Archive of SID.ir

بررسی توسعه تئوری ترکیبی انحلال – نفوذ و نفوذ لایه فیلمی در مدل‌سازی فرایند غشایی اسمز مستقیم

محسن باهوش، سهیلا شکرالله‌زاده*+، اسلام کاشی

پژوهشکده فناوری‌های شیمیایی، سازمان پژوهش‌های علمی و صنعتی ایران، تهران، ایران.

چکیده: شبیه‌سازی فرایندها چه در ابعاد آزمایشگاهی و چه صنعتی روشی است که در صورت توانایی کافی مدل در نزدیک کردن نتیجه‌های محاسباتی به نتیجه‌های عملیاتی، می‌تواند کمک شایانی به درک و بهینه‌سازی این فرایندها نماید. زیربنای شبیه‌سازی معتبر، آگاهی از مدل‌ها و معادلات مربوط به ویژگی‌های فیزیکی - شیمیایی و توانایی تحلیل و کاهش فرضیات محدودکننده فرایند مورد بررسی است. برای مدل‌سازی ریاضی پدیده انتقال جرم مواد از درون غشا مدل‌های گوناگون با کارایی و دقت متفاوت ارائه‌شده است. باتوجه‌به مفاهیم بنیادین تئوری انحلال- نفوذ، این تئوری قابلیت بیشتری در زمینه شبیه‌سازی فرایندهای غشایی اسمزی و از جمله اسمز مستقیم را به‌عنوان فرایند نمک‌زدایی آب دارد. در این مقاله، مروری بر توسعه مدل‌های ریاضی برای اسمز مستقیم و چگونگی تعیین پارامترهای آن به روش تجربی بیان شده است. نتیجه‌ها نشان داد مدل بوی و همکاران با درنظرگرفتن تمامی انواع گوناگون پلاریزاسیون‌های غلظتی خارجی و داخلی کامل‌ترین مدل محاسبه شار آب است. از طرفی به کمک روش ارائه شده تیرافری پارامترهای اصلی غشا (ضریب تراوایی آب، حل‌شونده و پارامتر ساختاری غشا) به کمک محاسبات عددی و نتیجه‌های تجربی قابل محاسبه است.

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

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

مقدمه

باتوجه به گزارش سازمان ملل[۱] و گزارش موسسه بین‌المللی مدیریت آب[۲]، آب و انرژی دو دغدغه اصلی کشورها در زمینه مدیریت و تأمین منابع محسوب می‌شود. ازاین‌رو، بهینه‌سازی روش‌های موجود و یا ارائه روش‌های جدید جهت بهره‌برداری بهینه و ازدیاد منابع آب آشامیدنی دارای اهمیت زیادی است. یکی از این روش‌ها، استفاده از فرایندهای غشایی جهت نمک‌زدایی و نمک‌زدایی آب است. امروزه این فناوری در عملیات‌های گوناگونی از تصفیه پساب[۳] و تغلیظ مواد در صنایع غذایی [۴] نمک‌زدایی آب[۵–۷] تا تولید برق [۸–۹] و صنایع دارویی کاربرد دارد [۱۰].

طبق یک طبقه‌بندی خاص، فرایند نمک‌زدایی آب شامل دو گروه روش‌های اسمزی (نظیر اسمز معکوس[۱] و اسمز مستقیم[۲]) و روش‌های حرارتی (نظیر متراکم‌سازی مکانیکی بخار آب، تبخیر ناگهانی چندمرحله‌ای و روش تقطیر چندمرحله‌ای) می‌باشد[۱۱]. فرآیند اسمز مستقیم یا اسمز پیش‌رو برخلاف فرآیند اسمز معکوس

* عهده‌دار مکاتبات

+E- mail: shokrollahzadeh@ irost.ir

(۱) Reverse Osmosis (RO)

(۲) Forward Osmosis (FO)

Archive of SID.ir

Archive of SID.ir

بدون دخالت فشار خارجی انجام می‌شود. در این فرایند آب از سمت محلول با غلظت کمتر (محلول خوراک) به سمت محلول با غلظت بیشتر (محلول کشنده) جریان می یابد تا هر دو محلول به تعادل غلظتی برسند. در مقایسه با روش‌های غشایی سنتی فشار محور، FO دارای برتری‌های ویژه‌ای ازجمله: پس‌زنی بالای مواد محلول، رسوب‌گرفتگی کمتر غشا و مصرف انرژی کمتر می‌باشد. به همین دلیل، غشای FO توانایی بالایی را برای جایگزینی با غشاهای اولترافیلتراسیون که در حال حاضر در راکتورهای زیستی غشایی[۱] (MBR) استفاده می‌شود، دارد. در چندین گزارش، پیش‌بینی‌شده که در سال‌های آینده ارزش بازار سالیانه غشاهای اسمز مستقیم درزمینه انرژی اسمزی، به‌کارگیری دوباره آب، نمک‌زدایی و سایر کاربردها، بیشتر از ترکیب بازارهای اسمز معکوس و اولترافیلتراسیون خواهد شد.

هم‌زمان با توسعه فرایندهای غشایی، مدل‌ها و مکانیسم‌های گوناگونی جهت بررسی و مطالعه مکانیسم‌های انتقال از درون غشا مطرح‌شده است. به‌عنوان نمونه به برخی از این مکانیسم‌ها در زیر اشاره‌شده است[۱۲-۱۳]:

- در مکانیسم غربالگری[۲]، جداسازی غشایی بر اساس اختلاف اندازه مولکول‌های حلال و حل‌شونده رخ می‌دهد و اندازه حفرات غشا باید بین اندازه این مولکول‌ها باشد. البته این مکانیسم در نمک‌زدایی محلول سدیم کلراید - آب به کمک اسمز معکوس کاربرد ندارد زیرا اندازه مولکول‌ها در این سیستم یکسان است.
- مکانیسم سطوح تر شده[۳]: این مکانیسم بر این اصل استوار است که به دلیل توانایی ترشوندگی مواد سازنده غشا، آب به‌وسیله پیوندهای هیدروژنی جذب غشا می‌شود. حضور آب در حفرات غشا مانع نفوذ مواد حل‌شونده به غشا شده و پس از این مرحله آب از یک سمت تر شده به سمت دیگر غشا منتقل می‌شود.
- مکانیسم انحلال - نفوذ[۴]: حل‌شونده و حلال ابتدا باید در لایه متراکم غشا حل‌شده سپس به علت گرادیان غلظت از درون آن نفوذ کرده و به سمت دیگر غشا منتقل شوند.
- مکانیسم حفره - جریان[۵]: مواد نفوذکننده به‌وسیله یک جریان همرفتی فشار محور در حفرات ریز جداسازی می‌شوند. علت جداسازی توانایی حفرات در دفع برخی مواد تراوش‌کننده خاص و جذب برخی مواد دیگر است.

در این مقاله به بررسی مدل‌سازی ریاضی مدل‌های انحلال - نفوذ و ارائه نمونه کاربردهای آن در شبیه‌سازی فرایند اسمز مستقیم پرداخته شده است. این مدل‌ها که بیشتر در دسته‌بندی مدل‌های انتقال غیر متخلخل غشا کاربرد دارند، برای مدل‌سازی انتقال مواد از درون هر دو غشای اسمز معکوس و مستقیم به‌کاررفته‌اند، با این تفاوت که پارامترهای خاص در غشای اسمز مستقیم به کار برده می‌شود[۱۶-۱۴]. در این مقاله سعی شده سیر تکاملی مدل‌های ریاضی این تئوری ارائه و پارامترهای مربوط به هرکدام مورد بررسی شود.

