

بررسی تجربی و شبیه‌سازی فرایند دفع دی اکسید کربن از بستر کربن اکتیو با استفاده از روش المان‌های جزئی

هادی باصری^{۱*}

اطلاعات مقاله	چکیده
دریافت مقاله: ۱۳۹۴/۰۵/۰۶ پذیرش مقاله: ۱۳۹۶/۰۳/۰۷	یکی از مهمترین فرایندهای مورد استفاده در صنایع شیمیایی، فرایندهای جذب و دفع سطحی می‌باشند. در این مقاله ابتدا فرایند دفع دی اکسید کربن را بر روی بستری از کربن اکتیو به صورت تجربی بررسی کرده‌ایم. در مرحله بعد با استفاده از یک هندسه دو بعدی و با روش عددی المان‌های جزئی به کمک نرم‌افزار COMSOL، فرایند دفع دی اکسید کربن را از بستر مورد نظر مدل کرده و اثر برخی از پارامترهای موثر بر فرایند دفع دی اکسید کربن را بررسی کرده‌ایم. برای مدل‌سازی بستر کربن اکتیو در این مقاله تغییرات در هر دو فاز ساکن و متحرک در دو حالت پایا و وابسته به زمان بررسی شده است. نتایج گزارش شده نشان می‌دهند که، ضریب انتقال جرم برای دی اکسید کربن و فلاکس خروجی دی اکسید کربن از ذرات بستر، جزء مهمترین پارامترهای موثر بر این فرایند هستند.
واژگان کلیدی: دفع دی اکسید کربن، بستر کربن اکتیو، شبیه‌سازی عددی، المان‌های محدود، نرم‌افزار COMSOL.	

۱- مقدمه

فرایندهای جذب و دفع مواد مختلف بر روی سطح مواد فعال سطحی یکی از مهمترین فرایندها در صنایع دارویی [۴-۱]، صنایع غذایی [۵]، صنایع پتروشیمی [۹-۶] و بسیاری از صنایع دیگر می‌باشند. در این فرایندها ابتدا ماده یا دسته‌ای از مواد شیمیایی را در معرض جاذب‌های سطحی قرار داده تا مواد مورد نظر جذب سطوح جاذب شوند، سپس با تغییر شرایط عملیاتی سیستم مانند کاهش فشار روی سیستم یا افزایش دمای سیستم، مواد جذب شده از روی سطوح جاذب دفع می‌شوند.

یکی از مهم‌ترین مواد فعال سطحی کربن اکتیو است. این ماده مهم از سالیان دور مورد توجه محققین و صنایع بوده و هم اکنون نیز جزء کاربردی‌ترین مواد جاذب به حساب می‌آید [۱۰ و ۱۱]. افزون بر آزمایش‌های بسیار زیادی که بر روی این ماده انجام شده است، محققین مختلف برای درک بهتر فرایندهای جذب و دفع از روش‌های مختلف مدل‌سازی بر روی کربن اکتیو استفاده کرده‌اند [۱۲ و ۱۳]. این محققین با استفاده از مدل‌سازی فرایندهای جذب و دفع بر روی کربن اکتیو، سعی کرده‌اند تا تاثیر

پارامترهای مختلفی چون تخلخل و غیره را بر روی سرعت و مقدار جذب مواد بررسی کنند [۱۲ و ۱۴]. در این مقاله فرایند دفع دی اکسید کربن از بستر کربن اکتیوی بررسی شده و تاثیر پارامترهای عملیاتی مختلف بر روی سرعت دفع و غلظت دی اکسید کربن موجود در فازهای مختلف مطالعه شده است. برای بررسی فرایند دفع از بستر مورد نظر، در بخش تئوری، یک بستر فرضی با ۱۲ ذره در نظر گرفته شده و معادلات حرکت و انتقال جرم حاکم بر این سیستم در فازهای ساکن و متحرک نوشته شده و سپس این معادلات به شکل عددی و با استفاده از روش المان‌های محدود حل شده‌اند. برای حل معادلات حاکم بر این سیستم از نرم‌افزار COMSOL (نسخه ۴/۲) استفاده شده است. در بخش تجربی، بستری از کربن اکتیو با ابعادی مشابه مدل مورد نظر ساخته شده است و با طراحی آزمایش‌های مورد نیاز، فرایند دفع دی اکسید کربن از بستر کربن اکتیوی ساخته شده، بررسی شده است. نتایج ارائه شده در این مقاله نشان می‌دهند که می‌توان با استفاده از مدل‌سازی عددی بستر به مطالعه تاثیر پارامترهای مختلف بر روی غلظت بستر و سرعت دفع مواد از بستر

* پست الکترونیک نویسنده مسئول: baseri@du.ac.ir

۱. استادیار، دانشکده شیمی، دانشگاه دامغان، دامغان، ایران

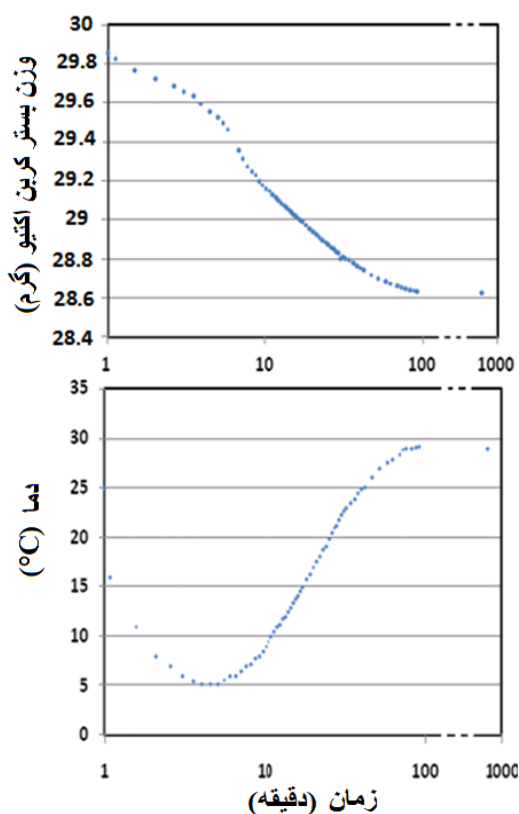
پرداخت.

