

## مدل سازی و شبیه سازی غشاء پالادیم-نقره بر پایه سرامیکی برای جداسازی مخلوط گازی

ناصر ثقه الاسلامی<sup>۱\*</sup>، مهدی امرائی<sup>۲</sup>  
<sup>۱</sup>دانشیار، دانشکده مهندسی، دانشگاه فردوسی، مشهد، ایران  
<sup>۲</sup>دانشجوی کارشناسی ارشد، دانشکده مهندسی، دانشگاه فردوسی، مشهد، ایران  
 دریافت: ۹۱/۷/۱۴ پذیرش: ۹۱/۱۲/۲۶

### چکیده

استفاده از تکنولوژی غشایی یکی از مناسب ترین روش ها برای فرآیندهای جداسازی از جمله برای جداسازی گازها می باشد. با توجه به وقت و هزینه های زیاد مطالعات آزمایشگاهی، دینامیک سیالات محاسباتی<sup>۱</sup> می تواند پیش بینی خوبی از رفتار سیال بدون انجام آزمایش داشته باشد. در این پژوهش، فرآیند جداسازی مخلوط گازی هیدروژن و نیتروژن توسط غشاء پالادیم-نقره بر پایه سرامیکی در یک مدول لوله ای توسط نرم افزار COMSOL Multiyphysics شبیه سازی شده است. با توجه به اندازه مولکولی کوچک تر و ضریب نفوذ بیشتر هیدروژن نسبت به نیتروژن، هیدروژن میل بیشتری برای عبور از غشاء متخلخل دارد. نتایج شبیه سازی معرف آن است که با افزایش فشار خوراک، کسر مولی گاز هیدروژن و دبی ورودی خوراک در سمت پوسته، فلاکس تراوش یافته گاز هیدروژن که از غشاء عبور می کند، در سمت لوله افزایش می یابد. نتایج حاصل از شبیه سازی با داده های آزمایشگاهی مقایسه گردیده و انطباق خوبی مشاهده شده است.

**کلمات کلیدی:** جداسازی، مخلوط گازی، غشاء، دینامیک سیالات محاسباتی، شبیه سازی

### مقدمه

فرآیند و انرژی مصرفی نسبتاً کم، در برابر روش های جداسازی دیگر مانند جذب سطحی، جذب و عملیات برودتی ارجحیت دارند [۱]. دانش جامع دینامیک سیالات و مکانیزم های انتقال جرم در فرآیندهای جداسازی غشایی برای طراحی و بهینه سازی دستگاه مناسب تعیین کننده اند. به این منظور روش های دینامیک سیالات محاسباتی خیلی مفیدند، زیرا کاربردهایشان

امروزه تکنولوژی غشاء به عنوان یکی از مدرن ترین روش های جداسازی مورد توجه گسترده قرار گرفته است. این فناوری قابلیت کاربری در حدود ۷۰ درصد از فرآیندهای شیمیایی را داشته و در کارهای زیست محیطی، توسعه پایدار و غیره نیز روزبه روز بر اهمیت آن ها افزوده می شود. فرآیندهای جداسازی غشایی به دلیل هزینه سرمایه گذاری اولیه پایین، سهولت انجام

\* slami@um.ac.ir

1. Computational Fluid Dynamic (CFD)

متوسط فشار ورودی و خروجی به عنوان فشار سمت خوراک از فشارهای موضعی در معادله داری استفاده نمودند [۸]. نتایج این مدل سازی نشان داد که مقادیر پیش بینی شده توسط مدل دینامیک سیالات محاسباتی از مقادیر حاصل از محاسبات ساده که در آن‌ها از فشار متوسط استفاده می‌شود، به مقادیر تجربی نزدیک‌تر است. همچنین آن‌ها نشان دادند که محاسبات ساده مقادیر بالاتری از فلاکس تراوش یافته را نسبت به روش دینامیک سیالات محاسباتی پیش بینی می‌کند. لیو<sup>۱</sup> و همکارانش انتقال جرم در عرض یک غشاء تراوش تبخیری مسطح با جریان آرام را به عنوان یک واکنش شیمیایی شبه درجه اول با توجه به پلاریزاسیون غلظتی و تأثیرات تیغه روی عملکرد جداسازی غشایی مدل کردند [۹ و ۱۰]. آن‌ها نتایج مدل خود و نتایج حاصل از روش‌های حل کلاسیک را با مقادیر تجربی مقایسه نمودند. بر اساس این مقایسه، در تمامی اعداد رینولدز، ضریب انتقال جرم پیش بینی شده توسط روش دینامیک سیالات محاسباتی به مقادیر تجربی نزدیک‌تر است، اما برای اعداد رینولدز بالاتر (دبی‌های بالاتر) از دقت روش دینامیک سیالات محاسباتی کاسته می‌شود.

### ساده‌سازی‌ها و فرضیات مدل

اکثر محققین با اعمال فرضیات مناسب و یک سری ساده سازی‌ها که از نتایج مطالعات آزمایشگاهی بدست آمده است، به ساده سازی مدل‌ها پرداخته‌اند. هدف از این مدل سازی‌ها، ارائه مدلی پیش بینی کننده است که بتواند عملیات را در مقیاس صنعتی شبیه‌سازی نماید تا بتوان بر اساس نتایج آن از افزایش مقیاس برای طراحی‌های صنعتی سیستم‌های غشایی بهره گرفت.

