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

شهره فاطمی استادیار گروه مهندسی شیمی – دانشکده فنی - دانشگاه تهران <u>Shfatemi@ut.ac.ir</u> **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)

چکیدہ

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 جزیی 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 گذر⁷ 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 تطبیقی⁵ 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 گذر، پاینخ بستر جذب نسبت به تعییر پارامترهای مؤثرمدان انتان بدست گردیده است. برای اطمینان از صحت مدل، نتایج حاصل از منحنی گذر، پاینخ بستر جذب نسبت به تغییر پارامترهای مؤثرمدل از جمله آمده است. برای اطمینان از صحت مدل، نتایج حاصل از منحنی گذر، پاینخ بستر جذب نسبت به تغییر پارامترهای مؤثرمدل از جمله آمده است. برای اطمینان از صحت مدل، نتایج حاصل از منحنی گذر، پاینخ بستر جذب نسبت به تغییر پارامترهای مؤثرمدل از جمله بادنازه دانه، فاکتور پیچش³ جاذب سرعت جریان گاز و دما تعیین و مورد ارزیایی 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 می دهد که میزان جذب شدگی به اندازه دانه و نیز فاکتور پیچش جاذب در شرایط مختلف تعیین و بررسی گردیده است. مدل حاضر نشان می دهد که میزان جذب شدگی به اندازه

مقدمه

خودروها به عنوان یک منبع مهم در انتشار آلاینده های گوناگون از جمله بخارارات هیدرو کربنی حاصل از بنزین و سوختهای 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[^] 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 برودتی⁶ و

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 وتعیین 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.

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 حفره ای، نفوذ سطحی'' و نفوذ

ریز حفره ای^{۱۲} را برای جذب تک جزیی و دو جزیی 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)^۳ بررسی و ارائه داده اند. آزمایشات این

محققین معمولا در سیستم ناپیوسته یا بستر جذب

دیفرانسیلی انجام شده است و دانه های کربن درداخل فاز

گازی شامل غلظت یکنواختی از مواد جذب شوند و به

صورت جذب تک جزیی ویا دو جزیی بررسی شده تا

کسر ماده جذب شده در زمانهای مختلف تعیین گردد و

در نهایت با تطبیق نتایج ازمایش و مدلهای مختلف

تعیین منحنی گذر اکثرا بر اساس فرضیات ساده کننده

ای از جمله ،بستر ثابت باجریان پیستونی، جذب همدما، سرعت ثابت سیال ورودی با ایزوترم^{۱۴} جذب خطی و برای

جذب تک جزیی به دست امده 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

تری ارائه گردد به طوریکه جذب مخلوط سه جزیی هیدرو کربنهای 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 نفوذحفره ای در

دانه همراه با ایزوترم جذب توسعه یافته لانگمیر مدلسازی

شده است. علت انتخاب ایزوترم لانگمیر در این مقاله این است که اولا در جذب سطحی باسرعتهای نسبتا کم

در این تحقیق سعی شده است که مدل کامل

در مراجع گذشته ، مدلهای ریاضی بسترجذب و

پارامترهای مدل تعیین شوند[۱۰ –۱۲].

www.SID.ir

است [۱۶].

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 ودر این مقاله از روش تعامد تطبيقي درحل 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 ودر نهایت ، منحنی گذر وظرفیت جذب گازها توسط بستر کربنی در شرایط جذب و بازیابی بستر به دست می اید.

مدل ریاضی جذب

مکانیزمهای پیچیده نفوذ ماده جذب شونده به داخل جاذب مسیرهایی هستند که در طی آنها نفوذ به داخل جاذب انجام می گیرد. این مسیرها را می توان 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 می توان بطور ساده به نفوذ حفرهای، نفوذ ریز حفرهای و نفوذ سطحی تقسیمبندی کرد. البته دو مکانیزم آخر معمولاً يكسان فرمول بندى مي شوند. [۶]

مدل نفوذ در بستر با نوشتن بیلان جرم جزئی در بستر جذب، معادله

زیر حاصل می شود:

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

(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) می باشد.

