

مدل سازی واکنش موازی-رقابتی Villiermaux-Dushman در میکروآکتورهای منتخب با استفاده از نرم افزار کامسول

پیوند واله شیدا، مجید یارمحمدتوسکی

گروه مهندسی شیمی، دانشگاه صنعتی کرمانشاه، کرمانشاه، ایران.

نویسنده مسئول ایمیل: p.valeh-sheyda@kut.ac.ir

تاریخ پذیرش: ۱۳۹۸/۰۶/۲۲

تاریخ دریافت: ۱۳۹۸/۰۲/۳۱

چکیده

بخش مهمی از فرایندهای شیمیایی را عمل اختلاط و ترکیب مواد تشکیل می‌دهد. در این تحقیق، سعی شده است شبیه‌سازی اختلاط واکنش Villiermaux-Dushman با استفاده از نرم‌افزار شبیه‌سازی COMSOL Multiphysics برای دو میکروکانال با سطح مقطع‌های مربعی و دوزنقه‌ای با ابعاد مشخص و به‌منظور دستیابی به حداقل شاخص جدایش خروجی بررسی می‌شود. از داده‌های تجربی برای ورودی‌های معلوم به نرم‌افزار استفاده شد. اثر دبی حجمی بر شاخص جدایی X_s به‌عنوان معیار سنجش کیفیت اختلاط و نیز افت فشار درون میکروکانال بررسی شد. نتایج حاصل از مدل‌سازی حاکی از آن است که در کلیه دبی‌ها، میکروکانال T شکل با سطح مقطع مربعی با شاخص جدایش نزدیک‌تر به صفر (۰/۰۰۰۱ - ۰/۰۰۶۷) نسبت به میکروکانال T شکل با سطح مقطع دوزنقه‌ای عملکرد بهتری دارد. مقادیر افت فشار، هم در کار مدل و هم کار تجربی در همه دبی‌ها از ۱ ml/min تا ۱۸ نزدیک به هم و در محدوده ۰/۰۱ bar تا ۰/۳ تغییر کرد. همچنین نرم‌افزار مورد استفاده نشان داد که در مدل‌سازی واکنش موازی-رقابتی دید-یدت از دقت نسبتاً زیادی برخوردار است.

کلمات کلیدی: اختلاط، میکروکانال، واکنش موازی-رقابتی Villiermaux-Dushman، شاخص تفکیک.

۱- مقدمه

مروری بر مطالعات گذشته در زمینه ساختار و هندسه میکروکانال‌ها بر خصوصیات جریان سیال، نشان می‌دهد که برای بررسی عملکرد اختلاط می‌توان از واکنش‌های مختلفی استفاده کرد. کاشید و همکارانش [۱] در سال ۲۰۱۱، راندمان اختلاط و نیز انرژی مصرفی در شکل‌های مختلفی از میکروکانال‌ها با سطوح مختلف را با استفاده از واکنش موازی-رقابتی دید-یدت به‌صورت آزمایشگاهی بررسی کردند. بدین منظور میکروکانال‌هایی با هندسه و ابعاد مختلف از جنس فولاد ضدزنگ ساخته شد. با استفاده از واکنش موازی-رقابتی دوشمان، نتایج بر اساس شاخص تفکیک تفسیر شد.

ساخت و تولید محصولات شیمیایی در صنایع تولیدکننده مواد شیمیایی ریز و کوچک از جمله داروسازی با استفاده از میکروکانال‌ها، اخیراً شاخه جدیدی در مهندسی واکنش‌های شیمیایی ایجاد کرده است که بیشتر بر انتخاب‌پذیری بالا (تولید پسماند کمتر)، افزایش شدت انجام فرایند و نکات ایمنی تأکید می‌کند [۱-۳]. میکروکانال‌ها سطح مخصوص زیادی را فراهم می‌کنند و بدین ترتیب میزان انتقال حرارت و جرم را در مقایسه با کانال‌ها و رآکتورهای سنتی به‌طور مؤثری افزایش می‌دهند؛ بنابراین، بدیهی است که کوچک‌شدن اندازه کانال‌ها کمک شایانی به افزایش بازدهی واحدهای صنعتی، کاهش مصرف انرژی و کاهش هزینه‌های عملیاتی می‌کند [۴].