در این تحقیق، مشخصات نفوذ هیدروژن در مخلوط نیتروژن/هیدروژن به وسیله یک غشاء Pd-Ag بر پایه سرامیک  $Al_2O_3$  را بررسی نموده‌ایم.

می‌تواند به پیش بینی عملیات جداسازی غشایی در هر موقعیت و در هر مقیاسی از مدول منجر شود.

در سال‌های اخیر تلاش‌های متعددی برای مدل سازی مدول‌های غشایی به کمک روش دینامیک سیالات محاسباتی صورت گرفته است. یکی از اولین کاربردهای روش‌های دینامیک سیالات محاسباتی برای غشاها که توسط کائو<sup>۱</sup> و همکارانش انجام شد، به تحلیل دینامیکی سیال و بهینه‌سازی هندسی پیش برنده‌های آشفته‌گی مربوط می‌شود [۲]. پس از آن دپینهو<sup>۲</sup> و همکارانش [۳] و وایلی<sup>۳</sup> و فلچر<sup>۴</sup> [۴] تلاش‌های اولیه‌ای را برای پیوند دادن معادلات ساده شده جریان با مدل‌های مکانیزم انتقال جرم، با تمرکز تلاششان بر روی پدیده پلاریزاسیون غلظتی انجام دادند. وایلی و فلچر در کارشان یک مدل دینامیک سیالات محاسباتی جهت شبیه‌سازی فرآیندهای غشایی با نیرو محرکه فشار همراه با عبور گزینشی مواد از غشاء ارائه نمودند. اما در این مدل میزان دفع می‌بایست از پیش تعریف شده باشد. آن‌ها اثر تغییرات در میزان دفع و نرخ تراوایی دیواره و همچنین، متغیر یا ثابت بودن خواص محلول را بر پروفایل‌های غلظت و سرعت بررسی کردند. احمد<sup>۵</sup> و همکارانش یک روش برای نمک‌زدایی غشایی اتخاذ نمودند [۵]. آن‌ها پروفایل غلظت را بر اساس تئوری فیلمی تعیین نمودند و از یک مدل دو بعدی برای پیش بینی پلاریزاسیون غلظتی، ضریب انتقال جرم و تنش برشی دیواره در یک کانال فضا ساز<sup>۶</sup> استفاده کردند. ما<sup>۷</sup> و همکارانش یک مدل المان محدود در مدول‌های اسمز معکوس حلزونی ارائه نمودند. آن‌ها نشان دادند که اگر مش‌های نزدیک غشاء تغییر جهت بردارهای سرعت را به خوبی تحت پوشش قرار ندهند، غلظت روی سطح غشاء کمتر از مقدار واقعی تخمین زده می‌شود [۶]. سانتوس<sup>۸</sup> و همکارانش اثر هندسه فضا ساز را بر روی جریان سیال، پروفایل غلظت، افت فشار و در نتیجه انرژی مصرفی بررسی نمودند [۷]. رحیمی و همکارانش جهت تعیین شار تراوش یافته در یک فرآیند میکروفیلتراسیون، به جای

1. Cao  
2. De pinho  
3. Wiley  
4. Fletcher  
5. Ahmad

6. Spacer  
7. Ma  
8. Santos  
9. Liu

اندک غشاء پالادیم-نقره، در مدل سازی و شبیه سازی، ضخامت غشاء فلزی صفر فرض می شود [۱۳]، بنابراین شعاع  $r_2-r_1$  تنها ضخامت غشاء سرامیکی می باشد (تأثیر غشاء فلزی در قالب شرایط مرزی  $r=r_2$  برای نرم افزار تعریف شده است).

مخلوط گازی  $H_2/N_2$  در  $z=0$  به داخل پوسته وارد می شود و در اثر گرادیان غلظت هیدروژن بین پوسته و لوله، هیدروژن از لایه فلزی و جداره غشاء متخلخل عبور می کند و به داخل لوله تراوش می یابد. در مدل آزمایشگاهی مورد بررسی، از گاز جاروب کننده استفاده نشده است. در مدل سازی با اعمال سرعت محوری در سمت لوله ( $V_{z-tube}$ ) در خلاف جهت محور  $z$ ، نقش گاز جاروب کننده را ایفا می کند. در واقع، نقش گاز جاروب کننده انتقال گاز هیدروژن تراوش یافته در سمت لوله به بیرون از لوله در  $z=0$  می باشد. همچنین جریان باقیمانده که حاوی نیتروژن و مقدار کمتری هیدروژن است، در  $z=L$  از پوسته خارج می شود. موازنه جرم در حالت دو بعدی و جریان پایا برای هر سه قسمت انجام می گیرد.

