

## شبیه سازی فرآیند غشاء به منظور حذف ترکیبات آلی فرار از فاضلاب با استفاده از CFD

ساناز بیک<sup>۱</sup>، سمیه طورانی<sup>۲\*</sup>، بیژن قنواتی<sup>۳</sup>

اطلاعات مقاله	چکیده
دریافت مقاله: ۱۳۹۶/۱۱/۱۵	<p>یکی از مهم ترین منابع انتشار ترکیبات آلی فرار (Volatile Organic Compounds) صنایع تولید کننده حلال های شیمیایی هستند. این مواد آلی علاوه بر اینکه آلودگی زیادی برای محیط زیست ایجاد می کنند، از نظر اقتصادی نیز ضررهای بیشماری به سبب هدر رفت به دنبال دارند. به همین منظور حذف مواد آلی فرار از آب یا پساب های صنعتی و نیز بازیابی آنها موضوع مهمی است که نیازمند بررسی دقیق می باشد. در این مقاله، شبیه سازی فرآیند جداسازی مواد آلی فرار از آب با استفاده از غشا نانوفایبر (nano-fiber) مورد بررسی قرار گرفته است. با توجه به پیچیدگی تحلیل توأمان معادلات مربوط به جریان گاز و مایع و نیز انتقال جرم در سراسر سیستم، از نرم افزار COMSOL Multiphysics جهت شبیه سازی عددی سیستم بهره گرفته شد. این نرم افزار محیط شبیه سازی چندفیزیکی است که با استفاده از روش عددی اجزاء محدود امکان شبیه سازی همزمان پدیده های انتقال مومنتوم و جرم را برای هندسه و شروط مرزی پیچیده فراهم می آورد. با شبیه سازی در شرایط گوناگون می توان عملکرد یک فرآیند غشایی را در حذف آلاینده های مختلف ارزیابی نمود. در نهایت برای ارزیابی صحت نتایج حاصل از شبیه سازی، از نتایج آزمایشگاهی انجام شده توسط فنگ و همکاران استفاده شد. پس از گذشت پنج ساعت غلظت کلروفرم در دمای ۶۰ درجه سانتی-گراد از مقدار ۱۱۵۷ppm به ۴۰۰ppm تقلیل می یابد. همچنین دمای ۲۳ درجه سانتی-گراد مقدار غلظت ماده ی آلی از ۱۳۴۷ppm به ۱۰۸۰ppm دست می یابد. تفاوت شیب تغییرات در این دو دما اساساً به علت تغییر در ضریب هانری در بررسی تعادل فازی است که با افزایش دما افزایش یافته و نفوذ کلروفرم درون غشا و در نتیجه درصد حذف آن را بهبود می بخشد. مقایسه تغییرات غلظت درون مخزن خوراک در این دو دما نشان دهنده ی تطابق بسیار مناسب شبیه سازی ها با داده های آزمایشگاهی با تفاوت نسبی ۱۱ درصدی می باشد.</p>
پذیرش مقاله: ۱۳۹۷/۰۳/۰۹	
<p><b>واژگان کلیدی:</b> ترکیبات آلی فرار، محیط زیست، غشا نانو فایبر، دینامیک سیالات محاسبات.</p>	

### ۱- مقدمه

در چند سال اخیر با توجه به افزایش قابل توجه مواد آلی در طبیعت، نگرانی زیادی ناشی از این مواد شیمیایی ایجاد شده است. وجود این مواد در آب آشامیدنی به مقدار بسیار جزئی باعث بروز خطرات زیادی برای سلامتی موجودات زنده از جمله انسان ها می شوند. بسیاری از امور روزمره به

صورت مستقیم و یا غیرمستقیم با این مواد در ارتباط هستند [۱]. بنابراین توجه جدی به این نوع آلاینده ها اجتناب ناپذیر است. در میان انواع آلاینده های آلی که وجود دارد، مواد آلی فرار<sup>۴</sup> یک تهدید جدی برای منابع آبی محسوب می شوند. حجم زیادی از این آلاینده ها از منابع مختلف وارد سیستم فاضلاب می شوند که بخش زیادی از

<sup>۴</sup> Volatile organic compounds (VOCs)

\* پست الکترونیک نویسنده مسئول: s.tourani@mhriau.ac.ir

۱. دانشجوی کارشناسی ارشد، گروه مهندسی شیمی، واحد ماهشهر، دانشگاه

آزاد اسلامی، ماهشهر

۲. استادیار، گروه مهندسی شیمی، واحد ماهشهر، دانشگاه آزاد اسلامی، ماهشهر

۳. استادیار، گروه مهندسی شیمی، واحد ماهشهر، دانشگاه آزاد اسلامی،

ماهشهر

والدس<sup>۵</sup> و همکاران از مدل مقاومت‌های سری برای شبیه‌سازی این فرآیند استفاده کردند. در این مدل مقاومت‌های موجود در لایه مرزی خوراک، عبور اجزاء از غشا و همچنین مقاومت موجود در سمت سیال، به صورت پشت سر هم در نظر گرفته شده‌اند و یک معادله برای فلاکس انتقال جرم ارائه شده است [۲]. در سال ۲۰۱۴، قدیری و همکاران، از مدل دو بعدی برای شبیه‌سازی فرآیند حذف ماده ۱،۱،۱ تری‌کلرواتان از آب استفاده کردند. در این پژوهش آنها به بررسی پدیده‌های انتقال در محیط متخلخل در حالت پایا و به کمک روش CFD<sup>۶</sup> پرداختند. همچنین تأثیر دما و دبی خوراک ورودی بر درصد جداسازی VOC از محلول آبی مورد بحث قرار گرفت [۳]. در سال ۲۰۱۵، لیو<sup>۷</sup> و همکاران به تحلیل و بررسی میزان انتقال جرم از غشا هالوفایبر که با کمپوزیت سرامیک و Polydimethylsiloxane (PDMS) ارتقا یافته، با روش CFD پرداختند. سپس غلظت پرکن‌ها و سطح در دسترس برای جداسازی، به عنوان پارامترهای اصلی برای بهینه کردن ساختار غشا بررسی شدند. در نهایت بهترین غشا برای حذف مواد آلی فرار به منظور بررسی کاربرد صنعتی آن انتخاب شد. پارامترهای عملیاتی مانند دمای خوراک، غلظت آلاینده‌ها، دبی خوراک و پایداری غشا به منظور بررسی عملکرد غشا مورد ارزیابی قرار گرفتند [۴].

## ۲- روش کار

در پژوهش حاضر گسسته‌سازی معادلات به روش اجزاء محدود به مجموعه معادلات جبری (حالت پایا) و یا به مجموعه معادلات دیفرانسیل معمولی نسبت به زمان (حالت غیرپایا) می‌انجامد. در حالت غیرپایا مجموعه معادلات دیفرانسیلی به وسیله روش ضمنی BDF<sup>۸</sup> نسبت به زمان انتگرال‌گیری شده تا معادلات جبری حاصل شوند. بنابراین برای هر مرحله زمانی، مجموعه‌ای از معادلات غیر خطی حاصل می‌شوند که به وسیله روش نیوتون تکرارپذیر، خطی‌سازی گردیده و به روش‌های مختلف مستقیم و یا تکراری حل می‌شوند. بنابراین می‌توان با انجام شبیه‌سازی در شرایط گوناگون به توصیفی مناسب از فرآیند MAS<sup>۹</sup> و بهینه‌سازی عملکرد آن در حذف مواد آلی فرار از پساب‌ها