واکنش اول یک واکنش خنثی‌سازی است؛ در حالی که واکنش دوم واکنش یدید-یدات است. دو محلول، یکی بافر یون اسید بورات، یدید و یدات و محلول سولفوریک اسید رقیق به میکروکانال مورد مطالعه تزریق شدند. جزئیات واکنش شامل معادله سرعت و مقادیر ثابت سرعت مطابق ذیل است:

$$r_1 = k_1 [\text{H}^+] [\text{H}_2\text{BO}_3^-] \quad (4)$$

$$k_1 = 1 \times 10^{11} \text{ L.mol}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$$

$$r_2 = k_2 [\text{H}^+]^2 [\text{I}^-] [\text{IO}_3^-] \quad (5)$$

$$\text{Log}_{10} k_2 = 9.28105 - 3 / 664 \sqrt{I} \quad (6)$$

$$\text{Log}_{10} k_2 = 8.383 - 1 / 5112 \sqrt{I} + 0.237 I \quad (7)$$

$$I = 1 / 2 \sum_{i=1}^n c_i z_i^2 \quad (8)$$

$$r_3 = r_3^+ - r_3^- = k_3^+ [\text{I}^-] [\text{I}_2] - k_3^- [\text{I}_3^-] \quad (9)$$

$$k_3^+ = 5.9 \times 10^8 \text{ L.mol}^{-1} \cdot \text{s}^{-1} \quad (10)$$

$$k_3^- = 7.5 \times 10^6 \text{ s}^{-1}$$

I تابعی از غلظت و عدد یونی است [7] که مقدار آن با استفاده از رابطه ۸ و مطابق با کار آزمایشگاهی عظیمی و همکاران [۸] برابر $1/0.1393$ در نظر گرفته شده است. با فرض اختلاط ایدئال، اسید به صورت آنی حل می‌شود و یون‌های بورات به‌طور همگن مصرف می‌کنند و بوریک اسید ایجاد می‌شود؛ لذا واکنش دوم اتفاق نمی‌افتد. چنانچه واکنش ایدئال نباشد، اسید با یدید-یدات موجود در محلول واکنش می‌دهد که نهایتاً موجب تولید ید می‌شود؛ بنابراین تولید ید می‌تواند عملکرد اختلاط را توصیف کند. شاخص جدایی X_S به‌عنوان میزان نسبی اسید مصرف‌شده به‌صورت زیر تعیین می‌شود:

$$X_S = \frac{Y}{Y_{ST}} \quad (11)$$

$$Y = \frac{4(C_{I_2} + C_{I_3^-})}{C_{H_3O^+}} \quad (12)$$

$$Y_{ST} = \frac{6C_{IO_3^-}}{6C_{IO_3^-} + C_{H_2BO_3^-}} \quad (13)$$

در این رابطه، Y نشان‌دهنده نسبت مول‌های مصرفی در واکنش دوم به کل مول‌های اسید در خوراک است. Y_{ST} مقدار Y است، در حالتی که تفکیک به‌صورت کامل انجام می‌شود. در دو رابطه بالا زیروند صفر نشان‌دهنده غلظت آن جزء قبل از ورود به میکروکانال است.

رحیمی و همکاران [۵] در سال ۲۰۱۴، در یک کار آزمایشگاهی، اثر اولتراسونیک با فرکانس ۱/۷ MHz بر اختلاط میکرو و ماکرو را در یک سونو راکتور ناپیوسته مطالعه کردند و نتایج آن را با یک راکتور هم‌زن‌دار مجهز به پره راشتون مقایسه کردند. در این کار کیفیت اختلاط میکرو به‌عنوان پاسخ با استفاده از واکنش موازی-رقابتی دوشمان بررسی شد. نتایج نشان داد که در یک توان ورودی یکسان، شاخص جدایش در راکتور هم‌زن‌دار، ۱۰ درصد بیشتر از سونوراکتور بوده است؛ بنابراین سونوراکتور از نظر اختلاط عملکرد بهتری داشته است.

بورن [۶] در سال ۲۰۰۸، برای تعیین میزان اختلاط میکرو، بازه ید را محاسبه کرد تا از نظر کیفی نتایج مفهوم و سازگاری را بیان کند. آن‌ها با انجام آزمایش و انتخاب اندازه‌های هم‌زن‌های مختلف، بازه ید و اختلاط را در مقیاس مولکولی مطالعه کردند. معلوم شد که در بررسی عملکرد کمی واکنش، نیاز به شناخت کامل سینتیک است که معرف غلظت و قدرت یونی مورد استفاده در آزمایش اختلاط است. هیچ‌یک از مدل‌های سینتیکی از مدل‌های واکنش دوشمان نتوانستند این شرایط را برآورده سازند و مدل‌ها تطابق کمی نشان دادند. در همین راستا، او نیاز به مطالعه سینتیک معادله واکنش دوم دوشمان، به‌کارگیری تکنیک‌های مدرن برای واکنش‌های سریع و غلظت مربوط به بررسی اختلاط را مطرح کرده است.

در تحقیق حاضر مدل‌سازی اختلاط میکرو در یک میکروکانال T شکل با سطح مقطع‌های مربعی و دوزنقه‌ای و با استفاده از واکنش موازی-رقابتی یدید-یدات بررسی و مطالعه می‌شود. هندسه، ابعاد و مشخصات جریان‌های مدل شامل دبی و غلظت جریان‌ها برای مدل‌سازی واکنش Villiermaux-Dushman بر اساس مطالعه کاشید و همکاران تنظیم شد. برای انجام مدل‌سازی، بررسی هیدرودینامیک جریان و عملکرد اختلاط از نرم‌افزار COMSOL Multiphysics نسخه ۵،۳ استفاده شد.