مدل‌ها و مکانیسم‌های انتقال

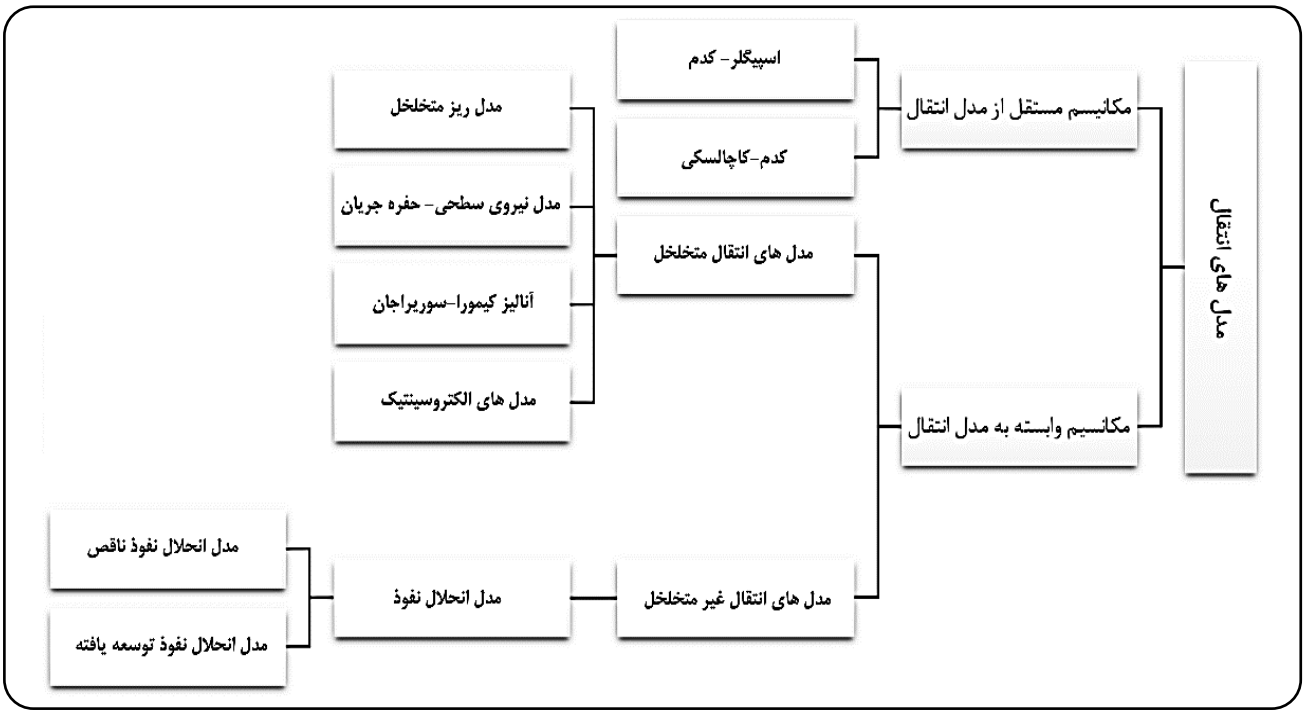
جهت توسعه مدل‌های انتقال از درون غشا دو دیدگاه گوناگون مطرح‌شده است: (۱) استفاده از ترمودینامیک برگشت‌ناپذیر برای توصیف فرایند و (۲) به‌کارگیری مدل‌هایی که از ویژگی‌های فیزیکی - شیمیایی - ساختاری غشا و محلول جهت توصیف فرایند در سامانه غشایی استفاده می‌کنند. در دسته اول که به مدل‌های مستقل از مکانیسم یا مدل‌های پدیدارشناختی[۶] نیز معروف هستند غشا به‌عنوان یک جعبه سیاه در نظر گرفته می‌شود و در آن فرایندهای آرام نزدیک به حالت تعادل رخ می‌دهد. این مدل‌ها برای سامانه‌هایی که اختلاف زیادی از حالت تعادل ندارند و روابطی منطقی بین شار و نیروی محرکه ارائه می‌کنند. به‌طورکلی می‌توان گفت این مدل منجر به معادلاتی می‌شود که رفتار پس‌زنندگی[۷] غشا را به‌وسیله ویژگی های ماکروسکوپی که قابل‌اندازه‌گیری هستند مرتبط می‌کند و ازآنجاکه این دیدگاه وابسته به مدل نیست، تفسیری در مورد جریان و مکانیسم‌های جداسازی ارائه نمی‌دهد. در دسته دوم که به مدل‌های وابسته به مکانیسم یا مدل‌های مکانیکی[۸] نیز معروف هستند، برخی مکانیسم‌های انتقال در نظر گرفته می‌شود و سپس شار به نیروی محرکه و رفتار پس‌زنندگی غشا به ویژگی‌های ساختاری شناخته‌شده یا فرضی غشا (مانند تخلخل، اندازه حفره، خمیدگی[۹] و غیره) و یا ویژگی‌های فیزیکی - شیمیایی (مانند نفوذ، حلالیت، تعاملات سایشی[۱۰] و غیره) مرتبط می‌گردد. تمامی مدل‌های فیزیکی - شیمیایی - ساختاری غشا به‌نوعی ترکیبی از سه مکانیسم انتقال موازی هستند[۱۷-۱۸]:

---

(۱) Membrane bioreactor (MBR)
(۲) Sieve mechanism
(۳) Wetted surface mechanism
(۴) Solution-Diffusion (SD)
(۵) Pore-flow (PF)
(۶) Phenomenological
(۷) Rejection
(۸) Mechanistic
(۹) Tortuosity
(۱۰) Frictional Interactions-

Archive of SID.ir

Archive of SID.ir



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

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

این دیدگاه، نسبت به مدل‌های پدیدارشناختی، اطلاعات بیشتری در مورد جریان و مکانیسم‌های جداسازی ارائه می‌دهد. از طرفی این دسته خود در دو گروه‌بندی مجزا می‌تواند به مدل‌های عمومی و مدل‌های الکترو سینتیک (در حالتی که محلول‌های خوراک الکترولیتی هستند) یا مدل‌های غشای متخلخل و غیر متخلخل تقسیم گردد. در شکل ۱ برخی از مدل‌های انتقال در غشا ذکرشده است[۱۹-۲۰]. به‌عنوان نمونه مدل‌های انحلال-نفوذ و حفره-جریان (مدل‌های انتقال متخلخل) هر دو در زیرمجموعه مدل‌های وابسته به مدل انتقال، قرار می‌گیرند. مدل انحلال - نفوذ ناقص[۱] (SDI) در سال ۱۹۶۷ ارائه شده است. این مدل برای غشاهایی کاربرد دارد که هنگام ساخت آن حفراتی روی سطح غشا ایجادشده و محلول از درون این حفرات تراوش می‌کند. مدل انحلال - نفوذ توسعه‌یافته[۲] (SDE) با در نظر گرفتن ترم فشاری در معادله پتانسیل شیمیایی حل‌شونده در محاسبات مدل اصلی انحلال - نفوذ و در سال ۱۹۸۰ مطرح‌شده است. این مدل زمانی اهمیت دارد که مولاریته حجمی نسبی[۳] حل‌شونده، زیاد و میزان جداسازی حل‌شونده و آب کم باشد[۱۲].

همان‌طور که اشاره شد در شکل ۱ فقط برخی مدل‌های مبتنی بر تئوری انحلال نفوذ ذکرشده در ادامه به دو مکانیسم انحلال - نفوذ و حفره - جریان که به همراه تئوری لایه فیلمی کاربرد گسترده‌ای در شبیه‌سازی و مدل‌سازی فرایندهای غشایی دارند[۲۳-۲۱]، پرداخته‌شده است.

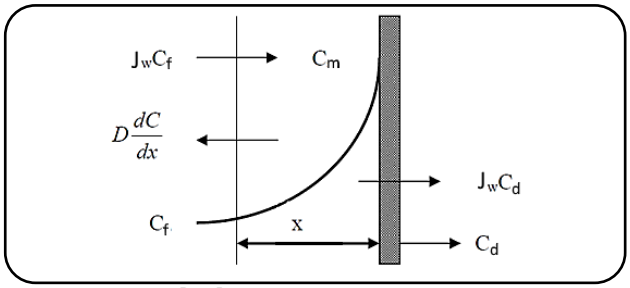
تئوری لایه فیلمی

طبق مطالعات *ژائو*[۴][۲۴] تئوری‌های گوناگونی برای بررسی نفوذ از درون غشا وجود دارد. هدف استفاده از این تئوری‌ها تفسیر انتقال جرم از غشا با کمک محاسبه ضریب نفوذ مولکولی و ضریب انتقال جرم می‌باشد. یکی از تئوری‌های اساسی و پرکاربرد تئوری لایه فیلمی[۵] (FTM) است. در این تئوری انتقال جرم در لایه‌ای با ضخامت بسیار کم رخ می‌دهد و انتقال جرم به‌صورت پایا[۶] فرض می‌شود. در شکل ۲ نمایی از غشا و لایه انتقال جرم نزدیک آن نشان داده‌شده است.

(۱) Solution-diffusion-imperfection (SDI)
(۲) Extended solution-diffusion (ESD)
(۳) Partial molar volume
(۴) Zhao Y. et al
(۵) Film Theory Method (FTM)
(۶) Steady state

Archive of SID.ir

Archive of SID.ir



شکل ۲- تئوری لایه فیلمی[۲۴].

