

بررسی توسعه تئوری ترکیبی انحلال - نفوذ و نفوذ لایه فیلمی در مدل سازی فرایند غشایی اسمز مستقیم

محسن باهوش، سهیلا شکرالله زاده*، اسلام کاشی

پژوهشکده فناوری های شیمیایی، سازمان پژوهش های علمی و صنعتی ایران، تهران، ایران.

چکیده: شبیه سازی فرایندها چه در ابعاد آزمایشگاهی و چه صنعتی روشی است که در صورت توانایی کافی مدل در نزدیک کردن نتیجه های محاسباتی به نتیجه های عملیاتی، می تواند کمک شایانی به درک و بهینه سازی این فرایندها نماید. زیربنای شبیه سازی معتبر، آگاهی از مدل ها و معادلات مربوط به ویژگی های فیزیکی - شیمیایی و توانایی تحلیل و کاهش فرضیات محدودکننده فرایند مورد بررسی است. برای مدل سازی ریاضی پدیده انتقال جرم مواد از درون غشا مدل های گوناگون با کارایی و دقت متفاوت ارائه شده است. با توجه به مفاهیم بنیادین تئوری انحلال-نفوذ، این تئوری قابلیت بیشتری در زمینه شبیه سازی فرایندهای غشایی اسمزی و از جمله اسمز مستقیم را به عنوان فرایند نمک زدایی آب دارد. در این مقاله، مروری بر توسعه مدل های ریاضی برای اسمز مستقیم و چگونگی تعیین پارامترهای آن به روش تجربی بیان شده است. نتیجه ها نشان داد مدل بوی و همکاران با در نظر گرفتن تمامی انواع گوناگون پلاریزاسیون های غلظتی خارجی و داخلی کامل ترین مدل محاسبه شار آب است. از طرفی به کمک روش ارائه شده تیرافری پارامترهای اصلی غشا (ضریب تراوایی آب، حل شونده و پارامتر ساختاری غشا) به کمک محاسبات عددی و نتیجه های تجربی قابل محاسبه است.

کلمات کلیدی: اسمز مستقیم، فرایند غشایی، انحلال-نفوذ، مدل سازی، انتقال جرم

KEYWORDS: Forward osmosis, Membrane process, Solution-Diffusion, Modeling, Mass transfer

مقدمه

و تغلیظ مواد در صنایع غذایی [۴] نمک زدایی آب [۵-۷] تا تولید برق [۸-۹] و صنایع دارویی کاربرد دارد [۱۰]. طبق یک طبقه بندی خاص، فرایند نمک زدایی آب شامل دو گروه روش های اسمزی (نظیر اسمز معکوس^۱ و اسمز مستقیم^۲) و روش های حرارتی (نظیر متراکم سازی مکانیکی بخار آب، تبخیر ناگهانی چندمرحله ای و روش تقطیر چندمرحله ای) می باشد [۱۱]. فرایند اسمز مستقیم یا اسمز پیش رو برخلاف فرایند اسمز معکوس

باتوجه به گزارش سازمان ملل [۱] و گزارش موسسه بین المللی مدیریت آب [۲]، آب و انرژی دو دغدغه اصلی کشورها در زمینه مدیریت و تأمین منابع محسوب می شود. از این رو، بهینه سازی روش های موجود و یا ارائه روش های جدید جهت بهره برداری بهینه و ازدیاد منابع آب آشامیدنی دارای اهمیت زیادی است. یکی از این روش ها، استفاده از فرایندهای غشایی جهت نمک زدایی و نمک زدایی آب است. امروزه این فناوری در عملیات های گوناگونی از تصفیه پساب [۳]

*E-mail: shokrollahzadeh@irost.ir

* عهده دار مکاتبات

(۱) Reverse Osmosis (RO)

(۲) Forward Osmosis (FO)

در این مقاله به بررسی مدل سازی ریاضی مدل های انحلال - نفوذ و ارائه نمونه کاربردهای آن در شبیه سازی فرایند اسمز مستقیم پرداخته شده است. این مدل ها که بیشتر در دسته بندی مدل های انتقال غیر متخلخل غشا کاربرد دارند، برای مدل سازی انتقال مواد از درون هر دو غشای اسمز معکوس و مستقیم به کار رفته اند، با این تفاوت که پارامترهای خاص در غشای اسمز مستقیم به کار برده می شود [۱۶-۱۴]. در این مقاله سعی شده سیر تکاملی مدل های ریاضی این تئوری ارائه و پارامترهای مربوط به هر کدام مورد بررسی شود.

مدل ها و مکانیسم های انتقال

جهت توسعه مدل های انتقال از درون غشا دو دیدگاه گوناگون مطرح شده است: (۱) استفاده از ترمودینامیک برگشت ناپذیر برای توصیف فرایند و (۲) به کارگیری مدل هایی که از ویژگی های فیزیکی - شیمیایی - ساختاری غشا و محلول جهت توصیف فرایند در سامانه غشایی استفاده می کنند. در دسته اول که به مدل های مستقل از مکانیسم یا مدل های پدیدارشناختی^۶ نیز معروف هستند غشا به عنوان یک جعبه سیاه در نظر گرفته می شود و در آن فرایندهای آرام نزدیک به حالت تعادل رخ می دهد. این مدل ها برای سامانه هایی که اختلاف زیادی از حالت تعادل ندارند و روابطی منطقی بین شار و نیروی محرکه ارائه می کنند. به طور کلی می توان گفت این مدل منجر به معادلاتی می شود که رفتار پس زندگی^۷ غشا را به وسیله ویژگی های ماکروسکوپی که قابل اندازه گیری هستند مرتبط می کند و از آنجا که این دیدگاه وابسته به مدل نیست، تفسیری در مورد جریان و مکانیسم های جداسازی ارائه نمی دهد. در دسته دوم که به مدل های وابسته به مکانیسم یا مدل های مکانیکی^۸ نیز معروف هستند، برخی مکانیسم های انتقال در نظر گرفته می شود و سپس شار به نیروی محرکه و رفتار پس زندگی غشا به ویژگی های ساختاری شناخته شده یا فرضی غشا (مانند تخلخل، اندازه حفره، خمیدگی^۹ و غیره) و یا ویژگی های فیزیکی - شیمیایی (مانند نفوذ، حلالیت، تعاملات سایشی^{۱۰} و غیره) مرتبط می گردد. تمامی مدل های فیزیکی - شیمیایی - ساختاری غشا به نوعی ترکیبی از سه مکانیسم انتقال موازی هستند [۱۷-۱۸]:

بدون دخالت فشار خارجی انجام می شود. در این فرایند آب از سمت محلول با غلظت کمتر (محلول خوراک) به سمت محلول با غلظت بیشتر (محلول کشنده) جریان می یابد تا هر دو محلول به تعادل غلظتی برسند. در مقایسه با روش های غشایی سنتی فشار محور، FO دارای برتری های ویژه ای از جمله: پس زنی بالای مواد محلول، رسوب گرفتگی کمتر غشا و مصرف انرژی کمتر می باشد. به همین دلیل، غشای FO توانایی بالایی را برای جایگزینی با غشاهای اولترافیلتراسیون که در حال حاضر در راکتورهای زیستی غشایی^۱ (MBR) استفاده می شود، دارد. در چندین گزارش، پیش بینی شده که در سال های آینده ارزش بازار سالیانه غشاهای اسمز مستقیم در زمینه انرژی اسمزی، به کارگیری دوباره آب، نمک زدایی و سایر کاربردها، بیشتر از ترکیب بازارهای اسمز معکوس و اولترافیلتراسیون خواهد شد. هم زمان با توسعه فرایندهای غشایی، مدل ها و مکانیسم های گوناگونی جهت بررسی و مطالعه مکانیسم های انتقال از درون غشا مطرح شده است. به عنوان نمونه به برخی از این مکانیسم ها در زیر اشاره شده است [۱۲-۱۳]:

- در مکانیسم غربالگری^۲، جداسازی غشایی بر اساس اختلاف اندازه مولکول های حلال و حل شونده رخ می دهد و اندازه حفرات غشا باید بین اندازه این مولکول ها باشد. البته این مکانیسم در نمک زدایی محلول سدیم کلراید - آب به کمک اسمز معکوس کاربرد ندارد زیرا اندازه مولکول ها در این سیستم یکسان است.
- مکانیسم سطوح تر شده^۳: این مکانیسم بر این اصل استوار است که به دلیل توانایی ترشوندگی مواد سازنده غشا، آب به وسیله پیوندهای هیدروژنی جذب غشا می شود. حضور آب در حفرات غشا مانع نفوذ مواد حل شونده به غشا شده و پس از این مرحله آب از یک سمت تر شده به سمت دیگر غشا منتقل می شود.
- مکانیسم انحلال - نفوذ^۴: حل شونده و حلال ابتدا باید در لایه متراکم غشا حل شده سپس به علت گرادیان غلظت از درون آن نفوذ کرده و به سمت دیگر غشا منتقل شوند.
- مکانیسم حفره - جریان^۵: مواد نفوذ کننده به وسیله یک جریان همرفتی فشار محور در حفرات ریز جداسازی می شوند. علت جداسازی توانایی حفرات در دفع برخی مواد تراوش کننده خاص و جذب برخی مواد دیگر است.

