Subject   Year   Month   Date
جلسه چهارم : ۹۴، ۱۱، ۲۴

unsteady state Diffusion in a sphere:

نفوذ ناپایا در داخل کره :

* در مثال قبل نفوذ در مختصات کروی داشتیم ولی نفوذ در خارج کره بود. آیا در داخل کره (قطره آب) نفوذ داریم؟ آیا در یک قطره در حال تبخیر شدن نفوذ داخلی داریم؟

جواب: خیر، چون در داخل قطره آب گرادیان غلظت نداریم. چون تبخیر از سطح آب انجام می‌شود و کاری به داخل قطره ندارد. یا مثلاً اگر یک گلوله کروی نفتالین داشته باشیم که در حال تصعید شدن است، گرادیان غلظت در داخل کره نداریم. برای همین المانی که در مثال قبل در نظر گرفتیم در بیرون کره بود.

* حالا چند حالت دیگر را در نظر بگیرید:

- فرض کنید تقطیر داریم. در تقطیر یا distillation تماس بین فازهای بخار و مایع داریم. مثلاً جریان گاز عبوری از سینی‌های برج تقطیر به صورت حباب در تماس با فاز مایع هستند. این حباب کروی گازی یک ماده خالص نیست، بلکه حاوی جزء فرار و غیر فرار است. بنابراین یک گرادیان غلظت داخل حباب کروی شکل داریم.

- مثال دیگر استخراج مایع - مایع است. در این فرآیند هم قطرات کروی شکل ناخالص داشتیم که فاز سبک به صورت [illegible] در فاز سنگین حرکت دارد و بعد از انتقال جرم بین فازها Rafinate و Extract

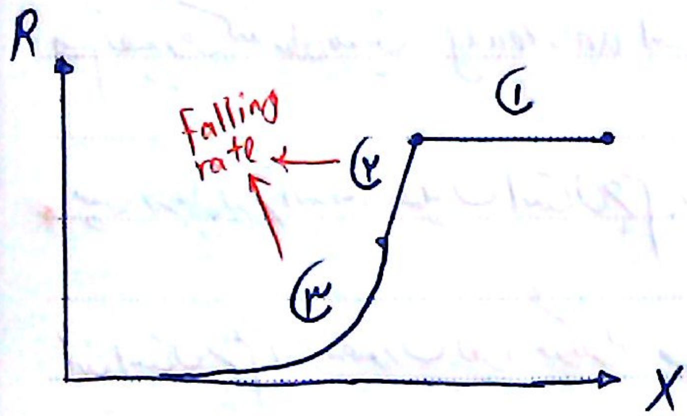
Subject:
Year: Month: Date:

داشتیم . پس قطراتی که در این فرآیند داشتیم ناخالص هستند و در داخل آن ها گرادیان غلظت داریم . پس

انتقال جرم در سیستم گروی داشتیم.

← در فرآیند خشک کردن ، جامد مرطوب ممکن است کروی نباشد (مثل جامدات گرانولی مرطوبی که در

صنعت ایجاد می شوند و باید خشک شوند . در درس عملیات واحد ۲ نمودار زیر را برای خشک کردن داشتیم :

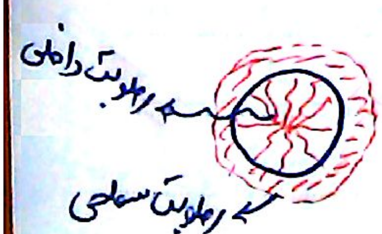


ناحیه ① : مربوط به تبخیر سطحی است.

ناحیه ② : ناحیه مکانیزم موئینگی است (تغییرات داخلی)

ناحیه ③ : ناحیه نفوذ مکانیزم

* زمانی که تبخیر رطوبت سطحی جامد داریم ، مکانیزم های حباب مرطوب حاکم است . بنابراین زمانی که



رطوبت سطح تبخیر می شود دیگر نفوذ نداریم . (مثل مثال قطره آب)

اما زمانی که رطوبت سطحی جسم تمام شد و نوبت به رطوبت داخلی جسم می رسد :

در اینجا رطوبت باید نفوذ کند و مکانیزم Diffusion داریم تا رطوبت از داخل جسم

به سطح برسد و تبخیر شود . در عملیات واحد ۲ به این ناحیه falling rate می گفتیم که شامل دو ناحیه ۲ و ۳

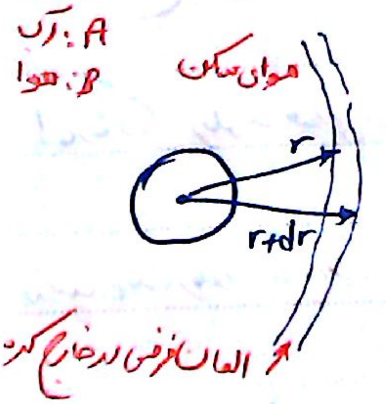
روی نفوذ ولد صفحه قبل می‌شد. (ناحیه کاهش مومنتوم و ناحیه کاهش نفوذ)

* بنابراین زمانی که در ناحیه ۲ و ۳ قرار داریم، گرادیان غلظت در داخل جسم که روی داریم. گرادیان غلظت را با ∇C (و یا ∇W برای گرادیان رطوبت) نشان می‌دهند.

