

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

حمید اسدی

دانشکده فنی، دانشگاه تهران، تهران، ایران

یونس امینی، جواد کریمی ثابت\*\*

پژوهشکده چرخه سوخت هسته‌ای، پژوهشگاه علوم و فنون هسته‌ای، تهران، ایران

**چکیده:** میکروسیال، علم و تکنولوژی است که سیال را در حجم  $10^{-9}$  تا  $10^{-18}$  لیتر با استفاده از کانال‌هایی با اندازه‌های 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. میکروفلوئیدیکی فناوری ارزشمندی برای جداسازی یون‌ها و ایزوتوپ‌های پایدار فلزی می‌تواند باشد. ایزوتوپ‌های پایدار برای پژوهش در مورد قابلیت دسترسی به مواد معدنی و متابولیسم مفید هستند. از کاربردهای ایزوتوپ پایدار می‌توان 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 محیط‌زیستی، زمین‌شناسی و باستان‌شناسی استفاده شوند. در این پژوهش، جداسازی یون فلزی کلسیم به عنوان مقدمه‌ای بر جداسازی ایزوتوپی کلسیم با استفاده از روش میکروفلوئیدیکی مورد مطالعه قرار گرفت. بدین منظور، شبیه‌سازی استخراج مایع-مایع و تکنولوژی میکروفلوئیدیکی برای استخراج و جداسازی یون کلسیم به عنوان روشی نوین در هم ادغام شده‌اند. در این راستا با هدف ارزیابی امکان انجام شبیه‌سازی استخراج یون کلسیم در سامانه میکروفلوئیدیکی، نسبت سرعت‌های 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 Y-Y شکل مقایسه شد. در میکروکانال Y-Y شکل بازدهی استخراج  $60/062\%$  می‌باشد در حالی که در هندسه حلزونی در شرایط بهینه بازدهی  $74/98\%$  به دست آمد. بنابراین با تغییر هندسه میکروکانال از Y-Y به حلزونی میزان انتقال جرم  $19/89\%$  بهبود می‌یابد.

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

\*عهده‌دار مکاتبات

**واژگان کلیدی:** میکروکانال حلزونی، انتقال جرم، دینامیک سیال‌های محاسبه‌ای، 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 می‌شود، فناوری میکروفلوئیدیک است. میکروفلوئیدیک علمی است که به مطالعه جریان سیال در کانال‌هایی به اندازه‌های میکرومتر جایی که نیروهای کشش سطحی و گرانشی بر اثرها جاذبه غلبه می‌کنند، می‌پردازد. از این تکنولوژی برای انجام عملیات گوناگون بر روی سیال‌ها و آنالیز آن‌ها استفاده می‌شود. میکروفلوئیدیک کاربردهای فراوانی مانند تعلیق، کپسوله کردن دارو، علوم پزشکی، بیوتکنولوژی، سامانه‌های میکروالکترومکانیک، سنتز، بلوریزاسیون، واکنش‌های شیمیایی، فرآورده‌های آرایشی بهداشتی و مواد غذایی دارد [۱-۴]. از برتری‌های ابزارهای میکروفلوئیدیک می‌توان به موارد زیر اشاره کرد [۵-۸].

- توانایی انجام فرایندها در حجم نمونه کم
- کاهش دخالت نیروی انسانی و کاهش میزان خطای انسانی
- تکرارپذیری بالاتر
- پاسخ سریع و هزینه کم
- کاهش مصرف انرژی
- بالا بودن میزان انتقال گرما

اخیرا توسعه سامانه‌های میکروفلوئیدیک پیوسته، برای افزایش بازده جداسازی یک جزء در مقایسه با روش‌های دیگر بسیار مورد توجه قرار گرفته‌است [۹،۷]. میکروفلوئیدیک 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 میکروفلوئیدیک انجام شود [۱۱،۱۰]. در ادامه به الگوهای جریان درون میکروکانال اشاره می‌شود.

رفتار جریان‌ها در میکروکانال در جریان چند فاز به نیروهای گوناگونی مانند نیروهای لزج، نیروی اینرسی، گرانش، کشش سطحی، فشار و غیره بستگی دارد. اعداد بی بعد بیان کننده نسبت اثرهای فیزیکی بوده که راهی برای ساده‌سازی مسائل پیچیده می‌باشد. الگوهای جریان در میکروکانال‌ها پارامتر تعیین کننده در میزان انتقال جرم می‌باشد [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 می‌رسد. با تشکیل رژیم‌های گوناگون می‌توان اثرها نیروی ویسکوز، کشش سطحی و اینرسی را مورد بررسی قرار داد. در بررسی جریان‌های دوفازی، نیروهای کشش بین سطحی ( $\sim \gamma/d$ ) به دلیل وابستگی به قطر کانال از مؤثرترین نیروهای تعیین کننده الگوهای جریان هستند. از سوی نیروی اینرسی ( $\sim \rho u^2$ ) نیز با وجود داشتن ترم سرعت با توان دوم، الگوی جریان را زیر تأثیر قرار می‌دهد ولی جاذبه ( $\sim \rho g H$ ) به طور معمول در مقیاس میکرو صرف نظر می‌شود. بنابراین رقابت بین نیروهای تأثیرگذار بر الگوی جریان به وسیله اعداد بی بعد موئینگی، رینولدز و وبر قابل تعیین است [۱۴،۱۳].

$$Ca_m = \frac{\mu_m u_m}{\gamma} \quad (1)$$

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 می‌شود. کاربرد مهم این عدد در تعیین آرام یا آشفتگی بودن جریان است.

$$Re_m = \frac{\rho_m u_m D_h}{\mu_m} \quad (2)$$

عدد وبر<sup>۳</sup>: عدد وبر برای پیش‌بینی شکست فصل مشترک زیر نیروهای اینرسی قوی مورد استفاده قرار می‌گیرد. در واقع عدد وبر به صورت نسبت نیروهای اینرسی به نیروهای کشش بین سطحی تعریف می‌شود [۱۵].

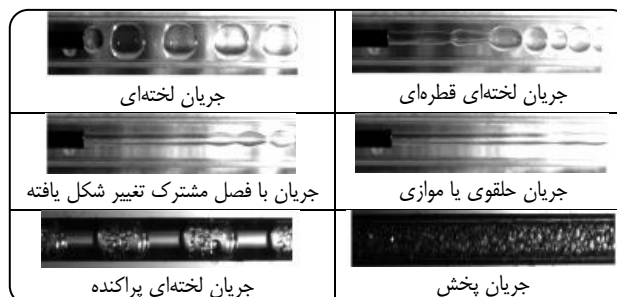
$$We_m = Re_m * Ca_m \quad (3)$$

(۱) Capillary number

(۳) Weber number

(۲) Reynolds number

کوانتومی، تقطیر، سانتریفیوژ و ... که با حالت گازی به تغلیظ ماده می‌پردازند، نمی‌توانند برای تغلیظ ایزوتوپ‌های کلسیم استفاده شوند، زیرا کار با کلسیم در حالت گازی دشوار است. از سویی دیگر تغلیظ ایزوتوپ به روش الکترومغناطیسی نیز بسیار هزینه بر می‌باشد [۸]. با توجه به مشکل‌های بالا روش مناسب برای جداسازی یون و ایزوتوپ‌های کلسیم فرایند استخراج مایع - مایع می‌باشد، که دو سیال آبی و آلی امتزاج ناپذیر به منظور استخراج گونه مورد نظر در مجاورت هم قرار می‌گیرند [۷، ۲۰-۱۸]. مطالعه پارامترهای مؤثر بر فرایندهای استخراج یون‌های فلزی با استفاده از سامانه‌های میکروسیالی، شیوه دسترسی ما به ایزوتوپ‌های دلخواه را مشخص می‌کند. در همین راستا پژوهشگران به مطالعه جداسازی یون‌های فلزی با استفاده از فرایند استخراج مایع-مایع در سامانه میکروفلوئیدیکی پرداخته‌اند [۲۱]. *فراهانی و همکاران* [۲۲] به مطالعه استخراج یون کادمیم با استفاده از حلال آلی و بررسی پارامترهای مؤثر در میکروکانال Y-Y شکل پرداخته‌اند. *عبداللهی و همکاران* [۱۸] در یک کار تجربی به مطالعه استخراج ایزوتوپ کلسیم ۴۸ در سامانه میکروفلوئیدیکی پرداختند و با استفاده از طراحی آزمایش باکس-بنکن، شرایط بهینه بازدهی استخراج را بررسی کردند که در این شرایط بازدهی ۶۲/۲۸٪ را گزارش کردند. *مرصوصی و همکاران* [۲۳] به مطالعه تأثیر تغییر هندسه از Y شکل به حلزونی، در استخراج مایع-مایع یون کلسیم با استفاده از سامانه میکروفلوئیدیکی 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 همکاران* [۲۴] استخراج مایع-مایع یون فلزی کلسیم و پارامترهای مؤثر بر آن را به کمک فناوری میکروفلوئیدیکی بررسی کردند. در بررسی هیدرودینامیکی این 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 گزینه مناسبی برای جایگزینی استخراج به روش‌های دیگر معرفی شده است. *هیبارا و همکاران* [۲۵] از آنالیز بی‌بعدی برای تعیین



