

مدلسازی ریاضی جذب دینامیک و چند جزئی هیدروکربنهای سبک در بستر ثابت کربن فعال

شهره فاطمی

استادیار گروه مهندسی شیمی - دانشکده فنی - دانشگاه تهران

Shfatemi@ut.ac.ir

امین سعادت مهر

فارغ التحصیل کارشناسی ارشد مهندسی شیمی - دانشکده فنی - دانشگاه تهران

(تاریخ دریافت ۸۳/۵/۵، تاریخ دریافت روایت اصلاح شده ۸۴/۲/۱۳، تاریخ تصویب ۸۴/۲/۲۴)

چکیده

در این مقاله مدلی ریاضی برای جذب چند جزئی هیدروکربنها در بسترهای جذب شامل دانه‌های جاذب با اشکال مختلف ارائه شده است و می‌تواند جذب سطحی مخلوطی از هیدروکربنهای موجود در جریان هوا را به صورت گذرا و به صورت تابعی از ابعاد بستر و جاذب با در نظر گرفتن مقاومت نفوذ محوری در بستر و مقاومت انتقال جرم فیلمی اطراف دانه و با استفاده از مکانیسم نفوذ حفره‌ای^۱ در داخل دانه همراه با شرایط جذب تعادلی در سطوح جامد ارائه کند. مدل جذب تعادلی بکار رفته مدل غیرخطی و چند جزئی لانگمیر توسعه یافته^۲ می‌باشد که برحسب نوع کربن فعال بکار رفته می‌تواند در شرایط عملیاتی مختلف دما، فشار، غلظت اجزا و سرعت جریان گاز، منحنی گذر^۳ را در شرایط جذب و دفع بستر پیشگویی کرده و ظرفیت جذب کربن فعال را برای هیدروکربنهای مختلف در شرایط فوق ارائه دهد. برای حل همزمان معادلات بستر و دانه از روشهای تعامد تطبیقی^۴ در دانه و تفاضل محدود غیر صریح در بستر به صورت همزمان استفاده شده است. منحنی کسر ماده جذب شده در دانه (FU)^۵ و منحنی گذر حاصل از حل مدل برای مخلوطهایی از اتان، پروپان، نرمال بوتان و نرمال پنتان بدست آمده است. برای اطمینان از صحت مدل، نتایج حاصل از منحنی (FU) با نتایج آزمایشی انجام شده در مراجع در شرایط یکسان مقایسه گردیده است که نتایج از دقت خوبی برخوردار است. در بررسی منحنی گذر، پاسخ بستر جذب نسبت به تغییر پارامترهای مؤثرمدل از جمله اندازه دانه، فاکتور پیچش^۶ جاذب، سرعت جریان گاز و دما تعیین و مورد ارزیابی قرار گرفته و همچنین زمان پر شدن بستر و میزان ماده جذب شده به ازاء واحد جرم جاذب در شرایط مختلف تعیین و بررسی گردیده است. مدل حاضر نشان می‌دهد که میزان جذب‌شدگی به اندازه دانه و نیز فاکتور پیچش جاذب وابستگی زیادی داشته و جذب توسط مکانیسم نفوذ حفره‌ای کنترل می‌شود. همچنین منحنی گذر در شرایط بازایی بستر نیز در اثر ورود هوای خالص به بستر پر شده، بررسی و زمان بازایی بستر با توجه به سرعت جریان هوا تعیین گردیده است.

واژه های کلیدی: کربن فعال، تعامد تطبیقی، هیدروکربن، کنیستر^۷، منحنی گذر، جذب سطحی

مقدمه

بررسی های انجام شده نتیجه شده است که برای جذب موادآلی فراربا غلظت کمتر از یک در صدوزنی از بسترهای ثابت کربن فعال به عنوان روشی موثر و با صرفه میتوان استفاده کرد [۳-۵].

برای پی بردن به چگونگی رفتار سیستم و تعیین منحنی گذر و همچنین پیشگویی ظرفیت جذب انواع جاذبهای کربنی و در نتیجه امکان طراحی سیستم های جذب، احتیاج به یک مدل ریاضی می باشد تا از این طریق بتوان راههای اصلاح و بهبود نسبی سیستم را ارائه کرد.

خودروها به عنوان یک منبع مهم در انتشار آلاینده های گوناگون از جمله بخارات هیدرو کربنی حاصل از بنزین و سوخته های دیگرشناخته شده اند. به طور کلی محدودیت های زیست محیطی در دنیا باعث شده است که در سالهای اخیریکی از بیشترین تحقیقات برروی کنترل الودگی و انتشار مواد آلی فرار^۸ در جریان هوا و توسعه تکنولوژی مربوطه متمرکز شود [۱-۲]. از میان روشهای مختلف مطرح در جذب این مواد دو روش بیش از روشهای دیگر مطرح است، یک روش میعان برودتی^۹ و روش دیگر جذب سطحی^{۱۰} توسط کربن فعال می باشد. از

جریان گاز در بستر جاذب، جذب به صورت تعادلی اتفاق می افتد، ثانیاً ایزوترم جذب لانگمیر بیش از مدل‌های دیگر برای جذب گازها صدق میکند [۸-۱۱].

با توجه به شرایط فوق، به دلیل غیر خطی بودن معادله های حاصل از بیلان جزء در دانه، امکان حل عددی به روش های متداول میسر نبوده است و در این مقاله از روش تعامد تطبیقی در حل مدل دانه استفاده شده و همزمان با معادله بستربه روش غیر صریح معادلات دانه و بستر برای سه جزء جذب شونده به صورت تابعی از زمان و مکان حل شده و در نهایت، منحنی گذر ظرفیت جذب گازها توسط بستر کربنی در شرایط جذب و بازیابی بستر به دست می آید.

مدل ریاضی جذب

مکانیزمهای پیچیده نفوذ ماده جذب شونده به داخل جاذب مسیرهایی هستند که در طی آنها نفوذ به داخل جاذب انجام می‌گیرد. این مسیرها را می‌توان بصورت مسیرهای موازی در سر راه عبور ماده در نظر گرفت. وقتی ماده‌ای از چند مسیر موازی بتواند نفوذ کند همواره مسیری که سرعت نفوذ در آن بیشتر باشد در فرآیند انتقال تأثیر بیشتری خواهد داشت. این مسیرها را می‌توان بطور ساده به نفوذ حفره‌ای، نفوذ ریز حفره‌ای و نفوذ سطحی تقسیم‌بندی کرد. البته دو مکانیزم آخر معمولاً یکسان فرمول‌بندی می‌شوند. [۶]

مدل نفوذ در بستر

با نوشتن بیلان جرم جزئی در بستر جذب، معادله زیر حاصل می‌شود:

$$D_{ax} \frac{\partial^2 C_b}{\partial Z^2} - U \frac{\partial C_b}{\partial Z} - \frac{3(1-\varepsilon_b)}{R_p} k_c (C_b - C_p|_{r=R_p}) = \varepsilon_b \frac{\partial C_b}{\partial t} \quad (1)$$

در این معادله عبارت‌های اول و دوم به ترتیب نشانه نفوذ مولکولی و توده‌ای می‌باشند و عبارت سوم بیانگر انتقال جرم فیلمی از بستر توده‌ای به سطح دانه جاذب با استفاده از ضریب انتقال جرم (k_c) می‌باشد.

محققین زیادی بر روی بسترهای جذب کار کرده و مکانیسم های جذب مختلفی را برای بستر های کربنی ارائه کرده اند، که شامل مکانیسم های جذب سینتیکی و جذب تعادلی می باشند. [۶-۱۴] بیشترین تحقیقات انجام شده بر روی مدل‌های جذب سطحی مواد از فاز گاز بوسیله دانه های جاذب متخلخل توسط Duong D. Do و همکارانش در سالهای اخیر انجام شده است [۶-۱۲]. اکثر تحقیقات این گروه به بررسی و مدلسازی مکانیسم های مختلف جذب در داخل دانه جاذب اختصاص یافته است و مدل‌های ریاضی جذب سینتیکی براساس مقاومت‌های نفوذ حفره‌ای، نفوذ سطحی^{۱۱} و نفوذ ریزحفره‌ای^{۱۲} را برای جذب تک جزئی و دو جزئی ارائه کرده اند [۶-۹]. همچنین مدل‌های جذب تعادلی هیدروکربنهای سبک را بر روی انواع کربن فعال بر اساس معادله لانگمیر و نیز تئوری محلول‌های جذب شده ایده آل (IAST)^{۱۳} بررسی و ارائه داده اند. آزمایشات این محققین معمولاً در سیستم ناپیوسته یا بستر جذب دیفرانسیلی انجام شده است و دانه های کربن در داخل فاز گازی شامل غلظت یکنواختی از مواد جذب شونده به صورت جذب تک جزئی و یا دو جزئی بررسی شده تا کسر ماده جذب شده در زمانهای مختلف تعیین گردد و در نهایت با تطبیق نتایج آزمایش و مدل‌های مختلف پارامترهای مدل تعیین شوند [۱۰-۱۲].

در مراجع گذشته، مدل‌های ریاضی بستر جذب و تعیین منحنی گذر اکثراً بر اساس فرضیات ساده کننده‌ای از جمله، بستر ثابت با جریان پیستونی، جذب همدم، سرعت ثابت سیال ورودی با ایزوترم^{۱۴} جذب خطی و برای جذب تک جزئی به دست آمده است [۱۴-۱۶]. در برخی از تحقیقات نیز توزیع غلظت در دانه به صورت یک معادله سهموی در نظر گرفته شده و به روش تحلیلی حل شده است [۱۶].

در این تحقیق سعی شده است که مدل کامل تری ارائه گردد به طوریکه جذب مخلوط سه جزئی هیدروکربنهای گازی از جریان هوا در بستری از دانه های جاذب به صورت گذرا با در نظر گرفتن پراکندگی محوری، مقاومت فیلمی اطراف دانه، و با مکانیسم نفوذ حفره‌ای در دانه همراه با ایزوترم جذب توسعه یافته لانگمیر مدلسازی شده است. علت انتخاب ایزوترم لانگمیر در این مقاله این است که اولاً در جذب سطحی با سرعت‌های نسبتاً کم

$$\frac{\partial q}{\partial t} = k_c \left[C_p (q_\infty - q) - \frac{q}{K} \right] \quad (9)$$

از این معادله هنگامی استفاده می‌شود که سرعت جریان گاز به درون بستر زیاد بوده یا اندازه دانه‌ها درشت است و زمان کافی برای تماس گاز و جامد وجود ندارد. ب- جذب تعادلی هنگامی بکار می‌رود که سرعت جذب و دفع در فاز جامد برابر شده، در نتیجه بین غلظت فاز جذب شده و غلظت در حفره تعادل برقرار شده است. در این صورت مدل تعادلی جذب رابطه بین غلظت در حفره و فاز جذب شده را تعیین می‌کند. یکی از مدل‌های جذب تعادلی مدل لانگمیر است که در پروژه حاضر نیز از این مدل استفاده شده است که برای جذب تک جزئی مطابق معادله زیر می‌باشد:

$$q = \frac{q_\infty K C_p}{1 + K C_p} \quad (10)$$

و برای جذب تعادلی چند جزئی می‌توان از مدل توسعه یافته لانگمیر بصورت زیر استفاده کرد: [۹-۱۱]

$$q_i = q_{\infty i} \frac{K_i C_{pi}}{1 + \sum_{j=1}^n K_j C_{pj}} \quad (11)$$

روش عددی

روشهای عددی مختلفی برای حل معادلات دیفرانسیل جزئی غیرخطی وجود دارد که با توجه به نوع سیستم در برخی موارد روش همگرا یا واگرا می‌شود. به این علت انتخاب یک روش عددی مناسب برای سیستم‌های غیرخطی بسیار مهم است. از روشهای عددی حل سیستم‌های غیرخطی روش تعامد تطبیقی می‌باشد که دقت و پایداری آن در حل این نوع معادلات به اثبات رسیده است و در مقاله حاضر آن استفاده شده است [۱۷ و ۱۸].

