

Numerical Study on the Impact of DC Electric Field on Fouling Characteristics of Cross-Flow Filtration

ARTICLE INFO

Article Type Original Research

Authors Davarpanah E.¹ *MSc,* Teymourtash A.R.*¹ *PhD*

How to cite this article

Davarpanah E, Teymourtash A.R. Numerical Study on the Impact of DC Electric Field on Fouling Characteristics of Cross-Flow Filtration. Modares Mechanical Engineering. 2019;19(5):1061-1073.

A B S T R A C T

Applying numerical methods for predicting cake formation and development in cross-flow membrane filtration has been an area of research. The solutions, which are mainly based on the development of zero, one, or two-dimensional methods for estimating filtration parameters, have always suffered from an obvious need for some calibration steps. In this paper, an independent two-way solving method is presented to determine the time variation of the geometry of the cross-flow filtration cake, so that by simultaneously solving the flow through the lattice Boltzmann (LB), it is possible to solve the convection-diffusion equation, using another mesoscopic method (LB-CA) in a two way coupling manner between flow changes and cake growth. Applying LB-CA provides it for all kinds of internal and external forces effects on particles trajectories to be explicitly taken into account. The proposed model was validated against both of theory of Romero and Davis and some experimental results. Moreover, the model was used to determine external effects which are arisen from static imposition of a DC electric field, on cross-flow filtration outcomes. The calculated results exhibits considerable improvements in flux decline curve and removing of fouling in some areas along the membrane length, as DC voltage rises. Also, optimal conditions with considering the electric poles' size as an optimization parameter shows that with considering the maximum improvement in the flux curve as the target parameter, the electric poles' size has an optimal value.

Keywords Cross-flow Filtration; Cake Formation; Lattice Boltzmann; LB-CA; DC Electric Filed

¹Mechanical Engineering Department, Engineering Faculty, Ferdowsi University of Mashhad, Mashhad, Iran

*Correspondence

Address: Engineering Faculty, Ferdowsi University of Mashhad, Mashhad, Iran Phone: +98 (51) 38805030 Fax: +98 (51) 38805030 teymourtash@um.ac.ir

Article History

Received: August 17, 2018 Accepted: November 2, 2018 ePublished: May 01, 2019

CITATION LINKS

[1] Microfiltration and ultrafiltration: Principles and applications [2] Constant pressure blocking filtration laws-application to power-law non-Newtonian fluids [3] The dynamics of polarisation in unstirred and stirred ultrafiltration [4] Concentration polarization with membrane ultrafiltration [5] A concentration polarization model for the filtrate flux in cross-flow microfiltration of particulate suspensions [6] Modeling of flux decline during crossflow ultrafiltration of colloidal suspensions [7] Concentration polarization of interacting solute particles in cross-flow membrane filtration [8] Crossflow membrane filtration of interacting nanoparticle suspensions [9] A suspension flow model for hydrodynamics and concentration polarisation in crossflow microfiltration [10] Numerical modelling of concentration polarisation and cake formation in membrane filtration processes [11] A lattice Boltzmann model for particle transport and deposition [12] The lattice boltzmann method [13] Numerical simulation of particle capture process of fibrous filters using Lattice Boltzmann two-phase flow model [14] Kinetics of permeate flux decline in crossflow membrane filtration of colloidal suspensions [15] Dielectrophoretic levitation in the presence of shear flow: Implications for colloidal fouling of filtration membranes

Copyright© 2019, TMU Press. This open-access article is published under the terms of the Creative Commons Attribution-NonCommercial 4.0 International License which permits Share (copy and redistribute the material in any medium or format) and Adapt (remix, transform, and build upon the material) under the Attribution-NonCommercial terms.

بررسی عددی تاثیر میدان الکتریکی جریان مستقیم بر مشخصههای اجتماع ذرات در جریان تصفیه عرضی

احسان داورپناه MSc

گروه مهندسی مکانیک، دانشکده مهندسی، دانشگاه فردوسی مشهد، مشهد، ایران

عليرضا تيمورتاش[•] PhD

گروه مهندسی مکانیک، دانشکده مهندسی، دانشگاه فردوسی مشهد، مشهد، ایران

چکیدہ

استفاده از روشهای عددی برای تعیین حدود و نحوه رشد کیک جرمی در فرآیند تصفیه عرضی مورد توجه محققین بوده است. حلهای مذکور که عمدتاً مبتنی بر توسعه روشهای صفر، یک یا دوبُعدی برای تخمین پارامترهای تصفیه معرفی شدهاند، متکی بر حداقل یک مرحله تنظیم روش با استفاده از نتایج آزمایشگاهی هستند. در این مقاله یک روش حل دوسویه مستقل، برای تعیین تغییرات زمانی هندسه کیک جرمی- جریان تصفیه، ارایه شده است. بهطوری که همزمان با حل جریان به روش شبکه بولتزمن، حل معادله انتقال جرم را با استفاده از یک روش مزوسکوپیک دیگر (LB-CA) در یک ارتباط دوسویه بین تغییرات جریان و رشد کیک میسر سازد. روش محاسباتی معرفی شده، امکان اعمال اثر نیروهای داخلی و خارجی بر خط سیر ذرات را فراهم نمودهاست. اعتبار روش محاسباتی، در مقایسه با حل تئوری رومرو- داویس و نتایج آزمایشگاهی، بررسی و تایید شده است. همچنین با استفاده از LB-CA، اثر اعمال میدان الکتریکی جریان مستقیم، بر کیفیت اجتماع ذرات بر سطح غشا و تغییر منحنی شار جریان بررسی و نشان داده شده است که با افزایش ولتاژ جریان مستقیم، بهتدریج از اجتماع ذرات در برخی نواحی غشا ممانعت به عمل آمده، منحنی کاهش شار جریان بهبود قابل ملاحظهای مییابد. همچنین بررسی شرایط بهینه با درنظرگرفتن اندازه پلهای الکتریکی بهعنوان پارامتر بهینهسازی نشان داده است با درنظرگرفتن بیشینه بهبود در منحنی شار جریان بهعنوان پارامتر هدف، اندازه پلهای الکتریکی دارای یک مقدار بهینه است.

کلیدواژهها: تصفیه عرضی، کیک جرمی، شبکه بولتزمن، روش LB-CA، میدان الکتریکی جریان مستقیم

> تاریخ دریافت: ۱۳۹۷/۰۵/۲۶ تاریخ پذیرش: ۱۳۹۷/۰۸/۱۱ *نویسنده مسئول: teymourtash@um.ac.ir

۱– مقدمه

استفاده از غشا برای تصفیه، جداسازی یا تغلیظ جریانهای حاوی ذرات در حوزههای متنوعی از تکنولوژی اعم از فرآیندهای شیمیایی، بیوتکنولوژی، داروسازی و فرآیندهای زیستمحیطی رواج عام یافته است^[1]. آنچه همواره استفاده صنعتی از غشا در فرآیندهای جداسازی را دچار چالش جدی مینماید، رسوب ذرات بر سطح و فضای درون سوراخها است که در نتیجه شار عبوری بهصورت نمایی کاهش پیدا میکند و در نتیجه، کیفیت عملکردی فرآیند جداسازی به رعت کاهش مییابد^[2].

در یک حالت کلی، طراحی آزمایشگاهی سطوح جداساز با درنظرگرفتن اثر همه پارامترهای دخیل در کیفیت و رشد رسوبات و حصول به یک نقطه بهینه در عمل و نتیجه فرآیند جداسازی، فرآیندی بسیار زمانبر و پُرهزینه است. در یک فرآیند تصفیه، عمده پارامترهای کیفی عملکردی غشا به کاهش شار جریان در اثر انسداد غشا با تشکیل و توسعه کیک جرمی، بستهشدن و درونگرفتگی سوراخهای سطح بستگی دارند. بنابراین نتیجه فرآیند بهینهسازی آزمایشگاهی قابل عمومیتیافتن نداشته و شدیداً وابسته به کیفیت ماده و هندسه سطح غشا یا از وجه دیگر وابسته به اندازه، شکل و ماده ذرات است.

در تاریخچه مدلسازی و شبیهسازی فرآیندهای تصفیه، چندین روش شاخص و قابل اعتنا، عمدتاً برای شبیهسازی تشکیل و توسعه کیک جرمی بر سطح غشا یا اندازهگیری اثر ساختار رسوب بر شار جریان ارایه شدهاند. در این رابطه *چوداک* و *فِین*^[3] با استفاده از مدل مقاومتی صفربعدی، چگونگی کاهش شار جریان را پیشبینی کردهاند. در این روش، میزان دبی عبور جریان در هر لحظه با استفاده از یک مقدار شار جریان پایای بهدستآمده از محاسبات آزمایشگاهی تعیین میشود. *یورتر*^[4]، برای شبیهسازی یدیده تصفیه عرضی، معادله سادهشده انتقال جرم را حل کرده است. در روش حل او ویژگی فیزیکی امکان برگشت ذرات به جریان فعال لحاظ شده است. با این حال در این روش هم نیاز به یک ضریب انتقال جرمی تعیین شده با استفاده از نتایج تجربی، جزئی از فرآیند حل خواهد بود. *زیدنی* و *کلتون*^[5]، با فرض این که کاهش شار جریان تنها بهدلیل تشکیل و توسعه کیک جرمی است و همچنین با فرض پخش ذرات در اثر تنش برشی، مساله میکروتصفیه ذرات در جریان عرضی را مورد توجه قرار دادهاند. در این تحقیق، با توجه به استفاده از مکانیزم پخش لزجی ذرات در توضیح نفوذ و نشست ذرات، امکان برآورد انعکاس ذرات رسوبی به جریان فعال لحاظ شده است. با این حال، این دسته از مدلها، یک بُعدی، تحلیلی و نیازمند به تنظیم بخشی از یارامترها با استفاده از آزمایشات تجربی هستند. *لی* و *کلارک*^[6]، با پیشفرض کاهش شار جریان در اثر رشد کیک جرمی که خود بهوسیله مکانیزم انتقال جرم ذرهای توسعه مییابد، مساله اولتراتصفیه در دستهای از مسایل را مورد یژوهش قرار دادهاند. در این روش، حل شبهبعدی-مقاومتی، بدون حل معادلات ناویر- استوکس، در هر گام زمانی، مقدار سرعت جریان برابر با نسبتی از شار جریان در نظر گرفته شده است. سپس با حل معادله انتقال جرم در یک فضای دوبُعدی، در نقاطی که غلظت از حد مشخصی عبور نماید، مقاومت جرم کیک در برابر جریان با استفاده از یک روش موازنه جرمی، تعیین و براساس مقدار جدید مقاومت در سطح غشا، جریان از دیواره غشا بهروزرسانی میشود. *باتاچارجی* و همکاران^[7]، ضمن تلاش برای محاسبه اثرات غلظت و بار الكتريكى ذرات بر ضريب پخش نانوذرات محلول، با درنظرگرفتن یک ساختار مشخص برای رسوب ذرات و حل معادله انتگرالی اورنستین- زرنیک، اثر رسوب ذرات را در قالب یک اختلاف فشار اسمزی لحاظ نمودهاند. این روش محاسباتی، بیشتر در شرایطی کاربرد دارد که کیک جرمی بر سطح تشکیل نمیشود، از این رو با استفاده از این روش، کاهش شار جریان در اثر تشکیل کیک جرمی قابل محاسبه نخواهد بود. در یک تحقیق جدیدتر، *کیم* و همکاران^[8]، با ارایه یک مدل صفربعدی، علاوه بر تغییرات شار جریان، تغییرات ضخامت کیک جرمی را محاسبه کردهاند. در این روش حل، مقاومت کیک جرمی تابعی از یک فاصله تعادلی بین ذرات و از این رو، تابعی از نیروهای حاصل از اثرات الکتریکی ذرات و محیط، اثرات اسیدی محیط، نیروی جذب واندروالسی و نیروی لزجی تعیین شده با استفاده از مدل هیل برای آرایههای مربعی ذرات در نظر گرفته شده است.

نیل به درک صحیحی از ارتباط دوسویه جریان- انتقال جرم، متاثر از رشد کیک جرمی میتواند زمینهساز ایجاد یک روش مدلسازی مستقل از دادههای آزمایشگاهی باشد که این موضوع مورد توجه برخی از محققان قرار گرفته است. در این بین، شاخصترین کار موجود، مقاله *کرومکمپ* و همکاران^[9] است که با استفاده از روش شبکه بولتزمن، به حل معادلات کوپل انتقال جرم (CDE) و ناویر-استوکس پرداختهاند. در این کار ارتباط دوسویه جریان- انتقال جرم

با فرض محیط کیک جرمی بهعنوان یک محیط متخلخل در حال توسعه ایجاد شده است. با این حال با توجه به محدودیتهای فراروی یک فرآیند حل بر پایه روش شبکه بولتزمن، بهویژه الزام حل معادله CDE، در مقياس ميكرومتريك، نتايج ارايه شده بهوسیله این محققان تنها قابل مقایسه با حل تئوری بوده است و روش حل قابل استفاده برای شبیهسازی سلولهای تصفیه در ابعاد حقیقی نیست. همچنین در الگوریتم ارایهشده در این کار، بهطور مشخص جایگاهی برای اعمال اثر نیروهای خارجی تعبیه نشده است. اخیراً *پایپوری* و همکاران^[10]، با ارایه یک روش ترکیبی شبکه بولتزمن- حجم کنترل، مشابه با پژوهش کرومکمپ و همکاران^[9]، مساله تصفیه عرضی را این بار در هندسههایی با ابعادی مشابه با محیطهای واقعی تصفیه حل نمودهاند. اگر چه در این کار به طور تلویحی، اعمال اثر نیروهای خارجی منوط به اصلاح ضرایب انتقال معرفی شده است، با این حال با استفاده از این روش ترکیبی نمیتوان اثر صریح نیروهای خارجی بر خط سیر ذرات را لحاظ نمود. همچنین استفاده از روش حجم کنترل برای حل CDE، در ترکیب با روش شبکه بولتزمن امتیاز ویژه این روش مزوسکوپیک مبنی بر بارگذاری موازی در پردازندههای سیستم را دچار خدشه جدی مینماید که به این ترتیب، زمان محاسبات مىتواند بەشكل قابل توجهى افزايش يابد.

در این مقاله برای شبیهسازی فرآیند میکروتصفیه در ابعادی مشابه با ابعاد حقیقی سلولهای تصفیه عرضی، یک روش محاسباتی بر مبنای استفاده از روش شبکه بولتزمن، برای حل میدان جریان گذرا در ترکیب با روش مزوسکوییک LB-CA برای حل معادله CDE ارایه شده است. مدل LB-CA معرفی شده در این تحقیق، الهامگرفته از الگوریتم مزوسکوییک معرفی شده به وسیله ماسولت و چوپارد است^[11] که بر خلاف کار ارایه شده به وسیله این محققان بر هندسه جریان انطباق کامل یافته است. برای رهیافتی به بارگذاری صحیح LB-CA، در ارتباط با روش شبکه بولتزمن و یارامترهای عملی- هندسی مساله حقیقی، چگونگی تنظیم مدل مونتهکارلوی متناظر با LB-CA، با استفاده از تحلیل چندمقیاسی و در تناظر با معادله CDE بررسی شده است. در نهایت، در این تحقیق پس از بررسى اعتبار روش جامع ارايهشده براى شبيهسازى تصفيه عرضى در مقایسه با مدل تئوری رومرو و داویس و نتایج تجربی موجود، اثر میدان الکتریکی جریان مستقیم (DC) با استفاده از مزیت روش LB-CA در تحلیل اثر نیروهای خارجی، بر هندسه کیک جرمی و برآیند کلی فرآیند تصفیه ملاحظه شده است. همچنین در مورد اندازه بهینه پلهای الکتریکی در تناظر با بیشترین تراوایی ممکن در طول زمان و در ارتباط با ولتاژ الکتریکی متصل به یلها بهطور خاص بحث شده است.

۲ – مدل ریاضی نانو تصفیه عرضی

تصفیه ذرات با استفاده از سطح نیمهتراوا معمولاً با ایجاد جریان بهواسطه یک اختلاف فشار ثابت در دو سوی غشا انجام میشود. در این شرایط، ساز و کار تصفیه را میتوان با توصیف جریان بهوسیله معادلات CDE و اندازه حرکت و حل لاگرانژی دینامیک ذرات محلول محاسبه کرد. اثر ذرات بر جریان شامل تغییر در لزجت موثر نقطهای و تغییر ضریب نفوذ ذرات^[9]، بهعنوان تابعی از غلظت خواهد بود^[7].

در این مقاله، علاوه بر اثرات فیزیکی ناشی از تعامل سیال و نانوذرات کلوئیدی، بهویژه اعمال اثر نیروهای براونی، اثر میدان جریان الکتریکی DC، بر تصفیه عرضی بهعنوان یک عامل

Volume 19, Issue 5, May 2019

ــ بررسی عددی تاثیر میدان الکتریکی جریان مستقیم بر مشخصههای اجتماع ذرات در جریان تصفیه عرضی ۱۰۶۳

ضدرسوبی مورد توجه قرار گرفته است. بنابراین علاوه بر معادلات ناویر– استوکس، (مطابق با نوشتار معادلات ۱ و ۲)، معادله میدان الکتریکی (معادله ۳) برای تعیین پتانسیل الکتریکی در نقاط میدان محاسباتی حل خواهد شد.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{u}) = 0 \tag{1}$$

$$\frac{\partial(\rho\vec{u})}{\partial t} + (\vec{u}\cdot\vec{\nabla})(\rho\vec{u}) = -\vec{\nabla}p + \nu(\phi)\nabla^{2}(\rho\vec{u}) + \vec{F}_{\text{bulk}}$$
(Y)

$$\nabla^2 \psi = 0 \tag{()}$$

در معادله ۲، ϕ پارامتر غلظت و $ar{F}_{
m bulk}$ چگالی نیروی کالبدی هستند و همچنین در معادله ۳، ψ مقدار پتانسیل الکتریکی در هر نقطه است.

برای تعیین رابطه تابعی بین لزجت سینماتیک (*v*) و غلظت، از مدل ارایهشده بهوسیله *رومرو و داویس*، مطابق با رابطه ۴ میتوان استفاده کرد^[9].

$$\nu = \nu_0 \left[1 + 1.5 \frac{\phi}{\left(1 - \frac{\phi}{\phi_c} \right)} \right]^2$$
 (*)

در رابطه ۴، ϕ_c بیشینه غلظت ذرات کروی در کیک جرمی و معمولاً برابر با ۰/۶ در نظر گرفته میشود. همچنین ۷_۵، برابر با لزجت سینماتیک سیال عاری از ذرات است.

برای تعیین دینامیک ذرات و متعاقباً تغییرات غلظت ماده جامد در محیط لازم است تا اثر نیروی درگ سیال و نیروی براونی وارد بر ذرات در شرایط جریان کلوئیدی لحاظ شود. در این صورت با درنظرگرفتن معادله لنگوین (کیم- زیدنی)، برای حل دینامیک ذرات بهشکل رابطه ۵، با توجه به هدف این مقاله در تعیین اثر میدان الکتریکی DC بر مشخصههای رسوبی، علاوه بر عبارت اول سمت راست که اثر نیروی درگ جریان را لحاظ نمودهاست، اثر نیروی الکتریکی ($\vec{F}_{{\rm Br},p}$) و نیروی براونی ($\vec{F}_{{\rm Br},p}$) در محاسبه دینامیک هر ذره لحاظ میشود.

$$m_p \frac{d\vec{u}_p}{dt} = 6\pi\mu a H_s (\vec{u}_p - \vec{u}_f) + \vec{F}_{\text{Br},p} + \vec{F}_{\text{DEP},p} \qquad (\Delta)$$
$$+ \sum \vec{F}_{\text{ext},p}$$

در رابطه ۵، a شعاع ذره، μ ویسکوزیته دینامیکی سیال و پانویسهای p و f بهترتیب مبین حالت ذره و سیال هستند. همچنین H_s یک ضریب اصلاحی برای اعمال اثر غلظت است^[8] که مطابق با رابطه ۶ بهعنوان تابعی از غلظت ماده در کیک جرمی (ϕ_c) تعیین میشود.

$$H_{\rm s} = \frac{1 + \binom{2}{3}\phi_{\rm c}^{5/3}}{1 - \binom{3}{2}\phi_{\rm c}^{1/3} + \binom{3}{2}\phi_{\rm c}^{5/3} - \phi_{\rm c}^2} \tag{8}$$

بهعلاوه نیروی براونی مطابق با رابطه ۷ تعیین میشود.

$$\vec{F}_{\mathrm{Br},p} = \vec{\xi} \sqrt{\frac{12\pi\mu a k_{\mathrm{B}} T}{\Delta t}} \tag{Y}$$

در رابطه ۲ ، $k_{
m B}$ ثابت بولتزمن، T دما و ξ یک بردار تصادفی گوسی است.

Modares Mechanical Engineering

در نهایت برای اعمال اثر نیروی دیالکتریک بر ذراتی که در محیط یک میدان الکتریکی عمل میکنند، از رابطه ۸ استفاده میشود.

$$\vec{F}_{\text{DEP},p} = 2\pi a^3 \varepsilon_f \text{Re} \Big[f_{CM}(\varepsilon_p^*, \varepsilon_f^*) \Big] \vec{\nabla} \Big(\vec{E} \cdot \vec{E} \Big) \qquad (\wedge)$$

Re $[f_{CM}(\varepsilon_p^*, \varepsilon_f^*)]$ میدان الکتریکی و $\vec{E} = \vec{\nabla} \psi$ ، ۸ در رابطه بخش حقیقی فاکتور کلاسیوس – موستی (با تعریف ارایه شده در رابطه ۹) بهعنوان تابعی از دو ضریب دی الکتریکی مختلط ذره جامد ε_f^* و سیال ε_f^* است.

$$f_{CM}(\varepsilon_p^*, \varepsilon_f^*) = \frac{\varepsilon_p^* - \varepsilon_f^*}{\varepsilon_p^* + 2\varepsilon_f^*} \tag{9}$$

در یک حالت کلی، ضریب دیالکتریک مختلط هر ماده (*ع) بهعنوان تابعی از فرکانس زاویهای میدان الکتریکی (ه) و رسانش ماده (ס) برابر با رابطه ۱۰ است.

$$\varepsilon^* = \varepsilon - i(^{\sigma}/_{\overline{\omega}}) \tag{1}$$

 $\varepsilon^* = \varepsilon$ و بنابراین $\overline{\varpi} = \infty$ ، DC که در حالت میدان الکتریکی است.

۳– الگوريتم حل

برای تعیین کمی رشد کیک جرمی در تصفیه عرضی نانوذرات و همچنین تعیین منحنی تغییرات زمانی شار جریان عبوری از غشا بهعنوان تابعی از اندازه ذرات، اختلاف فشار، مکانیزمهای انعکاس ذرات به جریان فعال و دیگر عوامل فیزیکی با اثرات ثانویه، حل معادلات ۱، ۲ و ۵ را میتوان بهعنوان راهکاری جامع در نظر گرفت. الگوریتم حل معرفیشده در این بخش (شکل ۱) میتواند بسته به ویژگیهای خاص هر مساله تغییر یا توسعه یابد. همان گونه که در این شکل مشاهد می شود، در ابتدای محاسبات، غلظت در همه نقاط میدان محاسباتی برابر با یک مقدار اولیه (ϕ_0) در نظر گرفته می شود. پس از آن در مرحله A، با استفاده از یک روش حل مناسب، میدان جریان پایا در محیط محاسباتی تشکیل میشود. در مرحله B، با حل معادله لنگوین، تغییرات سرعت و موقعیت مرکز هندسی ذرات، براساس میزان نیروی درگ، نیروی براونی، نیروی الکتریکی و سایر نیروهای خارجی اعمالی به هر ذره محاسبه می شود. در مرحله C و پس از به روزرسانی موقعیت ذرات در مرحله B، مقدار غلظت در هر نقطه میدان محاسباتی بهروزرسانی خواهد شد. در مرحله D براساس رابطه ۱۱، اندازه نیروی کالبدی حاصل از (\vec{F}_{cake}) تخلخل کیک ذرات که در مقابل جریان مقاومت میکند اتعیین می شود. پارامتر K_{cake} در این رابطه مطابق با رابطه ۲ (رابطه کارمن- کوزنی^[9])، بهعنوان تابعی از مقاومت ماده کیک ، و $\phi_{
m c}$ و μ تعیین می شود. μ ($R_{
m cake}$)

$$\vec{F}_{cake} = \frac{\vec{u}}{\rho K_{cake}} \left(\frac{\phi}{\phi_c} \right) \tag{11}$$

$$\frac{1}{K_{\text{cake}}} = \mu R_{\text{cake}} = \mu \frac{C \phi_c^2 S_c^2}{(1 - \phi_c)^3} \tag{17}$$

r/a در رابطه ۱۱ پارامتر C، یک مقدار ثابت و برابر با ۵ و $S_{
m c}$ برابر با n/a هستند.

در نهایت، در مرحله E، براساس تعداد نقاطی که وضعیت آنها از یک نقطه سیالی به یک نقطه کیک جامد تغییر یافته است و در صورت اهمیت میزان این تغییرات، مجدداً حلکننده میدان جریان فراخوانی میشود، در غیر این صورت، الگوریتم حل به جهت B

خواهد چرخید و به این ترتیب در هزینه محاسباتی صرفهجویی خواهد شد.



برای اعمال اثر مقاومتی محیط متخلخل غشا در مقابل جریان، مشابه با نحوه عکسالعمل کیک ذرات در برابر جریان، یک پارامتر $R_{\rm m}$ ، معرف مقاومت ماده متخلخل غشا در برابر جریان و معادلاً یک پارامتر $K_{\rm m}$ که با نسبت معکوس به ضخامت غشا ($\delta_{\rm m}$) و مقاومت غشا وابسته است، (رابطه ۱۳)، در نظر گرفته میشود. همچنین مشابه با رابطه ۱۱، نیروی مقاومتکننده غشا در برابر جریان، مطابق با رابطه ۱۴ خواهد بود

$$\frac{1}{K_{\rm m}} = \mu \frac{R_{\rm m}}{\delta_{\rm m}} \tag{14}$$

$$\vec{F}_{\rm m} = \frac{\vec{u}}{\rho K_{\rm m}} \tag{14}$$

۴- روش عددی

۴– شبکه بولتزمن MRT، تعیین دینامیک جریان

برای حل میدان جریان در مرحله A فلوچارت شکل ۱، لازم است تا از یک روش مناسب برای حل معادلات ناویر – استوکس بهره گرفته شود. استفاده از روش شبکه بولتزمن MRT با قابلیت برنامهریزی ویژه و سطح پایداری بالاتر نسبت به روش شبکه بولتزمن BGK، در حالی که همه امتیازات ویژه یک الگوریتم BGK در آن ظهور و بروز دارد، میتواند بهعنوان ابزاری مناسب برای شبیهسازی و بررسی پدیدههای مختلف جریانی بهویژه مسایلی که در آنها بیش از دو مقیاس زمانی در جزئیات فرآیند جریانی حضور دارند، مانند مساله حرکت براونی نانوذرات در یک محیط آرام، مورد استفاده قرار گیرد. در الگوریتمهای BGK و MRT، روش، براساس حل صریح دومرحلهای (مرحله برخورد محلی ذرات شبکه و مرحله مهاجرت ذرات از شبکه) معادله شبکه بولتزمن (LBE) بنا شده است.

LBE شکل جبری شده معادله بولتزمن و توصیف کننده تغییرات LBE سینماتیک ذرات توزیع شده در یک فضای bبعدی، $\vec{x} \in \delta_x \mathbb{Z}^d$ (\mathbb{Z} : $\vec{x} \in \delta_x \mathbb{Z}^d$ (\mathbb{Z} : σ_x مجموعه اعداد صحیح) و در طول گامهای زمانی $\mathbf{z} = \delta_t \mathbb{N}_0$ (\mathbf{z} : $\delta_t \{0, 1, ...\}$) مجموعه اعداد حسابی) است. مجموعه سرعتهای شبکه در LBE که جهت مجاز انتقال و نفوذ ذرات را مشخص می کند، معمولاً متقارن است. بنابراین تعداد سرعتهای شبکه برابر با ((1 + b) = p، شامل یک سرعت صفر و d سرعت غیرصفر است. یک معمولاً عنوا به سرعت معمولاً معمولاً می کند، معمولاً معار یک محمول می کند، معمولاً متقارن است. بنابراین تعداد سرعتهای غیرصفر است. یک مدل H

بهصورت DdQq نامیده میشود. در این مقاله بهمنظور شبیهسازی جریان در محیط دوبُعدی از شبکه D2Q9، با سرعتهای شبکه $\{\vec{c}_i|i=0,1,...,8\}$

در حالت کلی، معادله LBE دومرحلهای را میتوان با نوشتار برداری ۱۵ ارایه نمود.

$$f_i(\vec{x} + \vec{c}_i \delta_t, t_n + \delta_t) = f_i^*(\vec{x}, t_n) = \Omega(f_i) + F_i \qquad (1\Delta)$$

که بالانویس *، در معادله ۱۵ نمایشگر وضعیت پسابرخورد است. برای شبکه D2Q9، سرعتهای شبکه بهصورت رابطه ۱۶ تعریف میشوند.

$$\vec{c}_i = \begin{cases} (0,0), & i = 0\\ (\pm 1,0)c, (0,\pm 1)c & i = 1-4\\ (\pm 1,\pm 1)c, & i = 5-8 \end{cases} \tag{15}$$

در اینجا δ_x/δ_t و δ_x و δ_x و δ_z گامهای مکانی و زمانی هستند. در رابطه ۱۵، F_i و $f_i(\vec{x}, t_n)$ بهترتیب بردار نیروی وارد بر المان سیال در هر جهت شبکه و بسط هرمیت تابع توزیع بولتزمن در شبکه هستند. همچنین Ω عملگر برخورد است.

ممانهای پایای جریان، بهطور مثال چگالی ذرات شبکه ho و ، تابعی از تابع توزیع f_i هستند. برای اطلاعات بیشتر $j_{\alpha} = \rho u_{\alpha}$ در زمینه چگونگی بارگذاری دینامیک شبکه بولتزمن و اعمال شرایط مرزی میتوان به منبع کروجر و همکاران^[12] مراجعه کرد. یک محدودیت آشکار بر استفاده از روش شبکه بولتزمن در حل مسایل مختلف، ارتباط ویژه گام زمانی با گام مکانی حل مساله است. بهعنوان مثال زمانی که طول محیط جریان (در یک مساله تصفیه عرضی در محیط یک ماکروفیلتر) ۷میلیمتر است و ۴۰۰ نقطه با چیدمان همفاصله مربعی (مورد استفاده در روش استاندارد شبکه بولتزمن) در این طول، آرایش نقاط محاسباتی محیط حل را ایجاد میکنند که برای گام مکانی ۵–۱/۷۵eمتر، گام زمانی برابر با ۵-۵/۱۵ثانیه خواهد بود. به این ترتیب، برای حل یک فرآیند تصفیه با دوره زمانی ۱۰۰دقیقه، فرآیند حل باید حدود ۲میلیون گام زمانی یی در یی اجرا شود. این حجم از محاسبات برای اجرا در یک کامپیوتر شخصی، اگر نه غیرممکن که بسیار پُرهزینه است، با اهداف اصلی فرآیند شبیهسازی در رقابت با محاسبات آزمایشگاهی در تناقض قرار خواهد داشت.

محدودیت دوم بر استفاده از روش شبکه بولتزمن استاندارد، چیدمان مربعی نقاط است. اگر چه نویسندگان این مقاله با استفاده از مزایای مترتب بر یک شبکه بولتزمن MRT، روش لازم برای استفاده از چیدمانهای غیرمربعی نقاط (تولید مش در دستگاه متعامد) در شبکه بولتزمن را توسعه و مورد استفاده قرار دادهاند، با این حال از نظر حجم محتوای فعلی که خارج از حوصله مینماید و همچنین با توجه به برخی مزایای استفاده از روشهای ترکیبی در حل مسایل کاربردی، آن گونه که پیش از این اشاره شد، به جای حل مستقيم معادله ديفرانسيل جزئى CDE (مانند برخى مطالعات ^[9] [10])، حل مزوسکوییک معادله لنگوین برای تعیین دینامیک ذرات مورد استفاده قرار گرفته است. در این حالت، با توجه به ضخامت ناچیز کیک جرمی (در حد چند میکرومتر) در مقابل با بعد عرضی ماکروجریان مورد نظر، دینامیک ذرات متحرک تنها در بخش نزدیک به سطح غشا (در محدودهای با عرضی برابر با ۵% عرض جریان اصلی) مورد توجه قرار گرفته و برای باقیمانده جریان فرض برابری غلظت با مقدار ϕ_0 ، پیشدرآمد فرآیند حل منظور شده است. برای حل مزوسکوپیک معادله لانگوین ذرات در این محدوده، در بخش

Volume 19, Issue 5, May 2019

بدین مروسکوپیک – مونته کارلوی LB-CA براساس الگوریتم معرفی شده توسط *ماسولت* و *چوپارد* (حرکت محدود و اتفاقی ذرات در هندسه سلولی) ^[11] معرفی شده است.

۴–۲– روش LB-CA برای حل مزوسکوپیک معادله لانگوین

در حالت کلی، انتقال ذرات در سیال متاثر از اثر ترکیبی و دوسویه جریان- ذره، نیروهای ناشی از شتاب ثقل و شناوری و بیش از اینها نیروی براونی ذرات است. در ابتدا *ماسولت* و چوپارد[11]، در راستای شبیهسازی یدیدههایی مانند بارش برف، یک مدل CA را پیشنهاد نمودند که در آن حرکت ذرات با استفاده از یک الگوریتم مونتهکارلو پیشبینی میشود. در این شیوه حل به هر سلول محاسباتی، تعداد معینی از ذرات $N_p(ec{x},t)$ اختصاص داده می شود. سیس ذرات تنها مجاز به حرکت در جهات خاصی خواهند بود که بهوسیله شبکه تعیین میشود (دقیقاً مشابه با حرکت ذرات در شبکه بولتزمن). ایده کلیدی در این روش، جهش ذرات به نقاط همسایه براساس مقایسه تصویر بردار جابهجایی هر ذره، $\delta ec x$ ، (شکل a -۲) در دو جهت اصلی شبکه (راست با شمارنده ۱، چپ با شمارنده ۳، بالا با شمارنده ۲ و یایین با شمارنده ۴)، با یک زوج عدد تصادفی تولیدشده بهوسیله پردازنده محاسباتی قرار دارد. در شکل ۲- c، مثالی از قاعده جابهجایی ذره در یک شبکه D2Q9 مستطیلی، در قیاس با جابهجایی لاگرانژی (شکل ۲– b) نمایش داده شده است. استفاده از این روش، تضمینکننده مدیریت کمهزینه و بیاشکال حرکت ذرات در حدود نقاط محاسباتی خواهد بود. در حالت کلی، جابهجایی ذره بهازای گام زمانی (δt) ، معمولاً منجر به جایابی ذره در یک نقطه محاسباتی دیگر در همسایگی وضعیت فعلی آن نخواهد شد. از این رو همواره موقعیت ذره به یک نقطه فیمابینی (شکل ۲- b) انتقال خواهد یافت. این موضوع، بهویژه زمانی که در چالش با شرایط مرزهای جامد متغیر یا ثابت با زمان هستیم، مانند شرایط رشد کیک جرمی، پیچیدگیهایی را به روند حل تحمیل مینماید. برای ورود درست به این چالش در هر گام زمانی، یک پارامتر احتمالاتی (*Pr*_i) براساس نسبت اندازه جابهجایی (در جهات اصلی ۱، ۲، ۳ و ۴)، به اندازه مش مطابق با رابطه ۱۷ تعیین می شود.

$$Pr_{i} = \max\left(0, \vec{u}_{p} \cdot \vec{c}_{i} \frac{\Delta t}{\Delta x}\right)$$
$$= \max\left(0, \frac{\Delta \vec{x}_{p}}{\Delta x} \cdot \vec{c}_{i}\right), i = 1 - 4$$
(1Y)