در همه مدل سازی های انجام شده از معادله پیوستگی برای تعیین توزیع غلظت در سه دامنه پوسته، غشاء و لوله استفاده نموده ایم و برای مدل سازی سیستم غشایی از مختصات استوانه ای استفاده شده است. فرضیات کلی مورد استفاده عبارتند از:

- ۱- شرایط پایا و هم دما می باشد.
- ۲- جریان تراکم ناپذیر می باشد.
- ۳- واکنش شیمیایی نداریم.
- ۴- هندسه دارای تقارن محوری می باشد.

#### معادلات حاکم در سمت پوسته

معادله پیوستگی در شرایط پایا برای جزء  $i$  به این صورت

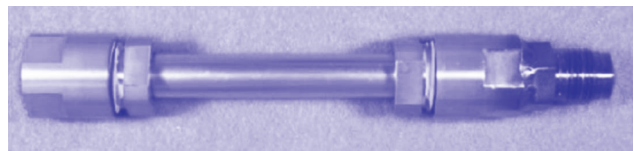
می باشد:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = \nabla \cdot N_i + R_i \quad (1)$$

که  $C_i$  (mol/m<sup>3</sup>)،  $N_i$  (mol/(m<sup>2</sup>.s)) و  $R_i$  (mol/(m<sup>3</sup>.s))

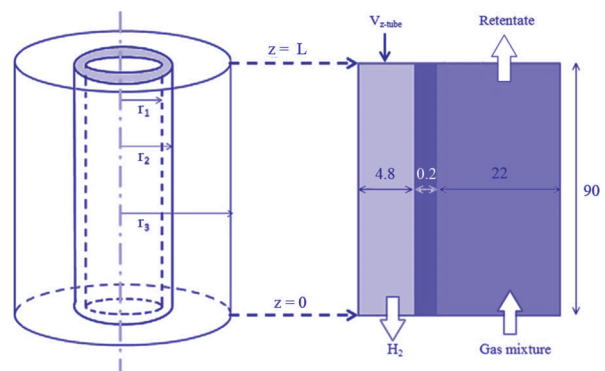
1. Pizzi

مدول مورد نظر یک مدول لوله ای به صورت دو استوانه هم مرکز است که قطر خارجی استوانه ۵/۴ cm، قطر لوله داخلی ۱ cm، طول استوانه ۹ cm و ضخامت لایه Pd-Ag استفاده شده  $2/5 \mu m$  و ضخامت غشاء سرامیکی از جنس آلومینا  $200 \mu m$  می باشد (لایه فلزی روی غشاء سرامیکی رسوب داده شده است). مشخصات هندسی مذکور، برگرفته از بررسی های آزمایشگاهی پیچی<sup>۱</sup> و همکاران [۱۱] می باشد. شکل ۱ شماتیک مدول مورد بررسی را نشان می دهد.



شکل ۱: شماتیک مدول مورد بررسی [۱۱]

به دلیل تطابق قابل قبول نتایج حاصل از شبیه سازی دو بعدی متقارن محوری با نتایج شبیه سازی سه بعدی، مختصات سه بعدی را می توان به صورت مختصات دو بعدی متقارن محوری در نظر گرفت و این کار دقت نتایج را کاهش نمی دهد [۱۲]. بنابراین در این پروژه مدل ریاضی دوبعدی نسبتاً جامعی برای جداسازی مخلوط گازی توسط مدول غشایی لوله ای تعریف می کنیم. شکل ۲ نمودار شماتیک مدول و مختصات دو بعدی متقارن محوری آن را نشان می دهد.



شکل ۲: نمودار شماتیک مدول و مختصات دو بعدی متقارن محوری آن (ابعاد بر حسب میلی متر می باشد)

مدول غشایی از سه قسمت پوسته (شعاع  $r_2-r_1$ )، غشاء (شعاع  $r_1$ ) و لوله (شعاع  $r_1$ ) تشکیل شده است. البته به دلیل ضخامت

که  $T, R, P_{H_2-shell}$  و  $Y_{H_2-shell}$  به ترتیب ثابت عمومی گازها، دمای مطلق، کسر مولی و فشار هیدروژن در پوسته می‌باشند.

نفوذ هیدروژن از غشاهای با پایه پالادیم با استفاده از روش انحلال-نفوذ مدل می‌شود. مولکول‌های هیدروژن به طور تجزیه پذیری جذب سطح فلز می‌شوند و از طریق بالک فلز به صورت  $H$  اتمی نفوذ می‌کنند و در طرف تراوش یافته دوباره به صورت  $H_2$  مولکولی ترکیب می‌شوند. فلاکس نفوذ هیدروژن در شرایط پایا  $J$  [ $mol/(m^2.s)$ ] از طریق قانون سیورت<sup>۱</sup> بیان می‌شود [۱۴]:

$$J = \frac{Q_{Pd}}{l} \left[ P_{H_2-f}^{0.5} - P_{H_2-p}^{0.5} \right] \quad (۹)$$

که  $Q_{Pd}$  ( $mol/m.s.Pa^{0.5}$ )،  $l$  (m)،  $P_{H_2-f}$  و  $P_{H_2-p}$  به ترتیب نفوذپذیری وضخامت لایه پالادیم، فشار هیدروژن در سمت ورودی و تراوش یافته می‌باشند.

