# شبیهسازی هیدرودینامیک و انتقال جرم دو فاز امتزاج ناپذیر در میکروکانال Y-Y و حلزونی شکل و بهینهسازی پارامترهای مؤثر

حمی*ل اسل*ی دانشکاره فنی، دانشگاه تهران، تهران، ایران

یونیس امینی، جواد کریمی ثابت\*+ پژوهشکده چرخه سوخت هستهای، پژوهشگاه علوم و فنون هستهای، تهران، ایران

**چکیان:** میکروسیال، علم و تکنولوژی است که سیال را در حجم <sup>۱۹</sup>-۱۰ تا ۱۰<sup>-۱</sup>۱ لیتر با استفاده از کانالهایی با اندازه های در مقیاس میکرو، مورد بررسی قرار میدهد. از مهمترین کاربردهای این تکنولوژی، تجزیه و تحلیل جریان سیال است. فرایندهای جداسازی در دستگاههای میکروفلوئیدیکی در دو دهه گذشته مورد توجه فراوانی قرار گرفته است. در بین فرایندهای جداسازی گوناگون، استخراج مایع مایع به طور ویژه از برتریهایی چون مسافت نفوذ مولکولی پایین و سطح ویژه فصل مشترک بالا که منجر به انتقال جرم مؤثری در دستگاههای میکروفلوئیدیکی میشود، برخوردار است. میکروفلوئیدیک فناوری ارزشمندی برای جداسازی یون،ا و ایزوتوپهای پایدار فلزی می تواند باشد. ایزوتوپهای پایدار برای پژوهش در مورد قابلیت دسترسی به مواد معدنی و متابولیسم مفید هستند. از کاربردهای ایزوتوپ پایدار می توان به عنوان ردیاب بدون تابش پرتو، تشخیص بیماری و تصویر برداری هستهای نام برد. این ایزوتوپها همچنین میتوانند به عنوان ماده اصلی یا ماده خام برای تولید رادیو داروها، آنالیز بیوشیمیایی، رادیوتراپی و کاربرد در علوم محیط زیستی، زمین شناسی و باستان شناسی استفاده شوند. در این پژوهش، جداسازی یون فلزی کلسیم به عنوان مقدمهای بر جداسازی ایزوتویی کلسیم با استفاده از روش میکروفلوئیدیک مورد مطالعه قرار گرفت. بدین منظور، شبیهسازی استخراج مایع مایع و تکنولوژی میکروفلویدیک برای استخراج و جداسازی یون کلسیم به عنوان روشی نوین در هم ادغام شدهاند. در این راستا با هدف ارزیابی امکان انجام شبیه سازی استخراج یون کلسیم در سامانه میکروفلوئیدیک، نسبت سرعت های دوفاز به گونهای انتخاب شد که الگوی جریان درون میکروکانال به صورت موازی باشد. نخست با روش تعیین تراز محل دقیق فصل مشترک تعیین شد، سپس با استفاده از مدل انتقال اجزاء رقیق میزان انتقال جرم از فاز آبی به آلی سنجیده شد. علاوه بر این برای مطالعه تأثیر هندسه در میزان استخراج، هندسه حلزونی شکل نیز مورد بررسی قرار گرفت. درصد استخراج در هندسه نوین محاسبه و با میکروکانال ۲-۲ شکل مقایسه شد. در میکروکانال ۲-۲ شکل بازدهی استخراج ۶۰/۰۶۲ ٪ می باشد در حالی که در هندسه حلزونی در شرایط بهینه بازدهی ۷۴/۹۱ ٪ بهدست آمد. بنابراین با تغییر هندسه میکروکانال از Y-Y به حلزونی میزان انتقال جرم ۱۹/۸۹٪ بهبود می یابد.

+Email: j\_karimi@alum.sharif.edu, Jvkarimi@aeoi.org.ir

\* عهدهدار مکاتبات

علمی – پژوهشی

دوره ۴۲، شماره ۱، ۱۴۰۲

**واژ گان کلیدی:** میکرو کانال حلزونی، انتقال جرم، دینامیک سیال های محاسبه ای، استخراج مایع-مایع، جریان دوفازی

KEYWORDS: Spiral microchannel, Mass transfer, Computational fluid dynamics, Liquid-liquid extraction, Two-phase flow

#### مقدمه

یکی از فناوریهای پرکاربرد و نوین که در دنیا برای انجام آزمایشهای دقیق و حفاظت شده بر روی سیالها در مقیاسهای میکرو استفاده می شود، فناوری میکروفلوئیدیک است. میکروفلوئیدیک علمی است که به مطالعه جریان سیال در کانالهایی به اندازههای میکرومتر جایی که نیروهای کشش سطحی و گرانروی بر اثرها جاذبه غلبه میکنند، میپردازد. از این تکنولوژی برای انجام عملیات گوناگون بر روی سیالها و آنالیز آنها استفاده می شود. میکروفلوییدیک کاربردهای فراوانی مانند تعلیق، کپسوله کردن دارو، علوم پزشکی، بیوتکنولوژی، سامانههای میکروالکترومکانیک، سنتز، بلوریزاسیون، واکنشهای شیمیایی، فراوردههای آرایشی بهداشتی و مواد غذایی دارد [۴–۱]. از برتریهای ابزارهای میکروفلویدیک می توان به موارد زیر اشاره کرد [۸–۵].

- توانایی انجام فرایندها در حجم نمونه کم
- کاهش دخالت نیروی انسانی و کاهش میزان خطای انسانی
  - تكرارپذيرى پالاتر
  - پاسخ سريع و هزينه كم
    - کاهش مصرف انرژی
  - بالا بودن ميزان انتقال گرما

اخیرا توسعه سامانههای میکروفلوئیدیک پیوسته، برای افزایش بازده جداسازی یک جزء در مقایسه با روشهای دیگر بسیار مورد توجه قرارگرفتهاست [۹،۷]. میکروفلویدیک به عنوان یک فناوری خیلی مهم به طور گسترده در فرایندهای زیستی، شیمیایی و مهندسی کاربرد دارد. این فناوری هم از قابلیت کوچک بودن اندازهها و هم از ویژگیهای میکروکانالها مانند ایجاد جریان آرام و اختلاط سریع به طور همزمان استفاده میکند و با توجه به ایجاد جریان آرام، استفاده برای جریانهای لایهای امکانپذیر میشود. در جداسازی یونها و ایزوتوپهای فلزی، برای دستیابی به انتخابپذیری بالا از ایزوتوپ دلخواه، فرایند واکنش شیمیایی میتواند در محیط اختلاط سریع مانند سامانه میکروفلوئیدیکی انجام شود [۱۱،۱۰]. در ادامه به الگوهای جریان درون میکروکانال اشاره میشود.

(r) Reynolds number

(۳)

رفتار جریانها در میکروکانال در جریان چند فازی به نیروهای گوناگونی مانند نیروهای لزج، نیروی اینرسی، گرانش، کشش سطحی، فشار و غیرہ بستگی دارد. اعداد بیبعد بیان کنندہ نسبت اثرهای فیزیکی بوده که راهی برای سادهسازی مسائل پیچیده می باشد. الگوهای جریان در میکروکانالها پارامتر تعیین کننده در میزان انتقال جرم می باشد [۱۲]. به علاوه در حین استفاده از جریانهای موازی برای تماس دو فاز، تعیین شرایطی که جداسازی فازهای غیرقابل امتزاج در میکروکانال انجام شود، ضروری به نظر می رسد. با تشکیل رژیمهای گوناگون می توان اثرها نیروی ویسکوز، کشش سطحی و اینرسی را مورد بررسی قرار داد. در بررسی جریانهای دوفازی، نیروهای کشش بین سطحی (γ/d) به دلیل وابستگی به قطر کانال از مؤثرترین نیروهای تعیین کننده الگوهای جریان هستند. از سوی نیروی اینرسی (pu<sup>2</sup>) نیز باوجود داشتن ترم سرعت با توان دوم، الگوی جریان را زیر تأثیر قرار میدهد ولی جاذبه (pgH~) بهطور معمول در مقياس ميكرو صرف نظر مى شود. بنابراین رقابت بین نیروهای تأثیرگذار بر الگوی جریان به وسیله اعداد بي بعد مويينگي، رينولدز و وبر قابل تعيين است [۱۴،۱۳].

عدد مویینگی<sup>۱</sup>: یکی از اعداد بی بعد مهم در میکروکانالها که برای فهم الگوهای جریان چند فازی استفاده می شود، عدد موئینگی می باشد. این عدد به صورت معادله (۱) تعریف می شود.

$$Ca_m = \frac{\varphi_m \omega_m}{\gamma} \tag{1}$$

عدد رینولدز<sup>۲</sup>: این عدد بیانگر نسبت نیروهای اینرسی به نیروهای لزج یا همان ویسکوز بوده و برای بیان نوع رژیم جریان استفاده می شود. کاربرد مهم این عدد در تعیین آرام یا آشفته بودن جریان است.

$$Re_m = \frac{\rho_m u_m D_h}{\mu_m}$$
 (۲) عدد وبر<sup>۳</sup>: عدد وبر برای پیش بینی شکست فصل مشترک زیر

عدد وبر ۲۰ عدد وبر برای پیسبینی سمست عص مستر ت زیر نیروهای اینرسی قوی مورد استفاده قرار می گیرد. در واقع عدد وبر به صورت نسبت نیروهای اینرسی به نیروهای کشش بین سطحی تعریف می شود [۱۵].

$$We_m = Re_m * Ca_m$$

(1) Capillary number (٣)Weber number

علمی – پژوهشی

#### 194

دوره ۴۲، شماره ۱، ۱۴۰۲

شبیه سازی هیدرودینامیک و انتقال جرم دو فاز امتزاج ...



