Е. В. Ферапонтов, С. П. Царев, Системы гидродинамического типа, возникающие в газовой хроматографии. Инварианты Римана и точные решения, *Матем. моделирование*, 1991, том 3, номер 2, 82–91

Математическое моделирование

том 3 номер 2 / 1991

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ ЯВЛЕНИЙ И ПРОЦЕССОВ

СИСТЕМЫ ГИДРОДИНАМИЧЕСКОГО ТИПА, ВОЗНИКАЮЩИЕ В ГАЗОВОЙ ХРОМАТОГРАФИИ. ИНВАРИАНТЫ РИМАНА И ТОЧНЫЕ РЕШЕНИЯ

© *Е.В. Ферапонтов, С.П. Царев*

Математический институт им. В.А. Стеклова АН СССР, Москва

Изучен ряд изотерм адсорбции, для которых соответствующая система уравнений хроматографии приводится к инвариантам Римана. Доказана интегрируемость рассматриваемых систем, получены их точные решения.

SYSTEMS OF HYDRODYNAMIC TYPE, ARISING IN GAS CHROMATOGRAPHY. RIEMANN INVARIANTS AND EXACT SOLUTIONS

E.V. Ferapontov, S.P. Tsarev

Steklov Mathematical Institute,
USSR Academy of Sciences, Moscow

A number of adsorption isoterms is studied, for which corresponding gas chromatography equations posess Riemann invariants. We prove integrability of systems in question and construct their exact solutions.

Введение. Уравнения, описывающие прохождение n-компонентной смеси веществ по хроматографической колонке в пренебрежении диффузией и временем установления сорбционного равновесия имеют вид законов сохранения количества вещества для каждой из компонент (см. [2, 6]):

$$V_0 u^i_x + (u^i + a^i)_t = 0, \quad i = 1, \ldots, n.$$

Здесь V_0 – скорость движения газа-носителя, предполагаемая постоянной, $u^i = u^i(x, t)$ – концентрация i-й компоненты смеси в газе-носителе, a^i – концентрация сорбированной i-й компоненты. Перейдя к новой независимой переменной $\tau = V_0 t - x$, получим

$$u^i_x + (a^i)_\tau = 0.$$

В таком виде уравнения хроматографии и будут рассматриваться в дальнейшем. Для того, чтобы система приняла замкнутый вид, необходимо задать изотерму сорбции, т.е. явный вид зависимости $a^i = a^i(u)$. Простейшей и наиболее изучен-ной является классическая изотерма Ленгмюра

$$a^i = \frac{\Gamma_i u^i}{1 + \sum\limits_{p=1}^{n} \Gamma_p u^p}, \tag{1}$$

где постоянные Γ_i предполагаются различными. Уравнения хроматографии с ленгмюровской изотермой сорбции допускают инварианты Римана, т.е. переменные R^i, в которых матрица системы становится диагональной ([2], с. 661):

$$R^i_x + \lambda^i(R) R^i_\tau = 0, \quad i = 1, \ldots, n, \tag{2}$$

что позволяет проинтегрировать их (см. п. 2 настоящей работы). Возникает естественный вопрос: какие еще изотермы приводят к диагонализируемым системам? В результате проведенного авторами анализа был найден ряд изотерм, для которых уравнения хроматографии также допускают инварианты Римана:

1. **Изотерма Ленгмюра с учетом диссоциации** ([1], с. 246):

$$a^i = \frac{(\Gamma_i u^i)^{1/r}}{1 + \sum\limits_{p=1}^{n} (\Gamma_p u^p)^{1/r}}, \tag{3}$$

где $r = 1, 2, \ldots$ – число частиц, на которые диссоциирует каждое из веществ при адсорбции.