* می‌خواهیم پدیده نفوذ را در داخل کره و در سیستم کروی بحث کنیم. در این سیستم غلظت با زمان هم تغییر می‌کند در این صورت unsteady است.

* پس در خیلی از فرآیندهای عملیات انتقال جرم، سیستم‌های کروی داریم (قطرات و حباب‌ها ...) و این انتقال جرم اکثراً به صورت نفوذ مولکولی صورت می‌گیرد.

* قبل از اینکه توزیع غلظت ناپایدار یک بعدی را برای داخل کره بیابیم، ابتدا توزیع غلظت ناپایدار یک بعدی را برای خارج کره (مانند مثال قبل) به دست می‌آوریم:



سیستم خارج کره: پس توزیع غلظت ناپایدار در خارج کره را به دست آورید.

با این فرض که هوا ساکن است.

ابتدا بقای جرم را می‌نویسیم:

$$acc = Input - output + gen - Cons$$

Subject:
Year Month Date

برای المان کروی فرضی، ترم های معادله بقا عبارت اندلز :

acc : $\frac{\partial n}{\partial t}$ Input : $N_{Ar} \cdot A_r \big|_r$ gen = 0

output : $N_{Ar} \cdot A_r \big|_{r+dr}$ Cons = 0

بنابراین معادله بقای جرم برای المان برابر است با :

$$\boxed{\frac{\partial n}{\partial t} = N_{Ar} \cdot A_r \big|_r - N_{Ar} \cdot A_r \big|_{r+dr}}$$

لذا طرفین :

حجم المان

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{\partial (C_A V)}{\partial t} = 4\pi r^2 dr \frac{\partial C_A}{\partial t}$$

همچنین طبق تعریف دیفرانسیل :

$$N_{Ar} \cdot A_r \big|_{r+dr} = N_{Ar} \cdot A_r \big|_r + \frac{\partial}{\partial r}(N_{Ar} \cdot A_r)\, dr$$

* که در اینجا V حجم المان و A_r سطح المان است :

$V = 4\pi r^2 dr$

$A_r = 4\pi r^2$

حالا معادله بقای جرم را بازنویسی می کنیم :

$$4\pi r^2 dr \frac{\partial C_A}{\partial t} = N_{Ar} \cdot A_r - \left(N_{Ar} \cdot A_r + \frac{\partial}{\partial r}(N_{Ar} \cdot A_r)\, dr\right)$$

Subject:
Year Month Date

$$\rightarrow 4\pi r^2 \cancel{dr}\ \frac{\partial C_A}{\partial t} = \cancel{N_{Ar} \cdot A_r} - \cancel{N_{Ar} \cdot A_r} - \frac{d}{dr}(N_{Ar} \cdot A_r)\cancel{dr}$$

$$\rightarrow 4\pi r^2 \frac{\partial C_A}{\partial t} = -\frac{d}{dr}\left(N_{Ar} \cdot A_r\right)$$

البته می توان عبارت سمت راست را ساده تر کرد. خواهیم داشت:

$$4\pi r^2 \frac{\partial C_A}{\partial t} = -\left(N_{Ar}\frac{\partial A_r}{dr} + A_r \frac{\partial N_{Ar}}{dr}\right)$$

از طرفی داشتیم:

$$A_r = 4\pi r^2 \rightarrow \frac{dA_r}{dr} = 8\pi r$$

بنابراین:

$$4\pi r^2 \frac{\partial C_A}{\partial t} = -\left(N_{Ar} \times 8\pi r + 4\pi r^2 \frac{\partial N_{Ar}}{\partial r}\right)$$

نهایتاً:

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

این رابطه برای نفوذ مولکولی در سیستم کروی یک بعدی (r) ناپایدار می باشد.

نکته: از فرمول های جلسه اول می دانیم که:

$$N_{Ar} = J_{Ar} + y_A(N_{Ar} + N_{Br})$$

چون نفوذ در لایه ساکن داشتیم: $N_{Br} = 0$ پس:

$$N_{Ar} = J_{Ar} + y_A N_{Ar} \rightarrow N_{Ar} = \frac{J_{Ar}}{1-y_A}$$

FARHANG

Subject:
Year Month Date

از طرفی رابطه ی J_{Ar} برای سیستم کروی به صورت زیر است :

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

توجه : تبدیلات سیستم کارتزین به استوانه ای و کروی در ضمیمه کتاب BSL آمده و باید مسلط باشید !

در نتیجه در رابطه ی نهایی :

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

باید به جای N_{Ar} جایگذاری کرد :

$$N_{Ar} = \frac{J_{Ar}}{1-y_A}$$

و

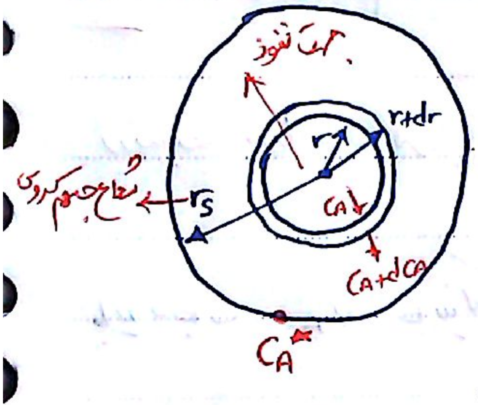
$$N_{Ar} = \frac{-D_{AB}\frac{\partial C_A}{\partial r}}{1-\frac{C_A}{C}}$$