شکل ۱ - الگوهای جریان در میکروکانال‌ها [۱۶]

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

$$u_m = \frac{Q_{aq} + Q_{org}}{W * D} \quad (۴)$$

$$\rho_m = \left( \frac{\theta_{aq}}{\rho_{aq}} + \frac{1 - \theta_{aq}}{\rho_{org}} \right)^{-1} \quad (۵)$$

$$\mu_m = \left( \frac{\theta_{aq}}{\mu_{aq}} + \frac{1 - \theta_{aq}}{\mu_{org}} \right)^{-1} \quad (۶)$$

$$\theta_{aq} = \frac{Q_{aq}}{Q_{aq} + Q_{org}} \quad (۷)$$

$$D_h = \frac{2(W * D)}{W + D} \quad (۸)$$

در این معادله‌ها  $u$ ،  $\rho$  و  $\mu$  به ترتیب سرعت خطی، دانسیته، گرانیوی سیال‌ها و  $D_h$ ،  $D$  و  $W$  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 پخش شده که در شکل ۱ نمایش داده شده است. جریان موازی در شدت جریان‌های بالا و در درون میکروکانال‌های بدون ساختار درونی مشاهده می‌شود. در میکروکانال‌ها نیروی کشش سطحی و ویسکوز بر نیروی جاذبه غلبه کرده و دو مایع می‌توانند صرف نظر از دانسیته‌هایشان در کنار یکدیگر حرکت کنند [۱۶، ۱۷].

جداسازی ایزوتوپ پایدار عمدتاً با روش‌های الکترومغناطیسی، غربال‌گری کوانتومی، سانتریفیوژ گازی، تقطیر و لیزرهای مولکولی انجام می‌شود. در میان این روش‌ها، مواردی مانند غربال‌گری

(۱) Slug flow

(۳) Deformed interface flow

(۵) Slug-dispersed flow

(۲) Slug-drop flow

(۴) Annular flow

فاز آبی تغلیظ می‌شود. در این مطالعه ۲۰ میلی‌لیتر فاز آبی محتوای کلسیم کلرید و ۲۰۰ میلی‌لیتر 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 غنی‌سازی  $^{48}\text{Ca}$  تأثیر کم‌تری دارد. روسان و همکاران [۲۹] یک میکروکانال حلزونی دیفرانسیلی طراحی کردند که با استفاده از آن در قطره‌های هیدرولیکی متفاوت کنترل پارامتر گردابه دین را مورد بررسی قرار دادند و جداسازی میکروذره‌های ۳ و  $10\ \mu\text{m}$  در نرخ جریان  $3000\ \mu\text{L}/\text{min}$  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 پژوهش‌های خود سلول‌های سرطانی را از خون، با نرخ جریان  $450\ \mu\text{m}$  و  $107\ \text{Cell}/\text{min}$  جدا کردند.

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 مایع-مایع شامل فاز آبی (آب و کلسیم کلرید) و فاز آلی (حلال بوتیل استات) می‌باشد و هندسه مطابق کار آزمایشگاهی عبداللهی و همکاران [۱۸] انتخاب شد. نتیجه‌های شبیه‌سازی با نتیجه‌های کار عبداللهی و همکاران 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

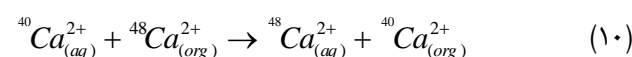
روش المان محدود یکی از روش‌های عمومی حل عددی معادله‌های دیفرانسیل جزئی در فضای دو بعدی و سه بعدی می‌باشد.

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 تأیید می‌کند. در جریان‌های موازی یا لایه‌ای، انتقال جرم بین فازهای مایع تنها بر مبنای نفوذ است؛ بنابراین، طول نفوذ  $L_{diff}$  نقش اساسی را ایفا می‌کند. زمان لازم برای نفوذ از معادله (۹) به دست می‌آید [۸].

$$t_{diff} = \frac{L_{diff}^2}{D_{diff}} \quad (9)$$

که در آن  $D_{diff}$  ضریب نفوذ جزء منتقل شونده می‌باشد. لایه‌های نازک مایع نفوذ اجزای استخراج شونده به سطح را تسریع می‌بخشد که در نتیجه آن راندمان استخراج افزایش می‌یابد. در مطالعه کیم و همکاران [۲۶] فرایند استخراج کمپلکس  $\text{AL}^{3+}\text{-DHAB}$  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 فلئوروسنت است ولی در روغن فلئوروسنت 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 اندازه‌گیری است.

در پژوهشی دیگر توسط زیندارسیک پلازل و همکاران [۲۷] نتیجه‌ها به دست آمده با داده‌های تجربی مقایسه و دقت قابل قبولی داشت. در این مطالعه، پروژسترون و ۱۱-آلفا هیدروکسی پروژسترون به صورت پیوسته از آب به وسیله اتیل استات در یک میکروراکتور شیشه‌ای به اندازه‌های ۲۲۰ میکرومتر عرض، ۵۰ میکرومتر عمق و ۳۳۲ میلی‌متر طول استخراج شده است. در مدل ارائه 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 بار تغلیظ  $^{48}\text{Ca}$  توسط فرایند استخراج مایع-مایع با استفاده از کلسیم کلرید و DC18C6 را انجام دادند. آن‌ها واکنش تبادل شیمیایی تغلیظ  $^{48}\text{Ca}$  را به فرم زیر ارائه کردند:



با توجه به واکنش تعادلی بالا  $^{40}\text{Ca}$  در فاز آلی و ایزوتوپ  $^{48}\text{Ca}$  در

(۱) Computational fluid dynamics

(۲) Finite element method

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

تابع تعیین تراز  $\varphi(x,t)$  عموماً به صورت تابع فاصله علامت‌دار<sup>۲</sup> نسبت به فصل مشترک تعریف می‌شود، بنابراین:

$$\varphi(x,t) = \begin{cases} +d(x,t), & x \in \Omega^- \\ 0, & x \in \Gamma \\ -d(x,t), & x \in \Omega^+ \end{cases} \quad (12)$$

که در آن:

$$d(x) = \min(|x - x_\Gamma|) \quad (13)$$

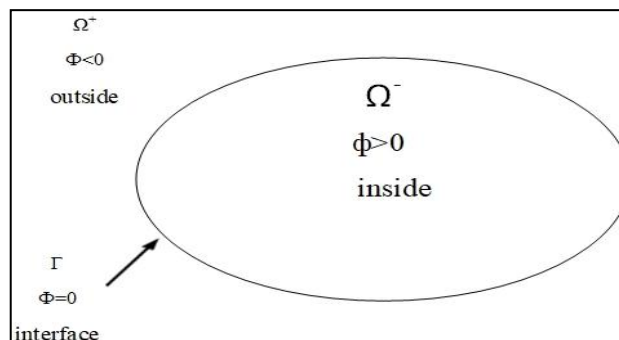
و ریشه‌های  $\varphi$  به ازای میدان سرعت  $u(x,t)$  توسط معادله زیر به‌دست آمده می‌شوند:

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

با استفاده از فرمول‌بندی بالا می‌توان تغییرهای توپولوژیکی در فصل مشترک را به دست آورد. موقعیت فصل مشترک در زمان  $t$  توسط حالت  $\varphi(x,t)=0$  معادله تعیین تراز مربوطه تعیین می‌شود [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 می‌شود. فصل مشترک سیال‌ها، با استفاده از یک تابع کلی، تابع تعیین تراز، نشان داده می‌شوند. 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 می‌یابد. معادله‌های فصل مشترک با حرکت مرز بین دو سیال در میدان سرعت  $u$  حل می‌شود:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + u \cdot \nabla \varphi = \gamma \mathcal{N} \cdot \left( \varepsilon \nabla \varphi - \phi(1-\phi) \frac{\nabla \varphi}{|\nabla \varphi|} \right) \quad (15)$$

