



Modeling and Simulation of Zn Heavy Metal Removal from Wastewater in Hollow Fiber Membrane Contactor

B. Pourtalebi¹, S. M. Abdoli^{2*}, A. Akbari²

1- M. Sc. of Chemical Engineering, Sahand University of Technology, Tabriz, Iran

2- Assistant Professor of Chemical Engineering, Sahand University of Technology, Tabriz, Iran

Email: abdoli@sut.ac.ir

Abstract

In this study, computational fluid dynamics simulation of liquid-liquid extraction of zinc was performed using trifluoroacetylacetone as a solvent in the hollow fiber membrane contactor. Mass and momentum balance equations (Navier-Stokes) were used to express the transport of zinc solutes through the membrane contactor. After applying the conditions, the governing equations were simulated using the finite element method. After validating the results, simulation was performed to study the distribution of zinc concentration in two-dimensional and three-dimensional form, as well as to investigate the effect of different parameters such as distribution coefficient and current intensity on the extraction efficiency. The results showed that by increasing the partition coefficient from 1 to 10, the amount of single-pass extraction increased from 10 to 100 percent. Also, the extraction efficiency in the counter-current flow of pipe and shell is 9% higher than in the co-current flow. Furthermore, this study showed that computational fluid dynamics could be used as an effective tool for the development of membrane-based extraction processes.

Received: 20 October 2022

Accepted: 31 December 2022

Page Number: 105-117

Keywords:

Modeling,
Heavy Metal Removal,
Solvent Extraction,
Hollow Fiber Membrane
Contactor

Please Cite this Article Using:

Pourtalebi, B., Abdoli, S. M., & Akbari, A. (2024). Modeling and Simulation of Zn Heavy Metal Removal from Wastewater in Hollow Fiber Membrane Contactor. *Iranian Chemical Engineering Journal*, 22(130), 105-117, [In Persian].



مدل‌سازی و شبیه‌سازی حذف فلز سنگین روی از پساب آبی در تماس‌دهنده غشایی فیبر توخالی

برهان پورطالبی^۱، سید مجید عبدلی^{۲*}، علی اکبری^۲

۱- کارشناسی ارشد مهندسی شیمی، دانشگاه صنعتی سهند

۲- استادیار مهندسی شیمی، دانشگاه صنعتی سهند

پیام نگار: abdoli@sut.ac.ir

چکیده

در این مطالعه، شبیه‌سازی استخراج مایع-مایع روی با استفاده از تری فلئورو استیل استون به‌عنوان حلال در تماس‌دهنده غشایی فیبر توخالی با استفاده از دینامیک سیالات محاسباتی انجام شد. معادلات موازنه جرم و مومنتوم (ناویر-استوکس) برای بیان انتقال املاح روی به‌وسیله تماس‌دهنده غشایی استفاده شدند. پس از اعمال شرایط، معادلات حاکم با استفاده از روش المان محدود شبیه‌سازی شدند. پس از اعتبارسنجی نتایج، شبیه‌سازی برای مطالعه توزیع غلظت روی به‌صورت دوبعدی و سه‌بعدی و همچنین بررسی اثر مؤلفه‌های مختلف مانند ضریب توزیع و شدت جریان بر بازده استخراج انجام شد. نتایج نشان داد که با افزایش ضریب توزیع از ۱ به ۱۰، میزان استخراج یک‌بار گذر از ۱۰ به ۱۰۰ درصد افزایش پیدا کرد. همچنین راندمان استخراج در جریان ناهم‌سوی لوله و پوسته نسبت به جریان هم‌سو ۹ درصد بیشتر است. علاوه بر این، با بررسی نتایج می‌توان به این نتیجه دست یافت که دینامیک سیالات محاسباتی می‌تواند به‌عنوان یک ابزار مؤثر برای توسعه فرایندهای استخراج مبتنی بر غشا، استفاده شود.

تاریخ دریافت: ۱۴۰۱/۰۷/۲۸

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۱/۱۰/۱۰

شماره صفحات: ۱۰۵ تا ۱۱۷

کلیدواژه‌ها:

مدل‌سازی،

حذف فلز سنگین،

استخراج با حلال،

تماس‌دهنده غشایی فیبر توخالی

* تبریز، دانشگاه صنعتی سهند، گروه مهندسی شیمی

استناد به مقاله:

پورطالبی، برهان، عبدلی، سید مجید، و اکبری، علی. (۱۴۰۲). مدل‌سازی و شبیه‌سازی حذف فلز سنگین روی از پساب آبی در تماس‌دهنده غشایی فیبر توخالی، نشریه مهندسی شیمی ایران، ۲۲(۱۳۰): ۱۱۷-۱۰۵.

امروزه جامعه جهانی با مشکلات زیادی روبه‌روست که سلامت انسان را به خطر می‌اندازد و اثرات منفی بر محیط‌زیست دارد. عوامل بسیاری آلودگی ایجاد می‌کنند که مهم‌ترین آن‌ها، فعالیت انسان‌هاست. به دلیل وجود منابع آب محدود و کمبود این ماده حیاتی به‌ویژه در مناطق خشک و هم‌چنین وجود مواد سمی در بعضی آب‌ها باید از این مایع ارزشمند به‌صورت بهینه استفاده شود. با توجه به نیاز اساسی انسان در زندگی و صنعت به آب، تلاش برای تصفیه و استفاده مجدد از آب روزبه‌روز افزایش می‌یابد. برحسب وجود آلاینده‌های مختلف در آب و نیاز به استفاده در بخش‌های متفاوت با حد استاندارد مشخص، روش‌های مختلفی برای تصفیه آب وجود دارد [۱].

آلاینده‌ها، اعم از آلی و غیرآلی، به محیط‌زیست آسیب می‌رسانند. دنیای کنونی بیشتر با خطر یون‌های فلزهای سنگین روبروست؛ زیرا ماهیت آن‌ها بسیار سمی و سرطان‌زا است. انتشار فلزهای سمی در جریان آب یک نگرانی جدی است که ممکن است بر کیفیت تأمین آب تأثیر بگذارد [۲]. فلزهای سنگین به‌عنوان عناصری توصیف می‌شوند که وزن اتمی آن‌ها بین ۶۳/۵ و ۲۰۰/۶ و چگالی آن‌ها بیشتر از ۵ گرم در سانتی‌مترمکعب است. برخی از فلزهای سنگین مانند مس (Cu)، روی (Zn) که پایه‌های اساسی فعالیت‌های بدن برای سلامتی انسان دارند و هم‌چنین سایر فلزهای سنگین مانند آرسنیک (As)، کادمیم (Cd) سمی هستند، حتی در مقادیر خیلی کم به دلیل غیرقابل تجزیه بودن می‌توانند در سامانه‌های اصلی بدن انسان تجمع زیستی پیدا کنند [۳]. با این حال، قرار گرفتن طولانی‌مدت در برابر فلزهای سنگین می‌تواند باعث تجمع سموم در بدن و منجر به از کار افتادن سامانه‌های بدن و در نهایت مرگ شود؛ بنابراین، سازمان بهداشت جهانی حداکثر سطح آلودگی^۱ را تعیین کرده تا اطمینان حاصل شود که مقدار فلزهای سنگین در یک منبع آب صفر یا فقط در حد آستانه مجاز است. بنابراین هرگونه وجود بیش از حد مجاز فلزهای سنگین برای انسان خطرناک است [۴].