که $\Delta \vec{x}_p = \vec{u}_p \Delta t$ است. همچنین موقعیت بعدی ذره (\vec{x}_p^*) با استفاده از رابطه
۸۸ تعیین میشود.

$$\vec{x}_p^* = \vec{x}_p + \lambda_1 \vec{c}_1 + \lambda_2 \vec{c}_2 + \lambda_3 \vec{c}_3 + \lambda_4 \vec{c}_4 \tag{1}$$

در رابطه ۱۸، پارامترهای λ_i ، متغیرهای بولی هستند و مقادیر λ_i با احتمال Pr_i برابر با یک هستند. بهطور مثال زمانی که 0 $Pr_1 = 9$ و احتمال $Pr_i = Pr_4 = 0$ هستند (متعاقباً 0 $Pr_4 = 0$ و $Pr_3 = Pr_4 = 0$ هستند (متعاقباً 0 $Pr_4 = 0$ و $\lambda_4 = 0$)، یعنی زمانی که ذره در اثر نیروهای اعمالی دارای جابهجاییهای مثبت در جهات راست و به سمت بالاست (شکل ۲-م)، احتمال این که ذره در موقعیت فعلی خود بدون حرکت باقی (م)، احتمال این که ذره در موقعیت فعلی خود بدون حرکت باقی بماند (0 $Pr_4 = 0$, $\lambda_1 = 0$, $\lambda_2 = 0$)، برابر با $(-Pr_2 - 1)(-Pr_1)$ خواهد بود. بهمنظور بارگذاری این رویه انتقالی، در هر گام زمانی و برای هر ذره واقع در مرکز یک مش، یک زوج عدد تصادفی (r_1, r_2) ، بودسیله یک روال مناسب تولید اعداد تصادفی تولید می شود. پس از آن با الگوریتم مونتهکارلو ارایه شده در رابطه ۱۹، وضعیت نهایی

Modares Mechanical Engineering

۱۹۶۶ احسان داورپناه و علیرضا تیمورتاش ______ ذره $(ec{x}_p^*)$ ، از وضعیت اولیه $(ec{x}_p)$ ، اعداد تصادفی r_1 و r_2 و دو عدد Pr_1 و Pr_1 و عیین خواهد شد.

$$\begin{cases} r_{1} > Pr_{1}, r_{2} > Pr_{2} \rightarrow \vec{x}_{p}^{*} = \vec{x}_{p} \\ r_{1} < Pr_{1}, r_{2} > Pr_{2} \rightarrow \vec{x}_{p}^{*} = \vec{x}_{p} + \vec{c}_{1}\Delta t \\ r_{1} > Pr_{1}, r_{2} < Pr_{2} \rightarrow \vec{x}_{p}^{*} = \vec{x}_{p} + \vec{c}_{2}\Delta t \\ r_{1} < Pr_{1}, r_{2} < Pr_{2} \rightarrow \vec{x}_{p}^{*} = \vec{x}_{p} + \vec{c}_{5}\Delta t \end{cases}$$

$$(19)$$



شکل ۲) نمایهای از انتقال ذرات با استفاده از روشهای دنبالکردن لاگرانژی و دنبالکردن با استفاده از الگوریتم LB-CA؛ a) حرکت ذره نسبت به شبکه D2Q9، (b) حرکت لاگرانژی ذرات نسبت به شبکه، c) حرکت نسبت به شبکه براساس روش LB-CA، d) نمایهای از هندسه سلولی یک بُعدی و توابع احتمالاتی متناظر با مهاجرت ذرات از و به سلول مرکزی

استفاده از LB-CA، منوط به استفاده از روش شبکه بولتزمن در حل جریان نیست و این روش در ترکیب با هر حلکننده جریان دیگری هم قابل استفاده خواهد بود. همچنین انتخاب شبکه حرکت ذرات در LB-CA، محدود به شبکههای متقارن- متعامد مانند D2Q9 نیست و از این رو استفاده از این روش در محیط نقاط محاسباتی بیست و از این رو استفاده از این روش در محیط نقاط محاسباتی بیست و از این رو استفاده از این روش در محیط نقاط محاسباتی بیست و از این رو استفاده از این روش در محیط نقاط محاسباتی بیست و از این رو استفاده از این روش در محیط نقاط محاسباتی این با توجه به سینماتیک LB-CA (رابطه ۱۹)، تعیین وضعیت ذره این با توجه به سینماتیک LB-CA (رابطه ۱۹)، تعیین وضعیت ذره در نقاط همسایه وابستگی ندارد. به این ترتیب، فرآیند حل، بینیاز از فرآیندهای متعارف گامزنی متداول در روشهایی مانند حجم محدود و غیره و با شروع از هر نقطه در میدان محاسباتی پیش خواهد رفت. یعنی پردازنده میتواند همزمان همه سرنخهای پردازشی (هر هسته یک سرنخ) را بی نیاز از تعیین تکلیف داده در سایر نقاط همسایه به فرآیند حل اختصاص دهد.

اگر چه تاکنون در کارهایی^[13] که در آنها مساله تصفیه نانوذرات غبار از جریان هوا مورد پژوهش قرار گرفته، از روش LB-CA بهجای حل معادله انتقال جرم (CDE) برای تعیین دینامیک ذرات بهره گرفته شده، با این حال مکانیزم حرکت پلهای ذرات در LB-CA با معادله CDE، بهدرستی مقایسه نشده است و بنابراین کیفیت اعداد تصادفی مورد نیاز برای بارگذاری این روش عددی مشخص نیست. در ادامه، برای سادگی و همچنین اختصار در بحث، معادله CDE یک بعدی از دینامیک LB-CA استخراج شده و در مورد لوازم

بارگذاری LB-CA بحث شده است.

(٢٠)

۲-۴–۱ استخراج معادله CDE یک بُعدی از LB-CA

همان طور که بهصورت ضمنی در بخش قبل به آن اشاره شد، در یک فضای دوبُعدی، ذرات در هر سلول از ۸ سلول همسایه آن تامین میشوند و ذرات سلول به نوبه خود امکان مهاجرت از، یا باقیماندن در، سلول فعلی را خواهند داشت.

بهطور مشابه در یک فضای یک بعدی ذرات هر سلول، حاصل مهاجرت ذرات از دو همسایه قبلی و بعدی به موقعیت سلول و مهرجرت ذرات از دو همسایه قبلی و بعدی به موقعیت سلول و همچنین مهاجرت یا ابقای ذرات سلول هستند. وضعیت سه سلول مورد بحث در محیط یک بعدی در شکل ۲- d نمایش داده شده می توانند با احتمال $T_{i,1}$ (در صورتی که جهت سرعت ذره به سمت راست باشد)، به همسایه بعدی (سلول f) یا با احتمال $Pr_{i,2}$ (در صورتی که جهت سرعت ذره به ممت صورتی که جهت سرعت $Pr_{i,2}$ (در صورتی که جهت سرعت $Pr_{i,2}$) (در صورتی که جهت سرعت $Pr_{i,2}$ (در صورتی که جهت سرعت ذره به سمت صورتی که جهت سرعت ذره به سمت مورتی که جهت سرعت ذره به سمت مورتی که جهت می واند و معایه قبلی $Pr_{i,2}$ (در سلول f)، مهاجرت نمایند. همچنین ذرات سلول f با احتمال Pr_{f} , و ذرات سلول f با احتمال Pr_{f} , به سلول i وارد خواهند شد. بنابراین معادله دینامیک انتقال ذرات را میتوان به شکل رابطه ۲۰ بوشت.

$$N_{i}^{1} = N_{i}^{0} - N_{i}^{\text{out}} + N_{f}^{\text{in}} + N_{h}^{\text{in}}$$

که N_i^0 تعداد اولیه ذرات در سلول i، N_i^{out} ذرات مهاجرت کرده از N_b^{in} تعداد اولیه ذرات در سلول i از سلول f و N_f^{in} ذرات ورودی به سلول i از سلول f و N_f^{in} درات در معدار هر یک از ورودی به سلول i از سلول b هستند. بنابراین مقدار هر یک از Pr_{i,2}, $Pr_{i,1}$ از احتمالات انتقال N_f^{in} , N_i^{out} , N_i^0 عبارات N_f^{in} , N_i^{out} در وابط ۲۴–۲۲ تعیین می شوند.

$$N_i^0 = \phi_i A_{\text{cell}} \tag{(Y)}$$

$$N_i^{\text{out}} = \phi_i (Pr_{i,1} + Pr_{i,2}) A_{\text{cell}} \tag{(YY)}$$

$$N_f^{\text{in}} = \phi_f P r_f A_{\text{cell}} \tag{Y}$$

$$N_b^{\rm in} = \phi_b P r_b A_{\rm cell} \tag{(YF)}$$

در اینجا، ϕ چگالی ذرات بر واحد سطح و $A_{
m cell}$ مساحت سلول هستند.

به این ترتیب، با جایگذاری روابط ۲۴–۲۱ در رابطه ۲۰، معادله انتقال سلولی بهصورت رابطه ۲۵ تغییر مییابد.

$$\phi_i^1 = \phi_i \left(1 - \left(Pr_{i,1} + Pr_{i,2} \right) \right) + \phi_f Pr_f$$

+ $\phi_b Pr_b$ (Y Δ)

با درنظرگرفتن بسط تیلور (با دقت مرتبه دوم) عبارات $\phi_f \phi_b$ و ϕ_i ، حول مقدار ϕ_i و بسط تیلور (با دقت مرتبه اول) عبارات Pr_f و Pr_b ، حول مقدارهای بهترتیب $Pr_{i,2}$ و $Pr_{i,1}$ ، و جایگذاری در رابطه ۲۵ داریم:

$$\begin{split} \phi_{i}^{1} &= \phi_{i} \left(1 - \left(Pr_{i,1} + Pr_{i,2} \right) \right) \end{split} \tag{Y5} \\ &+ \left(\phi_{i} + \frac{\partial \phi_{i}}{\partial x} \delta x + \frac{1}{2} \frac{\partial^{2} \phi_{i}}{\partial x^{2}} \delta x^{2} \right) \left(Pr_{i,2} + \frac{\partial Pr_{i,2}}{\partial x} \delta x \right) \\ &+ \left(\phi_{i} - \frac{\partial \phi_{i}}{\partial x} \delta x + \frac{1}{2} \frac{\partial^{2} \phi_{i}}{\partial x^{2}} \delta x^{2} \right) \left(Pr_{i,1} - \frac{\partial Pr_{i,1}}{\partial x} \delta x \right) \end{split}$$

با توجه به رابطه سرعت ذره و احتمالات $Pr_{i,1}$ و $Pr_{i,2}$ (مطابق با رابطه ۲۷):

$$u_p \frac{\delta t}{\delta x} = Pr_{i,1} - Pr_{i,2} \tag{YY}$$

حاصلضرب جملات در رابطه ۲۶، منتج به رابطه ۲۸ خواهد شد.

$$\frac{\partial \phi_{i}}{\partial t} + \frac{\partial (\phi_{i}u_{p})}{\partial x} = \left[\frac{1}{2} \left(Pr_{i,1} + Pr_{i,2}\right) \frac{\delta x^{2}}{\partial t}\right] \frac{\partial^{2} \phi_{i}}{\partial x^{2}} \\ + \frac{\partial \phi_{i}}{\partial x} \frac{\partial \left(Pr_{i,1} + Pr_{i,2}\right)}{\partial x} \frac{\delta x^{2}}{\partial t} \qquad (YA) \\ - \frac{1}{2} \frac{\partial^{2} \phi_{i}}{\partial x^{2}} \frac{\partial u_{p}}{\partial x} \delta x^{2}$$

که $\partial t = (\phi_i^1 - \phi_i)/\partial t$ است. همچنین در رابطه ۲۸، عبارت سوم سمت راست معادله در مقایسه با سایر عبارات، بهعلت ماهیت شبه تراکمناپذیر جریان در شبکه بولتزمن، حداقل دو مرتبه کوچکتر است، بنابراین از معادله حذف میشود. همچنین برای مشابهت کامل معادله ۲۸، با معادله CDE یک بعدی در هر نقطه (رابطه ۲۹):

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial (u_p \phi)}{\partial x} = D \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \tag{Y9}$$

لازم است در فضای یک بُعدی در هر نقطه:

$$D = \frac{1}{2} (Pr_1 + Pr_2) \frac{\delta x^2}{\partial t} \tag{(Ψ.)}$$

و بهطور مشابه در فضای دوبُعدی در هر نقطه

$$D = \frac{1}{2} \left(Pr_{\rm x} + Pr_{\rm y} + Pr_{\rm x}Pr_{\rm y} \right) \frac{\delta r^2}{\partial t} \tag{(41)}$$

 $Pr_{\rm y}=(Pr_2+\ Pr_{\rm x}=(Pr_1+Pr_3)$ باشد که در این رابطه $\delta r_{\rm y}=Pr_{\rm y}$ و δr کمینه اندازه گام مکانی هستند.