2. **Экспоненциальная изотерма**:

$$a^i = \frac{\alpha_i \exp(\Gamma_i u^i)}{1 + \sum\limits_{p=1}^{n} \alpha_p \exp(\Gamma_p u^p)}, \quad \alpha_i = \text{const}. \tag{4}$$

Несмотря на внешнюю схожесть с классической изотермой Ленгмюра (1), изотермы (3) и (4) приводят к существенно более сложным системам, диагональный вид (2) для них не удается явно выписать, хотя инварианты Римана и существуют. Значительно более просты следующие изотермы:

$$a^i = \frac{\Gamma_i u^i}{[1 + \sum\limits_{p=1}^{n} (\Gamma_p u^p)^{1/r}]^r}, \quad r = \text{const}, \tag{5}$$

и степенная изотерма (многокомпонентное обобщение степенной изотермы Фрумкина $a(u) = \Gamma u^{1/n}$):

$$a^i = \frac{\Gamma_i u^i}{\prod\limits_{p=1}^{n} (\Gamma_p u^p)^{\beta_p}} \tag{6}$$

($\beta_p > 0$ – произвольные постоянные).

Соответствующие изотермам (5), (6) системы также допускают инварианты Римана R^i, причем, в отличие от (3), (4), они могут быть явно выписаны в виде (2). Это позволяет предъявить для них достаточно широкий запас точных решений (см. § 5, 6).

Структура работы. В п. 1 приводится простой и удобный дифференциально-геометрический критерий диагонализируемости системы гидродинамического типа. Процедура приведения к инвариантам Римана и интегрирование уравнений хроматографии с классической изотермой Ленгмюра (1) описаны в п. 2. В п. 3

и п. 4 приведены выражения инвариантов Римана для уравнений хроматографии с изотермами (3) и (4). Наконец, п. 5 и п. 6 посвящены изотермам (5), (6): получена явная запись соответствующих систем в инвариантах Римана и построен достаточно широкий запас точных решений, параметризуемый алгебраическими кривыми степени n.

Авторы выражают глубокую благодарность Н.Х. Ибрагимову и участникам семинара по групповому анализу уравнений математической физики при МГУ за обсуждение результатов, а также С.Л. Киперману и В.А. Ферапонтову за консультации по вопросам хроматографии и адсорбции.

1. Критерий существования инвариантов Римана. Рассмотрим произвольную систему гидродинамического типа

$$u^i_x + v^i_j(u)\,u^j_\tau = 0, \quad i = 1, \ldots, n. \tag{7}$$

Предположим, что все корни λ_p характеристического уравнения $\det(v^i_j - \lambda\delta^i_j) = 0$ вещественны и различны; ξ^p_j -- отвечающие им левые собственные векторы матрицы v^i_j:

$$\xi^p_i v^i_j = \lambda^p \xi^p_j, \quad p = 1, \ldots, n.$$

Предположим для каждого собственного вектора ξ^p_j существование такого интегрирующего множителя c^p, что вектор $c^p\xi^p_j$ является градиентом: $c^p\xi^p_j = \partial R^p/\partial u^j$. Функции R^p называются инвариантами Римана. (Заметим, что для $n = 2$ интегрирующий множитель существут всегда, однако при $n > 2$ это уже не так.) В переменных R^p уравнения (7) приобретают простой диагональный вид (2). Как очевидно, приводимость данной системы к виду (2) эквивалентна наличию величин R^i. Таким образом, стандартный путь приведения системы к инвариантам Римана состоит в следующем:

1) вычисляются корни λ^p характеристического уравнения;

2) находятся отвечающие им левые собственные векторы ξ^p_j;

3) для каждого собственного вектора ξ^p_j выясняется вопрос о существовании интегрирующего множителя c^p.

