انتقال جرم (Mass transfer): همانطور که در مبحث انتقال حرارت اشاره گردید مکانیزم انتقال در جریان آرام نفوذ مولکولی می‌باشد. فیک نشان داد که فلاکس انتقال جرم در نفوذ مولکولی متناسب با گرادیان غلظت بوده داریم:

$$J_{Ax} \propto \frac{\partial C_A}{\partial x} \Rightarrow \boxed{J_{Ax} = -D_{AB}\frac{\partial C_A}{\partial x}}$$

قانون اول فیک (نفوذ مولکولی)

J_{Ax}: فلاکس انتقال جرم مولی جزء A در جهت x $\left(\frac{kmol}{m^2 . s}\right)$

D_{AB}: ضریب نفوذ جرم A از میان B — Mass diffusivity $\left(\frac{m^2}{s}\right)$

C_A: $\left(\frac{kmol}{m^3}\right)$

با بردن معادله فوق از حالت مولی به حالت جرمی داریم:

$$\boxed{j_{Ax} = -D_{AB}\frac{\partial \rho_A}{\partial x}}$$

ρ_A: $\left(\frac{kg}{m^3}\right)$

j_{Ax}: $\left(\frac{kg}{m^2 . s}\right)$ فلاکس انتقال جرم جرمی جزء A در جهت x

ــ باید توجه نمود که معمولاً انتقال جرم هم به صورت نفوذ مولکولی (molecular diffusion) و جریان توده‌ای سیال (Bulk diffusion) صورت می‌پذیرد (البته فرمهای دیگری نیز برای انتقال جرم وجود دارد). بنابراین مرسوم است که فلاکس انتقال جرم به صورتی نوشته شود که هر دو فرم انتقال در آن لحاظ شده باشد. این فرم از فلاکس انتقال جرم را "فلاکس نسبت به مبدأ مختصات ساکن" نامیده و به صورت زیر تعریف می‌نمایند:

$$N_{Ax} = \overbrace{-D_{AB}\frac{\partial C_A}{\partial x}}^{\text{فلاکس انتقال جرم از طریق نفوذ مولکولی}} + \overbrace{C_A V_x}^{\text{فلاکس انتقال جرم در اثر حرکت توده سیال}}$$

V_x: سرعت سیال در جهت x

N_{Ax}: فلاکس مولی انتقال جرم جزء A نسبت به مبدأ ثابت

فلاکس انتقال جرم در اثر حرکت توده‌ای   فلاکس انتقال جرم در اثر نفوذ مولکولی

یا

$$n_{Ax} = -D_{AB}\frac{\partial \rho_A}{\partial x} + \rho_A V_x$$

فلاکس جرمی انتقال جرم جزء A

نسبت به مبدأ ثابت

فلاکس مولی کل مخلوط

تعداد اجزاء

البته با توجه به تعریف فلاکس داریم:

$$N_{total_x} = \sum_{i=A}^{NC} N_{ix} = (C_A V_{Ax} + C_B V_{Bx} + \dots) = C V_x$$

غلظت مولی جزء A

سرعت جزء A نسبت به مبدأ ثابت

دانسیته مولی مخلوط

سرعت متوسط مخلوط

$$n_{total_x} = \sum_{i=A}^{NC} n_{ix} = (\rho_A V_{Ax} + \rho_B V_{Bx} + \dots) = \rho V_x$$

فلاکس جرمی کل مخلوط

دانسیته جرمی مخلوط

سرعت متوسط مخلوط

$$\Rightarrow N_{Ax} = -D_{AM}\frac{\partial C_A}{\partial x} + \frac{C_A}{C}\overbrace{(C V_x)}^{N_{total}} = -D_{AM}\frac{\partial C_A}{\partial x} + x_A \sum_{i=A}^{NC} N_{ix} \quad \checkmark$$

ضریب نفوذ A از سایر مخلوط

کسر مولی جزء A

$$\Rightarrow n_{Ax} = -D_{AM}\frac{\partial \rho_A}{\partial x} + \frac{\rho_A}{\rho}\overbrace{(\rho V_x)}^{n_{total}} = -D_{AM}\frac{\partial \rho_A}{\partial x} + \omega_A \sum_{i=A}^{NC} n_{ix} \quad \checkmark$$

