



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

ARTICLE INFO

Article Type

Original Research

Authors

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

How to cite this article

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

ABSTRACT

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

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

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

*Correspondence

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

Article History

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

CITATION LINKS

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

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

احسان داوریانه MSc

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

علیرضا تیمورتاش PhD

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

چکیده

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

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

تاریخ دریافت: ۱۳۹۷/۰۵/۲۶

تاریخ پذیرش: ۱۳۹۷/۰۸/۱۱

*نویسنده مسئول: teymourtash@um.ac.ir

۱- مقدمه

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

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

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

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

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

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \vec{\nabla} \cdot (\rho \vec{u}) = 0 \quad (۱)$$

$$\frac{\partial (\rho \vec{u})}{\partial t} + (\vec{u} \cdot \vec{\nabla})(\rho \vec{u}) = -\vec{\nabla} p + \nu(\phi) \nabla^2 (\rho \vec{u}) + \vec{F}_{\text{bulk}} \quad (۲)$$

$$\nabla^2 \psi = 0 \quad (۳)$$

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

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

$$\nu = \nu_0 \left[1 + 1.5 \frac{\phi}{(1 - \phi/\phi_c)} \right]^2 \quad (۴)$$

در رابطه ۴، ϕ_c بیشینه غلظت ذرات کروی در یک جرمی و معمولاً برابر با ۰/۶ در نظر گرفته می‌شود. همچنین ν_0 برابر با لزجت سینماتیک سیال عاری از ذرات است.

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

$$m_p \frac{d\vec{u}_p}{dt} = 6\pi\mu a H_s (\vec{u}_p - \vec{u}_f) + \vec{F}_{\text{BR},p} + \vec{F}_{\text{DEP},p} + \sum \vec{F}_{\text{ext},p} \quad (۵)$$

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

$$H_s = \frac{1 + (2/3)\phi_c^{5/3}}{1 - (3/2)\phi_c^{1/3} + (3/2)\phi_c^{5/3} - \phi_c^2} \quad (۶)$$

به علاوه نیروی براونی مطابق با رابطه ۷ تعیین می‌شود.

$$\vec{F}_{\text{BR},p} = \xi \sqrt{\frac{12\pi\mu a k_B T}{\Delta t}} \quad (۷)$$

در رابطه ۷، k_B ثابت بولتزمن، T دما و ξ یک بردار تصادفی گوسی است.

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

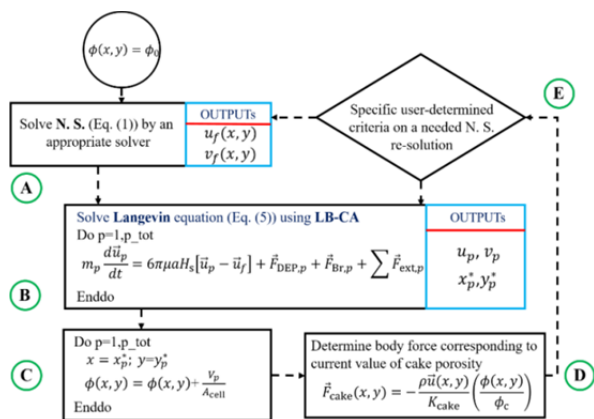
در این مقاله برای شبیه‌سازی فرآیند میکروتصفیه در ابعادی مشابه با ابعاد حقیقی سلول‌های تصفیه عرضی، یک روش محاسباتی بر مبنای استفاده از روش شبکه بولتزمن، برای حل میدان جریان گذرا در ترکیب با روش مزوسکوپیک LB-CA برای حل معادله CDE ارایه شده است. مدل LB-CA معرفی‌شده در این تحقیق، الهام‌گرفته از الگوریتم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

۲- مدل ریاضی نانو تصفیه عرضی

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

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

خواهد چرخید و به این ترتیب در هزینه محاسباتی صرفه جویی خواهد شد.



شکل ۱) فلوچارت متناظر با روش عمومی حل نانو تصفیه عرضی

برای اعمال اثر مقاومتی محیط متخلخل غشا در مقابل جریان، مشابه با نحوه عکس العمل کیک ذرات در برابر جریان، یک پارامتر R_m معرف مقاومت ماده متخلخل غشا در برابر جریان و معادلاً یک پارامتر K_m که با نسبت معکوس به ضخامت غشا (δ_m) و مقاومت غشا وابسته است، (رابطه ۱۳)، در نظر گرفته می شود. همچنین مشابه با رابطه ۱۱، نیروی مقاومت کننده غشا در برابر جریان، مطابق با رابطه ۱۴ خواهد بود

$$\frac{1}{K_m} = \mu \frac{R_m}{\delta_m} \quad (13)$$

$$\vec{F}_m = \frac{\vec{u}}{\rho K_m} \quad (14)$$

۴- روش عددی

۴-۱- شبکه بولتزمن MRT، تعیین دینامیک جریان

برای حل میدان جریان در مرحله A فلوچارت شکل ۱، لازم است تا از یک روش مناسب برای حل معادلات ناویر-استوکس بهره گرفته شود. استفاده از روش شبکه بولتزمن MRT با قابلیت برنامه ریزی برای حل در نقاط مش محاسباتی غیرمربعی، تنظیم مستقل مقادیر ویژه و سطح پایداری بالاتر نسبت به روش شبکه بولتزمن BGK، در حالی که همه امتیازات ویژه یک الگوریتم BGK در آن ظهور و بروز دارد، می تواند به عنوان ابزاری مناسب برای شبیه سازی و بررسی پدیده های مختلف جریانی به ویژه مسایلی که در آنها بیش از دو مقیاس زمانی در جزئیات فرآیند جریانی حضور دارند، مانند مساله حرکت براونی نانو ذرات در یک محیط آرام، مورد استفاده قرار گیرد. در الگوریتم های BGK و MRT، روش، براساس حل صریح دومرحله ای (مرحله برخورد محلی ذرات شبکه و مرحله مهاجرت ذرات از شبکه) معادله شبکه بولتزمن (LBE) بنا شده است.

LBE شکل جبری شده معادله بولتزمن و توصیف کننده تغییرات سینماتیک ذرات توزیع شده در یک فضای d بعدی، $\vec{x} \in \delta_x \mathbb{Z}^d$ ؛ مجموعه اعداد صحیح و در طول گام های زمانی $t_n \in \delta_t \mathbb{N}_0 := \{0, 1, \dots\}$ ، مجموعه اعداد حسابی) است. مجموعه سرعت های شبکه در LBE که جهت مجاز انتقال و نفوذ ذرات را مشخص می کند، معمولاً متقارن است. بنابراین تعداد سرعت های شبکه برابر با $q = (1 + b)$ ، شامل یک سرعت صفر و b سرعت غیر صفر است. یک مدل LB با q سرعت در فضای d بعدی معمولاً

در نهایت برای اعمال اثر نیروی دی الکتریک بر ذراتی که در محیط یک میدان الکتریکی عمل می کنند، از رابطه ۸ استفاده می شود.

$$\vec{F}_{DEP,p} = 2\pi a^3 \epsilon_f \text{Re}[f_{CM}(\epsilon_p^*, \epsilon_f^*)] \vec{\nabla}(\vec{E} \cdot \vec{E}) \quad (8)$$

در رابطه ۸، $\vec{E} = \vec{\nabla} \psi$ میدان الکتریکی و $\text{Re}[f_{CM}(\epsilon_p^*, \epsilon_f^*)]$ بخش حقیقی فاکتور کلاسیوس-موستی (با تعریف ارائه شده در رابطه ۹) به عنوان تابعی از دو ضریب دی الکتریکی مختلط ذره جامد ϵ_p^* و سیال ϵ_f^* است.

$$f_{CM}(\epsilon_p^*, \epsilon_f^*) = \frac{\epsilon_p^* - \epsilon_f^*}{\epsilon_p^* + 2\epsilon_f^*} \quad (9)$$

در یک حالت کلی، ضریب دی الکتریک مختلط هر ماده (ϵ^*) به عنوان تابعی از فرکانس زاویه ای میدان الکتریکی (ω) و رسانش ماده (σ) برابر با رابطه ۱۰ است.

$$\epsilon^* = \epsilon - i(\sigma/\omega) \quad (10)$$

که در حالت میدان الکتریکی DC، $\omega = \infty$ و بنابراین $\epsilon^* = \epsilon$ است.

