



مدلسازی ریاضی انتقال جرم در غشاهای نامتقارن متخلخل پلیمری و تعیین پارامترهای مدل

سارا فرهنگي^{۱*}، مجتبی شریعتی نیاسر^۱، محمد سلطانیه^۲،
مهدي پورافشاري چنار^۳

۱ - دانشکده مهندسی شیمی، دانشگاه تهران، تهران، ایران
۲- دانشکده مهندسی شیمی، دانشگاه صنعتی شریف، تهران، ایران
۳- دانشکده مهندسی شیمی، دانشگاه فردوسی مشهد، مشهد، ایران
sarafarhangi@yahoo.com

چکیده

در چند دهه اخیر فرایند غشایی برای جداسازی گازها وارد عرصه صنعت گردیده است و در این میان غشاهای پلیمری با ساختارهای متفاوت نقش عمده‌ای را ایفا می‌کنند. در این تحقیق با توجه به گسترش سریع استفاده از اینگونه غشاهای در زمینه جداسازی گازها و ضرورت پیش‌بینی رفتار این فرآیند و به منظور آشنایی بیشتر با پارامترهای تأثیرگذار بر فرآیند غشایی، مدلسازی ریاضی انتقال جرم گازها در غشاهای نامتقارن پلیمری ارائه گردیده است. در قسمت فشرده غشاء از مدل تحرک مضاعف و در قسمت متخلخل آن از فرآیند چهار جریان ناسن، ویسکوز، لغزشی و جریان سطحی استفاده شده است. مقادیر پارامترهای موجود در مدل براساس مقادیر تجربی برای تراوایی گازها در غشاهای مختلف و با استفاده از روش بهینه‌سازی ارائه شده، تعیین گردید.

واژه های کلیدی: غشاء نامتقارن - مدلسازی - تراوایی - جداسازی گاز

1 - مقدمه

فرآیندهای جداسازی از دیر زمان در صنایع مختلف مورد توجه قرار گرفته‌اند. اصولاً جداسازی براساس وجود تفاوت بین خواص اجزاء مانند جرم، دانسیته، ابعاد، شکل، سرعت نفوذ و یا براساس تفاوت در طبیعت شیمیایی اجزاء، مانند حلالیت صورت می‌گیرد که در یک فرآیند می‌توان از این خصوصیات با هم و یا بطور مجزا استفاده نمود [۱]. جداسازی به روش‌های گوناگونی صورت می‌پذیرد که یکی از مهمترین آن‌ها جداسازی غشایی می‌باشد. اساساً غشاء، لایه نازکی است که می‌تواند اجزاء یک سیال را بطور انتخابی جدا کند. به عبارت دیگر، غشاء فاز سومی است که انتقال جرم بین فازها را کنترل می‌نماید. بنابراین دو وظیفه عمده قابلیت انتخاب و نفوذپذیری بر عهده غشاء می‌باشد. تکنولوژی جداسازی غشایی از مزایایی مانند انرژی مصرفی کمتر و هزینه سرمایه گذاری پائینتر نسبت به روش‌های معمول جداسازی برخوردار است و علاوه بر سادگی فرآیند، به تجهیزات کم حجم‌تری نیاز دارد. بهمین دلیل در فرایندهای مختلفی از جمله جداسازی گازها، بطور گسترده استفاده می‌شود. توماس گراهام اولین کسی بود که در زمینه عبور گاز و بخار در غشاهای پلیمری آزمایشاتی انجام داد [۲ و ۳]. غشاهای براساس ساختار ساختمانی بصورت متقارن یا نامتقارن، متخلخل یا غیر متخلخل و منفرد یا مرکب دسته‌بندی می‌شوند. متناسب با ساختار غشاء و نوع گاز ورودی، مدل‌های مختلفی برای مکانیسم‌های انتقال گاز از آن‌ها وجود دارد که از آن جمله می‌توان به نفوذ ناسن، اثر غربال مولکولی و مکانیسم انحلال - نفوذ اشاره نمود. بطور کلی برای غشاهای متخلخل،

* دانشکده مهندسی شیمی، دانشگاه تهران، ۶۶۹۵۷۷۸۵ - ۰۲۱، sarafarhangi@yahoo.com



مکانیسم شارش تخلخلی (Pore flow model) در نظر گرفته می‌شود. در حالیکه در غشاهای فشرده، مکانیسم انحلال - نفوذ (Solution-diffusion model) مطرح می‌باشد.

