рассматривать отдельно физическую адсорбцию, то ей не сопутствует существенное изменение электронной молекулярной структуры адсорбата, а так же она обусловлена силами межмолекулярного взаимодействия. При протекании физической адсорбции может образовываться мономолекулярный слой, а так же многослойный или говоря другими словами монослойный. Двойной электрический слой обычно появляется из растворов при адсорбции электролитов. Капиллярная конденсация может протекать в порах адсорбента, если при этом его смачивает жидкий адсорбат. Так же можно сказать, что во время прохождения физической адсорбции, адсорбируемые молекулы обычно обладают поверхностной подвижностью.

Если же говорить про хемосорбцию, то можно сказать что при ней всегда между молекулами (атомами) адсорбата и адсорбента появляется химическая связь, говоря иными словами хемосорбцию можно рассматривать как реакцию химического происхождения, поверхностный слой которой обязательно будет ограничивать область протекания. Бывают такие случаи, когда оба типа адсорбции в одно и то же время могут протекать на одной и той же поверхности. Можно сказать с уверенностью, что хемосорбция чаще всего протекает при очень и очень больших температурах. Физическая же адсорбция наоборот проходит при температуре ниже критической конденсации адсорбата. Конечно же, все это происходит не в слишком пористых адсорбентах. Однако в нестандартных случаях физическая адсорбция может протекать при температуре, которая намного выше критической температуры конденсации адсорбата.

Наверняка можно сказать, что адсорбент хемосорбирует именно определенные молекулы, те которые выступают в реакцию с атомами именно на поверхности. Другими словами можно сказать, что процессы хемосорбции, можно сказать, носят определенного типа характер, как и множество других химических реакций. В физической же адсорбции специфичность тоже может проявляться в определенном наборе случаев.

1.3. Физические характеристики адсорбции

Г именно этой буквой принять обозначать количественную характеристику адсорбции. Она представляет собой, конечно же, избыток адсорбата, который приходится на единицу площади поверхностного слоя. Долей или другими словами степенью покрытия поверхности называют следующее отношение:

$$\theta = \frac{\Gamma}{\Gamma_{\infty}}$$

где Γ_{∞} принять считать предельно возможной величиной монослойной адсорбции для данной системы.

Теплота адсорбции, как всем известно, так называют теплоту, которая почти всегда выделяется при прохождении процессов адсорбции. Когда увеличивается прочность связи, в этот момент и возникает теплота адсорбции. Обычно она составляет примерно от 8 до 25 килоджоулей на моль. Иногда в редких случаях она может достигать 80 килоджоулям на моль. Конечно же, все эти цифры для физической адсорбции, если же рассматривать хемосорбцию, то цифры точно будут превышать 80 килоджоулей на моль.

Так же при хемосорбции можно наблюдать поглощение теплоты, это все возможно, если она сопровождается диссоциацией адсорбируемых молекул. Обычно теплота адсорбции становится меньше, связано это с тем, что энергия на поверхности распределяется не однородно или в результате латерального взаимодействия молекул в адсорбируемом слое, и, конечно же, все это происходит по мере заполнения поверхности.

В зависимости от типа центра теплота адсорбции можно сказать с уверенностью может быть различной, для адсорбентов которые обладают несколькими адсорбирующими центрами. Так же нужно добавить, что распределение свободной энергии на поверхности является дискретно-неоднородным.

Принято считать, что теплота адсорбции уменьшается до значения, приблизительно равного к значению теплоты конденсации адсорбата, именно во время перехода к полимолекулярной адсорбции. В современном мире всем известно, что кристаллическая структура поверхности твердого тела может сильно измениться в процессе прохождения адсорбции, конечно же, если теплота адсорбции сравнима с поверхностной энергией адсорбента. В случае хемосорбции даже металлы и ионные кристаллы подвержены изменению поверхностной структуры. Если же говорить про физическую адсорбцию, то перестройке в чаще всего подвергается поверхность молекулярных кристаллов.

Как и было сказано ранее, процесс обратный адсорбции называется десорбция. Во время протекания десорбции, адсорбируемые частицы уходят с поверхности адсорбента. Так же можно сказать, что десорбция протекает, потому что происходят колебательные передвижения адсорбируемых молекул вдоль направления действия силы притяжения между адсорбентом и адсорбатом. Данные колебания принято обозначать τ_0 и чаще всего оно приблизительно равно 10^{-13} с.

Методы статистической термодинамики, именно с помощью них можно рассчитать скорость десорбции и адсорбции. В хемосорбции же скорость не быстрых процессов чаще всего описывают следующим уравнением приведенным ниже:

$$\frac{dq}{dt} = a \cdot \exp{(-\alpha q)}$$

где q - количество адсорбируемого вещества, а - константа, зависящая от температуры. Конечно же, если скорости десорбции и адсорбции равны, то возможно установить адсорбционное равновесие. Так же можно узнать среднее продолжительность времени, число которое показывает, сколько частица находится в адсорбционном состоянии в равновесных условиях. Другими словами просто время адсорбции, и найти его можно используя следующее уравнение записанное ниже:

$$\tau = \tau_0 \cdot exp\left(\frac{Q}{RT}\right)$$

где Q – количество теплоты адсорбции, R - универсальная газовая постоянная, T - абсолютная температура.

Смело можно сказать, что адсорбция имеет место лишь в том случае, когда величины нескольких периодов колебаний адсорбированной молекулы достигает величина τ. Эта величина время, за которое между ней и поверхностью всегда успевает установиться энергетическое равновесие. Чаще всего время протекания физической адсорбции приблизительно равно 10^{-12} - 10^{-6} секунд. В случае с хемосорбцией наоборот время протекания намного больше 10^{2} секунд. Так же хочется добавить, что критерием обратимости адсорбции является время адсорбции.

Глава №2 Определение констант адсорбции

2.1. Решение системы уравнений для определения констант адсорбции с помощью итерационного метода Ньютона и теоремы Штурма

С использованием закона сохранения массы методом характеристик получена следующая система уравнений для определения констант адсорбции.