کسر جرمی جزء A

توجه:

دبی جرمی کل $= \rho A V_x \Rightarrow$ فلاکس جرمی کل $= \rho V_x$ ✓

دبی مولی کل $= C A V_x \Rightarrow$ فلاکس مولی کل $= C V_x$ ✓

- بنابراین بطور خلاصه برای سیالات با جریان آرام داریم:

$$\left[N_{Ax} - x_A \sum_{i=A}^{Nc} N_{ix}\right] = -D_{A,M}\frac{\partial C_A}{\partial x}$$

$$\left[n_{Ax} - \omega_A \sum_{i=A}^{Nc} n_{ix}\right] = -D_{A,M}\frac{\partial \rho_A}{\partial x}$$

"قانون فیک".

در جریان ناآرام (توربولنت)، دیگر روابط معادلات فوق صادق نمی‌باشد و لذا معمولاً از مفهوم ضریب انتقال جرم که براساس داده‌های آزمایشگاهی تعیین می‌شود برای محاسبه فلاکس انتقال جرم بصورت زیر استفاده می‌گردد:

$$\left[N_{Ax} - x_A \sum_{i=A}^{Nc} N_{ix}\right] = k_x \Delta x_A$$

mass transfer coefficient (mol basis), $\frac{kmol}{m^2 . s}$

$$\left[n_{Ax} - \omega_A \sum_{i=A}^{Nc} n_{ix}\right] = k_\omega \Delta \omega_A$$

mass transfer coefficient (mass basis), $\frac{kg}{m^2 . s}$

- اعداد بدون بعد مورد استفاده در محاسبه ضریب انتقال جرم: علاوه بر عدد رینولدز، دو عدد بدون بعد شروود (Sh) و اشمیت (Sc) نیز در محاسبه ضریب انتقال جرم بکار می‌روند.

sherwood, schmidt

این اعداد بصورت زیر تعریف می‌شوند:

momentum diffusivity, mass diffusivity

$$Pr = \frac{\nu}{\alpha} \Rightarrow Sc = \frac{D_{AM}}{\alpha}$$

thermal diffusivity

ضریب انتقال حرارت

$$Nu = \frac{hl}{k} \Rightarrow Sh = \frac{k_x l}{C D_{A,M}} \quad / \quad \frac{k_\omega l}{\rho D_{A,M}}$$

طول مشخصه

ضریب هدایت سیال

- البته از ترکیب اعداد بدون بعد فوق و دیگر اعداد بدون بعد، j را نیز تعریف نمود.

j فاکتور انتقال حرارت:

$$j_H = Nu\, Re^{-1}\, Pr^{-1/3}$$

j فاکتور انتقال جرم:

$$j_D = Sh\, Re^{-1}\, Sc^{-1/3}$$

- بعنوان نمونه روابط زیر برای محاسبه ضریب انتقال جرم داخل لوله ها ارائه شده است.

(R. E. Treybal, "Mass transfer operation", 3rd Ed., McGraw-Hill, 1980, Chapter 3, Table 3.3).

داخل لوله ها:

$$Sh = 0.023\, Re^{0.83}\, Sc^{1/3}\ ,\quad \begin{cases} Re = 4000 - 60{,}000 \\ Sc = 0.6 - 3000 \end{cases}$$

- توجه مهم: در محلولهای رقیق نسبت به A، در نفوذ خلاف جهت با دبی‌های مساوی برای مخلوطهای دوجزئی، در حالتهای و حضور گاز در مولکول که $\sum N_{ix}$ برابر با صفر است معادلات ضرایب انتقال جرم بصورت زیر خلاصه می‌شوند:

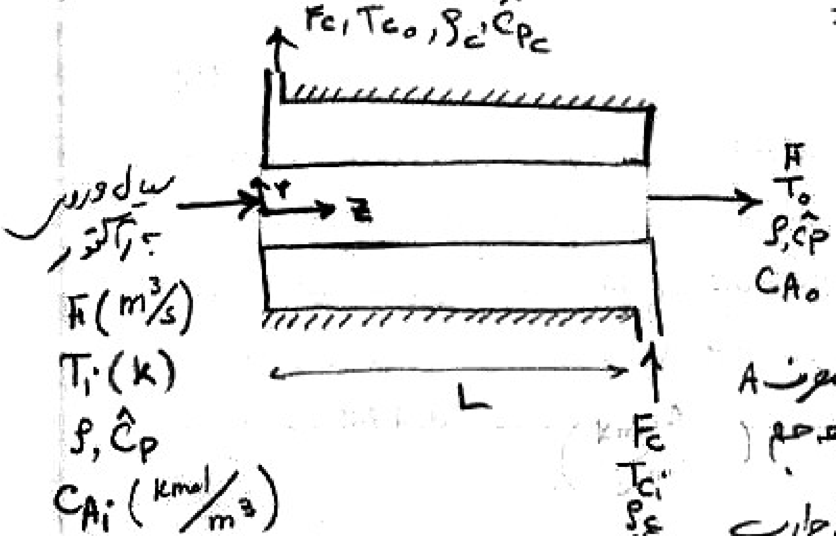
$$\begin{cases} N_{Ax} = k_x \Delta x_A \\ n_{Ax} = k_w \Delta w_A \end{cases} \xleftarrow{\text{حالات نفوذ خلاف جهت و ...}} \sum N_{ix} = 0 \ \text{یا}\ (\text{محلول رقیق نسبت به A})\ x_A \to 0$$

- تشابه حرارت و جرم: یکی دیگر از روشهای محاسبه ضریب انتقال جرم، استفاده از تشابه حرارت و جرم است. می‌توان بعضی از روابط مربوط به ضریب انتقال حرارت را در صورت برقراری تشابه، برای محاسبه ضریب انتقال جرم استفاده نمود. شرایط استفاده از تشابه عبارتند از:

۱- برقراری تشابه هندسی، ۲- ناچیز بودن انتقال حرارت از طریق تشعشع، ۳- تک فاز بودن رژیم جریان، ۴- آهسته بودن انتقال جرم

$$j_D = j_H\ ,\quad Nu \to Sh,\quad Pr \to Sc$$

مثال ۸: موازنه جرم و انرژی در یک راکتور لوله‌ای: راکتور لوله‌ای نشان داده شده در شکل زیر را در نظر بگیرید.



در این راکتور واکنش گرمازای زیر رخ می‌دهد:

$$A \xrightarrow{k} B$$

جانشین دارم

نرخ مصرف A: $R_A = k C_A$ (بر واحد حجم) $(kmol A/s.m^3)$

نرخ حرارت آزاد شده بر واحد مول A: $\Delta H_R < 0$ $\left(\frac{J}{s.kmol A}\right)$

ثابت سرعت واکنش: $k = k_0 e^{-E/RT}$

d_i = قطر داخلی لوله

d_o = قطر خارجی لوله

D_i = قطر داخلی پوسته

مدل دینامیکی حاکم بر فرآیند را تعیین کنید. در مدلسازی فرضیات زیر را در نظر بگیرید.

۱- اتلاف حرارت با محیط ناچیز است.

۲- مقاومت هدایتی دیواره راکتور و تجمع حرارت در آن ناچیز است.

۳- خواص سیال داخل راکتور و جداره ثابت است ($\rho, \hat{C}_p, \rho_c, \hat{C}_{p_c}$)

۴- فرض کنید که رژیم جریان داخل پوسته توربولنت بوده و لذا پروفایل جریان داخل پوسته را تخت (plug) در نظر گرفت. ضریب انتقال حرارت دیواره لوله با سیال داخل پوسته را h_c در نظر بگیرید.

۵- فرض کنید که رژیم جریان داخل لوله آرام بوده و لذا نمی‌توان جریان داخل لوله را تخت در نظر گرفت. سرعت سیال داخل لوله را فقط تابعی از r در نظر بگیرید ($V_z = V_z(r)$).

مدل‌سازی راکتور را در هر حالت زیر انجام دهید (لوله):

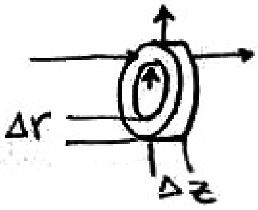
الف) از نفوذ مولکولی در جهت شعاع و محور نمی‌توان صرف‌نظر نمود.

