

مدلسازی عددی اثر شکل ریز مجرا در فرآیند استخراج مایع-مایع سیستم سه جزئی (آب-اسید استیک-کروزن)

محمد همتیان

چکیده

در فرآیند استخراج مایع-مایع بازده جداسازی اهمیت زیادی دارد. ریز مجراها می توانند نسبت سطح به حجم بزرگ و مسافت انتقال جرم کوتاهی ایجاد کنند. در مقایسه با ستون های مرسوم استخراج مایع-مایع، گرادیان غلظت در ریز مجراها بسیار بزرگ است و ممکن است ضریب انتقال جرم تا ۳۰ برابر افزایش یابد. در این پژوهش به منظور افزایش شدت انتقال جرم در فرآیند استخراج مایع-مایع از ریز مجراها استفاده شده است. سیستم مورد بررسی آب-اسید استیک-کروزن که استخراج اسید استیک مورد بررسی قرار گرفته است. هدف اصلی بررسی اثر طراحی هندسی ریز مجراهای مختلف (صاف و سیسنوسی با شکل های مختلف) بر میزان استخراج است. تعیین میزان و چگونگی این اثرات در فرآیند استخراج مایع-مایع در این پروژه مورد بررسی قرار گرفته است. به منظور شبیه سازی پدیده ی جریان اسلاگ از نرم افزار کامسول استفاده گردیده و جهت صحت سنجی نرم افزار و حلگر مورد استفاده نتایج حاصل از شبیه سازی عددی با نتایج آزمایشات تجربی مورد مقایسه قرار گرفته است. با توجه به بررسی کلی نتایج بدست آمده می توان نتیجه گرفت که تاثیر شکل بر میزان بازده استخراج بسیار زیاد می باشد اما این اثر می تواند بخاطر افزایش سرعت کاهش یابد در واقع افزایش سرعت در جریان آرام باعث کاهش اثر انتقال جرم از طریق پخشی می شود. همچنین افزایش بازده در اثر تغییر شکل میکرو کانال نیز می تواند ناشی از اثر این نوع از کشیدگی قطره ی اسلاگ و وجود مساحت بیشتر میان دو فاز باشد.

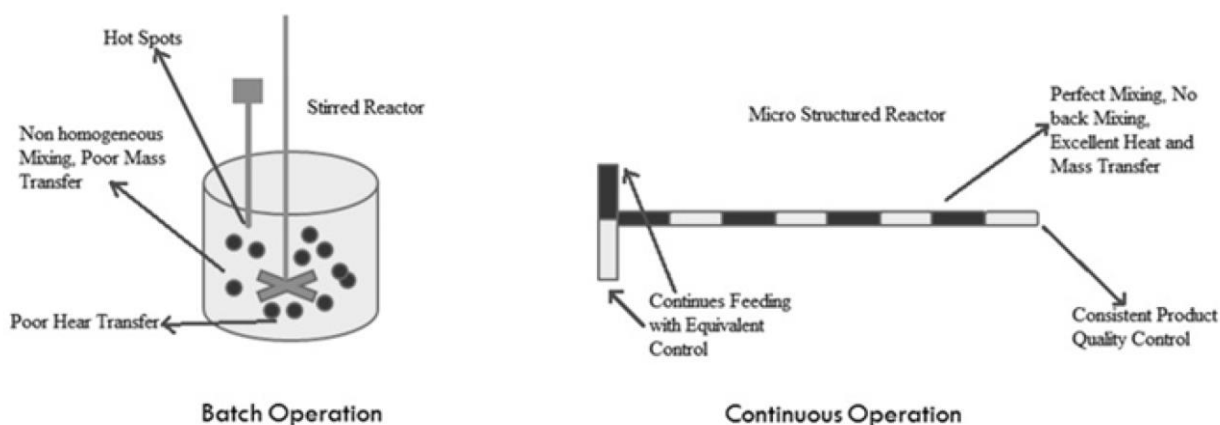
کلید واژه: استخراج مایع-مایع، میکرو کانال، شکل، مدلسازی عددی، جریان اسلاگ

مقدمه

میکروفلوئیدیک دانش به کارگیری و کنترل مقادیر بسیار کم سیال در حجم پیکولیتر تا میکرولیتر بر پایه تنظیم جریان لایه ای سیال در ریز کانال های میکرونی است. این کانال ها با شکل و ابعاد دلخواه ساخته شده و امکان برقراری جریان سیال با دبی و فشار قابل تنظیم را فراهم می کنند. میکروفلوئیدیک به عنوان یک علم میان رشته ای در حوزه های متعددی از جمله فیزیک، شیمی، بیولوژی و بیوتکنولوژی به کار می رود. بویژه در حوزه ی بیولوژی سلولی و مهندسی بافت، سیستم های میکروفلوئیدیک به چالش های موجود در این حوزه در ارتباط با کنترل دقیق فاکتورهای محیطی مانند انواع محرک های شیمیایی و مکانیکی و ارزیابی رفتارهای سلولی در پاسخ به آن ها غلبه کرده اند. به دلیل ابعاد مشخصه کوچکتر در راکتورهای میکروساختار، نسبت سطح به حجم بسیار بالا است به همین دلیل مزیت های زیادی برای دستگاه های میکروساختار نسبت به راکتورهای معمولی وجود دارد. از مزایای موجود می توان به محیط ایمن برای استفاده از مواد شیمیایی سمی یا خطرناک [۱، ۲]، امکان کنترل موثر بر روی فرآیند، مصرف انرژی مقرون به صرفه، سیستم های تجزیه و تحلیل با اندازه کوچک، سنتز مواد شیمیایی [۳] و طیف وسیعی از کاربردها اشاره کرد.

نیاز به روش‌های آنالیز مانند کروماتوگرافی گازی، کروماتوگرافی مایع با فشار بالا و کاپیلاری الکتروفورز در مقادیر بسیار کم نمونه، راه را برای توسعه‌ی حوزه‌ی میکروفلوئیدیک باز کرد. انگیزه دوم نیز سلاح‌های شیمیایی و بیولوژیکی بعد از پایان جنگ سرد بود.

راکتورهای میکروساختار (MSR) برای غلبه بر معایب موجود در راکتورهای معمولی (شکل ۱) مانند محدودیت‌های انتقال حرارت و انتقال جرم که منجر به بازده کم محصول و انتخاب پذیری پایین می‌شود، استفاده می‌شوند. استفاده از راکتوری با حجم کم، خطرات مربوط به جابجایی مواد خطرناک را نیز کاهش می‌دهد. گاهی اوقات می‌توان از راکتورهای میکروساختار به عنوان دستگاه دستی برای آزمایش نمونه نیز استفاده کرد.



شکل ۱- تفاوت‌های راکتور همزن‌دار و راکتور میکروساختار [۳]

در سال‌های اخیر راکتورهای میکروساختار به‌عنوان فناوری نوظهوری قرار گرفته‌اند که می‌توانند جایگزین راکتورهای ناپیوسته در صنایع شیمیایی و دارویی شوند. [۴] کاربردهای میکروراکتورها را می‌توان در واکنش پلیمریزاسیون زنجیره‌ای، استخراج، کریستالیزاسیون نانو ذرات، سنتز آلی، غربالگری بیولوژیکی، بهینه‌سازی فرآیند زیستی، آنالیز سلولی، غربالگری دارو و تشخیص بالینی مشاهده کرد. در زمینه مهندسی شیمی، با معرفی این حوزه تحقیقاتی، پیشرفت چشمگیری در بازده سنتز و انتخاب پذیری مشاهده شده است. [۵] میکروراکتورها را می‌توان بر اساس ساختار و توان عملیاتی خود بر اساس چهار نوع راکتورهای تراشه‌ای، کاپیلاری، میکروساختار و میکرو راکتور صنعتی طبقه‌بندی کرد. [۶]

راکتورهای میکروساختار نوع تراشه‌ای و کاپیلاری معمولاً دارای قطر کانال زیر ۹۰۰ میکرومتر هستند و به همین دلیل این نوع راکتورها نسبت سطح به حجم ($50000 \text{ m}^2/\text{m}^3$) بالاتری نسبت به انواع دیگر میکروراکتورها دارند. مواد استفاده‌شده برای ساخت راکتورهای میکروساختار معمولاً سیلیکون [۷]، شیشه [۸]، PDMS (پلی‌دی‌متیل سیلوکسان) [۹] یا PMMA (پلی‌متیل متاکریلات) [۱۰] می‌باشند. برای این نوع میکروساختارها انواع اتصالات وجود دارد. از اتصال‌های ساده X، T و Y شکل تا تراشه‌های مختلف میکرو راکتور پیچیده استفاده می‌شود. با توجه به خواص مواد موجود در این تراشه‌ها، این نوع میکروساختارها می‌توانند فقط در فشارهای پایین

کار کنند در نتیجه کاربردهای آنها در صنعت محدود می‌شود. از طرفی میکروراکتورهای کاپیلاری بسیار ارزان هستند و برای دستیابی به محدوده فشار حداکثر تا ۴۵۰ bar ، معمولاً با فولاد ضد زنگ یا پلیمرهای با کارایی بالا و مقاوم در برابر مواد شیمیایی ساخته می‌شوند. [۶] در این بخش سعی بر این است که مجموعه‌ای از داده‌های مبتنی بر هیدرودینامیک جریان، انتقال جرم و پارامترهای موثر بر انتقال جرم در جریان اسلاگ-مایع-مایع در میکروکانال‌ها بررسی شوند.