در معادله (۵) یعنی مدل نفوذ در دانه، ابتدا لازم است که مشتق غلظت فاز جذب شده (q) توسط معادله لانگمیر توسعه یافته یعنی معادله (۱۱) جایگزین گردد، سپس مشتقات مکانی دانه توسط روش تعامد تطبیقی به صورت چندجمله‌ای متعامد جایگزین شده و به این

شرایط مرزی و اولیه بستر:

$$Z=0 \Rightarrow D_{ax} \frac{\partial C}{\partial Z} = U(C - C_0) \quad (2)$$

$$Z=L \Rightarrow \frac{\partial C}{\partial Z} = 0 \quad (3)$$

$$t=0 \Rightarrow C=0 \quad (4)$$

مدل نفوذ در دانه

با نوشتن بیلان جرم در دانه، معادله زیر حاصل می‌شود:

$$\frac{1}{r^s} \frac{\partial}{\partial r} \left\{ r^s (\epsilon_p D_p \frac{\partial C_p}{\partial r}) \right\} = \epsilon_p \frac{\partial C_p}{\partial t} + (1 - \epsilon_p) \frac{\partial q}{\partial t} \quad (5)$$

پارامتر S ثابت شکلی است و برای مختصات مکعب مستطیلی^{۱۵} برابر ۱ و برای مختصات استوانه‌ای و کروی به ترتیب برابر ۲ و ۳ می‌باشد. شرایط مرزی و اولیه دانه:

$$r=0 \Rightarrow \frac{\partial C_p}{\partial r} = \frac{\partial q}{\partial r} = 0 \quad (6)$$

$$r=R_p \Rightarrow \epsilon_p D_p \frac{\partial C_p}{\partial r} \Big|_{r=R_p} = k_c (C - C_p \Big|_{r=R_p}) \quad (7)$$

$$t=0 \Rightarrow C_p = q = 0 \quad (8)$$

مدل جذب در فاز جامد

به کمک این مدل رابطه بین غلظت داخل حفره و غلظت در فاز جذب شده مشخص می‌شود. مدل ریاضی این مرحله به دو صورت ارائه می‌شود: الف- جذب سینتیکی یا غیر تعادلی که توسط یک معادله سینتیکی برای یک ماده جذب شونده می‌توان بصورت زیر ارائه داد [۱۴]:

و شرایط عملیاتی در دو بخش: یکی بخش پر شدن دانه و دیگری بخش تعیین منحنی گذر از بستریه مرور زمان حاصل می‌شود.

نتایج آزمایشی

بر اساس تحقیقات Duong D. Do و همکاران [۸] نتایج آزمایشی جذب هیدروکربنهای سبک بنزین بر روی دانه مکعبی کربن فعال از نوع Ajax و Norit قبلا در شرایط ناپیوسته بدست آمده است. با این نتایج کسر جذب شدگی (FU) برای دانه‌های جاذب در زمانهای مختلف بر اساس معادله زیر بدست آمده و به صورت منحنی رسم شده است [۶]:

مقدار ماده جذب شده در جاذب

$$FU = \frac{\text{مقدار ماده جذب شده در جاذب}}{\text{حداکثر جذب بر اساس غلظت توده}}$$

یعنی برای هر جزء در هر لحظه:

$$FU_i =$$

$$\frac{\varepsilon_p \int_0^1 \overline{C_{ip,t}} r^{-2} dr + (1 - \varepsilon_p) \int_0^1 \frac{q_{\infty} K C_{ip,t}}{1 + K C_{ip,t}} r^{-2} dr}{\varepsilon_p \int_0^1 \overline{C_{ip,t}} r^{-2} dr + (1 - \varepsilon_p) \int_0^1 \frac{q_{\infty} K C_{ip,t}}{1 + K C_{ip,t}} r^{-2} dr}$$

(۱۲)

برای اطمینان از صحت مدل حاضر، ابتدا سعی شد (FU) حاصل از مدل با آزمایشات حاصل از مرجع [۸] مقایسه گردد. چنانچه این مدل بتواند (FU) را که مربوط به جذب نسبی هیدروکربن در دانه می‌باشد، بخوبی پیشگویی کند، می‌توان صحت مدل را تأیید کرده و آنرا برای تعیین منحنی‌های گذر در بستر دینامیک بکار برد.

نتایج و بحث

مقایسه مدل و آزمایش

نتایج حاصل از کسر جذب شدگی دانه نسبت به زمان در نمودارهای (۱)، (۲) و (۳) مشاهده می‌شود، تا مقایسه‌ای میان FU محاسبه شده از مدل و آزمایش در شرایط یکسان انجام شود. نتایج آزمایشی در سیستم ناپیوسته، مخلوط دو جزئی، غلظت ثابت در فاز توده، اختلاط کامل در فاز توده، دانه کربن فعال از نوع Ajax و Norit بشکل مکعبی در دماهای ۳۰، ۶۰ و ۹۰ درجه

ترتیب معادله های یفرانسیل جزئی غیرخطی به معادله های دیفرانسیل معمولی تبدیل شود تا بتوان آنها را به روش رانگ کاتا حل نمود. توسط شرط مرزی در معادله (۷) مدل دانه به بستر ارتباط می‌یابد و همزمان با مدل دانه، معادله بستر نیز به روش تفاضل‌های غیر صریح برای هر جزء حل می‌شود. در این حالت بر حسب طول بستر و با مرور زمان تغییرات جزء (i) در حفره (C_{pi}) و در فاز جامد (q_i) و در جریان گاز داخل بستر (C_i) بدست می‌آید. آماده سازی معادلات دانه و بستر برای حل عددی در پیوست (۱) آمده است.

در معادلات حاصل برخی پارامترهای فیزیکی از جمله ضریب پراکندگی بستر، ضریب نفوذ مؤثر دانه و ضریب انتقال جرم فیلم اطراف دانه وجود دارد که در پیوست (۲) به روابط ریاضی و روش تعیین آنها اشاره شده است. همچنین در مدلسازی بستر جذب به پارامترهای ایزوترم تعادلی لانگمیر برای هر یک از مواد جذب شونده در جاذب کربنی نیاز است که برای هر جزء شامل پارامتر حداکثر جذب ($q_{\infty i}$) و ثابت جذب (K_i) می‌باشد که برای هر نوع جاذب و برای هر ماده متفاوت است. بر اساس تحقیقات انجام شده بر روی کربن فعال Ajax، این پارامترها مطابق مراجع [۷-۹] در جدول های (۱) و (۲) ملاحظه می‌شوند.

جدول ۱: مشخصات فیزیکی کربن فعال‌های بکار رفته در مدل.

نوع کربن فعال	دانسیته (kg/m^3)	تخلخل دانه ε_p	سطح مخصوص (m^2/g)	تخلخل بستر ε_b
Norit	۵۶۹	۰,۷۴	۱۰۵۲	۰,۴۸
Ajax	۶۶۰	۰,۷۱	۱۲۰۰	۰,۵

مدلسازی در این مقاله با فرض ثابت بودن دما در طول بستر در نظر گرفته شده است که با وجود غلظت کم اجزاء جذب شونده در فاز گاز و فیزیکی بودن فرایند جذب فرض قابل قبولی می‌باشد [۱۲]. نتایج حل دستگاه معادلات برای جذب ترکیبات مختلف سه جزئی از هیدروکربنهای اتان، پروپان، نرمان بوتان و نرمال پنتان در شرایط مختلفی از نظر ابعاد بستر، دانه، غلظت اجزا ورودی

جایگزین جزء سبکتر در فاز جامد شود. بدین ترتیب یک فلاکس داخلی از طرف سطح به حفره، علاوه بر فلاکس نفوذی از طرف فاز توده به حفره برای جزء سبکتر بوجود می‌آید که موجب افزایش غلظت جزء سبکتر نسبت به غلظت اولیه می‌گردد. این افزایش غلظت در بستر نیز مشاهده خواهد شد. (پدیده تلاطم) این پدیده تا هنگامی صورت می‌گیرد که جزء سنگین‌تر توانایی جابجا کردن جزء سبکتر را داشته باشد. سپس به مرور و کاهش توانایی جزء سنگین‌تر در جابجا کردن جزء سبک و نیز نفوذ جزء سبک در حفراتی که جزء سنگین توانایی نفوذ در آنها را ندارد، غلظت جزء سبک کاهش یافته و کم کم به غلظت واقعی خود که غلظت اولیه است می‌رسد.

منحنی‌های گذر جذب

در بررسی منحنی‌های گذراز بستر تأثیر عوامل مختلفی مانند: نوع ماده جذب شونده، غلظت اجزاء، دما، سرعت حجمی جریان، ضریب پیچش جاذب، طول بسترو اندازه دانه، بررسی شده است. نتایج حاصل از آنالیز حساسیت مدل برای منحنی گذر از بستر جذب با غلظت ورودی ثابت از مخلوط سه جزیی در شکل‌های (۴) تا (۸) ارائه شده است. این منحنی‌ها تغییرات غلظت خروجی از بسترا در زمانهای مختلف نشان می‌دهند. در هر شکل اثر تغییر یک پارامتر در نتایج مدل بررسی شده است. شرایط عملیاتی مدل در جدول (۳) گزارش شده است.

در این جدول، در یک ستون وزن کل مواد جذب شده در واحد وزن جاذب (WS) و در ستون دیگر زمان گذر (t_b) به عنوان زمان خروج سنگین‌ترین ماده تا رسیدن به غلظت ورودی ارائه شده است، که براساس فرمول زیر در هر منحنی گذر محاسبه شده است:

$$W_s = \frac{UC_w M_w \int_0^{t_b} (1 - \frac{C}{C_0}) dt}{L\rho_b} \quad (14)$$

این دو ستون معیاری خواهد بود برای مقایسه اجزاهای مختلف در شرایط مختلف که مورد بحث قرار می‌گیرد.