غشاهای فشرده (پلیمری): در غشاهای فشرده عمل جداسازی از طریق انحلال مولکول‌های گازی در سطح غشاء و نفوذ به درون ساختار آن انجام می‌گیرد. بنابراین مکانیسم تراوایی معمولاً شامل سه مرحله جذب یا جذب سطحی در ناحیه بالا دستی، نفوذ از درون غشاء و تبخیر یا دفع از ناحیه پایین دستی است که این روش، مکانیسم انحلال - نفوذ نامیده می‌شود. عملکرد غشاهای فشرده به اینکه در دمایی بالاتر یا پایین تر از دمای شیشه‌ای قرار داشته باشند بستگی دارد. این دما باعث تغییر در ساختار پلیمری غشاء از حالت لاستیکی به حالت شیشه‌ای خواهد شد [۵ و ۴]. از آنجا که عمده غشاهای پلیمری مورد استفاده در جداسازی گاز و مورد بحث در این تحقیق از نوع شیشه‌ای می‌باشند لذا قبل از مدلسازی، به تشریح این نوع از غشاهای می‌پردازیم:

غشاهای شیشه‌ای: جذب گازها درون پلیمرهای شیشه‌ای از ایزوترم پیچیده‌تری تبعیت می‌نماید که بوسیله ترکیب قانون هنری و قانون لانگمویر بدست می‌آید. به تئوری که بیان کننده این نوع جذب است تئوری جذب مضاعف گفته می‌شود. در فرمولاسیون این مدل فرضیات زیر در نظر گرفته شده‌اند:

۱- اجزاء تراوش‌پذیر در غشاهای پلیمری شیشه‌ای به دو صورت (هنری و لانگمویر) جذب می‌شوند. ۲- جذب گونه‌های تراوش‌پذیر متحرک از یک رابطه خطی نظیر قانون هنری پیروی می‌نماید. ۳- نوع دوم جذب با گیر افتادن مولکول‌ها در تعداد معینی از جایگاه‌ها، مطابق رابطه غیر خطی لانگمویر ارائه خواهد شد. ۴- در ساختار غشاء همواره یک تعادل موضعی بین گونه‌های متحرک و غیر متحرک در جایگاه‌های مختلف جذبی برقرار است. ۵- اجزاء تراوش‌پذیر که در جایگاه‌های لانگمویر جذب می‌شوند، کاملاً غیر متحرک بوده و در شار گذرنده از غشاء شرکت نمی‌نمایند. ۶- نفوذ، تنها توسط گونه‌های متحرک صورت می‌گیرد و نیرو محرکه آن اختلاف غلظت است. ۷- ضریب نفوذ واقعی، ثابت و مستقل از غلظت یا موقعیت موضعی در درون غشاء خواهد بود.

براساس فرضیات فوق معادلاتی بر مبنای عدم تحرک در جایگاه‌های جذب لانگمویر حاصل شد، اما بعدها پیشنهاد گردید که ممکن است نیاز نباشد که مولکول‌های جذب شده در مکان‌های لانگمویر کاملاً ثابت باشند. مطالعات بعدی نشان دادند که مولکول‌های تراوش‌پذیر در دو مکان مجزا، تحرک‌های متفاوتی دارند و مدل تحرک مضاعف براساس اختلاف در تحرک مولکول‌ها بیان گردید. به این ترتیب رابطه زیر برای تعیین ضریب تراوش پذیری در غشاهای فشرده شیشه‌ای بدست آمد.

$$P = k_D D_H \left[1 + \frac{F K}{(1 + b p_o)(1 + b p_L)} \right] \quad (1)$$

$$F = \frac{D}{D_H} \quad K = \frac{C_s b}{k_D}$$

D_L [$\frac{m^2}{s}$] و D_H [$\frac{m^2}{s}$]، مشخصه ضرایب نفوذ ناشی از گرادیان موضعی غلظت در دو مکان جذب هنری و لانگمویر، C_s ثابت اشباع حفره‌ها و پارامتر b [pa^{-1}] ضریب وابستگی و نسبت ثابت سرعت‌های جذب به دفع گاز در حفره‌ها را نشان می‌دهد. k_D [$\frac{cc(gas)}{cc(polymer).pa}$] ضریب حلالیت گاز و p_L, p_o به ترتیب فشار سمت خوراک و محصول می‌باشند [۴ و ۶].