بنابراین تولید اعداد تصادفی با توزیع احتمال یکنواخت با مقدار متوسط غیرصفر میتواند پاسخگوی فرآیند حل باشد. همچنین برای مشابهت کامل بین معادلات ۲۸ و ۲۹ لازم است که عبارت سوم سمت راست معادله ۲۸ که یک مرتبه از دو عبارت اول کوچکتر بوده، حذف شود. در این صورت در هر نقطه δPr از مرتبه بزرگی یک (1) o خواهد بود. یعنی با شروع از یک یا چند نقطه مبنا در میدان حل (که این نقاط حداقل $x \delta x$ با هم فاصله دارند)، باید تغییرات δPr در هر نقطه به نحوی تنظیم شود که نسبت به سایر نقاط تعیین وضعیتشده همسایه در گام زمانی فعلی کوچکتر از (۱۰ باشد.

۴-۲- روش حجم کنترل و حل معادله پتانسیل الکتریکی

برای حل سلولی دینامیک ذرات، در شرایطی که میدان الکتریکی بر خط سیر ذرات تاثیر قابل توجهی دارد، لازم است تا عبارت باید معادله $F_{\text{DEP},p} = F_{\text{DEP},p}(x,y)$ باید معادله π با یک الگوریتم عددی مناسب حل شود. در این کار، برای حل معادله پتانسیل الکتریکی، یک روش حجم کنترل ضمنی استفاده شده است. هندسه نقاط به نحوی است که تعداد سلولها و شبکههای مستطیلی آرایشیافته در هر ردیف با هم برابرند شبکههای مستطیلی آرایشیافته در هر ردیف با هم برابرند ($max_{\text{Ib}} = imax_{\text{FV}}$) محینین نسبت تعداد سلولها در هر ستون به تعداد شبکهها در آن ($max_{\text{FV}}/jmax_{\text{Ib}}$) مقداری محیح بزرگتر یا مساوی یک (دراین مقاله $Jmax_{FV}/Jmax_{1b}$) معداری برابر با ۱۵) است. در این کار بهعلت ضخامت ناچیز کیک جرمی در قیاس با بعد جریان در ماکروسلول تصفیه، حل معادله π ، تنها یک برا و در ابتدای محاسبات انجامشده $jmax_{\text{Ib}}$ برابر با ۵% عرض جریان در نظر گرفته شده است.

۵– اعمال روش پیشنهادی به یک مساله نوعی

محیط جریان تصفیه عرضی مطابق با شکل ۳ در نظر گرفته شده است. جریان با نمایه سرعت شبه سهموی در اثر اختلاف فشار در

برسی عددی تاثیر میدان الکتریکی جریان مستقیم بر مشخصههای اجتماع ذرات در جریان تصفیه عرضی ۱۰۶۷ P_{out} و P_{out} و P_{out} و اختلاف فشار جریان اصلی و $\frac{\partial \phi}{\partial t}$ و سوی کانال P_{in} و اختلاف فشار جریان اصلی و $\frac{\partial \phi}{\partial t}$ پایین دست غشای متخلخل (TMP) تشکیل می شود. رابطه بین TMP و فشار در پایین دست المان تصفیه، P_{per} مطابق با رابطه TMP در نظر گرفته می شود. در این رابطه، L_0 طولی برابر فاصله از ورودی کانال تا نیمه طول غشا است.

$$TMP = P_{\rm in} - \frac{L_0}{L} (P_{\rm in} - P_{\rm out}) - P_{\rm per} \tag{(44)}$$

در انجام محاسبات اختلاف فشار TMP، در بازه ۲۱ تا ۶۱kpa تغییر داده شده است. همچنین اندازه ذرات در حدود ذرات کلوئیدی و از مرتبه ۱۰۰nm (دو مقدار ۱۵۰ و ۳۰۰nm) در نظر گرفته شده و غلظت ماده جامد در محلول بر حسب نسبت سطح به سطح، معادل با *-۰۱×۸ حجم به حجم در شرایط آزمایشگاهی برابر با ^۳-۱۰×۹ فرض شده است. بنابراین با نسبت اندازه $\delta x/\delta y$ -۱۵ برای هر سلول، در ابتدا در هر سلول برای اندازه ذرات ۱۵۰ و ۳۰۰۰m بهترتیب و بهطور متوسط ۲ و ۱/۵ ذره قرار داده شدهاند. علاوه بر این برای محاسبه اثر ميدان الكتريكي DC، بر فرآيند تصفيه عرضي ضريب دىالكتريك سیال حامل (آب) ۸۰ و ضریب دیالکتریک ماده جامد (SiO₂) برابر با ۳/۹ هستند. همچنین برای تشکیل میدان الکتریکی مطابق با شکل ۳، هندسه ممبرین از پلهای الکتریکی تراوایی تشکیل شده که اندازه گام پلها ۲برابر عرض هر پل بوده و به هر پل الکتریکی، یک ولتاژ الکتریکی DC معین، ($\psi = \psi_m$)، متصل شده است. مقدار ولتاژ DC، بین صفر تا ۵۰۰۷ و اندازه عرض پلها بین ۲۰۰ تا ۹۰۰µm تغییر نمودهاست.



شکل ۳) نمایه محیط دوبُعدی نانوتصفیه عرّضی و شرایط مرزی متناظر

۶– بررسی اعتبار

برای بررسی اعتبار روش حل تصفیه عرضی، نتایج روش حل با حل تئوری *رومرو و داویس* و نتایج تجربی موجود در این زمینه، در قالب دو مساله مقایسه شده است. مقایسه با نتایج تجربی، متمرکز بر مسایلی است که در آنها، ناشی از اختلاف فشار در بالادست جریان اصلی در کانال و پاییندست جریان تصفیه، تشکیل کیک جرمی، محرز و عاملی بر کاهش شار جریان باشد. در حقیقت عامل ترمودینامیک مهمی که معمولاً در مقابله با اختلاف فشار دو سوی سطح غشا از تشکیل کیک جرمی ممانعت به عمل میآورد، گرادیان فشار اسمزی است که با توان سوم شعاع ذره رابطه معکوس دارد^[7]. بنابراین زمانی که اندازه نانوذره از مرتبه چند ۱۰نانومتر است، ایجاد یک اختلاف فشار اندک هم میتواند اثر اختلاف فشار اسمزی را خنثی نماید، از این رو تشکیل کیک جرمی حتمی خواهد بود. بهدلیل نمایش توانایی مدل عددی پیشنهادی در محاسبه کیک جرمی، نتایج عددی با نتایج تجربی هونگ و همکاران^[14] مقایسه شدهاند. آنها بهمنظور تعیین سینماتیک تشکیل کیک جرمی، عمده نتایج آزمایشگاهی خود را در سه سری آزمایش برای ذرات با اندازههای ۱۵۰ و ۳۰۰nm، برای سه اختلاف فشار ۶۲، ۴۱ و ۲۱kpa

۱۰۶۸ احسان داورپناه و علیرضا تیمورتاش ــ

و برای غلظت بالادستی (ϕ_0) ۲۰۰۵، /۱۰،۱ و ۲۰۱۰، درصد حجمی انجام دادهاند که در این بین، با توجه به ارتباط دوطرفه شار جریان و پارامترهای کمی کیک، یعنی میزان ضخامت و مقاومت ماده، نتایج آزمایشات درباره اثر اختلاف فشار (مرتبط با آهنگ شارش سیال از محیط متخلخل غشا) و اندازه ذرات (مرتبط با پارامترهای کمی کیک) بهعنوان مرجعی برای آزمایش روش عددی در تعیین صحیح سینماتیک جریان تصفیه- رشد کیک مورد استفاده قرار گرفتهاند.

از نظر پارامترهای هندسی – مادی تصفیه، در انجام آزمایشات سلول تصفیه به شکل یک محیط استوانه ای با طول و قطرهای به ترتیب ۲۵۰ و ۲۵۰ و ۲۵۰ انتخاب شد و بار (SiO₂) با نامهای تجاری FST-1 و FST-3 انتخاب شد و بار الکتریکی این ذرات خنثی بوده است. در نهایت، تخلخل ماده کیک به دست آمده از آزمایشات (ϵ_c)، برابر با ۲۳/۰ است که به این $\phi_c = 1 - \epsilon_c = 0.63$

از نظر پارامترهای عملیاتی تصفیه، در انجام آزمایشات تجربی سرعت متوسط جریان در سلول تصفیه برابر با ¹-۰/۲۴۶ms بوده و با توجه به رابطه کارمن-کوزنی (رابطه ۱۱)، برای ذرات به اندازههای ۱۵۰ و ۲۰۰۳m، مقاومت هیدرودینامیک ماده کیک در مقابل جریان نشتی، بهترتیب برابر با ۱۰۴×۲/۵ و ۲^{-۳}۰۰×۱/۱۲۵ هستند. همچنین مقاومت محیط غشا برابر با ۲۰۰^۳۰۱×۱/۱۲ خواهد بود.

برای بهدست آوردن عبارت $K_{\rm m}$ در معادله ۱۴، ابتدا باید ضخامت غشای مورد استفاده در آزمایشات معین شود. با توجه به این که در اعشای مورد استفاده در آزمایشات معین شود. با توجه به این که در 144 یک مقاله 141 ، بهازای اختلاف فشار معادل معرین شود. با اندازه 124 ۰۰ معادل با ایمانه مقاله 141 ، بهازای اختلاف فشار معانه ممبرین با اندازه 141 ۰۰ م 142 ۰۰ مح 142 ۰۰ مح 142 ۰۰ مح 142 ۰۰ محریان آرام در ایجاد شده است، براساس رابطه بین سرعت متوسط جریان آرام در لوله، اختلاف فشار، لزجت دینامیکی، اندازه سوراخ و طول سوراخ و خواهد بود. در این صورت، مقدار فیزیکی ضریب سرعت در رابطه به معبارتی ضخامت ممبرین 17 ۰۰ معادل این پارمتر خواهد بود. در این صورت، مقدار فیزیکی ضریب سرعت در رابطه فیزیکی (مشخص شده با پانویس ایست (real) به پارامتر معادل آن در فضای شبکه بولتزمن (مشخص شده با پانویس ایست (real) از ارتباط فیزیکی (مشخص شده با پانویس ایست (real) از ارتباط فیزیکی (مشخص شده با پانویس ایست (real) معادل آن در ایست می معادی (real) معادی معادی معادی این معادی معادی این معادی معادی (real) ایست معادی معادی (real) ایست معادی (real) این این معادی می معادی (real) معادی (real) این ایست معادی (real) این ایست معادی (real) این ایست معادی (real) ایست معادی (real) ایست معادی (real) ایست (real) معادی (real) این ایست (real) معادی (real) ایست (real) معادی (real) ایست (real) معادی (real) ایست (real) معادی (real) این در ایست (real) (real) معادی (real) (rea

$$\frac{R_{\rm mem,lb}}{R_{\rm mem,real}} = \left(\frac{l_{\rm real}}{l_{\rm lb}}\right)^2 \tag{477}$$

در اینجا بعد هیدرودینامیک مقاومتکننده در برابر جریان عبوری از غشا (l_{real}) برابر با قطر سوراخ غشا (۲۰nm) و بعد هیدرودینامیک در محیط شبکه، معادل با سوراخهایی بوده که مستقل از هم مسیر جریان را فراهم آوردهاند و بنابراین برابر با یک است. همچنین با توجه به این که چگالی (ρ) و لزجت سینماتیک (v)، در فضای شبکه بولتزمن بهترتیب برابر با یک و $\delta/(1 - 2\tau)$ هستند، برای ضریب تخفیف $1 = \tau$ (که در همه محاسبات از آن استفاده شده ضریب تریب سریب تفای $1/\rho K_{\rm mem} = (\mu/\rho) R_{\rm mem}$ محیط شبکه بولتزمن، ضخامت غشا در محیط حل عددی، چند ضریب سرعت ($\delta/$) است. بنابراین برای اجرای یک حل صحیح در ضریب سرعت ($\delta/$) است. بنابراین برای اجرای یک حل صحیح در محیط شبکه بولتزمن، ضخامت غشا در محیط حل عددی، چند مرتبه بزرگتر از مقدار حقیقی در نظر گرفته می شود. در انجام محاسبات ارتفاع کانال ۲۰۰۳ با δx ، برابر با n° ، برابر با آن استفاده مده، داده محاسبات از آن استفاده شده مرتبه بزرگتر از مقدار حقیقی در نظر گرفته می شود. در انجام محاسبات ارتفاع کانال ۲۰۰۳ با δx ، برابر با آن این رو، گام فضایی δx ، برابر با آن این رو از این رو مداد است.

