دوره ۴۲، شماره ۱، ۱۴۰۲

بررسی مدل غیرفیک برای محاسبه ضریب نفوذ کربندیاکسید درآب با روش کاهش فشار

فرشته زارعی بخش مهندسی شیمی، دانشکده مهندسی نفت، گاز و پتروشیمی، دانشگاه خلیج فارس، بوشهر

رضا آذین ^{*+} بخش مهندسی نفت، دانشکده مهندسی نفت، گاز و پتروشیمی، دانشگاه خلیج فارس، بوشهر

شهریار عصفوری، حسین رهیا. بخش مهندسی شیمی، دانشکده مهندسی نفت، گاز و پتروشیمی، دانشگاه خلیج فارس، بوشهر

چکیده: ذخیره و دفع CO2 به سازندهای آبده یک روش امیدوار کننده برای کاهش گازهای گلخانهای و مقابله با پدیده گرم شدن کره زمین است. اندازه گیری میزان دقیق انحلال CO2 در سفره های آب شور به یافتن یک مدل مناسب برای نفوذ گاز وابسته است. در حال حاضر به منظور اندازه گیری ضریب نفوذ ملکولی بیشتر از روش های غیر مستقیم، از جمله روش کاهش فشار استفاده می شود. مهم ترین نکته در این روش استفاده از مدل و شروط مرزی مناسب و تجزیه و تحلیل تتایج آزمایشگاه است. در این مقاله، از روش مدل سازی غیر فیک برای تحلیل داده های آزمایشگاهی روش افت فسار برای انتشار گاز 2O2در سفره های آب شور استفاده شده و نتایج با مدل فیک برای تحلیل داده های آزمایشگاهی مال سازی و تحلیل تتایج آزمایشگاه است. در این مقاله، از روش مدل سازی غیر فیک برای تحلیل داده های آزمایشگاهی موش افت فشار برای انتشار گاز 2O2در سفره های آب شور استفاده شده و نتایج با مدل فیک با دو نوع شرط مرزی گوناگون، مال سازی و تجربی، با استفاده از روش های بهینه سازی، ضریب نفوذ، ضریب انتقال جرم و زمان تاخیر تحمین زده شده اند. نتایج نشان می دهد که ضریب نفوذ با در نظر گرفتن شرط مرزی غیر تعادلی بیش از دو برای تحلین زده شده اند. ساز گارتر است. همچنین، مدل غیرفیک با وجود ترم تنظیم کننده زمان تاخیر، رسیدن به تعادل را به تاخیر می اند. سازگاری بیشتری با نتایج تجربی به خصوص در لحظه های اولیه دارد.

واژه های کلیدی: مدل غیرفیک، مدل فیک، ضریب نفوذ، روش کاهش فشار

KEYWORDS: Nonfickian model, fickian model, Diffusion coefficient, Pressure decay method

مقدمه

می توان این گاز را به مخازن آبده شور تزریق کرد. مخازن آبده شور زیرزمینی با توجه به اینکه برای آشامیدن و یا کشاورزی مناسب نمی باشد

کربن دی اکسید به عنوان یک گاز گلخانه ای، یک عامل اساسی در فرایند گرمایش کره زمین است، به منظور حل این بحران

+E- mail: razinpgu@gmail.com

* عهدهدار مکاتبات

علمی _ پژوهشی

نشریه شیمی و مهندسی شیمی ایران

فرشته زارعی و همکاران

دوره ۴۲، شماره ۱، ۲+۱۴

از این و می تواند برای ذخیره سازی در نظر گرفته شود. اولین عملیات تزریق گاز به مخازن گازی آبده در اوایل سال ۱۹۹۰ در کانادا انجام شد. بدست آوردن نرخ انتقال جرم به وسیله نفوذ مولکولی، برای محاسبه ی مقدار گاز نفوذی درون آبده و نیز تعیین میزان انحلال در پروژه های تزریق گاز امری ضروری است.

نفوذ در نتیجه حرکت تصادفی و برخورد مولکولها به یکدیگر اتفاق افتاده و از اختلاف پتانسیل شیمیایی به دلیل اختلاف غلظت اجزا در یک سیستم چند جزئی نشات می گیرد. ضریب نفوذ پارامتر فیزیکی است که نمایانگر کیفیت فرآیند نفوذ است و به دو روش مستقیم و غیر مستقیم اندازه گیری می شود. روش مستقیم شامل تجزیه و تحلیل ترکیبات مخلوط است[۱, ۲]. به عبارتی در روش مستقیم، تغییرات درصد جزء نفوذکننده در طول ستون مایع با زمان، از طریق آنالیز ترکیب بررسی شده و ضریب نفوذ تعیین می شود. این روشها معمولاً وقت گیر و هزینهبر است. بنابراین استفاده از روشهای غیرمستقیم رواج بیشتری پیدا کرده است. در روشهای غیرمستقیم از طریق اندازه گیری تغییرات ویژگیهایی که به دلیل انجام پدیده نفوذ تغییر می کند، می توان ضریب نفوذ را تعیین کرد. از جمله این ویژگیها میتوان به اندازه گیری فشار گاز نفوذی، حجم جزء نفوذکننده و چگالی فاز مایع، سرعت سطح مشترک و همتراز کردن سطح گاز و مایع، و شکست تشعشع نیروی مغناطیسی برق و... اشاره کرد [۳]. یکی از مهمترین و پرکاربردترین روش اندازه گیری ضریب نفوذ در سیستمهای گاز – مایع روش کاهش فشار است که اولین بار توسط ریاضی معرفی شد[۴]. برخلاف سایر روشها، روش کاهش فشار دارای سهولت و دقت بالایی است و از تئوری قوی برخوردار است[۳, ۵]. مبنای این روش بر این اساس است که، همان طور که مولکولهای فاز گاز درون یک سلول بسته با فشار بالا به درون فاز مايع نفوذ مي كنند فشار گاز كاهش مي يابد. فرآيند نفوذ تا أنجا ادامه مي يابد که فاز مایع اشباع از فاز گاز شود[۶]. چندین مدل ریاضی برای تعیین ضریب نفوذ از دادههای آزمایشگاهی فشار – زمان پیشنهاد شده است و تمامی مدل های ارائه شده، از به کار بردن قانون دوم فیک و شرایط مرزی گوناگون، برای جزء حل شونده بدست آمدهاند. یافتن شرط مرزی مناسب با سیستم وابسته به نوع گاز و مایع و شرایط انجام آزمایش است. جدول ۱ محاسبه ضریب نفوذ سیستمهای گوناگون با روش کاهش فشار و معادله حاکم فیک را نشان میدهد. جعفری راد و همکاران (۲۰۱۵) به ارائه دادههای آزمایشگاهی از تزریق دىاكسيدكربن به محلول أب شور حاوى محلول يونى گوناگون با استفاده از روش کاهش فشار پرداختند و ضریب نفوذ را با روش

