

نفوذ و انتقال جرم در شرایط غیریکنواخت

۴-۲ انتقال جرم درون کره در حالت غیریکنواخت (کره جامد، کره مایع یا حباب کروی صلب)

جرم ورودی - جرم خروجی $\pm$ جرم تولیدی و مصرفی = تجمع جرمی

فرض: انتقال از کره به بیرون صورت می گیرد. با توجه به عدم واکنش شیمیایی درون کره: (A جزء انتقالی است)

$$\dot{m}_{A1} - \dot{m}_{A2} = \frac{dm_A}{d\theta}$$

حجم المان $V = 4\pi r^2 \Delta r$ ، $m_A = (M_A V C_A)|_{\text{المان}}$

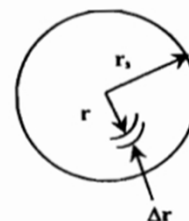
$$\frac{dm_A}{d\theta} = M_A 4\pi r^2 \Delta r \frac{dC_A}{d\theta}$$

$$\dot{m}_{A1} = (M_A 4\pi r^2 N_{Ar})|_r \quad , \quad \dot{m}_{A2} = (M_A 4\pi r^2 N_{Ar})|_{r+\Delta r}$$

$$(M_A 4\pi r^2 N_{Ar})|_r - (M_A 4\pi r^2 N_{Ar})|_{r+\Delta r} = M_A 4\pi r^2 \Delta r \frac{dC_A}{d\theta}$$

$$-\left[\frac{\partial(r^2 N_{Ar})}{\partial r}\right] = r^2 \frac{\partial C_A}{\partial \theta}$$

$$-\left(2r N_{Ar} + r^2 \frac{\partial N_{Ar}}{\partial r}\right) = r^2 \frac{\partial C_A}{\partial \theta}$$



از حرکت بالک صرف نظر می شود، لذا:

$$N_{Ar} = J_{Ar} + x_A \sum_{i=1}^n N_{ir} = -D_{AB} \frac{\partial C_A}{\partial r}$$

سیستم دو جزئی (A , B) در نظر گرفته شده و از انتقال اجزاء بیرون کره به درون کره صرف نظر شده است.

$$\frac{\partial N_{Ar}}{\partial r} = -D_{AB} \frac{\partial^2 C_A}{\partial r^2}$$

$$\left(2rD_{AB} \frac{\partial C_A}{\partial r} \right) + r^2 \left(D_{AB} \frac{\partial^2 C_A}{\partial r^2} \right) = r^2 \frac{\partial C_A}{\partial r}$$

و یا:

$$\frac{\partial C_A}{\partial \theta} = D_{AB} \left(\frac{\partial^2 C_A}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial C_A}{\partial r} \right)$$

شرایط مرزی و اولیه:

غلظت solute (جزء A) در کلیه نقاط درون کره در لحظه شروع انتقال جرم، یکسان و مساوی C_{A_0} است.

$$IC \quad \begin{matrix} r = r_s \\ 0 \leq r \leq r_s \end{matrix} \quad \theta = 0 \quad C_A = C_{A_0} \quad \text{یا} \quad C_A(r, 0) = C_{A_0}$$

از مقاومت در فاز مداوم صرف نظر می‌شود. لذا غلظت جزء A در سطح کره (فصل مشترک دو فاز) ثابت و برابر با C_A^f (غلظت در حال تعادل با فاز مداوم) است.

$$BC_1 \quad \theta = \theta \quad , \quad r = r_s \quad , \quad C_A = C_A^f \quad \text{یا} \quad C_A(r_s, \theta) = C_A^f$$

فرض بر آن است که نفوذ فقط در جهت r وجود دارد، تغییرات غلظت در جهات θ و φ وجود ندارد. خصوصیات فیزیکی با توجه به مقدار انتقال جرم کم، تقریباً ثابت فرض می‌شود و غلظت در مرکز کره تا حد محدودی تغییر خواهد کرد. یا:

$$BC_2 \quad \lim_{r \rightarrow 0} C_A(r, \theta) = \text{محدود}$$

با استفاده از روش جداسازی متغیرها، معادله PDE را حل می‌کنیم (جزئیات حل در ضمیمه ۴-۱).

$$y(r, \theta) = C_A - C_A^f$$

$$BC_1 \quad y(r_s, \theta) = 0$$

$$BC_2 \quad \lim_{r \rightarrow 0} y(r, \theta) = 0 \quad \text{محدود}$$

$$IC \quad y(r, 0) = C_A - C_A^f$$

روش جداسازی متغیرها:

$$y(r, \theta) = R(r)T(\theta)$$

$$R(r) = \frac{C_2}{r} \sin\left(\frac{n\pi r}{r_s}\right), \quad n = 1, 2, \dots$$

$$T(\theta) = C_1 \exp(-\lambda^2 D \theta), \quad \lambda = \frac{n\pi}{r_s}$$

$$y = \sum_{n=1}^{\infty} A_n \frac{1}{r} \sin\left(\frac{n\pi r}{r_s}\right) \exp\left(\frac{D n^2 \pi^2 \theta}{r_s^2}\right)$$