شرایط مرزی و اولیه بستر:

$$Z = \circ \quad \Rightarrow \quad D_{ax} \frac{\partial C}{\partial Z} = U(C - C_{\circ})$$
(7)

$$Z = L \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial C}{\partial Z} = \circ$$

$$t = \circ \quad \Rightarrow \quad C = \circ \tag{(f)}$$

مدل نفوذ در دانه

با نوشتن بیلان جرم در دانه، معادله زیر حاصل
میشود:
$$\frac{1}{r^s} \frac{\partial}{\partial r} \left\{ r^s (\varepsilon_p D_p \frac{\partial C_p}{\partial r}) \right\} = \left\{ \varepsilon_p \frac{\partial C_p}{\partial t} + (1 - \varepsilon_p) \frac{\partial q}{\partial t} \right\}$$

(۵)

(٣)

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:

$$r = \circ \implies \frac{\partial C_p}{\partial r} = \frac{\partial q}{\partial r} = \circ$$

(۶)

(Y)

$$r = R_{p} \implies$$

$$\varepsilon_{p} D_{p} \frac{\partial C_{p}}{\partial r} \Big|_{r=R_{p}} = k_{c} (C - C_{p} \Big|_{r=R_{p}})$$

$$t = \circ \implies C_p = q = \circ$$
(A)

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]:

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

از این معادله هنگامی استفاده می شود 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 می رود 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 می کند. یکی از مدلهای جذب تعادلی مدل لانگمیراست که در پروژه حاضر نیز از این مدل استفاده شده است که برای جذب تک جزئی مطابق معادله زیر می باشد:.

$$q = \frac{q_{\infty} K C_p}{1 + K C_p} \tag{(1.1)}$$

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

$$q_{i} = q_{\infty i} \frac{K_{i} C_{pi}}{1 + \sum_{j=1}^{n} K_{j} C_{pj}}$$
(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 ودر مقاله حاضرازآن استفاده شده است[۱۲ 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 چندجمله ای متعامد جایگزین شده و به این

ترتیب معادله های یفرانسیل جزئی غیرخطی به معادله های دیفرانسیل معمولی تبدیل شود تا بتوان آنها را به 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 مییابدو 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 (c_{pi}) و در جزیان گاز داخل بستر (c_{i}) بدست میآید. اماده سازی معادلات دانه و بستر برای حل عددی میآید. اماده سازی معادلات دانه و بستر برای حل عددی در پیوست (۱) امده 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 در جاذب کربنی نیاز است که برای هر جزء شامل پارامتر مداکثر جذب ($_{i00}$) و ثابت جذب (K_i) می باشد که برای هر نوع جاذب و برای هر ماده متفاوت است. براساس تحقیقات انجام شده بر روی کربن فعال Ajax ، این پارامترها مطابق مراجع [۲–۹] در جدول های (۱) و (۲) ملاحظه می شوند.

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

نوع کربن فعال	دانسیته (kg/m3)	تخلخل دانه ${\cal E}_P$	سطح مخصوص (m2/g)	تخلخل بستر <i>E_b</i>
Norit	۵۶۹	۰,۷۴	1.02	۴۸, ۰
Ajax	۶ ۶.	۰,۷۱	17	۵, ۰

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 می باشد[۱۲]. نتایج حل دستگاه معادلات برای جذب ترکیبات مختلف سه جزیی از هیدروکربنهای اتان، پروپان، نرمان بوتان و نرمال پنتان در شرایط مختلفی از نظر ابعاد بستر، دانه، غلظت اجزا ورودی

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

نتايج أزمايشي

براساس 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 براساس معادله زیربدست آمده و به صورت منحنی رسم شده است [۶]:

مقدار ماده جذب شده در جاذب

FU=----

حداکثر جذب بر اساس غلظت توده

یعنی برای هر جزء در هر لحظه:

 $FU_i =$

$$\frac{\varepsilon_p \int_{\circ}^{1} \overline{C_{ip,t}} r^{-2} d\overline{r} + (1 - \varepsilon_p) \int_{\circ}^{1} \frac{q_{\infty} K \overline{C_{ip,t}}}{1 + K \overline{C_{ip,t}}} r^{-2} d\overline{r}}{\varepsilon_p \int_{\circ}^{1} \overline{C_{ip,t}} r^{-2} d\overline{r} + (1 - \varepsilon_p) \int_{\circ}^{1} \frac{q_{\infty} K \overline{C_{ip,t}}}{1 + K \overline{C_{ip,t}}} r^{-2} d\overline{r}}$$
(17)

