



Simulation of Effective Parameters on Desalination Water Using Capacitive Deionization Method

A. Abolghasemi, S. Seddighi*

Department of Mechanical Engineering, K. N. Toosi University of Technology, Tehran, Iran

ABSTRACT: Capacitive deionization is one of the membrane methods available for water desalination that works based on ion exchange. In capacitive ionization systems, saline water passes through a cell that has electrodes with a high contact surface. By applying a voltage, the ions are absorbed under an electric field on the surface of the porous electrodes, as a result of which the salinity of the water is reduced and freshwater is removed from the other side of the system. Recently, researchers have proposed various models for predicting the behavior of desalination plants by capacitive deionization. The model used for the simulation is a one-dimensional transfer equation based on the transfer theory of porous and ball-Chapman-Stern electrodes to predict the output water concentration and identify the parameters affecting the performance of the capacitive deionization system. This study aimed to investigate the water desalination efficiency using changes in the operating parameters of capacitive deionization systems. The parameters studied in this study included fluid flow, applied electric current, input concentration, porosity, electrode cross-section, and electrode length. The results showed that the most effective parameter in improving the performance of the device is applied electric current so that with a fifty percent increase in applied electric current, the percentage of water desalination increased by about 72%, and the time required to achieve maximum water desalination decreased by about 76%.

Review History:

Received: Mar. 19, 2021
Revised: May, 31, 2021
Accepted: Jun. 19, 2021
Available Online: Jul. 17, 2021

Keywords:

Capacitive deionization
Ion exchange membrane
Flow-through configuration
Water desalination
Numerical simulation

1- Introduction

Capacitive deionization uses an electrochemical method for separating salt from aqueous solutions producing sweet water by utilizing the absorption of excess ions when the electrodes are charged by an external power supply [1]. The capacitive deionization is performed in a cycle consisting of two stages: the first stage being the electrical absorption of ions or the charge of purification of water in which the ions are immobilized and stopped at the pair of porous carbon electrodes. The next step is the release of ions from the electrodes, where takes place and the electrodes' desorption are regenerated [2]. Suss et al. [3] introduced the method of current flow through the electrode, in which direct current passes through the electrodes. Using the theory of macroscopic porous electrodes, they showed that the Flow-through configuration method would be able to significantly reduce the desalination time and could desalinate water with higher salinity.

In capacitive deionization, water is desalinated by storing ions in electrical dual layers in carbon pores. Biesheuvel et al. [4] proposed a dynamic method involving a constant electric charge in the pores and showed this model can predict different laboratory observations. Their method also predicted some high-salt operating regimes.

Jande and Kim [5] developed a mathematical model of transient absorption to predict the minimum effluent

concentration and charge time in the cell at constant voltage, using the charge and current variables, such as potential use, fluid flow, and electrode capacity. In subsequent studies, Jande and Kim [6] proposed a short response model to describe the changes in effluent concentration over time in the constant flow mode of colleagues. Yatian Qu et al. [7] proposed a model for describing the desalination performance of the Flow-through configuration system by focusing on understanding and characterizing the effects of mass absorption and transfer coupling. Their work is the first model that can be used to predict the concentration of output in the water system of capacitive sweeteners by considering the interaction of mass transfer, electric charge, and velocity.

2- Methodology

Eq. (1) represents the general form of the one-dimensional transfer equation for the simulation of the ion deionization cell, of which Fig. 1 is an overview, based on the Gouy-Chapman-Stern transfer electrode theory [7].

$$\frac{\partial c_e}{\partial t} + \frac{2Q}{P_M V_0} (c_e - c_0) = - \frac{2\lambda I_0}{P_M V_0 F} \quad (1)$$