Рассмотрим систему из четырех уравнений с четырьмя неизвестными вида:

$$\begin{cases} T_f = \left(1 + m\left(\frac{\Gamma}{1+\beta c} + \frac{a}{c}\right)\right)(1-S) \\ T_1 - T_0 = \left(1 + \frac{m\cdot\Gamma}{(1+\beta c)^2}\right)(1-S) \\ T_2 - T_0 = \left(1 + \frac{4m\cdot\Gamma}{(2+\beta c)^2}\right)(1-S) \\ T_3 - T_0 = \left(1 + \frac{16m\cdot\Gamma}{(4+\beta c)^2}\right)(1-S) \end{cases} \quad (1)$$

$T_{f,}$, T_0, T_1, T_2, T_3 - безразмерное время;

$m = \frac{(1-\emptyset)\rho_r}{\emptyset\rho_w}$, где $\emptyset$ - пористость породы, ρ_r - плотность скелета породы, ρ_w - плотность водной фазы;

c - концентрация реагента;

a – константа адсорбция;

S - водонасыщеность недоступного объема пор;

Γ – константа адсорбции;

β – константа адсорбции.

Заметим что переменная a системы (1) содержится лишь в первом уравнении и для того что бы ее найти нужно будет знать такие переменные как Γ, β и S. Выразим переменную a из первого уравнения системы (1).

$$T_f = \left(1 + m\left(\frac{\Gamma}{1+\beta c} + \frac{a}{c}\right)\right)(1-S)$$

Разделим левую часть уравнения на правую часть уравнения и получим:

$$\frac{T_f}{(1-S)} = 1 + m\left(\frac{\Gamma}{1+\beta c} + \frac{a}{c}\right)$$

Применив распределительный закон умножения, раскроем скобки в правой части уравнения, получим:

$$\frac{T_f}{(1-S)} = 1 + \frac{m\Gamma}{1+\beta c} + \frac{am}{c}$$

Нам нужно выразить переменную a, поэтому из правой части уравнения в левую часть уравнения перенесем первое и второе слагаемое, получим:

$$\frac{am}{c} = \frac{T_f}{(1-S)} - 1 - \frac{m\Gamma}{1+\beta c}$$

Найдем общий знаменатель правой части уравнения. Им будет являться выражение $(1-S)(1+\beta c)$ и запишем всю правую часть уравнения под одну общую черту, получим:

$$\frac{am}{c} = \frac{T_f(1+\beta c) - (1-S)(1+\beta c) - m\Gamma(1-S)}{(1-S)(1+\beta c)}$$

Для того что бы в левой части осталась только переменная a достаточно умножить все уравнение на число обратное коэффициенту стоящему перед a. Этим числом является $\frac{c}{m}$, умножив, получим следующий результат:

$$a = \frac{c\left(T_f(1+\beta c) - (1-S)(1+\beta c) - m\Gamma(1-S)\right)}{m(1-S)(1+\beta c)}$$

Для того что бы найти переменные Γ, β и S решим систему из трех уравнений с тремя неизвестными:

$$\begin{cases} T_1 - T_0 = \left(1 + \frac{m\cdot\Gamma}{(1+\beta c)^2}\right)(1-S) \\ T_2 - T_0 = \left(1 + \frac{4m\cdot\Gamma}{(2+\beta c)^2}\right)(1-S) \\ T_3 - T_0 = \left(1 + \frac{16m\cdot\Gamma}{(4+\beta c)^2}\right)(1-S) \end{cases} \quad (2)$$

Для начала из системы (2) выпишем первое уравнение $T_1 - T_0 = \left(1 + \frac{m \cdot \Gamma}{(1+\beta c)^2}\right)(1 - S)$ и найдем из него $(1 - S)$, так как во всех трех уравнениях есть множитель $(1 - S)$. Для этого в первой скобке найдем общий знаменатель, которым будет являться $(1 + \beta c)^2$, и запишем все под общую дробь, получим:

$$T_1 - T_0 = \left(\frac{(1 + \beta c)^2 + m \cdot \Gamma}{(1 + \beta c)^2}\right)(1 - S)$$

После этого разделим левую часть уравнения на правую часть уравнения и получим:

$$(1 - S) = \frac{(T_1 - T_0)(1 + \beta c)^2}{(1 + \beta c)^2 + m \cdot \Gamma}$$

Дальше для решения системы будем использовать значение выражения $(1 - S)$, но для итогового ответа нам нужна переменная S. Выразим S из последней записи получим:

$$S = 1 - \frac{(T_1 - T_0)(1 + \beta c)^2}{(1 + \beta c)^2 + m \cdot \Gamma}$$

Далее из системы (2) выписываем второе уравнение $T_2 - T_0 = \left(1 + \frac{4m \cdot \Gamma}{(2+\beta c)^2}\right)(1 - S)$ и выражаем, неизвестную величину Γ. Для этого в первой скобке находим общий знаменатель, которым является выражение $(2 + \beta c)^2$, и записываем все под общую дробную черту:

$$T_2 - T_0 = \left(\frac{(2 + \beta c)^2 + 4m \cdot \Gamma}{(2 + \beta c)^2}\right)(1 - S)$$

Затем левую часть уравнения делим на второй множитель, получаем:

$$\frac{T_2 - T_0}{(1 - S)} = \left(\frac{(2 + \beta c)^2 + 4m \cdot \Gamma}{(2 + \beta c)^2}\right)$$

Подставив значение $(1 - S)$ которое мы получили выше получим следующее уравнение:

$$\frac{T_2 - T_0}{\frac{(T_1 - T_0)(1 + \beta c)^2}{(1 + \beta c)^2 + m \cdot \Gamma}} = \left(\frac{(2 + \beta c)^2 + 4m \cdot \Gamma}{(2 + \beta c)^2}\right)$$

Выполнив в левой части уравнения деление числителя на знаменатель получим:

$$\frac{(T_2 - T_0)((1+\beta c)^2 + m \cdot \Gamma)}{(T_1 - T_0)(1+\beta c)^2} = \frac{(2+\beta c)^2 + 4m \cdot \Gamma}{(2+\beta c)^2}$$