استفاده از تماس‌دهنده‌های غشایی^۲ یک راه جدید برای انجام فرایندهای جداسازی مانند استخراج مایع-مایع، است [۵]. تماس‌دهنده غشایی وسیله‌ای است که در آن جداسازی ترکیبات

به دلیل نیروی محرکه خاصی از یک فاز به فاز دیگر از راه غشا انجام می‌شود. این مدول، انتقال جرم را بدون پراکندگی از یک فاز به فاز دیگر برای سامانه‌های گاز-مایع یا مایع-مایع انجام می‌دهد [۶]. ویژگی مشترک این فرایندها، این است که عملکرد این جداسازی به‌وسیله ضریب توزیع یک جزء در دو فاز تعیین می‌شود. پیکربندی این تماس‌دهنده‌ها شبیه مدول حرارتی پوسته و لوله است که در آن الیاف توخالی ریزحفره در داخل یک پوسته نصب شده‌اند [۷]. تماس‌دهنده غشایی به‌عنوان دستگاه‌های استخراج مورد توجه زیادی قرار گرفته است. در این تماس‌دهنده، غشا به‌عنوان یک مانع فیزیکی بین دو فاز یعنی خوراک و حلال عمل می‌کند و سطح مشترک بین خوراک و حلال را به وجود می‌آورد [۸]. از برتری‌های این تماس‌دهنده‌ها می‌توان به طراحی فرایند ساده، نسبت سطح به حجم بالا و نداشتن مشکل طغیان اشاره کرد. بنا بر این، استخراج یا به عبارت بهتر جداسازی فلزهای سنگین را می‌توان به‌وسیله تماس‌دهنده‌های غشایی انجام داد [۹].

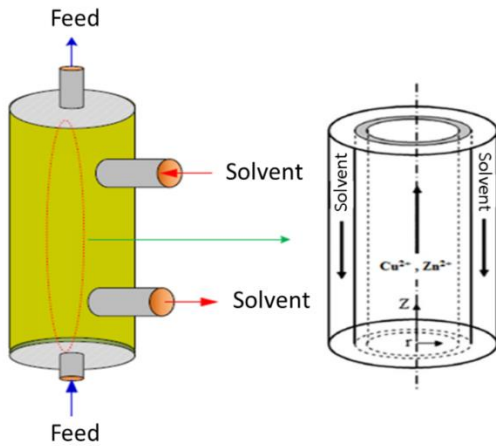
با توسعه حلال‌های جدید، یک مدل ریاضی عمومی برای پیش‌بینی عملکرد استخراج تماس‌دهنده‌های غشایی در شرایط عملیاتی گسترده مورد نیاز است. چنین مدلی را می‌توان با ایجاد تعادل جرم و حرکت در سراسر تماس‌دهنده غشا در نظر گرفت. این تعادل‌ها معادلات دیفرانسیل جزئی^۳ را به‌وجود می‌آورند که حل آن دشوار و پرزحمت است. دینامیک سیالات محاسباتی^۴ می‌تواند به‌عنوان یک ابزار سریع و مؤثر برای حل معادلات دیفرانسیل جزئی‌های پیچیده استفاده شود [۱۰]. دقت شبیه‌سازی دینامیک سیالات محاسباتی به‌طور گسترده در زمینه‌های تحقیقاتی مختلف آزمایش شده است. با یک مدل دینامیک سیالات محاسباتی معتبر، عملکرد فرایند را می‌توان به‌آسانی و با دقتی بالا، تحت طیف وسیعی از شرایط و در یک بازه زمانی مطالعه کرد. در مقایسه با راه‌اندازی آزمایشی پرهزینه، دینامیک سیالات محاسباتی می‌تواند بینش عمیقی از فرایندها در مقیاس صنعتی و درک روشنی از پدیده‌های در حال وقوع ارائه دهد. علاوه بر آن، این ابزار قدرتمند منجر به بررسی میکروسکوپی فرایند و مازول می‌شود که طراحی کارآمد فرایند را در پی دارد [۱۱].

مطالعات گسترده‌ای در زمینه مدل‌سازی و شبیه‌سازی سامانه

3. Partial Differential Equations
4. Computational Fluid Dynamics

¹ Maximum Contamination Levels
² Hollow Fiber Membrane Contactor

غشا نفوذ می‌کند و به طرف پوسته منتقل می‌شود؛ بنابراین، نیروی محرکه در این فرایند اختلاف غلظت املاح است. شکل (۱) طرحواره یک تماس‌دهنده غشایی لوله‌ای را برای فرایند استخراج نشان می‌دهد [۱۴].



شکل ۱. طرحواره تماس‌دهنده غشایی لوله‌ای برای استخراج روی.

Figure 1. Schematic of tubular membrane contactor for zinc extraction.

الیاف تماس‌دهنده به‌طور منظم به‌صورت محوری در پوسته مدول تماس‌دهنده غشایی قرار گرفته‌اند. این پیکربندی اولیه که به‌عنوان «سلول جریان» نامیده می‌شود، شبیه یک لوله دایره‌ای متحدالمرکز است که ضخامت لوله داخلی نشان‌دهنده ضخامت غشای متخلخل است. مدول مجموعه‌ای از «لوله‌های جریان» یکسان به‌موازات یکدیگر است که رفتار مدل یک «سلول جریان» به کل تماس‌دهنده تعمیم داده می‌شود. شکل (۲) یک سلول جریان واحد از یک مدول فیبر توخالی را نشان می‌دهد. این سلول جریان به سه قسمت لوله، غشا و قسمت پوسته تقسیم می‌شود. نیمی از سلول جریان به دلیل هندسه متقارن مدل شده‌است. خوراک آبی حاوی یون روی از پایین با $z = 0$ و TFA از بالا در $z = L$ به‌صورت همسو یا ناهمسو می‌تواند وارد تماس‌دهنده شود [۱۷].

۲-۱ هندسه دو بعدی

برای تسهیل در شبیه‌سازی فرایند، سامانه به‌صورت دوبعدی متقارن در نظر گرفته می‌شود. در حالت دوبعدی متقارن، سه مستطیل با

تماس‌دهنده غشایی انجام شده است. مرجانی و شیرازیان [۱۱]، شبیه‌سازی استخراج فلز سنگین مس (II) را در تماس‌دهنده‌های غشایی با استفاده از دینامیک سیالات محاسباتی بررسی و یک روی کرد جدید مبتنی بر انتقال حرکت و جرم برای مدلسازی تصفیه پساب ایجاد کردند. هم‌چنین محمد و همکاران [۷] گزارش دادند که با ترکیب معادلات مومنوم و انتقال جرم و حل هم‌زمان آنان با روی کرد دینامیک سیالات محاسباتی برای حذف مس (II) به تطابق خوبی با داده‌های تجربی رسیده‌اند. آنان در این مطالعه برای اعتبارسنجی شبیه‌سازی از روش‌های یک‌بار گذر و عملی برای اثبات داده‌های شبیه‌سازی استفاده کردند.