*Corresponding author's email: Sadegh.seddighi@kntu.ac.ir



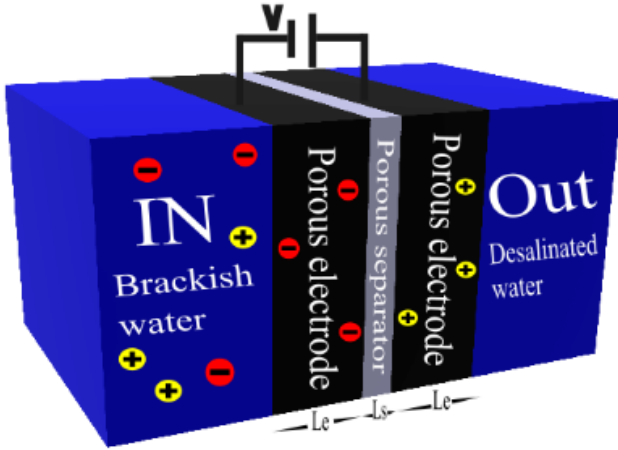


Fig. 1. Schematic diagram of capacitive deionization cell

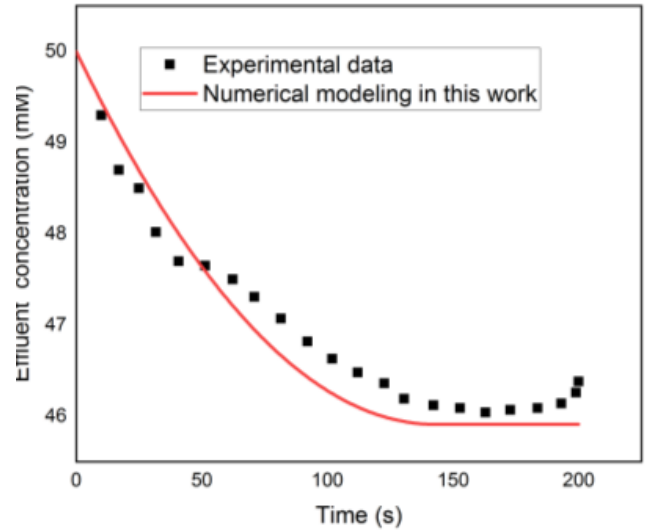


Fig. 2. Comparison of the Experiment [7] and numerical results based on the data in Table 1

The value can be obtained from Eq. (2)

$$\lambda \approx \frac{I_0 t}{8P_m V_e c_0 F} \quad (2)$$

Eqs. (3) and (4) is the response of Eq. (1) to the values and will be as follows

$$c_e(t) = c_0 - \left(\frac{B}{A^2}\right)(1 - e^{-At}) + \left(\frac{A}{B}\right)t \quad (3)$$

$$c_e(t) = \left(\frac{C}{A}\right) + K_1(e^{-At}) + c_0 \quad (4)$$

Where the values of the parameters A and B and C are obtained from Eq. (5) below.

$$A = \frac{2Q}{P_M V_0}, \quad B = -\frac{I_0^2}{4P_M P_m V_0 V_e c_0 F^2} \quad (5)$$

$$C = -\frac{2I_0}{P_M V_0 F}$$

The percentage of changes in the concentration of the effluent water concentration is defined as Eq. (6).

$$\%C = \frac{C_o - C_i}{C_o} \times 100 \quad (6)$$

3- Results and Discussion

Fig. 1 shows a schematic diagram of a capacitive deionization cell. The electrode material used in the laboratory model is a hyperical integrated carbon airgel. To confirm the results obtained from numerical solutions, these results must be validated. In this study, the results of the numerical solution have been validated by laboratory research conducted by Yatian Qu et al. This is a validation for the values given in Table 1. The process of the graph obtained from the results shows good coordination with the laboratory data, the results of which can be seen in Fig. 2.

This study aims to investigate the efficiency of water desalination using changes in system operating parameters. The parameters studied in this study include fluid flow, applied electric current, input concentration, porosity, electrode cross-section, and electrode length. Figs. 3 to 8 shows the concentration of output water with changes in system operating parameters.

Table 1. Parameter values used in this work

Parameter	description	value	unit
P_M	macropore porosity	0.57	
P_m	micropore porosity	0.1	
V_0	entire cell volume	1.57	cm ³
L_e	thickness of electrode	300	μm
L_s	thickness of separator	100	μm
V_e	volume of electrode	1.3	cm ³
c_0	feed salt concentration	50	mM
I_0	charging current	50	mA
F	Faraday constant	96485	sA/mol
Q	flow rate	7.7	ml/min

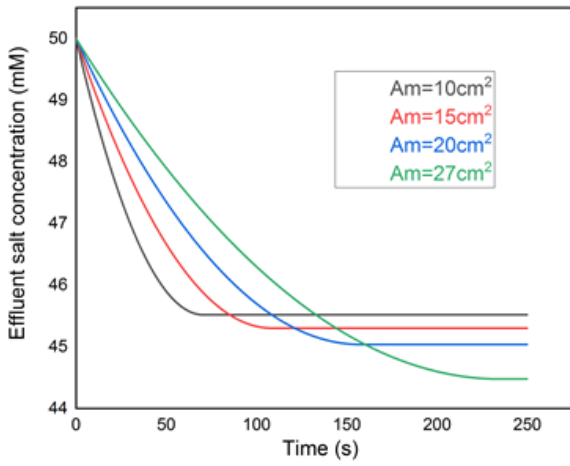


Fig. 3 Diagram of changes in output water concentration over time, when the cross section is variable

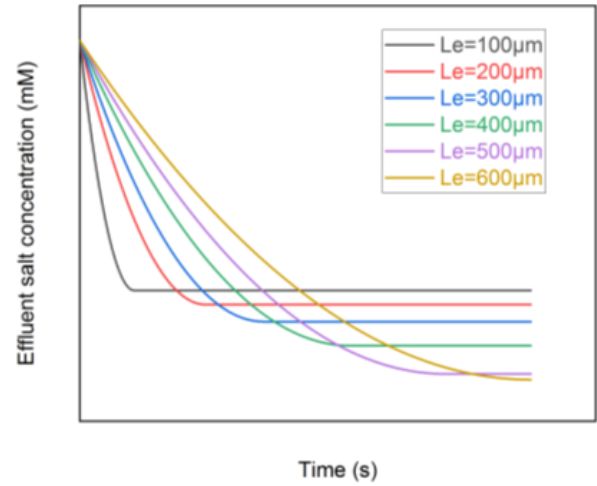


Fig. 6. Diagram of changes in output water concentration over time for different electrode thicknesses

