**همانندسازی CFD فرآیند تراوش تبخیری با توسعه مدل‌های پیشرفته ترمودینامیکی و نفوذی**

رها شهسواری 1، امید بختیاری**\***

1 دانشجوی دکتری، دانشگاه رازی، دانشکده نفت و پتروشیمی،‌ مهندسی شیمی، مرکز تحقیقات پیشرفته مهندسی شیمی، گروه مرکز پژوهشی غشا.

2 عضو هیات علمی، دانشگاه رازی، دانشکده نفت و پتروشیمی، گروه مهندسی شیمی، مرکز تحقیقات پیشرفته مهندسی شیمی، مرکز پژوهشی غشا.

obakhtiari@razi.ac.ir\*

**چکيده**

یک مدل‌سازی ریاضی دو بعدی برای توصیف جداسازی غشایی مخلوط‌ متانول / آب در فرآیند تراوش تبخیری با استفاده از غشا PDMS گسترش یافته و با بهره‌گیری از دینامیک سیالات محاسباتی (CFD) حل شده است. در این مدل از تئوری حجم آزاد، ورنتاس دوداو و ویلسون استفاده شده است. اثر دمای خوراک بر دقت پیش‌بینی شار گذرا از میان غشا بررسی شد و نتایج نشان داد که مدل ارائه شده به خوبی توانایی پیش‌بینی تاثیر دمای خوراک بر روی شار گذرا از میان غشا را دارد. نتايج پيش‌بيني شار با مدل ویلسون هم‌خوانی خوبی با داده‌هاي آزمايشگاهي دارد. در دماهای خوراک 30، 40 و °C50 خطاهای پیش‌بینی شار غشا به ترتیب برابر 2/14، 5/14 و 5/16 % محاسبه شد.

**واژگان كليدي:**

غشا، تراوش‌تبخیری، مدل‌های ترمودینامیکی، مدل‌سازی، دینامیک سیالات محاسباتی.

1. **مقدمه**

به تازگی فرآیندهای جداسازی غشایی به عنوان فرآیندهای سازگار با فرآیندهای سنتی جداسازی مانند تقطیر، استخراج، جذب و غیره توجه صنایع را به خود جلب کرده است. داشتن دانش درمورد ساز‌وکار پدیده‌های انتقال حاکم بر این فرآیندها می‌تواند نقش مهمی در طراحی و برنامه های کاربردی در این زمینه بازی کند. بنابراین، توسعه و شبیه سازی یک مدل ریاضی که قادر به توصیف درست پدیده‌ها در طول نفوذ و انتقال اجزا از طریق غشا باشد، یک کار ضروری است. در تراوش‌تبخیری که یکی از فرآیندهای جداسازی غشایی می‌باشد، اصل جداسازی بر مبنای اختلاف در مقدار فشار بخار اجزا می‌باشد و جزئی که دارای فشار بخار کمتری است با شار عبوری بیشتری از غشا عبور می‌کند و غلظت آن در قسمت مقادیر تراوش یافته افزایش می‌یابد. دو دیدگاه برای بررسی انتقال جرم در فرآیند تراوش‌تبخیری وجود دارد، دیدگاه اول براساس مدل‌های ترمودینامیکی که شامل جذب سطحی، نفوذ و انتقال جرم ترا غشایی است. مدل‌های جذب سطحی غشا شامل ایزومر لانگمویر و قانون هنری، تئوری پارامتر حلالیت، تئوری فلوری هاگینز، مدل ویلسون، UNIQUAC و UNIFAC است. مدل‌های نفوذ غشا شامل مدل‌های تجربی ضریب نفوذ وابسته به غلظت، تئوری حجم آزاد و مدل جذب دوگانه[[1]](#footnote-1) می‌باشد و مدل‌های انتقال جرم غشایی شامل مدل‌های تجربی انتقال جرم غشایی، مدل انحلال - نفوذ[[2]](#footnote-2)، تئوری ماکسول استفان[[3]](#footnote-3) و مدل جریان نفوذ[[4]](#footnote-4) است [1]. دیدگاه دوم براساس حل معادلات پایستگی برای نفوذکننده در فازهای مایع و غشا است براساس تکنیک دینامیک سیالات محاسباتی(CFD) است. سیالات محاسباتی یک روش ریاضی مناسب برای شبیه‌سازی و تحلیل مسائل انتقال حرارت، انتقال جرم و مکانیک سیالات می‌باشد [2]. آزمایش‌های عملی محاسبات تئوری، دو روش اصلی و مشخص برای پیش‌بینی چگونگی جریان سیال و توزیع انتقال جرم در کاربردهای مختلف صنعتی و تحقیقاتی می‌باشد. در اندازه‌گیری‌های تجربی به دلیل هزینه‌های زیاد ترجیحا آزمایش‌ها بر روی مدلی ساده‌تر از نسخه اصلی انجام می‌پذیرد. حذف پیچیدگی‌ها، ساده‌سازی آزمایش‌ها، خطای دستگاه‌های اندازه‌گیری و بعضی موانع در راه اندازه‌گیری از جمله مشکلاتی هستند که روش‌های عملی با آن‌ها روبه‌رو هستند. مهم‌ترین امتیاز استفاده از محاسبات تئوری در مقایسه با آزمایش‌های تجربی هزینه کم آن است. علاوه بر سرعت بیشتر محاسبات عددی، می‌توان با این روش‌ها اطلاعات کامل با جزئیات بیشتر از قبیل تغییرات سرعت، فشار و غیره را در سراسر دامنه مورد نظر به دست آورد. در مقابل، اغلب اوقات شبیه‌سازی آزمایشگاهی برای به دست آوردن این گونه اطلاعات مشکل و مستلزم صرف زمان زیاد و در برخی شرایط غیر‌ممکن است. در همین راستا در این مطالعه به دلیل کاهش هزینه و همچنین به دست آوردن شرایط عملیاتی بهینه، از شبیه‌سازی عددی با استفاده از دینامیک سیالات محاسباتی استفاده شده است.