طریق صنایع و مصارف خانگی و بخش دیگر از طریق کشاورزی از جمله این منابع هستند. به طور کلی این مواد به مقدار بسیار جزئی در آب وجود دارند و به وسیله روش‌های معمول تصفیه آب و فاضلاب قابل حذف نیستند. از جمله ترکیبات آلی فرار بسیار خطرناک می‌توان به بنزن، تولوئن، زایلین، اتیل بنزن و کلروفرم اشاره کرد. حذف این مواد آلی موجود در آب و فاضلاب، اخیراً مورد توجه زیادی قرار گرفته است. از جمله روش‌های مؤثری که به این منظور مورد استفاده قرار می‌گیرد می‌توان به جذب سطحی، هوا زدایی، تبدیل یونی، اسمز معکوس و فرایند جداسازی تقطیر غشائی اشاره کرد. تمام این روش‌ها به منظور حذف مقادیر ترکیبات آلی فرار مؤثر هستند ولی هزینه زیاد این روش‌ها کاربرد صنعتی آنها رو محدود کرده است، فقط در مواردی که غلظت آلاینده‌ها زیاد باشد امکان استفاده از این روش‌ها فراهم است. در این بین، تقطیر غشائی یک فرایند جداسازی حرارت محور است. در این فرایند تنها مولکول‌های بخار اجازه عبور از میان حفرات غشاء آبرگیز میکروحفره‌ها را پیدا می‌کنند. نیروی محرکه این فرایند توسط اختلاف فشار ایجاد شده به سبب اختلاف دما در طول غشاء فراهم می‌آید. از آنجایی که نیروی محرکه فقط متکی بر اختلاف دما نیست، تقطیر غشائی قابلیت اجرا در دماهای بسیار پایین‌تری را نسبت به تقطیر حرارتی رایج دارا می‌باشد. خوراک مایعی که تحت فرایند تقطیر غشائی قرار می‌گیرد، می‌بایست با یک سمت غشاء در تماس مستقیم قرار داده شود به طوری که این مایع نباید تا زمانی که فشاری بیش از فشار ورودی مایع غشاء بر آن اعمال نشده است از میان حفرات خشک غشاء نفوذ نماید. طبیعت آبرگیز غشاء مانع ورود محلول‌های مایع به داخل حفرات آن می‌شود. در نتیجه فصل‌های مشترک بخار مایع در ورودی‌های حفرات غشاء تشکیل می‌شوند. تقطیر غشائی برای دستیابی به هدف جداسازی از روش‌های آلی گوناگونی شامل تقطیر غشائی تماس مستقیم<sup>۱</sup>، تقطیر غشائی شکاف هوا<sup>۲</sup>، تقطیر غشائی گاز روبنده<sup>۳</sup> و تقطیر غشائی تحت خلاء<sup>۴</sup> بهره می‌جوید. تفاوت موجود میان این روش‌ها در نحوه چگالش محصول تراویده می‌باشد [۱]. در سال ۲۰۰۹،

<sup>۶</sup> Computational fluid dynamics

<sup>۷</sup> Liu

<sup>۸</sup> Backward differentiation formula

<sup>۹</sup> Membrane air stripping

<sup>۱</sup> Direct contact membrane distillation

<sup>۲</sup> Air gap membrane distillation

<sup>۳</sup> Sweeping gas membrane distillation

<sup>۴</sup> Vacuum membrane distillation

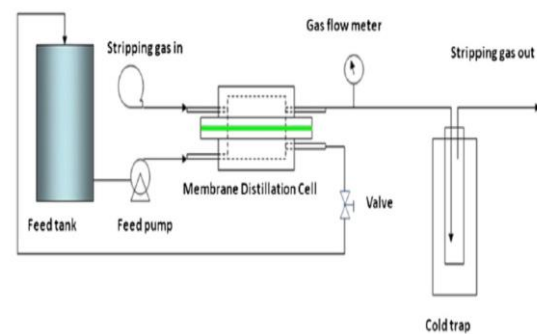
<sup>۵</sup> Valdes

است که به شکل قرصی با شعاع ۱۳ سانتی‌متر و ضخامت ۰/۱۵ میلی‌متر بین دو محفظه‌ی مایع و گاز گنجانده شده است. نیتروژن نیز به عنوان گاز جارو کننده‌ی ماده‌ی آلی نفوذی با دبی حجمی ثابت ۱۰ لیتر به ازای هر دقیقه از سیلندری به محفظه‌ی گازی همسان با محفظه‌ی آب واقع در بخش فوقانی غشای نیمه‌تراوا منتقل گردیده و از فرایند خارج می‌گردد. با توجه به وجود همزن در مخزن خوراک و اختلاط کامل در این بخش از فرایند، معادله‌ی انتقال جرم مورد ارزیابی مربوط به این مخزن مستقل از مکان و تنها وابسته به زمان می‌باشد. به منظور اعمال معادلات حاکم در فرایند صرفاً نیاز به بازسازی هندسه‌ی مربوط به سیستم غشایی شامل سه بخش استوانه‌ای مانند و بررسی معادلات جزئی انتقال سیال و انتقال جرم در این محیطها می‌باشد. شکل (۲) هندسه‌ی بازسازی شده از این سیستم غشایی را در نرم‌افزار نشان می‌دهد. به سبب عدم گزارش مقادیر مربوط به ساختار و موقعیت لوله‌های ورودی و خروجی از سیستم غشایی، چهار اتصال با موقعیت تقریبی به دست آمده از شکل (۱) و با شعاع ۲ میلی‌متر به عنوان لوله‌های ورودی و خروجی به هندسه مورد ارزیابی اضافه گردیده‌اند [۵].

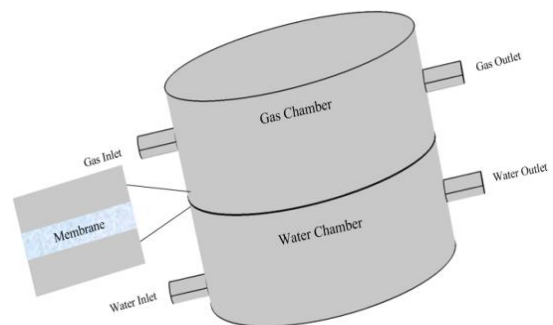
شبیه‌سازی برای دو معادله‌ی حرکت آب و گاز جارو کننده در دو سوی صفحه‌ی نازک غشایی، سه معادله‌ی انتقال جرم مربوط به ماده‌ی آلی فرار در هر سه بخش از سیستم غشایی (فضای آب، درون غشا و فضای گازی)، و در نهایت معادله‌ی بقای جرم کلی این ماده در سراسر فرایند انجام می‌گیرند. پس از بازسازی هندسه‌ی مورد ارزیابی به وسیله‌ی ابزارهای گرافیکی موجود در نرم‌افزار و یا فرخوانی آن از دیگر نرم‌افزارهای طراحی، با استفاده از مدل‌های گوناگون پیشنهادی موجود در نرم‌افزار، معادلات حاکم مربوط به پدیده‌ی مورد نظر به قسمت‌های مختلف هندسه اعمال گردیده و ضرایب و پارامترهای آن تعیین می‌شوند. با انتخاب شروط مرزی مناسب در توصیف شرایط واقعی، مراحل انجام مدل‌سازی ادامه می‌یابد. پس از آن هندسه‌ی مورد ارزیابی به وسیله‌ی ابزارها و شیوه‌های گوناگون شبکه‌بندی، به تعداد زیادی از اجزای دو بعدی و یا سه بعدی تقسیم‌بندی می‌گردد. در نهایت بر اساس اینکه هدف یافتن جواب حالت پایا و یا غیر پایا مسئله باشد در ادامه هرکدام از این مراحل شبیه‌سازی پیموده شده در نرم‌افزار Cmsol Multiphysics به تفصیل شرح داده می‌شوند.

دست یافت. در این شبیه‌سازی توزیع سرعت مایع، گاز و همچنین توزیع غلظت مایع، توزیع غلظت در غشاء و توزیع گاز بررسی خواهد شد. همچنین جهت اعتبار سنجی نتایج شبیه‌سازی، با نتایج آزمایشگاهی فنگ و همکارانش مقایسه خواهد شد [۱]. در این پژوهش شبیه‌سازی غشا نیمه‌تراوا جهت حذف مواد آلی فرار با استفاده از نرم‌افزار Cmsol Multiphysics و به روش المان محدود انجام شد.