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 می شود، تا مقایسهای میان FU محاسبه شده از مدل و آزمایش در شرایط یکسان انجام شود.نتایج آزمایشی درسیستم 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

سلسیوس بدست آمده است [۸] . ملاحظه می شود 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٪ می باشد. این مقدار خطا ی نسبی نشان دهنده دقت قابل قبولی برای مدل حاضر می باشد.

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

جدول ۲: پارامترهای ایزوترم جذب مواددر کربن فعال Ajax.

جذب شونده	دما ° C	حداکثر ظرفیت جذب 4mole / m ³	ثابت جذب m ³ / <i>kmole</i>			
	١.	۵,۴۹	13.			
اتان	۳۰	4,9	٨۵			
	۶.	۴,۵۸	47,1			
	١.	۵	1114,8			
پروپان	۳۰	4,59	548			
	۶.	4,75	217,0			
	١.	۵,۳۳	177.			
نرمال بوتان	۳۰	۴,۸	1.0.			
	۶.	4,17	840			
	١٠	4,89	144			
نرمال پنتان	٣٠	4,17	997.			
	۶.	۳,۵۵	९ ٣٩٠			

همانطور که در نمودارها مشاهده می شود، در نتایج حاصل از مدل و آزمایش، غلظت جزء سبکتر در مقاطعی 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 ($_{\infty}$) می باشد. از طرفی جزء سنگین دارای ثابت جذب تعادلی بیشتری است، یعنی بعلت جرم مولکولی بیشتر، روی سطح جامد با قدرت بیشتری جذب شده و پیوند محکم تری با سطح برقرار می کند.این امر موجب می شود که جزء سنگین تر

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 می گردد. این افزایش غلظت در بستر نیز مشاهده خواهد شد. (پدیده تلاطم) این پدیده تا هنگامی صورت می گیرد که جزء سنگین توانایی جابجا کردن جزء سبکتر را داشته باشد. سپس به مرور و کاهش توانایی جزء سنگین تر 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 می سد.

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 بسترجذب با غلظت ورودی ثابت از مخلوط سه جزیی در شکلهای (۴) تا (۸) ارائه شده است . این منحنی ها تغییرات غلظت خروجی از بستررا در زمانهای مختلف نشان می دهند. در هر شکل اثر تغییر یک پارامتر در نتایج مدل بررسی شده است. شرایط عملیاتی مدل درجدول (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 سنگین ترین ماده تا رسیدن به غلظت ورودی ارائه شده است، که براساس فرمول زیر در هر منحنی گذر محاسبه شده است:

$$W_{s} = \frac{UC_{\circ}M_{w}\int_{\circ}^{t_{b}}(1 - C/C_{\circ})dt}{L\rho_{b}}$$
(14)

این دو ستون معیاری خواهد بود برای مقایسه اجراهای مختلف در شرایط مختلف که مورد بحث قرار می گیرد.

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



شکل۱ : کسر ماده جذب شده در دانه مکعبی از نوع نوریت (Norit) با ضخامت ۸٫۸۵ میلی متر برای مخلوط ۵٪ مولی اتان و۵٪ 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 و۵٪ پروپان در دمای ۳۰۳ کلوین.

اتان و پروپان) زمان خروج پنتان از بسترطولانی تر است. با توجه به گرمازا بودن عمل جذب سطحی، انتظار میرود 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 اجراهای ۱۱، ۱۲ و ۱۳ بوضوح قابل مشاهده میباشد. اجزاء سبک تر در بستر همواره رخ می دهد . در اجراهای ۲۰ و ۲۳ 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 درمقایسه با بوتان در اجرای ۰۱ می باشد . همچنین t b و Ws در اجرای ۲۰ بیشتر است، میتوان گفت به علت تفاوت بیشتردرخواص اجزاء جذب شونده سبک و سنگین در این اجرا (پنتان در مقابل



شکل ۳ : کسر ماده جذب شده در دانه مکعبی از نوع اژاکس (Ajax) با ضخامت ۴٫۴ میلی متر برای مخلوط ۱۰٪ مولی اتان و۱۰٪ پروپان در دمای ۳۳۳ کلوین.