ترم‌های سمت چپ معادله ۱۵ حرکت صحیح سطح مشترک را نشان می‌دهد، در حالی که ترم‌های سمت راست، برای پایداری عددی ضروری هستند. پارامتر  $\varepsilon$  ضخامت ناحیه‌ای را تعیین می‌کند که به آرامی از صفر به یک حرکت می‌کند و به طور معمول از نظم اندازه عناصر شبکه برخوردار است. به‌طور پیش فرض  $\varepsilon$  در هر دامنه ثابت است و برابر با بزرگ‌ترین مقدار اندازه شبکه  $h$  هست. پارامتر  $\gamma$  میزان دوباره‌سازی، یا تثبیت عملکرد تعیین تراز را مشخص می‌کند. که برای هر مسئله خاص باید تنظیم شود. اگر  $\gamma$  خیلی



شکل ۲ - نمایش فصل مشترک  $\Gamma$  توسط روش تعیین تراز [۳۹]

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. فرمول‌بندی روش المان محدود در ادامه به سامانه‌ای از معادله‌های جبری تبدیل می‌شود که بیانگر تقریبی از یک تابع مجهول بر روی هر المان است [۳۱-۳۳]. 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<sup>۱</sup> 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 می‌شود. 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 می‌گیرد و توسط آن می‌توان 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 می‌شود. این تابع در محل فصل مشترک صفر در نظر گرفته می‌شود. برای درک این روش یک منحنی ساده‌ی بسته  $\Gamma(t)$  که در آن  $\varphi$  در ناحیه‌ی  $\Omega$  محصور شده و در دو پس حرکت می‌کند را در نظر بگیرید. در فرمول بندی تعیین تراز، تابع تعیین تراز  $\varphi$  فصل مشترک صفر در نظر گرفته می‌شود و مرز به صورت زیر تعریف می‌شود.

(۱) level set

(۲) Signed distance function



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:

$$\int_{cv} \frac{\partial \rho}{\partial t} dv + \int_{cs} \rho \vec{v} \cdot \vec{n} \cdot dA = 0 \quad (19)$$

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

$$\int_{cv} \frac{\partial \rho}{\partial t} dv = \sum_{in} m - \sum_{out} m \quad (20)$$

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

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

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v}) = 0 \quad (21)$$

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

$$\vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{v}) = 0 \quad (22)$$

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

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \vec{U}) + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{U} \vec{U}) = -\vec{\nabla} P + \vec{\nabla} \cdot [\mu (\vec{\nabla} \vec{U} + \vec{\nabla} \vec{U}^T)] + \rho \vec{g} + \vec{F} \quad (23)$$

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

**جدول ۱ - شرایط مرزی حاکم بر مسئله**

مقدار	شرط مرزی
۲۰	شدت جریان فاز آبی (μlit/min)
۷۰	شدت جریان فاز آلی (μlit/min)
۰/۰۱۴۸۱۵	سرعت فاز آبی (m/s)
۰/۰۵۱۸۲۵	سرعت فاز آلی (m/s)
عدم لغزش	شرایط هیدرودینامیکی رو دیواره
۲۹۳	دمای عملیاتی (K)
۱	فشار عملیاتی (atm)

کوچک باشد، ممکن است ضخامت فصل مشترک ثابت نماند و به دلیل بی‌ثباتی‌های عددی ممکن است نوسان‌ها در φ ظاهر شود. از طرف دیگر اگر γ خیلی بزرگ باشد، سطح مشترک به‌طور صحیح حرکت نمی‌کند. مقداری مناسب برای γ بیش‌ترین مقدار میدان سرعت u است. اگر سرعت واگرایی آزاد باشد، یعنی اگر:

$$\nabla \cdot u = 0 \quad (16)$$

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

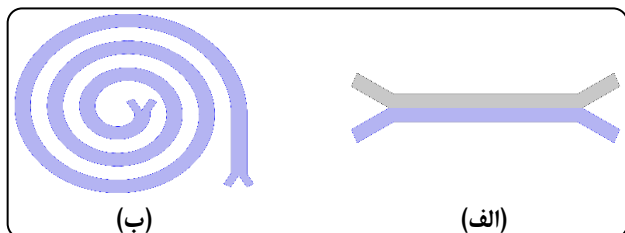
$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (u \phi) = \gamma \nabla \cdot \left( \varepsilon \nabla \phi - \phi (1 - \phi) \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|} \right) \quad (17)$$

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

$$u = -U_0 n \quad (18)$$

که در آن n بردار نرمال و U<sub>0</sub> 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>۱</sup> در نظر گرفته می‌شود. شرایط مرزی حاکم بر مسئله نیز در جدول ۱ نمایش داده شده است.

(۱) Time dependent



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 اعتنا 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 می‌توان گفت:

$$N_{A0}|_{phase1} = N_{A0}|_{phase2} = N_{A0} \quad (27)$$

که با استفاده از قانون فیک داریم:

$$N_{A0} = K_{y,loc}^0 (y_{Ab} - y_{A0}) = N_{A0} = K_{x,loc}^0 (x_{Ab} - x_{A0}) \quad (28)$$

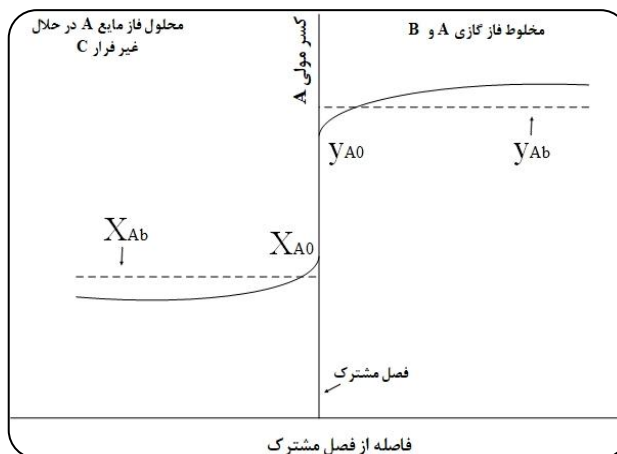
در معادله بالا  $x$  و  $y$  به فاز ۱ و ۲ اشاره دارد. آهنگ انتقال میان فاز ۱، که برای محاسبه غلظت فصل مشترک استفاده می‌شود به صورت زیر بیان می‌شود.

$$N_{A0} = K_{y,loc}^0 (y_{Ab} - y_{Ae}) = K_{x,loc}^0 (x_{Ae} - x_{Ab}) \quad (29)$$

که در معادله بالا  $y_{Ae}$  ترکیب فاز ۱ در تعادل با فاز ۲ با ترکیب  $x_{Ab}$  و  $x_{Ae}$  ترکیب فاز ۲ در تعادل با فاز ۱ با ترکیب شیمیایی  $y_{Ab}$  می‌باشد. کمیت  $K_{x,loc}^0$  و  $K_{y,loc}^0$  ضریب‌های کلی انتقال جرم مبتنی بر هر فاز مختص خود است.

### 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 [۱۸]، عرض کانال‌ها  $500 \mu m$  و طول  $60 mm$  است. گام حلقه میکروکانال حلزونی نیز  $1 mm$  در نظر گرفته شده است. شعاع انحنا اولین حلقه  $5.825 mm$  انتخاب شده است. طول کانال‌های ورودی و خروجی  $0.5 mm$  و عرض



شکل ۳ - توزیع‌های غلظت در همسایگی فصل مشترک در سامانه دو فاز [۴۱]

می‌باشد. انتقال جرم مسئله حاضر شامل فصل مشترک سیال-سیال می‌باشد که این فصل مشترک به صورت متحرک و ناپایا 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 فاز 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 [۴۲، ۴۱، ۳۷، ۱۱، ۸].

$$N_{A0} - x_{A0}(N_{A0} + N_{B0}) = -(cD_{AB} \frac{\partial x_A}{\partial y})|_{y=0} \quad (24)$$

این معادله در فصل مشترک انتقال جرم ( $y=0$ ) نوشته شده است. این معادله شار مولی میان فاز ۱ 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:

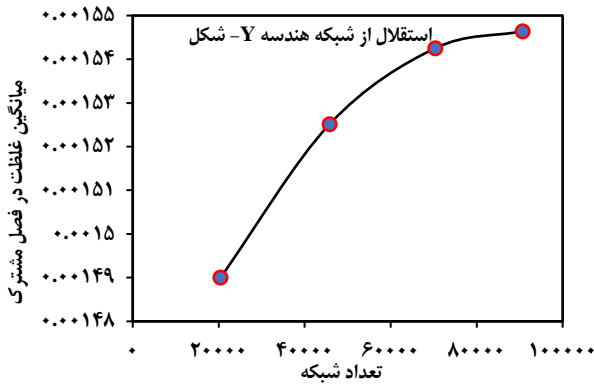
$$N_{A0} = \sqrt{\frac{D_{AB}}{\pi} \frac{h_z^2 v_s^2}{\int_0^x h_x h_z^2 v_s d\bar{x}}} (C_{A0} - 0) \equiv k_{c,loc}^0 \Delta C_A \quad (25)$$

و همچنین عدد شروود<sup>۱</sup>، (که نفوذ پذیری انتقال جرم را بیان می‌کند)، به صورت زیر بیان می‌شود.

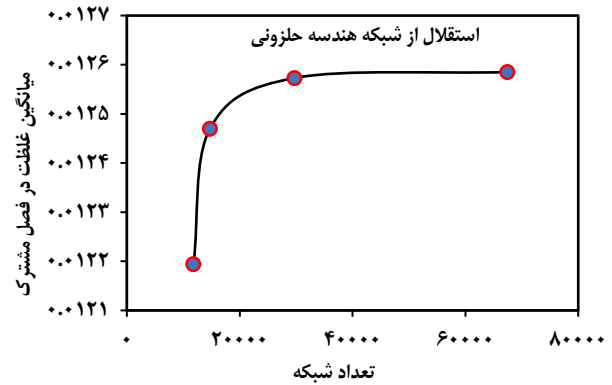
$$Sh_{loc} = \frac{k_{c,loc}^0 l_0}{D_{AB}} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} (Re Sc)^{1/2} \sqrt{\frac{h_z^2 v_s^2}{\int_0^x h_x h_z^2 v_s d\bar{x}}} \frac{l_0}{v_0} \quad (26)$$

در این معادله‌ها  $l_0$  و  $v_0$  طول مشخصه و سرعت مشخصه‌ای هستند که می‌توان پس از تعریف شکل جسم انتخاب کرد.

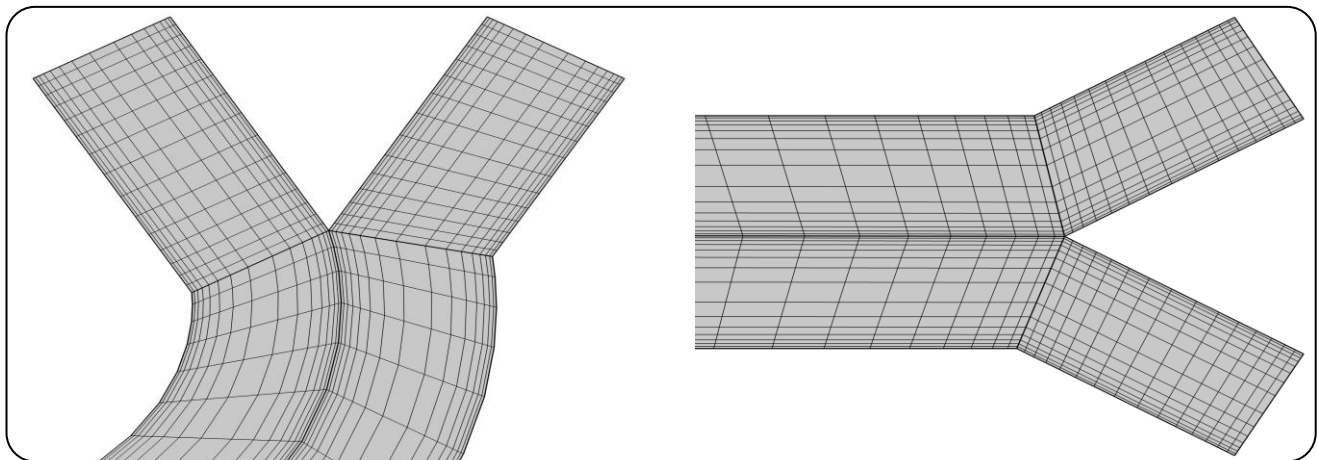
(۱) Sherwood



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



شکل ۵ - بررسی دقت حل در تعداد شبکه‌های گوناگون و به دست آوردن تعداد شبکه بهینه در هندسه حلزونی



شکل ۷ - شبکه‌بندی هندسه‌های الف) میکروکانال Y- شکل (سمت راست)، ب) میکروکانال حلزونی (سمت چپ)

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 می‌شود که از تعداد شبکه ۲۹۷۵۱ و ۷۰۳۲۰ به ترتیب در هندسه‌های حلزونی و Y- شکل بالاتر پاسخ تغییر محسوسی نمی‌کند و ریز کردن بیش‌تر از این تعداد از لحاظ زمان و هزینه به صرفه نمی‌باشد. 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 شبیه‌سازی عددی میکروکانال از دو سیال آب و بوتیل استات که قطبیت ضعیفی دارد و در مقایسه با حلال‌های دیگر درجه سمیت کم‌تری دارد [۲۴] استفاده شده است. مشخصه‌های سیال‌های به کار برده شده و همچنین شرایط عملیاتی استخراج در جدول ۲ آورده شده است:

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

#### شبکه‌بندی 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 می‌باشد. بنابراین شبکه بهینه می‌بایست برای شبیه‌سازی در نظر گرفته شود. شبکه‌ها در واقع جزءهایی هستند که در روش تفاضل‌های محدود برای حل دقیق‌تر مسئله در نظر گرفته می‌شود. در فضای دو بعدی از شبکه‌های مثلثی و مربعی استفاده می‌شود. شیوه انتخاب شبکه‌بندی در این پژوهش به صورتی بوده که در مناطقی که مقدار پارامترهای مورد سنجش مانند سرعت و غلظت حساس‌تر هستند و نیاز به دقت بالاتری دارند، از شبکه‌بندی ریزتر استفاده شود. این



جدول ۳ - سطوح کد گذاری شده و بازه آزمایشی متغیرها

سطح		نماد	متغیرهای تأثیرگذار	
-۱	۰	۱		
۲۰	۳۵	۵۰	X1	شدت جریان فاز آبی (μlit/min)
۲۸	۴۹	۷۰	X2	شدت جریان فاز آلی (μlit/min)
۰/۰۰۱	۰/۰۵۰۵	۰/۱	X3	غلظت کلسیم کلرید ورودی (mol/lit)
۲	۳	۴	X4	تعداد حلقه میکروکانال

جدول ۲ - مشخصه‌های سیال‌های به کار برده شده

مشخصه‌های هندسی		مشخصه‌های سیال‌های استفاده شده	
۶	طول (cm)	آب	چگالی (kg.m <sup>-3</sup> )
۵۰۰	عرض (μm)	بوتیل استات	چگالی (kg.m <sup>-3</sup> )
۲/۹۹۸	گرانروی (cP)	کشش سطحی بین آب و بوتیل استات (N/m)	گرانروی (cP)
۱	گرانروی (cP)		
۵/۸۸۲	گرانروی (cP)		
۶۸۵/۰	گرانروی (cP)		
۰۱۴/۰	گرانروی (cP)		

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

۳۰ ران شبیه‌سازی پیشنهاد شد. با استفاده از روش سطح پاسخ و آنالیز داده‌ها 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 ضریب‌های برازش مدل آماری چند جمله‌ای درجه دوم کامل که در آن اثر خطی هر متغیر، مربع آن‌ها و اثرهای متقابل آن‌ها در نظر گرفته شده طبق معادله (۳۰) آورده شده است. چرا که مدل درجه دوم کامل دارای بالاترین F-value، پایین‌ترین P-value و بیش‌ترین مقدار R<sup>2</sup> می‌باشد.

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 به‌سزایی 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 ۰/۰۵ به منزله معنی‌دار بودن عامل‌های مدل در نظر گرفته می‌شود [۴۶، ۴۵]. مقدار خطای مجموع مربع‌های مدل منطبق شده بر داده‌ها، میزان دقت نوع معادله برازش حاکم بر مدل را مشخص نموده که در مبحث طراحی آزمایش‌ها از اهمیت به‌سزایی 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> به‌دست آمد.

#### دقت مدل

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

#### 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 اندازه‌گیری می‌شود است [۴۳]. 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) به‌وسیله مدل درجه دوم کامل برای ارتباط دادن به متغیرهای عملیاتی برازش یافت.

$$Y = \beta_0 + \sum_{i=1}^K \beta_i X_i + \sum_{i=1}^k \beta_{ii} X_i^2 + \sum_{i=1}^{k-1} \sum_{j=i+1}^k \beta_{ij} X_i X_j + \varepsilon \quad (30)$$

در معادله بالا Y راندمان استخراج تولیدی پیش‌بینی شده و  $\beta_i$ ،  $\beta_{ii}$ ،  $\beta_{ij}$  ضریب‌های برازش محاسبه شده به‌دست آمده از تحلیل برازش،  $X_i$  و  $X_j$  متغیرهای مستقل یا فاکتورهای کد گذاری شده و  $\varepsilon$  خطای تصادفی می‌باشد [۴۵، ۴۴].

#### نتیجه‌ها و بحث

##### تحلیل آماری شبیه‌سازی‌های انجام شده طبق طراحی آزمایش

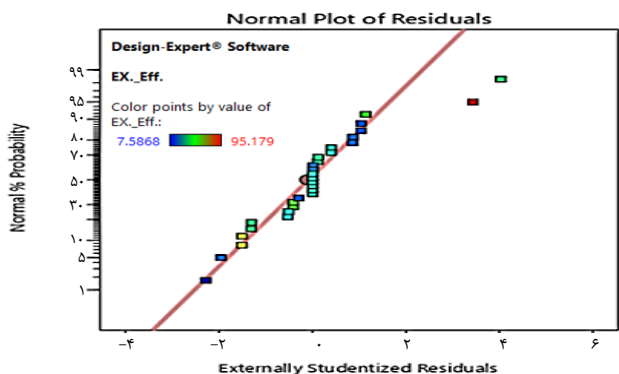
برای بهینه‌سازی پارامترهای قابل تنظیم در شبیه‌سازی، ۴ پارامتر با استفاده از نرم‌افزار طراحی آزمایش مورد بررسی قرار گرفت، که با استفاده از روش رویه پاسخ به منظور بهینه کردن پارامترها تعداد

(۱) PRESS

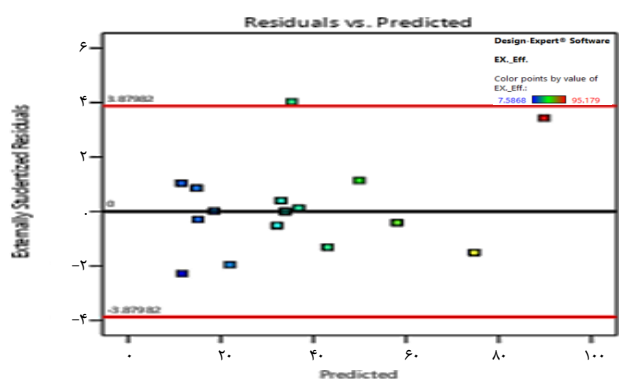
(۲) full quadratic

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

مدل	جمع مربع‌ها	درجه آزادی	میانگین مربع‌ها	F-value	P-value	R <sup>2</sup> <sub>adj</sub>
خطی (Linear)	۹۵۶۷/۷۲	۴	۲۳۹۱/۹۳	۳۴/۱۱	۰/۰۰۰۱ <	۰/۸۲۰۴
خطی + برهم‌کنش‌های دوتایی (Linear+2FI)	۴۳۳/۱۵	۶	۷۲/۲۰	۱/۰۴	۰/۴۳۱۳	۰/۸۲۲۰
درجه دو (Quadratic+2FI)	۱۱۷۰/۷۰	۴	۲۹۲/۶۸	۲۹/۳۹	۰/۰۰۰۱ <	۰/۹۷۴۵
درجه سه (cubic)	۱۴۰/۹۵	۸	۱۷/۶۲	۱۴/۶۴	۰/۰۰۱۰	۰/۹۹۶۹



شکل ۸ - نمودار توزیع نرمال برای خطاهای به دست آمده از شبیه‌سازی



شکل ۹ - تغییرهای باقی‌مانده بر حسب پاسخ مدل در هر آزمایش

در شکل ۹ باقی‌مانده‌ها بر حسب مقدارهای برازش یافته راندامان استخراج از مدل رسم شده‌اند. باقی‌مانده‌ها باید به طور تصادفی در اطراف صفر پراکنده شده باشند. پراکنده بودن مقدارها نشان‌دهنده آن است که انحراف در مشاهده‌های اصلی به مقدار پاسخ ارتباطی نداشته و مدل پیشنهادی توصیف مناسبی از فرایند است.

### بررسی تأثیر عامل‌ها مؤثر بر استخراج یون کلسیم

#### بررسی اثر 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 می‌شود.

جدول ۵ - ثابت‌ها و ضریب‌های برازش بین متغیرها و پاسخ

ضریب‌ها	فاکتور
۳۳/۹۶	ثابت
-۱۶/۹۷	A_Q(eq)
۵/۹۱	B_Q(org)
-۰/۰۰۰۵	C_C0_Ca
۸/۷۱	D_N-R
۰/۱۸۴۳	AB
۰/۰۰۶۷	AC
-۴/۵۱	AD
۰/۰۰۰۶	BC
۲/۶۰	BD
۰/۰۰۵۷	CD
۵/۴۹	A <sup>2</sup>
-۲/۶۱	B <sup>2</sup>
-۰/۲۲۵۵	C <sup>2</sup>
-۰/۳۶۱۹	D <sup>2</sup>

انتظار می‌رود که از توزیع نرمالی پیروی کنند. مقدارهای پیش‌بینی شده باقی‌مانده به وسیله تابع توزیع نرمال در شکل ۸ رسم شده است. خط مستقیم نمودار نشان می‌دهد که باقی‌مانده‌ها از توزیع نرمال پیروی می‌کنند.

با توجه به جدول ۵ و مقدارهای P-value، معادله برازش خطی مرتبه دوم حاکم بر نیروی فرایند به صورت معادله ۳۰ است.

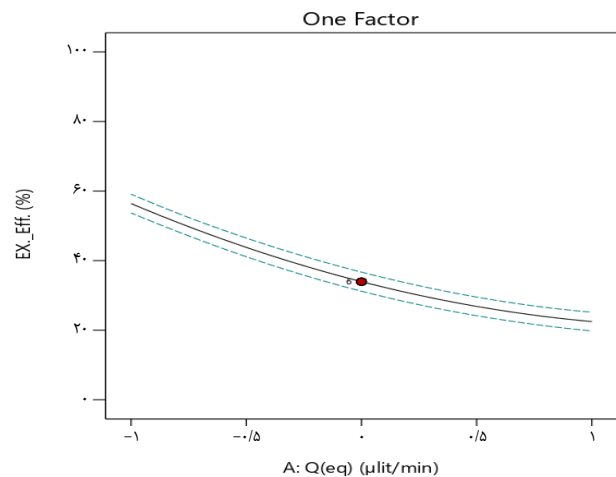
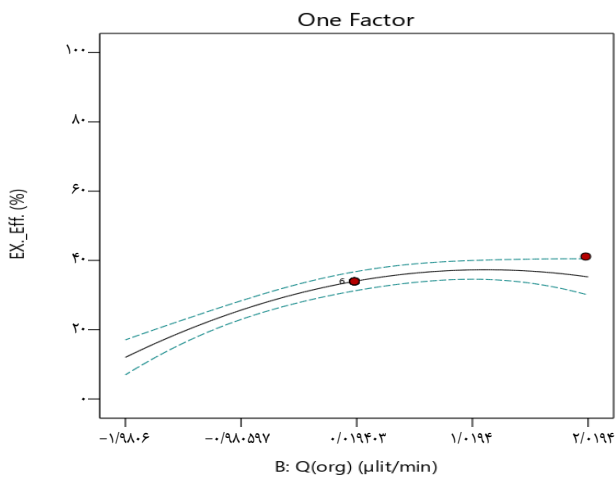
$$EX.Eff. = 33.96 - 16.96787 * Q(eq) + 5.91156 * Q(org) + 8.70629 * N_R - 4.50531 * Q(eq) * N_R + 2.59656 * Q(org)N_R \quad (30) + 5.48739 * Q(eq)^2 - 2.61064 * Q(org)^2$$

ترم‌های Q(eq)، Q(org)، C0\_Ca و N\_R 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)<sup>2</sup>، Q(org)<sup>2</sup>، C0\_Ca<sup>2</sup> و N\_R<sup>2</sup> اثرهای درجه دوم پارامترهای یاد شده و به دست آمده ضرب پارامترها در هم اثرهای متقابل فاکتورهای مورد نظر می‌باشند.

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

ترمها	درجه آزادی DF	جمع مربعها SS	میانگین مربعها MS	F-value	P-value
مدل	۱۴	۱۱۱۷۱/۶۰	۷۹۷/۹۷	۸۰/۱۳	< ۰/۰۰۰۱
A_Q(eq)	۱	۶۹۰۹/۸۱	۶۹۰۹/۸۱	۶۹۳/۸۵	۰/۰۰۰۱
B_Q(org)	۱	۸۳۸/۷۲	۸۳۸/۷۲	۸۴/۲۲	< ۰/۰۰۰۱
C_C0_Ca	۱	۶e-۵/۰۴۲	۶e-۵/۰۴۲	۷e-۵/۰۶۳	۰/۹۹۹۴
D_N-R	۱	۱۸۱۹/۱۹	۱۸۱۹/۱۹	۱۸۲/۶۸	< ۰/۰۰۰۱
A*B	۱	۰/۵۴۳۵	۰/۵۴۳۵	۰/۰۵۴۶	۰/۸۱۸۴
A*C	۱	۰/۰۰۰۷	۰/۰۰۰۷	۰/۰۰۰۱	۰/۹۹۳۳
A*D	۱	۳۲۴/۷۷	۳۲۴/۷۷	۳۲/۶۱	< ۰/۰۰۰۱
B*C	۱	۶e-۵/۰۶۳	۶e-۵/۰۶۳	۷e-۵/۰۸۴	۰/۹۹۹۴
B*D	۱	۱۰۷/۸۷	۱۰۷/۸۷	۱۰/۸۳	۰/۰۰۴۹
C*D	۱	۰/۰۰۰۵	۰/۰۰۰۵	۰/۰۰۰۱	۰/۹۹۴۳
A <sup>2</sup>	۱	۸۲۵/۹۱	۸۲۵/۹۱	۸۲/۹۳	< ۰/۰۰۰۱
B <sup>2</sup>	۱	۱۸۶/۹۴	۱۸۶/۹۴	۱۸/۷۷	۰/۰۰۰۶
C <sup>2</sup>	۱	۱/۳۹	۱/۳۹	۰/۱۴۰۰	۰/۷۱۳۵
D <sup>2</sup>	۱	۳/۵۹	۳/۵۹	۰/۳۶۰۷	۰/۵۵۷۱
باقی مانده <sup>۲</sup>	۱۵	۱۴۹/۳۸	۹/۹۶		
عدم تطابق <sup>۳</sup>	۱۰	۱۴۹/۳۸	۱۴/۹۴		
خطای سامانه <sup>۴</sup>	۵	۰/۰۰۰	۰/۰۰۰		
همبستگی کل <sup>۵</sup>	۲۹	۱۱۳۲۰/۹۸			

$R^2 = ۰/۹۸۶۸$  ;  $Adjusted R^2 = ۰/۹۷۴۵$  ;  $Predicted R^2 = ۰/۹۲۴۰$  ;  $Adeq Precision = ۳۵/۰۷۳۵$



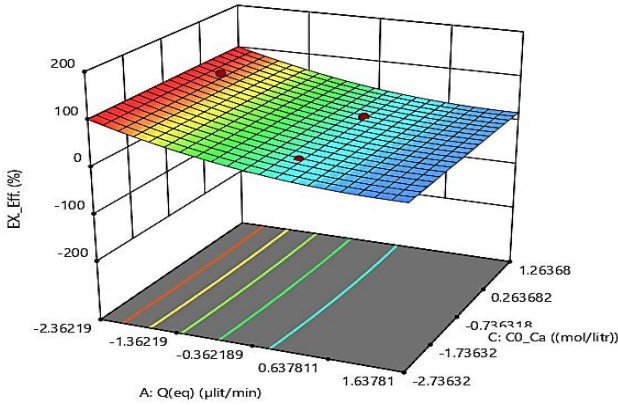
شکل ۱۰ - اثر شدت جریان فاز آبی و آلی بر روی میزان استخراج سامانه میکروفلوئیدیک

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

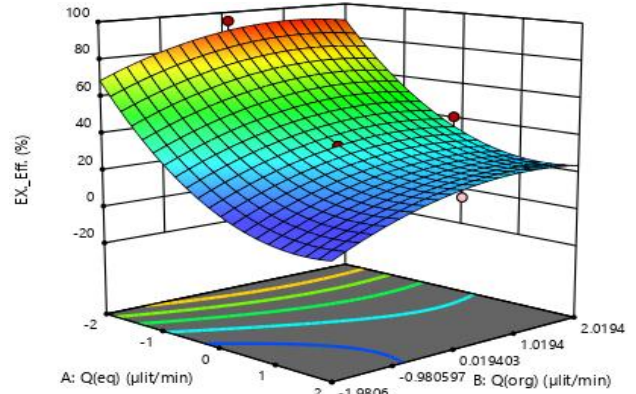
که بررسی فاکتورها به صورت جداگانه به‌طور کامل با کانتور سه بعدی و بررسی اثرهای متقابل فاکتورها بر روی پاسخ مطابقت دارد.

- (۱) Significant
- (۳) Lack of fit
- (۵) Correlation Total

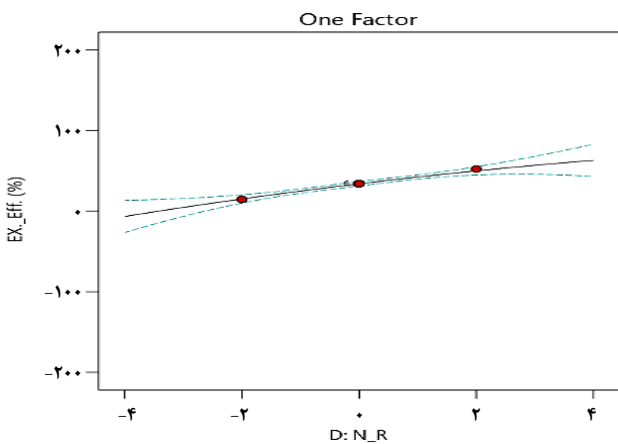
- (۲) Residual
- (۴) Pure error



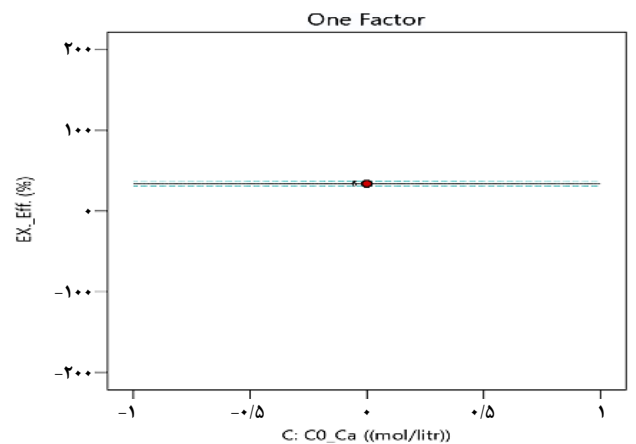
شکل ۱۳ - نمودار سه بعدی اثر غلظت کلسیم کلرید و شدت جریان فاز آلی



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



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



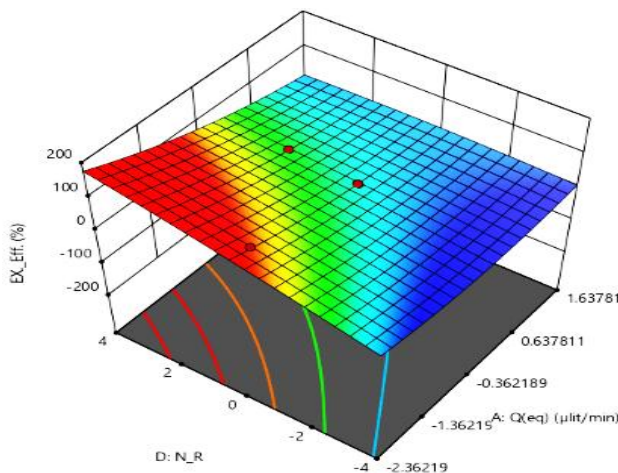
شکل ۱۲ - اثر غلظت کلسیم کلرید روی راندمان استخراج

**بررسی اثر غلظت کلسیم کلرید**

شکل ۱۲ اثر غلظت کلسیم کلرید روی راندمان استخراج کلسیم در حالی که سایر پارامترها در نقاط مرکزی ثابت شده‌اند را نشان می‌دهد. همان‌گونه 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.

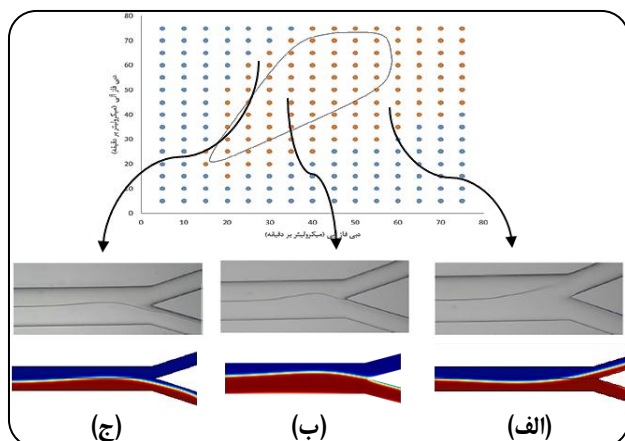
**بررسی اثر تعداد حلقه میکروکانال اسپیرال**

تعداد حلقه میکروکانال که از تعداد دور حلقه ۲ الی ۴ را مورد بررسی قرار داد شد، همان‌گونه که از بررسی تأثیر تک عاملی تعداد حلقه از شکل ۱۴ به دست آمده می‌شود مشاهده می‌شود که با افزایش تعداد حلقه، شاهد افزایش راندمان در بازده استخراجی هستیم، که این به دلیل کاهش شعاع انحنا و افزایش نیروهای مؤثر بر جداسازی و انتقال ذره‌ها از فاز آبی به فاز آلی هستیم.



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 می‌باشد.

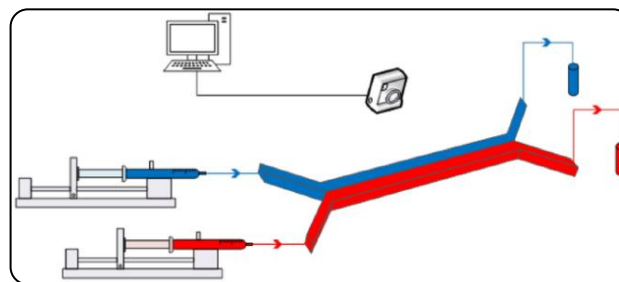


شکل ۱۷ - شبیه‌سازی عددی و اعتبار سنجی آن با کار آزمایشگاهی در نسبت شدت جریان‌های گوناگون، کسر حجمی فازها در قسمت خروجی و جدایش فازها [۱۸]

باشد فصل مشترک دو فاز تقریباً در مرکز کانال قرار دارد و امکان جدایش بیشتر می‌شود. نتیجه‌های به‌دست آمده از مقایسه پژوهش یاد شده با نتیجه‌های به‌دست آمده از شبیه‌سازی در شکل ۱۷ آورده شده است که با توجه به تطابق قابل قبول نتیجه‌های به‌دست آمده از شبیه‌سازی، امکان آنالیز جریان با استفاده از شبیه‌سازی نتیجه می‌شود.

همان‌گونه که از شکل ۱۷ استنباط می‌شود، نتیجه‌های آزمایشگاهی به‌دست آمده از کار عبداللهی و همکاران [۱۸] 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 در شدت جریان‌های گوناگون در کار آزمایشگاهی و شبیه‌سازی شباهت زیادی به یکدیگر دارند. مشخصه‌های جریان‌های به کار رفته در این پژوهش و کار عبداللهی و همکاران نیز در جدول شماره ۳ آمده است. در بحث شبیه‌سازی انتقال جرم مشخصه‌های جریانی و انتقال جرم کار آزمایشگاهی عبداللهی و همکاران [۱۸] 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 می‌باشد.



شکل ۱۶ - شمایی از میکروکانال استفاده شده توسط عبداللهی و همکاران [۱۸]

با بررسی عامل‌های مؤثر بر بازدهی و بهینه‌سازی آن‌ها، بیش‌ترین درصد بازده استخراج در شدت جریان فاز آبی  $20 \mu\text{lit}/\text{min}$ ، شدت جریان فاز آلی  $70 \mu\text{lit}/\text{min}$ ، غلظت کلسیم کلرید  $0/05 \text{ M}$  و تعداد ۴ حلقه اتفاق می‌افتد و مقدار پیش‌بینی شده برای راندمان استخراج  $74/98\%$  درصد برآورد شد.

### نتیجه‌های اعتبارسنجی و شبیه‌سازی میکروکانال حلزونی

هنگامی که دو سیال غیرقابل امتزاج وارد میکروکانال می‌شوند، 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 به‌طور معمول به ترتیب در نرخ جریان‌های پایین و بالا ایجاد می‌شود [۱۶].

شرایط عملیاتی در شبیه‌سازی مطابق با شرایط کار آزمایشگاهی عبداللهی و همکاران [۱۸] اعمال شد. در این پژوهش جداسازی یون کلسیم از محلول آبی توسط محلول آلی در میکروکانال Y-Y شکل و حلزونی شبیه‌سازی شد. میکروکانال با طول ۶ سانتی‌متر و عرض ۵۰۰ میکرومتر و عمق ۹۰ میکرومتر مطابق شکل ۱۶ در نظر گرفته شد. نتیجه‌های مربوط به هیدرودینامیک جریان در شکل ۱۷ مشاهده می‌شود.

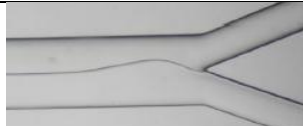

در این پژوهش، فصل مشترک دو فاز در شدت جریان‌های گوناگون، در جریان لایه‌ای بررسی شد. طبق نتیجه‌های عبداللهی و همکاران [۱۸] اگر نسبت شدت جریان فاز آبی به فاز آلی  $0/75$

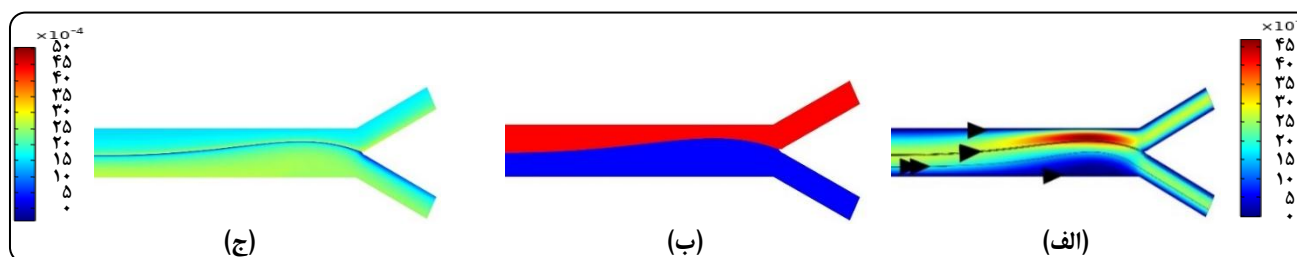


جدول ۳ - مشخصه‌های جریان‌های به کار رفته در شبیه‌سازی با روش تعیین تراز

شکل	سرعت فاز آبی (m/s)	سرعت فاز آلی (m/s)	شدت جریان فاز آبی (μlit/min)	شدت جریان فاز آلی (μlit/min)
کار شبیه‌سازی حاضر	الف	۰/۰۲۶	۰/۰۳	۳۵/۱
	ب	۰/۰۲۹۶۳	۰/۰۵۸۵۶	۴۰/۰۰۰۵
	ج	۰/۰۲۹۶۳	۰/۰۶	۴۰/۰۰۰۵
کار عبداللهی و همکاران	الف	۰/۰۲۶	۰/۰۳	>۲۰
	ب	۰/۰۲۹۶۳	۰/۰۵۸۵۶	[۲۰-۷۰]
	ج	۰/۰۲۹۶۳	۰/۰۶	[۱۰-۷۰]

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

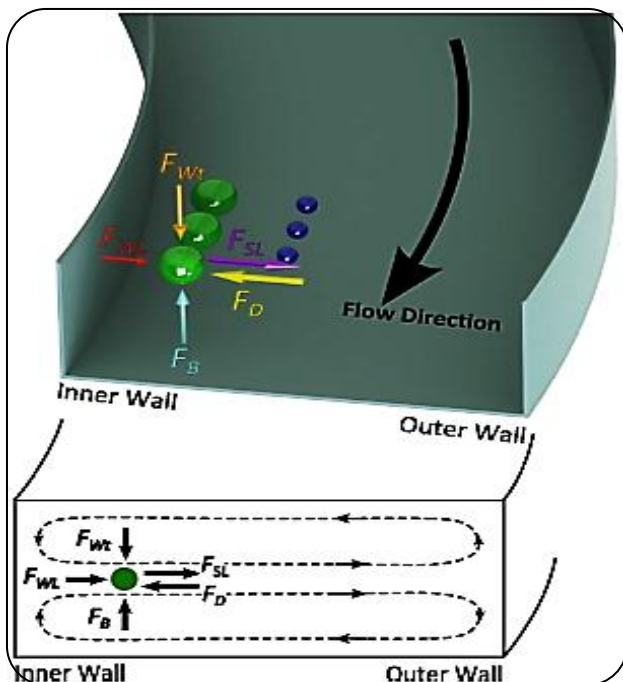
عبداللهی و همکاران [۱۸]		این پژوهش میکروکانال Y-Y شکل	
فاز آبی	فاز آلی	فاز آبی	فاز آلی
غلظت کلسیم کلرید فاز ورودی ۰/۰۰۵ مولار	غلظت کلسیم کلرید فاز ورودی ۰ مولار	غلظت کلسیم کلرید فاز ورودی ۰/۰۰۵ مولار	غلظت کلسیم کلرید فاز ورودی ۰ مولار
شدت جریان فاز آبی ۲۰ میکرولیتر بر دقیقه سرعت ۰/۰۱۴۸۲ متر بر ثانیه	شدت جریان فاز آبی ۲۸ میکرولیتر بر دقیقه سرعت ۰/۰۲۱ متر بر ثانیه	شدت جریان فاز آبی ۲۰ میکرولیتر بر دقیقه سرعت ۰/۰۱۴۸۲ متر بر ثانیه	شدت جریان فاز آبی ۲۸ میکرولیتر بر دقیقه سرعت ۰/۰۲۱ متر بر ثانیه
غلظت کلسیم کلرید فاز آبی خروجی ۰/۰۱۸۸۶ مولار	غلظت کلسیم کلرید فاز آبی خروجی ۰/۰۱۹۹۶۹ مولار	غلظت کلسیم کلرید فاز آبی خروجی ۰/۰۱۹۹۶۹ مولار	غلظت کلسیم کلرید فاز آبی خروجی ۰/۰۱۹۱۷۹ مولار
بازدهی استخراجی میکروفلوئیدیک ۶۲/۲۸٪	بازدهی استخراجی میکروفلوئیدیک ۶۲/۰۶۲٪	بازدهی استخراجی میکروفلوئیدیک ۶۲/۲۸٪	بازدهی استخراجی میکروفلوئیدیک ۶۲/۰۶۲٪
اندازه‌های کانال مورد استفاده: عرض ۵۰۰ میکرومتر، عمق ۹۰ میکرومتر، طول ۶ سانتی‌متر	اندازه‌های کانال مورد استفاده: عرض ۵۰۰ میکرومتر، عمق ۹۰ میکرومتر، طول ۶ سانتی‌متر	اندازه‌های کانال مورد استفاده: عرض ۵۰۰ میکرومتر، عمق ۹۰ میکرومتر، طول ۶ سانتی‌متر	اندازه‌های کانال مورد استفاده: عرض ۵۰۰ میکرومتر، عمق ۹۰ میکرومتر، طول ۶ سانتی‌متر
الگوی جریان			
			



شکل ۱۸ - کانتور (الف) سرعت، (ب) کسر حجمی، (ج) غلظت یون کلسیم در شبیه‌سازی هیدرودینامیک و انتقال جرم مسئله عبداللهی و همکاران [۱۸]

با توجه به این که جریان به حالت پایا رسیده است و با باریک‌تر 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 مشاهده می‌شود که فازها دقیقاً همانند با کار آزمایشگاهی با توجه به نسبت شدت جریان که دارند، از کانال خروجی مربوط به خود خارج می‌شوند و این بهترین حالت جداسازی می‌باشد. غلظت در فاز آبی با ۰/۰۰۵

هنگام استفاده از جریان‌های موازی برای تماس دو فاز، تعیین شرایطی که جداسازی فازهای غیرقابل امتزاج در میکروکانال انجام می‌شود، ضروری می‌باشد. همان‌گونه 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.



شکل ۱۹ - نیروهای اعمال شده به ذره درون کانال منحنی [۲۹]

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

### نتیجه‌گیری

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 امکان‌سنجی 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،

### جدول ۵ - شرایط عملیاتی و نتیجه‌های کار شبیه‌سازی میکروکانال حلزونی

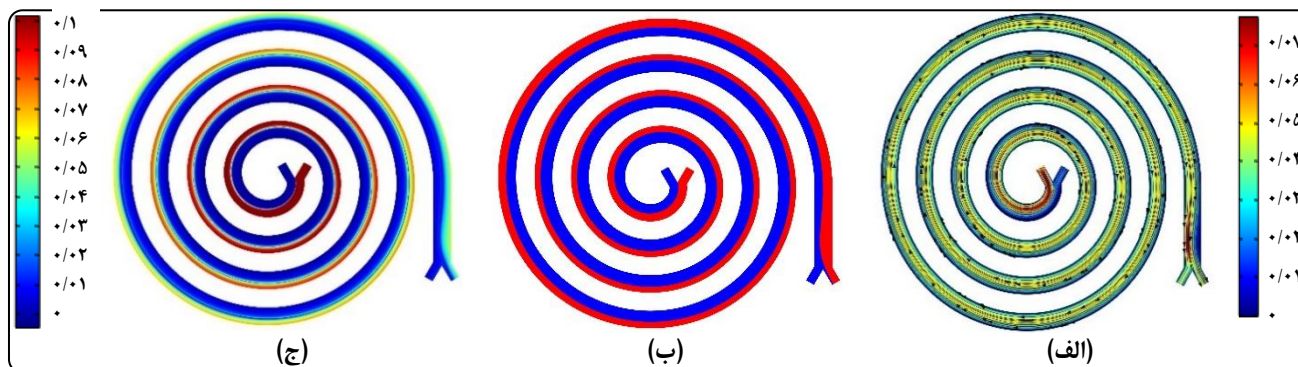
نتیجه‌های میکروکانال حلزونی شکل	
فاز آبی	فاز آلی
غلظت کلسیم کلرید فاز ورودی ۰/۰۰۵ مولار	غلظت کلسیم کلرید فاز ورودی ۰ مولار
شدت جریان فاز آبی ۲۰ میکرولیتر بر دقیقه سرعت ۰/۰۱۴۸۲ متر بر ثانیه	شدت جریان فاز آبی ۲۸ میکرولیتر بر دقیقه سرعت ۰/۰۲۱ متر بر ثانیه
غلظت کلسیم کلرید فاز خروجی ۰/۰۰۱۴۱۰ مولار	
بازدهی استخراجی میکروفلوئیدیک ۷۱/۷۹٪	
اندازه‌های میکروکانال: عرض ۵۰۰ میکرومتر، طول ۶ سانتی‌متر (چهار حلقه)	

مولار وارد شده و با انجام فرایند انتقال جرم که تنها به روش سازوکار نفوذ هست، مشاهده می‌شود که غلظت در کانال خروجی فاز آبی در بازه ۰/۰۰۲ مولار خارج می‌باشد. در ادامه برای بهبود انتقال جرم همین مسئله در میکروکانال حلزونی شبیه‌سازی و مقایسه می‌شود. شرایط عملیاتی و بازدهی استخراج به‌دست آمده از شبیه‌سازی در این میکروکانال در جدول شماره ۵ آمده است.

هنگامی که سیال در کانال خمیده در جریان است زیر تأثیر نیروی گریز از مرکز قرار می‌گیرد (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 می‌آید 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 می‌شود و در متمرکز شدن ذره‌ها خیلی مؤثر می‌باشد [۴۹، ۴۸]. به طور کلی اگر یک ذره در کانال خمیده در مسیر جریان جابه‌جا شود، نیروی بالابر برشی ( $F_{sl}$ ) به علت جریان برشی سهموی، نیروی برشی دیواره ( $F_w$ )، نیروی درگ دین به علت اختلاف سرعت در کانال خمیده ( $F_D$ )، نیروی وزن ذره معلق در جریان ( $F_{wt}$ ) و نیروی شناوری را تجربه می‌کند [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

(۱) transport of diluted species



شکل ۲۰ - کانتور (الف) سرعت (ب) کسرحجمی (ج) غلظت یون کلسیم در شبیه‌سازی هیدرودینامیک و انتقال جرم میکروکانال حلزونی

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

تاریخ دریافت: ۱۴۰۰/۰۱/۱۷؛ تاریخ پذیرش: ۱۴۰۰/۰۷/۱۹

مدل ارائه شده، مناسب ارزیابی می‌شود. با در نظر گرفتن نتیجه به‌دست آمده شده و دقت مناسب اعتبار سنجی، برای بهبود و مطالعه تأثیر هندسه میکروکانال، هندسه به حلزونی شکل تغییر داده شد. به منظور مطالعه عامل‌های مؤثر بر فرایند، از طراحی آزمایش روش رویه پاسخ - طرح مکعب مرکزی<sup>۱</sup> استفاده شد. چهار عامل شدت جریان فاز آبی، شدت جریان فاز آلی، غلظت کلسیم کلرید 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).

(۱) Response Surface Methodology - Central Composite Design

- [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., Sundén 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., Sundén 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).

- [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 Fluidic 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).



- [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 Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/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).