Tạp chí CƠ HỌC 1981 số 3 (trang 2 – 6)

SỰ CHUYỀN CHẤT TRONG CÁC VẬT LIỆU XỐP MAO DẪN

TRƯƠNG MINH CHÁNH

Khoa học về các quá trình và thiết bị công nghệ hóa học có một vai trò rất quan trọng trong sự phát triển của công nghiệp hóa học. Các quá trình trao đổi chất, chẳng hạn, quá trình chưng cất, quá trình hấp phụ, hấp thụ và nhả, quá trình trích ly lỏng, thu hồi từ pha rắn, quá trình hòa tan, kết tinh và sấy khô, quá trình trao đổi ion,... chiếm một vị trí đặc biệt trong các quá trình công nghệ hóa học. Một số quá trình trao đổi chất đã được mô tả bằng toán học nhờ phương trình khuyếch tán và định luật Fick. Tuy nhiên các kết quả thực nghiệm không phải bao giờ cũng trùng hợp với các kết quả lý thuyết, để giải thích các kết quả đó ta cần phải xây dựng các mô hình tổng quát hơn. Trong công trình này ta sẽ xét quá trình chuyền chất trong các vật liệu xốp mao dẫn có hình dạng đơn giản nhất trên cơ sở mô hình khuyếch tán suy rộng [1,2]. Các kết quả giải tích được dùng để giải thích các số liệu thực nghiệm.

§ 1. CÁC PHƯƠNG TRÌNH CƠ BẢN

Xét một vật thể xốp có các lỗ hổng chứa đầy dung dịch hai thành phần, giả định rằng sự chuyền chất trong dung dịch ở các lỗ hổng của vật xốp được mô tả bởi hệ phương trình nhận được ở [1,2] với các hệ số không đổi tương tự có tính tới các đặc trưng hóa lý, hình học của vật xốp. Bỏ qua ảnh hưởng của các chuyền động vi mô, của các tenxơ khuyếch tán mặt, của sự chênh lệch áp suất khi đó hệ phương trình tuyến tính mô tả quá trình chuyền chất trong dung dịch đẳng nhiệt, đẳng hướng, không nén được có dạng [1].

$$\rho \frac{dc}{dt} = -\Delta \vec{j} \tag{1.1}$$

$$\frac{d\vec{j}}{dt} = -\frac{1}{\tau_*}\left(\vec{j} + \rho D_* \Delta C\right)$$

trong đó $\rho = \text{const}$ là mật độ khối lượng của hỗn hợp, C là nồng độ, $\vec{j}$ là dòng khuếch tán khối lượng, $\tau_* \geqslant 0$, $D_* \geqslant 0$ là các hệ số đặc trưng cho sự khuyếch tán vật chất trong vật xốp. Hệ phương trình (1.1) có thể đưa về một phương trình đạo hàm riêng hyperbolic xác định nồng độ C, khác với phương trình dạng parabolic trong lý thuyết khuyếch tán cổ điển.

Cấu trúc của vật rắn xốp rất phức tạp [3] vì vậy các quá trình chuyền chất trong các lỗ hổng của nó bị ảnh hưởng của rất nhiều nhân tố, chẳng hạn tính chất lý hóa của các vật liệu tạo nên vật xốp, kích thước, hình dạng của các lỗ hổng và sự phân bố của chúng trong vật thể. Thông thường kích thước của các lỗ hổng thay đổi trong khoảng từ 10^{-1} cm đến 10^{-8} cm, với các kích thước nhỏ hơn 10^{-4} cm thì hoàn toàn có thể coi dung dịch chứa trong các lỗ hổng đó là không chuyền động ($\vec{u}^m = 0$). Đối với các vật ề xốp mao dẫn dạng đơn giản nhất: hình cầu, hình trụ tròn vô hạn, bản phẳng vô hạn i bài toán chuyền chất cổ điển [1] mô tả trong khuôn khổ lý thuyết khuyếch tán suy ng có thể xác định bởi các phương trình và điều kiện không thứ nguyên sau:

$$
\begin{aligned}
&\frac{\partial C}{\partial F_0} = \left(\frac{\partial j}{\partial X} + \frac{\Gamma}{X}\, j\right)\\
&\frac{\partial j}{\partial F_0} = \frac{1}{\varkappa}\left(j - \frac{\partial C}{\partial X}\right)\\
&C\Big|_{F_0=0} = 1; \quad j\Big|_{F_0=0} = 0\\
&(j + B_iC)\Big|_{X=1} = 0; \quad \frac{\partial C}{\partial X}\Big|_{X=0} = 0
\end{aligned}
\qquad (1.2)
$$