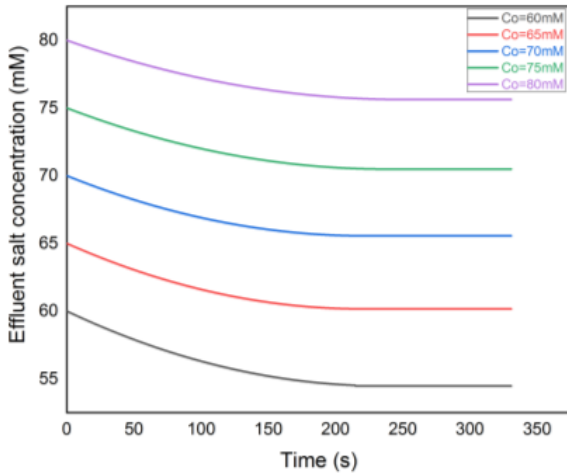


Fig. 4. Diagram of changes in output water concentration over time, when the input concentration is variable

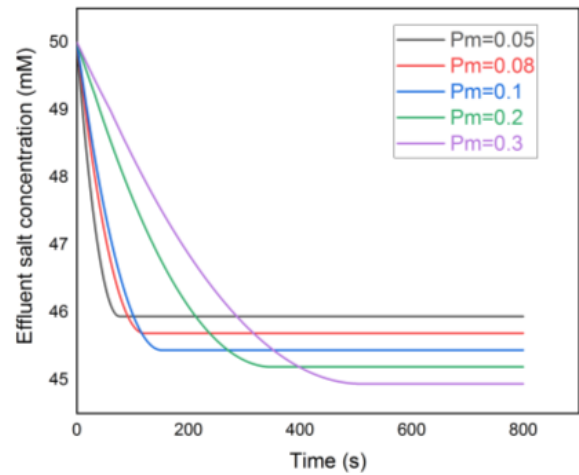


Fig. 7. Diagram of changes in output water concentration over time, when porosity is variable

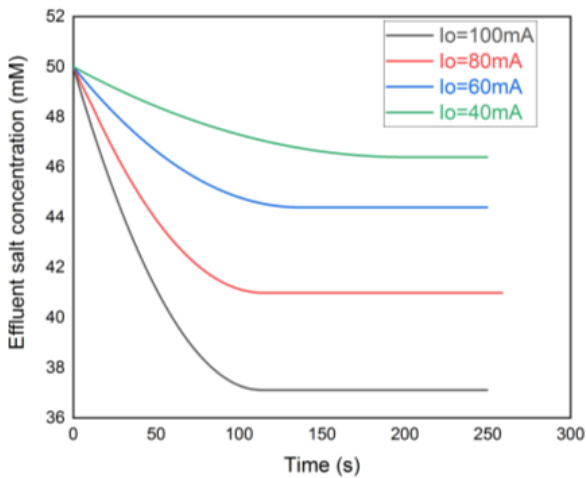


Fig. 5. Diagram of changes in output water concentration over time, when the operating flow of the device is variable

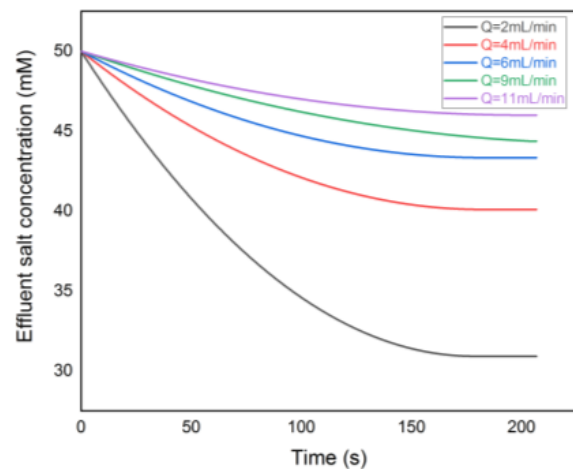


Fig. 8. Diagram of changes in output water concentration over time, when the flow rate is variable

A modeling tool is developed in this paper for the simulation of capacitive deionization systems. The model predicts the efficiency of water desalination and the time required to achieve maximum water desalination. The increase in the efficiency of water desalination and the reduction of time required to achieve maximum water desalination are studied to assess the performance of the device and the optimal operation of the device. The results show that the most effective parameter in improving the Charging current performance by increasing 1.5 times the Charging current flow, the water desalination percentage increased by 72%, and the time required to reach maximum water desalination decreased by 76%.

