ΟΝΟΜΑΤΕΠΩΝΥΜΟ:	**ΕΤΟΣ:**	**Α.Μ:**

<table>
<tr><td rowspan="3">Basic definitions</td><td colspan="2">$\rho = \rho_A + \rho_B =$ mass density of solution (Kg/m^3)
$\rho_A = c_A M_A =$ mass concentration of A (Kg of A/m^3 of solution)
$\omega_A = \frac{\rho_A}{\rho} =$ mass fraction of A</td></tr>
<tr><td colspan="2">$c = c_A + c_B =$ molar density of solution (Kg-moles/m^3)
$c_A = \frac{\rho_A}{M_A} =$ molar concentration of A (Kg-moles of A/m^3 of solution)
$x_A = \frac{c_A}{c} =$ mole fraction of A</td></tr>
<tr><td colspan="2">$M = \frac{\rho}{c} =$ number-mean molecular weight of mixture</td></tr>
<tr><td>Additional relations</td><td>$x_A + x_B = 1$
$x_A M_A + x_B M_B = M$
$x_A = \frac{\frac{\omega_A}{M_A}}{\frac{\omega_A}{M_A} + \frac{\omega_B}{M_B}}$
$dx_A = \frac{d\omega_A}{M_A M_B \left(\frac{\omega_A}{M_A} + \frac{\omega_B}{M_B}\right)^2}$</td><td>$\omega_A + \omega_B = 1$
$\frac{\omega_A}{M_A} + \frac{\omega_B}{M_B} = \frac{1}{M}$
$\omega_A = \frac{x_A M_A}{x_A M_A + x_B M_B}$
$d\omega_A = \frac{M_A M_B dx_A}{(x_A M_A + x_B M_B)^2}$</td></tr>
</table>

<u>Μαζική συγκέντρωση</u> ρ_i **:** $\rho_i = \frac{\text{μάζα του είδους i}}{\text{όγκος μίγματος}}$

<u>Πυκνότητα του μίγματος</u> ρ : $\rho = \sum_{i=1}^{n} \rho_i$

<u>Γραμμομοριακή συγκέντρωση</u> c_i : $c_i = \frac{\text{αριθμός γραμμομορίων είδους i}}{\text{όγκος μίγματος}}$,

$c_i = \rho_i / M_i$ όπου M_i μοριακό βάρος i

<u>Ολική συγκέντρωση του μίγματος</u> c : $c = \sum_{i=1}^{n} c_i$

<u>Κλάσμα μάζας</u> $\boldsymbol{\omega_i}$: $\omega_i = \frac{\text{μαζική συγκέντρωση του i}}{\text{πυκνότητα του μίγματος}} = \frac{\rho_i}{\rho}$ $\qquad \sum_{i=1}^{n} \omega_i = 1$

<u>Γραμμομοριακό κλάσμα</u> $\mathbf{x_i}$: $\sum_{i=1}^{n} x_i = 1$

<u>Μέση μαζική ταχύτητα v</u> : $\mathbf{v} = \frac{\sum_{i=1}^{n} \rho_i \mathbf{v}_i}{\sum_{i=1}^{n} \rho_i} = \sum_{i=1}^{n} \omega_i \mathbf{v}_i$, όπου $\mathbf{v_i}$ η μέση ταχύτητα των μορίων του i

<u>Μέση γραμμομοριακή (ή μοριακή) ταχύτητα</u> v* : $\mathbf{v}^* = \frac{\sum_{i=1}^{n} c_i \mathbf{v}_i}{\sum_{i=1}^{n} c_i} = \sum_{i=1}^{n} x_i \mathbf{v}_i$

$\mathbf{v_i} - \mathbf{v}$ = <u>ταχύτητα διάχυσης του i ως προς την μέση μαζική ταχύτητα</u>

$\mathbf{v_i} - \mathbf{v}^*$ = <u>ταχύτητα διάχυσης του i ως προς την μέση μοριακή ταχύτητα</u>

Basic definitions	$\mathbf{v}_A$ = velocity of species A relative to stationary coordinates $\mathbf{v}_A - \mathbf{v}$ = diffusion velocity of species A relative to **v** $\mathbf{v}_A - \mathbf{v}^*$ = diffusion velocity of species A relative to **v***
	$\mathbf{v}$ = mass average velocity = $(1/\rho)(\rho_A \mathbf{v}_A + \rho_B \mathbf{v}_B) = \omega_A \mathbf{v}_A + \omega_B \mathbf{v}_B$ $\mathbf{v}^*$ = molar average velocity = $(1/c)(c_A \mathbf{v}_A + c_B \mathbf{v}_B) = x_A \mathbf{v}_A + x_B \mathbf{v}_B$
Additional relations	$v - \mathbf{v}^* = \omega_A(\mathbf{v}_A - \mathbf{v}^*) + \omega_B(\mathbf{v}_B - \mathbf{v}^*)$ $\mathbf{v}^* - \mathbf{v} = x_A(\mathbf{v}_A - \mathbf{v}) + x_B(\mathbf{v}_B - \mathbf{v})$

Μαζική παροχή (ως προς ακίνητο σύστημα συντεταγμένων) : $\mathbf{n}_i = \rho_i \mathbf{v}_i$

Γραμμομοριακή παροχή (ως προς ακίνητο σύστημα συντεταγμένων) : $\mathbf{N}_i = c_i \mathbf{v}_i$

Μαζική παροχή (ως προς την μέση μαζική ταχύτητα **v**) **:** $\mathbf{j}_i = \rho_i(\mathrm{v}_\mathbf{i} - \mathrm{v})$

Γραμμομοριακή παροχή (ως προς την μέση μαζική ταχύτητα **v**) **:** $J_i = c_i(\mathbf{v}_i - \mathbf{v})$

Μαζική παροχή (ως προς τη μέση γραμμομοριακή ταχύτητα **v***) : $j_i^* = \rho_i(\mathbf{v}_i - \mathbf{v}^*)$

Γραμ/μοριακή παροχή (ως προς τη μέση γραμμομοριακή ταχύτητα **v***) : $\mathbf{J}_i^* = c_i(\mathbf{v}_i - \mathbf{v}^*)$