غشاهای متخلخل: انتقال گاز در غشاهای متخلخل اساساً با انتقال گاز در غشاهای فشرده متفاوت است. در غشاهای متخلخل، گازها به واسطه اختلاف جرم مولکولی یا اندازه از یکدیگر جدا می‌شوند. برای بررسی میزان نفوذ گاز در غشاهای متخلخل فرض می‌شود که غشاء، از یک دسته لوله موئین با شعاع‌های متفاوت تشکیل شده باشد. سپس بر اساس تئوری سینیتیک گازها، شار نفوذ در یکی از لوله‌های موئین محاسبه شده و در نهایت برای تمام لوله‌های موئین بدست می‌آید. برای دستیابی به یک مدل مناسب فرضیات زیر در نظر گرفته می‌شوند:

۱- در یک غشاء متخلخل نامتقارن، لایه سطحی از یک دسته‌ای از لوله‌های موئین تشکیل شده که توزیع اندازه تخلخل‌ها از تابع نرمال زیر تبعیت می‌کند:

$$N(r) = \frac{N_t}{\sqrt{2\pi}s} \exp\left[-0.5\left(\frac{r-\bar{r}}{s}\right)^2\right] \quad (۲)$$

که \bar{r} [m] شعاع متوسط، N_t تعداد کل منافذ که شعاع آن‌ها از صفر تا r_{\max} است و s [m] انحراف استاندارد می‌باشد.

۲- گرادیان فشار در داخل غشاء باعث جابجایی مولکول‌های گاز در منافذ می‌شود و همزمان تعادل جذب در تمام نقاطی که امکان جذب وجود دارد، برقرار می‌شود. بنابراین مولکول‌ها، نه تنها طبق مکانیزم‌های معمول انتقال در توده گاز جابجا می‌شوند بلکه تحت تأثیر نیروهای جاذبه و دافعه بین جنس غشاء و مولکول گاز، جذب سطحی می‌شوند. البته مقدار گاز انتقال یافته با جذب و دفع، در انتقال کلی تأثیر چندانی ندارد. ۳- با اینکه حضور مولکول‌ها در فاز گاز و فاز جذب شده پذیرفته شده است، تبادل سریع بین این دو حالت در طی عبور گاز از غشاء، نادیده گرفته شده و گرادیان فشار در طول غشاء، خطی در نظر گرفته می‌شود. ۴- فرض می‌شود که مولکول‌های جذب شده روی سطح غشاء و دیواره‌های منافذ متحرک هستند و در شار کل شرکت دارند.

انتقال مولکول‌ها در فاز گاز: انتقال گاز در لوله‌های موئین بر اساس تئوری سینیتیک گازها با سه نوع جریان نادنس، جریان لغزشی و جریان ویسکوز صورت می‌گیرد.

میزان انتقال از طریق هر یک از مکانیسم‌های فوق، بسته به اندازه نسبی شعاع منافذ (r [m]) و مسیر آزاد پویش مولکولی گاز (l [m])، تعیین خواهد شد. مسیر آزاد میانگین از رابطه زیر قابل محاسبه خواهد بود:

$$l = \frac{RT}{\sqrt{2\pi}d^2 N \bar{p}} \quad (۳)$$

که \bar{p} [pa] فشار متوسط در طول غشاء، R ثابت عمومی گازها، T [°K] دمای مطلق، d [m] قطر مولکول‌های گاز و N عدد آووگادرو است.