همچنین محیط غشای یک مستطیل به عرض ۴۰lu (lu؛ گام شبکه؛ معادل با δ*x*) اختیار شده است. به این ترتیب مقدار R_{mem}، در فضای حقیقی برابر با ¹⁻s^{-۱}۰۱×۱/۷۲ و در نتیجه، ضریب سرعت برابر با ۲۰/۱ و در محدوده مجاز قرار خواهد داشت.

برای تعیین عبارت ضریب سرعت در معادله ۱۲ ($1/\rho K_{cake}$) برای تعیین عبارت ضریب سرعت در معادله ۱۲ ($1/\rho K_{cake}$) مشابه با حالت تعیین ضریب سرعت برای غشای ممبرین عمل می شود. با این تفاوت که l_{real} در معادله ۳۳، برابر با فاصله می شود. با این تفاوت که ا l_{real} در معادله ۳۳، برابر با فاصله است که در آن نیروهای جذبی واندروالسی، جذبی اسید پایه، دفعی است که در آن نیروهای جذبی واندروالسی، جذبی اسید پایه، دفعی لزج سیال بین سطح – مایع قطبیده و نیروی مقاومت کننده لایه الکترواستاتیک سطح – مایع قطبیده و نیروی مقاومت کننده لایه الکترواستاتیک سطح – مایع قطبیده و نیروی مقاومت کننده لایه می رست که در آن نیروهای جذبی واندروالسی، جذبی اسید پایه، دفعی الکترواستاتیک سطح – مایع قطبیده و نیروی مقاومت کننده لایه می رست که در آن نیروهای جذبی واندروالسی، جذبی اسید پایه، دفعی این می می می می می می می موج در معاد مایع قطبیده و نیروی مقاومت کننده لایه این می روی مقاومت کننده لایه الکترواستاتیک سطح – دایع قطبیده و نیروی مقاومت کننده لایه این می رسو و از نزدیکی یا دورشدن بیشتر سطوح ذرات ممانعت به می روی می می می روی می می می در معاد این والم این ماید پایه می روی این می می می روی می می روی این والم این می می می روی ای می مایت به می می روی می می روی می می روی این می می رو از نزدیکی یا دورشدن بیشتر سطوح ذرات ممانعت به می روی این والی می می آله در این والم این واله این می والم این واله این واله این واله این واله این این دو اندازه این بود. می رو می می می رو این رو این رو این رو این رو این رو این والی این دو اندازه دان به می این این واله این بود.

پس از ارایه نکات لازم برای تعیین ضریب سرعت محیطهای غشا و کیک در فضای شبکه از مقدار حقیقی آن، ذکر یک نکته دیگر ضروری است. در انجام آزمایشات، سرعت متوسط جریان اصلی ۰/۲۴۶ms⁻¹ و طول سلول تصفیه برابر با ۲۵۰mm بوده است. در

صورت تنظیم au بر عدد یک (بهمنظور انجام محاسبات در سریعترین توالی ممکن)، سرعت متوسط اصلی در ابعاد شبکه lu) ∙/۶۳lult^{−1} الا؛ گام مکانی شبکه و lt؛ گام زمانی شبکه) خواهد بود که این مقدار خیلی بیشتر از حدود یایداری سرعت شبکه ($^{\prime}$ ست. در حقیقت برای اجرای محاسبات در روش ($^{\prime}$ شبکه بولتزمن در یک فرآیند حل پایدار و بهمنظور نیل به حداکثر مشابهت شرایط جریان به یک جریان تراکمناپذیر لازم است تا حداکثر سرعت در محیط حل عددی از مرتبه $^{-1}$ ۰/۰lult باشد. از طرف دیگر، زمانی که برای ارتفاع ۷mm، جهت عمودی با ۴۵۰ نقطه پوشش داده شده است، برای پوشش دادن جهت افقی (به طول ۲۵۰mm) نیاز به حدوداً ۱۶۱۰۰ نقطه خواهد بود. اما حل در یک محیط با اندازه ۱۶۱۰۰^۱×۱۶۱۰ بسیار زمانبر خواهد بود. این مشکل حتی با انجام محاسبات در میدان نقاطی که نسبت گام مکانی طولی به گام مکانی عرضی $(\delta x/\delta y)$ به اندازه دلخواه بزرگتر از یک تنظیم شده است (با استفاده از روش شبکه بولتزمن MRT در میدان نقاط محاسباتی با چیدمان غیرمربعی)، بهبود چندانی نخواهد یافت. چون در این شرایط مساحت سلولها افزایش یافته و هر سلول برای پُرشدن و رسیدن غلظت محتوای آن به حالت کیک جرمی با $\phi = \phi_{
m c}$ به نسبت $\delta x/\delta y$ ، به انباره شدن تعداد ذرات بیشتری نیازمند است، به این ترتیب، زمان محاسبات مجدداً افزایش خواهد یافت.

با توجه با آنچه گفته شد، باید تدبیری برای حل جریان با سرعت مناسب و همچنین راهی برای کاهش تعداد نقاط محاسباتی در نظر گرفته شود، به نحوی که فیزیک تشکیل کیک و رشد آن با حداکثر مشابهت تخمین زده شود. در مساله تصفیه عرضی همواره برای شرط مرزی در سطح مرز جامد تراوا، اعم از سطح اولیه تمیز غشا یا سطح کیک جرمی، شرایط عدم عبور جرم و بهصورت رابطه ۳۴ در نظر گرفته می شود.

$$u_n \phi - D \frac{\partial \phi}{\partial n} = 0 \tag{(3.17)}$$

دوره ۱۹، شماره ۵، اردیبهشت ۱۳۹۸

در این رابطه، *n* جهت عمود بر مرز جامد تراوا است.

میتوان رابطه ۳۴ را بهازای طول غشا (L_m) و سرعت متوسط جریان عرضی (U_{cr}) بیبعد کرد. در این صورت، مشابهت بین دو محیط تراوشی، با سرعتها و اندازههای مختلف محیط، مستلزم برابری عدد بیبعد $D/L_m U_{cr}$ ، در دو محیط خواهد بود. بنابراین با توجه به برابری گامهای زمان و مکان در محیطهای حل (معرفیشده با پانویس num) و حقیقی (معرفیشده با پانویس (cell)، نسبت ضریب نفوذ D_{num} به D_{cel} ، مطابق با رابطه ۳۵ به نسبت احتمالات انتقالی وابستگی خواهد داشت.

$$\alpha = \frac{D_{\text{num}}}{D_{\text{cell}}} = \frac{(L_{\text{m}}U_{\text{cr}})_{\text{num}}}{(L_{\text{m}}U_{\text{cr}})_{\text{cell}}}$$
$$= \frac{(Pr_{x} + Pr_{y} + Pr_{x}Pr_{y})_{\text{num}}}{(Pr_{x} + Pr_{y} + Pr_{x}Pr_{y})_{\text{cell}}}$$
(*\Delta)

از این رو، در انجام محاسبات هر دو احتمال انتقال *Pr*_{x,num} و Pr_{y,num}، در مرز تراوا (α)، برابر کاهش داده میشوند.

۶–۱– مقایسه با حل تئوری *رومرو و داویس*

پس از این، با بهرهگیری از امکان بهوجودآمده در ایجاد مشابهت $L_{\rm m,num}$ و $U_{\rm cr,num}$ و $L_{\rm m,num}$ و $L_{\rm m,num}$ و بین یک محیط حقیقی و محیط حل، $U_{\rm cr,num}$ و $U_{\rm cr,num}$ بهترتیب برابر با ¹ -۰/۰۲۴۶ms و m در نظر گرفته شدهاند که به این ترتیب طول غشا 4۰۰ و ضریب π -۰۱×4/7 حواهند بود. همچنین در این تحقیق، طول میدان محاسباتی ۲۰۰۱ منظور شده است.

در نمودار ۱، دو نمایه از تغییرات ضخامت کیک جرمی با زمان برای یک لحظه در نیمعمر تصفیه، یعنی زمانی که شار عبوری از غشا به نصف حالت اولیه کاهش یافته است (نمودار ۱– a) و نهایتاً برای زمان ۱۷۵min که در آن شار جریان تا ۲۰% شار اولیه کاهش یافته است (نمودار ۱– b) نمایش داده شدهاند. در این حالت TMP برابر با ۴۱kpa و متوسط شار جریان پایا از غشای تمیز برابر با ۰/۰۳mms⁻¹ بودهاند. مطابق با نمودار، ضخامت کیک جرمی از ابتدای غشا تا انتهای آن رفتهرفته افزایش یافته است و این موضوع با حقیقت فرآیند تشکیل کیک مورد اشاره در بسیاری از مراجع^[9, 10] مطابقت دارد. پس از این، در نمودار ۱– C، منحنی شار جریان در طول غشا، در چند لحظه از تصفیه با حل تئوری رومرو و د*اویس* مقایسه شده است. مطابق با بحث ارایه شده به وسیله رومرو و داویس، در شرایطی که حاصل تعارض اختلاف فشار ترمودینامیک اسمزی و اختلاف فشار جریان، تشکیل یک لایه بسیار نازک از کیک جرمی در طولی بیش از *x*cr (از ابتدای غشا) باشد، شار جریان پایای عبوری در طول غشا (J_{ss}) ، از مقدار شار جریان در ابتدای طول غشا (J_0) و با رابطه ۳۶ تعیین می شود.

$$J_{ss} = J_0 \left(1.5 \frac{(x - x_{\rm cr0})}{x_{\rm cr}} + 1 \right)^{-1/3}$$
(75)

در حالی که در حل رومرو و داویس، x_{cr} و x_{cr} با هم برابرند، برای استفاده از این رابطه در شرایطی که ضخامت کیک بیش از آن است که تنها حاصلی از تقابل اختلاف فشار اسمزی و جریان انگاشته شود، میتوان بین مقدار x_{cr0}، در صورت کسر و x_c، در مخرج تمایز قائل شد. در حقیقت، در حالت مد نظر در این مقاله (تشکیل و رشد بازگشتناپذیر کیک جرمی)، در حالی که در هر لحظه امکان تشکیل کیک در ابتدای غشا وجود دارد، همزمان، احتمال بیشتر جذب ذرات به سطح کیک در طولهای پاییندست، عامل تغییر زمانی انحنای کیک، متعاقباً شار جریان و در نتیجه، کاهش جریان

Volume 19, Issue 5, May 2019

ی عددی تاثیر میدان الکتریکی جریان مستقیم بر مشخصههای اجتماع ذرات در جریان تصفیه عرضی ۱۰۶۹

تصفیه است. بنابراین عبارت x_{cr}، با فرض یک تناظر خطی معکوس بین شار جریان و ضخامت کیک، طول جدید محدوده رشد کیک است. در حقیقت می توان فرض کرد، در هر لحظه، رشد کیک (مشابه با فرضیات رومرو و داویس)، معادل با یک فرآیند شبه تعادلی بوده که در آن سطح مجموعه متخلخل کیک و غشا، برابر یک سطح اولیه جدید و $x_{\rm cr}$ ، طول پیدایش نقاط کیک در این سطح جدید است. با توجه به این که با رشد ضخامت کیک، احتمال جذب ذرات در طولهای کمتر افزایش خواهد یافت، انتظار میرود مقدار x_{cr}، با زمان رفتهرفته کاهش یابد. در نمودار ۱- c، نقاط بهدست آمده از رابطه ۳۶ و برازش یافته بر نتایج حل عددی به نمایش در آمدهاند. در این نمودار، نتایج بهدستآمده برای منحنی شار جریان در طول غشا (از نقطه x = ۱۰۰lu تا نقطه x=۱۰۰lu)، بر حسب نسبت شار جریان در ابتدای غشا به شار جریان در ابتدای غشای تمیز (J_0/J_{00}) ، ترسیم و با مقدار متناظر بهدست آمده از فرمول رومرو و داویس مقایسه شدهاند. مطابق با این نمودار در همه حالات، منحنی شار عددی بهخوبی نمایهای با توان ۰/۳۳۳ – را دنبال کرده و نزدیکی نتیجه حل عددی به حل تئوری در شرایط منتهی به پایان تصفیه (زمانی که نسبت J_0/J_{00} به صفر نزدیک می شود) افزایش یافته است. همچنین در جدول ۱، تغییرات نسبت $x_{
m cr}/L_{
m m}$ بر حسب J/J_{00} ذکر شده که مطابق با این اعداد رفتهرفته با نزدیکی $x_{
m cr}$ بیشتر به شرایط انسداد کامل غشا و مطابق با انتظار طول كاهش يافته است.