مقایسه شده است.ملاحظه می شود هرچه اندازه دانه

حاصل از اجراهای ۲۰و ۲۰ و ۳۰.

کمتر باشد سطح تماس سیال با سطوح جاذب بیشتر شده و بستر به علت کاهش مقاومتهای درونی دانه امکان نفوذو جذب بیشتری به مواد میدهدو باعث می شود در مدت زمان یکسان ظرفیت جذب بستر بیشتر شود سرعت حجمی بالای جریان ورودی، در سطح مقطع یکسان برای ستر جذب، باعث کوتاه شدن زمان ماند در بستر شده و 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 ، سرعت جریان هده است.



شکل ۶: مقایسه منحنی های 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 مقادیری 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

گذاشت. با توجه به نمودار (۷) و جدول (۴) در اجراهای شماره ۴۱ ، ۴۲ و ۴۳ مشاهده می شود 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 می شود.





با توجه به شکل (۸) و جدول (۴) در اجراهای ۱۵و۲۵و۵۳ 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 ۳۰۰۰ و ۵۰۰۰ ppm برای اجزاء سبک تا سنگین انتخاب شده است. در غلظتهای بالای ورودی انتظار می رود میزان جذب نیز بالاتر باشد ولی ازسوی

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



شکل ۸ : مقایسه منحنی های 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 قبلا اشباع شده است میتوان بستر را از مواد جذب شده تخلیه کرد. در اینجا اثرسرعت 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

بستر کوتاهتر می شود. با توجه به اینکه هیدرو کربنهای بستر قدرت جذب کمتری نسبت به نرمال پنتان دارند (جدول ۲ نیز بر اساس ثابت تعادل جذب، K ، تأیید کننده این موضوع می باشد) بنابر این با دفع نرمال پنتان قطعا هیدرو کربنهای سبکتر نیز دفع خواهند شد. بنابر این با این مدل می توان زمان لازم برای تخلیه بستر از مواد جذب شده را بر اساس سرعت جریان هوای خالص می شود، هر چه سرعت جریان هوا بیشتر باشد، زمان تخلیه مواد از بستر نیز کوتاهتر خواهد بود. شرایط عملیاتی بستر در جدول (۴) دیده می شود.



نتيجه گيري

در تحقیق حاضر، مدلسازی ریاضی جذب چند جزیی 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 آنالیزحساسیت مدل ملاحظه شده است که