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

$$J_{i=} - D\frac{dC}{dx} + c_m J_w \qquad (۱)$$

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

$$\left[\frac{c_m - c_d}{c_f - c_d}\right] = e^{\frac{J_w}{k_b}} \qquad (۲)$$

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

مقایسه مدل انحلال – نفوذ و حفره – جریان

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

$$J_i = c_i V_i = c_i U_i \frac{d\mu_i}{dx} \qquad (۳)$$

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

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

$$d\mu_i = RTdln(\gamma_i n_i) + v_i dP \qquad (۴)$$

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

$$\mu_i = \mu_i^0 + RTdln(\gamma_i n_i) + v_i(P - P_i^0) \qquad (۵)$$

کمیت‌های μ_i^0 و p_i^0 به ترتیب بیانگر پتانسیل شیمیایی جزء خالص i و فشار مرجع هستند. این فشار مرجع معمولاً برابر با فشار بخار اشباع جزء خالص i قرار داده می‌شود. برای تعریف مدل تراوش باید فرضیاتی در معادله ۵ اعمال شود. معمولاً اولین فرض این است که سیالات موجود در دو طرف غشا با مواد موجود در سطح غشا در تعادل هستند. این فرض بدین معنی است که گرادیان پیوسته‌ای از پتانسیل شیمیایی از یک سمت غشا به سمت دیگر وجود دارد و از طرفی، طبق این فرض میزان شدت جذب و دفع در مرز غشا بسیار بیشتر از مقدار نفوذ از درون غشا است. این فرض تقریباً برای بیشتر فرایندهای غشایی صادق بوده ولی در مواردی مانند نفوذ گازها از درون فلزات که جذب سطحی خیلی کند است، این فرض صادق نیست[۲۵–۲۶].

برای استفاده از معادلات کلی فوق در تئوری‌های انحلال – نفوذ و حفره – جریان، فرضیات گوناگونی برای حل معادله ۵ در هر یک از این دو تئوری در نظر گرفته می‌شود که در جدول ۱ با یکدیگر مقایسه شده‌اند[۲۷–۲۵–۱۳].

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

$$J_i = -\frac{RTU_i}{c_i}\frac{dc_i}{dx} \qquad (۶)$$

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

$$J_i = -D_i\frac{dc_i}{dx} \qquad (۷)$$

معادله ۸ نتیجه انتگرال معادله ۷ در ضخامت غشا است:

$$J_i = -D_i\frac{c_F - c_P}{t} \qquad (۸)$$

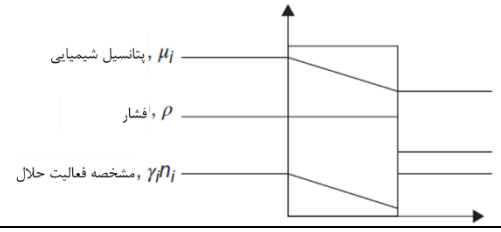
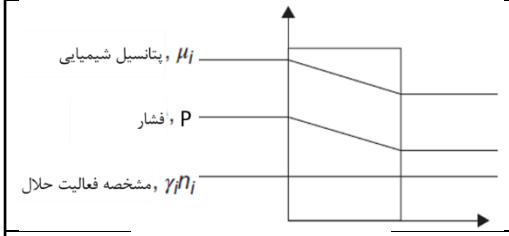
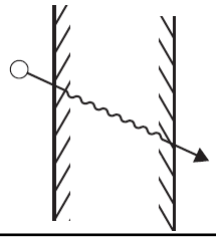
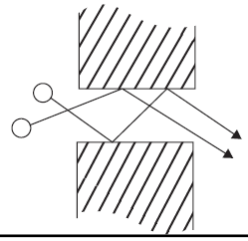
در مدل‌های PF گرادیان پتانسیل شیمیایی ناشی از گرادیان فشار است و در نبود گرادیان غلظت، ترکیب معادله ۳ و ۴ منجر به معادله ۹ می‌شود.

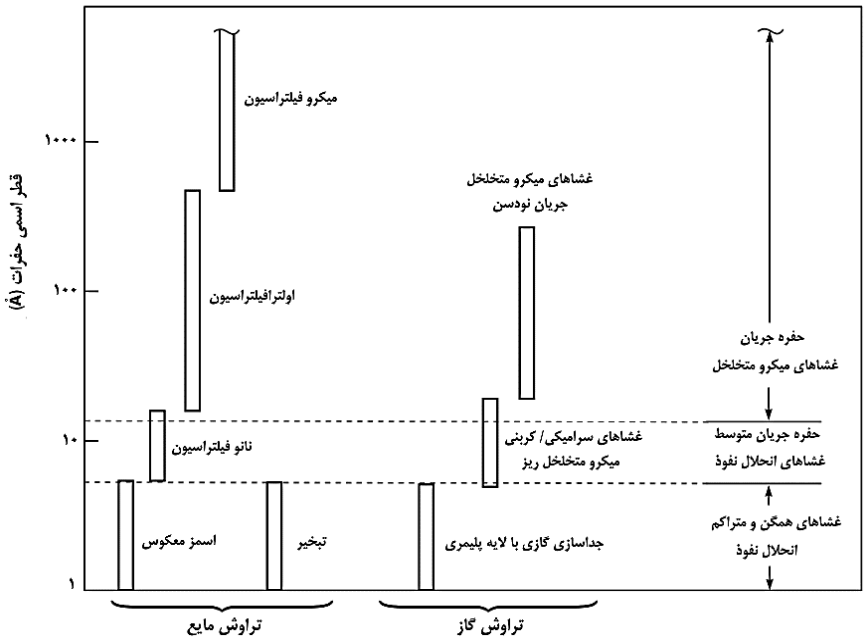
(۱) Electromotive force

Archive of SID.ir

Archive of SID.ir

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

ویژگی های در طول غشا	انحلال-نفوذ (SD)	حفره-جریان (PF)
فشار (p)	ثابت و برابر با فشار محلول پرفشار	متغیر
گرادیان پتانسیل شیمیایی ماده نفوذکننده	تنها به‌صورت گرادیان غلظت بیان می‌شود.	
مشخصه فعالیت حلال ($\gamma_i n_i$)	متغیر	ثابت
اندازه حفرات و پایداری	اندازه کوچک‌تر و پایداری کمتر	اندازه بزرگ‌تر و پایداری بیشتر
مقدار پتانسیل شیمیایی (μ_i)	در محلول‌های دو طرف غشا ثابت و در درون غشا متغیر است	
مکانیسم جداسازی	بر اساس اختلاف حلالیت مواد تراوش‌کننده درون غشا و تحرک آن‌ها در غشا به علت تراکم غشاهای انحلال - نفوذ رخ می‌دهد.	تراوش مواد نفوذکننده از درون منافذ میکرومتری غشا انجام می‌شود.
تغییرات μ_i، p و $\gamma_i n_i$ هنگام نفوذ محلول تک جزئی از درون غشا در یک سامانه فشار محور		
نحوه تراوش مواد نفوذکننده		



شکل ۳- ارتباط بین اندازه حفرات و بهترین مدل ریاضی برای مدل‌سازی فرایند تراوش از درون آن[۲۷].

همچنین در شکل ۳ محدوده کاربری دو مدل PF و SD با توجه به اندازه حفرات غشا مشخص‌شده است. با توجه به این شکل با کاهش اندازه حفرات غشا، مدل SD از قابلیت بیشتری برای مدل‌سازی فرایند تراوش غشایی برخوردار است.

Archive of SID.ir

Archive of SID.ir

$$J_i = Ac_i \frac{dP}{dx} \quad (۹)$$

در این معادله $\frac{dp}{dx}$، گرادیان فشار موجود در محیط متخلخل A ضریب تراوایی یا ضریب قانون دارسی[۱] بوده و در حقیقت منعکس‌کننده ماهیت محیط متخلخل می‌باشد. این ضریب تابعی از پارامترهای ساختاری غشا مانند قطر منافذ، تخلخل سطحی و پیچش غشا[۲] است. با انتگرال‌گیری از معادله ۶ در طول غشا، قانون دارسی به‌صورت معادله ۷ به دست می‌آید[۲۸].