نرم‌افزار COMSOL نرم‌افزاری قدرتمند برای شبیه‌سازی فرایندهای مختلف با کاربردهای صنعتی است که در زمینه های مختلف مهندسی مانند انتقال حرارت، انتقال جرم، مکانیک سیالات، الکترونیک و غیره استفاده می‌شود. به دلیل کاربردهای زیاد و دقت قابل توجه در محاسبات، این نرم‌افزار روز به روز بیشتر مورد توجه محققین قرار می‌گیرد و شبیه‌سازی فرایندهای زیادی در مقالات مختلف توسط این نرم افزار انجام شده است [۱۵ و ۱۶]. در این مقاله از نرم افزار COMSOL برای شبیه‌سازی نتایج و بهینه‌سازی و نتیجه‌گیری نهایی از داده‌های تجربی استفاده شده است.

۲- تجربی

برای بررسی سرعت فرایند دفع دی اکسید کربن از بستر کربن اکتیو ابتدا حدود ۲۸ گرم از دانه‌های کربن اکتیو با متوسط اندازه ذرات بین ۰/۸ الی ۱ سانتی‌متر و دانسیته حدود ۰/۶ گرم بر سانتی متر مکعب را به درون یک ظرف استوانه‌ای از جنس فولاد ضد زنگ و با قطر حدود ۴ سانتی متر ریخته‌ایم. تخلخل بستر کربن اکتیوی ساخته شده حدود ۰/۷ می باشد. ابتدا و انتهای ظرف مورد نظر را با توری فلزی با قطر منافذ حدود ۰/۵ میلی‌متر مسدود کرده ایم. برای انجام آزمایش‌ها ظرف حاوی کربن اکتیو را برای مدت زمان بیش از ۵ ساعت به درون یک مخزن تحت فشار دی اکسید کربن که دما و فشار آن توسط سیستم های کنترلی بر روی یک مقدار دلخواه کنترل می‌شوند، قرار داده‌ایم. با این کار مقدار مشخصی دی اکسید کربن درون ذرات کربن اکتیو جذب می‌شود. در مرحله بعد و برای بررسی سرعت دفع دی اکسید کربن، ظرف مورد نظر را از درون مخزن تحت فشار خارج کرده و با کمک یک دمنده کوچک جریان هوا را در فشار اتمسفریک و با سرعت حدود ۰/۰۵ متر بر ثانیه از پایین وارد ظرف کرده‌ایم (دمای هوای محیط ۳۰°C بوده است). در این مرحله ظرف و محتویات آن را با گذشت زمان به صورت مداوم توزین کرده‌ایم. کاهش وزن ظرف و محتویات آن نشان‌دهنده خروج یا دفع دی اکسید کربن از درون بستر کربن اکتیوی می‌باشد. برای بررسی دقیق‌تر، یک دماسنج نیز به شکلی در این ظرف قرار داده شد که مخزن آن در داخل بستر کربن اکتیوی قرار داشته و دمای بستر را با گذشت زمان یادداشت کرده‌ایم. شکل‌های (۱) و (۲) نمودارهای مربوط به کاهش وزن و

تغییر دمای بستر کربن اکتیو را در اثر خروج دی اکسید کربن از آن نشان می‌دهند. این شکل‌ها که در شرایط جذب متفاوتی رسم شده‌اند، نشان می‌دهند که در دمای ۴۲°C و فشار ۵۲ بار حدود ۱ گرم دی اکسید کربن بر روی ۳۰ گرم کربن اکتیو جذب شده است و این در حالی است که در دمای ۵۵°C حدود ۰/۶۷ گرم دی اکسید کربن بر روی ۳۰ گرم کربن اکتیو جذب شده است. همچنین شیب نمودارهای دما و وزن در این شکل‌ها نشان می‌دهند که در زمان‌های حدود ۸ دقیقه از ابتدای فرایند دفع، شرایط غیر پایا بوده است و پس از آن شرایط به حالت پایا رسیده است. برای تخمین زمان شرایط غیر پایا از روی شکل نمودارها، مدت زمانی که شیب نمودارهای تغییر دما و تغییر وزن بستر ثابت مانده است را در شرایط پایا فرض کرده‌ایم.



شکل ۱: کاهش وزن کربن اکتیو و تغییر دمای آن در اثر خروج دی اکسید کربن از بستر کربن اکتیوی (فرایند جذب دی اکسید کربن در دمای ۴۲°C و فشار ۵۲ بار بوده است).

۳- مدل‌سازی

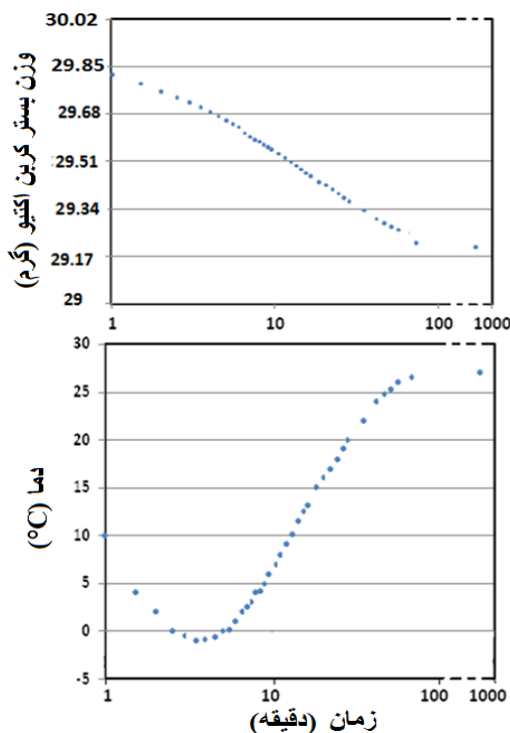
برای شبیه‌سازی فرایند دفع دی اکسید کربن از بستر کربن اکتیو از روش عددی المان‌های محدود استفاده شده است. در این مدل‌سازی نرم‌افزار تجاری Comsol (نسخه ۴/۲) به کار رفته است. برای انجام این شبیه‌سازی از یک هندسه

مرحله نخست فرض شده که غلظت دی اکسید کربن درون ذرات کربن اکتیو موجود در بستر برابر با یک مقدار بیشینه باشد. با شروع فرایند دفع، انتقال جرم دی اکسید کربن از ذرات فاز ساکن به درون فاز متحرک موجب کاهش غلظت درون ذرات بستر و افزایش غلظت در فاز متحرک می‌شود. برای بررسی فرایند دفع، کل زمان دفع به دو بخش دسته بندی شده است. بخش اول مرحله‌ای است که غلظت دی اکسید کربن در مرکز ذرات ثابت در نظر گرفته شده و با گذشت زمان، انتقال جرم موجب افزایش گرادیان غلظت درون ذرات می‌شود. در مرحله دوم، غلظت در مرکز ذرات فاز جامد تغییر کرده و با گذشت زمان کاهش می‌یابد. با گذشت زمان و در انتهای مرحله دوم غلظت دی اکسید کربن در مرکز ذرات به صفر میل کرده و در نتیجه فرایند دفع پایان می‌یابد.