Несмотря на свою теоретическую простоту, эта процедура обладает одним недостатком: для получения ответа на вопрос о существовании инвариантов Римана всякий раз необходимо проделывать трудоемкие вычисления (уже п. 1 требует при $n = 3$ решения кубического уравнения с коэффициентами, зависящими от переменных u^i). Существует намного более простой критерий наличия инвариантов Римана: построим по матрице $v^i_j(u)$ системы так называемый тензор Нейенхейса

$$N^i_{jk} = v^p_j\partial_p v^i_k - v^p_k\partial_p v^i_j - v^i_p(\partial_j v^p_k - \partial_k v^p_j).$$

Впервые это выражение появилось в работе [4], на ее основе интересующий нас критерий был получен в [3]. Построим теперь тензор

$$T^i_{jk} = N^i_{pr}v^p_j v^r_k - N^p_{jr}v^i_p v^r_k - N^p_{rk}v^i_p v^r_j + N^p_{jk}v^i_r v^r_p.$$

Т е о р е м а [3]. *Матрица $v^i_j(u)$ диагонализируема (локально) в подходящей системе координат R^i тогда и только тогда, когда $T^i_{jk} \equiv 0$.*

З а м е ч а н и е. Эта теорема была доказана в [3] в предположении наличия в каждой точке базиса из вещественных собственных векторов. Все рассматриваемые нами системы являются строго гиперболическими, т.е. удовлетворяют данному условию.

Приведенный критерий диагонализируемости использует лишь элементарные операции дифференцирования и умножения и не требует нахождения собственных чисел и векторов. Благодаря этому вычисление тензора T^i_{jk} по заданной матрице системы (7) было реализовано на языке REDUCE [10], на котором и производились расчеты в данной работе. Разумеется, приведенный критерий есть лишь критерий существования, и для того, чтобы явно выписать систему в инвариантах Римана, необходимо так или иначе проделать все вычисления из пп. 1–3.

В дальнейшем нам понадобятся некоторые сведения о диагональных системах гидродинамического типа (см. [7]).

Определение. Система (2) называется *полугамильтоновой,* если для любой тройки различных индексов $i \neq j \neq k$

$$\partial_k \left[\frac{\partial_j \lambda^i}{\lambda^j - \lambda^i} \right] = \partial_j \left[\frac{\partial_k \lambda^i}{\lambda^k - \lambda^i} \right].$$

Утверждение [7]. *Коммутирующими потоками (симметриями) системы* (2) *являются системы* $R^i_y + w^i(R) R^i_\tau = 0$, *собственные числа* $w^i(R)$ *которых связаны с* λ^i *соотношениями*

$$\frac{\partial_j w^i}{w^j - w^i} = \frac{\partial_j \lambda^i}{\lambda^j - \lambda^i} \tag{8}$$

для любой пары $i \neq j$.

Несложная проверка показывает, что для полугамильтоновых систем уравнения (8) совместны и определяют $w^i(R)$ с произволом в n функций одного аргумента. Полугамильтоновы системы обладают также бесконечным числом законов сохранения "гидродинамического типа" $I = \int P(R^1, \ldots, R^n)dx$ (см. [7]).

Рассмотрим соотношения

$$w^i(R) = \tau - \lambda^i(R)\,x, \quad i = 1, \ldots, n, \tag{9}$$

где $w^i(R)$ – произвольное решение системы (8). Оказывается, если выразить из (9) $R^1, \ldots, R^n$ как функции от x, t, мы получим решение системы (2). Более того, так мы получим общее решение (подробнее см. [7]). Указанную процедуру нахождения решений полугамильтоновых систем мы будем называть обобщенным методом годографа. Фактически это – линеаризация уравнений (7), сводящая их к линейной системе (8) на коммутирующие потоки. В ряде случаев (например, для системы уравнений хроматографии, отвечающей классической изотерме Ленгмюра) уравнения (8) могут быть явно проинтегрированы.