(۱) Membrane bioreactor (MBR)

(۳) Wetted surface mechanism

(۵) Pore-flow (PF)

(۷) Rejection

(۹) Tortuosity

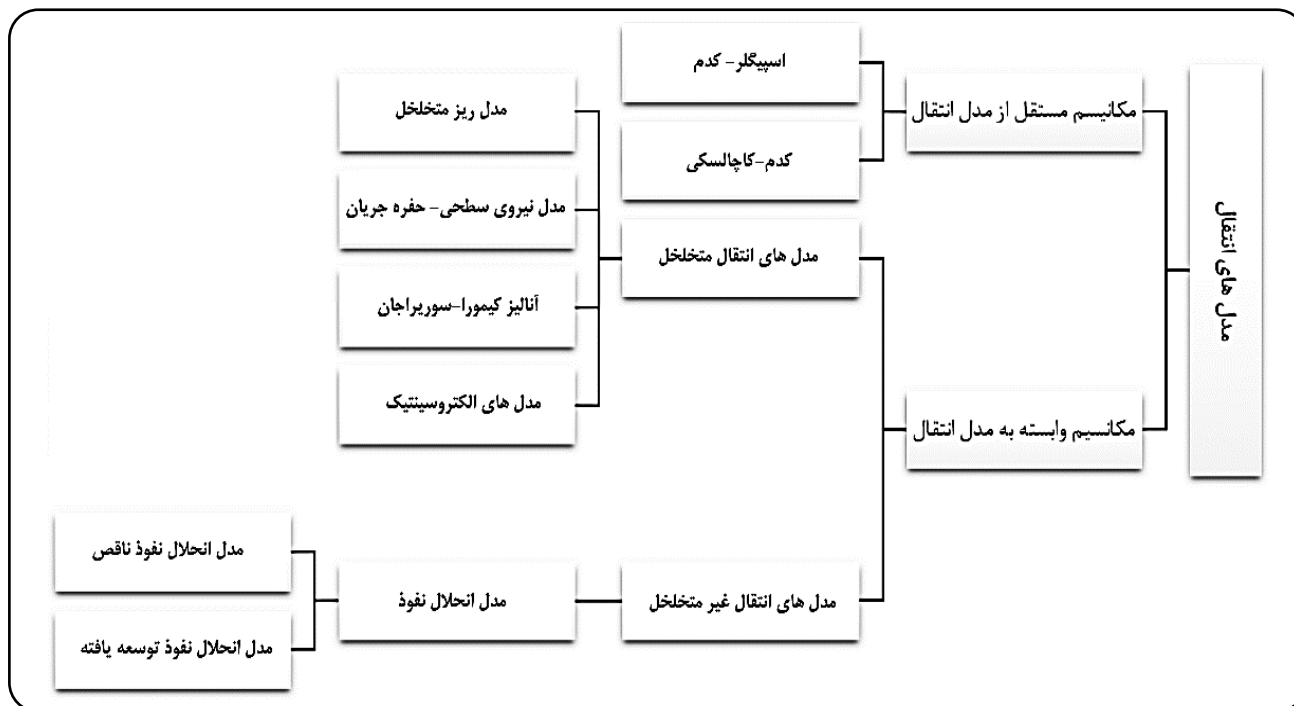
(۲) Sieve mechanism

(۴) Solution-Diffusion (SD)

(۶) Phenomenological

(۸) Mechanistic

(۱۰) Frictional Interactions-



شکل ۱- برخی از مدل های انتقال در غشا [۱۲].

اهمیت دارد که مولاریته حجمی نسبی^۳ حل شونده، زیاد و میزان جداسازی حل شونده و آب کم باشد [۱۲].

همان طور که اشاره شد در شکل ۱ فقط برخی مدل های مبتنی بر تئوری انحلال نفوذ ذکر شده در ادامه به دو مکانیسم انحلال - نفوذ و حفره - جریان که به همراه تئوری لایه فیلمی کاربرد گسترده ای در شبیه سازی و مدل سازی فرایندهای غشایی دارند [۲۱-۲۳]، پرداخته شده است.

تئوری لایه فیلمی

طبق مطالعات ژائو^۴ [۲۴] تئوری های گوناگونی برای بررسی نفوذ از درون غشا وجود دارد. هدف استفاده از این تئوری ها تفسیر انتقال جرم از غشا با کمک محاسبه ضریب نفوذ مولکولی و ضریب انتقال جرم می باشد. یکی از تئوری های اساسی و پرکاربرد تئوری لایه فیلمی^۵ (FTM) است. در این تئوری انتقال جرم در لایه پای با ضخامت بسیار کم رخ می دهد و انتقال جرم به صورت پایا^۶ فرض می شود. در شکل ۲ نمایی از غشا و لایه انتقال جرم نزدیک آن نشان داده شده است.

- نفوذ ناشی از گرادیان غلظت
- نفوذ ناشی از گرادیان فشار
- جریان هیدرودینامیکی درون حفرات

این دیدگاه، نسبت به مدل های پدیدارشناختی، اطلاعات بیشتری در مورد جریان و مکانیسم های جداسازی ارائه می دهد. از طرفی این دسته خود در دو گروه بندی مجزا می تواند به مدل های عمومی و مدل های الکترو سینتیک (در حالتی که محلول های خوراک الکترولیتی هستند) یا مدل های غشای متخلخل و غیر متخلخل تقسیم گردد. در شکل ۱ برخی از مدل های انتقال در غشا ذکر شده است [۱۹-۲۰]. به عنوان نمونه مدل های انحلال-نفوذ و حفره-جریان (مدل های انتقال متخلخل) هر دو در زیرمجموعه مدل های وابسته به مدل انتقال، قرار می گیرند. مدل انحلال - نفوذ ناقص^۱ (SDI) در سال ۱۹۶۷ ارائه شده است. این مدل برای غشاهایی کاربرد دارد که هنگام ساخت آن حفراتی روی سطح غشا ایجاد شده و محلول از درون این حفرات تراوش می کند. مدل انحلال - نفوذ توسعه یافته^۲ (SDE) با در نظر گرفتن ترم فشاری در معادله پتانسیل شیمیایی حل شونده در محاسبات مدل اصلی انحلال - نفوذ و در سال ۱۹۸۰ مطرح شده است. این مدل زمانی

(۱) Solution-diffusion-imperfection (SDI)

(۳) Partial molar volume

(۵) Film Theory Method (FTM)

(۲) Extended solution-diffusion (ESD)

(۴) Zhao Y. et al

(۶) Steady state

در فازهای تراکم‌ناپذیر مانند غشای جامد یا مایع تغییرات حجم در برابر فشار ناچیز است در نتیجه با انتگرال از معادله ۴ نسبت به غلظت و فشار معادله ۵ نتیجه می‌شود:

$$\mu_i = \mu_i^0 + RT \ln(\gamma_i n_i) + v_i(P - P_i^0) \quad (5)$$

کمیت‌های μ_i^0 و P_i^0 به ترتیب بیانگر پتانسیل شیمیایی جزء خالص i و فشار مرجع هستند. این فشار مرجع معمولاً برابر با فشار بخار اشباع جزء خالص i قرار داده می‌شود. برای تعریف مدل تراوش باید فرضیاتی در معادله ۵ اعمال شود. معمولاً اولین فرض این است که سیالات موجود در دو طرف غشا با مواد موجود در سطح غشا در تعادل هستند. این فرض بدین معنی است که گرادیان پیوسته‌ای از پتانسیل شیمیایی از یک سمت غشا به سمت دیگر وجود دارد و از طرفی، طبق این فرض میزان شدت جذب و دفع در مرز غشا بسیار بیشتر از مقدار نفوذ از درون غشا است. این فرض تقریباً برای بیشتر فرایندهای غشایی صادق بوده ولی در مواردی مانند نفوذ گازها از درون فلزات که جذب سطحی خیلی کند است، این فرض صادق نیست [۲۵-۲۶]. برای استفاده از معادلات کلی فوق در تئوری‌های انحلال - نفوذ و حفره - جریان، فرضیات گوناگونی برای حل معادله ۵ در هر یک از این دو تئوری در نظر گرفته می‌شود که در جدول ۱ با یکدیگر مقایسه شده‌اند [۲۷-۲۵-۱۳].

در مدل SD گرادیان فشار وجود نداشته و گرادیان پتانسیل شیمیایی ناشی از گرادیان فعالیت حلال است در نتیجه ترکیب معادله ۳ و ۴ منجر به معادله ۶ می‌شود [۲۷].

$$J_i = -\frac{RTU_i}{c_i} \frac{dc_i}{dx} \quad (6)$$

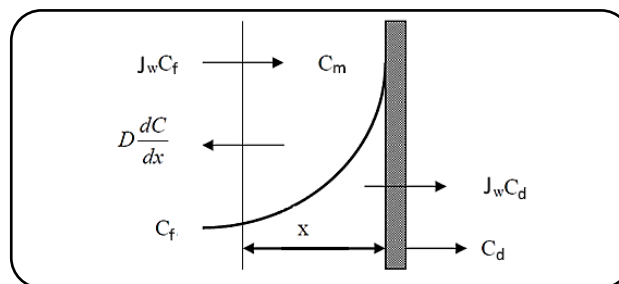
در صورتی که ترم $\frac{RTL_i}{c_i}$ با ضریب نفوذ مولکولی D_i جایگزین شود، معادله ۶ مشابه قانون فیک و به صورت معادله ۷ به دست می‌آید.

$$J_i = -D_i \frac{dc_i}{dx} \quad (7)$$

معادله ۸ نتیجه انتگرال معادله ۷ در ضخامت غشا است:

$$J_i = -D_i \frac{c_F - c_P}{t} \quad (8)$$

در مدل‌های PF گرادیان پتانسیل شیمیایی ناشی از گرادیان فشار است و در نبود گرادیان غلظت، ترکیب معادله ۳ و ۴ منجر به معادله ۹ می‌شود.