میکروراکتورها یا دستگاه‌های میکروفلوئیدیک شامل جریان سیال درون کانال‌هایی با ابعاد مشخصه کمتر از یک میلی‌متر هستند. این راکتورها به دلیل نسبت سطح به حجم بالایشان، نرخ انتقال جرم بالایی را فراهم می‌کنند و در نتیجه برای انجام واکنش‌هایی با انتقال جرم محدود و سریع مورد استفاده قرار می‌گیرند. به دلیل خصوصیات عالی انتقال حرارت، میکروکانال‌ها برای انجام واکنش‌های گرمازا مورد استفاده قرار می‌گیرند که در نتیجه باعث کنترل دمایی بهتر خواهد شد. در این راکتورها به دلیل این که حجم کمی برای واکنش درگیر می‌شود خطرات مرتبط با سروکار داشتن و حمل و نقل مواد سمی و خطرناک کاهش می‌یابد. برخلاف راکتورهای معمولی با مقیاس بزرگ که چالش‌های زیادی دارند میکروراکتورها به وسیله تکرار ساده میکروکانال‌ها یا واحدهای مجزا تغییر مقیاس داده می‌شوند. بنابراین فناوری میکرو واکنش (واکنش‌های ریزساختار) به عنوان یک فناوری نویدبخش برای انجام فرایندهای شیمیایی، بیوشیمیایی و دارویی در مقیاس کوچک که شامل جریان‌های تک فازی و چندفازی هستند در سال‌های اخیر مطرح شده است.

برای میکروراکتورهایی که دربرگیرنده جریان‌های چندفازی (مثلاً جریان‌های گاز-مایع یا مایع-مایع) هستند، فهم دقیق و همراه با جزئیات اثرات پارامترهای طراحی و عملیاتی روی هیدرودینامیک (علم دینامیک سیالات) اهمیت بسزایی دارد. طی دهه گذشته تلاش‌های تحقیقاتی با اهمیتی در جهت بررسی آزمایشگاهی جریان‌های گاز-مایع درون میکروکانال‌ها به منظور درک اثرات دبی‌های گاز و مایع، اندازه کانال، ساختار توزیع کننده و خواص سیالات روی رژیم‌های جریانی، طول اسلاگ، افت فشار و غیره انجام شده است. اگرچه در مقایسه با سیستم‌های گاز-مایع، سیستم‌های مایع-مایع مورد توجه کمتری قرار گرفته‌اند. با وجود پیشرفت‌های اخیر در زمینه محاسبات حرفه‌ای و کارآمد و روش‌های شبیه‌سازی سطح آزاد جریان، مدل‌سازی عددی جریان دوفازی در میکروکانال‌ها توجهات قابل ملاحظه‌ای را در چند سال اخیر به خود جلب کرده است. در این زمینه چندین مقاله درباره شبیه‌سازی‌های عددی تشکیل حباب یا اسلاگ در میکروکانال‌ها برای جریان‌های گاز-مایع وجود دارد. با این وجود گزارشات کمی از شبیه‌سازی جریان‌های مایع-مایع در میکروکانال‌ها در دست است. مروری مفصل و با جزئیات کامل بر روی بررسی‌های عددی و آزمایشگاهی جریان‌های مایع-مایع در میکروکانال‌ها در بخش‌های پیش رو ارائه شده است. [۲۸-۳۱] بخش‌های سیال مانند حباب‌ها و قطرات در ابزارهای میکروفلوئیدیک به طور کلی با نسبت‌های بزرگ سطح به حجم و فواصل انتقال کوتاه مشخص می‌شوند که انتقال حرارت و جرم را افزایش می‌دهند. از آنجا که جریان‌های دوفازی شامل گاز - مایع و مایع - مایع در یک دستگاه میکرو در نظر گرفته می‌شوند دارای یک سطح مشترک هستند که یک فاز را از فاز دیگر جدا می‌کند. بنابراین، اثرات بین سطحی (کشش بین سطحی و زاویه تماس) شروع به غلبه بر رژیم‌های جریان و تغییرات توپولوژیکی (برای مثال شکست یا ائتلاف) نسبت به عوامل

دیگر مانند نیروهای اینرسی و گرانشی می‌کنند. در میان تمامی رژیم‌های جریان ممکن، جریان‌های اسلاگ که می‌توان آن‌ها را "جریان‌های بخش‌بندی شده" یا "جریان‌های تیلور" نیز نامید به یکی از رژیم‌های مورد مطالعه در مطالعات تجربی و عددی مربوط به الگوهای جریان، میدان جریان در شکاف‌ها، پروفایل‌های اسلاگ، ضخامت لایه نازک و غیره تبدیل شده‌اند. به طور کلی روش‌های عددی برای مطالعه جریان‌های دو فازی به طور گسترده مورد استفاده قرار نگرفته‌اند که عمدتاً به دلیل سه‌بعدی بودن جریان است که منجر به هزینه بالا در توان محاسباتی و زمان محاسبات و محدودیت روش‌های عددی توسعه‌یافته برای جریان‌های دو فازی می‌شود. با این حال، پیشرفت‌های بسیار سریع در روش‌ها و تجهیزات محاسباتی، کاربردهای روش‌های عددی را در شبیه‌سازی‌های میکروفلوئیدیک دو فازی به ویژه در شبیه‌سازی‌های مربوط به فصل مشترک در دو دهه گذشته، ارتقا داده است. [۵-۱]