غلظت کل ←

پس اگر N_{Ar} بالا را در رابطه نهایی جایگذاری کنیم ، به یک معادله PDE می رسیم . که در آن $C_A = C_A(r,t)$ است . پس اگر سوال از ما خواسته توزیع غلظت ناپایدار را به دست بیاوریم ، باید معادله PDE را با داشتن شرایط مرزی و اولیه حل کنیم . اگر صورت سوال توزیع غلظت پایدار را خواسته باشد تنها $\frac{\partial C_A}{\partial t}$ برابر صفر خواهد بود و یک معادله ODE داریم و باز هم نیاز به شرط مرزی داریم تا بتوانیم معادله را حل کنیم .

جسم مرطوب کروی :

برای جسم کروی زیر می‌خواهیم توزیع غلظت یک بعدی ناپایدار را بدست بیاوریم. فرض می‌کنیم که تبخیر سطحی نداریم و مکانیزم نفوذ است. (از داخل کره)



حل :

- یک المان کروی (پوسته کروی) در داخل کره در نظر می‌گیریم.

این المان در فاصله‌ی r از مرکز قرار دارد و ضخامتش dr است.

((بنابراین در داخل کره که ما این غلظت داریم چون نفوذ رطوبت از داخل کره به سطح انجام می‌گیرد))

- نفوذ در اینجا در جهت r است و از جهت φ و θ صرف نظر می‌کنیم. بنابراین غلظت در فاصله‌ی r از مرکز C_A و در فاصله‌ی $r+dr$، C_A+dC_A می‌باشد که نشان دهنده جهت نفوذ است.

- غلظت در سطح کره برابر غلظت تعادلی C_A^* است. این غلظت تعادلی تابع شرایط هوا است.

بنابراین این C_A^* یک مقدار ثابت و مستقل از زمان است. ((اگر تبخیر سطحی می‌داشتیم، آنگاه غلظت سطحی تابعی از زمان می‌بود اما اینجا در ناحیه ۳ نفوذ هستیم))

Subject:
Year Month Date

* چون داریم نفوذ داخل جامد را بررسی می‌کنیم پس داریم: $N_{Ar} = J_{Ar} = -D\dfrac{\partial C_A}{\partial r}$

چون در داخل جامد دیگر حرکت بالک نداریم.

حالا طبق معادله شرایطی که در صفحه ۳۴ جزوه به دست آوردیم، خواهیم داشت:

معادله حاکم: $$\frac{\partial C_A}{\partial t} = D\left(\frac{\partial^2 C_A}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial C_A}{\partial r}\right)$$

یا:

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = \frac{D}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial C_A}{\partial r}\right)$$

مشاهده می‌شود که به یک معادله‌ی PDE رسیده‌ایم.

برای حل معادلات PDE چند راه داریم:

1) separation of variables : جداسازی متغیرها

2) Laplace Transform : تبدیل لاپلاس

3) Combination of variables : ترکیب متغیرها

4) سری فوریه

FARHANG

Subject:
Year: Month: Date

در این سؤال از روش جداسازی متغیرها استفاده خواهیم کرد.

- شرایط مرزی و شرط اولیه را مشخص می کنیم:

$$B.C: \begin{cases} C_A(r_s, t) = C_A^* & : \text{وابسته به شرایط هوا} \\ C_A(0, t) = finite & : \text{مقدار محدود} \end{cases}$$

$$I.C \; \{ \; C_A(r, 0) = C_{A0} \quad : \text{غلظت اولیه جسم}$$

هدف: بدست آوردن توزیع غلظت : $C_A = C_A(r, t)$

- با توجه به معادله حاکم که صفحه قبل نوشتیم، چون معادله همگن است می توان از روش جداسازی متغیرها استفاده کرد.

تغییر متغیر: برای اینکه جهت شرط همگن درجهت r داشته باشیم از تغییر متغیر زیر استفاده می کنیم:

$$y' = C_A - C_A^* \xrightarrow[\text{در معادله حاکم}]{} \frac{\partial y'}{\partial t} = D\left(\frac{\partial^2 y'}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial y'}{\partial r}\right)$$

حالا تغییر متغیر را در شرایط مرزی و اولیه تاثیر می دهیم:

$$y'(r, 0) = C_{A0} - C_A^* \quad : IC$$

$$\left.\begin{aligned} y'(r_s, t) &= 0 \\ y'(0, t) &= finite \end{aligned}\right\} \longrightarrow B.C$$

حالا که شرایط مرزی همگن شد می‌توان از جداسازی متغیرها استفاده کرد:

فرض: $y'(r,t) = R(r) \times T(t)$

y' را در معادله حاکم قرار می‌دهیم:

$$\frac{\partial y'}{\partial t} = R\frac{dT}{dt} \qquad \frac{\partial y'}{\partial r} = T\frac{dR}{dr} \qquad \frac{\partial^2 y'}{\partial r^2} = T\frac{d^2R}{dr^2}$$

بنابراین بعد از جایگذاری در معادله حاکم صفحه قبل خواهیم داشت:

$$\frac{1}{DT}\frac{dT}{dt} = \frac{1}{R}\left(\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr}\right) = ?$$

- عبارت فوق ۳ حالت می‌تواند باشد: 0 ، λ^2 ، $-\lambda^2$

- نتایج نشان می‌دهد که $-\lambda^2$ به ما جواب درست می‌دهد و 0 و λ^2 ما را به تناقض یا جواب بدیهی می‌رساند.