ب) نفوذ مولکولی در جهت محوری ناچیز بوده ولی در جهت شعاعی باید منظور شود.

ج) نفوذ مولکولی در جهت شعاعی و محوری ناچیز است (Plug flow Reactor).

حالت الف) در نظر گرفتن نفوذ مولکولی در جهت شعاعی و محوری (دو جهته)

معادله جرم برای جزء A داخل لوله (دیفرانسیل در جهت شعاعی و محوری):



$$\frac{\partial\left[C_A \times \underbrace{(2\pi r \Delta r \Delta z)}_{\text{حجم المان}}\right]}{\partial t} = \left(N_{A_z} - N_{A_{z+\Delta z}}\right)(2\pi r \Delta r)$$

$$+\left(N_{A_r} - N_{A_{r+\Delta r}}\right)(2\pi r \Delta z) - k C_A (2\pi r \Delta r \Delta z)$$

حال دو طرف معادله فوق را بر المان حجم تقسیم کرده و آن را نسبت به صفر میل می‌دهیم، لذا داریم:

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = -\frac{\partial N_{A_z}}{\partial z} - \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r N_{A_r}\right) - k C_A \quad (1)$$

حال با توجه به اینکه داخل لوله جریان آرام وجود دارد و تنها از قانون اول فیک به صورت زیر استفاده می‌شود:

$$N_{A_z} - x_A N_{total_z} = -D_{AB}\frac{\partial C_A}{\partial z} \quad , \quad N_{total_z} = C V_z \quad , \quad x_A = \frac{C_A}{C}$$

$$\Rightarrow N_{A_z} = C_A V_z - D_{AB}\frac{\partial C_A}{\partial z} \quad (2)$$

$$N_{A_r} - x_A N_{total_r} = -D_{AB}\frac{\partial C_A}{\partial r} \quad , \quad N_{total_r} = C V_r = 0$$

حرکت سیال در جهت r نداریم

$$\Rightarrow N_{A_r} = -D_{AB}\frac{\partial C_A}{\partial r} \quad (3)$$

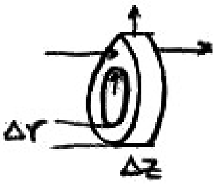
از جایگذاری معادلات (2) و (3) در (1) داریم:

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = -V_z \frac{\partial C_A}{\partial z} + D_{AB}\left[\frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial C_A}{\partial r}\right)\right] - k_0 e^{-E/RT} C_A \qquad \text{(I)}$$

$C_A = f(t, r, z)$, $V_z = f(r)$

معادله انرژی برای سیال داخل لوله (مایع) :

پراکندگی محوری (Axial Dispersion)



پراکندگی شعاعی (Redial Dispersion)

$$\frac{\partial\left[\rho \hat{C}_p T(2\pi r \Delta r \Delta z)\right]}{\partial t} = \rho \hat{C}_p\left[V_z T\Big|_z - V_z T\Big|_{z+\Delta z}\right](2\pi r\Delta r) + \left[q_z - q_{z+\Delta z}\right](2\pi r \Delta r)$$

$$+ \left[q_r - q_{r+\Delta r}\right](2\pi r \Delta z) - \Delta H_R\, k C_A\, (2\pi r \Delta r \Delta z)$$

حد طرفین معادله را بر المان حجم تقسیم کرده و آن را به سمت صفر میل می‌دهیم، لذا داریم:

$$\rho \hat{C}_p \frac{\partial T}{\partial t} = -\rho \hat{C}_p V_z \frac{\partial T}{\partial z} - \frac{\partial q_z}{\partial z} - \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(r q_r) - \Delta H_R\, k C_A$$

با توجه به اینکه رژیم جریان آرام است، می‌توان از قانون هدایت فوریه به صورت زیر استفاده کرد:

$$q_z = -k' \frac{\partial T}{\partial z} \quad , \quad q_r = -k' \frac{\partial T}{\partial r}$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = -V_z \frac{\partial T}{\partial z} + \alpha\left[\frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial T}{\partial r}\right)\right] - \frac{\Delta H_R k_0 e^{-E/RT} C_A}{\rho C_p} \qquad \text{(II)}$$

پراکندگی محوری (axial dispersion)

پراکندگی شعاعی (redial dispersion)

جریان آرام داخل لوله ؛ $V_z = V_{z,max}\left[1 - (r/r_i)^2\right]$

برای حل عددی معادلات (I) و (II) به یک شرط اولیه برای C_A، یک شرط اولیه برای T، چهار شرط مرزی برای C_A و چهار شرط مرزی برای T نیاز داریم.