شکل ۲- تئوری لایه فیلمی [۲۴].

در حالت پایا شار حل‌شونده درون لایه فیلمی برابر شار حل‌شونده‌ای است که از غشا عبور می‌کند. نوشتن معادله بقای جرم معادله ۱ را نتیجه می‌دهد:

$$J_i = -D \frac{dc}{dx} + c_m J_w \quad (1)$$

با انتگرال گرفتن از معادله ۱ تحت شرایط مرزی لایه فیلمی به معادله ۲ به دست می‌آید:

$$\left[\frac{c_m - c_d}{c_f - c_d} \right] = e^{\frac{J_w}{k_b}} \quad (2)$$

در این معادله $D_i/x = k_b$ ضریب نفوذ از سطح به بالک است.

مقایسه مدل انحلال - نفوذ و حفره - جریان

اصل ترمودینامیکی بنیادین در آغاز تشریح ریاضی تراوش در تمامی غشاها این است که نیروهای محرکه فشار، دما، غلظت و نیروی محرکه برقی^۱ به یکدیگر وابسته هستند و نیروی محرکه کلی که باعث حرکت ماده نفوذکننده i می‌شود، گرادیان پتانسیل شیمیایی (μ_i) آن می‌باشد، در نتیجه شار J_i ($g \text{ cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$) به صورت معادله ۳ بیان می‌گردد:

$$J_i = c_i V_i = c_i U_i \frac{d\mu_i}{dx} \quad (3)$$

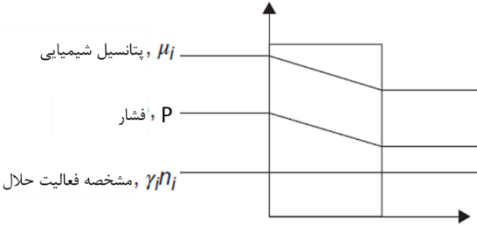
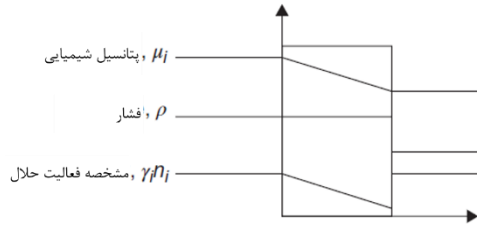
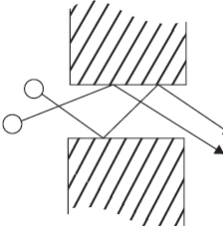
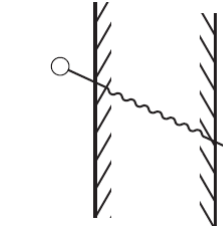
در این معادله $d\mu_i/dx$ گرادیان پتانسیل شیمیایی جزء i است. تمامی نیروهای محرکه معمول (مانند گرادیان فشار و دما و غیره) می‌توانند در گرادیان پتانسیل شیمیایی خلاصه شوند و تأثیر آن‌ها بر شار به وسیله معادله ۳ بیان شود [۲۵-۲۶].

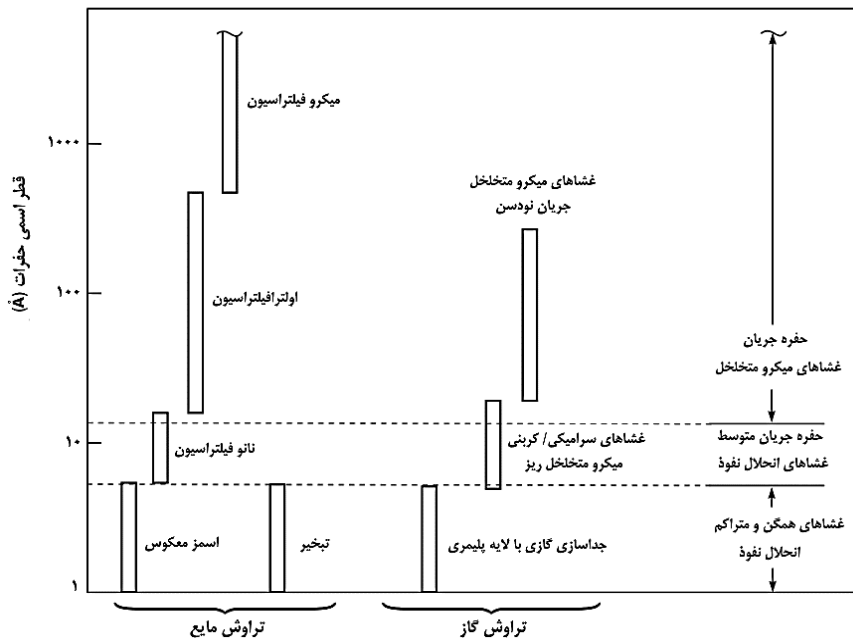
با محدود کردن نیروهای محرکه به فشار و غلظت، معادله پتانسیل شیمیایی به شکل معادله ۴ نمایش داده می‌شود:

$$d\mu_i = RT \ln(\gamma_i n_i) + v_i dP \quad (4)$$

(۱) Electromotive force

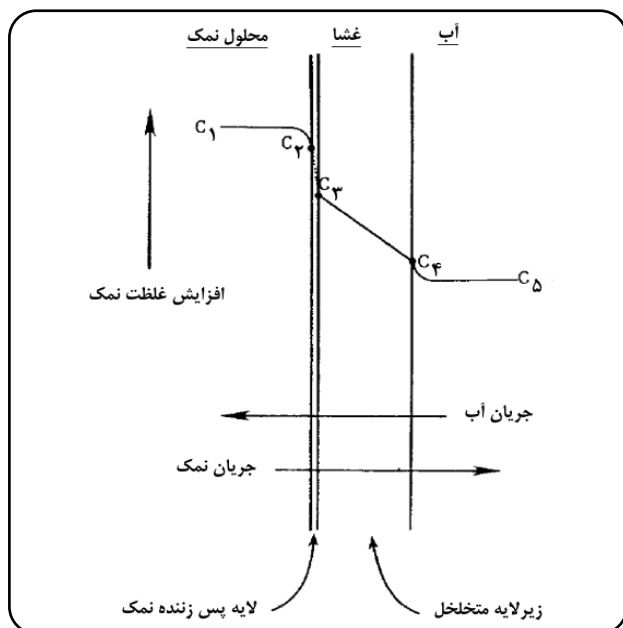
جدول ۱- بررسی تشابه و اختلاف فرضیات دو مدل انحلال نفوذ و حفره جریان برای حل معادلات ریاضی در غشا (گرد آوری شده از [۲۷])

حفره-جریان (PF) متغیر	انحلال-نفوذ (SD) ثابت و برابر با فشار محلول پرفشار	ویژگی های در طول غشا فشار (P)
تنها به صورت گرادیان غلظت بیان می شود.		گرادیان پتانسیل شیمیایی ماده نفوذکننده
ثابت	متغیر	مشخصه فعالیت حلال ($\gamma_i n_i$)
اندازه بزرگ تر و پایداری بیشتر	اندازه کوچک تر و پایداری کمتر	اندازه حفرات و پایداری
در محلول های دو طرف غشا ثابت و در درون غشا متغیر است		مقدار پتانسیل شیمیایی (μ_i)
تراوش مواد نفوذکننده از درون منافذ میکرومتری غشا انجام می شود.	بر اساس اختلاف حلالیت مواد تراوش کننده درون غشا و تحرک آن ها در غشا به علت تراکم غشاهای انحلال - نفوذ رخ می دهد.	مکانیسم جداسازی
		تغییرات μ_i ، P و $\gamma_i n_i$ هنگام نفوذ محلول تک جزئی از درون غشا در یک سامانه فشار محور
		نحوه تراوش مواد نفوذکننده



اندازه حفرات غشا، مدل SD از قابلیت بیشتری برای مدل سازی فرایند تراوش غشایی برخوردار است.

همچنین در شکل ۳ محدوده کاربری دو مدل PF و SD با توجه به اندازه حفرات غشا مشخص شده است. با توجه به این شکل با کاهش



شکل ۴- انتقال جرمی در غشای PRO [۲۹].