۲. سینتیک واکنش Villiermaux-Dushman و شاخص اختلاط [۱]

مطابق ذیل، واکنش موازی-رقابتی دوشمان برای سنجش شاخص اختلاط استفاده شد.

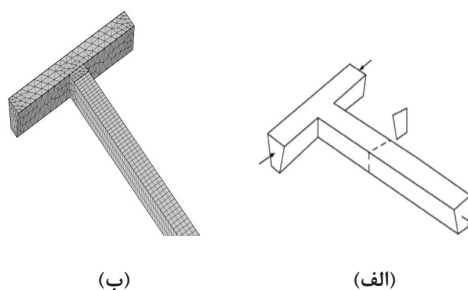


هرچه ید کمتری تولید شود، اختلاط بهتری صورت می‌گیرد. کیفیت اختلاط هم بر اساس شاخص X_S توصیف شد که عددی بین صفر و یک است. هرچه این عدد به سمت صفر نزدیک‌تر باشد، یعنی اختلاط بهتر و هرچه به یک نزدیک‌تر باشد، یعنی اختلاط بدتر بوده یا به عبارتی تفکیک به وجود آمده است. لازم به ذکر است طیف I_3^- در طول موج 353nm برای تعیین میزان غلظت در نظر گرفته شد.

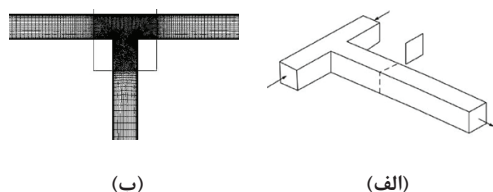
۳. مشخصات محلول و هندسه میکروکانال

هندسه میکروکانال مورد استفاده در کار آزمایشگاهی با سطح مقطع دوزنقه‌ای به طول 75mm و قطر هیدرولیکی $40\text{ }\mu\text{m}$ در نرم‌افزار کامسول تعریف شد (شکل ۱).

مش مورد استفاده دارای 10866 المان در دو نوع مثلثی و مستطیلی منظم است. به‌طور کلی، محدوده مدل به دو بخش تقسیم شد: بخش اول، شامل قسمت‌های ورودی و بخش دوم محل برخورد دو جریان تا کمی بعد از آن در نظر گرفته شد. در این ناحیه دوم، نرخ واکنش و گرادیان غلظت شدید است؛ لذا در این ناحیه از مش مثلثی بدون در نظر گرفتن مش‌های لایه‌های مرزی با تعداد 6066 المان با توجه به اندازه و ابعاد کل شکل میکروکانال‌ها انتخاب شد. نمای هندسه مش‌زده در نرم‌افزار در ورودی و خروجی و نیز محل تلاقی جریان‌ها در میکروکانال در (شکل ۱ و ۲). ب) نمایش داده شده است. برای بررسی عملکرد اختلاط به‌صورت تجربی، آزمایش‌های کاشید و همکاران، مطابق با غلظت‌های اولیه (جدول ۱) برای دی‌های یکسان محلول انجام شد. بدین ترتیب، غلظت‌های دو جریان مورد استفاده با شدت جریان حجمی ثابت در دو سر ورودی میکروکانال برای مدل‌سازی در نظر گرفته شد.



شکل ۱. الف) میکروکانال با سطح مقطع دوزنقه‌ای مورد استفاده کاشید و همکاران [۱]؛ ب) نمای هندسه مش‌زده در نرم‌افزار.



شکل ۲. الف) میکروکانال با سطح مقطع مربعی مورد استفاده کاشید و همکاران [۲]؛ ب) نمای هندسه مش‌زده در نرم‌افزار.

جدول ۱. غلظت‌های مورد استفاده واکنش دهنده‌ها برای مدل‌سازی واکنش Villermaux-Dushman [۱]

	$C_{\text{H}_2\text{BO}_3^-}$ [M]	C_{H^+} [M]	C_{I^-} [M]	$C_{\text{IO}_3^-}$ [M]
ورودی دوم	0.091	0	0.016	0.0033
ورودی اول	0	0.0224	0	0