ong đó ta đặt:

$$
\begin{aligned}
&C = \frac{C_* - C(F, t)}{C_* - C_0}, \quad j = \frac{JR}{\rho D_* (C_* - C_0)}\\
&X = \frac{\xi}{R}, \quad F_0 = \frac{D_* t}{R^2}, \quad B_i = \frac{kR}{D_*}, \quad \varkappa = \frac{D_* \tau_*}{R^2}
\end{aligned}
\qquad (1.3)
$$

huẩn số không thứ nguyên F_0 thường được gọi là chuẩn số Furiê, còn B_i là chuẩn số iô; hệ số $0 < k$ = const là hệ số trao đổi chất của môi trường xốp với bên ngoài, R là ich thước đặc trưng của môi trường xốp, C_0 là nồng độ ban đầu của vật xốp, C_* là nồng ộ không đổi của dung dịch ở ngoài vật xốp. Tọa độ ξ là tọa độ lấy theo hướng chuyền ật chất trong các ống mao dẫn của vật xốp. Đối với bản phẳng $\Gamma = 0$, đối với hình trụ òn $\Gamma = 1$, còn đối với hình cầu $\Gamma = 2$.

Để so sánh với các kết quả thực nghiệm người ta hay dùng các đặc trưng trung ình. Đối với các vật thể xốp hình dạng đơn giản ở trên thì nồng độ trung bình và dòng huyếch tán trung bình theo thể tích được tính theo công thức:

$$
\begin{aligned}
&\overline{C} = (\Gamma + 1)\int_0^1 C X^{\Gamma}\, dX\\
&\overline{j} = (\Gamma + 1)\int_0^1 j X^{\Gamma}\, dX
\end{aligned}
\qquad (1.4)
$$

§2. QUÁ TRÌNH CHUYỀN CHẤT

Hệ phương trình (1.2) có thể giải dễ dàng nhờ phép biến đổi tích phân Laplaxơ [5]. au đây ta xét riêng từng trường hợp cụ thể:

I. Bản phẳng vô hạn dày 2R

Cho một bản phẳng vô hạn dày 2R. Các ống mao dẫn hướng theo trục x (trục x ấy vuông góc với mặt bản phẳng, gốc tọa độ nằm ở giữa chiều dày) với các mặt bên hông cho vật chất đi qua, bởi vậy sự thay đổi nồng độ chỉ xảy ra theo trục x và ta ó $X = \frac{x}{R}$.

Nghiệm của bài toán (1.2) khi $\Gamma = 0$ có dạng :

$j(X, F_o, B_i, \varkappa) =$

$$-\sum_{n=1}^{N} \frac{3\mu_n \sin\mu_n \sin\mu_n X}{\mu_n \sqrt{1-4\varkappa\mu_n^2} + \sin\mu_n\cos\mu_n} \exp\left(-1+\sqrt{1-4\varkappa\mu_n^2}\right)\frac{F_o}{2\varkappa}$$

$C(X, F_o, B_i, \varkappa) =$

$$\sum_{n=1}^{N} \frac{\left(1+\sqrt{1-4\varkappa\mu_n^2}\right)\sin\mu_n\cos\mu_n X}{\mu_n\sqrt{1-4\varkappa\mu_n^2}+\sin\mu_n\cos\mu_n} \exp\left(-1+\sqrt{1-4\varkappa\mu_n^2}\right)\frac{F_o}{2\varkappa} \quad (2.1)$$

Các đặc trưng trung bình có dạng :

$\overline{C}(F_o, B_i, \varkappa) =$

$$\sum_{n=1}^{N} \frac{\left(1+\sqrt{1-4\varkappa\mu_n^2}\right)\sin^2\mu_n \exp\left(-1+\sqrt{1-4\varkappa\mu_n^2}\right)\frac{F_o}{2\varkappa}}{\mu_n\left(\mu_n\sqrt{1-4\varkappa\mu_n^2}+\sin\mu_n\cos\mu_n\right)}$$

$\overline{j}(F_o, B_i, \varkappa) =$

$$2\sum_{n=1}^{N} \frac{\sin\mu_n(\cos\mu_n - 1)\exp\left(-1+\sqrt{1-4\varkappa\mu_n^2}\right)\frac{F_o}{2\varkappa}}{\mu_n\sqrt{1-4\varkappa\mu_n^2}+\sin\mu_n\cos\mu_n} \quad (2.2)$$

Trong các công thức (2.1), (2.2) các giá trị μ_n là nghiệm của phương trình :

$$\operatorname{ctg}\mu = \frac{1-\sqrt{1-4\varkappa\mu^2}}{2\varkappa\mu B_i} \quad (2.3)$$

và thỏa mãn bất đẳng thức

$$\mu \leqslant \frac{1}{2\sqrt{\varkappa}} \quad (2.4)$$

Phương trình (2.3) có vô số nghiệm μ_n, tuy vậy do điều kiện (2.4) trong vô số giá trị μ_n đó ta chỉ lấy N giá trị μ_n đầu tiên thỏa mãn điều kiện (2.4). Như vậy do điều kiện (2.4) các phương trình động học nhận được ở đây và ở các mục sau đều được trình bày ở dạng tổng của một số hữu hạn (khá lớn) số hạng.