شکل (۴) با توجه به تغییر در ماده جذب شونده ارائه شده است. به طور کلی پدیده تلاطم غلظت برای

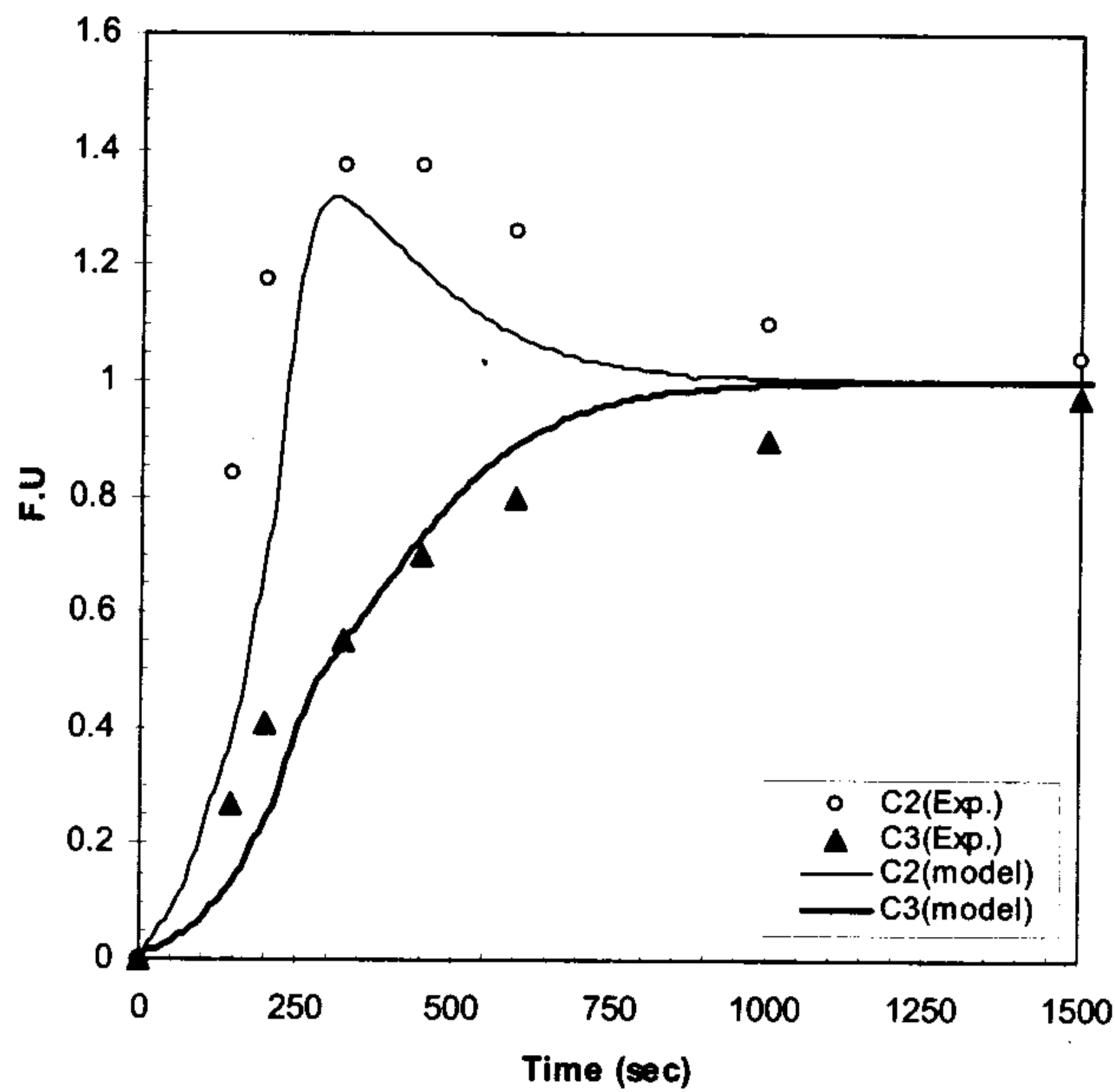
سلسیوس بدست آمده است [۸]. ملاحظه می‌شود که تطبیق نسبی بین مدل دانه و نتایج آزمایشی وجود دارد. درصد خطای نسبی (AARD) ^{۱۶} مطابق معادله زیر برای شکل‌های (۱) تا (۳) به ترتیب ۱۶,۱٪ و ۱۶,۸٪ و ۲۰,۲٪ می‌باشد. این مقدار خطای نسبی نشان دهنده دقت قابل قبولی برای مدل حاضر می‌باشد.

$$AARD = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{(Y_{EXP_i} - Y_{MODEL_i})}{Y_{EXP_i}} \quad (13)$$

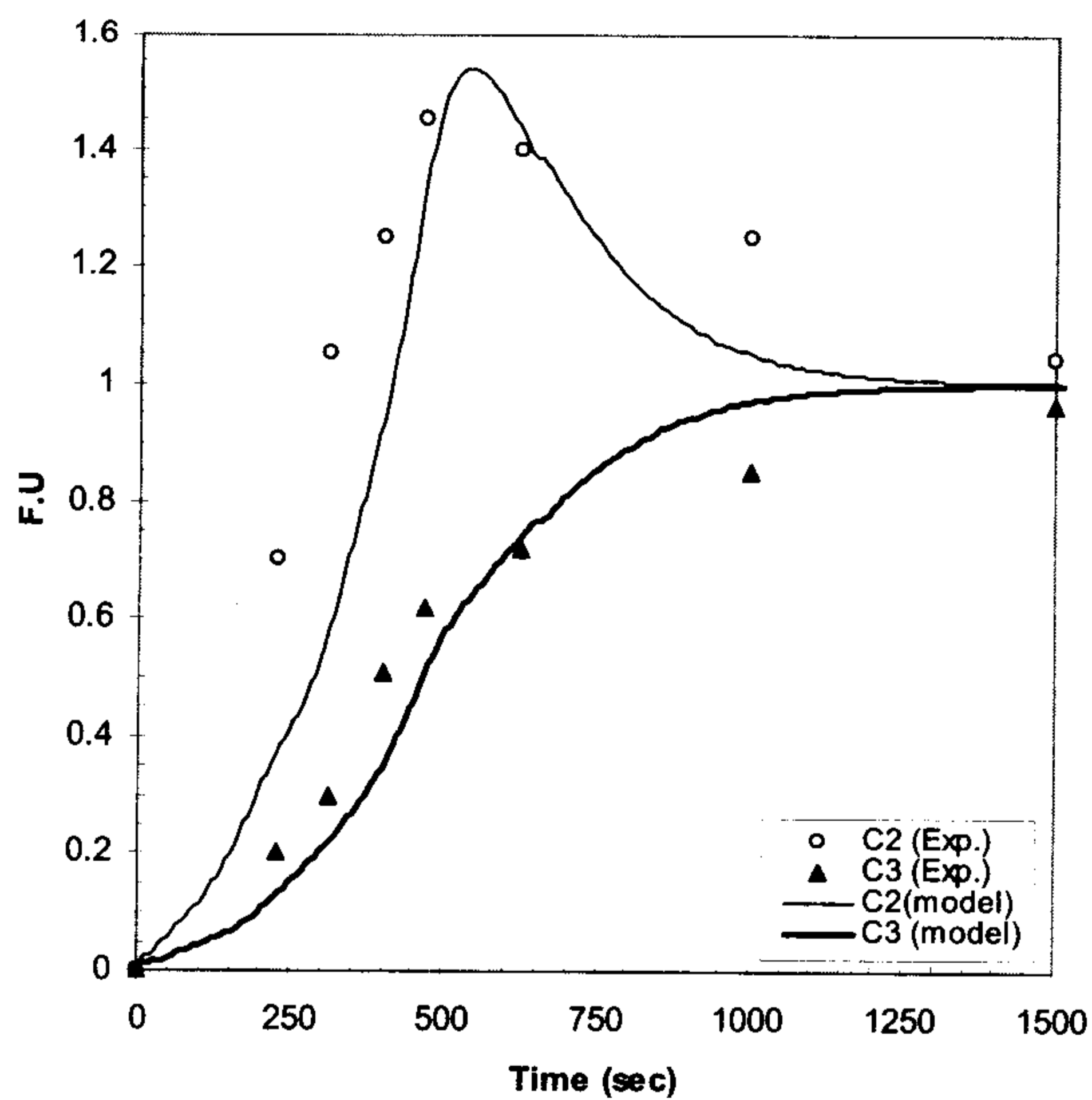
جدول ۲: پارامترهای ایزوترم جذب مواد در کربن فعال Ajax

جذب شونده	دما °C	حداکثر ظرفیت جذب $kmole/m^3$	ثابت جذب $m^3/kmole$
اتان	۱۰	۵,۴۹	۱۳۰
	۳۰	۴,۹	۸۵
	۶۰	۴,۵۸	۴۲,۱
پروپان	۱۰	۵	۱۱۸۴,۶
	۳۰	۴,۶۹	۵۴۶
	۶۰	۴,۳۶	۲۱۷,۵
نرمال بوتان	۱۰	۵,۳۳	۱۲۲۰
	۳۰	۴,۸	۱۰۵۰
	۶۰	۴,۱۷	۶۴۵
نرمال پنتان	۱۰	۴,۳۹	۱۴۷۰۰
	۳۰	۴,۱۲	۹۹۲۰
	۶۰	۳,۵۵	۶۳۹۰

همانطور که در نمودارها مشاهده می‌شود، در نتایج حاصل از مدل و آزمایش، غلظت جزء سبکتر در مقطعی از زمان از مقدار اولیه خود بیشتر شده است. علت این پدیده این است که جزء سبکتر به علت کوچکی مولکولها، به تعداد بیشتری در حفرات ریز نفوذ کرده، بنابراین دارای ظرفیت جذب بیشتری (q_∞) می‌باشد. از طرفی جزء سنگین‌تر دارای ثابت جذب تعادلی بیشتری است، یعنی بعلا جرم مولکولی بیشتر، روی سطح جامد با قدرت بیشتری جذب شده و پیوند محکم‌تری با سطح برقرار می‌کند. این امر موجب می‌شود که جزء سنگین‌تر