- ابتدا معادله‌ی T را حل می‌کنیم:

$$\frac{1}{DT}\frac{dT}{dt} = -\lambda^2 \rightarrow \frac{dT}{dt} = -D\lambda^2 dt \rightarrow T = c_1 e^{-\lambda^2 D t}$$

- حالا به سراغ معادله‌ی R می‌رویم:

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr} + \lambda^2 R = 0$$

Subject:
Year Month Date

- برای حل این معادله از تغییر متغیر روبه‌رو استفاده می‌کنیم و مشتقات اول و دوم را می‌گیریم:

$$R = \frac{\beta}{r} \rightarrow \frac{dR}{dr} = \frac{1}{r}\frac{d\beta}{dr} - \frac{1}{r^2}\beta$$

$$\frac{d^2R}{dr^2} = -\frac{1}{r^2}\frac{d\beta}{dr} + \frac{1}{r}\frac{d^2\beta}{dr^2} - \frac{1}{r^2}\frac{d\beta}{dr} + \frac{2}{r^3}\beta$$

- حالا باید مشتقات اول و دوم R را در معادله R قرار دهیم. پس از ساده‌سازی خواهیم داشت:

$$\frac{d^2\beta}{dr^2} + \lambda^2\beta = 0 \longrightarrow \beta = C_2 \sin \lambda r + C_3 \cos \lambda r$$

$$\times \frac{1}{r} \rightarrow R = \frac{C_2}{r}\sin \lambda r + \frac{C_3}{r}\cos \lambda r$$

حالا شرایط مرزی را تاثیر می‌دهیم:

$$@\, r = 0 \rightarrow R = \text{finite}$$

$$\rightarrow R(0) = \frac{C_2}{0} \times \sin 0 + \frac{C_3}{0}\cos 0 = \text{finite}$$

$\rightarrow C_3 = 0$ پس باید

بنابراین $\rightarrow R(r) = \frac{C_2}{r}\sin \lambda r$

$$@\, r = r_s \rightarrow R = 0$$

Subject:
Year Month Date

$$R(r_s) = \frac{C_2}{r_s} \sin \lambda r_s = 0 \rightarrow \sin \lambda r_s = \sin n\pi$$

$$\rightarrow \lambda = \frac{n\pi}{r_s} \qquad n = 1, 2, 3, \dots$$

بنابراین y' را می‌توان به شکل زیر نوشت:

$$y' = \sum_{n=1}^{\infty} \underbrace{A_n}_{\text{حاصلضرب } C_1 \text{ و } C_2} \exp\left(\frac{-D n^2 \pi^2}{r_s^2} t\right) \frac{1}{r} \sin\left(\frac{n\pi}{r_s} r\right)$$

برای به دست آوردن A_n از شرط اولیه I.C استفاده می‌کنیم:

$$\xrightarrow{t=0} \underbrace{r(C_{A_0} - C_A^*)}_{f(r)} = \sum_{n=1}^{\infty} A_n \sin\left(\frac{n\pi}{r_s} r\right)$$

جلسه پنجم: ۹۴،۱۱،۲۵

طرفین رابطه اخیر را در $\sin\left(\frac{m\pi}{r_s} r\right)$ ضرب می‌کنیم:

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

((از روش ضریب بسط متعامد برای به دست آوردن A_n استفاده می‌کنیم))

بنابراین از ۰ تا r_s از دو طرف رابطه انتگرال می‌گیریم (انتگرال سیگما = سیگمای انتگرال)

$$\int_0^{r_s} r\left(C_{A_0}-C_A^*\right)\sin\frac{m\pi r}{r_s}\,dr=\sum_{n=1}^{\infty}A_n\int_0^{r_s}\sin\frac{n\pi r}{r_s}\sin\frac{m\pi r}{r_s}\,dr$$

- از ریاضیات مهندسی می دانیم که بنا به خاصیت توابع متعامد: (orthogonal function)

if $n\neq m$ → عبارت سمت راست $=0$

if $n=m$;

$$\int_0^{r_s} r\left(C_A-C_A^*\right)\sin\frac{n\pi r}{r_s}\,dr=A_n\int_0^{r_s}\sin^2\frac{n\pi r}{r_s}\,dr$$

برای محاسبه‌ی انتگرال سمت راست، از فرمول مقابل استفاده می کنیم :

$$\sin^2\alpha=\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\cos 2\alpha$$

برای عبارت سمت راست

$$\Rightarrow\int_0^{r_s}\sin^2\frac{n\pi r}{r_s}\,dr=\frac{1}{2}\int_0^{r_s}dr-\frac{1}{2}\int_0^{r_s}\cos\frac{2n\pi r}{r_s}\,dr$$

$$=\frac{r_s}{2}-\frac{r_s}{4n\pi}\cancel{\sin 2n\pi}^{\,0}=\frac{r_s}{2}$$ → باید جایگذاری کنیم