۳- الگوریتم حل

برای تعیین کمی رشد کیک جرمی در تصفیه عرضی نانو ذرات و همچنین تعیین منحنی تغییرات زمانی شار جریان عبوری از غشا به عنوان تابعی از اندازه ذرات، اختلاف فشار، مکانیزم های انعکاس ذرات به جریان فعال و دیگر عوامل فیزیکی با اثرات ثانویه، حل معادلات ۱، ۲ و ۵ را می توان به عنوان راهکاری جامع در نظر گرفت. الگوریتم حل معرفی شده در این بخش (شکل ۱) می تواند بسته به ویژگی های خاص هر مساله تغییر یا توسعه یابد. همان گونه که در این شکل مشاهده می شود، در ابتدای محاسبات، غلظت در همه نقاط میدان محاسباتی برابر با یک مقدار اولیه (ϕ_0) در نظر گرفته می شود. پس از آن در مرحله A، با استفاده از یک روش حل مناسب، میدان جریان پایا در محیط محاسباتی تشکیل می شود. در مرحله B، با حل معادله لنگوین، تغییرات سرعت و موقعیت مرکز هندسی ذرات، براساس میزان نیروی درگ، نیروی براونی، نیروی الکتریکی و سایر نیروهای خارجی اعمالی به هر ذره محاسبه می شود. در مرحله C و پس از به روز رسانی موقعیت ذرات در مرحله B، مقدار غلظت در هر نقطه میدان محاسباتی به روز رسانی خواهد شد. در مرحله D براساس رابطه ۱۱، اندازه نیروی کالبدی حاصل از تخلخل کیک ذرات که در مقابل جریان مقاومت می کند ($\vec{F}_{cake}$) تعیین می شود. پارامتر K_{cake} در این رابطه مطابق با رابطه ۱۲ (رابطه کارمن-کوزنی^[9])، به عنوان تابعی از مقاومت ماده کیک (R_{cake}) و μ ، ϕ_c تعیین می شود.

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

$$\frac{1}{K_{cake}} = \mu R_{cake} = \mu \frac{C \phi_c^2 S_c^2}{(1 - \phi_c)^3} \quad (12)$$

در رابطه ۱۱ پارامتر C ، یک مقدار ثابت و برابر با ۵ و S_c برابر با ۳/۴ هستند.

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

بعد، روش مزوسکوپیک - مونته‌کارلو LB-CA براساس الگوریتم معرفی شده توسط ماسولت و چوپارد (حرکت محدود و اتفاقی ذرات در هندسه سلولی) [11] معرفی شده است.

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

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

$$Pr_i = \max\left(0, \vec{u}_p \cdot \vec{c}_i \frac{\Delta t}{\Delta x}\right) \quad (17)$$

$$= \max\left(0, \frac{\Delta \vec{x}_p}{\Delta x} \cdot \vec{c}_i\right), i = 1 - 4$$

که $\Delta \vec{x}_p = \vec{u}_p \Delta t$ است. همچنین موقعیت بعدی ذره $(\vec{x}_p^*)$ با استفاده از رابطه ۱۸ تعیین می‌شود.

$$\vec{x}_p^* = \vec{x}_p + \lambda_1 \vec{c}_1 + \lambda_2 \vec{c}_2 + \lambda_3 \vec{c}_3 + \lambda_4 \vec{c}_4 \quad (18)$$

در رابطه ۱۸، پارامترهای λ_i ، متغیرهای بولی هستند و مقادیر λ_i با احتمال Pr_i برابر با یک هستند. به‌طور مثال زمانی که $Pr_1 > 0$ و همچنین $Pr_2 > 0$ هستند (متعاقباً) $Pr_3 = Pr_4 = 0$ و $\lambda_3 = \lambda_4 = 0$ ، یعنی زمانی که ذره در اثر نیروهای اعمالی دارای جابه‌جایی‌های مثبت در جهات راست و به سمت بالاست (شکل ۲-۲). احتمال این که ذره در موقعیت فعلی خود بدون حرکت باقی بماند $(\lambda_1 = 0, \lambda_2 = 0)$ ، برابر با $(1 - Pr_1)(1 - Pr_2)$ خواهد بود. به‌منظور بارگذاری این رویه انتقالی، در هر گام زمانی و برای هر ذره واقع در مرکز یک مش، یک زوج عدد تصادفی (r_1, r_2) ، به‌وسیله یک روال مناسب تولید اعداد تصادفی تولید می‌شود. پس از آن با الگوریتم مونته‌کارلو ارایه‌شده در رابطه ۱۹، وضعیت نهایی

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

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

$$f_i(\vec{x} + \vec{c}_i \delta t, t_n + \delta t) = f_i^*(\vec{x}, t_n) = \Omega(f_i) + F_i \quad (15)$$

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

$$\vec{c}_i = \begin{cases} (0, 0), & i = 0 \\ (\pm 1, 0)c, (0, \pm 1)c & i = 1 - 4 \\ (\pm 1, \pm 1)c, & i = 5 - 8 \end{cases} \quad (16)$$

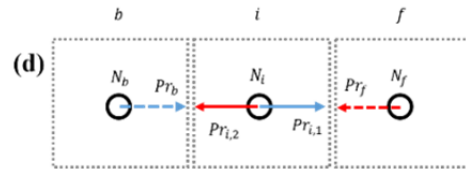
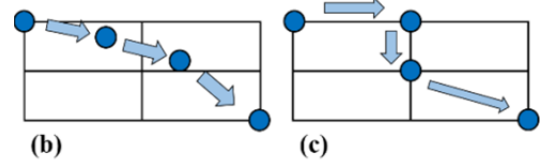
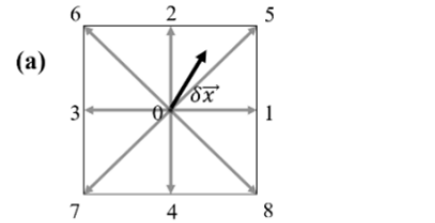
در اینجا $c = \delta x / \delta t$ و δx و δt گام‌های مکانی و زمانی هستند. در رابطه ۱۵، F_i و $f_i(\vec{x}, t_n)$ به‌ترتیب بردار نیروی وارد بر المان سیال در هر جهت شبکه و بسط هرمیت تابع توزیع بولتزمن در شبکه هستند. همچنین Ω عملگر برخورد است.

ممان‌های پایای جریان، به‌طور مثال چگالی ذرات شبکه ρ و $j_\alpha = \rho u_\alpha$ ، تابعی از تابع توزیع f_i هستند. برای اطلاعات بیشتر در زمینه چگونگی بارگذاری دینامیک شبکه بولتزمن و اعمال شرایط مرزی می‌توان به منبع کروجر و همکاران [12] مراجعه کرد. یک محدودیت آشکار بر استفاده از روش شبکه بولتزمن در حل مسائل مختلف، ارتباط ویژه گام زمانی با گام مکانی حل مساله است. به‌عنوان مثال زمانی که طول محیط جریان (در یک مساله تصفیه عرضی در محیط یک ماکروفلتر) ۷ میلی‌متر است و ۴۰۰ نقطه با چیدمان هم‌فاصله مربعی (مورد استفاده در روش استاندارد شبکه بولتزمن) در این طول، آرایش نقاط محاسباتی محیط حل را ایجاد می‌کنند که برای گام مکانی ۵-۷۵۵/۱ متر، گام زمانی برابر با ۵-۱۸/۵ ثانیه خواهد بود. به این ترتیب، برای حل یک فرآیند تصفیه با دوره زمانی ۱۰۰ دقیقه، فرآیند حل باید حدود ۲ میلیون گام زمانی پی در پی اجرا شود. این حجم از محاسبات برای اجرا در یک کامپیوتر شخصی، اگر نه غیرممکن که بسیار پرهزینه است، با اهداف اصلی فرآیند شبیه‌سازی در رقابت با محاسبات آزمایشگاهی در تناقض قرار خواهد داشت.