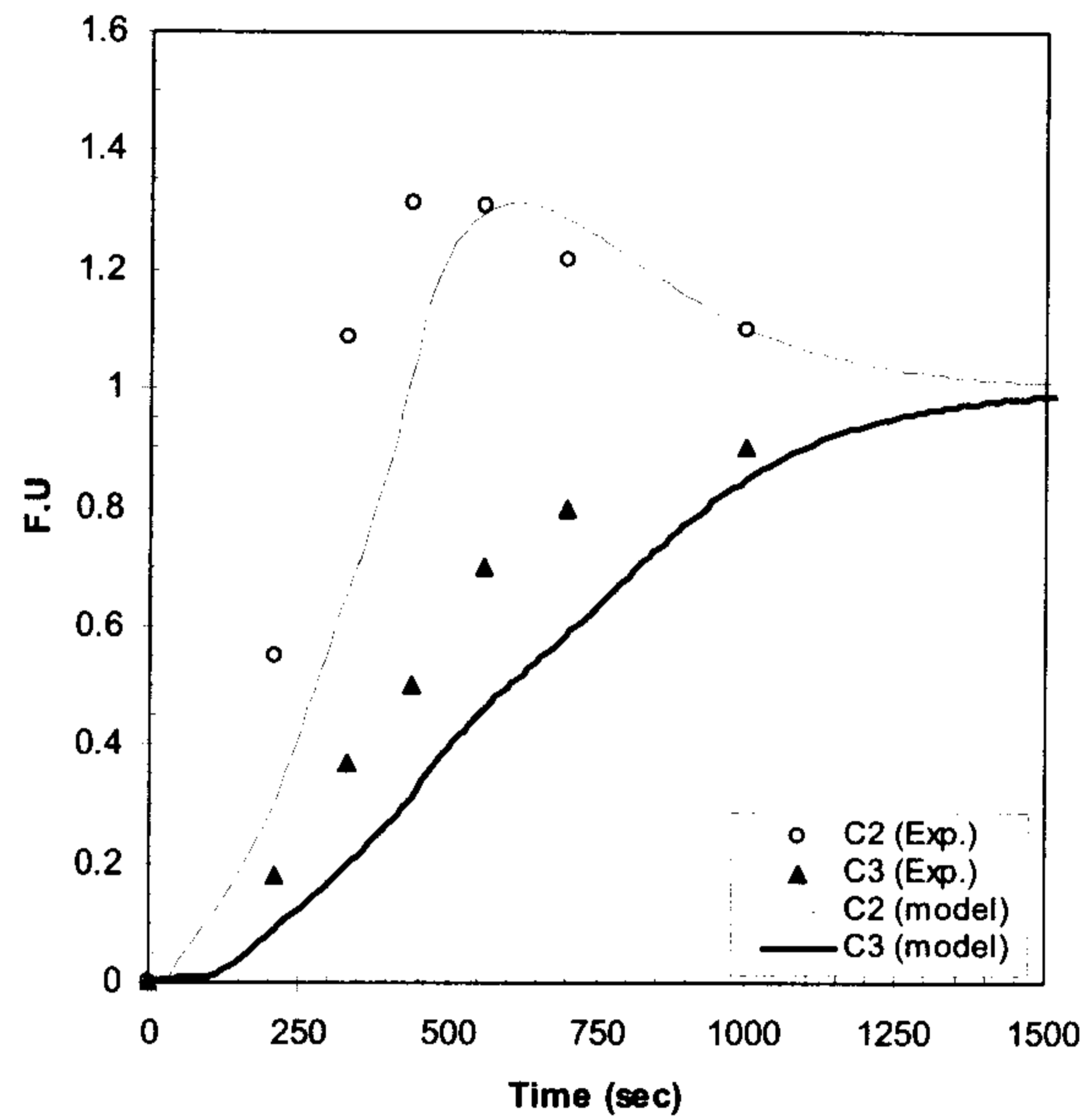
شکل ۱: کسر ماده جذب شده در دانه مکعبی از نوع نوریت (Norit) با ضخامت ۸٫۸۵ میلی متر برای مخلوط ۵٪ مولی اتان و ۵٪ پروپان در دمای ۳۶۳ کلوین.



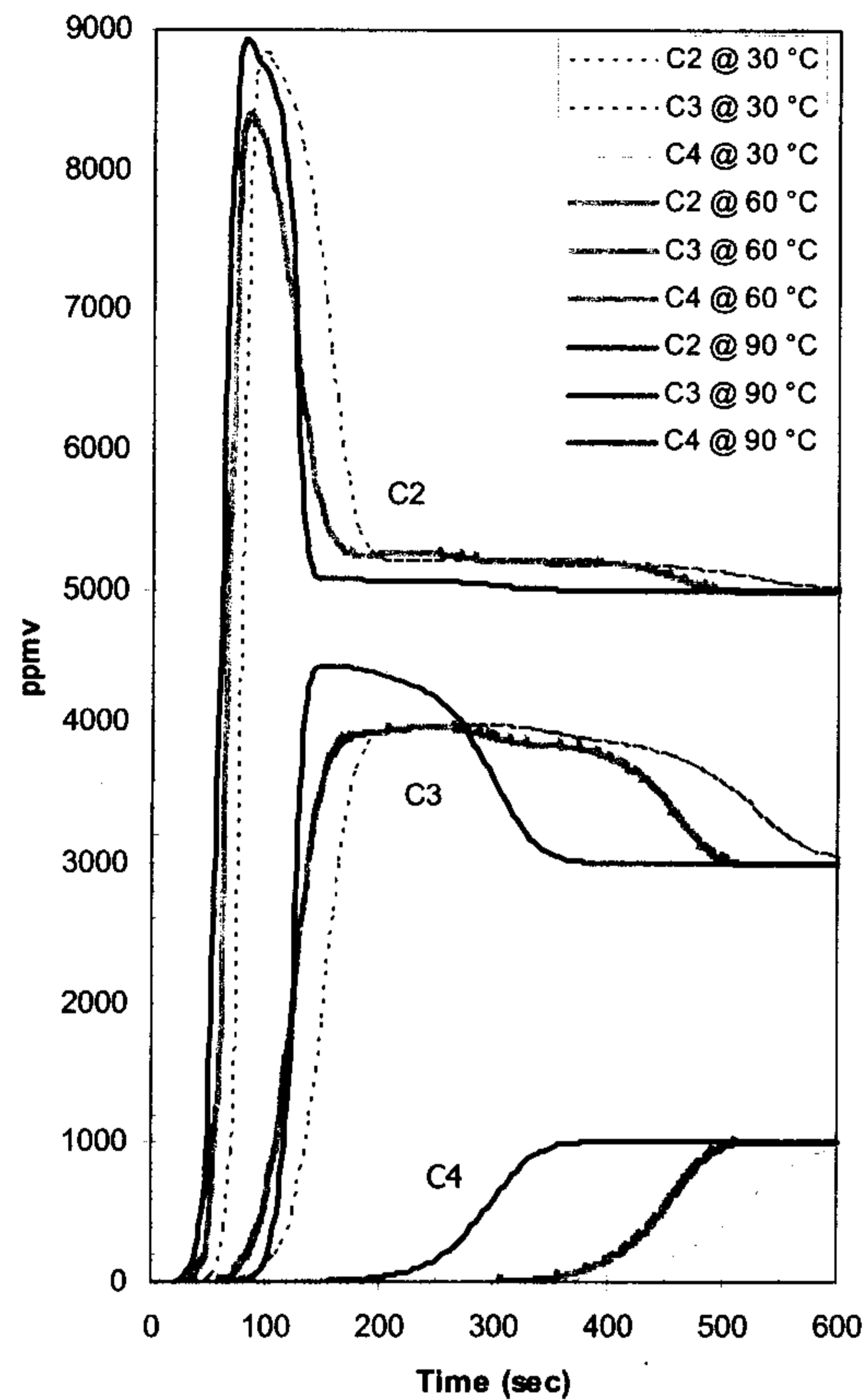
شکل ۲: کسر ماده جذب شده در دانه مکعبی از نوع نوریت (Norit) با ضخامت ۸٫۸۵ میلی متر برای مخلوط ۲٪ مولی اتان و ۵٪ پروپان در دمای ۳۰۳ کلوین.

اتان و پروپان) زمان خروج پنتان از بستر طولانی تر است. با توجه به گرمازا بودن عمل جذب سطحی، انتظار می رود که در شرایط یکسان ولی متفاوت از نظر دما، میزان جذب کمتر و نیز مدت زمان برای اشباع شدن بستر جذب، کوتاهتر باشد که در نمودار (۵) و جدول (۳) این اثر در اجزای ۱۱، ۱۲ و ۱۳ بوضوح قابل مشاهده می باشد.

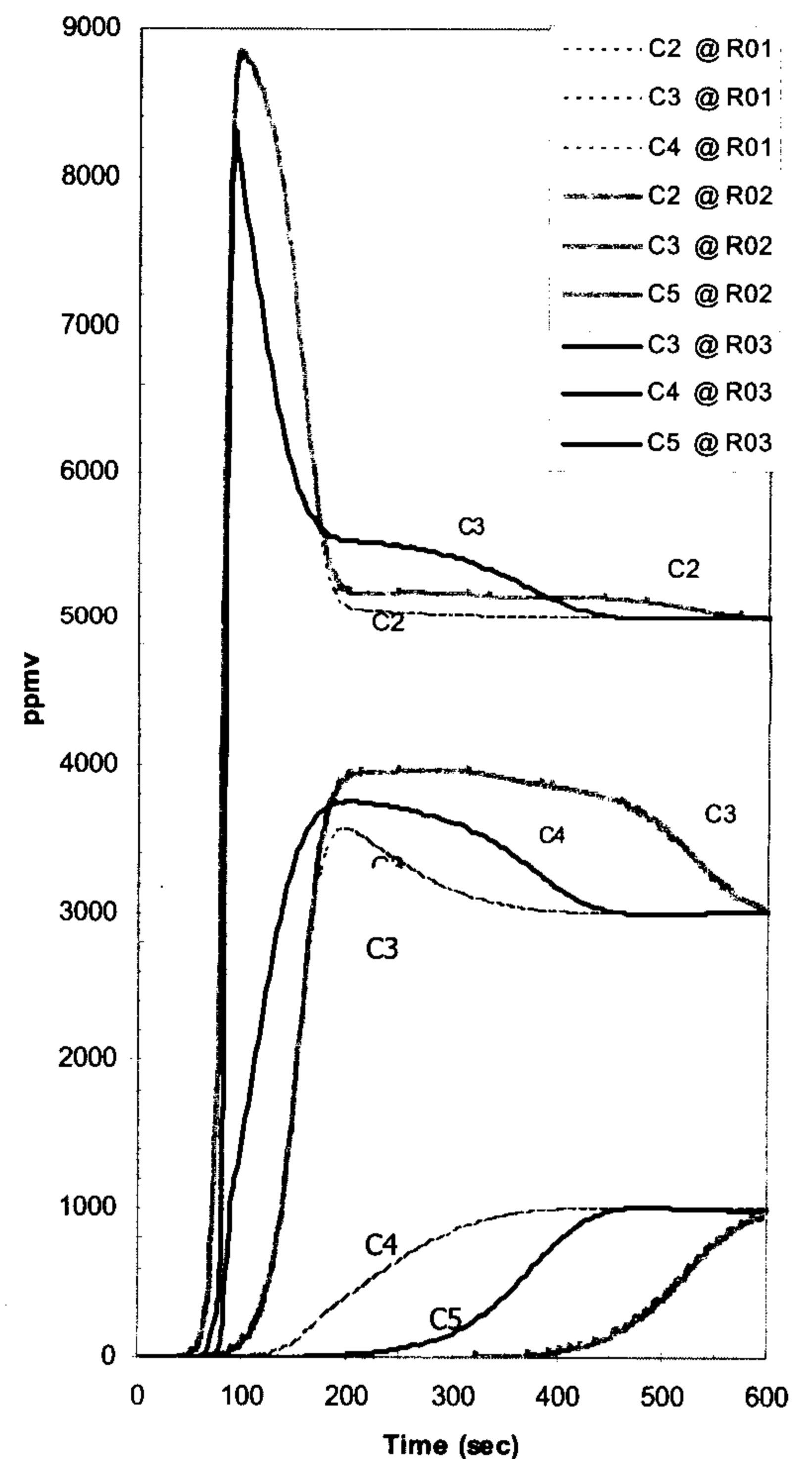
اجزاء سبک تر در بستر همواره رخ می دهد. در اجزای ۰۲ و ۰۳ تلاطم بیشتری در مقایسه با اجرای ۰۱ در اجزاء سبک دیده می شود، که این به دلیل وجود جزء سنگینتر پنتان در این دو اجرا در مقایسه با بوتان در اجرای ۰۱ می باشد. همچنین W_s و t_b در اجرای ۰۲ بیشتر است، میتوان گفت به علت تفاوت بیشتر در خواص اجزاء جذب شونده سبک و سنگین در این اجرا (پنتان در مقابل



شکل ۳: کسر ماده جذب شده در دانه مکعبی از نوع ازاکس (Ajax) با ضخامت ۴,۴ میلی متر برای مخلوط ۱۰٪ مولی اتان و ۱۰٪ پروپان در دمای ۳۳۳ کلوین.