2. Классическая изотерма Ленгмюра. Система уравнений в этом случае принимает вид

$$u^i_x + \left[\frac{\Gamma_i u^i}{1 + \sum\limits_{p=1}^{n} \Gamma_p u^p} \right]_\tau = 0, \tag{10}$$

Собственные числа λ^p являются корнями уравнения

$$\sum_{p=1}^{n} \frac{\Gamma_p^2 u^p}{\Gamma_p - \lambda V} = V, \tag{11}$$

где введено обозначение $V = 1 + \sum \Gamma_p u^p$. При этом инвариант Римана R^i, отвечающий собственному числу λ^i, вычисляется по формуле (см. [2], с. 661): $R^i = \lambda^i V$, т.е. в инвариантах Римана получаем

$$R^i_x + \frac{R^i}{V} R^i_\tau = 0.$$

Входящая в эти уравнения величина V выражена не через R^i, а через исходные переменные u^i. Явное выражения V через R^i может быть получено из следующих элементарных соображений (см. [8]; нужно подчеркнуть, что в оригинальной работе [6] такое выражение отсутствует). Домножим обе части (11) на $\prod_p (\Gamma_p - R)$. Получится уравнение n-й степени относительно R с коэффициентом $(-1)^n V$ при R^n и свободным членом $\prod_p \Gamma_p$. Следовательно, по теореме Виета

$$\prod_p R^p = \frac{\prod_p \Gamma_p}{V}, \quad V = \frac{\prod_p \Gamma_p}{\prod_p R^p},$$

т.е. уравнения хроматографии примут вид

$$R^i_x + R^i \frac{\prod_p R^p}{\prod_p \Gamma_p} R^i_\tau = 0. \tag{12}$$

Элементарная проверка показывает, что система (12) является полугамильтоновой, и уравнения (8) на коммутирующие потоки $w^i(R)$ запишутся в виде

$$\frac{\partial_j w^i}{w^j - w^i} = \frac{R^i}{R^j(R^j - R^i)}, \quad (i \neq j).$$

Общее решение этих уравнений получено в [5]:

$$w^i = R^i \prod_{p=1}^{n} R^p \frac{\partial}{\partial R^i} \left\{ \sum_{k=1}^{n} \frac{A_k(R^k)}{\prod_{m \neq k} (R^m - R^k)} \right\},$$

где $A_k(R^k)$ – n произвольных функций одного аргумента. Следовательно, формула обобщенного годографа (9) дает в неявной форме общее решение системы (12).

3. Изотерма Ленгмюра с учетом диссоциации (3). Наиболее общий вид этой изотермы дается формулой (см. [1]):

$$a^i(u) = \frac{(\Gamma_i u^i)^{1/r_i}}{1 + \sum_{p=1}^{n} (\Gamma_p u^p)^{1/r_p}},$$

где r_p – число частиц, на которое диссоциирует при адсорбции p-е вещество (r_p, вообще говоря, различны). Применяя к соответствующей системе уравнений хроматографии критерий диагонализируемости, описанный в п. 1, получаем, что диагонализируемость имеет место лишь при равных коэффициентах диссоциации $r_p \equiv r$. Переходя к новым переменным $v^i = (\Gamma_i u^i)^{1/r}$, $y = rx$, получаем систему

$$v^i_y + (v^i)^{1-r} \left[\frac{\Gamma_i v^i}{1 + \Sigma v^p} \right]_\tau = 0. \tag{13}$$

Собственные числа λ^i являются корнями уравнения

$$\sum_{p=1}^{n} \frac{\Gamma_p (v^p)^{2-r}}{\Gamma_p (v^p)^{1-r} - \lambda V} = V, \quad V = 1 + \sum_{p=1}^{n} v^p.$$

При $r = 1$, что соответствует классической изотерме Ленгмюра, это превращается в формулу (11). К сожалению, для инвариантов Римана R^i не удается получить столь же простых формул, как в п. 2. Так, уже для случая $r = 2$ для инвариантов

Римана имеем

$$R^i = \sum_{p=1}^{n} \Gamma_p \left[\ln \frac{\Gamma_p - v^p \lambda^i V}{\Gamma_p} + \frac{\Gamma_p}{\Gamma_p - v^p \lambda^i V} \right].$$

При $r = 3, 4, \ldots$ выражения становятся еще сложнее.