اخیرا مدل‌سازی برخی از مسائل مربوط به تراوش‌تبخیری را با روش دینامیک سیالات محاسباتی مورد توجه بسیاری از پژوهش‌گران قرار گرفته است. رضا کاظمی و همکاران [3] با شبیه‌سازی غشا کامپوزیت پلی‌نیل الکل بر پایه پلی‌پروپیلن در جداسازی آب از اتیلن گلایکول با استفاده از فرآیند تراوش‌تبخیری، نشان دادند در بهترین حالت در دمای C° 70 خطای مدل ریاضی به دست آمده برابر 68/3 % و بیشترین مقدار خطای آن نیز 80/12 % است. لیو و همکاران [4] از CFD برای محاسبه پروفایل غلظت با در نظر گرفتن قطبش غلظتی در ورقه مسطح غشا تراوش‌تبخیری استفاده کردند. مقایسه داده‌های آزمایشگاهی و مدل خطای 24/11 %مدل را نشان می‌دهد. رئیسی و همکاران [5] انتقال جرم ایزوپنتیل استات و نرمال‌هگزان از میان غشا کامپوزیتPDMS را با استفاده از تئوری انحلال-نفوذ مورد بررسی قرار دادند. دینامیک سیالات محاسباتی برای حل معادلات انتقال جرم بکار گرفته شد. داده‌های آزمایشگاهی و مدل مطابقت خوبی داشتند. همچنین تاثیر پارامترهای کلیدی مانند غلظت اجزا در خوراک، درجه حرارت و غلظت در سمت تراوش یافته به صورت تئوری و تجربی بررسی شد. نتایج نشان داد که با افزایش غلظت اجزا و دما در خوراک غلظت در سمت تراوش یافته افزایش می‌یابد. AARD محاسبه شده برای ایزوپنتیل استات در تمام دماهای خوراک و غلظت‌ها 46/6 % در حالی که برای نرمال هگزان 15/7 % می‌باشد. در بررسی کنونی، از مدل‌های ترمودینامیکی مناسب در مراحل جذب و نفوذ، به عنوان دو مرحله اصلی در فرآیند تراوش تبخیری، برای گسترش یک مدل ریاضی دو بعدی با دقت بیش‌تر در پیش‌بینی داده‌های آزمایشگاهی جداسازی تراوش تبخیری متانول / آب با غشا تخت پلی‌دی‌متیل‌سیلوکسان که در کار آزمایشگاهی بخشی و همکاران [6] بهره گرفته می‌شود.