References

- [1] S. Porada, R. Zhao, A. van der Wal, V. Presser, P.M. Biesheuvel, Review on the science and technology of water desalination by capacitive deionization, *Progress in Materials Science*, 58(8) (2013) 1388-1442.
- [2] M. Anderson, A. L. Cudero, J. Palma, Capacitive deionization as an electrochemical means of saving energy and delivering clean water. Comparison to present desalination practices: Will it compete?, *Electrochimica Acta*, 55 (2010) 3845-3856.
- [3] M.E. Suss, T.F. Baumann, W.L. Bourcier, C.M. Spadaccini, K.A. Rose, J.G. Santiago, M. Stadermann, Capacitive desalination with flow-through electrodes, *Energy & Environmental Science*, 5(11) (2012) 9511-9519.
- [4] P.M. Biesheuvel, H.V.M. Hamelers, M.E. Suss, Theory of Water Desalination by Porous Electrodes with Immobile Chemical Charge, *Colloids and Interface Science Communications*, 9 (2015) 1-5.
- [5] Y.A.C. Jande, W.S. Kim, Predicting the lowest effluent concentration in capacitive deionization, *Separation and Purification Technology*, 115 (2013) 224-230.
- [6] Y. Jande, W.-S. Kim, Desalination using capacitive deionization at constant current, *Desalination*, 329 (2013) 29-34.
- [7] Y. Qu, P.G. Campbell, A. Hemmatifar, J.M. Knipe, C.K. Loeb, J.J. Reidy, M.A. Hubert, M. Stadermann, J.G. Santiago, Charging and Transport Dynamics of a Flow-Through Electrode Capacitive Deionization System, *The Journal of Physical Chemistry B*, 122(1) (2018) 240-249.

HOW TO CITE THIS ARTICLE

A. Abolghasemi, S. Seddighi, *Simulation of Effective Parameters on Desalination Water Using Capacitive Deionization Method*, *Amirkabir J. Mech. Eng.*, 53(11) (2022) 1401-1404.

DOI: 10.22060/mej.2021.19769.7104





شبیه‌سازی اثر پارامترهای مؤثر در نمک‌زدایی آب به روش یون‌زدایی خازنی

ابوالقاسم ابوالقاسمی، صادق صدیقی*

دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی خواجه نصیرالدین طوسی، تهران، ایران.

تاریخچه داوری:

دریافت: ۱۳۹۹/۱۲/۲۹
بازنگری: ۱۴۰۰/۰۳/۱۰
پذیرش: ۱۴۰۰/۰۳/۲۹
ارائه آنلاین: ۱۴۰۰/۰۴/۲۶

کلمات کلیدی:

یون‌زدایی خازنی
غشای تبادل یونی
پیکربندی درون الکترو
نمک‌زدایی آب
شبیه‌سازی عددی

خلاصه: یون‌زدایی خازنی یکی از روش‌های غشایی موجود برای نمک‌زدایی آب می‌باشد که بر اساس تبادل یونی کار می‌کند. در سیستم‌های یون‌زدایی خازنی، آب شور از درون سلولی عبور می‌کند که دارای الکترودهایی با سطح تماس زیاد است. با اعمال ولتاژ، یون‌ها تحت میدان الکتریکی در سطح الکترودهای متخلخل جذب می‌شوند، در نتیجه این عمل، میزان شوری آب کاهش یافته و آب شیرین از سمت دیگر سیستم خارج می‌گردد. اخیراً پژوهشگران به ارائه مدل‌های مختلف برای پیش‌بینی رفتار دستگاه آب شیرین‌کن به روش یون‌زدایی خازنی پرداختند. مدل مورد استفاده برای شبیه‌سازی، یک معادله انتقال یک بعدی می‌باشد که بر اساس تئوری انتقال الکترودهای متخلخل و گوی-چاپمن-استرن به منظور پیش‌بینی غلظت آب خروجی و شناسایی پارامترهای مؤثر در عملکرد سیستم یون‌زدایی خازنی توسعه پیدا کرد. هدف این پژوهش بررسی راندمان شیرین‌سازی آب با استفاده از تغییرات پارامترهای کاری سیستم‌های یون‌زدایی خازنی است. پارامترهای مورد بررسی در این پژوهش شامل دبی سیال، جریان الکتریکی اعمالی، غلظت ورودی، تخلخل، سطح مقطع الکتروود و طول الکتروود بود. نتایج نشان دادند که مؤثرترین پارامتر در بهبود عملکرد دستگاه جریان الکتریکی اعمالی می‌باشد، به طوری که با افزایش پنجاه درصدی جریان الکتریکی اعمالی، درصد شیرین‌سازی آب حدود ۷۲ درصد افزایش و زمان لازم برای رسیدن به حداکثر شیرین‌سازی آب حدود ۷۶ درصد کاهش یافت.

۱- مقدمه

خازنی^۱، هیدراته کردن گاز^۲، انجماد^۳ و آب‌شیرین‌کن‌های خورشیدی نیز هر یک در مقیاس آزمایشگاهی و حتی تجاری به بازار عرضه شدند [۲]. سایر تکنولوژی‌های جانبی نیز که در برخی موارد در کنار روش‌های اصلی مورد استفاده قرار می‌گیرند عبارتند از: اولترافیلتراسیون^۴، نانوفیلتراسیون^۵ و فیلترهای یونی^۶. یون‌زدایی خازنی بیشتر جهت نمک‌زدایی آب‌های شور و نیمه شور مورد توجه می‌باشند. با این حال در جهت رفع آلاینده‌های یونی مانند فلزات سنگین، نیترات، آمونیم نیز استفاده می‌شود. این سیستم‌ها به ولتاژهای بالا نیاز ندارند، مصرف انرژی در آن‌ها کم می‌باشد، فشار کاری سیستم پایین است، سریع‌تر هستند و قابلیت دست یافتن به غلظت‌های پایین را به ازای هر بار شارژ دارند [۳].