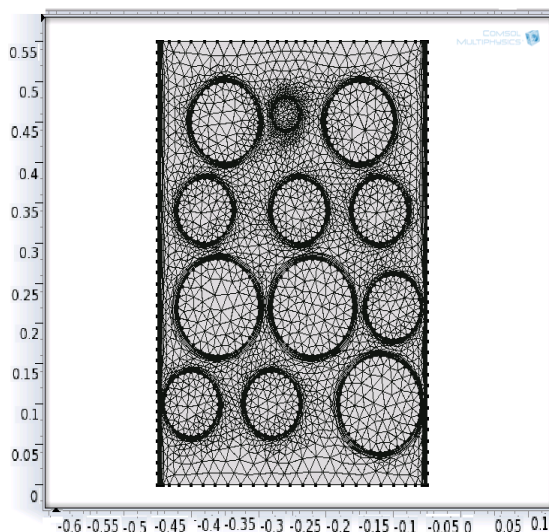
برای بررسی تغییرات غلظت فاز ساکن در طول فرایند دفع از مدل انتقال اجزاء در محیط متخلخل^۱ در جعبه ابزار نرم‌افزار کامسول استفاده شده که معادلات مربوط به آن در پیوست ارائه شده است.

برای مطالعه بر روی فاز متحرک درون بستر، این‌گونه فرض شده است که هوا به عنوان سیال حامل و با سرعت ۰/۰۵ متر بر ثانیه از پایین به بالا درون بستر کربن اکتیو جریان دارد. دما و فشار سیستم ثابت در نظر گرفته شده است ولی با عبور هوا از بین دانه‌های بستر، سرعت موضعی آن تغییر می‌کند و همچنین با نفوذ دی اکسید کربن از فاز ساکن به درون هوای عبوری از بستر، غلظت دی اکسید کربن درون هوا افزایش می‌یابد. برای بررسی میدان‌های سرعت و تغییرات غلظت درون فاز متحرک از مدل‌های جریان متلاطم $k-\epsilon^2$ و انتقال اجزاء با غلظت کم^۳ موجود در جعبه ابزار نرم‌افزار کامسول استفاده شده است. در پیوست، معادلات مربوط به این مدل‌ها به اختصار ارائه شده است. همان‌طور که در بخش تجربی بیان شد. بخشی از فرایند دفع دی اکسید کربن در حالت کاملاً غیر پایا انجام گرفته است. برای مدل‌سازی بهتر این فرایند، حالت ناپایا نیز در این مقاله بررسی شده است. برای انجام این محاسبات، مدل قبل در حالت وابسته به زمان^۴ نیز حل شده و تغییرات میدان‌های سرعت و غلظت فاز متحرک در مدت زمان حالت غیر پایا بررسی شده که در بخش‌های بعدی ارائه می‌شود.

دو بعدی استفاده شده و بستر کربن اکتیو به صورت دوازده ذره دایره شکل با قطرهای ۱۰ میلی‌متر و کمتر و با تخلخل ۰/۷ فرض شده است. شکل (۳) نمایی از بستر شبیه‌سازی شده را نشان می‌دهد.



شکل ۲: کاهش وزن کربن اکتیو و تغییر دمای آن در اثر خروج دی اکسید کربن از بستر کربن اکتیوی (فرایند جذب دی اکسید کربن در دمای ۵۵°C و فشار ۵۲ بار بوده است).



شکل ۳: نمایی از بستر حاوی دانه‌های کربن اکتیو

برای انجام این شبیه‌سازی فرایندهای مربوطه در هر دو فاز ساکن و متحرک درون بستر مدل‌سازی شده است. در

³ Transport of Diluted Species

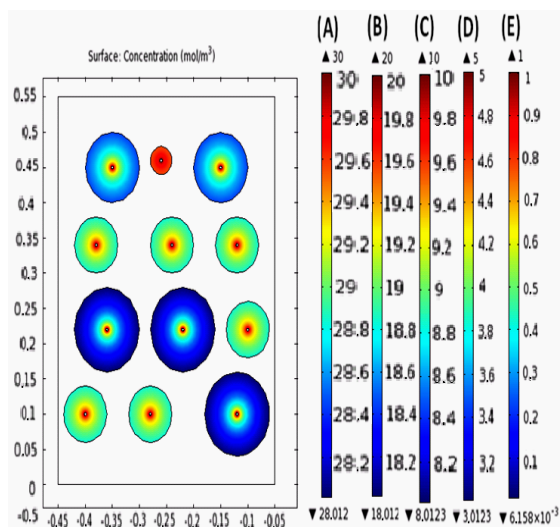
⁴ Time dependent

¹ Species Transport in porous Media

² Turbulent Flow k-ε model

می‌شود. در مراحل ابتدایی فرایند، می‌توان فرض کرد که غلظت دی اکسید کربن در مرکز ذرات ثابت است و با گذشت زمان غلظت دی اکسید کربن در مرزهای ذرات کاهش یافته و این کاهش موجب افزایش گرادیان غلظت درون ذرات می‌شود. اما با گذشت زمان به مرحله‌ای می‌رسیم که غلظت دی اکسید کربن در مرکز ذرات بستر نیز کاهش یافته و این فرایند تا خروج کامل دی اکسید کربن از درون ذرات بستر ادامه می‌یابد.

فلاکس دی اکسید کربن خروجی از ذرات بستر، یکی از پارامترهای تاثیرگذار بر این سیستم می‌باشد. افزایش این عدد موجب کاهش سریع تر غلظت دی اکسید کربن درون ذرات بستر می‌شود و با فرض ثابت ماندن غلظت دی اکسید کربن در مرکز ذرات، همان‌طور که در شکل (۴) مشاهده می‌شود، افزایش شدت جریان دی اکسید کربن خروجی از ذرات بستر (F) از 0.00005 تا 0.0005 مول بر ثانیه متر مربع، موجب کاهش غلظت دی اکسید کربن در سطح خارجی ذرات بستر از حدود 29 تا 20 مول بر متر مکعب شده است.