مرجع	سيستم مورد بررسى	مواد مورد بررس <i>ی</i>	نويسندگان
[۴]	توده سيال	−CH₄–نرمال پنتان	ریاضی(۱۹۹۶)
[Y]	توده سيال	-CO ₂ /CH ₄ نفت سنگين	<i>ژانگ</i> و همکار <i>ان</i> (۲۰۰۰)
[٩ ,٨]	تودہ سیال	-CO ₂ /CH ₄ بيتومن	<i>آپرتی</i> و هم <i>کاران</i> (۲۰۰۰–۲۰۰۲)
[١٠ ,۶]	تودہ سیال	-CO ₂ /CH ₄ نفت سنگین	ت <i>ارانیواسان</i> (۲۰۰۴–۲۰۰۶)
[17 ,11]	تودہ سیال	-CO ₂ /CH ₄ بيتومن	<i>شیخا</i> و هم <i>کاران</i> (۲۰۰۴–۲۰۰۶)
[10-18]	تودہ سیال	-CO ₂ /CH ₄ بيتومن	<i>اطمینان</i> و همکار <i>ان</i> (۲۰۱۳)
[18]	تودہ سیال	CO ₂ –آبدہ نمکی	<i>آذین</i> و هم <i>کاران</i> (۲۰۱۳)
[\Y]	تودہ سیال	CO2−ايزواوكتان− هگزانول	<i>ناطق</i> و ه <i>مکاران</i> (۲۰۱۷)
[١٨]	توده سيال	CO ₂ –آبدہ نمکی	<i>جعفریراد</i> و هم <i>کاران</i> (۲۰۱۵)
[71-19]	محيط متخلخل	CO ₂ –نفت	<i>سونیانگ</i> و همکار <i>ان</i> (۲۰۱۸–۲۰۱۶)
[77]	توده سيال	CO ₂ –آبدہ نمکی	ش <i>ی</i> و هم <i>کاران</i> (۲۰۱۷)
[7٣]	محيط متخلخل	-CO ₂ نفت	<i>جو</i> و هم <i>کاران</i> (۲۰۱۹)

جدول ۱- طبقه بندی شرایط مرزی در سطح تماس گاز-مایع

تحلیلی شیخا و همکاران بدست آوردند [۱۸]. آذین و همکاران [۲۴]، به بررسی اثر دما و فشار بر میزان نفوذپذیری سیستم دیاکسیدکربن – آب، با کمک روند نمودار افت فشار پرداختند. آنها نشان دادند که با افزایش دما، فشار تعادلی بیش تر می شود، چرا که با افزایش دما حلالیت گاز کاهش خواهد یافت و این موجب افت فشار کمتر در سیستم می شود و در نتیجه آن فشار تعادلی بزرگ تری خواهیم داشت. همچنین افزایش فشار اولیه موجب افزایش حلالیت در شرایط دما ثابت است. فیاضی و همکاران (۲۰۱۹) با استفاده از تصویر برداری مغناطیسی و یک روش حل عددی مقادیر ضریب نفوذ، انحلال پذیری و تورم مایع را برای سیستم گاز – نفت سنگین گزارش کردند [۲۵]. انحلال دی اکسید کربن در نفت سبک انجام دادند و نشان دادند که انحلال دی اکسید کربن در نفت سبک ویسکوزیته را تا ۶۱٪ کاهش می دهد[۲۶]./ممدی و همکاران (۲۰۲۹) نشان دادند که ضریب نفوذ

علمی _ پژوهشی

2+4

نشریه شیمی و مهندسی شیمی ایران 🦳 بررسی مدل غیرفیک برای محاسبه ضریب نفوذ کربندیاکسید ...

ماره ۱، ۱۴۰۲	دوره ۴۲، شد
--------------	-------------

جنول ٦- شرايك (شايسكانغي تمورد عنك بورشي در ارتشايش <i>درين</i> و تفتيكو (ش1						
فشار اوليه	فشار تعادلي	دما	ثابت هنری مایع	ضريب تراكم	ارتفاع ستون	ارتفاع ستون
(كيلوپاسكال)	(كيلوپاسكال)	(درجه سانتی گراد)	(کیلوپاسکال مترمکعب بر کیلوگرم)	پذیری	مايع (متر)	گاز (متر)
۵۸۷۱	۵۵۵۶	۴.	۱۵۱/۵	•/۶۸۲۸	•/١	۳/٠

و همکاران[۱۶]	آزمایش <i>آذین</i>	ورد تحت بررسی در	ا آزمایشگاهی م	جدول ۲- شرایط
---------------	--------------------	------------------	----------------	---------------

دیاکسیدکربن در آب در فشار یکسان با افزایش دما و همچنین در دمای یکسان با افزایش فشار رابطه مستقیم دارد[۲۷].

گرچه نظریه نفوذ فیک کاملاً توسعه یافته است، اما در بسیاری از سیستمها چنین توصیف سادهای جوابگو نیست، در چند سال اخیر تحقیقات بیشتری در زمینهٔ اثر غیرفیک انجام شده است[۲۸]. یکی از مشکلات مدل فیک این است که معادله سهموی فیک نشان دهنده سرعت بی نهایت از نفوذ است که این ویژگی از لحاظ فیزیکی غیر قابل قبول است[۲۹]. برای مثال می توان به سیستمهای حاوی حلال پلیمر[۳۰, ۳۱]، انتقال جرم گذرا، انتقال جرم همراه با واکنش شیمیایی و انتقال جرم در دمای بالا و یا شار نفوذ بسیار بزرگ اشاره کرد. دادههای آزمایشگاهی در این زمینه وجود دارد که گواه بر وجود فرایند نفوذ با سرعت محدود است [۳۳, ۳۳].

پس از اینکه مدل نفوذ هذلولی بر خصوصیات غیر فیزیکی سرعت نامحدود پخش، که از مشخصههای مدل سهموی نفوذ است، غلبه کرد؛ تحقیقات وسیعی از نفوذ هذلولی توسط محققین ارائه شد. توری نفوذ هذلولی اولین بار در سال ۱۹۵۸ توسط کاتالیو معرفی شد [۳۴]. ماکسول[۳۵] و کاتالیو با استفاده از تئوری کلاسیک فیک معادلات هذلولی نفوذ را بدست آورند. در سال ۲۰۰۰ *دیایر و همکاران* بیان کردند، قوانین کلاسیک همچون فیک و فوریه، گرادیان غلظت و دما را، به صورت خطی با شار ارتباط میدهد و این عموماً کاربرد ندارد. آنها مشکل اساسی این معادلات را در سیستمهایی همچون نفوذ در پلیمرها و جریان در طی مسیر یک محیط متخلخل بیان کردند[۳۶].

در سال ۲۰۱۵ علیزاده *گیاشی و همکاران* به بررسی نفوذ فیک و غیرفیک بر روی مخلوط هیدروکربنهای سبک همراه با نفت سنگین به روش آزمایشگاهی اشعه x پرداختند. برای سیالهایی با ساختار نانو سیال و مخلوط تولوئن به همراه نفت سنگین رفتار غیرفیک را مشاهده نمودند [۳۷].