4. Экспоненциальная изотерма. Применяя критерий диагонализируемости (п. 1) к уравнениям

$$u_x^i + \left[\frac{\alpha_i \exp(\Gamma_i u^i)}{1 + \sum\limits_{p=1}^{n} \alpha_p \exp(\Gamma_p u^p)} \right]_\tau = 0, \tag{14}$$

отвечающим изотерме (4), непосредственно убеждаемся в том, что тензор $T^i_{jk} \equiv 0$ независимо от конкретных значений констант α_i, Γ_i. Следовательно, система может быть диагонализована. Переходя к новым переменным $v^i = \alpha_i \exp(\Gamma_i u^i)$, получим

$$v_x^i + v^i \left[\frac{\Gamma_i v^i}{1 + \sum v^p} \right]_\tau = 0. \tag{15}$$

Собственные числа λ^i являются корнями уравнения

$$\sum_{p=1}^{n} \frac{\Gamma_p (v^p)^2}{\Gamma_p v^p - \lambda V} = V, \quad V = 1 + \sum_{p=1}^{n} v^p.$$

Для инварианта Римана R^i, отвечающего собственному числу λ^i, имеет место формула

$$R^i = \sum_{p=1}^{n} \Gamma_p^{-1} \left[\ln \frac{\lambda^i V}{\Gamma_p v^p - \lambda^i V} + \frac{\lambda^i V}{\Gamma_p v^p - \lambda^i V} \right].$$

Ситуация здесь та же, что и в п. 3 – для λ^i не удается получить явных выражений через инварианты Римана R^i, т.е. не удается исключить переменные v^i.

Замечание. Уравнения (14) могут быть переписаны в гамильтоновой форме (см. [7]):

$$u_x^i = \frac{1}{\Gamma_i} \frac{d}{d\tau} \left[\frac{\partial H}{\partial u^i} \right],$$

где гамильтониан $H = \ln \left[1 + \sum \alpha_p \exp(\Gamma_p u^p) \right]$.

Как известно, сочетание свойств диагонализируемости и гамильтоновости влечет интегрируемость системы методом обобщенного годографа, т.е. другими словами, влечет существование бесконечного множества коммутирующих потоков с произволом в n функций одного аргумента. Однако невозможность явно записать рассматриваемые уравнения в диагональных переменных затрудняет применение этого метода. В следующем параграфе рассмотрены 2 другие изотермы, приводящие к системам, которые удается явно диагонализировать. Это позволяет исследовать их более эффективно и, в частности, построить широкий запас точных решений.

5. Изотерма (5). Уравнения хроматографии запишутся в виде

$$u_x^i + \left[\frac{\Gamma_i u^i}{\left[1 + \sum\limits_{p=1}^{n} (\Gamma_p u^p)^{1/r} \right]^r} \right]_\tau = 0.$$

Собственные числа λ^i являются корнями уравнения

$$\sum_{p=1}^{n} \frac{\Gamma_p(\Gamma_p u^p)^{1/r}}{\Gamma_p - \lambda V} = V^{1/r}, \quad V = \Big[\, 1 + \sum_{p=1}^{n} (\Gamma_p u^p)^{1/r} \Big]^r .$$

При этом инварианты Римана R^i вычисляются по той же формуле, что и для классической изотермы Ленгмюра (см. § 3): $R^i = \lambda^i V$. В переменных R^i система примет диагональный вид

$$R^i_x + \frac{R^i}{V} R^i_\tau = 0, \qquad V = \Big[\, \frac{\prod_p \Gamma_p}{\prod_p R^p} \Big]^r .$$