شکل (۵): تغییر غلظت دی اکسید کربن در فاز ساکن بستر در

مقادیر مختلف غلظت دی اکسید کربن در مرکز ذرات

$$(A): C_0 = 30 \text{ mol/m}^3, (B): C_0 = 20 \text{ mol/m}^3$$

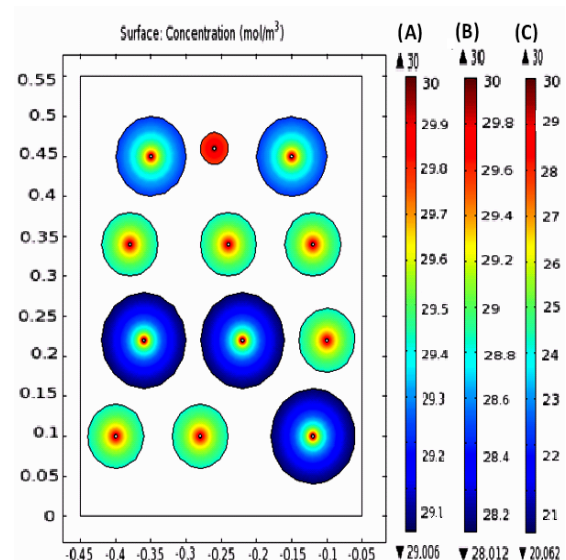
$$(C): C_0 = 10 \text{ mol/m}^3, (D): C_0 = 5 \text{ mol/m}^3$$

$$(E): C_0 = 1 \text{ mol/m}^3$$

همان‌طور که قبلاً اشاره شد، با گذشت زمان غلظت دی اکسید کربن در مرکز ذرات بستر کاهش می‌یابد. این کاهش غلظت موجب کاهش گرادیان غلظت درون ذرات بستر و در نتیجه کاهش شدت انتقال جرم از فاز ساکن به فاز متحرک

برای انجام این مدل‌سازی از مش‌بندی معمول (Normal) با حدود 20000 نقطه استفاده شده و زمان انجام هر محاسبه با استفاده از یک پردازنده 5 هسته‌ای با سرعت $5/2$ GHz حدود 15 دقیقه بوده است.

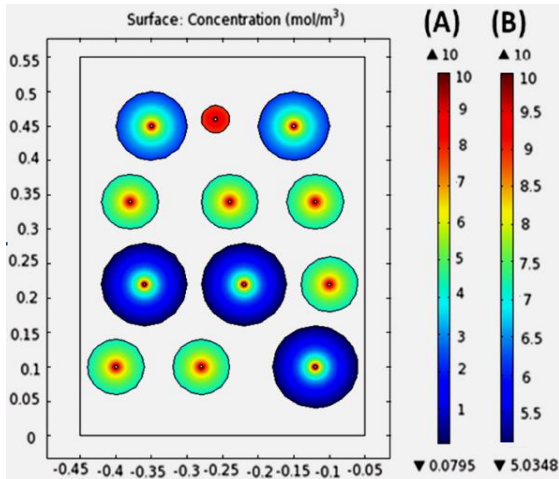
برای انتخاب نوع مش‌بندی از حالت‌های مختلف با تعداد مش‌بندی متفاوت (بیشتر و کمتر از حالت معمول) استفاده شد و با توجه به زمان پردازش و دقت نتایج به دست آمده، حالت مش‌بندی معمول انتخاب شد.



شکل (۴): تغییر غلظت دی اکسید کربن درون فاز ساکن بستر در مقادیر مختلف فلاکس دی اکسید کربن خروجی از جداره خارجی ذرات (A): $F = 0.00005 \text{ mol/s.m}^3$; (B): $F = 0.0005 \text{ mol/s.m}^3$; (C): $F = 0.005 \text{ mol/s.m}^3$

۴- نتایج

در فرایند دفع دی اکسید کربن از ذرات موجود درون بستر کربن اکتیوی، اثر پارامترهای مختلف بررسی شده است. در فاز ساکن اثر پارامترهایی چون غلظت دی اکسید کربن در مرکز ذرات (C_0)، شدت جریان دی اکسید کربن خروجی از سطح خارجی ذرات بستر (F) و ضریب انتقال جرم دی اکسید کربن درون ذرات بستر (D_p) (با جنس کربن اکتیو) بر روی تغییر غلظت دی اکسید کربن درون ذرات بستر مطالعه شده است. برای مطالعه پارامترهای مورد نظر، فرض شده است که ابتدا غلظت دی اکسید کربن درون ذرات بستر ثابت و برابر یک مقدار بیشینه مشخص باشد. با شروع فرایند دفع، مولکول‌های دی اکسید کربن از درون ذرات بستر به خارج ذرات (در فاز متحرک) نفوذ می‌کنند و این نفوذ موجب ایجاد یک گرادیان غلظت درون ذرات بستر

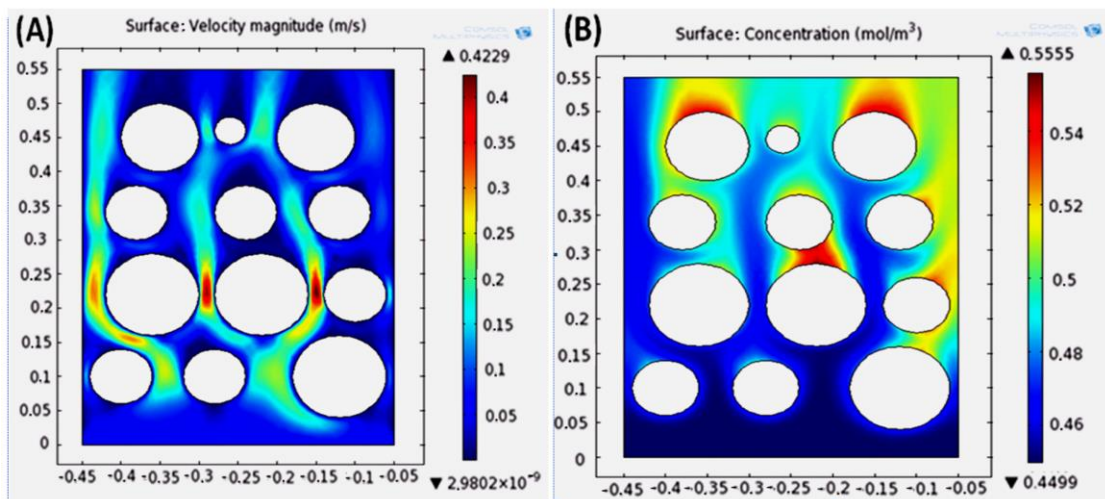


شکل ۶: تغییر غلظت دی اکسید کربن درون ذرات فاز ساکن بستر در مقادیر مختلف ضریب پخش (انتقال جرم)