Раскроем скобки в числителе левой части уравнения получим:

$$\frac{(T_2 - T_0)(1+\beta c)^2 + (T_2 - T_0)m \cdot \Gamma}{(T_1 - T_0)(1+\beta c)^2} = \frac{(2+\beta c)^2 + 4m \cdot \Gamma}{(2+\beta c)^2}$$

Разобьем дроби на несколько слагаемы, получим:

$$\frac{(T_2 - T_0)(1+\beta c)^2}{(T_1 - T_0)(1+\beta c)^2} + \frac{(T_2 - T_0)m \cdot \Gamma}{(T_1 - T_0)(1+\beta c)^2} = \frac{(2+\beta c)^2}{(2+\beta c)^2} + \frac{4m \cdot \Gamma}{(2+\beta c)^2}$$

Так как нам нужно выразить Γ, то собираем все, что содержит неизвестную Γ в левой части уравнения, а все остальное в правую часть уравнения. Помним, что при переносе в другую часть уравнения знак выражения меняется на противоположный знак. Получим:

$$\frac{(T_2 - T_0)m \cdot \Gamma}{(T_1 - T_0)(1+\beta c)^2} - \frac{4m \cdot \Gamma}{(2+\beta c)^2} = \frac{(2+\beta c)^2}{(2+\beta c)^2} - \frac{(T_2 - T_0)(1+\beta c)^2}{(T_1 - T_0)(1+\beta c)^2}$$

Выполнив сокращения в правой части уравнения, оно принимает вид:

$$\frac{(T_2 - T_0)m \cdot \Gamma}{(T_1 - T_0)(1+\beta c)^2} - \frac{4m \cdot \Gamma}{(2+\beta c)^2} = \frac{\cancel{(2+\beta c)^2}}{\cancel{(2+\beta c)^2}} - \frac{(T_2 - T_0)\cancel{(1+\beta c)^2}}{(T_1 - T_0)\cancel{(1+\beta c)^2}}$$

$$=> \frac{(T_2 - T_0)m \cdot \Gamma}{(T_1 - T_0)(1+\beta c)^2} - \frac{4m \cdot \Gamma}{(2+\beta c)^2} = 1 - \frac{(T_2 - T_0)}{(T_1 - T_0)}$$

Найдем общие знаменатели в левой части и правой части уравнения, и приведем их к общему знаменатель. В левой части это выражение $(T_1 -$ $T01+\beta c22+\beta c2$, а в правой части $T1-T0$. Получим:

$$\frac{m \cdot \Gamma(T_2 - T_0)(2+\beta c)^2 - 4m \cdot \Gamma(T_1 - T_0)(1+\beta c)^2}{(T_1 - T_0)(1+\beta c)^2(2+\beta c)^2} = \frac{(T_1 - T_0) - (T_2 - T_0)}{(T_1 - T_0)}$$

Раскрыв скобки в числителе правой части уравнения и приведя подобные слагаемые, получим:

$$\frac{m \cdot \Gamma(T_2 - T_0)(2+\beta c)^2 - 4m \cdot \Gamma(T_1 - T_0)(1+\beta c)^2}{(T_1 - T_0)(1+\beta c)^2(2+\beta c)^2} = \frac{(T_1 - T_2)}{(T_1 - T_0)}$$

Для того чтобы избавиться от знаменателей умножим все уравнение на знаменатель левой части $(T_1 - T_0)(1 + \beta c)^2(2 + \beta c)^2$, и выполнив сокращения получим:

$$m \cdot \Gamma(T_2 - T_0)(2 + \beta c)^2 - 4m \cdot \Gamma(T_1 - T_0)(1 + \beta c)^2 = (T_1 - T_2)(1 + \beta c)^2(2 + \beta c)^2$$

В левой части уравнения вынесем общий множитель $m \cdot \Gamma$ за скобки получим:

$$m \cdot \Gamma\left((T_2 - T_0)(2 + \beta c)^2 - 4(T_1 - T_0)(1 + \beta c)^2\right) = (T_1 - T_2)(1 + \beta c)^2(2 + \beta c)^2$$

Теперь выразим из данного уравнения неизвестную *Г*, для этого разделим правую часть уравнения на выражение $m\left((T_2 - T_0)(2 + \beta c)^2 - 4(T_1 - T_0)(1 + \beta c)^2\right)$, получим:

$$\Gamma = \frac{(T_1 - T_2)(1 + \beta c)^2(2 + \beta c)^2}{m\left((T_2 - T_0)(2 + \beta c)^2 - 4(T_1 - T_0)(1 + \beta c)^2\right)}$$

Так как мы выразили неизвестную *Г*, то ее значение можно подставить в выражение $(1 - S) = \frac{(T_1 - T_0)(1+\beta c)^2}{(1+\beta c)^2 + m \cdot \Gamma}$. Подставив, получим:

$$(1 - S) = \frac{(T_1 - T_0)(1 + \beta c)^2}{(1 + \beta c)^2 + \frac{m \cdot (T_1 - T_2)(1 + \beta c)^2(2 + \beta c)^2}{m\left((T_2 - T_0)(2 + \beta c)^2 - 4(T_1 - T_0)(1 + \beta c)^2\right)}}$$

Вынесем общий множитель $(1 + \beta c)^2$ за скобки уравнение примет вид:

$$(1 - S) = \frac{(T_1 - T_0)(1 + \beta c)^2}{(1 + \beta c)^2\left(1 + \frac{m \cdot (T_1 - T_2)(2 + \beta c)^2}{m\left((T_2 - T_0)(2 + \beta c)^2 - 4(T_1 - T_0)(1 + \beta c)^2\right)}\right)}$$

Выполнив некоторые сокращения, уравнение принимает следующий вид:

$$(1 - S) = \frac{(T_1 - T_0)\cancel{(1 + \beta c)^2}}{\cancel{(1 + \beta c)^2}\left(1 + \frac{\cancel{m} \cdot (T_1 - T_2)(2 + \beta c)^2}{\cancel{m}\left((T_2 - T_0)(2 + \beta c)^2 - 4(T_1 - T_0)(1 + \beta c)^2\right)}\right)} =>$$

$$(1-S)=\frac{(T_1-T_0)}{1+\frac{(T_1-T_2)(2+\beta c)^2}{(T_2-T_0)(2+\beta c)^2-4(T_1-T_0)(1+\beta c)^2}}$$