شکل ۱ - الگوهای جریان در میکروکانالها [۱۶]

زیرنویس m به معنای مقدار متوسط از دو فاز میباشد که توسط پارامترهای زیر تعریف شدهاند.

$$u_m = \frac{Q_{aq} + Q_{org}}{w * D} \tag{(f)}$$

$$\rho_m = \left(\frac{\theta_{aq}}{\rho_{aq}} + \frac{1 - \theta_{aq}}{\rho_{org}}\right)^{-1} \tag{(a)}$$

$$\mu_m = \left(\frac{\theta_{aq}}{\mu_{aq}} + \frac{1 - \theta_{aq}}{\mu_{org}}\right)^{-1} \tag{8}$$

$$\Theta_{aq} = \frac{Q_{aq}}{Q_{aq} + Q_{org}} \tag{Y}$$

$$D_h = \frac{2(W*D)}{W+D} \tag{A}$$

در این معادلهها ۵ ، p و µ به ترتیب سرعت خطی، دانسیته، گرانروی سیالها و D ، W ، D و D قطر هیدرولیکی، عرض و عمق میکروکانال شکل میباشند.

بسته به هندسه میکروکانال، سرعت جریان، ویژگیهای سیالها و ... شش نوع رژیم جریان گوناگون در میکروکانالها قابل دیدن است. جریان لختهای<sup>۱</sup>، جریان لختهای قطرهای<sup>۲</sup>، جریان با فصل مشترک تغییر شکل یافته<sup>۳</sup>، جریان حلقوی یا موازی<sup>۴</sup>، جریان لختهای پراکنده<sup>۵</sup> و جریان پخششده که در شکل ۱ نمایش داده شده است. جریان موازی در شدت جریانهای بالا و در درون میکروکانالهای

بدون ساختار درونی مشاهده می شود. در میکروکانالها نیروی کشش سطحی و ویسکوز بر نیروی جاذبه غلبه کرده و دو مایع می توانند صرف نظر از دانسیته هایشان در کنار یکدیگر حرکت کنند [۱۷،۱۶].

جداسازی ایزوتوپ پایدار عمدتا با روشهای الکترومغناطیسی، غربال گری کوانتومی، سانتریفیوژ گازی، تقطیر و لیزرهای مولکولی انجام می شود. در میان این روشها، مواردی مانند غربال گری

علمی – پژوهشی

Archive of SID.ir

شکل به حلزونی، در استخراج مایع –مایع یون کلسیم با استفاده از سامانه میکروفلوئیدیک پرداختند. آنها با استفاده از طراحی آزمایش و روش سطح پاسخ پارامترهای مؤثر بر فرایند را مورد مطالعه قرار دادند. نتیجهها این مطالعه نشان میدهد که میکروکانال حلزونی این توانایی را دارد که با بهینهسازی شرایط عملیاتی در سرعت جریان بالاتر از سرعت جریان در میکروکانال Y شکل به استخراج تعادلی دست یابد. *فروزان* و همکار*ان* [۲۴] استخراج مایع–مایع یون فلزی کلسیم و پارامترهای مؤثر بر آن را به کمک فناوری پژوهش، همخوانی خوب نتیجههای شبیهسازی به روش VOF با مشاهدههای تجربی در تعیین الگوهای گوناگون جریان دو فازی مشاهده شد. استفاده از استخراج میکروفلوئیدیکی در این مطالعه مشاهده شد. استفاده از استخراج میکروفلوئیدیکی در این مطالعه مشاهده شد. استفاده از استخراج میکروفلوئیدیکی در این مطالعه

<sup>(</sup>Y) Slug-drop flow(Y) Annular flow

 $<sup>(\</sup>mathbf{1})$  Slug flow

<sup>(</sup>**r**) Deformed interface flow

<sup>(</sup>a) Slug-dispersed flow

وابستگی نیروهای موجود به اندازههای کانال و ویژگیهای سیال استفاده کردند. این آنالیز فصل مشترک موازی و پایدار مایع – مایع در میکروکانالهایی با اندازهها چند صد میکرومتر را تائید میکند. در جریانهای موازی یا لایهای، انتقال جرم بین فازهای مایع تنها بر مبنای نفوذ است؛ بنابراین، طول نفوذ Ldiff نقش اساسی را ایفا میکند. زمان لازم برای نفوذ از معادله (۹) بهدست میآید [۸].

$$t_{diff} = \frac{L_{diff}^2}{D_{diff}} \tag{9}$$

که در آن D<sub>diff</sub> ضریب نفوذ جزء منتقل شونده میباشد. لایههای نازک مایع نفوذ اجزای استخراج شونده به سطح را تسریع میبخشند که در نتیجه آن راندمان استخراج افزایش مییابد. در مطالعه کیم و همکاران [۲۶] فرایند استخراج کمپلکس AL<sup>3+</sup>-DHAB از آب به ۱-بوتانول با الگوی جریان موازی در یک میکروکانال پلیمری با عرض ۲۰۰ میکرومتر و عمق ۱۰ میکرومتر انجام شده است. از آن جایی که این کمپلکس در آب غیر فلوئورسنت است ولی در روغن فلوئورسنت قوی میباشد؛ بنابراین مانیتور کردن موقعیت استخراج به وسیله طیفسنجی فلورسانس امکان پذیر میباشد به گونهای که شدت فلورسانس کمپلکس در فاز بوتانول در برای جریان و عرض کانال قابل اندازه گیری است.

در پژوهشی دیگر توسط زنیدارسیک پلازل و همکاران [۲۷] نتیجهها به دست آمده با دادههای تجربی مقایسه و دقت قابل قبولی داشت. در این مطالعه، پروژسترون و ۱۱– الفا هیدروکسی پروژسترون به صورت پیوسته از آب به وسیله اتیل استات در یک میکروراکتور شیشهای به اندازههای ۲۲۰ میکرومتر عرض، ۵۰ میکرومتر عمق و شیشهای به اندازههای ۲۲۰ میکرومتر عرض، ۵۰ میکرومتر است. ۳۳۲ میلیمتر طول استخراج شده است. در مدل ارایه شده جابهجایی در برای جریان و نفوذ در همه جهتها در نظر گرفته شده است. گسستهسازی به روش اختلاف محدود انجام شده است. الگوی جریان سه بعدی، پروفایلهای سرعت دو فاز و همچنین پروفایل غلظت جزء استخراج شونده درون دو فاز محاسبه شده که همخوانی خوبی با دادههای تجربی داشتند. هازاما و همکاران [۲۸] برای اولین نوبی با دادههای تجربی داشتند. هازاما و همکاران [۲۸] برای اولین نار تغلیظ ۲<sup>48</sup> توسط فرایند استخراج مایع–مایع با استفاده از کلسیم کلرید و <sup>48</sup> دا به فرم زیر ارایه کردند:

$$^{10}Ca^{2+}_{(aq)} + {}^{48}Ca^{2+}_{(org)} \rightarrow {}^{48}Ca^{2+}_{(aq)} + {}^{40}Ca^{2+}_{(org)}$$
 (1.)

با توجه به واکنش تعادلی بالا <sup>40</sup>Ca در فاز آلی و ایزوتوپ <sup>48</sup>Ca در

(**r**)Finite element method

فاز آبی تغلیظ میشود. در این مطالعه ۲۰ میلی لیتر فاز آبی محتوای کلسیم کلرید و ۲۰۰ میلی لیتر فاز آلی کلروفرم و DC18C6 به مدت یک ساعت همزده شده و سپس فازها از همدیگر جدا شدند. این فرایند ۶ بار تکرار شد. آنها نشان دادند که اندازه و شکل هسته نسبت به جرم هستهی ایزوتوپ در غنی سازی <sup>48</sup>Ca تأثیر کم تری دارد. *روسان و همکاران* [۲۹] یک میکروکانال حلزونی دیفرانسیلی طراحی کردند که با استفاده از آن در قطرهای هیدرولیکی متفاوت کنترل پارامتر گردابه دین را مورد بررسی قرار دادند و جداسازی میکروذرههای ۳ و ۳ ۱۰ در نرخ جریان mL/min همراه با رینولدز ۱۵۵ را گزارش کردند. سان و همکاران [۳۰] یک میکروکانال حلزونی دوگانه، همراه با سطح مقطع ثابت را مورد بررسی قرار دادند. این گروه در طی پژوهش های خود سلول های سرطانی را از خون، با نرخ جریان ۴۵۰m و ۲۵۰۰

در این پژوهش هدف شبیهسازی عددی (دینامیک سیالهای محاسبهای<sup>۱</sup> به روش المان محدود<sup>۲</sup>) هیدرودینامیک جریان دو فازی و استخراج یون کلسیم توسط تراشهی میکروفلوئیدیکی Y-Y و حلزونی شکل بین دو فاز میباشد. شبیهسازی انتقال جرم سامانه مايع–مايع شامل فاز آبي (آب و كلسيم كلريد) و فاز آلي (حلال بوتیل استات) می باشد و هندسه مطابق کار آزمایشگاهی عبداللهی و همکاران [۱۸] انتخاب شد. نتیجههای شبیهسازی با نتیجههای کار *عبداللهی* و همکار*ان* اعتبار سنجی شد. این شبیهسازی با توجه به داشتن تقارن در بعد سوم و به منظور صرفهجویی در وقت و هزینه به صورت دو بعدی انجام شد. جریان مورد بررسی به صورت تراکم ناپذیر، نیوتنی و آرام و همه دیوارهها به صورت ثابت و با فرض عدم لغزش در نظر گرفته شد. مشخصههای سیالها و غلظت گونه انتقال جرم نیز مطابق با کار عبداللهی و همکاران انتخاب شد. و سرانجام نتیجهها با هم مقایسه شد و برای بهبود میزان انتقال جرم، هندسه میکروکانال شبیهسازی از Y-Y به حلزونی تغییر داده شد و میزان بهبود در شبیهسازی محاسبه شد. نوآوری این پژوهش بحث شبیهسازی انتقال جرم و بررسی تأثیر تغییر هندسه به حلزونی میباشد.

#### روش مدلسازی معادلههای حاکم و شرایط مرزی و اولیه

روش المان محدود یکی از روشهای عمومی حل عددی معادلههای دیفرانسیل جزئی در فضای دو بعدی و سه بعدی می باشد.