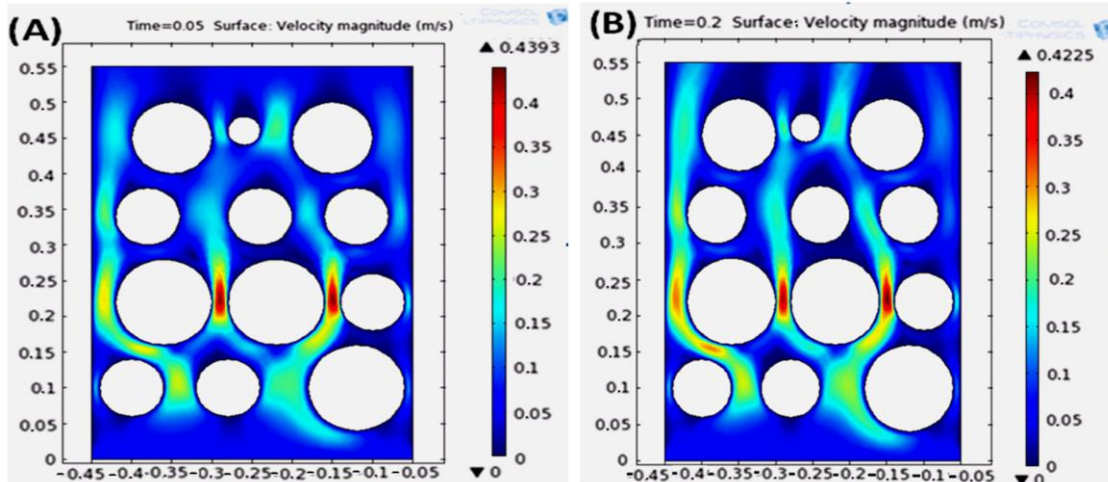
(A): $D_d = 0.0795 \text{ mol/s.m}^2$

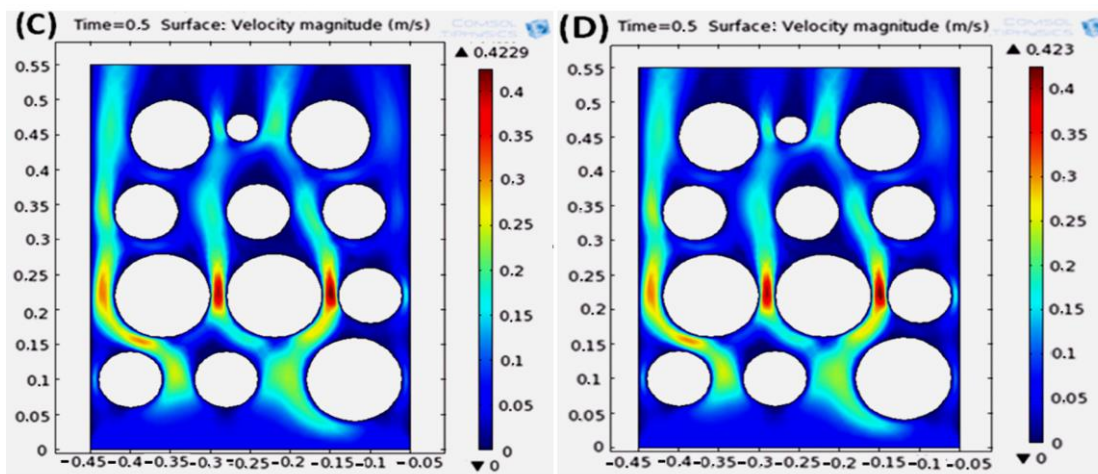
(B): $D_d = 5.0348 \text{ mol/s.m}^2$

می‌شود. شکل (۵) تغییرات گرادیان غلظت دی اکسید کربن درون ذرات بستر را نشان می‌دهد (به ازای غلظت‌های مختلف دی اکسید کربن در مرکز ذرات بستر). بر اساس نتایج ارائه شده در این شکل با کاهش غلظت دی اکسید کربن در مرکز ذرات از حدود ۳۰ تا ۱ مول بر متر مکعب، غلظت در سطح خارجی ذرات از حدود ۲۸ تا حدود ۰ مول بر متر مکعب کاهش یافته است. لازم به ذکر است که سایر پارامترهای موثر بر سیستم در شکل (۵) ثابت در نظر گرفته شده است. ضریب پخش یا ضریب نفوذ دی اکسید کربن درون ذرات بستر، سومین پارامتر تاثیر گذار بر غلظت دی اکسید کربن درون ذرات بستر است. همان‌طور که در شکل (۶) مشاهده می‌شود، با دو برابر شدن ضریب نفوذ دی اکسید کربن، گرادیان غلظت آن درون ذرات بستر به شکل چشم‌گیری کاهش یافته است.