دبی کل گاز (Q_g [kmol/s])، از مجموع سه جریان فوق و انتگرال گیری روی محدوده اندازه منافذ و با جایگزینی توزیع اندازه منافذ از معادله تابع توزیع نرمال بصورت زیر حاصل می‌گردد:

$$Q_g = \frac{N_t}{L} [G_1 I_1 + G_2 I_2 + G_3 I_3] \Delta p \quad (۴)$$

در این رابطه:

$$G_1 = \left[\frac{32p}{9MRT} \right]^{\frac{1}{2}}, \quad G_2 = \frac{p}{MC}, \quad G_3 = \frac{p\bar{p}}{8hRT} \quad (۵)$$



$$I_1 = \frac{1}{\sqrt{2ps}} \int_{r=0}^{0.05l} r^3 \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{r-\bar{r}}{s}\right)^2\right] dr \quad (۶)$$

$$I_2 = \frac{1}{\sqrt{2ps}} \int_{r=0.05l}^{50l} r^3 \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{r-\bar{r}}{s}\right)^2\right] dr \quad (۷)$$

$$I_3 = \frac{1}{\sqrt{2ps}} \int_{r=50l}^{r_{\max}} r^4 \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{r-\bar{r}}{s}\right)^2\right] dr \quad (۸)$$

که L [m] طول منافذ، h [pa.s] ویسکوزیته گاز، M جرم مولکولی و \bar{c} [m/s] سرعت متوسط مولکول‌های گاز است که توسط رابطه زیر تعریف می‌شود:

$$\bar{c} = (8RT/pM)^{\frac{1}{2}} \quad (۹)$$

جریان سطحی: همانطور که در غشاءهای فشرده، گاز در سطح غشاء جذب شده و سپس نفوذ می‌کند، در غشاءهای متخلخل نیز قسمتی از مولکول‌های گاز بر روی دیواره منافذ جذب شده و منتقل می‌شوند. برای محاسبه مقدار جریان سطحی، براساس موازنه دو بعدی نیرو عمل شده و اگر چنانکه از قانون هنری برای ایزوترم جذب استفاده شود، جریان سطحی از رابطه زیر حاصل می‌گردد.

$$Q_s = \frac{RT r_{app}}{2000 t C_R L^2} \frac{I_4}{I_5} \int_{p_L}^{p_g} k_D^2 p dp = A_2 \frac{I_4}{I_5} \bar{p} \Delta p \quad (۱۰)$$

در این رابطه:

$$I_4 = \int_{r=0}^{r_{\max}} N(r) r^2 dr \quad (۱۱)$$

$$I_5 = \int_{r=0}^{r_{\max}} N(r) r dr \quad (۱۲)$$

که Q_s [kmol/s] دبی گاز منتقل شده توسط جذب سطحی، t ضریب پیچش منافذ، r_{app} [kg/m³] دانسیته ظاهری غشاء، C_R [kg/(s.m²)] ضریب مقاومت در مقابل انتقال مولکول‌های جذب شده است و A_2 [kmol/(ms pa²)] از رابطه زیر محاسبه می‌شود:

$$A_2 = \frac{RT r_{app}}{2000 t C_R L^2} k_D^2 \quad (۱۳)$$

دبی کل جریان گاز، Q_{total} از حاصل جمع جریان در فاز گاز Q_g و جریان سطحی Q_s حاصل می‌شود. و اگر ساده ترین حالت تعادل جذب (قانون هنری) برای تعادل بین گاز و غشاء در نظر گرفته شود، رابطه زیر برای تراوایی گاز J [kmol/(m².s.pa)] در غشاء متخلخل حاصل می‌گردد [۷]:

$$J_{total} = \frac{Q_{total}}{S_{total} \Delta p} = A_1 [G_1 I_1 + G_2 I_2 + G_3 I_3] + A_2 \frac{I_4}{I_5} \bar{p} \quad (۱۴)$$

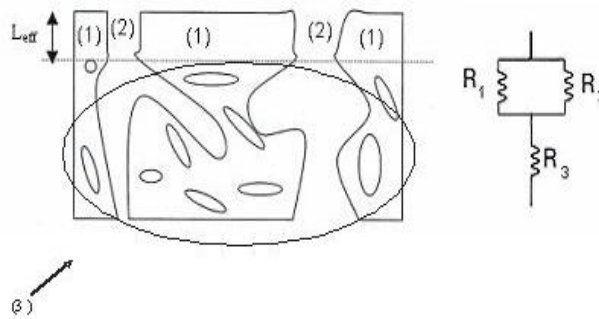


که S_{total} [m²] سطح کل غشاء و A [m⁻³] و A_2 [kmol/(m³ s pa²)] به صورت روابط زیر بیان می‌شود:

$$A_2 = \frac{RT r_{app}}{2000 t C_R L^2 S_{total}} S^2, A_1 = \frac{N_t}{S_{total} L} \quad (15)$$

۲- مدلسازی غشاء نامتقارن متخلخل

غشاءهای نامتقارن مورد بحث در این تحقیق، غشاءهایی با تخلخل سطحی کم می‌باشند و برای این نوع غشاءها سه ناحیه جداگانه در نظر گرفته شده که در شکل (۱) این نواحی و تشابه الکتریکی این نوع از غشاءها مشخص گردیده‌اند. این نواحی به ترتیب عبارتند از: قسمت فشرده ناحیه سطحی (ناحیه شماره ۱) با ضخامت L_{eff} (ضخامت مؤثر جداسازی)، تخلخل ناحیه سطحی (ناحیه شماره ۲) و شبکه کاملاً متخلخل (ناحیه شماره ۳).



شکل ۱ - شمایی از غشاء نامتقارن و مدار مقاومت الکتریکی معادل

با توجه به مدل‌های قبلی ارائه شده برای غشاءهای نامتقارن، فرض می‌شود که ناحیه ۳ مشخص شده در شکل (۱) تخلخل بسیار بالایی داشته و مقاومت آن در مقابل عبور جریان گاز قابل اغماض است ($R_3 \cong 0$). بنابراین جریان گاز هنگام عبور از غشاء نامتقارن متخلخل با دو مقاومت موازی مواجه می‌شود و با توجه به تشابه الکتریکی، جریان کل گاز عبوری از غشاء به صورت زیر بیان می‌شود:

$$I_{total} = I_1 + I_2 \Rightarrow Q_{total} = Q_1 + Q_2 \quad (16)$$

که Q_{total} [kmol/s] دبی کل جریان گاز، Q_1 دبی جریان گاز عبوری از قسمت چگال و Q_2 دبی جریان گاز عبوری از منافذ سطح غشاء می‌باشند. بر اساس مدل عنوان شده برای محیط‌های متخلخل، دبی کل گاز عبوری از منافذ مطابق رابطه زیر محاسبه می‌شود:

$$Q_2 = \frac{N_t}{L} (G_1 I_1 + G_2 I_2 + G_3 I_3) \Delta p + A_2' \frac{I_4}{I_5} \bar{p} \Delta p \quad (17)$$

و با توجه به اینکه عبور گاز از قسمت فشرده ناحیه سطحی از مکانیزم انحلال- نفوذ تبعیت می‌کند پس دبی جریان عبوری برای این حالت بصورت زیر بیان می‌شود:

$$Q_1 = P S_1 \frac{\Delta p}{L_{eff}} \quad (18)$$



که $S_1 [m^2]$ مساحت قسمت فشرده ناحیه سطحی، $\Delta p [pa]$ اختلاف فشار، $I_{eff} [m]$ ضخامت ناحیه سطحی و $p \left[\frac{kmol.m}{m^2.pa.s} \right]$ ضریب تراوش پذیری می‌باشد. از ترکیب روابط (۱۷) و (۱۸) رابطه تراوایی گاز در غشاء نامتقارن متخلخل، بصورت زیر بیان می‌شود:

$$J_{total} = \frac{N_t}{L S_{total}} (G_1 I_1 + G_2 I_2 + G_3 I_3) + \frac{A_2'}{S_{total}} \frac{I_4}{I_5} \bar{p} + \frac{S_1}{S_{total}} \frac{P}{L_{eff}} \quad (19)$$

تخلخل سطحی بر اساس رابطه زیر بیان می‌شود:

$$e = \frac{S_2}{S_{total}} \Rightarrow \frac{S_1}{S_{total}} = 1 - e \quad (20)$$

که $S_2 [m^2]$ سطح منافذ و e تخلخل سطحی می‌باشند.

در غشاهای نامتقارن مناسب برای جداسازی گازها معمولاً $e < 10^{-5}$ می‌باشد [۱۰]. بنابراین:

$$\frac{S_1}{S_{total}} = 1 - e \approx 1 \Rightarrow S_1 \approx S_{total} \quad (21)$$

در این حالت رابطه (۱۹) بصورت زیر بیان می‌شود:

$$J_{total} = A_1 (G_1 I_1 + G_2 I_2 + G_3 I_3) + A_2 \frac{I_4}{I_5} \bar{p} + \frac{P}{L_{eff}} \quad (22)$$

که $A_1 = \left[\frac{1}{m^3} \right]$ ، $A_2 = \left[\frac{kmol}{m^3.s.pa^2} \right]$ و $A_1 = \frac{N_t}{L S_{total}}$ ، $A_2 = \frac{A_2'}{S_{total}}$ می‌باشد.

۳- تعیین پارامترهای مجهول مدل

با توجه به رابطه (۲۲) تراوایی یک گاز خالص تابع غیر خطی از فشار متوسط بوده و برای محاسبه مقدار آن، پارامترهای مجهول s ، \bar{r} ، A_2 ، A_1 باید مشخص شوند. به همین منظور اگر مقادیر تراوایی گاز خالص J_{total} (متغیر وابسته) در فشارهای متوسط \bar{p} (متغیر مستقل) معلوم باشد، با استفاده از "رگرسیون غیر خطی" بهترین منحنی قابل برازش بر نقاط تجربی موجود تعیین شده و در نتیجه مقادیر پارامترهای مجهول بدست می‌آید.

برای انجام رگرسیون غیرخطی، تابعی بصورت مجموع مربعات (Sum of squared residuals) تفاوت بین تراوایی محاسبه شده (J_{calc}) توسط رابطه (۲۲) و تراوایی تجربی (J_{exp})، تعریف می‌کنیم.

$$SS_R = \sum_{i=0}^n (J_{exp i} - J_{calci})^2 \quad (23)$$

که n تعداد داده های تجربی می‌باشد. تابع SS_R را به عنوان تابع هدف در نظر گرفته و با بکارگیری یک روش مناسب بهینه سازی، مقادیری از پارامترهای مجهول (s ، \bar{r} ، A_2 ، A_1) که مقدار تابع هدف را حداقل می‌کنند، محاسبه می‌شود.

روش تعیین پارامترها: از آنجا که روش های بهینه سازی برای انجام محاسبات، به یک نقطه شروع نیاز دارند به همین دلیل مرتبه اعدادی که می‌توان به پارامترهای موجود اختصاص داد، باید تعیین شوند. که در زیر در مورد هر یک از پارامترها بحث می‌شود:



(\bar{r}): با توجه به اینکه مقدار ماکزیمم شعاع حفرات (r_{\max})، مشخص می‌باشد، پس پارامتر شعاع متوسط حفرات (\bar{r})، مقداری در بازه (r_{\max} و ۰) می‌تواند داشته باشد.

(S): براساس تعریف تابع دانسیته احتمال (Probability density function) که بصورت $f(r) = \frac{N(r)}{N_t}$ بیان می‌شود و

اگر احتمال حضور حفرات با شعاع بزرگتر از r_{\max} برابر صفر فرض شود، بنابراین:

$$\int_0^{r_{\max}} f(r) dr = 1 \quad (24)$$

در نتیجه پارامتر انحراف از معیار (S) و \bar{r} مقادیری را قبول می‌کنند که تساوی (۲۴) برقرار گردد.

(A_1 و A_2): با فرض اینکه مقادیر S و \bar{r} معلوم باشد و در رابطه (۲۲) A_1 و A_2 را بعنوان متغیرهای مستقل و J_{total} را بعنوان متغیر وابسته در نظر گرفته و برای یافتن نقطه مینیمم، از این رابطه نسبت به A_1 و A_2 مشتق جزئی گرفته و معادلات بدست آمده را برابر صفر قرار دهیم با حل دستگاه معادلات بدست آمده مقادیر A_1 و A_2 بدست آمده و مرتبه آن‌ها مشخص می‌شود و متناسب با مرتبه بدست آمده برای پارامترهای A_1 و A_2 مقادیری اختیاری بعنوان ابتدا و انتهای بازه مربوطه (LB_{A_1} و UB_{A_1} ، LB_{A_2} ، UB_{A_2}) در نظر گرفته می‌شود. برای تعیین نقطه بهینه تابع موجود، روش بهینه سازی که دامنه عمل آن را بتوان محدود کرد (constrained method) مورد نیاز است. به همین دلیل از روش Quasi Newton و تابع Fmincon نرم افزار Matlab 7 که قابلیت پذیرش قیود خطی و غیر خطی را دارد، استفاده شده است. با روش Quasi Newton برای نقاط شروع مختلف، مینیمم های متفاوتی حاصل می‌شود (Local Minimums). به همین دلیل از الگویی بصورت زیر استفاده گردیده است:

براساس الگوریتم ژنتیک از نواحی مختلف دامنه عمل تابع هدف، جمعیت هایی از نقاط شروع انتخاب شده و برای هر کدام از نقاط موجود در هر جمعیت، با استفاده از روش Quasi Newton نقطه بهینه محاسبه می‌شود و با مقایسه پاسخ‌های بدست آمده، کمترین مقدار بعنوان نقطه بهینه جمعیت مذکور ذخیره شده و بعد از اعمال این روش برای کلیه جمعیت ها، نقطه بهینه اصلی از مقایسه مقادیر ذخیره شده، تعیین می‌شود.

۴- نتایج

با توجه به این که در این تحقیق از ترکیب مدل های شارش تخلخلی و جذب مضاعف استفاده شده است، وجود پارامترهای جذب مضاعف (b ، S و C_S)، ضرایب نفوذ هنری و لانگمویر (D_L و D_H) نیز برای زوج گاز- پلیمر ضروری است تا بتوان ضرایب تراوش پذیری مورد نیاز را محاسبه نمود و در مدل شارش تخلخلی برای محاسبه پویش آزاد میانگین گازها (I) و G_3 ، به قطر مولکولی و ویسکوزیته گازها نیاز است که در جداول (۱) نمونه‌ای از این اطلاعات در مورد گازهای آرگون و نیتروژن ارائه شده است [۹].

برای پیاده سازی مدل ریاضی از مقادیر تجربی بدست آمده مربوط به گاز آرگون و نیتروژن برای غشاءهای پلی سولفون، استفاده گردیده (جدول ۲ و شکل ۲) [۷ و ۸] و نتایج بدست آمده برای پارامترهای مدل در جدول (۳) آورده شده است. برای درک بهتر اهمیت پارامترهای بدست آمده، تراوایی کل به تفکیک نوع جریان در مورد گاز آرگون در شکل (۲) رسم گردیده است. به این ترتیب براساس نتایج ارائه شده، با تعیین پارامترهای مدل می‌توان تراوایی حاصل از جریان‌های مختلف در غشاء مورد نظر را محاسبه نمود و چگونگی عملکرد غشاء در جداسازی گازها را مورد بررسی قرار داد. متناسب با توزیع اندازه منافذ و شرایط عملیاتی، سهم جریان‌های ناسن، لغزشی و ویسکوز در انتقال گاز تغییر کرده و در صورتی هر سه مکانیزم در انتقال نقش دارند که $r_{\max} > 50I$ باشد.



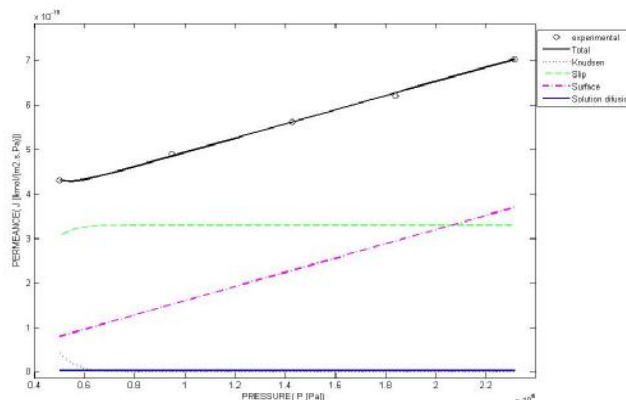
$N_2 (L_{\text{eff}} = 20000 \text{ A}^\circ)$	
$A_1 \times 10^{-16} \left[\frac{1}{m^3} \right]$	
$A_2 \times 10^{10} \left[\frac{\text{kmol}}{m^3 \cdot s \cdot \text{pa}^2} \right]$	
$\bar{r} (\text{ }^\circ \text{ A})$	
$S (\text{ }^\circ \text{ A})$	
$Ar (L_{\text{eff}} = 5000 \text{ A}^\circ)$	
$A_1 \times 10^{-19} \left[\frac{1}{m^3} \right]$	۲/۷۴
$A_2 \times 10^8 \left[\frac{\text{kmol}}{m^3 \cdot s \cdot \text{pa}^2} \right]$	۱/۷۴
$\bar{r} (\text{ }^\circ \text{ A})$	۱۷/۶۱
$S (\text{ }^\circ \text{ A})$	۳/۴۶