علمی – پژوهشی

### Archive of SID.ir

298

<sup>(1)</sup> Computational fluid dynamics

دوره ۴۲، شماره ۱، ۱۴۰۲

که در آن:

(۱۳)

$$\Gamma = \{ x \in \Omega \mid \varphi(x,t) = 0 \}$$
 (11) 
$$\Phi < 0$$

<sup>۲</sup> تابع تعیین تراز  $\varphi(x,t)$  عموما به صورت تابع فاصله علامتدار نسبت به فصل مشترک تعریف می شود، بنابراین:  $(+d(x,t), x \in \Omega^{-})$ 

$$\varphi(x,t) = \begin{cases} 0, x \in \Gamma \\ -d(x,t), x \in \Omega^+ \end{cases}$$
(17)

 $d(x)=min(|x-x\Gamma|)$ 

و ریشههای  $\varphi$  به ازای میدان سرعت u(x,t) توسط معادله زیر بهدست آمده می شوند:

$$\partial t + u \cdot \nabla \varphi = 0 / \partial \varphi$$
 (14)

با استفاده از فرمول بندی بالا می توان تغییرهای توپولوژیکی در فصل مشترک را به دست آورد. موقعیت فصل مشترک در زمان t توسط حالت 0=(x,t) معادله تعیین تراز مربوطه تعیین می شود [۳۹]. روش تعیین تراز یک فناوری برای نشان دادن مرزها یا فصل مشترک متحرک با استفاده از یک شبکه ثابت است. این برای مسائلی مفید است همچون مسئله کنونی که دامنه محاسبهای با یک مرز مشترک به دو دامنه تقسیم می شود. فصل مشترک سیالها، با استفاده از یک تابع تعیین تراز، نشان داده می شوند. در نرمافزار کامسول این تابع روان منعطف هست که در یک دامنه برابر صفر و در دیگری برابر یک است. این تابع در میان فصل مشترک به آرامی از صفر به یک انتقال می یابد.

معادلههای فصل مشترک با حرکت مرز بین دو سیال در میدان سرعت u حل می شود:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + u \cdot \nabla \phi = \gamma \nabla \cdot \left( \varepsilon \nabla \phi - \phi (1 - \phi) \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|} \right)$$
(10)

ترمهای سمت چپ معادله ۱۵ حرکت صحیح سطح مشتر ک را نشان می دهد، در حالی که ترمهای سمت راست، برای پایداری عددی ضروری هستند. پارامتر ٤ ضخامت ناحیهای را تعیین می کند که به آرامی از صفر به یک حرکت می کند و به طور معمول از نظم اندازه عناصر شبکه برخوردار است. به طور پیش فرض ٤ در هر دامنه ثابت است و برابر با بزرگترین مقدار اندازه شبکه h هست. پارامتر Y میزان دوباره سازی، یا تثبیت عملکرد تعیین تراز را مشخص می کند. که برای هر مسئله خاص باید تنظیم شود. اگر Y خیلی

(1) level set

197



به منظور حل یک سامانه بر اساس روش المان محدود، سامانه مورد مطالعه به قسمتهای کوچکتر و سادهتری تقسیم میشود. این گسستهسازی مستلزم تعریف سامانه به صورت یک شبکه میباشد. در واقع شبکه از مجموعهای از نقاط گسسته برای تبدیل سامانه به بازه عددی برای حل مسئله است. فرمول بندی روش المان محدود در ادامه به سامانهای از معادلههای جبری تبدیل می شود که بیانگر تقریبی از یک تابع مجهول بر روی هر المان است [۳۱–۳۲]. در این پژوهش مدلسازی دینامیک سیالها و شبیهسازی عددی با استفاده از نرمافزار کامسول که یک طرح عددی بر پایه روش المان محدود است انجام شده است [۳۴]. در این راستا، برای ردیابی فصل مشترک بین دو فاز از روش تعیین تراز ۷ پایستار که توسط اولسون و کریز ارایه شده و دارای دقت مرتبه بالا و بقای جرم خوبی است استفاده شده است. از این رویکرد برای توصیف سطح مشترک بین دو سیال امتزاج ناپذیر استفاده می شود. مسائلی که با فصل مشترک یا مرز متحرک سروکار دارند در موارد گوناگونی رخ میدهند؛ مانند برهمکنش بین سیال و سازه، جریانهای چندفازی و غشاهای منعطف متحرک [۳۵–۳۸]. روش تعیین تراز فناوری است که برای نمایش فصل مشترک یا مرز متحرک با مش ثابت مورد استفاده قرار می گیرد و توسط آن می توان حرکت فصل مشترک در هر نوع میدان سرعتی را مشخص کرد (شکل ۲)[۳۸].

مطابق شکل ۲ در این روش یک تابع کمکی  $\varphi$  (تابع تعیین تراز) روی کل دامنه تعریف می شود. این تابع در محل فصل مشترک صفر در نظر گرفته می شود. برای درک این روش یک منحنی سادهی بسته ( $\Gamma$ ) که در آن - $\varphi$  در ناحیهی  $\Omega$  محصور شده و در دو پس حرکت می کند را در نظر بگیرید. در فرمول بندی تعیین تراز، تابع تعیین تراز  $\varphi$  فصل مشترک صفر در نظر گرفته می شود و مرز به صورت زیر تعریف می شود.

(r) Signed distance function

علمی – پژوهشی

نشریه شیمی و مهندسی شیمی ایران

حمید اسدی و همکاران

دوره ۴۲، شماره ۱، ۱۴۰۲

جدول ۱ - شرایط مرزی حاکم بر مسئله

مقدار	شرط مرزی
۲.	شدت جریان فاز آبی (µlit/min)
٧٠	شدت جریان فاز آلی (µlit/min)
۰/۰۱۴۸۱۵	سرعت فاز آبی (m/s)
•/•۵١٨٢۵	سرعت فاز آلی (m/s)
عدم لغزش	شرایط هیدرودینامیکی رو دیواره
۲۹۳	دمای عملیاتی (K)
١	فشار عملیاتی (atm)

کوچک باشد، ممکن است ضخامت فصل مشترک ثابت نماند و بهدلیل بی ثباتی های عددی ممکن است نوسان ها در  $\varphi$  ظاهر شود. از طرف دیگر اگر  $\gamma$  خیلی بزرگ باشد، سطح مشترک به طور صحیح حرکت نمی کند. مقداری مناسب برای  $\gamma$  بیش ترین مقدار میدان سرعت u است. اگر سرعت واگرایی آزاد باشد، یعنی اگر:

$$\nabla u = 0 \tag{19}$$

در صورت عدم ورود یا خروج از مرزها، باید حجم محدود شده توسط سطح مشترک حفظ شود. برای بهدست آوردن محاسبههای دقیق عددی، می توان از معادله زیر استفاده کرد [۳۹].

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla .(u\phi) = \gamma \nabla . \left( \varepsilon \nabla \phi - \phi (1-\phi) \frac{\nabla \phi}{\left| \nabla \phi \right|} \right)$$
(1V)

شرط مرزی در ورودیها به صورت سرعت ثابت در نظر گرفته میشود که به شکل معادلهی زیر بیان میشود:

$$u = -U_0 n \tag{1A}$$

که در آن n بردار نرمال و Uu سرعت ورودی فاز آلی یا آبی است. شرط مرزی روی کلیه دیوارهها به صورت دیواره مرطوب شونده، با زاویه تماس ۳۰ درجه در نظر گرفته میشود. با توجه به شبیهسازی انجام شده، سرانجام یک حالت پایا نتیجه میشود. شرط اولیه در مدل نیز بدین ترتیب قرار گرفته که در ابتدا و در زمان صفر در نیمی از کانال فاز آبی و در نیمی دیگر فاز آلی قرار میگیرد که با شروع فرایند، هر دو فاز با سرعتهای فرایندی مختص خود وارد کانال میشوند. برای بررسی مسائل سیالها دوفازی با توجه به این که چنین فرایندهایی، غیر پایا میباشند، باید در حل چنین مسائلی زمان نیز وارد شود، بنابراین در شبیهسازی، روش حل وابسته به زمان <sup>۲</sup> در نظر گرفته میشود. شرایط مرزی حاکم بر مسئله نیز در جدول ۱ نمایش دادهشده است.

شرط عدم لغزش سیال رو دیواره کانال با توجه به چسبندگی سیال به دیواره و سرعت صفر روی دیواره اعمال میشود [۴۰].

#### معادلههای مومنتوم و جرم حاکم بر مسئله

با توجه به رژیم جریان برای شبیهسازی باید معادلههای بقای جرم و بقای مومنتوم با استفاده از شرایط مرزی مناسب برای جریان حل شوند [۴۱٬۳۳]:

بر اساس نظریه انتقال رینولدز برای یک حجم معیار، معادلهی زیر برای بقای جرم بهدست میآید:

$$\int_{cv} \frac{\partial \rho}{\partial t} dv + \int_{cs} \rho \vec{v} \cdot \vec{n} \cdot dA = 0$$

$$\int_{cv} \frac{\partial \rho}{\partial t} dv + \int_{cs} \rho \vec{v} \cdot \vec{n} \cdot dA = 0$$

$$(19)$$

در صورت داشتن ورودی و خروجی مناسب و منظم معادله بالا را به شکل زیر می توان نوشت:

$$\int_{cv} \frac{\partial \rho}{\partial t} dv = \sum_{in} m - \sum_{out} m$$

معادله بالا بیان می کند که نرخ خالص تغییر جرم در حجم معیار با تفاوت نرخ جریانهای ورودی و خروجی آن برابر است.