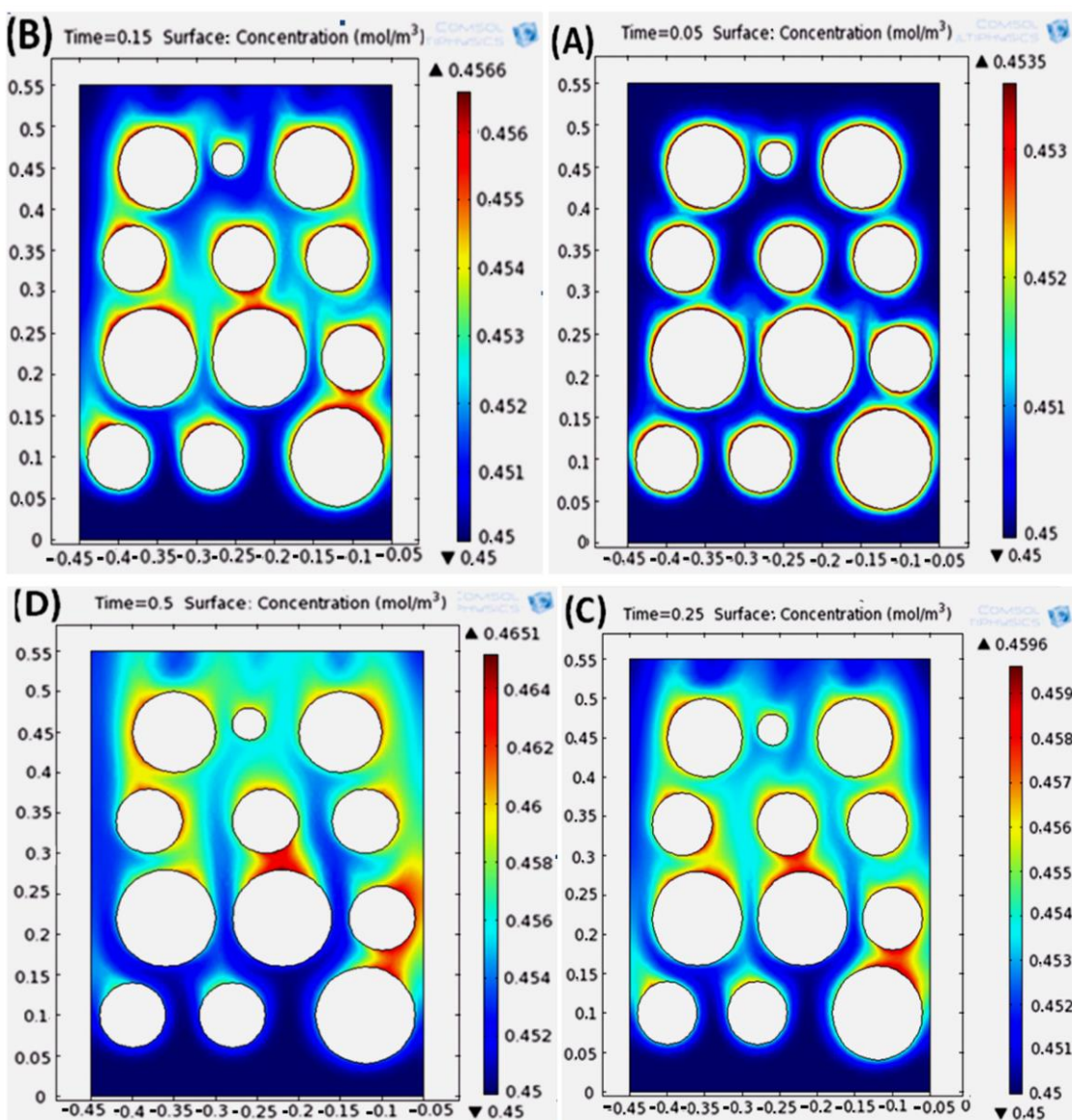


شکل ۷: (A) تغییرات میدان سرعت و (B) تغییرات غلظت درون فاز متحرک در فرایند دفع دی اکسید کربن از بستر کربن اکتیو





شکل ۸: تغییرات میدان سرعت فاز متحرک درون بستر با گذشت زمان و در بازه زمانی که سیستم غیر پایا می‌باشد. (A) بازه زمانی ۰/۰۵ زمان حالت پایا، (B) بازه زمانی ۰/۲ زمان حالت پایا، (C) بازه زمانی ۰/۴ زمان حالت پایا و (D) بازه زمانی ۰/۵ زمان حالت پایا

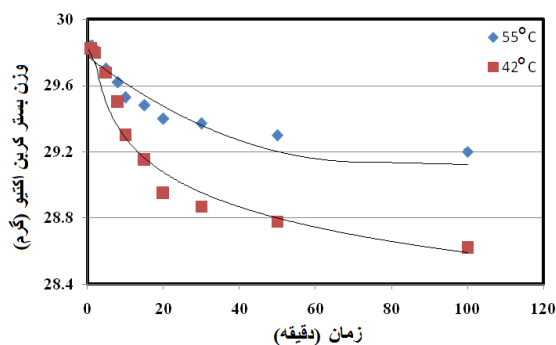


شکل ۹: تغییرات غلظت فاز متحرک درون بستر با گذشت زمان و در بازه زمانی که سیستم غیر پایا می‌باشد. (A) بازه زمانی ۰/۵ زمان حالت پایا، (B) بازه زمانی ۰/۱۵ زمان حالت پایا، (C) بازه زمانی ۰/۲۵ زمان حالت پایا و (D) بازه زمانی ۰/۵۰ زمان حالت پایا

غلظت در شرایط غیرپایا می‌پردازیم.

شکل (۸) تغییرات میدان سرعت فاز متحرک را درون بستر و با گذشت زمان نشان می‌دهد. همان‌طور که در این شکل دیده می‌شود، تغییرات میدان سرعت در ابتدای فرایند بسیار سریع است ولی با گذشت زمان سرعت این تغییرات کم شده و این کاهش تا جایی ادامه می‌یابد که در انتهای بازه زمانی حالت غیرپایا، تغییرات میدان سرعت بسیار ناچیز بوده و قابل مشاهده نمی‌باشد. تغییرات غلظت فاز متحرک درون بستر جامد و در طول زمان (در بازه‌های زمانی قبل از زمان حالت پایا) در شکل (۹) نشان داده شده است.

همان‌طور که در این شکل مشاهده می‌شود، تغییرات غلظت در بازه‌های زمانی قبل از زمان حالت پایا نیز شبیه به تغییرات میدان سرعت است. به عبارت دیگر در ابتدای فرایند دفع، تغییرات غلظت فاز متحرک بسیار سریع می‌باشد ولی سرعت این تغییرات با گذشت زمان به شدت کاهش یافته است.



شکل ۱۰: مقایسه میان داده‌های تجربی و نتیجه مدل‌سازی، نقاط نشان‌دهنده داده‌های تجربی و خطوط نشان‌دهنده نتایج مدل‌سازی با روش المان‌های جزئی می‌باشند

۵- نتیجه‌گیری

در این مقاله فرایند دفع دی‌اکسید کربن از بستری حاوی کربن اکتیو بررسی شده است. برای انجام این مطالعه ضمن انجام آزمایش از مدل‌سازی عددی با روش المان‌های جزئی و با کمک نرم‌افزار Comsol استفاده شده است. برای بررسی صحت و دقت مدل‌سازی انجام شده در این مقاله، نتایج حاصل از مدل‌سازی را با نتایج تجربی مقایسه کرده ایم. مقایسه میان داده‌های تجربی و نتایج محاسبات درون شکل (۱۰) نشان داده شده است. بر اساس نتایج ارائه شده در این شکل، مدل ارائه شده دارای صحت نسبتاً مناسبی می‌باشد و با افزایش دما از ۴۵ تا ۵۵°C، انحراف میان داده‌های تجربی و نتایج محاسبات افزایش یافته است.