در سالهای اخیر مطالعات گسترده در زمینه مدلسازی معادلات نفوذ و پخش غیرفیک انجام شده است. *پارک و همکاران*[۳۸] در سال ۲۰۱۸ پخش آلاینده ها در کانال را با معادله حاکم دوبعدی فیک مدلسازی کردند. نتایج حاکی از نزدیکی مقادیر مدلسازی با معادله پخش دوبعدی غیرفیک و مقادیر آزمایشگاهی داشت. *شارول* و همکار*ان*[۳۹] در سال ۲۰۱۹ مطالعاتی روی مدل غیرفیک برای انتقال جرم در محیط

علمی _ پژوهشی

متخلخل انجام دادند. فنگ و همکار*ان*[۴۰] در سال ۲۰۲۱ مدل خود را بر اساس معادله حاکم نفوذ غیرفیک با ضرایب متغیر گسترش دادند. در این مقاله دادههای آزمایشگاهی *آذین* و همکار*ان* [۱۶] روی سیستم آبده نمکی-CO₂ با مدل غیرفیک مورد تجزیه و تحلیل قرار گرفت و ضریب نفوذ، ضریب انتقال جرم و زمان تاخیر برای سیستم موردنظر محاسبه شد. در ادامه مقادیر محاسبه شده با مدل فیک مقایسه شد. همچنین استفاده از شرط مرزی تعادلی و غیرتعادلی برای فصل مشترک گاز – مایع ارزیابی شد.

روش حل و مدلسازی ریاضی روش افت فشار

در روش افت فشار که برای محاسبه ضریب نفوذ گازها در مایعات استفاده می شود، گاز در یک سلول نفوذ با دمای یکنواخت و حجم ثابت بر روی حجمی از سیال قرار می گیرد. فاز مایع غیرفرار در تماس با فاز گاز است و در نتیجه گاز تا زمان اشباع شدن سیال به تدریج درون آن نفوذ می کند. در اثر انحلال گاز حل شونده، فشار گاز روند نزولی را طی می کند. روند تغییرات فشار گاز در اثر انحلال ثبت می گردد. از روی تغییرات فشار گاز در محفظه و ارتباط آن با تغییرات غلظت گاز در مایع و به کار بردن روش معکوس، پارامترهای انتقال جرم محاسبه می شود.

دادههای آزمایشگاهی با روش کاهش فشار و از مقاله *آذین* و همکاران [۱۶] گرفته شد که جزییات آن در جدول ۲ آورده شده است. آنها ضریب نفوذ را برای ۶ مورد انتشار دی اکسید کربن به آبخوان شور در شرایط گوناگون دما و فشار مخزن و روش حل تحلیلی با معادله فیک گزارش کردند.

مدل سازی با معادله حاکم نفوذ فیک

شکل ۱ محفظه نفوذ را نشان میدهد، که سطح مشتر ک گاز-مایع در مکان 0 = x و انتهای محفظه در L = x ، قرار گرفته است. این سیستم با فرضیاتی مانند عدم وجود واکنش شیمیایی، خالص در نظر گرفتن فاز گاز، ثابت بودن دما، ضریب نفوذ و ضریب تراکم پذیری، غیر فرار در نظر گرفتن سیال، صرفنظر کردن از تورم مایع و تبعیت تعادل ترمودینامیکی فاز گاز و مایع از قانون هنری، بر اساس معادله نفوذ سهموی فیک (معادله ۱) بیان می شود [ع, ۷, ۱۲].

فرشته زارعی و همکاران

دوره ۴۲، شماره ۱، ۱۴۰۲



شکل۱- تصویر سلول افت فشار برای سیستم حل شونده- حلال

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \tag{1}$$

که C غلظت گاز در فاز مایع و C ضریب نفوذ گاز است. روشهای متفاوتی برای تعیین ضریب نفوذ مولکولی از دادههای آزمایشگاهی فشار – زمان (در واقع حل معادله فیک) موجود است. انتخاب نوع روش، وابسته به سیال مورد استفاده، شرایط آزمایش، فرضیات مسئله و بررسی پارامترهای مؤثر در محاسبه میزان انتقال جرم دارد. قبل از شروع فرآیند نفوذ، غلظت گاز در مایع ناچیز است. بنابراین، شرط اولیه برای حل قانون دوم فیک به صورت معادله ۲ خواهد بود:

$$C|_{t=0} = 0 \qquad \qquad 0 \le x \le L \tag{(7)}$$

بسیاری از محققان [۶–۸٫ ۱۳] به علت نفوذ ناپذیر بودن انتهای محفظه، انتقال جرم در این مکان را صفر در نظر گرفته اند. بنابراین شرط مرزی معادله ۳ از نوع نیومن را می توان در انتهای محفظه بکار برد:

$$\left. \frac{\partial C}{\partial x} \right|_{x=L} = 0 \qquad \qquad t > 0 \qquad \qquad (\red{scalar})$$

شرط مرزی روی سطح تماس تا حدود زیادی بستگی به نوع سیال دارد. با فرض این که در تمامی زمانها، غلظت در سطح مشترک برابر با غلظت در فشار تعادلی باشد (به عبارتی دیگر شرایط در فصل مشترک برابر با شرایط تعادل باشد)، شرط مرزی از نوع دیریکله را برای فرآیند نفوذ می توان به صورت معادله ۴ نوشت:

$$C|_{x=0} = C_{eq}(P_{eq}) \qquad t > 0 \tag{(f)}$$

در معادله بالا (C_{eq} (P_{eq} غلظت در فشار تعادلیست. در شرط مرزی دیگر، مطابق با معادله ۵، مقاومت سطحی در سطح انتقال جرم در نظر گرفته میشود، در حقیقت فرض میشود، غلظت در سطح تماس ناپیوسته است.

$$-D\frac{\partial C}{\partial x}\Big|_{x=0} = k(C_{eq}(P_{eq}) - C(x=0,t))$$
 (Δ)

که k ضریب انتقال جرم است و غلظت تعادلی (*C_{eq}(P_{eq})* را می توان به کمک قانون هنری بیان کرد.