$ \begin{array}{cccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	جدول ۳: زمان گذر(*) و میزان ماده جذب شده (**)در مرحله جذب مخلوط سه جزئی برای کربن فعال Ajax بشکل کروی.													
$ \begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	شماره اجرای مدل	پارامتر متغیر	مادہ اول	ماده دوم	ماده سوم	(o C) دما	(psia) فشار	(cm3/sec) سرعت ورودی	(cm) قطر دانه	(cm) طول بستر	ضريب پيچش	(gr) وزن جاذب	Ws(gr/gr) (**)	t b (sec) (*)
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	01	. ۲	C2	C3	C4	30	15	0.31	0.2	30	3	42.39	2.93	400
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	02	وع جذا شونده	C2	C3	C5	30	15	0.31	0.2	30	3	42.39	3.63	645
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	03	. j.	C3	C4	C5	30	15	0.31	0.2	30	3	42.39	3.01	460
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	11		C2	C3	C5	30	15	0.31	0.2	30	3	42.39	3.63	645
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	12	دما	C2	C3	C5	60	15	0.31	0.2	30	3	42.39	3.59	500
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	13		C2	C3	C5	90	15	0.31	0.2	30	3	42.39	3.19	370
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	21	اند	C3	C4	C5	30	15	0.31	0.1	30	3	42.39	12.03	460
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	22	بازه د	C3	C4	C5	30	15	0.31	0.2	30	3	42.39	3.01	460
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	23	.ه ا	C3	C4	C5	30	15	0.31	0.3	30	3	42.39	1.34	460
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	31	ĩ	C2	C3	C5	30	15	0.16	0.2	30	3	42.39	3.57	1300
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	32	ج. ع	C2	C3	C5	30	15	0.31	0.2	30	3	42.39	3.63	645
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	33	ريان	C2	C3	C5	30	15	0.47	0.2	30	3	42.39	3.62	550
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	41	. کر	C2	C4	C5	60	20	0.16	0.2	30	3	42.39	3.01	1200
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	42	<u>}.</u> ع	C2	C4	C5	60	20	0.16	0.2	30	5	42.39	2.4	900
$ \begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	43	ا چش	C2	C4	C5	60	20	0.16	0.2	30	10	42.39	1.92	700
$\begin{array}{c ccccccccccccccccccccccccccccccccccc$	51		C2	C3	C4	30]	15	0.31	0.2	10	3	14.13	2.93	200
53 C2 C3 C4 30 15 0.31 0.2 50 3 70.65 2.91 800	52	طول بستر	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	متغيرمدل	ماده اول	ماده دوم	ماده سوم	دما (C) دما	فشار (psia)	سرعت جريان (cm3/sec)	قطر دانه (cm)	طول بستر (cm)	فاكتور پيچش	وزن جاذب (gr)	زمان دفع (sec) *
61		C2	C3	C5	30	15	0.16	0.2	30	15	42.39	10
62	رعت جريا	C2	C3	C5	30	15	0.31	0.2	30	15	42.39	15
63	Ù	C3	C3	C5	30	15	0.47	0.2	30	15	42.39	32
1*	1	1		.1 .	1./	1. 1	NL 1			1 1 .		tt "l

(*)- بعلت طولانی بودن زمان احیاء کامل بستر، زمان لازم برای دفع ۴۰٪ از مواد جذب شده معیاری برای مقایسه در نظر گرفته شده است. مدل نسبت به اندازه دانه و نیز ضریب پیچش جاذب حساس است و مقاومت نفوذ حفرهای نقش مهمی را در فرآیندهای جذب توسط جاذبهای دانهبندی شده اجرا میکند.

فهرست علائم

$$A_{ij}$$
 : ضريب تعامدی برای مشتق اول B_{ij} : ضريب تعامدی برای مشتق دوم B_{ij} B_{ij}

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.

m : طول بستر : *L*

m : شعاع r

sec : زمان : t C : دما T

ن شعاع کره یا استوانه : R_P

m/s سرعت جريان کلى : U

جاذب kg / kg

 $kg/m^{"}$ دانسیته بستر جاذب : ρ_{h}

m : بعد طولی بستر : *z* : گام بستر : *dz*

ن تخلخل در حفرات ذره : \mathcal{E}_P

τ : ضریب پیچش جامد
 kg / m.s : μ
 μ
 m^{*} / s
 εμωλρίζεται γ

تخلخل بستر : \mathcal{E}_h

 $m^{"}/kmol$ (ضریب لانگمیر) : شابت جذب همدما

 $kmol/m^{n}$ غلظت ماده جذب شده در سطح : q

ا میزان وزن ماده جذب شده به ازای وزن $W_{
m S}$

kg / kmol الده *M_w* : جرم مولکولی ماده *M_w*

 $kmol/m^r$ جذب : q_{∞}

 $kmol/m^{"}$ غلظت اولیه ماده جذب شده : q_{\circ}

- 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 bidispered 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 Jresey.
- 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. "انداه گیری پارامترهای تعادلی و سینتیکی و شبیه سازی 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
- 3 Breakthrough curve
- 5 Fractional Uptake
- 7 Canister
- 9 Cryogenic Condensation
- 11 Surface Diffusion
- 13 Ideal Adsorbed Solution Theory
- 15 Slab