Приведем слагаемые в знаменателе правой части уравнения к общему знаменателю, получим:

$$(1-S)=\frac{(T_1-T_0)}{\frac{(T_2-T_0)(2+\beta c)^2-4(T_1-T_0)(1+\beta c)^2+(T_1-T_2)(2+\beta c)^2}{(T_2-T_0)(2+\beta c)^2-4(T_1-T_0)(1+\beta c)^2}}$$

Разделим числитель правой части уравнения на знаменатель правой части уравнения получим:

$$(1-S)=\frac{(T_1-T_0)\big((T_2-T_0)(2+\beta c)^2-4(T_1-T_0)(1+\beta c)^2\big)}{(T_2-T_0)(2+\beta c)^2-4(T_1-T_0)(1+\beta c)^2+(T_1-T_2)(2+\beta c)^2}$$

В знаменателе правой части уравнения вынесем общий множитель $(2+\beta c)^2$ за скобки получим:

$$(1-S)=\frac{(T_1-T_0)\big((T_2-T_0)(2+\beta c)^2-4(T_1-T_0)(1+\beta c)^2\big)}{(2+\beta c)^2(T_2-T_0+T_1-T_2)-4(T_1-T_0)(1+\beta c)^2}$$

Выполнив приведение подобных слагаемых, получим:

$$(1-S)=\frac{(T_1-T_0)\big((T_2-T_0)(2+\beta c)^2-4(T_1-T_0)(1+\beta c)^2\big)}{(2+\beta c)^2(T_1-T_0)-4(T_1-T_0)(1+\beta c)^2}$$

В знаменателе правой части уравнения вынесем общий множитель (T_1-T_0) за скобки получим:

$$(1-S)=\frac{(T_1-T_0)\big((T_2-T_0)(2+\beta c)^2-4(T_1-T_0)(1+\beta c)^2\big)}{(T_1-T_0)((2+\beta c)^2-4(1+\beta c)^2)}$$

Выполнив сокращения уравнение, принимает следующий вид:

$$(1-S)=\frac{\cancel{(T_1-T_0)}\big((T_2-T_0)(2+\beta c)^2-4(T_1-T_0)(1+\beta c)^2\big)}{\cancel{(T_1-T_0)}((2+\beta c)^2-4(1+\beta c)^2)}$$

$$=>(1-S)=\frac{(T_2-T_0)(2+\beta c)^2-4(T_1-T_0)(1+\beta c)^2}{(2+\beta c)^2-4(1+\beta c)^2}$$

Заметим что в правой части уравнения в знаменателе формула разности квадратов, применив ее, получим следующее уравнение:

$$(1-S)=\frac{(T_2-T_0)(2+\beta c)^2-4(T_1-T_0)(1+\beta c)^2}{\big(2+\beta c-2(1+\beta c)\big)\big(2+\beta c+2(1+\beta c)\big)}$$

Раскрыв в знаменателе правой части уравнения скобки получим:

$$(1-S)=\frac{(T_2-T_0)(2+\beta c)^2-4(T_1-T_0)(1+\beta c)^2}{(2+\beta c-2-2\beta c)(2+\beta c+2+\beta c)}$$

Приведя подобные слагаемые, получим:

$$(1-S)=\frac{(T_2-T_0)(2+\beta c)^2-4(T_1-T_0)(1+\beta c)^2}{-(4+3\beta c)\beta c}$$

И так, из первого уравнения системы (2) было получено выражение $(1-S)$, а из второго уравнения системы (2) была получена неизвестная $Г$. Теперь, записываем третье уравнение системы (2), и найдем из него β:

$$T_3-T_0=\left(1+\frac{16m\cdot Г}{(4+\beta c)^2}\right)(1-S)$$

Для этого делим левую часть уравнения на выражение $(1-S)$, получим:

$$\frac{T_3-T_0}{1-S}=1+\frac{16m\cdot Г}{(4+\beta c)^2}$$

Подставим найденные выше значения $1-S$ и $Г$, получим:

$$\frac{T_3-T_0}{\frac{(T_2-T_0)(2+\beta c)^2-4(T_1-T_0)(1+\beta c)^2}{-(4+3\beta c)\beta c}} = 1+\frac{\frac{16m(T_1-T_2)(1+\beta c)^2(2+\beta c)^2}{m\big((T_2-T_0)(2+\beta c)^2-4(T_1-T_0)(1+\beta c)^2\big)}}{(4+\beta c)^2}$$

Разделим числитель на знаменатель в левой и правой части, получим:

$$\frac{-(T_3-T_0)(4+3\beta c)\beta c}{(T_2-T_0)(2+\beta c)^2-4(T_1-T_0)(1+\beta c)^2} = 1+\frac{16m(T_1-T_2)(1+\beta c)^2(2+\beta c)^2}{m(4+\beta c)^2\big((T_2-T_0)(2+\beta c)^2-4(T_1-T_0)(1+\beta c)^2\big)}$$

Сократим числитель, и знаменатель правой части на m, получим

$$\frac{-(T_3 - T_0)(4 + 3\beta c)\beta c}{(T_2 - T_0)(2 + \beta c)^2 - 4(T_1 - T_0)(1 + \beta c)^2}$$
$$= 1 + \frac{16(T_1 - T_2)(1 + \beta c)^2(2 + \beta c)^2}{(4 + \beta c)^2\big((T_2 - T_0)(2 + \beta c)^2 - 4(T_1 - T_0)(1 + \beta c)^2\big)}$$

Что бы избавиться от знаменателей умножим все уравнение на выражение $(4 + \beta c)^2\big((T_2 - T_0)(2 + \beta c)^2 - 4(T_1 - T_0)(1 + \beta c)^2\big)$, получим:

$$-(T_3 - T_0)(4 + 3\beta c)(4 + \beta c)^2\beta c$$
$$= (4 + \beta c)^2\big((T_2 - T_0)(2 + \beta c)^2 - 4(T_1 - T_0)(1 + \beta c)^2\big)$$
$$+ 16(T_1 - T_2)(1 + \beta c)^2(2 + \beta c)^2$$

Собрав все выражения в одной части уравнения, получим:

$$\underbrace{(4 + \beta c)^2\big((T_2 - T_0)(2 + \beta c)^2 - 4(T_1 - T_0)(1 + \beta c)^2\big)}_{1}$$
$$+ \underbrace{16(T_1 - T_2)(1 + \beta c)^2(2 + \beta c)^2}_{2}$$
$$+ \underbrace{(T_3 - T_0)(4 + 3\beta c)(4 + \beta c)^2\beta c}_{3} = 0$$

Выпишем каждое слагаемое уравнения отдельно и раскроем скобки.