با این‌که تحقیقات زیادی در زمینه مدلسازی و شبیه‌سازی تماس‌دهنده‌های فیبر توخالی انجام گرفته، در این مقاله سعی بر این است که مدلسازی و شبیه‌سازی حذف و استخراج فلز سنگین روی با استفاده از دینامیک سیالات محاسباتی انجام شود. هم‌چنین، مطالعه فعلی بر برجسته‌کردن مشخصه‌ها و عواملی نظیر ضریب توزیع^۱، مشخصه‌های هندسی غشا و مسیر جریان تمرکز دارد که نقش مهمی در طراحی ماژول و بازده استخراج ایفا می‌کند.

۲-۲ مدلسازی فرایند

روی کرد مدلسازی فرایند حاضر بر مبنای حل معادلات دیفرانسیل شامل جرم و مومنوم فلز سنگین روی در سه قسمت تماس‌دهنده غشایی، یعنی لوله، غشا و پوسته است [۱۱]. از این رو، از ابزار دینامیک سیالات محاسباتی برای پیش‌بینی عملکرد استخراج‌کننده غشایی استفاده می‌شود [۱۲].

فاز خوراک حاوی محلول آبی روی در داخل لوله داخلی جریان دارد، درحالی‌که حلال استخراج‌کننده (TFA^2) در داخل پوسته جریان دارد. حالت غیرترشونده^۳ برای شبیه‌سازی در نظر گرفته شده‌است. فرض بر این است که فاز حاوی حلال استخراج‌کننده به دلیل آب‌گریزی غشا به حفره‌های غشا نفوذ کرده و آن‌ها را خیس می‌کند [۱۰]. یک سطح مشترک در مجاورت حفره‌های غشا به سمت لوله داخلی ایجاد می‌شود که در این سطح مشترک، یک واکنش شیمیایی بین یون فلزی روی و حلال استخراج‌کننده رخ می‌دهد و کمپلکس آلی- فلزی شکل می‌گیرد. این کمپلکس از راه حفره‌های

1. Partition Coefficient
2. Trifluoroacetylacetone
3. Non-Wetted Mode

که در آن HA و MA₂ به ترتیب نشان‌دهنده کمپلکس TFA و TFA-M هستند، درحالی‌که ترکیباتی که علامت بار روی آن‌ها رسم شده، فاز آلی را نشان می‌دهند. K_{ex} ثابت تعادل استخراج است و می‌تواند با رابطه تعادل (۲) براساس قانون عمل جرم ساده نشان داده شود.

$$\frac{C_{eq}^{MA_2}}{C_{eq}^{M^{2+}}} = P = K_{ex} \frac{(C^{HA})^2}{(C^{H^+})^2} \quad (2)$$

در این رابطه C غلظت و P مخفف ضریب توزیع کمپلکس فلز-چنگاله^۲ است که به‌عنوان نسبت غلظت کمپلکس چنگاله در فاز آلی به غلظت فلز در فاز آبی در حالت تعادل تعریف می‌شود.

۳-۲ مدل ریاضی تئوری توسعه تماس‌دهنده غشایی الیاف توخالی

معادله اصلی که انتقال محلول روی را از فاز آبی به فاز آلی توصیف می‌کند، معادله اصلی انتقال جرم است. شکل دیفرانسیل معادله اصلی انتقال جرم برای محلول به‌صورت معادله (۳) نوشته می‌شود [۱۷]:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} + \nabla \cdot (-D_i \nabla C_i + C_i V) = R_i \quad (3)$$

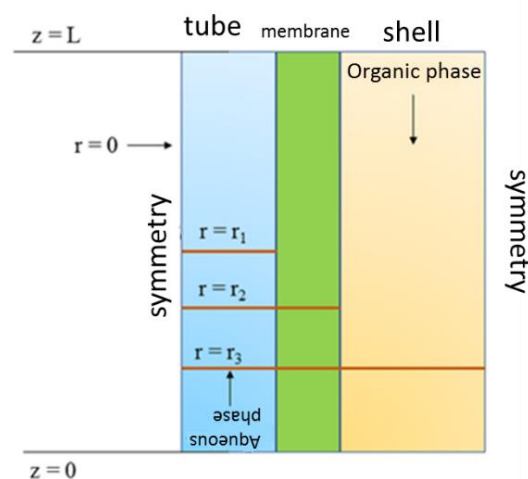
که C_i نشان‌دهنده غلظت محلول (mol/m³)، D_i ضریب نفوذ (m²/s)، V بردار سرعت (m/s) و R_i نشان‌دهنده ترم واکنش (mol/m³.s) است. بردار سرعت را می‌توان به‌صورت تحلیلی بیان کرد یا با ترکیب کردن یک موازنه مومنوم با معادله (۳) به‌دست آورد.

۴-۲ قسمت لوله تماس‌دهنده غشایی الیاف توخالی

معادله اصلی انتقال جرم، معادله (۱) برای همه دامنه‌های تماس‌دهنده غشایی، یعنی لوله، غشا و پوسته، صادق است. انتقال املاح روی در سمت لوله به‌دلیل نفوذ و همرفتی اتفاق می‌افتد. این انتقال با معادله (۴) بیان شده است [۱۸]:

1. Law of Mass Action
2. Chelate

طول یکسان و عرض متفاوت در کنار هم در نظر گرفته می‌شود (شکل (۲)). مشخصات هر ناحیه در جدول (۱) آورده شده است [۱۴].



شکل ۲. جریان سلول تک‌محوری- شعاعی با دامنه مدل و مرزهای آن.

Figure 2. Uniaxial-radial cell flow with model domain and its boundaries.

جدول ۱. مشخصات و اندازه هندسه سامانه [۱۴].

Table 1. Specifications and geometry size of the system [14].

Parameter	Value
Radius tubes side of membrane contactor (r ₁)	1.1 × 10 ⁻⁴ (m)
Radius membrane side of membrane contactor (r ₂)	1.5 × 10 ⁻⁴ (m)
Radius shell side of membrane contactor (r ₃)	2.47 × 10 ⁻⁴ (m)
The length of the membrane contactor module (L)	121.8 × 10 ⁻³ (m)

۲-۲ سینتیک واکنش و تعادل استخراج

TFA مایعی به‌رنگ زرد مایل به قهوه‌ای است که در استخراج فلزها سنگین کاربرد دارد [۱۵]. این حلال به‌دلیل حلالیت مناسب و پیوند با یون‌های فلزی و تشکیل کمپلکس فلز- حلال و حذف آن استفاده می‌شود. واکنش آن با یون‌های فلز در حالت تعادل به‌صورت رابطه (۱) است [۱۶]:



$$D_{i-mem} \left[\frac{\partial^2 C_{i-mem}}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C_{i-mem}}{\partial r} + \frac{\partial^2 C_{i-mem}}{\partial z^2} \right] = 0 \quad (10)$$