بنابراین

با توجه به آنچه در سری فوریه داریم، (در $\theta = 0$ به سری فوریه میرسیم)

$$\theta = 0$$

$$r(C_{A_0} - C_A^f) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n \sin \frac{n\pi r}{r_s}$$

$$f(r) = r(C_{A_0} - C_A^f)$$

$$A_n = \frac{2}{r_s} \int_0^{r_s} r(C_{A_0} - C_A^f) \sin \frac{n\pi r}{r_s} dr = \frac{2r_s}{n\pi} (C_{A_0} - C_A^f) (-1)^{n+1}$$

$$C_A - C_A^f = \frac{2r_s}{\pi} (C_{A_0} - C_A^f) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{n} \frac{1}{r} \sin \frac{n\pi r}{r_s} \exp\left(\frac{-Dn^2\pi^2\theta}{r_s^2}\right)$$

رابطه فوق غلظت جزء A درون کره را در هر لحظه $\theta = \theta$ و در فاصله r از مرکز کره خواهد داد.

دستیابی به غلظت متوسط a درون کره در طول زمان θ

$$\theta = M_A A_r N_{Ar} \Big|_{r=r_s, \theta=\theta} = -4M_A \pi r_s^2 D_{AB} \frac{\partial C_A}{\partial r} \Big|_{r=r_s, \theta=\theta}$$

با استفاده از رابطه بدست آمده (تغییرات غلظت بر حسب θ, r)

$$\frac{\partial C_A}{\partial r} \Big|_{r=r_s, \theta=\theta} = -\frac{2}{r_s} (C_{A_0} - C_A^f) \sum_{n=1}^{\infty} \exp\left(\frac{-Dn^2\pi^2\theta}{r_s^2}\right)$$

$$\theta = -4M_A \pi r_s^2 D_{AB} \left(-\frac{2}{r_s}\right) (C_{A_0} - C_A^f) \sum_{n=1}^{\infty} \exp\left(\frac{-Dn^2\pi^2\theta}{r_s^2}\right)$$

و حال کل جرم انتقالی از کره در طول زمان θ

$$N'_A = \int_0^\theta M_A 4\pi r_s^2 N_{Ar} \Big|_{r=r_s} d\theta$$

$$= M_A 4\pi r_s^2 \int_0^\theta N_{Ar} \Big|_{r=r_s} d\theta = M_A \frac{8r_s^2}{\pi} (C_{A0} - C_A^f) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} \left(1 - \exp \frac{-Dn^2\pi^2\theta}{r_s^2}\right)$$

توجه کنید: فرض شده قطر کره r_s ثابت باشد (اگر مقدار solute کم و یا انتقال جرم کم صورت گیرد فرض صحیح است).

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} = \frac{\pi^2}{6}$$

از طرفی اگر پس از طول مدت زمان θ غلظت درون کره به غلظت متوسط $\bar{C}_A$ رسیده باشد، می توان گفت:

$$N'_A = M_A \left(\frac{4}{3}\pi r_s^2\right) (C_{A0} - \bar{C}_A) = \text{کل انتقال جرم صورت گرفته}$$

که $\bar{C}_A$ غلظت متوسط درون کره در لحظه θ است. از تساوی دو مقدار N'_A داریم:

$$\frac{C_{A_0} - \bar{C}_A}{C_{A_0} - C_A^f} = 1 - \frac{6}{\pi^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} \exp\left(-\frac{Dn^2\pi^2\theta}{r_s^2}\right)$$

در رابطه فوق، انتقال جرم صورت گرفته در طول θ :