یون‌زدایی خازنی یک روش کنترل شده الکتروشیمیایی است که با بهره‌گیری

فناوری‌های تجاری نمک‌زدایی در گذشته عموماً شامل فرایندهای حرارتی مانند تقطیر ناگهانی چند مرحله‌ای^۱ و تقطیر مؤثر چند مرحله‌ای^۲ و فرآیندهای جداسازی غشایی همانند اسمز معکوس^۳ بودند [۱]. بعدها واحدهای نمک‌زدایی که ترکیبی از فرآیندهای حرارتی و غشایی به صورت یکپارچه بودند نیز به میان آمدند. علاوه بر این فرآیندها، روش‌هایی مانند تقطیر تراکمی تبخیری^۴، الکترودیالیز^۵، الکترودیالیز معکوس^۶ و تکنولوژی‌های جدید مختلفی نظیر اسمز مستقیم^۷، تقطیر غشایی^۸، یون‌زدایی

- 1 Multi-Stage Flash Distillation (MSF)
- 2 Multi-Effect Distillation (MED)
- 3 Reverse Osmosis (RO)
- 4 Thermal Vapor Compression (TVS)
- 5 Electrodialysis (ED)
- 6 Electrodialysis Reversal (ER)
- 7 Forward Osmosis (FO)
- 8 Membrane Distillation (MD)

* نویسنده عهده‌دار مکاتبات: Sadegh.seddighi@kntu.ac.ir



بار را در یون‌زدایی‌خازنی بررسی کردند، آن‌ها یک روش دو بعدی گذرا را برای بدست آوردن دینامیک جذب و دفع در سل‌های جریان عبوری از بین الکتروود^۲ توسعه و حل نمودند. آن‌ها از این روش برای مطالعه جذب و دفع یون‌ها استفاده کردن، همچنین یک نمونه آزمایشگاهی سل جریان عبوری از بین الکتروود را برای اندازه‌گیری نمک جذب شده و بار الکتریکی که تابعی از ولتاژ خارجی می‌باشد، ساخته و نتایج دفع و جذب یون‌ها در گام زمانی مختلف با جریان ثابت و ولتاژ ثابت را ارائه دادند. آن‌ها هم چنین نتایج حاصل از نمک‌زدایی تحت تأثیر غلظت‌های مختلف ورودی را ارائه دادند و نشان دادند در هر دو مورد انتقال الکترون‌ها در نهایت ناچیز و انتقال یون‌های پخش شده موجب کاهش نمک‌زدایی می‌شود. گایز و همکاران [۱۱] یک روش یک بعدی اصلاح شده بر اساس نظریه الکتروودهای چندگانه دوانان و به کار گرفتن شرایط مرزی ساده حاصل از قواعد مقیاس پذیری، ارائه دادند، که نمک‌زدایی با روش جریان عبوری از درون الکتروود را توصیف می‌کند و نتایج حاصل را با داده‌های به‌دست آمده از سل ساخته شده آزمایشگاهی مقایسه کردند، داده‌های به دست آمده مانند: حجم میکرومنافذ، جذب انرژی و ظرفیت لایه سخت به خوبی تطبیق داده شد. همچنین این روش غلظت نمک جریان خروجی و جریان سلی به دست آمده از داده‌های آزمایشگاهی را به خوبی توصیف می‌کند. بنابراین آن‌ها ادعا کردند که سل جریان عبوری از درون الکتروود را می‌توان بر خلاف سل‌های دیگر، که نیاز به مدل‌سازی دوبعدی دارند، با مدل‌سازی یک بعدی، به خوبی توصیف نمود.

در یون‌زدایی خازنی، آب با ذخیره‌سازی یون‌ها در لایه‌های دوگانه الکتریکی موجود در منافذ کربنی نمک‌زدایی می‌شود، بیشیوول و همکاران [۱۲] یک روش دینامیک پویا ارائه دادند که شامل شارژ الکتریکی ثابت^۳ در منافذ است و نشان دادند که این مدل می‌تواند مشاهده‌های آزمایشگاهی مختلف را پیش‌گویی کند. روش آن‌ها همچنین برخی رژیم‌های عملیاتی با جذب بالای نمک که تاکنون کشف نشده بود را پیشبینی کرد. امیت و همکاران [۱۳] تئوری اثر انتقال سطح بر دینامیک شارژ سل یون‌زدایی خازنی را ارائه دادند، آن‌ها با شبیه‌سازی، احتمال تأثیر انتقال سطح را در فرآیند یون‌زدایی خازنی توضیح دادند. آن‌ها مشاهده نمودند در برخی از شرایط مدل‌ها، این انتقال سطح موجب سریع شدن فرآیند شارژ می‌شود، اما برخلاف تصور افزایش اضافی این انتقال موجب کاهش سرعت در دیگر شرایط مدل می‌شود. انتقال سریع و مؤثر یون‌ها بین محلول آبی و الکتروودهای متخلخل از اهمیت زیادی در برخی از کاربردها مانند ذخیره انرژی الکتریکی در ابر خازن‌ها،