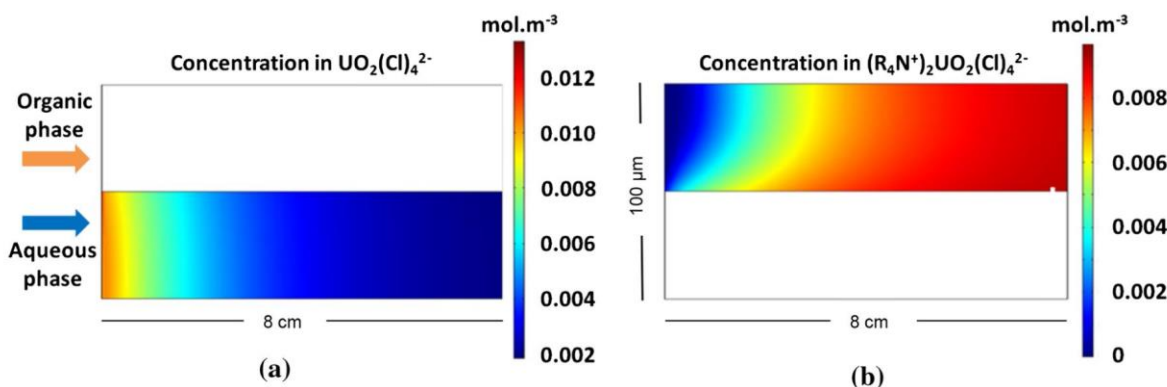
پیشینه تحقیق

در سال ۲۰۱۹ رامجی و همکاران [۳۲]، یک مدل ریاضی برای انتقال جرم در رژیم جریان اسلاگ مایع-مایع در یک میکروکانال ارائه دادند که در آن با استفاده از یک رویکرد لاگرانژی، رفتار یک سلول واحد در کانال در چارچوب یک مرجع متحرک تحلیل می‌شود. این سیستم برای دو مورد متفاوت تجزیه و تحلیل شده است که در مورد اول جریان اسلاگ در تماس مستقیم با دیواره کانال است و در مورد دیگر یک فیلم نازک از سیال پیوسته اطراف جریان اسلاگ وجود دارد. یکی از نوآوری‌های این کار، گسترش فرمول تابع جریان برای تعیین ساختارهای جریان در دامنه‌های چندگانه‌ی به هم پیوسته و ساخته شده از دو فاز مایع در یک جریان تحت فشار است. هدف اصلی این کار درک تأثیر الگوهای جریان (که توسط خواص سیال و شرایط عملیاتی تعیین می‌شود) بر انتقال جرم حل شونده در جریان اسلاگ و فاز پیوسته است. در این راستا، معادله انتقال گونه‌ها با استفاده از میدان سرعت به دست آمده به صورت عددی حل می‌شود. قابلیت اطمینان مدل توسعه‌یافته با آزمایش‌های گزارش شده در مقالات دیگر تأیید شده است. این مطالعه به ما درکی در مورد تأثیر فیلم بر هیدرودینامیک و سهم آن در انتقال جرم می‌دهد. یکی از یافته‌های کلیدی این مطالعه این است که در صورتی که فاز پیوسته ویسکوزیته بالاتری نسبت به فاز اسلاگ داشته باشد، می‌توان سرعت انتقال جرم را افزایش داد.

دستگاه‌های میکروسیال برای صنایع فرآیندی بسیار مهم هستند زیرا این دستگاه‌ها می‌توانند انتقال گرما و جرم را در سیستم‌های واکنش دو فازی تشدید کنند. سیستم‌های واکنش دو فازی، مانند واکنش‌های گاز-مایع و مایع-مایع با محدودیت‌های خاص قبلاً در سیستم‌های میکروسیال توسط چند محقق انجام شده‌اند. با این حال، این مفاهیم هنوز در حال توسعه هستند و درک دقیق هیدرودینامیک فرآیند بسیار حائز اهمیت است. مطالعات هیدرودینامیک ذاتا برای ارائه شرایط واکنش دقیق و شناسایی محدودیت‌های عملکردی بسیار مهم است. در سال ۲۰۱۶ شبیه‌سازی دینامیک سیالات محاسباتی برای بررسی هیدرودینامیک درگیر در میکروکانال تقویت‌شده T شکل توسط چاندرا و همکاران [۳۳] انجام شد. تشکیل اسلاگ، اندازه اسلاگ، شکل اسلاگ و افت فشار در میکروکانال تقویت‌شده با استفاده از روش حجم سیال (VOF) برای سیستم آب-سیکلوهگزان مدل سازی شد.

این مطالعه نشان داد که اختلاط به طرز فوق‌العاده‌ای در داخل اسلاگ و در سطح مشترک در میکروکانال افزایش می‌یابد اما همزمان افت فشار نیز افزایش می‌یابد. با این حال، افزایش انسداد بر تشکیل اسلاگ، طول واحد اسلاگ و افت فشار تأثیر می‌گذارد.

همچنین در سال ۲۰۱۵ هله و همکاران [۳۴] بر روی میکروسیال مایع-مایع برای استخراج رادیونوکلئید مدل سازی انجام دادند. آن‌ها استخراج مایع-مایع با جریان های موجود در یک هندسه مستطیلی در یک تراشه شیشه‌ای شکل را مورد بررسی قرار دادند. پروفیل های سرعت با یک روش عددی برای دو سیستم شیمیایی بدست آمد. همچنین نقش تفاوت ویسکوزیته بین دو فاز بر روی هیدرودینامیک و همچنین تأثیر سطح مقطع هندسی (کانالهای متقارن و نامتقارن) بررسی شده است. سپس مدل سازی عددی انتقال جرم برای یک سیستم شیمیایی با در نظر گرفتن نتایج حاصل از مدل سازی هیدرودینامیکی مورد بررسی قرار گرفت. شکل (۲-۳) مدل عددی پروفیل غلظت در میکروکانال را نشان می‌دهد. در این کار یک واکنش سطحی فرض شده و یک ضریب انتقال کلی تعیین می‌شود که پروفیل غلظت U(VI) را در هر دو فاز آبی و آلی به دست می‌آورد. در نهایت، مقایسه بین نتایج تجربی و نظری برای طول های مختلف کانال، اعتبار مدل انتقال جرم و همچنین تعیین طول کانال برای استخراج بهینه را امکان پذیر کرد.



شکل ۲- مدل عددی پروفیل غلظت در میکروکانال [۳۴]

میکرو راکتورها برای توسعه فرآیندهای مایع-مایع فناوری بسیار خوبی هستند زیرا به دلیل افزایش نسبت سطح به حجم، امکان انتقال جرم را در مقایسه با دستگاه‌های دیگر افزایش می‌دهند. اما از آن جایی که تأثیر جریان آرام منفی می باشد تأثیر آن باید بررسی شود. در سال ۲۰۰۸ رایموندی و همکاران [۲۳] مطالعه انتقال جرم در میکروکانال‌ها با استفاده از شبیه سازی های عددی مستقیم دوبعدی انجام دادند. سیستم‌های جریان اسلاگ مایع-مایع در کانال مربعی با عمق ۵۰-۹۶۰ میکرو متر بررسی شد. محدوده سرعت قطرات بین ۰/۰۰۱۵ تا ۰/۲۵ متر بر ثانیه و نسبت بین عمق کانال و طول قطره بین ۰/۴ و ۱۱/۲ متغیر است. ضرایب انتقال جرم حجمی سمت قطره از محاسبات توابع غلظت بدست آمد و اصلاح این ضرایب به عنوان تابعی از پارامترهای جریان و اندازه کانال مورد بحث قرار گرفت. این مطالعه نشان می دهد که انتقال جرم به شدت تحت تأثیر ساختار جریان در

داخل قطره است. علاوه بر این، نشان می دهد که محصور شدن قطرات به دلیل اندازه کانال منجر به افزایش انتقال جرم در مقایسه با مواردی می شود که قطرات توسط دیوارها محدود نمی شوند.

فرضیات

فیزیک جریان های دوفازی شامل دو بخش می شود. بخش اول شامل معادلات حرکت جریان و بقای جرم و بخش دوم شامل معادلات حاکم بر مزر دو فاز و تقابل کشش سطحی و میزان انحلال دو فاز در یکدیگر است.

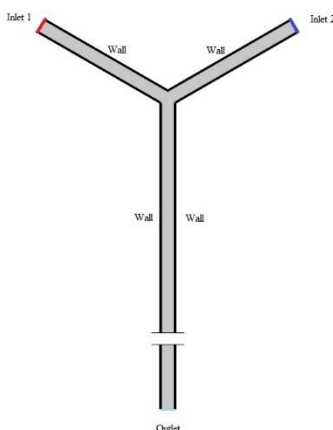
به منظور شبیه سازی این نوع از جریان ها در رژیم جریان آرام و غیر پایا که جریان اسلاگ نمونه ای از آن ها می باشد با ایجاد ارتباط بین حلگرهای Laminar flow و Level set می توان مجموع معادلات حاکم بر جریان را حل کرد بصورتی که معادلات بقای جرم و مومنتوم توسط حلگر Laminar flow حل شده و نتایج آن برای ادامه ی حل به حلگر Level set داده می شود تا با استفاده از معادلات حاکم بر دو سیال مرزها و میزان انحلال پذیری را بدست آورد. رابط Level Set امکان ردیابی اینترفیس را فراهم می کند. برای مثال، امکان ردیابی رابط های سیال- سیال یا سایر رابط های متحرک برای کاربردهای چند فازی به این ماژول ها نیاز دارند. در پژوهش کاشید و همکاران یک میکروراکتور ۷ شکل مورد بررسی قرار گرفته و سیالات مورد استفاده در این پژوهش آب و سیکلوهگزان می باشد. همچنین تغییرات قطر و دبی مورد بررسی قرار گرفته است. سیال های مورد استفاده جهت بررسی جریان اسلاگ با توجه به پژوهش انجام شده آب و سیکلوهگزان می باشد که خواص سیالاتی آن مطابق با جدول ۱ زیر تعریف شده است.