- 2 Extended Longmuir
- 4 Orthogonal Collocation
- 6 Tortusity Factor
- 8 Volatile Organic Compounds
- 10 Adsorption
- 12 Micro Pore Diffusion 14 - Isotherm
- 16 Average Absolute Relative error

$$\begin{split} -\psi_{2} \frac{\partial Cp_{1}}{\partial t} - \xi_{2} \frac{\partial Cp_{2}}{\partial t} + \delta_{2} \frac{\partial Cp_{3}}{\partial t} &= \\ D_{p_{2}} \left(\frac{\partial^{2} Cp_{2}}{\partial r^{2}} + \frac{s}{r} \frac{\partial Cp_{2}}{\partial r} \right) \\ -\psi_{3} \frac{\partial Cp_{1}}{\partial t} - \delta_{3} \frac{\partial Cp_{2}}{\partial t} + \xi_{3} \frac{\partial Cp_{3}}{\partial t} &= \\ D_{p_{3}} \left(\frac{\partial^{2} Cp_{3}}{\partial r^{2}} + \frac{s}{r} \frac{\partial Cp_{3}}{\partial r} \right) \end{split} \tag{(A-\psi)}$$

بطوریکه

$$\xi_{i} = \left[1 + \frac{(1 - \varepsilon_{p})q_{i\infty}K_{i}(1 + \sum_{j=1, j \neq i}^{3}K_{j}Cp_{j})}{(1 + K_{1}Cp_{1} + K_{2}Cp_{2} + K_{3}Cp_{3})^{2}}\right]$$

$$\psi_{i} = \left[\frac{(1-\varepsilon_{p})q_{i\infty}K_{i}K_{j\neq i}Cp_{i_{j}}}{(1+K_{1}Cp_{1}+K_{2}Cp_{2}+K_{3}Cp_{3})^{2}}\right]$$
(λ - ψ)

$$\delta_{i} = \left[\frac{(1 - \varepsilon_{p})q_{i\infty}K_{i}K_{k\neq i}Cp_{i}}{(1 + K_{1}Cp_{1} + K_{2}Cp_{2} + K_{3}Cp_{3})^{2}}\right]$$
(9-5)

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 وا با استفاده از چند جمله ای متعامد ژاکوبی ریشه های این معادله بین مکان صفر و یک بدست آمده و سپس با کمک چندجمله ای لاگرانژ مشتقات اول و دوم مکانی به چند جمله ای هایی با ضرایب ثابت Bij و Aij

$$\left. x^{i-s} \frac{\partial}{\partial x} (x^{s-i} \frac{\partial y}{\partial x}) \right|_{(x=xi)} = \sum_{j=i}^{i} B_{ij} y(x_j)$$
 (۱۱-پ)
بنابراین برای غلظت جزء اول در نقطهٔ داخلـی i

مکانی به شکل زیر تبدیل می شوند:: مکانی به شکل زیر تبدیل می شوند::

$$\frac{\partial^{-C} p_{1i}}{\partial r^{2}} + \frac{s}{r} \frac{\partial C p_{1i}}{\partial r} =$$

$$4r_{i} \sum_{j=1}^{m+1} C p_{1j} A_{ij} + (2s+2) \sum_{j=1}^{m+1} C p_{1j} B_{ij}$$
(17)

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 جزئئ و با استفاده از معادله EL مراحل زیر انجام میشود. معادله EL برای جزء اول در مخلوط سه جزئی بصورت زیر خواهد شد:

$$q_{1} = q_{1\infty} \frac{K_{1}C_{p1}}{1 + K_{1}C_{p1} + K_{1}C_{p1} + K_{r}C_{p1}} \quad (1 \quad -\psi)$$

$$(1 \quad -\psi)$$

$$(1 \quad -\psi)$$

$$K_{i}$$

$$\frac{\partial q_{i}}{\partial t} = \sum_{j=1}^{n} \left(\frac{\partial q_{i}}{\partial C_{j}} \times \frac{\partial C_{j}}{\partial t} \right) \qquad (1 - \sqrt{2})$$

$$(y -$$

$$\frac{\partial q_{i}}{\partial t} = \frac{q_{i\infty}k_{i}}{\left(1 + k_{v}Cp_{v} + k_{v}Cp_{v} + k_{v}Cp_{v}\right)^{v}} \times \left[\left(1 + k_{v}Cp_{v} + k_{v}Cp_{v}\right) \frac{\partial Cp_{v}}{\partial t} - \left(1 - \frac{\partial Cp_{v}}{\partial t}\right)^{v} + k_{v}Cp_{v}\right] \frac{\partial Cp_{v}}{\partial t} - \left(1 - \frac{\partial Cp_{v}}{\partial t}\right] + \left(1 - \frac{\partial Cp_{v}}{\partial t}\right)^{v} + \left(1 - \frac{\partial$$