در این شبیه‌سازی از نتایج آزمایشگاهی فنگ و همکارانش استفاده شد [۱]. شکل (۱) نمایی از سیستم آزمایشگاهی فنگ و همکاران می‌باشد.



شکل ۱: نمایی از سیستم آزمایشگاهی مورد ارزیابی فنگ و همکاران [۱]



شکل ۲: هندسه‌ی سیستم غشایی بازسازی شده در نرم‌افزار Cmsol Multiphysics

از مخزنی به حجم ۴/۷ لیتر که توسط پمپی آب با دبی حجمی ثابت ۰/۵ لیتر به ازای هر دقیقه به محفظه‌ی زیرین بخش غشایی به شکل استوانه‌ای با شعاع ۱۳ سانتی‌متر و ارتفاع ۲ سانتی‌متر منتقل می‌گردد. آب ورودی به این ناحیه پس از دست دادن بخشی از ماده‌ی آلی فرار، با توجه به اختلاف فشار بین مخزن و محفظه‌ی مایع در غشاء به مخزن خوراک مجهز به همزن بازگردانده شده و این چرخه ادامه می‌یابد [۱]. غشای نانوفایبر نیمه‌تراوای مورد ارزیابی دارای حفره‌هایی با شعاع متوسط ۳۲۰ نانومتر و تخلخل ۷۶٪

## ۱-۲- شرایط مرزی و اولیه

واکنش) به صورت معادلات دیفرانسیل پاره ای که بیان گر قوانین اصل بقاء جرم و مومنوم هستند، به دست می آیند سپس این معادلات به مجموعه ای از معادلات جبری تبدیل شده و به صورت عددی حل می شوند [۷].

همچنین شبیه سازی برای دو سری از معادلات جریان آرام و متلاطم انجام گرفته است. پس از پیش بینی توزیع سرعت سیال، معادلات غیر پایا و دیفرانسیلی جزئی انتقال جرم با استفاده از این سرعت ها در هر سه بخش از سیستم غشایی (محفظه ی مایع، محیط غشایی و محفظه ی گاز) مورد ارزیابی قرار گرفته و در نهایت، غلظت خروجی از محفظه ی آب به عنوان شرط مرزی ورودی به مخزن خوراک جهت تحلیل معادله ی کلی و غیر پایای انتقال جرم در این مخزن و محاسبه ی غلظت آب در طول زمان مورد استفاده قرار می گیرد.

### ۱-۲-۲- معادلات حرکت آب و نیتروژن

از آنجایی که بسیاری از فرایندها در شرایط تقریبی دما ثابت انجام می گیرند، از معادله ی بقای انرژی صرف نظر می شود. معادلات بقای جرم و اندازه حرکت برای جریان به صورت زیر بیان می گردند [۸]:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u) = 0 \quad (3)$$

$$\rho \frac{\partial u}{\partial t} + \rho(u \cdot \nabla)u = \nabla \cdot [-pI + \tau] + \rho g \quad (4)$$

که در این معادلات  $\rho$  چگالی سیال،  $u$  بردار سرعت سیال،  $p$  فشار،  $\tau$  تانسور تنش برشی و  $g$  بردار گرانش می باشند.

حرکت سیال به دو گونه ی آرام و متلاطم صورت می پذیرد. در جریان آرام ذرات سیال به صورت خطوطی منظم در حرکت می باشند. در این گونه از جریان ها حرکت سیال به شرایط مرزی و ابعاد هندسه وابسته می باشد. اما با افزایش سرعت، جریان به حالت آشفته تبدیل می گردد که در این شرایط، حرکت سیال علاوه بر شرایط مرزی و ابعاد، به انتقال و گسترش گردابه ها نیز مربوط می باشد [۸]. آشفتگی دارای طیف گسترده ای از گردابه های با اندازه های متفاوت است و این مقیاس های مختلف همزمان با هم در یک جریان متلاطم وجود دارند. در این پژوهش تحلیل جریان آشفته با روش میانگین گیری رینولدز انجام شد و برای محاسبه سرعت از مدل خطی دو معادله ای  $k-\epsilon$  ارائه شده توسط

در ورودی محفظه ها دبی های ثابت به ترتیب برابر با ۰/۵ و ۱۰ لیتر به ازای هر دقیقه به ترتیب برای جریان آب و نیتروژن لحاظ می گردند. در خروجی این دو محفظه، فشار ثابت یک اتمسفر و در دیواره های این دو بخش از سیستم غشایی نیز شرط عدم لغزش و در نتیجه سرعت صفر اعمال می شود. در معادله ی انتقال جرم غیر پایای مربوط به محفظه ی آب و در ورودی این بخش، غلظتی برابر با غلظت لحظه ای در مخزن خوراک در نظر گرفته و در خروجی نیز شرط گرادیان صفر غلظت لحاظ می گردد. در تمامی دیواره های محفظه ی آب به جز سطح مشترک با محیط غشایی شرط عدم نفوذ و در سطح مشترک نیز شرط تعادل گاز - مایع در غلظت های پایین و در نتیجه معادله ی هنری (با ثابت گزارش شده  $H = 0.61$  در دمای ۶۰ درجه ی سانتی - گراد) به صورت زیر در نظر گرفته می شود [۶].

$$C_m = HC_1 \quad (1)$$

در ورودی محفظه ی نیتروژن غلظت صفر، در خروجی گرادیان صفر غلظت و در تمامی دیواره ها به جز سطح مشترک با غشا شرط عدم نفوذ ماده در نظر گرفته می شود. با توجه به نفوذ گاز به درون محیط غشایی در سطح مشترک محفظه ی گاز با غشا نیز فرض برابری غلظت این دو ناحیه گرفته می شود [۶].

$$C_m = C_g \quad (2)$$

شروط مرزی برای محیط غشایی نیز از معادلات (۱۳) و (۱۴) تبعیت نموده و در دیگر دیواره ها نیز شرط عدم نفوذ ماده لحاظ شده است. با توجه شرایط انجام آزمایشات فنگ و همکاران، دما و فشار سیستم به ترتیب یک اتمسفر و ۶۰ درجه ی سانتی گراد در نظر گرفته شده اند. غلظت لحظه ی صفر کلروفورم در مخزن خوراک برابر با ۱۱۵۷ppm در نظر گرفته شده، دبی برابر ورودی و خروجی آب در مخزن برابر با ۰/۵ لیتر در دقیقه و برای غلظت لحظه ای جریان ورودی به مخزن نیز از مقدار متوسط غلظت در سطح مقطع خروجی از محفظه ی آب در سیستم غشایی استفاده می - شود [۶].

### ۲-۲- معادلات حاکم

در روش CFD ابتدا معادلات حاکم بر جریان سیال (معادلات ناویر استوکس، معادلات مربوط به انتقال جرم و

در معادلات غیرپایای انتقال جرم مورد استفاده قرار می-گیرند [۸].

برای به دست آوردن خصوصیات مربوط به سیال آب از material library نرم‌افزار Comsol Multiphysics برای محاسبه‌ی چگالی و گرانیوی استفاده نموده که در دمای ۶۰ درجه‌ی سانتی‌گرادی و فشار یک اتمسفری سیستم غشایی، مقادیر  $984.58 \text{ Kg.m}^{-3}$  و  $4.70 \times 10^{-4} \text{ Pa.s}$  را نتیجه می‌دهند. با فرض گاز ایده‌آل برای نیتروژن، چگالی و گرانیوی این سیال در دما و فشار سیستم برابر با  $1.01 \text{ Kg.m}^{-3}$  و  $1.92 \times 10^{-5} \text{ Pa.s}$  محاسبه گردید.