جدول ۱. خواص سیالات

سیال	چگالی ($\frac{Kg}{m^3}$)	ویسکوزته ی دینامیک ($Pa.s$)	دما (K)
آب	۹۹۷	$۸.۹e-۴$	۲۹۳.۱۵
سیکلوهگزان	۷۷۹	$۹.۹۳e-۴$	۲۹۳.۱۵

با توجه به سرعت کم جریان و عدد رینولدز و کوچک بودن قطر کانال جریان آرام فرض گردیده است. برای جریان ناپایا (متغیر با زمان) می توان در معادله ی نویراستوکس از ترم جابجایی صرف نظر کرد (استوک فلو). درتقریب کانال کم عمق میکرو راکتور با دیواره ی خیس و زاویه تماس ۱۳۵ درجه فرض شده است. در زمینه ی هندسه جریان می توان عنوان نمود که جریان در یک میکرو راکتور ۷ شکل مورد بررسی قرار گرفته که زاویه بین دو ورودی ۱۲۰ درجه می باشد و قطر مجراهای ورودی با مجرای خروجی یکسان و معادل یک میلیمتر می باشد و جریان برای سه حالت جریان اسلاگ، جریان قطره ای و جریان بدون شکل مورد بررسی قرار گرفته است.

شرایط مرزی نمونه بشرح ذیل می باشد: از ورودی شماره ی یک سیکلو هگزان و از ورودی شماره ی دو آب وارد می شود. در محلی که دو سیال با هم مخلوط می گردند فرض دیواره ی خیس در نظر گرفته شده است لازم به ذکر است که قطر داخلی کانال نیز برابر با ۱ میلیمتر می باشد.



شکل ۲- میکروکانال در نظر گرفته شده به همراه شرایط مرزی حاکم بر آن

به منظور مقایسه نتایج بدست آمده از شبیه سازی با نتایج ارائه شده توسط کاشید و همکاران مسئله ی مورد نظر در سه حالت مورد بررسی قرار گرفته که در جدول ۲ به نمایش در آمده است.

جدول ۲. مشخصات حالت های جریان در مقاله ی مرجع

حالت	سرعت آب در ورودی (m/s)	سرعت سیکلو هگزان در ورودی (m/s)	قطر انشعاب ورودی آب و سیکلو هگزان (mm)	قطر انشعاب خروجی جریان (mm)	نتیجه ی آزمایش ها
۱	۰.۰۲۸۲۹	۰.۰۲۸۲۹	۱	۱	Slug flow
۲	۰.۰۰۳۵۴	۰.۰۲۸۲۹	۱	۱	Drop flow
۳	۰.۰۲۸۲۹	۰.۰۰۳۵۴	۱	۱	Deformed flow

به منظور بررسی انتقال جرم و همچنین بدست آوردن غلظت در هر نقطه و ضریب انتقال جرم و بازده استخراج می بایست معادلات جدیدی وارد مسئله شود. به همین منظور با اضافه کردن حلگر TCS به شبیه سازی می توان با تقریب بسیار خوبی این موضوع را بررسی نمود.

معادله ی ابتدایی برای بقای جرم یک گونه ی i بصورت زیر می باشد:

$$\rho \frac{\partial \omega_i}{\partial t} + \nabla \cdot j_i + \rho (u \cdot \nabla) \omega_i = R_i \quad \text{معادله ۱}$$

که در این رابطه t زمان، ω_i غلظت جزء i ، ρ چگالی و R_i سورس ترم جنریشن جزء i می باشد.

ضریب انتقال جرم به صورت زیر بدست می آید. در این رابطه a سطح مقطع m^2 C_{sat} غلظت اشباع، C_{in} غلظت ورودی مایع، T زمان ماند مایع و C_{out} غلظت خروجی مایع می باشد.

$$K_L a = \frac{1}{T} \ln \left(\frac{C_{sat} - C_{in}}{C_{sat} - C_{out}} \right) \quad \text{معادله ۲}$$

همچنین زمان ماند نیز از رابطه‌ی زیر بدست می آید:

$$T = \frac{L}{V} \quad \text{معادله ۳}$$

بازده استخراج به صورت زیر بدست می آید.

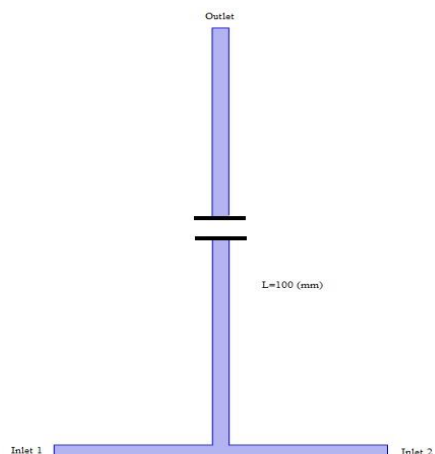
$$E = \frac{C_{A2}^{out} - C_{A2}^{in}}{C_{A2}^* - C_{A2}^{in}} \quad \text{معادله ۴}$$

بررسی نتایج آزمایشگاهی

مسئله‌ی پیش رو در دو هندسه‌ی متفاوت مورد بررسی قرار گرفته و نتایج آنها مورد مقایسه واقع شده است. در حالت اول میکروکانال به صورت تی شکل با قطر ۱۰۰۰ میکرون و با خروجی مستقیم و در حالت دوم میکروکانال با قطر ۱۰۰۰ میکرون با خروجی سینوسی که شرایط مرزی و هندسه‌ی آنها در شکل ۳ به نمایش در آمده است.

۱- هندسه‌ی اول

همانطور که در شکل ۳ نمایش داده شده هندسه‌ی اول یک میکروکانال با قطر ورودی‌های و خروجی ۱ میلی‌متر را نشان می‌دهد که ورودی‌های آن به صورت T به هم متصل شده است. به منظور بررسی تاثیر اثر افزایش دبی بر پارامترهایی نظیر ضریب انتقال جرم و همچنین بازده استخراج، پنج دبی متفاوت همانند جدول ۳ در نظر گرفته شده و نتایج آن به تفصیل آورده شده است.



شکل ۳. هندسه ی شماره یک با قطر ورودی ۱ میلیمتر به طول ۱۰۰ میلیمتر

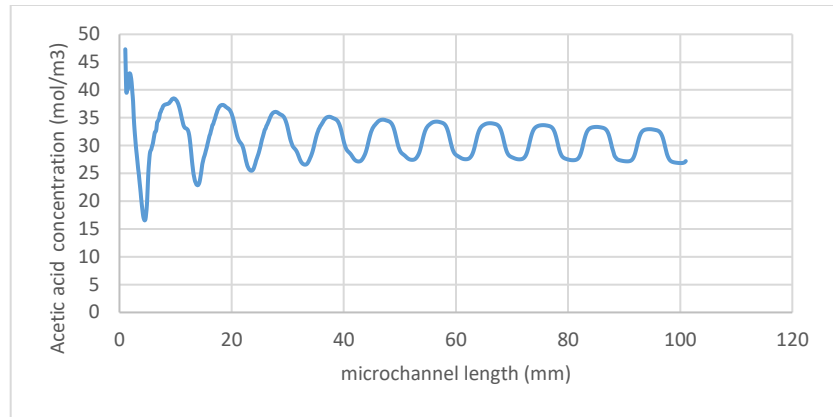
جدول ۳. مشخصات ۵ نمونه شبیه سازی در هندسه ی اول (T شکل)

شماره شبیه سازی	دبی آب و استیک اسید	دبی کروزن	غلظت ورودی استیک اسید	جرم مولی کروزن	جرم مولی استیک اسید	ضریب نفوذ فاز ۱ در ۲	ضریب نفوذ فاز ۲ در ۱
۱	۴۰ m l/s	۴۰ m l/s	۶۵ mol/m ^۳	۰.۳۲۱۴۹۶۴ g/mol	۰.۰۶۰۰۵۲ g/mol	۱.۳e-۹	۱.۱۸e-۹
۲	۸۰ m l/s	۸۰ m l/s					
۳	۱۲۰ m l/s	۱۲۰ m l/s					
۴	۱۶۰ m l/s	۱۶۰ m l/s					
۵	۲۰۰ m l/s	۲۰۰ m l/s					