نمودار ۱) رشد کیک جرمی در دو گام زمانی متفات در نیمعمر رشد کیک و در انتهای محاسبات زمانی و همچنین تغییرات شار جریان در طول غشا، رسمشده بر حسب نسبت J_0/J_0 و مقایسهشده با حل تئوری *رومرو* و د*اویس*؛ a) در نیمعمر رشد کیک، b) در انتهای محاسبات زمانی که 0.2 = $\langle J_0 / \langle I \rangle$ است، c) تغییرات شار جریان در طول غشا، رسمشده بر حسب نسبت J_0/J_0 و مقایسهشده با حل تئوری *رومرو* و د*اویس*

Modares Mechanical Engineering

۱۰۷۰ احسان داورپناه و علیرضا تیمورتاش

جدول ۱) تغییرات x _{cr} /L _m بر حسب <i>J/J</i> 00							
^J / _{J00}	۰/۲	٠/٣	+/۴	•/۵	•/۶	•/٨	
$x_{\rm cr}/L_{\rm m}$	•/•۲۵	•/•٣	۰/۰۳۷۵	•/•۵	۰/۰۸۷۵	•/1۵	

۶–۲ – مقایسه با نتایج تجربی ۶–۲ – اثر اختلاف فشار و اندازه ذرات بر منحنی تصفیه

در بخش اول بررسی اعتبار در مقایسه نتایج عددی با نتایج تجربی، منحنی شار بهدست آمده از محاسبات برای سه *TMP* ۲۱، ۴۱، و ۶۱kpa، با نتایج تجربی مشابه مقایسه شدهاند (نمودار ۲ – ۵). در این حالات اندازه ذرات ۱۵۰nm و ولتاژ پلهای الکتریکی ۷۷ بودهاند. همچنین در نمودار ۲ – b، تغییرات شار جریان بهدست آمده از شبیه سازی با نتایج تجربی برای دو اندازه ذرات ۱۵۰ و ۳۰۰nm مقایسه شده است. در این حالت *TMP* برابر با ۴۱kpa است. که ذرات اندازه کوچکتری دارند، محسوس تر و بیشتر است.



نمودار ۲) تغییرات شار جریان با زمان در شرایط مختلف حاصل از شبیهسازی و نتایج تجربی ارایه شده توسط *هونگ* و همکاران^[14]؛ a) تغییرات شار جریان با زمان در شرایطی که اندازه ذرات ۱۵۰nm است و *TMP* در بازه ۲۱ تا ۴۱kpa تغییر میکند، b) تغییرات شار جریان با زمان برای ذرات ۱۵۰ و ۳۰۰nm، در شرایطی که *TMP* برابر با ۴۱kpa است؛ در این تصویر خطوط، نمایشگر نتایج حاصل از شبیه سازی و نقاط نتایج تجربی ارایه شده توسط *هونگ* و همکاران^[14] است.

با توجه به نمودار ۲- ۵، مدل عددی بهخوبی توانایی تخمین اثر دوسویه جریان و کیک جرمی و به عبارت دیگر، تخمین فرآیند تصفیه را برای *TMP*های متفاوت و بنابراین مقدار متفاوت شار جریان عبوری از غشا دارد. این در حالی است که فرآیندهای تصفیه عرضی با *TMP*های متفاوت ۲۱، ۴۱ و ۶۱kpa کاملاً غیرمتشابه و دارای نیمعمرهای تصفیه کاملاً متفاوت هستند. بنابراین روش حل عددی از ارایه نتایج متشابه با تغییر پارامترهای عملیاتی جریان مبرا شده است. در حقیقت، زمانی که ارتباط دوسویه جریان- رشد

ماهنامه علمی-پژوهشی مهندسی مکانیک مدرس

کیک جرمی بهدرستی ایجاد نشود، ارتباط بین شار جریان و رشد کیک جرمی، بهویژه در بازه زمانی پس از نیمعمر تصفیه، بهدرستی ایجاد نمیشود و نتایج سطح بالاتری از تراوایی را در زمانهای بیشتر از نیمعمر تصفیه را تخمین میزند. در این حالت، منحنی تصفیه بهشکل یک منحنی نمایی مستقیم در میآید و بین شرایط عملیاتی متفاوت یک تشابه غیرواقعی را نشان خواهد داد. همچنین با توجه به نمودار ۲- b و مطابق با انتظار، با افزایش اندازه ذرات، مقاومت ماده کیک بهشدت کاهش یافته و بنابراین برای یک دوره زمانی یکسان تصفیه و با غلظت یکسان ماده جامد محلول، کاهش شار جریان در شرایطی

۲- تعیین اثر میدان الکتریکی DC و هندسه پلهای الکتریکی بر رشد کیک جرمی

اگر چه پیش از این در برخی مقالات، گروهی از محققان به مطالعه اثر میدان الکتریکی در کاهش جرم گرفتگی و انسداد غشای تصفیه یرداختهاند، اما عمده این تلاشها بهعلت عدم برخورداری از شرایط شبیهسازی اثر دوسویه کیک جرمی و جریان، تصویری کامل از وقایع تصفیه ضمن اثرگذاری میدان الکتریکی بر مسیر تعداد بیشماری از ذرات را ارایه ننمودهاند. *ملا* و *باتاچارجی*^[15]، در چند پژوهش عددی شاخص در این حوزه، به بررسی اثر میدانهای الکتریکی DC و AC، بر خط سیر ذرات یرداختهاند، اما با استفاده از این دیدگاه تحلیلی- عددی غیر از تعیین مرزهای بین یک فرآیند تصفیه یاک و تصفیه دارای رسوب، نتیجه عمده دیگری قابل استحصال نیست. بهویژه با این روش حل نمیتوان به درکی از تمایزات رشد کیک در شرایطی که میدان الکتریکی تنها میتواند مانع از تشکیل بخشی از کیک جرمی شود، دست یافت. یک راه برای برونرفت از این نقصان در تحلیل، حل مزوسکوپیک معادله CDE با امکان تحلیل خط سیر ذرات در یک فرآیند دوسویه است. در حقیقت با استفاده از LB-CA، اگر از یک طرف میتوان معادله CDE را در مقیاس مزوسکوییک حل کرد، همزمان امکان اعمال اثراتی در مقیاس میکروسکوپیک به وجود خواهد آمد. در این بخش، نمونههایی از نتایج حل جریان تصفیه در حضور میدان الکتریکی DC ارایه شده است. نتایج برای TMP برابر با ۴۱ kpa، اندازه ذرات برابر با ۱۵۰ nm، و اندازه یلهای الکتریکی ۲۰۰، ۳۰۰، و ۹۰۰μm محاسبه شدهاند. میدان الکتریکی اعمالی به پلهای الکتریکی از نوع DC و اندازه آن برابر با ۱۰۰، ۲۰۰، ۳۰۰ و ۵۰۰۷ در نظر گرفته شده است. همچنین، ضریب دیالکتریک آب و ماده جامد SiO₂ بهترتیب ۸۰ و ۳/۹ هستند که به این ترتیب مولفه y نیروی الکتریکی محاسبه شده از رابطه ۸، در سمت جریان مثبت و در تقابل با نیروی درگ سیال و رشد رسوب عمل مینماید. در نمودار ۳، هندسه دوبُعدی میدان الکتریکی ایجادشده در حدود پلهای غشا نمایش داده شده و در این تصویر، اندازه یلها ۹۰۰μm و ولتاژ هر پل ۵۰۰۷ است.



نمودار ۳) تصویری از کانتور میدان الکتریکی DC توسعهیافته در جهت جریان تصفیه در زمان ولتاژ اعمالی ۵۰۰۷ به پلهای الکتریکی

۲–۱ بزرگای ولتاژ اعمالی، هندسه رسوب و اثرات ضدرسوبی متناظر

در نمودار ۴– a، گراف تغییرات زمانی شار جریان بهعنوان تابعی از بزرگای ولتاژ اعمالی به یلهای غشا نمایش داده شده است. در انجام محاسبات این نمودار، اندازه پلهای الکتریکی مستطیلی همسان و همفاصله، برابر با ۳۰۰μm در نظر گرفته شده و ولتاژ اعمالی در بازه ۵۰۰۷-۰ تغییر داده شده است.



نمودار ۴) منحنی کاهش شار جریان بهعنوان تابعی از پتانسیل الکتریکی DC و نمایههای دوبُعدی رسوب بر سطح غشای متاثر از اثر ضدرسوبی میدان پتانسیل الكتريكي DC، براي ولتاژهاي اعمالي؛ a) منحني كاهش شار جريان بهعنوان تابعی از پتانسیل الکتریکی b-e ،DC) نمایههای دوبُعدی رسوب بر سطح غشای متاثر از اثر ضدرسوبی میدان پتانسیل الکتریکی DC، برای ولتاژهای اعمالی a) ۵۰۰۷ (c) ۲۰۰۷ (c) و ۵) ۵۰۰۷؛ در این نمودارها، ممبرین شامل ۲۰ پل مستطیلی همفاصله بوده که گام هر پل ۲برابر عرض آن است. همچنین TMP، برابر با ۴۱kpa است

با توجه به نمودار ۴- a در یک روند کلی با افزایش میدان الكتريكي، فرآيند تصفيه رفتهرفته به يك فرآيند غيررسوبي نزديك و نزدیکتر شده است. اما وابستگی نرخ رسوب به ولتاژ اعمالی، یک وابستگی خطی نیست و در ابتدا با افزایش ولتاژ از صفر تا ۱۰۰۷ تغییر محسوسی در منحنی شار جریان قابل مشاهده نیست. با این حال در گام دوم، افزایش از ۱۰۰ تا ۲۰۰۷، به شکل قابل ملاحظهای منحنی شار جریان رشد پیدا میکند و بنابراین کیفیت غیررسوبی فرآیند تصفیه افزایش مییابد. در اینجا اگر مبنای مقایسه نسبت $(J/J_{00}=d(J/J_{00})_{t=t_e}/d\psi$ باشد، t_e نمانی است که $d(J/J_{00})_{t=t_e}/d\psi$ Volume 19, Issue 5, May 2019