از جذب یون‌های اضافی در لایه‌های دوگانه الکتریکی که یک ناحیه مرزی بین الکتروود و محلول است، هنگامی که الکتروودها توسط منبع خارجی تأمین برق شارژ می‌گردد، نمک را از محلول‌های آبی حذف و آب را تصفیه می‌کند. حال، هنگامی که الکتروود مساحت سطح مخصوص بالایی داشته باشد، این یون‌های اضافی می‌توانند از نظر جرم نمک جذبی بر یک واحد جرمی از الکتروود مقدار زیادی داشته باشند. این عامل فرآیند جذب الکتروودی را برای تصفیه آب مناسب و مورد قبول واقع می‌سازد [۴]. چرخه فرآیند یون‌زدایی خازنی شامل دو مرحله است، مرحله اول جذب الکتریکی یون یا باردار کردن به منظور خالص سازی آب است که یون‌ها در جفت الکتروودهای کربن متخلخل بی حرکت و ایستا می‌شوند. مرحله بعد آزادسازی یون‌ها از الکتروودها است که عمل واجذب رخ داده و الکتروودها احیا می‌شوند. نکته بسیار مهم در روش یون‌زدایی خازنی این است که اختلاف پتانسیل الکتریکی نباید به هیچ وجه به نقطه‌ای برسد که موجب شکسته شدن پیوندهای بین اتم اکسیژن و هیدروژن آب شود [۵]. مطالعات اولیه بر روی فرآیند یون‌زدایی خازنی به اواسط دهه ۶۰ و اوایل دهه ۷۰ برمی‌گردد. مفهوم فرآیند یون‌زدایی خازنی اولین بار توسط کاتودل و همکاران ارائه گردید که در آن از الکتروودهای کربن متخلخل ساخته شده از پودر کربن فعال استفاده شد [۶]. پس از آن جانسون و ونولیا [۷] این فرآیند را به عنوان یک فرآیند برگشت‌پذیر بررسی نمودند. تحقیقات این پژوهشگران به صورت تجربی و نظری انجام پذیرفت و بر روی جنس‌های مختلف الکتروود آزمایش انجام گرفت. تحقیقات فشرده‌ای که توسط گروه جانسون انجام پذیرفت، در نهایت به دلیل عدم ثبات و پایداری الکتروودها، به‌خصوص آند متوقف و ناتمام ماند. به هر روی ارزیابی‌های مقدماتی هزینه، توسط گروه جانسون نشان داد فرآیند یون‌زدایی خازنی به‌عنوان یک فرآیند کارا و کم هزینه می‌تواند برای نمک‌زدایی از آب مطرح گردد. در سال ۱۹۷۱ جانسون و نیومن [۸] تئوری انتقال یون در الکتروودهای کربن متخلخل و ذخیره یون براساس یک مکانیزم خازنی را معرفی کردند. ساس و همکاران [۹] روش جریان عبوری از درون الکتروود^۱ را معرفی کردند، که در آن جریان مستقیم از درون الکتروودها عبور می‌کنند. با استفاده از نظریه الکتروودهای متخلخل ماکروسکوپی، آن‌ها نشان دادند که روش جریان عبوری از درون الکتروود قادر خواهد بود، زمان نمک‌زدایی را به طور قابل توجه‌ای کاهش دهد و می‌تواند آب با شوری بیشتری را نمک‌زدایی کند.

همتی‌فر و همکاران [۱۰] کوپلینگ انتقال سیال، بار و همچنین ظرفیت

2 Flow-Between (FB)

3 Immobile chemical charge

1 (FTE) Flow-Through Electrode

تمرکز بر فهم و مشخصه‌یابی آثار کوپل‌شدگی جذب و انتقال جرم ارائه دادند. کار آن‌ها اولین مدلی است که می‌توان با در نظر گرفتن اثر متقابل انتقال جرم، بار الکتریکی و سرعت، غلظت خروجی را در سیستم آب شیرین‌کن‌های خازنی پیش‌بینی کرد. در نتیجه با توجه به بررسی‌ها انجام شده دریافتیم که بهترین مدلی که تا کنون برای شبیه‌سازی یون‌زدایی خازنی ارائه شده مدل یاتیان کو و همکاران می‌باشد. چیزی که تا کنون توسط پژوهشگران پیشین مورد بررسی قرار نگرفت، بررسی راندمان با تغییر پارامترها بود، نوآوری این پژوهش بررسی راندمان نمک‌زدایی آب با استفاده از تغییرات پارامترهای کاری سیستم و یافتن موثرترین آن است. پارامترهای مورد بررسی در این پژوهش شامل دبی سیال، جریان الکتریکی اعمالی، غلظت ورودی، تخلخل، سطح مقطع الکترود و طول الکترود می‌باشد.