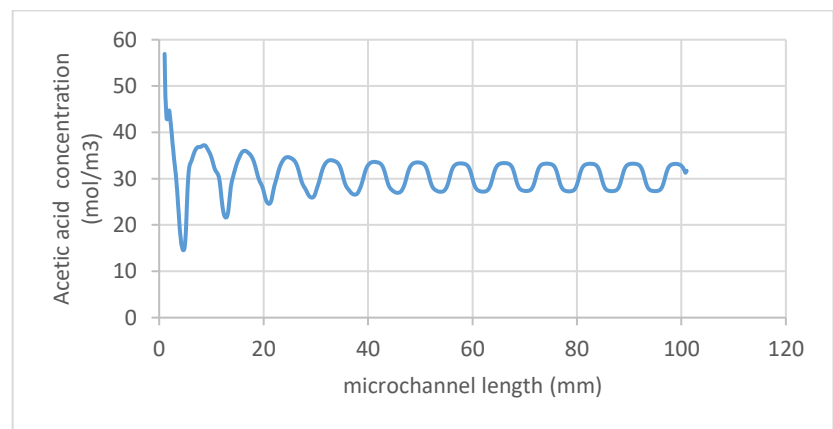
طول خروجی ۱۰۰ میلیمتر در نظر گرفته شده به منظور شبیه سازی بهتر جریان فرض دیواره ی خیس در محل تداخل دو فاز بر روی دیوار در نظر گرفته شده است. از ورودی شماره یک جریان کروزن و از ورودی شماره ۲ محلول آب و استیک اسید وارد می شود.

• نمودار غلظت در راستای محور

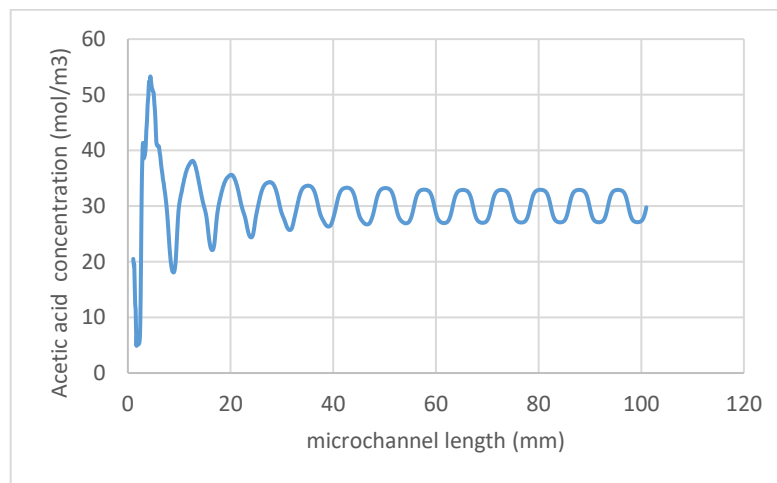
به منظور درک بهتر از نحوه ی انحلال پذیری و استخراج استیک اسید در کروزن تغییرات غلظت در خط مرکز میکروکانال در شکل های ۴ تا ۸ به نمایش درآمده است. همانطور که مشاهده می شود تغییرات غلظت نوسانی می باشد. اما در اثر حرکت جریان به سمت خروجی دامنه ی نوسانات کاهش پیدا می کند که این موضوع بیانگر میل کردن و به توازن رسیدن غلظت استیک اسید در کروزن می باشد. افزایش سرعت تاثیر قابل ملاحظه ای بر روی شکل نمودارها نداشته اما اثر خود را در بازده استخراج نشان می دهد.



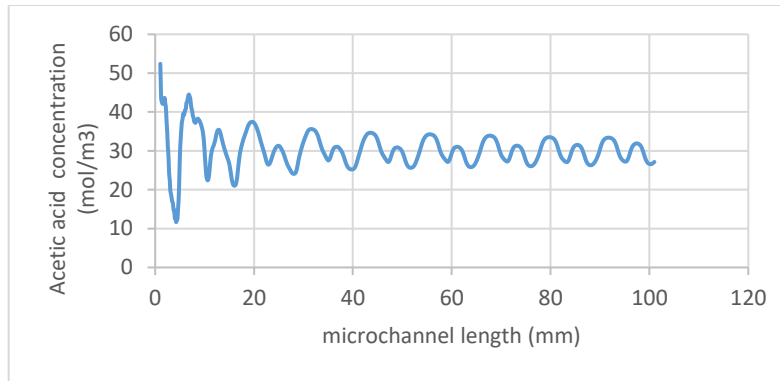
شکل ۴- تغییرات غلظت در خط مرکزی میکروکانال در دبی ۴۰ m l/s



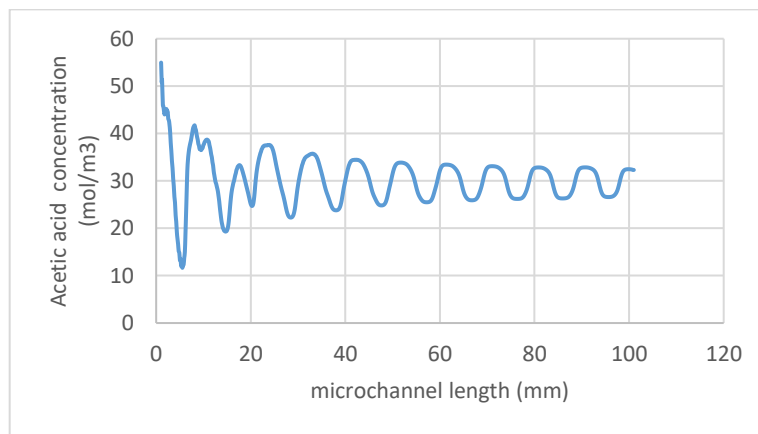
شکل ۵- تغییرات غلظت در خط مرکزی میکروکانال در دبی ۸۰ m l/s



شکل ۶- تغییرات غلظت در خط مرکزی میکروکانال در دبی ۱۲۰ m l/s



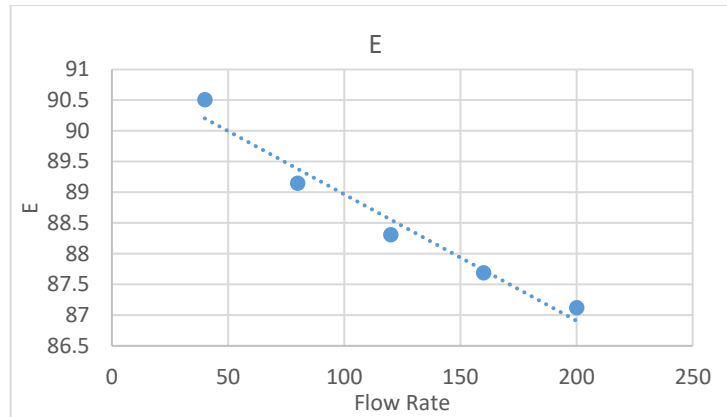
شکل ۷- تغییرات غلظت در خط مرکزی میکروکانل در دبی 160 m l/s



شکل ۸- تغییرات غلظت در خط مرکزی میکروکانل در دبی 200 m l/s

• تغییرات بازده بر حسب افزایش دبی

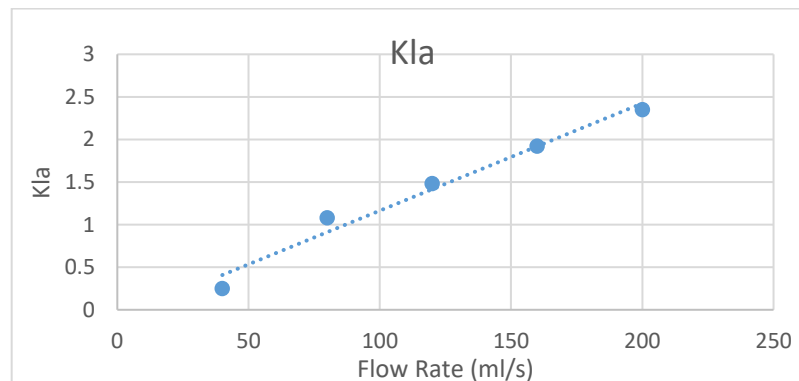
همانطور که در نمودار ۹ قابل مشاهده است افزایش دبی در ورودی هر دو جریان باعث افت بازده استخراج شده است که این موضوع بیانگر اثر ترم نفوذ در اثر اختلاف غلظت در میان دو فاز می باشد به این معنا که با افزایش سرعت در طول یکسان زمان مناسب جهت انتقال جرم کاهش پیدا کرده و در نتیجه بازده کاهش می یابد.