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

ذره $(\vec{x}_p^*)$ ، از وضعیت اولیه $(\vec{x}_p)$ ، اعداد تصادفی r_1 و r_2 و دو عدد Pr_1 و Pr_2 ، تعیین خواهد شد.

$$\begin{cases} r_1 > Pr_1, r_2 > Pr_2 \rightarrow \vec{x}_p^* = \vec{x}_p \\ r_1 < Pr_1, r_2 > Pr_2 \rightarrow \vec{x}_p^* = \vec{x}_p + \vec{c}_1 \Delta t \\ r_1 > Pr_1, r_2 < Pr_2 \rightarrow \vec{x}_p^* = \vec{x}_p + \vec{c}_2 \Delta t \\ r_1 < Pr_1, r_2 < Pr_2 \rightarrow \vec{x}_p^* = \vec{x}_p + \vec{c}_5 \Delta t \end{cases} \quad (19)$$



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

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

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

بارگذاری LB-CA بحث شده است.

۴-۲-۱- استخراج معادله CDE یک‌بعدی از LB-CA

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

به‌طور مشابه در یک فضای یک‌بعدی ذرات هر سلول، حاصل مهاجرت ذرات از دو همسایه قبلی و بعدی به موقعیت سلول و همچنین مهاجرت یا ابقای ذرات سلول هستند. وضعیت سه سلول مورد بحث در محیط یک‌بعدی در شکل ۲-d نمایش داده شده است. مطابق با شکل ۲-d، ذرات در سلول i (سلول مرکزی) می‌توانند با احتمال $Pr_{i,1}$ (در صورتی که جهت سرعت ذره به سمت راست باشد)، به همسایه بعدی (سلول f) یا با احتمال $Pr_{i,2}$ (در صورتی که جهت سرعت ذره به سمت چپ باشد)، به همسایه قبلی (سلول b)، مهاجرت نمایند. همچنین ذرات سلول f با احتمال Pr_f ، و ذرات سلول b با احتمال Pr_b ، به سلول i وارد خواهند شد. بنابراین معادله دینامیک انتقال ذرات را می‌توان به شکل رابطه ۲۰ نوشت.

$$N_i^1 = N_i^0 - N_i^{\text{out}} + N_f^{\text{in}} + N_b^{\text{in}} \quad (20)$$

که N_i^0 تعداد اولیه ذرات در سلول i ، N_i^{out} ذرات مهاجرت‌کرده از سلول i ، N_f^{in} ذرات ورودی به سلول i از سلول f و N_b^{in} ذرات ورودی به سلول i از سلول b هستند. بنابراین مقدار هر یک از عبارات N_i^0 ، N_i^{out} ، N_f^{in} و N_b^{in} ، از احتمالات انتقال $Pr_{i,1}$ ، $Pr_{i,2}$ ، Pr_f و Pr_b و به‌ترتیب آرایه‌شده در روابط ۲۱-۲۴ تعیین می‌شوند.

$$N_i^0 = \phi_i A_{\text{cell}} \quad (21)$$

$$N_i^{\text{out}} = \phi_i (Pr_{i,1} + Pr_{i,2}) A_{\text{cell}} \quad (22)$$

$$N_f^{\text{in}} = \phi_f Pr_f A_{\text{cell}} \quad (23)$$

$$N_b^{\text{in}} = \phi_b Pr_b A_{\text{cell}} \quad (24)$$

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

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

$$\phi_i^1 = \phi_i \left(1 - (Pr_{i,1} + Pr_{i,2}) \right) + \phi_f Pr_f + \phi_b Pr_b \quad (25)$$

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

$$\begin{aligned} \phi_i^1 &= \phi_i \left(1 - (Pr_{i,1} + Pr_{i,2}) \right) \\ &+ \left(\phi_i + \frac{\partial \phi_i}{\partial x} \delta x + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \phi_i}{\partial x^2} \delta x^2 \right) \left(Pr_{i,2} + \frac{\partial Pr_{i,2}}{\partial x} \delta x \right) \\ &+ \left(\phi_i - \frac{\partial \phi_i}{\partial x} \delta x + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \phi_i}{\partial x^2} \delta x^2 \right) \left(Pr_{i,1} - \frac{\partial Pr_{i,1}}{\partial x} \delta x \right) \end{aligned} \quad (26)$$

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

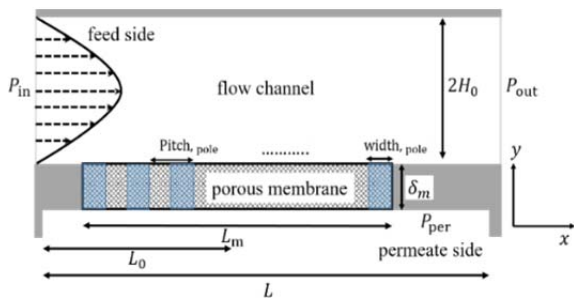
$$u_p \frac{\delta t}{\delta x} = Pr_{i,1} - Pr_{i,2} \quad (27)$$

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

دو سوی کانال P_{in} و P_{out} و اختلاف فشار جریان اصلی و پایین دست غشای متخلخل (TMP) تشکیل می‌شود. رابطه بین TMP و فشار در پایین دست المان تصفیه، P_{per} مطابق با رابطه ۳۲ در نظر گرفته می‌شود. در این رابطه، L_0 طولی برابر فاصله از ورودی کانال تا نیمه طول غشا است.

$$TMP = P_{in} - \frac{L_0}{L}(P_{in} - P_{out}) - P_{per} \quad (32)$$

در انجام محاسبات اختلاف فشار TMP ، در بازه ۲۱ تا ۶۱ kpa تغییر داده شده است. همچنین اندازه ذرات در حدود ذرات کلونیدی و از مرتبه ۱۰۰ nm (دو مقدار ۱۵۰ و ۳۰۰ nm) در نظر گرفته شده و غلظت ماده جامد در محلول بر حسب نسبت سطح به سطح، معادل با 10^{-4} حجم به حجم در شرایط آزمایشگاهی برابر با 9×10^{-4} فرض شده است. بنابراین با نسبت اندازه $\delta x / \delta y = 15$ برای هر سلول، در ابتدا در هر سلول برای اندازه ذرات ۱۵۰ و ۳۰۰ nm به ترتیب و به طور متوسط ۲ و ۵/۰ ذره قرار داده شده‌اند. علاوه بر این برای محاسبه اثر میدان الکتریکی DC، بر فرآیند تصفیه عرضی ضریب دی الکتریک سیال حامل (آب) ۸۰ و ضریب دی الکتریک ماده جامد (SiO_2) برابر با ۳/۹ هستند. همچنین برای تشکیل میدان الکتریکی مطابق با شکل ۳، هندسه ممبرین از پل‌های الکتریکی تراوایی تشکیل شده که اندازه گام پل‌ها ۲ برابر عرض هر پل بوده و به هر پل الکتریکی، یک ولتاژ الکتریکی DC معین، $(\psi = \psi_m)$ متصل شده است. مقدار ولتاژ DC، بین صفر تا ۵۰۰ V و اندازه عرض پل‌ها بین ۲۰۰ تا ۹۰۰ μm تغییر نموده‌است.



شکل ۳) نمایه محیط دو بُعدی نانوتصفیه عرضی و شرایط مرزی متناظر

۶- بررسی اعتبار

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

$$\frac{\partial \phi_i}{\partial t} + \frac{\partial(\phi_i u_p)}{\partial x} = \left[\frac{1}{2} (Pr_{i,1} + Pr_{i,2}) \frac{\delta x^2}{\partial t} \right] \frac{\partial^2 \phi_i}{\partial x^2} + \frac{\partial \phi_i}{\partial x} \frac{\partial (Pr_{i,1} + Pr_{i,2})}{\partial x} \frac{\delta x^2}{\partial t} - \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \phi_i}{\partial x^2} \frac{\partial u_p}{\partial x} \delta x^2 \quad (28)$$

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

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial(u_p \phi)}{\partial x} = D \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \quad (29)$$

لازم است در فضای یک بُعدی در هر نقطه:

$$D = \frac{1}{2} (Pr_1 + Pr_2) \frac{\delta x^2}{\partial t} \quad (30)$$

و به طور مشابه در فضای دو بُعدی در هر نقطه

$$D = \frac{1}{2} (Pr_x + Pr_y + Pr_x Pr_y) \frac{\delta r^2}{\partial t} \quad (31)$$

باشد که در این رابطه $Pr_x = (Pr_1 + Pr_3)$ و $Pr_y = (Pr_2 + Pr_4)$ و δr کمینه اندازه گام مکانی هستند.