شرط مرزی ۵ همان قانون سیورت می‌باشد که آن را بر حسب غلظت  $C$  نوشته‌ایم ( $P=CRT$ ) و  $H = \frac{Q_{Pd}}{l} (RT)^{0.5}$  یک مقدار ثابت می‌باشد. علامت منفی به این دلیل است که شار  $J$  در خلاف جهت محور  $r$  یعنی از پوسته به غشاء اعمال می‌شود. متغیرهایی که برای پوسته تعریف شد، برای قسمت‌های غشاء و لوله نیز معنای یکسان دارند و به ترتیب آن‌ها را با زیرنویس membrane و tube معرفی نموده‌ایم.

برای توصیف سرعت سمت پوسته، از معادله توزیع سرعت در استوانه‌های هم مرکز استفاده نموده‌ایم، که معادله نهایی آن به این صورت می‌باشد [۱۵]:

$$V_{z-shell} = 2 \bar{V}_s \times B \left[ 1 - \left( \frac{r}{r_3} \right)^2 - \frac{1 - (r_2/r_3)^2}{\ln(r_3/r_2)} \times \ln \left( \frac{r_3}{r} \right) \right] \quad (۱۰)$$

که  $\bar{V}_s = \frac{q_{shell}}{A}$  بیانگر سرعت میانگین در پوسته،  $A_s$  بیانگر سطح مقطع درون پوسته و  $B$  یک مقدار ثابت می‌باشد.

### معادلات حاکم بر سمت غشاء

برای انتقال جرم درون غشاء فرض می‌کنیم درون غشاء فقط نفوذ انجام می‌گیرد و حرکت توده‌ای (جابجایی) نداریم، بنابراین:

$$V_{z-membrane} = 0 \quad (۱۱)$$

به ترتیب نشان‌دهنده غلظت، فلاکس کلی انتقال جرم و ترم واکنش جزء  $i$  می‌باشند.

برای تعیین فلاکس کلی انتقال جرم جزء  $i$  از قانون نفوذ فیک استفاده می‌کنیم [۳۷]:

$$N_i = J_i + C_i V_z = D_i \nabla C_i + C_i V_z \quad (۲)$$

که  $J_i$  [ $mol/(m^2.s)$ ]،  $D_i$  ( $m^2/s$ ) و  $V_z$  (m/s) به ترتیب فلاکس نفوذی، ضریب نفوذ جزء  $i$  و سرعت محوری می‌باشند و ترم  $C_i V_z$  نشان دهنده جابجایی می‌باشد.

با ترکیب معادلات ۱ و ۲ داریم:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = D_i \nabla^2 C_i + \nabla \cdot C_i V_z + R_i \quad (۳)$$

درون پوسته مخلوط گازی جریان دارد و از آنجا که هیدروژن اندازه مولکولی کوچک‌تر و ضریب نفوذ بیشتری دارد، فرض می‌شود فقط مولکول‌های هیدروژن از غشاء نفوذ کرده و جزء دیگر یعنی نیتروژن نفوذ نمی‌کند. بنابراین باید معادله پیوستگی را برای هیدروژن در فاز گاز ساده نمود. با صرف نظر کردن از سرعت شعاعی در مقایسه با سرعت محوری، واکنش شیمیایی نداشته باشیم و شرایط پایا باشد، خواهیم داشت:

$$V_{z-shell} \frac{\partial C_{H_2-shell}}{\partial z} = \quad (۴)$$

$$D_{H_2-shell} \left[ \frac{\partial^2 C_{H_2-shell}}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C_{H_2-shell}}{\partial r} + \frac{\partial^2 C_{H_2-shell}}{\partial z^2} \right]$$

که در آن  $D_{H_2-shell}$  ضریب نفوذ هیدروژن در مخلوط گازی،  $C_{H_2-shell}$  غلظت هیدروژن در پوسته و  $V_{z-shell}$  سرعت محوری در پوسته می‌باشد.

برای حل معادله ۴ به چهار شرط مرزی نیاز است. این شرایط مرزی عبارتند از:

$$r = r_2 \quad , \quad J = -H \left[ C_{H_2-shell}^{0.5} - C_{H_2-membrane}^{0.5} \right] \quad (۵)$$

$$r = r_3 \quad , \quad \frac{\partial C_{H_2-shell}}{\partial r} = 0 \quad (۶)$$

$$z = L \quad , \quad N_{H_2-shell} = C_{H_2-shell} V_{z-shell} \quad (۷)$$

$$z = 0 \quad , \quad C_{H_2-shell} = \frac{y_{H_2-shell} P_{H_2-shell}}{RT} \quad (۸)$$

$$z = L, \quad C_{H_2-tube} = 0 \quad (22)$$

فرض می‌شود توزیع سرعت درون لوله از الگوی جریان آرام نیوتنی تبعیت می‌کند، بنابراین توزیع سرعت سمت لوله را به صورت معادله هاگن-پویسوله می‌باشد [۱۵]:

$$V_{z-tube} = 2 \bar{V}_t \left[ 1 - \left( \frac{r}{r_1} \right)^2 \right] \quad (23)$$

که در آن  $\bar{V}_t = \frac{q_{tube}}{A_t}$  بیانگر سرعت میانگین در لوله و  $A_t$  بیانگر سطح مقطع درون لوله است.