شکل ۹- تغییرات بازده بر حسب افزایش دبی در هندسه ی شماره یک

• تغییرات K_{La} بر حسب افزایش دبی

همانطور که در نمودار ۱۰ قابل مشاهده می‌باشد افزایش دبی و در نتیجه افزایش سرعت باعث افزایش ضریب انتقال جرم گردیده و می‌توان نتیجه گرفت که ضریب انتقال جرم تابعی از سرعت جریان بوده این موضوع بیانگر آن است که افزایش سرعت باعث شدت گرفتن قدرت گردابه‌ها در داخل جریان شده و جذب سطحی میان دوفاز را افزایش می‌دهد.



شکل ۱۰- تغییرات K_{La} در اثر افزایش دبی در هندسه شماره یک

۲- هندسه ی دوم

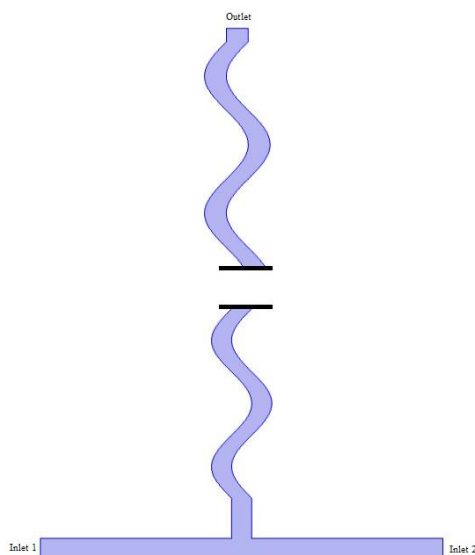
همانطور که در شکل ۱۱ نمایش داده شده هندسه ی دوم یک میکروکانال با قطر ورودی‌های و خروجی ۱ میلی‌متر می‌باشد که ورودی آن به صورت T به هم متصل شده و در ادامه میکروکانال از معادله ی سینوسی پیروی می‌کند. به منظور بررسی اثر افزایش دبی بر پارامترهایی نظیر ضریب انتقال جرم و همچنین بازده استخراج همانند هندسه ی قبلی پنج دبی متفاوت همانند جدول ۴ در نظر گرفته شده و نتایج آن به تفصیل ارائه گردیده است.

به منظور مقایسه ی اثر شکل بر بازده و ضریب انتقال جرم تمامی شرایط این شبیه سازی با شرایط شبیه سازی هندسه اول یکسان می باشد.

جدول ۴. مشخصات مشخصات ۵ نمونه شبیه سازی در هندسه ی دوم (سینوسی شکل)

شماره شبیه سازی	دبی آب و استیک اسید	دبی کروزن	غلظت ورودی استیک اسید	جرم مولی کروزن	جرم مولی استیک اسید	ضریب نفوذ فاز ۱ در ۲	ضریب نفوذ فاز ۲ در ۱
۱	۴۰ m l/s	۴۰ m l/s	۶۵ mol/m ^۳	۰.۳۲۱۴۹۶۴ g/mol	۰.۰۶۰۰۵۲ g/mol	۱.۳e-۹	۱.۱۸e-۹
۲	۸۰ m l/s	۸۰ m l/s					
۳	۱۲۰ m l/s	۱۲۰ m l/s					
۴	۱۶۰ m l/s	۱۶۰ m l/s					
۵	۲۰۰ m l/s	۲۰۰ m l/s					

به منظور شبیه سازی بهتر جریان فرض دیواره ی خیس در محل تداخل دو فاز بر روی دیوار در نظر گرفته شده است. از ورودی شماره یک جریان کروزن و از ورودی شماره ۲ محلول آب و استیک اسید وارد می شود.

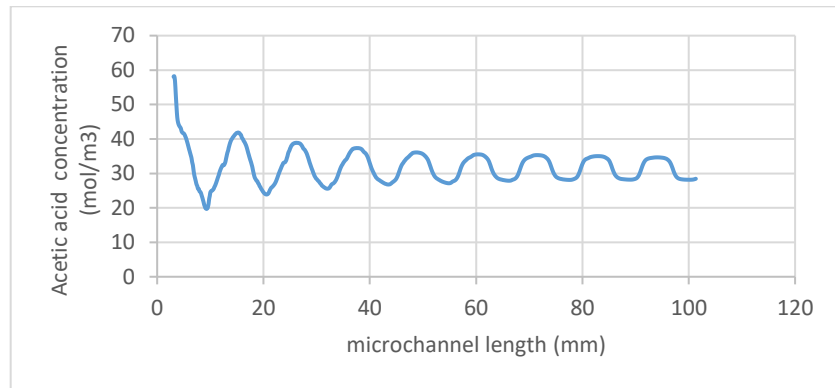


شکل ۱۱- هندسه ی شماره دو (میکروکانال سینوسی)

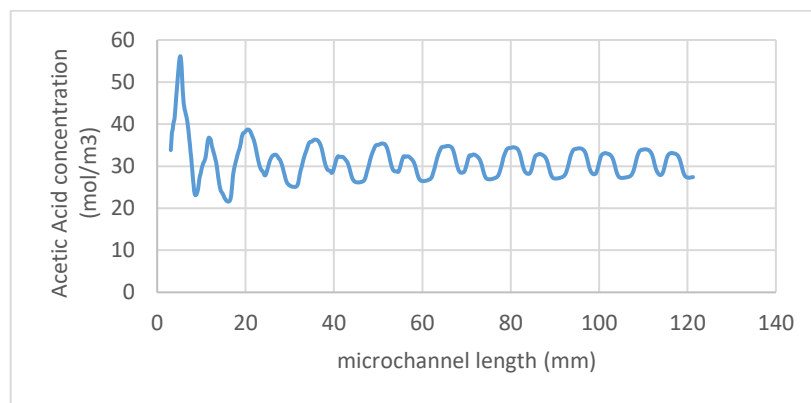
• نمودار غلظت در راستای محور

به منظور درک بهتر از نحوه ی انحلال پذیر و استخراج استیک اسید در کروزن تغییرات غلظت در خط مرکز میکرو کانال در شکل های ۱۲ تا ۱۶ به نمایش درآمده است. همانطور که مشاهده می شود تغییرات غلظت نوسانی

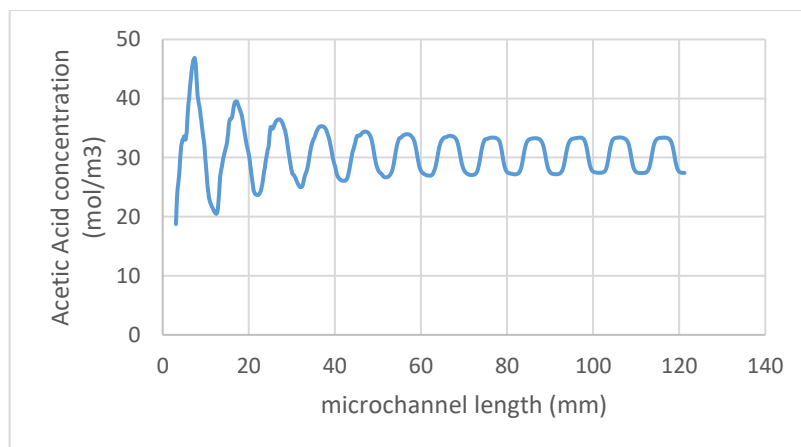
می‌باشد. اما در اثر حرکت جریان به سمت خروجی دامنه‌ی نوسانات کاهش پیدا می‌کند. تفاوت عمده میان این هندسه با هندسه‌ی قبلی میل سریع‌تر (در طول کمتر) غلظت دو ماده به همدیگر می‌باشد. افزایش سرعت تاثیر قابل ملاحظه‌ای بر روی شکل نمودارها نداشته اما اثر خود را در بازده استخراج نشان می‌دهد.