در این معادله، π_2 فشار اسمزی در سمت محلول غلیظ، C_p غلظت در سمت محلول رقیق، C_p غلظت در سمت محلول غلیظ می باشد. لوئب و همکاران [۳۰] با فرض:

- نبود فشار خارجی ($\Delta P = 0$)
 - رابطه مستقیم غلظت حل شونده و فشار اسمزی ($\frac{\pi_A}{\pi_B} = \frac{C_A}{C_B}$)
 - ناچیز بودن پلاریزاسیون غلظتی خارجی در دو سمت غشا
 - $\pi_{low}, A\pi_{low} \gg B$ فشار اسمزی سمت محلول رقیق
 - $\pi_{Hi}, A\pi_{Hi} \gg B - J_w$ فشار اسمزی سمت محلول غلیظ
- و تبدیل معادله PRO به FO، رابطه‌ای به صورت معادله ۱۲ ارائه کرده‌اند.

$$J_w = \frac{1}{K} \ln \frac{A\pi_{Hi} + B}{A\pi_{Low} + B + J_w} \quad (12)$$

در این معادله، K به صورت معادله ۱۳ تعریف می شود [۱۱]:

$$K = \frac{\tau \tau}{\varepsilon D} = \frac{S}{D} \quad (13)$$

مکاین و الیمیک [۳۱-۳۲] نیز معادلات را مورد بررسی بیشتر قرار داده و روابط گوناگونی را برای محاسبه پلاریزاسیون غلظتی داخلی و خارجی در دو حالت تغلیظ شده و رقیق شده ارائه کردند

$$J_i = A c_i \frac{dP}{dx} \quad (9)$$

در این معادله $\frac{dp}{dx}$ گرادیان فشار موجود در محیط متخلخل A ضریب تراوایی یا ضریب قانون دارسی^۱ بوده و در حقیقت منعکس کننده ماهیت محیط متخلخل می باشد. این ضریب تابعی از پارامترهای ساختاری غشا مانند قطر منافذ، تخلخل سطحی و پیچش غشا^۲ است. با انتگرال گیری از معادله ۶ در طول غشا، قانون دارسی به صورت معادله ۷ به دست می آید [۲۸].

$$J_i = A \frac{(P_F - P_P)}{t} \quad (10)$$

توسعه مدل های اسمز مستقیم مبتنی بر تئوری SD و FTM

هر دو مدل SD و PF در قرن ۱۹ ارائه شده‌اند ولی PF، به دلیل نزدیک بودن تئوری آن به شرایط فیزیکی معمول تا اواسط دهه ۱۹۴۰ میلادی مدل شناخته شده تری محسوب می شد. در دهه ۴۰، مدل SD برای تشریح انتقال گازها در فیلم پلیمری به کار رفت. با اوج گرفتن انجام مطالعات اسمز معکوس در دهه ۶۰ و ۷۰ میلادی، سرانجام مدل SD بعد از دهه ۸۰ میلادی کاربرد گسترده تری به ویژه در زمینه مدل سازی و شبیه سازی فرایندهای اسمزی پیدا کرد [۱۳]. مینا و نقطه شروع اکثر معادله های ارائه شده اخیر برای مدل سازی شار آب و حل شونده در فرایندهای اسمز مستقیم و اسمز با فشار تأخیری^۳ (PRO) به پژوهش لی و همکاران [۲۹] در سال ۱۹۸۱ برمی گردد. هدف اصلی آن ها بررسی غشاها برای تولید برق با کمک فرایند PRO بوده ولی آن ها بر مبنای تئوری های انحلال - نفوذ و تئوری فیلمی^۵ (SD-FTM) معادله ۱۱ را برای محاسبه شار آب ارائه کردند. شکل ۴ غلظت های گوناگون و جهت شار آب و حل شونده را در فرایند PRO نشان می دهد. دو اختلاف اصلی این فرایند با فشار اسمز مستقیم، وجود فشار هیدرولیکی خارجی و جهت قرارگیری غشا می باشد. در فرایند اسمز با فشار تأخیری، لایه فعال غشا به سمت محلول خوراک قرار گرفته است [۱۱]. معادله ارائه شده با فرض رابطه مستقیم بین فشار اسمزی و غلظت و پایا بودن فرایند به صورت معادله ۱۱ می شود:

$$J_w = A \left[\pi_2 \frac{1 - \frac{C_4}{C_2} \exp(J_w K)}{1 - \frac{B}{J_w} [\exp(J_w K) - 1]} - \Delta P \right] \quad (11)$$

(۱) Darcy

(۳) Pressure Retarded Osmosis

(۵) Solution Diffusion- Film Theory Diffusion Model

(۷) McCutcheon J.R. and Elimelech M

(۲) Tortuosity

(۴) Lee K. L. et all

(۶) Loeb S. et al.

جدول ۲- روابط ارائه شده مکاچن و الیمیک مربوط به پلاریزاسیون غلظتی [۳۱-۳۲]

CECP	DECP	CICP	DICP	نوع پلاریزاسیون
$\frac{\pi_{fm}}{\pi_{fb}} = \exp\left(\frac{J_w}{k}\right)$	$\frac{\pi_{dm}}{\pi_{db}} = \exp\left(-\frac{J_w}{k}\right)$	$\frac{\pi_{fin}}{\pi_{fb}} = \exp(J_w K)$	$\frac{\pi_{din}}{\pi_{db}} = \exp(-J_w K)$	معادله مربوطه

در این معادله $D_{C(x)}$ نماد ضریب نفوذ مولکولی تابع غلظت است. باتوجه به تغییرات غلظت با مکان، x معادله این ضریب مولکولی به صورت معادله ۲۰ بیان می شود.

$$D_{C(x)} = E_1 + E_2 c_x + E_3 c_x^2 + \dots + E_n c_x^{n-1} \quad (20)$$

در این معادله E_i ثابت‌هایی هستند وابسته به رابطه تجربی بین غلظت و نفوذ مولکولی. با ترکیب معادلات ۱۳، ۱۹ و ۲۰ و انتگرال گیری از آن در طول لایه متراکم غشا، K نیز دیگر ثابت نبوده و متناسب با مکان تغییر می کند در نتیجه رابطه جدیدی (معادله ۲۱) به نام K^* تعریف شد تا این تغییرات را پوشش دهد.

$$K^* = \left[\frac{f_1}{J_m} (C_{dm} - C_{db}) + \frac{f_2}{J_m} (C_{dm}^2 - C_{db}^2) + \dots + \frac{f_n}{J_m} (C_{dm}^n - C_{db}^n) \right] + \frac{g}{J_m} \ln \left(\frac{B(C_{fm} - C_{Dm}) + J_m C_{dm}}{B(C_{fm} - C_{Dm}) + J_m C_{db}} \right) \quad (21)$$

از طرفی برای محاسبه K و عدد شرود حدود ۲۷ رابطه تجربی وجود دارد و از آنجایی که فرمول محاسبه عدد شرود در مقاله الیمیک و مکاچن از روی آزمایش‌های اولترافیلتراسیون محاسبه شده بود، در این مقاله بیان شده که لزوماً این روابط (معادله‌های ۱۵ و ۱۶) برای بررسی ECP در FO نیز مفید نیستند. معادله ۱۵ تنها در صورتی صحیح است که طول کانال خیلی بزرگ‌تر از طول هیدرودینامیکی جریان توسعه یافته^۶ باشد، در نتیجه انتقال جرم فقط زمانی که طول ناحیه توسعه یافته ناچیز باشد معتبر است ولی طول غشای FO معمولاً به قدری زیاد نیست که این معادله معتبر باشد. معادله ۱۶ نیز با فرض افت فشار زیاد در جریان فرایندهای UF و RO توسعه یافته است. این معادله نیز بیشتر برای جریان‌های با اغتشاش زیاد مناسب است و در فرایند FO که فشار خارجی ناچیز یا صفر است کاربرد زیادی ندارد. در نتیجه معادله‌های ۲۲ و ۲۳ برای جریان آرام و مغشوش پیشنهاد شد [۳۳].

بسته به جهت گیری غشا در سامانه‌های اسمز محور هر دو نوع پلاریزاسیون خارجی رقیق^۱ (DECP) و غلیظ^۲ (CECP) می تواند اتفاق بیفتد. معمولاً زمانی که لایه پشتیبان در سمت محلول کُشنده قرار دارد، CECP و زمانی که در سمت محلول خوراک قرار دارد DECP غالب است. همچنین بسته به نحوه قرار گرفتن لایه پشتیبان در نوع پلاریزاسیون غلظتی داخلی می تواند اتفاق بیفتد. اگر لایه پشتیبان در سمت محلول کُشنده باشد، پلاریزاسیون غلظتی داخلی رقیق^۳ (DICP) و اگر لایه پشتیبان در سمت محلول خوراک باشد، پلاریزاسیون غلظتی داخلی غلیظ^۴ (CICP) رخ می دهد [۱۱].

ضریب انتقال جرم طبق معادلات ۱۴-۱۶ برابر است با:

$$k = \frac{Sh \times D}{d_h} \quad (14)$$

$$\text{Laminar Flow (Re} \leq 2100) \quad Sh = 1.85 \left(Re Sc \frac{d_h}{L} \right)^{0.33} \quad (15)$$

$$\text{Turbulent Flow (Re} > 2100) \quad Sh = 0.04 Re^{0.75} Sc^{0.33} \quad (16)$$

مکاچن و الیمیک بیان کردند که با فرض:

- پس‌زندگی کامل غشا و نبود شار جرمی نمک ($B=0$)
 - حاکم بودن روابط CECP و DICP در فرایند اسمز مستقیم
- معادله مربوطه به شار آب به صورت معادله ۱۷ بیان می شود:

$$J_w = A(\pi_{Db} \times \exp(-J_w K) - \pi_{Fb} \times \exp\left(\frac{J_w}{k}\right)) \quad (17)$$

تان و همکاران [۳۳]^۵ رابطه‌های جدیدی برای محاسبه مقاومت انتقال جرمی حل شونده در لایه پشتیبان متخلخل (K) و عدد شرود (Sh) پیشنهاد کردند. شار جرمی حل شونده از لایه متراکم غشا در حالت DICP به صورت معادله ۱۸ تعریف می شود.

$$J_s = B(c_{dm} - c_{fm}) \quad (18)$$

همچنین با در نظر گرفتن معادلات جابجایی - نفوذ مولکولی، برای شار جرمی حل شونده در لایه متخلخل غشا می توان رابطه ۱۹ را نوشت:

$$J_s = \varepsilon \frac{dD_{C(x)} c(x)}{dx} - J_w c(x) \quad (19)$$

(۱) Dilutive External Concentration Polarization (DECP)

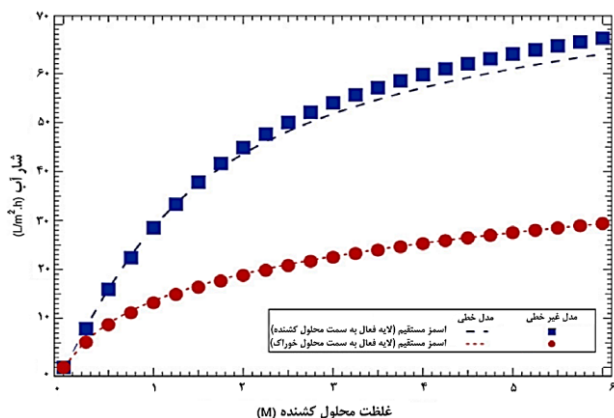
(۳) Dilutive Internal Concentration Polarization (DICP)

(۵) Tan C.H. et al

(۲) Concentrative External Concentration Polarization (CECP)

(۴) Concentrative Internal Concentration Polarization (CICP)

(۶) Hydrodynamic flow development length



شکل ۶- مقایسه نتیجه‌های مدل‌های خطی و غیرخطی فشار-غلظت در محاسبه شار آب [۳۴].