شکل ۱ نمای کلی از سل نمک‌زدایی آب به روش یون‌زدایی خازنی از طریق ساختار جریان عبوری از درون الکترود می‌باشد. همان طور که در این شکل، به طور شماتیک مشخص است، آب شور از سمت چپ که حاوی یون‌های مثبت و منفی است وارد الکترود می‌شود و بعد از جذب در الکترودها با بارهای ناهمنام نمک‌زدایی شده و از سمت راست خارج می‌شود. هدف در این پژوهش شبیه‌سازی عددی نمک‌زدایی آب به روش یون‌زدایی خازنی برای بررسی پارامترهای مؤثر در بازده می‌باشد. برای این منظور مدل‌های ریاضی مختلفی برای شبیه‌سازی ارائه شد، مدلی که در این پژوهش از آن استفاده می‌شود مدلی است که یاتیان کو و همکاران ارائه دادند. نحوه شبیه‌سازی به این صورت بوده است که ابتدا با استفاده از معادلات حاکم که با استفاده از نرم‌افزار فرترن حل شده و سپس با تغییرات پارامترهای موجود در معادله، به بررسی درصد تغییرات غلظت خروجی آب و زمان نمک‌زدایی به عنوان دو عامل مؤثر در بازده پرداخته شد.

۲- روش حل

رابطه (۱) [۱۹] شکل کلی معادله انتقال یک بعدی مورد استفاده شده می‌باشد که بر اساس تئوری انتقال الکترودهای متخلخل^۲ و گوی-چاپمن-استرن به منظور پیش‌بینی غلظت آب خروجی و شناسایی پارامترهای مؤثر در عملکرد سیستم یون‌زدایی خازنی می‌باشد. فرضیات لازم برای حل مساله عبارتند: یکنواخت بودن تخلخل در تمام سطوح الکترود، رقیق بودن محلول و متقارن بودن پخش یون درون آب می‌باشد [۱۹].

نمک‌زدایی و تطهیر آب با یون‌زدایی خازنی و استخراج انرژی با استفاده از شوری برخوردار است.

بیشوول و بازانت [۱۴]، یک تئوری یکپارچه برای شارژ خازنی و نمک‌زدایی با الکترودهای متخلخل ایده‌آل قطبی، که در محدوده‌ی لایه‌های دوگانه معتبر بودند ارائه دادند. آن‌ها این تئوری را برای یک نمونه رقیق، متقارن و الکترودهای دوگانه با استفاده از مدل لایه‌های دوگانه، که فرمول‌های ساده‌ی جذب نمک و شارژ خازنی آن برای هر قسمت از لایه‌های دوگانه در دسترس است نشان دادند. آن‌ها مدل کامل و گوی-چاپمن-استرن^۱ را به صورت عددی برای یک پارامتر مؤثر در سیستم یون‌زدایی خازنی حل کردند، و سپس مدل کاهش یافته‌ای برای دو رژیم محدود با دو مقیاس زمانی متفاوت بدست آوردند، در حالت ابر خازن ولتاژ کم یا/و زمان اولیه، الکترودهای متخلخل مانند یک خط انتقال عمل می‌کند، معادله نفوذ خطی برای پتانسیل الکتروداستاتیکی کنترل می‌شود، در حالت نمک‌زدایی ولتاژ بزرگ و زمان زیاد، الکترودهای متخلخل به آرامی یون‌های ناهم نام را جذب می‌کند و توسط کوپله شدن معادله‌ی غیرخطی نفوذ برای پتانسیل متوسط منافذ و غلظت نمک کنترل می‌شود. عملکرد دستگاه نمک‌زدایی آب به روش یون‌زدایی خازنی توسط روابط پیچیده بین خواص مواد الکترود، توزیع سرعت سیال درون دستگاه کنترل می‌شود. کارتیک لاکسمن و همکاران [۱۵] با شبیه‌سازی به کمک دینامیک سیالات محاسباتی توانستند مدلی را توسعه دهند که با مدل کردن اندرکنش سیال با الکترودها و توزیع سرعت سیال درون دستگاه از طریق کاهش دادن افت فشار، عملکرد نمک‌زدایی آب با روش یون‌زدایی خازنی را بهینه کنند. نتایج مطالعه آن‌ها نشان می‌دهد که با تغییرات ساده در ساختار پورت خروجی ورودی واحدهای نمک‌زدایی آب به روش یون‌زدایی خازنی می‌توان تا ۶۰٪ کاهش در افت فشار، به افزایش ۳۵ درصدی در ظرفیت جذب نمک رسید. بیشوول و ون لیمپت [۱۶] مدل دینامیکی فرآیند جذب و دفع را بر اساس تئوری لایه‌های گوی-چاپمن برای پیش‌بینی غلظت پساب وابسته به زمان ارائه دادند. جان و کیم [۱۷] مدل ریاضی جذب گذرا را برای پیش‌بینی کمینه غلظت پساب و زمان شارژ در سل در حالت ولتاژ ثابت، با استفاده از شارژ و متغیرهای جریان، از قبیل: پتانسیل به کار رفته، دبی سیال و ظرفیت الکترود. در مطالعات بعدی، جان و کیم [۱۸] مدل پاسخ کوتاه برای توصیف تغییرات غلظت پساب بر حسب زمان در حالت جریان ثابت همکاران ارائه دادند. یاتیان کو و همکاران [۱۹] مدلی برای توصیف عملکرد نمک‌زدایی سیستم جریان عبوری از درون الکترود با