1. **معادلات انتقال جرم**

معادله اصلی برای انتقال جرم سازنده‌های از جمله متانول و آب در فرآیند تراوش تبخیری را می‌توان به صورت زیر نشان داد [7]:

|  |  |
| --- | --- |
| (1) |  |

که در آن Ci غلظت سازنده انتقال یافته با یکای mol/m3، Di ضریب نفوذ مولکولی با یکای m2/s، V بردار سرعت با یکای m/s و 𝑅i عبارت واکنشی با یکای mol/m3.s است.

* 1. **معادله‌های سمت خوراک غشا**

معادله پیوستگی برای برآورد شار حالت پایای انتقال سازنده از جریان خوراک با استفاده از قانون نفوذ فیک به صورت زیر بیان می‌شود [7]:

|  |  |
| --- | --- |
| (2) |  |

که در آن سرعت جریان خوراک در جهت با یکای m/s است.

در جریان آرام سیال، معادله ناویراستوکس به صورت زیر نوشته می‌شود [7]:

|  |  |
| --- | --- |
| (3) |  |

که در آن گران‌روی دینامیک با یکای kg/m.s، چگالی مایع با یکای kg/m3، P فشار استاتیک مایع با یکای Pa و F نیروی میدان بیرونی با یکای N می‌باشد.

* 1. **معادله‌های فاز غشا**

معادله پیوستگی حالت پایا برای انتقال سازنده از میان غشا به شرح زیر نوشته می‌شود [7]:

|  |  |
| --- | --- |
| (4) |  |

شرایط مرزی برای معادله‌های بالا در هر دو ناحیه خوراک و غشا در جدول 1 گزارش شده‌اند.

جدول 1. شرایط مرزی برای معادله‌های انتقال جرم و اندازه حركت در فازهای خوراک و غشا مدول غشایی صفحه تخت.

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| مرز | معادله پایستگی جرم | | معادله پایستگی اندازه حرکت در خوراک |
| سمت غشا | سمت خوراک |
|  | **-** |  |  |
|  |  |  |  |
| (خلا) |  | - |  |
|  |  |  |  |
|  |  | شار همرفتی |  |

1. **مدل‌ها و روش‌ها**

جذب و انحلال سازنده‌ها در میان غشــا معمولا به برهم‌کنش ماده سازنده غشا - سازنده‌ها، درجه اتصــال عرضــی غشا، ترکیب خوراک و دما وابسـتگی شـدیدی دارند و مدل‌های مختلفی برای پیش‌بینی جذب مخلوط مایع چند سازنده‌ای در غشـا در فرآیند تراوش تبخیری ارائه شده که در ادامه مدل‌های حجم آزاد ورنتاس دودا و ویلسون بررسی می‌شوند.

* 1. **داده‌های آزمایشگاهی**

برای مدل‌سازی و بررسی انتقال جرم از میان غشا در فرآیند تراوش تبخیری، داده‌های آزمایشگاهی جداسازی محلول متانول / آب با غشا PDMS از کار بخشی و همکاران مورد استفاده قرار گرفته است. ضخامت لایه بالایی و مساحت موثر غشا به ترتیب µm 8 و m2 0024/0 گزارش شده است. ابعاد کانال خوراک ماژول غشایی آن‌ها در انجام پژوهش m 13/0 × 06/0 × 09/0 بوده است. شمای هندسی ماژول همانندسازی شده در کار کنونی در شکل 1 نمایش داده شده است [6].

محلول متانول/آب

غشا PDMS

y

x

ورود خوراک

فاز تراویده برای جمع‌آوری

سمت تخلیه فاز تراویده

خروج جریان پس‌زده شده

شکل 1. شمای هندسه مدول به کار گرفته شده در بررسی کنونی.