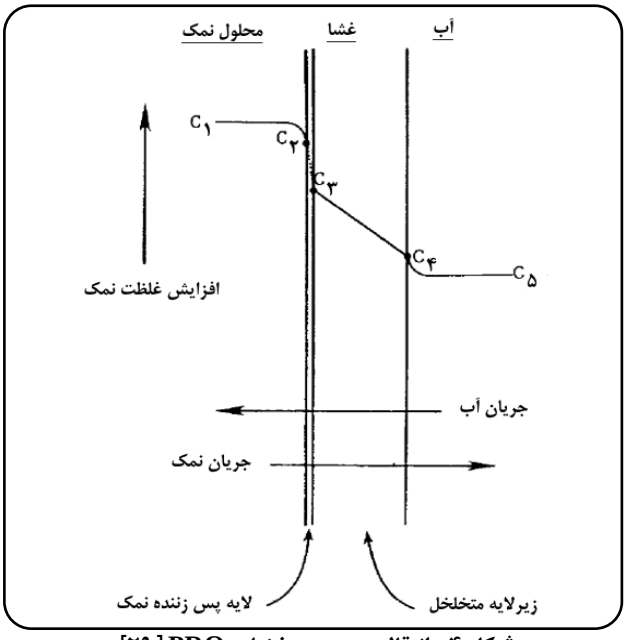
$$J_i = A\frac{(P_F - P_P)}{t} \quad (۱۰)$$

توسعه مدل‌های اسمز مستقیم مبتنی بر تئوری SD و FTM

هر دو مدل SD و PF در قرن ۱۹ ارائه‌شده‌اند ولی PF، به دلیل نزدیک بودن تئوری آن به شرایط فیزیکی معمول تا اواسط دهه ۱۹۴۰ میلادی مدل شناخته‌شده‌تری محسوب می‌شد. در دهه ۴۰، مدل SD برای تشریح انتقال گازها در فیلم پلیمری به کار رفت. با اوج گرفتن انجام مطالعات اسمز معکوس در دهه ۶۰ و ۷۰ میلادی، سرانجام مدل SD بعد از دهه ۸۰ میلادی کاربرد گسترده‌تری به‌ویژه در زمینه مدل‌سازی و شبیه‌سازی فرایندهای اسمزی پیدا کرد[۱۳]. مبنا و نقطه شروع اکثر معادله‌های ارائه‌شده اخیر برای مدل‌سازی شار آب و حل‌شونده در فرایندهای اسمز مستقیم و اسمز با فشار تأخیری[۳] (PRO) به پژوهش *لی و همکاران*[۴] [۲۹] در سال ۱۹۸۱ برمی‌گردد. هدف اصلی آن‌ها بررسی غشاها برای تولید برق با کمک فرایند PRO بوده ولی آن‌ها بر مبنای تئوری‌های انحلال – نفوذ و تئوری فیلمی[۵] (SD-FTM) معادله ۱۱ را برای محاسبه شار آب ارائه کردند. شکل ۴ غلظت‌های گوناگون و جهت شار آب و حل‌شونده را در فرایند PRO نشان می‌دهد. دو اختلاف اصلی این فرایند با فشار اسمز مستقیم، وجود فشار هیدرولیکی خارجی و جهت قرارگیری غشا می‌باشد. در فرایند اسمز با فشار تأخیری، لایه فعال غشا به سمت محلول خوراک قرارگرفته است[۱۱].

معادله ارائه‌شده با فرض رابطه مستقیم بین فشار اسمزی و غلظت و پایا بودن فرایند به‌صورت معادله ۱۱ می‌شود:

$$J_w = A\left[\pi_2 \frac{1 - \frac{c_4}{c_2}\exp(J_w K)}{1 - \frac{B}{J_w}[\exp(J_w K) - 1]} - \Delta P\right] \quad (۱۱)$$



شکل ۴- انتقال جرمی در غشای PRO [۲۹].

در این معادله، π_2 فشار اسمزی در سمت محلول غلیظ، C_4 غلظت در سمت محلول رقیق، C_2 غلظت در سمت محلول غلیظ می‌باشد.

لوئب و همکاران[۶] [۳۰] با فرض:

- نبود فشار خارجی $(\Delta P = 0)$
- رابطه مستقیم غلظت حل‌شونده و فشار اسمزی $(\frac{\pi_A}{\pi_B} = \frac{C_A}{C_B})$
- ناچیز بودن پلاریزاسیون غلظتی خارجی در دو سمت غشا
- $A\pi_{low} \gg B$، π_{low} فشار اسمزی سمت محلول رقیق
- $A\pi_{Hi} \gg B - J_w$، π_{Hi} فشار اسمزی سمت محلول غلیظ

و تبدیل معادله PRO به FO، رابطه‌ای به‌صورت معادله ۱۲ ارائه کرده‌اند.

$$J_w = \frac{1}{K}\ln\frac{A\pi_{Hi} + B}{A\pi_{Low} + B + J_w} \quad (۱۲)$$

در این معادله، K به‌صورت معادله ۱۳ تعریف می‌شود[۱۱]:

$$K = \frac{t\tau}{\varepsilon D} = \frac{S}{D} \quad (۱۳)$$

مکاچن و الیملک[۷] [۳۱-۳۲] نیز معادلات را مورد بررسی بیشتر قرار داده و روابط گوناگونی را برای محاسبه پلاریزاسیون غلظتی داخلی و خارجی در دو حالت تغلیظ شده و رقیق شده ارائه کردند

(۱) Darcy
(۲) Tortuosity
(۳) Pressure Retarded Osmosis
(۴) Lee K. L. et all
(۵) Solution Diffusion- Film Theory Diffusion Model
(۶) Loeb S. et al.
(۷) McCutcheon J.R. and Elimelech M

Archive of SID.ir

Archive of SID.ir

جدول ۲- روابط ارائه‌شده *مکاچن و الیملک* مربوط به پلاریزاسیون غلظتی[۳۱-۳۲]

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

بسته به جهت‌گیری غشا در سامانه‌های اسمز محور هر دو نوع پلاریزاسیون خارجی رقیق[۱] (DECP) و غلیظ[۲] (CECP) می‌تواند اتفاق بیفتد. معمولاً زمانی که لایه پشتیبان در سمت محلول کِشنده قرار دارد، CECP و زمانی که در سمت محلول خوراک قرار دارد DECP غالب است. همچنین بسته به نحوه قرارگرفتن لایه پشتیبان دو نوع پلاریزاسیون غلظتی داخلی می‌تواند اتفاق بیفتد. اگر لایه پشتیبان در سمت محلول کِشنده باشد، پلاریزاسیون غلظتی داخلی رقیق[۳] (DICP) و اگر لایه پشتیبان در سمت محلول خوراک باشد، پلاریزاسیون غلظتی داخلی غلیظ[۴] (CICP) رخ می‌دهد[۱۱].

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

$$k = \frac{Sh \times D}{d_h} \qquad (۱۴)$$

$$\text{Laminar Flow (Re≤2100)} \quad Sh = 1.85\left(ReSc\frac{d_h}{L}\right)^{0.33} \qquad (۱۵)$$

$$\text{Turbulent Flow (Re>2100)} \quad Sh = 0.04Re^{0.75}Sc^{0.33} \qquad (۱۶)$$

مکاچن و الیملک بیان کردند که با فرض:

- پس‌زنندگی کامل غشا و نبود شار جرمی نمک (B=۰)
- حاکم بودن روابط CECP و DICP در فرایند اسمز مستقیم

معادله مربوطه به شار آب به‌صورت معادله ۱۷ بیان می‌شود:

$$J_w = A(\pi_{Db} \times \exp(-J_w K) - \pi_{Fb} \times \exp(\frac{J_w}{k})) \qquad (۱۷)$$

تان و *همکاران*[۵][۳۳] رابطه‌های جدیدی برای محاسبه مقاومت انتقال جرمی حل‌شونده در لایه پشتیبان متخلخل (K) و عدد شرود (Sh) پیشنهاد کردند. شار جرمی حل‌شونده از لایه متراکم غشا در حالت DICP به‌صورت معادله ۱۸ تعریف می‌شود.

$$J_s = B(c_{dm} - c_{fm}) \qquad (۱۸)$$

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

$$J_s = \varepsilon\frac{dD_{c(x)}c(x)}{dx} - J_w c(x) \qquad (۱۹)$$

در این معادله $D_{C(x)}$ نماد ضریب نفوذ مولکولی تابع غلظت است. باتوجه‌به تغییرات غلظت با مکان، x، معادله این ضریب مولکولی به‌صورت معادله ۲۰ بیان می‌شود.