برای شبیه‌سازی فرآیند باید معادلات ذکر شده به همراه شرایط مرزی آن‌ها به صورت هم‌زمان حل شوند. در پروژه حاضر برای حل به روش عددی از نرم‌افزار V3.5COMSOL Multiphysics استفاده شده که سابقاً با نام FEMLAB شناخته شده است. این نرم‌افزار با استفاده از روش المان محدود به حل مدل‌ها می‌پردازد.

### نتایج و بحث

مخلوط گازی در دمای  $400^\circ\text{C}$  و با دبی ۱ lit/min و با فشارهای مختلف، وارد پوسته مدول غشایی می‌شود. در حالی که فشار در سمت تراوش یافته (لوله) همیشه ۱ bar می‌باشد [۱۱]. برای دو ترکیب درصد گاز هیدروژن در جریان خوراک (۵۰٪ و ۸۸٪)، اثر تغییر پارامترهای مهم مثل فشار، کسر مولی و دبی خوراک بر فلاکس تراوش یافته هیدروژن را بررسی خواهیم نمود.

مخلوط گازی در  $z=0$  وارد پوسته می‌شود که شکل ۳ نمودار طیف رنگی توزیع غلظت هیدروژن را در  $y_{H_2}=0.5$  نشان می‌دهد. تغییر رنگ نشان دهنده تغییر غلظت می‌باشد و فلش‌ها بیانگر فلاکس کلی انتقال می‌باشند. با جریان یافتن مخلوط گازی از درون پوسته، هیدروژن از ورودی که دارای بیشترین غلظت است، با توجه به اختلاف غلظت به سمت غشاء حرکت می‌کند و پس از عبور از غشاء به داخل لوله تراوش می‌کند. بر طبق این شکل، غلظت هیدروژن در ورودی به پوسته دارای بیشترین مقدار است و با حرکت به سمت لوله به تدریج از غلظت آن کاسته می‌شود. در قسمت لوله در مختصات  $z=L$

در نتیجه معادله پیوستگی در حالت یکنواخت برای انتقال هیدروژن از درون غشاء که تنها تحت اثر نفوذ است، به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$D_{H_2-membrane} \left[ \frac{\partial^2 C_{H_2-membrane}}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C_{H_2-membrane}}{\partial r} + \frac{\partial^2 C_{H_2-membrane}}{\partial z^2} \right] = 0 \quad (12)$$

ضریب نفوذ،  $D_{H_2-membrane}$  در رابطه فوق، پارامتر موثر بر نفوذ است که در بر گیرنده عواملی چون تخلخل غشاء و انحناى حفرات غشاء می‌باشد و طبق رابطه زیر محاسبه می‌شود:

$$D_{H_2-membrane} = \frac{D_{H_2} \times \varepsilon}{\tau} \quad (13)$$

در این رابطه اعداد بی بعد  $\varepsilon$  و  $\tau$  به ترتیب تخلخل غشاء و انحناى حفرات غشاء هستند که به ترتیب برابر با ۰/۵ و ۲ می‌باشند.

شرایط مرزی برای غشاء به شرح زیر خواهد بود:

$$r = r_1, \quad C_{H_2-membrane} = C_{H_2-tube} \quad (14)$$

$$r = r_2, \quad J = H \left[ C_{H_2-shell}^{0.5} - C_{H_2-membrane}^{0.5} \right] \quad (15)$$

$$z = 0, \quad \frac{\partial C_{H_2-membrane}}{\partial r} = 0 \quad (16)$$

$$z = L, \quad \frac{\partial C_{H_2-membrane}}{\partial r} = 0 \quad (17)$$

### معادلات حاکم بر سمت لوله

موازنه جرم در حالت یکنواخت برای هیدروژن درون لوله تحت اثر نفوذ و حرکت توده ای قرار دارد و به صورت زیر نوشته می‌شود:

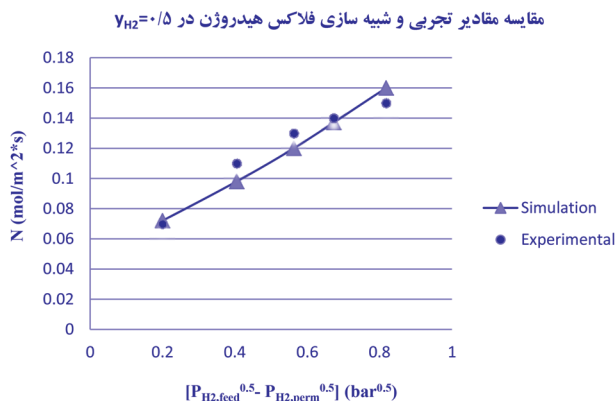
$$V_{z-tube} \frac{\partial C_{H_2-tube}}{\partial z} = D_{H_2-tube} \left[ \frac{\partial^2 C_{H_2-tube}}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C_{H_2-tube}}{\partial r} + \frac{\partial^2 C_{H_2-tube}}{\partial z^2} \right] \quad (18)$$