### ۲-۲-۲- معادلات بقای جرم ماده‌ی آلی فرار

معادلات وابسته به زمان بقای جرم ماده‌ی آلی فرار در جریان آب درون محفظه‌ی زیرین به صورت زیر بیان می‌شود:

$$\frac{\partial C_1}{\partial t} = -[(\nabla \cdot C_1 U_1) + (\nabla \cdot J_1)] \quad (9)$$

در این معادله  $C_1$  غلظت جزء حل‌شونده در جریان آب،  $t$  زمان و  $J_1$  نیز شار مولی جزء نفوذی درون مایع می‌باشند [۸]. شار مولی ماده‌ی حل‌شونده با استفاده از قانون فیک به صورت زیر به ضریب نفوذ جزء درون آب ( $D_1$ ) و گرادیان غلظتی مربوط می‌شود:

$$J_1 = -D_1 \nabla C_1 \quad (10)$$

ضریب نفوذ کلروفورم به عنوان ماده‌ی آلی فرار سیستم درون آب در دمای ۴۰ درجه‌ی سانتی‌گراد برابر با  $1.51 \times 10^{-9} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$  گزارش شده است [۸]. با توجه به معادله‌ی (۱۱) برگرفته از معادله‌ی استوکس - انیشتین در ارزیابی اثر تغییرات دما بر ضریب نفوذ درون مایعات، ضریب نفوذ کلروفورم در آب در دمای ۶۰ درجه‌ی سانتی‌گراد برابر با محاسبه می‌شود.

$$\frac{D_{1,T2}}{D_{1,T1}} = \frac{T2\mu_{T1}}{T1\mu_{T2}} \quad (11)$$

همچنین انتقال ماده‌ی فرار درون محفظه‌ی فوقانی در جریان گاز نیتروژن با غلظت  $C_g$  و ضریب نفوذ  $U_g$  نیز با توجه به معادلات زیر بیان می‌شود:

$$\frac{\partial C_g}{\partial t} = -[(\nabla \cdot C_g U_g) + (\nabla \cdot J_g)] \quad (12)$$

لاندر و اسپالدینگ جهت توصیف جریان آشفته و گرانیوی گردابه‌ای استفاده می‌شود [۹]. بر طبق این مدل دو معادله-ی انتقال دیگر به مدل‌سازی جریان سیال افزوده می‌شود. این مدل شامل دو معادله‌ی انتقال اضافی و دو متغیر دیگر به نام‌های انرژی جنبشی جریان آشفته ( $k$ ) و نرخ اتلاف آشفته‌گی ( $\varepsilon$ ) می‌باشد. بر طبق این مدل، گرانیوی گردابه-ای از رابطه‌ی زیر محاسبه می‌گردد:

$$\mu_T = \rho C_\mu \frac{K^2}{\varepsilon} \quad (5)$$

که در آن  $C_\mu$  ثابت مدل می‌باشد [۸].

معادله‌ی انتقال برای کمیت  $k$  به صورت زیر است:

$$\rho \frac{\partial K}{\partial t} + \rho(U \cdot \nabla)K = \nabla \cdot ((\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_K}) \nabla K) + P_K - \rho \varepsilon \quad (6)$$

که  $P_K$  به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$P_K = \mu_T (\nabla U : (\nabla U + (\nabla U)^T)) - \frac{2}{3} (\nabla \cdot U)^2 - \frac{2}{3} \rho K \nabla \cdot U \quad (7)$$

معادله‌ی انتقال متغیر  $\varepsilon$  نیز به صورت زیر است:

$$\rho \frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \rho(U \cdot \nabla)\varepsilon = \nabla \cdot ((\mu + \frac{\mu_T}{\sigma_\varepsilon}) \nabla \varepsilon) + C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} P_k - C_{\varepsilon 2} \rho \frac{\varepsilon^2}{K} \quad (8)$$

ثوابت موجود در مدل  $k-\varepsilon$  از روابط تجربی حاصل شده و به صورت ارائه شده در جدول ۱ می‌باشند [۸].

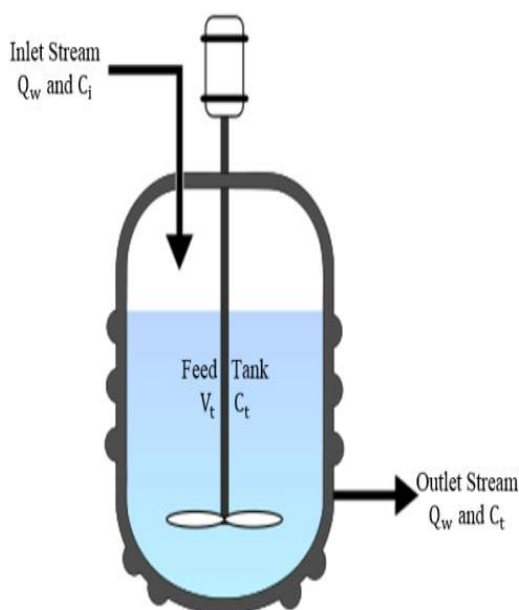
جدول ۱: ثوابت مربوط به مدل  $k-\varepsilon$  در توصیف گرانیوی

گردابه‌ای جریان آشفته [۸]

ثابت	$C_\mu$	$C_{\varepsilon 1}$	$C_{\varepsilon 2}$	$\sigma_K$	$\sigma_\varepsilon$
مقدار	۰,۰۹	۱,۴۴	۱,۹۲	۱,۰	۱,۳

با استفاده از این خصوصیات و اعمال شرایط مرزی مقتضی، جریان‌های آرام و آشفته از این دو سیال در محفظه‌های بخار و مایع شبیه‌سازی گردیده و توزیعات پایای سرعت‌های حاصل ( $U_1$  و  $U_g$  به عنوان سرعت‌های گاز و مایع) نیز

سطوح دیواره‌های در تماس با سیال، به اجزاء بسیار ریز مثلثی تقسیم‌بندی شده‌اند. به سبب اینکه در نزدیکی دیواره‌ها و در جهت عمود بر سطح (به ویژه سطوح مشترک محفظه‌های مایع و گاز با محیط متخلخل غشایی)، گرادیان بالایی از سرعت سیال و غلظت حل شونده وجود دارد، از نوع خاصی از شبکه‌بندی به نام لایه‌ی مرزی استفاده شده است. این روش از شبکه‌بندی دارای اجزاء شش وجهی با ضخامتی بسیار نازک در جهت عمود بر دیواره می‌باشد. سپس با تنظیم سرعت رشد شبکه‌بندی، به نواحی مرکزی اجزاء چهار وجهی بدون ساختار اضافه گردیده است. استفاده از اجزاء مثلثی بسیار ریز، اجزاء چهار وجهی بزرگتر و همچنین تنظیم سرعت رشد، سبب می‌شود اندازه‌ی شبکه‌ها در نزدیکی دیگر دیواره‌ها ریزتر از اندازه‌ی آن‌ها در نواحی مرکزی باشد [۱۰] (شکل (۴)).