بنابراین A_n برابر است با :

$$A_n=\frac{2}{r_s}\int_0^{r_s} r\left(C_{A_0}-C_A^*\right)\sin\left(\frac{n\pi r}{r_s}\right)dr$$

$$\rightarrow A_n = \frac{2}{r_s}\left(C_{A_0} - C_A^*\right)\int_0^{r_s} r\sin\frac{n\pi r}{r_s}\,dr$$

- برای محاسبه این انتگرال از روش جزء به جزء استفاده می‌کنیم. حاصل انتگرال برابر خواهد بود با:

$$\int_0^{r_s} r\sin\left(\frac{n\pi r}{r_s}\right)dr = \frac{r_s^2}{2\pi}(-1)^{n+1}$$

- بنابراین A_n برابر است با:

$$A_n = \frac{2r_s}{n\pi}\left(C_{A_0} - C_A^*\right)(-1)^{n+1}$$

- حالا با جایگذاری A_n در رابطه‌ی ص ۴۱ و تبدیل u به C_A:

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

* بنابراین رابطه‌ی توزیع غلظت برحسب r و t به دست آمده است.

- اگر بخواهیم شار را در هر لحظه در سطح کره بیابیم:

$$N_{Ar}(t) = -D\left.\frac{\partial C_A}{\partial r}\right|_{r=r_s}$$

- بنابراین برای محاسبه‌ی $N_{Ar}(t)$ در سطح کره، ابتدا باید از رابطه‌ی C_A که در بالا به دست آمده نسبت به r مشتق بگیریم و بعد $r=r_s$ را در آن قرار دهیم. حاصل برابر خواهد بود با:

Subject:
Year Month Date

$$N_{Ar}(t) = \frac{2D}{r_s}\left(C_{A_0} - C_A^*\right)\sum_{n=1}^{\infty} - exp\left(-\frac{Dn^2\pi^2}{r_s^2}t\right)$$

- این رابطه شار A در هر لحظه t در سطح کره را به ما می دهد.

* اگر بخواهیم کل مول انتقال یافته از لحظه $t=0$ تا $t=t$ را در واحد سطح کره بیابیم،

باید از $N_{Ar}(t)$ نسبت به t انتگرال بگیریم:

$$\text{کل مول انتقال یافته از ۰ تا } t \left(\frac{mol}{m^2}\right) = \int_0^t N_{Ar}(t)\,dt =$$

$$= \frac{2D}{r_s}\left(C_{A_0} - C_A^*\right)\sum_{n=1}^{\infty}\int_0^t exp\left(\frac{-Dn^2\pi^2 t}{r_s^2}\right)dt$$

باید حاصل انتگرال سمت راست عبارت را بیابیم:

$$\int_0^t exp\left(\frac{-Dn^2\pi^2 t}{r_s^2}\right)dt = \frac{-r_s^2}{Dn^2\pi^2}\, exp\left(\frac{-Dn^2\pi^2 t}{r_s^2}\right)\Bigg|_0^t$$

$$= \frac{r_s^2}{Dn^2\pi^2}\left(1 - exp\left(\frac{-Dn^2\pi^2}{r_s^2}t\right)\right)$$

حالا حاصل انتگرال را در رابطه بالای جایگذاری می کنیم:

$$\int_0^t N_{Ar}(t)\,dt = \frac{4D}{r_s}\left(C_{A_0}-C_A^*\right)\sum_{n=1}^{\infty}\frac{r_s^2}{Dn^2\pi^2}\left(1-\exp\left(\frac{-Dn^2\pi^2}{r_s}t\right)\right)$$

ـ برای به دست آوردن مقدار کل مول منتقل شده از ۰ تا t با واحد (moL) داریم :

$$N_A'(\mathrm{mol}) = 4\pi r_s^2 \int_0^t N_{Ar}(t)\,dt$$

همان طور که مشاهده می شود $A_s = 4\pi r_s^2$ را در انتگرال ضرب کرده ایم. ساده سازی می کنیم :

$$N_A' = \frac{8 r_s^3}{\pi}\left(C_{A_0}-C_A^*\right)\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n^2}\left(1-\exp\left(\frac{-Dn^2\pi^2}{r_s^2}t\right)\right)$$

* در بعضی از کتاب ها رابطه ی فوق کمی فرق دارد. چون از تکنیک های زیر استفاده می کنند :

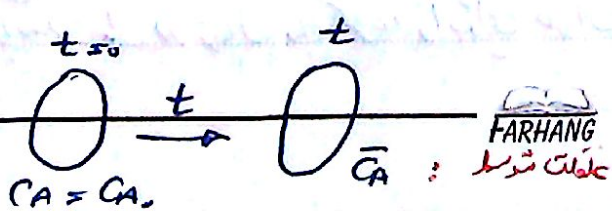
$$\boxed{\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n^2} = \frac{\pi^2}{6}}$$

بنابراین می توان N_A' را می توان به شکل زیر بازنویسی کرد :

$$N_A' = \frac{4}{3} r_s^3\left(C_{A_0}-C_A^*\right)\left[\frac{6}{\pi^2}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n^2} - \frac{6}{\pi^2}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n^2}\exp\left(\frac{-Dn^2\pi^2}{r_s}t\right)\right]$$

بنابراین مقدار کل مول های منتقل شده از لحظه ی ۰ تا t از فرمول بالا قابل محاسبه است.