این پدیده نشان‌دهنده آن است که با افزایش ضریب نفوذ، سرعت انتقال جرم درون ذرات بستر افزایش یافته و در نتیجه گرادیان غلظت کاهش یافته است. تغییرات غلظت درون فاز متحرک و همچنین پارامترهای تاثیرگذار بر این فاز از مهمترین مباحث مربوط به مدل‌سازی فرایند دفع سطحی می‌باشند. در مدل‌سازی فاز متحرک، تغییرات سرعت فاز متحرک درون بستر جامد بسیار مهم و اثرگذار است. زیرا سرعت فاز متحرک از سویی بر روی زمان ماند این فاز درون بستر تاثیر گذاشته و از سویی دیگر موجب تغییر در گرادیان غلظت می‌شود. از این رو در این مقاله سرعت فاز متحرک نیز به همراه غلظت آن بررسی شده است.

شکل (A-۷) تغییرات میدان سرعت را درون بستر جامد نشان می‌دهد. برای بررسی میدان‌های سرعت و غلظت درون فاز متحرک فرض شده است که هوا با غلظت اولیه ۰/۴۵ مول بر متر مکعب و با سرعت اولیه ۰/۰۵ متر بر ثانیه (در خارج از بستر) از پایین بستر وارد آن می‌شود. با عبور هوا از میان ذرات بستر، به دلیل تغییر سطح مقطع هوای ورودی، سرعت آن در بعضی از بخش‌ها تا حدود ۱۰ برابر افزایش می‌یابد. میدان سرعت نشان داده شده در شکل (A-۷) برای تخمین تغییرات غلظت درون فاز متحرک مورد استفاده قرار گرفته است و نتایج به دست آمده از آن در شکل (B-۷) ارائه شده است. برای انجام محاسبات مربوط به این شکل‌ها سایر پارامترهای موثر بر فرایند ثابت فرض شده است. به عنوان نمونه غلظت در مرکز دانه‌های جامد $C_0 = 10 \text{ mol/m}^3$ و شدت جریان دی‌اکسید کربن ورودی به فاز متحرک (از دانه‌های بستر) $F = 0.00005 \text{ mol/s.m}^2$ در نظر گرفته شده است. در فرایندهای دفع مواد از درون بسترهای جامد و به خصوص برای حالات غیرپیوسته، نمی‌توان سیستم را به صورت کامل در شرایط پایا و با جریان‌های کاملاً توسعه یافته فرض کرد. این حالت به خصوص در شرایطی پیش می‌آید که زمان کلی انجام فرایند نسبتاً کوتاه باشد. در این گونه موارد بخش قابل توجهی از زمان دفع مواد به صورت غیرپایا و با میدان‌های سرعت و غلظت متغیر می‌باشد. همان‌گونه که در شکل‌های (۱) و (۲) بخش تجربی این مقاله نشان داده شده است، در ابتدا و انتهای فرایند که شیب نمودارها متغیر می‌باشد سیستم در حالت غیرپایا قرار دارد. در ادامه این بخش به بررسی میدان‌های سرعت و

مربوط به این معادلات عبارت‌اند از:

$$\sigma_k = 1.4, \quad C_\mu = 0.09, \quad C_{C2} = 1.9, \quad C_{C1} = 1.5$$

$$K_\nu = 0.41, \quad \sigma_c = 1.5$$

۶- تقدیر و تشکر

بدین وسیله از آقای مهندس مهدیار قاسمی دره‌نایی بابت همکاری در تهیه نسخه نرم‌افزار Comsol Multiphysics تشکر می‌شود.

خطای استاندارد نسبی میان داده‌های تجربی و نتایج آزمایشگاهی در حدود ۹٪ می‌باشد.

نتایج ارائه شده در این مقاله نشان می‌دهد که برای طراحی و بهینه‌سازی فرایندهای استخراج از فاز جامد و به خصوص فرایندهای جذب و دفع از مواد جاذب، می‌تواند از مدل ارائه شده استفاده کرد.

۶- پیوست

معادلات مورد استفاده در مدل انتقال اجزاء در محیط متخلخل (فاز جامد) [۱۵]:

$$\nabla \cdot \Gamma_j + u \cdot \nabla C_j = R_j + S_j \quad (1)$$

$$N_j = \Gamma_j + u C_j = - (D_{D,j} + D_{e,j}) \nabla C_j + u C_j \quad (2)$$

معادلات استفاده شده در مدل انتقال اجزاء با غلظت کم (فاز متحرک):

$$\nabla \cdot (-D_j \nabla C_j) + u \cdot \nabla C_j = R_j \quad (3)$$

$$N_j = -D_j \nabla C_j + u C_j \quad (4)$$

در این معادلات C غلظت اجزاء، u سرعت سیال، D ضریب انتقال جرم، R سرعت تولید یا مصرف یک جزء و N شار انتقال جرم می‌باشد.

معادلات به کار رفته در مدل جریان متلاطم $k-\epsilon$ (فاز متحرک) [۱۶ و ۱۷]:

$$\rho(u, \nabla)u = \nabla \cdot \left[-pI + (\mu + \mu_\tau)(\nabla u + (\nabla u)^\tau) - \frac{2}{3} \rho k I \right] + F \quad (5)$$

$$\rho(u, \nabla)\epsilon = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_\tau}{\sigma_c} \right) \nabla \epsilon \right] + C_{c1} \frac{\epsilon}{k} P_k - C_{c2} \rho \frac{\epsilon^2}{k} f_c(\rho, \mu, k, \epsilon, l_w), \quad \epsilon = ep \quad (6)$$

$$\mu_\tau = \rho C_\mu \frac{k^2}{\epsilon} f_u(\rho, \mu, k, \epsilon, l_w) \quad (7)$$

$$P_k = \mu_\tau [\nabla u : (\nabla u + (\nabla u)^\tau)]$$

$$\nabla G \cdot \nabla G + \sigma_w G (\nabla \cdot \nabla G) = (1 + 2\sigma_w) G^4,$$

$$l_w = \frac{1}{G} - \frac{t_{ref}}{2} \quad (8)$$

$$\rho \nabla \cdot u = 0$$

$$\rho(u, \nabla)k = \nabla \cdot \left[\left(\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_k} \right) \nabla k \right] + P_k - \rho \epsilon \quad (9)$$