Окончательный вид нашей системы в инвариантах Римана:

$$R^i_x + R^i \Big[\, \frac{\prod_p R^p}{\prod_p \Gamma_p} \Big]^r R^i_\tau = 0. \tag{16}$$

Приведем удобные формулы, связывающие переменные u^i с инвариантами Римана:

$$u^i = \mu^i \Big[\, \frac{\prod_p (R_p - \Gamma_i)}{\prod_p R^p} \Big]^r, \quad \mu^i = \frac{1}{\Gamma_i} \Big[- \prod_{p \neq i} \Big[\, 1 - \frac{\Gamma_i}{\Gamma_p} \Big] \Big]^{-r} .$$

Для $r = 1$ аналогичные формулы (относящиеся, правда, не к уравнениям хроматографии, а к тесно связанным с ними уравнениями электрофореза) были получены в [9].

Простой вид уравнений (16) позволяет построить для них достаточно широкий запас точных решений. Будем искать решения, на которых

$$\left(\frac{\prod_p R^p}{\prod_p \Gamma_p} \right)^r = \frac{f'(x)}{\phi'(\tau)}$$

для некоторых функций $f(x)$ и $\phi(\tau)$ (штрих означает производную по соответствующему аргументу). Заметим, что это условие равносильно условию: $\dfrac{\partial^2}{\partial x \partial \tau} \ln \big[\prod_p R^p \big] = 0$. Уравнения (16) запишутся в виде

$$\frac{R^i_x}{f'(x)} + \frac{R^i R^i_\tau}{\phi'(\tau)} = 0.$$

Переходя к новым независимым переменным $X = f(x)$, $T = \phi(\tau)$, получим набор независимых уравнений Хопфа

$$R^i_X + R^i R^i_T = 0, \qquad i = 1, \ldots, n, \tag{17}$$

к которым добавлена дифференциальная связь

$$\frac{\partial^2}{\partial X \partial T} \ln \big[\prod_p R^p \big] = 0. \tag{18}$$

Полученная переопределенная система может быть явно проинтегрирована. Пусть $P_n(u, v)$ – произвольный многочлен степени n от двух переменных. Утверждается, что решениями уравнений (17), (18) являются корни уравнения

$$P_n(R, T - RX) = 0,$$

которое представляет собой уравнение степени n относительно R с коэффициентами, зависящими от X, T. Таким образом, решения системы (17), (18) параметризуются алгебраическими кривыми n-й степени. Возвращаясь к переменным x, τ, получаем следующий результат: решениями $R^i(x, \tau)$ системы (16), удовлетворяющими дополнительному условию $\frac{\partial^2}{\partial x \partial \tau} \ln [\prod_p R^p] = 0$, являются корни уравнений n-й степени

$$P_n(R, \phi(\tau)) - Rf(x)) = 0, \tag{19}$$

где $P_n(u, v)$ – произвольной полином степени n, а функции $f(x)$ и $\phi(\tau)$ определяются из условий согласования

$$\prod_p R^p = \prod_p \Gamma_p \left[\frac{f'(x)}{\phi'(\tau)} \right]^{1/r}.$$

В самом деле, у многочлена $P_n(R, \phi(\tau) - Rf(x))$ коэффициент при R^n – многочлен $Q_n(f)$ степени n относительно f, свободный член – многочлен $S_n(\phi)$ степени n относительно ϕ (вид многочленов Q_n, S_n однозначно определяется по $P_n(u, v)$). Следовательно, по теореме Виета

$$\prod_p R^p = (-1)^n \frac{S_n(\phi)}{Q_n(f)}.$$

Подставляя это выражение в условия согласования и разделяя переменные, получим для определения $f(x)$ и $\phi(\tau)$ следующие обыкновенные дифференциальные уравнения:

$$(-1)^n \prod_p \Gamma_p (f')^{1/r} Q_n(f) = c, \quad (\phi')^{1/r} S_n(\phi) = c,$$

где c – константа разделения. Находя отсюда $f(x)$, $\phi(\tau)$ и подставляя в (19), получим окончательное уравнение на R, корни которого и дают нам запас точных решений системы (16).