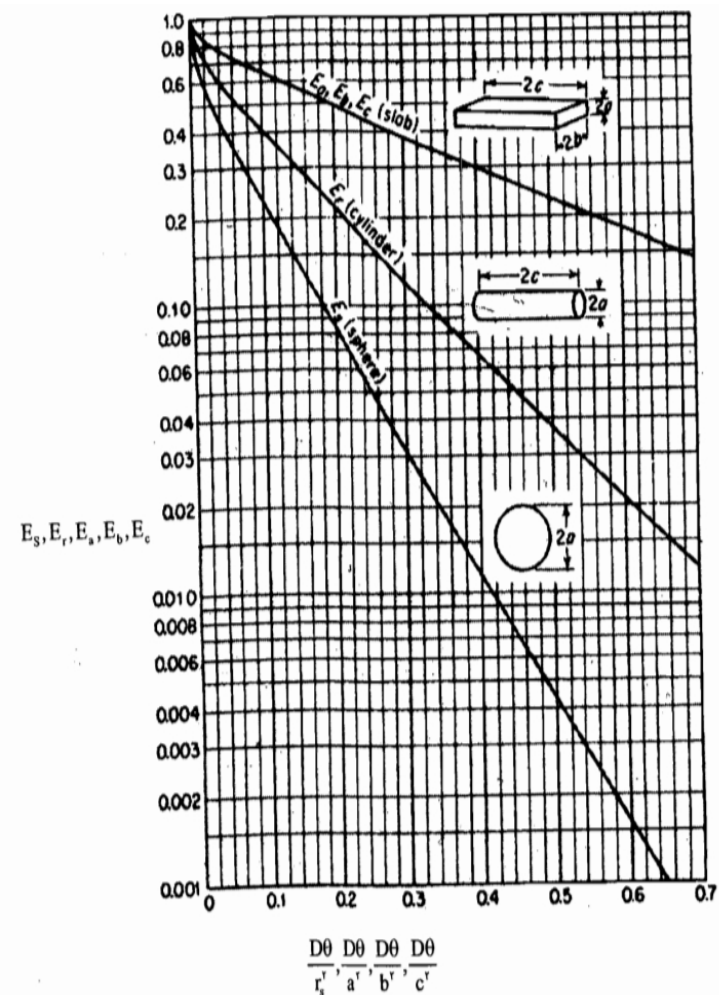
$$C_{A_0} - C_A^f$$

حداکثر انتقال جرم ممکن

با توجه به تعاریف فوق، راندمان انتقال جرم (مقدار انتقال جرم صورت گرفته به حداکثر انتقال جرم ممکن) قابل دستیابی است.

$$E = \frac{C_{A_0} - \bar{C}_A}{C_{A_0} - C_A^f}$$

$$1 - E = E_s = \frac{6}{\pi^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} \exp\left(-\frac{Dn^2\pi^2\theta}{r_s^2}\right)$$
 معادله نیومن



$$C_A = C_{A_0} + \frac{r_s}{r} (C_A^f - C_{A_0}) \sum_{n=0}^{\infty} \left[\operatorname{erfc} \frac{(2n+1)r_s - r}{2\sqrt{D\theta}} - \operatorname{erfc} \frac{(2n+1)r_s + r}{2\sqrt{D\theta}} \right]$$

رابطه فوق غلظت جز A را در هر لحظه θ در فاصله r از مرکز کره می‌دهد.

انتقال جرم درون کره، استوانه و تیغه جامد در شرایط غیریکنواخت

می‌توانیم غلظت متوسط را در طول زمان θ درون کره بدست آوریم.

$$\frac{C_{A_0} - \bar{C}_A}{C_{A_0} - C_A^f} = 6 \sqrt{\frac{D\theta}{r_s^2}} \left[\frac{1}{\sqrt{\pi}} + 2 \sum_{n=0}^{\infty} ierfc \frac{nr_s}{\sqrt{D\theta}} \right] - 3 \frac{D\theta}{r_s^2}$$

که:

$$ierfc\alpha = \int_{\alpha}^{\infty} erfc\theta d\theta = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \exp(-\alpha^2) - \alpha \operatorname{erfc}\alpha$$

$$\operatorname{erfc}\alpha = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{\alpha}^{\infty} \exp(-\theta^2) d\theta = 1 - \operatorname{erf}\alpha$$

$$\operatorname{erf}\alpha = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\alpha} \exp(-\theta^2) d\theta$$

$$\text{Biot Number} = \frac{k_{\rho} d}{D_{AC} m}$$

$$k_{\rho} \left[\frac{m}{s} \right] = \text{ضریب انتقال جرم فاز مداوم}$$

$$d[m] = \text{قطر کره}$$

$$D_{AC} \left[\frac{m^2}{s} \right] = \text{ضریب نفوذ A در فاز مداوم}$$

ثابت تعادلی (A بین دو فاز) $m =$

ضریب انتقال جرم بر مبنای فاز پراکنده

ضریب انتقال جرم بر مبنای فاز مداوم

کل مقاومت در فاز پراکنده قرار میگیرد.

$$\frac{1}{K_d} = \frac{1}{k_d} + \frac{m}{k_c}$$

$$\frac{1}{K_c} = \frac{1}{k_c} + \frac{1}{mk_d}$$

$$\frac{k_c}{m} \rightarrow \infty \quad \text{یا} \quad \frac{m}{k_c} \rightarrow 0$$

نفوذ و انتقال جرم در استوانه جامد در حالت غیریکنواخت:

تجمع = جرم تولیدی و مصرفی $\pm$ جرم خروجی - جرم ورودی

$$M_A N_{Ar} A_r|_r - M_A N_{Ar} A_r|_{r+\Delta r} = M_A 2\pi r L \Delta r \frac{\partial C_A}{\partial \theta}$$

عدم واکنش شیمیایی در لایه انتقال جرم و استفاده از نفوذ مولکولی درون لوله (حرکت توده‌ای وجود ندارد)

$$A_r = 2\pi rL$$

$$-\frac{\partial(rN_{Ar})}{\partial r} = r \frac{\partial C_A}{\partial \theta}$$

سیستم را دو جزئی A و B در نظر میگیریم.

$$N_{Ar} = J_{Ar} = -D_{AB} \frac{\partial C_A}{\partial r}$$

$$rD_{AB} \frac{\partial^2 C_A}{\partial r^2} + D_{AB} \frac{\partial C_A}{\partial r} = r \frac{\partial C_A}{\partial \theta}$$

و یا:

$$D_{AB} \left(\frac{\partial^2 C_A}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C_A}{\partial r} \right) = \frac{\partial C_A}{\partial \theta}$$