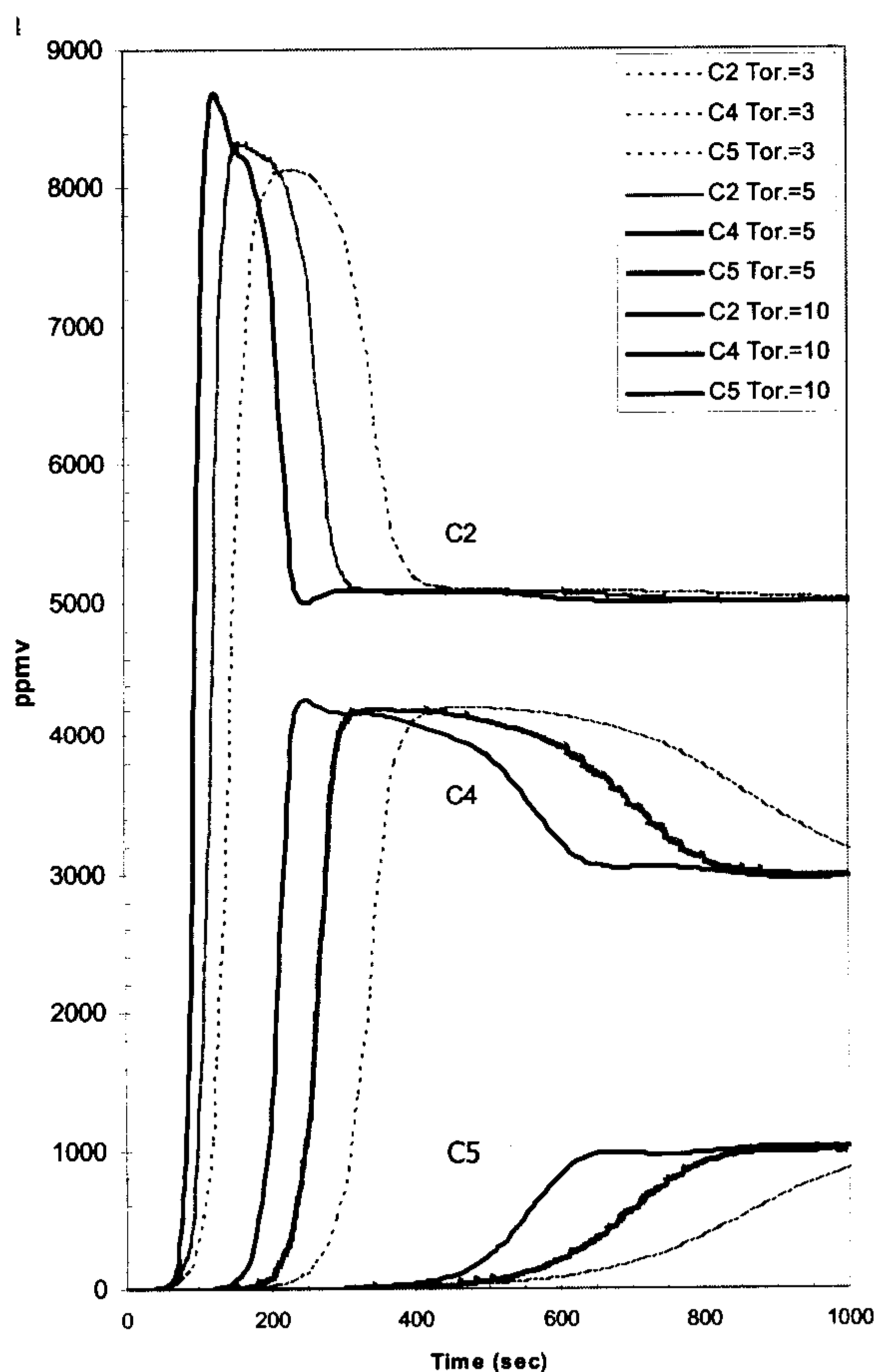
شکل ۵: مقایسه منحنی های گذر برای دماهای مختلف حاصل از اجراهای ۱۱ و ۱۲ و ۱۳.



شکل ۴: مقایسه منحنی های گذر برای خوراک های مختلف حاصل از اجراهای ۰۱ و ۰۲ و ۰۳.

در اجراهای ۲۱ و ۲۲ و ۲۳ اندازه دانه مطابق جدول (۳) مقایسه شده است. ملاحظه می شود هرچه اندازه دانه

گذاشت. با توجه به نمودار (۷) و جدول (۴) در اجراهای شماره ۴۱، ۴۲ و ۴۳ مشاهده می‌شود که در جاذبهایی با ضریب پیچیدگی کم (ضریب نفوذ مؤثر بالا) توانایی بستر برای جذب بیشتر شده و منحنی گذر در انتهای بستر دیرتر ظاهر می‌شود.

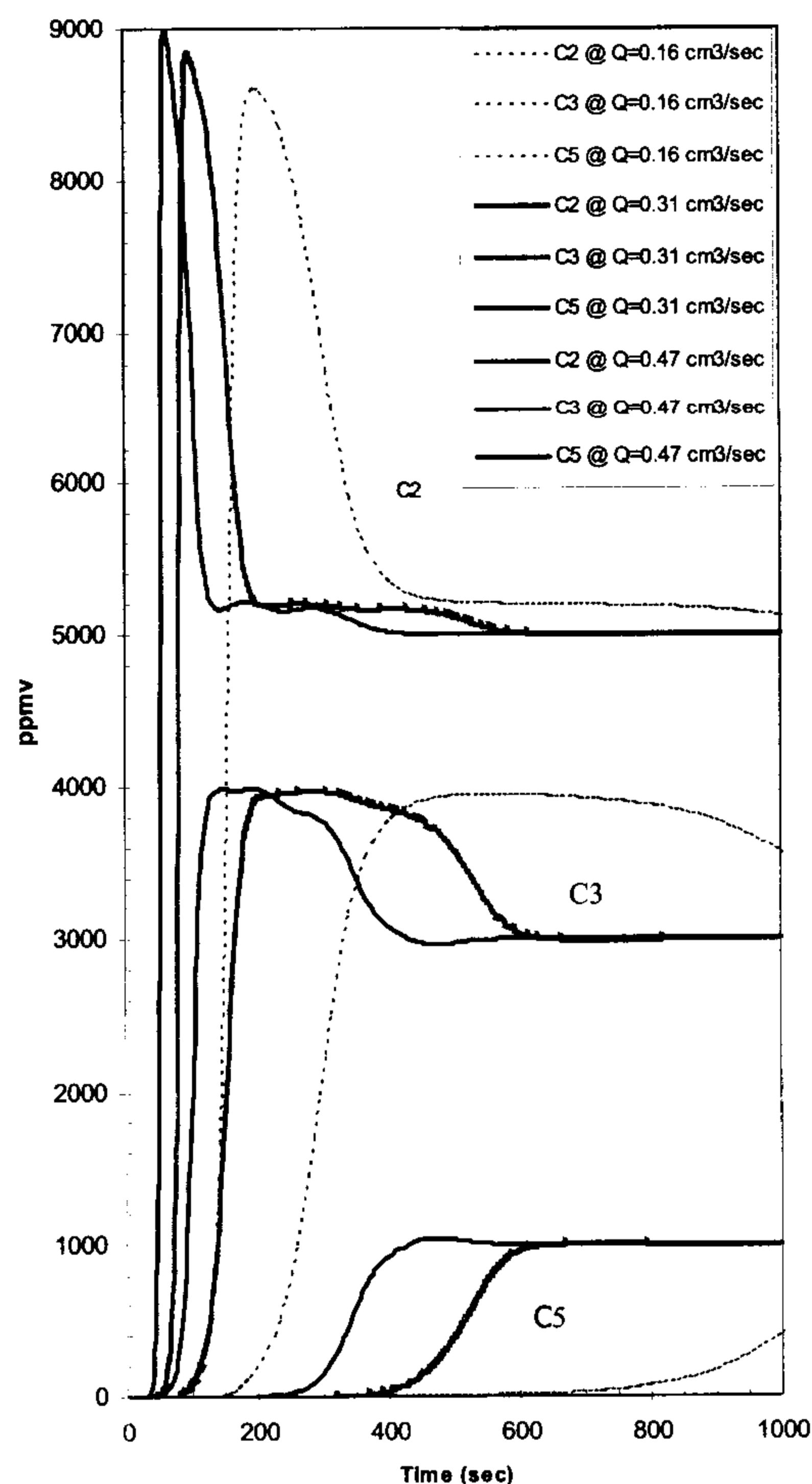


شکل ۷: منحنی‌های گذر برای ضریب‌های پیچش مختلف جاذب حاصل از اجراهای ۴۱ و ۴۲ و ۴۳.

با توجه به شکل (۸) و جدول (۴) در اجراهای ۵۱ و ۵۲ و ۵۳ مشاهده می‌شود که افزایش طول بستر یعنی افزایش میزان جاذب موجب افزایش زمان ماند در بستر شده و باعث می‌شود که منحنی گذر دیرتر در خروجی بستر ظاهر شود، ولی در عین حال افزایش طول بستر هیچ تأثیری در میزان نسبی جذب بستر نخواهد گذاشت.