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

اگر عبارتهای
$$rac{\partial q_1}{\partial t}$$
 و $rac{\partial q_7}{\partial t}$ و $rac{\partial q_7}{\partial t}$ در معادلههای
مدل دانه برای هر جزء جایگذاری شود شکل کلی زیر
برای سه جزء حاصل میشود:

$$\begin{split} \xi_1 \frac{\partial Cp_1}{\partial t} - \psi_1 \frac{\partial Cp_2}{\partial t} - \delta_1 \frac{\partial Cp_3}{\partial t} &= \\ D_{p_1} (\frac{\partial^2 Cp_1}{\partial r^2} + \frac{s}{r} \frac{\partial Cp_1}{\partial r}) \end{split} \tag{(f-c)}$$

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

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 نقطهٔ j بستر و در زمان t+1 معادله (۱۳)حاصل می شود که اگر رابطه غلظت در دانه و بستر با استفاده از شرط مرزی (۷) جایگزین شود معادله کلی زیر نتیجه می شود:

$$\begin{aligned} AC_{j+1,t+1} + BC_{j,t+1} \\ + MC_{j-1,t+1} + PC_p \Big|_{r=R_p; j, t+1} = NC_{j,t} \end{aligned}$$

(پ-۱۳)

$$A = \left(\frac{1}{l^{r}} - \frac{UL}{rD_{ax}l}\right) \tag{14-1}$$

$$B = \left(\frac{-2}{l^2} - \frac{3(1 - \varepsilon_b)k_c L^2}{R_p D_{ax}} - \frac{\varepsilon_b D_p L^2}{D_{ax} R_p^2 h}\right) \qquad (1\Delta - \psi)$$

$$M = \left(\frac{1}{l^2} + \frac{UL}{2D_{ax}l}\right) \tag{19-1}$$

$$N = \frac{-\varepsilon_b D_p L^{\mathsf{Y}}}{R_p^{\mathsf{Y}} h D_{qx}} \tag{1}$$

$$p = \frac{3(1 - \varepsilon_b)k_c L^2}{R_p D_{ax}} \tag{1}$$

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

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

 $\gamma = \cdot / \mathfrak{f} \mathfrak{d} + \cdot / \mathfrak{d} \mathfrak{d} \mathcal{E}_{h}$

ضريب انتقال جرم فيلمى

ضریب انتقال جرم فیلمی اطراف دانه مطابق رابطه زیر بدست میآید: [۱۹].

$$k_{c} = \frac{D_{M}}{\mathbf{Y}R_{p}} \left[\mathbf{Y} + 1/1 \left(\frac{\mathbf{Y}UR_{p}}{\mu}\right)^{1/\varphi} \left(\frac{\mathbf{v}}{D_{M}}\right)^{1/\varphi} \right]$$

بطوريكه:

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

$$D_{Mi,air} = \frac{(1+1)^{1/\sqrt{2}} (M_{wi} + M_{wair})^{1/2}}{P\left[(\sum_{i} v_{i})^{1/2} + (v_{air})^{1/2} \right]^{\gamma}} \frac{P\left[(\sum_{i} v_{i})^{1/2} + (v_{air})^{1/2} \right]^{\gamma}}{P\left[(\sum_{i} v_{i})^{1/2} + (v_{air})^{1/2} \right]^{\gamma}} \frac{P\left[(\sum_{i} v_{i})^{1/2} + (v_{air})^{1/2} \right]^{\gamma}}{P_{\pi}(N_{\pi})^{1/2}} \frac{P\left[(\sum_{i} N_{\pi}) + (\sum_{i} N_{\pi})$$