با توجه به معادلات اساسی بقای جرم و فلاکس انتقال جرم برای سیستم نشان داده شده در شکل ۱ داریم:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial J}{\partial x} = 0 \tag{(8)}$$

$$\tau \frac{\partial J}{\partial t} + J = -D \frac{\partial C}{\partial x} \tag{Y}$$

که C غلظت گاز در فاز مایع، J فلاکس انتقال جرم نفوذی و τ ترم تاخیر زمان می باشد. به عبارت دیگر τ مدت زمانی است که طول می کشد تا سیستم به حالت تعادل بر سد [۴۱]. حاصل ترکیب معادلات بالا با یکدیگر بر مبنای غلظت معادله ۸ و بر مبنای فلاکس معادله ۹ می باشد که شکل اصلی معادلات اصلاح شده فیک یا معادلات هذلولی غیرفیک است [۴۲].

$$\tau \frac{\partial^2 C}{\partial t^2} + \frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \tag{A}$$

$$\tau \frac{\partial^2 J}{\partial t^2} + \frac{\partial J}{\partial t} = D \frac{\partial^2 J}{\partial x^2} \tag{9}$$

هر کدام از معادلههای بالا به دو شرط مرزی و دو شرط اولیه نیاز دارند. برای معادله ۸ میتوان شروط اولیه را مطابق معادلات ۱۰ و ۱۱ و شروط مرزی راطبق معادله ۱۲ و ۱۳ در نظر گرفت[۴۲].

$$C = 0 \qquad \qquad 0 \le x \le L \qquad t = 0 \qquad (1)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = 0 \qquad \qquad 0 \le x \le L \qquad t = 0 \qquad (11)$$

$$-D\frac{\partial C}{\partial x} = -k(C_{eq} - C) \qquad x = 0 \qquad t \ge 0 \quad (17)$$

$$\frac{\partial L}{\partial x} = 0 \qquad \qquad x = L \qquad t \ge 0 \qquad (17)$$

گسسته سازی معادلات با روش اختلاف محدود

برای حل عددی معادلات از روش تفاضل محدود ضمنی استفاده شد. برای گسسته سازی از تفاضل مرکزی برای مشتقات مکانی غلظت و از تفاضل پیشرو برای مشتقات زمانی غلظت استفاده شد. بر طبق همین روش معادلات ۱ تا ۵ به ترتیب طبق معادلات ۱۴ تا ۱۸ نوشته شده اند.

$$\frac{C_i^{p+1} - C_i^p}{\Delta t} = D \frac{C_{i-1}^{p+1} - 2C_i^{p+1} + C_{i+1}^{p+1}}{\Delta x^2}$$
(14)

2+8

نشریه شیمی و مهندسی شیمی ایران 🦳 بررسی مدل غیرفیک برای محاسبه ضریب نفوذ کربن دی اکسید ...

دوره۴۲، شماره ۱، ۱۴۰۲

$$C^p = 0 \tag{10}$$

$$\frac{C_i^{p+1} - C_{i-1}^{p+1}}{\Delta x} = 0 \tag{18}$$

$$\left. C_{i}^{p+1} \right|_{x=0} = C_{eq}(P_{eq}) \tag{1Y}$$

$$-D\frac{c_{i+1}^{p+1} - c_i^{p+1}}{\Delta x} | x = 0 = k(C_{eq}(P_{eq}) - C_i^{p+1})$$
(1A)

برای حل عددی معادله غیرفیک هم میتوان از گسسته سازی مستقیم معادله ۸ و یا از حل همزمان معادلات ۶ و ۷ استفاده کرد. در این کار از گسسته سازی و حل معادلات ۶ و ۷ به صورت همزمان و شرایط مرزی ۱۰ تا ۱۳ استفاده شد. این معادلات به ترتیب طبق معادلات ۱۹ تا ۲۲ گسسته سازی شده است.

$$\frac{C_i^{p+1} - C_i^p}{\Delta t} + \frac{J_i^{p+1} - J_{i-1}^{p+1}}{\Delta x} = 0$$
 (19)

$$\tau \frac{J_{i}^{p+1} - J_{i}^{p}}{\Delta t} + J_{i}^{p+1} = -D \frac{C_{i}^{p+1} - C_{i-1}^{p+1}}{\Delta x}$$
(Y•)

$$\frac{C_{i+1}^{p+1} - C_i^{p+1}}{\Delta x} = (-k/D)(C^* - C_i^{p+1})$$
(Y)

$$\frac{C_i^{p+1} - C_{i-1}^{p+1}}{\Delta x} = 0$$
 (YY)

از حل معادلات ذکر شده توزیع غلظت محاسبه شد و همان طور که در قسمت بعدی شرح داده شده با استفاده از توزیع غلظت، توزیع فشار محاسبه شده است. سپس با استفاده از حل معکوس و به حداقل رساندن تابع خطای تشکیل شده بین توزیع فشار محاسبه شده و تجربی، با استفاده از روشهای بهینه سازی، ضریب نفوذ، ضریب انتقال جرم و زمان تاخیر تخمین زده شده اند.

ارتباط تغييرات غلظت با فشار

تغییرات غلظت در فاز مایع طبق قانون بقای جرم با تغییرات فشار در فاز گاز مرتبط می شوند. در واقع جرم گاز نفوذ کننده در مایع برابر با تفاضل جرم اولیه و نهایی گاز در نظر گرفته می شود. با ادغام معادله حالت طبق قانون گازهای ایده آل و قانون اول فیک، ارتباط تنییرات غلظت و فشار طبق معادله ۲۳ قابل محاسبه است:

$$\frac{dC}{dx} = -\frac{h_g}{ZRTD}\frac{dP}{dt} \tag{(YT)}$$

در رابطه بالا D ضریب نفوذ، R ثابت گازها، $l_{
m g}$ ارتفاع ستون گاز موجود در بالای مایع، T دمای گاز و Z ضریب تراکم پذیری گاز است[۱۲].

علمی _ پژوهشی

حل معکوس و بهینه سازی عددی

روش حل معکوس روشی است که در آن پارامترهای موردنیاز با حل عددی معادلات مربوطه به صورت غیرمستقیم تعیین میشوند. روش حل معکوس کاربردهای زیادی در مهندسی دارد. به عنوان مثال، نفوذپذیری مخزن، ضریب نفوذ و پخش و ضریب هدایت حرارتی را میتوان از مشاهده واقعی فشار ، غلظت و دما اندازه گیری کرد[۱۱]. در این مقاله از یک روش حل معکوس برای تخمین مقادیر ضریب نفوذ، ضریب انتقال جرم و زمان تاخیر با تجزیه و تحلیل مقادیر فشار گاز اندازه گیری شده با زمان، استفاده شده است. معادلات حاکم برای ایجاد فشار جهت مقایسه با فشار اندازه گیری شده، قانون دوم فیک و معادله غیرفیک است که با استفاده از حل عددی به روش اختلاف محدود حل شده است. سپس نتایج دو مدل مقایسه شده است.

به طور کلی، مسائل معکوس با به حداقل رساندن یک تابع هدف با برخی از تکنیک های بهینه سازی حل می شوند. در این مسئله، تابع هدف که حداقل تخمین واریانس را ارائه می دهد، میانگین خطای نسبی مطلق مطابق معادله ۲۴ است.

$$OF = \sum_{i=1}^{N} \frac{P^{\exp} - P^{cal}}{P^{\exp}} = 0$$
(YF)

در این معادله، P^{exp} فشار اندازه گیری تجربی با روش کاهش فشار و P^{cal} فشار محاسبه شده بر اساس حل عددی است. بهینهسازی با استفاده از روش تقسیمات طلایی انجام شد. شکل ۲ الگوریتم کلی محاسبات ضریب نفوذ را نشان میدهد. در محاسبات مربوط به معادله حاکم نفوذ غیرفیک باید این الگوریتم برای سه مجهول (ضریب نفوذ، ضریب انتقال جرم و زمان تاخیر) به صورت همزمان حل شود.