سو و همکاران [۳۶] شار معکوس حل‌شونده در فرایند اسمز مستقیم را با در نظر گرفتن ECP در هر دو طرف غشا مدل‌سازی کرده‌اند. بدین منظور آن‌ها از معادله ۱ در سه شرایط مرزی گوناگون انتگرال گرفته‌اند که سرانجام معادله ۲۵ حاصل شد:

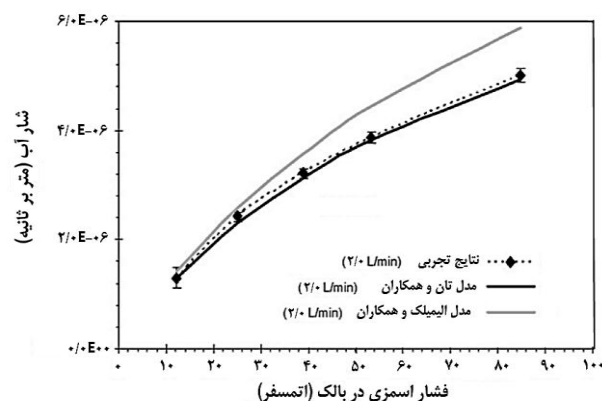
$$J_s = B \left(\frac{C_{Db} + J_{sw}}{\exp(J_s(K/J_{sw})) \exp(J_s/J_{sw}k_D)} - (C_{Fb} + J_{sw}) \exp\left(\frac{J_s}{J_{sw}k_F}\right) \right) \quad (25)$$

در این معادله J_{sw} معادل شار حل‌شونده به آب است. تفاوت معادله‌های به‌دست‌آمده توسط سو و معادله‌های الیمیلک و مکچن در جدول ۳ نشان داده شده است:

در ادامه، یکی از کامل‌ترین معادله‌های اخیر که هم تأثیر ICP و هم اثر DECP و CECP را در نظر می‌گیرد توسط بوی و همکاران [۳۷] ارائه شد. آن‌ها با فرض رابطه خطی بین فشار اسمزی و غلظت، معادله شار آب را به صورت معادله ۲۶ محاسبه کردند:

$$J_w = A \left\{ \frac{\pi_{Db} \exp\left[-J_w \left(\frac{1}{k_D} + \frac{S}{D_D}\right)\right] - \pi_{Fb} \exp\left(\frac{J_w}{k_F}\right)}{1 + \frac{B}{J_w} \left\{ \exp\left(\frac{J_w}{k_F}\right) - \exp\left[-J_w \left(\frac{1}{k_D} + \frac{S}{D_D}\right)\right] \right\}} \right\} \quad (26)$$

باتوجه به اینکه در این معادله اثرات کامل پلاریزاسیون غلظتی لحاظ شده و برخلاف سایر معادلات، بین ضریب انتقال جرم حل‌شونده در محفظه خوراک و محلول کاشنده تمایز ایجاد شده است، این معادله به صورت کامل تمام نواقص معادلات قبلی را پوشش می‌دهد.



شکل ۵- مقایسه مدل‌های ریاضی تان و الیمیلک در محاسبه اثر فشار اسمزی سمت محلول کاشنده روی شار آب [۳۳].

$$\text{Laminar Flow (Re} \leq 2100) \quad Sh = 0.332Re^{1/2}Sc^{1/3} \quad (22)$$

$$\text{Turbulent Flow (Re} > 2100) \quad Sh = 0.04Re^{4/5}Sc^{1/3} \quad (23)$$

علاوه بر این موارد پژوهش آن‌ها نشان داد مدل ارائه شده توسط الیمیلک و مکچن شار آب را بیشتر از مقدار واقعی پیش‌بینی می‌کند (شکل ۵). تانگ و همکاران [۳۴] صحت یکی از فرضیات اساسی، رابطه خطی بین فشار اسمزی (π) و غلظت حل‌شونده (C)، در به دست آوردن معادله‌های شار آب را مورد بررسی قرار دادند. دو مدل خطی و غیرخطی در دو حالت AL-DS (لایه فعال در سمت محلول حل‌شونده) و AL-FW (لایه فعال در سمت خوراک) مورد بررسی قرار گرفت و مشخص شد که این فرضیه برای فرایند FO (AI-FW) صحیح است ولی مدل غیرخطی در مواقعی که غلظت محلول کاشنده زیاد و در حالت (AL-DS) باشد، اختلاف جزئی (کمتر از ۵٪) با نتیجه‌های مدل خطی پیدا می‌کند. نتیجه‌های مدل خطی و غیرخطی در شکل ۶ نشان داده شده است. ژائو و همکاران [۳۵] با تعریف خاصیتی به نام فشردگی^۱، ICP را به سایر ویژگی‌های محلول (مانند اندازه ذرات حل‌شونده و ویسکوزیته محلول) مربوط کرده‌اند. معادله مربوطه به صورت معادله ۲۴ است:

$$K = \frac{\tau\tau}{\delta\varepsilon_{eff}D} \quad (24)$$

در صورتی که برخی از منافذ برای ذرات حل‌شونده با اندازه بزرگ غیرقابل دسترس باشد، مقدار تخلخل مؤثر می‌تواند از تخلخل کلی غشا کمتر باشد. ضریب فشردگی (δ) به نسبت قطر حل‌شونده به قطر منافذ، بستگی دارد [۱۱].

(۱) Tang C.Y. et al.
(۳) Constrictivity
(۵) Bui N.N. et al

(۲) Zhao S.et al.
(۴) Suh C. et al.

جدول ۳- تفاوت مدل‌های سو و الیمیک [۳۶]

مدل سو و همکاران	مدل الیمیک و همکاران
$C_i = (C_{Dm} + J_s/J_w) / \exp(J_w K) - J_s/J_w$	$C_i = C_{Db} / \exp(J_w K)$ (فرضیات : $J_s = 0, C_{Dm} = C_{Db}$)
$C_{Dm} = (C_{Db} + J_s/J_w) / \exp(J_w/k_D) - J_s/J_w$	$C_{Dm} = C_{Db} / \exp(J_w/k_D)$ (فرضیات : $J_s = 0$)
$C_{Fm} = (C_{Fb} + J_s/J_w) \exp(J_w/k_F) - J_s/J_w$	$C_{Fm} = C_{Fb} \exp(J_w/k_F)$ (فرضیات : $J_s = 0$)
$J_s = B \left(\frac{C_{Dm} + J_s/J_w}{\exp(J_w K)} \exp(J_w/k_D) - \frac{C_{Fm} - J_s/J_w}{\exp(J_w/k_F)} \right)$	$J_s = J_w C_{Db} / (1 + J_w/B) \exp(J_w K) - 1$ (فرضیات : $C_{Fm} = C_{Fb} = 0, C_{Dm} = C_{Db}$)

(C_i) غلظت حل شونده در لایه مرزی بین لایه پشتیبان و لایه فعال غشا
(C_{Dm}) غلظت حل شونده روی سطح غشا در سمت لایه پشتیبان
(C_{Fm}) غلظت حل شونده روی سطح غشا در سمت لایه فعال
شار معکوس نمک (J_s)

محاسبه ضریب تراوایی حل شونده

هنگام محاسبه B از فرض رابطه خطی بین فشار اسمزی و غلظت حل شونده استفاده می‌شود. در این حالت طبق معادله ۲۸ پارامتر Φ به عنوان یک ضریب ثابت این ارتباط خطی را بین پارامترها برقرار می‌کند.

$$\pi = \Phi \times C \quad (28)$$

به عنوان نمونه مقدار پارامتر Φ برابر $\frac{bar \cdot L}{g} \cdot 0.805$ در نظر گرفته می‌شود که تا غلظت ۱/۵ مولار اعتبار دارد [۴۰]. با مشخص شدن مقدار این پارامتر و ضریب تراوایی آب طبق روش گفته شده و کمک گرفتن از داده‌های تجربی برابر شار آب و حل شونده مقدار B طبق معادله ۲۹ محاسبه می‌شود [۳۸].