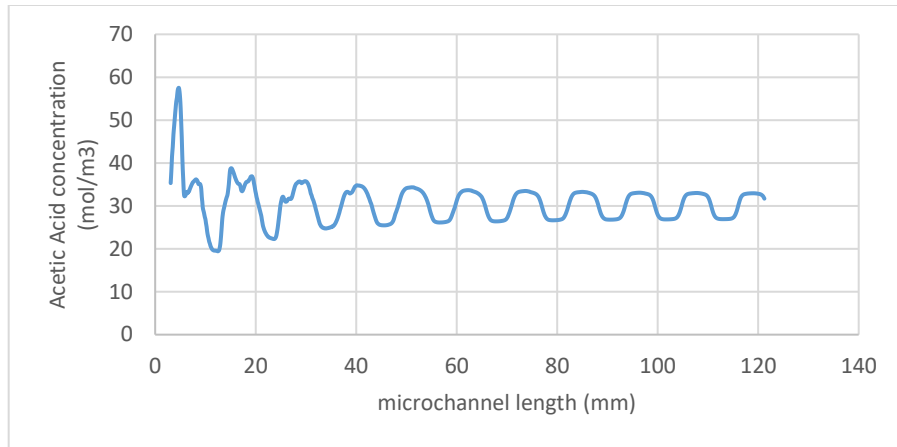
شکل ۱۲- تغییرات غلظت در خط مرکزی میکروکانال در دبی ۴۰ m l/s



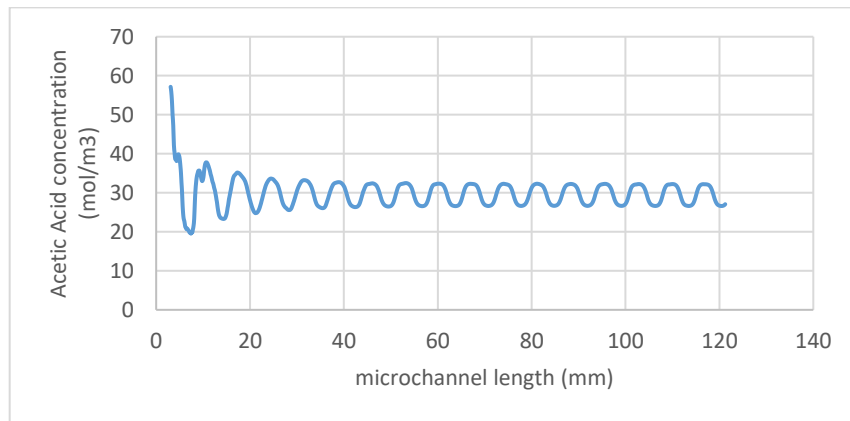
شکل ۱۳- تغییرات غلظت در خط مرکزی میکروکانال در دبی ۸۰ m l/s



شکل ۱۴- تغییرات غلظت در خط مرکزی میکروکانال در دبی ۱۲۰ m l/s



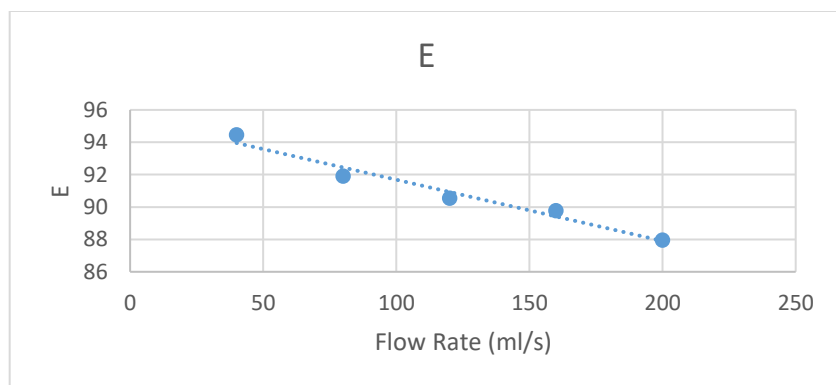
شکل ۱۵- تغییرات غلظت در خط مرکزی میکروکانل در دبی 160 m l/s



شکل ۱۶- تغییرات غلظت در خط مرکزی میکروکانل در دبی 200 m l/s

• تغییرات بازده بر حسب افزایش دبی

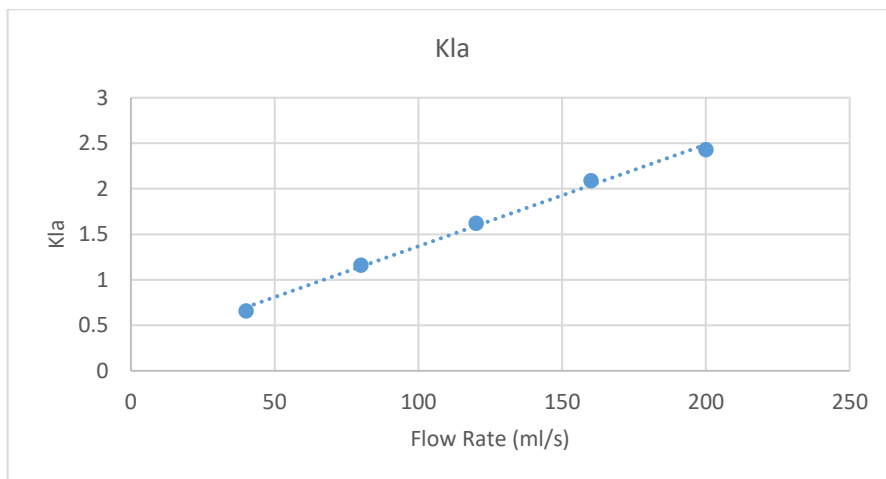
همانطور که در نمودار ۱۷ قابل مشاهده است افزایش دبی در ورودی هر دو جریان باعث افت بازده استخراج شده است که این موضوع بیانگر اثر ترم نفوذ در اثر اختلاف غلظت در میان دو فاز می‌باشد به این معنا که با افزایش سرعت در طول یکسان زمان مناسب جهت انتقال جرم کاهش پیدا کرده و در نتیجه بازده کاهش می‌یابد.



شکل ۱۷- تغییرات بازده بر حسب افزایش دبی در هندسه ی شماره دو

• تغییرات K_{La} بر حسب افزایش دبی

همانطور که در نمودار ۱۸ قابل مشاهده می‌باشد افزایش دبی و در نتیجه افزایش سرعت باعث افزایش ضریب انتقال جرم گردیده که این موضوع بیانگر آن است که افزایش سرعت باعث افزایش جذب سطحی در جریان اسلاگ گردیده زیرا سرعت چرخش جریان درون قطره افزایش یافته و در نتیجه ضریب انتقال جرم افزایش میابد.



شکل ۱۸- تغییرات K_{La} بر حسب افزایش دبی در هندسه ی شماره دو

همانطور که از دو نمودار بازده استخراج در میان دو شکل مشخص است در میکروکانال سینوسی بازده استخراج در حدود چهار درصد افزایش داشته اما اثر افزایش سرعت باعث میل کردن دو نمودار به هم می‌شود و می‌توان نتیجه گرفت که در دبی های بالا تغییر شکل اثرگذاری کمی بر بازده استخراج دارد.

تفسیر نتایج

با توجه به بررسی کلی نتایج بدست آمده می‌توان نتیجه گرفت که تاثیر شکل بر میزان بازده استخراج بسیار زیاد می‌باشد، اما این اثر می‌تواند بخاطر افزایش سرعت کاهش یابد، در واقع افزایش سرعت در جریان آرام باعث

کاهش اثر انتقال جرم از طریق پخشی می شود، همچنین نمودار های غلظت بدست آمده در این پژوهش که معادل آن در پژوهش های دیگر وجود ندارد و از نظر آزمایشگاهی این نوع از نمودار غیره قابل رسم بوده بیان گر آن است که غلظت در داخل میکروکانال بصورت سینوسی تغییر کرده و همواره مقدار آن در فاز اولیه (آبی) بیشتر باقی می ماند و مرز هر قطره ی اسلاگ استیک اسید بیشترین جذب را نسبت به مرکز آن دارا می باشد، که این موضوع بیان گر این است که با افزایش مرز میان دو فاز می توان جذب بسیار بیشتری را برای جریان رقم زد و افزایش بازده در اثر تغییر شکل میکرو کانال نیز می تواند ناشی از اثر این نوع از کشیدگی قطره ی اسلاگ و وجود مساحت بیشتر میان دو فاز باشد.