	Quantity	With Respect to Stationary Axes	With Respect to **v**	With Respect to **v***
Basic definitions	velocity of species A $(\mathrm{m\,s^{-1}})$	$\mathbf{v}_A$ (A)	$\mathbf{v}_A - \mathbf{v}$ (B)	$\mathbf{v}_A - \mathbf{v}^*$ (C)
	Mass flux of species A $(\mathrm{Kgm^{-2}\,s^{-1}})$	$\mathbf{n}_A = \rho_A \mathbf{v}_A$ (B)	$\mathbf{j}_A = \rho_A(\mathbf{v}_A - \mathbf{v})$ (E)	$\mathbf{j}_A^* = \rho_A(\mathbf{v}_A - \mathbf{v}^*)$ (F)
	Molar flux of species A	$\mathbf{N}_A = c_A \mathbf{v}_A$ (G)	$\mathbf{J}_A = c_A(\mathbf{v}_A - \mathbf{v})$ (H)	$\mathbf{J}_A^* = c_A(\mathbf{v}_A - \mathbf{v}^*)$ (I)
Relations among the fluxes, for reference only	Sum of mass fluxes $(\mathrm{Kgm^{-2}\,s^{-1}})$	$\mathbf{n}_A + \mathbf{n}_B = \rho\mathbf{v}$ (J)	$\mathbf{j}_A + \mathbf{j}_B = 0$ (K)	$\mathbf{j}_A^* + \mathbf{j}_B^* = \rho(\mathbf{v} - \mathbf{v}^*)$ (L)
	Sum of molar fluxes $(\mathrm{Kg-moles\ m^{-2}\,s^{-1}})$	$\mathbf{N}_A + \mathbf{N}_B = c\mathbf{v}^*$ (M)	$\mathbf{J}_A + \mathbf{J}_B = c(\mathbf{v}^* - \mathbf{v})$ (N)	$\mathbf{J}_A^* + \mathbf{J}_B^* = 0$ (O)
	Fluxes in terms of $\mathbf{n_A}$ and $\mathbf{n_B}$	$\mathbf{N}_A = \dfrac{\mathbf{n}_A}{M_A}$ (P)	$\mathbf{j}_A = \mathbf{n}_A - \omega_A(\mathbf{n}_A + \mathbf{n}_B)$ (Q)	$\mathbf{j}_A^* = \mathbf{n}_A - x_A\left(\mathbf{n}_A + \dfrac{M_A}{M_B}\mathbf{n}_B\right)$ (R)
	Fluxes in terms of $\mathbf{N_A}$ and $\mathbf{N_B}$	$\mathbf{n}_A = \mathbf{N}_A M_A$ (S)	$\mathbf{J}_A = \mathbf{N}_A - \omega_A\left(\mathbf{N}_A + \dfrac{M_B}{M_A}\mathbf{N}_B\right)$ (T)	$\mathbf{J}_A^* = \mathbf{N}_A - x_A(\mathbf{N}_A + \mathbf{N}_B)$
	Fluxes in terms of $\mathbf{j_A}$ and **v**	$\mathbf{n}_A = \mathbf{j}_A + \rho_A \mathbf{v}$ (V)	$\mathbf{J}_A = \dfrac{j_A}{\mathbf{M}_A}$ (W)	$\mathbf{j}_A^* = \dfrac{M}{M_B}\mathbf{j}_A$ (X)
	Fluxes in terms of $\mathbf{J}_A^*$ and $\mathbf{v}^*$	$\mathbf{N}_A = \mathbf{J}_A^* + c_A \mathbf{v}^*$ (Y)	$\mathbf{J}_A = \dfrac{M_B}{\mathbf{M}_A}\mathbf{J}_A^*$ (Z)	$\mathbf{j}_A^* = \mathbf{J}_A^* M_A$ (AA)

$$J_i^* = \mathbf{N}_i - x_i \sum_j \mathbf{N}_j \qquad j_i = \mathbf{n}_i - \omega_i \sum_j \mathbf{n}_j \qquad \sum_i \mathbf{J}_i^* = 0 \qquad \sum_i j_i = 0 \qquad \sum_i J_i \neq 0 \qquad \sum_i j_i^* \neq 0$$

1ος Νόμος Fick για δυαδικό σύστημα : $\mathbf{J}_A^* = -cD_{AB}\nabla x_A \qquad N_A = x_A(N_A + N_B) - cD_{AB}\nabla x_A$

Flux	Gradient	Form of Fick's First Law
$\mathbf{n}_A$	$\nabla\omega_A$	$\mathbf{n}_A - \omega_A(\mathbf{n}_A + \mathbf{n}_B) = -\rho D_{AB}\nabla\omega_A$
N_A	∇x_A	$\mathbf{N}_A - x_A(\mathbf{N}_A + \mathbf{N}_B) = -cD_{AB}\nabla x_A$
$\mathbf{j}_A$	$\nabla\omega_A$	$\mathbf{j}_A = -\rho D_{AB}\nabla\omega_A$
$\mathbf{J}_A^*$	∇x_A	$\mathbf{J}_A^* = -cD_{AB}\nabla x_A$
$\mathbf{j}_A$	∇x_A	$\mathbf{j}_A = -\left(\frac{c^2}{\rho}\right)M_A M_B D_{AB}\nabla x_A$
$\mathbf{J}_A^*$	$\nabla\omega_A$	$\mathbf{J}_A^* = -\left(\frac{\rho^2}{cM_A M_B}\right)D_{AB}\nabla\omega_A$
$c(\mathbf{v}_A - \mathbf{v}_B)$	∇x_A	$c(\mathbf{v}_A - \mathbf{v}_B) = -\frac{cD_{AB}}{x_A x_B}\nabla x_A$

<u>ΣΥΝΤΕΛΕΣΤΗΣ ΔΙΑΧΥΣΗΣ για *Αέρια Μίγματα*</u>

$$\frac{p D_{AB}}{(p_{cA}p_{cB})^{1/3}(T_{cA}T_{cB})^{5/12}\left(\frac{1}{M_A}+\frac{1}{M_B}\right)^{1/2}} = \alpha\left(\frac{T}{\sqrt{T_{cA}T_{cB}}}\right)^b$$

(1) <u>J. C. Slattery, R. B. Bird (1958)</u>

$D_{AB}[=]\ m^2\, s^{-1}$, M_A και M_B μοριακό βάρος συστατικού A και B, $p[=]atm$, $T[=]\ K$

<u>Για μη πολικά ζευγάρια αερίων</u>: $\alpha = 2.745\times10^{-4}$, $b = 1.823$

<u>Για</u> H_2O *<u>με ένα μη πολικό αέριο</u>*: $\alpha = 3.640\times10^{-4}$, $b = 2.334$

<u>Γραμμ/κος όγκος ένωσης</u> C_nH_k : $V = nV_C + kV_H$

<u>ανηγμένη πίεση</u>: $P_r = \frac{P}{P_c}$, <u>ανηγμένη θερμοκρασία</u>: $T_r = \frac{T}{T_c}$,

όπου P_c, T_c <u>κρίσιμη πίεση & θερμοκρασία</u>

$$cD_{AB} = 2.2646\times10^{-5}\frac{\sqrt{T(1/M_A + 1/M_B)}}{\sigma_{AB}^2\Omega_{D,AB}}$$

(2) <u>Chapman-Enskog</u>

Για ιδανικά αέρια ($c = p/RT$): $D_{AB} = 0.0018583\frac{\sqrt{T^3(1/M_A + 1/M_B)}}{p\sigma_{AB}^2\Omega_{D,AB}}$

$D_{AB}[=]\ m^2\, s^{-1}$, $c[=]Kg-moles\, m^{-3}$, $T[=]\ K$, $p[=]atm$,
$\sigma_{AB}[=]$Angström

$$\frac{\varepsilon_{AB}}{k} = \sqrt{\frac{\varepsilon_A}{k}\frac{\varepsilon_B}{k}} \qquad \sigma_{AB} = \frac{\sigma_A + \sigma_B}{2}$$

$$\mathcal{D}_{AB} = \frac{T^{7/4}\sqrt{M_r}}{p(V_A^{1/3}+V_B^{1/3})^2}\cdot 10^{-3}$$

(3) <u>FSG (Fuller-Schettler-Giddings)</u>

$$M_r = \frac{M_A + M_B}{M_A \cdot M_B}$$

$D_{AB}[=]\ m^2\, s^{-1}$, $T[=]\ K$, $p[=]atm$, M_A και M_B μοριακό βάρος συστατικού A και B

V_A και V_B ο γραμμομοριακός όγκος του A και B [=] m^3/Kg-mole

ΣΥΝΤΕΛΕΣΤΗΣ ΔΙΑΧΥΣΗΣ (Αραιά *Υγρά Μίγματα*)

$$\mathcal{D}_{AB} = 7.4\cdot 10^{-8}\frac{(\psi_B M_B)^{1/2}T}{\mu V_A^{0.6}}$$ **Wilke-Chang**

