و همان رابطه‌ی صفحه‌ی ۳۷ جزوه به دست می‌آید.

بنابراین لاگرانژین به راحتی می‌توان لاگرانژین فرمول‌ها هم برای به دست آوردن معادله‌ها کمک استفاده کرد.

جلسه هفتم: ۹۴ ,۱۲ ,۲

در ابتدای جلسه‌ی دیگه حاوی نمودارهای توابع بسل مختلف در کلاس توزیع شد.

قبل از اینکه انتقال جرم در مختصات استوانه‌ای را بررسی کنیم، ابتدا باید با توابع بسل آشنا باشیم.

* یادآوری توابع بسل:

فرم عمومی تابع بسل:

$$\frac{d}{dx}\left(x^{\alpha}\frac{dy}{dx}\right)+\gamma^{2}x^{\beta}y=0$$

دو تا Case برای این معادله موجود است:

Case 1: $\beta-\alpha+2\neq 0$

general solution: $y(x)=x^{\nu/\mu}Z_{\nu}\left(|\gamma|\mu x^{\frac{1}{\mu}}\right)$

$$\nu=\frac{1-\alpha}{\beta-\alpha+2}\quad,\quad \mu=\frac{2}{\beta-\alpha+2}$$

به توان x خواهد شد $\rightarrow \dfrac{\nu}{\mu}=\dfrac{(1-\alpha)}{2}$

بسته به اینکه γ چه حالتی دارد (حقیقی یا موهومی) جواب‌های زیر را داریم:

γ	ν	particular solutions (همان Z_ν)
Real	fractional (کسری)	J_ν , $J_{-\nu}$ (یا Y_ν)
	zero or Integer: n صفر (عدد صحیح)	J_n , Y_n
Imaginary	fractional	I_ν , $I_{-\nu}$ (یا K_ν)
	zero or Integer: n	I_n , K_n

تا اینجا جواب های case 1 بود. حالا case 2 :

Case 2: $\beta - \alpha + 2 = 0$

general Solution : $y(x) = x^r$

که r ریشه های معادله درجه ۲ زیر است :

$$r^2 + (\alpha - 1) r + \gamma^2 = 0$$

اگر Δ به صورت مقابل تعریف شود :

$$\Delta = (\alpha - 1)^2 - 4\gamma^2$$

Δ	particular	solution
$\Delta > 0$	x^{r_1} ,	x^{r_2}
$\Delta = 0$	x^{s} ,	$x^{s} \ln x$
$\Delta < 0$	$x^{s} \cos(\varepsilon \ln x)$,	$x^{s} \sin(\varepsilon \ln x)$

Subject:
Year Month Date

که مقادیر r_1 و r_2 و δ و ε به صورت زیر محاسبه می‌شوند:

$$r_{1,2} = \frac{1}{2}\left\{(1-\alpha) \pm \sqrt{\Delta}\right\}$$

$$\delta = \frac{1}{2}(1-\alpha) \quad \text{و} \quad \varepsilon = \frac{1}{2}\left[4\gamma^2 - (\alpha-1)^2\right]^{\frac{1}{2}}$$

- در این حالت که $\beta - \alpha + 2 = 0$ شده است (۳)، معادله به صورت زیر ساده می‌شود:

$$x^2 \frac{d^2y}{dx^2} + \alpha x \frac{dy}{dx} + \gamma^2 y = 0$$

به این معادله، Euler's Eq یا در بعضی جاها Cauchy's Eq می‌گویند.

* خواص معادله بسل:

- به عبارت: $H_\nu(x)$ معادله Hankel گفته می‌شود و به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$J_\nu(x) + Y_\nu(x) = H_\nu^{(1)}(x)$$

$$J_\nu(x) - Y_\nu(x) = H_\nu^{(2)}(x)$$

حالا به سراغ مشتق توابع بسل می‌رویم:

$$\frac{d}{dx}\left[x^{\nu} Z_{\nu}(mx)\right] = \begin{cases} m x^{\nu} Z_{\nu-1}(mx) \;; & Z: J, Y, I, H^{(1)}, H^{(2)} \\ -m x^{\nu} Z_{\nu-1}(mx) \;; & Z: K \end{cases}$$

$$\frac{d}{dx}\left[x^{-\nu} Z_{\nu}(mx)\right] = \begin{cases} -m x^{-\nu} Z_{\nu+1}(mx) \;; & Z: J, Y, K, H^{(1)}, H^{(2)} \\ m x^{-\nu} Z_{\nu+1}(mx) \;; & Z = I \end{cases}$$

حالت خاص : $\nu = 0$

$$\frac{d}{dx}\left[Z_{0}(mx)\right] = \begin{cases} -m Z_{1}(mx) \;; & Z: J, Y, K, H^{(1)}, H^{(2)} \\ m Z_{1}(mx) \;; & Z: I \end{cases}$$

$$\frac{d}{dx}\left[Z_{\nu}(mx)\right] = \begin{cases} m Z_{\nu-1}(mx) - \frac{\nu}{x} Z_{\nu}(mx) & Z: J, I, Y, H^{(1)}, H^{(2)} \\ -m Z_{\nu-1}(mx) - \frac{\nu}{x} Z_{\nu}(mx) \;; & Z = K \end{cases}$$

* اگر بخواهیم معادله اویلر را حل کنیم، یک روش ساده وجود دارد. مثلاً معادله زیر را در نظر بگیرید:

$$x^{2}\frac{d^{2}y}{dx^{2}} + \alpha x\frac{dy}{dx} + \delta^{2} y = 0$$

تغییر متغیر $x = e^{u}$

Subject:
Year Month Date

با تاثیر تغییر متغیر در داخل معادله خواهیم داشت:

$$\frac{d^2y}{du^2} + (\alpha-1)\frac{dy}{du} + \delta^2 y = 0 \longrightarrow$$ معادله دیفرانسیل خطی با ضرایب ثابت $\rightarrow y = e^{ru}$

بنابراین جواب معادله اویلر به صورت: $y(x) = x^r$ خواهد شد که r از معادله زیر بدست می‌آید:

$$r^2 + (\alpha-1) r + \delta^2 = 0$$

** حالا تعریف چند تابع بسل را به صورت سری می‌نویسیم:

$$J_0(x) = 1 - \frac{\left(\frac{x}{2}\right)^2}{(1!)^2} + \frac{\left(\frac{x}{2}\right)^4}{(2!)^2} + \cdots$$

$$J_1(x) = \frac{x}{2} - \frac{\left(\frac{x}{2}\right)^3}{(1!)(2!)} + \frac{\left(\frac{x}{2}\right)^5}{2!\;3!} + \cdots$$

$$\vdots$$

$$J_\nu(x) = \frac{\left(\frac{x}{2}\right)^\nu}{\Gamma(\nu+1)}\left\{1 - \frac{\left(\frac{x}{2}\right)^2}{1!\,(\nu+1)} + \frac{\left(\frac{x}{2}\right)^4}{2!\,(\nu+1)(\nu+2)} + \cdots\right\}$$

* تابع گاما به صورت مقابل تعریف می‌شود: $\Gamma(\nu+1) = \nu!$

$$I_0(x) = 1 + \frac{\left(\frac{x}{2}\right)^2}{(1!)^2} + \frac{\left(\frac{x}{2}\right)^4}{(2!)^2} + \cdots$$

$$I_1(x) = \frac{x}{2} + \frac{\left(\frac{x}{2}\right)^3}{1!\,2!} + \frac{\left(\frac{x}{2}\right)^5}{2!\,3!} + \dots$$

$\vdots$

$$I_\nu(x) = \frac{\left(\frac{x}{2}\right)^\nu}{\Gamma(\nu+1)}\left\{1 + \frac{\left(\frac{x}{2}\right)^2}{1!\,(\nu+1)} + \frac{\left(\frac{x}{2}\right)^4}{2!\,(\nu+1)(\nu+2)} + \dots\right\}$$

برای توابع Y_ν و K_ν به هندبوک ریاضی مراجعه کنید.

همچنین بین J_ν و $J_{-\nu}$ هم روابطی وجود دارد که در اینجا وقت نیست که توضیح دهیم.

* برخی ویژگی های توابع بسل را باید بدانیم:

$J_0(0) = 1$, $J_\nu(0) = 0$, $\nu \neq 0$

$I_0(0) = 1$, $I_\nu(0) = 0$, $\nu \neq 0$

با مراجعه به نمودارهایی که ابتدای کلاس توضیح شد، می توان ویژگی هایی که در بالا ذکر شد را مشاهده کرد.

* اگر به شکل توابع $J_\nu(x)$ نگاه کنیم، هر جایی که منحنی های J محور $y=0$ را قطع می کنند، آن نقاط جواب معادله $J_\nu(x)=0$ هستند. برای این معادله بی نهایت جواب داریم.

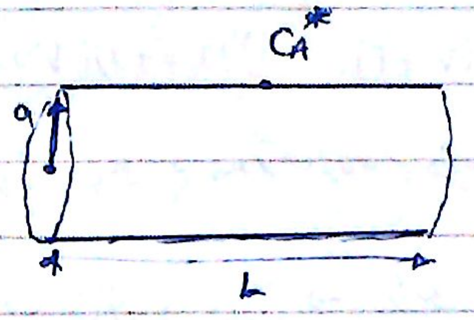
* با دقت در نمودارهای Y_ν می توان مشاهده کرد که: $Y_\nu(0) = -\infty$

برای نمودارهای K_ν هم: $K_\nu(0) = +\infty$, $K_\nu(\infty) = 0/1$

تا اینجا یادآوری توابع بسل بود. حالا به بحث انتقال جرم در سیستم استوانه می‌پردازیم:

unsteady state diff in a cylandre:

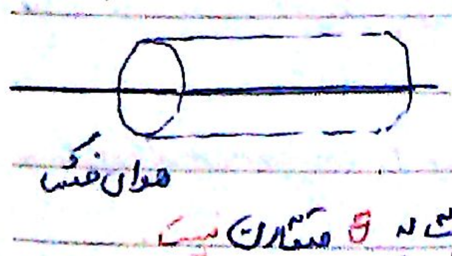
انتقال جرم ناپایدار در مختصات کروی:



فرض می‌کنیم که نمونه‌های مرطوب به شکل استوانه داریم. رطوبت در داخل این استوانه به صورت نفوذی حرکت می‌کند و جسم در حال خشک شدن است. لذا تغییرات رطوبت در داخل جسم مرطوب را به صورت تابعی از شعاع استوانه و زمان $(C_A(r,t))$ خواسته اند. فرضیات سوال این است که طول استوانه زیاد و شعاع کم است. (در اینجا حالت نفوذ در جهت z صرف نظر می‌شود).

همچنین فرض می‌شود که جسم نسبت به θ متقارن است. یعنی هوای اطراف استوانه یکنواخت است و غلظت یکسان دارد.

* داول بپرسند



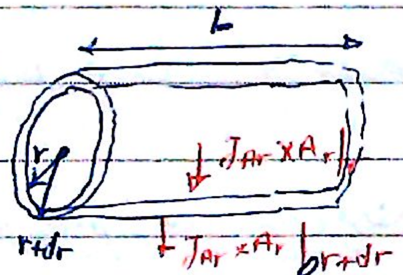
اگر هوای اطراف استوانه متغیر بود، یعنی به وسیله یک صفحه، دو طرف استوانه را از همدیگر جدا کرده ایم، به طوری که سطح بالایی در مجاورت هوای مرطوب و سطح پایینی در مجاورت هوای خشک باشد. در این صورت جسم نسبت به θ متقارن نیست.

بنابراین برای این استوانه که شعاع r و طول L دارد و غلظت در سطح استوانه همان رطوبت تعادلی است (C_A^*)

شرایط مرزی به صورت مقابل خواهد بود: $C_A(r,t) = ?$

B.C $\begin{cases} C_A(a,t) = C_A^* \\ C_A(0,t) = \text{finite} \end{cases}$, $C_A(r,0) = C_{A0}$ IC

یک المان پوسته ای به صورت مقابل در نظر می گیریم:



چون در داخل استوانه فقط نفوذ داریم، $J_{Ar}\big|_r$ شار نفوذی ورودی به المان در جهت r و $J_{Ar}\big|_{r+dr}$ شار نفوذی خروجی از المان در جهت r می باشد.

بنابراین معادله بقای جرم را برای المان می نویسیم:

$$\frac{\partial n_A}{\partial t} = n_A\Big|_{input} - n_A\Big|_{output}$$

$$\frac{\partial\left((2\pi r\,dr\,L)\,C_A\right)}{\partial t} = J_{Ar}\,A_r\Big|_r - J_{Ar}\,A_r\Big|_{r+dr}$$

$$2\pi r L\,\cancel{dr}\,\frac{\partial C_A}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial r}\left(J_{Ar}\,A_r\right)\cancel{dr}$$

از طرفی: $A_r = 2\pi r L$ است. بنابراین:

$$2\pi r L \frac{\partial C_A}{\partial t} = -\left(A_r \frac{\partial J_{Ar}}{\partial r} + J_{Ar} \frac{\partial A_r}{\partial r} \right)$$

از قانون فیک :

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

جایگذاری می کنیم و بعد از ساده سازی خواهیم داشت :

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = D\left[\frac{\partial^2 C_A}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C_A}{\partial r} \right]$$: معادله حاکم

* برای حل این معادله ، تغییر متغیر می دهیم :

$$C_A'(r,t) = C_A(r,t) - C_A^*$$

این تغییر متغیر را انجام دادیم ، چون شرایط مرزی مربوط به r را همگن می کند :

$$C_A(0,t) = \text{finite} \rightarrow C_A'(0,t) = \text{finite} \quad \text{BC1}$$

$$C_A(a,t) = C_A^* \rightarrow C_A'(a,t) = 0 \quad \text{BC2}$$

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

البته به جای شرط مرزی اول (BC1) می توان از شرط مقابل استفاده کرد (مشتق شرط مرزی اول) :

$$\frac{\partial C_A'}{\partial r}(0,t) = 0$$ ← چون جسم متقارن است

با این تغییر متغیری که گرفتیم ، معادله به صورت زیر درخواهد آمد :

$$\frac{\partial C_A'}{\partial t} = D\left[\frac{\partial^2 C_A'}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C_A'}{\partial r} \right]$$

* حالا که هم معادله خطی است و هم شرایط مرزی، می‌توان از روش جداسازی متغیرها استفاده کرد.

$$C_A'(r,t) = R(r)\cdot T(t)$$

در معادله جایگذاری می‌کنیم:

$$RT' = D\left(R''T + \frac{1}{r}R'T\right)$$

$$\div DRT \Rightarrow \frac{T'}{DT} = \frac{R''}{R} + \frac{1}{r}\frac{R'}{R} = -\lambda^2$$

حل معادله T:

$$\frac{dT}{T} = -D\lambda^2 dt \Rightarrow T = c_1 \exp(-D\lambda^2 t)$$

حل معادله‌ی R:

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

$$\Rightarrow \frac{d}{dr}\left(r\frac{dR}{dr}\right) + \lambda^2 rR = 0$$: معادله بسل

همان طور که مشاهده می‌شود به فرم عمومی معادله بسل رسیدیم. باید بررسی کنیم که Case 1 است یا Case 2

$$\alpha = 1 \quad , \quad \beta = 1 \Rightarrow \beta - \alpha + 2 = 2 \neq 0$$

بنابراین Case 1 است:

$$\mu = \frac{2}{1-1+2} = 1 \quad , \quad \nu = \frac{1-\alpha}{\beta-\alpha+2} = 0$$

با مقایسه با فرم معادله ای که در صفحه ۶۲ و صفحه ۶۴ است:

$m = \lambda$

$x = r$

$\nu = 0$ جواب عمومی از جدول ص ۶۴ : $R(r) = a_0 J_0(\lambda r) + a_1 Y_0(\lambda r)$

$J_0(\lambda r)$ را می‌توان به صورت سری زیر نوشت (قبلاً هم گفتیم):

$$J_0(\lambda r) = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{\left(\frac{\lambda r}{2}\right)^{2k}}{k!\,\Gamma(k+1)} \quad \text{و} \quad \Gamma(k+1) = k!$$

* حالا شرایط مرزی را تأثیر می‌دهیم:

$$C_A'(0,t) = \text{finite} \rightarrow R(0)\,T(t) = \text{finite} \rightarrow R(0) = \text{finite}$$

تابع $T(t)$ که محدود هست، پس تابع $R(0)$ باید محدود باشد:

$$R(0) = a_0 \underbrace{J_0(0)}_{1} + a_1 Y_0(0) = \text{finite}$$

* گفتیم که $Y_0(0) = -\infty$ است. پس a_1 باید صفر باشد: باید: $a_1 = 0$

بنابراین: $R(r) = a_0 J_0(\lambda r)$

حالا شرط مرزی دوم را تأثیر می‌دهیم: $C_A'(a,t) = 0$

$$R(a)\,T(t) = 0 \rightarrow R(a) = 0$$

از طرفی: $R(a) = a_0 J_0(\lambda a) = 0 \rightarrow J_0(\lambda a) = 0$

نقاطی که J_0 صفر می‌شود جواب‌ها هستند. فرض کنید که این نقاط: $b_n a$ ها باشند. یعنی:

نقاط $b_1 a$ و $b_2 a$ و $b_3 a$ و ... حاصل تابع J_0 را صفر می‌کند. بنابراین:

$$J_0(\lambda_n a) = J_0(b_n a) = 0 \rightarrow \lambda_n = b_n$$

- بنابراین C_A' برابر است با:

$$C_{A_n}' = \underbrace{a_{0,n}}_{C_n} J_0(b_n r)\, \exp(-D b_n^2 t)$$

$C_A'(r,t)$ به صورت مجموعی از جواب‌ها می‌شود:

$$\boxed{C_A'(r,t) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \exp(-D b_n^2 t)\, J_0(b_n r)}$$

برای به دست آوردن ثابت a_n از شرط اولیه استفاده می‌کنیم:

$$C_A'(r,0) = C_{A_0} - C_A^* = \sum_{n=0}^{\infty} a_n J_0(b_n r)$$

حالا طرفین را در $r J_0(b_m r)$ ضرب می‌کنیم و انتگرال می‌گیریم:

$$\int_0^a (C_{A_0} - C_A^*)\, r J_0(b_m r)\, dr = \int_0^a \sum_{n=0}^{\infty} a_n J_0(b_n r) \times r J_0(b_m r)\, dr$$

* توجه کنید که تابع وزن مثل r است. (در صفحه‌ی قبل تر این وزن ۱ بود)

حالا اگر $n \neq m$: $\int_0^a r J_0(b_n r)\, J_0(b_m r)\, dr = 0$. از خاصیت تعامد

حالت $n = m$ را در جلسه بعد بررسی خواهیم کرد.

if $n=m$:

$$\int_0^a (C_{A_0}-C_A^*)\, r J_0(b_n r)\, dr = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \int_0^a r J_0^2(b_n r)\, dr$$

از خواص تابع بسل :

$$\int_0^a r J_0(b_n r)\, dr = \frac{a^{0+1}}{b_n} J_{0+1}(b_n a) = \frac{a}{b_n} J_1(b_n a)$$

$$\int_0^a r J_0^2(b_n r)\, dr = \frac{a^2}{2} J_{0+1}(b_n a) = \frac{a^2}{2} J_1(b_n a)$$

بنابراین a_n به دست می آید :

$$a_n = \frac{\int_0^a (C_{A_0}-C_A^*)\, r J_0(b_n r)\, dr}{\int_0^a r J_0^2(b_n r)\, dr}$$

پس از محاسبه انتگرال ها :

$$a_n = (C_{A_0}-C_A^*) \frac{\frac{a}{b_n} J_1(b_n a)}{\frac{a^2}{2} J_1(b_n a)} \longrightarrow \boxed{a_n = \frac{2}{a}(C_{A_0}-C_A^*)\frac{1}{J_1(b_n a)}}$$

بنابراین با جایگذاری a_n در رابطه C_A' و تبدیل C_A' به C_A ، توزیع غلظت C_A برحسب شعاع و زمان برابر است با :

$$C_A(r,t) = C_A^* + \frac{2}{a}(C_{A_0}-C_A^*) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{J_0(b_n r)}{b_n J_1(b_n a)} \exp(-D b_n^2 t)$$

می توان مانند مثال های قبلی ، غلظت متوسط را برحسب t برای این استوانه محاسبه کرد.

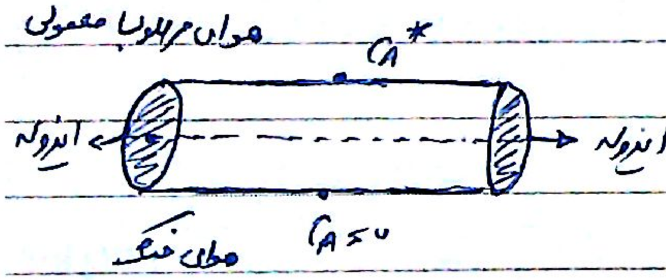
HW 11

اثبات کنید:

$$\frac{C_{A_0}-\bar{C}_A}{C_{A_0}-C_A^*} = 1-\frac{4}{a^2}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{b_n^2}\exp\left(-Db_n^2 t\right)$$

* حالا می‌خواهیم این انتقال استوانه را کمی تغییر دهیم.

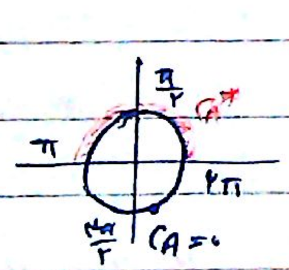
* فرض کنید استوانه‌ای داریم که انتقال جرم آن فقط از سطح جانبی آن صورت می‌گیرد و سطوح کناری انیدولا هستند. شعاع این استوانه a است. نصف این استوانه را در معرض هوای مرطوب معمولی و نیمه دیگر را در هوای کاملاً خشک قرار دارد.



تغییرات رطوبت را نسبت به r و θ به صورت تابع بیابید.

می‌خواهیم: $C_A(r,\theta)=?$

سطح مقطع استوانه:



$$C_A(a,\theta)=\begin{cases}C_A^* & 0<\theta<\frac{\pi}{2}\\ 0 & \pi<\theta<2\pi\end{cases}$$

HW 12

توزیع غلظت را بر حسب r و θ به دست بیاورید.

* روش ترکیب متغیرها. Combination of Variables

روش‌های تبدیل لاپلاس و جداسازی متغیرها را مرور کردیم. حالا به معرفی روش ترکیب متغیرها می‌رویم.

* این روش در مواقعی که یکی از شرط‌های مرزی در ∞ قرار می‌گیرد خیلی کاربرد دارد!

مثلاً معادله مقابل را در نظر بگیرید: $\frac{\partial C_A}{\partial t} = D_{AB}\frac{\partial^2 C_A}{\partial x^2}$ ؛ معادله PDE

در این حالت پارامتر η را به صورت مقابل در نظر می‌گیریم:

$$\eta = a x^m t^n$$

(باید متغیرهای مستقل معادله را با هم ترکیب کنیم)

حالا مشتق‌هایی که در معادله وجود دارند را ایجاد می‌کنیم:

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = \frac{\partial C_A}{\partial \eta} \times \frac{\partial \eta}{\partial t}$$

از طرفی:

$$\frac{\partial \eta}{\partial t} = a n x^m t^{n-1}$$

حالا مشتق نسبت به x:

$$\frac{\partial C_A}{\partial x} = \frac{\partial C_A}{\partial \eta} \times \frac{\partial \eta}{\partial x}$$

و حالا مشتق دوم نسبت به x:

$$\frac{\partial^2 C_A}{\partial x^2} = \frac{\partial C_A}{\partial \eta} \times \frac{\partial^2 \eta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_A}{\partial \eta^2}\left(\frac{\partial \eta}{\partial x}\right)\left(\frac{\partial x}{\partial \eta}\right)$$

با جایگذاری این مشتقات در معادله، معادله PDE به یک معادله ODE تبدیل می‌شود. همچنین باید شرایط مرزی را هم نسبت به η تغییر دهیم. از حل معادله ODE جواب به دست خواهد آمد.

* تا به این جا انتقال جرم نفوذی را گفتیم. از این به بعد به کاربردهای انتقال جرم در محیط‌های متخلخل می‌پردازیم. محیط‌های متخلخل تشکیل از ذره‌ها یا Adsorption می‌توانند باشند. در این جا کاربردهای عملیاتی را بررسی خواهیم کرد.

* ابتدا مقدمه‌ای برای معرفی غشا ها داریم.

انواع غشا ها از نظر داشتن حفره: غشاهای متخلخل prous membrane — غشاهای چگال dense membrane

غشاهای متخلخل خودشان چند نوع هستند:

1) macro porous membrane → اندازه حفرات بزرگتر از ۵۰ nm است.

2) meso porous membrane → اندازه حفرات بین ۲nm و ۵۰nm است.

3) micro prous membrane → اندازه حفرات کمتر از ۲nm است.

غشاهای چگال: غشاهای هستند که حفره ندارند. یعنی اگر بخواهد عبور کند باید حل شود و نفوذ کند.

این نفوذ به خاطر اختلاف پتانسیل شیمیایی رخ می دهد.

انواع غشا ها از نظر جنس:

1) inorganic membranes غشاهای معدنی:

این نوع غشا ها انواع مختلفی دارند:

غشاهای سرامیکی، سیلیکا SiO_2، زیرکونیا ZrO_2، TiO_2، آلومینا (α یا γ Al_2O_3)،

زئولیت ها: Zeolites (ترکیبی از SiO_2 و Al_2O_3) هستند و نقش غربال مولکولی دارند

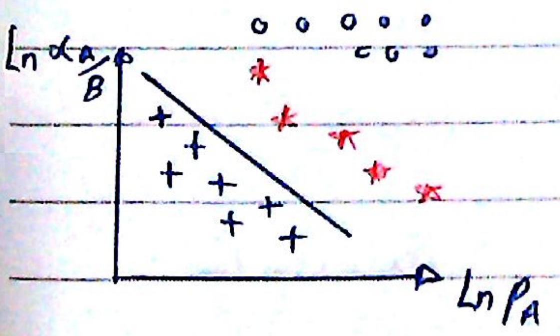
۲) Polymeric membrane — غشاهای پلیمری

این غشاها می توانند متخلخل (porous) یا چگال (dense) باشند.

۳) mixed matrix membranes (MMMs)
غشاهای شبه مختلط

غشاهای معدنی برخلاف غشاهای پلیمری، در محیط های سمی یا محیط های دما بالا می توانند به راحتی جداسازی مطلوب خود را انجام دهند. اما غشاهای معدنی معایبی نیز دارند. مثلا یک مشکلی که غشاهای معدنی دارند این است که شکننده اند. بنابراین نمی توان از آن ها به صورت ماژول های حلزونی و الیاف توخالی استفاده کرد. با این وجود بازده جداسازی غشاهای معدنی بیشتر از غشاهای پلیمری است.

چون برای جداسازی غشاهای معدنی محدودیت داریم:



+ : غشاهای پلیمری ‌ ‌ o : غشاهای معدنی ‌ ‌ ★ : غشاهای شبه مختلط

P_A : میزان دبی تراوش یافته : permeability

$\alpha_{A/B}$: بیان کننده میزان جداسازی است، هرچه بیشتر باشد، جداسازی بهتر انجام شده است.

* با توجه به نمودار نشان داده شده، برای غشاهای پلیمری به طور همزمان نمی توان هم دبی تراوه و هم درصد

خلوص بالا داشت.

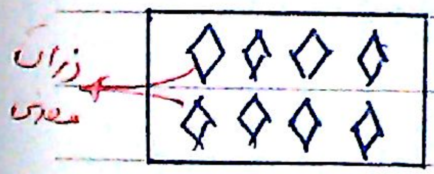
لذا غشاهای معدنی درصد خلوص و درجه کریستالی بالایی دارند. اما فرآیند و process سختی دارند

چون شکننده هستند، نمی‌توان نسبت سطح به حجم بالای آن‌ها را استفاده کرد.

* برای حل این مشکل، ترکیبی از غشاهای معدنی و پلیمری را استفاده می‌کنند. همان غشاهای ترکیبی هستند.

فرض کنید که ماتریس زمینه یک شبکه پلیمری باشد که ذرات معدنی را با روش‌های خاصی درون آن قرار داده‌ایم:

* برای غشاهای شبه مختلط دو حالت داریم:



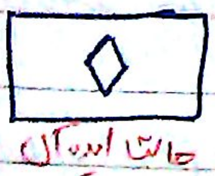
۱) اگر فاز معدنی متخلخل باشد ۲) اگر فاز معدنی چگال باشد.

دو حالت بالا هر کدام چند حالت دارند. قوانین انتقال جرمی که باید برای این محیط‌ها به کار برد کاملاً

متفاوت است.

Morphology of MMMs:

* ساختارهای متفاوتی برای غشاهای شبه مختلط ارائه شده است:



حالت ایده‌آل

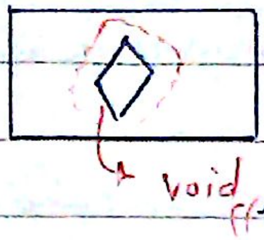
۱) بین ذره معدنی و پلیمر فضای خالی و ناحیه آزادی نباشد:

همینطور پلیمری که ساختارش تغییر کرده باشد هم در اطراف ذرات معدنی وجود ندارد.

این حالت، حالت ایده‌آل است و برای این نوع از مدل ماکسول استفاده می‌شود

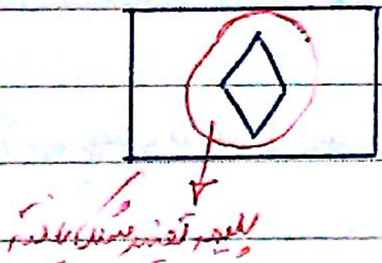
۲) به خاطر اختلاف ماهیتی که بین فاز معدنی و پلیمری وجود دارد، فضاهای خالی بین فازها ایجاد می‌شود

که به آن ها void می‌گوییم.



(بسته به اینکه فاز معدنی، متخلخل باشد یا چگال، مدل انتقال جرم فرق می‌کند)

۳) در اطراف ذره معدنی، مقداری پلیمر تغییر شکل یافته وجود دارد. یعنی یک فاز جدید بین فاز معدنی و پلیمری به وجود آمده که به آن rigidified polymer یا پلیمر تغییر شکل داده شده می‌گویند.



۴) Metal membranes غشاهای فلزی

از قبیل پالادیوم (Pd)، نقره (Ag)، فولاد ضد زنگ (S.S) و... که هر کدام می‌توانند متخلخل یا چگال باشند. مثلاً برای خالص‌سازی هیدروژن در پیل‌های سوختی از این نوع غشاها استفاده می‌شود که روابط انتقال جرم خاص خودشان را دارند.

اما این تقسیم‌بندی دیدگاه هم وجود دارد. بسته به اینکه فاز خوراک چه باشد، به صورت زیر تقسیم می‌شوند:

Subject:
Yare: Month: Day: Page: ( )

۱) غاز گازی ← gas separation

۲) فاز مایع ← Liquid separation : خودش انواعی دارد : MF و UF و NF و RO

۳) بخار ← مانند تراوش تبخیری یا pervaporation

* مکانیزم انتقال جرم برای هرکدام از حالت های فوق متفاوت است. مکانیزم فقط به اندازه منافذ وابسته نیست بلکه به برهمکنش بین ماده و غشا و همچنین جنس غشا به مکانیزم انتقال جرم موثر است.

* ابتدا به انتقال جرم در محیط متخلخل (porous media) می پردازیم. اولین کسی که این مبحث را بررسی کرده ، دارسی است.

جلسه نهم : ۹٤/۱۲/۷ .

حرکت سیال در محیط جامد متخلخل بسته به اینکه سیال خالص باشد یا اینکه مخلوطی از گازهای مختلف باشد متفاوت است.

ابتدا بحث برای سیال خالص بررسی می کنیم.

دارسی از اولین کسانی بود که جریان آرام (Laminar) سیال را در محیط متخلخل بررسی کرده است.

منظور از سیال، مایع یا گاز است. ابتدا مایع را بررسی می کنیم.

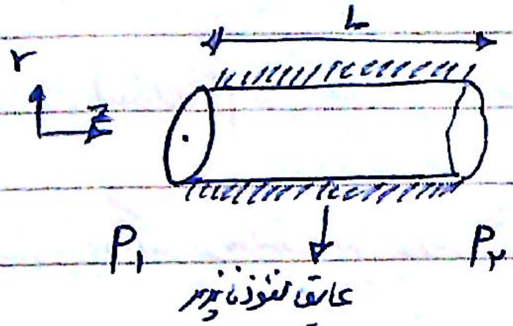
KABIR

دارسی یک Core (استوانه ای از جنس سنگ مخزن نفتی) را برای آزمایش های خود به کار برد.

دارسی این Core را از قسمت سطح جانبی، عایق می کرد. دلیل این بود که جریان فقط در جهت z

باشد. فشار بالا دست را با P_1 و فشار پایین دست را P_2 فرض می کردند. طول این Core L

بوده است.



A : سطح مقطع

* در آزمایشات مشاهده شد که سرعت مایع متناسب با گرادیان فشار (در اینجا $\frac{dp}{dz}$) است.

همچنین سرعت مایع متناسب با عکس ویسکوزیته مایع بوده است.

$$u_L \propto \nabla P \left(\frac{dp}{dz}\right)$$

$$u_L \propto \frac{1}{\mu_L}$$

μ مربوط به خاصیت سیال و $\frac{dp}{dz}$ به شرایط جریان مربوط است.

بنابراین سرعت مایع متناسب است با:

$$u_L \propto \frac{\nabla P}{\mu_L}$$

* چون با افزایش z، کاهش فشار داریم بنابراین مشتق گرادیان فشار منفی $\frac{dp}{dz}<0$ است. بنابراین باید یک منفی در تناسب داشته باشیم.

با استفاده از ضریب تناسب K_L رابطه ی زیر به دست آمد که به قانون دارسی معروف است:

$$\boxed{u_L = \frac{-K_L}{\mu_L}\frac{dp}{dz}}$$

K_L : ضریب تراوایی Core یا permeability نام دارد. (واحدش «دارسی» است)
Coff (Darcy)

اگر رابطه فوق را در سطح مقطع Core (A) ضرب کنیم:

$$A u_L = q_L = \frac{-K_L}{\mu_L} A \frac{dp}{dz}$$

حالا اگر این معادله را حل کنیم:

$$q_L \int_0^L dz = \frac{-K_L}{\mu_L} \int_{P_1}^{P_2} A\,dp$$

$$\rightarrow \boxed{q_L = \frac{K_L A}{\mu_L}\left(\frac{P_1 - P_2}{L}\right)}$$

به فرم جدید قانون دارسی برای مایع رسیدیم.

K_L را می‌توان از رابطه‌ی فوق بیرون کشید:

$$K_L = \frac{q_L \mu_L}{A\left(\frac{P_1 - P_2}{L}\right)}$$

* اگر واحد های SI را جایگذاری کنیم، واحد K_L برحسب m^2 خواهد بود. اما واحد m^2 مرسوم نیست. بلکه از واحد دارسی استفاده می‌کنند.

$$1D = 0.987 \times 10^{-12}\ m^2$$

تعریف دارسی:

$$\underline{\underline{1D}} = \frac{1\left(\frac{cm^3}{s}\right) \times (1\,cp)}{1\,cm^2 \times \frac{1\,atm}{1\,cm}}$$

یعنی اگر دبی $1\frac{cm^3}{s}$ از مایعی با ویسکوزیته $1cp$ را از درون استوانه متخلخل (core) با سطح

مقطع $1cm^2$ و با گرادیان فشار $\frac{1atm}{1cm}$ عبور دهیم، تراوش پذیری آن core، ۱ دارسی

خواهد بود.

* البته $1D$ عدد بزرگی است و معمولاً از میلی دارسی mD استفاده می کنند.

فرضیات قانون دارسی:

۱) حرکت سیال آرام است. Laminar flow ← سرعت سیال در محیط متخلخل کم است.

۲) تنش سطحی در دیواره حفرات صرف نظر می شود ۳) سرعت در دیواره های حفره صفر است.
slip = 0

* F_L را mass velocity می نامیم که به صورت زیر تعریف می شود:

$$F_L = u_L \rho_L = \frac{K_L A \rho_L}{\mu_L}(P_1 - P_2) \qquad \rho_L = cte : \text{دانسیته ثابت}$$

$\left(\frac{kg}{m^2.s}\right)$

با تقسیم بر جرم مولکولی، N_L $\left(\frac{mole}{velocity}\right)$ به دست می آید.

$$N_L = \frac{F_L}{M} = \frac{K_L \rho_L}{M \mu_L}\left(\frac{P_1 - P_2}{L}\right)$$

$\left(\frac{mole}{m^2.s}\right)$

N (این بزرگی) بدین فضا است که نسبت به مقطعات ساکن داریم بررسی می کنیم.

* به اختلاف $P_1 - P_2$ (فشار بالا دست منهای پایین دست) ΔP گفته می شود. (برخلاف عرف معمول)

$\Delta P = P_1 - P_2$

* روابطی که تا اینجا گفتیم برای مایعات بود. حالا برای گازها بررسی می کنیم:

برای گازها:

$$f_g = \rho_g u_g = \frac{-k_g}{\mu_g}\rho_g \frac{dp}{dz}$$

$\left(\frac{kg}{m^2.s}\right)$

((واحد mass velocity با شار (flux) یکی است ولی اصطلاح flux را فقط برای نفوذ به کار می بریم))

تا اینجا چون سیال تراکم پذیر است پس ρ ثابت نیست:

طبق معادله گازهای ایده آل: $\rho_g = \frac{PM}{RT}$

این عبارت را در رابطه‌ی f_g قرار می دهیم:

$$f_g = \frac{-k_g M}{\mu_g R T}\frac{p\,dp}{dz}$$

باز هم می توان طرفین را بر M تقسیم کرد و N_g را به دست آورد:

$$\left(\frac{mole}{m^2.s}\right) N_g = \frac{F_g}{M} = \frac{-k_g}{\mu_g R T}\frac{p\,dp}{dz}$$

می توان انتگرال گیری کرد:

$$N_g\int_0^L dz = \frac{-k_g}{\mu_g R T}\int_{P_1}^{P_2} p\,dp$$

$$\rightarrow \boxed{N_g = \frac{k_g}{2\mu_g R T L}\left(P_1^2 - P_2^2\right)}$$

KABIR

این رابطه‌ی دارسی برای گازها است.

N در این جا، باتوجه به مباحث جلسه اول، شامل نفوذ مولکولی و حرکت توده است.
(نسبت به صفحات قبل)

اما فعلاً در این جا نفوذ مولکولی نداریم.

* در این حرکت سیال خالص در جامد متخلخل را بررسی می کنیم که شامل:

جریان جابه جایی (Convenctive) یا advective   جریان نفوذی (diffusive)

مباحثی که تا اینجا گفتیم، مربوط به جریان جابه جایی یا Convective است. هنوز وارد مبحث نفوذ نشده ایم.

- جریان جابه جایی (Conevctive) در محیط متخلخل برای سیال خالص، خودش ۳ حالت است:

۱) Darcy law ← برای مایع و گاز بود ← در سرعت های پایین

(اگر سرعت بالا باشد رابطه دارسی با داده های تجربی هماهنگ نخواهد بود)

۲) Brinkman ← برای سرعت های زیادتر استفاده می شود و تنش سطحی را در سطح جامد در نظر می گیرد. (اینجا قانون هم مانند دارسی برای جریان Laminar است فقط کمی سرعت بیشتر است)

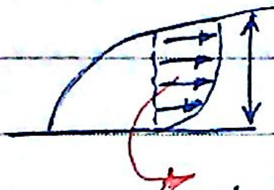
رابطه Brinkman:

$$\nabla P_g = \underbrace{\frac{-\mu_g}{K_g \theta_c} u_g}_{\text{مقاومت دارسی}} + \underbrace{\frac{\mu_e \nabla^2 u}{\theta_c}}_{\text{مقاومت جریان}}$$

اگر واحدهای انگلیسی بود باید g_c را در نظر گرفت. اگر SI بود: $g_c = 1$

این رابطه بیان می‌کند که زمانی که سرعت در جامد متخلخل تا حدی زیاد باشد که قانون دارسی نتواند به خوبی داده‌های تجربی را پیش‌بینی کند، گرادیان فشار دارای مقاومت دارسی و مقاومت سیال خواهد بود. (در رابطه دارسی از مقاومت جریان صرف‌نظر می‌کردیم).

* اگر لایه مرزی به صورت مقابل باشد:



$\delta = \sqrt{K_g}$

$\tilde{\mu}$ ویسکوزیته در ناحیه لایه مرزی است که آن را با ویسکوزیته بالک برابر فرض می‌کنیم: $\tilde{\mu} = \mu$

$\tilde{\mu}$ =

* در رابطه Brinkman همانند رابطه دارسی، فرض non-slip (عدم لغزش) در دیواره‌ها را داریم.

* همچنین رابطه‌ی بین ضخامت لایه مرزی و K_g به صورت مقابل است: $\delta = \sqrt{K_g}$

(۳) Forchheimer ⟵ برای جریان در رژیم Turbulent است. (۱۱۲)

$$\boxed{\nabla p_g = \frac{-\mu_g u_g}{K_g} - C_F K_g^{-\frac{1}{2}} \rho_g u_g^2}$$

گرادیان جریان گاز فشار از یک رابطه خطی با سرعت گاز (u_g) دارد که همان رابطه دارسی است و یک رابطه غیرخطی بر حسب سرعت است. یعنی تاثیر سرعت گاز بر روی گرادیان فشار شامل دو جمله است، مقاومت خطی و مقاومت غیرخطی

* C_F تابع ناهمواری مکانیکی است و مقدارش بین ۰/۱ تا ۰/۵۵ دارد.