Конструкция значительно упростится, если в качестве $P_n(u, v)$ взять приводимый многочлен, распадающийся в произведение n линейных сомножителей. Тогда (19) также распадается, и $R^i(x, \tau)$ представляется в виде

$$R^i(x, \tau) = \frac{\phi(\tau) - a^i}{f(x) - b^i}, \tag{20}$$

где a^i, b^i – произвольные константы, а $f(x)$ и $\phi(\tau)$ определяются после непосредственной подстановки (20) в уравнение (16):

$$(f')^{1/r} \prod_p (f - b^p) = c, \quad (\phi')^{1/r} \frac{\prod_p (\phi - a^p)}{\prod_p \Gamma_p} = c.$$

Построенные решения могут быть явно переписаны и в исходных физических переменных u^i.

6. Степенная изотерма. Уравнения хроматографии запишутся в виде

$$u^i_x + \left[\frac{\Gamma_i u^i}{\prod_{p=1}^{n} (\Gamma_p u^p)^{\beta_p}} \right]_\tau = 0.$$

Собственные числа λ^i являются корнями уравнения

$$\sum_{p=1}^{n} \frac{\Gamma_p \beta_p}{\Gamma_p - \lambda V} = 1, \quad V = \prod_{p=1}^{n} (\Gamma_p u^p)^{\beta_p}.$$

Отсюда следует, что собственные числа $\lambda^i = \mu^i / V$, где константы μ^i являются корнями уравнения

$$\sum_{p=1}^{n} \frac{\Gamma_p \beta_p}{\Gamma_p - \mu} = 1.$$

Инвариант Римана R^i, отвечающий собственному числу λ^i, вычисляется по формуле

$$R^i = \sum_{p=1}^{n} \frac{\beta_p}{\Gamma_p - \mu^i} \ln (\Gamma_p u^p).$$

В переменных R^i система примет диагональный вид

$$R^i_x + \frac{\mu^i}{V} R^i_\tau = 0.$$

Несложно получить явно выражение V через инварианты Римана: $V = \exp(\Sigma c^p R^p)$, где константы c^p являются решениями линейной системы

$$\sum_{p=1}^{n} \frac{c^p}{\Gamma_j - \mu^p} = 1, \quad j = 1, \ldots, n.$$

Окончательно в инвариантах Римана имеем

$$R^i_x + \mu^i \exp(-\Sigma c^p R^p) R^i_\tau = 0. \tag{21}$$

Для построения точных решений этой системы положим

$$\exp(-\Sigma c^p R^p) = \frac{f'(x)}{\phi'(\tau)}, \text{ т.е. } \frac{\partial^2}{\partial x \, \partial \tau} \Sigma c^p \kappa^p = 0. \tag{22}$$

Подставляя в (21), получим

$$\frac{R^i_x}{f'(x)} + \frac{\mu^i R^i_\tau}{\phi'(\tau)} = 0,$$

или же, в новых переменных $X = f(x)$, $T = \phi(\tau)$,

$$R^i_x + \mu^i R^i_T = 0. \tag{23}$$

При этом условие (22) сохранит свой вид:

$$\frac{\partial^2}{\partial X \, \partial T} \sum_p c^p R^p = 0. \tag{24}$$

Уравнения (23), (24) явно интегрируются: $R^i(X, T)$ должно быть многочленом степени n относительно аргумента $(T - \mu^i X)$:

$$R^i(X, T) = Q_i(T - \mu^i X),$$

причем коэффициенты многочленов должны быть такие, чтобы выполнялось условие (24). Возвращаясь к переменным x, τ, получим: $R^i(x, \tau) = Q_i(\phi(\tau) - \mu^i f(x))$, где $f(x)$ и $\phi(\tau)$ находятся из условий согласования

$$\Sigma c^p R^p = \ln \phi'(\tau) - \ln f'(x). \tag{25}$$

Поскольку переменные разделяются, мы приходим к обыкновенным дифференциальным уравнениям на $f(x)$ и $\phi(\tau)$.