بنابراین تولید اعداد تصادفی با توزیع احتمال یکنواخت با مقدار متوسط غیر صفر می‌تواند پاسخگوی فرآیند حل باشد. همچنین برای مشابهت کامل بین معادلات ۲۸ و ۲۹ لازم است که عبارت سوم سمت راست معادله ۲۸ که یک مرتبه از دو عبارت اول کوچک‌تر بوده، حذف شود. در این صورت در هر نقطه δPr از مرتبه بزرگی یک $O(1)$ خواهد بود. یعنی با شروع از یک یا چند نقطه مبنا در میدان حل (که این نقاط حداقل $10 \delta x$ با هم فاصله دارند)، باید تغییرات δPr در هر نقطه به نحوی تنظیم شود که نسبت به سایر نقاط تعیین وضعیت شده همسایه در گام زمانی فعلی کوچک‌تر از ۱/۰ باشد.

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

برای حل سلولی دینامیک ذرات، در شرایطی که میدان الکتریکی بر خط سیر ذرات تأثیر قابل توجهی دارد، لازم است تا عبارت $F_{DEP,p} = F_{DEP,p}(x, y)$ به درستی تعیین شود. در این شرایط باید معادله ۳ با یک الگوریتم عددی مناسب حل شود. در این کار، برای حل معادله پتانسیل الکتریکی، یک روش حجم کنترل ضمنی استفاده شده است. هندسه نقاط به نحوی است که تعداد سلول‌ها و شبکه‌های مستطیلی آرایش‌یافته در هر ردیف با هم برابرند ($imax_{IB} = imax_{FV}$). همچنین نسبت تعداد سلول‌ها در هر ستون به تعداد شبکه‌ها در آن ($jmax_{FV} / jmax_{IB}$) مقداری صحیح بزرگ‌تر یا مساوی یک (در این مقاله $jmax_{FV} / jmax_{IB}$) برابر با ۱۵) است. در این کار به علت ضخامت ناچیز کیک جرمی در قیاس با بعد جریان در ماکروسلول تصفیه، حل معادله ۳، تنها یک بار و در ابتدای محاسبات انجام شده $jmax_{IB}$ برابر با ۵٪ عرض جریان در نظر گرفته شده است.

۵- اعمال روش پیشنهادی به یک مساله نوعی

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

و برای غلظت بالادستی (ϕ_0)، 0.005 ، 0.01 ، و 0.03 درصد حجمی انجام داده‌اند که در این بین، با توجه به ارتباط دوطرفه شار جریان و پارامترهای کمی کیک، یعنی میزان ضخامت و مقاومت ماده، نتایج آزمایشات درباره اثر اختلاف فشار (مرتبط با آهنگ شارش سیال از محیط متخلخل غشا) و اندازه ذرات (مرتبط با پارامترهای کمی کیک) به‌عنوان مرجعی برای آزمایش روش عددی در تعیین صحیح سینماتیک جریان تصفیه- رشد کیک مورد استفاده قرار گرفته‌اند.

از نظر پارامترهای هندسی- مادی تصفیه، در انجام آزمایشات سلول تصفیه به‌شکل یک محیط استوانه‌ای با طول و قطرهای به‌ترتیب 250 و 7mm بوده است. ذرات جامد از جنس جامد سیلیکا (SiO_2) با نام‌های تجاری PST-1 و PST-3 انتخاب شد و بار الکتریکی این ذرات خنثی بوده است. در نهایت، تخلخل ماده کیک به‌دست‌آمده از آزمایشات (ϵ_c)، برابر با 0.37 است که به این ترتیب غلظت ماده جامد در محیط کیک $\phi_c = 1 - \epsilon_c = 0.63$ خواهد بود.

از نظر پارامترهای عملیاتی تصفیه، در انجام آزمایشات تجربی سرعت متوسط جریان در سلول تصفیه برابر با 0.246ms^{-1} بوده و با توجه به رابطه کارمن- کوزنی (رابطه ۱۱)، برای ذرات به اندازه‌های 150 و 300nm ، مقاومت هیدرودینامیک ماده کیک در مقابل جریان نشستی، به‌ترتیب برابر با 4×10^{-6} و $1/125 \times 10^{-6}\text{m}^{-2}$ هستند. همچنین مقاومت محیط غشا برابر با $1/1 \times 10^{-10}\text{m}^{-1}$ خواهد بود.

برای به‌دست‌آوردن عبارت K_m در معادله ۱۴، ابتدا باید ضخامت غشای مورد استفاده در آزمایشات معین شود. با توجه به این که در یک مقاله^[۱۴]، به‌ازای اختلاف فشار 61kPa ، شار جریانی معادل با $4/7 \times 10^{-6}\text{ms}^{-1}$ در سوراخ‌های استوانه‌ای ممبرین با اندازه 20nm ایجاد شده است، براساس رابطه بین سرعت متوسط جریان آرام در لوله، اختلاف فشار، لزجت دینامیکی، اندازه سوراخ و طول سوراخ و به‌عبارتی ضخامت ممبرین $\delta_m = \Delta p D^2 / 32 \mu v$ ، برابر با $16\mu\text{m}$ خواهد بود. در این صورت، مقدار فیزیکی ضریب سرعت در رابطه ۱۴، $1/\rho K_m$ ، برابر با $6/88 \times 10^{-9}\text{s}^{-1}$ است. برای تبدیل این پارامتر فیزیکی (مشخص‌شده با پانویس real) به پارامتر معادل آن در فضای شبکه بولتزمن (مشخص‌شده با پانویس lb) از ارتباط ابعادی بین $R_{\text{mem}} = R_m / \delta_m$ ، در دو فضا، مطابق با رابطه ۳۳ استفاده می‌شود.

$$\frac{R_{\text{mem,lb}}}{R_{\text{mem,real}}} = \left(\frac{l_{\text{real}}}{l_{\text{lb}}} \right)^2 \quad (33)$$

در اینجا بعد هیدرودینامیک مقاومت‌کننده در برابر جریان عبوری از غشا (l_{real}) برابر با قطر سوراخ غشا (20nm) و بعد هیدرودینامیک در محیط شبکه، معادل با سوراخ‌هایی بوده که مستقل از هم مسیر جریان را فراهم آورده‌اند و بنابراین برابر با یک است. همچنین با توجه به این که چگالی (ρ) و لزجت سینماتیک (ν)، در فضای شبکه بولتزمن به‌ترتیب برابر با یک و $(2\tau - 1)/6$ هستند، برای ضریب تخفیف $\tau = 1$ (که در همه محاسبات از آن استفاده شده است)، مقدار $1/\rho K_m = (\mu/\rho) R_{\text{mem}}$ در فضای شبکه برابر با $27/52$ می‌شود که این مقدار بسیار بیشتر از بیشینه مجاز برای ضریب سرعت (0.5) است. بنابراین برای اجرای یک حل صحیح در محیط شبکه بولتزمن، ضخامت غشا در محیط حل عددی، چند مرتبه بزرگ‌تر از مقدار حقیقی در نظر گرفته می‌شود. در انجام محاسبات ارتفاع کانال 7mm با 450 نقطه محاسباتی پوشش داده شده، از این رو، گام فضایی δx ، برابر با $1/55 \times 10^{-6}\text{m}$ است.

همچنین محیط غشای یک مستطیل به عرض 40lu ؛ گام شبکه؛ معادل با δx) اختیار شده است. به این ترتیب مقدار R_{mem} ، در فضای حقیقی برابر با $1/77 \times 10^{-9}\text{s}^{-1}$ و در نتیجه، ضریب سرعت برابر با 0.11 و در محدوده مجاز قرار خواهد داشت.

