Subject:
Year Month Date

نکته: در این سؤال سطح مقطع ثابت است و تابعی از Z نیست. اما مثلاً 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

$\xrightarrow{\div A\,dz}$ با قانون فیک

$$\boxed{\frac{\partial C_A}{\partial t} = D\,\frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2}}$$

این معادله را می‌توانیم (با تعریف لاپلاسین هم به دست بیاوریم) (تعریف گرادیان و لاپلاسین در مختصات های مختلف در ضمیمه A کتاب Bird (ویرایش دوم) آمده است. مراجعه کنید. همچنین باید تبدیلات مختصات کارتزین به استوانه‌ای و کروی را باید بلد باشیم که در همان ضمیمه A آمده است))

از طرفی می‌توانیم بدون المان گیری و با استفاده از معادله نفوذ، معادله فوق را به دست آورد:

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = D\nabla^2 C_A = D\left(\cancel{\frac{\partial^2 C_A}{\partial x^2}} + \cancel{\frac{\partial^2 C_A}{\partial y^2}} + \frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2}\right)$$ (معادله B.11-1 کتاب Bird)

- با توجه به اینکه صورت سؤال فرض کرده است که وجه جانبی عایق است و فقط وجه‌های در جهت Z عایق نیستند

همچنین چون ضخامت در مقابل طول و عرض خیلی کم است می‌توان از تغییر غلظت در جهت x و y صرف نظر کرد.

Subject:

Year Month Date

(در هر جهتی که اندازه کسته باشد تغییرات در همان جهت فرض می کنیم. مثلا در اینجا z در مقایسه با طول خیلی کم است. پس تغییرات معقول در جهت z داریم)

بنابراین به معادله ی زیر می رسیم که معادله فیک معروف است:

$$\boxed{\frac{\partial C_A}{\partial t} = D\,\frac{\partial^2 C_A}{\partial t}}$$

همان طور که مشاهده می شود به همان معادله صفحه قبل رسیدیم. پس می توان انتگرال گیری و حل از معادله نفوذ استفاده کنیم و به یک جواب می رسیم.

* می خواهیم از تبدیل لاپلاس برای حل این معادله و شرایط مرزی اش (ص ۵۲ جزوه) استفاده کنیم.

بنابراین کمی یادآوری می کنیم:

برای تابع تک متغیره:

$$\bar{f}(s) = L\left[f(t)\right] = \int_0^\infty e^{-st} f(t)\,dt$$

$$f(t) = L^{-1}\left[\bar{f}(s)\right]$$

برای تابع چند متغیره:

$$\bar{f}(x,s) = L_t\left[f(x,t)\right] = \int_0^t e^{-st} f(x,t)\,dt$$

تبدیل لاپلاس از مشتق ها:

$$L_t\left[\frac{\partial f(x,t)}{\partial t}\right] = s\bar{f}(x,s) - f(x,0)$$

لاپلاس مشتق نسبت به x :

$$L_t\left[\frac{\partial f(x,t)}{\partial x}\right] = \frac{\partial \bar{f}(x,s)}{\partial x}$$

کافی است که ابتدا از $f(x,t)$ لاپلاس بگیریم و بعد مشتق نسبت به x بگیریم.

برای مشتق های دوم و بالاتر نسبت به x هم به همین عنوان خواهد بود.

بنابراین اگر از چنین معادله ی PDE لاپلاس بگیریم به یک معادله ی ODE تبدیل خواهد شد.

- تغییر متغیر:

$$y' = C_A - C_A^* \quad , \quad y' = y'(z,t)$$

بنابراین شرایط مرزی بدین ترتیب عملی خواهد شد. فلذا اینکه y' را محاسبه کردیم C_A هم به دست می آید.