شرایط مرزی مورد نیاز معادله فوق عبارتند از:

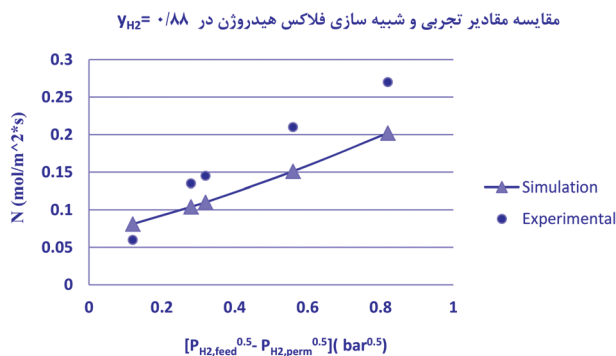
$$r = 0, \quad \frac{\partial C_{H_2-tube}}{\partial r} = 0 \quad (19)$$

$$r = r_1, \quad C_{H_2-tube} = C_{H_2-membrane} \quad (20)$$

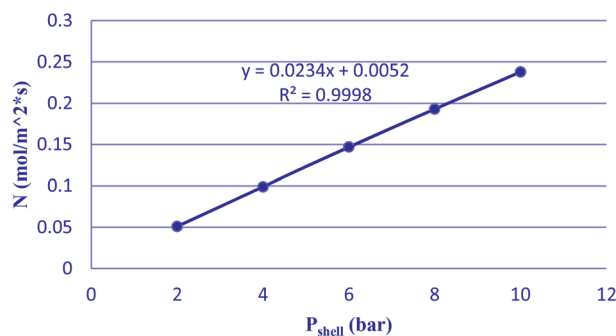
$$z = 0, \quad N_{H_2-tube} = C_{H_2-tube} V_{z-tube} \quad (21)$$



شکل ۴: نمودار فلاکس هیدروژن بر حسب جذر فشار دو سر غشاء در  $y_{H_2}=0.5$  و مقایسه آن با مقادیر تجربی



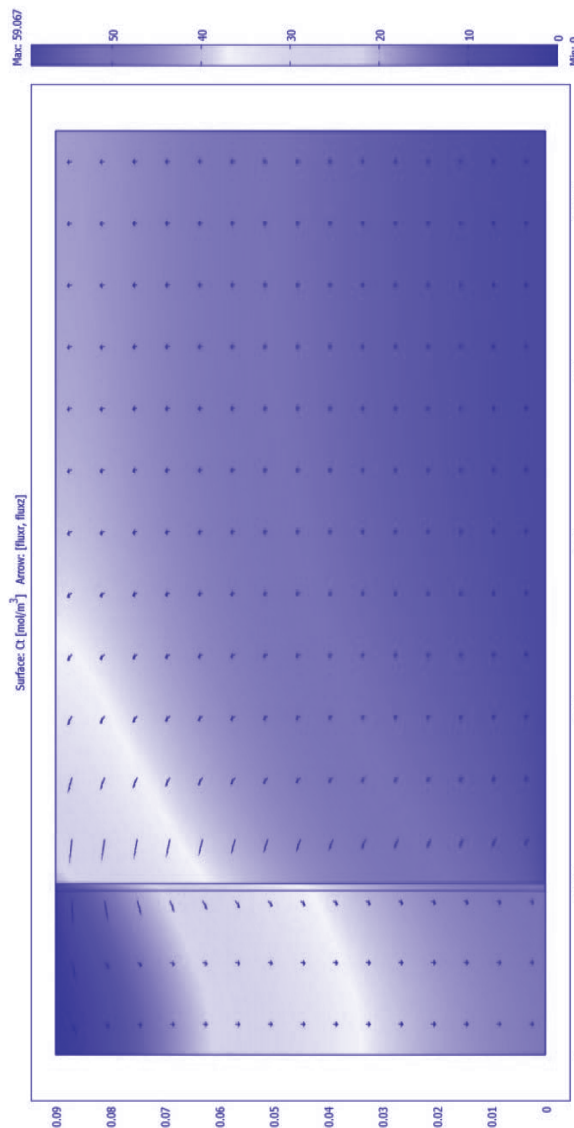
شکل ۵: نمودار فلاکس هیدروژن بر حسب جذر فشار دو سر غشاء در  $y_{H_2}=0.88$  و مقایسه آن با مقادیر تجربی



شکل ۶: نمودار فلاکس هیدروژن بر حسب فشار در شرایط  $y_{H_2}=0.5$  و  $q_{shell}=1 \text{ Lit/min}$

شبیه سازی و مقادیر تجربی [۱۱] وجود دارد.