که D_{mem} (m^2/s) و C_{mem} (mol/m^3) به ترتیب ضریب نفوذ و غلظت روی در ناحیه غشا هستند. شرایط مرزی (۱۱) تا (۱۴) روی ناحیه غشا اعمال می‌شود:

$$\text{at } r = r_1, C_{i-mem} = C_{i-tube} \times P \quad (11)$$

$$\text{at } r = r_2, C_{i-mem} = C_{i-shell} \quad (12)$$

$$\text{at } z = 0, \frac{\partial C_{i-mem}}{\partial r} = 0 \quad (13)$$

$$\text{at } z = L, \frac{\partial C_{i-mem}}{\partial r} = 0 \quad (14)$$

۲-۶ قسمت پوسته تماس دهنده غشایی الیاف توخالی

انتقال روی در طرف پوسته با نفوذ و همرفتی دقیقاً مانند سمت لوله انجام می‌شود که با معادله (۱۵) بیان می‌شود [۱۷]:

$$D_{i-shell} \left[\frac{\partial^2 C_{i-shell}}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C_{i-shell}}{\partial r} + \frac{\partial^2 C_{i-shell}}{\partial z^2} \right] = u_{z-shell} \frac{\partial C_{i-shell}}{\partial z} \quad (15)$$

که D_{shell} (m^2/s) و C_{shell} (mol/m^3) به ترتیب ضریب نفوذ و غلظت روی در سمت پوسته هستند، درحالی‌که $u_{z-shell}$ سرعت سمت پوسته یا فاز آلی است. شرایط مرزی (۱۶) تا (۱۹) برای انتقال جرم در این ناحیه اعمال می‌شود:

$$\text{at } r = r_3, \frac{\partial C_{i-shell}}{\partial r} = 0 \quad (\text{تقارن}) \quad (16)$$

$$\text{at } r = r_2, C_{i-shell} = C_{i-mem} \quad (17)$$

$$\text{at } z = L, C_{i-shell} = 0 \quad (18)$$

$$D_{i-tube} \left[\frac{\partial^2 C_{i-tube}}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C_{i-tube}}{\partial r} + \frac{\partial^2 C_{i-tube}}{\partial z^2} \right] = u_{z-tube} \frac{\partial C_{i-tube}}{\partial z} \quad (4)$$

عبارت‌های D_{tube} (m^2/s) و C_{tube} (mol/m^3) به ترتیب ضریب نفوذ و غلظت روی محلول در لوله هستند، درحالی‌که u_{z-tube} (m/s) سرعت جریان محوری است. جریان در سمت لوله فرض می‌شود که نیوتنی و کاملاً توسعه‌یافته است، بنا بر این از معادله (۵) برای محاسبه سرعت استفاده می‌شود:

$$u_{z-tube} = 2u \left[1 - \left(\frac{r}{r_1} \right)^2 \right] \quad (5)$$

که u (m/s) نشان‌دهنده سرعت متوسط داخل لوله است. شرایط مرزی (۶) و (۷) برای این ناحیه اعمال شده‌است:

$$\text{at } r = 0, \frac{\partial C_{i-tube}}{\partial r} = 0 \quad (6)$$

$$\text{at } r = r_1, C_{i-tube} = \frac{C_{i-mem}}{P} \quad (7)$$

که P ضریب توزیع است و به‌عنوان نسبت غلظت‌های املاح روی در خوراک آبی به استخراج‌کننده آلی در حالت تعادل تعریف می‌شود. بقیه شرایط مرزی برای ناحیه لوله به‌صورت (۸) و (۹) است:

$$\text{at } z = 0, C_{i-tube} = C_0 \quad (8)$$

C_0 غلظت اولیه یا ورودی خوراک است.

$$\text{at } z = L, D_{i-tube} \nabla C_{i-tube} = 0 \quad (9)$$

۲-۵ قسمت غشای تماس‌دهنده غشایی الیاف توخالی

انتقال جرم نفوذی محوری و شعاعی در داخل حفرات غشا فرض می‌شود. این را می‌توان با معادله ریاضی (۱۰) بیان کرد [۱۸]:

انتقال ممنتوم کاربرد دارد. برای کاهش تعداد مش‌ها و در نتیجه زمان شبیه‌سازی، هندسه مدول غشایی با ضریب ۲۰۰ درجهت محوری کاهش یافته است. با انجام این کار مش‌های بهبود بخشیده شده در نزدیکی مرزهای سامانه به وجود آمدند که نسبت به مش‌های اولیه ریزتر هستند. این امر برای افزایش دقت مدل مهم است؛ زیرا دینامیک سیالات به شرایط بسیار حساس و بر انتقال جرم کلی در نقاط مرزی تأثیرگذار است. همچنین استقلال از مش انجام گرفته و تعداد ۱۳۳۴۰ مش مثلثی برای کل ۳ ناحیه مناسب است. تعداد مش‌ها در سطح مشترک ناحیه بیشتر از بقیه نقاط است.

۳. بحث و نتایج

۳-۱ اعتبارسنجی مدل دینامیک سیالات محاسباتی حالت

یک‌بارگذر

در حالتی که سامانه به صورت یک‌بارگذر عمل می‌کند؛ یعنی محلول آبی و محلول آلی مصرف شده پس از عبور از تماس‌دهنده غشایی بازیابی نشد و در مخزنی جمع آوری شدند، غلظت فلز روی در خروجی تماس‌دهنده غشایی برای ضرایب توزیع مختلف بررسی شد. غلظت اولیه روی در خوراک آبی $3/15 \text{ mol/m}^3$ در نظر گرفته شده و غلظت اولیه حلال TFA در حالات مختلف برای دستیابی به ضرایب‌های توزیع مورد نیاز متغیر است. شبیه‌سازی‌ها در دمای ثابت ۲۹۸ کلوین انجام شد. جدول (۳) مقایسه نتایج شبیه‌سازی با داده‌های تجربی محمد و همکاران [۱۴] برای ضرایب توزیع مختلف را برای حالت یک‌بارگذر نشان می‌دهد.

$$\text{at } z=0, D_{i-\text{shell}} \nabla C_{i-\text{shell}} = 0 \quad (19)$$

شرایط مرزی با موازنه مومنوم معادلات ناویر-استوکس به صورت (۲۰) تا (۲۳) است:

$$\text{at } r=r_3, u_{z-\text{shell}} = 0 \quad (\text{شرط عدم لغزش}) \quad (20)$$

$$\text{at } r=r_2, u_{z-\text{shell}} = 0 \quad (\text{شرط عدم لغزش}) \quad (21)$$

$$\text{at } z=L, u_{z-\text{shell}} = u_0 \quad (\text{مرز ورودی}) \quad (22)$$

$$\text{at } z=0, p = p_{\text{atm}} \quad (\text{مرز خروجی}) \quad (23)$$

بنابراین معادلات موازنه جرم و مومنوم برای ایجاد توزیع غلظت در سمت پوسته ترکیب می‌شوند. مقادیر تخلخل و ضریب پیچش به ترتیب ۰/۴ و ۲/۵ است. در جدول (۲)، مشخصات و مقادیر مشخصه‌های مورد استفاده در این مطالعه آورده شده است.