در این تحقیق ابتدا ضریب نفوذ و ضریب انتقال جرم به صورت عددی با حل معکوس معادله حاکم نفوذ سهموی فیک برای این آزمایش تخمین زده شد و با مقادیر منتشر شده مقایسه شد. سپس با حل معادله حاکم نفوذ هذلولی غیرفیک، پارامترهای انتقال جرم و زمان تاخیر محاسبه و با قانون کلاسیک فیک مقایسه شد. مراحل انجام محاسبات به ترتیب زیر انجام شده است:

- دس زدن یک بازه برای مقادیر ضریب نفوذ (یا سایر پارامترها)
- ۲) محاسبه غلظت از روی پارامترهای حدس زده شده با معادله
 حاکم فیک یا غیرفیک
 - ۳) محاسبه فشار از روی غلظت محاسبه شده
- ۴) محاسبه تابع هدف (مقایسه فشار محاسبه شده با مدل و فشار اندازه گیری شده با روش افت فشار)
- ۵) حداقل کردن تابع هدف و گزارش مقادیر پارامترهای مجهول



دوره ۴۲، شماره ۱، ۱۴۰۲

Archive of SID.ir



شکل ۲- الگوریتم کلی محاسبات ضریب نفوذ

این مراحل برای معادله فیک با شرط مرزی غیرتعادلی با دو مجهول و معادله غیرفیک با شرط مرزی غیرتعادلی با سه مجهول برای پارامترهای گوناگون ادغام و حل شده است.

نتایج و بحث

از آن جا که فرضیات مدل تحلیلی شیخ/[۱۱, ۱۲] باعث ایجاد تفاوت زیادی بین مقادیر فشار آزمایشگاهی اندازه گیری شده توسط *آذین* و همکاران [۱۶] و فشار محاسبه شده با حل تحلیلی به روش شیخا می شود، نمی توان به مقادیر ضریب نفوذ محاسبه شده از این روش اطمینان کرد. در حقیقت این مدل با داده های تجربی مطابقت ندارد. در ادامه، فشار محاسبه شده با مدل غیرفیک اندازه گیری می شود و ضریب نفوذ، ضریب انتقال جرم و زمان تاخیر گزارش می شود.

نتايج معادله نفوذ سهموي فيك

تقریبا می توان گفت تمام محققان محفظه نفوذ در روش کاهش فشار را با معادله فیک با دوشرط مرزی تعادلی و غیرتعادلی مدل کرده اند.

جدول ۳- درصد میانگین خطای نسبی مطلق محاسبه شده برای شرط مرزی تعادلی و غیرتعادلی

معادله حاکم فیک	معادله حاكم فيك	میانگین خطای		
با شرط مرزی غیرتعادلی	با شرط مرزی تعادلی	نسبی مطلق		
./٢١	./٣٩	۸ ساعت اوليه		



فشار محاسبه شده با شرط مرزی تعادلی و غیرتعادلی

شکل ۳ فشار آزمایشگاهی اندازه گیری شده توسط *آذین* و همکاران و فشار محاسبه شده با معادله فیک با دو شرط مرزی تعادلی و غیرتعادلی را نشان میدهد. همانطور که از شکل ۳ مشخص است و همچنین با توجه به مقادیر میانگین خطای نسبی مطلق [۳۳] محاسبه شده در جدول ۳ ، برای شرط مرزی تعادلی اختلاف بین فشار آزمایشگاهی و فشار محاسبه شده در لحظات اولیه زیاد است اما با گذشت زمان و رسیدن به حالت تعادل این اختلاف کمتر میشود. اما این اختلاف در لحظات اولیه باعث بروز خطای زیادی در تخمین ضریب نفوذ می گردد. همانطور که مشخص است مقدار ضریب نفوذ از ^۸-۱۰×۸/۳ در شرط مرزی تعادلی به ^۸-۱۰×۷۶۷۶ در شرط مرزی غیرتعادلی می رسد، در حقیقت ضریب نفوذ دوبرابر شده است.

دلیل این اختلاف در لحظات اولیه این است که سیستم دی اکسیدکربن _ آبده نمکی آنچنان که در شرط مرزی تعادلی فرض می شود، نمی تواند زود به حالت تعادل برسد. این حقیقت نشان دهنده این موضوع است که شرط مرزی غیرتعادلی سازگاری بیشتری با این مسئله داشته و مقدار ضریب نفوذ محاسبه شده در آن دقت بیشتری دارد[۶].

شرط مرزی غیرتعادلی با در نظر گرفتن مقاومت حاصل از انحلال $\left(\frac{1}{k}\right)$ در سطح تماس دو فاز، مدت زمان رسیدن به تعادل را افزایش می دهد و توانسته است مطابقت بهتری با دادههای آزمایشگاهی

علمی _ پژوهشی

Archive of SID.ir

۲+۸

دوره۴۲، شماره ۱، ۱۴۰۲

نشریه شیمی و مهندسی شیمی ایران 🦳 بررسی مدل غیرفیک برای محاسبه ضریب نفوذ کربندیاکسید ...

داشته باشد. استفاده از شرط مرزی غیرتعادلی تا حدود زیادی وابسته به ضریب انتقال جرم(k) بین دو فاز است. از نظر فیزیکی وقتی k به اندازه کافی بزرگ باشد یا مقاومت سطحی بین دو فاز به اندازه کافی کم باشد، شرط مرزی غیرتعادلی به شرط مرزی تعادلی نزدیک میشود. مقدار عددیk از صفر تا بینهایت متغییر است. $\infty \approx k$ معادل عدم وجود مقاومت سطحی بین دو فاز و انتقال جرم بینهایت یا شرط مرزی تعادلی است. در حالی که اگر $0 \approx k$ باشد، نمی توان از حل تحلیلی معادله نفوذ استفاده کرد. $0 \approx k$ در دو حالت ممکن است اتفاق بیفتد. مورد اول وقتی است که گاز غیر قابل انحلال مورد دوم وقتی اتفاق میافتد که ضریب نفوذ بی نهایت باشد مورد دوم وقتی اتفاق میافتد که ضریب نفوذ بی نهایت باشد مورد دوم وقتی اتفاق میافتد که ضریب نفوذ بی نهایت باشد مورد دوم وقتی اتفاق میافتد که ضریب نفوذ بی نهایت باشد مورد دوم وقتی اتفاق میافتد که ضریب نفوذ بی نهایت باشد ماول ستون گاز و مایع خیلی کم باشد. بنابراین فرضیاتی مثل طول ستون گاز و مایع، فشار اولیه گاز و نوع سیستم مورد نظر تعیین کننده شرط مرزی و روش حل مورد استفاده در روش کاهش