M_B : μοριακό βάρος συστατικού Β

μ : ιξώδες του διαλύματος [=] cp

T: απόλυτη θερμοκρασία [=] K

V_A: γραμμομοριακός όγκος του Α [=] m^3/Kg-mole

ψ_B : 'παράμετρος συσχέτισης'
Νερό: ψ_B =2.6
Μεθανόλη: ψ_B =1.9
Αιθανόλη: ψ_B =1.5
Βενζόλιο, Επτάνιο, Αιθέρας: ψ_B =1.0

ΕΞΙΣΩΣΗ ΣΥΝΕΧΕΙΑΣ *για τα συστατικά Α,Β*

$$\left.\begin{aligned}\frac{\vartheta\rho_A}{\vartheta t}+(\nabla\cdot n_A)=r_A\\ \frac{\vartheta\rho_B}{\vartheta t}+(\nabla\cdot n_B)=r_B\end{aligned}\right\}\xrightarrow{\text{Μίγμα}}\boxed{\frac{\vartheta\rho}{\vartheta t}+(\nabla\cdot\rho v)=0}$$

$$(r_A+r_B=0)$$

$$\left.\begin{aligned}\frac{\vartheta c_A}{\vartheta t}+(\nabla\cdot N_A)=R_A\\ \frac{\vartheta c_B}{\vartheta t}+(\nabla\cdot N_B)=R_B\end{aligned}\right\}\xrightarrow{\text{Μίγμα}}\boxed{\frac{\vartheta c}{\vartheta t}+(\nabla\cdot cv^*)=(R_A+R_B)}$$

Για ρευστό με σταθερή πυκνότητα : $(\nabla\cdot v)=0$

Σταθερή γραμμ/κή συγκέντρωση μίγματος :

$$(\nabla\cdot\mathbf{v}^*)=\frac{1}{c}(R_A+R_B)$$

Εξισώσεις δυαδικής διάχυσης μίγματος Α, Β :

$$\frac{\vartheta\rho_A}{\vartheta t}+(\nabla\cdot\rho_A\mathbf{v})=(\nabla\cdot\rho_A D_{AB}\nabla\omega_A)+r_A\xrightarrow[D_{AB}\,=\,\text{σταθερό}]{\rho\,=\,\text{σταθερό}}\frac{\vartheta\rho_A}{\vartheta t}+\rho_A(\nabla\cdot\mathbf{v})+(\mathbf{v}\cdot\nabla\rho_A)=D_{AB}\nabla^2\rho_A+r_A\xrightarrow{\div M_A}$$

$$\Longrightarrow\frac{\vartheta c_A}{\vartheta t}+(\mathbf{v}\cdot\nabla c_A)=D_{AB}\nabla^2 c_A+R_A$$

$$\frac{\vartheta c_A}{\vartheta t}+(\nabla\cdot c_A\mathbf{v}^*)=(\nabla\cdot cD_{AB}\nabla x_A)+R_A\xrightarrow[D_{AB}\,=\,\text{σταθερό}]{c\,=\,\text{σταθερό}}\frac{\vartheta c_A}{\vartheta t}+c_A(\nabla\cdot\mathbf{v}^*)+(\mathbf{v}^*\cdot\nabla c_A)=D_{AB}\nabla^2 c_A+R_A\xrightarrow{(1)}$$

$$\Longrightarrow\frac{\vartheta c_A}{\vartheta t}+(\mathbf{v}^*\cdot\nabla c_A)=D_{AB}\nabla^2 c_A+R_A-\frac{c_A}{c}(R_A+R_B)$$

όπου (1) : $\nabla\cdot\mathbf{v}^*=(1/c)\ (R_A+R_B)$

Εξίσωση συνέχειας σε διάφορα συστήματα συντεταγμένων:

Καρτεσιανό σύστημα:
$$\frac{\partial c_A}{\partial t}+\left(\frac{\partial N_{Ax}}{\partial x}+\frac{\partial N_{Ay}}{\partial y}+\frac{\partial N_{Az}}{\partial z}\right)=R_A$$

Κυλινδρικό σύστημα:
$$\frac{\partial c_A}{\partial t}+\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(rN_{Ar})+\frac{1}{r}\frac{\partial N_{A\theta}}{\partial\theta}+\frac{\partial N_{Az}}{\partial z}\right)=R_A$$

Σφαιρικό σύστημα:
$$\frac{\partial c_A}{\partial t}+\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}(r^2N_{Ar})+\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(N_{A\theta}\sin\theta)+\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial N_{A\phi}}{\partial\phi}\right)=R_A$$

N. Fick : *ρ,* D_{AB} *= σταθερά,* $\mathbf{v}=0$, *όχι χημική αντίδραση:* $\dfrac{\vartheta c_A}{\vartheta t}=D_{AB}\nabla^2 c_A$

Εξίσωση της συνέχειας για σταθερό ρ και D_{AB} :

Καρτεσιανό σύστημα:
$$\frac{\partial c_A}{\partial t}+\left(v_x\frac{\partial c_A}{\partial x}+v_y\frac{\partial c_A}{\partial y}+v_z\frac{\partial c_A}{\partial z}\right)=D_{AB}\left(\frac{\partial^2 c_A}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 c_A}{\partial y^2}+\frac{\partial^2 c_A}{\partial z^2}\right)+R_A$$

Κυλινδρικό σύστημα:
$$\frac{\partial c_A}{\partial t}+\left(v_r\frac{\partial c_A}{\partial r}+v_\theta\frac{1}{r}\frac{\partial c_A}{\partial\theta}+v_z\frac{\partial c_A}{\partial z}\right)=D_{AB}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial c_A}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 c_A}{\partial\theta^2}+\frac{\partial^2 c_A}{\partial z^2}\right)+R_A$$

Σφαιρικό σύστημα:
$$\frac{\partial c_A}{\partial t}+\left(v_r\frac{\partial c_A}{\partial r}+v_\theta\frac{1}{r}\frac{\partial c_A}{\partial\theta}+v_\phi\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial c_A}{\partial\phi}\right)=D_{AB}\left(\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial c_A}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial c_A}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2 c_A}{\partial\phi^2}\right)+R_A$$

Συνήθεις Συνοριακές Συνθήκες:

Γνωστή συγκέντρωση στην επιφάνεια **:** $x_A(0) = x_{A0} = \text{γνωστό}$

Μαζική παροχή σε μια επιφάνεια γνωστή : $N_{Ax}(0) = N_{Ax,0} = \text{γνωστό}$ ή $\dfrac{\partial x_A(0)}{\partial x} = \text{γνωστό}$

Στερεό σε επαφή με διάλυμα : $N_{Ax}(0) = k_c\left(c_{A_0} - c_{A_\infty}\right)$, k_c συντελεστής μεταφοράς μάζας

Ετερογενής αντίδραση στην επιφάνεια : $N_{Ax,0} = k_1'' c_A$,όπου k_1'' συντελεστής αντίδρασης, αντίδραση 1ης τάξης/μονάδα επιφάνειας

Διάχυση μέσω ακίνητου αερίου υμένα (ή *ΚΕΛΙ ΤΟΥ ARNOLD*)