پیشنهادهات

با توجه به اینکه در این پژوهش دبی ها و قطر کانال در محدوده ای انتخاب شده بود که شرط جریان آرام در داخل کانال برقرار باشد از فرض جریان آرام در شبیه سازی استفاده شده است می توان با افزایش سرعت و وارد شدن به محدوده ی جریان آشفته اثر آشفستگی در جریان اسلاگ را مورد بررسی قرار داد می توان پیش بینی کرد که با افزایش آشفستگی در جریان اختلاط بهتری صورت گرفته و بازده استخراج افزایش یابد. همچنین با توجه به اینکه در این پژوهش دبی ها برابر در نظر گرفته شده بود، می توان اثر متفاوت بودن آنها را مورد بررسی قرار داد و به عنوان مثال با افزایش دبی فاز آلی (کروزن) می توان پیش بینی کرد که مقدار بیشتری از اسید استیک استخراج شود، البته کم بودن میزان دبی آب و میزان اسید استیک کمتر برای جداسازی در سطح تماس کروزن هم باید در نظر گرفته شود. همچنین می توان با استفاده از جدا کننده جریان در میان میکرو کانال که ممکن است باعث افزایش سطح میان دو سیال گردد میزان استخراج را افزایش داد از دیگر مواردی که میتوان مورد بررسی قرار داد اثر افزایش دما و یا کاهش دما بر روی جریان اسلاگ می باشد افزایش دما که تاثیر مستقیم بر کاهش چگالی دو سیال دارد ممکن است باعث کاهش نیروی کشش سطحی میان دو فاز گردیده و باعث افزایش راندمان گردد. همچنین در این شبیه سازی اثر واکنش های شیمیایی میان دو فاز در نظر گرفته نشده پس می توان در پژوهشی دیگر اثر این نوع از واکنش ها را در جریان در نظر گرفت.

منابع

1. Burns JR, Ramshaw C. Development of a Microreactor for Chemical Production. Chemical Engineering Research and Design. ۱۹۹۹;۷۷(۳):۱۱-۲۰۶
2. Falconi C, Lehrenfeld C, Marschall H, Meyer C, Abiev R, Bothe D, et al. Numerical and experimental analysis of local flow phenomena in laminar Taylor flow in a square mini-channel. Physics of Fluids. ۲۰۱۶;۲۸(۱):۰۱۲۱۰۹
3. Voloshin Y, Halder R, Lawal A. Kinetics of hydrogen peroxide synthesis by direct combination of H₂ and O₂ in a microreactor. Catalysis Today. ۲۰۰۷;۱۲۵(۱):۷-۴۰
4. Ehrfeld W, Hessel V, Haverkamp V. Microreactors. Ullmann's encyclopedia of industrial chemistry. ۲۰۰۰

5. Jeong GS, Chung S, Kim C-B, Lee S-H. Applications of micromixing technology. *Analyst*. 2010;135(3):33-46.
6. Jovanović M. Liquid-liquid microreactors for phase transfer catalysis. Eindhoven University of Technology. 2002:11
7. Henriksen TR, Olsen JL, Vesborg P, Chorkendorff I, Hansen O. Highly sensitive silicon microreactor for catalyst testing. *Review of Scientific Instruments*. 2001;72(12):3009
8. Garcia-Egido E, Spikmans V, Wong SY, Warrington BH. Synthesis and analysis of combinatorial libraries performed in an automated micro reactor system. *Lab on a Chip*. 2003;3(2):6-7
9. Fries DM, Voith T, von Rohr PR. Liquid extraction of vanillin in rectangular microreactors. *Chemical Engineering & Technology: Industrial Chemistry-Plant Equipment-Process Engineering-Biotechnology*. 2008;31(8):1112
10. Ahmed-Omer B, Barrow D, Wirth T. Effect of segmented fluid flow, sonication and phase transfer catalysis on biphasic reactions in capillary microreactors. *Chemical Engineering Journal*. 2008;135:S28-S3
11. Atencia J, Beebe DJ. Controlled microfluidic interfaces. *Nature*. 2005;437(7059):246-248
12. Tang J, Zhang X, Cai W, Wang F. Liquid-liquid extraction based on droplet flow in a vertical microchannel. *Experimental thermal and fluid science*. 2013;92-99:118
13. Zhao C-X, Middelberg AP. Two-phase microfluidic flows. *Chemical Engineering Science*. 2011;66(7):411-139
14. Zhao Y, Chen G, Yuan Q. Liquid-liquid two-phase flow patterns in a rectangular microchannel. *AIChE journal*. 2006;52(12):60-405
15. Garstecki P, Fuerstman MJ, Stone HA, Whitesides GM. Formation of droplets and bubbles in a microfluidic T-junction—scaling and mechanism of break-up. *Lab on a Chip*. 2006;6(3):46-437
16. Xu J, Luo G, Li S, Chen G. Shear force induced monodisperse droplet formation in a microfluidic device by controlling wetting properties. *Lab on a Chip*. 2006;6(1):6-131
17. Stone HA, Stroock AD, Ajdari A. Engineering flows in small devices: microfluidics toward a lab-on-a-chip. *Annu Rev Fluid Mech*. 2004;36:1-381
18. Harries N, Burns J, Barrow DA, Ramshaw C. A numerical model for segmented flow in a microreactor. *International journal of heat and mass transfer*. 2003;46(17):22-331
19. Gupta R, Leung SS, Manica R, Fletcher DF, Haynes BS. Hydrodynamics of liquid-liquid Taylor flow in microchannels. *Chemical Engineering Science*. 2013;9-92:110
20. Whitman WG. The two-film theory of gas absorption. *Chem Metall Eng*. 1923;8-29:146
21. Higbie R. The rate of absorption of a pure gas into a still liquid during short periods of exposure. *Trans AIChE*. 1935;31-32:66
22. Cussler EL, Cussler EL. *Diffusion: mass transfer in fluid systems*: Cambridge university press 2009 ;
23. Raimondi NDM, Prat L, Gourdon C, Cognet P. Direct numerical simulations of mass transfer in square microchannels for liquid-liquid slug flow. *Chemical Engineering Science*. 2008;63(22):30-552

24. Antony R, Nandagopal MG, Sreekumar N, Rangabhashiyam S, Selvaraju N. Liquid-liquid slug flow in a microchannel reactor and its mass transfer properties-a review. *Bulletin of Chemical Reaction Engineering & Catalysis*. 2014;9(3):207
25. Godfrey JC, Slater MJ. *Liquid-liquid extraction equipment*: Wiley New York; .1994
26. Sarrazin F, Bonometti T, Prat L, Gourdon C, Magnaudet J. Hydrodynamic structures of droplets engineered in rectangular micro-channels. *Microfluidics and Nanofluidics*. 2008;5(1):7-13
27. Kashid MN, Agar DW, Turek S. CFD modelling of mass transfer with and without chemical reaction in the liquid-liquid slug flow microreactor. *Chemical Engineering Science*. 2007;62(20-18):9-5102
28. Chung P-Y, Kawaji M. The effect of channel diameter on adiabatic two-phase flow characteristics in microchannels. *International journal of multiphase flow*. 2004;30(-78):61-73
29. Triplett K, Ghiaasiaan S, Abdel-Khalik S, LeMouel A, McCord B. Gas-liquid two-phase flow in microchannels: part II: void fraction and pressure drop. *International Journal of Multiphase Flow*. 1999;25(3):410-39
30. Xiong R, Bai M, Chung JN. Formation of bubbles in a simple co-flowing micro-channel. *Journal of Micromechanics and Microengineering*. 2007;17(5):1002
31. Fries DM, Rudolf von Rohr P. Impact of inlet design on mass transfer in gas-liquid rectangular microchannels. *Microfluidics and nanofluidics*. 2009;6(1):35-27
32. Ramji S, Rakesh A, Pushpavanam S. Modelling mass transfer in liquid-liquid slug flow in a microchannel. *Chemical Engineering Journal*. 2019;361-364:280
33. Chandra A, Kishor K, Mishra P, Alam M. Numerical investigations of two-phase flows through enhanced microchannels. *Chemical and Biochemical Engineering Quarterly*. 2016;30(2):59-149
34. Hellé G, Roberston S, Cavadias S, Mariet C, Cote G. Toward numerical prototyping of labs-on-chip: modeling for liquid-liquid microfluidic devices for radionuclide extraction. *Microfluidics and Nanofluidics*. 2015;19(5):57-124