۲-۷ شبیه‌سازی دینامیک سیالات محاسباتی

برای انجام شبیه‌سازی و به دست آوردن نتایج از روش اجزای محدود^۱ برای حل معادلات دیفرانسیل استفاده شد. تجزیه و تحلیل عناصر محدود با مش بندی تطبیقی و کنترل خطا^۲ با استفاده از حل عددی UMFPACK ترکیب شده است. این حل کننده برای حل مسائل مرزی غیرخطی مناسب است که برای ماژول‌های انتقال جرم و

جدول ۲. مشخصات و مقادیر ضرایب‌های نفوذ و غلظت اولیه [۱۴].

Table 2. Characteristics and values of diffusion coefficient and initial concentration [14].

Parameter	Value
Diffusion coefficient for Zinc in tube side ($D_{\text{Zn-Tube}}$)	$2.52 \times 10^{-9} \text{ (m}^2/\text{s)}$
Diffusion coefficient for Zinc in shell side ($D_{\text{Zn-shell}}$)	$2.24 \times 10^{-10} \text{ (m}^2/\text{s)}$
Diffusion coefficient for Zinc in membrane side ($D_{\text{Zn-Membrane}}$)	$D_{\text{Zn-shell}} \times (\frac{\epsilon}{\tau})$
Initial concentration of Zinc	$3.15 \text{ (mol/m}^3)$

1. Finite Element Method

2. Adaptation and Error Estimation

جدول ۳. مقایسه نتایج شبیه‌سازی با داده‌های تجربی [۴۶] برای ضریب‌های توزیع مختلف.

Table 3. Comparison of simulation results with experimental data [46] for different partition coefficients.

Partition coefficient	Simulation	Experimental	Standard deviation
P=1	0.93	0.79	9.80
P=2	0.81	0.71	4.49
P=4	0.53	0.48	3.53
P=6	0.28	0.23	3.53

ورودی مدول در مرحله توسعه است، یعنی توزیع سرعت در این ناحیه سهموی نیست؛ اما در شکل (۳-b) توزیع سرعت را در داخل مدول نشان می‌دهد که در آن تقارن در $r = r_3$ در نظر گرفته شده است و از این رو، حد اکثر سرعت را می‌توان در این مرز فرضی مشاهده کرد.

۳-۳ توزیع غلظت در سه بخش سلول جریان

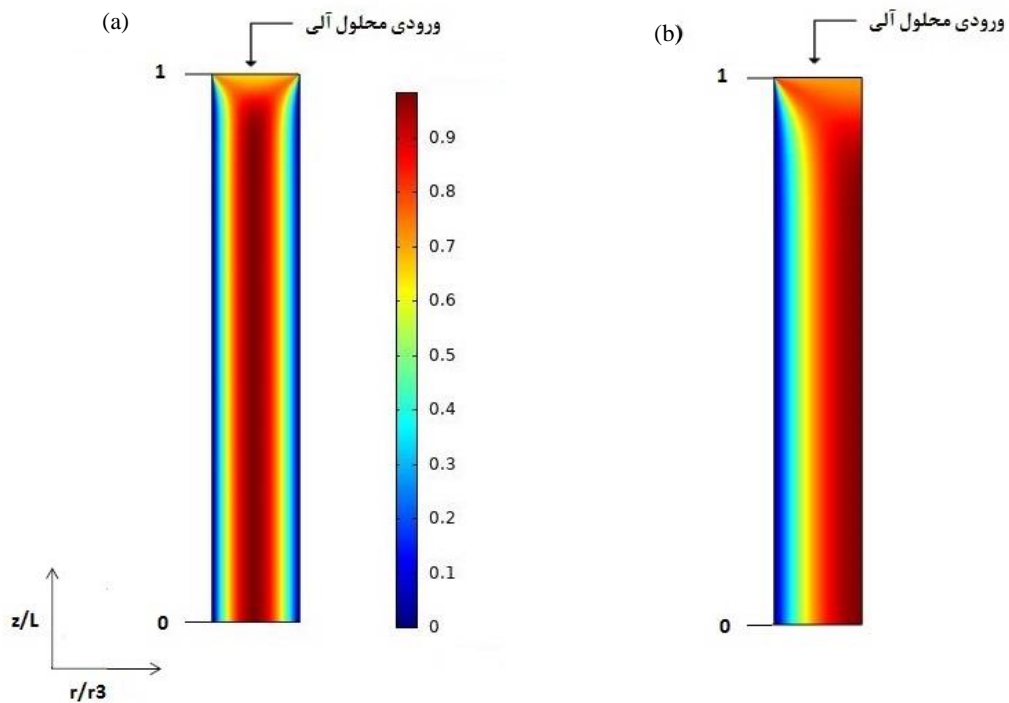
توزیع غلظت املاح روی در سه بخش از مدول در شکل (۴) به صورت دوبعدی در شکل (۵) به صورت سه‌بعدی نشان داده شده است. در این قسمت، محلول آبی روی در سمت لوله یا خوراک است، در حالی که حلال آلی، TFA، در سمت پوسته جاری است. محلول آبی در $z = 0$ با غلظت اولیه روی وارد می‌شود. حلال آلی تازه از طرف مقابل در پوسته جریان دارد. به دلیل آب‌گریز بودن غشا، حلال آلی به داخل حفره‌های غشا نفوذ می‌کند و با فاز آبی در سطح مشترک غشا در تماس است. فشار گذر غشایی^۱، فاز آلی را از عبور به ناحیه لوله بازمی‌دارد و از این رو اجازه نمی‌دهد که در خوراک پراکنده شود. محلول روی سپس با TFA در سطح مشترک واکنش می‌دهد و منجر به تشکیل یک ترکیب پیچیده (کمپلکس) می‌شود. از آنجایی که این واکنش فوری است، بنابراین به جای استفاده از ضریب‌های انتقال جرم، از ساده‌سازی با ضریب توزیع در سطح مشترک لایه مرزی فاز آبی با غشا استفاده می‌شود. کمپلکسی که در نتیجه این واکنش ایجاد می‌شود به دلیل گرادیان غلظت به سمت پوسته منتقل می‌شود و سپس به وسیله فاز آلی ورودی خارج می‌شود. پروفایل غلظت در شکل (۴) نشان می‌دهد که غلظت روی

در جدول (۳) با توجه به انحراف معیار می‌توان مشاهده کرد که تطابق خوبی بین داده‌های تجربی و یافته‌های مدل برای ضریب توزیع بالاتر وجود دارد. نتایج مدل برای مقدار کمتر ضریب توزیع دارای انحراف معیار بالایی است. در حین انجام شبیه‌سازی، فرض بر این بود که ضریب توزیع ثابت می‌ماند. با این حال، با حرکت خوراک و حلال در امتداد تماس‌دهنده غشایی، ضریب توزیع تغییر می‌کند. ضریب توزیع بالاتر به معنای میل ترکیبی بیشتر حلال برای املاح است. حلالیت املاح با استفاده از ضریب توزیع بالاتر کمی تغییر می‌کند، اما در صورت ضریب توزیع کمتر، تأثیر بر حلالیت مهم‌تر است؛ بنابراین با افزایش ضریب توزیع، مقدار حلال مورد استفاده افزایش می‌یابد. به عبارت دیگر در صورت استفاده از ضریب توزیع بالاتر، حلال زیادی مصرف می‌شود که به صرفه نیست. پس باید ضریب توزیعی در نظر گرفت که هم از لحاظ میزان حذف و هم از لحاظ اقتصادی بهینه باشد.