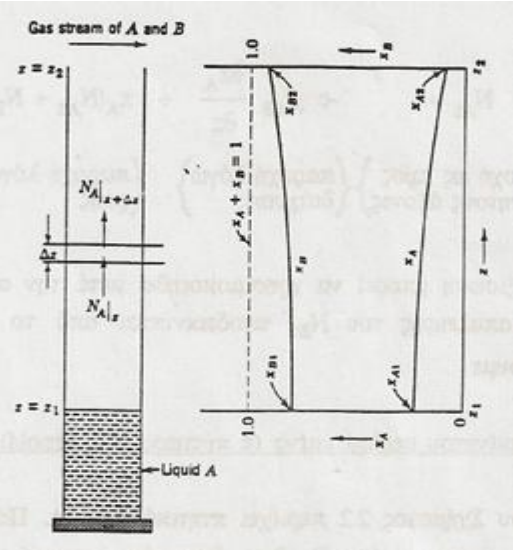
Β στάσιμο: $N_{Bz} = 0$

N. Fick: $N_{Az} = -cD_{AB}\dfrac{\vartheta x_A}{\vartheta z} + x_A\left(N_{Az} + N_{Bz}\right)$

Ισοζύγιο Μάζας: $SN_{Az}\big|_z - SN_{Az}\big|_{z+\Delta z} = 0 \xrightarrow[\Delta z\to 0]{\div S\Delta z} -\dfrac{dN_{Az}}{dz} = 0$

S: διατομή της στήλης

$$\Rightarrow \frac{d}{dz}\left(\frac{cD_{AB}}{1-x_A}\cdot\frac{dx_A}{dz}\right) = 0 \xrightarrow{cD_{AB}\,:\,\text{σταθ.}} \boxed{\frac{d}{dz}\left(\frac{1}{1-x_A}\cdot\frac{dx_A}{dz}\right) = 0} \quad (1)$$



ΣΣ1: $x_A = x_{A_1}$ για $z = z_1$ ΣΣ2: $x_A = x_{A_2}$ για $z = z_2$

Ολοκληρώνοντας την (1) καταλλήγουμε:

$$\left(\frac{1-x_A}{1-x_{A1}}\right) = \left(\frac{1-x_{A2}}{1-x_{A1}}\right)^{\frac{z-z_1}{z_2-z_1}} \quad \text{ή} \quad \left(\frac{x_B}{x_{B1}}\right) = \left(\frac{x_{B2}}{x_{B1}}\right)^{\frac{z-z_1}{z_2-z_1}}$$

Μέση τιμή συγκέντρωσης Β:

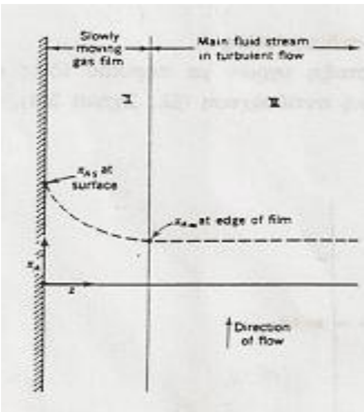
$$\frac{x_{B,avg}}{x_{B1}} = \frac{\int_{z_1}^{z_2}\left(x_B/x_{B1}\right)dz}{\int_{z_1}^{z_2}dz} = \frac{\int_0^1\left(x_{B2}/x_{B1}\right)^{\zeta}d\zeta}{\int_0^1 d\zeta} = \left.\frac{\left(x_{B2}/x_{B1}\right)^{\zeta}}{\ln\left(\frac{x_{B2}}{x_{B1}}\right)}\right|_0^1$$

$$\text{Άρα : } x_{B,avg} = \frac{x_{B2}-x_{B1}}{\ln\left(\frac{x_{B2}}{x_{B1}}\right)} \quad (2)$$

Ρυθμός μεταφοράς μάζας στην διεπιφάνεια υγρού-αερίου:

$$N_{Az}\big|_{z=z_1} = -\frac{cD_{AB}}{1-x_{A1}}\frac{dx_A}{dz}\bigg|_{z=z_1} = +\frac{cD_{AB}}{x_{B1}}\frac{dx_B}{dz}\bigg|_{z=z_1} = \frac{cD_{AB}}{(z_2-z_1)}\ln\left(\frac{x_{B2}}{x_{B1}}\right) \Rightarrow N_{Az}\big|_{z=z_1} = \frac{cD_{AB}}{(z_2-z_1)(x_B)_{ln}}\left(x_{A1}-x_{A2}\right)$$

$$\xrightarrow{\text{ή}} N_{Az}\big|_{z=z_1} = \frac{\left(pD_{AB}/RT\right)}{\left(z_2-z_1\right)}\ln\frac{p_{B2}}{p_{B1}} = \frac{\left(pD_{AB}/RT\right)}{\left(z_2-z_1\right)\left(p_B\right)_{ln}}\left(p_{A1}-p_{A2}\right)$$



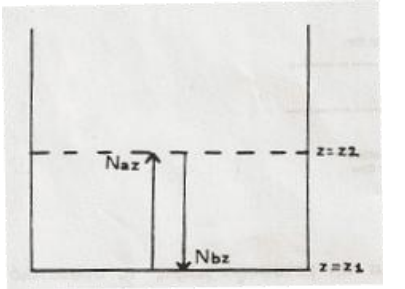
Θεωρία Υμένα :

πάχος του υμένα : $z_2 - z_1 = \delta$

$$N_{Az} = \frac{cD_{AB}}{\delta\left(x_B\right)_{ln}}\left(x_{As}-x_{A\infty}\right) = \frac{D_{AB}}{\delta\left(x_B\right)_{ln}}\left(C_{As}-C_{A\infty}\right)$$

συντελεστής μεταφορά μάζας: $k_c = \dfrac{D_{AB}}{\delta\left(x_B\right)_{ln}}$ ή $k_c = \dfrac{D_{AB}p}{\delta\left(p_B\right)_{ln}}$

<u>Μοντέλο της ισομοριακής αντιδιαχύσεως:</u> $N_{Az}+N_{Bz}=0$, $\dfrac{dN_{Az}}{dz}=0$ (1),

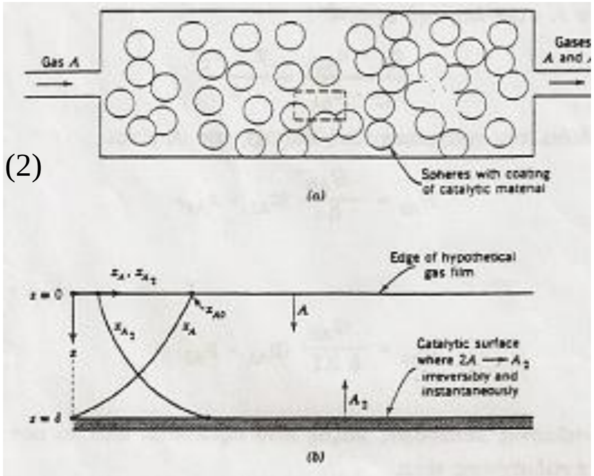


<u>N. Fick</u>: $N_{Az}=-cD_{AB}\dfrac{\partial x_A}{\partial z}$ (2), για c, D_{AB} σταθερά : (1) $\Longrightarrow$ $\dfrac{d^2c_A}{dz^2}=0$ (3)

ΣΣ1: $z=z_1$ $c_A=c_{A1}$, ΣΣ2: $z=z_2$ $c_A=c_{A2}$ Ολοκληρώνω την (3): $\dfrac{c_A-c_{A1}}{c_{A2}-c_{A1}}=\dfrac{z-z_1}{\delta}$