$$D_{c(x)} = E_1 + E_2 c_x + E_3 c_x^2 + \cdots + E_n c_x^{n-1} \qquad (۲۰)$$

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

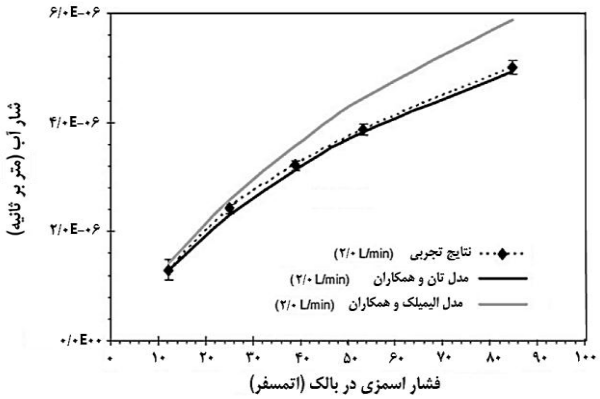
$$K^* = \left[\frac{f_1}{J_m}(C_{dm} - C_{db}) + \frac{f_2}{J_m}(C_{dm}^2 - C_{db}^2) + \cdots + \frac{f_n}{J_m}(C_{dm}^n - C_{db}^n)\right] + \frac{g}{J_m} ln\left(\frac{B(C_{fm} - C_{Dm}) + J_m C_{dm}}{B(C_{fm} - C_{Dm}) + J_m C_{db}}\right) \qquad (۲۱)$$

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

(۱) Dilutive External Concentration Polarization (DECP)
(۲) Concentrative External Concentration Polarization(CECP)
(۳) Dilutive Internal Concentration Polarization (DICP)
(۴) Concentrative Internal Concentration Polarization (CICP)
(۵) Tan C.H. et al
(۶) Hydrodynamic flow development length

Archive of SID.ir

Archive of SID.ir



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

$$Sh = 0.332Re^{1/2}Sc^{1/3} \quad \text{Laminar Flow (Re≤2100)} \quad (۲۲)$$

$$Sh = 0.04Re^{4/5}Sc^{1/3} \quad \text{Turbulent Flow (Re>2100)} \quad (۲۳)$$

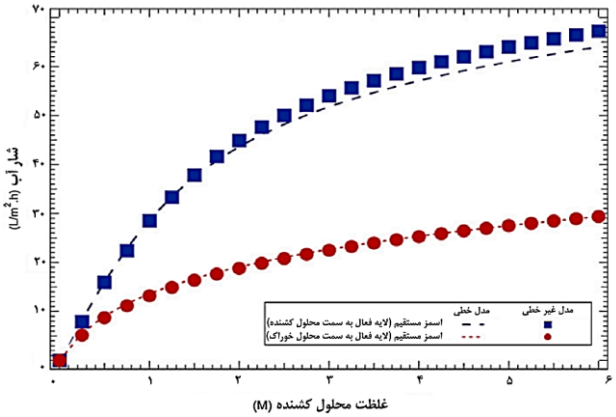
علاوه بر این موارد پژوهش آن‌ها نشان داد مدل ارائه‌شده توسط *الیملک* و *مکاچن* شار آب را بیشتر از مقدار واقعی پیش‌بینی می‌کند (شکل ۵).

تانگ و *همکاران*[۱][۳۴] صحت یکی از فرضیات اساسی، رابطه خطی بین فشار اسمزی (π) و غلظت حل‌شونده (C)، در به دست آوردن معادله‌های شار آب را موردبررسی قرار دادند. دو مدل خطی و غیرخطی در دو حالت AL-DS (لایه فعال در سمت محلول حل‌شونده) و AL-FW (لایه فعال در سمت خوراک) موردبررسی قرار گرفت و مشخص شد که این فرضیه برای فرایند FO (Al-FW) صحیح است ولی مدل غیرخطی در مواقعی که غلظت محلول کشنده زیاد و در حالت (AL-DS) باشد، اختلاف جزئی (کمتر از ۵٪) با نتیجه‌های مدل خطی پیدا می‌کند. نتیجه‌های مدل خطی و غیرخطی در شکل ۶ نشان داده‌شده است.

ژائو و *همکاران*[۲][۳۵] با تعریف خاصیتی به نام فشردگی[۳]، ICP را به سایر ویژگی‌های محلول (مانند اندازه ذرات حل‌شونده و ویسکوزیته محلول) مربوط کرده‌اند. معادله مربوطه به‌صورت معادله ۲۴ است:

$$K = \frac{t\tau}{\delta\varepsilon_{eff}D} \quad (۲۴)$$

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



شکل۶- مقایسه نتیجه‌های مدل‌های خطی و غیرخطی فشار-غلظت در محاسبه شار آب[۳۴].

سو و *همکاران*[۴][۳۶] شار معکوس حل‌شونده در فرایند اسمز مستقیم را با درنظرگرفتن ECP در هر دو طرف غشا مدل‌سازی کرده‌اند. بدین منظور آن‌ها از معادله ۱ در سه شرایط مرزی گوناگون انتگرال گرفته‌اند که سرانجام معادله ۲۵ حاصل شد:

$$J_S = B\left(\frac{C_{Db}+J_{SW}}{\exp(J_S(K/J_{SW}))\exp(J_S/J_{SW}k_D)} - (C_{Fb}+J_{SW})\exp\left(\frac{J_S}{J_{SW}k_F}\right)\right) \quad (۲۵)$$

در این معادله J_{sw}، معادل شار حل‌شونده به آب است. تفاوت معادله‌های به‌دست‌آمده توسط سو و معادله‌های الیملک و مکاچن در جدول ۳ نشان داده‌شده است:

در ادامه، یکی از کامل‌ترین معادله‌های اخیر که هم تأثیر ICP و هم اثر DECP و CECP را در نظر می‌گیرد توسط *بوی* و *همکاران*[۵][۳۷] ارائه شد. آن‌ها با فرض رابطه خطی بین فشار اسمزی و غلظت، معادله شار آب را به‌صورت معادله ۲۶ محاسبه کردند:

$$J_w = A\left\{\frac{\pi_{Db}exp\left[-J_w\left(\frac{1}{k_D}+\frac{S}{D_D}\right)\right]-\pi_{Fb}\exp\left(\frac{J_w}{k_F}\right)}{1+\frac{B}{J_w}\left\{\exp\left(\frac{J_w}{k_F}\right)-exp\left[-J_w\left(\frac{1}{k_D}+\frac{S}{D_D}\right)\right]\right\}}\right\} \quad (۲۶)$$

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

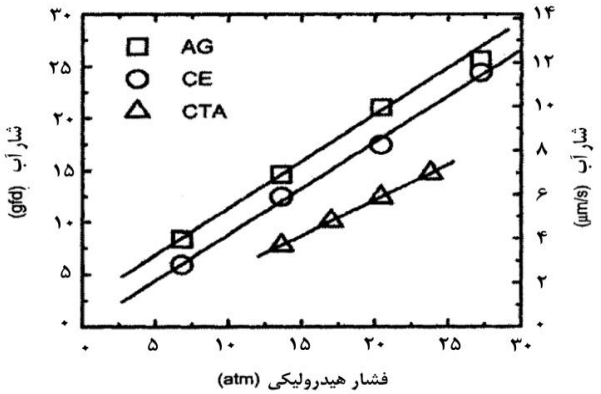
(۱) Tang C.Y. et al.
(۲) Zhao S.et al.
(۳) Constrictivity
(۴) Suh C. et al.
(۵) Bui N.N. et al

Archive of SID.ir

Archive of SID.ir

جدول ۳- تفاوت مدل‌های *سو و الیمیلک*[۳۶]

	مدل الیملک و همکاران	مدل سو و همکاران
غلظت حل شونده در لایه مرزی بین لایه پشتیبان و لایه فعال غشا (C_i)	$C_i = C_{Db}/\exp(J_W K)$ (فرضیات : $J_S = 0,\quad C_{Dm} = C_{Db}$)	$C_i = (C_{Dm} + J_S/J_W)/\exp(J_W K) - J_S/J_W$
غلظت حل شونده روی سطح غشا در سمت لایه پشتیبان (C_{Dm})	$C_{Dm} = C_{Db}/\exp(J_W/k_D)$ (فرضیات : $J_S = 0$)	$C_{Dm} = (C_{Db} + J_S/J_W)/\exp(J_W/k_D) - J_S/J_W$
غلظت حل شونده روی سطح غشا در سمت لایه فعال (C_{Fm})	$C_{Fm} = C_{Fb}\exp(J_W/k_F)$ (فرضیات : $J_S = 0$)	$C_{Fm} = (C_{Fb} + J_S/J_W)\exp(J_W/k_F) - J_S/J_W$
شار معکوس نمک (J_S)	$J_S = J_W C_{Db}/(1 + J_W/B)\exp(J_W K) - 1$ (فرضیات : $C_{Fm} = C_{Fb} = 0,\quad C_{Dm} = C_{Db}$)	$J_S = B((C_{Db} + J_S/J_W)/\exp(J_W K)\exp(J_W/k_D) - (C_{Fb} - J_S/J_W)\exp(J_W/k_F))$



شکل۷- مقایسه اثر فشار هیدرولیکی (atm) بر شار آب خالص عبوری از غشا (gfd – μm/s) برای سه غشای گوناگون (غشاهای AG[۱] و CE[۲] ساخت شرکت GE Osmonics و مخصوص فرایند RO و غشای CTA[۳] مخصوص فرایند FO) [۳۹].