با ساده سازی معادله (۱۹) و نوشتن موازنه جرم دور المان کوچکی از سیال معادله دیفرانسیل کلی برای بقای جرم به صورت زیر بهدست آمده می شود که به معادله پیوستگی شناخته می شود:

$$\frac{\partial p}{\partial t} + \vec{V}.\left(\rho\vec{v}\right) = 0 \tag{(Y1)}$$

و با توجه به این که دانسیته سیال با زمان تغییر نمیکند معادله به شکل زیر نوشته میشود:

$$\vec{\nabla}.\left(\rho\vec{v}\right) = 0 \tag{YY}$$

معادله مومنتوم در سرتاسر دامنه حل می شود و میدان سرعت بهدست آمده به صورت مشترک در اختیار هر دو فاز قرار می گیرد. با نوشتن موازنه مومنتوم بر اساس نظریه رینولدز، معادله ناویر استوکس کلی به صورت زیر بهدست می آید.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{U}) + \nabla . (\rho \vec{U} \vec{U}) = -\nabla P + \nabla . [\mu (\nabla \vec{U} + \nabla \vec{U}^T)] + \rho \vec{g} + \vec{F}$$
(YY)

بدین ترتیب برای بهدست آوردن توزیع دقیق فشار و سرعت باید این معادلهها برای هر فاز به صورت جداگانه نوشته و حل شوند. با توجه به جریان موازی در مسئله حاضر، تنها سازوکار انتقال جرم موجود در سامانه مورد مطالعه انتقال جرم به روش نفوذ مولکولی

(1) Time dependent

علمی – پژوهشی

297

نشریه شیمی و مهندسی شیمی ایران

دوره ۴۲، شماره ۱، ۱۴۰۲

Archive of SID.ir



شکل ۳ – توزیعهای غلظت در همسایگی فصل مشترک در سامانه دو فازی [۴۱]

میباشد. انتقال جرم مسئله حاضر شامل فصل مشترک سیال–سیال میباشد که این فصل مشترک به صورت متحرک و ناپاپا که بر اثر پسای ویسکوز و گرادیان کشش سطحی به علت ناهمگنی در ترکیب شیمیایی به وجود میآید، در نظر گرفته میشود. سامانهای که مورد مطالعه قرار میگیرد، یک سامانه دو فازی میباشد. آهنگ انتقال جرم در مرزهای فاز با اختلاف غلظت معادله دارد. در مرز بین دوفاز (فصل مشترک) انتقال جرمی که صورت میگیرد، را میتوان با معادله (۱۹) به صورت زیر توصیف کرد [۲۰،۴۱،۳۷،۱۱۰۸].

$$N_{A0} - x_{A0}(N_{A0} + N_{B0}) = -(cD_{AB}\frac{\partial x_A}{\partial y})|y = 0$$
 (Yf)

این معادله در فصل مشترک انتقال جرم (y=0) نوشته شده است. این معادله شار مولی میان فازی گونه A را توصیف میکند.

برای سامانههایی با فصل مشترک سیال–سیال و بودن گرادیان سرعت در فصل مشترک، شار جرمی در سطح از معادله زیر قابل محاسبه هست:

$$N_{A0} = \sqrt{\frac{D_{AB}}{\pi} \frac{h_z^2 v_s^2}{\int_0^x h_x h_z^2 v_s d\overline{x}}} (C_{A0} - 0) \equiv k_{c,loc}^0 \Delta c_A \qquad (\Upsilon\Delta)$$

و هچنین عدد شروود<sup>۱</sup>، (که نفوذ پذیری انتقال جرم را بیان می کند)، به صورت زیر بیان می شود.

$$Sh_{loc} = \frac{k_{c,loc}^0 l_0}{D_{AB}} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} (Re \, S \, c)^{1/2} \sqrt{\frac{h_Z^2 v_S^2}{\int_0^X h_X h_Z^2 v_S d\bar{x}} \frac{l_0}{v_0}}$$
(YF)

در این معادلهها 10 و vo طول مشخصه و سرعت مشخصهای هستند که می توان پس از تعریف شکل جسم انتخاب کرد.

علمی – پژوهشی

شکل ۴ - هندسه دو بعدی مورد استفاده برای شبیهسازی هیدرودینامیکی و انتقال جرم الف) میکروکانال Y- شکل ب) میکروکانال حلزونی

#### ضریبهای انتقال در دوفاز انتقال جرم

با توجه به این که دو سیال در تماس نزدیک باهم قرار دارند، از مقاومت فصل مشترک میتوان چشم پوشی کرد. زیرا که خود فصل مشترک دارای جرم در خور اعتنایی نیست. بنابراین میتوان بررسی را با فرض پیوستگی شار جرمی کل در فصل مشترک برای گونه مورد نظر انجام داد.

بنابراین با توجه به سامانه نشان داده شده می توان گفت:

$$N_{A0}|_{phase1} = N_{A0}|_{phase2} = N_{A0}$$
(YY

که با استفاده از قانون فیک داریم:

$$N_{A0} = K_{y,loc}^{0}(y_{Ab} - y_{A0}) = N_{A0} = K_{x,loc}^{0}(x_{Ab} - x_{A0})$$
 (YA

در معادله بالا x و y به فاز ۱ و ۲ اشاره دارد. آهنگ انتقال میان فازی، که برای محاسبه غلظت فصل مشترک استفاده می شود به صورت زیر بیان می شود.

#### هندسه مدل

در این پژوهش از میکروکانال حلزونی و میکروکانال Y-Y شکل استفاده شده است. به منظور قابل مقایسه بودن، با نتیجههای گزارش شده در پژوهش *عبداللهی* و *همکاران* [۸۸]، عرض کانالها ۳س ۵۰۰ و طول ۳m ۶۰ است. گام حلقه میکروکانال حلزونی نیز ۳m ۱ در نظر گرفته شده است. شعاع انحنا اولین حلقه mm ۵۰/۵ انتخاب شده است. طول کانالهای ورودی و خروجی mm ۵/۵ و عرض

حمید اسدی و همکاران

دوره ۴۲، شماره ۱، ۱۴۰۲

Archive of SID.ir



شکل ۵ – بررسی دقت حل در تعداد شبکههای گوناگون و بهدست آوردن تعداد شبکه بهینه در هندسه حلزونی



شکل ۶ - بررسی دقت حل در تعداد شبکههای گوناگون و بهدست آوردن تعداد شبکه بهینه در هندسه Y - شکل



شکل ۲ - شبکهبندی هندسه های الف) میکروکانال ۲- شکل (سمت راست)، ب) میکروکانال حلزونی (سمت چپ)

۰/۲۵ mm در نظر گرفته شده است. دو سیال امتزاج ناپذیر به درون میکروکانال تزریق می شوند. محاسبهها بهدلیل تقارن در بعد سوم، کاهش هزینه و زمان انجام در دو بعد انجام شد.

#### شبکه بندی و بررسی حل استقلال از شبکه

بررسی استقلال از شبکه در مسائل محاسبههای عددی، یکی از بخشهای مهم برای دقت حل، کاهش زمان و هزینه می باشد. بنابراین شبکه بهینه می بایست برای شبیه سازی در نظر گرفته شود. شبکهها در واقع جزءهایی هستند که در روش تفاضل های محدود برای حل دقیق تر مسئله در نظر گرفته می شود. در فضای دو بعدی از شبکههای مثلثی و مربعی استفاده می شود. شیوه انتخاب شبکه بندی در این پژوهش به صورتی بوده که در مناطقی که مقدار پارامترهای مورد سنجش مانند سرعت و غلظت حساس تر هستند و نیاز به دقت بالاتری دارند، از شبکه بندی ریز تر استفاده شود. این

ناحیهها به عنوان لایه مرزی شناخته میشوند.

در تأثیر پذیری پاسخ از تعداد شبکه، رانهایی با تعداد شبکههای گوناگون گرفته شد، که با توجه به شکل ۵ و ۶ مشاهده می شود که از تعداد شبکه ۲۹۷۵۱ و ۲۹۳۲ به ترتیب در هندسههای حلزونی و Y- شکل بالاتر پاسخ تغییر محسوسی نمی کند و ریز کردن بیش تر از این تعداد از لحاظ زمان و هزینه به صرفه نمی باشد. بنابراین این تعداد شبکه ایجاد شده برای هندسه میکروکانال حلزونی و Y - شکل ذکر شده به عنوان تعداد شبکه بهینه به دست آمد.

#### ویژگیهای سیالهای استفاده شده

در شبیه سازی عددی میکروکانال از دو سیال آب و بوتیل استات که قطبیت ضعیفی دارد و در مقایسه با حلال های دیگر درجه سمیت کمتری دارد [۲۴] استفاده شده است. مشخصه های سیال های به کار برده شده و همچنین شرایط عملیاتی استخراج در جدول ۲ آورده شده است:

علمی – پژوهشی

### Archive of SID.ir

٣++

نشریه شیمی و مهندسی شیمی ایران 💦 ن

شبیهسازی هیدرودینامیک و انتقال جرم دو فاز امتزاج ...

دوره ۴۲، شماره ۱، ۱۴۰۲

	سطح		نماد	متغیرهای تأثیر گذار
-1	•	١		
۲۰	۳۵	۵۰	X1	شدت جریان فاز آبی (µlit/min)
77	41	γ۰	X2	شدت جریان فاز آلی (µlit/min)
٠/٠٠١	۰/۰۵۰۵	٠/١	X3	غلظت کلسیم کلرید ورودی (mol/lit)
٢	٣	۴	X4	تعداد حلقه ميكروكانال

جدول ۳ - سطوح کد گذاری شده و بازه أزمایشی متغیرها

۳۰ ران شبیه سازی پیشنهاد شد. با استفاده از روش سطح پاسخ و آنالیز داده ها یک معادله برازش خطی مرتبه دوم با توجه به جدول ۴ برای پاسخ سامانه بر حسب متغیرهای ورودی با در نظر گرفتن دقت مدل منطبق شد. ثابت و ضریب های برازش مدل آماری چند جمله ای درجه دوم کامل که در آن اثر خطی هر متغیر، مربع آن ها و اثرهای متقابل آن ها در نظر گرفته شده طبق معادله (۳۰) آورده شده است. چرا که مدل درجه دوم کامل دارای بالاترین F-value، پایین ترین P-value

به منظور تبیین ارتباط بین متغیرهای عملیاتی و راندمان استخراج ثابتها و ضریبهای برازش به روش نرمافزار Design Expert بهدست آمده شده در جدول ۵ نشان داده شده است.

آنالیز واریانس میزان تأثیر پارامترهای معادله برازش را مشخص مینماید و در تحلیل و مدلسازی آزمایشها نقش به سزایی دارد. جدول آنالیز واریانس در طراحی آزمایشها میزان اثر فاکتورهای ورودی و برهمکنشهای آنها را بر روی پاسخ خروجی مشخص مینماید [۴۶].

با توجه به قابلیت اطمینان ۹۵ درصد در آزمایشهای مهندسی، P-value کمتر از ۲۰۱۵ به منزله معنی دار بودن عاملهای مدل در نظر گرفته می شود [۴۶٬۴۵]. مقدار خطای مجموع مربعهای<sup>۱</sup> مدل منطبق شده بر دادهها، میزان دقت نوع معادله برازش حاکم بر مدل را مشخص نموده که در مبحث طراحی آزمایشها از اهمیت به سزایی برخوردار است. هر چه این مقدار در مدلهای قابل انطباق بر دادهها کمتر باشد، مدل مربوطه دارای خطای پیشبینی کمتری است. در این پژوهش کمترین عدد این مولفه مربوط به مدل برازش مرتبه دوم کامل<sup>۲</sup> به دست آمد.