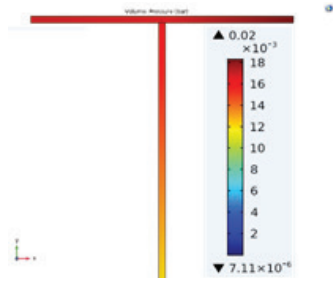
۴. تنظیمات مدل

سیال مورد استفاده در این شبیه‌سازی، حلال آب در نظر گرفته شد. مقادیر مربوط به دانسیته و ویسکوزیته در دما و فشار متناظر برای آب در نرم‌افزار تعیین شد. فشار نسبی اولیه و دما به ترتیب 0 Pa و 300 K به کار گرفته شد. جریان به‌صورت laminar flow در نظر گرفته شد. دی‌های معلوم 10 ml h^{-1} رای اسید و برای یکی از ورودی‌ها ثابت و برای ورودی دیگر به‌صورت افزایشی از یک تا 18 ml min^{-1} استفاده شد. شرایط مرزی برای دو ورودی میکروکانال از نوع velocity inlet و برای خروجی از نوع فشار اتمسفریک انتخاب شد. برای تعریف سینتیک واکنش، معادلات واکنش به‌صورت جداگانه با استفاده از مدل Transport of Concentrated Species و با در نظر گرفتن شرایط مرزی ورودی به‌صورت غلظت و شرایط مرزی خروجی به‌صورت جریان خروجی برای نرم‌افزار تعریف شد. معادلات Incompressible Navier-Stokes برای انتقال ممنتم و جرم سیال و واکنش در حالت پایا، به‌صورت عددی هم‌زمان حل شدند.

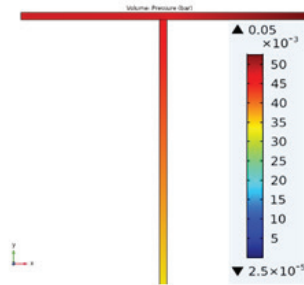
۵. نتایج و بحث

۵.۱. بررسی افت فشار

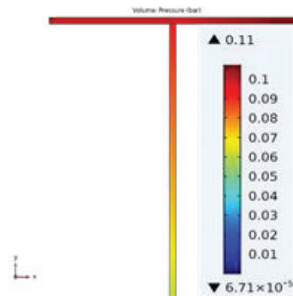
به‌طور کلی، افت فشار یکی از مباحث مهم در حوزه میکروکانال‌ها به شمار می‌رود. افت فشار به‌طور مستقیم با مصرف انرژی در ارتباط است که عمدتاً به دلیل قطر هیدرولیکی کوچک کانال روی می‌دهد. (شکل ۳) پروفایل فشار در دو میکروکانال مورد مطالعه را در ۵ دی مختلف نشان می‌دهد.



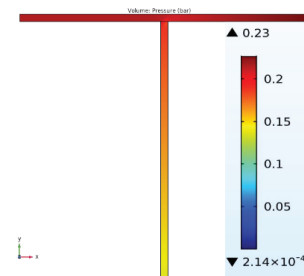
(الف)



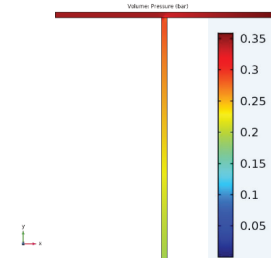
(ب)



(ج)

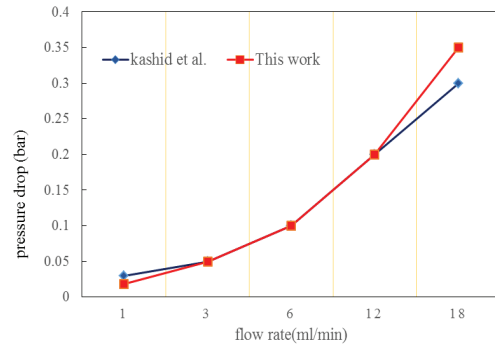


(د)

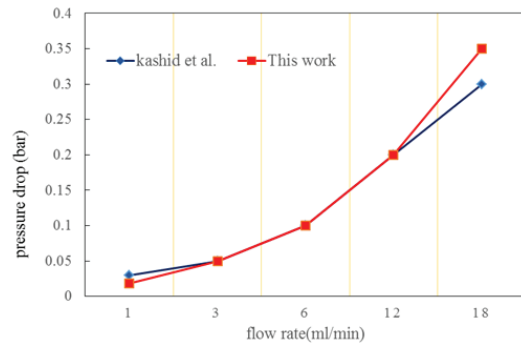


(هـ)

شکل ۴. کانتور فشار (برحسب bar) در طول میکروکانال با سطح مقطع دوزنقه‌ای الف) 1 ml min^{-1} ب) 3 ml min^{-1} ج) 6 ml min^{-1} د) 12 ml min^{-1} هـ) 18 ml min^{-1}



(الف)



(ب)

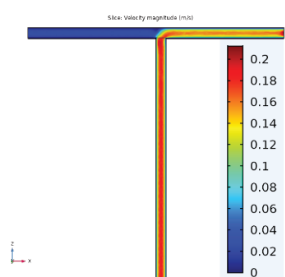
شکل ۳. مقایسه افت فشار کار آزمایشگاهی با نتایج حاصل از مدل برای میکروکانال با سطح مقطع الف) دوزنقه‌ای؛ ب) مربعی.

مطابق (شکل‌های ۳ الف و ب)، در میکروکانال با سطح مقطع مربعی با افزایش دبی از ۱ تا 18 ml/min میزان افت فشار از 0.012 bar تا 0.3 bar به‌طور خطی افزایش می‌یابد. به این ترتیب انرژی مورد نیاز با افزایش دبی به‌طور شایان توجهی افزایش می‌یابد. این در حالی است که میزان افت فشار در آزمایش‌های تجربی از 0.03 bar تا 0.15 bar است. همچنین برای میکروکانال با سطح مقطع دوزنقه‌ای با افزایش دبی افت فشار از 0.18 bar تا 0.35 bar به‌طور خطی افزایش می‌یابد؛ در صورتی که در نتایج تجربی این مقادیر از 0.03 bar تا 0.3 bar تغییر می‌کند. با مقایسه نتایج مدل و نتایج تجربی، نتیجه به‌دست‌آمده این است که مدل از دقت نسبتاً خوبی برخوردار است؛ به‌طوری که افت فشار مدل روند صعودی افت فشار با افزایش دبی را با شبی پی‌پذیرفتنی گزارش می‌دهد. (شکل ۴) کانتورهای افت فشار را برای پنج دبی‌های مختلف گزارش می‌دهد.

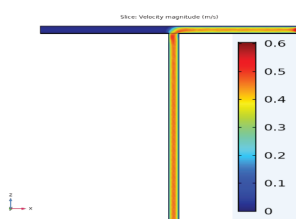


۵.۲. مطالعهٔ پروفایل سرعت

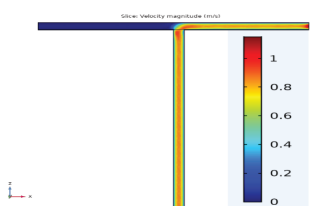
شکل‌های ۵، ۶ و ۷ اثر افزایش دبی ورودی اسید بر پروفایل سرعت روی میکروکانال‌ها با سطح مقطع مربعی و دوزنقه‌ای را نمایش می‌دهد. مطابق این دو شکل، الگوی جریان در دبی‌های مختلف تفاوت قابل‌ملاحظه‌ای با هم دارند. در دبی‌های بالاتر، دبی بیشتری جریان را به سمت عقب در سوی دیگر کانال می‌راند و نقطهٔ تلاقی را تغییر می‌دهد؛ به عبارت دیگر، با تحقیق بر روی گردابه‌ها در دبی‌های مختلف، معلوم می‌شود که با افزایش دبی، تعداد و طول گردابه زیادتر می‌شود. به علاوه بزرگی بردار سرعت در کلیهٔ طول کانال در نزدیکی جداره به صفر و در مرکز به ماکزیمم مقدار می‌رسد. کمترین مقدار سرعت 0.2 ms^{-1} و بیشترین مقدار سرعت به 3 ms^{-1} و برای میکروکانال با سطح مقطع دوزنقه‌ای کمترین مقدار سرعت 0.25 ms^{-1} و بیشترین مقدار سرعت به 4 ms^{-1} می‌رسد. همچنین می‌توان گفت بیشترین مقدار سرعت در نقطهٔ تلاقی و تغییر مسیر جریان است؛ به طوری که پس از عبور از این ناحیه مجدداً کاهش می‌یابد.



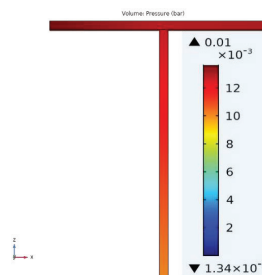
(الف)



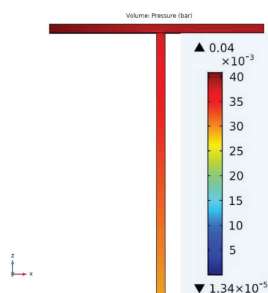
(ب)



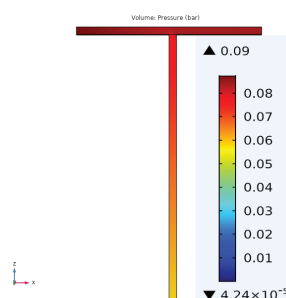
(ج)



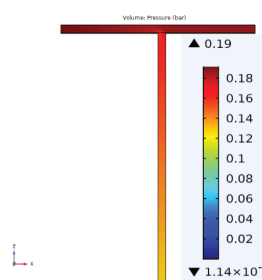
(الف)



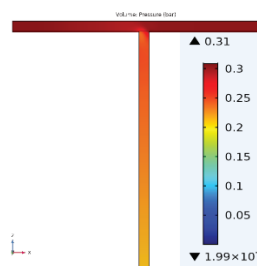
(ب)



(ج)



(د)

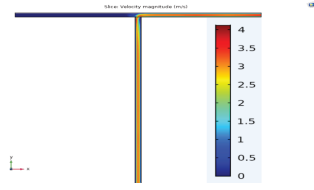


(ه)

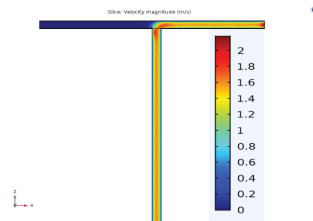
شکل ۵. کانتور فشار (بر حسب bar) در طول میکروکانال مربعی (الف)