شکل ۳: مخزن خوراک و متغیرها و پارامترهای مربوط به معادله‌ی بقای جرم در این مخزن

#### ۴-۲- بررسی استقلال حل از شبکه

تعیین سائز مناسب شبکه بیشترین زمان تحلیل سه بعدی را به خود اختصاص می‌دهد، چرا که کیفیت شبکه بندی، روند همگرایی را به شدت تحت تأثیر قرار می‌دهد. حل یک مسئله دینامیک سیالات عددی باید مستقل از شبکه باشد یعنی تغییرات جواب‌ها به ازای ریزتر شدن شبکه قابل صرف‌نظر باشد [۱۱]. در این پژوهش نیز عملیات عدم وابستگی برای سه دسته از شبکه‌بندی‌ها با درجه‌های ریزسازی متفاوت برای جریان سیال آرام درون محفظه‌های

$$J_g = -D_g \nabla C_g \quad (13)$$

ضریب نفوذ کلروفورم درون نیتروژن در دما و فشار سیستم بر اساس نظریه‌ی چپمن - انسکوگ و بر طبق معادله‌ی (۱۴) برابر با  $1.09 \times 10^{-5} \text{ m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$  به دست می‌آید [۸].

$$D_g = \frac{1.858 \times 10^{-3} T^{\frac{3}{2}} \sqrt{\frac{1}{M_A} + \frac{1}{M_B}}}{\rho \sigma_{AB}^2 \Omega} \quad (14)$$

معادله‌ی انتقال جرم غیرپایای ماده‌ی آلی فرار بر اساس مکانیسم نفوذ درون گاز عبوری از غشا به صورت زیر بیان می‌شود:

$$\frac{\partial C_m}{\partial t} = D_m (\nabla^2 C_m) \quad (15)$$

$C_m$  غلظت درون غشا و  $D_m$  ضریب نفوذ ماده‌ی آلی درون غشاء است که به صورت زیر به ضریب نفوذ درون جریان گاز، تخلخل ۷۶ درصدی محیط غشایی (E) و پیچ و خم آن ( $\tau$ ) مربوط می‌شود [۸].

$$D_m = D_g \left( \frac{E}{\tau} \right) \quad (16)$$

$$\tau = \frac{1}{E} \quad (17)$$

#### ۳-۲-۲- معادله‌ی کلی انتقال جرم در مخزن خوراک

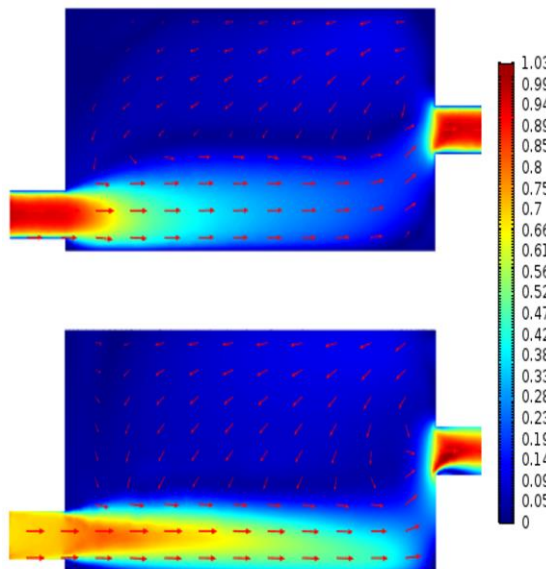
وجود همزن، محلولی همگن را در مخزن خوراک به وجود می‌آورد که موجب می‌شود معادله‌ی انتقال جرم درون این مخزن مستقل از مکان و تنها وابسته به زمان باشد. معادله‌ی بقای جرم ماده‌ی آلی فرار در این مخزن با حجم و دمای ثابت به صورت زیر بیان می‌شود [۶]:

$$V_t \frac{\partial C_t}{\partial t} = Q_w (C_i - C_t) \quad (18)$$

$V_t$  و  $C_t$  به ترتیب حجم ثابت مخزن و غلظت ماده‌ی آلی درون مخزن می‌باشند.  $Q_w$  دبی حجمی آب در سیستم و  $C_i$  نیز غلظت ورودی به مخزن می‌باشد که در واقع غلظت محاسبه شده در خروجی از محفظه‌ی زیرین سیستم غشایی است [۶] (شکل (۳)).

#### ۳-۲- شبکه‌بندی هندسه

فرآیند شبکه‌بندی هندسه‌ی سه لایه‌ی سیستم غشایی در نرم‌افزار Comsol Multiphysics با استفاده از ابزار دو بعدی و سه بعدی مختلفی انجام گرفته است. در ابتدا



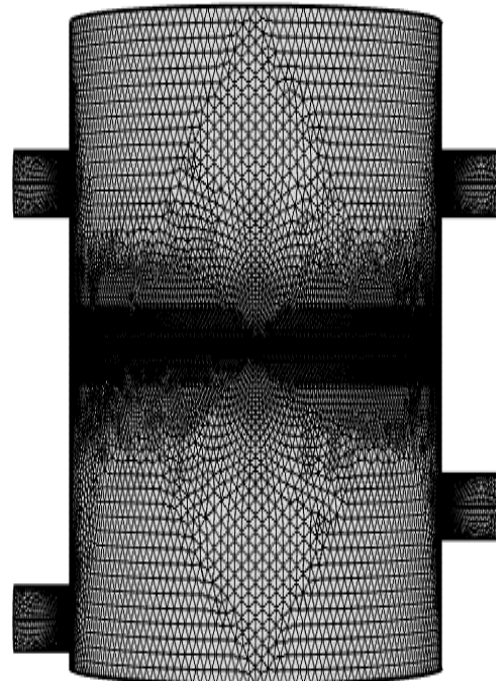
شکل ۶: بزرگی بردار سرعت آب حاصل از جریان‌های آرام (A) و آشفته (B) در سطح مقطع میانی محفظه مایع

### ۳- نتایج و بحث

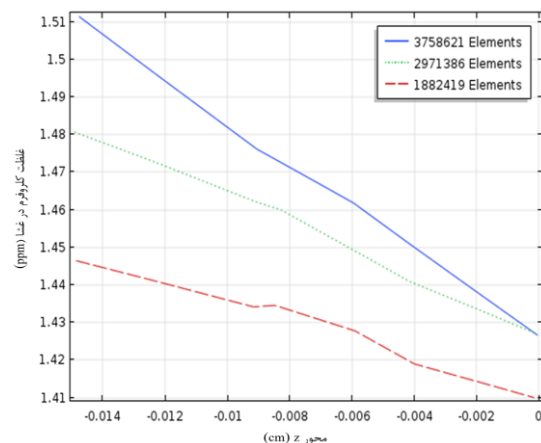
#### ۳-۱- توزیع سرعت مایع

بزرگی بردار سرعت ذرات کلروفورم در محفظه‌ی مایع سلول غشایی به دست آمده از شبیه‌سازی جریان آرام سیال بعد از گذشت حدود ۵ ساعت در شکل (۶) نشان داده شده است. این شکل نشان می‌دهد که در بخش زیرین محفظه‌ی مایع، بزرگی بردار سرعت ذرات کلروفورم بیش از دو برابر بخش فوقانی است. گرچه ذرات کلروفورم در محفظه‌ی مایع عمده‌تاً در جهت نازل خروجی حرکت می‌کنند، نحوه‌ی تزریق آب به درون محفظه و نیز تفاوت در موقعیت لوله‌های ورودی و خروجی منجر به گردش بسیار مناسب از جریان آب درون محفظه گردیده و شرایط همگن و بهتری از انتقال جرم را پدید خواهند آورد. شکل (۷) تغییرات سرعت عمودی ذرات کلروفورم درون محفظه مایع را برای جریان آرام و آشفته در طول خطی عرضی در بخش‌های میانی این محفظه مورد مقایسه قرار می‌دهد. شرط مرزی عدم وجود سرعت بر روی صفحات باعث ایجاد گردابه‌هایی در نزدیک صفحات می‌شود. همان‌طور که مشاهده می‌شود، روند تغییرات برای هر دو جریان یکسان است. جهت حرکت سیال به سمت بالای محفظه مایع می‌باشد که منجر به تشکیل گردابه، بازگشت جریان و در نتیجه سرعت منفی سیال در قسمت‌های فوقانی گردیده است. در جریان آرام به دلیل فرض لایه‌ای بودن جریان، سیال مسیرهای منظم و هموار را طی می‌کند. در این جریان هرگونه گرایش به

مایع و گاز صورت گرفته است. بزرگی غلظت ماده آلی فرار در غشا و در امتداد مسیری عمودی واقع در میانه‌ی سیستم در شکل (۵) مورد مقایسه قرار گرفته است و با توجه به این نمودارها، درصد تفاوت غلظت برای شبکه‌بندی‌های مختلف بسیار پایین بوده (خصوصاً برای شبکه‌بندی‌های با ۲۹۷۱۳۸۶ و ۳۷۵۸۶۲۱ المان) و بیشینه‌ی خطای نسبی مربوط به این دو شبکه‌بندی کمتر از سه درصد است. از این رو شبکه‌بندی شامل تعداد ۲۹۷۱۳۸۶ المان به عنوان شبکه‌بندی مناسب در حل عددی معادلات بقا گزینش شده است.