برای تعیین عبارت ضریب سرعت در معادله $(1/\rho K_{\text{cake}})$ ، مشابه با حالت تعیین ضریب سرعت برای غشای ممبرین عمل می‌شود. با این تفاوت که l_{real} در معادله ۳۳، برابر با فاصله تعادلی سطوح ذرات کیک (h_{eq}) است. در حقیقت، h_{eq} فاصله‌ای است که در آن نیروهای جذبی و اندروالسی، جذبی اسید پایه، دفعی الکترواستاتیکی سطح- مایع قطبیده و نیروی مقاومت‌کننده لایه لزج سیال بین سطوح کروی ذرات به‌هم‌زدیک‌شونده، به تعادل می‌رسد و از نزدیکی یا دورشدن بیشتر سطوح ذرات ممانعت به عمل می‌آید. برای تعیین h_{eq} ، از روابط لازم برای هر یک از نیروهای فوق که در یک پژوهش^[۸] آمده، استفاده شده است و مقدار h_{eq} ، برای ذراتی به اندازه‌های 150 و 300nm به‌ترتیب $5/5$ و 7nm و از این رو، ضریب سرعت برای این دو اندازه ذرات، به‌ترتیب 0.24 و 0.11 خواهند بود.

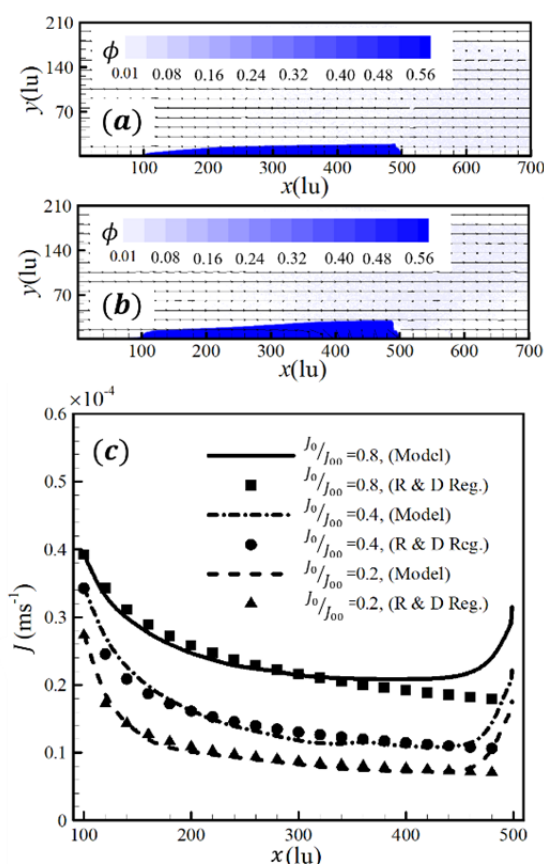
پس از ارایه نکات لازم برای تعیین ضریب سرعت محیط‌های غشا و کیک در فضای شبکه از مقدار حقیقی آن، ذکر یک نکته دیگر ضروری است. در انجام آزمایشات، سرعت متوسط جریان اصلی 0.246ms^{-1} و طول سلول تصفیه برابر با 250mm بوده است. در

صورت تنظیم τ بر عدد یک (به‌منظور انجام محاسبات در سریع‌ترین توالی ممکن)، سرعت متوسط اصلی در ابعاد شبکه 0.63ult^{-1} ؛ گام مکانی شبکه و lt ؛ گام زمانی شبکه) خواهد بود که این مقدار خیلی بیشتر از حدود پایداری سرعت شبکه (0.3ult^{-1}) است. در حقیقت برای اجرای محاسبات در روش شبکه بولتزمن در یک فرآیند حل پایدار و به‌منظور نیل به حداکثر مشابهت شرایط جریان به یک جریان تراکم‌ناپذیر لازم است تا حداکثر سرعت در محیط حل عددی از مرتبه 0.1ult^{-1} باشد. از طرف دیگر، زمانی که برای ارتفاع 7mm ، جهت عمودی با 450 نقطه پوشش داده شده است، برای پوشش دادن جهت افقی (به طول 250mm) نیاز به حدوداً 16100 نقطه خواهد بود. اما حل در یک محیط با اندازه 450×16100 بسیار زمان‌بر خواهد بود. این مشکل حتی با انجام محاسبات در میدان نقاطی که نسبت گام مکانی طولی به گام مکانی عرضی ($\delta x/\delta y$) به اندازه دلخواه بزرگ‌تر از یک تنظیم شده است (با استفاده از روش شبکه بولتزمن MRT در میدان نقاط محاسباتی با چیدمان غیرمربعی)، بهبود چندانی نخواهد یافت. چون در این شرایط مساحت سلول‌ها افزایش یافته و هر سلول برای پُرشدن و رسیدن غلظت محتوای آن به حالت کیک جرمی با $\phi = \phi_c$ به نسبت $\delta x/\delta y$ ، به انبساط شدن تعداد ذرات بیشتری نیازمند است، به این ترتیب، زمان محاسبات مجدداً افزایش خواهد یافت.

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

$$u_n \phi - D \frac{\partial \phi}{\partial n} = 0 \quad (34)$$

تصفیه است. بنابراین عبارت x_{cr} ، با فرض یک تناظر خطی معکوس بین شار جریان و ضخامت کیک، طول جدید محدوده رشد کیک است. در حقیقت می‌توان فرض کرد، در هر لحظه، رشد کیک (مشابه با فرضیات رومرو و دویس)، معادل با یک فرآیند شبه تعادلی بوده که در آن سطح مجموعه متخلخل کیک و غشا، برابر یک سطح اولیه جدید و x_{cr} ، طول پیدایش نقاط کیک در این سطح جدید است. با توجه به این که با رشد ضخامت کیک، احتمال جذب ذرات در طول‌های کمتر افزایش خواهد یافت، انتظار می‌رود مقدار x_{cr} ، با زمان رفته‌رفته کاهش یابد. در نمودار ۱- c، نقاط به‌دست‌آمده از رابطه ۳۶ و برازش یافته بر نتایج حل عددی به نمایش درآمده‌اند. در این نمودار، نتایج به‌دست‌آمده برای منحنی شار جریان در طول غشا (از نقطه $x = 100\text{lu}$ تا نقطه $x = 500\text{lu}$)، بر حسب نسبت شار جریان در ابتدای غشا به شار جریان در ابتدای غشای تمیز (J_0/J_{00}) ، ترسیم و با مقدار متناظر به‌دست‌آمده از فرمول رومرو و دویس مقایسه شده‌اند. مطابق با این نمودار در همه حالات، منحنی شار عددی به‌خوبی نمایه‌ای با توان $0.33/3$ را دنبال کرده و نزدیکی نتیجه حل عددی به حل تئوری در شرایط منتهی به پایان تصفیه (زمانی که نسبت J_0/J_{00} به صفر نزدیک می‌شود) افزایش یافته است. همچنین در جدول ۱، تغییرات نسبت x_{cr}/L_m بر حسب J/J_{00} ذکر شده که مطابق با این اعداد رفته‌رفته با نزدیکی بیشتر به شرایط انسداد کامل غشا و مطابق با انتظار طول x_{cr} کاهش یافته است.



نمودار ۱ رشد کیک جرمی در دو گام زمانی متفاوت در نیم‌عمر رشد کیک و در انتهای محاسبات زمانی و همچنین تغییرات شار جریان در طول غشا، رسم‌شده بر حسب نسبت J_0/J_{00} و مقایسه‌شده با حل تئوری رومرو و دویس: (a) در نیم‌عمر رشد کیک، (b) در انتهای محاسبات زمانی که $\langle J \rangle/J_0 = 0.2$ است، (c) تغییرات شار جریان در طول غشا، رسم‌شده بر حسب نسبت J_0/J_{00} و مقایسه‌شده با حل تئوری رومرو و دویس

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

$$\alpha = \frac{D_{num}}{D_{cell}} = \frac{(L_m U_{cr})_{num}}{(L_m U_{cr})_{cell}} = \frac{(Pr_x + Pr_y + Pr_x Pr_y)_{num}}{(Pr_x + Pr_y + Pr_x Pr_y)_{cell}} \quad (35)$$

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

۱-۶- مقایسه با حل تئوری رومرو و دویس

پس از این، با بهره‌گیری از امکان به‌وجودآمده در ایجاد مشابهت بین یک محیط حقیقی و محیط حل، $U_{cr,num}$ و $L_{m,num}$ ، به‌ترتیب برابر با 0.0246ms^{-1} و 6mm در نظر گرفته شده‌اند که به این ترتیب طول غشا 400lu و ضریب $\alpha = 2/4 \times 10^{-3}$ خواهند بود. همچنین در این تحقیق، طول میدان محاسباتی 700lu منظور شده است.