۶ml/min (ج) ۳ml/min (ب) ۱ml/min

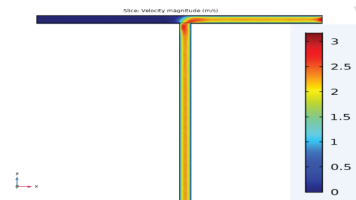
۱۸ml/min (د) ۱۲ml/min (ه)



(ه)

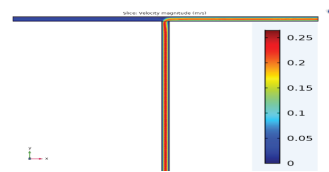


(د)

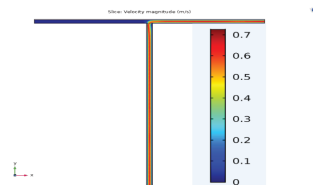


(ه)

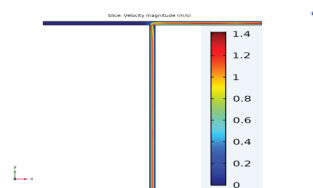
شکل ۶. کانتور سرعت (بر حسب m/s) در طول میکروکانال مربعی
الف) 1 ml min^{-1} (ب) 3 ml min^{-1} (ج) 6 ml min^{-1} (د) 12 ml min^{-1}
ه) 18 ml min^{-1}



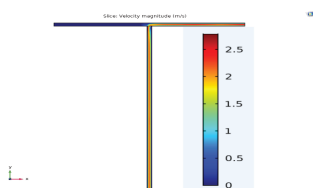
(الف)



(ب)



(ج)

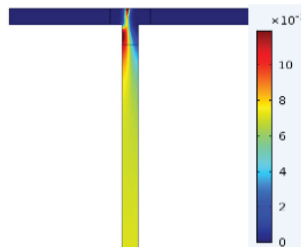


(د)

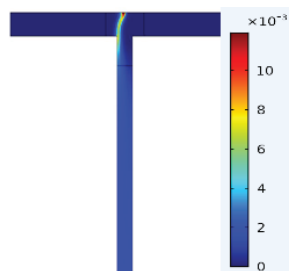
شکل ۷. کانتور سرعت (بر حسب m/s) در طول میکروکانال دوزنقه‌ای
الف) 1 ml min^{-1} (ب) 3 ml min^{-1}
ج) 6 ml min^{-1} (د) 12 ml min^{-1} (ه) 18 ml min^{-1}

۵.۳. اثر دبی بر شاخص جداسازی (X_G)

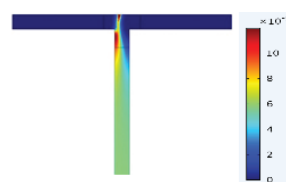
علاوه بر مطالعه اثر دبی بر هیدرودینامیک جریان، اثر دبی بر شاخص تفکیک و میزان اختلاط نیز به کمک مدل سازی مطالعه شده است. (شکل ۸)، شاخص جداسازی را برای میکروکانال دوزنقه‌ای در ۵ دبی مختلف به وضوح نمایش می‌دهد. مطابق شکل، دبی‌هایی بررسی شده‌اند که بتوان در آن‌ها این اثر را به وضوح نمایش داد. همان طور که مشاهده می‌شود، مقادیر شاخص تفکیک در ورودی میکروآکتور صفر است و پس از انجام واکنش مقادیر آن‌ها در محل تلاقی جریان‌ها ظاهر می‌شود.



(الف)



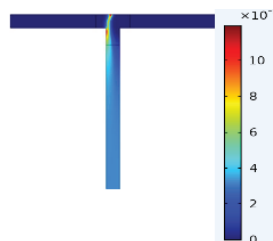
(ب)



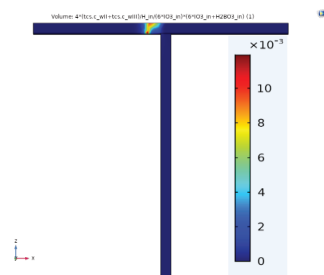
(ج)



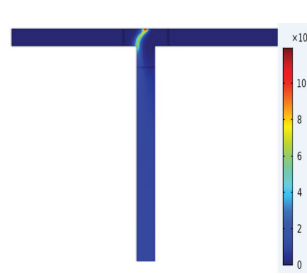
(د)



(د)



(ه)



(ه)

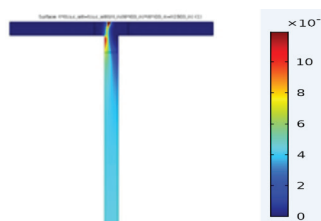
شکل ۹. کانتور شاخص جدایش در طول میکروکانال مربعی
الف) 1 ml min^{-1} ب) 3 ml min^{-1} ج) 6 ml min^{-1} د) 12 ml min^{-1}
ه) 18 ml min^{-1}

شکل ۸. کانتور شاخص تفکیک در طول میکروکانال دوزنقه‌ای
الف) 1 ml min^{-1} ب) 3 ml min^{-1} ج) 6 ml min^{-1} د) 12 ml min^{-1}
ه) 18 ml min^{-1}