تعیین پارامترهای غشا

مدل‌سازی غشایی اسمز مستقیم نیازمند در دسترس بودن سه پارامتر اصلی غشا، A ضریب تراوایی آب، B ضریب تراوایی حل‌شونده و K پارامتر مقاومت نفوذپذیری می‌باشد.

محاسبه ضریب تراوایی آب:

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

$$J_w = A\Delta P \qquad (۲۷)$$

محاسبه ضریب تراوایی حل‌شونده

هنگام محاسبه B از فرض رابطه خطی بین فشار اسمزی و غلظت حل‌شونده استفاده می‌شود. در این حالت طبق معادله ۲۸ پارامتر φ به‌عنوان یک ضریب ثابت این ارتباط خطی را بین پارامترها برقرار می‌کند.

$$\pi = \varphi \times C \qquad (۲۸)$$

به‌عنوان نمونه مقدار پارامتر φ برابر ۰/۸۰۵ $\frac{bar\ L}{g}$ در نظر گرفته می‌شود که تا غلظت ۱/۵ مولار اعتبار دارد[۴۰]. با مشخص شدن مقدار این پارامتر و ضریب تراوایی آب طبق روش گفته‌شده و کمک گرفتن از داده‌های تجربی برابر شار آب و حل‌شونده مقدار B طبق معادله ۲۹ محاسبه می‌شود[۳۸].

$$B = \varphi \times A \times \frac{|J_w|}{|J_s|} \qquad (۲۹)$$

محاسبه پارامتر مقاومت نفوذپذیری غشا

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

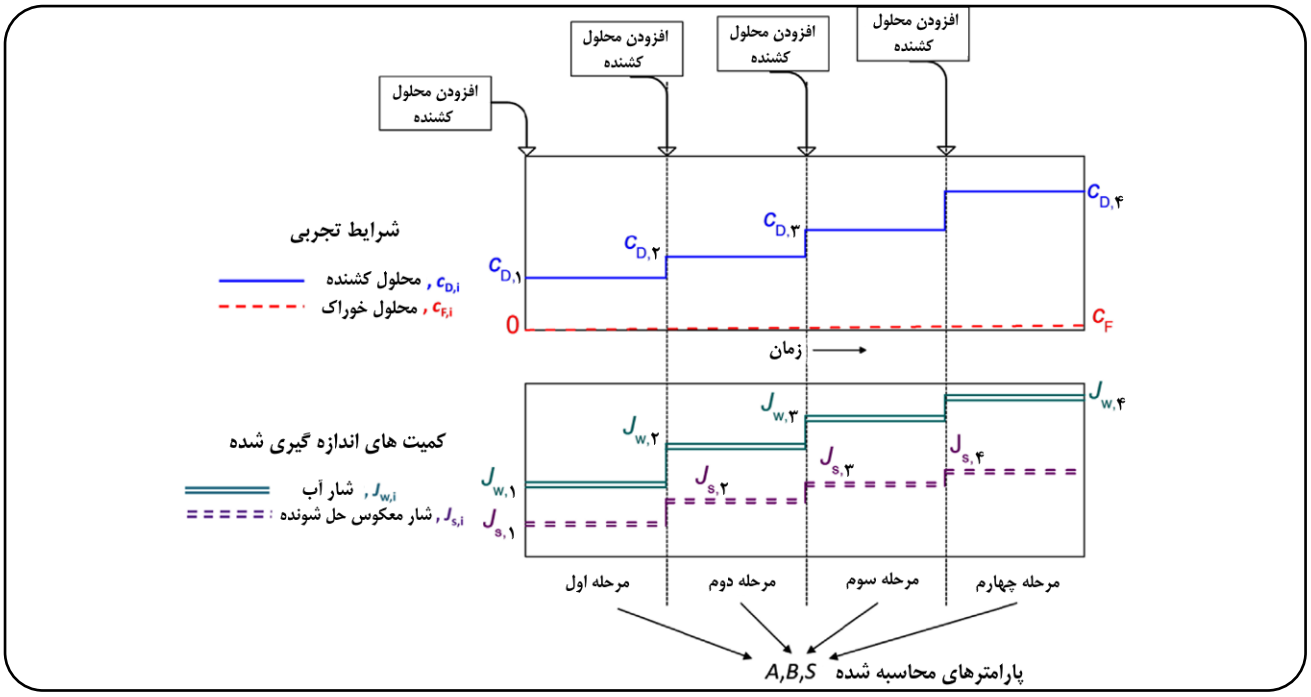
$$K = \frac{1}{J_w}\ln\left(\frac{B + A\pi_{d,m}}{B + |J_w| + A\pi_{f,m}}\right) \qquad (۳۰)$$

فرض اصلی این معادلات عدم وجود ECP است. برای برقراری این فرض در آزمایش‌های تجربی می‌بایست از سرعت‌های عبور محلول‌های خوراک و کشنده بالا باشد و از فضا سازها[۴] جهت ایجاد تلاطم مناسب در محفظه غشایی استفاده شود[۲۲–۳۸].

(۱) Polyamide thin film composite membrane
(۲) Cellulose acetate asymmetric membrane
(۳) Cellulose Triacetate membrane
(۴) Spacer

Archive of SID.ir

Archive of SID.ir



شکل۸- نحوه محاسبه ضریب تراوایی آب، حل‌شونده و پارامتر ساختاری غشا[۴۱]

محاسبه هم‌زمان سه پارامتر اصلی غشا

تیرافری و *همکاران*[۱] [۴۱] در سال ۲۰۱۳ با حل معادله غیرخطی ۳۱ و با فرض عدم وجود ECP در سمت محلول کشنده غشا، مدل ریاضی ارائه کرده‌اند که این معادله را در اکسل و نرم‌افزار متلب حل کرده و سرانجام با ترکیب آزمایشات تجربی و معادلات ریاضی مقدار A، B و S را ارائه می‌دهد. روش انجام کار، اضافه کردن غلظت محلول کشنده طی ۴ مرحله، مطابق شکل ۸، و اندازه‌گیری غلظت این محلول، محلول خوراک و شار جرمی آب و حل‌شونده طی این چهار مرحله است. اطلاعات ورودی نرم‌افزار اطلاعات مذکور می‌باشد.

$$J_w = A\left\{\frac{\pi_{Db}exp\left[-J_w\left(\frac{S}{D_D}\right)\right]-\pi_{Fb}\exp\left(\frac{J_w}{k_F}\right)}{1+\frac{B}{J_w}\left\{\exp\left(\frac{J_w}{k_F}\right)-exp\left[-J_w\left(\frac{S}{D_D}\right)\right]\right\}}\right\} \quad (۳۱)$$

بررسی برخی شبیه‌سازی‌های انجام‌شده در زمینه اسمز مستقیم

تئوری و معادلات ریاضی که تا اینجا مورد بررسی قرار گرفت، مبنای شبیه‌سازی فرایند اسمز مستقیم توسط محققین بوده است. *گروبر* و *همکاران*[۲] در سال‌های ۲۰۱۱-۲۰۱۶ فرایند اسمز مستقیم را بر مبنای تئوری انحلال نفوذ با نرم‌افزار OpenFOAM شبیه‌سازی کرده‌اند. هدف این شبیه‌سازی‌ها بررسی شکل جریان و اثرات پلاریزاسیون غلظتی با درنظرگرفتن ICP [۲۲]، مقایسه محفظه‌های غشایی گوناگون مطابق و اثرات آن بر شار آب[۳۸] و ارائه مدل جهت بهینه‌سازی فرایندهای اسمز مستقیم و معکوس با درنظرگرفتن فضاسازها بوده است[۱۵]. در شکل ۹ میزان سرعت جریان و نیروی محرکه اسمزی متناسب با آن در دو محفظه غشایی گوناگون نمای داده شده است. در قسمت‌هایی از محفظه غشا که نیروی محرکه اسمزی کمتر است جریان نیز سرعت کمتری دارد. از این نتیجه‌ها می‌توان برای بهینه‌سازی محفظه غشایی و تجاری‌سازی آن استفاده نمود[۳۸].