در شکل ۶ فلاکس هیدروژن بر حسب فشارهای مختلف سمت پوسته در حالی رسم شده است که کسر مولی هیدروژن و دبی ورودی خوراک ثابت هستند. وقتی که فشار خوراک سمت

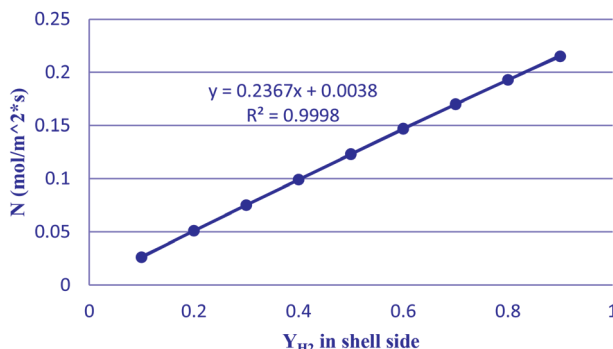


شکل ۳: نمودار توزیع غلظت هیدروژن و بردارهای فلاکس در  $y_{H_2}=0.5$

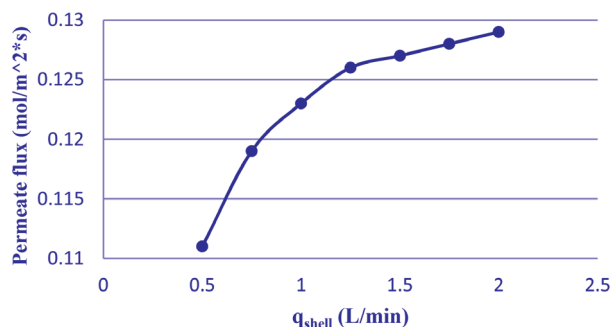
کمترین غلظت هیدروژن وجود دارد و گاز هیدروژن جدا شده در  $z=0$  از لوله خارج می شود. این نتایج کیفی تطابق خوبی با بحث تئوری دارد.

در شکل های ۴ و ۵ نمودار فلاکس هیدروژن بر حسب جذر فشار دو سر غشاء در دو ترکیب درصد را با مقادیر تجربی مقایسه نموده ایم. در هر دو ترکیب درصد، با افزایش فشار فلاکس افزایش می یابد و روند نمودارها صعودی می باشد. برای شکل ۴ و ۵ به ترتیب تطابق خوب و نسبتاً خوبی بین نتایج

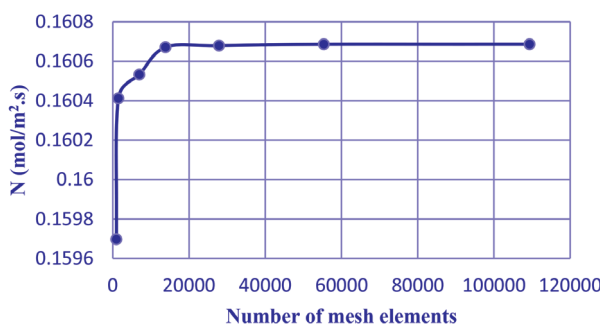




شکل ۷: نمودار فلاکس هیدروژن بر حسب کسر مولی هیدروژن در شرایط  $P_{shell} = \Delta \text{ bar}$  و  $q_{shell} = 1 \text{ Lit/min}$



شکل ۸: نمودار فلاکس هیدروژن بر حسب دبی خوراک در شرایط  $P_{shell} = \Delta \text{ bar}$  و  $Y_{H_2} = 0.5$



شکل ۹: نمودار استقلال از مش

یافته هیدروژن به صورت خطی افزایش می‌یابد. به طور کلی فلاکس با افزایش دبی خوراک نیز افزایش می‌یابد ولی رابطه آن پیچیده‌تر است و به صورت خطی نمی‌باشد. در نتیجه شبیه‌سازی، پیش بینی قابل قبولی از اثر پارامترها بر شرایط عملیاتی فرآیند بدون انجام آزمایش به دست آمد و نتایج

پوسته افزایش پیدا می‌کند این کار باعث افزایش نیرو محرکه اختلاف غلظت می‌شود و میزان فلاکس تراوش یافته در سمت تراوه نیز افزایش می‌یابد. رابطه فلاکس با این متغیر به صورت خطی می‌باشد.

در شکل ۷ فلاکس هیدروژن بر حسب کسر مولی هیدروژن در خوراک در حالی رسم شده است که فشار سمت پوسته و دبی ورودی خوراک ثابت هستند. با افزایش کسر مولی گاز هیدروژن موجود در خوراک، محتوای گاز هیدروژن که برای جداسازی مورد نظر ما می‌باشد افزایش می‌یابد و طبیعتاً در سمت تراوه، میزان بیشتری از هیدروژن تراوش یافته خواهیم داشت و کسر مولی نیز مانند فشار اثر مستقیم بر فلاکس دارد و رابطه فلاکس با این متغیر نیز به صورت خطی می‌باشد.

در شکل ۸ فلاکس هیدروژن بر حسب دبی‌های مختلف ورودی خوراک در حالی رسم شده است که فشار سمت پوسته و دبی ورودی خوراک ثابت هستند. با افزایش دبی خوراک و ورودی میزان فلاکس گاز هیدروژن تراوش یافته افزایش پیدا می‌کند. در اینجا رابطه فلاکس با دبی خوراک خطی نمی‌باشد که این نشان می‌دهد فلاکس به طور خطی با دبی تغییر نمی‌کند و رابطه پیچیده تری وجود دارد. البته در اینجا نیز روند کلی تغییر فلاکس با افزایش دبی خوراک، افزایشی می‌باشد.