<u>Γραμμ/κή παροχή A</u>: $N_{Az}=\dfrac{D_{AB}}{\delta}\left(c_{A1}-c_{A2}\right)$ ή $N_{Az}=\dfrac{D_{AB}}{\delta RT}\left(p_{A1}-p_{A2}\right)$, *<u>Συντελεστής μεταφοράς μάζας</u>*: $k_c=\dfrac{D_{AB}}{\delta}$

<u>Διάχυση με στιγμιαία ετερογενή χημική αντίδραση *(στιγμιαία)*:</u>



<u>Αντίδραση διμερισμού</u> : $2A\rightarrow A_2$, $N_{A_2z}=-\dfrac{1}{2}N_{Az}$

<u>N.Fick</u> : $N_{Az}=\dfrac{cD_{AA_2}}{1-\frac{1}{2}x_A}\dfrac{dx_A}{dz}$ (1) , $\dfrac{dN_{Az}}{dz}=0 \overset{(1)}{\Longrightarrow} \dfrac{d}{dz}\left(\dfrac{1}{1-\frac{1}{2}x_A}\dfrac{dx_A}{dz}\right)=0$ (2)

ΣΣ1: $x_A=x_{A_0}$ για $z=0$, ΣΣ2: $x_A=0$ για $z=\delta$

Ολοκληρώνω την (2): $\left(1-\dfrac{1}{2}x_A\right)=\left(1-\dfrac{1}{2}x_{A0}\right)^{1-(z/\delta)}$

<u>Γραμμ/κή παροχή:</u> $N_{Az}=\dfrac{2cD_{AA_2}}{\delta}\ln\left(\dfrac{1}{1-\frac{1}{2}x_{A0}}\right)$

<u>Διάχυση με αργή ετερογενή χημική αντίδραση(*όχι στιγμιαία*):</u>

<u>Αντίδραση διμερισμού :</u> $2A\rightarrow A_2$, στιγμιαία στην καταλυτική επιφάνεια (για $z=\delta$), $N_{Az}=k_1''c_A=ck_1''x_A$

Ισχύουν οι ίδιες σχέσεις με όταν έχω στιγμιαία χημική αντίδραση. Αλλάζει μόνο η ΣΣ2.

ΣΣ1: $x_A=x_{A_0}$ για $z=0$, ΣΣ2: $x_A=\dfrac{N_{Az}}{ck_1''}$ για $z=\delta$ $\left(1-\dfrac{1}{2}x_A\right)=\left(1-\dfrac{1}{2}\dfrac{N_{Az}}{ck_1''}\right)^{z/\delta}\left(1-\dfrac{1}{2}x_{A0}\right)^{1-(z/\delta)}$

<u>Γραμμ/κή παροχή στο z=0</u> : $N_{Az}=\dfrac{2cD_{AA_2}}{\delta}\ln\left(\dfrac{1-\frac{1}{2}\left(N_{Az}/ck_1''\right)}{1-\frac{1}{2}x_{A0}}\right)$ (*)

<u>Μ ε ανάπτυξη της γραμμ/κης παροχής (*) σε σειρά Taylor έχουμε</u>: $N_{Az}=\dfrac{2cD_{AA_2}/\delta}{1+\left(D_{AA_2}/k_1''\delta\right)}\ln\left(\dfrac{1}{1-\frac{1}{2}x_{A_0}}\right)$

<u>Διάχυση με ομογενή χημική αντίδραση:</u>

<u>Αναντίστρεπτη αντίδραση πρώτης τάξης :</u> $A+B\rightarrow AB$ (Το αέριο Α διαλύεται και διαχέεται στην υγρή φάση και ταυτόχρονα αντιδρά με το Β)

<u>Ισοζύγιο μάζας:</u> $N_{Az}\big|_z S-N_{Az}\big|_{z+\Delta z}S-k_1'''c_AS\Delta z=0 \xrightarrow[\Delta z\rightarrow 0]{\div S\Delta z} \dfrac{dN_{Az}}{dz}+k_1'''c_A=0$ (1)

k_1''' :σταθερά ρυθμού αντίδρασης ως προς Α και S: εγκάρσια επιφάνεια του υγρού όπου γίνεται η αντίδραση

<u>N. Fick</u>: $N_{Az}=-D_{AB}\dfrac{dc_A}{dz}$ (2), (1) $\overset{(2)}{\Longrightarrow} -D_{AB}\dfrac{d^2c_A}{dz^2}+k_1'''c_A=0$ (3)

ΣΣ1: $c_A=c_{A0}$ για $z=0$, ΣΣ2: $N_{Az}=0$ ή $\dfrac{dc_A}{dz}=0$ για $z=L$

Ολοκληρώνοντας την (3): $\dfrac{c_A}{c_{A0}} = \dfrac{\cosh b_1\left[1-(z/L)\right]}{\cosh b_1}$, όπου $b_1 = \sqrt{k_1''' L^2 / D_{AB}}$

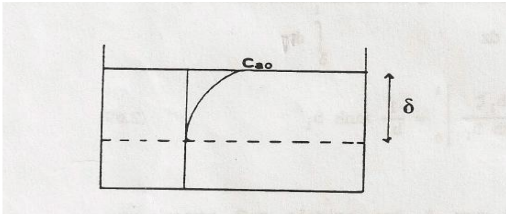
<u>*Μέσης συγκέντρωσης του Α στην υγρή φάση:*</u> $\dfrac{c_{A,avg}}{c_{A0}} = \dfrac{\int_0^L (c_A / c_{A0})\,dz}{\int_0^L dz} = \dfrac{\int_0^1 (\cosh b_1\zeta / \cosh b_1)\,d\zeta}{\int_0^1 dz} =$

$$= \left.\frac{\sinh b_1\zeta}{b_1 \cosh b_1}\right|_0^1 = \frac{1}{b_1}\tanh b_1 \qquad \text{όπου } \zeta = 1-(z/L)$$

<u>*Γραμμ/κη παροχή του Α στο επίπεδο z=0 :*</u> $N_{Az}\Big|_{z=0} = -D_{AB}\left.\dfrac{dc_A}{dz}\right|_{z=0} = -D_{AB}c_{A0}\left.\dfrac{\sinh b_1\left[1-(z/L)\right]}{\cosh b_1}\left(-\dfrac{b_1}{L}\right)\right|_{z=0}$

$$= \left(\frac{D_{AB}c_{A0}}{L}\right) b_1 \tanh b_1 \quad , \quad \text{όπου } b_1 = \sqrt{k_1''' L^2 / D_{AB}}$$

<u>Μοντέλο διεισδύσεως:</u> $-D_{AB}\dfrac{d^2 c_A}{dz^2} + k_1''' c_A = 0$ (1)



ΣΣ1: $c_A = c_{A_0}$ για $z=0$, ΣΣ2: $c_A = 0$ για $z = \delta$

Ολοκληρώνοντας την (1) έχουμε: $\dfrac{c_A}{c_{A0}} = \cosh\left(\sqrt{k'''/D_{AB1}}\, z\right) - \dfrac{\sinh\left(\sqrt{\dfrac{k_1'''}{D_{AB}}}\, z\right)}{\tanh\left(\sqrt{\dfrac{k_1'''}{D_{AB}}}\, \delta\right)}$

Η γραμμομοριακή παροχή του Α για $z=0$ είναι : $N_{Az}\Big|_{z=0} = \dfrac{D_{AB}c_{A0}}{\delta}\left[\dfrac{\sqrt{k'''/D_{AB}}\,\delta}{\tanh\left(\sqrt{\dfrac{k_1'''}{D_{AB}}}\,\delta\right)}\right]$