از موارد کاربرد دیگر شبیه‌سازی‌های انجام‌شده پس از معادلات جریان، می‌توان به بررسی نقش فضا سازها در افزایش میزان شار آب عبوری از غشا اشاره کرد. همان‌طور که در شکل ۱۰ نمایش داده شده با جانمایی مناسب فضاسازها می‌توان تلاطم کافی در جریان را ایجاد نمود که این امر سرانجام منجر به افزایش میزان شار جرمی آب از درون غشا خواهد شد. این مقایسه بین دو محفظه غشایی با هندسه و تعداد ورودی و خروجی یکسان ولی با تعداد ستون متفاوتی از فضاسازها انجام‌شده است[۱۵].

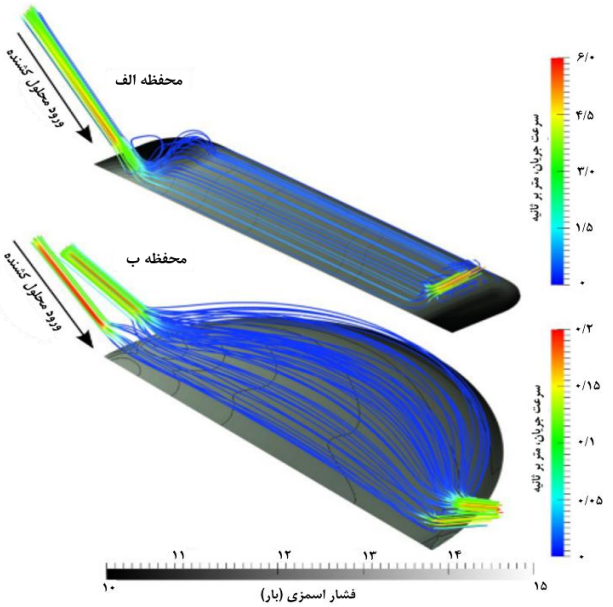
طاهریان و *همکاران*[۲۱] نیز در سال ۲۰۱۷ فرایند اسمز مستقیم را به‌وسیله نرم‌افزار Netlogo و با حل معادله ۱۷ شبیه‌سازی کرده‌اند. در این پژوهش، اثر پارامترهای فرآیندی گوناگونی مانند دما، طول محفظه،

(۱) Tiraferri A. et al

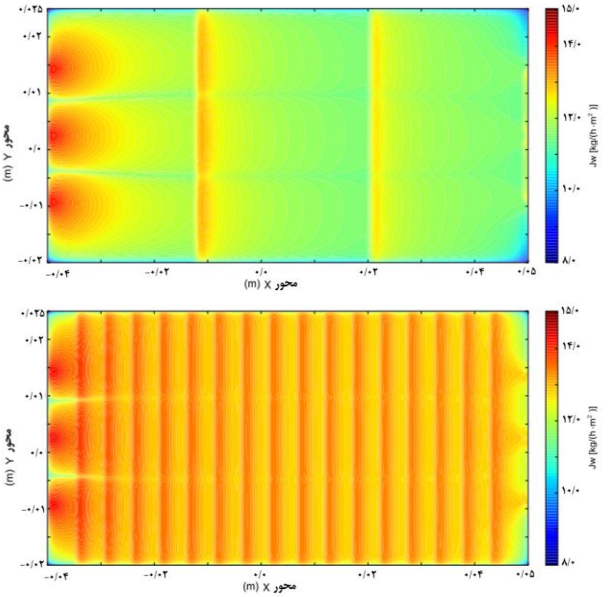
(۲) Gruber M.F.et al

Archive of SID.ir

Archive of SID.ir

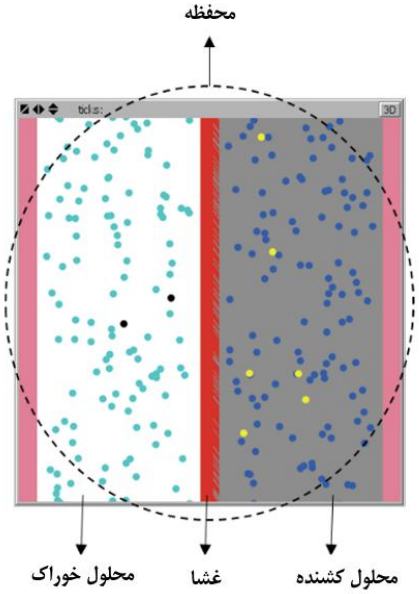


شکل۹- مقایسه نحوه عبور جریان و فشار اسمزی در دو محفظه غشایی گوناگون[۳۸].



شکل۱۰- بررسی اثرات به‌کارگیری تعداد گوناگون فضا ساز بر شار جرمی آب عبوری از غشا[۱۵].

سرعت جریان در سمت محلول خوراک و پارامتر ساختاری غشا روی شار آب متوسط موردبررسی قرار گرفت. بااینکه در این پژوهش برخلاف شبیه‌سازی *گروبر* و *همکاران*، از معادله قدیمی ۱۷ برای محاسبه شار آب در یک فضای دوبعدی استفاده‌شده است ولی بااین‌وجود *طاهریان* و *همکاران* از محلول‌های کشنده گوناگونی برای سنجش اثرات این پارامتر مهم بر روی شار جرمی آب و نمک استفاده کرده‌اند.



شکل۱۱- بررسی اثر شرایط فرآیندی بر شار آب در یک محفظه ساده دو بعدی [۲۱].

نتیجه‌گیری

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

Archive of SID.ir

Archive of SID.ir

فرایندهای غشایی داشته و شبیه‌سازی‌های آینده خطای کمتری نسبت به نتیجه‌های تجربی داشته باشند. از طرفی، همان‌طور که ذکر شد شبیه‌سازی‌ها پس از اعتبارسنجی با داده‌های آزمایشگاهی، با درنظرگرفتن شرایط فرایندی غشا (نوع محلول کشنده و خوراک و غلظت آن، سرعت و جهت جابه‌جایی محلول‌ها و پارامتر ساختاری غشا و غیره) و شرایط فیزیکی محفظه‌های غشایی (شکل هندسی محفظه، تعداد و زاویه ورودی و خروجی و غیره) قابلیت بهینه‌سازی این شرایط را در راستای کاهش هزینه‌های تحقیقات آزمایشگاهی را دارند.

واژه‌نامه

A	ضریب تراوایی آب / Water permeability coefficient
B	ضریب تراوایی حل‌شونده/ Solute permeability coefficient
c	غلظت
D	ضریب نفوذ مولکولی
d_h	قطر هیدرولیکی محفظه غشایی
En/fn/g	ثوابت وابسته به ضریب نفوذ مولکولی
Js	شار حل‌شونده
Jw	شار آب
k	ضریب انتقال جرم
K	مقاومت لایه متخلخل نسبت به ماده حل‌شونده
L	طول غشا
n	کسر مولی
P	فشار
R	ثابت عمومی گازها
Re	عدد رینولدز
S	پارامتر ساختاری غشا
Sc	عدد اشمیت
Sh	عدد شرود
T	دمای مطلق
t	ضخامت غشا
U	ضریب تناسب ارتباط برقرارکننده بین گرادیان پتانسیل شیمیایی و شار
V	سرعت
x	فاصله

نمادهای یونانی

δ	ضریب فشردگی
ε_{eff}	تخلخل مؤثر
ε	تخلخل
μ	پتانسیل شیمیایی
π	فشار اسمزی
τ	پیچش/ Tortuosity
φ	ضریب ثابت ارتباط‌دهنده فشار اسمزی و غلظت
ν	حجم مولی جزئی
γ	ضریب فعالیت و ارتباط‌دهنده غلظت و فعالیت

زیروند ها

b	توده و بالک
d	محلول کشنده
f	محلول خوراک
i, n	شمارنده
in	بین سطح لایه متراکم و پشتیبان غشا
m	غشا
sw	حل‌شونده به آب

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

مراجع

[1] UNESCO, "World Water Development Report Volume 4: Managing Water under Uncertainty and Risk". (2012).

[2] Amarasinghe U.A., Smakhtin V., "Global Water Demand Projections: Past, Present and Future". (2014).

[3] Nikazar M., Jamshidi M., Reuse of Refinery Treated Wastewater in Cooling Towers. *Iranian Journal of Chemistry and Chemical Engineering (IJCCE)*, **27(4):** 1–7 (2008).

[4] Garcia-Castello E.M., McCutcheon J.R., Elimelech M., Performance Evaluation of Sucrose Concentration Using Forward Osmosis. *Journal of Membrane Science*, **338(1–2):** 61–66 (2009).