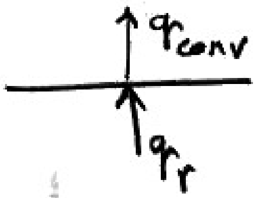
$$I.C)\quad t=0, \quad C_A = f_1(r,z), \quad T = f_2(r,z)$$

$$B.C1)\quad z=0; \quad C_A\big|_{z=0} = C_{Ai}, \quad T\big|_{z=0} = T_i$$

$$B.C2)\quad z=L, \quad \frac{\partial C_A}{\partial z}\bigg|_{z=L} = 0, \quad \frac{\partial T}{\partial z}\bigg|_{z=L} = 0$$

$$B.C3)\quad r=0, \quad \frac{\partial C_A}{\partial r}\bigg|_{r=0} = 0, \quad \frac{\partial T}{\partial r}\bigg|_{r=0} = 0$$

$$B.C4)\quad r=r_1, \quad \frac{\partial C_A}{\partial r}\bigg|_{r=r_1} = 0, \quad ?$$

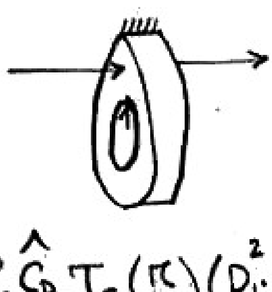


با توجه به صرف نظر از مقاومت هدایتی دیواره و تجمع حرارتی در آن:

$$-k' \frac{\partial T}{\partial r}\bigg|_{r=r_1} (2\pi r_1) = h'_c \left(T\big|_{r=r_1} - T_c\right)(2\pi r_0)$$

$$\boxed{\frac{\partial T}{\partial r}\bigg|_{r=r_1} + \left(\frac{h'_c d_0}{k' d_1}\right)\left(T\big|_{r=r_1} - T_c\right) = 0}$$ شرط مرزی

همانطور که مشاهده می‌گردد برای استفاده از شرط مرزی فوق به T_c نیازمندیم، با نوشتن موازنه انرژی برای سیال خنک‌کننده با فرض جریان plug داریم:



$$F_c = V_c \times \frac{\pi}{4}(D_1^2 - d_0^2), \quad V_c > 0$$

$$\frac{\partial\left[\rho_c \hat{C}_{p_c} T_c \left(\frac{\pi}{4}\right)(D_1^2 - d_0^2)\Delta z\right]}{\partial t} = -F_c \rho_c \hat{C}_{p_c}\left(T_c\big|_z - T_c\big|_{z+\Delta z}\right)$$
$$+\left(q'_z - q'_{z+\Delta z}\right)\left(\frac{\pi}{4}\right)(D_1^2 - d_0^2) + h'_c(\pi d_0 \Delta z)\left(T\big|_{r=r_1} - T_c\right)$$

دو طرف معادله را بر المان حجم تقسیم کرده و Δz را به سمت صفر میل می‌دهیم، لذا داریم:

$$\frac{\partial T_c}{\partial t} = V_c \frac{\partial T_c}{\partial z} - \cancel{\frac{1}{\rho_c C_{p_c}} \frac{\partial q_z}{\partial z}} + \frac{4 h'_c d_o}{(D_1^2 - d_o^2)\, \rho_c C_{p_c}} \left(T|_{r=r_1} - T_c \right)$$

ناچیز است

با صرف نظر از پراکنش محوری از رابطه بالا داریم (چون توربولنت است).

$$\boxed{\frac{\partial T_c}{\partial t} = V_c \frac{\partial T_c}{\partial z} + \frac{4 h'_c d_o}{(D_1^2 - d_o^2)\, \rho_c \hat{C}_{p_c}} \left(T|_{r=r_1} - T_c \right)} \qquad \text{III}$$

$$\begin{cases} \text{I.C)}\ t=0, & T_c = f_3(z) \\ \text{B.C)}\ z=L, & T_c = T_{c_i} \end{cases}$$

!! معادلات I، II و III همراه با شرایط مرزی و اولیه مدل حاکم بر فرآیند می‌باشند !!