1 слагаемое

$$(4 + \beta c)^2\big((T_2 - T_0)(2 + \beta c)^2 - 4(T_1 - T_0)(1 + \beta c)^2\big)$$

Для начала возведем в квадрат все что возможно, получим:

$$(16 + 8\beta c + \beta^2c^2)\big((T_2 - T_0)(4 + 4\beta c + \beta^2c^2) - 4(T_1 - T_0)(1 + 2\beta c + \beta^2c^2)\big)$$

Раскроем скобки в нутрии второго множителя, получим:

$$(16 + 8\beta c + \beta^2c^2)\big(4(T_2 - T_0) + \beta c \cdot 4(T_2 - T_0) + \beta^2c^2 \cdot (T_2 - T_0)$$
$$- 4(T_1 - T_0) - \beta c \cdot 8(T_1 - T_0) - \beta^2c^2 \cdot 4(T_1 - T_0)\big)$$

Вынесем общий множитель 4, βc и β^2c^2 за скобки получим:

$$(16 + 8\beta c + \beta^2c^2)\big(\beta^2c^2 \cdot (T_2 - T_0 - 4T_1 + 4T_0) + \beta c$$
$$\cdot (4T_2 - 4T_0 - 8T_1 + 8T_0) + 4(T_2 - T_0 - T_1 + T_0)\big)$$

Приведя подобные слагаемые, получим:

$$(16 + 8\beta c + \beta^2c^2)\big(\beta^2c^2 \cdot (T_2 - 4T_1 + 3T_0) + \beta c \cdot (4T_2 - 8T_1 + 4T_0)$$
$$+ 4(T_2 - T_1)\big)$$

Применив распределительный закон умножения, получим:

$$\beta^2c^2(16T_2 - 64T_1 + 48T_0) + \beta c(64T_2 - 128T_1 + 64T_0) + 64(T_2 - T_1)$$
$$+ \beta^3c^3(8T_2 - 32T_1 + 24T_0) + \beta^2c^2(32T_2 - 64T_1 + 32T_0)$$
$$+ \beta c(32T_2 - 32T_1) + \beta^4c^4(T_2 - 4T_1 + 3T_0)$$
$$+ \beta^3c^3(4T_2 - 8T_1 + 4T_0) + \beta^2c^2(4T_2 - 4T_1)$$

Вынесем за скобки общие множители β^3c^3, β^2c^2 и βc, получим:

$$\beta^4c^4(T_2 - 4T_1 + 3T_0) + \beta^3c^3(8T_2 - 32T_1 + 24T_0 + 4T_2 - 8T_1 + 4T_0)$$
$$+ \beta^2c^2(16T_2 - 64T_1 + 48T_0 + 32T_2 - 64T_1 + 32T_0 + 4T_2 - 4T_1)$$
$$+ \beta c(64T_2 - 128T_1 + 64T_0 + 32T_2 - 32T_1) + 64(T_2 - T_1)$$

Приведя подобные слагаемые, получим:

$$\beta^4c^4(T_2 - 4T_1 + 3T_0) + \beta^3c^3(12T_2 - 40T_1 + 28T_0)$$
$$+ \beta^2c^2(52T_2 - 132T_1 + 80T_0) + \beta c(96T_2 - 160T_1 + 64T_0)$$
$$+ 64(T_2 - T_1)$$

2 слагаемое

$$16(T_1 - T_2)(1 + \beta c)^2(2 + \beta c)^2$$

Для начала возведем в квадрат все что возможно, получим:

$$16(T_1 - T_2)(1 + 2\beta c + \beta^2c^2)(4 + 4\beta c + \beta^2c^2)$$

Применив распределительный закон умножения, умножим вторую скобку на третью, получим:

$$16(T_1 - T_2)(4 + 4\beta c + \beta^2c^2 + 8\beta c + 8\beta^2c^2 + 2\beta^3c^3 + 4\beta^2c^2 + 4\beta^3c^3$$
$$+ \beta^4c^4)$$

Приведя подобные слагаемые, получим:

$$16(T_1 - T_2)(\beta^4c^4 + 6\beta^3c^3 + 13\beta^2c^2 + 12\beta c + 4)$$

Применив распределительный закон умножения, получим следующий результат:

$$\beta^4c^4(16T_1 - 16T_2) + \beta^3c^3(96T_1 - 96T_2) + \beta^2c^2(208T_1 - 208T_2)$$
$$+ \beta c(192T_1 - 192T_2) + 64(T_1 - T_2)$$

3 слагаемое

$$(T_3 - T_0)(4 + 3\beta c)(4 + \beta c)^2\beta c$$

Для начала возведем в квадрат все что возможно, и применив распределительный закон умножения, умножим вторую скобку на множитель βc, получим:

$$(T_3 - T_0)(4\beta c + 3\beta^2 c^2)(16 + 8\beta c + \beta^2 c^2)$$

Применив распределительный закон умножения, умножим вторую скобку на третью, получим:

$$(T_3 - T_0)(64\beta c + 32\beta^2 c^2 + 4\beta^3 c^3 + 48\beta^2 c^2 + 24\beta^3 c^3 + 3\beta^4 c^4)$$

Применив распределительный закон умножения, и приведя подобные слагаемые, получим:

$$\beta^4 c^4(3T_3 - 13T_0) + \beta^3 c^3(28T_3 - 28T_0) + \beta^2 c^2(80T_3 - 80T_0) \\ + \ \beta c(64T_3 - 64T_0)$$