* 1. **فرض‌های گسترش مدل**

مدل ریاضی بر پایه فرض‌های زیر گسترش یافته است:

* سازوکار انحلال - نفوذ برای انتقال سازنده‌ها از میان غشا در نظر گرفته می‌شود.
* فرآیند در حالت پایا انجام و جریان خوراک آرام فرض می‌شود.
* هیچ واکنشی میان سازنده‌های گذرا از میان غشا رخ نمی‌دهد.
* فرآیند هم‌دما در نظر گرفته می‌شود، به این معنی که قطبش دمایی در لایه مرزی مایع به علت تبخیر ناچیز است.
* قطبش غلظتی در سوی خوراک نیز ناچیز انگاشته می‌شود.
* فشار در فاز غشا ثابت و برابر فشار در فاز مایع فرض می‌شود.
* سطح مشترک‌های مایع - غشا و غشا - بخار در تعادل ترمودینامیکی هستند.
* مقاومت‌های انتقال جرم لایه مرزی سمت خوراک و لایه پایه غشا ناچیز هستند و مقاومت انتقال جرم در لایه فعال بالایی متمرکز است.
* به دلیل اعمال خلا در سوی جریان تراوش یافته، غلظت سازنده‌ها در آن جا ناچیز (صفر) می‌باشد.
  1. **معادلات مدل‌ ترمودینامیکی در مرحله جذب فرآیند تراوش تبخیری**

مدل‌های ترمودینامیکی دو مرحله اصلی انتقال جرم در تراوش تبخیری، در برگیرنده جذب در غشا و نفوذ از میان آن، را پوشش می‌دهند. در ادامه مدل‌های ترمودینامیکی حاکم بر مراحل انتقال جرم، جذب و نفوذ در غشا در تراوش تبخیری به اختصار بیان می‌شوند.

* + 1. **مدل ویلسون**

مدل ویلسون[[5]](#footnote-5) از سوی هری ستوا و همکاران ارائه شده است [8]. معادله ضریب فعالیت به کار گرفته شده در مدل ویلسون در معادله (6) نشان داده شده است. مقادیر پارامترهای ساختاری مدل ویسلون برای سازنده‌های متانول و آب در جدول 2 ارائه شده است [9].

|  |  |
| --- | --- |
| (6) |  |

جدول 2. پارامترهای مدل ویلسون برای سازنده‌های متانول و آب [10].

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| پارامتر | یکا | متانول | آب |
|  |  | 7/40 | 1/18 |
|  |  | 8/42 | 8/18 |
|  |  | 2/28 | 9/47 |

* 1. **مدل به کار گرفته شده در مرحله نفوذ سازنده‌ها به درون غشا**

به دلیل اثر نرم‌شوندگی پدید آمده از نفوذ سازنده‌ها در درون پلیمرها و وابستگی ضریب نفوذ نیز به غلظت سازنده‌ها، روند نفوذ از میان غشا روند به نسبت پیچیده‌ای است. انواع مدل‌های بنیادی و نیمه‌تجربی برای توضیح نفوذ سازنده‌ها از میان غشا ارائه شده‌اند. نفوذ مولکولی در پلیمر با عبور مولکول از میان فضاهای آزاد و فاصله میان‌مولکولی میان زنجیره‌های پلیمری رخ می‌دهد. تئوری بنیادی حجم آزاد دودا[[6]](#footnote-6) برای نفوذ در سیستم سه‌تایی (دو سازنده خوراک و یک سازنده پلیمر) به شرح زیر است [11]:

|  |  |
| --- | --- |
| (7) |  |

که در آن ضریب پیش‌نمایی با یکای ، انرژی فعال‌سازی مولکول‌ها برای غلبه بر نیروی جاذبه برای نگه داشتن آن‌ها در کنار یکدیگر با یکای ، R ثابت جهانی گازها با یکای ، دمای مطلق نفوذ با یکای کلوین، ، و کسر جرمی سازنده‌ها، ، و حجم آزاد ویژه سازنده‌های ، با یکای و ، و نسبت حجم مولی بحرانی یک جهش برای سازنده‌های و به حجم مولی بحرانی یک جهش در غشا، فاکتور تداخل و حجم آزاد میانگین روزنه در یکای جرم مخلوط است.پارامترهای تئوری حجم آزاد ورنتاس دودا برای سیستم PDMS / متانول / آب در جدول 3 ارائه شده‌اند.

جدول 3. پارامترهای تئوری حجم آزاد ورنتاس دودا برای سیستم PDMS / متانول / آب [9].

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| پارامتر | یکا | متانول | آب | پلی‌دی‌متیل‌سیلوکسان |
|  |  | 961/0 | 1/18 | 905/0 |
|  |  | 3-10 × 17/1 | 4-10 × 18/2 | 4-10 × 32/9 |
|  |  | 41/48 - | 9/47 | 81 - |
|  | - | 4887/0 | 248/0 | - |
|  |  | - | 01/250 | - |

* 1. **سخت‌افزار و نرم‌افزار به کار گرفته شده**

در این برریس برای حل عددی معادله‌های پایستگی جرم و مومنتوم با شـــرایط مرزی آن‌ها و مدل‌های ترمودینامیکی بیان شده، از نرم افزار Multiphysics COMSOL 2.5 با پردازنده Intel(R) Core(TM) i7-4510U CPU بهره گرفته شده است.

1. **نتایج و بحث**
   1. **استقلال نتایج از مش‌بندی**

برای دقت بیشتر مقادیر محاسبه شده شمار شبکه در ناحیه ضخامت غشا افزایش داده شد و همچنین برای رسیدن به دقت کافی در لایه مرزی نزدیک سطح مشترک از مش ریزتر در نزدیک دیواره‌ها استفاده شده است. با افزایش شمار گره‌ها وابستگی نتایج به تعداد المان‌ها کم / حذف می‌شود. در **Error! Reference source not found.**جدول 4 جزییات مش‌بندی و همچنین پارامترهای استفاده شده در مدل‌سازی به طور مختصر بیان شده است.

جدول 4. جزییات مش‌بندی و پارامترهای به کار رفته در همانندسازی CFD مدول غشایی.

|  |  |
| --- | --- |
| متغیر | مقدار / نوع |
| شکل مش‌بندی | مثلثی |
| درجه آزادی | 12952 |
| تعداد المان‌های مرزی | 490 |
| تعداد المان‌ها | 5885 |

* 1. **میزان اعتبار مدل**

برای سنجش کارایی مدل، شار سازنده آلی خروجی مدل‌سازی شده با نتایج آزمایشگاهی مقایسه می‌شود. خطای نسبی داده‌های حاصل از مدل‌سازی و آزمایشگاهی از رابطه زیر محاسبه می‌شود:

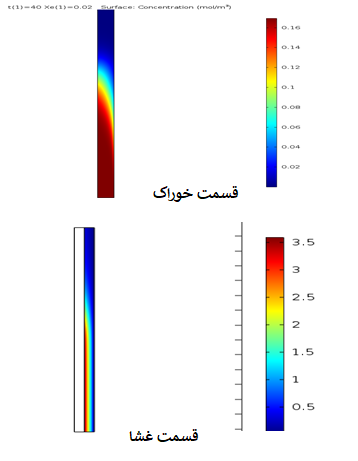
|  |  |
| --- | --- |
| (5) |  |

مقایسه بین شارهای پیش‌بینی شده مدل ویلسون در دماهای مختلف و اندازه‌گیری‌های تجربی انجام شد و نتایج در شکل 2 نشان داده شده است. میانگین خطاهای مطلق نسبی محاسبه شده آن‌ها (AARE) برابر 2/21 % است.

شکل 2. خطای نسبی شار پیش‌بینی شده با مدل ویلسون در سه دمای متفاوت خوراک 40، 50 و °C 60.

* 1. **توزیع غلظت متانول**

شکل 3 توزیع غلظت بی‌بعد متانول (C/C0) در خوراک و غشا را نشان می‌دهد. غلظت متانول خوراک در (0 = y) برابر با بیشترین مقدار (C0) است. هنگام ورود خوراک متانول به دلیل اختلاف غلظت و بر اساس مکانیزم جابه‌جایی و نفوذ از غشا می‌گذرد. به سبب خلا غلظت متانول در مرز غشا و تراویده صفر درنظر گرفته می‌شود [3].