* حال اگر بخواهیم در لحظه ی t مقدار غلظت متوسط (از نظر مکانی) را محاسبه کنیم :



$\bar{C}_A$ غلظت متوسط کره در زمان t است و به شکل زیر قابل محاسبه است:

مقدار مول انتقال یافته از لحظه‌ی t تا ۰

$$= N_A' = \underbrace{(C_A - \bar{C}_A)}_{\text{غلظت انتقال یافته}} \times \underbrace{\left(\frac{4}{3}\pi r_s^3\right)}_{\text{حجم}}$$

حجم × غلظت انتقال یافته = مول انتقال یافته

* بنابراین با داشتن مقدار N_A' از فرمول صفحه‌ی قبل و جایگذاری در فرمول بالا، می‌توان $\bar{C}_A$ را هم به دست آورد. بنابراین خواهیم داشت (البته با کمی تغییر در شکل فرمول بالا):

$$\frac{C_{A0} - \bar{C}_A}{C_{A0} - C_A^*} = \frac{3N_A'}{4\pi r_s^3 (C_A - C_A^*)}$$

N_A' را جایگذاری می‌کنیم:

$$\frac{C_{A0} - \bar{C}_A}{C_{A0} - C_A^*} = 1 - \frac{6}{\pi^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} \exp\left(\frac{-Dn^2\pi^2 t}{r_s^2}\right)$$

* بنابراین غلظت متوسط $\bar{C}_A$ در لحظه‌ی t از فرمول بالا به دست می‌آید.

نکته: رابطه‌ای که برای توزیع غلظت $C_A(r,t)$ در صفحه‌ی ۴۳ به دست آوردیم، زمانی جواب دقیق به ما می‌دهد (به عبارتی همگرا می‌شود) که برای زمان طولانی به کار رود و یا عبارت $\frac{Dt}{r_s^2}$ بزرگ باشد. ولی در زمان‌های کوتاه وابتدایی جواب‌های دقیق به ما نمی‌دهد.

Subject:
Year: Month: Date

یعنی روش جداسازی متغیرها مختص زمان های زیاد است نه زمان های ابتدایی.

- برای حل این مشکل (اینکه توزیع غلظت $C_A(r,t)$ را در t های کوچک بدست بیاوریم) از روش تبدیل لاپلاس استفاده می شود.

- قبل از لاپلاس، چند تابع را معرفی می کنیم: (ضمیمه C کتاب BSL صفحه ۸۵۷)

Error function: $$\operatorname{erf} x = \frac{\int_0^x \exp(-\bar{x}^2)\,d\bar{x}}{\int_0^\infty \exp(-\bar{x}^2)\,d\bar{x}}$$

همچنین می توان ثابت کرد که:
$$\int_0^\infty \exp(-\bar{x}^2)\,d\bar{x} = \frac{\sqrt{\pi}}{2}$$

بنابراین با جایگذاری در رابطه‌ی erf داریم:

$$\boxed{\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x \exp(-\bar{x}^2)\,d\bar{x}}$$

چند خاصیت این تابع:

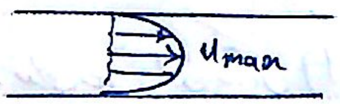
$$\operatorname{erf}(0) = 0 \qquad \operatorname{erf}(\infty) = 1$$

تابع خطا فرد است: $\operatorname{erf}(-x) = -\operatorname{erf}(x)$

مشتق تابع خطا: $$\frac{d\operatorname{erf} u}{dx} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \exp(-u^2)\frac{du}{dx}$$

داخل پرانتز:

برای جریان داخل لوله از مکانیک سیالات داشتیم:



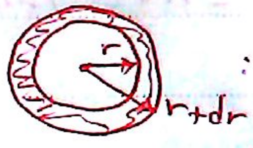
که در این جا سرعت u تابع r بود: $u = u(r)$

همچنین به دست می آوردیم که: $u = u_{max}\left(1-\left(\frac{r}{R}\right)^2\right)$

برای به دست آوردن سرعت متوسط از فرمول زیر استفاده می کردیم:

$$\bar{u} = \frac{\int u\,dA}{\int dA} = \frac{\int_0^R u(r)\,2\pi r\,dr}{\int_0^R 2\pi r\,dr}$$

المان:



$dA = 2\pi r\,dr$

$$\rightarrow \bar{u} = \frac{2\pi \int_0^R u_{max}\left(1-\left(\frac{r}{R}\right)^2\right) r\,dr}{\pi R^2}$$

بعد از محاسبه ی این انتگرال به این نتیجه می رسیدیم که:

$$\bar{u} = \frac{u_{max}}{2}$$

- در این درس هم می خواستیم برای C_A در لحظه ی t متوسط گیری کنیم. بنابراین:

$$\bar{C}_A - C_{A0} = \frac{\int (C_A - C_{A0})\,dA}{\int dA} = \frac{\int_0^{r_s} (C_A - C_{A0})\,4\pi r^2\,dr}{\underbrace{\int_0^{r_s} 4\pi r^2\,dr}_{\frac{4}{3}\pi r^3}}$$

پس از محاسبه ی انتگرال فوق به همان رابطه ی $\bar{C}_A$ در صفحه ۴۶ جزوه می رسیم

پایان پرانتز

Subject:
Year Month Date

Error function Complementary: erfc

$$\operatorname{erfc}(\alpha) = 1 - \operatorname{erf}(\alpha)$$

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

((ضمیمه های A و C کتاب BSL را مطالعه کنید))

- روش تبدیل لاپلاس را در مثال بعد توضیح خواهیم داد. اما در اینجا فقط جواب $C_A(r,t)$ را با روش تبدیل لاپلاس (برای زمان های ابتدایی جواب های دقیقی هستند) می نویسیم.