2. Hình trụ vô hạn bán kính R

Đối với hình trụ tròn bán kính R cho phép sự chuyển chất theo phương bán kính thì trong hệ tọa độ trụ. (r, θ, x) với tâm nằm trên trục hình trụ, nghiệm của bài toán (1.2) với $\Gamma = 1$, $X = \frac{r}{R}$ có dạng :

$C(X, F_o, B_i, \varkappa) =$

$$\sum_{n=1}^{N} \frac{\left(1+\sqrt{1-4\varkappa\mu_n^2}\right)J_1(\mu_n)J_o(\mu_n X)\exp\left(-1+\sqrt{1-4\varkappa\mu_n^2}\right)\frac{F_o}{2\varkappa}}{\mu_n\sqrt{1-4\varkappa\mu_n^2}\left[J_0^2(\mu_n)+J_1^2(\mu_n)\right]+\left(1-\sqrt{1-4\varkappa\mu_n^2}\right)J_o(\mu_n)J_1(\mu_n)} \quad (2.5)$$

$$\ldots, F_o, B_i, \varkappa) = - 2 \sum_{n=1}^{N} \frac{\mu_n J_1(\mu_n) J_1(\mu_n X) \exp\left(-1 + \sqrt{1 - 4\varkappa\mu_n^2}\right) \frac{F_o}{2\varkappa}}{\mu_n \sqrt{1 - 4\varkappa\mu_n^2}\,[J_0^2(\mu_n) + J_1^2(\mu_n)] + \left(1 - \sqrt{1 - 4\varkappa\mu_n^2}\right) J_o(\mu_n) J_1(\mu_n)}$$

Các đặc trưng trung bình của quá trình chuyền chất được xác định như sau:

$$\overline{C}(F_o, B_i, \varkappa) = \sum_{n=1}^{N} \frac{2(1+\sqrt{1-4\varkappa\mu_n^2})\, J_1^2(M_n)\exp(-1+\sqrt{1-4\varkappa\mu_n^2})\, \frac{F_o}{2\varkappa}}{\mu_n\{\mu_n \sqrt{1-4\varkappa\mu_n^2}\,[J_0^2(\mu_n)+J_1^2(\mu_n)] + (1-\sqrt{1-4\varkappa\mu_n^2})J_o(\mu_n)\, J_1(\mu_n)\}}$$

$$\overline{j}(F_o, B_i, \varkappa) = - \sum_{n=1}^{N} \frac{\pi\left(1+\sqrt{1-4\varkappa\mu_n^2}\right) J_o(\mu_n) J_1(\mu_n)[J_1(\mu_n) H_o(\mu_n) - J_o(\mu_n) H_1(\mu_n)]}{\mu_n\{\mu_n\sqrt{1-4\varkappa\mu_n^2}\,[J_0^2(\mu_n+J_1^2(\mu_n)] + (1-\sqrt{1-4\varkappa\mu_n^2})J_o(\mu_n)J_1(\mu_n)\}} \times \tag{2.6}$$

$$\times \exp(-1+\sqrt{1-4\varkappa\mu_n^2})\, \frac{F_o}{2\varkappa}$$

ng đó μ_n là nghiệm của phương trình đặc trưng:

$$\frac{J_o(\mu_n)}{J_1(\mu_n)} = \frac{1 - \sqrt{1 - 4\varkappa\mu^2}}{2\varkappa\mu B_i} \tag{2.7}$$

ı $J_\nu(x)$ là hàm Bessel loại một bậc ν và $H_\nu(x)$ là hàm Xtrubi loại một bậc υ.