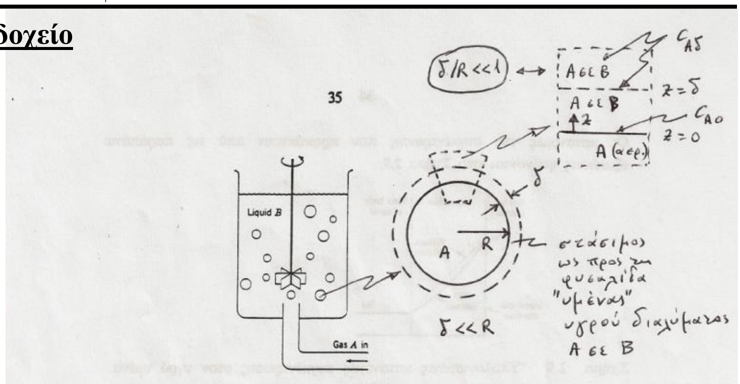
Αδιάστατος αριθμός Hatta : $N_{Ha} = \dfrac{\sqrt{k_1'''/D_{AB}}\,\delta}{\tanh\left[\sqrt{k_1'''/D_{AB}}\,\delta\right]}$

Για $k_1'''=0$ (όχι χημική αντίδραση) : $N_{Az}\Big|_{z=0} = \dfrac{D_{AB}c_{A0}}{\delta}$,   Για $k_1''' \neq 0$: $N_{Az}\Big|_{z=0} = \dfrac{D_{AB}c_{A0}}{\delta} N_{Ha}$

Για $k_1''' >>$ (πολύ γρήγορη αντίδραση): $N_{Az}\Big|_{z=0} = \sqrt{k_1''' D_{AB}}\, c_{A0}$, $N_{A_{z|z=0}} = k_c\left(c_{A_0} - 0\right)$ άρα $k_c = \sqrt{k_1''' D_{AB}}$

<u>Απορρόφηση αερίου με χημική αντίδραση σε αναδευόμενο δοχείο</u>

$$-D_{AB}\frac{d^2 c_A}{dz^2} + k_1''' c_A = 0$$



ΣΣ1: $c_A = c_{A0}$ για $z=0$, ΣΣ2: $c_A = c_{A\delta}$ για $z=\delta$

Λύση της διαφορικής: $\left(\dfrac{c_A}{c_{A0}}\right) = \dfrac{\Gamma \sinh b_1\zeta + \sinh b_1(1-\zeta)}{\sinh b_1}$,

όπου $\zeta = z/\delta$, $\Gamma = c_{A\delta}/c_{A0}$ και $b_1 = \sqrt{k_1'''\delta^2 / D_{AB}}$

Απουσία χημικής αντίδρασης (δηλ. $b_1 = 0$) η λύση της διαφορικής είναι: $\left(\dfrac{c_A}{c_{A0}}\right)_{no\,reaction} = \Gamma\zeta + (1-\zeta)$

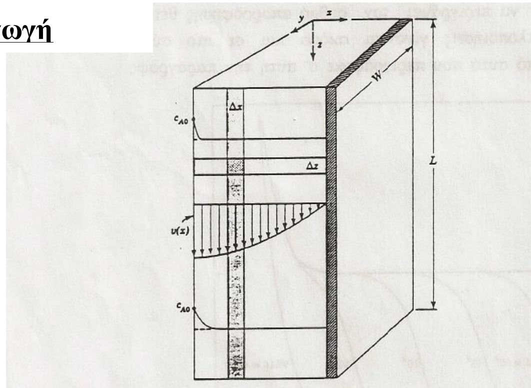
Γραμμομοριακές παροχές για την απορρόφηση με ή χωρίς χημική αντίδραση για $z=0$ είναι :

$N_{Az}\Big\vert_{z=0} = \left(-D_{AB}\left.\dfrac{dc_A}{dz}\right\vert_{z=0}\right) = \dfrac{D_{AB}c_{A0}}{\delta}\left(\dfrac{b_1\cosh b_1 - b_1\Gamma}{\sinh b_1}\right)$	$\left(N_{Az}\right)_{no\,reaction} = \left(-D_{AB}\left.\dfrac{dc_A}{dz}\right\vert_{z=0}\right)_{no\,reaction} = \dfrac{D_{AB}c_{A0}}{\delta}(1-\Gamma)$

Από την προηγούμενη εξίσωση μπορούμε να υπολογίσουμε το φαινομενικό πάχος του υμένα παρουσία χημικής αντίδρασης, θέτοντας επιπλέον Γ=0. Αυτό είναι ισοδύναμο με το να υποθέσουμε μια τιμή για το κλάσμα

$$N^* = \frac{\begin{Bmatrix}\text{ρυθμός απορρόφησης}\\ \text{με πρώτης τάξεως}\\ \text{αντίδραση}\end{Bmatrix}}{\begin{Bmatrix}\text{ρυθμός απορρόφησης}\\ \text{χωρίς αντίδραση και}\\ \text{με } c_{A\delta}=0\end{Bmatrix}} = \left(\frac{b_1}{\sinh b_1}\right)(\cosh b_1 - \Gamma)$$

<u>Διάχυση σε πίπτοντα υγρό υμένα: μεταφορά μάζας με εξαναγκασμένη συναγωγή</u>



Πεδίου ταχυτήτων $v_z(x)$ μέσα στον υμένα: $v_z(x) = v_{max}\left[1-\left(\frac{x}{\delta}\right)^2\right]$

Ισοζύγιο μάζας για το Α:

$$N_{Az}\big|_z W\Delta x - N_{Az}\big|_{z+\Delta z} W\Delta x + N_{Ax}\big|_x W\Delta z - N_{Ax}\big|_{x+\Delta x} W\Delta z = 0$$

όπου W: το πλάτος του υμένα

Γραμμομοριακή παροχή στην z-κατεύθυνση με σταθερό c:

$$N_{Az} = -D_{AB}\frac{\partial c_A}{\partial z} + x_A\left(N_{Az}+N_{Bz}\right) \approx c_A v_z(x)$$

Γραμμομοριακή παροχή στην x-κατεύθυνση : $N_{Ax} = -D_{AB}\frac{\partial c_A}{\partial x} + x_A\left(N_{Ax}+N_{Bx}\right) \approx -D_{AB}\frac{\partial c_A}{\partial x}$

Άρα : $v_{max}\left[1-\left(\frac{x}{\delta}\right)^2\right]\frac{\partial c_A}{\partial z} = D_{AB}\frac{\partial^2 c_A}{\partial x^2}$

ΣΣ1: $c_A = 0$ για $z=0$, ΣΣ2: $c_A = c_{A0}$ για $x=0$, ΣΣ3: $\frac{\partial c_A}{\partial x} = 0$ για $x=\delta$

Αν θεωρήσουμε ότι το βάθος διείσδυσης του Α είναι σχετικά μικρό τότε το Α δεν "αισθάνεται" την παρουσία του στερεού τοίχο για $x=\delta$ και "νομίζει" ότι όλος ο υγρός υμένας κινείται με σταθερή ταχύτητα v_{max}.