#### دقت مدل

برای ارزیابی دقت برازش مدل، نمودار توزیع نرمال باقیمانده رسم میشود. باقیماندههای انحراف بین مقدارهای پیشبینی شده و واقعی می باشند، و اگر خطاهای آزمایشی تصادفی باشند

(1) PRESS

جدول ۲ - مشخصههای سیالهای به کار برده شده ۶ طول (cm) مشخصههاي هندسی ۵۰۰ عرض (µm) ४/९९٨ چگالی (kg.m<sup>-3</sup>) آب گرانروی cP مشخصههاي ١ چگالی (kg.m<sup>-3</sup>) ۵/۸۸۲ سیالهای استفاده بوتيل استات ۶۸۵/۰ گرانرویcP شده کشش سطحی بین آب و بوتیل استات N/m کشش سطحی بین آب و

شبیهسازی در دمای عملیاتی ۲۹۳ کلوین و فشار عملیاتی ۱ اتمسفر انجام شد.

#### طراحی آزمایش و بهینهسازی

در این پژوهش، طرح آزمایش مرکب مرکزی برای پیدا کردن شرایط بهینه استخراج یون کلسیم با استفاده از فناوری میکروفلوئیدیک به کار گرفته شد، چرا که طرح مرکب مرکزی بهترین روش برای بهینهسازی آزمایشهایی که متغیر مستقل کمی دارند و متغیر وابسته نیز در یک کمیت اندازه گیری میشود است [۳۳]. اثر پارامترهای شدت جریان حجمی فاز آبی، شدت جریان حجمی فاز آلی، غلظت کلسیم کلرید ورودی و تعداد حلقه بر روی بازدهی استخراج کلسیم کلرید مورد بررسی قرار گرفت. جدول ۳ بازه آزمایشی و سطوح متغیرهای مستقل مورد استفاده را در این پژوهش نشان میدهد. متغیر پاسخ (راندمان استخراج) به وسیله مدل درجه دوم کامل برای ارتباط دادن به متغیرهای عملیاتی برازش یافت.

$$Y = \beta_0 + \sum_{i=1}^{k} \beta_i X_i + \sum_{i=1}^{k} \beta_{ii} X_i^2 + \sum_{i=1}^{k-1} \sum_{i=2}^{k} \beta_{ij} X_i X_j + \varepsilon$$
( $r$ .)

در معادله بالا Y راندمان استخراج تولیدی پیش بینی شده و  $\beta_i$ ، در معادله بالا Y راندمان استخراج تولیدی پیش بینی شده و  $\beta_{ij}$ ,  $\beta_{ii}$   $\beta_{ii}$ ,  $\beta_{ii}$   $\beta_{ii}$ ,  $\beta_{ii}$  مریبهای برازش، محاسبه شده بهدست آمده از تحلیل برازش، X<sub>i</sub> و X<sub>i</sub> متغیرهای مستقل یا فاکتورهای کد گذاری شده و  $\sigma$  خطای تصادفی میباشد [۴۵٬۴۴].

#### نتیجهها و بحث تحلیل آماری شبیهسازیهای انجام شده طبق طراحی آزمایش

برای بهینهسازی پارامترهای قابل تنظیم در شبیهسازی، ۴ پارامتر با استفاده از نرمافزار طراحی آزمایش موردی بررسی قرار گرفت، که با استفاده از روش رویه پاسخ به منظور بهینه کردن پارامترها تعداد

(r) full quadratic

#### دوره ۴۲، شماره ۱، ۱۴۰۲

 $\overline{}$ 

R <sup>2</sup> adj	P-value	F-value	میانگین مربعها	درجه آزادی	جمع مربعها	مدل	
•/\\٢•۴	•/••• \<	34/11	४८७१/४८	۴	9887/77	خطی (Linear)	
•/٨٢٢٠	•/4717	1/+4	۷۲/۲۰	۶	477/10	خطی + برهمکنشهای دوتایی (Linear+2FI)	
•/٩٧۴۵	•/••• \<	४९/٣٩	<b>۲۹۲/۶</b> λ	۴	۱۱۷۰/۷۰	درجه دو (Quadratic+2FI)	
•/૧૧۶٩	•/••١•	14/84	17/87	٨	14./90	درجه سه (cubic)	

جدول ۴ - ارزیابی مدلهای پیشنهادی با استفاده از نرمافزار Design Expert







در شکل ۹ باقی مانده ها بر حسب مقدارهای برازش یافته راندمان استخراج از مدل رسم شده اند. باقی مانده ها باید به طور تصادفی در اطراف صفر پراکنده شده باشند. پراکنده بودن مقدارها نشان دهنده آن است که انحراف در مشاهده های اصلی به مقدار پاسخ ارتباطی نداشته و مدل پیشنهادی توصیف مناسبی از فرایند است.

#### بررسی تأثیر عاملها مؤثر بر استخراج یون کلسیم بررسیاثر شدت جریان فاز آبی و فاز آلی

شکل ۱۰ اثر خطی تغییرهای فاکتور شدت جریان فاز آبی و آلی روی پاسخ را در حالی است که سایر فاکتورها در نقاط مرکزی ثابت هستند، نشان میدهد. با پایین آمدن شدت جریان فاز آبی و بالا رفتن شدت جریان فاز آلی تا حدی باعث بهبود استخراج می شود.

علمی – پژوهشی

برازس بين متغيرها و پاسخ	جدول ۵ – تابتها و صريبهاي ا
فردين	فاكتمر

صريبها /	فاكتور
۳۳/۹۶	ثابت
- <i>\%</i> /٩٧	A_Q(eq)
۵/۹۱	B_Q(org)
-•/••• <b>۵</b>	C_C0_Ca
٨/٢١	D_N-R
•/1844	AB
•/••۶Y	AC
-۴/۵۱	AD
•/•••۶	BC
۲/۶۰	BD
•/••۵Y	CD
۵/۴۹	$A^2$
-7/81	$B^2$
-•/۲۲۵۵	C <sup>2</sup>
-•/٣۶١٩	D <sup>2</sup>

انتظار میرود که از توزیع نرمالی پیروی کنند. مقدارهای پیش بینی شده باقیمانده به وسیله تابع توزیع نرمال در شکل ۸ رسم شده است. خط مستقیم نمودار نشان می دهد که باقی مانده ها از توزیع نرمال پیروی می کنند.

با توجه به جدول ۵ و مقدارهای P-value، معادله برازش خطی مرتبه دوم حاکم بر نیروی فرایند به صورت معادله ۲۰ است. EX.Eff. = 33.96 - 16.96787 \* Q(eq) + 5.91156 \* Q(org) + 8.70629 \* N\_R -4.50531 \* Q(eq) \* N\_R + 2.59656 \* Q(org)N\_R (٣٠) + 5.48739 \* Q(eq)^2 - 2.61064 \* Q(org)^2 ترمهای (Q(eq) به ترتیب اثرهای خطی پارامترهای شدت جریان فاز آبی ورودی، شدت جریان فاز آلی ورودی، غلظت کلسیم کلرید ورودی در فاز آبی و تعداد حلقه

هستند،  $Q(eq)^2$ ،  $Q(eq)^2$ ،  $Q(eq)^2$  و  $N_R^2$  و  $N_R^2$  اثرهای درجه دوم پارامترهای یاد شده و به دست آمده ضرب پارامترها در هم اثرهای متقابل فاکتورهای مورد نظر میباشند.

۳+۲

دوره ۴۲، شماره ۱، ۱۴۰۲

شبیهسازی هیدرودینامیک و انتقال جرم دو فاز امتزاج ...

	ا مسيم	ی استخراب یور	۱۹۹۰) شان برزش شناه برز	بحين ورياس (۲۰۱۰ )	جاول ، ا	
	P-value	F-value	میانگین مربعها MS	جمع مربعها SS	درجه آزادی DF	ترمها
تفاوت معنادار `	•/••• \<	۸۰/۱۳	<b>४९४/९४</b>	11141/80	14	مدل
	•/•••١	۶۹۳/۸۵	۶۹ <b>۰</b> ۹/۸۱	<b>۶</b> ९٠९/۸۱	١	A_Q(eq)
	•/••• \<	۸۴/۲۲	٨٣٨/٧٢	٨٣٨/٧٢	١	B_Q(org)
	•/٩٩٩۴	۷e-۵/۰۶۳	8e-0/+47	8e-0/+47	١	C_C0_Ca
	•/••• \<	184/88	١٨١٩/١٩	१४१९/१९	١	D_N-R
	•/٨١٨۴	•/•۵۴۶	•/۵۴۳۵	•/۵۴۳۵	١	A*B
	•/٩٩٣٣	•/••• ١	•/•••Y	•/•••¥	١	A*C
	•/••• \<	37/81	876/11	878/11	١	A*D
	•/૧૧૧۴	۷e-۵/۰۸۴	8e-0/+83	8e-0/+88	١	B*C
	•/••۴٩	۱۰/۸۳	<u>۱۰۷/۸۷</u>	١٠٧/٨٧	١	B*D
	•/٩٩۴٣	•/•••١	•/•••۵	۰/۰۰۰۵	١	C*D
	•/••• \<	۸۲/۹۳	۸۲۵/۹۱	۸۲۵/۹۱	١	$A^2$
	•/•••۶	١٨/٧٧	<b>۱</b> ٨۶/٩۴	185/94	١	$\mathbf{B}^2$
	۰/۷۱۳۵	•/14••	।/٣٩	١/٣٩	١	$C^2$
	+/DDY1	۰/۳۶۰۷	٣/۵٩	٣/۵٩	١	$D^2$
بدون تفاوت معنادار			ঀ/ঀ۶	ነ ۴٩/٣٨	۱۵	باقىماندە۲
			14/94	ነ ዮዒ/ፖለ	١.	عدم تطابق <sup>۳</sup>
			•/•••	•/•••	۵	خطای سامانه <sup>۴</sup>
				۱۱۳۲۰/۹۸	۲۹	ر همبستگی کل <sup>۵</sup>

جدول ۶ - تحلیل واریانس (ANOVA) مدل برازش شده برای استخراج یون کلسیر

 $R^2={\textstyle \bullet}/{\textstyle \mbox{\rm ASA}}$  ; Adjusted  $R^2={\textstyle \bullet}/{\textstyle \mbox{\rm ASA}}$  ; Predicted  $R^2={\textstyle \bullet}/{\textstyle \mbox{\rm ASA}}$  ; Adeq Precision = Ta/{\textstyle \mbox{\rm ASA}}



همان گونه که در نمودار سه بعدی مشخص می باشد در نسبت شدت جریانهای پایین فاز آبی به فاز آلی بازدهی استخراج بالاتری را شاهد هستیم.