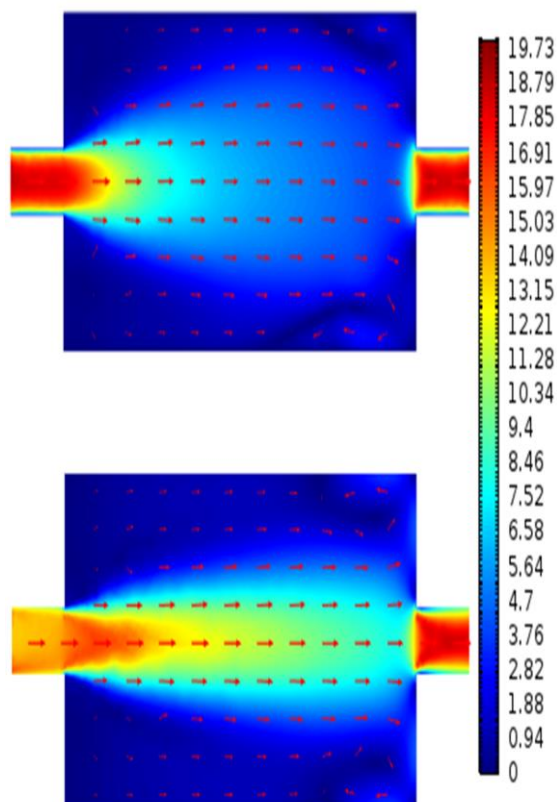
شکل ۴: نمایی از شبکه‌بندی مورد استفاده در حل عددی معادلات بقا



شکل ۵: نمودار غلظت در امتداد خطی عمودی در میانه‌های سیستم و برای شبکه‌بندی‌های مختلف



تفاوت توزیع و مقادیر پیش‌بینی شده از بزرگی بردار سرعت حاصل از دو جریان آشفته و آرام نیز به خوبی در این شکل مشهود است [۱۲]. جریان آشفته توزیعی بسیار غیر یکنواخت با تغییرات ناگهانی که بیشینه‌ی سرعت آن حدود دو برابر بیشینه‌ی سرعت جریان آرام است را به وجود آورده است. با توجه به چنین اختلاف زیادی بین این دو گونه از شبیه‌سازی‌ها، در ادامه و در شبیه‌سازی انتقال جرم درون سیستم غشایی از توزیع سرعت حاصل از جریان آشفته‌ی نیتروژن در محفظه‌ی گازی در بررسی انتقال ذرات کلروفورم در این بخش مورد استفاده قرار می‌گیرد شکل ((۹)).

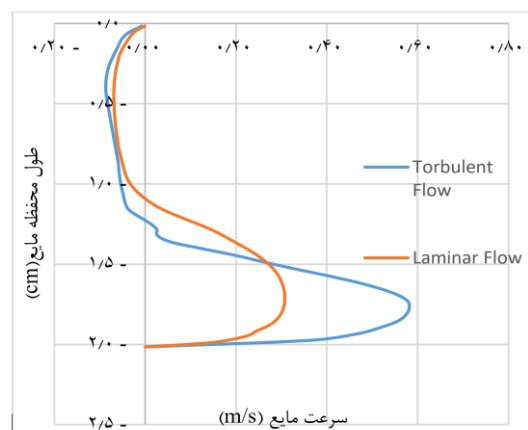


شکل ۸: بزرگی بردار سرعت گاز حاصل از جریان‌های آرام (A) و آشفته (B) در سطح مقطع میانی محفظه گاز

### ۳-۳- توزیع غلظت مایع

نتایج حاصل از این شبیه‌سازی عددی برای تغییرات غلظت ذرات کلروفورم برای هر یک از محفظه‌های سلول غشایی در طی فرآیند حذف ماده‌ی سمی در ادامه بررسی خواهند شد. هنگام ورود محلول کلروفورم به سلول غشا، به دلیل بالا بودن غلظت کلروفورم در ورودی محفظه مایع مقداری از کلروفورم به سمت غشا حرکت می‌کند که به دلیل سرعت بالای گاز جاروب کننده در محفظه گازی و نفوذ کلروفورم از غشا، این ماده از محلول کلروفورم ورودی جدا می‌شود. شکل (۱۰)

آشفته‌گی توسط نیروهای اصطکاک مستهلک می‌شود. ولی در جریان آشفته، ذرات به علت انرژی جنبشی بالا مسیرهای نامنظمی را طی می‌کنند و با برخورد به یکدیگر سبب انتقال انرژی می‌شوند. پس انتظار داریم در جریان آشفته سرعت و شتاب ذرات کلروفورم در مقایسه با جریان آرام، بیشتر باشد و این تقریب نزدیک‌تری از حالت واقعی جریان ذرات کلروفورم است. بنابراین با توجه به تفاوت زیاد سرعت‌های حاصل از این دو جریان، از نتایج سرعت حاصل از شبیه‌سازی آشفته‌ی جریان مایع برای بررسی انتقال جرم استفاده می‌گردد [۱۲].



شکل ۹: مقایسه‌ی سرعت حاصل از جریان‌های آرام و آشفته‌ی سیال در عرض محفظه مایع

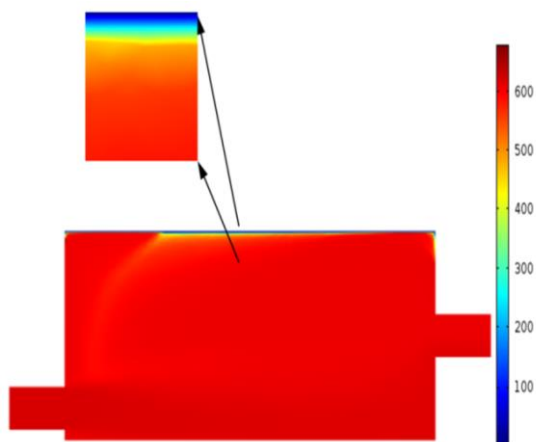
### ۳-۲- توزیع سرعت گاز

بردار سرعت ناشی از جریان‌های آرام و آشفته نیتروژن در محفظه گاز سلول غشایی نانوالیاف در شکل (۸) مورد مقایسه قرار گرفته‌اند.

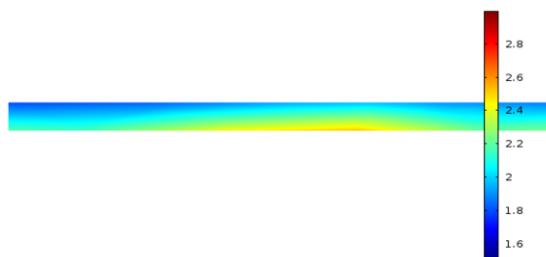
با توجه به اختلاف فشار بالای بین کپسول نیتروژن و محفظه‌ی اتمسفریک گازی، دبی زیاد و در نتیجه سرعت‌های بسیار بالایی از سیال در این بخش از سیستم غشایی حاصل گردیده است. در حالی که بیشینه‌ی سرعت سیال در محفظه‌ی مایع به یک متربرثانیه می‌رسید، بیشینه‌ی سرعت برای هر دو گونه از جریان‌های گازی به ۲۰ متربرثانیه دست می‌یابد. علاوه بر این ورود و خروج همسان گاز به محفظه منجر به توزیع متقارنی از بزرگی بردار سرعت در این محفظه گردیده است. بر خلاف هندسه‌ی غیرمتقارن محفظه‌ی مایع با سرعت پایین که به تک گردابه‌ای بزرگ در بخش فوقانی آن می‌انجامید، سرعت بالای سیال در محفظه‌ی متقارن گازی منجر به دو گردابه‌ی بسیار کوچک‌تر در گوشه‌های انتهایی این بخش از سیستم گردیده است.