در اجراهای مختلف غلظت ورودی اجزاء در تمام حالتها مقدار ثابتی در نظر گرفته شده است که به ترتیب ۱۰۰۰ و ۳۰۰۰ و ۵۰۰۰ ppm برای اجزاء سبک تا سنگین انتخاب شده است. در غلظتهای بالای ورودی انتظار می‌رود میزان جذب نیز بالاتر باشد ولی ازسوی

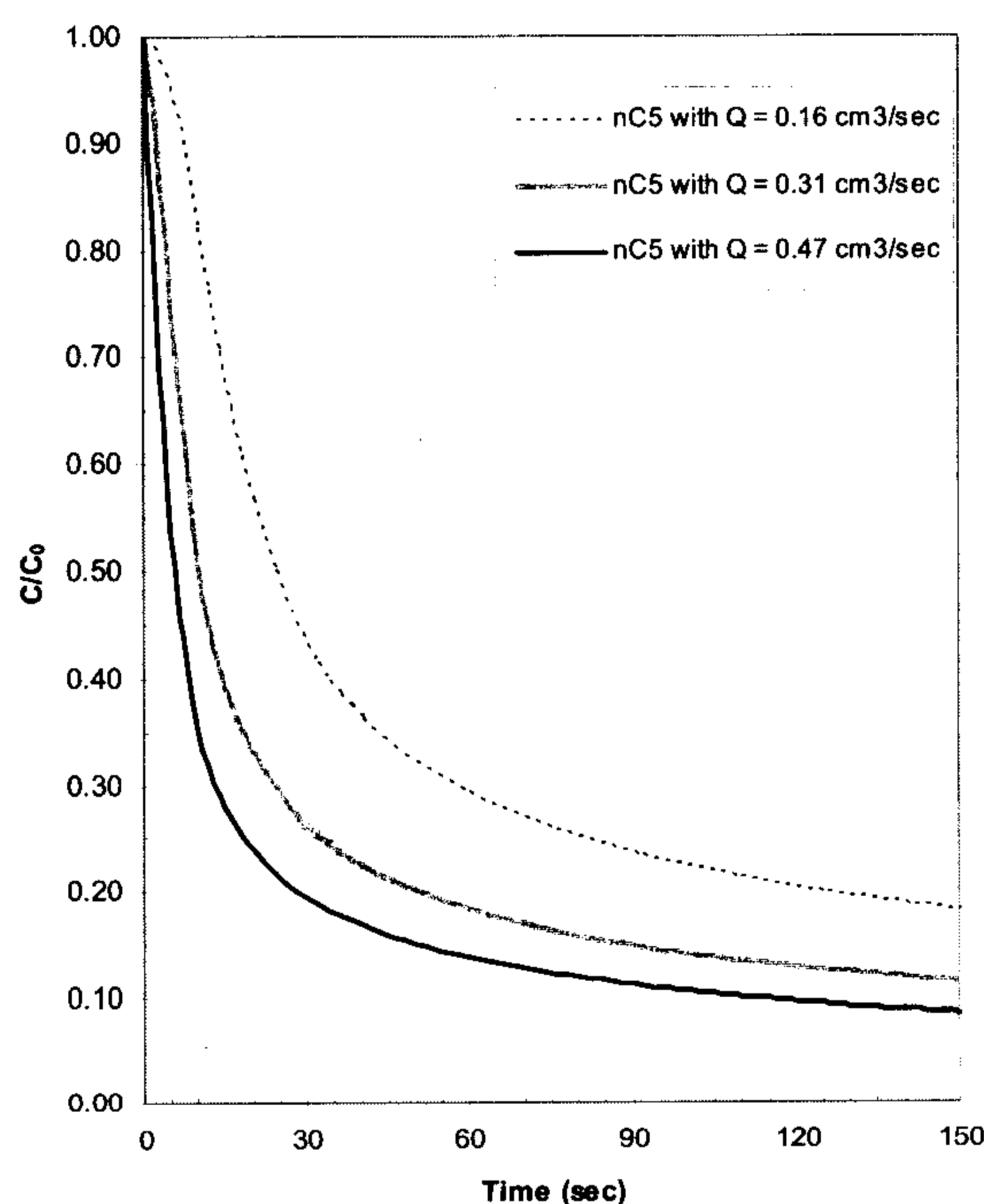
کمتر باشد سطح تماس سیال با سطوح جاذب بیشتر شده و بستر به علت کاهش مقاومت‌های درونی دانه امکان نفوذو جذب بیشتری به مواد میدهد و باعث می‌شود در مدت زمان یکسان ظرفیت جذب بستر بیشتر شود سرعت حجمی بالای جریان ورودی، در سطح مقطع یکسان برای بستر جذب، باعث کوتاه شدن زمان ماند در بستر شده و موجب می‌شود منحنی گذر زودتر از بستر خارج شود. اثر سرعت جریان ورودی در شکل (۶) برای اجراهای ۳۱، ۳۲ و ۳۳ ارائه شده است.



شکل ۶: مقایسه منحنی‌های گذر برای سرعت‌های مختلف ورودی حاصل از اجراهای ۳۱ و ۳۲ و ۳۳.

ضریب پیچش جاذب یکی از موارد بسیار مؤثر در بسترهای جذب می‌باشد. این ضریب در کربن‌های فعال مقداری از ۲ تا ۱۵ را دارا می‌باشد [۶]. با توجه به تأثیر مستقیم ضریب پیچیدگی در ضریب نفوذ مؤثر (به پیوست ۲ رجوع شود)، مقادیر متنوع این ضریب تأثیر متفاوتی را در ضریب نفوذ مؤثر و در نتیجه سرعت جذب خواهد

بستر کوتاه‌تر می‌شود. با توجه به اینکه هیدروکربنهای بستر قدرت جذب کمتری نسبت به نرمال پنتان دارند (جدول ۲ نیز بر اساس ثابت تعادل جذب، K ، تأیید کننده این موضوع می‌باشد) بنابراین این با دفع نرمال پنتان قطعاً هیدروکربن‌های سبکتر نیز دفع خواهند شد. بنابراین این با این مدل می‌توان زمان لازم برای تخلیه بستر از مواد جذب شده را بر اساس سرعت جریان هوای خالص تعیین کرد. با توجه به شکل (۹) و جدول (۴) ملاحظه می‌شود، هر چه سرعت جریان هوا بیشتر باشد، زمان تخلیه مواد از بستر نیز کوتاه‌تر خواهد بود. شرایط عملیاتی بستر در جدول (۴) دیده می‌شود.

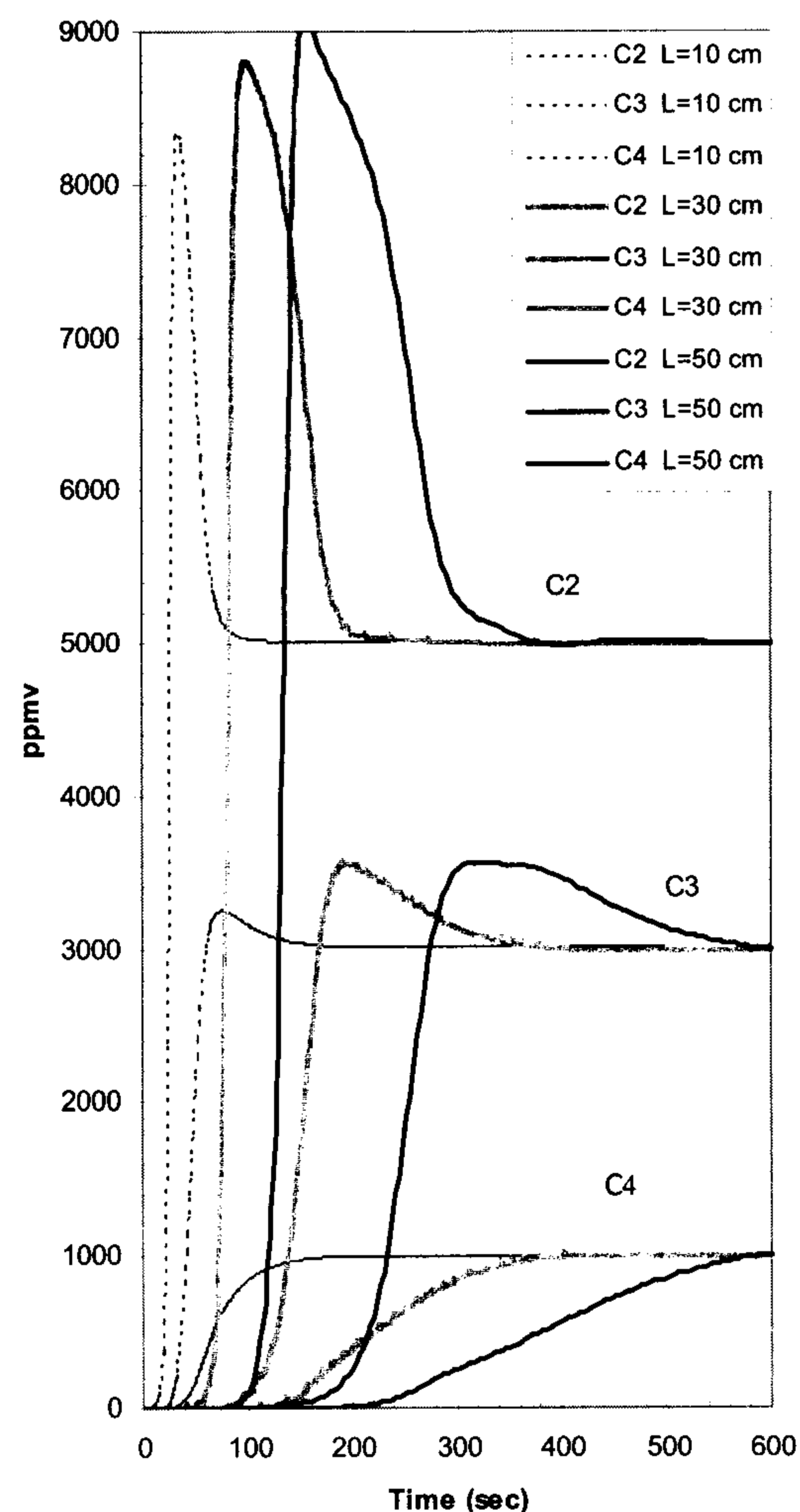


شکل ۹: مقایسه منحنی‌های گذر برای مرحله دفع توسط جریان هوا با سعت‌های مختلف حاصل از اجراهای ۶۱ و ۶۲ و ۶۳.

نتیجه‌گیری

در تحقیق حاضر، مدلسازی ریاضی جذب چند جزئی آلاینده‌های هیدروکربنی از جریان هوا در شرایط دما ثابت انجام شده است. مدل ریاضی حاصل قادر است مرحله جذب و بازیابی بستر کربن فعال را از آلاینده‌های موجود به صورت تابعی از زمان در طول بستر و در داخل دانه‌های جاذب در شرایط عملیاتی مختلف پیش‌گویی کند. با توجه به آنالیز حساسیت مدل ملاحظه شده است که

دیگر بالا بودن غلظت ورودی باعث اشباع سریعتر بستر می‌شود و زوان گذر را کاهش می‌دهد که این امر در اجرای مدل ملاحظه شد.