(1) Significant(٣) Lack of fit(۵) Correlation Total

که بررسی فاکتورها به صورت جداگانه بهطور کامل با کانتور سه بعدی و بررسی اثرهای متقابل فاکتورها بر روی پاسخ مطابقت دارد.

(٢) Residual(۴) Pure error

علمی – پژوهشی

#### ۳+۳

حمید اسدی و همکاران

نشریه شیمی و مهندسی شیمی ایران



Archive of SID.ir





شکل ۱۴ – اثر تعداد حلقه اسپیرال روی میزان استخراج سامانه میکروفلوئیدیک



شکل ۱۵ - کانتور سه بعدی بررسی هم زمان شدت جریان فاز آبی و تعداد حلقه میکروکانال

مطابق با بررسی شدت جریان فاز آبی در شدت جریان پایین فاز آبی و تعداد دور حلقه بالا بازدهی استخراج بالا می باشد.

علمی – پژوهشی



شکل ۱۱ - نمودار سه بعدی اثر متقابل شدت جریان فاز آبی -فاز آلی



#### بررسي اثر غلظت كلسيم كلريد

شکل ۱۲ اثر غلظت کلسیم کلرید روی راندمان استخراج کلسیم در حالی که سایر پارامترها در نقاط مرکزی ثابت شدهاند را نشان میدهد. همان گونه که مشاهده میشود با افزایش غلظت راندمان استخراج بهبود نیافته، که میتوان علت را به تغییرهای نسبت توزیع کلسیم بین دو فاز آبی و آلی نسبت داد.

در بازه مورد بررسی غلظت کلسیم کلرید و در شدت جریان پایین فاز آلی، غلظت کلسیم کلرید بر روی بازده استخراجی مؤثر نمیباشد.

#### بررسي اثر تعداد حلقه ميكروكانال اسپيرال

تعداد حلقه میکروکانال که از تعداد دور حلقه ۲ الی ۴ را مورد بررسی قرار داد شد، همان گونه که از بررسی تأثیر تک عاملی تعداد حلقه از شکل ۱۴ بهدست آمده می شود مشاهده می شود که با افزایش تعداد حلقه، شاهد افزایش راندمان در بازده استخراجی هستیم، که این بهدلیل کاهش شعاع انحناء و افزایش نیروهای مؤثر بر جداسازی و انتقال ذرهها از فاز آبی به فاز آلی هستیم.

#### ۳+۴

نشریه شیمی و مهندسی شیمی ایران شبیه

شبیهسازی هیدرودینامیک و انتقال جرم دو فاز امتزاج ...

دوره ۴۲، شماره ۱، ۱۴۰۲



شکل ۱۶ – شماییی از میگروگان استفاده شده توسط عبد*التهی* و *همکاران* [۱۸]

با بررسی عاملهای مؤثر بر بازدهی و بهینهسازی آنها، بیش ترین درصد بازده استخراج در شدت جریان فاز آبی ۱۴۰۸ ۲۰ ۲۰ شدت جریان فاز آلی μlit/min ۲۰، غلظت کلسیم کلرید M ۸/۰ و تعداد ۴ حلقه اتفاق میافتد و مقدار پیش بینی شده برای راندمان استخراج ۲۴/۹۸ درصد برآورد شد.

#### نتيجههاي اعتبارسنجي و شبيهسازي ميكروكانال حلزوني

هنگامی که دو سیال غیرقابل امتزاج وارد میکروکانال می شوند، بسته به کشش سطحی بین سیال و دیواره، کشش سطحی بین دو سیال، نیروهای ویسکوز و هندسه میکروکانال، الگوهای گوناگون جریان را میتوان مشاهده کرد. جریان قطرهای و جریان موازی دو الگوی جریان غالب هستند که در سامانههای میکروفلوئیدیکی رخ میدهند [۴۷]. در جریان قطرهای، کشش سطحی بین یک فاز و دیوار بیشتر از کشش سطحی بین دو سیال میباشد و این امر منجر به ایجاد فاز پراکنده و فاز پیوسته میشود و هنگامی که نیروهای ویسکوز به نیروی کشش سطحی غالب باشد جریان موازی ایجاد میشود. جریان قطرهای و موازی به طور معمول به ترتیب در نرخ جریان های پایین و بالا ایجاد میشود [۱۶].

شرایط عملیاتی در شبیه سازی مطابق با شرایط کار آزمایشگاهی عبد *اللهی و همکاران* [۱۸] اعمال شد. در این پژوهش جداسازی یون کلسیم از محلول آبی توسط محلول آلی در میکروکانال Y-Y شکل و حلزونی شبیه سازی شد. میکروکانال با طول ۶ سانتی متر و عرض ۵۰۰ میکرومتر و عمق ۹۰ میکرومتر مطابق شکل ۱۶ در نظر گرفته شد. نتیجه های مربوط به هیدرودینامیک جریان در شکل ۱۷ مشاهده می شود.

در این پژوهش، فصل مشترک دو فاز در شدت جریانهای گوناگون، در جریان لایهای بررسی شد. طبق نتیجههای *عبداللهی* و همکاران [۱۸] اگر نسبت شدت جریان فاز آبی به فاز آلی ۰/۷۵





شکل ۱۷ - شبیهسازی عددی و اعتبار سنجی آن با کار آزمایشگاهی در نسبت شدت جریانهای گوناگون، کسر حجمی فازها در قسمت خروجی و جدایش فازها [۱۸]

باشد فصل مشترک دو فاز تقریبا در مرکز کانال قرار دارد و امکان جدایش بیشتر می شود. نتیجه های به دست آمده از مقایسه پژوهش یاد شده با نتیجه های به دست آمده از شبیه سازی در شکل ۱۷ آورده شده است که با توجه به تطابق قابل قبول نتیجه های به دست آمده از شبیه سازی، امکان آنالیز جریان با استفاده از شبیه سازی نتیجه می شود.

همان گونه که از شکل ۱۷ استنباط میشود، نتیجههای آزمایشگاهی بهدست آمده از کار عبد*اللهی* و همکار*ان* [۸] با تصویرهای بهدست آمده از شبیهسازی با تقریب بسیار خوبی یکسان میباشد، در تصویرهای آزمایشگاهی سیال قسمت پایینی میکروکانال فاز آبی و قسمت بالایی را فاز آلی تشکیل میدهد، همچنین در کار شبیهسازی شده، بخش قرمز رنگ مربوط به فاز آبی و قسمت آبی رنگ مربوط به فاز آلی میباشد، از مقایسه تصویرهای تجربی شبیهسازی نتیجه میشود که مدل به کار رفته تا حد زیادی به واقعیت نزدیک است چرا که محل فصل مشترک شراهت زیادی به یکدیگر دارند. مشخصههای جریانهای به کار رفته در این پژوهش و کار عبد*اللهی* و همکار*ان* نیز در جدول شماره رفته در این پژوهش و کار عبد*اللهی* و همکار*ان* نیز در جدول شماره و انتقال جرم مشخصههای جریانی و انتقال جرم کار آزمایشگاهی و همکار*ان* [۸] نیز در جدول ۴ آورده شده است.

کانتور سرعت، کسر حجمی و غلظت مربوط به شبیهسازی کانال Y-Y در شکل ۱۸ نمایش داده شده است. الگوهای جریان در میکروکانالها پارامتر تعیین کننده در میزان انتقال جرم می باشد.

۳+۵

نشریه شیمی و مهندسی شیمی ایران

#### حمید اسدی و همکاران

بره ۲۲، شماره ۱، ۱۴۰۲	در
-----------------------	----

شدت جریان فاز آلی (µlit/min)	شدت جریان فاز آبی (µlit/min)	سرعت فاز آلی (m/s)	سرعت فاز آبی (m/s)	شكل	
۴۰/۵	۳۵/۱	۰/۰۳	•/•7۶	الف	
۲٩/٠۵۶	۴۰/۰۰۰۵	۰/۰۵۸۵۶	•/• ٢٩۶٣	ŗ	کار شبیهسازی حاضر
٨١	۴۰/۰۰۰۵	۰/۰۶	•/• ٢٩۶٣	ىح	
[\]	>٢٠	۰/۰۳	•/•7۶	الف	
[7]	[٢٠-٧٠ ]	۰/۰۵۸۵۶	•/• ٢٩۶٣	J.	کار <i>عبدالل</i> هی و <i>همکاران</i>
>٢.	[\Y+ ]	۰/۰۶	•/• 7958	ج	,

جدول ۳ - مشخصههای جریانهای به کار رفته در شبیهسازی با روش تعیین تراز

#### جدول ۴- شرایط عملیاتی و نتیجهها -آزمایشگاهی *عبداللهی و همکاران* [۱۸] و کار شبیهسازی حاضر

	عبداللهی و همکاران [۱۸]		
فاز آبی فاز آلی		فاز آبی	
غلظت كلسيم كلريد فاز ورودي	غاذات کا بر کاربر فاز میدم ، کار	غلظت كلسيم كلريد فاز ورودي ٠/٠٠۵	
۰۰۰۵ مولار	علطت فتسيم فتريد فأر ورودي بالمودر	مولار	
شدت جریان فاز آبی ۲۰ میکرولیتر بر	شدت جریان فاز آبی ۲۸ میکرولیتر بر	شدت جریان فاز آبی ۲۰ میکرولیتر بر	
دقیقه سرعت ۰/۰۱۴۸۲ متر بر ثانیه	دقیقه سرعت ۰/۰۲۱ متر بر ثانیه	دقیقه سرعت ۰/۰۱۴۸۲ متر بر ثانیه	
غلظت كلسيم كلريد فاز أبى خروجي غلظت كلسيم كلريد فاز ألى خروجي		غلظت كلسيم كلريد فاز أبي خروجي	
۰/۰۰۱۹۹۶۹ مولار		۰/۰۰۱۸۸۶ مولار	
بازدهی استخراجی	بازدهی استخراجی میکروفلوئیدیک ۶۲/۲۸ ٪		
اندازههای کانال مورد استفاده: عرض	۵۰ میکرومتر، عمق ۹۰ میکرومتر، طول	اندازههای کانال مورد استفاده: عرض •	
صورت دو ب	لىمتر	۶ سان	
ں جریان	الگوى		
	غلظت کلسیم کلرید فاز ورودی غلظت کلسیم کلرید فاز ورودی شدت جریان فاز آبی ۲۰ میکرولیتر ب دقیقه سرعت ۱۹۸۲/۰ متر بر ثانیه غلظت کلسیم کلرید فاز آبی خروجی اندازههای کانال مورد استفاده: عر صورت دو رجریان	الله المعادر التي المعادر التي المعادر المعادر التي المعادر المعاد	