۳-۲ پروفایل سرعت بی‌بعد در قسمت پوسته تماس‌دهنده غشایی

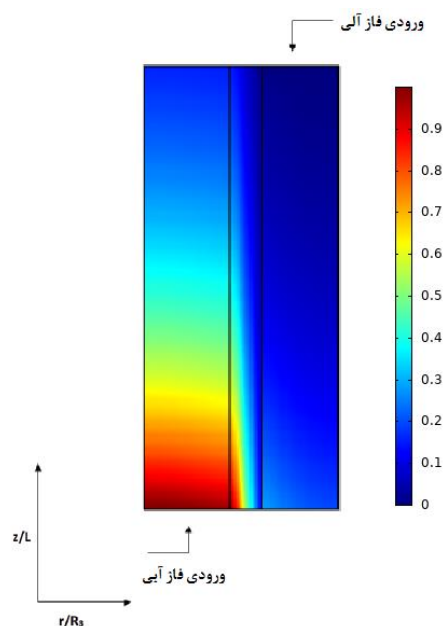
سرعت، نقش مهمی در طراحی و عملکرد تماس‌دهنده غشایی‌ها برای استخراج مایع-مایع ایفا می‌کند. پروفایل‌های سرعت محوری-شعاعی در پوسته مدول در شکل (۳) نشان داده شده است. در این شکل، r_3 یک مرز جامد است و از این رو، هیچ شرایط لغزشی در نظر گرفته نمی‌شود؛ بنابراین در وسط پوسته مقدار سرعت بیشینه است و در نزدیکی دیواره‌ها کمترین مقدار خود را داراست. هم‌چنین به وضوح می‌توان مشاهده کرد که جریان در نزدیکی

1. Transmembrane Pressure



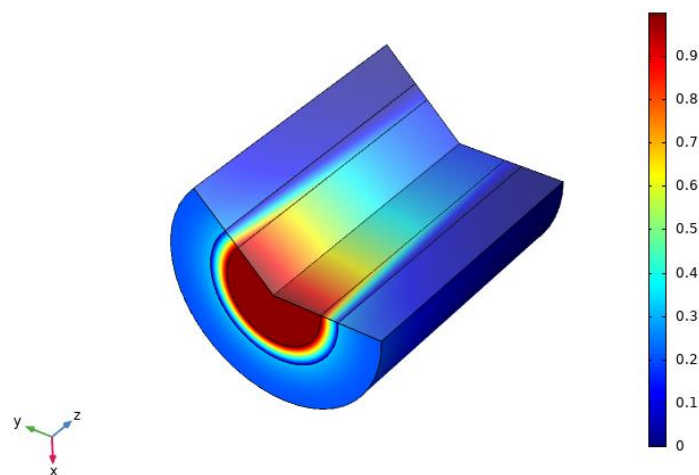
شکل ۳. (a) توزیع دوبعدی سرعت بی‌بعد در تماس‌دهنده غشایی (b) توزیع دوبعدی سرعت بی‌بعد با شرط مرزی r_3 متقارن.

Figure 3. (a) Two-dimensional distribution of dimensionless velocity in the membrane contactor (b) Two-dimensional distribution of dimensionless velocity with symmetric r_3 boundary condition.



شکل ۴. توزیع غلظت بی‌بعد دوبعدی یک سلول جریان برای روی.

Figure 4. Two-dimensional dimensionless concentration distribution of a flow cell for zinc.



شکل ۵. توزیع غلظت بی‌بعد سه‌بعدی یک سلول جریان برای روی.

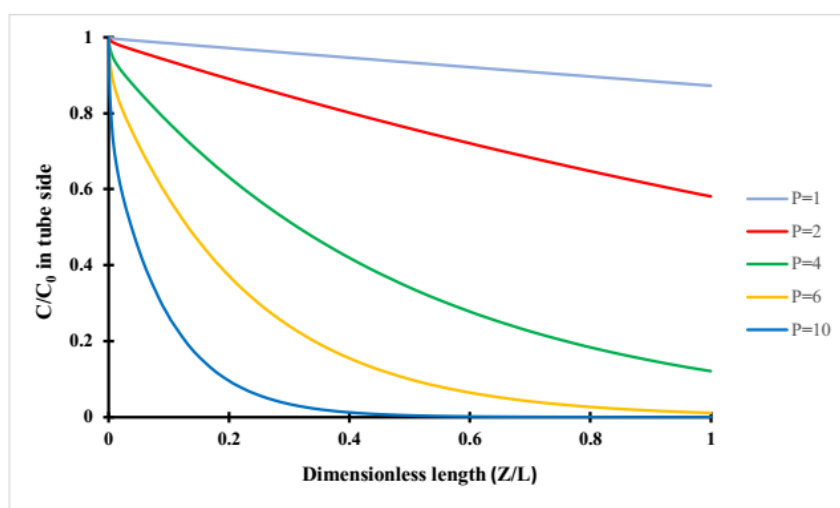
Figure 5. Three-dimensional dimensionless concentration distribution of a flow cell for zinc.

مشخصه‌هایی مانند ماهیت استخراج‌کننده، غلظت خوراک، مقدار pH و دما وابسته است. برای بررسی اثر آن بر استخراج با استفاده از مدل حاضر، شبیه‌سازی برای مقادیر دلخواه انتخاب‌شده، انجام شد. شکل (۶) نتایج روی را نشان می‌دهد. از شکل (۶) می‌توان مشاهده کرد که بازده استخراج با افزایش ضریب توزیع، افزایش می‌یابد. هم‌چنین می‌توان مشاهده کرد که بازده استخراج در مقادیر کمتر با سرعت بسیار بیشتری افزایش می‌یابد. درحالی‌که در مقادیر بالاتر ضریب توزیع، تأثیر آن بر بازده استخراج چشم‌گیر نیست.

به تدریج کاهش می‌یابد؛ زیرا محلول آبی در امتداد تماس‌دهنده غشایی به سمت جلو جریان می‌یابد. از سوی دیگر، غلظت املاح روی در سمت پوسته در حال افزایش است. این به دلیل انتقال مداوم یک املاح از خوراک آبی به حلال آلی است.

۳-۴ تأثیر ضریب توزیع بر راندمان استخراج

ضریب توزیع یکی از مهم‌ترین مشخصه‌ها در فرایند استخراج مایع-مایع مبتنی بر غشاست. این ضریب نسبت غلظت املاح در فاز آلی به غلظت فاز آبی در حالت تعادل است. این ضریب به



شکل ۶. تأثیر ضریب توزیع بر راندمان استخراج فلز روی در طول تماس‌دهنده غشایی.

Figure 6. The effect of partition coefficient on the extraction efficiency of zinc metal along the length of the membrane contactor.