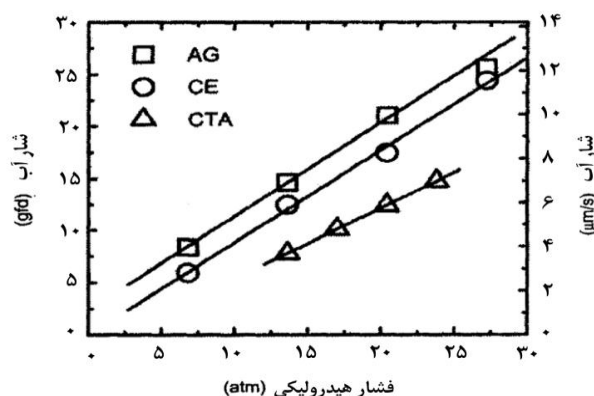
$$B = \Phi \times A \times \frac{|J_w|}{|J_s|} \quad (29)$$

محاسبه پارامتر مقاومت نفوذپذیری غشا

پس از محاسبه مقدار A و B و با برازش معادله ۳۰ با داده‌های تجربی شار آب در غلظت‌های گوناگون محلول کشنده، پارامتر مقاومت نفوذپذیری غشا (K) به دست می‌آید:

$$K = \frac{1}{J_w} \ln \left(\frac{B + A\pi_{d,m}}{B + |J_w| + A\pi_{f,m}} \right) \quad (30)$$

فرض اصلی این معادلات عدم وجود ECP است. برای برقراری این فرض در آزمایش‌های تجربی می‌بایست از سرعت‌های عبور محلول‌های خوراکی و کشنده بالا باشد و از فضا سازها جهت ایجاد تلاطم مناسب در محفظه غشایی استفاده شود [۲۲-۳۸].



شکل ۷- مقایسه اثر فشار هیدرولیکی (atm) بر شار آب خالص عبوری از غشا (gfd - $\mu\text{m/s}$) برای سه غشای گوناگون (غشاهای AG^۱ و CE^۲ ساخت شرکت GE Osmonics و مخصوص فرایند RO و غشای CTA^۳ مخصوص فرایند FO) [۳۹].

تعیین پارامترهای غشا

مدل سازی غشایی اسمز مستقیم نیازمند در دسترس بودن سه پارامتر اصلی غشا، A ضریب تراوایی آب، B ضریب تراوایی حل شونده و K پارامتر مقاومت نفوذپذیری می‌باشد.

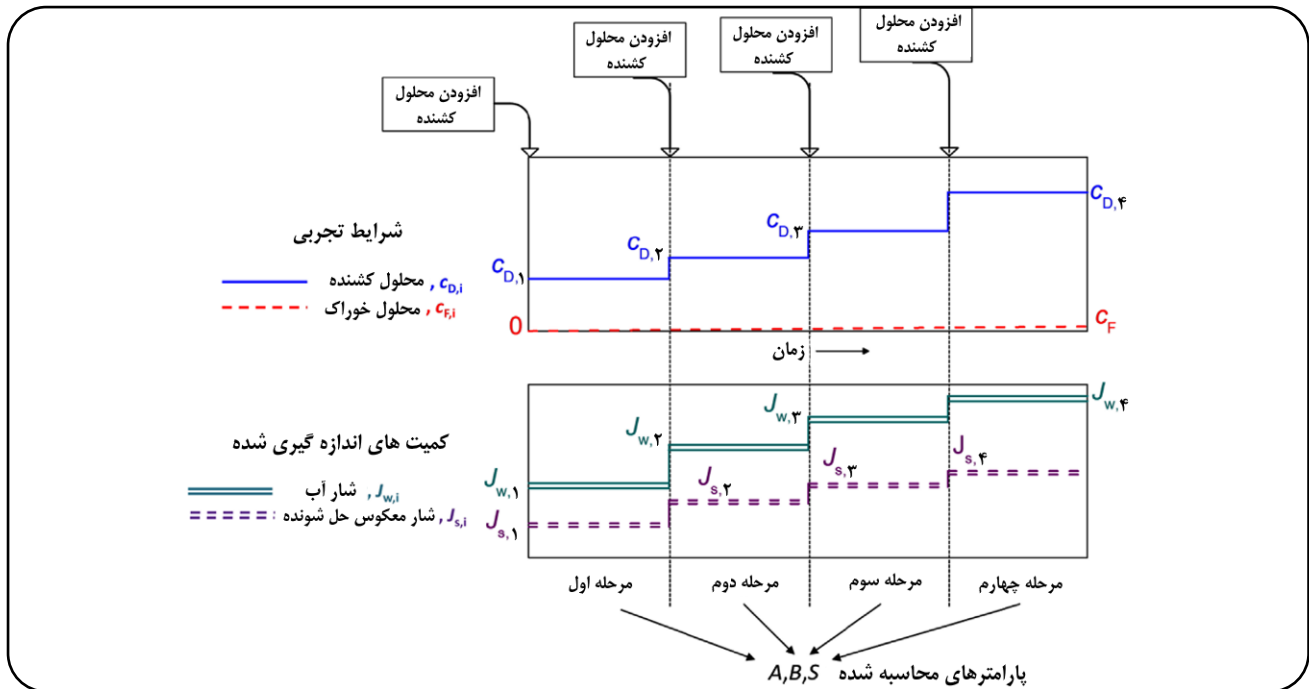
محاسبه ضریب تراوایی آب:

برای محاسبه این ضریب بر اساس معادله ۲۷ از یک سامانه آزمایشگاهی RO (اعمال فشار خارجی - P) استفاده می‌شود. در دو سمت غشا، آب مقطر وجود دارد. پس از محاسبه شار آب عبوری از غشا با اعمال فشارهای خارجی متفاوت، نموداری مطابق شکل ۷ رسم می‌شود. شیب این نمودار طبق معادله ۲۷ برابر ضریب تراوایی آب است [۳۸-۳۹].

$$J_w = A\Delta P \quad (27)$$

(۱) Polyamide thin film composite membrane
(۳) Cellulose Triacetate membrane

(۲) Cellulose acetate asymmetric membrane
(۴) Spacer



شکل ۸- نحوه محاسبه ضریب تراوایی آب، حل شونده و پارامتر ساختاری غشا [۴۱]

غلظتی با در نظر گرفتن ICP [۲۲]، مقایسه محفظه‌های غشایی گوناگون مطابق و اثرات آن بر شار آب [۳۸] و ارائه مدل جهت بهینه‌سازی فرایندهای اسمز مستقیم و معکوس با در نظر گرفتن فضا سازه‌ها بوده است [۱۵]. در شکل ۹ میزان سرعت جریان و نیروی محرکه اسمزی متناسب با آن در دو محفظه غشایی گوناگون نمای داده شده است. در قسمت‌هایی از محفظه غشا که نیروی محرکه اسمزی کمتر است جریان نیز سرعت کمتری دارد. از این نتیجه‌ها می‌توان برای بهینه‌سازی محفظه غشایی و تجاری‌سازی آن استفاده نمود [۳۸]. از موارد کاربرد دیگر شبیه‌سازی‌های انجام شده پس از معادلات جریان، می‌توان به بررسی نقش فضا سازه‌ها در افزایش میزان شار آب عبوری از غشا اشاره کرد. همان‌طور که در شکل ۱۰ نمایش داده شده با جانمایی مناسب فضا سازه‌ها می‌توان تلاطم کافی در جریان را ایجاد نمود که این امر سرانجام منجر به افزایش میزان شار جرمی آب از درون غشا خواهد شد. این مقایسه بین دو محفظه غشایی با هندسه و تعداد ورودی و خروجی یکسان ولی با تعداد ستون متفاوتی از فضا سازه‌ها انجام شده است [۱۵].

طاهریان و همکاران [۲۱] نیز در سال ۲۰۱۷ فرایند اسمز مستقیم را به وسیله نرم‌افزار Netlogo و با حل معادله ۱۷ شبیه‌سازی کرده‌اند. در این پژوهش، اثر پارامترهای فرآیندی گوناگونی مانند دما، طول محفظه،

محاسبه هیزمان سه پارامتر اصلی غشا

تیرافیری و همکاران [۴۱] در سال ۲۰۱۳ با حل معادله غیرخطی ۳۱ و با فرض عدم وجود ECP در سمت محلول کثنده غشا، مدل ریاضی ارائه کرده‌اند که این معادله را در اکسل و نرم‌افزار متلب حل کرده و سرانجام با ترکیب آزمایشات تجربی و معادلات ریاضی مقدار A، B و S را ارائه می‌دهد. روش انجام کار، اضافه کردن غلظت محلول کثنده طی ۴ مرحله، مطابق شکل ۸، و اندازه‌گیری غلظت این محلول، محلول خوراک و شار جرمی آب و حل شونده طی این چهار مرحله است. اطلاعات ورودی نرم‌افزار اطلاعات مذکور می‌باشد.