بنابراین بعد از حل معادله ی PDE به روش تبدیل لاپلاس جواب به صورت زیر خواهد بود:

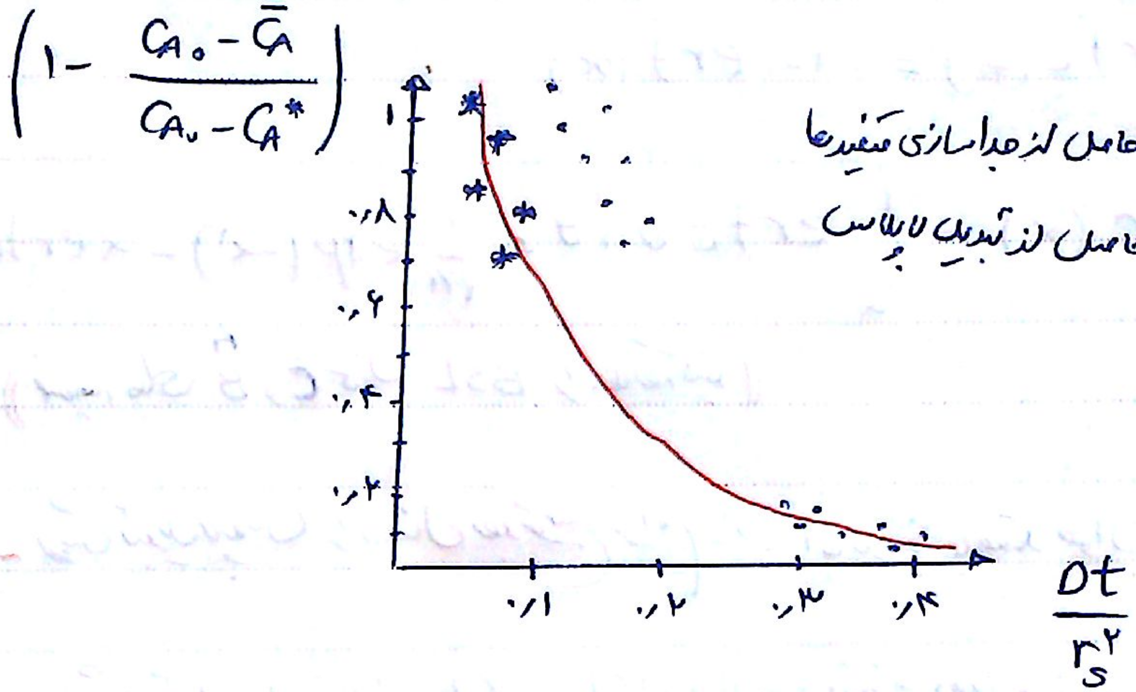
$$C_A = C_{A0} + \frac{r_s}{r}\left(C_A^* - C_{A0}\right) \sum_{n=0}^{\infty} \left[\operatorname{erfc}\left(\frac{(2n+1) r_s - r}{2\sqrt{Dt}} \right) - \operatorname{erfc}\left(\frac{(2n+1) r_s + r}{2\sqrt{Dt}} \right) \right]$$

حالا اگر بخواهیم $\bar{C}_A$ را به دست بیاوریم خواهیم داشت:

$$\frac{C_A - \bar{C}_A}{C_{A0} - C_A^*} = 6\sqrt{\frac{Dt}{r_s^2}} \left[\frac{1}{\sqrt{\pi}} + 2\sum_{n=1}^{\infty} \operatorname{ierfc} \frac{n r_s}{\sqrt{Dt}} \right] - \frac{3Dt}{r_s^2}$$

Subject:
Year Month Date

- این سوال به صورت عددی هم حل شده است و نتایج حل عددی و تحلیلی با هم مقایسه شده اند:



* زمانی که محور عمودی صفر است:

$$1-\frac{C_{A0}-\bar{C}_A}{C_{A0}-C_A^*}=0 \rightarrow C_{A0}=\bar{C}_A$$

در این حالت محور افقی هم صفر است یعنی: $t \rightarrow 0$

یعنی در لحظات ابتدای: $\bar{C}_A = C_{A0}$ که بدیهی است.

* از طرفی در $t \rightarrow \infty$ محور عمودی صفر می شود، یعنی: $\bar{C}_A = C_A^*$

* با دقت در نمودار می توان دریافت که رابطه ای که صفحه قبل از روش تبدیل لاپلاس به دست آورده ایم دقت بالایی دارد.

* در ادامه نفوذ ناپایدار در سیستم کارتزین را بررسی می کنیم.