در نمودار ۱، دو نمایه از تغییرات ضخامت کیک جرمی با زمان برای یک لحظه در نیم‌عمر تصفیه، یعنی زمانی که شار عبوری از غشا به نصف حالت اولیه کاهش یافته است (نمودار ۱- a) و نهایتاً برای زمان 175min که در آن شار جریان تا ۲۰٪ شار اولیه کاهش یافته است (نمودار ۱- b) نمایش داده شده‌اند. در این حالت TMP برابر با 41kPa و متوسط شار جریان پایا از غشای تمیز برابر با 0.3mms^{-1} بوده‌اند. مطابق با نمودار، ضخامت کیک جرمی از ابتدای غشا تا انتهای آن رفته‌رفته افزایش یافته است و این موضوع با حقیقت فرآیند تشکیل کیک مورد اشاره در بسیاری از مراجع [9, 10] مطابقت دارد. پس از این، در نمودار ۱- c، منحنی شار جریان در طول غشا، در چند لحظه از تصفیه با حل تئوری رومرو و دویس مقایسه شده است. مطابق با بحث ارایه‌شده به‌وسیله رومرو و دویس، در شرایطی که حاصل تعارض اختلاف فشار ترمودینامیک اسمزی و اختلاف فشار جریان، تشکیل یک لایه بسیار نازک از کیک جرمی در طولی بیش از x_{cr} (از ابتدای غشا) باشد، شار جریان پایای عبوری در طول غشا (J_{ss})، از مقدار شار جریان در ابتدای طول غشا (J_0) و با رابطه ۳۶ تعیین می‌شود.

$$J_{ss} = J_0 \left(1.5 \frac{(x - x_{cr0})}{x_{cr}} + 1 \right)^{-1/3} \quad (36)$$

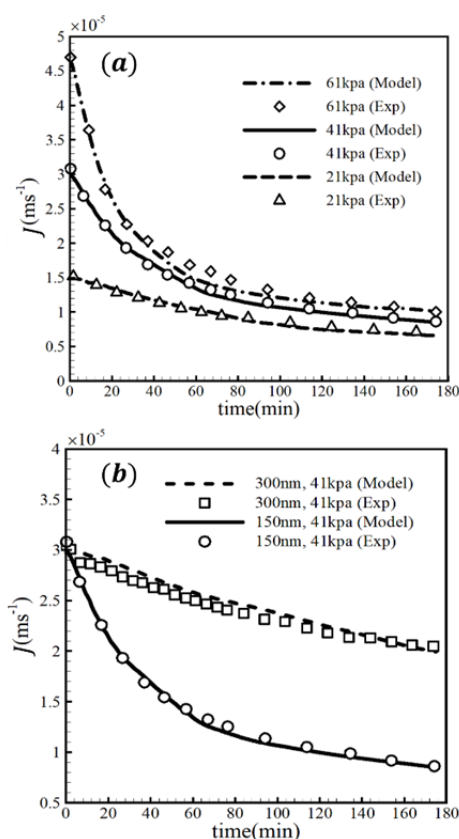
در حالی که در حل رومرو و دویس، x_{cr} و x_{cr0} با هم برابرند، برای استفاده از این رابطه در شرایطی که ضخامت کیک بیش از آن است که تنها حاصلی از تقابل اختلاف فشار اسمزی و جریان انگاشته شود، می‌توان بین مقدار x_{cr0} ، در صورت کسر و x_{cr} ، در مخرج تمایز قائل شد. در حقیقت، در حالت مد نظر در این مقاله (تشکیل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

J/J_{00}	۰/۲	۰/۳	۰/۴	۰/۵	۰/۶	۰/۸
x_{cr}/L_m	۰/۰۲۵	۰/۰۳	۰/۰۳۷۵	۰/۰۵	۰/۰۸۷۵	۰/۱۵

۶-۲- مقایسه با نتایج تجربی

۶-۲-۱- اثر اختلاف فشار و اندازه ذرات بر منحنی تصفیه

در بخش اول بررسی اعتبار در مقایسه نتایج عددی با نتایج تجربی، منحنی شار به دست آمده از محاسبات برای سه TMP ۲۱، ۴۱، و ۶۱ kpa، با نتایج تجربی مشابه مقایسه شده‌اند (نمودار ۲-ا). در این حالات اندازه ذرات ۱۵۰ nm و ولتاژ پل‌های الکتریکی ۰.۷ بوده‌اند. همچنین در نمودار ۲-ب، تغییرات شار جریان به دست آمده از شبیه‌سازی با نتایج تجربی برای دو اندازه ذرات ۱۵۰ و ۳۰۰ nm مقایسه شده است. در این حالت TMP برابر با ۴۱ kpa است. که ذرات اندازه کوچک‌تری دارند، محسوس‌تر و بیشتر است.

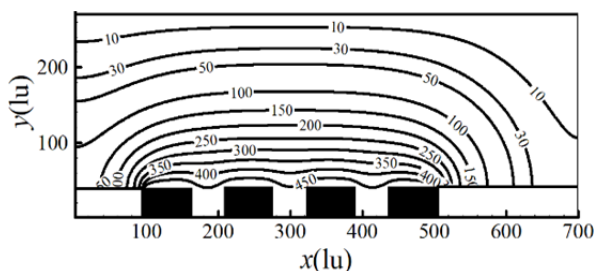


نمودار ۲) تغییرات شار جریان با زمان در شرایط مختلف حاصل از شبیه‌سازی و نتایج تجربی ارایه شده توسط هونگ و همکاران [14]: (a) تغییرات شار جریان با زمان در شرایطی که اندازه ذرات ۱۵۰ nm است و TMP در بازه ۲۱ تا ۴۱ kpa تغییر می‌کند، (b) تغییرات شار جریان با زمان برای ذرات ۱۵۰ و ۳۰۰ nm، در شرایطی که TMP برابر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