Με αυτή την υπόθεση η διαφορική εξίσωση και οι συνοριακές συνθήκες γίνονται: $v_{max}\frac{\partial c_A}{\partial z} = D_{AB}\frac{\partial^2 c_A}{\partial x^2}$

ΣΣ1: $c_A = 0$ για $z=0$, ΣΣ2: $c_A = c_{A0}$ για $x=0$, ΟΣ1: $c_A = 0$ καθώς $x\to\infty$

Άρα : $\frac{c_A}{c_{A0}} = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^{\frac{x}{\sqrt{4D_{AB}z/v_{max}}}} e^{(-\xi^2)}d\xi = 1 - \text{erf}\,\frac{x}{\sqrt{4D_{AB}z/v_{max}}}$ ή $\frac{c_A}{c_{A0}} = \text{erf}_c\,\frac{x}{\sqrt{4D_{AB}z/v_{max}}}$

όπου erf :η συνάρτηση λάθους ενώ $y = 1-\text{erf}$: η *συμπληρωματική συνάρτηση λάθους*

<u>Ολοκλήρωση της γραμμομοριακής παροχής σε όλο το μήκος του υμένα</u>

Τοπική γραμμομοριακή παροχή στο επίπεδο x = 0 και στην θέση z : $N_{Ax}(z)\big|_{x=0} = -D_{AB}\frac{\partial c_A}{\partial x}\bigg|_{x=0} = c_{A0}\sqrt{\frac{D_{AB}v_{max}}{\pi z}}$

Τα ολικά γραμμομόρια του Α που μεταφέρονται ανά μονάδα χρόνου από τον αέριο στον υγρό υμένα :

$$W_A = WLc_{A0}\sqrt{\frac{4D_{AB}v_{max}}{\pi L}} = WLc_{A0}\sqrt{\frac{4D_{AB}v_{max}}{\pi L}}\cdot 2\int_0^\infty e^{-\xi^2}\xi\, d\xi = WLc_{A0}\sqrt{\frac{4D_{AB}v_{max}}{\pi L}}$$

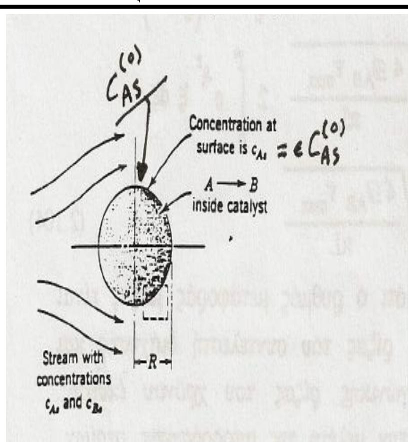
<u>Διάχυση και χημική αντίδραση μέσα σε πορώδη καταλύτη: Συντελεστής αποτελεσματικότητας</u>

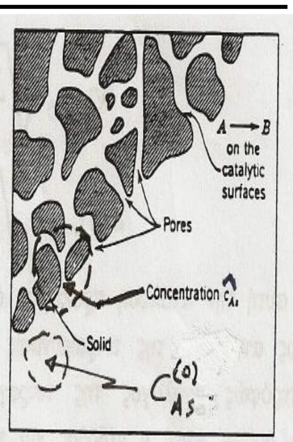
Ισοζύγιο μάζας για το Α σε ένα στοιχειώδες κύτταρο πάχους Δr μέσα σ΄ ένα καταλυτικό σωματίδιο:

$$N_{Ar}\big|_r 4\pi r^2 - N_{Ar}\big|_{r+\Delta r} 4\pi\left(r+\Delta r\right)^2 + R_A 4\pi r^2\Delta r = 0$$

$$\xRightarrow[\Delta r\to 0]{\div 4\pi\Delta r} \frac{d}{dr}\left(r^2 N_{Ar}\right) = r^2 R_A$$

$N_{Ar} = -D_A\frac{dc_A}{dr}$, όπου D_A ο συντ. αποτελεσματικής διαχυτότητας





$$\left.\begin{aligned}&\frac{d}{dr}\left(r^2N_{Ar}\right)=r^2R_A\\&N_{Ar}=-D_A\frac{dc_A}{dr}\end{aligned}\right\}\Rightarrow -D_A\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dc_A}{dr}\right)=R_A \qquad \boxed{D_A:\text{σταθερός}}$$

Σε περίπτωση όπου το A αντιδρά με αντίδραση πρώτης τάξης στην καταλυτική επιφάνεια ($R_A=k_1''\alpha c_A$):

$$D_A\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dc_A}{dr}\right)=k_1''\alpha c_A$$

ΣΣ1: $c_A=c_{As}$ για $r=R$, ΣΣ2: c_A : πεπερασμένο για $r=0$

Για την επίλυση της διαφορικής κάνουμε αλλαγή μεταβλητής : $c_A/c_{As}=f(r)/r$

Άρα : $\dfrac{d^2f}{dr^2}=\left(\dfrac{k_1''\alpha}{D_A}\right)f$, Γενική λύση : $\dfrac{c_A}{c_{As}}=\dfrac{C_1}{r}\cosh\sqrt{\dfrac{k_1''\alpha}{D_A}}\,r+\dfrac{C_2}{r}\sinh\sqrt{\dfrac{k_1''\alpha}{D_A}}\,r$

Με εφαρμογή των συνοριακών συνθηκών: $\dfrac{c_A}{c_{As}}=\left(\dfrac{R}{r}\right)\dfrac{\sinh(\sqrt{k_1''\alpha/D_A}\,r)}{\sinh(\sqrt{k_1''\alpha/D_A}\,R)}$

Γραμμομοριακή ροή : $W_{As}=4\pi R^2N_{As}=-4\pi R^2D_A\left.\dfrac{dc_A}{dr}\right|_{r=R}$

Λύνοντας την παράγωγο του C_A θα έχουμε: $W_{As}=4\pi RD_Ac_{As}\left(1-\sqrt{\dfrac{k_1''\alpha}{D_A}}R\coth\sqrt{\dfrac{k_1''\alpha}{D_A}}R\right)$

Αν η ενεργή καταλυτική επιφάνεια ήταν όλη εκτεθειμένη σε αέριο ρεύμα συγκέντρωση c_{As} τότε το είδος A δεν θα έπρεπε να διαχυθεί μέσα στους πόρους για να αντιδράσει στο εσωτερικό του καταλύτη. Σε αυτή την περίπτωση η γραμμομοριακή ροή είνα

$$\left.\begin{aligned}&W_{A0}=\left(\frac{4}{3}\pi R^3\right)\alpha\left(-k_1''c_{As}\right)\\&W_{As}=4\pi RD_Ac_{As}\left(1-\sqrt{\frac{k_1''\alpha}{D_A}}R\coth\sqrt{\frac{k_1''\alpha}{D_A}}R\right)\end{aligned}\right\}\xrightarrow{\text{τις διαιρώ κατά μέλη}}\boxed{\eta_A=\frac{3}{K^2}\left(K\coth K-1\right)}$$

όπου $K=\sqrt{k_1''\alpha/D_A}\,R$ αδιάσταση ποσότητα

η_A : *συντελεστής αποτελεσματικότητας*

Για σφαιρικό σωματίδιο ακτίνας R ο λόγος του όγκου προς την εξωτερική επιφάνεια είναι : $R/3b$

Για μη σφαιρικά σωματίδια ορίζουμε το R ως εξής: $R_{nonsph}=3\left(\dfrac{V_p}{S_p}\right)$

Διάχυση κατά Knudsen

$Kn=\lambda/d_p$, όπου λ: η μέση ελεύθερη διαδρομή των μορίων του διαχεόμενου αερίου, d_p: η διάμετρος ενός τυπικού πόρου