شکل ۹ بحث استقلال از مش را بررسی می‌کند و میزان تغییرات فلاکس هیدروژن بر حسب تعداد مش را در شرایط دلخواه (فشار، کسر مولی و دبی خوراک) نشان می‌دهد. در تعداد مش‌های کم تغییرات فلاکس نسبتاً زیاد است ولی با افزایش تعداد مش‌ها از حدود ۲۰۰۰۰ تا حدود ۱۱۰۰۰۰ (تعداد مش‌های مدل مورد بررسی) عملاً تغییر فلاکس صفر می‌شود که این نشان دهنده استقلال نتایج از مش می‌باشد.

### نتیجه گیری

با تغییر پارامترهای مهم عملیاتی مثل فشار خوراک، کسر مولی هیدروژن و دبی خوراک و فلاکس تراوش یافته هیدروژن افزایش می‌یابد. فلاکس با فشار و کسر مولی رابطه مستقیم دارد و با افزایش این دو پارامتر، فلاکس تراوش

شبهه‌سازی تطابق خوب و قابل قبولی با نتایج تجربی دارند. می‌تواند به عنوان یک ابزار مفید و قابل اطمینان برای طراحی تطابق خوب بین داده‌های آزمایشگاهی و داده‌های پیش‌بینی مدول‌های جدید یا برای بهینه‌سازی مدول‌های موجود در نظر شده، پیشنهاد می‌نماید که دینامیک سیالات محاسباتی گرفته شود.

#### منابع

1. S.P. Kaldis, G.C. Kapantaidakis, T.I. Papadopoulos and G.P. Sakellaropoulos, Simulation of binary gas separation in hollow fiber asymmetric membranes by orthogonal collocation, *Journal of Membrane Science*, Vol. 142, 1998, pp.43-59.
2. Z. Cao, D. Wiley, and A. Fane, CFD simulations of net-type turbulence promoters in a narrow channel, *Journal of Membrane Science*, vol. 185, 2001, pp.43-59.
3. M. N. de Pinho, V. Semião, and V. Geraldes, Integrated modeling of transport processes in fluid/nanofiltration membrane systems, *Journal of Membrane Science*, vol. 206, 2002, pp.189-200.
4. D. E. Wiley and D. F. Fletcher, Techniques for computational fluid dynamics modelling of flow in membrane channels, *Journal of Membrane Science*, vol. 211, 2003, pp.189-200.
5. A. Ahmad, K. Lau, M. Bakar, and S. Shukor, Integrated CFD simulation of concentration polarization in narrow membrane channel, *Computers & chemical engineering*, vol. 29, 2005, pp.2087-2095.
6. S. Ma, L. Song, S. L. Ong, and W. J. Ng, A 2-D streamline upwind Petrov/Galerkin finite element model for concentration polarization in spiral wound reverse osmosis modules, *Journal of Membrane Science*, vol. 244, 2004, pp.129-139.
7. J. Santos, V. Geraldes, S. Velizarov, and J. Crespo, Investigation of flow patterns and mass transfer in membrane module channels filled with flow-aligned spacers using computational fluid dynamics (CFD), *Journal of Membrane Science*, vol. 305, 2007, pp.103-117.
8. M. Rahimi, S. Madaeni, and K. Abbasi, CFD modeling of permeate flux in cross-flow microfiltration membrane, *Journal of Membrane Science*, vol. 255x, 2005, pp.103-117.
9. S. X. Liu, M. Peng, and L. Vane, CFD modeling of pervaporative mass transfer in the boundary layer, *Chemical Engineering Science*, vol. 59, 2004, pp.5853-5857.
10. S. X. Liu, M. Peng, and L. M. Vane, CFD simulation of effect of baffle on mass transfer in a slit-type pervaporation module, *Journal of Membrane Science*, vol. 265, 2005, pp.124-136.
11. D. Pizzi, R. Worth, M. Giacinti Baschetti, G. C. Sarti, and K. Noda, Hydrogen permeability of 2.5  $\mu\text{m}$  palladium-silver membranes deposited on ceramic supports, *Journal of Membrane Science*, vol. 325x, 2008, pp.124-136.
12. J. Gozávez-Zafrilla, A. Santafé-Moros, S. Escolastico, and J. Serra, Fluid dynamic modeling of oxygen permeation through mixed ionic-electronic conducting membranes, *Journal of Membrane Science*, vol. 378, 2011, pp.290-300.
13. M. Coroneo, G. Montante, M. Giacinti Baschetti, and A. Paglianti, CFD modelling of inorganic membrane modules for gas mixture separation, *Chemical Engineering Science*, vol. 64x, 2009, pp.290-300.
14. Abdulrahman Y. Al Raisi, and Tracy Q. Gardner, Surface and fluid phase transport effects on hydrogen permeability through palladium-based membranes, *Membranes for Hydrogen Purification (Conference)*, 2007.
15. R. B. Bird, and W. E. Stewart, *Lightfoot transport phenomena*, John & Sons, New York, 1960.