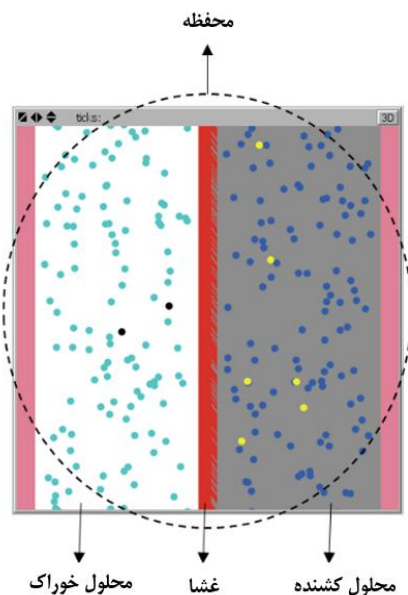
$$J_w = A \left\{ \frac{\pi_{D_b} \exp \left[-J_w \left(\frac{S}{D_D} \right) \right] - \pi_{F_b} \exp \left(\frac{J_w}{k_F} \right)}{1 + \frac{B}{J_w} \left\{ \exp \left(\frac{J_w}{k_F} \right) - \exp \left[-J_w \left(\frac{S}{D_D} \right) \right] \right\}} \right\} \quad (31)$$

بررسی برخی شبیه‌سازی‌های انجام شده در زمینه اسمز مستقیم

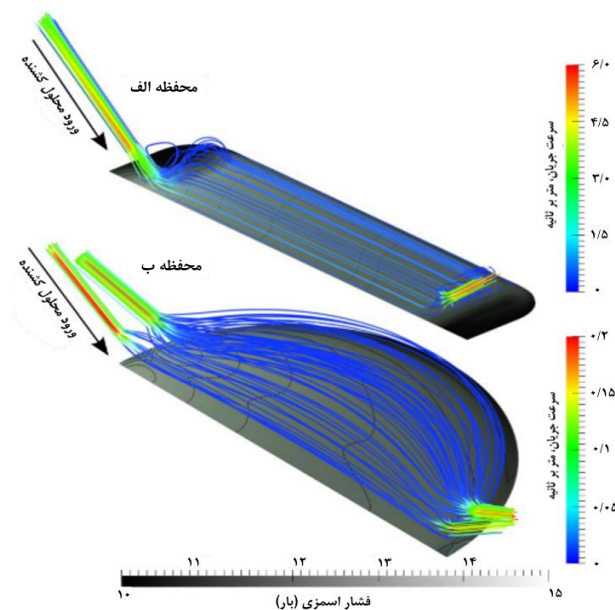
تئوری و معادلات ریاضی که تا اینجا مورد بررسی قرار گرفت، مبنای شبیه‌سازی فرایند اسمز مستقیم توسط محققین بوده است. گروبر و همکاران^۲ در سال‌های ۲۰۱۱-۲۰۱۶ فرایند اسمز مستقیم را بر مبنای تئوری انحلال نفوذ با نرم‌افزار OpenFOAM شبیه‌سازی کرده‌اند. هدف این شبیه‌سازی‌ها بررسی شکل جریان و اثرات پلاریزاسیون

(۱) Tiraferri A. et al

(۲) Gruber M.F. et al



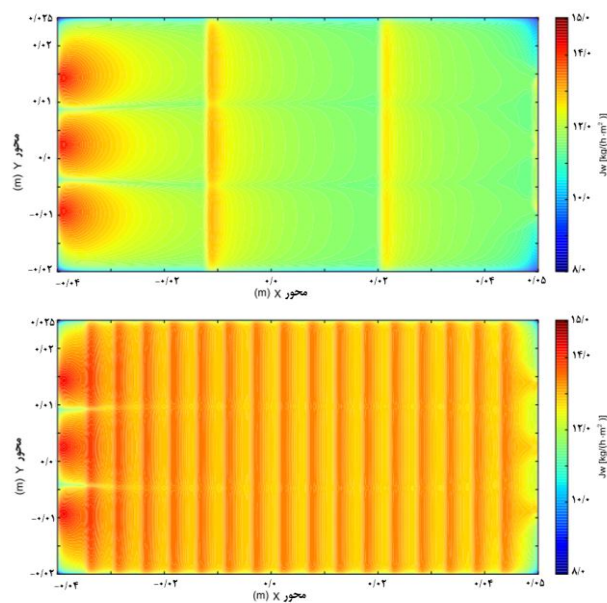
شکل ۱۱- بررسی اثر شرایط فرآیندی بر شار آب در یک محفظه ساده دو بعدی [۲۱].



شکل ۹- مقایسه نحوه عبور جریان و فشار اسمزی در دو محفظه غشایی گوناگون [۳۸].

نتیجه گیری

در این مقاله با توجه به پیشینه و کاربرد مدل‌های گوناگون انحلال - نفوذ در مدل‌سازی و محاسبه پارامترهای غشایی، به بررسی نحوه توسعه این مدل‌ها در فرآیند غشایی اسمز مستقیم پرداخته شده است. در معادلات اولیه اثرات پلاریزاسیون غلظتی به طور کامل یا به صورتی جزئی در نظر گرفته نمی‌شده است. یک از دلایل وابستگی مدل‌سازی و قدرت حل معادلات به پیشرفت‌های کامپیوتری بوده که به مرور زمان با پیشرفت ابزار حل مسئله معادلات غیرخطی پیچیده‌تر (نظیر مدل بوی و همکاران) با قابلیت در نظر گرفتن ICP و ECP در دو طرف غشا توسعه داده شده‌اند. در نتیجه، مدل بوی و همکاران با در نظر گرفتن تمامی انواع گوناگون پلاریزاسیون‌های غلظتی خارجی و داخلی و اثر جریان معکوس حل شونده کامل‌ترین مدل محاسبه شار آب است. سایر مدل‌ها، مانند روابط مک‌چن و الیمیلک، تمام این عوامل را به صورت همزمان لحاظ نکرده و از فرضیات ساده‌کننده برای محاسبه شار آب استفاده کرده بودند. از طرفی به کمک روش ارائه شده تیراوری پارامترهای اصلی غشا (ضریب تراوایی آب، حل‌شونده و پارامتر ساختاری غشا) به کمک محاسبات عددی و نتیجه‌های آزمایشگاهی، برای غشاهای تجاری و بخصوص برای غشاهای ساخته شده در آزمایشگاه، قابل محاسبه است. پیش‌بینی می‌شود با افزایش قدرت محاسبه ابزارهای حل مسئله، معادلات غیرخطی پیچیده‌تر نیز کاربرد بیشتری در زمینه شبیه‌سازی



شکل ۱۰- بررسی اثرات به کارگیری تعداد گوناگون فضا ساز بر شار جرمی آب عبوری از غشا [۱۵].

سرعت جریان در سمت محلول خوراک و پارامتر ساختاری غشا روی شار آب متوسط مورد بررسی قرار گرفت. باینکه در این پژوهش برخلاف شبیه‌سازی گروبر و همکاران، از معادله قدیمی ۱۷ برای محاسبه شار آب در یک فضای دوبعدی استفاده شده است ولی باین وجود پدیده‌ها و همکاران از محلول‌های کثنده گوناگونی برای سنجش اثرات این پارامتر مهم بر روی شار جرمی آب و نمک استفاده کرده‌اند.

عدد شروود	Sh	فرایندهای غشایی داشته و شبیه‌سازی‌های آینده خطای کمتری نسبت به نتیجه‌های تجربی داشته باشند. از طرفی، همان‌طور که ذکر شد شبیه‌سازی‌ها پس از اعتبارسنجی با داده‌های آزمایشگاهی، با در نظر گرفتن شرایط فرایندی غشا (نوع محلول کشنده و خوراک و غلظت آن، سرعت و جهت جابه‌جایی محلول‌ها و پارامتر ساختاری غشا و غیره) و شرایط فیزیکی محفظه‌های غشایی (شکل هندسی محفظه، تعداد و زاویه ورودی و خروجی و غیره) قابلیت بهینه‌سازی این شرایط را در راستای کاهش هزینه‌های تحقیقات آزمایشگاهی را دارند.
دمای مطلق	T	
ضخامت غشا	t	
ضریب تناسب ارتباط برقرارکننده بین گرادیان پتانسیل شیمیایی و شار	U	
سرعت	V	
فاصله	x	
نمادهای یونانی		
ضریب فشردگی	δ	
تخلخل مؤثر	ϵ_{eff}	
تخلخل	ϵ	
پتانسیل شیمیایی	μ	
فشار اسمزی	π	
پیچش / Tortuosity	τ	
ضریب ثابت ارتباط‌دهنده فشار اسمزی و غلظت	φ	
حجم مولی جزئی	v	
ضریب فعالیت و ارتباط‌دهنده غلظت و فعالیت	γ	
زیروندها		
توده و بالک	b	
محلول کشنده	d	
محلول خوراک	f	
شمارنده	i, n	
بین سطح لایه متراکم و پشتیبان غشا	in	
غشا	m	
حل‌شونده به آب	sw	
		واژه‌نامه
		A ضریب تراوایی آب / Water permeability coefficient
		B ضریب تراوایی حل‌شونده / Solute permeability coefficient
		c غلظت
		D ضریب نفوذ مولکولی
		d_h قطر هیدرولیکی محفظه غشایی
		En/fn/g ثوابت وابسته به ضریب نفوذ مولکولی
		J_s شار حل‌شونده
		J_w شار آب
		k ضریب انتقال جرم
		K مقاومت لایه متخلخل نسبت به ماده حل‌شونده
		L طول غشا
		n کسر مولی
		P فشار
		R ثابت عمومی گازها
		Re عدد رینولدز
		S پارامتر ساختاری غشا
		Sc عدد اشمیت

تاریخ دریافت: ۱۳۹۹/۱۱/۰۹؛ تاریخ پذیرش: ۱۴۰۰/۰۸/۲۴

مراجع

- [1] UNESCO, "World Water Development Report Volume 4: Managing Water under Uncertainty and Risk". (2012).
- [2] Amarasinghe U.A., Smakhtin V., "Global Water Demand Projections: Past, Present and Future". (2014).
- [3] Nikazar M., Jamshidi M., Reuse of Refinery Treated Wastewater in Cooling Towers. *Iranian Journal of Chemistry and Chemical Engineering (IJCCE)*, **27(4)**: 1–7 (2008).
- [4] Garcia-Castello E.M., McCutcheon J.R., Elimelech M., Performance Evaluation of Sucrose Concentration Using Forward Osmosis. *Journal of Membrane Science*, **338(1–2)**: 61–66 (2009).