Subject:
Year Month: Date

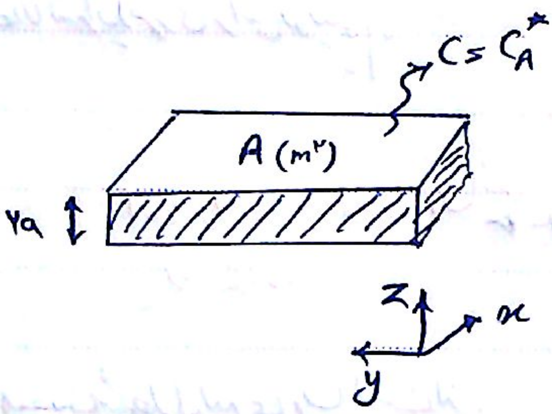
Unsteady state Diff in a slab:

جسم صلبی

فرض کنید یک جسم مکعب مستطیل به شکل زیر داشته باشیم و می‌خواهیم این جسم را خشک کنیم. سطوح جانبی این مکعب مستطیل را عایق کرده‌ایم. انتقال جرم برای این جسم را می‌خواهیم در دو حالت بررسی کنیم:

۱) انتقال جرم در هر دو سطح انجام می‌گیرد ۲) انتقال جرم فقط در یک سطح داریم.

(منظور از سطح، سطوح بالا و پایین است)



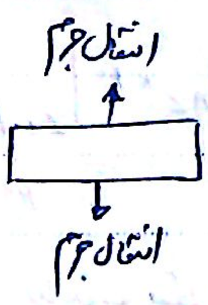
ابتدا برای حالت ۱) انتقال جرم را بررسی می‌کنیم

همچنین فرض مسئله این است که $2a$ در مقایسه با طول و عرض مکعب مستطیل بسیار کوچک است.

خواسته مسئله: به دست آوردن توزیع غلظت یک بعدی (Z) ناپایدار: $C_A = C_A(z, t)$

حل حالت ۱):

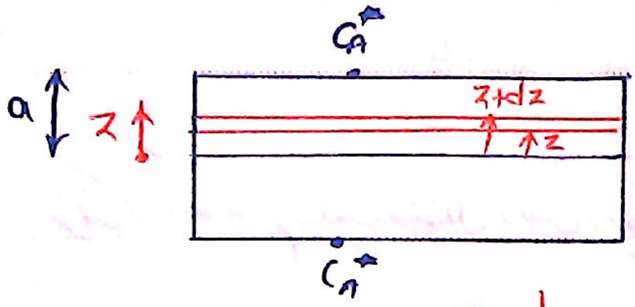
در این حالت از وجوه بالا و پایین انتقال جرم داریم:



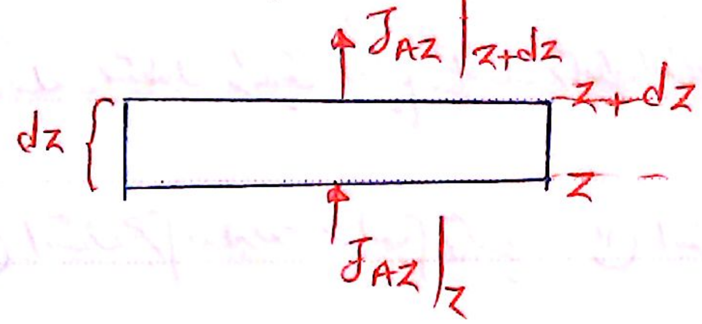
برای شروع باید المان گیری کنیم. چون شکل متقارن است محور را در وسط قرار می‌دهیم تا محاسبات

Subject:
Year Month Date

مسأله تکرار شود:



المان را دوباره رسم می‌کنیم:



حجم المان : $\underbrace{A}_{\text{سطح مقطع}} \times dz$

حالا شرایط مرزی را می‌نویسیم:

$$B.C \begin{cases} C_A(z=a, t) = C_A^* \\ \dfrac{\partial C_A}{\partial z}(z=0, t) = 0 \end{cases}$$

این شرط مرزی به خاطر تقارن شکل به دست آمد

همچنین شرط اولیه عبارت است از:

$$I.C: \quad C_A(z, t=0) = C_{A0}$$

- معادله بقای جرم را می‌نویسیم:

$$acu = input - output + \cancel{gen} - \cancel{Cons}$$

بنابراین:

$$\frac{\partial n}{\partial t} = \frac{\partial (C_A \overset{\text{حجم المان}}{V})}{\partial t} = A\,dz\,\frac{\partial C_A}{\partial t} = \underbrace{J_{Az} \times A\big|_z}_{input} - \underbrace{J_{Az} \times A\big|_{z+dz}}_{output}$$

نکته: در اینجا فقط نفوذ داریم و بالک نداریم. برای همین به جای N_{Az}، J_{Az} گذاشتیم.

Subject:
Year Month Date

نکته: در این سوال سطح مقطع ثابت است و تابعی از z نیست. اما فعلاً برای شکلی مثل زیر:

$\Longrightarrow$ در اینجا A ثابت نیست

- با استفاده از تعریف دیفرانسیل، ترم output را ساده می‌کنیم:

$$A\,dz\,\frac{\partial C_A}{\partial t} = J_{Az} \cdot A\Big|_z - \left(J_{Az} \cdot A\Big|_z - \frac{\partial}{\partial z}\left(J_{Az} A\right) dz \right)$$

جلسه ششم: ۹۴/۱۲/۱ :

FARHANG