<sup>.</sup> شکل ۱۸ - کانتور الف) سرعت، ب) کسرحجمی، ج) غلظت یون کلسیم در شبیهسازی هیدرودینامیک و انتقال جرم مسئله *عبداللهی و همکاران* [۱۸]

هنگام استفاده از جریانهای موازی برای تماس دو فاز، تعیین شرایطی که جداسازی فازهای غیرقابل امتزاج در میکروکانال انجام میشود، ضروری میباشد. همان گونه که اشاره شد جریان موازی در شدت جریانهای بالا و در درون میکروکانالهای بدون ساختار درونی بهطور معمول تشکیل میشود. با توجه به ویژگیهای جریان اشاره شده در جدول ۴ جریان شبیهسازی شده موازی بوده و جداسازی جریانها در خروجی در شکل ۱۸ نشان داده شده است.

با توجه به این که جریان به حالت پایا رسیده است و با باریک تر شدن قسمت انتهایی مربوط به فاز آلی در کانال اصلی مشاهده میشود که سرعت در قسمت انتهایی افزایش سپس در کانال خروجی مربوط به فاز آلی کاهش مییابد. در کانتور کسر حجمی فازها مشاهده میشود که فازها دقیقا همانند با کار آزمایشگاهی با توجه به نسبت شدت جریان که دارند، از کانال خروجی مربوط به خود خارج می شوند و این بهترین حالت جداسازی می باشد. غلظت در فاز آبی با ۲۰۰۵

علمی – پژوهشی

#### ۳+۶

دوره ۴۲، شماره ۱، ۱۴۰۲

نتيجههاي ميكروكانال حلزوني شكل					
فاز آلی	فاز آبی				
غلظت كلسيم كلريد	غلظت کلسیم کلرید فاز ورودی ۰/۰۰۵				
فاز ورودی ۰ مولار	مولار				
شدت جریان فاز آبی ۲۸ میکرولیتر بر	شدت جریان فاز آبی ۲۰ میکرولیتر بر				
دقیقه سرعت ۰/۰۲۱ متر بر ثانیه	دقیقه سرعت ۰/۰۱۴۸۲ متر بر ثانیه				
	غلظت كلسيم كلريد فاز خروجي				
۱۴۱۰-/۰۰ مولار					
بازدهی استخراجی میکروفلوئیدیک ۷۱/۷۹٪					
اندازههای میکروکانال: عرض ۵۰۰ میکرومتر، طول ۶ سانتیمتر (چهار حلقه)					

جدول ۵ - شرایط عملیاتی و نتیجههای کار شبیهسازی میکروکانال حلزونی

مولار وارد شده و با انجام فرایند انتقال جرم که تنها به روش سازو کار نفوذ هست، مشاهده می شود که غلظت در کانال خروجی فاز آبی در بازه ۲/۰۰۲ مولار خارج می باشد. در ادامه برای بهبود انتقال جرم همین مسئله در میکرو کانال حلزونی شبیه سازی و مقایسه می شود. شرایط عملیاتی و بازدهی استخراج به دست آمده از شبیه سازی در این میکرو کانال در جدول شماره ۵ آمده است.

هنگامی که سیال در کانال خمیده در جریان است زیر تأثیر نیروی گریز از مرکز قرار می گیرد (بر اساس شعاع انحنای کانال). در این حالت سرعت سیال نزدیک به دیواره بیرونی بیشتر از سرعت سیال نزدیک به دیواره درونی است. سیالی که نزدیک به دیواره بیرونی حرکت میکند، به نسبت دارای سرعت بیشتری است. در چنین شرایطی یک خلا ظاهری در مقابل جریان درونی وجود می آید و سیال نزدیک به دیواره بیرونی تمایل دارد به سمت دیواره درونی حرکت کند. این جریان چرخشی در میکروکانال منحنی از دیواره بیرونی به دیواره درونی را گردابه دین مینامند. به دلیل وجود این نوع حرکت در سیال، یک نیروی درگ به ذرههای حمل شده توسط جریان وارد می شود و در متمر کز شدن ذرهها خیلی مؤثر می باشد [۴۹،۴۸]. به طور کلی اگر یک ذره در کانال خمیده در مسیر جریان جابهجا شود، نیروی بالابر برشی (Fsl) به علت جریان برشی سهموی، نیروی برشی دیواره (F<sub>w</sub>)، نیروی درگ دین به علت اختلاف سرعت در کانال خمیده (FD)، نیروی وزن ذره معلق در جریان (F<sub>wt</sub>) و نیروی شناوری را تجربه می کند [۲۹]. شکل ۱۹ این نیروها را به صورت شمایی نشان میدهد.

نتیجههای بهدست آمده از شبیهسازی مربوط به سرعت، کسر حجمی و غلظت در میکروکانال حلزونی در شکل شماره ۲۰ نشان

علمی – پژوهشی



داده شده است. با توجه به یکسان بودن طول مسیر انتقال جرم میکروکانال حلزونی و میکروکانال ۲-۲ شکل، نتیجه ها نشان داد که بازدهی انتقال جرم در میکروکانال حلزونی ۱۹/۸۹ ٪ نسبت به میکروکانال ۲-۲ شکل بیشتر میباشد که میتوان علت را در وجود نیروی دین، در میکروکانال حلزونی جویا شد. زیرا که باعث مهاجرت ذره ها به سمت دیواره درونی کانال و درنتیجه افزایش میزان انتقال جرم می شود.

#### نتيجهگيري

شبیهسازی مسائل پیچیده از چندین جنبه بسیار مورد توجه میباشد، که میتوان به موارد صرفه جویی در وقت و هزینه و ایجاد دید بازتر در مسائل تجربی اشاره نمود. با هدف ارزیابی امکان انجام شبیهسازی استخراج یون کلسیم، در سامانه میکروفلوئیدیک، نخست کار آزمایشگاهی عبداللهی و همکاران برای امکان سنجی نخست کار آزمایشگاهی عبداللهی و همکاران برای امکان سنجی و تعیین میزان خطای شبیهسازی نسبت به کار آزمایشگاهی در نظر گرفته شد. برای انجام این شبیهسازی، نخست با روش تعیین تراز محل دقیق فصل مشترک تعیین شد. سپس با استفاده از مدل انتقال اجزاء رقیق<sup>۱</sup> میزان انتقال جرم از فاز آبی به آلی سنجیده شد. با توجه به نزدیک بودن نتیجه شبیهسازی به نتیجههای آزمایشگاهی،

<sup>(1)</sup> transport of diluted species

دوره ۴۲، شماره ۱، ۱۴۰۲



حلزونی و نیروهای نوین وارده به ذرهها در طول مسیر انتقال جرم، میزان انتقال جرم در مقایسه با میکروکانال ۲-۲، افزایش ۱۹/۸۹٪ داشت. خطای شبیهسازی کمتر از ۳/۶٪ نسبت به نتیجههای آزمایشگاهی اعتبار بالای مدل ارایه شده را نشان میدهد.

تاريخ دريافت : ١٧ / ١١ / ١٢ / ١۴٠٠ ؛ تاريخ پذيرش : ١٩ / ٧٢ / ١۴٠٠

مدل ارایه شده، مناسب ارزیابی می شود. با در نظر گرفتن نتیجه بهدست آمده شده و دقت مناسب اعتبار سنجی، برای بهبود و مطالعه تأثير هندسه ميكروكانال، هندسه به حلزوني شكل تغيير داده شد. به منظور مطالعه عاملهای مؤثر بر فرایند، از طراحی آزمایش روش رویه پاسخ – طرح مکعب مرکزی ٔ استفاده شد. چهار عامل شدت جريان فاز آبي، شدت جريان فاز آلي، غلظت كلسيم كلريد و تعداد حلقه میکروکانال طی ۳۰ ران شبیهسازی مورد بررسی قرار گرفت. در شرایط بهینه میزان بازدهی استخراج در میکروکانال حلزونی ۷۴/۹۸٪ بهدست آمد. با توجه به ویژگیهای جریان در میکروکانال

مراجع

- [1] Zhao C.X., Miller E., Cooper-White J.J., Middelberg A.P., Effects of Fluid–Fluid Interfacial Elasticity on Droplet Formation in Microfluidic Devices, AIChE Journal, 57(7): 1669-1677 (2011).
- [2] Wörner M., Numerical Modeling of Multiphase Flows in Microfluidics and Micro Process Engineering: A Review of Methods and Applications, Microfluidics and nanofluidics, 12(6): 841-886 (2012).
- [3] Plouffe P., Roberge D.M., Sieber J., Bittel M., Macchi A., Liquid–Liquid Mass Transfer in a Serpentine Micro-Reactor Using Various Solvents, Chemical Engineering Journal, 285: 605-615 (2016).
- [4] Plouffe P., Roberge D.M., Macchi A., Liquid-Liquid Flow Regimes and Mass Transfer in Various Micro-Reactors, Chemical Engineering Journal, 300: 9-19 (2016).
- [5] Marques M., Fernandes P., Cabral J., Žnidaršič-Plazl P., Plazl I., On the Feasibility of in Situ Steroid Biotransformation and Product Recovery in Microchannels, Chemical Engineering Journal, 160(2): 708-714 (2010).