انتظار داشت در پایین بخش غشایی به دلیل تزریق و ورود ملکول‌های کلروفرم از محفظه‌ی مایع، غلظت این ماده در حدود  $2/53$  مول بر مترمربع است و در بالای این بخش به دلیل تماس با گاز جاروب کننده این غلظت کاهش یافته و به مقادیر  $1/6$  مول به ازای مترمربع می‌رسد. تفاوت در توزیع سرعت آب در نزدیکی سطح مشترک محفظه‌ی مایع و محیط غشایی به تفاوت در میزان شار مولی ماده‌ی حل-شونده‌ی نفوذی به غشا انجامیده که خود مقادیری متفاوت از غلظت سطحی را در صفحه‌ی زیرین غشا به وجود آورده است [۱۲].



شکل ۱۰: توزیع غلظت کلروفرم در محفظه‌ی مایع در ساعت سوم از فرآیند (ppm)

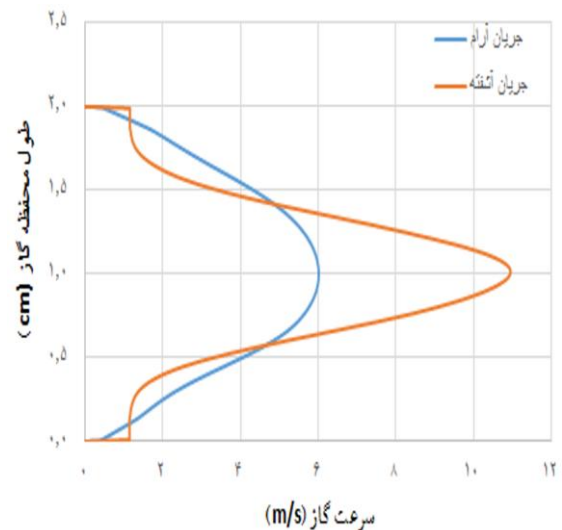


شکل ۱۱: توزیع غلظت کلروفرم در محیط متخلخل غشایی در ساعت سوم از فرآیند (ppm)

### ۳-۵- توزیع غلظت گاز

شکل (۱۲) توزیع غلظت کلروفرم را در محفظه‌ی گازی سلول غشایی در ساعت سوم از فرآیند حذف ماده‌ی آلی در سطح مقطع عمودی واقع در میانه‌ی سیستم را نشان می‌دهد. جریان زیاد گاز جاروب کننده باعث می‌شود که کلروفرم ورودی به بخش بالایی محفظه‌ی گازی به سمت نازل بیرونی انتقال یابد. پس در طول این محفظه غلظت کلروفرم کاهش می‌یابد. جریان خالص نیتروژن گازی با غلظت صفر به این محیط وارد شده و پس از دریافت مقداری از ماده‌ی

غلظت یکنواخت کلروفرم در ورودی محفظه مایع را نشان می‌دهد. همان‌طور که از شکل می‌توان دریافت توزیع کلروفرم در خروجی این بخش تقریباً یکنواخت است و از نظر مقداری به دلیل حذف کلروفرم توسط غشا، از غلظت ورودی کمتر است. در نواحی نزدیک به غشا به دلیل نفوذ کلروفرم بیش‌ترین تغییر در غلظت کلروفرم را شاهد هستیم. نفوذ مشروط کلروفرم با استفاده از مکانیسم صرف نفوذ به درون غشا منجر به کاهش شدید غلظت مایع در سطح مشترک با محیط غشایی گردیده است. بالعکس در میانه‌ی محفظه‌ی مایع به سبب غالب بودن پدیده‌ی همرفت در انتقال کلروفرم توزیع یکنواختی از حل‌شونده به وجود آمده است. این امر سبب شده است که بلافاصله پس از خروج کلروفرم در سطح فوقانی پدیده‌ی همرفت منجر به جایگزینی آن گردیده و کمبود آن را جبران نماید. بنابراین صرفاً در این سطح مشترک و فاصله‌ی بسیار کوتاه در نزدیکی آن که در واقع لایه‌ی مرزی انتقال جرم است، تفاوت غلظت کلروفرم مشهود می‌باشد [۱۲].

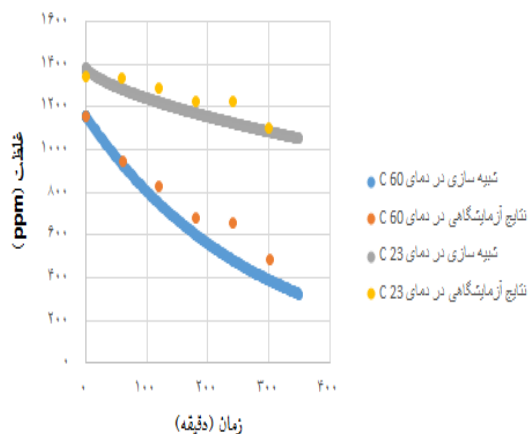


شکل ۹: مقایسه‌ی سرعت حاصل از جریان‌های آرام و آشفتگی سیال در عرض محفظه‌ی گاز

### ۳-۴- توزیع غلظت در غشا

شکل (۱۱) توزیع غلظت کلروفرم در محیط متخلخل غشایی در بخشی از سطح مقطعی عرضی دقیقاً واقع در میانه‌ی سیستم را نشان می‌دهد. نفوذ بسیار محدود کلروفرم در این محیط که در واقع صرفاً ناشی از مکانیسم نفوذ، آن هم محدود شونده توسط حفره‌های ریز غشای نیمه تراواست، منجر به غلظت‌های اندک از ملکول‌های حل-شونده در این فضا گردیده است. همان‌طور که می‌توان

کاهش می‌یابد. در دمای  $60^{\circ}\text{C}$  به دلیل اینکه ضریب هانری مربوط به تعادل فازی بین جریان گاز مایع در سطح مشترک غشا و جریان مایع بالاتر از مقدار مربوط به دمای  $23^{\circ}\text{C}$  می‌باشد، حذف ملکول‌های ماده‌ی آلی با سرعت بیشتری انجام گرفته و شیب تغییرات غلظت مخزن خوراک زیادتر است. با توجه به شکل (۱۳)، میزان کلروفورم در آب بعد از گذشت ۵ ساعت در دمای  $60^{\circ}\text{C}$  برابر  $40\text{ ppm}$  و در دمای  $23^{\circ}\text{C}$  برابر  $108\text{ ppm}$  است.

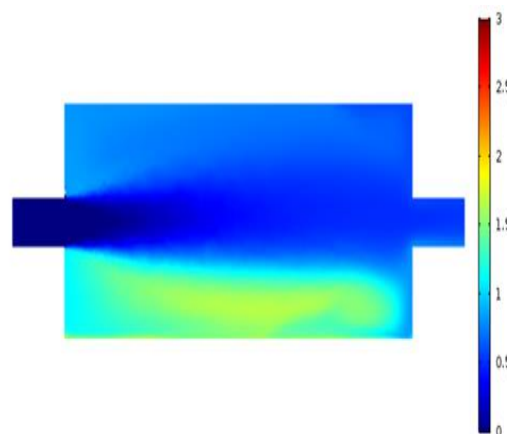


شکل ۱۳: ارزیابی صحت نتایج حاصل از شبیه‌سازی در دماهای ۲۳ و  $60^{\circ}\text{C}$  درجه‌ی سانتی‌گراد