Проиллюстрируем эту процедуру в простейшем случае двухкомпонентной смеси ($n = 2$). Уравнения (21) примут вид

$$R^1_x + \mu^1 \exp(-c^1 R^1 - c^2 R^2) R^1_\tau = 0,$$
$$R^2_x + \mu^2 \exp(-c^1 R^1 - c^2 R^2) R^2_\tau = 0.$$

Решение запишутся следующим образом:

$$R^1(x, \tau) = a^0 + a^1 [\phi(\tau) - \mu^1 f(x)] + a^2 [\phi(\tau) - \mu^1 f(x)]^2,$$
$$R^2(x, \tau) = b^0 + b^1 [\phi(\tau) - \mu^2 f(x)] + b_2 [\phi(\tau) - \mu^2 f(x)]^2.$$

Условие того, что $c^1 R^1 + c^2 R^2$ не содержит произведения $f\phi$, приводит к соотношению

$$c^1 \mu^1 a^2 + c^2 \mu^2 b^2 = 0.$$

Разделяя переменные в уравнениях (25) для определения $f(x)$ и $\phi(\tau)$, получаем обыкновенные дифференциальные уравнения

$$\ln \phi' = [c^1 a^2 (\mu^1)^2 + c^2 b^2 (\mu^2)^2] \phi^2 - [c^1 a^1 \mu^1 + c^2 b^1 \mu^2] \phi +$$
$$+ c^1 a^0 + c^2 b^0 + c,$$
$$\ln f' = -[c^1 a^2 + c^2 b^2] f^2 - [c^1 a^1 + c^2 b^1] f + c,$$

где c — константа разделения (f и ϕ выражаются через интеграл вероятностей $\int \exp(-\xi^2)\, d\xi$).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Киперман С.Л.* Основы химической кинетики в гетерогенном катализе. — М.: Химия, 1979. — 349 с.
2. *Рождественский Б.Л., Яненко Н.Н.* Системы квазилинейных уравнений. — М.: Наука, 1978. — 688 с.
3. *Haantjes A.* On X_{n-1}-forming sets of eigenvectors // Indagationes Mathematicae. — 1955. — V. 17, № 2. — p. 158–162.
4. *Nijenhuis A.* X_{n-1}-forming sets of eigenvectors // Indagationes Mathematicae. — 1951. — V. 13, № 2. — p. 200–212.
5. *Павлов М.В.* Гамильтонов формализм уравнений электрофореза. Интегрируемые уравнения гидродинамики: Препринт ИТФ им. Л.Д. Ландау. — М., 1987. — № 17.
6. *Кузнецов Н.Н.* Некоторые математические задачи хроматографии // Вычислительные методы и программирование. Вып. 6. — М.: МГУ, 1967. — С. 242–258.
7. *Царев С.П.* Геометрия гамильтоновых систем гидродинамического типа. Обобщенный метод годографа // Изв. АН СССР. Матем. — 1990, — Т. 54, № 5. — С. 1048–1068.
8. *Царев С.П.* Полугамильтонов формализм диагональных систем гидродинамического типа и интегрируемость уравнений хроматографии и электрофореза // Современный групповой анализ; методы и приложения, № 106. — ЛИИАН, 1989. — С. 30–35.
9. *Жуков М.Ю., Юдович В.И.* Математическая теория изотахофореза // ДАН СССР. — 1982. — Т. 267, № 2. — С. 334–338.
10. *Еднерал В.Ф., Крюков А.П., Родионов А.Я.* Язык аналитических вычислений REDUCE. — М.: МГУ, 1989.

Поступила в редакцию
16.01.91 г.