После того как в каждом из трех слагаемых раскрыты скобки, запишем получившиеся результаты в одно уравнение:

$$\beta^4 c^4(T_2 - 4T_1 + 3T_0) + \beta^3 c^3(12T_2 - 40T_1 + 28T_0) \\ + \beta^2 c^2(52T_2 - 132T_1 + 80T_0) + \ \beta c(96T_2 - 160T_1 + 64T_0) \\ + 64(T_2 - T_1) + \beta^4 c^4(16T_1 - 16T_2) + \beta^3 c^3(96T_1 - 96T_2) \\ + \beta^2 c^2(208T_1 - 208T_2) + \ \beta c(192T_1 - 192T_2) + 64(T_1 - T_2) \\ + \beta^4 c^4(3T_3 - 13T_0) + \beta^3 c^3(28T_3 - 28T_0) + \beta^2 c^2(80T_3 - 80T_0) \\ + \ \beta c(64T_3 - 64T_0) = 0$$

Выполнив вынесение общего множителя за скобки, и приведя подобные слагаемые, было получено уравнение четвертой степени:

$$\beta^4 c^4(3T_3 - 15T_2 + 12T_1) + \beta^3 c^3(28T_3 - 84T_2 + 56T_1) \\ + \beta^2 c^2(80T_3 - 156T_2 + 76T_1) + \ \beta c(64T_3 - 96T_2 + 32T_1) = 0$$

2.2. Алгоритм расчета констант адсорбции

Для решения данного уравнения была написана программа на языке программирования «Delphi». Алгоритм расчета констант адсорбции приведен ниже:

1. Задаем параметры: концентрация c_0, времена $T_{f,}$, T_0, T_1, T_2, T_3.
2. Задаем коэффициенты полученного уравнения четвертой степени:

$$A = c^4(3T_3 - 15T_2 + 12T_1);$$
$$B = c^3(28T_3 - 84T_2 + 56T_1);$$
$$C = c^2(80T_3 - 156T_2 + 76T_1);$$
$$D = c(64T_3 - 96T_2 + 32T_1).$$

3. Задаем интервал, на котором расположены действительные корни уравнения четвертой степени.
4. Находим полиномы ряда «Штурма».
5. Определяем число смены знаков в последовательности полиномов в крайних точка заданного интервала.
6. Считаем значение ряда «Штурма» и число действительных корней (при нулевом числе действительных корней расчет завершается).
7. Итерационным методом «Ньютона» определяем корень уравнения четвертой степени.
8. Понижаем степень уравнения с помощью алгоритма последовательного деления многочленов «Евклида» и находим следующий корень итерационным методом «Ньютона» (процедура повторяется до тех пор, пока не будут найдены все действительные корни, число которых было установлено при помощи теоремы «Штурма»).
9. Для каждого значения параметра β находим значения оставшихся констант адсорбции.
10. Из этих наборов решений выбираем физически непротиворечивое решение.