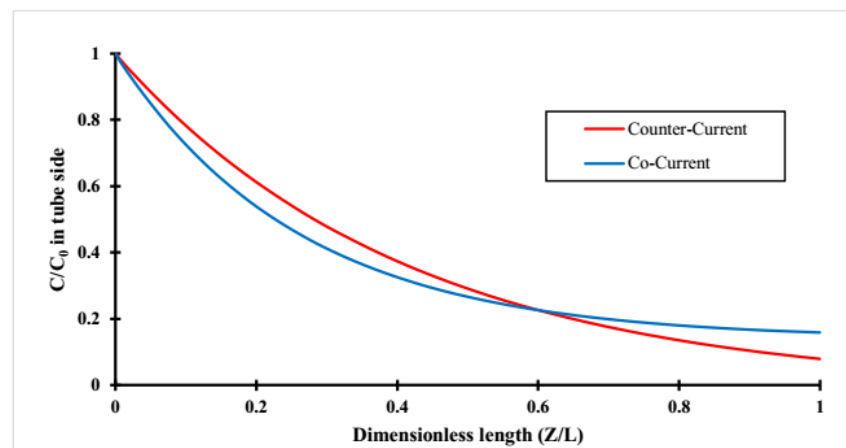
برابر با یک انجام شد. غلظت روی در ورودی و خروجی مدول تماس‌دهنده غشایی در نرخ‌های جریان مختلف حساب شد. راندمان استخراج برای مقادیر مختلف دبی فازهای آبی و آلی حساب شد. سرعت جریان یک فاز در یک‌زمان تغییر می‌کرد، درحالی‌که فاز دیگر ثابت نگه‌داشته می‌شد و نتیجه در شکل (۸) نشان داده شده‌است. در این شکل مشاهده می‌شود که راندمان استخراج با افزایش نرخ جریان فاز آبی (خوراک) کاهش می‌یابد. این اتفاق به این دلیل است که زمان تماس یا ماند روی با افزایش سرعت جریان کاهش می‌یابد و در نتیجه انتقال جرم کمتری در سراسر غشا انجام می‌شود. باین‌حال، افزایش نرخ جریان آلی در سمت پوسته اثر معکوس بر راندمان استخراج روی دارد. راندمان استخراج با افزایش نرخ جریان آلی همان‌طور که مشخص است، افزایش می‌یابد. در واقع افزایش سرعت جریان فاز آلی، TFA (استخراج‌کننده) بیشتری را برای تماس با روی در حفره‌های غشا فراهم می‌کند؛ بنابراین، مولکول‌های روی بیشتری از فاز آبی به فاز آلی استخراج می‌شوند. افزایش سرعت جریان فاز آلی در سمت پوسته، غلظت روی را در سطح مشترک غشا-پوسته کاهش می‌دهد و در نتیجه منجر به گرادیان غلظت بالاتر می‌شود که به نوبه خود باعث افزایش انتقال جرم می‌شود. هم‌چنین می‌توان مشاهده کرد که این اثر تنها در دبی کم قابل توجه است. راندمان استخراج در سرعت‌های بالای جریان فاز آلی ناچیز می‌شود؛ زیرا هیچ املاح دیگری برای حذف در لایه مرزی فاز آلی در سمت پوسته با سرعت جریان بالاتر در دسترس نیست.

۳-۵ پیکربندی جریان همسو در مقابل جریان ناهمسو

در شکل (۷) راندمان استخراج دو پیکربندی جریان مقایسه شده‌است. این شکل نشان می‌دهد که غلظت در خروجی جریان ناهمسو کمتر از جریان همسوست، به این معنی که بازده استخراج در مورد پیکربندی ناهمسو بیشتر است. بازده استخراج بهتر را می‌توان در نزدیکی ورودی ماژول برای جریان همسو مشاهده کرد؛ زیرا گرادیان غلظت در این ناحیه بالاتر است. باین‌حال، با حرکت روبه‌جلوی خوراک، گرادیان غلظت کاهش می‌یابد. از طرف دیگر، گرادیان غلظت در جریان ناهمسو در سراسر تماس‌دهنده غشایی ثابت می‌ماند که در نهایت منجر به استخراج بالاتر می‌شود. به‌عنوان مثال، غلظت بدون بعد روی برای جریان همسو به $0/16$ کاهش می‌یابد، درحالی‌که برای جریان ناهمسو، غلظت در خروجی تماس‌دهنده غشایی به $0/07$ کاهش یافت. از طول بی‌بعد $0/6$ جریان ناهمسو کاهش بیشتری نسبت به جریان همسو دارد و دلیل این اتفاق در تماس بودن جریان خوراک در انتهای لوله با حلال تازه در ورودی جریان فاز آلی است. هم‌چنین بازده استخراج برای جریان همسو 84 درصد و برای جریان ناهمسو 93 درصد است که نشان می‌دهد جریان ناهمسو بازده بهتری دارد.

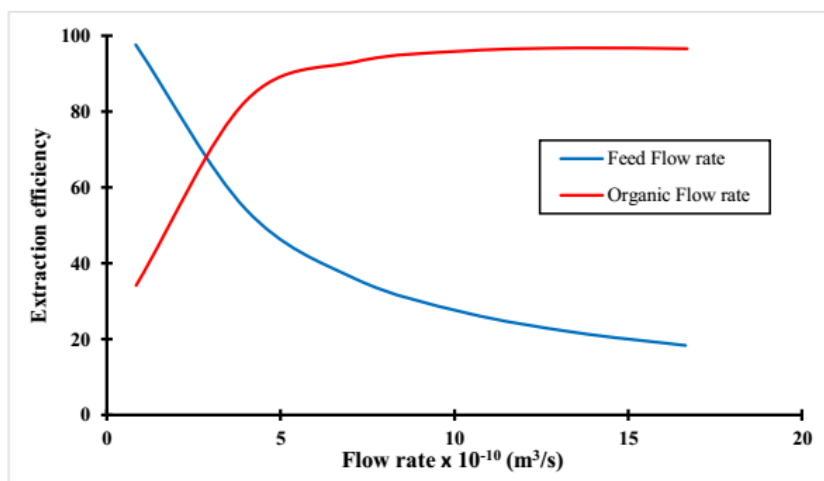
۳-۶ تأثیر شدت جریان بر راندمان حذف

در آخر اثر نرخ جریان بر راندمان استخراج بررسی شد. شبیه‌سازی برای اندازه‌گیری راندمان استخراج روی از فاز آبی در ضریب توزیع



شکل ۷. پروفایل غلظت محوری املاح در سمت لوله برای پیکربندی جریان همسو و ناهمسو برای روی.

Figure 7. Axial concentration profiles of solutes in the tube side for the counter-current and co-current flow configurations for Zn.



شکل ۸. اثرات دبی‌های آبی و آلی بر راندمان استخراج روی.

Figure 8. Effects of aqueous and organic flows on zinc extraction efficiency.