شکل ۴ تغییرات غلظت را در ضرایب نفوذ گوناگون برای معادله فیک با شرط مرزی تعادلی و شکل ۵ تغییرات غلظت را در ضرایب انتقال جرم گوناگون به ازای یک ضریب نفوذ مشخص نشان میدهد. همانطور که از شکل و مشخص است با افزایش ضریب نفوذ D همچنین با افزایش ضریب انتقال جرم k ، مقاومت سطحی $\frac{1}{4}$, بین دو فاز کاهش می یابد و میزان انتقال جرم بیشتری صورت می گیرد و در نتیجه افت فشار بیشتر شده است. هنگامی که شرط مرزی غیرتعادلی می شود قرار است پارامتر دیگری تحت عنوان ضریب انتقال جرم نیز گزارش شود و به عبارتی k از سمت بی نهایت به مقدار عددی میل می کند و این به معنی کاهش k و همچنین کاهش مقدار انتقال جرم است. پس برای اینکه مقدار انتقال جرم کاهش نیابد و از دادههای آزمایشگاهی فاصله نگیرد باید مقدار ضریب نفوذ افزایش یابد.

برای محاسبه پارامترها در مدل فیک با شرط مرزی تعادلی از بهینهسازی با یک مجهول (ضریب نفوذ)، مدل فیک با شرط مرزی غیرتعادلی از بهینه سازی با دو مجهول (ضریب نفوذ و ضریب انتقال جرم) و در مدل غیرفیک از بهینه سازی با سه مجهول (ضریب نفوذ، ضریب انتقال جرم، زمان تاخیر) استفاده شده است. شکل ۶ و۷ به ترتیب تابع هدف را بر حسب مجهولات در مدل فیک با شرط مرزی تعادلی و غیرتعادلی نشان میدهد. همان طور که از شکل ۶ مشخص است در نقطه ای که تابع هدف حداقل مقدار خود را دارد مجهولات تعیین میشوند.



Archive of SID.ir



شکل۴- تغییرات فشار برحسب زمان در مقادیر گوناگون ضریب نفوذ



شکل ۵- تغییرات فشار بر حسب زمان در مقادیر گوناگون ضریب انتقال جرم و در ^۸-۱۰×2/۷۶۶



با شرط مرزی تعادلی



ضریب نفوذ(متر مربع بر ثانیه) × ۱۰-^ ضریب انتقال جرم (متر بر ثانیه) × ۱۰-^۵ شکل۷- رسم تابع هدف بر حسب پارامترهای مجهول برای معادله فیک با شرط مرزی غیر تعادلی

دوره ۴۲، شماره ۱، ۱۴۰۲

فرشته زارعی و همکاران

نتايج معادله نفوذ هذلولي غير فيك

فشار آزمایشگاهی و فشار محاسباتی با مدل فیک با دو شرط مرزی و مدل غیرفیک در شکل ۸ نشان داده شده است. همانطور که از شکل ۸ مشخص است مدل غیرفیک این اختلاف بین دادههای آزمایشگاهی و محاسباتی در لحظات اولیه را به حداقل رسانده است، پس می توان گفت پارامترهای تخمین زده شده با این مدل دارای بیشترین دقت می باشد.

مقایسه نتایج حاصل از حل معادله غیرفیک با نتایج به دست آمده از تحقیقات آذین و همکاران، حاکی از آن است که، معادله حاکم نفوذ غیرفیک با شرط مرزی غیرتعادلی به دلیل داشتن پارامتر τ (فرض ترمودینامیک توسعهیافته غیرتعادلی) و تأخیر در زمان نفوذ، روند تغییرات فشار مشابه به فشار اندازه گیری شده در آزمایشگاه دارد و خطای کمتری نسبت به معادله فیک با شرط مرزی غیرتعادلی (در نظر گرفتن مقاومت در سطح تماس بین دو سیال) داشته است. تاکید می شود که با بکار بردن معادله ماکسول –کاتانیو، بهجای معادله فیک، فرض نامحدود بودن سرعت پخش اصلاح می گردد.

شکل ۹ تغییرات فشار بر حسب زمان در سه زمان تاخیر گوناگون و در یکD و ۸ مشخص را نشان می دهد. همانطور که از شکل ۹ مشخص است وقتی زمان تاخیر صفر در نظر گرفته شود، نتایج به نظریه نفوذ فیک نزدیک می شود و در زمان های اولیه اختلاف قابل مشهودی بین مقادیر فشار مدل و آزمایشگاهی موجود است. اما همانطور که ترم تاخیر افزایش مییابد این اختلاف کمتر شده و در زمان تاخیر حدودا ۴۰۰۰ ثانیه این اختلاف به حداقل مقدار خود می رسد.

توزیع غلظت گاز دی اکسید کربن در طول ستون مایع در شکل ۱۰ نشان داده شده است. همانطور که از شکل مشخص است غلظت گاز در فاز مایع تا حدود ۴۰۰۰ ثانیه به سرعت تغییر می کند و پس از آن تغییرات غلظت کاهش می یابد. دلیل این امر این است که قبل از سیستم هنوز به حالت پخش در بی نهایت نرسیده است در واقع هنوز فلظت گاز به انتهای محفظه نفوذ نرسیده است. در نتیجه گرادیان غلظت در محفظه نفوذ زیاد است و مقدار تغییرات غلظت بیشتر است. از ۴۰۰۰ ثانیه تا انتهای فرایند در همه بازههای زمانی با توجه به کاهش گرادیان غلظت، تغییرات غلظت کمتر شده است. بنابراین نفوذ گاز دی اکسید کربن در آبده نمکی را می توان شامل دو مرحله دانست. مراحل اولیه تا قبل از تعادل دو فاز که سرعت نفوذ بالاست و مراحل ثانویه بعد از تعادل دو فاز که سرعت نفوذ کمتر است.







شکل ۹- تغییرات فشار بر حسب زمان در زمان های تاخیر گوناگون

علمی _ پژوهشی

Archive of SID.ir

21+

دوره۴۲، شماره ۱، ۱۴۰۲

نشریه شیمی و مهندسی شیمی ایران 🦳 بررسی مدل غیرفیک برای محاسبه ضریب نفوذ کربن دی اکسید ...