شکل ۸: مقایسه منحنی‌های گذر برای طول‌های مختلف بستر حاصل از اجراهای ۵۱ و ۵۲ و ۵۳.

بازیابی بستر

همانطور که در متن اشاره شد در این مدلسازی دفع یا بازیابی بستر نیز مورد بررسی قرار گرفته و با مدل ارائه شده امکان بررسی منحنی گذر در شرایط بازیابی نیز میسر است. با ورود جریان هوای خالص به بستری که قبلاً اشباع شده است می‌توان بستر را از مواد جذب شده تخلیه کرد. در اینجا اثر سرعت جریان هوای ورودی در مدت زمان دفع بستر بررسی شده است. نمودار (۹) ارائه کننده اثر جریان هوای خالص ورودی بر زمان دفع نرمال پنتان می‌باشد که مشاهده می‌شود با افزایش سرعت جریان هوا زمان دفع نرمال پنتان و در نتیجه زمان احیای

جدول ۳: زمان گذر(*) و میزان ماده جذب شده (**در مرحله جذب مخلوط سه جزئی برای کریب فعال Ajax بشکل کروی.

شماره اجرای مدل	پارامتر متغیر	ماده اول	ماده دوم	ماده سوم	دما (°C)	فشار (psia)	سرعت ورودی (cm ³ /sec)	قطر دانه (cm)	طول بستر (cm)	ضریب پیچش	وزن جاذب (gr)	Ws(gr/gr) (**)	t b (sec) (*)
01	نوع جذب شونده	C2	C3	C4	30	15	0.31	0.2	30	3	42.39	2.93	400
02		C2	C3	C5	30	15	0.31	0.2	30	3	42.39	3.63	645
03		C3	C4	C5	30	15	0.31	0.2	30	3	42.39	3.01	460
11	دما	C2	C3	C5	30	15	0.31	0.2	30	3	42.39	3.63	645
12		C2	C3	C5	60	15	0.31	0.2	30	3	42.39	3.59	500
13		C2	C3	C5	90	15	0.31	0.2	30	3	42.39	3.19	370
21	اندازه دانه	C3	C4	C5	30	15	0.31	0.1	30	3	42.39	12.03	460
22		C3	C4	C5	30	15	0.31	0.2	30	3	42.39	3.01	460
23		C3	C4	C5	30	15	0.31	0.3	30	3	42.39	1.34	460
31	سرعت جریان	C2	C3	C5	30	15	0.16	0.2	30	3	42.39	3.57	1300
32		C2	C3	C5	30	15	0.31	0.2	30	3	42.39	3.63	645
33		C2	C3	C5	30	15	0.47	0.2	30	3	42.39	3.62	550
41	ضریب پیچش	C2	C4	C5	60	20	0.16	0.2	30	3	42.39	3.01	1200
42		C2	C4	C5	60	20	0.16	0.2	30	5	42.39	2.4	900
43		C2	C4	C5	60	20	0.16	0.2	30	10	42.39	1.92	700
51	طول بستر	C2	C3	C4	30	15	0.31	0.2	10	3	14.13	2.93	200
52		C2	C3	C4	30	15	0.31	0.2	30	3	42.39	2.93	400
53		C2	C3	C4	30	15	0.31	0.2	50	3	70.65	2.91	800

جدول ۴: زمان احیا بستر (*) و شرایط بازیابی توسط جریان هوای خالص در سرعت‌های مختلف ورودی.

شماره آزمایش	متغیر مدل	ماده اول	ماده دوم	ماده سوم	دما (°C)	فشار (psia)	سرعت جریان (cm ³ /sec)	قطر دانه (cm)	طول بستر (cm)	فاکتور پیچش	وزن جاذب (gr)	زمان دفع * (sec)
61	سرعت جریان	C2	C3	C5	30	15	0.16	0.2	30	15	42.39	10
62		C2	C3	C5	30	15	0.31	0.2	30	15	42.39	15
63		C3	C3	C5	30	15	0.47	0.2	30	15	42.39	32

(*)- بعلا طولانی بودن زمان احیاء کامل بستر، زمان لازم برای دفع ۴۰٪ از مواد جذب شده معیاری برای مقایسه در نظر گرفته شده است.

L : طول بستر m	مدل نسبت به اندازه دانه و نیز ضریب پیچش
K : ثابت جذب همدمما (ضریب لانگمیر) $m^3 / kmol$	جاذب حساس است و مقاومت نفوذ حفره‌ای نقش مهمی
M_w : جرم مولکولی ماده $kg / kmol$	را در فرآیندهای جذب توسط جاذبهای دانه‌بندی شده
q : غلظت ماده جذب شده در سطح $kmol / m^3$	اجرا می‌کند.
q_∞ : حداکثر ظرفیت جذب $kmol / m^3$	
q_0 : غلظت اولیه ماده جذب شده $kmol / m^3$	
r : شعاع m	
R_p : شعاع کره یا استوانه	
t : زمان sec	
T : دما $^\circ C$	
U : سرعت جریان کلی m / s	
W_s : میزان وزن ماده جذب شده به ازای وزن	
جاذب kg / kg	
z : بعد طولی بستر m	
dz : گام بستر m	
ρ_b : دانسیته بستر جاذب kg / m^3	
ε_p : تخلخل در حفرات ذره	
ε_b : تخلخل بستر	
τ : ضریب پیچش جامد	
μ : ویسکوزیته $kg / m.s$	
ν : ویسکوزیته m^2 / s	
	مدل نسبت به شعاع عمودی برای مشتق اول
	ضریب تعامدی برای مشتق دوم
	غلظت در بستر $kmol / m^3$
	غلظت در حفرات $kmol / m^3$
	غلظت اولیه $kmol / m^3$
	ضریب بی‌بعد در بستر
	غلظت بی‌بعد در حفرات
	ضریب نفوذ محوری m^2 / s
	ضریب نفوذ مؤثر در حفرات m^2 / s
	ضریب نفوذ نادسن m^2 / s
	ضریب نفوذ مولکولی m^2 / s
	ضریب نفوذ در سطح جامد m^2 / s
	کسر ماده جذب شده
	گام زمانی
	ضریب انتقال جرم فیلمی m / s
	گام طولی

فهرست علائم

مراجع

- 1 - Jounson, H. R. and Williams, R. S. (2000). "Performance of activated carbon in evaporation loss control system." *SAE Technical Paper Series*, No. 902119.
- 2 - Reddy, Sam Raghuma. (2001). "Evaporative emission control canister system for reducing breakthrough emissions." *United State Patent*, No. 6279548.
- 3 - Dwivedi, P., Gaur, V., Sharma, A. and Verma, N. (2004). "Comparative study of removal of volatile organic compounds by cryogenic condensation and adsorption by activated carbon fiber." *Sep. & Purif. Tech.*
- 4 - Gupta, V. K. and Verma, N. (2002). "Removal of volatile organic compounds by cryogenic condensation followed by adsorption." *Chem. Eng. Sci.*, Vol. 57, PP. 2676- 2696.
- 5 - Bansode, R. R., Losso, J. N., Marshall, W. E., Rao, R. M. and Portier, R. J. (2003). "Adsorption of volatile organic compounds by pecan shell- and almond shell- based granular activated carbons." *Bioresource Tech.*, Vol. 90, No. 2 , PP. 175-184.
- 6 - Do. Duong, D. (2000). "Adsorption analysis: equilibria and kinetics." *Series on Chemical Engineering*, Imperial College.

- 7 - Hu, X., Rao, G. N. and Do, D. D. (1993). "A mathematical model for multicomponent adsorption, desorption and displacement kinetics of ethane, propane and n-butane in activated carbon." *Gas Sep. & Purif.*, Vol. 7, PP. 197-206.
- 8 - Wang, K., Qiao, S., Hu, X. and Do, D. D. (2001). "Discrimination of adsorption kinetic models for adsorption of hydrocarbons in activated carbon." *Adsorption*, Vol. 7, No. 1, PP. 51-63.
- 9 - HU, X. and Do, D. D. (1992). "Multi-component adsorption kinetic of hydrocarbons onto activated carbon: effect of adsorption equilibrium equations." *Chem. Eng. Sci.*, Vol. 47, No. 7, PP. 1715-1725.
- 10 - Hu, X. and Do, D. D. (1995). *Comparing Various Multicomponent Adsorption Equilibrium Models*. Vol. 41, PP. 1585-1592.
- 11 - Ahmadpour, Wang, K. and Do, D. D. (1998). "Comparison of models on the prediction of binary equilibrium data of activated carbons." *AIChE J.*, Vol. 44, No. 3, PP. 740.
- 12 - Hu, X. and Do, D. D. (1995). "Validity of isothermality in adsorption kinetics of gases in bidispersed solids." *AIChE J.*, Vol. 41.
- 13 - Malek, A. and Farooq, S. (1996). "Comparison of isotherm models for hydrocarbon adsorption on activated carbon." *AIChE J.*, Vol. 42, No. 11, PP. 3191-3201.
- 14 - Chuang, C. L., Chiang, P. C. and Chang, E. E. (2003). "Modeling VOCs adsorption onto activated carbon." *Chemosphere*, Vol. 53, No. 1, PP. 17-27.
- 15 - Murillo, R., Garc_a, T., Ayl_on, E., Call_en, M. S., Navarro, M. V., Lopez, J. M. and Mastral, A. M. (2004). "Adsorption of phenanthrene on activated carbons: breakthrough curve modeling." *Carbon*, Vol. 42, PP. 2009-2017.
- 16 - "Modeling breakthrough curves in a fixed bed of activated carbon fiber-exact solution and parabolic approximation." (1997). *Chem. Eng. Sci.*, Vol. 51, No. 46, PP. 1581-1584.
- 17 - Rice, R. G. and Do, D. D. (1994). *Applied mathematics and modeling for chemical engineers*. John Wiley & Sons Inc.
- 18 - Villadsen, J. and Michelsen, N. L. (1978). *Solution of differential equation models by polynomial approximation*. Prentice Hall, Engelwood Cliffs, New Jersey.
- 19 - Ruthven, D. M. (1997). *Encyclopedia of separation technology*. John Wiley & Sons.
- 20 - *API Technical Data Book*. (1976). Third Edition .
- 21 - Suzuki, M. (1990). "Adsorption engineering." *Chemical Engineering Monographs*, Elsevier, PP. 178-185.
- ۲۲ - فاطمی، ش. "اندازه‌گیری پارامترهای تعادلی و سینتیکی و شبیه‌سازی بستر جذب جهت جداسازی نرمال پارافینها توسط غربالهای مولکولی." رساله کارشناسی ارشد، دانشکده فنی، دانشگاه تهران (۱۳۷۲).