اگر طرفین را بر عبارت $-k_g^{-\frac{1}{2}}\rho_g u_g^2$ تقسیم کنیم:

$$\frac{\nabla P_g}{-k_g^{-\frac{1}{2}}\rho_g u_g^2} = \frac{-\frac{\mu_g u_g}{k_g}}{-k_g^{-\frac{1}{2}}\rho_g u_g^2} + C_F = \frac{\mu_g}{k_g^{\frac{1}{2}}\rho_g u_g} + C_F$$

در واقع گرادیان فشار ∇P_g متناسب است با:

$$\nabla P_g \propto \left(\frac{\mu_g}{k_g \rho_g u_g} + C_F\right)$$

* عدد رینولدز بر مبنای تراوایی نفوذپذیری به صورت مقابل تعریف می‌شود:

$$Re_k = \frac{\rho_g u_g \sqrt{k_g}}{\mu_g}$$: Reynold's number based permeability

بنابراین گرادیان فشار (∇P_g) متناسب است با:

$$\nabla P_g \propto \left(\frac{1}{Re_k} + C_F\right)$$

* بنابراین می‌توان نتیجه گرفت که :

$$u\uparrow \rightarrow Re_k\downarrow \rightarrow \frac{1}{Re_k}\uparrow \rightarrow \nabla P_g \propto C_F$$: Forchheimer

در جریان آشفته ، C_F بیشتر از Re_k روی گرادیان فشار تاثیرگذار است.

* معمولاً انتقال مکانیزم از دارسی به Forchheimer در محدوده ۱ تا ۱۰ اتفاق می‌افتد.

$(Re_k : 1-10)$

* همچنین :

$$u\downarrow \rightarrow Re_k\downarrow \rightarrow \frac{1}{Re_k}\uparrow \rightarrow \nabla P_g \propto \frac{1}{Re_k}$$: مکانیزم دارسی

- اگر $C_F = 0$ باشد، مکانیزم دارسی است.

* اگر رابطه‌ی دارسی که برای گاز به دست آوردیم :

$$N_g = \frac{K_g}{2\mu_g RTL}(P_1^2-P_2^2)$$

کمی تغییر می‌دهیم :

$$N_g = \frac{K_g}{2\mu_g RTL}(P_1+P_2)(P_1-P_2)$$

$$= \frac{K_g}{\mu_g RTL}\underbrace{\left(\frac{P_1+P_2}{2}\right)}_{P_{ave}}(P_1-P_2) = \frac{K_g}{\mu_g RTL}P_{ave}\,\Delta P$$

منظور از P_{ave} : میانگین فشار بالادست و پایین‌دست core :

* اگر در Δp ثابت، P_{ave} را کم کنیم، مطابق رابطه فوق (رابطه دارسی)

رابطه ی: $\downarrow P_{av} \xrightarrow{\Delta p = Cte} \downarrow N_g$ یا f_g ← یعنی:

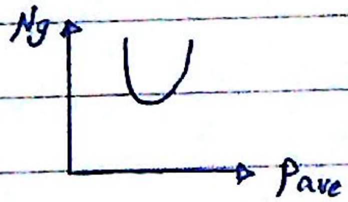
* اگر حفرات core از حدی کوچکتر باشند، نتایج واقعی که از آزمایشات بدست می‌آید به صورت زیر خواهد بود:

چهار

در واقعیت

$\downarrow P_{av} \xrightarrow{\Delta p = Cte} \downarrow N_g$ اما اگر P_{av} را همچنان کاهش دهیم:

$P_{av} \downarrow\downarrow \longrightarrow N_g \uparrow$ یعنی:



علت:

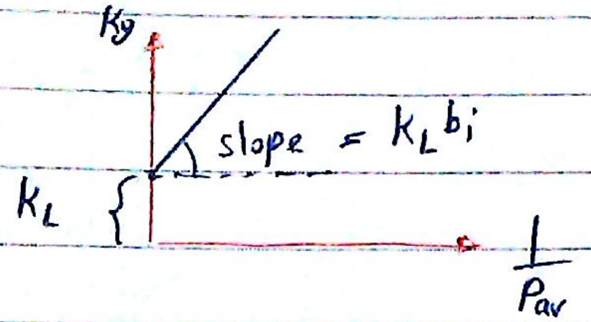
دلیل اینکه با کاهش P_{av}، N_g زیاد شده است این است که پدیده لغزش slip در دیواره ها رخ می‌دهد یعنی دیگر سرعت در دیواره صفر نخواهد بود.

* برای اولین بار کلینکنبرگ (klinkenberg) رابطه‌ی دارسی را اصلاح کرد. یعنی K_g را که در رابطه دارسی ثابت در نظر گرفته می‌شد اصلاح کرد و آن را تابعی از فشار تعریف کرد:

$$K_g = K_L \left(1 + \frac{b_i}{P_{av}}\right)$$ Klinkenberg Eq

این رابطه کلاینکنبرگ نام دارد و بیان می‌کند که اگر K_g (تراوایش پذیری گاز) را برحسب $\frac{1}{P_{av}}$

برنقطه بکشیم، K_g مقدار ثابتی نیست بلکه:



b_i: ثابت کلاینکنبرگ است و تابعی از ناحیه متخلخل، دما و گاز عبور کننده است:

b_i = Klinkenberg Eq $\quad b_i = f$ (گاز عبور کننده، T، و ناحیه متخلخل)

همچنین در برخی از منابع و مقالات، b_i را تابعی از K_L معرفی کرده اند: $b_i = g(K_L)$

* در فشارهای زیاد، رابطه دارسی برقرار و درست است و $K_g = K_L$ خواهد بود.

- مثلاً اگر سیال مورد آزمایش هوا باشد، b_i را به صورت زیر گزارش کرده اند:

برای سنگ مخازن نفتی: $b_{air}(T = 25°C) = 0/11\, K_L^{0/39}$

برای سنگ مخازن ماسه‌ای: $b_{air}(T = 25°C) = 0/98\, K_L^{-0/33}$

اگر دما غیر از $25°c$ باشد و یا اگر گاز دیگری داشته باشیم، باید با رابطه‌ی زیر b_i را اصلاح کنیم:

$$\boxed{b_i = b_{air}\left(\frac{\mu_i(T)}{\mu_{air}(T_{ref})}\right)\left(\frac{M_{air}}{M_i}\right)^{\frac{1}{2}}\left(\frac{T}{T_{ref}}\right)^{\frac{1}{2}}}$$