Αν **Kn<~0.1**→ κανονική μοριακή διάχυση
Αν **Kn>~1**→ υπερισχύει η διάχυση κατά Knudsen
Για **~0.1<Kn<~1** → ενδιάμεση περιοχή (και οι δύο μηχανισμοί συμμετέχουν σημαντικά)
Για υγρά : Kn<<0.1 δεν έχουμε διάχυση Knudsen

Συντελεστής *αυτοδιαχύσεως* για τα αέρια: $\mathcal{D}_{AA*}=\dfrac{1}{3}\lambda_A\bar{u}=\dfrac{1}{3}\lambda_A\sqrt{\dfrac{8k_BT\tilde{N}}{\pi M_A}}$

όπου: $\bar{u}_A$ = μέση ταχύτητα των μορίων του A, k_B = σταθερά του Boltzmann = $1.38066\times10^{-23}\,J/K$

$\tilde{N}$ = αριθμός του Avogadro = 6.02214×10^{26} molecules/kg-mole, T = απόλυτη θερμοκρασία (K)

M_A = μοριακό βάρος του A (kg/kg-mole)

Για διάχυση κατά Knudsen: $\mathcal{D}_{Kn,A}=\dfrac{1}{3}d_p\bar{u}_A=\dfrac{1}{3}d_p\sqrt{\dfrac{8k_B\tilde{N}T}{\pi M_A}}$, όπου d_p :διάμετρος του πόρου ή $\mathcal{D}_{Kn,A} = 4850 d_p \sqrt{\dfrac{T_A}{M_A}}$ $\quad (cm^2/sec)$, $\quad d_p$[=]cm, M_A[=]g/g-mole και T[=] K

Ενδιάμεση Περιοχή, ~0.1<Kn<~1

$\dfrac{1}{\mathcal{D}_{Ae}} = \dfrac{1-\alpha x_A}{\mathcal{D}_{AB}} + \dfrac{1}{\mathcal{D}_{Kn,A}}$, όπου $\mathcal{D}_{Ae}$ = αποτελεσματικός (ή ισοδύναμος) συντελεστής διαχύσεως του Α , $\alpha \equiv 1 + \dfrac{N_{Bx}}{N_{Ax}}$

Στην περίπτωση ισομοριακής αντιδιαχύσεως : $\alpha = 0$ ($N_{Bx} = -N_{Ax}$) : $\dfrac{1}{\mathcal{D}_{Ae}} = \dfrac{1}{\mathcal{D}_{AB}} + \dfrac{1}{\mathcal{D}_{Kn,A}}$

Διάχυση σε πορώδες σώμα: $\mathcal{D}_{Ae} = \dfrac{\varepsilon}{\tau} \mathcal{D}_{Ae}$,όπου ε είναι το πορώδες και τ είναι ο συντελεστής του δαιδαλώδους

Συντελεστής του Δαιδαλώδους ***τ:*** $\tau \equiv \left(\dfrac{L_e}{L}\right)^2$, **Wang και Smith:** $\mathcal{D}_{A,eff} = \dfrac{\varepsilon}{\tau} \displaystyle\int_0^\infty \mathcal{D}_{A,p}(r) f(r) dr$

$\varepsilon = \dfrac{1}{V_t} \displaystyle\int_0^\infty V_p(r) f(r) dr$, όπου V_t : ο ολικός όγκος του πορώδους μέσου,

$V_p(r)$:ο όγκος του πόρου με χαρακτηριστική ακτίνα r

Burganos και Sotirchos: Κάθε πόρος χαρακτηρίζεται από μια αγωγιμότητα: $g = \dfrac{\pi r^2}{\ell} \mathcal{D}_{A,p}$,

r:ακτίνα του πόρου, ℓ :μήκος του πόρου $\mathcal{D}_{A,p} = \mathcal{D}_{\mathcal{A},K_n} = \dfrac{1}{3} d_p \sqrt{\dfrac{8RT}{\pi M_A}}$,

Θεωρία Ισοδύναμου Μέσου: $\displaystyle\int_0^\infty \dfrac{g - g_e}{g + \left(\dfrac{z}{2} - 1\right) g_e} f(g) dg = 0$

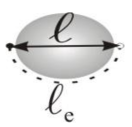
Αποτελεσματικός συντελεστή διαχύσεως: $\mathcal{D}_{A,eff} = \dfrac{1}{\tau} \kappa g_e \ell_p^2$

όπου: κ : αριθμός πόρων ανά μονάδα όγκου, ℓ_p : μήκος πόρων ισοδύναμου δικτύου

τ : συντελεστής του δαιδαλώδους του δικτύου (τ=2 για 2-D δίκτυα και τ=3 για 3-D δίκτυα)

Εκτίμηση του συντελεστή δαιδαλώδους:

$\tau \equiv \left(\dfrac{L_e}{L}\right)^2 = \left(\dfrac{(AB)_e}{(AB)}\right)^2$



$$\tau = \left(\dfrac{n \cdot \ell_e}{n \cdot \ell}\right)^2 = \left(\dfrac{\ell_e}{\ell}\right)^2$$

Για καλά πακτωμένους κόκκους : $\ell \cong d_g$

$$\left.\begin{array}{l} \ell \cong d_g \\ \ell_e \cong \dfrac{\pi}{2} d_g \end{array}\right\} \quad \underline{\tau \approx \dfrac{\pi^2}{4} \cong 2.5}$$

$$\boxed{\frac{d(\alpha^{f(x)})}{dx} = \ln a \cdot \frac{df(x)}{dx} \cdot \alpha^{f(x)}}$$

$$y'' + a_1 y' + a_0 y = 0$$

<u>Χαρακτηριστικό πολυώνυμο:</u> $\lambda^2 + a_1\lambda + a_0 = 0$

$$\boxed{\int a^x dx = \frac{1}{x \ln a} + c}$$

$$\lambda_{1,2} = \frac{-\beta \pm \sqrt{\Delta}}{2\alpha}$$

$$\Delta = \beta^2 - 4\alpha\gamma$$

<u>Δ>0 → 2 πραγματικές λύσεις, άνισες</u>

$$\lambda_{1,2} = \frac{-\beta \pm \sqrt{\Delta}}{2\alpha}$$

$$(\lambda - \lambda_1)(\lambda - \lambda_2) = 0$$

$$y = c_1 e^{\lambda_1 x} + c_2 e^{\lambda_2 x}$$

ειδική περίπτωση: $\lambda_1 = -\lambda_2$

$$y = k_1 \cosh \lambda_1 x + k_2 \sinh \lambda_1 x$$

$$\cosh \lambda_1 x = \frac{1}{2}(e^{\lambda_1 x} + e^{-\lambda_1 x}), \qquad \sinh \lambda_1 x = \frac{1}{2}(e^{\lambda_1 x} - e^{-\lambda_1 x})$$

<u>Δ=0 → 1 διπλή ρίζα</u>

$$\lambda_{1,2} = \frac{-\beta}{2\alpha}$$

$$\lambda_1 = \lambda_2$$

$$y = c_1 e^{\lambda_1 x} + c_2 x e^{\lambda_2 x}$$

<u>Δ<0 →2 μιγαδικές λύσεις</u>

$$\lambda_{1,2} = \frac{-\beta \pm í\sqrt{4\alpha\gamma - \beta^2}}{2\alpha}, \quad í = \sqrt{(-1)}, \ \lambda_1 = \alpha + í\beta, \lambda_2 = \alpha - í\beta$$

$$y = c_1 e^{\alpha x} \cos bx + c_2 e^{\alpha x} \sin bx$$