Ниже приведен листинг программы на языке программирования «Delphi»:

```
program iteration;


var  T1, T0, T2, T3, Tf, C0, m, eps: real;
```

```
    i, j, n: integer;
    beta1, beta2, f1, df1, A, B, C, D, E, F, Ast, Bst, Cst, Dst: array [1..4]
of real;
    beta, g, S, Am, V1, V2, V3: array [1..5] of real;
    z: array [1..4, 1..5] of real;
    St: array [1..2, 1..6] of real;
    x: array [1..2] of real;
    W: array [1..2] of integer;
    label 1, 2;
   begin
    m:=0.263;
    T0:=10;
    T1:=8.2;
    T2:=9;
    T3:=9.5;
    Tf:=0.8;
    C0:=5e-4;
    for i:=1 to 4 do
    for j:=1 to 5 do
      z[i,j]:=1;
    for i:=2 to 4 do
    for j:=1 to (i-1) do
      z[i,j]:=0;
    A[1]:=0;
    B[1]:=C0*C0*C0*C0*(3*T3-15*T2+12*T1);
    C[1]:=C0*C0*C0*(28*T3-84*T2+56*T1);
    D[1]:=C0*C0*(80*T3-156*T2+76*T1);
    E[1]:=C0*(64*T3-96*T2+32*T1);
    F[1]:=0;
```

```
x[1]:=-10000;
x[2]:=10000;
Ast[1]:=(3*C[1]*C[1]-8*B[1]*D[1])/(16*B[1]);
Bst[1]:=(C[1]*D[1]-6*B[1]*E[1])/(8*B[1]);
Cst[1]:=(C[1]*E[1]-16*B[1]*F[1])/(16*B[1]);
Ast[2]:=(Bst[1]*(3*C[1]*Ast[1]-4*B[1]*Bst[1])-
Ast[1]*(2*D[1]*Ast[1]-4*B[1]*Cst[1]))/(Ast[1]*Ast[1]);
Bst[2]:=(Cst[1]*(3*C[1]*Ast[1]-4*B[1]*Bst[1])-
Ast[1]*Ast[1]*E[1])/(Ast[1]*Ast[1]);
for i:=1 to 2 do
begin
 St[i,
1]:=A[1]*x[i]*x[i]*x[i]*x[i]*x[i]+B[1]*x[i]*x[i]*x[i]*x[i]+C[1]*x[i]*x[i]*x
[i]+D[1]*x[i]*x[i]+E[1]*x[i]+F[1];
 St[i,
2]:=5*A[1]*x[i]*x[i]*x[i]*x[i]+4*B[1]*x[i]*x[i]*x[i]+3*C[1]*x[i]*x[i]+2*
D[1]*x[i]+E[1];
 St[i, 3]:=Ast[1]*x[i]*x[i]+Bst[1]*x[1]+Cst[1];
 St[i, 4]:=Ast[2]*x[1]+Bst[2];
 St[i,                    5]:=(Bst[2]*(Bst[1]*Ast[2]-Ast[1]*Bst[2])-
Ast[2]*Ast[2]*Cst[1])/(Ast[2]*Ast[2]);
end;
for i:=1 to 2 do
begin
 W[i]:=0;
 for j:=1 to 4 do
  if ((St[i, j+1]>0) and (St[i, j]<0)) or ((St[i, j+1]<0) and (St[i, j]>0))
then
   W[i]:=W[i]+1;
end;
```

```
        n:=W[1]-W[2];
        writeln ('number of roots ', n);
        readln;

        if (n=0) then goto 2;
        for i:=1 to 4 do
        begin
            if (i=2) then
            begin
                B[2]:=A[1];
                C[2]:=B[1]+A[1]*beta[1];
                D[2]:=C[1]+B[1]*beta[1]+A[1]*beta[1]*beta[1];

E[2]:=D[1]+C[1]*beta[1]+B[1]*beta[1]*beta[1]+A[1]*beta[1]*beta[1]*beta
[1];

F[2]:=E[1]+D[1]*beta[1]+C[1]*beta[1]*beta[1]+B[1]*beta[1]*beta[1]*beta[
1]+A[1]*beta[1]*beta[1]*beta[1]*beta[1];
            end;

            if (i=3) then
            begin
                C[3]:=A[1];
                D[3]:=B[1]+A[1]*(beta[1]+beta[2]);

E[3]:=C[1]+B[1]*(beta[1]+beta[2])+A[1]*(beta[1]*beta[1]+beta[2]*beta[2]
+beta[1]*beta[2]);

F[3]:=D[1]+C[1]*(beta[1]+beta[2])+B[1]*(beta[1]*beta[1]+beta[2]*beta[2]
```

```
+beta[1]*beta[2])+A[1]*(beta[1]*beta[1]*beta[1]+beta[2]*beta[2]*beta[2]+
beta[1]*beta[2]*beta[2]+beta[2]*beta[1]*beta[1]);
          end;

          if (i=4) then
          begin
             D[4]:=A[1];
             E[4]:=B[1]+A[1]*(beta[1]+beta[2]+beta[3]);

F[4]:=C[1]+B[1]*(beta[1]+beta[2]+beta[3])+A[1]*(beta[1]*beta[1]+beta[2]
*beta[2]+beta[3]*beta[3]+beta[1]*beta[2]+beta[1]*beta[3]+beta[2]*beta[3])
;
          end;
          beta1[i]:=100;
          eps:=15;
          while (eps>1e-5) do
          begin

f1[i]:=z[i,1]*A[i]*beta1[i]*beta1[i]*beta1[i]*beta1[i]*beta1[i]+z[i,2]*B[i]*b
eta1[i]*beta1[i]*beta1[i]*beta1[i]+z[i,3]*C[i]*beta1[i]*beta1[i]*beta1[i]+z[i
,4]*D[i]*beta1[i]*beta1[i]+z[i,5]*E[i]*beta1[i]+F[i];

df1[i]:=5*z[i,1]*A[i]*beta1[i]*beta1[i]*beta1[i]*beta1[i]+4*z[i,2]*B[i]*bet
a1[i]*beta1[i]*beta1[i]+3*z[i,3]*C[i]*beta1[i]*beta1[i]+2*z[i,4]*D[i]*beta1
[i]+z[i,5]*E[i];
             beta2[i]:=beta1[i]-f1[i]/df1[i];
             eps:=abs((beta2[i]-beta1[i]));
             beta1[i]:=beta2[i];
          end;
          beta[i]:=beta2[i];
```

```
g[i]:=((1+beta[i]*C0)*(1+beta[i]*C0)*(2+beta[i]*C0)*(2+beta[i]*C0)*(T1-
T2))/(m*((T2-T0)*(2+beta[i]*C0)*(2+beta[i]*C0)-4*(T1-
T0)*((1+beta[i]*C0))*((1+beta[i]*C0))));
            S[i]:=1+((T2-T0)*(2+beta[i]*C0)*(2+beta[i]*C0)-4*(T1-
T0)*((1+beta[i]*C0))*((1+beta[i]*C0)))/((4+3*beta[i]*C0)*beta[i]*C0);
            Am[i]:=(Tf*(1+beta[i]*C0)*C0-(1-
S[i])*(1+beta[i]*C0+m*g[i])*C0)/(m*(1-S[i])*(1+beta[i]*C0));

        end;
         1:

        for i:=1 to 4 do
        begin
        V1[i]:=(1+m*g[i]/((1+beta[i]*C0)*(1+beta[i]*C0)))*(1-S[i]);
        V2[i]:=(1+4*m*g[i]/((2+beta[i]*C0)*(2+beta[i]*C0)))*(1-S[i]);
        V3[i]:=(1+16*m*g[i]/((4+beta[i]*C0)*(4+beta[i]*C0)))*(1-S[i]);
        writeln('solution number ', i:1);
        writeln(V1[i], ' ', V2[i], ' ', V3[i] );
        end;
       for i:=1 to 4 do
        begin
            writeln('solution number ', i:1);
            writeln(beta[i], ' ', g[i], ' ', S[i], ' ', Am[i] );
            writeln(' ');
        end;
       2:
        readln;
end.
```

Для определения действительных корней по методу Штурма требуется составить систему Штурма. Для этого обозначим коэффициенты, стоящие перед степенями β за буквы A, B, C, D. Тогда уравнение примет следующий вид:

$$f(\beta) = A\beta^4 + B\beta^3 + C\beta^2 + D\,\beta$$

Где $A = c^4(3T_3 - 15T_2 + 12T_1)$, $B = c^3(28T_3 - 84T_2 + 56T_1)$, $C = c^2(80T_3 - 156T_2 + 76T_1)$, $D = c(64T_3 - 96T_2 + 32T_1)$.

Что бы составить систему Штурма нужно найти $f(\beta)$, $f_1(\beta)$, $f_2(\beta)$, $f_3(\beta)$ и $f_4(\beta)$.