Từ các phương trình nhận được có thể xét các trường hợp riêng đơn giản hơn. i tăng chuẩn số Bi thì vận tốc thu hồi chất cũng tăng. Khi Bi $\to \infty$ sức cản khuyếch ı bên ngoài coi như không đáng kể, điều kiện biên loại ba mà ta đã xét chuyền thành u kiện biên loại thứ nhất. Các kết quả tương ứng của bài toán đặt ra dễ dàng nhận ợc từ các nghiệm trên khi cho Bi $\to \infty$. Trường hợp khi vận tốc của quá trình chuyền ít trong các ống mao dẫn rất lớn thì phương trình khuyếch tán dạng hyperbolic của thuyết khuyếch tán suy rộng sẽ chuyền thành phương trình khuyếch tán dạng parabolic ı lý thuyết khuyếch tán cổ điền. Cho $\varkappa \to 0$ ta dễ dàng nhận được từ (2.1) – (2.7) các quả cổ điền tương ứng.

Nghiệm cụ thể cho bài toán hình cầu bán kính R cũng đã được tác giả thu nhận.

Để so sánh kết quả giải tích nhận được trong khuôn khổ lý thuyết khuyếch tán điền với các kết quả thực nghiệm người ta thường phải đo giá trị của hệ số khuyếch ı. Việc đo này được tiến hành trên cơ sở định luật Fick. Trong nhiều trường hợp các quả giải tích phù hợp với các số liệu thực nghiệm. Tuy nhiên có những trường hợp c kết quả giải tích không phù hợp với các số liệu thực nghiệm [3], hệ số khuyếch tán được lớn hơn giá trị lý thuyết. Để chứng tỏ sự phù hợp của lý thuyết mới ta đánh một cách gần đúng, thô thiển hệ số khuyếch tán hiệu ứng của lý thuyết khuyếch tán rộng bằng phương pháp của lý thuyết về các chế độ đều [4] trong trường hợp khi $\gg 1$, $\varkappa \ll 1$, $B_i = \infty$. Ta có trong cả ba trường hợp:

$$D_{hj} = (1 + \varkappa\mu_n^2)\, D_* \tag{2.8}$$

ràng cho thấy hệ số khuyếch tán hiệu ứng tính theo lý thuyết khuyếch tán suy rộng ı hơn so với hệ số khuyếch tán tính theo định luật Fick. Hệ số khuyếch tán hiệu ứng giá trị không những phụ thuộc vào tính chất của dung dịch mà còn phụ thuộc vào cấu trúc hóa lý và hình dạng của vật xốp.

Địa chỉ:

Đại học Tổng hợp

Nhận ngày 7-1-1980

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. **Nguyễn Văn Điệp, Trương Minh Chánh.** Lý thuyết về các hỗn hợp dòng thể vi mô. Tạp chí Cơ Học N° 3-4, 1979.

2. НГУЕН ВАЙ ДЬЕП. Некоторые вопросы теории взаимопроникающихся сред. Докт. дисертация, М,. 1976.

3. АКСЕЛЬРД Г. А. Массообмен В системе твердой тело-жидкости. Изд. Львовского университета, 1970.

4. РОМАНКОВ П. Г., РАШКОВСКАЯ Н. Б., ФРОЛОВ В. Ф. Массообменные процессы химической технологии. Л., Химия, 1975.

5. ЛЫКОВ А.В. Теория теплопроводности. Изд. Высшая школа. М. 1967.

SUMMARY

THE MASS TRANSFER IN THE CAPILLARY — POROUS MATERIALS

In the paper the Mass transfers in capillary-porous plate, circular cylinder are considered within the framework of the linear isothermal generalized — diffusive theory of the homogenous fluid mixtures. Solutions are obtained by the method of laplacces integral transformation.

Tin hoạt động Cơ Học

NHẰM tăng cường sự hợp tác nghiên cứu và phối hợp hoạt động trong lĩnh vực cơ học, từ năm 1978 viện hàn lâm khoa học các nước: Cộng hòa nhân dân Bungari, Cộng hòa nhân dân Hungari, Cộng hòa dân chủ Đức, Cộng hòa nhân dân Balan, Liên bang Cộng hòa xã hội chủ nghĩa Xô viết, Liên bang Cộng hòa xã hội chủ nghĩa Tiệp khắc đã cho xuất bản Tạp chí **Các thành tựu Cơ Học**.

Từ năm 1979 viện cơ học thuộc viện khoa học Việt Nam đã chính thức tham gia vào hoạt động của tạp chí nói trên. Các đồng chí Nguyễn Văn Đạo và Nguyễn Văn Điệp đã được cử làm ủy viên Ban biên tập.

Trong xuất bản phẩm thường kỳ của mình, số 2/1980, Ban biên tập tạp chí **Các thành tựu Cơ Học** đã nhiệt liệt chúc mừng việc các nhà cơ học Việt Nam tham gia các hoạt động của tạp chí và bày tỏ niềm hy vọng vào sự phát triển tốt đẹp mối quan hệ và hợp tác giữa các nước xã hội chủ nghĩa trong lĩnh vực cơ học.