شکل 3. توزیع بی‌بعد غلظت متانول (C/C0) در سوی خوراک و غشا مدول غشایی.

* 1. **اثر غلظت متانول در خوراک**

یکی از مهم‌ترین پارامترهای تاثیرگذار بر روی شار و گزینش‌گری در تراوش تبخیری غلظت خوراک این فرآیند است. تغییر در ترکیب خوراک فرآیند جذب را مستقیما تحت تاثیر قرار می‌دهد. همچنین تراوش اجزا به غشا به غظت‌هایشان وابسته است. برای بررسی اثر غلظت خوراک بر روی عملکرد سیستم غلظت‌ها از Wt. % 100 - 2 برای مخلوط متانول / آب در دمای C° 40 با مدل ترمودینامیکی ویلسون در نظر گرفته شده و نتایج در شکل 4‌ آمده است. همان طور که دیده می‌شود مدل ویلسون داده‌های آزمایشگاهی به صورت قابل قبولی پیش‌بینی (میانگین خطای 1/15) می‌کند.

شکل 4. تاثیر غلظت متانول بر شار متانول از میان غشا در دمای °C40 با استفاده از مدل‌ Wilson.

* 1. **اثر دمای خوراک**

دمای خوراک نیز یک عامل مهم در فرآیند تراوش تبخیری متانول / آب است که بر روی هر دو مرحله جذب سطحی و نفوذ سازنده‌ها از میان غشا تاثیر می‌گذارد. تراوش‌پذیری، ویسکوزیته سازنده‌ها در مخلوط خوراک و همچنین نفوذ آن‌ها از میان غشا با دمای خوراک تغییر گاه چشم‌گیری می‌کند. اثر دمای خوراک بر شار متانول در شکل 5 آمده است. با افزایش دما از 40 تا ºC 60 موجب افزایش اختلاف فشار بخار (نیروی پیش‌ران) در دو سوی غشا و در نتیجه افزایش شار می‌شود. برابر تئوری حجم آزاد، مولکول‌های تراونده از میان فضـــای خالی غشا می‌گذرند. افزایش دما ســـبب تضـــعیف برهم‌کنش میان مولکول‌های تراونده و پلیمر و حرکت زنجیره‌های پلیمری و در پایان آسان شدن حرکت تراونده‌ها از میان غشا می‌شود [12].

شکل 5. تاثیر دمای خوراک بر شار متانول در غلظت Wt.3 %.

1. **نتیجه‌گیری**

مدل‌سازی فرآیند تراوش‌تبخیری جداسازی متانول/آب با غشا تک لایه آب‌گریز پلی‌دی‌متیل‌سیلوکسان بر پایه تئوری حجم آزاد و مدل ترمودینامیکی ویلسون بر پایه CFD و حل همزمان معادله‌های پیوستگی و مومنتوم در دو بعد با استفاده از توانایی محاسباتی دینامیک سیالات در نرم‌ا‌فزار کامسول مولتی فیزیک انجام شده است. معادله‌های به دســت آمده به روش عددی بر مبنای روش المان محدود با دقت بســیار بالایی حل شــد. قدرت پیش‌بینی مــــدل‌های ترمودینامیکی، اثــــر غلظت و دمای خوراک بر فرآیند جذب سیستم مذکور مطالعه شد. نتایج پیش‌بینی مدل‌های ارائه شــده برای شــار هم‌خوانی خوبی با مقادیر اندازه‌گیری شــده تجربی دارند. اثر دما و غلظت بر شــار متانول در محلول دوتایی با حداقل خطای 69/5 % ارائه شــده‌اند. با افزایش دمای خوراک، شــار تراوش متانول افزایش پیدا کرد. همچنین افزایش غلظت متانول در خوراک ســـبب بهبود انتقال متانول و منجر به افزایش شار متانول شد.