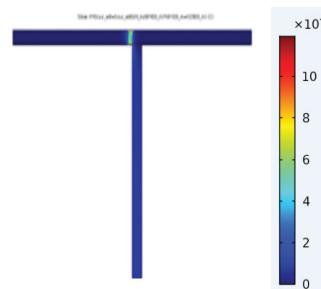
در حالت کلی، این عدد برای میکروکانال با سطح مقطع مربعی در محدوده بین صفر تا 0.1 قرار گرفته است. در دبی 1 ml min^{-1} مقدار شاخص تفکیک در خروجی میکروکانال به 0.02 است، حال آنکه با افزایش دبی به 3 ml min^{-1} و سپس 6 ml min^{-1} مقدار X_s به 0.1 و سپس 0.06 کاهش می‌یابد. تمایل به سمت صفر مؤید آن است که اختلاط به صورت مؤثرتری صورت گرفته است و هرچقدر به سمت عدد 1 میل کند، یعنی تفکیک روی داده است.

همچنین مشاهده می‌شود که بخش اعظم دبی به سمت چپ وارد می‌شود و بخش کمتر آن از سمت چپ وارد می‌شود. مکان تشکیل یون I_3^- در حقیقت نقطه برخورد دو جریان را نمایش می‌دهد. مکان تشکیل I_3^- با افزایش دبی از 1 ml min^{-1} تا 18 ml min^{-1} تغییر می‌کند و به سمت چپ رانده می‌شود. این تغییر به گونه‌ای است که مقدار شاخص جداسازی با افزایش دبی کاهش قابل ملاحظه‌ای می‌یابد. این پدیده را می‌توان به واکنش مقادیر زیادی H^+ با $H_2BO_3^-$ نسبت داد. به عبارت دیگر، می‌توان این گونه تفسیر کرد که با افزایش دبی حجمی، عدد رینولدز افزایش می‌یابد و بدین ترتیب اختلاط مؤثرتری اتفاق می‌افتد. این اثر مطابق با نتایج کاشید و همکاران گزارش شده است.

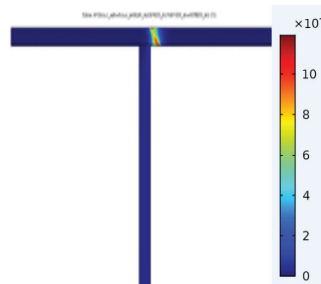
(شکل ۱۰)، مقادیر شاخص جداسازی را در دبی‌های مختلف و مقایسه آن بین نتایج حاصل از مدل و کار



(الف)

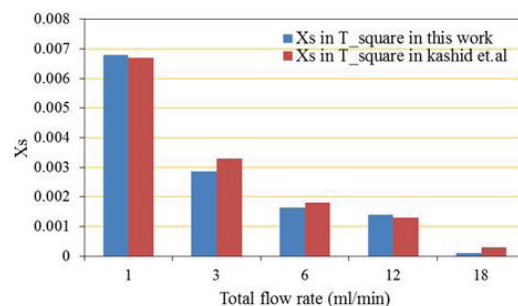


(ب)

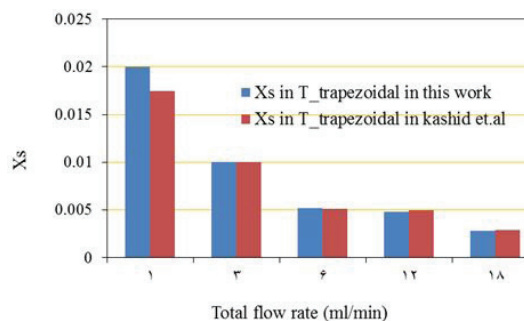


(ج)

آزمایشگاهی صورت گرفته، به طور خلاصه نمایش می دهد که بیانگر توضیحات ذکر شده در فوق است.



(الف)



(ب)

شکل ۱۰. مقایسه شاخص جدایش کار آزمایشگاهی با نتایج حاصل از مدل برای دو میکروکانال: (الف) مربعی؛ (ب) دوزنقه‌ای.