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

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

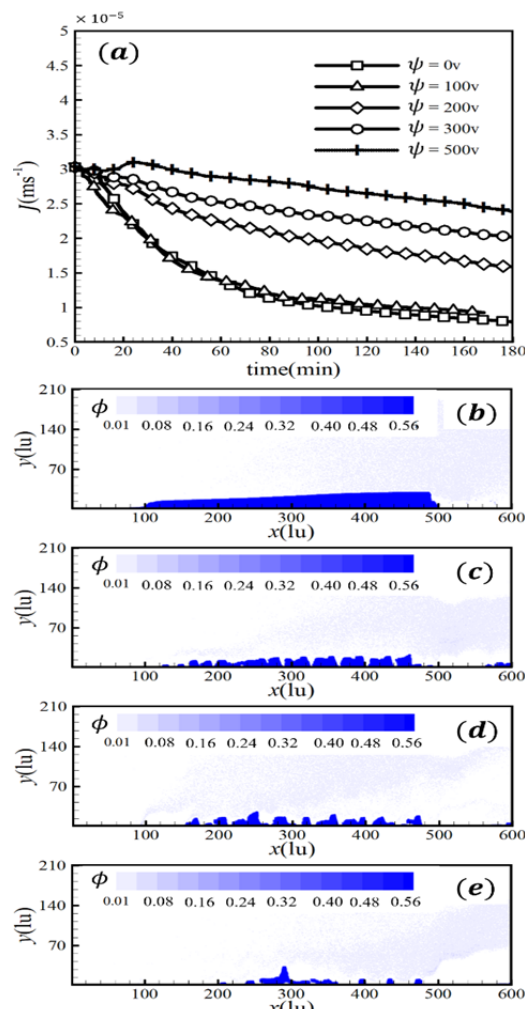
اگر چه پیش از این در برخی مقالات، گروهی از محققان به مطالعه اثر میدان الکتریکی در کاهش جرم گرفتگی و انسداد غشای تصفیه پرداخته‌اند، اما عمده این تلاش‌ها به علت عدم برخورداری از شرایط شبیه‌سازی اثر دوسویه کیک جرمی و جریان، تصویری کامل از وقایع تصفیه ضمن اثرگذاری میدان الکتریکی بر مسیر تعداد بی‌شماری از ذرات را ارایه ننموده‌اند. ملا و باتاچاری [15]، در چند پژوهش عددی شاخص در این حوزه، به بررسی اثر میدان‌های الکتریکی DC و AC، بر خط سیر ذرات پرداخته‌اند، اما با استفاده از این دیدگاه تحلیلی- عددی غیر از تعیین مرزهای بین یک فرآیند تصفیه پاک و تصفیه دارای رسوب، نتیجه عمده دیگری قابل استحصال نیست. به‌ویژه با این روش حل نمی‌توان به درکی از تمایزات رشد کیک در شرایطی که میدان الکتریکی تنها می‌تواند مانع از تشکیل بخشی از کیک جرمی شود، دست یافت. یک راه برای برون‌رفت از این نقصان در تحلیل، حل مزوسکوپیک معادله CDE با امکان تحلیل خط سیر ذرات در یک فرآیند دوسویه است. در حقیقت با استفاده از LB-CA، اگر از یک طرف می‌توان معادله CDE را در مقیاس مزوسکوپیک حل کرد، همزمان امکان اعمال اثراتی در مقیاس میکروسکوپیک به وجود خواهد آمد. در این بخش، نمونه‌هایی از نتایج حل جریان تصفیه در حضور میدان الکتریکی DC ارایه شده است. نتایج برای TMP برابر با ۴۱ kpa، اندازه ذرات برابر با ۱۵۰ nm و اندازه پل‌های الکتریکی ۲۰۰، ۳۰۰، و ۹۰۰ μm محاسبه شده‌اند. میدان الکتریکی اعمالی به پل‌های الکتریکی از نوع DC و اندازه آن برابر با ۱۰۰، ۲۰۰، ۳۰۰ و ۵۰۰ V در نظر گرفته شده است. همچنین، ضریب دی‌الکتریک آب و ماده جامد SiO_2 به ترتیب ۸۰ و ۳/۹ هستند که به این ترتیب مولفه Y نیروی الکتریکی محاسبه شده از رابطه ۸، در سمت جریان مثبت و در تقابل با نیروی درگ سیال و رشد رسوب عمل می‌نماید. در نمودار ۳، هندسه دوبعدی میدان الکتریکی ایجاد شده در حدود پل‌های غشا نمایش داده شده و در این تصویر، اندازه پل‌ها ۹۰۰ μm و ولتاژ هر پل ۵۰۰ V است.



نمودار ۳) تصویری از کانتور میدان الکتریکی DC توسعه یافته در جهت جریان تصفیه در زمان ولتاژ اعمالی ۵۰۰ V به پل‌های الکتریکی

۱-۷- بزرگای ولتاژ اعمالی، هندسه رسوب و اثرات ضد رسوبی متناظر

در نمودار ۴-ا، گراف تغییرات زمانی شار جریان به عنوان تابعی از بزرگای ولتاژ اعمالی به پل‌های غشا نمایش داده شده است. در انجام محاسبات این نمودار، اندازه پل‌های الکتریکی مستطیلی همسان و هم‌فاصله، برابر با $300\mu\text{m}$ در نظر گرفته شده و ولتاژ اعمالی در بازه $0-500\text{V}$ تغییر داده شده است.



نمودار ۴) منحنی کاهش شار جریان به عنوان تابعی از پتانسیل الکتریکی DC و نمایه‌های دو بعدی رسوب بر سطح غشای متاثر از اثر ضد رسوبی میدان پتانسیل الکتریکی DC، برای ولتاژهای اعمالی؛ (a) منحنی کاهش شار جریان به عنوان تابعی از پتانسیل الکتریکی DC، (b-e) نمایه‌های دو بعدی رسوب بر سطح غشای متاثر از اثر ضد رسوبی میدان پتانسیل الکتریکی DC، برای ولتاژهای اعمالی (a) ۰.۷، (b) ۲۰۰، (c) ۳۰۰، (d) و ۵۰۰؛ در این نمودارها، ممبرین شامل ۲۰ پل مستطیلی هم‌فاصله بوده که گام هر پل ۲ برابر عرض آن است. همچنین TMP برابر با 4kPa است

با توجه به نمودار ۴-ا در یک روند کلی با افزایش میدان الکتریکی، فرآیند تصفیه رفته‌رفته به یک فرآیند غیر رسوبی نزدیک و نزدیک‌تر شده است. اما وابستگی نرخ رسوب به ولتاژ اعمالی، یک وابستگی خطی نیست و در ابتدا با افزایش ولتاژ از صفر تا 100V تغییر محسوس در منحنی شار جریان قابل مشاهده نیست. با این حال در گام دوم، افزایش از 100 تا 200V ، به شکل قابل ملاحظه‌ای منحنی شار جریان رشد پیدا می‌کند و بنابراین کیفیت غیر رسوبی فرآیند تصفیه افزایش می‌یابد. در اینجا اگر مبنای مقایسه نسبت $d(J/J_0)_{t=t_e}/d\psi$ باشد، t_e زمانی است که $J/J_0 = 1$

در حالات مختلف استفاده می‌شود. این نسبت برای ولتاژهای 100 ، 200 ، 300 و 500V به ترتیب برابر با 0.00101 ، 0.00704 ، 0.00402 و 0.00201 است. به این ترتیب، بیشترین رشد نمودار شار جریان به نسبت رشد ولتاژ اعمالی، در حالت 200V اتفاق افتاده و پس از آن رفته‌رفته شدت اثر ضد رسوبی میدان الکتریکی DC کاهش یافته است. بنابراین همان گونه که اعمال ولتاژهای پایین حدود 100V نمی‌تواند هیچ انتظاری را برآورده نماید، ممکن است براساس مصالحه بین هزینه‌های لازم برای تشکیل یک میدان الکتریکی قوی و کاهش رسوب، یک نقطه عملیاتی فی‌مابینی گزینه بهتری باشد.

در نمودار ۴-ب تا e، هندسه رسوب تشکیل شده متناظر با منحنی‌های شار جریان گزارش شده در نمودار ۴-ا، برای ولتاژهای صفر، 200 ، 300 و 500V ترسیم شده‌اند. با توجه به نمودار ۴-ب، زمانی که خط سیر ذرات تحت تأثیر میدان الکتریکی قرار نگرفته، هندسه یک جرمی یک محیط یک‌دست هموار است که در سراسر طول غشا تشکیل شده و رفته‌رفته با فاصله گرفتن از ابتدای غشا بر ضخامت آن افزوده شده است. این وضعیت با اعمال میدان الکتریکی با ولتاژ 200V به شکل قابل توجهی به هم خورده و در هندسه یک جرمی شکاف‌های تراوی متعددی ایجاد شده است (نمودار ۴-ج). با افزایش بیشتر ولتاژ اعمالی تا حد 300V (نمودار ۴-د)، علاوه بر افزایش شکاف‌های تراوی در طول یک، رسوب در بخشی از محدوده ابتدایی غشا و اندکی از محدوده انتهای غشا کاملاً ناپدید شده است. نهایتاً با افزایش بیشتر ولتاژ اعمالی تا سطح 500V ، اکثریت شکاف‌های تراوی به هم متصل شده و اندازه محیط بی‌رسوب در ابتدای غشا تا حدود نقاط مرکزی توسعه یافته است (نمودار ۴-ه).