#### ۴- نتیجه‌گیری

شبیه‌سازی‌ها برای معادله‌ی انتقال جرم غیرجزیی و وابسته به زمان کلروفورم درون مخزن خوراک متصل به معادلات دیفرانسیل جزیی بقای جرم این ماده درون سیستم غشایی با استفاده نرم‌افزار COMSOL Multiphysics صورت گرفت. مدل‌سازی بقای ماده‌ی آلی در سیستم غشایی نیز شامل معادلات حرکت آب و نیتروژن در محفظه‌های مایع و گاز و معادلات انتقال ماده در این دو محفظه و نیز محیط متخلخل غشایی است که توسط قانون هنری در توصیف تعادل فازی گاز - مایع برای مواد در غلظت پایین مرتبط می‌گردند. نتایج حاصل از شبیه‌سازی دال بر این موضوع است که مقایسه‌ی توزیع سرعت مربوط به جریان‌ات آرام و آشفته درون محفظه‌ی مایع بیانگر تفاوت چشم‌گیر این متغیر توسط دو مدل مختلف می‌باشد. گرچه جریان آرام و لایه‌ای سیال به دلیل بازدارندگی نیروهای گرانشی از حالت سهموی برخوردار است، جریان آشفته دارای گرادیان بالایی از سرعت در عرض محفظه با مقدار بسیار بالاتری از سرعت پیشینه می‌باشد. بنابراین در ارزیابی‌های انتقال جرم فرض بر آشفستگی جریان آب درون این محفظه گرفته شد. علاوه

آلی نفوذی، با غلظت تقریبی یک ppm از این محفظه خارج می‌گردد. همان‌طور که مشاهده می‌شود، غلظت کلروفورم در پایین محفظه گازی زیر نازل‌های ورودی و خروجی بیشترین مقدار خود را دارد. این امر به سبب ورود حل-شونده از سطح مشترک محفظه با محیط غشایی واقع در بخش زیرین آن می‌باشد. با توجه به ضریب نفوذ بسیار بالاتر ماده‌ی آلی در جریان گازی نیتروژن در مقایسه با مقدار متناسب مربوط به جریان مایع و نیز سرعت چند برابری جریان نیتروژن در مقایسه با جریان مایع، میزان نفوذ ماده-ی آلی در این محیط که در واقع همان لایه‌ی مرزی انتقال جرم است، بسیار بیشتر از فاصله‌ی نفوذی انتقال جرم در محفظه‌ی مایع می‌باشد [۱۲].



شکل ۱۲: توزیع غلظت کلروفورم در محفظه‌ی گازی در ساعت سوم از فرآیند (ppm)

#### ۳-۶- ارزیابی صحت مدل‌سازی

برای بررسی و ارزیابی صحت مدل استفاده شده، غلظت کلروفورم به دست آمده از نتایج شبیه‌سازی در مخزن خوراک به همراه داده‌های آزمایشگاهی گزارش شده به وسیله فنگ و همکاران برای دو دمای  $23^{\circ}\text{C}$  و  $60^{\circ}\text{C}$  در شکل (۱۳) نشان داده شده‌اند. همان‌طور که در شکل نشان داده شده است، مدل مورد استفاده به خوبی نتایج آزمایشگاهی را پیش‌بینی نموده که بر اساس ارزیابی‌های انجام گرفته، انحراف نتایج شبیه‌سازی از حالت واقعی حدود ۱۵ درصد است. به این نکته نیز می‌بایست اشاره نمود که شبیه‌سازی‌ها پس از گذشت پنج ساعت، نتایج را کمتر از میزان واقعی آن پیش‌بینی می‌کنند. به عبارت دیگر نتایج مدل از داده‌های آزمایشگاهی انحراف منفی دارد. چون سیستم به صورت جریان آب آلوده را به سلول غشا برمی-گرداند، میزان کلروفورم با گذشت زمان به صورت پیوسته

مشترک گرادیان بسیار بالایی از غلظت را در نزدیکی دیواره به وجود می‌آورد. نتایج نشان می‌دهند که پس از گذشت پنج ساعت غلظت کلروفرم در دمای ۶۰ درجه‌ی سانتی‌گراد از مقدار ۱۱۵۷ به ۴۰۰ppm تقلیل می‌یابد. همچنین دمای ۲۳ درجه سانتی‌گرادی مقدار غلظت ماده‌ی آلی از ۱۳۴۷ppm به ۱۰۸۰ppm دست می‌یابد.

#### ۵- تشکر و قدردانی

از شرکت مناطق نفت‌خیز جنوب به خاطر حمایت‌های مالی تشکر و قدردانی ویژه داریم.

بر این بررسی توزیع سرعت مایع نشان می‌دهد که تفاوت در ارتفاع و موقعیت نازل‌های ورودی و خروجی آب درون این محفظه منجر به تشکیل گردابه‌ای بسیار بزرگ در بخش فوقانی محفظه در نزدیکی سطح مشترک با محیط غشایی گردیده که شرایط مناسب‌تری از انتقال جرم را ایجاد می‌کند. نتایج مربوط به توزیع غلظت کلروفرم در محفظه‌ی مایع نشان می‌دهند که آشفتگی جریان و شکل-گیری گردابه در نزدیکی سطح مشترک با غشا یکنواختی بسیار زیادی را در این فضا فراهم آورده است. انتقال کلروفرم به سمت غشا موجب کاهش غلظت در یک مقطع عرضی به سمت غشا می‌گردد. تعادل مایع گاز در این سطح

#### ۶- مراجع

- [1] C. Feng, K.C. Khulbe, & S. Tabe, "Volatile organic compound removal by membrane gas stripping using electro-spun nanofiber membrane", *Desalination*, Vol. 287, 2012, pp. 98–102.
- [2] H. Valdés, J. Romero, J. Sanchez, S. Bocquet, G.M. Rios, and F. Valenzuela, "Characterization of chemical kinetics in membrane-based liquid–liquid extraction of molybdenum (VI) from aqueous solutions", *Chemical Engineering Journal*, Vol. 151, Nos. 1–3, 2009, 333–341.
- [3] M. Ghadiri, V. Abkhiz, M. Parvini, and A. Marjani, "Simulation of Membrane Distillation for Purifying Water Containing 1, 1, 1-Trichloroethane", *Chemical Engineering & Technology*, Vol. 37, No. 3, 2014, pp. 543–550.
- [4] D. Liu, G. Liu, L. Meng, Z. Dong, K. Huang, and W. Jin, "Hollow fiber modules with ceramic-supported PDMS composite membranes for pervaporation recovery of bio-butanol", *Separation and Purification Technology*, Vol. 146, 2015, pp. 24–32.
- [5] CFDOnline, [Online], Available:<http://www.cfdonline.com/Wiki/Turbulence-modeling>, [Accessed 5 12 2015].
- [6] R. Sander, "Compilation of Henry's law constants (version 4.0) for water as solvent." *Atmospheric Chemistry & Physics*, Vol. 15, 2015, pp. 4399–4981.
- [7] ن. یعقوبی، "سینتیک و پدیده‌های انتقال در جفت شدن اکسایشی متان: مدل‌سازی CFD در مقیاس دانه‌ای"، *مجله مدل‌سازی در مهندسی، دانشگاه سمنان، دوره ۱۲، شماره ۳۹، ۱۳۹۳، صفحه ۱۴۱–۱۲۳*.
- [8] CFD Module User's Guide, Comsol Multiphysics v5.3, 2017.
- [8] م. ضیائی راد، "بررسی عددی تأثیر هندسه دانه‌های روی سطح بر جریان آشفته و انتقال حرارت در یک کانال مستطیلی"، *مجله مدل‌سازی در مهندسی، دانشگاه سمنان، دوره ۹، شماره ۲۷، ۱۳۹۰، صفحه ۴۸–۳۷*.
- [10] Meshing, in Reference Manual, Comsol Multiphysics v5.3, 2017.
- [11] م. علی‌گودرز، "مدل‌سازی عددی محفظه احتراق توربین SGT600 و تحلیل میدان جریان در شرایط کارکرد واقعی"، *مجله مدل‌سازی در مهندسی، دانشگاه سمنان، دوره ۱۰، شماره ۳۱، ۱۳۹۱، صفحه ۳۵–۲۵*.
- [12] R.B. Bird, *Transport phenomena, Applied Mechanics Reviews*, 55(1), R1-R4, 2002.