۶. نتیجه گیری

مدل سازی اختلاط میکرو در یک میکروکانال T شکل و با سطح مقطع های مربعی و دوزنقه‌ای و با استفاده از واکنش موازی و رقابتی یدید-یدات مطالعه و بررسی شد. هندسه، ابعاد و مشخصات جریان های مدل شامل دبی و غلظت جریان ها بر اساس مطالعه کاشید و همکاران تنظیم شد. با مقایسه نتایج افت فشار تجربی و مدل سازی، می توان گفت که مدل از دقتی پذیرفتنی برخوردار است. می توان گفت که میکروکانال مربعی در شاخص جدایش به دلیل شدت اختلاط بیشتر و در محل برخورد دو جریان، نسبت به میکروکانال دوزنقه‌ای عملکرد بهتری داشت؛ با اینکه میکروکانال دوزنقه‌ای شکل نیز قطر هیدرولیکی مشابهی با مربعی داشت، عملکرد میکروکانال مربعی بهتر بود. علت این اتفاق می تواند نامتقارن بودن میکروکانال دوزنقه‌ای باشد که منجر به اختلاط ضعیف تری می شود. همچنین معلوم شد که با افزایش دبی از ۱ تا ۱۸ ml min⁻¹ میزان افت فشار برای میکروکانال مربعی از ۰/۱۲ bar تا ۰/۳ bar و افت فشار برای میکروکانال دوزنقه‌ای از ۰/۱۸ bar تا ۰/۳۵ bar است و به طور خطی افزایش می یابد. علاوه بر مطالعه بر

هیدرودینامیک جریان، اثر دبی بر شاخص تفکیک و میزان اختلاط نیز به کمک مدل سازی ارزیابی شد. شاخص های جداسازی در ۵ دبی مختلف نشان داد که میزان شاخص جداسازی با افزایش دبی کاهش قابل ملاحظه ای می یابد. این مقادیر برای میکروآکتور با سطح مقطع مربعی در محدوده ۰/۰۰۱ - ۰/۰۶۷ و در سطح مقطع دوزنقه‌ای در محدوده ۰/۰۲۸ - ۰/۰۲ قرار دارد. مکان تشکیل I₃⁻ با افزایش دبی از ۱ ml min⁻¹ تا ۱۸ ml min⁻¹ تغییر می کند و به سمت چپ رانده می شود. این پدیده را می توان به واکنش مقادیر زیادی از H⁺ با H₂BO₃⁻ نسبت داد. به عبارت دیگر، می توان این گونه تفسیر کرد که با افزایش دبی حجمی، عدد رینولدز افزایش می یابد و بدین ترتیب اختلاط مؤثرتری اتفاق می افتد.

۷. مراجع

- [1].Kashid, M., Renken A., and Kiwi-Minsker L. (2011), "Mixing efficiency and energy consumption for five generic microchannels designs", Chemical Engineering Journal. (167), pp 436-443.
- [2].Ehrfeld W., Hessel V., and Löwe H. (2000), "Microreactors", Wiley-VCH Verlag GmbH, Weinheim.
- [3].Hessel,V., Renken,A., Schouten, J.C. and Yoshida, J. I. (2009), "Micro Process Engineering: A Comprehensive Handbook", Vols. 1-3, Wiley-VCH Verlag GmbH, Weinheim.
- [4].Hessel V., Lowe H., and Schonfeld F. (2005), "Micromixers-a review on passive and active mixing principles", Chem. Eng. Sci., 60, pp 2479-2501.
- [5].Rahimi M., Azimi N., Parvizian F., and Alsairafi A.A. (2014), "Computational fluid dynamics modeling of micromixing performance in presence of microparticles in a tubular sonoreactor", Comput. Chem. Eng. 60, 403-412.
- [6].Bourne J. R. (2008), "Comments on the iodide/iodate method for characterising micromixing", Chemical Engineering, 140, pp 638-641.
- [7].Falk L., and Commenge J.M. (2010), "Performance comparison of micromixers". Chem Eng Sci, 65, pp 405-411.
- [8].Rahimi M., Azimi N. Parsamogadam M. A, Rahimi A., Masahy M. M. (2017), "Mixing performance of T, Y, and oriented Y-micromixers with spatially arranged outlet channel: evaluation with Villermaux/Dushman test reaction", Microsyst Technol, pp 3117-3130.

Modeling of the Parallel-Competitive Reaction of Villermaux-Dushman in Selected Microreactors Using COMSOL Software

Peyvand Valeh-e-Sheyda*, Majid Yarmohammad Touski

Chemical Engineering Department, Kermanshah University of Technology, Kermanshah, Iran.

Corresponding Author, Email: p.valeh-sheyda@kut.ac.ir

Abstract

A significant part of the chemical process is the mixing and mixing process. In this research, it has been tried to simulate the mixing of the Villermaux-Dushman reaction using the COMSOL Multiphysics simulation software for two microchannels with specified square and trapezoidal dimensions to achieve the minimum output separation index. Experimental data were used for the inputs to the software. The effect of volumetric flow on the X_s , separation index, as a measure of mixing quality and the drop in microchannel pressure was investigated. The results of modeling show that for all flow rates, the T-shaped micro-channel with square cross-section with separation index close to zero (0.0067-0.0001) performs better than T-shaped micro-channel with trapezoidal cross-section. The pressure drop, both in model work and experimental work, was varied in the range of 0.01 to 0.3 bar by changing the flow rate from 1 to 18 ml/min, in discharge. The pressure, velocity, and separation index contours were compared for each microchannel. Also, the software used has shown that it has a fairly high accuracy in modeling the parallel reaction of iodide-iodate.

Keywords: *Mixing, microchannel, parallel-competitive reaction of Villermaux-Dushman, Segregation index.*