واژه های انگلیسی به ترتیب استفاده در متن

- | | |
|-------------------------------------|--------------------------------------|
| 1 - Pore Diffusion | 2 - Extended Longmuir |
| 3 - Breakthrough curve | 4 - Orthogonal Collocation |
| 5 - Fractional Uptake | 6 - Tortusity Factor |
| 7 - Canister | 8 - Volatile Organic Compounds |
| 9 - Cryogenic Condensation | 10 - Adsorption |
| 11 - Surface Diffusion | 12 - Micro Pore Diffusion |
| 13 - Ideal Adsorbed Solution Theory | 14 - Isotherm |
| 15 - Slab | 16 - Average Absolute Relative error |

$$-\psi_2 \frac{\partial Cp_1}{\partial t} - \xi_2 \frac{\partial Cp_2}{\partial t} + \delta_2 \frac{\partial Cp_3}{\partial t} = \quad (5-پ)$$

$$D_{p_2} \left(\frac{\partial^2 Cp_2}{\partial r^2} + \frac{s}{r} \frac{\partial Cp_2}{\partial r} \right)$$

$$-\psi_3 \frac{\partial Cp_1}{\partial t} - \delta_3 \frac{\partial Cp_2}{\partial t} + \xi_3 \frac{\partial Cp_3}{\partial t} = \quad (6-پ)$$

$$D_{p_3} \left(\frac{\partial^2 Cp_3}{\partial r^2} + \frac{s}{r} \frac{\partial Cp_3}{\partial r} \right)$$

بطوریکه

$$\xi_i = \left[1 + \frac{(1 - \varepsilon_p) q_{i\infty} K_i \left(1 + \sum_{j=1, j \neq i}^3 K_j Cp_j \right)}{(1 + K_1 Cp_1 + K_2 Cp_2 + K_3 Cp_3)^2} \right] \quad (7-پ)$$

$$\psi_i = \left[\frac{(1 - \varepsilon_p) q_{i\infty} K_i K_{j \neq i} Cp_{i,j}}{(1 + K_1 Cp_1 + K_2 Cp_2 + K_3 Cp_3)^2} \right] \quad (8-پ)$$

$$\delta_i = \left[\frac{(1 - \varepsilon_p) q_{i\infty} K_i K_{k \neq i} Cp_i}{(1 + K_1 Cp_1 + K_2 Cp_2 + K_3 Cp_3)^2} \right] \quad (9-پ)$$

ضرایب ξ_i ، ψ_i ، δ_i توابعی از غلظت اجزا می‌باشند. چنانچه ملاحظه می‌شود، معادلات (3 تا 6) معادلات دیفرانسیل جزئی و غیرخطی می‌باشند. در این حالت با کمک روش تعامد تطبیقی و با استفاده از چند جمله‌ای متعامد ژاکوبی ریشه‌های این معادله بین مکان صفر و یک بدست آمده و سپس با کمک چندجمله‌ای لاگرانژ مشتقات اول و دوم مکانی به چند جمله‌ای هابی با ضرایب ثابت B_{ij} و A_{ij} تبدیل می‌شوند. [۱۸]:

$$\left. \frac{dy}{dx} \right|_{(x=x_i)} = \sum_{j=1}^{n+1} A_{ij} y(x_j) \quad (10-پ)$$

$$x^{l-s} \left. \frac{d}{dx} \left(x^{s-1} \frac{dy}{dx} \right) \right|_{(x=x_i)} = \sum_{j=1}^{n+1} B_{ij} y(x_j) \quad (11-پ)$$

بنابراین برای غلظت جزء اول در نقطه داخلی i مشتقات مکانی به شکل زیر تبدیل می‌شوند:

$$\frac{\partial^2 Cp_{1i}}{\partial r^2} + \frac{s}{r} \frac{\partial Cp_{1i}}{\partial r} = \quad (12-پ)$$

$$4r_i \sum_{j=1}^{m+1} Cp_{1j} A_{ij} + (2s+2) \sum_{j=1}^{m+1} Cp_{1j} B_{ij}$$

پیوست ۱ [۲۲]

مرتب کردن معادله دانه

معادله (۵) معادله غلظت جزء i در دانه می‌باشد. در این معادله لازم است بجای غلظت جزء در فاز جذب (q_i) از ایزوترم تعادلی استفاده شود تا تابع (q_i) برحسب غلظت در حفره (C_{p_i}) بدست آید. بنابراین برای سیستم چند جزئی و با استفاده از معادله EL مراحل زیر انجام می‌شود. معادله EL برای جزء اول در مخلوط سه جزئی بصورت زیر خواهد شد:

$$q_1 = q_{1\infty} \frac{K_1 C_{p_1}}{1 + K_1 C_{p_1} + K_2 C_{p_2} + K_3 C_{p_3}} \quad (1-پ)$$

K_i ثابت جذب جزء i ام می‌باشد. مشتق زمانی ماده

جذب شده در جامد ($\frac{dq}{dt}$) در معادله (۵) برای جزء اول

بصورت زیر خواهد شد:

$$\frac{\partial q_1}{\partial t} = \sum_{j=1}^n \left(\frac{\partial q_1}{\partial C_j} \times \frac{\partial C_j}{\partial t} \right) \quad (2-پ)$$

با سه جزئی در نظر گرفتن فرآیند نفوذ در دانه و جاگذاری مشتق $\frac{\partial q_1}{\partial C_j}$ در فرمول بالا، برای جزء اول

عبارت زیر حاصل خواهد شد:

$$\frac{\partial q_1}{\partial t} = \frac{q_{1\infty} k_1}{(1 + k_1 Cp_1 + k_2 Cp_2 + k_3 Cp_3)^2} \times \left[(1 + k_2 Cp_2 + k_3 Cp_3) \frac{\partial Cp_1}{\partial t} - (k_2 Cp_2) \frac{\partial Cp_2}{\partial t} - (k_3 Cp_3) \frac{\partial Cp_3}{\partial t} \right] \quad (3-پ)$$

معادله‌های مربوط به دو جزء دیگر نیز به همین ترتیب نوشته می‌شوند.

اگر عبارت‌های $\frac{\partial q_1}{\partial t}$ و $\frac{\partial q_2}{\partial t}$ و $\frac{\partial q_3}{\partial t}$ در معادله‌های

مدل دانه برای هر جزء جایگذاری شود شکل کلی زیر برای سه جزء حاصل می‌شود:

$$\xi_1 \frac{\partial Cp_1}{\partial t} - \psi_1 \frac{\partial Cp_2}{\partial t} - \delta_1 \frac{\partial Cp_3}{\partial t} = \quad (4-پ)$$

$$D_{p_1} \left(\frac{\partial^2 Cp_1}{\partial r^2} + \frac{s}{r} \frac{\partial Cp_1}{\partial r} \right)$$

$$D_{ax} = \varepsilon_b \left(\gamma D_M + R_p \frac{U}{\varepsilon_b} \right)$$

بطوریکه:

$$\gamma = 0.45 + 0.55 \varepsilon_b$$

ضریب انتقال جرم فیلمی

ضریب انتقال جرم فیلمی اطراف دانه مطابق رابطه

زیر بدست می‌آید: [۱۹].

$$k_c = \frac{D_M}{R_p} \left[2 + 1/1 \left(\frac{2UR_p}{\mu} \right)^{1/6} \left(\frac{v}{D_M} \right)^{1/2} \right]$$

ضریب نفوذ مؤثر

ضریب نفوذ مولکولی مؤثر از نفوذ مولکولی و

ضریب نفوذ نادسن بدست خواهد آمد. برای نفوذ جزء i در جزء هوا [۲۰]:

$$D_{Mi,air} = \frac{0.0204 T^{1/75} \left(\frac{1}{M_{wi}} + \frac{1}{M_{wair}} \right)^{1/5}}{P \left[\left(\sum_i v_i \right)^{1/2} + (v_{air})^{1/2} \right]^2}$$

D_M : (ft²/h) ضریب نفوذ مولکولی

M_w : (lb/lbmol) جرم مولکولی

T : (°R) دمای مطلق

P : (psia) فشار

v : (ft³/lbmol) حجم نفوذی اتم‌ها

و ضریب نفوذ حفره ای در دانه:

$$D_P = \frac{\varepsilon P}{\tau} D_{Mi,2,3,\dots,n}$$

که τ ضریب پیچش جاذب است و به بافت داخلی جاذب بستگی دارد. معمولاً از ۲ تا ۱۵ بسته به نوع جاذب متغیر است.

ضریب نفوذ نادسن [۲۱]:

$$D_K \text{ (in...cm}^2\text{/sec)} = 9700 R_p \left(\frac{T}{M_w} \right)^{1/2}$$

R_p : (cm) شعاع متوسط حفره

M_w : جرم مولکولی

T : (°K) دمای مطلق

ضریب نفوذ مؤثر مورد استفاده در مدل [۱۴]:

$$\frac{1}{D_P} = \frac{1}{D_K} + \frac{1}{D_{Pe}}$$

i شعاع نقطه i ام است. m تعداد نقاط تعامد است. بدین ترتیب معادلات دیفرانسیل جزئی به معادلات دیفرانسیل معمولی تبدیل شده و با در نظر گرفتن ماده n و i نقطه تعامد داخلی یک دستگاه معادلات شامل ni معادله حاصل می‌شود که به روش رانگ کوتا حل می‌شوند.

مرتب کردن معادله بستر

برای حل معادلات بستر از روش تفاضل محدود

غیر صریح استفاده شده است. با اعمال این روش بر روی معادله (۱) برای نقطه j بستر و در زمان $t+1$ معادله (۱۳) حاصل می‌شود که اگر رابطه غلظت در دانه و بستر با استفاده از شرط مرزی (۷) جایگزین شود معادله کلی زیر نتیجه می‌شود:

$$AC_{j+1,t+1} + BC_{j,t+1} + MC_{j-1,t+1} + PC_p \Big|_{r=R_p;j,t+1} = NC_{j,t} \quad (\text{پ-۱۳})$$

t ، شمارنده زمان و j ، شمارنده مکان در بستر می‌باشد. بطوریکه:

$$A = \left(\frac{1}{l^2} - \frac{UL}{2D_{ax}l} \right) \quad (\text{پ-۱۴})$$

$$B = \left(\frac{-2}{l^2} - \frac{3(1-\varepsilon_b)k_c L^2}{R_p D_{ax}} - \frac{\varepsilon_b D_p L^2}{D_{ax} R_p^2 h} \right) \quad (\text{پ-۱۵})$$

$$M = \left(\frac{1}{l^2} + \frac{UL}{2D_{ax}l} \right) \quad (\text{پ-۱۶})$$

$$N = \frac{-\varepsilon_b D_p L^2}{R_p^2 h D_{ax}} \quad (\text{پ-۱۷})$$

$$P = \frac{3(1-\varepsilon_b)k_c L^2}{R_p D_{ax}} \quad (\text{پ-۱۸})$$

دستگاه معادله‌های (۱۳) پس از بکارگیری شرایط مرزی ابتدا و انتهای بستر به روش گوس جردن همزمان با دانه حل می‌شوند.

پیوست ۲

ضریب پراکندگی

ضریب پراکندگی بستر از معادله زیر جایگزین شد

(Ruthven 1984) [۱۹]: