



بررسی عددی تأثیر گسترش عمودی هندسه غشاء بر جداسازی ذرات غیرکلوئیدی از جریان

احسان داورپناه^۱، علیرضا تیمورتاش^{۲*}

۱- دانشجوی دکتری، مهندسی مکانیک، دانشگاه فردوسی مشهد، مشهد

۲- استاد، مهندسی مکانیک، دانشگاه فردوسی مشهد، مشهد

* مشهد، صندوق پستی 91775-1111 teymourtash@um.ac.ir

چکیده

استفاده از هندسه‌های مختلف غشاء برای جداسازی ذرات در فرایندهای تصفیه یا تغليط، مورد توجه گروهی از محققین قرار گرفته است. هر تغییری در هندسه غشاء که باعث تغییر در شناس ذرات برای برخورد و چسبیدن به سطوح سوراخها شود، می‌تواند نتیجه فرایند جداسازی را به شکل قابل توجهی دستخوش تغییر نماید. در این تحقیق با استفاده از روش شبکه بولتزمن در ترکیب با یک مدل جامع برخورد، مشخصه‌های رسواب بر هندسه توسعه یافته غشاء بررسی شده است. توسعه غشاء به صورت دو سطح عمودی سوراخ‌دار گسترش یافته در طرف جریان در نظر گرفته شده است. در این حالت غشاء در دو بازه زمانی متفاوت "رسوب پیش‌رونده" و "توسعه کیک جرمی" عمل می‌کند. در بازه اول، پیکره‌بندی غشاء در بعد طول به سه محدوده بسته، قعال، و غیر قعال تقسیم شده و رسواب ذرات در محدوده قعال سبب جابجایی مزد روسب شده و در نتیجه محدوده‌های قعال به سنته و غیرفعال به قعال تبدیل می‌گردد؛ همچنین در بازه زمانی دوم و پس از سنته شلن عمدۀ مسیرهای جریان، انسداد غشاء با رشد کیک جرمی در سراسر طول المان جداساز تقویت می‌شود. نمایه‌های به دست آمده برای منحنی شار جرمی نشان‌دهنده یک آهنج اولیه کاکش شار جرمی با تقریب منفیست که بیش از نیمی از دوره عملکرد غشاء را در بر می‌گیرد و در مقایسه با هندسه‌های توسعه یافته، می‌تواند به شکل قابل توجهی، عبور حجم بیشتری از جریان را ممکن‌سازد.

اطلاعات مقاله

مقاله پژوهشی کامل
درايفت: ۱۹ دی ۱۳۹۶
پذیرش: ۱۸ اسفند ۱۳۹۶
ارائه در سایت: ۲۴ فروردین ۱۳۹۷
کلید واژگان:
غشاء
رسوب پیش رونده
کیک جرمی
شبکه بولتزمن
ذرات غیرکلوئیدی

Numerical Study on the Impact of Pore Geometry Extension on Dead-Ended Fouling Characteristics of Non-Colloidal Particles

Ehsan Davarpanah, Ali Reza Teymourtash*

Department of Mechanical Engineering, Ferdowsi university of Mashhad, Mashhad, Iran

* P.O.B. 91775-1111, Mashhad, Iran, teymourtash@um.ac.ir

ARTICLE INFORMATION

Original Research Paper
Received 09 January 2018
Accepted 09 March 2018
Available Online 13 April 2018

Keywords:
Membrane
progressive fouling
cake formation
lattice Boltzmann
non-colloidal

ABSTRACT

Applying membranes with especial geometries and fouling characteristics has been an area of research and a subject of interest in membrane science community. While a considerable part of fouling happenings are originated from chaotic roots such as Brownian motions, the remainders can be scheduled to approach on desired filtration features. Here in this study the somehow invisible features of progressive fouling which is the case for novel micro-engineered membranes was realized in some details. The problem of progressive fouling was considered as a result of dead-ended filtration of non-colloidal particles over a vertically extended pore geometry. It was shown that, in this filtration apparatus, due to a serialized activation and deactivation of flow passages, progressive fouling can change its seat with other more flow resistive classical types of surface and pore blockings and control filtration path more apparently. Results was considered for different amounts of pore extension and porosities. It was found that employing an especial set of pore extension length and porosity make it feasible to derive manageable filtration processes with high levels of purification and permeation performances.

[1]. آنچه همواره استفاده صنعتی از غشاء در فرایندهای جداسازی را دچار چالش جدی می‌نماید، رسواب ذرات بر سطح^۱ و فضای درون سوراخ‌های^۲ که در نتیجه شار عبوری به صورت نمایی کاکش یافته و در نتیجه کیفیت عملکردی فرایند جداسازی به سرعت کاکش می‌یابد [2]. پدیده تشکیل و رشد رسواب بر نقاط سطح غشاء، پدیده‌ای پیچیده است که گستره ای از

1- مقدمه

استفاده از غشاء^۳ برای تصفیه^۴، جداسازی^۵، و یا تغليط^۶ جریان‌های حاوی ذرات در حوزه‌های متنوعی از تکنولوژی‌ایم از فرایندهای شیمیایی، بیوتکنولوژی، داروسازی، و فرایندهای زیست محیطی رواج عام یافته است

⁵ Membrane fouling
⁶ Pore narrowing

¹ Membrane

² Purification

³ Filtration

⁴ Flow concentration

به جزء که در آن‌ها پارامترهای مدل براساس چند آزمایش قابل اعتماد تنظیم شده و کلیت مدل در راستای حصول به درکی کلی از جزئیات رسوب مورد استفاده قرار می‌گیرد، جزئیات بیشتری از شکل و زمان‌بندی تشکیل رسوبات مختلف قابل محاسبه است. با این حال در این سبک شبیه‌سازی هم در ابتدا لازم است پارامترهای مدل به صورت تابعی از منحنی شار جریان به دست آمده از آزمایش تنظیم شوند.

روش دیگر برای تعیین شکل و زمان‌بندی رسوبات، بر استفاده از الگوریتم‌های متعارف در دینامیک سیالات محاسباتی مانند روش‌های حجم کترول⁷ و المان محدود⁸ بنا شده است. با این حال، پیچیدگی‌های حاصل از تعامل با ذرات جامد متحرک در یک حل دو طرفه که دینامیک سیال و ذره یکدیگر را اصلاح می‌کنند، استفاده از روش‌های شبیه‌سازی متعارف در دینامیک سیالات محاسباتی، جداسازی را دچار محدودیت‌های عملی جدی نموده است. فرایندهای عددی توزیع و باز توزیع نقاط محاسباتی⁹ در فضای خالی بین ذرات متحرک، معمولاً نیازمند استفاده از الگوریتم‌های محاسباتی سنگینی هستند که عمدتاً در طی محاسبات موفق عمل نمی‌کنند [14]. علاوه بر این، وجود مقیاس‌های طولی متنوع در فرایندهای میکروسیالی¹⁰، لزوم توزیع نقاطی به اندازه کافی ریز در نزدیکی مرزهای جامد را ایجاد می‌کند و در عمل منجر به تشکیل حجم گستردگی از نقاط و کاهش شدید سرعت محاسبات می‌گردد.

با استفاده از روش‌های محاسباتی مزوسکوپیک¹¹ می‌توان پلی بین مقیاس‌های مختلف طولی در مسئله ایجاد کرد [16]. در این بین متداول‌ترین روش توسعه یافته در سال‌های اخیر، روش شبکه بولتزمن¹² است که در آن می‌توان بدون نیاز به باز توزیع نقاط محاسباتی، اثر مرزهای جامد متحرک بر جریان را در محاسبات لحاظ نمود [17]، این مشخصات علاوه بر سادگی معرفی اثرات متنوع فیزیکی، در قالب معادله برخورد-پخش شبکه بولتزمن، امکان راه اندازی فرایندهای حل موازی را سبب شده است. برخی از محققین از روش شبکه بولتزمن در جهت تعیین فیزیک نشست یا رسوب ذرات و کیفیت جداسازی همت گمارده‌اند. ونگ و همکارانش [18]، در تلاش برای شبیه‌سازی نشست ذرات معلق در جریان هوا بر سطح فیلترهای فیبرین از شبکه بولتزمن و یک روش آماری به ترتیب برای محاسبه جریان، و محاسبه انتقال ذرات جامد بهره گرفته‌اند. در کاری دیگر به بررسی اثر پیکره‌بندی و شکل چیدمان موضع فیبرین استوانه‌ای تصفیه کننده بر کیفیت جداسازی ذرات و افت فشار در طول محیط جداسازی همت گمارده شده است [19]. همچنین فو و همکارانش [20]، اثر نفوذ و انعکاس فشار آکوستیکی بر نشست ذرات جامد معلق را با استفاده از یک الگوریتم شبکه بولتزمن دو مرحله‌ای و حل لاغرانژی مسیر ذرات بررسی کرده‌اند. در کار دیگر و با استفاده از یک مدل اسازی یک طرفه که در آن تنها اثر جریان را بر مسیر ذرات لحاظ شده است تانگ و همکارانش [21]، توانسته اند چگونگی رشد مرز جامد در اثر چسبیدن ذرات به سطح و در نتیجه تعییر خطوط جریان را ترسیم کنند؛ در این تحقیق دینامیک جریان و ذرات با استفاده از شبکه بولتزمن در ترکیب با یک روش حجم محدود محاسبه شده‌اند. کای و زنگ [22]، با استفاده از یک الگوریتم حل دو طرفه اثر پارامترهای چسبیدگی و اندازه ذرات بر میزان نشست ذرات و افت فشار در طول المان استوانه‌ای تصفیه هوا را بررسی کرده

نیروهای هیدرودینامیکی، حرکت‌های براونی، و اثرات ناشی از آب دوستی یا آب‌گریزی المان‌های غشاء و ذرات جامد در زمان‌بندی تغییرات هندسی-زمانی آن نقش تعیین کننده‌ای دارند [3].

هیدرودینامیک فراینده جداسازی به جز در مواردی خاص که فرایند جداسازی از یک ساز و کار اجرایی پویا بر خوردار است [4]، همواره تابعی از پارامترهای عملکردی، مانند اختلاف فشار، حالت جریان، اعم از جریان عمودی و یا موازی با سطح، و هندسه غشاء می‌باشد. همچنین میزان اهمیت اثرات ناشی از آب دوستی یا آب‌گریزی المان‌های جامد و حرکت‌های براونی در فراینده جداسازی ذرات، تابعی از اندازه ذره هستند که در تعیین دینامیک ذرات کلوبیدی (با اندازه‌ای کوچکتر از یک میکرومتر) باید در نظر گرفته شوند [5].

هندسه غشاء (شکل، ساختار، و چگونگی توزیع سوراخ‌ها)، الگوی تغییرات میدان جریان در ابتدا و حین فراینده جداسازی را تعیین می‌کند. بنابراین با توجه به نقش عمده هندسه غشاء در تعیین مشخصه‌های فراینده جداسازی، تعداد قابل توجهی از تحقیقات پژوهشگران در این حوزه از دانش مهندسی به بررسی اثر هندسه بر مشخصه‌ها و کیفیت فراینده جداسازی تعلق گرفته است. هو و زیدنی اثر هندسه سطح بر مشخصه‌های رسوب ذرات پروتئینی را بررسی کرده‌اند [6]. آن‌ها در تحقیق خود از سه نوع هندسه سطح دارای سوراخ‌های موازی غیرمرتبط، سطح متخلخل همگن¹³، و انواعی از غشاء‌های ناهمگن از جهت توزیع تخلخل و مسیر عبور جریان¹⁴، استفاده کرده‌اند. هوانگ و لین [7]، با استفاده از سه نوع غشاء با ساختارهای سلولی¹⁵، شانه‌دار¹⁶، و غشاء دارای سوراخ‌های موازی هم فاصله¹⁷، اثر محیط عبور جریان بر کیفیت رسوب در جریان موازی با سطح را بررسی نموده‌اند. در دیگر تلاش برای درک اثر سطح جداساز بر کیفیت جداسازی و به منظور نیل به هندسه‌ای ترکیبی با بیشترین راندمان تصفیه، زیدنی و هو [8]، عملکرد غشاء متخلخل همگن، و غشاء دارای سوراخ‌های موازی هم فاصله در ترکیب با نوع ذرات معلق، محققین را بر آن داشته تا ضمن رشد دانش جداسازی و تکنیک‌های ساخت سطوح جداساز همچنان به پژوهش‌هایی در این زمینه بپردازند؛ به طور مثال اثر اندازه سوراخ و شکل آن بر رسوب ذرات زیست گونه و انسداد غشاء، در یک جداسازی موازی سطح، مورد توجه دیزجه و همکارانش قرار گرفته است [9].

پژوهش‌های صورت گرفته چه در زمینه بررسی اثر هندسه، و چه دیگر پارامترهای مؤثر بر کیفیت رسوب و کاهش عملکرد جداسازی، عمدتاً به صورت تجربی و به ندرت در قالب شبیه‌سازی‌های عددی پیگیری شده‌اند. روش‌های شبیه‌سازی جداسازی را می‌توان در دو گروه عمدۀ مدل‌های شبکه‌ای گسترش¹⁸ [11,10]، و مدل‌های متعارف در دینامیک سیالات محاسباتی [13,12]، دسته‌بندی کرد. اولین کار ارائه شده در زمینه مدل‌های شبکه‌ای به وسیله‌ای [10] ارائه شده است. در این روش، هندسه غشاء به صورت یک شبکه سلولی تجزیه شده و به هر سلول یک سوراخ اختصاص داده می‌شود. پس از آن در هر گام محاسباتی، رشد رسوب بر سطح، براساس یک مدل آماری تعیین و بسته به شکل و اندازه رسوب، شار عبوری از غشاء تعیین گردیده است. به این ترتیب در این رویکرد محاسباتی، نسبت به روش‌های مدل‌سازی ریاضی کل

⁷ Control volume based methods (CVM)

⁸ Finite element models (FEM)

⁹ Meshing and remeshing schemes

¹⁰ Mesoscopic methods

¹¹ Lattice Boltzmann method (LBM)

¹ Isotropic membrane

² Asymmetric membrane

³ Durapore membrane

⁴ MF-Millipore membrane

⁵ Isopore membrane

⁶ Discrete network models

کرده یا سطح غشاء باشد. این برخوردها زمانی که منجر به ساکن شدن ذره و رشد رسوب شود، مز جریان را تغییر داده و در نتیجه میزان شار جریان عبوری از غشاء را دچار تغییر خواهد کرد. از این‌رو، لازم است تا اثرات مقابله ذرات متوجه و جریان لحظه شود؛ بنابراین شبیه‌سازی فرایند جداسازی معادل با احرای یک حل دوطرفه خواهد بود؛ در این تحقیق الزام محاسبه اثرات دوطرفه هیدرومکانیکی جریان-ذرات، با استفاده از روش شبکه بولتزمن در فضای دو بعدی و با توزیع مربعي نقاط محاسباتی محقق شده است.

در روش شبکه بولتزمن پارامترهای جریان براساس تغییرات زمانی ممان‌های ذرات مجازی که محدود به جایجایی در جهات معنی هستند (جهات شبکه، در ادامه مشخص شده با زیرنویس k) تعیین می‌شود. در "شکل 1a" نمونه‌ای از یک شبکه دو بعدی با ۹ جهت حرکت ذرات مجازی (D2Q9)، به نمایش در آمده است. معادله تغییرات زمانیتابع توزیع ذرات مجازی (تابع $f = f(\vec{r}, t)$ با زمان به شکل رابطه (۱) می‌باشد [۲۷].

$$f_k(\vec{r} + \vec{e}_k \delta t, t + \delta t) = f_k^*(\vec{r}, t) = \\ f_k(\vec{r}, t) - \frac{\delta t}{\tau} \left(f_k(\vec{r}, t) - f_k^{eq}(\vec{r}, t) \right) + w_k \frac{\vec{F} \cdot \vec{e}_k}{c_s^2} \quad (1)$$

در رابطه (۱)، تابع f_k ، مبین مقدار تابع توزیع در جهت k ام شبکه است؛ به علاوه،

$$W_k = \begin{cases} \frac{4}{9}; & k = 0 \\ \frac{1}{9}; & k = 1-4 \\ \frac{1}{36}; & k = 5-8 \end{cases} \quad (2)$$

تابع وزن در جهات شبکه است که به هر جهت شبکه یک سرعت مشخص، v_k ، به صورت رابطه (۳) اختصاص داده شده است.

$$\vec{e}_k = \begin{cases} (0, 0) & ; k = 0 \\ (\pm c, 0) & ; k = 1, 3 \\ (0, \pm c) & ; k = 2, 4 \\ (\pm c, \pm c) & ; k = 5-8 \end{cases} \quad (3)$$

در رابطه (۱)، یک ضریب تخفیف زمانی^۵ و از طریق اعداد بی‌بعد به فیزیک مسئله حقیقی ارتباط پیدا می‌کند. همچنین^۶، سرعت شبکه بولتزمن و برابر با $\sqrt{1/3}$ ، پارامتر \vec{F} ، بردار چگالی نیروی خارجی، و $c = \delta x / \delta t$ ، سرعت انتقال ذرات مجازی می‌باشد، که δx و δt ، به ترتیب گام مکانی و گام زمانی بی‌بعد در فضای محاسباتی شبکه بولتزمن هستند.

دو پارامتر اصلی جریان تراکم‌ناپذیر، یعنی فشار و سرعت به ترتیب برابر با ممان‌های صفرم و یکم تابع توزیع می‌باشند که در رابطه (۴) آمده است.

$$p = c_s^2 \sum f_k \quad (4\text{-الف})$$

$$\vec{u} = \frac{c_s^2}{p} \sum \vec{e}_k f_k \quad (4\text{-ب})$$

ارتباط بین پارامترهای جریان در شبکه بولتزمن یعنی τ (برابر با $(68t_{lb} + 1)/2$)، δx و \vec{F} و معادل آن‌ها در فضای حقیقی از طریق برابری اعداد بی‌بعد فرود (Fr)، اویلر (Eu)، و رینولدز (Re)، روابط (۵-الف) تا (۵-ج)، و رابطه بین اختلاف فشار و اختلاف چگالی در آحاد شبکه بولتزمن یعنی رابطه (۵-د) تعیین می‌شود.

$$\left(\frac{u}{\sqrt{gD}} \right)_{real} = \left(\frac{u}{\sqrt{gD}} \right)_{lb} \quad (5\text{-الف})$$

$$\left(\frac{\Delta p}{\rho u^2} \right)_{real} = \left(\frac{\Delta p}{\rho u^2} \right)_{lb} \quad (5\text{-ب})$$

$$\left(\frac{uD}{\vartheta} \right)_{real} = \left(\frac{uD}{\vartheta} \right)_{lb} \quad (5\text{-ج})$$

⁵ Relaxation time

اند. کرومکمپ و همکارانش [۲۳]، به جهت تعیین نمایه‌های غلظت رسوب، در مقابل ارتفاع از سطح، و ضخامت کیک جرمی، در برابر طول، از روش شبکه بولتزمن بهره گرفته‌اند. با این حال در این شبیه‌سازی دو بعدی، اثرات مقابله ذرات و جریان به طور غیرمستقیم و در قالب معادله پخش-انتقال جرم، اعمال شده است. برنس و همکارانش [۲۴] در جستجوی هندسه بهینه سوراخ و با اجرای یک شبیه‌سازی یک طرفه سه بعدی، چگونگی نشست تک ذره کروی بر کوریدورهای سوراخ را بررسی کرده‌اند. به‌منظور بررسی اثر برخورد ذرات بر مشخصه‌های ریولوزی سیال حامل، اعم از ضریب نفوذ و لزجت سیال، کرومکمپ و همکارانش [۲۵]، دینامیک برخورد را بعنوان تابعی از اثر نیروی فیلم جریان لزج بین دو ذره و نیروی مکانیکی برخورد که اثر آن در قالب یک نیروی هوک لحظه شده است در نظر گرفته‌اند. نتایج این تحلیل، یعنی تعیین ضریب نفوذ و لزجت جریان ذره دار، همچنان در جهت بررسی ضمنی اثر ذرات بر جریان قابل استفاده است؛ در این روش مدل‌سازی برخورد، اثرات مؤلفه مماسی برخورد بر دینامیک ذرات برخورد کننده قابل احصاء نیست و این در حالیست که برای محاسبه دقیق برخوردهای مورب که عمدۀ برخوردهای دوتایی در جداسازی را شامل می‌شوند، لازم است تا فیزیک برخورد با درک همه شرایط ممکن و اعمال اثرات فیزیکی وابسته به هر کدام به شکل جامعی مدل‌سازی شود [۲۶].

در این تحقیق اثر توسعه هندسه غشاء در محیط جریان بر مشخصه‌های کیفی فرایند جداسازی بررسی می‌شود. هندسه سطح توسعه یافته به صورت دو صفحه موازی سوراخ دار عمود بر سطح غشاء در نظر گرفته شده است. نشان داده شد که کیفیت عملکرد غشاء توسعه یافته، با امکان ایجاد مکانیزم رسوب پیشونده، تابعی از تعداد سوراخ‌های صفحات عمودی و نسبت اندازه ذره به سوراخ می‌باشد. در این‌جا، به‌منظور انجام شبیه‌سازی از یک مدل شبکه بولتزمن در ترکیب با یک مدل برخورد استفاده شده است. همچنین به جهت تبدیل نتایج بی‌بعد حاصل از محاسبات به فضای حقیقی متناظر، یک روش نگاشت معرفی شده است. در بخش بررسی اعتبار نشان داده شده است که نگاشت نتایج عددی به خوبی با نتایج آزمایشگاهی شار جریان-زمان متناظر مطابقت دارد و حل ارائه شده برای یک هندسه خاص می‌تواند مستقل از تنظیم پارامتر و بی‌نیاز از نتایج آزمایشگاهی در جهت تخمین دقیق فرایند جداسازی مورد استفاده قرار بگیرد. از روش عددی برای شبیه‌سازی مسئله موردنظر در این مقاله در شرایطی استفاده شده که جریان حامل ذرات غیرکلولئیدی می‌باشد؛ بنابراین از اثرات نیروهای الکترواستاتیکی سطح و نیروهای براوونی صرف‌نظر شده است.

2- روش عددی: شبکه بولتزمن-مدل برخورد

2-1- روش شبکه بولتزمن در محاسبه جریان غیرکلولئیدی

در جداسازی عمود بر سطح، با اعمال اختلاف فشار در طرفین غشاء، جریان پوازی آرام در مجاری غشاء شکل می‌گیرد. در این حالت، فیزیک فرایند جداسازی را می‌توان حاصل از جایجایی ذرات به طرف غشاء و نشست بر سطح^۱، پستن کامل و رویدی^۲، انسداد تراوای و درودی (انسداد میانه)^۳، و تنگ نمودن مسیر جریان در مجاری (انسداد استاندارد)^۴ دانست.

برخلاف حرکت آزاده ذرات در جهت جریان، انتقال ذره در نزدیکی سطح جداساز، ممکن است همراه با برخورد با دیگر ذرات از پیش رسوب

¹ Surface fouling

² Complete blocking

³ Intermediate blocking

⁴ Standard filtration

$$\vec{F}_b \left(\vec{r}_b, t + \frac{1}{2} \delta t \right) = \frac{\delta \vec{x}^3}{\delta t} \left[2f_b^*(\vec{r}, t) - \frac{2w_k \rho_0 \vec{u}_b \cdot \vec{e}_k}{c_s^2} \right] \vec{e}_k \quad (9)$$

بنابراین نیرو و گشتاور هیدرودینامیکی کل وارد بر جسم جامد متحرک عبارتند از (رابطه‌های 10-الف) و (10-ب):

$$\vec{F}_H = \sum_b \vec{F}_b \quad (10-\text{الف})$$

$$\vec{M}_H = \sum_b \vec{r}_b \times \vec{F}_b \quad (10-\text{ب})$$

2-2-2- دینامیک برخورد

چگونگی رشد و تشکیل رسوبات غیرکلوبیدی تابعی از کیفیت برخورد است که خود برآیند نهایی اثر نیروهای سطحی (ناشی از میزان آب دوستی، آب گزینی و اثر الکتریکی سطح)، نیروهای خارجی (در صورت وجود و اهمیت در برابر سایر نیروها)، و نیروهای هیدرومکانیکی خواهد بود [29].

در شرایط جریان غیرکلوبیدی، در بین نیروهای سطحی، نیروی الکترواستاتیکی سطح به لحاظ بزرگی یک یا دو مرتبه کوچکتر از نیروهای هیدرومکانیکی و دیگر نیروهای سطحی و از این‌رو، قابل صرف‌نظر کردن می‌باشد؛ همچنین در بین نیروهای حاصل از اثرات آب دوستی و آب گزینی سطح، یعنی نیروی غیرقطبی و اندروالسی، \vec{F}_{vdW} ، و نیروی قطبی اسید پایه لوپیس، \vec{F}_{AB} ، در شرایطی که درجه اسیدیته آب صفر باشد (آب معمولی)، می‌توان از نیروی F_{AB} در محاسبات صرف‌نظر کرد. بنابراین مسئله حل و بررسی دینامیک برخورد ذرات غیرکلوبیدی را می‌توان به رقابت بین اثر نیروهای هیدرومکانیکی و نیروی واندروالسی فروکاست.

نیروی هیدرومکانیکی برخورد، برابر با مجموع اثر نیروهای هیدرودینامیکی حاصل از جریان در فضای بین دو ذره و خارج از آن، و نیروهای مکانیکی حاصل از برخورد سطوح جامد، است.

در شرایط برخورد دو ذره، حداکثر میزان نزدیکی دو سطح جامد برابر اندازه زیری سطوح برخورد خواهد بود. عدد نودسن زیری (نسبت اندازه متوسط زیری و پوش آزاد مولکول‌های سیال حامل) در یک بازه پوسته، برای زیری‌های بسیار کوچک (با اندازه‌های قابل مقایسه با فاصله آزاد سیلر مولکول‌های سیال)، تا زیری‌های بزرگتر (تا حد پوش آزاد مولکولی سیال)، تغییر می‌کند؛ بنابراین گام نقاط محاسباتی همواره چند مرتبه بزرگتر از زیری ذرات بوده و در برخورد، در فضای بین دو ذره، تعداد کافی نقاط محاسباتی برای تشكیل جریان و در نتیجه تعیین اثر نیروی جریان لزج، وجود نخواهد داشت. در این شرایط باستی از یک حل تحلیلی برای تعیین اثر نیروی جریان لزج بین دو سطح بهره گرفت. کولی و اونیل [30] نشان دادند که در شرایط برخورد، نیروی هیدرودینامیکی، \vec{F}_H ، و گشتاور هیدرودینامیکی، \vec{M}_H ، وارد بر سطوح برخورد با دقت بالایی برابر با نیروی لایه لزج، R_{lub} ¹، و گشتاور لایه لزج، \vec{M}_{lub} ، بین سطوح می‌باشند. بنابراین تعیین نیرو و گشتاور هیدرودینامیکی حاصل از جریان لایه لزج، با استفاده از یک مدل تحلیلی جامع ضروری است. در این تحقیق با استفاده از مدل بازنویسی شده کولی و اونیل بهوسیله سیمئونو و کالتونی [31]، نیرو و گشتاور حاصل از جریان فیلم لزج به دام افتاده در فاصله بین سطوح زیر محاسبه می‌شود. ورودی‌های این مدل، با توجه به "شکل 1b"، فاصله دوسرخ (δ)، سرعت‌های ذرات برخورد کننده و شعاع ذرات برخورد کننده، R ، می‌باشند.

$$\Delta p_{lb} = c_s^2 \Delta \rho_{lb} \quad (5)$$

در این روابط، u ، یک سرعت مشخصه، g ، شتاب ثقل، D ، یک طول مشخصه (اندازه ذره یا اندازه سوراخ)، Δp ، اختلاف فشار در دو طرف غشاء، ϑ ، لزجت سینماتیکی، و ρ ، چگالی سیال حامل هستند. بنابراین برای بارگذاری محاسبات به Δp_{lb} و D_{lb} (طول در واحد نقاط شبکه) به ترتیب یک مقدار کوچک در مراتب ای بین ۰ تا ۰.۰۱ و عددی بزرگتر از ۶.۵ اختصاص داده می‌شود، به نحوی که براساس مقادیر معلوم D_{real} ، Δp_{real} ، ϑ_{real} ، و ضریب تخفیف τ ، به عددی در حد امکان نزدیک به ۱ و نه بزرگتر از آن می‌کند.

1-1-2- مرزهای ورود و خروج

کیفیت مرزهای ورود و خروج سیال بسته به نوع مسئله می‌تواند از انواع مرز تکرار، دیریکله، و یا نویمن باشد. اعمال مرزهای نویمن و دیریکله در یک حالت کلی با فرض عدم تغییرات در جزء غیرتعادلی تابع توزیع مرزی می‌تواند صورت گیرد. در این روش مطابق با رابطه (6)، مقدار مجهول تابع توزیع در مرز (با مختصات \vec{r}_b) از مقدار معلوم تابع توزیع غیرتعادلی در نزدیکترین نقطه سیالی درونی (با مختصات \vec{r}_{nf}) تعیین می‌شود.

$$f_k^b(\vec{r}_b, t) = \bar{f}_k^{eq}(\vec{r}_b, t) + (f_k(\vec{r}_{nf}, t) - f_k^{eq}(\vec{r}_{nf}, t)) \quad (6)$$

در این رابطه \bar{f}_k^{eq} برای مرزهای فشاری و سرعتی به ترتیب از روابط (7-الف) و (7-ب)، محاسبه می‌شود.

$$\bar{f}_k^{eq}(\vec{r}_b, t) = \bar{f}_k^{eq}(\rho_b, \vec{u}_{nf}) \quad (7-\text{الف})$$

$$\bar{f}_k^{eq}(\vec{r}_b, t) = \bar{f}_k^{eq}(\rho_{nf}, \vec{u}_b) \quad (7-\text{ب})$$

برای توضیحات بیشتر می‌توان به مرجع [28] مراجعه کرد.

2-2-2- مرز جامد-سیال

به منظور تعیین اثر مرز جامد متحرک یا ساکن، لد [27] اصلاح توزیع ذرات شبکه در برخورد با یک مرز جامد را در قالب رابطه (8)، ارائه نموده است.

$$f_{k'}^{\text{new}}(\vec{r}, t + \delta t) = f_k^*(\vec{r}, t) - \frac{2w_k \rho_0 \vec{u}_b \cdot \vec{e}_k}{c_s^2} \quad (8)$$

در این رابطه، \vec{r} بردار موقعیت مکانی نقطه سیالی همسایه مرز جامد است به نحوی که به ازای یک گام جابجایی در جهت k ، یعنی $(\vec{r} + \vec{e}_k)$ ، وضعیت از حالت نقطه سیالی به وضعیت جامد تغییر یابد؛ زیرنویس b ، نمایانگر نقطه جامد مرزی و جهت k' ، قرینه جهت k نسبت به مرکز شبکه، می‌باشد.

به منظور اطلاع بیشتر از جزئیات مرتبط با اعمال اثر مرزهای جامد ساکن و متحرک، و چگونگی توسعه روش شبکه بولتزمن ایزوترمال به روش شبکه بولتزمن ترمال جهت اعمال اثراتی مانند جریان‌های براونی می‌توان به [27] مراجعه کرد.

2-2-2- تعیین دینامیک ذره جامد

1-2-2- دینامیک ذره آزاد

در این کار بر شبیه‌سازی رسوب جریان رقيق ذرات لاتکس با چگالی برابر با چگالی آب و اندازه‌های بزرگتر از ۱ میکرومتر (ذرات غیرکلوبیدی)، تمرکز شده است. بنابراین صرف‌نظر از اثر نیروهای وزن، و شناوری، تنها نیرو و گشتاور اعمالی به ذرات غیرکلوبیدی آزاد، که به سمت سطح در حرکت هستند، نیرو و گشتاور هیدرودینامیکی متصور خواهد بود. نیروی هیدرودینامیکی وارد از سیال به هر نقطه از مرز جامد متحرک با استفاده از رابطه (9)، محاسبه می‌شود [27].

¹ Lubrication force

و ضخامت غشاء، به ترتیب برابر با $10 \times 10^{-4} \text{ مترمربع}$, ۰.۳، و ۸ میکرومتر، می‌باشد. همچنین شکل سوراخ‌ها، و چیدمان آن‌ها به ترتیب دایره‌ای، و مربعی می‌باشند (شکل ۲a).

برای انجام شبیه‌سازی اختلاف فشار در محیط حل دو بعدی به اندازه ای در نظر گرفته شده که سرعت متوسط عبوری از مجازی غشاء، در نمونه اصلی و حل دو بعدی یکسان باشند. با توجه به روابط اختلاف فشار، TMP^2 و TMP^3 در رابطه (۱۱)، در دو جریان پوازی کاتال و سوراخ استوانه‌ای، (رابطه (۱۱))، سرعت متوسط، \bar{u} ، در دو جریان پوازی کاتال و سوراخ استوانه‌ای،

$$\bar{u}^{2D} = \frac{TMP^{2D} D_{po}^2}{CL \cdot 12\mu} \quad (11)$$

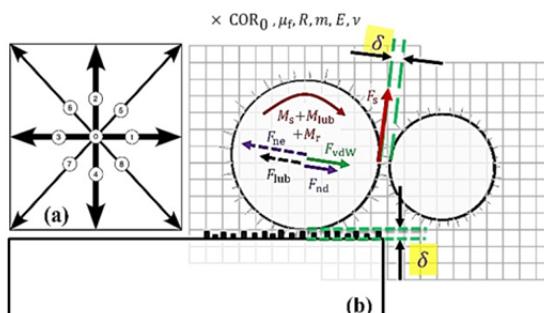
$$\bar{u}^{3D} = \frac{TMP^{3D} D_{po}^2}{CL \cdot 32\mu}$$

در رابطه (۱۱)، CL طول سوراخ، D_{po} قطر سوراخ، و μ لزجت دینامیکی سیال می‌باشند.

به ازای اختلاف فشار ۴۴ پاسکال در عرض ضخامت ۸ میکرومتری، که یک دبی جریان معادل با ۱۷.۴ میلی‌لیتر بر دقیقه در نمونه اصلی را ایجاد می‌کند، اختلاف فشار در محیط حل برابر با ۱۶.۵ پاسکال، در نظر گرفته شده است. همچنین، هندسه مسئله مطابق با "شکل ۲b" در نظر گرفته شده است که مرزهای AB، CD، مرزهای فشار ثابت و مرزهای BC، و AD، مرزهای تکرار شونده، می‌باشند. به علاوه، نسبت و مقدار اندازه‌های ذره (D_{pa}) و سوراخ‌ها (D_{po})، معادل با شرایط آزمایشگاهی لحاظ شده‌اند؛ جزئیات بیشتر در رابطه با شرایط لحاظ شده در شبیه‌سازی‌های انجام شده، در جدول ۱ آورده شده‌اند.

۲-۳- هندسه و پارامترهای مسائل رسوب پیش‌روند (p30، p31، و p32)

هندسه غشاء موردنظر به همراه مرزهای جریان در "شکل ۳" به نمایش در آمد است. مرزهای AB، CD، مرزهای فشار ثابت و مرزهای AD، BC و مرزهای تکرار شونده در نظر گرفته شده‌اند. در همه محاسبات اختلاف فشار مرزهای AB، CD، ۱۰۰ پاسکال در نظر گرفته شده و سیال از طریق مرز AB دو مرز، AB، و BC، می‌گذرد. اندازه ذرات در واحدهای متربک و عد شبکه به ترتیب به طرف غشاء جریان یافته و پس از عبور از سطوح عمودی سوراخ‌دار، از مرز CD خارج می‌شود. اندازه ذرات در واحدهای متربک و عد شبکه به ترتیب برابر با ۲ میکرومتر، و ۱۴، در نظر گرفته شده‌اند؛ همچنین پارامترهای ورودی



شکل ۱ (a) نمایه گرافیکی شبکه متقاضن دو بعدی با ۹ سرعت، مورد استفاده در کار حاضر (b) دیاگرام آزاد نیروهای مشارکت کننده در برخورد به همراه پارامترهای هندسی و مادی مورد استفاده در مدل سازی برخورد.

² Trans-membrane pressure

در دیاگرام نیرویی "شکل ۱b"، نیروهای عامل در برخورد ذره غیرکلوبیدی نشان داده شده‌اند. در کنار نیروی، F_{nd} ، و گشتاور، M_{nd} ، نیروهای ناشی از برخورد مکانیکی سطوح جامد یعنی نیروی میراکننده هر تری، F_{nd} ، و نیروی الاستیک، F_{ne} که در راستای برخورد و بر مرکز ذره وارد می‌شوند، به همراه نیروی اصطکاک حاصل از لغزش سطوح جامد، F_s ، و گشتاورهای حاصل از لغزش، M_s ، و غلتش، M_r ، به تصویر کشیده شده‌اند.

به منظور محاسبه نیروها و گشتاورهای مکانیکی در برخورد سطوح جامد، مدل‌های متنوعی به وسیله محققین راهه شده است. در این تحقیق شبیه‌سازی برخورد سطوح جامد ذرات غیرکلوبیدی با استفاده از مدل برخورد چسبنده راهه شده به وسیله مارشال [۲۶]، انجام پذیرفته است. در این مدل انرژی سطح در تعامل با نیروی میراکننده هر تری و در تقابل با نیروی الاستیک برخورد، امکان چسبیدن یا بازگشت ذره را تعیین می‌کند. در این مدل، پارامترهای زاویه برخورد، ویسکوالاستیسیته مواد و اندازه ذرات، نقش تعیین کننده‌ای در تعیین نتیجه ایفا می‌کنند. با استفاده از این مدل می‌توان میزان فشرده‌گی در راستای برخورد (خط اتصال مرکزهای ذرات برخورد کننده)، لغزش در جهت مماسی (عمود بر خط اتصال مرکزهای ذرات برخورد کننده)، غلتش نسبی دو سطح نسبت به هم، و پیچش حول خط اتصال مرکزها (در تحلیل برخورد سه‌بعدی)، را محاسبه کرد. ورودی‌های این مدل محاسباتی اندازه شعاع ذرات برخورد کننده، R ، مدول یانگ سطوح، E ، ضریب پواسون ماده ذرات، ν ، و جرم ذرات، m می‌باشند. همچنین به منظور تعیین دینامیک برخورد لازم است دو ضریب اصطکاک لغزش بین سطوح، μ ، و ضریب انعکاس در یک برخورد کاملاً الاستیک، COR_0 ^۱، به عنوان ورودی در اختیار مدل قرار داده شوند.

۳- مسائل بررسی اعتبار و رسوب پیش‌روند

اعتبار برنامه عددی با مقایسه نتایج عددی و تجربی موجود و در قالب دو مسئله p1، و p2 که به ترتیب از نوع تصفیه با شکل گیری انسداد استاندارد، و تصفیه با شکل گیری انسداد میانه می‌باشند، بررسی می‌شود. پس از آن در مسائل p30، p31، و p32 به ترتیب مشخصه‌های کلی رسوب در یک پیکربندی غشاء عمودی، اثر ارتفاع غشاء بر کیفیت تصفیه، و اثر نسبت اندازه ذره به سوراخ بر عملکرد غشاء عمودی، مورد توجه قرار خواهد گرفت. تنظیم پارامترهای مسائل مورد بحث مطابق با گفتارهای بخش‌های ۱-۳، و ۲-۳- انجام خواهد پذیرفت

۳-۱- هندسه و پارامترهای مرتبط با مسائل بررسی اعتبار (p1 و p2)

پیش از ارائه نتایج حاصل از شبیه سازی جداسازی جریان با استفاده از سطح توسعه یافته عمودی، لازم است تا اعتبار برنامه محاسباتی مورد تأیید قرار گیرد. به این منظور و در این قسمت دو آزمایش کلاسیک جداسازی ذرات از سیال حامل شبیه‌سازی شده و با نتایج آزمایشگاهی موجود ارائه شده به وسیله ورکیانی و همکارانش [۳۲]، مقایسه شده‌اند.

آزمایش‌های انجام شده در [۳۲]، فرایندهای تصفیه‌ای هستند که در آن‌ها نسبت اندازه ذرات لاتکس به اندازه سوراخ به ترتیب برابر با ۰.۳۳، (ذرات قادر به عبور از غشاء هستند؛ معادل با فرایند انسداد استاندارد)، و ۱، (معادل با فرایند کلاسیک انسداد میانه)، انتخاب شده‌اند. اندازه سوراخ در همه آزمایشات ۳ میکرومتر بوده و بنابراین ذرات، جزء ذرات غیرکلوبیدی محسوب می‌شوند. نتایج آزمایشگاهی، در شرایطی بدست آمده‌اند، که مساحت، تخلخل،

¹ Coefficient of restitution

جدول 1 شرایط مورد استفاده در شبیه‌سازی جریان عمود بر سطح، برای

سه حالت انسداد استاندارد (P1)، انسداد میانه (P2)، و رسوپ پیشرونده (P3)

Table 1 Simulation conditions of dead-ended filtration where membrane blocking proceeds either in standard (P1), intermediate (P2), or progressive fouling ($P3i$; $i=0-2$) modes

مقدار در فضای شبکه	مقدار در فضای حقیقی	مقدار در ابعاد	مقدار در فضای حقیقی	مقدار در فضای حقیقی
$(P3i, P2, P1)$	$i = 0, 1, 2$	متريک، يکا در ابعاد شبکه	$[lu]$ ؛ μm	پارامتر، علامت، يکا در ابعاد
$i = 0, 1, 2$				
$(14, 14, 14)$	$(2, 3, 1)$	ذره قطر، D_{pa} ، μm	$[lu]$ ؛ μm	مقدار در فضای حقیقی
$(0.1, 0.05, 0.15)$	$(10, 10, 10)$	اندازه زبری، δ ، μm	$[lu]$ ؛ μm	مساحت شبکه، يکا در ابعاد شبکه
$(1, 1, 1)$	$(1000, 1000, 1000)$	چگالی، ρ_{pa} ، kg/m^3	$[-]$ ؛ kg/m^3	$(P3i, P2, P1)$
-	$(2 \times 10^9, 2 \times 10^9, 2 \times 10^9)$	مدول يانگ، E_{pa} ، Pa	$[P]$	$i = 0, 1, 2$
-	$(0.34, 0.34, 0.34)$	ثابت پواسون، ϑ_{pa}	$[-]$	بولتمن
$(0.01, 0.01, 0.01)$	$(1, 1, 1 \& 0.1)$	غلظت جامد در محلول، S	$[A / A]$ ؛ g/lit	

مقدار در فضای شبکه	مقدار در فضای حقیقی	مقدار در فضای حقیقی	مقدار در فضای حقیقی	مقدار در فضای حقیقی
1	1000	$[-]$ ؛ kg/m^3	چگالی، ρ_f	سيال حامل
0.1667	1×10^{-6}	$[-]$ ؛ m^3/s	لزجت سينماتيكي، η	
$(P3i, P2, P1)$	$i = 0, 1, 2$			
$i = 0, 1, 2$				
$(20, 50, 90)$	$(3, 8, 8)$	$[lu]$ ؛ μm	غشاء ضخامت، ϵ	
$(14, 16, 43)$	$(2, 3, 3)$	μm	اندازه سوراخ، D_{po}	
$(0.52, 0.52, 0.52)$	$(0.3, 0.3, 0.3)$	$[A / A]$ ؛ m	تخلل، ϵ	
$(30, 34, 90)$	$(6.47, 7.85, 7.85)$	$[lu]$ ؛ μm	گام غشاء، λ	
-	$(3 \times 10^9, 3 \times 10^9, 3 \times 10^9)$	$[P]$ ؛ E_m	مدول يانگ، E_m	
-	$(0.33, 0.33, 0.33)$	$[-]$ ؛ ϑ_m	ثابت پواسون، ϑ_m	

از حل دو بعدی به فضای سه بعدی نگاشته شده سپس با نتایج مشابه اندازگیری شده در آزمایشات مقایسه شوند. این مهم با فرض برابر دانستن میزان اثر انسدادی ذرات در دو فضای دو و سه بعدی حاصل شده است. در اینجا برای نگاشت منحنی تغییرات زمانی شار جریان محاسبه شده به معادل آن در فضای سه بعدی و مقایسه با منحنی تغییرات زمانی شار جریان آزمایشگاهی مربوطه، مسئله اجتماع ذرات به طور دقیق تری بازبینی می شود. هر ذره ضمن نزدیک شدن به، و/یا عبور از غشاء می تواند تأثیری معادل 0 تا 100 درصد یک انسداد کامل را ایجاد کند. از این رو فرض می شود که نسبت تعداد ذرات فعال در جهت جریان به تعداد کل ذرات افزوده شده به جریان به ازای مقدار معینی از شار جریان بی بعد، در مدل عددی و حقیقی برابر است. بیان ریاضی معادل این فرض را می توان به صورت رابطه (12) نوشت.

$$\left(\frac{N_{AC}}{N_{tot}} \right)^{\text{Num}} = \left(\frac{N_{AC}}{N_{tot}} \right)^{\text{Real}} \quad (12)$$

¹ pitch

به مدل برخورد، برابر با مقادیر ارائه شده در جدول 1، و اندازه زبری، و غلظت سطح جامد به سطح محلول، به ترتیب برابر با، 10 nm ، 0.01 ، در نظر گرفته شده اند. بیش از این، تخلخل در محیط دو بعدی و ضخامت سطوح برابر با 0.52 ، و 3 میکرومتر می باشند.

در "شکل 3"، کلیت مکانیزم رسوپ پیشرونده نشان داده شده است؛ در اینجا نشان داده است که سطوح عمود سوراخ دار، در اثر تشکیل رسوبات در بخش جریان پذیر غشاء، به سه ناحیه بسته، فعال، و غیرفعال تقسیم می شوند.

4- بررسی اعتبار
4-1- فرایند نگاشت: تبدیل نتایج محاسبات از فضای حل به فضای حقیقی
برای انجام مقایسه بین نتایج عددی و حقیقی، لازم است نتایج به دست آمده

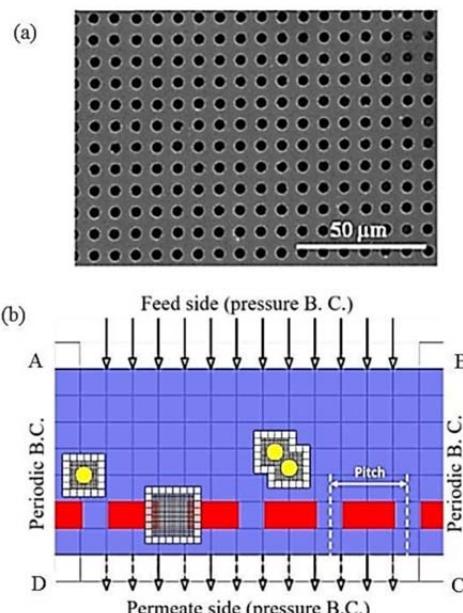


Fig. 2 (a) تصویر SEM از سطح غشاء، مورد استفاده در آزمایشات ورکیانی و همکارش [32] (b) فضای شبیه‌سازی دو بعدی جداسازی جریان عمود بر سطح به همراه شرایط مرزی

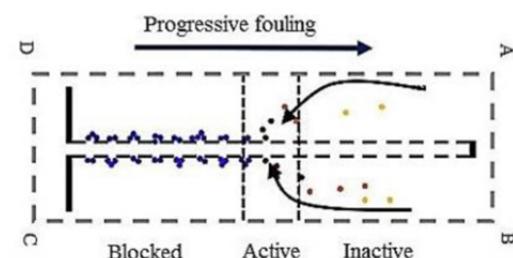


Fig. 3 توصیف گرافیکی فرایند رسوپ پیشرونده بر هندسه توسعه یافته سوراخ

با نگاشت شار-زمان حاصل از محاسبات ارائه شده است. "شکال 4c و 4d" به ترتیب، مقایسه نتایج برای دو غلظت ذره جامد 0.1 و 1 گرم بر لیتر را نمایش می‌دهند.

علاوه بر مقایسه منحنی‌های تغییرات زمانی شار جریان، در تصاویر 4c و 4d مقدار N_{tot}^{3D} (محاسبه شده از نتایج آزمایشگاهی)، با مقدار محاسبه شده از شبیه‌سازی (Ψ) مقایسه شده‌اند. مقدارتابع Ψ برای دو مسأله با غلظت ذره جامد 0.1 و 0.01 گرم بر لیتر به ترتیب برابر با 21.75 و 10.22 می‌باشد.

با توجه به "شکال 4c و 4d"، مشاهده می‌شود که برنامه محاسباتی با دقت قابل ملاحظه‌ای توانسته است منحنی شار جریان-زمان را در فرایندی که بخشی از ذرات امکان عبور از غشاء را به دست می‌آورند، تخمین بزند. این در حالیست که شبیه‌سازی بی نیاز از هرگونه پارامتر مدلی است که در ارتباط با نتایج آزمایشگاهی تنظیم شده باشد، و در فرایند مستقیم توانسته به این مهم دست یابد.

4-2-2-2-مسأله P2: جداسازی با نسبت D_{pa}/D_{po} برابر با 4 مختصات سطح غشاء در این حالت مشابه شرایط بخش 4-2-1 بوده و محلولی از آب و ذرات به قطر 3 میکرومتر بر سطح غشاء رسوب نموده است. مقدار تابع Ψ در این حالت، برابر با 1.667 می‌باشد.

در "شکل 5a" تصویری از شبیه‌سازی نشست ذرات و انسداد غشاء در انتهای شبیه‌سازی به نمایش در آمدده است. برای انجام مقایسه، در "شکل 5b" منحنی‌های زمانی شار جریان، و N_{tot}^{3D} -زمان، حاصل از محاسبات، با نتایج آزمایشگاهی موجود، [32]، برای غلظت جزء جامد 1 گرم بر لیتر مقایسه شده‌اند؛ مقایسه نتایج، دقت روش عددی در تخمین منحنی شار جریان-زمان، در فرایندی که اندازه ذرات در حد و اندازه سوراخ است را تأیید می‌کند.

که در این رابطه، N_{AC} و N_{tot} به ترتیب تعداد ذرات فعال در محیط جذب هر سوراخ غشاء، و تعداد کل ذرات تعذیه شده به هر سوراخ غشاء هستند. همچنین اشاره می‌شود که N_{tot} و Ψ ، به ترتیب به محیط‌های شبیه‌سازی عددی و حقیقی، اشاره می‌کنند.

با تجزیه و تحلیل این رابطه براساس رابطه هندسی بین فضای دو بعدی و سه بعدی، درنهایت رابطه بین تعداد ذرات کل فضاهای حل و حقیقی، در هر مرحله از جداسازی به شکل رابطه (13)، خلاصه می‌شود.

$$(13) \quad N_{tot}^{3D}(J) = \Psi N_{tot}^{2D}(J)$$

در اینجا برای تابع Ψ ، عنوان "تابع غشاء" انتخاب شده است. بنابرین با در اختیار داشتن مقادیر معلوم N_{tot}^{2D} از محاسبات و Ψ از ارتباط هندسی بین محیط‌های حقیقی و مجازی، می‌توان تعداد ذراتی که در محیط حقیقی جداسازی حضور داشته‌اند، N_{tot}^{3D} را محاسبه کرد.

پس از تعیین N_{tot}^{3D} ، از N_{tot}^{2D} و Ψ می‌توان زمان مرتبط با هر مقدار J (تعیین شده از محاسبات) را تعیین کرده و منحنی J بر حسب زمان را تشکیل داد. پس از آن منحنی تغییرات زمانی J قابل مقایسه با منحنی آزمایشگاهی مشابه خواهد بود. جزئیات روش محاسبه و تعیین Ψ و تشکیل منحنی شار جریان-زمان در بخش پیوست این مقاله آمده است.

4-2- مقایسه نتایج

4-1-2-4-مسأله P1: جداسازی با نسبت D_{pa}/D_{po} برابر با 0.33

در "شکل‌های 4a و 4b"، تصاویر دو لحظه از فرایند جداسازی یعنی نقطه‌ای در میانه فرایند و لحظه پایان شبیه‌سازی به نمایش در آمدده است. برای انجام شبیه‌سازی‌ها به جز نیروهای براوونی، الکترواستاتیکی و نیروی حاصل از درجه اسیدی مایع حامل ذرات، سایر عوامل مؤثر در برخورد لحظه شده‌اند. در ادامه در "شکال 4c و 4d" نتایج آزمایشگاهی تغییرات زمانی شار جریان در مقایسه

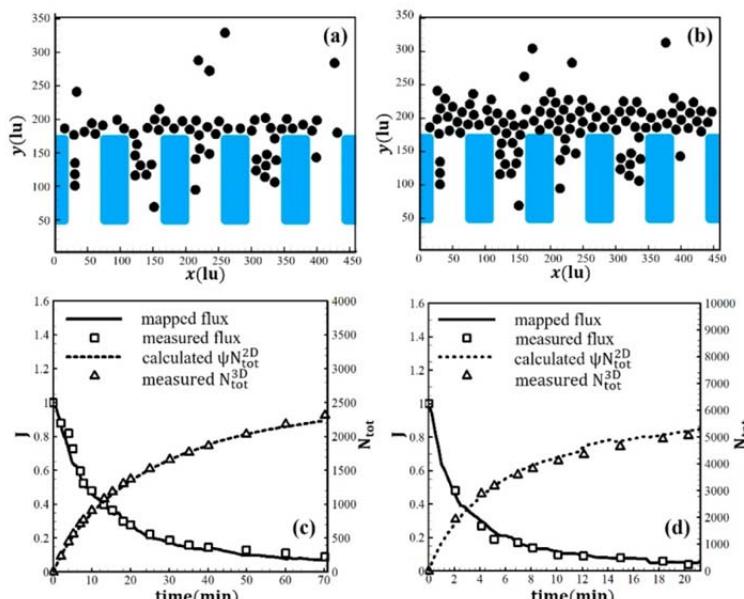


Fig. 4 (a&b) two snapshots of membrane fouling corresponding to pore narrowing at an intermediate and a final step of normal filtration, when D_{po}/D_{pa} , is 3 (c&d) mapped results calculated for dimensionless flux (J) vs. time and number of seeded particles vs. time which are compared with their relative data derived from experiments [32], when solid concentration in dummy space is $0.01 A/A$, and its real value is equal to (c) 0.1 g/lit, and (d) 1 g/lit.

شکل 4 (a&b) تصاویر دوبعدی رسوب ذرات بر سطح غشاء مربوط به دو گام زمانی میانی و انتهایی شبیه‌سازی؛ در این حالت با نسبت D_{po}/D_{pa} برابر با 3 مکانیزم رشد رسوب از نوع انسداد استاندارد می‌باشد (c&d) مقایسه نتایج حاصل از شبیه‌سازی با نتایج تجربی [32] برای منحنی تغییرات زمانی شار بی بعد و تغییرات زمانی تعداد ذرات وارد شده به محدوده جذب هر سوراخ غشاء، و قیتی که غلظت در محیط محاسباتی برابر با 0.01 A/A و 0.1 g/lit و (d) 1 g/lit می‌باشدند.

سطح توسعه یافته ترسیم شده است. با توجه به این تصویر در مطابقت با "شکال 6a تا 6d" منحنی شارجریان-زمان، دارای سه ناحیه متمایز است. در ناحیه اول و پیش از توسعه رسوب به تمام سطح غشاء (محدوده **)، که از این پس رسوب پیش رونده نوع اول نامیده می‌شود، منحنی موردنظر دارای یک تغیر منفیست و تقریباً بیشتر حجم سیال تصفیه شده، یعنی بیش از 66 درصد از کل، در این بازه زمانی از غشاء عبور می‌کند. این پخش از منحنی در دیگر فرایندهای متعارف تصفیه وجود ندارد و حاصل راهیابی جریان از مسیری با کمترین مقاومت ممکن، یعنی سوراخ‌های جریانی مرز جامد تاج غشاء در مقابل با جبهه میدان فشار در حال توسعه، یک مقاومت در مقابل جریان به سمت سوراخ‌های فعال در تاج غشاء ایجاد می‌کند؛ در این شرایط برخلاف حالت رسوب پیش‌روندۀ نوع دوم، سوراخ‌های فعال در نزدیکی تاج غشاء معادل با یک غشاء معمولی با مکانیزم انسداد میانه، عمل کرده و جهت تغیر منحنی جریان عوض می‌شود. با این حال، همچنان که گفته شد، رسوب تا فراغیر شدن آن بر تمام سطح عمودی موادی ادامه می‌یابد. در نهایت در محدوده رشد کیک، محدوده **، کمتر از 20 درصد از حجم تصفیه شده، از غشاء عبور خواهد کرد.

5-2-5- مسئله p31، اثر ارتفاع غشاء بر تغییرات زمانی شار جریان در تصفیه با رسوب پیش‌روندۀ آن گونه که پیش از این توضیح داده شد، مهمترین بخش عبور جریان در غشاء عمودی، محدوده **، در "شکل 6e" می‌باشد که در آن رسوب پیش‌روندۀ نوع اول بدون داشتن هیچ گونه درکی از یک اثر کاهنده بالادستی و تقریباً با

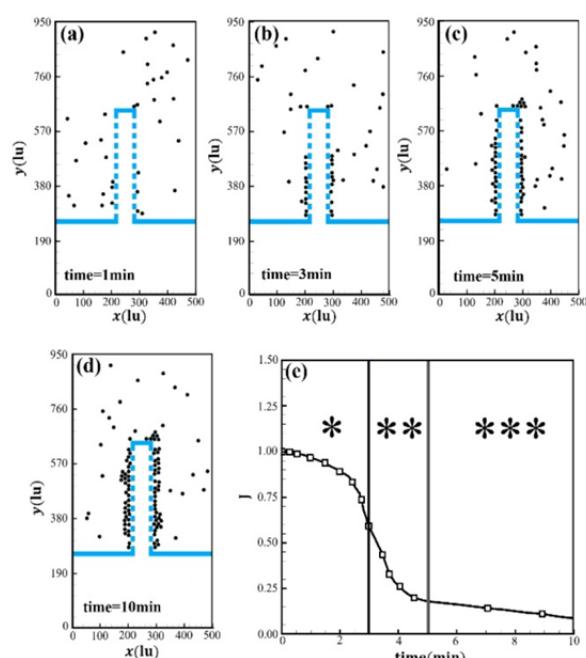


Fig. 6 (a-d) تصاویر رشد رسوب پیش‌روندۀ در چند گام زمانی (e) منحنی کاهش زمانی شار جریان با سه رژیم کاهشی متمایز

شکل 6 (a-d) تصاویر رشد رسوب پیش‌روندۀ در چند گام زمانی (e) منحنی کاهش

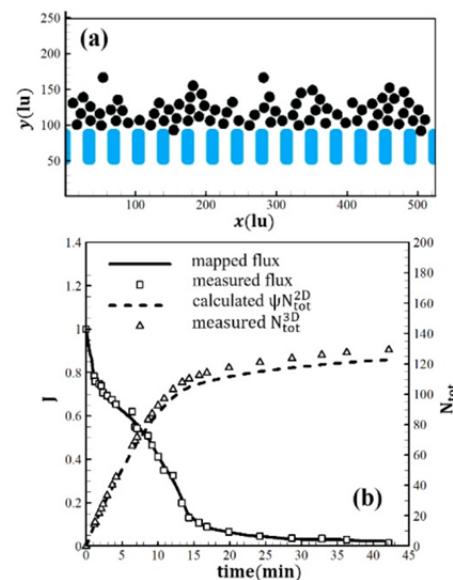


Fig. 5 (a) detailed representation of an intermediate fouling at final step of filtration when D_{po}/D_{pa} is 1 (b) mapped results calculated for dimensionless flux (J) vs. time and number of seeded particles vs. time which are compared with their relative data derived from experiments [32], when solid concentration in dummy and read spaces are 0.01 A/A, and 0.1 g/lit, respectively.

شکل 5 (a) تصاویر دو بعدی رسوب ذرات بر سطح غشاء مربوط به گام زمانی در انتهای شبیه‌سازی؛ در این حالت با نسبت D_{po}/D_{pa} برابر با 1 مکانیزم رشد رسوب از نوع انسداد میانی می‌باشد (c) مقایسه نتایج حاصل از شبیه‌سازی با نتایج تجربی [32] برای منحنی تغییرات زمانی شار بی بعد و تغییرات زمانی تعداد ذرات وارد شده به

5-نتایج و بحث

5-1-5- مسئله P30: فرایند رسوب پیش‌روندۀ مشخصه‌های کلی در "شکل 6a تا 6d". روند تغییرات زمانی رسوب ذرات بر غشاء‌ای با ارتفاع 10 سوراخ، نشان داده شده است. در این مسئله نسبت اندازه ذره به سوراخ، 1، می‌باشد. در ابتدای جداسازی اختلاف فشار در جهت عرضی، سبب فعلی‌سازی جریان در نزدیکترین سوراخ‌ها به ریشه غشاء می‌شود؛ به این ترتیب ذرات به سمت سوراخ‌های پایه هدایت شده و مسیر جریان در این سوراخ‌ها را می‌بندند؛ (شکل 6a)؛ پس از بسته شدن سوراخ‌های فعال در این ناحیه، جبهه میدان فشار در فضای بین دو سطح به سمت بالاتر جابجا شده و گروهی دیگر از سوراخ‌های باز که پیش از این غیرفعال بودند را دچار تغییر وضعیت نموده، غالب جریان از گروه جدید سوراخ‌های فعال عبور خواهد کرد. مجدداً، نشست ذرات بر سوراخ‌های فعال موجب بسته شدن سوراخ‌ها و انتقال مرز فعالیت غشاء به سمت سوراخ‌های غیرفعال می‌شود (شکل 6b)؛ در نهایت آخرين گروه سوراخ‌های غشاء فعال و پس از آن بسته می‌شوند (شکل 6c). پس از آن رسوب ذرات بر تمام سطح غشاء و به صورت تقریباً یکنواخت ادامه پیدا می‌کند. مرحله اول، یعنی بسته و فعال شدن پیاپی نواحی سطح غشاء (تصاویر 6a تا 6c) مرحله رسوب پیش‌روندۀ و مبنی مشخصه‌های متفاوت اثر توسعه هندسه نسبت به یک هندسه ساده می‌باشد؛ همچنان مرحله دوم (شکل 6d) مرحله رشد کیک جرمیست که کیفیت و سرعت رشد آن وابسته به میزان مسیر جریان باقی مانده از مرحله اول می‌باشد.

محدوده جذب هر سوراخ غشاء، زمانی که غلظت در محیط محاسباتی و حقیقی به ترتیب 0.01 A/A و 0.1 g/lit می‌باشد.

در "شکل 6e" منحنی تغییرات زمانی شار جریان، حاصل از رسوب بر

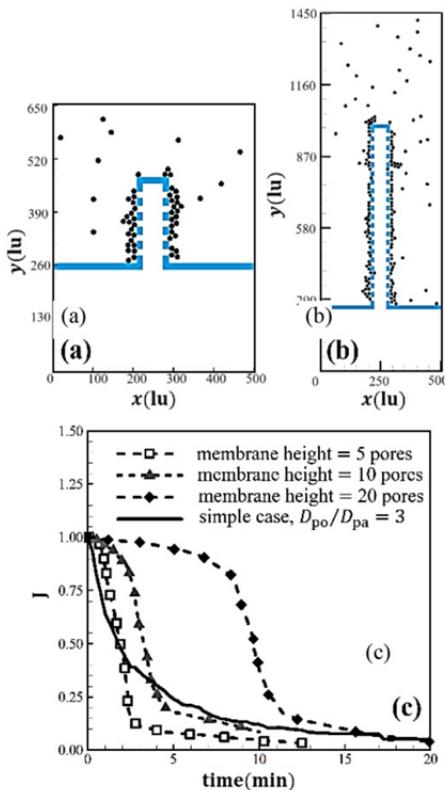


Fig. 7 (a&b) clogged surfaces for vertical membranes of two different heights of 5 and 50 pores, when porosity is fixed (d) changes in flux attenuation curve as a function of membrane height when they are compared with the one of an unguarded membrane surface.

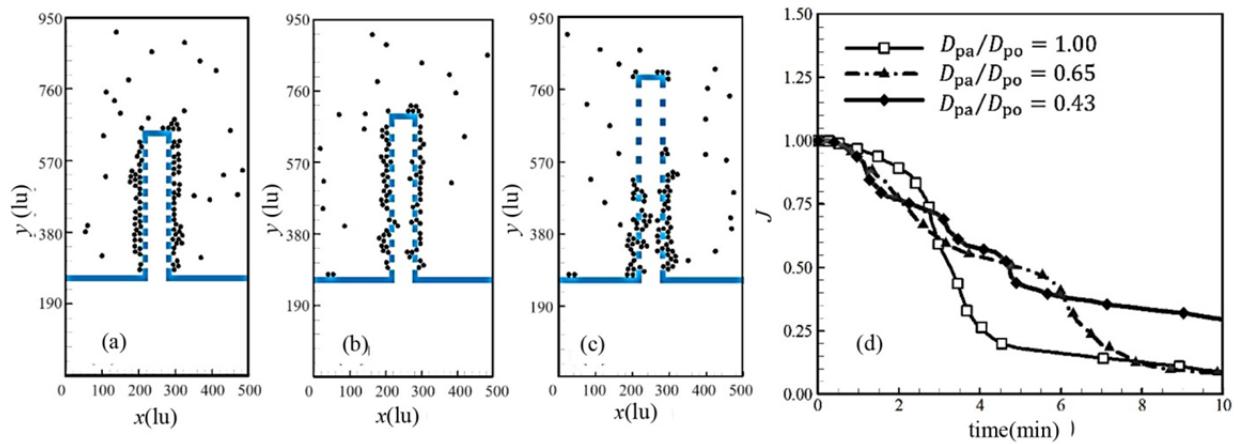
شکل 7 (a&b) تصاویر سطوح بسته شده دو غشاء عمودی با ارتفاع‌های 5 و 20 سوراخ، و میزان تخلخل یکسان (c) تغییرات منحنی شار جریان در مقابل ارتفاع غشاء و در مقایسه با غشاء ساده

بخشی از جریان در این ناحیه، شدت جریان در مسیرهای جدیداً فعال شده رفته رفته کاهش یافته و شدت جریان در سوراخ‌های تازه فعال شده ثابت نخواهد ماند. بنابراین در صورتی که میزان حجم مایع خروجی اولویت اول فرایند جداسازی باشد این طرح، نسبت به طرح پایه ارجحیت خواهد داشت. با افزایش اندازه سوراخ و برای نسبت اندازه ذره به سوراخ 0.43 (شکل 8c) مکانیزم رسو بیشرونده از بین رفته و تنها بخشی از جان غشاء عمودی، پوشیده خواهد شد. همچنین امکان نفوذ رسویات به فضای بین دو سطح سوراخ‌دار و خروج ذرات به وجود خواهد آمد، که از میزان خلوص جریان خروجی خواهد کاست (خلوص جریان خروجی 85 درصد است)؛ با این حال غشاء امکان عبور حجم بیشتری نسبت به حالت پایه فراهم خواهد کرد ($V/V_0 = 1.55$). بنابراین حتی با صرف نظر کردن از اهمیت میزان خلوص مایع خروجی، کاهش بیش از حد نسبت اندازه ذره به سوراخ، به این بردن امکان استفاده از همه سطح غشاء در فرایند جداسازی می‌انجامد و با افزایش بیشتر تعداد سوراخ‌ها (مشابه با حالت تعداد سوراخ 20، نسبت اندازه ذره به سوراخ 1) امکان تصفیه حجم بیشتری به وجود نخواهد آمد. بنابراین در حالت کلی یک مقدار بهینه برای نسبت اندازه ذره به سوراخ وجود دارد (در اینجا برابر با 0.65) که به ازای آن بیشترین حجم عبوری ممکن در ازای ابیانی شرایط رسو بیشرونده، ممکن خواهد بود.

یک سرعت ثابت پیش می‌رود. با توجه به این که بازه عمل رسو بیشرونده نوع دوم به محدوده سوراخ‌های فعال در نزدیکی تاج غشاء می‌باشد، بایستی با افزایش ارتفاع غشاء بازه عمل رسو بیشرونده نیز افزایش باید. بنابراین در این بخش شبیه‌سازی جریان برای دو ارتفاع متفاوت 5 و 20 سوراخ انجام شده و با منحنی شار جریان-زمان غشاء 10 سوراخ مقایسه شده است.

در "شکل 7a و 7b"، حالت نهایی غشاء-رسو برای دو ارتفاع متفاوت 5 و 20 سوراخ به نمایش در آمده است؛ همچنین در "شکل 7c" سه منحنی شار جریان-زمان به عنوان تابعی از ارتفاع غشاء (تعداد سوراخ‌ها در هر طرف)، نمایش داده شده است؛ بدلاً از این تصور، منحنی شار جریان-زمان برای حالت بدون سطح توسعه یافته و حالت‌های دارای سطح توسعه یافته با هم مقایسه شده‌اند. با توجه به "شکل 7c"، اگرچه شب منحنی شار-زمان، پس از نقطه عطف و با افزایش ارتفاع اندکی کاهش یافته و در نتیجه فرض ثابت بودن اندازه محدوده رسو بیش رونده نوع دوم را اندکی دچار خدشه کرده است، با این حال همچنان که انتظار می‌رفت افزایش ارتفاع غشاء باعث افزایش محدوده مهم رسو بیشرونده نوع اول شده است. همچنین با توجه به این تصویر اگرچه با توسعه غشاء به ارتفاع 5 سوراخ، از نفوذ ذرات به و نشست ذرات بر سوراخ اصلی خروجی ممانعت به عمل آمده است، با این حال منحنی شار-زمان در این حالت در مقایسه با حالت ساده، حجم تصفیه شده کمتری از خود عبور خواهد داد. افزایش بیشتر ارتفاع غشاء تا 10 سوراخ سبب شده است تا عملکرد تصفیه‌ای غشاء در مرتبه ای برابر با حالت ساده قرار بگیرد؛ این در حالیست که غشای توسعه یافته 10 سوراخ در مقایسه با حالت ساده از مزیت خلوص صد درصدی مایع خروجی برخوردار است. در نهایت، با توجه به "شکل 7c"، افزایش بیشتر ارتفاع (تا 20 سوراخ) موجب برتری غشاء توسعه یافته نسبت به غشاء ساده هم از جهت میزان حجم تصفیه شده و هم از جهت درجه خلوص سیال خروجی شده است. در حقیقت مطابق با آنچه گفته شد، ارتفاع 10 سوراخ، حد پایینی لازم برای استفاده از غشاء عمودی در مقایسه با غشاء ساده می‌باشد تا بتوان علاوه‌بر جلوگیری از انسداد مسیر اصلی جریان، با کنترل جهت انسداد، از طریق رسو بیش رونده، به حجم تصفیه و خلوص خروجی بیشتری نایل آمد.

5-3- مسئله 32، اثر نسبت اندازه ذره به سوراخ بر رسو بیشرونده در بخش 1-5 اندازه ذره به سوراخ به نحوی تنظیم شد (برابر با 1) که غشاء عمودی مانع از عبور ذرات از سوراخ اصلی گردد و بدین ترتیب خلوص مایع خروجی 100 درصد بود. در این قسمت اندازه ذره به سوراخ به ترتیب 0.65 و 0.43، انتخاب شده و مشخصه‌های جداسازی با حالت اندازه ذره به سوراخ برابر با 1 (حالت پایه، از این پس در نظر گرفته شده با پانویس 0) مقایسه شده‌اند. با توجه به تصاویر غشاء-رسو (شکل‌های 8a-c) در انتهای شبیه‌سازی، و منحنی‌های تغییرات شار-زمان متناظر، در ابتدا علیرغم افزایش اندازه سوراخ (شکل 8b؛ نسبت اندازه ذره به سوراخ برابر با 0.65)، تمام سطح غشاء در اثر مکانیزم رسو بیشرونده، با ذرات پوشیده شده و به جز تعداد کمی از ذرات (5 درصد)، اکثر ذرات در ورودی‌های سوراخ‌ها به دام خواهد افتاد؛ اما با توجه به "شکل 8d"، افزایش اندازه سوراخ در این حالت تقریباً منفی اولیه در منحنی شار-زمان را از بین برد و نسبت حجم عبوری در این حالت به حالت پایه افزایش خواهد یافت ($V/V_0 = 1.35$). علت از بین رفتن تقریباً منفی در منحنی شار را می‌توان وجود مسیرهای نیمه بسته در کنار مسیرهای جدیداً فعال شده دانست. در این صورت با افزایش مسیرهای نیمه بسته و جذب



شکل 8 (a-c) اثر تخلخل بر چگونگی رشد رسوب بر سطح توسعه یافته غشاء (d) تغییرات زمانی منحنی شار جریان در مقابل تخلخل سطح

قابل ارائه است.

(14-الف)

$$S^{2D} = \frac{N_{AC}^{Num} A_{pa}}{A_{AC}} \quad (14-a)$$

(14-ب)

$$S^{3D} = \frac{N_{AC}^{Real} V_{pa}}{V_{AC}} \quad (14-b)$$

که در این رابطه، با توجه به "شکل 9a", \$N_{AC}^{Num}\$ و \$N_{AC}^{Real}\$ به ترتیب تعداد ذرات مؤثر بر کاهش جریان در فضای مدل و فضای حقیقی می‌باشد. همچنین \$V_{AC} = L_1^{3D} L_2^{3D} H^{3D}\$ و \$A_{AC} = L_1^{2D} H^{2D}\$ به ترتیب سطح و حجم حامل ذرات مؤثر بر کاهش جریان هستند. بیش از این \$A_{pa}\$ و \$V_{pa}\$، به ترتیب سطح و حجم ذره جامد هستند که برای یک ذره کروی به ترتیب برابر با \$\pi D_{pa}^3/6\$ و \$\pi D_{pa}^2/4\$ می‌باشند.

با تعریف پارامتر نسبت غلظت (CR) به صورت رابطه (15)،

$$CR = \frac{S^{3D}}{S^{2D}} \quad (15)$$

رابطه بین \$N_{AC}^{Num}\$ و \$N_{AC}^{Real}\$ عبارتست از:

$$N_{AC}^{Real} = \frac{3}{2} CR \left(\frac{L_1^{3D} L_2^{3D}}{D_{pa} L_1^{2D}} \right) \left(\frac{H^{3D}}{H^{2D}} \right) N_{AC}^{Num} \quad (16)$$

برای تعیین نسبت CR، باید ارتباط معنایی بین صورت و مخرج کسر \$S^{3D}\$ و \$S^{2D}\$ به شکل قابل قبولی ایجاد شده و این پارامترها، به یک نوع یکسان تغییر یابند. این مهم با درک مفهوم آماری غلظت، امکان یزد خواهد بود؛ به این ترتیب که غلظت ماده جامد در یک فضای دو یا سه بعدی به معنی احتمال پیدا کردن جزء جامد، در هر جهت مختصاتی می‌باشد. یعنی به طور مثال برای \$S^{3D}\$ می‌توان نوشت:

$$S^{3D} = \beta^x \beta^y \beta^z \quad (17)$$

که در رابطه (17)، \$\beta^x\$, \$\beta^y\$ و \$\beta^z\$ به ترتیب احتمال پیدا کردن جزء جامد در جهت‌های x, y, و z می‌باشند. بدیهی است که در یک فضای همگن، احتمال پیدا کردن ذرات در همه جهات با هم برابرند (\$\beta^x = \beta^y = \beta^z\$) و از این رو برای \$S^{2D}\$ و \$S^{3D}\$ داریم:

$$S^{3D} = \beta^3; \quad S^{2D} = \beta^2 \quad (18)$$

در رابطه (18)، \$\beta\$، و \$\beta'\$، هر دو از یک نوع و معادل‌های آماری \$S^{3D}\$ و \$S^{2D}\$ می‌باشند. بنابراین بیان ریاضی-آماری رابطه (15)، را می‌توان به صورت رابطه (19)، در نظر گرفت.

$$CR = \frac{S^{3D}}{S^{2D}} = \frac{\beta^3}{\beta'^2} \quad (19)$$

6- نتیجه‌گیری

در این تحقیق با استفاده از روش شبکه بولتزمن استاندارد دو بعدی در ترکیب با یک مدل محاسبه برخورده، به مسأله جداسازی از هندسه سوراخ توسعه یافته در جهت جریان پرداخته شد. در اینجا، هندسه توسعه یافته به صورت دو سطح عمودی سوراخ‌دار موازی که در جهت جریان و بر ورودی سوراخ اصلی نصب شده‌اند در نظر گرفته شد. نشان داده شد که ساختار رسوب در دو بازه زمانی متمایز رسوب پیش‌رونده و تشکیل کیک جرمی بر سطوح عمودی، گسترش می‌یابد. در بازه زمانی اول، رسوب پیش‌رونده با جابجایی جبهه میدان فشار در فاصله دو سطح عمودی سوراخ‌دار و تبدیل پیوسته نواحی فعال و غیرفعال غشاء به نواحی بسته، و فعل، باعث گسترش انسداد در سطح غشاء از ریشه تا تاج غشاء می‌شود. پس از آن در بازه زمانی دوم نشست ذرات به شکل یکنواخت و در قالب رشد کیک جرمی باعث کاهش آرام جریان خواهد شد. همچنین نشان داده شد که منحنی جریان-زمان متناظر با مرحله رسوب پیش‌رونده شامل دو بازه زمانی متمایز، رسوب پیش‌رونده نوع اول و رسوب پیش‌رونده نوع دوم است، که در بازه زمانی اول ساختار رسوب بدون هیچ‌گونه درکی نسبت به اثر منفی تاج غشاء، با سرعت ثابت پیش‌رفته و تقریباً منحنی جریان در این حالت منفیست که در نتیجه بیشترین حجم تصفیه در این مرحله از غشاء عبور خواهد کرد. در بازه زمانی رسوب پیش‌رونده نوع دوم تقریباً منحنی جریان عوض شده و عملکرد غشاء مشابه عملکرد متعارف در یک فرایند جداسازی عمود بر سطح خواهد بود.

همچنین در این تحقیق اثر نسبت اندازه ذره به سوراخ و ارتفاع سطح توسعه یافته غشاء بر مرحله رسوب پیش‌رونده بررسی شد. نشان داده شد که باقی رسوب پیش‌رونده متناظر با رعایت یک حدی پایینی برای نسبت اندازه ذره به سوراخ می‌باشد. همچنین با افزایش ارتفاع هندسه غشاء می‌توان گستره زمانی رسوب پیش‌رونده نوع اول و در نتیجه دوره عملکردی مفید غشاء را به شکل قابل توجهی افزایش داد.

7- پیوست

7-1- روش نگاشت در تعیین منحنی شار جریان-زمان

برای تعیینتابع غشاء (7) از ارتباط هندسی بین فضای مدل‌سازی و فضای حقیقی استفاده شده است. براساس "شکل 9a" رابطه ریاضی غلظت ماده جامد در فضاهای مدل‌سازی (\$S^{2D}\$) و حقیقی (\$S^{3D}\$) به صورت روابط (14)

$$\Psi = \frac{3}{2} CR \left(\frac{X}{N_{\text{Pore}}} \right) \left(\frac{L_1^{3D} L_2^{3D}}{D_{\text{pa}} L_1^{2D}} \right) \left(\frac{H^{3D}}{H^{2D}} \right) \quad (23)$$

با تعیینتابع غشاء از رابطه (23) و با در اختیار داشتن N_{tot}^{3D} ، از محاسبات، مقدار N_{tot}^{3D} از رابطه (22) تعیین می‌شود. همچنین با در اختیار داشتن L از محاسبات و N_{tot}^{3D} می‌توان زمان متناظر با هر نقطه از منحنی شار جریان را محاسبه کرد.

برای تعیین زمان متناظر با هر نقطه شار بی بعد مراحل زیر اجرا می‌شود.

-1 مقدار دبی حجمی در دو گام ۱-۲، و q_i یعنی q_{i-1} و q_i در یک تناسب خطی از مقدار دبی حجمی در آغاز تصفیه، q_0 ، که متناظر با شار بی بعد ۱، می‌باشد، و شار بی بعد حاصل از محاسبات در این دو لحظه، (q_{i-1}, q_i) ، تعیین می‌شود.

-2 مقدار N_{tot}^{3D} در لحظه i ، از مقدار معلوم تابع غشاء، Ψ ، و مقدار محاسبه شده N_{tot}^{2D} در این لحظه، مطابق با رابطه (22)، تعیین می‌شود.

-3 با معلوم بودن N_{tot}^{3D} حجم مایع عبوری از غشاء در لحظه i ، V_i را می‌توان از رابطه (24)، تعیین کرد.

$$V_i = \frac{N_{\text{tot}}^{3D} V_{\text{pa}}}{S^{3D}} \quad (24)$$

همچنین با معلوم بودن V_{i-1} ، از گام قبلی محاسبات در این حلقه داریم:

$$dV = V_i - V_{i-1} \quad (25)$$

-4 با در اختیار داشتن مقادیر t_{i-1} ، dV ، q_i ، و t_{i-1} (زمان در لحظه $i-1$) زمان متناظر با لحظه i ، از رابطه (26)، تعیین می‌شود.

$$t_i = \frac{2dV}{q_{i-1} + q_i} + t_{i-1} \quad (26)$$

8- مراجع

- [1] L. J. Zeman, Microfiltration and ultrafiltration, *Principles and Application*, 1996.
- [2] J. Hermia, Constant pressure blocking filtration law application to powder-law non-Newtonian fluid, *Transactions of the Institution of Chemical Engineers*, Vol. 60, pp. 183-187, 1982.
- [3] M. S. Doodeji, M. Zerafat, M. Yousefi, S. Sabbagh, Effect of OH-treatment of PDMS on rejection in hybrid nanofiltration membranes for desalination, *Desalination*, Vol. 426, pp. 60-68, 2018.
- [4] A. Kola, Y. Ye, P. Le-Clech, V. Chen, Transverse vibration as novel membrane fouling mitigation strategy in anaerobic membrane bioreactor applications, *Journal of Membrane Science*, Vol. 455, pp. 320-329, 2014.
- [5] M. M. Kim, A. L. Zydney, Effect of electrostatic, hydrodynamic, and Brownian forces on particle trajectories and sieving in normal flow filtration, *Journal of Colloid and Interface Science*, Vol. 269, pp. 425-431, 2004.
- [6] C. C. Ho, A. L. Zydney, Effect of membrane morphology on the initial rate of protein fouling during microfiltration, *Journal of Membrane Science*, Vol. 155, pp. 261-275, 1999.
- [7] K. J. Hwang, T. T. Lin, Effect of morphology of polymeric membrane on the performance of cross-flow microfiltration, *Journal of Membrane Science*, Vol. 199, pp. 41-52, 2002.
- [8] A. L. Zydney, C. C. Ho, Effect of membrane morphology on system capacity during normal flow microfiltration, *Biotechnology and bioengineering*, Vol. 83, pp. 537-543, 2003.
- [9] N. Dizge, G. Soydemir, A. Karagunduz, B. Keskinler, Influence of type and pore size of membranes on cross flow microfiltration of biological suspension, *Journal of Membrane Science*, Vol. 366, pp. 278-285, 2011.
- [10] W. Li, *Fouling Models for Optimizing Asymmetry of Microfiltration Membranes*: University of Cincinnati, 2009.
- [11] Q. Han, W. Li, T. A. Trinh, X. Liu, J. W. Chew, A network-based approach to interpreting pore blockage and cake filtration during membrane fouling, *Journal of Membrane Science*, Vol. 528, pp. 112-125, 2017.
- [12] T. Deuschle, U. Janoske, M. Piesche, A CFD-model describing filtration, regeneration and deposit rearrangement effects in gas filter systems, *Chemical Engineering Journal*, Vol. 135, pp. 49-55, 2008.
- [13] F. Qian, N. Huang, J. Lu, Y. Han, CFD-DEM simulation of the filtration performance for fibrous media based on the mimic structure, *Computers and Chemical Engineering*, Vol. 71, pp. 478-488, 2014.
- [14] D. Wan, S. Turek, Fictitious boundary and moving mesh methods for the

بهطور مثال برای غلظت‌های 0.001، 0.01، 0.02، در فضاهای سه و دو بعدی، β و β' ، هر دو برابر با 0.1، خواهند بود؛ و در نتیجه CR، برابر با 1، می‌باشد. با معلوم بودن مقادیر، L_1^{3D} ، L_2^{3D} ، CR ، H^{3D}/H^{2D} ، L_1^{2D} ، L_2^{2D} ، $N_{\text{AC}}^{\text{Real}}$ ، و $N_{\text{AC}}^{\text{Num}}$ ، لازم است تا ارتباط هندسی بین یک سوراخ در فضای سه بعدی و سوراخ‌های فضای سه بعدی به درستی درک شود. در این قسمت با در نظر گرفتن هندسه سوراخ سهبعدی به شکل کانال استوانه‌ای این مسئله تشریح می‌شود. به این منظور در مثال ارائه شده در این بخش اندازه سوراخ به اندازه ذره β در نظر گرفته می‌شود.

هندسه یک سوراخ سه بعدی دایره‌ای را می‌توان با یک چند ضلعی زوج محاط بر آن به "شکل 9b" تقریب زد. در این تصویر سوراخ دایره‌ای به وسیله یک شش ضلعی، یک هشت ضلعی، و یک ده ضلعی محاط شده است. طول هر ضلع شش، هشت، و ده ضلعی به ترتیب برابر با 1.24، 1.73، و 0.97 برابر قطر یک ذره کروی می‌باشد؛ بنابراین ورودی هر سوراخ می‌تواند میزان تقرباً 10 ذره باشد. همچنین هر دو ضلع رو در رو در یک چند ضلعی زوج معادل یک کانال در فضای دو بعدی عمل خواهد کرد. بنابراین سوراخ سه بعدی موردنظر معادل با 5 سوراخ در فضای دو بعدی خواهد بود؛ یعنی می‌توان نوشت:

$$N_{\text{AC}}^{\text{Num}} = \chi N_{\text{AC},1}^{2D} \quad (20)$$

که $N_{\text{AC},1}^{2D}$ ، میزان تعداد ذرات فعال در فضای تغذیه "یک سوراخ دو بعدی" و χ برای این مسئله برابر با 5 خواهد بود. با استفاده از رابطه (20) در رابطه (16) و از آنجایی که $N_{\text{AC}}^{\text{3D}} = N_{\text{AC}}^{\text{Real}}$ داریم:

$$N_{\text{AC}}^{3D} = \frac{3}{2} CR \left(\frac{X}{N_{\text{Pore}}} \right) \left(\frac{L_1^{3D} L_2^{3D}}{D_{\text{pa}} L_1^{2D}} \right) \left(\frac{H^{3D}}{H^{2D}} \right) N_{\text{AC}}^{2D} \quad (21)$$

در رابطه (21)، N_{Pore} ، $N_{\text{AC},1}^{2D}$ / N_{Pore} به جای، N_{AC}^{2D} / N_{Pore} جایگذاری شده است. با اعمال رابطه (21) در رابطه هندسی انسداد (رابطه (12)) خواهیم داشت:

$$N_{\text{tot}}^{3D} = \Psi N_{\text{tot}}^{2D} \quad (22)$$

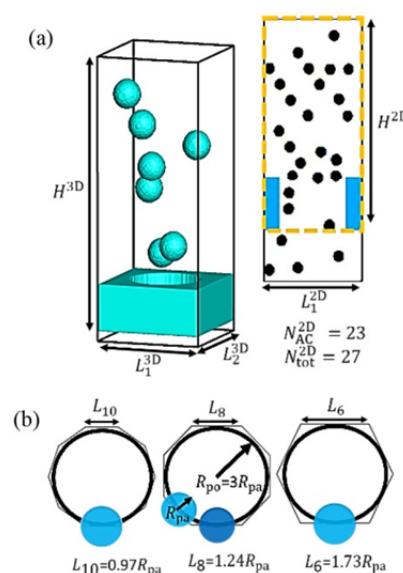


Fig. 9 (a) توصیف هندسی سوراخ در فضاهای محاسباتی و حقیقی و پارامترهای

شکل 9 (a) توصیف هندسی سوراخ در فضاهای محاسباتی و حقیقی و پارامترهای (b) نمایه ای از هندسه سوراخ به عنوان میزان تعداد معینی از ذرات جامد

- polarisation in crossflow microfiltration, *Journal of Membrane Science*, Vol. 253, pp. 67-79, 2005.
- [24] G. Brans, J. Kromkamp, N. Pek, J. Gielen, J. Heck, C. Van Rijn, et al., "Evaluation of microsieve membrane design, *Journal of Membrane Science*, Vol. 278, pp. 344-348, 2006.
- [25] J. Kromkamp, D. van den Ende, D. Kandhai, R. van der Sman, R. Boom, Lattice Boltzmann simulation of 2D and 3D non-Brownian suspensions in Couette flow, *Chemical Engineering Science*, Vol. 61, pp. 858-873, 2006.
- [26] J. Marshall, Discrete-element modeling of particulate aerosol flows, *Journal of Computational Physics*, Vol. 228, pp. 1541-1561, 2009.
- [27] A. J. Ladd, Numerical simulations of particulate suspensions via a discretized Boltzmann equation. Part 2. Numerical results, *Journal of Fluid Mechanics*, Vol. 271, pp. 311-339, 1994.
- [28] J. Cao, *Advanced Parallel Processing Technologies: 6th International Workshop, APPT 2005, Hong Kong, China, October 27-28, Proceedings* Vol. 3756: Springer Science & Business Media, 2005.
- [29] X. M. Wang, X. y. Li, Modeling of the initial deposition of individual particles during the cross-flow membrane filtration, *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, Vol. 440, pp. 91-100, 2014.
- [30] M. Cooley, M. O'Neill, On the slow motion generated in a viscous fluid by the approach of a sphere to a plane wall or stationary sphere, *Mathematika*, Vol. 16, pp. 37-49, 1969.
- [31] J. A. Simeonov, J. Calantoni, Modeling mechanical contact and lubrication in direct numerical simulations of colliding particles, *International Journal of Multiphase Flow*, Vol. 46, pp. 38-53, 2012.
- [32] M. E. Warkiani, F. Wicaksana, A. G. Fane, H. Q. Gong, Investigation of membrane fouling at the microscale using isopore filters, *Microfluidics and Nanofluidics*, Vol. 19, pp. 307-315, 2015.
- numerical simulation of rigid particulate flows, *Journal of Computational Physics*, Vol. 222, pp. 28-56, 2007.
- [15] S. K. Saha, G. P. Celata, Advances in modelling of biomimetic fluid flow at different scales, *Nanoscale Research Letters*, Vol. 6, pp. 344, 2011.
- [16] E. Moeendarbary, T. Ng, M. Zangeneh, Dissipative particle dynamics: introduction, methodology and complex fluid applications—a review, *International Journal of Applied Mechanics*, Vol. 1, pp. 737-763, 2009.
- [17] S. Chen, Z. Wang, X. Shan, G. D. Doolen, Lattice Boltzmann computational fluid dynamics in three dimensions, *Journal of Statistical Physics*, Vol. 68, pp. 379-400, 1992.
- [18] H. Wang, H. Zhao, Z. Guo, C. Zheng, Numerical simulation of particle capture process of fibrous filters using Lattice Boltzmann two-phase flow model, *Powder Technology*, Vol. 227, pp. 111-122, 2012.
- [19] H. Wang, H. Zhao, K. Wang, Y. He, C. Zheng, Simulation of filtration process for multi-fiber filter using the Lattice-Boltzmann two-phase flow model, *Journal of Aerosol Science*, Vol. 66, pp. 164-178, 2013.
- [20] S. C. Fu, W. T. Yuen, C. Wu, C. Y. H. Chao, Finite-difference lattice Boltzmann simulation on acoustics-induced particle deposition, *Comptes Rendus Mécanique*, Vol. 343, pp. 589-598, 2015.
- [21] Z. X. Tong, M. J. Li, Y. L. He, Y. S. Li, Numerical simulation of the particle deposition on a tube with coupled lattice Boltzmann method and finite volume method, *Energy Procedia*, Vol. 75, pp. 3207-3212, 2015.
- [22] R. R. Cai, L. Z. Zhang, Modeling of dynamic deposition and filtration processes of airborne particles by a single fiber with a coupled lattice Boltzmann and discrete element method, *Building and Environment*, Vol. 106, pp. 274-285, 2016.
- [23] J. Kromkamp, A. Bastiaanse, J. Swarts, G. Brans, R. Van Der Sman, R. Boom, A suspension flow model for hydrodynamics and concentration