**CFD simulation of pervaporation using advanced models of thermodynamics and diffusive**

**Raha Shahsavari, Omid** **Bakhtiari[[7]](#footnote-7)**

Membrane Research Division, Advanced Research Center for Chemical Engineering, Faculty of Petroleum and Chemical Engineering, Razi University, Kermanshah, Iran

**Abstract**

A two - dimensional mathematical modeling for description of pervaporative separation of methanol / water mixture using the PDMS membrane in pervaporation process was developed and solved using computation fluid dynamic (CFD). In this modeling, free volume theory, Vrentas Duda and Wilson models were employed. The effect of feed temperature effect on the model simulation predictions' accuracy, i. e. the membrane flux, was investigated and satisfactory results were found. The membrane flux prediction using the Wilson model was found very well in agree with those of experimentally measured ones. Relative errors of the predicted membrane flux in feed temperatures of 30, 40 and 50°C, was found as 14.2, 14.5 and 16.5% respectively.

**Keywords**: Membrane, Pervaporation, Thermodynamic Models, Simulation, Computational Fluid Dynamics.

**منابع**

1. Lipnizki, F. and G. Trägårdh, Modelling of pervaporation: models to analyze and predict the mass transport in pervaporation. Separation and Purification Methods, 2001. 30(1): p. 49-125.
2. Keshavarz Moraveji, M., et al., CFD modeling of hydrophobic pervaporation process: ethanol/water separation. Desalination and Water Treatment, 2013. 51(16-18): p. 3445-3453.
3. Rezakazemi, M., et al., CFD simulation of water removal from water/ethylene glycol mixtures by pervaporation. Chemical engineering journal, 2011. 168(1): p. 60-67.
4. Liu, S.X., M. Peng, and L. Vane, CFD modeling of pervaporative mass transfer in the boundary layer. Chemical engineering science, 2004. 59(24): p. 5853-5857.
5. Mafi, A., A. Raisi, and A. Aroujalian, Computational fluid dynamics modeling of mass transfer for aroma compounds recovery from aqueous solutions by hydrophobic pervaporation. Journal of Food Engineering, 2013. 119(1): p. 46-55.
6. Bakhshi, A., et al., Effect of operating conditions on pervaporation of methanol—water mixtures: Part 1. Membrane Technology, 2006. 2006(11): p. 7-9.
7. Bird, R.B., W.E. Stewart, and E.N. Lightfoot, Transport phenomena. Vol. 1. 2006: John Wiley & Sons.
8. Jonquières, A., et al., Polarity measurements in block copolymers (polyurethaneimides) and correlation with their pervaporation features. Journal of applied polymer science, 1995. 56(12): p. 1567-1579.
9. Wilson, G.M., Vapor-liquid equilibrium. XI. A new expression for the excess free energy of mixing. Journal of the American Chemical Society, 1964. 86(2): p. 127-130.
10. Wilson, G.M., Vapor-liquid equilibrium. XI. A new expression for the excess free energy of mixing. Journal of the American Chemical Society, 1964. 86(2): p. 127-130.
11. Vrentas, J., J. Duda, and H.C. Ling, Free‐volume theories for self‐diffusion in polymer–solvent systems. I. Conceptual differences in theories. Journal of Polymer Science: Polymer Physics Edition, 1985. 23(2): p. 275-288.
12. Rezakazemi, M., et al., Transient computational fluid dynamics modeling of pervaporation separation of aromatic/aliphatic hydrocarbon mixtures using polymer composite membrane. Polymer Engineering & Science, 2013. 53(7): p. 1494-1501.

1. - Dual sorption Model [↑](#footnote-ref-1)
2. - Solution-diffusion [↑](#footnote-ref-2)
3. - Maxwell-Stefan [↑](#footnote-ref-3)
4. - Pore Flow [↑](#footnote-ref-4)
5. - Wilson [↑](#footnote-ref-5)
6. - Vrentas Duda [↑](#footnote-ref-6)
7. - Corresponding Author: E-mail: obakhtiari@razi.ac.ir, Telfax: +98 83 34 283 262 [↑](#footnote-ref-7)