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

۲-۷- هندسه پل‌های الکتریکی، هندسه رسوب و حد بهینگی

با توجه به نقش درجه اول شکاف‌های تراوی در ابقای شرایط جریان که در بخش ۱-۷ به آن پرداخته شد، در این بخش به اثر اندازه پل‌های الکتریکی پرداخته می‌شود. در حقیقت با این ایده که تعدد پل‌های الکتریکی می‌تواند بر تعدد شکاف‌های تراوی درون بستر یک جرمی بیافزاید، در این بخش، اثر اندازه پل‌های الکتریکی بر منحنی شار جریان و هندسه یک جرمی بررسی می‌شود.

در نمودار ۵-ا، تغییرات زمانی شار جریان به عنوان تابعی از اندازه پل‌های الکتریکی نمایش داده شده است. با توجه به نتایج این نمودار، کاهش اندازه پل‌ها و متعاقباً افزایش تعداد آنها در ابتدا (با کاهش اندازه پل‌ها از 900 به $300\mu\text{m}$) باعث بهبود در روند منحنی شار جریان می‌شود. پس از آن کاهش بیشتر اندازه پل‌های الکتریکی (با کاهش اندازه پل‌ها از 300 به $200\mu\text{m}$)، تأثیر قابل ملاحظه‌ای بر روند کاهش شار جریان نخواهد داشت. بنابراین اندازه پل‌های الکتریکی، دارای یک نقطه بهینه بوده که در اینجا تقریباً $300\mu\text{m}$ است. برای درک دلیل وجود اندازه بهینه برای اندازه پل‌های الکتریکی می‌توان به هندسه رسوب به دست آمده برای فرآیند تصفیه با پل‌هایی به اندازه‌های 900 ، 300 ، $200\mu\text{m}$ (نمودار ۵-ب تا d) مراجعه کرد. با توجه به نمودار ۵، بهبودی در روند منحنی شار جریان در گذر از حالت b به حالت c، مرهون افزایش

و یک روش LB-CA دو بُعدی و انطباق یافته بر فیزیک انتقال جرم در محدوده محیط تصفیه گذاشته شده است. با استفاده از این روش حل، امکان حل مزوسکوپی معادله لانگوین و تعیین دینامیک ذرات متاثر از همه انواع نیروهای خارجی و درون جریانی ایجاد شده است. اعتبار روش عددی مورد اشاره، در مقایسه با حل تئوری رومرو و دویس و همچنین نتایج تجربی ارایه شده به وسیله هونگ و همکاران^[14] مورد تایید قرار گرفت.

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

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

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

تعارض منافع: این مقاله مستخرج از پایان نامه دکترای احسان داورپناه با راهنمایی دکتر علیرضا تیمورتاش در گروه مهندسی مکانیک، دانشگاه فردوسی مشهد با عنوان "شبیه ساز سه بعدی ذرات در رژیم جریان متعامد سیال و سطح جداساز" است.

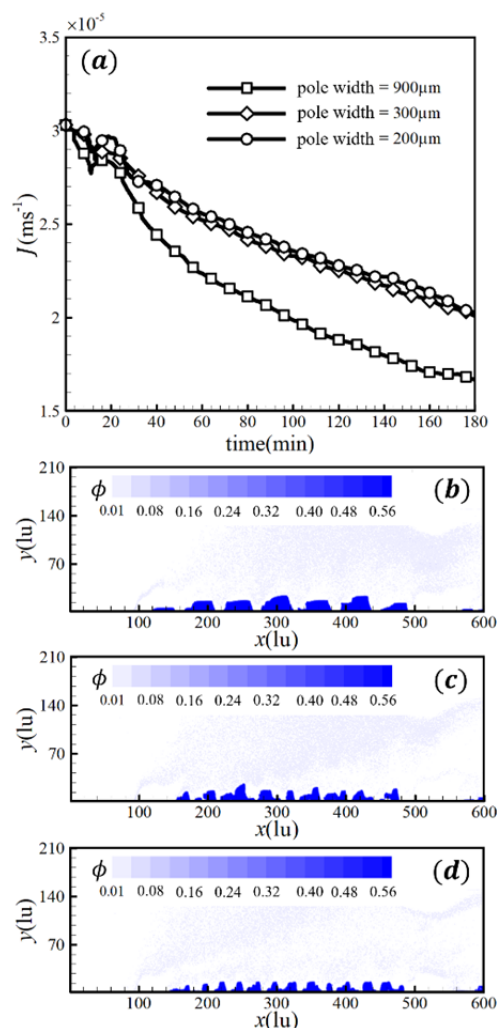
سهم نویسندگان: احسان داورپناه (نویسنده اول)، پژوهشگر اصلی (۵۰٪)؛ علیرضا تیمورتاش (نویسنده دوم)، نگارنده مقدمه/روشن شناس/تحلیلگر آماری/نگارنده بحث (۵۰٪)

منابع مالی: موردی از سوی نویسندگان بیان نشده است.

منابع

- 1- Zeman LJ, Zydney AL. Microfiltration and ultrafiltration: Principles and applications. 1st Edition. Boca Raton: CRC Press; 2017.
- 2- Hermia J. Constant pressure blocking filtration laws-application to power-law non-Newtonian fluids. Institution of Chemical Engineers Transactions. 1982;60(3):183-187.
- 3- Chudacek MW, Fane AG. The dynamics of polarisation in unstirred and stirred ultrafiltration. Journal of Membrane Science. 1984;21(2):145-160.
- 4- Porter MC. Concentration polarization with membrane ultrafiltration. Industrial and Engineering Chemistry Product Research and Development. 1972;11(3):234-248.
- 5- Zydney AL, Colton CK. A concentration polarization model for the filtrate flux in cross-flow microfiltration of particulate suspensions. Chemical Engineering Communications. 1986;47(1-3):1-21.
- 6- Lee Y, Clark MM. Modeling of flux decline during crossflow ultrafiltration of colloidal suspensions. Journal of Membrane Science. 1998;149(2):181-202.
- 7- Bhattacharjee S, Kim AS, Elimelech M. Concentration polarization of interacting solute particles in cross-flow membrane filtration. Journal of Colloid and Interface Science. 1999;212(1):81-99.
- 8- Kim S, Marion M, Jeong BH, Hoek EMV. Crossflow

شکاف های تراوا و کاهش نسبی ضخامت کیک جرمی است که پیش از این هم به عنوان ایده ای برای بهبود بخشیدن به فرآیند تصفیه الکتریکی در نظر گرفته شد. با این حال، عدم تغییر بیشتر در منحنی شار علی رغم افزوده شدن به تعداد شکاف های تراوا و کاهش نسبی ضخامت کیک در حالت d نسبت به حالت c را می توان مربوط به ظرافت بیشتر مسیر عبور از شکاف های حالت d، در مقایسه با حالت c دانست (نمودار ۵). اگر چه در حالت c، بر تعدد شکاف های تراوا افزوده شده است، اما مسیرهای کم عرض تر جریان در این حالت در قیاس با حالت c، مقاومت بیشتری را فراروی جریان قرار خواهد داد و از اثر مثبت تعدد شکاف ها خواهد کاست.



نمودار ۵: تغییرات زمانی شار عبوری از غشا، به عنوان تابعی از اندازه پل های الکتریکی و نمایه های دو بُعدی رسوب بر سه چیدمان متفاوت پل های الکتریکی تراوا؛ (a) تغییرات زمانی شار عبوری از غشا، به عنوان تابعی از اندازه پل های الکتریکی، (b-d) نمایه های دو بُعدی رسوب بر سه چیدمان متفاوت پل های الکتریکی تراوا، زمانی که اندازه پل های الکتریکی یکسان و هم فاصله برابر با (b) ۹۰۰ μm (c) ۳۰۰ μm و (d) ۲۰۰ μm هستند؛ نتایج برای ولتاژ اعمالی ۳۰۰ V و TMP برابر با ۴۱ kPa به دست آمده اند.

۸- نتیجه گیری

در این پژوهش، یک روش عددی جامع برای حل مساله تصفیه در محیط هایی با مقیاس های بزرگی متفاوت (از مرتبه میکرو تا ماکروسول های تصفیه) ارایه شد. بنای روش عددی ارایه شده در این تحقیق بر استفاده از روش شبکه بولتزمن به عنوان حلگر جریان

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

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

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

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

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

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

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

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