بنابراین اگر معادله حاکم را برحسب y' بنویسیم خواهیم داشت:

$$(PDE): \frac{\partial y'}{\partial t} = D\frac{\partial^2 y'}{\partial z^2}$$

حال از چنین تبدیل لاپلاس می گیریم:

$$\left.\begin{aligned} L_t\left[\frac{\partial y'}{\partial t}\right] &= s\bar{y} - y'_0 \\ L_t\left[\frac{\partial^2 y'}{\partial z^2}\right] &= \frac{d^2\bar{y}}{dz^2} \end{aligned}\right\} \longrightarrow \frac{d^2\bar{y}}{dz^2} - \frac{s\bar{y}}{D} = -\frac{y'_0}{D}$$

معادله ODE شد:

از حل جواب های عمومی و خصوصی این معادله ODE نتایج زیر به دست می آید:

$$\bar{y} = c_1 e^{-\sqrt{\frac{s}{D}}z} + c_2 e^{\sqrt{\frac{s}{D}}z} + \frac{y'_0}{s}$$

((حل جواب عمومی از طریق معادله مشخصه و حل جواب خصوصی از روش ضرایب نامعین انجام می شود))

Subject:
Year Month Date

حالا باید با استفاده از شرایط مرزی، C_1 و C_2 را بدست بیاوریم:

داریم: $\frac{\partial C_A}{\partial z}(0,t)=0 \rightarrow \frac{d\bar{y}(0,s)}{dz}=0$

$$\rightarrow -C_1\sqrt{\frac{s}{D}}+C_2\sqrt{\frac{s}{D}}=0 \rightarrow C_1=C_2$$

بنابراین: $\bar{y}=C_1\left[e^{-\sqrt{\frac{s}{D}}z}+e^{\sqrt{\frac{s}{D}}z}\right]+\frac{y'_0}{s}$

اما شرط مرزی بعدی:

$$C_A(a,t)=C_A^* \rightarrow y'(a,t)=0 \xrightarrow{L} \bar{y}(a,s)=0$$

با جایگذاری این رابطه در $\bar{y}$، ضریب C_1 بدست می‌آید:

$$C_1=\frac{-y'_0}{s\left[e^{-\sqrt{\frac{s}{D}}a}+e^{\sqrt{\frac{s}{D}}a}\right]}=C_2$$

حالا این ضرایب را در $\bar{y}$ جایگذاری می‌کنیم:

$$\bar{y}=\frac{-y'_0}{s}\left[\frac{e^{-\sqrt{\frac{s}{D}}z}+e^{\sqrt{\frac{s}{D}}z}}{e^{-\sqrt{\frac{s}{D}}a}+e^{\sqrt{\frac{s}{D}}a}}\right]+\frac{y'_0}{s}$$

برای اینکه بتوانیم به راحتی از آن معکوس لاپلاس بگیریم، کمی تغییر در آن می‌دهیم: (صورت و مخرج را بر $e^{\sqrt{\frac{s}{D}}a}$ تقسیم می‌کنیم)

$$\bar{y}=\frac{-y'_0}{s}\left[\frac{e^{-\sqrt{\frac{s}{D}}(a+z)}+e^{-\sqrt{\frac{s}{D}}(a-z)}}{e^{-2\sqrt{\frac{s}{D}}a}+1}\right]$$

حالا می‌توان با استفاده از بسط زیر:

$$\frac{1}{1+x}=\sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n x^n$$

عبارت مخرج را ساده کرد:

مخرج رابطه $\bar{y}$

$$\frac{1}{1+e^{-2\sqrt{\frac{s}{D}}a}}=\sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n e^{-2n\sqrt{\frac{s}{D}}a}$$

حالا این بسط را وارد رابطه‌ی $\bar{y}$ می‌کنیم:

$$\bar{y}=y_0'\left[\frac{1}{s}-\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n}{s}e^{-\sqrt{\frac{s}{D}}\left[(2n+1)a-z\right]}-\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n}{s}e^{-\sqrt{\frac{s}{D}}\left[(2n+1)a+z\right]}\right]$$

این عملیاتی که انجام دادیم برای این است که بتوان با استفاده از جدول های ریاضی تبدیل معکوس لاپلاس گرفت. این روابطی که در اینجا به دست آمده در جداول موجود است. بنابراین خواهیم داشت:

ص ۱۶۹ کتاب اشتیل

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

بنابراین C_A هم تابع z است و هم t که در معادله مشاهده می‌شود.