در حالات مختلف استفاده می شود. این نسبت برای $(0.2)_{\psi=0}$ ولتاژهای ۱۰۰، ۲۰۰، ۳۰۰، و ۵۰۰۷ بهترتیب برابر با ۲۰۰/۰۰، ۲۰۴۰/۰۰، ۰/۰۰۴۰۲ و ۰/۰۰۲۰۱، است. به این ترتیب، بیشترین رشد نمودار شار جریان به نسبت رشد ولتاژ اعمالی، در حالت ۲۰۰۷ اتفاق افتاده و یس از آن رفتهرفته شدت اثر ضدرسوبی میدان الکتریکی DC کاهش یافته است. بنابراین همان گونه که اعمال ولتاژهای پایین حدود ۱۰۰۷ نمیتواند هیچ انتظاری را برآورده نماید، ممکن است براساس مصالحه بین هزینههای لازم برای تشکیل یک میدان الکتریکی قوی و کاهش رسوب، یک نقطه عملیاتی فیمابینی گزینه بهتری باشد. در نمودار ۴– b تا e، هندسه رسوب تشکیل شده متناظر با

منحنیهای شار جریان گزارششده در نمودار ۴– a، برای ولتاژهای صفر، ۲۰۰، ۳۰۰ و ۵۰۰۷ ترسیم شدهاند. با توجه به نمودار ۴- b، زمانی که خط سیر ذرات تحت تاثیر میدان الکتریکی قرار نگرفته، هندسه کیک جرمی یک محیط یکدست هموار است که در سراسر طول غشا تشکیل شده و رفتهرفته با فاصلهگرفتن از ابتدای غشا بر ضخامت آن افزوده شده است. این وضعیت با اعمال میدان الکتریکی با ولتاژ ۲۰۰۷ بهشکل قابل توجهی به هم خورده و در هندسه کیک جرمی شکافهای تراوای متعددی ایجاد شده است (نمودار ۴ - C). با افزایش بیشتر ولتاژ اعمالی تا حد ۳۰۰۷ (نمودار d - ۴)، علاوه بر افزایش شکافهای تراوا در طول کیک، رسوب در بخشی از محدوده ابتدایی غشا و اندکی از محدوده انتهای غشا كاملاً نايديد شده است. نهايتاً با افزايش بيشتر ولتاژ اعمالي تا سطح ۵۰۰۷، اکثریت شکافهای تراوا به هم متصل شده و اندازه محیط بیرسوب در ابتدای غشا تا حدود نقاط مرکزی توسعه یافته است (نمودار ۴– e).

بنابر آنچه ملاحظه می شود، تشکیل شکاف های تراوا و توسعه محیط بیرسوب در ابتدای غشا بهترتیب اهمیت در ابقای شار جریان، نقشهای درجه اول و درجه دوم را به عهده دارند. به این ترتیب اگر بتوان اثر میدان الکتریکی در تشکیل شکافهای تراوا را افزایش داد، به همان میزان استفاده از میدان الکتریکی را میتوان فرآیندی موفقتر در نظر گرفت.

۲-۲- هندسه پلهای الکتریکی، هندسه رسوب و حد بهینگی

با توجه به نقش درجه اول شکافهای تراوا در ابقای شرایط جریان که در بخش ۲–۱ به آن یرداخته شد، در این بخش به اثر اندازه پلهای الکتریکی پرداخته میشود. در حقیقت با این ایده که تعدد یلهای الکتریکی میتواند بر تعدد شکافهای تراوای درون بستر کیک جرمی بیافزاید، در این بخش، اثر اندازه پلهای الکتریکی بر منحنی شار جریان و هندسه کیک جرمی بررسی می شود.

در نمودار a - ۵، تغییرات زمانی شار جریان بهعنوان تابعی از اندازه پلهای الکتریکی نمایش داده شده است. با توجه به نتایج این نمودار، کاهش اندازه پلها و متعاقباً افزایش تعداد آنها در ابتدا (با کاهش اندازه یلها از ۹۰۰ به ۳۰۰µm) باعث بهبود در روند منحنی شار جریان میشود. پس از آن کاهش بیشتر اندازه پلهای الکتریکی (با کاهش اندازه یلها از ۳۰۰ به ۲۰۰μ)، تاثیر قابل ملاحظهای بر روند کاهش شار جریان نخواهد داشت. بنابراین اندازه یلهای الکتریکی، دارای یک نقطه بهینه بوده که در اینجا تقریباً ۳۰۰μm است. برای درک دلیل وجود اندازه بهینه برای اندازه پلهای الکتریکی میتوان به هندسه رسوب بهدستآمده برای فرآیند تصفیه با پلهایی به اندازههای ۹۰۰، ۳۰۰، ۲۰۰μm (نمودار b −۵ تا b) مراجعه کرد. با توجه به نمودار ۵، بهبودی در روند منحنی شار جریان در گذر از حالت b به حالت c، مرهون افزایش

۱۰۷۲ احسان داورپناه و علیرضا تیمورتاش

شکافهای تراوا و کاهش نسبی ضخامت کیک جرمی است که پیش از این هم بهعنوان ایدهای برای بهبودبخشیدن به فرآیند تصفیه الکتریکی در نظر گرفته شد. با این حال، عدم تغییر بیشتر در منحنی شار علیرغم افزودهشدن به تعداد شکافهای تراوا و کاهش نسبی ضخامت کیک در حالت d نسبت به حالت c را میتوان مربوط به ظرافت بیشتر مسیر عبور از شکافهای حالت b، در مقایسه با حالت c دانست (نمودار ۵). اگر چه در حالت c، بر تعدد شکافهای تراوا افزوده شده است، اما مسیرهای کمعرض تر جریان در این حالت در قیاس با حالت c، مقاومت بیشتری را فراروی جریان قرار خواهد داد و از اثر مثبت تعدد شکافها خواهد کاست.



نمودار ۵) تغییرات زمانی شار عبوری از غشا، بهعنوان تابعی از اندازه پلهای الکتریکی و نمایههای دوبُعدی رسوب بر سه چیدمان متفاوت پلهای الکتریکی تراوا؛ a) تغییرات زمانی شار عبوری از غشا، بهعنوان تابعی از اندازه پلهای الکتریکی، b-d) نمایههای دوبُعدی رسوب بر سه چیدمان متفاوت پلهای الکتریکی تراوا، زمانی که اندازه پلهای الکتریکی یکسان و همفاصله برابر با b) الکتریکی تراوا، زمانی که اندازه پلهای الکتریکی یکسان و همفاصله برابر با b) ۲۰۰μ و ۲۸۰μ به دست آمدهاند.

۸- نتیجهگیری

در این پژوهش، یک روش عددی جامع برای حل مساله تصفیه در محیطهایی با مقیاسهای بزرگی متفاوت (از مرتبه میکرو تا ماکروسلولهای تصفیه) ارایه شد. بنای روش عددی ارایهشده در این تحقیق بر استفاده از روش شبکه بولتزمن بهعنوان حلگر جریان

ماهنامه علمی– پژوهشی مهندسی مکانیک مدرس

و یک روش LB-CA دوبُعدی و انطباقیافته بر فیزیک انتقال جرم در محدوده محیط تصفیه گذاشته شده است. با استفاده از این روش حل، امکان حل مزوسکوپیک معادله لانگوین و تعیین دینامیک ذرات متاثر از همه انواع نیروهای خارجی و درونجریانی ایجاد شده است. اعتبار روش عددی مورد اشاره، در مقایسه با حل تئوری رومرو و د/ویس و همچنین نتایج تجربی ارایهشده بهوسیله هونگ و همکاران^[14] مورد تایید قرار گرفت.

در نهایت، در این کار با استفاده از امتیاز روش بناشده بر الگوریتم LB-CA، در تحلیل اثر نیروهای خارجی، مساله تصفیه الکتریکی با اعمال ولتاژ DC بر پلهای الکتریکی تراوای تعبیهشده درون محیط غشا مورد توجه قرار گرفت. در این مقاله نشان داده شد که اعمال میدان الکتریکی با ایجاد شکافهای تراوا در هندسه کیک جرمی و روبش بخشی از ذرات در ابتدای غشا به شکل قابل توجهی به بهبود روند کاهشی شار جریان کمک میکند. نشان داده شد که برای بیشینه ولتاژ اعمالی و کمینه اندازه پلهای جرمی، نقاط بهینهای متصور خواهد بود که هسته تحلیل در این مورد دستیابی به بیشترین تعدد در شکافهای تراوای عریض با کمترین ولتاژ اعمالی ممکن است.

تشکر و قدردانی: موردی از سوی نویسندگان بیان نشده است.

تاییدیه اخلاقی: تعهد مینماییم این مقاله در هیچ نشریه ایرانی یا غیر ایرانی در حال بررسی و چاپ نیست.

تعارض منافع: این مقاله مستخرج از پایاننامه دکترای *احسان* د*اورپناه* با راهنمایی دکتر *علیرضا تیمورتاش در* گروه مهندسی مکانیک، دانشگاه فردوسی مشهد با عنوان "شبیهسازس سهبعدی ذرات در رژیم جریان متعامد سیال و سطح جداساز" است.

سهم نویسندگان: احسان داورپناه (نویسنده اول)، پژوهشگر اصلی (۵۰۰%)؛ علیرضا تیمورتاش (نویسنده دوم)، نگارنده مقدمه/روششناس/تحلیلگر آماری/نگارنده بحث (۵۰۰%) **منابع مالی:** موردی از سوی نویسندگان بیان نشده است.

منابع

1- Zeman LJ, Zydney AL. Microfiltration and ultrafiltration: Principles and applications. 1st Edition. Boca Raton: CRC Press; 2017.

2- Hermia J. Constant pressure blocking filtration lawsapplication to power-law non-Newtonian fluids. Institution of Chemical Engineers Transactions. 1982;60(3):183-187.

3- Chudacek MW, Fane AG. The dynamics of polarisation in unstirred and stirred ultrafiltration. Journal of Membrane Science. 1984;21(2):145-160.

4- Porter MC. Concentration polarization with membrane ultrafiltration. Industrial and Engineering Chemistry Product Research and Development. 1972;11(3):234-248.

5- Zydney AL, Colton CK. A concentration polarization model for the filtrate flux in cross-flow microfiltration of particulate suspensions. Chemical Engineering Communications. 1986;47(1-3):1-21.

6- Lee Y, Clark MM. Modeling of flux decline during crossflow ultrafiltration of colloidal suspensions. Journal of Membrane Science. 1998;149(2):181-202.

7- Bhattacharjee S, Kim AS, Elimelech M. Concentration polarization of interacting solute particles in cross-flow membrane filtration. Journal of Colloid and Interface Science. 1999;212(1):81-99.

8- Kim S, Marion M, Jeong BH, Hoek EMV. Crossflow

ـ بررسی عددی تاثیر میدان الکتریکی جریان مستقیم بر مشخصههای اجتماع ذرات در جریان تصفیه عرضی ۱۰۷۳

12- Krüger T, Kusumaatmaja H, Kuzmin A, Shardt O, Silva G, Viggen EM. The lattice boltzmann method. 1st Edition. Switzerland: Springer; 2017.

13- Wang H, Zhao H, Guo Z, Zheng Ch. Numerical simulation of particle capture process of fibrous filters using Lattice Boltzmann two-phase flow model. Powder Technology. 2012;227:111-122.

14- Hong S, Faibish RS, Elimelech M. Kinetics of permeate flux decline in crossflow membrane filtration of colloidal suspensions. Journal of Colloid and Interface Science. 1997;196(2):267-277.

15- Molla Sh, Bhattacharjee S. Dielectrophoretic levitation in the presence of shear flow: Implications for colloidal fouling of filtration membranes. Langmuir. 2007;23(21):10618-10627.

membrane filtration of interacting nanoparticle suspensions. Journal of Membrane Science. 2006;284(1-2):361-372.

9- Kromkamp J, Bastiaanse A, Swarts J, Brans G, Van Der Sman RGM, Boom RM. A suspension flow model for hydrodynamics and concentration polarisation in crossflow microfiltration. Journal of membrane science. 2005;253(1-2):67-79.

10- Paipuri M, Kim SH, Hassan O, Hilal N, Morgan K. Numerical modelling of concentration polarisation and cake formation in membrane filtration processes. Desalination. 2015;365:151-159.

11- Masselot A, Chopard B. A lattice Boltzmann model for particle transport and deposition. Europhysics Letters. 1998;42(3):259-264.