Archive of SID.ir

Archive of SID.ir

[۵] دهنوی س.م.، شکرالله زاده س.، بررسی جداسازی نمک و بازیابی آب در فرایند اسمز معکوس آب دریا با استفاده از آب خنک کننده نیروگاه. *نشریه علوم و مهندسی جداسازی*، **۱۰(۲):** ۱-۱۰ (۱۳۹۷)

[6] Nematzadeh M., Samimi A., Shokrollahzadeh S., Application of Sodium Bicarbonate as Draw Solution in Forward Osmosis Desalination: Influence of Temperature and Linear Flow Velocity. *Desalination and Water Treatment*, **57(44):** 20784–20791 (2016).

[7] Shokrgozar Eslah S., Shokrollahzadeh S., Moini Jazani O., Samimi A., Forward Osmosis Water Desalination: Fabrication of Graphene Oxide-Polyamide/Polysulfone Thin-Film Nanocomposite Membrane with High Water Flux and Low Reverse Salt Diffusion. *Separation Science and Technology*, **53(3):** 573–583 (2018).

[8] McGinnis R.L., Elimelech M., Global Challenges in Energy and Water Supply: The Promise of Engineered Osmosis. *Environmental Science and Technology*, **42(23):** 8625–8629 (2008).

[9] Achilli A., Cath T.Y., Childress A.E., Power Generation with Pressure Retarded Osmosis: An Experimental and Theoretical Investigation. *Journal of Membrane Science*, **343(1–2):** 42–52 (2009).

[۱۰] باهوش م.، شکرالله زاده س.، کاشی ا.، مروری بر کاربردهای فرآیند غشایی اسمز مستقیم. *نشریه مهندسی شیمی ایران*، **۱۵(۸۹):** ۱۸-۳۴ (۱۳۹۵)

[۱۱] باهوش م.، شکرالله زاده س.، کاشی ا.، اثر پلاریزاسیون غلظتی در فرآیند شیرین‌سازی آب به روش اسمز مستقیم (مروری). *علوم و تکنولوژی محیط زیست*، (۱۳۹۵)

[12] Mehdizadeh H., Modeling of Transport Phenomena in Reverse Osmosis Membranes. *Ph.D thesis in Chemical Engineering.McMaster University, CANADA*, (1990).

[13] Wijmans J.G., Baker R.W., The Solution-Diffusion Model: A Review. *Journal of Membrane Science*, **107(1–2):** 1–21 (1995).

[14] Bahoosh M., Kashi E., Shokrollahzadeh S., Rostami K., Comparison the Performance of Different Reverse Osmosis Membrane Modules by CFD Modeling. *Iranian Journal of Chemical Engineering(IJChE)*, **16(1):** 101–116 (2019).

[15] Gruber M.F., Aslak U., Hélix-Nielsen C., Open-Source CFD Model for Optimization of Forward Osmosis and Reverse Osmosis Membrane Modules. *Separation and Purification Technology*, **158**: 183–192 (2016).

[16] Seo J., Kim Y.M., Chae S.H., Lim S.J., Park H., Kim J.H., An Optimization Strategy for a Forward Osmosis-Reverse Osmosis Hybrid Process for Wastewater Reuse and Seawater Desalination: A Modeling Study. *Desalination*, **463(March):** 40–49 (2019).

[17] Awobusuyi T.D., Concentration of Ammonium from Dilute Aqueous Solutions using Commercially Available Reverse Osmosis Membranes, University of Ottawa, (2016).

[18] Wang J., Dlamini D.S., Mishra A.K., Pendergast M.T.M., Wong M.C.Y.Y., Mamba B.B., Freger V., Verliefde A.R.D., Hoek E.M.V., A critical review of transport through osmotic membranes. *Journal of Membrane Science*, **454**: 516–537 (2014).

Archive of SID.ir

Archive of SID.ir

[19] Vaidya S.Y., Simaria A.V., Murthy Z.V.P., Reverse Osmosis Transport Models Evaluation: A New Approach. *Indian Journal of Chemical Technology*, **8(5):** 335–343 (2001).

[20] Singh R.P., Medina A.G., "Food Properties and Computer-Aided Engineering of Food Processing Systems". Springer Netherlands, (2012).

[21] Taherian M., Mousavi S.M., Modeling and Simulation of Forward Osmosis Process Using Agent-Based Model System. *Computers & Chemical Engineering*, **100**: 104–118 (2017).

[22] Gruber M.F., Johnson C.J., Tang C.Y., Jensen M.H., Yde L., Hélix-Nielsen C., Computational Fluid Dynamics Simulations of Flow and Concentration Polarization in Forward Osmosis Membrane Systems. *Journal of Membrane Science*, **379(1–2):** 488–495 (2011).

[23] Fletcher D.F., Wiley D.E., A Computational Fluids Dynamics Study of Buoyancy Effects in Reverse Osmosis. *Journal of Membrane Science*, **245(1–2):** 175–181 (2004).

[24] Zhao Y., Modeling of Membrane Solute Mass Transfer in NF/RO Membrane Systems, University of Central Florida, (2004).

[25] Wijmans J.G.H., Baker R.W., The Solution-Diffusion Model: A Unified Approach to Membrane Permeation. In Materials Science of Membranes for Gas and Vapor Separation Chichester, UK: John Wiley & Sons, Ltd, 159–189 (2006).

[26] Uragami T., "Science and Technology of Separation Membranes, 2 Volume Set". Wiley, (2017).

[27] Baker R.W., "Membrane Technology and Applications". Chichester, UK: John Wiley & Sons, Ltd, (2004).

[28] Marchetti P., Solomon M.F.J., Szekely G., Livingston A.G., Molecular Separation with Organic Solvent Nano filtration : A Critical Review. *Chemical Review*, **114**: 10735–10806 (2014).

[29] Lee K.L., Baker R.W., Lonsdale H.K., Membranes for Power Generation by Pressure-Retarded Osmosis. *Journal of Membrane Science*, **8(2):** 141–171 (1981).

[30] Loeb S., Titelman L., Korngold E., Freiman J., Effect of Porous Support Fabric on Osmosis Through a Loeb-Sourirajan Type Asymmetric Membrane. *Journal of Membrane Science*, **129(2):** 243–249 (1997).

[31] McCutcheon J.R., Elimelech M., Influence of Concentrative and Dilutive Internal Concentration Polarization on Flux Behavior in Forward Osmosis. *Journal of Membrane Science*, **284(1–2):** 237–247 (2006).

[32] Mccutcheon J.R., Elimelech M., Modeling Water Flux in Forward Osmosis: Implications for Improved Membrane Design. *AIChE Journal*, **53(7):** 1736–1744 (2007).

[33] Tan C.H., Ng H.Y., Modified Models to Predict Flux Behavior in Forward Osmosis in Consideration of External and Internal Concentration Polarizations. *Journal of Membrane Science*, **324(1–2):** 209–219 (2008).

[34] Tang C.Y., She Q., Lay W.C.L., Wang R., Fane A.G., Coupled Effects of Internal Concentration Polarization and Fouling on Flux Behavior of Forward Osmosis Membranes During Humic Acid Filtration. *Journal of Membrane Science*, **354(1–2):** 123–133 (2010).

Archive of SID.ir

Archive of SID.ir

[35] Zhao S., Zou L., Relating Solution Physicochemical Properties to Internal Concentration Polarization in Forward Osmosis. *Journal of Membrane Science*, **379(1–2):** 459–467 (2011).

[36] Suh C., Lee S., Modeling Reverse Draw Solute Flux in Forward Osmosis with External Concentration Polarization in Both Sides of the Draw and Feed Solution. *Journal of Membrane Science*, **427**: 365–374 (2013).

[37] Bui N.N., Arena J.T., McCutcheon J.R., "Proper Accounting of Mass Transfer Resistances in Forward Osmosis: Improving the Accuracy of Model Predictions of Structural Parameter". Elsevier, (2015).

[38] Gruber M.F., Johnson C.J., Tang C., Jensen M.H., Yde L., Helix-Nielsen C., Validation and Analysis of Forward Osmosis CFD Model in Complex 3D Geometries. *Membranes*, **2(4):** 764–782 (2012).

[39] McCutcheon J.R., McGinnis R.L., Elimelech M., A Novel Ammonia—Carbon Dioxide Forward (Direct) Osmosis Desalination Process. *Desalination*, **174(1):** 1–11 (2005).

[40] Geraldes V.V., Semião V., De Pinho M.N., Flow and Mass Transfer Modelling of Nanofiltration. *Journal of Membrane Science*, **191(1–2):** 109–128 (2001).

[41] Tiraferri A., Yip N.Y., Straub A.P., Romero-Vargas Castrillon S., Elimelech M., A Method for the Simultaneous Determination of Transport and Structural Parameters of Forward Osmosis Membranes. *Journal of Membrane Science*, **444**: 523–538 (2013).

Archive of SID.ir