<sup>(1)</sup> Response Surface Methodology - Central Composite Design

دوره ۴۲، شماره ۱، ۱۴۰۲

- [6] Aota A., Mawatari K., Kitamori T., Parallel Multiphase Microflows: Fundamental Physics, Stabilization Methods and Applications, *Lab on a Chip*, 9(17): 2470-2476 (2009).
- [7] Sattari-Najafabadi M., Esfahany M.N., Hexavalent Chromium Extraction from Aqueous Solutions in a Liquid-Liquid Slug Flow Microreactor, *Chemical Engineering and Processing-Process Intensification*, 157: 108156 (2020).
- [8] Sattari-Najafabadi M., Esfahany M.N., Wu Z., Sunden B., Mass Transfer between Phases in Microchannels: A Review, Chemical Engineering and Processing-Process Intensification, 127: 213-237 (2018).
- [9] Liu G., Wang K., Lu Y., Luo G., Liquid–Liquid Microflows and Mass Transfer Performance in Slit-Like Microchannels, *Chemical Engineering Journal*, 258: 34-42 (2014).
- [10] Sattari-Najafabadi M., Esfahany M.N., Wu Z., Sundén B., Hydrodynamics and Mass Transfer in Liquid-Liquid Non-Circular Microchannels: Comparison of Two Aspect Ratios and Three Junction Structures, Chemical Engineering Journal, 322: 328-338 (2017).
- [11] Sadeghi A., Amini Y., Saidi M.H., Chakraborty S., Numerical Modeling of Surface Reaction Kinetics in Electrokinetically Actuated Microfluidic Devices, *Analytica chimica acta*, 838: 64-75 (2014).
- [12] Sadeghi A., Amini Y., Saidi M.H., Yavari H., Shear-Rate-Dependent Rheology Effects on Mass Transport and Surface Reactions in Biomicrofluidic Devices, AIChE Journal, 61(6): 1912-1924 (2015).
- [13] Jahromi P.F., Karimi-Sabet J., Amini Y., Fadaei H., Pressure-Driven Liquid-Liquid Separation in Y-Shaped Microfluidic Junctions, *Chemical Engineering Journal*, **328**: 1075-1086 (2017).
- [14] Sattari-Najafabadi M., Nasr Esfahany M., Wu Z., Sundén B., The Effect of the Size of Square Microchannels on Hydrodynamics and Mass Transfer During Liquid-Liquid Slug Flow, AIChE Journal, 63(11): 5019-5028 (2017).
- [15] Anandan P., Two Phase Microfluidics: New Trend in Model Identification, (2013).
- [16] Kashid N.M., Renken A., Kiwi-Minsker L., Influence of Flow Regime on Mass Transfer in Different Types of Microchannels, Industrial & Engineering Chemistry Research, 50(11): 6906-6914 (2011).
- [17] Cao Z., Wu Z., Sattari Najafabadi M., Sunden B., Liquid-Liquid Flow Patterns in Microchannels, American Society of Mechanical Engineers, V002T010A013, (2017).
- [18] Abdollahi P., Karimi-Sabet J., Moosavian M.A., Amini Y., Microfluidic Solvent Extraction of Calcium: Modeling and Optimization of the Process Variables, Separation and Purification Technology, 231: 115875 (2020).
- [19] Kishimoto T., Matsuoka K., Fukumoto T., Umehara S., Calcium Isotope Enrichment by Means of Multi-Channel Counter-Current Electrophoresis for the Study of Particle and Nuclear Physics, *Progress of Theoretical and Experimental Physics*, 2015(3): (2015).
- [20] Gussone N., Dietzel M., Calcium Isotope Fractionation During Mineral Precipitation from Aqueous Solution, Springer, 75-110 (2016).

علمی – پژوهشی

- [21] Sattari-Najafabadi M., Esfahany M.N.N., Intensification of Liquid-Liquid Mass Transfer in a Circular Microchannel in the Presence of Sodium Dodecyl Sulfate, *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, **117:** 9-17 (2017).
- [22] Farahani A., Rahbar-Kelishami A., Shayesteh H., Microfluidic Solvent Extraction of Cd (II) in Parallel Flow Pattern: Optimization, Ion Exchange, and Mass Transfer Study, Separation and Purification Technology, 258: 118031 (2021).
- [23] Marsousi S., Karimi-Sabet J., Moosavian M.A., Amini Y., Liquid-Liquid Extraction of Calcium Using Ionic Liquids in Spiral Microfluidics, *Chemical Engineering Journal*, 356: 492-505 (2019).
- [24] Foroozan P., Karimi-sabet J., Amini Y., Ion-Pair Extraction-Reaction of Calcium Using Y-Shaped Micro Fl Uidic Junctions: An Optimized Separation Approach, *Chemical Engineering Journal*, 334: 2603-2615 (2018).
- [25] Hibara A., Tokeshi M., Uchiyama K., HISAMOTO H., KITAMORI T., Integrated Multilayer Flow System on a Microchip, *Analytical sciences*, 17(1): 89-93 (2001).
- [26] Kim H.-B., Ueno K., Chiba M., Kogi O., Kitamura N., Spatially-Resolved Fluorescence Spectroscopic Study on Liquid/Liquid Extraction Processes in Polymer Microchannels, *Analytical sciences*, 16(8): 871-876 (2000).
- [27] Žnidaršič-Plazl P., Plazl I., Steroid Extraction in a Microchannel System—Mathematical Modelling and Experiments, *Lab on a Chip*, 7(7): 883-889 (2007).
- [28] Hazama R., Tatewaki Y., Kishimoto T., Matsuoka K., Endo N., Kume K., Shibahara Y., Tanimizu M., Challenge on Ca-48 Enrichment for Candles Double Beta Decay Experiment, *arXiv preprint arXiv:0710.3840*, (2007).
- [29] Russom A., Gupta A.K., Nagrath S., Di Carlo D., Edd J.F., Toner M., Differential Inertial Focusing of Particles in Curved Low-Aspect-Ratio Microchannels, *New journal of physics*, 11(7): 075025 (2009).
- [30] Sun J., Liu C., Li M., Wang J., Xianyu Y., Hu G., Jiang X., Size-Based Hydrodynamic Rare Tumor Cell Separation in Curved Microfluidic Channels, *Biomicrofluidics*, 7(1): 011802 (2013).
- [31] Madenci E., Guven I., "The Finite Element Method and Applications in Engineering Using Ansys®", Springer, (2015).
- [32] Bathe K.J., Finite Element Method, *Wiley encyclopedia of computer science and engineering*: 1-12 (2007).
- [33] Amini Y., Karimi-Sabet J., Esfahany M.N., Experimental and Numerical Simulation of Dry Pressure Drop in High-Capacity Structured Packings, *Chemical Engineering & Technology*, 39(6): 1161-1170 (2016).
- [34] Deshpande K.B., Zimmerman W.B., Simulation of Interfacial Mass Transfer by Droplet Dynamics Using the Level Set Method, *Chemical Engineering Science*, 61(19): 6486-6498 (2006).

علمي - يژوهشي

31+

دوره ۴۲، شماره ۱، ۱۴۰۲

- [35] Olsson E., Kreiss G., A Conservative Level Set Method for Two Phase Flow, Journal of computational physics, 210(1): 225-246 (2005).
- [36] Osher S., Sethian J.A., Fronts Propagating with Curvature-Dependent Speed: Algorithms Based on Hamilton-Jacobi Formulations, *Journal of computational physics*, **79(1)**: 12-49 (1988).
- [37] Sattari-Najafabadi M., Sundén B., Wu Z., Nasr Esfahany M., Influence of Physical Properties of Phases on Hydrodynamics and Mass Transfer Characteristics of a Liquid-Liquid Circular Microchannel, American Society of Mechanical Engineers, V001T003A003 (2016).
- [38] Amini Y., Nasr Esfahany M., CFD Simulation of the Structured Packings: A Review, Separation science and technology, 54(15): 2536-2554 (2019).
- [39] Ismail M., Level Set and Phase Field Methods: Application to Moving Interfaces and Two-Phase Fluid Flows, *Claremont Graduate University, Claremont*: (2007).
- [40] Najafabadi H.H., Moraveji M.K., CFD Investigation of Local Properties of Al2o3/Water Nanofluid in a Converging Microchannel under Imposed Pressure Difference, Advanced Powder Technology, 28(3): 763-774 (2017).
- [41] Bird R.B., Transport Phenomena, Appl. Mech. Rev., 55(1): R1-R4 (2002).
- [42] Amini Y., Karimi-Sabet J., Esfahany M.N., Experimental and Numerical Study of Multiphase Flow in New Wire Gauze with High Capacity Structured Packing, *Chemical Engineering and Processing: Process Intensification*, **108:** 35-43 (2016).
- [43] Pali H.S., Sharma A., Kumar N., Singh Y., Biodiesel Yield and Properties Optimization from Kusum Oil by RSM, *Fuel*, 291: 120218 (2021).
- [44] Silva G.F., Camargo F.L., Ferreira A.L., Application of Response Surface Methodology for Optimization of Biodiesel Production by Transesterification of Soybean Oil with Ethanol, *Fuel Processing Technology*, 92(3): 407-413 (2011).
- [45] Ahmad T., Danish M., Kale P., Geremew B., Adeloju S.B., Nizami M., Ayoub M., Optimization of Process Variables for Biodiesel Production by Transesterification of Flaxseed Oil and Produced Biodiesel Characterizations, *Renewable Energy*, 139: 1272-1280 (2019).
- [46] Montgomery D.C., "Design and Analysis of Experiments", John wiley & sons, (2017).
- [47] Yagodnitsyna A.A., Kovalev A.V., Bilsky A.V., Flow Patterns of Immiscible Liquid-Liquid Flow in a Rectangular Microchannel with T-Junction, *Chemical Engineering Journal*, 303: 547-554 (2016).
- [48] Schaap A., Dumon J., Den Toonder J., Sorting Algal Cells by Morphology in Spiral Microchannels Using Inertial Microfluidics, *Microfluidics and Nanofluidics*, 20(9): 1-11 (2016).
- [49] Warkiani M.E., Khoo B.L., Wu L., Tay A.K.P., Bhagat A.A.S., Han J., Lim C.T., Ultra-Fast, Label-Free Isolation of Circulating Tumor Cells from Blood Using Spiral Microfluidics, *Nature protocols*, **11(1)**: 134-148 (2016).

علمی – پژوهشی