حالت ب) صرف نظر از پراکنش محوری :

$$\begin{cases} \dfrac{\partial C_A}{\partial t} = -V_z \dfrac{\partial C_A}{\partial z} + D_{AB}\left[\dfrac{1}{r} \dfrac{\partial}{\partial r}\left(r \dfrac{\partial C_A}{\partial r} \right) \right] - k_0 e^{-E/RT} C_A \\[2ex] \dfrac{\partial T}{\partial t} = -V_z \dfrac{\partial T}{\partial z} + \alpha \left[\dfrac{1}{r} \dfrac{\partial}{\partial r}\left(r \dfrac{\partial T}{\partial r} \right) \right] - \dfrac{\Delta H_R k_0 e^{-E/RT} C_A}{\rho \hat{C}_p} \\[2ex] \dfrac{\partial T_c}{\partial t} = V_c \dfrac{\partial T_c}{\partial z} + \dfrac{4 h'_c d_o}{(D_1^2 - d_o^2)\, \rho_c \hat{C}_{p_c}} \left(T|_{r=r_1} - T_c \right) \end{cases}$$

$$\begin{cases} \text{I.C)}\ t=0, \quad C_A = f_1(r,z), \quad T = f_2(r,z), \quad T_c = f_3(z) \\[1ex] \text{B.C1)}\ z=0, \quad C_A = C_{A_i}, \quad T = T_i \quad , \quad \text{B.C2)}\ z=L, \quad T_c = T_{c_i} \\[1ex] \text{B.C3)}\ r=0, \quad \dfrac{\partial C_A}{\partial r} = 0, \quad \dfrac{\partial T}{\partial r} = 0 \\[1ex] \text{B.C4)}\ r=r_1, \quad \dfrac{\partial C_A}{\partial r} = 0, \quad \left.\dfrac{\partial T}{\partial r}\right|_{r=r_1} = -\left(\dfrac{h'_c d_o}{k d_1} \right)\left(T|_{r=r_1} - T_c \right) \end{cases}$$

حالت ج) صرف‌نظر از پراکندگی (شعاعی و محوری) (plug flow):

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} = -V_z \frac{\partial C_A}{\partial z} - k_0 e^{-E/RT} C_A \quad \checkmark$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = -V_z \frac{\partial T}{\partial z} - \frac{U_i(\pi d_i \Delta z)(T-T_c)}{\rho \hat{C}_p (\pi d_i^2/4)\Delta z} - \Delta H_R k_0 e^{-E/RT} C_A / \rho \hat{C}_p$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} = -V_z \frac{\partial T}{\partial z} - \frac{4U_i}{\rho \hat{C}_p d_i}(T-T_c) - \frac{\Delta H_R k_0 e^{-E/RT} C_A}{\rho \hat{C}_p} \quad \checkmark$$

$$\frac{\partial T_c}{\partial t} = V_c \frac{\partial T_c}{\partial z} + \frac{U_i(\pi d_i \Delta z)(T-T_c)}{\rho_c \hat{C}_{p_c} \pi (D_i^2 - d_o^2)/4 \, \Delta z}$$

$$\frac{\partial T_c}{\partial t} = V_c \frac{\partial T_c}{\partial z} + \frac{4 U_i d_i}{\rho_c \hat{C}_{p_c} (D_i^2 - d_o^2)}(T-T_c) \quad \checkmark$$

I.C) $t=0, \quad C_A = f_1(z), \quad T = f_2(z), \quad T_c = f_3(z)$

B.C1) $z=0, \quad C_A = C_{A_i}, \quad T = T_i,$

B.C2) $z=L, \quad T_c = T_{ci}$

« نحوه حل عددی مشتقات جزئی در فصل ۶ توضیح داده شده است. »