- [۵] دهنوی س.م.، شکرالله زاده س.، بررسی جداسازی نمک و بازیابی آب در فرایند اسمز معکوس آب دریا با استفاده از آب خنک کننده نیروگاه. نشریه علوم و مهندسی جداسازی، ۱۰-۱: (۲)۱۰: (۱۳۹۷)
- [6] Nematzadeh M., Samimi A., Shokrollahzadeh S., [Application of Sodium Bicarbonate as Draw Solution in Forward Osmosis Desalination: Influence of Temperature and Linear Flow Velocity](#). *Desalination and Water Treatment*, **57(44)**: 20784–20791 (2016).
- [7] Shokrgozar Eslah S., Shokrollahzadeh S., Moini Jazani O., Samimi A., [Forward Osmosis Water Desalination: Fabrication of Graphene Oxide-Polyamide/Polysulfone Thin-Film Nanocomposite Membrane with High Water Flux and Low Reverse Salt Diffusion](#). *Separation Science and Technology*, **53(3)**: 573–583 (2018).
- [8] McGinnis R.L., Elimelech M., [Global Challenges in Energy and Water Supply: The Promise of Engineered Osmosis](#). *Environmental Science and Technology*, **42(23)**: 8625–8629 (2008).
- [9] Achilli A., Cath T.Y., Childress A.E., [Power Generation with Pressure Retarded Osmosis: An Experimental and Theoretical Investigation](#). *Journal of Membrane Science*, **343(1–2)**: 42–52 (2009).
- [۱۰] باهوش م.، شکرالله زاده س.، کاشی ا.، مروری بر کاربردهای فرآیند غشایی اسمز مستقیم. نشریه مهندسی شیمی ایران، ۱۵(۸۹): ۱۸–۳۴ (۱۳۹۵)
- [۱۱] باهوش م.، شکرالله زاده س.، کاشی ا.، اثر پلاریزاسیون غلظتی در فرآیند شیرین‌سازی آب به روش اسمز مستقیم (مروری). علوم و تکنولوژی محیط زیست، (۱۳۹۵)
- [12] Mehdizadeh H., [Modeling of Transport Phenomena in Reverse Osmosis Membranes](#). *Ph.D thesis in Chemical Engineering. McMaster University, CANADA*, (1990).
- [13] Wijmans J.G., Baker R.W., [The Solution-Diffusion Model: A Review](#). *Journal of Membrane Science*, **107(1–2)**: 1–21 (1995).
- [14] Bahoosh M., Kashi E., Shokrollahzadeh S., Rostami K., [Comparison the Performance of Different Reverse Osmosis Membrane Modules by CFD Modeling](#). *Iranian Journal of Chemical Engineering(IJChE)*, **16(1)**: 101–116 (2019).
- [15] Gruber M.F., Aslak U., Hélix-Nielsen C., [Open-Source CFD Model for Optimization of Forward Osmosis and Reverse Osmosis Membrane Modules](#). *Separation and Purification Technology*, **158**: 183–192 (2016).
- [16] Seo J., Kim Y.M., Chae S.H., Lim S.J., Park H., Kim J.H., [An Optimization Strategy for a Forward Osmosis-Reverse Osmosis Hybrid Process for Wastewater Reuse and Seawater Desalination: A Modeling Study](#). *Desalination*, **463(March)**: 40–49 (2019).
- [17] Awobusuyi T.D., [Concentration of Ammonium from Dilute Aqueous Solutions using Commercially Available Reverse Osmosis Membranes](#), University of Ottawa, (2016).
- [18] Wang J., Dlamini D.S., Mishra A.K., Pendergast M.T.M., Wong M.C.Y.Y., Mamba B.B., Freger V., Verliefde A.R.D., Hoek E.M.V., [A critical review of transport through osmotic membranes](#). *Journal of Membrane Science*, **454**: 516–537 (2014).

- [19] Vaidya S.Y., Simaria A.V., Murthy Z.V.P., [Reverse Osmosis Transport Models Evaluation: A New Approach](#). *Indian Journal of Chemical Technology*, **8(5)**: 335–343 (2001).
- [20] Singh R.P., Medina A.G., ["Food Properties and Computer-Aided Engineering of Food Processing Systems"](#). Springer Netherlands, (2012).
- [21] Taherian M., Mousavi S.M., [Modeling and Simulation of Forward Osmosis Process Using Agent-Based Model System](#). *Computers & Chemical Engineering*, **100**: 104–118 (2017).
- [22] Gruber M.F., Johnson C.J., Tang C.Y., Jensen M.H., Yde L., Hélix-Nielsen C., [Computational Fluid Dynamics Simulations of Flow and Concentration Polarization in Forward Osmosis Membrane Systems](#). *Journal of Membrane Science*, **379(1–2)**: 488–495 (2011).
- [23] Fletcher D.F., Wiley D.E., [A Computational Fluids Dynamics Study of Buoyancy Effects in Reverse Osmosis](#). *Journal of Membrane Science*, **245(1–2)**: 175–181 (2004).
- [24] Zhao Y., [Modeling of Membrane Solute Mass Transfer in NF/RO Membrane Systems](#), University of Central Florida, (2004).
- [25] Wijmans J.G.H., Baker R.W., [The Solution-Diffusion Model: A Unified Approach to Membrane Permeation](#). In *Materials Science of Membranes for Gas and Vapor Separation* Chichester, UK: John Wiley & Sons, Ltd, 159–189 (2006).
- [26] Uragami T., ["Science and Technology of Separation Membranes, 2 Volume Set"](#). Wiley, (2017).
- [27] Baker R.W., ["Membrane Technology and Applications"](#). Chichester, UK: John Wiley & Sons, Ltd, (2004).
- [28] Marchetti P., Solomon M.F.J., Szekely G., Livingston A.G., [Molecular Separation with Organic Solvent Nano filtration : A Critical Review](#). *Chemical Review*, **114**: 10735–10806 (2014).
- [29] Lee K.L., Baker R.W., Lonsdale H.K., [Membranes for Power Generation by Pressure-Retarded Osmosis](#). *Journal of Membrane Science*, **8(2)**: 141–171 (1981).
- [30] Loeb S., Titelman L., Korngold E., Freiman J., [Effect of Porous Support Fabric on Osmosis Through a Loeb-Sourirajan Type Asymmetric Membrane](#). *Journal of Membrane Science*, **129(2)**: 243–249 (1997).
- [31] McCutcheon J.R., Elimelech M., [Influence of Concentrative and Dilutive Internal Concentration Polarization on Flux Behavior in Forward Osmosis](#). *Journal of Membrane Science*, **284(1–2)**: 237–247 (2006).
- [32] Mccutcheon J.R., Elimelech M., [Modeling Water Flux in Forward Osmosis: Implications for Improved Membrane Design](#). *AIChE Journal*, **53(7)**: 1736–1744 (2007).
- [33] Tan C.H., Ng H.Y., [Modified Models to Predict Flux Behavior in Forward Osmosis in Consideration of External and Internal Concentration Polarizations](#). *Journal of Membrane Science*, **324(1–2)**: 209–219 (2008).
- [34] Tang C.Y., She Q., Lay W.C.L., Wang R., Fane A.G., [Coupled Effects of Internal Concentration Polarization and Fouling on Flux Behavior of Forward Osmosis Membranes During Humic Acid Filtration](#). *Journal of Membrane Science*, **354(1–2)**: 123–133 (2010).

- [35] Zhao S., Zou L., [Relating Solution Physicochemical Properties to Internal Concentration Polarization in Forward Osmosis](#). *Journal of Membrane Science*, **379(1-2)**: 459-467 (2011).
- [36] Suh C., Lee S., [Modeling Reverse Draw Solute Flux in Forward Osmosis with External Concentration Polarization in Both Sides of the Draw and Feed Solution](#). *Journal of Membrane Science*, **427**: 365-374 (2013).
- [37] Bui N.N., Arena J.T., McCutcheon J.R., "Proper Accounting of Mass Transfer Resistances in Forward Osmosis: Improving the Accuracy of Model Predictions of Structural Parameter". Elsevier, (2015).
- [38] Gruber M.F., Johnson C.J., Tang C., Jensen M.H., Yde L., Helix-Nielsen C., [Validation and Analysis of Forward Osmosis CFD Model in Complex 3D Geometries](#). *Membranes*, **2(4)**: 764-782 (2012).
- [39] McCutcheon J.R., McGinnis R.L., Elimelech M., [A Novel Ammonia—Carbon Dioxide Forward \(Direct\) Osmosis Desalination Process](#). *Desalination*, **174(1)**: 1-11 (2005).
- [40] Geraldes V.V., Semião V., De Pinho M.N., [Flow and Mass Transfer Modelling of Nanofiltration](#). *Journal of Membrane Science*, **191(1-2)**: 109-128 (2001).
- [41] Tiraferri A., Yip N.Y., Straub A.P., Romero-Vargas Castrillon S., Elimelech M., [A Method for the Simultaneous Determination of Transport and Structural Parameters of Forward Osmosis Membranes](#). *Journal of Membrane Science*, **444**: 523-538 (2013).