در این معادلات u سرعت سیال در نقطه مشخص، ρ دانسیته سیال و μ ویسکوزیته می‌باشد. همچنین ثوابت

۷- مراجع

- [1] S. Álvarez-Torrellas, A. Rodríguez, G. Ovejero, J. García, "Comparative adsorption performance of ibuprofen and tetracycline from aqueous solution by carbonaceous materials", *Chemical Engineering Journal*, Vol. 283, 2016, pp. 936-947.
- [2] D. Fernández-Calviño, A. Bermúdez-Couso, M. Arias-Estévez, J.C. Nóvoa-Muñoz, M.J. Fernández-Sanjurjo, E. Álvarez-Rodríguez, A. Núñez-Delgado, "Competitive adsorption/desorption of tetracycline, oxytetracycline and chlortetracycline on two acid soils: Stirred flow chamber experiments", *Chemosphere*, Vol. 134, 2015, pp. 361-366.
- [3] A. Tamayo, M. Alejandra Mazo, R. Ruiz-Caro, A. Martín-Illana, L. Miguel Bedoya, M.D. Veiga-Ochoa, J. Rubio, "Mesoporous silicon oxycarbide materials for controlled drug delivery systems", *Chemical Engineering Journal*, Vol. 280, 2015, pp. 165-174.
- [4] L. Gu, X. He, Z. Wu, "Mesoporous hydroxyapatite: Preparation, drug adsorption, and release properties", *Materials Chemistry and Physics*, Vol. 148, No. 1-2, 2014, pp. 153-158.
- [5] K. Hiromori, N. Shibasaki-Kitakawa, K. Nakashima, T. Yonemoto, "Novel simple process for tocopherols selective recovery from vegetable oils by adsorption and desorption with an anion-exchange resin", *Food Chemistry*, Vol. 194, 2016, pp. 1-5.
- [6] H.b. Fang, J.t. Zhao, Y.t. Fang, J.j. Huang, Y. Wang, "Selective oxidation of hydrogen sulfide to sulfur over activated carbon-supported metal oxides", *Fuel*, Vol. 108, 2013, pp. 143-148.
- [7] B.C. Bai, E.A. Kim, C.W. Lee, Y.S. Lee, J.S. Im, "Effects of surface chemical properties of activated carbon fibers modified by liquid oxidation for CO₂ adsorption", *Applied Surface Science*, Vol. 353, 2015, pp. 158-164.
- [8] J. Kim, M. Yoon, H. Yang, J. Jo, D. Han, Y.J. Jeon, S. Cho, "Enrichment and purification of marine polyphenol phlorotannins using macroporous adsorption resins", *Food Chemistry*, Vol. 162, 2014, pp. 135-142.
- [9] X.J. Liu, Y.F. Shi, M.A. Kalbassi, R. Underwood, Y.S. Liu, "A comprehensive description of water vapor equilibriums on alumina F-200: Adsorption, desorption, and H₂O/CO₂ binary adsorption", *Separation and Purification Technology*, Vol. 133, 2014, pp. 276-281.
- [10] M. Kacem, M. Pellerano, A. Delebarre, "Pressure swing adsorption for CO₂/N₂ and CO₂/CH₄ separation: Comparison between activated carbons and zeolites performances", *Fuel Processing Technology*, Vol. 138, 2015, pp. 271-283.
- [11] A. Alabadi, S. Razzaque, Y. Yang, S. Chen, B. Tan, "Highly porous activated carbon materials from carbonized biomass with high CO₂ capturing capacity", *Chemical Engineering Journal*, Vol. 281, 2015, pp. 606-612.
- [12] F.J. García-Mateos, R. Ruiz-Rosas, M.D. Marqués, L.M. Cotoruelo, J. Rodríguez-Mirasol, T. Cordero, "Removal of paracetamol on biomass-derived activated carbon: Modeling the fixed bed breakthrough curves using batch adsorption experiments", *Chemical Engineering Journal*, Vol. 279, 2015, pp. 18-30.
- [13] P. Iovino, S. Canzano, S. Capasso, A. Erto, D. Musmarra, "A modeling analysis for the assessment of ibuprofen adsorption mechanism onto activated carbons", *Chemical Engineering Journal*, Vol. 277, 2015, pp. 360-367.
- [14] N. Díez, P. Álvarez, M. Granda, C. Blanco, R. Santamaría, R. Menéndez, "CO₂ adsorption capacity and kinetics in nitrogen-enriched activated carbon fibers prepared by different methods", *Chemical Engineering Journal*, Vol. 281, 2015, pp. 704-712.
- [15] D. Salvi, D. Boldor, J. Ortego, G.M. Aita, C.M. Sabliov, "Numerical Modeling of Continuous Flow Microwave Heating: A Critical Comparison of COMSOL and ANSYS", *Journal of Microwave Power and Electromagnetic Energy*, Vol. 44, No. 4, 2010, pp. 187-197.
- [۱۶] م. جعفری راد، ر. آذین، ش. عصفوری، ر. فاتحی، "شبیه‌سازی جابجایی طبیعی در فرایند دفع گازهای اسیدی به سازند آبد"، *پژوهش نفت*، دوره ۲۴، شماره ۷۷، ۱۳۹۳، صفحه ۱۰۹-۱۰۰.
- [15] A.L. Ljung, T. Staffan Lundström, K. Tano, "SIMULATION OF HEAT TRANSFER AND FLUID FLOW IN A POROUS BED OF IRON ORE PELLETS DURING UP- DRAUGHT DRYING", *Fifth International Conference on CFD in the Process Industries CSIRO*, Melbourne, Australia, 13-15 December, 2006.
- [16] D.C. Wilcox, "Turbulence Modeling for CFD", 3rd ed. DCW Industries, Inc., La Canada CA, 2006.
- [17] C.D. Scott-Pomerantz, "The K-Epsilon model in the theory of turbulence", PhD. Thesis, University of Pittsburgh, 2004.