جدول۴- پارامترهای انتقال جرم محاسبه شده در این تحقیق					
زمان تاخیر (ثانیه)	ضریب انتقال جرم (متر بر ثانیه)	ضريب نفوذ (مترمربع بر ثانيه)	مدل سازی	روش حل	
		۲/ <i>۸۶</i> ×۱۰ ^{-۸}	معادله فیک با فرضیات و حل شیخا	ں و همکار <i>ان</i> با حل تحلیلی [۱۶]	
		۳/۸×۱۰ ^{-۸}	معادله فیک با شرط مرزی تعادلی	A 1 (1	
	۲/۸۵۴×۱۰ ^{-۵}	۷/ ۷۶۶ ×۱۰ ^{-۸}	معادله فیک با شرط مرزی غیرتعادلی	ین تحقیق با حل عددی با روس	
۴/۰۲×۱۰ ^۳	۶/۵×۱۰ ^{-۴}	۸/۷۷۰×۱۰ ^{-۸}	معادله غيرفيک	س محدود	



شکل۱۰۰ - توزیع غلظت گاز دی اکسید کربن در طول ستون مایع در زمانهای گوناگون

جدول ۴ مقدار پارامترهای انتقال جرم در مدلهای گوناگون بررسی شده را نشان میدهد. نتایج نشان دهنده این است که استفاده از حل تحلیلی برای محاسبه ضریب نفوذ به دلیل فرضیات ساده شوندهای که دارد از دقت کافی برخوردار نیست. از طرفی چون سیستم دی اکسیدکربن – آبده نمکی زود به تعادل نمیرسد، معادله حاکم نفوذ فیک با شرط مرزی تعادلی خطای زیادی دارد. اما معادله حاکم فیک با شرط مرزی غیرتعادلی با در نظر گرفتن مقاومت انتقال جرم در سطح مشترک دو فاز زمان رسیدن به تعادل را افزایش میدهد و سازگاری بیشتری با داده های آزمایشگاهی داشته است.

اما بیشترین مقدار ضریب انتقال جرم در معادله غیرفیک گزارش شده است و همان طور که از شکل مشخص است فشار محاسبه شده با این مدل بیشترین ساز گاری با داده های آزمایشگاهی داشته است.

در معادله فیک، اطلاعات پخش با سرعت بینهایت به صورت آنی در همه قسمتها نمایان میشود و سرعت پخش بینهایت است، غلظت بلافاصله در همهجا در نقاط دور احساس میشود، در نتیجه در حالی که مدل تقریب خوبی برای مسائل حالت پایدار است، منجر به خطا در زمان کوتاه شده است.

نتيجه گيري

در این تحقیق یک روش جدید برای تجزیه و تحلیل نتایج آزمایشگاهی روش کاهش فشار برای تخمین پارامترهای انتقال جرم ارائه شده است. این روش جدید بر مبنای معادله حاکم غیرفیک با شرط مرزی ناپیوستگی در سطح برای سیستم موردنظر میباشد. سپس نتایج این روش با معادله حاکم فیک مقایسه شد. برای مدلسازی با معادله حاکم نفوذ فیک، نتایج نشان میدهد که ضریب نفوذ با معادله حاکم نفوذ فیک، نتایج نشان میدهد که ضریب نفوذ با در نظر گرفتن شرط مرزی غیرتعادلی نسبت به شرط مرزی تعادلی سازگارتر است. از طرفی دیگر برخلاف مدل فیک که در لحظات اولیه سازگارتر است. از طرفی دیگر برخلاف مدل فیک که در لحظات اولیه با دادههای تجربی اختلاف زیادی دارد مدل غیرفیک با وجود ترم با دادههای تجربی اختیر، رسیدن به تعادل را به تاخیر میاندازد و سازگاری بیشتری با نتایج تجربی دارد.

تاريخ دريافت : ۱۶ / ۰۹ / ۱۳۹۸ ؛ تاريخ پذيرش : ۰۸ / ۰۹ / ۱۴۰۰

منابع

[1] Wen Y., Kantzas A., Wang G., "Estimation of Diffusion Coefficients in Bitumen Solvent Mixtures Using X-ray CAT Scanning and Low Field NMR". In Canadian International Petroleum Conference. Petroleum Society of Canada (2004)

علمی _ پژوهشی

- [2] Tang L.Y., Liu,Y., Song Y.Ch., Shen Z.J., Zhou X.H., ", Investigation of CO2 Diffusion in Oil-Saturated Porous Media by Using X-Ray Computer-Assisted Tomography". Advanced Materials Research. 807: 2498-2502 (2013)
- [3] Behzadfar E., Hatzikiriakos S.G., "Diffusivity of CO2 in Bitumen: Pressure–Decay Measurements Coupled with Rheometry". Energy & Fuels. 28(2): 1304-1311 (2014)
- [4] Riazi M.R., "A New Method for Experimental Measurement of Diffusion Coefficients in Reservoir Fluids". Journal of Petroleum Science and Engineering. 14(3): 235-250 (1996)
- [5] Oushal F., Azizi Sh., Peyghambarzadeh S. M., Azizi Z., "Diffusion Coefficient of Ethylene in NMP Using Pressure Decay Method: Experimental and Modelling Study". *Iranian Journal of Chemistry and Chemical Engineering (IJCCE)*. 41(9): 3085-3099 (2021)
- [6].Tharanivasan A.K., Yang C., Gu Y., "Comparison of Three Different Interface Mass Transfer Models Used in the Experimental Measurement of Solvent Diffusivity in Heavy Oil". *Journal of Petroleum Science and Engineering*. 44(3): 269-282 (2004)
- [7] Zhang Y., Hyndman C., Maini B., "Measurement of Gas Diffusivity in Heavy Oils". Journal of Petroleum Science and Engineering. 25(1): 37-47 (2000)
- [8] Upreti S.R. Mehrotra A.K., "Experimental Measurement of Gas Diffusivity in Bitumen: Results for Carbon Dioxide". Industrial & engineering chemistry research. 39(4): 1080-1087 (2000)
- [9] Upreti S.R. Mehrotra A.K., "Diffusivity of CO2, CH4, C2H6 and N2 in Athabasca Bitumen". The Canadian Journal of Chemical Engineering. 80(1): 116-125 (2002)
- [10] Tharanivasan A.K., Yang C., Gu Y., "Measurements of Molecular Diffusion Coefficients of Carbon Dioxide, Methane, and Propane in Heavy Oil Under Reservoir Conditions". *Energy & fuels.* 20(6): 2509-2517 (2006)
- [11] Sheikha H., Mehrotra A.K., Pooladi-Darvish M., "An Inverse Solution Methodology for Estimating the Diffusion Coefficient of Gases in Athabasca Bitumen from Pressure-Decay Data". Journal of Petroleum Science and Engineering. 53(3): 189-202 (2006)
- [12] Sheikha H., Pooladi-Darvish M., Mehrotra A.K., "Development of Graphical Methods for Estimating the Diffusivity Coefficient of Gases in Bitumen from Pressure-Decay Data". *Energy* & *fuels*. **19**(**5**): 2041-2049 (2005)
- [13] Etminan S.R., Maini B.B., Chen Z., "Determination of Mass Transfer Parameters in Solvent-Based Oil Recovery Techniques Using a Non-Equilibrium Boundary Condition at the Interface". *Fuel.* **120(3)**: 218-232 (2014)
- [14] Etminan S.R., Pooladi-Darvish M., Maini B.B., Chen Z., "Modeling the Interface Resistance in Low Soluble Gaseous Solvents-Heavy Oil Systems". *Fuel.* **105**(3): 672-687 (2013)
- [15] Etminan S.S., Maini B.B., Chen Z.J., "Modeling the Diffusion Controlled Swelling and Determination of Molecular Diffusion Coefficient in Propane-Bitumen System Using a Front Tracking Moving Boundary Technique". In SPE Heavy Oil Conference-Canada. Society of Petroleum Engineers. (2014)