× (فشار سمت محصول)

پارامترهای مدل در
آرگون و نیتروژن
پلی سولفون

$$p_L = 1 \times 10^5 \text{ pa}$$

جدول ۳ - مقادیر
مورد تراوایی گاز
در غشاء



شکل ۲- تراوایی حاصل از جریان‌های مختلف گاز آرگون (فشار سمت محصول $p_L = 0 \text{ pa}$ و $L_{\text{eff}} = 5000 \text{ A}$)

مراجع

- [1] Setford, S. J., "A basic introduction to separation science", Rapra Technology LTD, 1995.
- [۲] - مدائنی، س.، "غشاه‌ها و فرآیندهای غشایی"، انتشارات طاق بستان، ۱۳۸۱.
- [3] Chauhan, R. S., Panday, P., "Membrane for gas separation", Prog. Polym. Sci., pp. 853-893, 2001.
- [4] Kesting, R.E., Fritzche, A.K., "Polymeric gas separation membranes", John Wiley & Sons, 1993.
- [5] Seader and Henley, "Separation process principles", John Wiley and Sons, 1998.
- [۶] - حجتی، ع.، "شبیه‌سازی غشایی گازهای چندجزئی"، پایان نامه کارشناسی ارشد مهندسی شیمی، دانشکده مهندسی شیمی، دانشگاه صنعتی شریف، ۱۳۸۱.
- [7] Rangarajan, R., Mazid, M. A., Matsuura, Sourirajan, T. S., "Permeation of pure gases under pressure through asymmetric porous membranes. Membrane characterization and prediction of performance", Ind. Eng. Chem. Process Des.Dev., pp.79-87, 1984.
- [8] Wang, D., Xu, R., Jiang, G., Zhu, B. "Determination of surface dense layer structure parameters of the asymmetric membrane by gas permeation method", Journal of membrane science, pp .97-108, 1990.
- [۹] - مومنی، مهتا، "انتقال چند جزئی در جداسازی گازها توسط غشاه‌ها" پایان نامه کارشناسی ارشد، دانشکده مهندسی شیمی، دانشگاه صنعتی شریف، ۱۳۷۶.
- [10] Wang, D., Li, K., Teo, W.K., "Effects of temperature and pressure on gas perm selection properties in asymmetric membranes", Journal of membrane science, pp. 89-101, 1995.



Mathematical Modeling of Mass Transfer through Porous Asymmetric polymeric Membranes and Determining the Model Parameters

**S. Farhangi^{1*}, M. Shariaty-Niassar¹, M. Soltanieh²,
M. Pourafshari³**

¹- Chemical Engineering Department, Tehran University, Tehran, Iran

²- Chemical Engineering Department, Sharif University, Tehran, Iran

³- Chemical Engineering Department, Fedowsi University, Mashhad, Iran

Abstract

It is about several decades that the membranes application for gas separation has shown a great concern within industries. The polymeric membranes have played the most important role. As the application of such membranes in separation processes are extensively increased and the necessity to predict the behavior of these processes and also in order to be familiar with the effective parameters on membrane processes, a mathematical model of mass transfer through porous asymmetric membrane is presented here. Within the dense section of the membrane, a dual sorption model is applied and for the porous section, a pore flow model consisting of four mechanisms; namely the Knudsen flow, the viscous flow, the slip flow as well as the surface flow is implemented. The experimental values of gases permeances in different membranes and proper optimization method are used to determine the membrane transport parameters.

Keywords: Asymmetric Membrane, Modeling, Permeance, Gas Separation

* Corresponding Author: Tele : (+98) 21-66957785 ; E-mail: sarafarhangi@yahoo.com