- حالا می‌خواهیم مقدار $\bar{C}_A$ (غلظت متوسط‌کانی) را در زمان t به دست بیاوریم.

اگر N_{Az} را که به صورت تابعی از t است، به دست بیاوریم، خواهیم داشت:

$$N_{Az}(t)=-D\left.\frac{dC_A}{dz}\right)_{z=a}\quad\left(\frac{mol}{m^2\cdot s}\right)$$

FARHANG

این فرمول میزان شار را در لحظه‌ی t و در $z = a$ (سطح جسم) به ما می‌دهد.

حالا اگر مانند مثال قبل، بخواهیم کل مول منتقل شده از مرز جسم را از لحظه‌ی ۰ تا t به دست بیاوریم،

به صورت زیر عمل می‌کنیم:

کل مول A منتقل شده (از سطح جسم از لحظه‌ی t تا ۰):

$$\underset{(\text{mole } A)}{N_A'} = 2A \times \int_0^t N_{Az}(t)\Big|_{z=a} dt$$

که در اینجا A تابعی از z نیست و یک عدد ثابت است: $A \neq f(z)$

از طرفی N_A' یا همان کل مول‌های منتقل شده را می‌توان به صورت زیر نیز بیان کرد:

$$\underset{(\text{mol } A)}{N_A'} = \underbrace{(C_{A0} - \bar{C}_A)}_{\text{غلظت منتقل شده}}\underbrace{(2Aa)}_{\text{حجم}}$$

حالا از تساوی قرار دادن این دو رابطه خواهیم داشت:

$$C_{A0} - \bar{C}_A = \frac{1}{a}\int_0^t N_{Az}(t)\Big|_{z=a} dt$$

H.W 7) اثبات کنید که از فرمول بالا می‌توان به رابطه‌ی زیر رسید:

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

برای زمان‌های کم، داده‌های آزمایشگاهی، معادلات فوق که از روش تبدیل لاپلاس به دست آمده را تصدیق می‌کنند.

اما برای زمان های بالا ، روش تبدیل لاپلاس جواب های دقیقی نمی دهد و باید از separation of variables استفاده کنیم

- حالا اگر از روش جداسازی متغیرها برای این مساله استفاده کنیم ، به جواب زیر می رسیم :

$$C_A(z,t) = C_A^* + \frac{4}{\pi}\left(C_{A_0} - C_A^*\right)\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n}{2n+1}\cos\left[\frac{(2n+1)\pi z}{2a}\right]$$
$$\times \exp\left[\frac{-D(2n+1)^2\pi^2 t}{4a^2}\right]$$

HW 8) این رابطه را با روش جداسازی متغیرها اثبات کنید :

حالا غلظت متوسط $\bar{C}_A$ را در هر لحظه می توان به صورت زیر به دست آورد :

* برای t های زیاد و طولانی مناسب است.

$$\frac{C_{A_0} - \bar{C}_A}{C_{A_0} - C_A^*} = 1 - \frac{\bar{C}_A - C_A^*}{C_{A_0} - C_A^*} = 1 - \frac{8}{\pi^2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{(2n+1)^2} \times$$
$$\exp\left[\frac{-D(2n+1)^2\pi^2 t}{4a^2}\right]$$

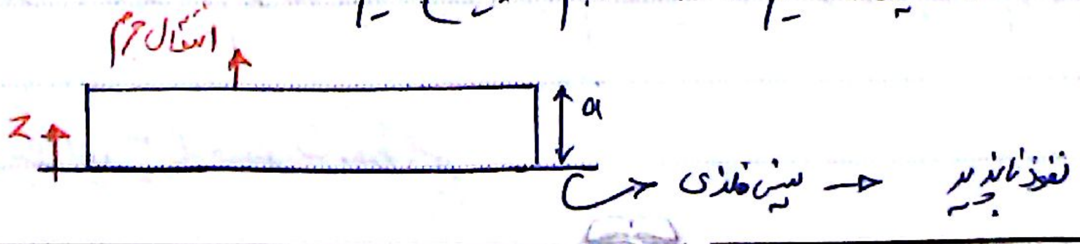
HW 9) این رابطه را هم اثبات کنید.