212

- [16] Azin R., Mahmoudy M., Jafari Raad S.M., Osfouri Sh., "Measurement and Modeling of CO 2 Diffusion Coefficient in Saline Aquifer at Reservoir Conditions". Central European Journal of Engineering. 3(4): 585-594 (2013)
- [17] Nategh M., Osfouri S., Azin R., "Prediction of CO 2 Mass Transfer Parameters to Light Oil in Presence of Surfactants and Silica Nanoparticles Synthesized in Cationic Reverse Micellar System". Korean Journal of Chemical Engineering, 35: 44-52 (2017)
- [18] Raad S.M.J., Azin R., Osfouri S., "Measurement of CO2 Diffusivity in Synthetic and Saline Aquifer Solutions at Reservoir Conditions: The Role of Ion Interactions". Heat and Mass *Transfer*, **51:** 1587-1595 (2015)
- [19] Li S., Li Z., Dong Q., ", Diffusion Coefficients of Supercritical CO2 in Oil-Saturated Cores Under Low Permeability Reservoir Conditions". Journal of CO2 Utilization. 14: 47-60 (2016)
- [20] Li S., Qiao Ch., Li Zh., Hui Y., "The Effect of Permeability on Supercritical CO2 Diffusion Coefficient and Determination of Diffusive Tortuosity of Porous Media Under Reservoir Conditions". Journal of CO2 Utilization. 28: 1-14 (2018)
- [21] Li S., Qiao Ch., Chao Zh., Li Z."Determination of Diffusion Coefficients of Supercritical CO2 Under Tight Oil Reservoir Conditions with Pressure-Decay Method". Journal of CO2 Utilization. 24: 430-443 (2018)
- [22] Shi Z., Wen B., Hesse M.A., Tsotsis T.T., Jessen K. "Measurement and Modeling of CO2 Mass Transfer in Brine at Reservoir Conditions". Advances in Water Resources. 113: 100-111 (2018)
- [23] Gao H., Zhang B., Fan L., Zhang H., Chen G., Tontiwachwuthikul P., Liang Z., "Study on the Diffusivity of CO2 in Oil-Saturated Porous Media Under High Pressure and Temperature". Energy & Fuels. (2019)
- [24] Azin R., Mahmoudy M., Jafari Raad S.M., Osfouri Sh., "Measurement and Modeling of CO2 Diffusion Coefficient in Saline Aquifer at Reservoir Conditions". Open Engineering. 3(4): 585-594 (2013)
- [25] Fayazi A. Kantzas A., "Determining Diffusivity, Solubility, and Swelling in Gaseous Solvent-Heavy Oil Systems". Industrial & Engineering Chemistry Research. 58(23): 10031-10043 (2019)
- [26] Rezk M.G. Foroozesh J., "Phase Behavior and Fluid Interactions of a CO2-Light Oil System at High Pressures and Temperatures". Heliyon. 5(7): e02057 (2019)
- [27] Ahmadi H., Jamialahmadi M., Soltani Soulgani B., Dinarvand N., Sharafi M. S., "Experimental Study and Modelling on Diffusion Coefficient of CO2 in Water". Fluid Phase Equilibria. 523: 112584 (2020)
- [28] Zhokh A., Strizhak P., "Crossover Between Fickian and Non-Fickian Diffusion in a System with Hierarchy". Microporous and Mesoporous Materials. 282(7): 22-28 (2019)
- [29] Hassanizadeh S.M., "On the Transient Non-Fickian Dispersion Theory". Transport in Porous Media. 23(1): 107-124 (1996)

علمی _ یژوهشی

دوره ۴۲، شماره ۱، ۱۴۰۲

فرشته زارعی و همکاران

- [30] Neogi P., "Anomalous Diffusion of Vapors Through Solid Polymers. Part II: Anomalous Sorption". AIChE journal. 29(5): 833-839 (1983)
- [31] Vrentas J., Vrentas C., Huang W., "Anticipation of Anomalous Effects in Differential Sorption Experiments". *Journal of applied polymer science*. **64(10)**: 2007-2013 (1997)
- [32] Compte A. Metzler R., "The Generalized Cattaneo Equation for the Description of Anomalous Transport Processes" *Journal of Physics A: Mathematical and General.* **30(21)**: 7277 (1997)
- [33] Suo Y. Shen S., "Analytical Solution for 2D Non-Fickian Transient Mass Transfer With Arbitrary Initial and Periodic Boundary Conditions". *Journal of Heat Transfer.* 135(8): 082001 (2013)
- [34] Cattaneo C., "Sur Une Forme De Lequation De La Chaleur Eliminant Le Paradoxe Dune Propagation Instantanee". Comptes Rendus Hebdomadaires Des Seances De L Academie Des Sciences. 247(4): 431-433 (1958)
- [35] Maxwell J.C., "On the Dynamical Theory of Gases". Philosophical transactions of the Royal Society of London: 49-88 (1867)
- [36] Depireux N., Lebon G., "An Extended Thermodynamics Modeling of Non-Fickian Diffusion". Journal of non-newtonian fluid mechanics. 96(1-2): 105-117 (2001)
- [37] Alizadehgiashi M., Shaw J.M., "Fickian and Non-Fickian Diffusion in Heavy Oil + Light Hydrocarbon Mixtures". *Energy & Fuels*. 29(4): 2177-2189 (2015)
- [38] Park I. Seo I.W., "Modeling Non-Fickian Pollutant Mixing in Open Channel Flows Using Two-Dimensional Particle Dispersion Model". *Advances in water resources*. **111(1)**: 105-120 (2018)
- [39] Hasan Sh., Joekar-Niasar V., Karadimitriou N. K., Sahimi M., "Saturation Dependence of Non-Fickian Transport in Porous Media". Water Resources Research. 55(2): 1153-1166 (2019)
- [40] Feng Z., Ran M., Liu Y., "An Efficient Difference Scheme for the Non-Fickian Time-Fractional Diffusion Equations with Variable Coefficient". *Applied Mathematics Letters*. **121(11)**: 107489 (2021)
- [41] Abarzhi I.I., "Wave Mechanism of Mass Transfer for Kinetics of Adsorption in Biporous Media" Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects. 164(2-3): 105-113 (2000)
- [42] Civan F. Rasmussen M.L., "Improved Measurement of Gas Diffusivity for Miscible Gas Flooding Under Nonequilibrium Vs .Equilibrium Conditions". in SPE/DOE Improved Oil Recovery Symposium. Society of Petroleum Engineers. (2002)
- [43] Azizi S., "Evaluation of Mass Transfer Resistance Across the Interface for CO2–Propylene Carbonate System: Experimental and Mathematical Modeling". *Chemical Engineering Research* and Design. 149(8): 34-44 (2019)

علمی _ پژوهشی

214