$f(\beta) = A\beta^4 + B\beta^3 + C\beta^2 + D\,\beta$ – сама функция;

$f_1(\beta) = f^I(\beta) = 4A\beta^3 + 3B\beta^2 + 2C\beta + D$ – производная от функции;

$f_2(\beta) = \frac{3B^2 - 8AC}{16A}\beta^2 + \frac{BC - 6AD}{8A}\beta + \frac{BD - 16AE}{16A}$ - остаток от деления функции на производную от этой функции взятый с противоположным знаком;

$f_3(\beta) = \frac{B'(3BA' - 4AB') - A\prime(2CA' - 4AC\prime)}{A\prime^2}\beta + \frac{C^{'}(3BA' - 4AB') - A\prime^2 D}{A\prime^2}$ - остаток от деления производной функции на $f_2(\beta)$ взятый с противоположным знаком, где $A' = \frac{3B^2 - 8AC}{16A}$, $B' = \frac{BC - 6AD}{8A}$, а $C' = \frac{BD - 16AE}{16A}$;

$f_4(\beta) = \frac{B^{''}(B'A'' - A'B'') - A\prime\prime^2 C\prime}{A\prime\prime^2}$ - остаток от деления $f_2(\beta)$ на $f_3(\beta)$ взятый с противоположным знаком, где $A'' = \frac{B'(3BA' - 4AB') - A\prime(2CA' - 4AC\prime)}{A\prime^2}$, $B'' = \frac{C^{'}(3BA' - 4AB') - A\prime^2 D}{A\prime^2}$.

Затем определяется знак этих многочленов путем подстановки +∞ и -∞ поочередно в каждую из получившихся функций. Сколько перемен знаков было между получившимися функциями, это и есть количество действительных корней уравнения.

После того как найдены все действительные корни нужно подставить значения β в полученные выражения и вычислить оставшиеся неизвестные:

$$\begin{cases} a = \dfrac{c\left(T_f(1+\beta c) - (1-S)(1+\beta c) - m\Gamma(1-S)\right)}{m(1-S)(1+\beta c)} \\ S = 1 - \dfrac{(T_1 - T_0)(1+\beta c)^2}{(1+\beta c)^2 + m \cdot \Gamma} \\ \Gamma = \dfrac{(T_1 - T_2)(1+\beta c)^2(2+\beta c)^2}{m\left((T_2 - T_0)(2+\beta c)^2 - 4(T_1 - T_0)(1+\beta c)^2\right)} \end{cases}$$

Выводы

В ходе выполнения данной рабаты были сделаны следующие выводы:

1. Изучение литературы по данной теме продемонстрировало наличие необходимости учёта адсорбции реагента и недоступного объёма пор при моделировании или проведения экспериментов по фильтрации воды в пористой среде, содержащей индикаторные трассеры. При отсутствии учёта данных процессов возможна неверная интерпретация экспериментальных данных и результатов моделирования.
2. В процессе определения характеристик, соответствующих различным значениям концентрации реагента в потоке, вполне возможно рассчитать временной отрезок до регистрации содержания реагента на выходе, а так же временные отрезки до снижения значения концентраций до определённых пределов.
3. Наличие экспериментальных данных по времени регистрации определённых значений концентраций позволяет рассчитать параметры адсорбции путём решения системы нелинейных алгебраических уравнений.

Заключение

В данной работе была рассмотрена тема «Определение констант адсорбции в экспериментальных исследованиях», в которой большое внимание было уделено методу определения константы абсорбции-удерживания реагентов в керновом материале без его разрушения, а так же методу определения недоступного объема пор для фильтрации растворов высокомолекулярных веществ.

Использование языка программирования «Delphi» позволяет вычислить то, что вручную сосчитать практически невозможно; компьютер является средством, позволяющим вычислять и перерабатывать огромные объемы данных, и вычислять константы, даже если они имеют огромные числа. При использовании компьютерной поддержки в процессе решения поставленной задачи, происходит существенное упрощение на первый взгляд сложных заданий: логика, знание структуры языка и математических алгоритмов, необходимых для качественного написания программы в языке программирования.

Применение методов описанных в работе позволяет решать целый спектр новых трудоёмких, но интересных задач: от упрощения решения прямых задач, до выполнения вычислений в обратной задаче с помощью языка программирования.

Перед нами была поставлена задача, не только изучить теоретические сведения, но определить параметры адсорбции и недоступного объема пор по известному характеру движения оторочки, а так же произвести обработку экспериментальных данных и, конечно же, определить искомые параметры.

Список литературы

1. Адсорбция [Электронный ресурс] // Режим доступа: http://ru.wikipedia.org
2. Адсорбция. Методы исследования [Электронный ресурс] // Режим доступа: https://chem21.info
3. Адсорбция. Физическая и химическая адсорбция [Электронный ресурс] // Режим доступа: https://sites.google.com
4. Адсорбция и абсорбция [Электронный ресурс] // Режим доступа: https://chem21.info
5. Грег С., Синг К. Адсорбция, удельная поверхность, пористость [Текст] - М.: Мир, 1984.
6. Ентов В. М., Зазовский А. Ф. Адсорбционные явления в пористых средах [Текст] -М.: Недра, 1989.
7. Ентов В.М. Физико-химическая гидродинамика процессов в пористых средах [Текст] // Успехи механики, 1981.
8. Кандыбин А.И. Моделирование циклических адсорбционных процессов разделения водородсодержащих газовых смесей [Текст] -М.: Наука, 1989.
9. Константы адсорбционного равновесия [Электронный ресурс] // Режим доступа: https://chem21.info
10. Корн Г., Корн Т. Системы уравнений [Текст] -М.: Наука, 1974.
11. Кострикин А. И. Введение в алгебру [Текст] -М.: Физматлит, 2004.
12. Курош А.Г. Курс высшей алгебры [Текст] -М.: Наука, 1965.
13. Метод Ньютона для систем нелинейных уравнений [Электронный ресурс] // Режим доступа: https://algowiki-project.org
14. Метод Штурма. Определение корней многочлена [Электронный ресурс] // Режим доступа: http://kontromat.ru

15. Метод Штурма и его применение [Электронный ресурс] // Режим доступа: https://sibac.info

16. Методы решения систем нелинейных уравнений [Электронный ресурс] // Режим доступа: http://mathhelpplanet.com

17. Рочестера К. Адсорбция из растворов на поверхностях твердых тел [Текст] -М.: Мир, 1986.

18. Численные методы решения систем нелинейных уравнений [Электронный ресурс] // Режим доступа: https://habr.com

19. Шафаревич И.Р. О решении уравнений высших степеней (метод Штурма) [Текст] -М.: Физматлит, 1954.

20. Шумяцкий Ю.И. Промышленные адсорбционные процессы [Текст] -М.: Колосс, 2009.