مراجع

- [1] Abdullah, N., Yusof, N., Lau, W. J., Jaafar, J., & Ismail, A. F. (2019). Recent trends of heavy metal removal from water/wastewater by membrane technologies. *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*, 76, 17–38. <https://doi.org/10.1016/j.jiec.2019.03.029>
- [2] Oehmen, A., Valerio, R., Llanos, J., Fradinho, J., Serra, S., Reis, M. A. M., Crespo, J. G., & Velizarov, S. (2011). Arsenic removal from drinking water through a hybrid ion exchange membrane- Coagulation process. *Separation and Purification Technology*, 83(1), 137–143. <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2011.09.027>
- [3] Szlachta, M., Gerda, V., & Chubar, N. (2012). Adsorption of arsenite and selenite using an inorganic ion exchanger based on Fe-Mn hydrous oxide. *Journal of Colloid and Interface Science*, 365(1), 213–221. <https://doi.org/10.1016/j.jcis.2011.09.023>
- [4] Nasir, A. M., Goh, P. S., Abdullah, M. S., Ng, B. C., & Ismail, A. F. (2019). Adsorptive nanocomposite membranes for heavy metal remediation: Recent progresses and challenges. *Chemosphere*, 232, 96–112. <https://doi.org/10.1016/j.chemosphere.2019.05.174>
- [5] Rezakazemi, M. (2018). CFD simulation of seawater purification using direct contact membrane desalination (DCMD) system. *Desalination*, 443, 323–332. <https://doi.org/10.1016/j.desal.2017.12.048>
- [6] Zhang, Z., Chen, F., Rezakazemi, M., Zhang, W., Lu, C., Chang, H., & Quan, X. (2018). Modeling of a CO₂-piperazine-membrane absorption system. *Chemical Engineering Research and Design*, 131, 375–384. <https://doi.org/10.1016/J.CHERD.2017.11.024>

۴. نتیجه‌گیری

در این پژوهش، یک مدل عددی برای استخراج روی با حلال استخراجی TFA با استفاده از تماس‌دهنده غشایی الیاف توخالی توسعه یافت. برای ساده‌سازی، هندسه سامانه به صورت دوبعدی متقارن در نظر گرفته شد که مانند یک سلول جریان است که از سه قسمت لوله، غشا و پوسته تشکیل شده است. شبیه‌سازی دینامیک سیالات محاسباتی با ترکیب کردن معادلات حرکت و جرم در سامانه انجام شد که منجر به اعتبارسنجی حالت پایا شد. مشخصه‌هایی که تأثیر بسیاری در استخراج روی داشتند، بررسی شد. پروفایل سرعت در دو قسمت لوله و پوسته مطالعه شد که بررسی‌ها نشان داد در قسمت لوله سرعت توسعه یافته، اما برای قسمت پوسته بعد از عبور ۲۰ درصد از طول تماس‌دهنده به حالت توسعه یافته دست پیدا کرده است. همچنین پروفایل غلظت، بررسی و برای سه ناحیه لوله، غشا و پوسته ترسیم شد که نشان می‌دهد غلظت در لوله روند کاهشی و در پوسته روند افزایشی دارد. ضریب توزیع به عنوان مهم‌ترین مشخصه برای استخراج روی مطالعه شد. نتایج نشان داد که با افزایش ضریب توزیع میزان استخراج افزایش می‌یابد به ویژه در ضریب توزیع‌های بالای ۶ که روند استخراج به شدت بالاست؛ اما افزایش ضریب توزیع میزان استفاده از حلال مصرفی را نیز افزایش می‌دهد. استفاده از حلال‌ها با ضریب‌های توزیع بالاتر شاید از لحاظ استخراج مناسب باشد؛ اما از لحاظ اقتصادی مناسب نیست و باید ضریب توزیع بهینه انتخاب شود.

- [7] Muhammad, A., Younas, M., & Rezakazemi, M. (2018). CFD simulation of copper(II) extraction with TFA in non-dispersive hollow fiber membrane contactors. *Environmental Science and Pollution Research*, 25(12), 12053–12063. <https://doi.org/10.1007/s11356-018-1282-1>
- [8] Sciubba, L., Gioia, D. Di, Fava, F., & Gostoli, C. (2009). Membrane-based solvent extraction of vanillin in hollow fiber contactors. *DES*, 241(1–3), 357–364. <https://doi.org/10.1016/j.desal.2007.10.104>
- [9] Juang, R., & Huang, H. (2003). *Mechanistic analysis of solvent extraction of heavy metals in membrane contactors*. 213, 125–135.
- [10] Hashemi, F., Rowshanzamir, S., & Rezakazemi, M. (2012). CFD simulation of PEM fuel cell performance: Effect of straight and serpentine flow fields. *Mathematical and Computer Modelling*, 55(3–4), 1540–1557. <https://doi.org/10.1016/j.mcm.2011.10.047>
- [11] Marjani, A., & Shirazian, S. (2011). Simulation of heavy metal extraction in membrane contactors using computational fluid dynamics. *Desalination*, 281(1), 422–428. <https://doi.org/10.1016/j.desal.2011.08.032>
- [12] Rezakazemi, M., Darabi, M., Soroush, E., & Mesbah, M. (2019). CO₂ absorption enhancement by water-based nanofluids of CNT and SiO₂ using hollow-fiber membrane contactor. *Separation and Purification Technology*, 210(September 2018), 920–926. <https://doi.org/10.1016/j.seppur.2018.09.005>
- [13] Juang, R. S., & Huang, H. L. (2002). Modeling of nondispersive extraction of binary Zn(II) and Cu(II) with D2EHPA in hollow fiber devices. *Journal of Membrane Science*, 208(1–2), 31–38. [https://doi.org/10.1016/S0376-7388\(02\)00134-5](https://doi.org/10.1016/S0376-7388(02)00134-5)
- [14] Muhammad, A., Younas, M., Druon-Bocquet, S., Romero, J., & Sanchez-Marcano, J. (2017). Numerical modelling and simulation of membrane-based extraction of copper (II) using hollow fiber contactors. *Desalination and Water Treatment*, 63(March), 113–123. <https://doi.org/10.5004/dwt.2017.20169>
- [15] Steinbach, J. F., & Freiser, H. (1953). Acetylacetone. *Analytical Chemistry*, 25(6), 881–884. <https://doi.org/10.1021/ac60078a009>
- [16] Wai, C. M., & Wang, S. (1997). Supercritical fluid extraction: metals as complexes. *Journal of Chromatography A*, 785(1–2), 369–383. [https://doi.org/10.1016/S0021-9673\(97\)00679-1](https://doi.org/10.1016/S0021-9673(97)00679-1)
- [17] Bird, R. B., Lightfoot, E. N., & Stewart, W. E. (1960). *Notes on Transport Phenomena. Transport Phenomena. By RB Bird, Warren E. Stewart, Edwin N. Lightfoot. A Rewritten and Enlarged Edition of "Notes on Transport Phenomena"*.
- [18] Fasihi, M., Shirazian, S., Marjani, A., & Rezakazemi, M. (2012). Computational fluid dynamics simulation of transport phenomena in ceramic membranes for SO₂ separation. *Mathematical and Computer Modelling*, 56(11–12), 278–286. <https://doi.org/10.1016/j.mcm.2012.01.010>