- این رابطه هایی که به دست آمد مشابه روابطی است که در عملیات واحد ۲ برای خشک کردن (drying) به دست می آمد.

حل حالت ۲ :

حالت دوم : نفوذ از یک سطح جسم انجام می شود و سطح دیگر انتقال جرم نداریم.

مانند حالتی که در خشک کن های سینی دار داریم که فقط انتقال جرم از یک سطح داریم

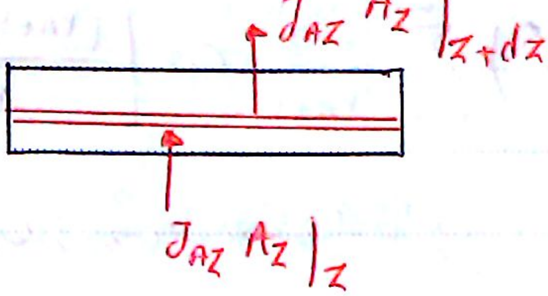


بنابراین :

$$\frac{\partial C_A(0,t)}{\partial z} = 0$$

$$C_A(a,t) = C_A^*$$

پس باید المانی که می‌کشیم به صورت مقابل باشد :

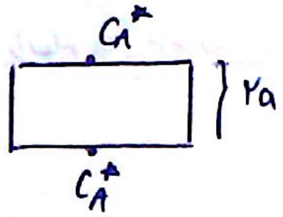


اگر دقت کنیم ، شرایط مرزی این مسأله با حالت اول (که برای نصف جسم نوشتیم) یکسان است . بنابراین

جواب عیناً همان حالت قبلی است . اما در اینجا حالت ، a ضخامت کل ولی در مسأله قبلی a نصف

ضخامت بود . پس در روابط مسأله قبل باید به جای a ، $\frac{a}{2}$ بگذاریم تا برای این مسأله هم صدق کند .

HW 10) برای شکل زیر ، توزیع غلظت $C_A(z,t)$ را بیابید :



شرط اولیه برای این مسأله : $C_A(z,0) = b\left[\left(1-\left(\frac{z}{a}\right)^2\right)\right]$

شرایط مرزی مانند حالت اول خواهد بود .

- در ادامه می‌خواهیم روابط فیک را برای ۳ سیستم کارتزین ، استوانه‌ای و کروی بنویسیم و همچنین لاپلاسین ∇^2

را برای این ۳ تا مختصات معرفی کنیم :

Subject:
Year Month Date

قانون فیک:

Cartesian Coordinates:

$$J_{Ax} = -D_{AB}\frac{\partial C_A}{\partial x}, \quad J_{Ay} = -D_{Ay}\frac{\partial C_A}{\partial y}, \quad J_{Az} = -D_{AB}\frac{\partial C_A}{\partial Z}$$

Cylindrical Coordinates:

$$J_{Ar} = -D_{AB}\frac{\partial C_A}{\partial r} \quad J_{A\theta} = -\frac{D_{AB}}{r}\frac{\partial C_A}{\partial \theta}, \quad J_{AZ} = -D_{AB}\frac{\partial C_A}{\partial Z}$$

Spherical Coordinates:

$$J_{Ar} = -D_{AB}\frac{\partial C_A}{\partial r} \quad J_{A\theta} = -D_{AB}\frac{\partial C_A}{r\partial \theta} \quad J_{A\varphi}\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial C_A}{\partial \varphi}$$

لاپلاسین:

$$\nabla^2 C_A = \frac{\partial^2 C_A}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_A}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2}$$: Cartesian

$$\nabla^2 C_A = \left[\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial C_A}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 C_A}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 C_A}{\partial Z^2}\right]$$: cylindrical

$$\nabla^2 C_A = \left[\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial C_A}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial \theta}\left(\sin\theta\frac{\partial C_A}{\partial \theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2 C_A}{\partial \varphi^2}\right]$$: spherical

- مثلا در مثال کره ای که داشتیم، تغییرات θ و φ را صرف نظر می کردیم و فقط جهت r را در نظر می گرفتیم

که رابطه اش:

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