2 Macroscopic porous electrode (MPE)

1 Gouy-Chapman-Stern (GCS)

$$A = \frac{2Q}{P_M V_0}, \quad B = -\frac{I_0^2}{4P_M P_m V_0 V_e c_0 F^2} \quad (۶)$$

$$\frac{\partial c_e}{\partial t} + \frac{2Q}{P_M V_0} (c_e - c_0) = -\frac{2\lambda I_0}{P_M V_0 F} \quad (۱)$$

رابطه (۷)، پاسخ رابطه (۴) برای مقادیر کارایی شارژ محلی برابر یک می‌باشد و به صورت زیر خواهد بود [۱۹].

$$c_e(t) = \left(\frac{C}{A}\right) + K_1 (e^{-\lambda t}) + c_0, \quad (۷)$$

$$(\lambda = 1) \rightarrow \left(t \geq \frac{8P_m V_e c_0 F}{I_0}\right)$$

بر اساس تئوری گوی-چاپمن-استرن و استفاده از توزیع بولتزمن^۱، مقدار کارایی شارژ محلی را می‌توان از رابطه (۲) به دست آورد [۱۹]. کارایی شارژ محلی می‌باشد به صورت نسبت محلی جذب^۲ نمک بر واجذب^۳ به ازای هر واحد شارژ الکتریکی خالص انتقال داده شده تعریف می‌شود. و مقدار آن طبق تعریف بین صفر تا یک می‌تواند باشد.

$$\lambda \approx \frac{I_0 t}{8P_m V_e c_0 F} \quad (۲)$$

که در آن مقادیر پارامترها از رابطه (۸) بدست می‌آید [۱۹].

با جایگذاری مقدار کارایی شارژ محلی در رابطه (۱)، رابطه (۳) برای مقادیر کارایی شارژ محلی کمتر از یک حاصل می‌شود [۱۹].

$$A = \frac{2Q}{P_M V_0}, \quad C = -\frac{2I_0}{P_M V_0 F} \quad (۸)$$

$$\frac{\partial c_e}{\partial t} + \frac{2Q}{P_M V_0} (c_e - c_0) = -\frac{I_0^2}{4P_M P_m V_0 V_e c_0 F^2} t \quad (۳)$$

مقدار پارامتر K_1 از طریق اعمال شرایط اولیه از رابطه (۵) بدست می‌آید. مقدار درصد تغییرات غلظت خروجی آب درصد شیرین شده به صورت رابطه (۹) تعریف می‌شود.

و با جایگذاری مقدار کارایی شارژ محلی در رابطه (۱)، رابطه (۴) برای مقادیر کارایی شارژ محلی برابر یک حاصل می‌شود [۱۹].

$$\%C = \frac{C_o - C_i}{C_o} \times 100 \quad (۹)$$

$$\frac{\partial c_e}{\partial t} + \frac{2Q}{P_M V_0} (c_e - c_0) = -\frac{2I_0}{P_M V_0 F} \quad (۴)$$

همچنین زمان نمک‌زدایی که به عنوان پارامتر دوم برای بررسی عملکرد سل در نظر گرفته شده، زمانی است که آب خروجی به نهایت شیرین شدنش رسیده باشد، به عبارتی با گذشت زمان، غلظت خروجی تغییر نکند.

رابطه (۵)، پاسخ رابطه (۳) برای مقادیر کارایی شارژ محلی کمتر از یک می‌باشد و به صورت زیر خواهد بود [۱۹].

$$c_e(t) = c_0 - \left(\frac{B}{A^2}\right) (1 - e^{-\lambda t}) + \left(\frac{A}{B}\right) t, \quad (۵)$$

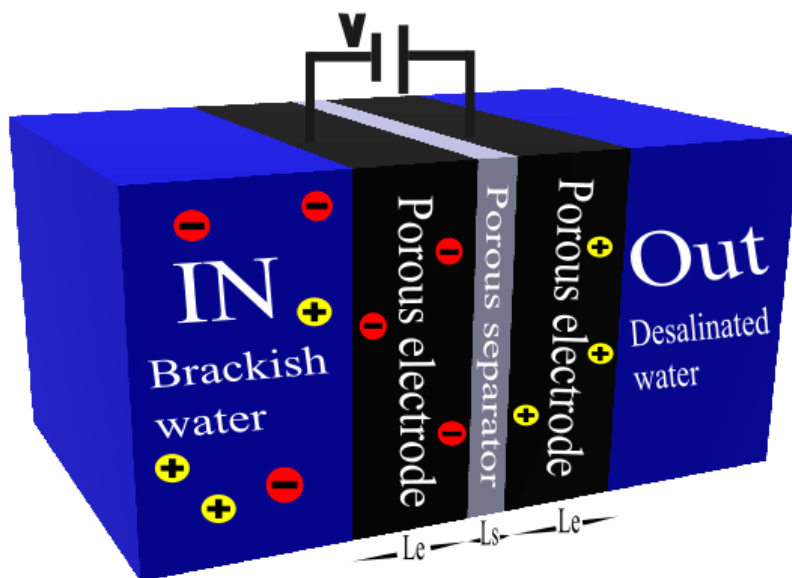
$$(\lambda < 1) \rightarrow \left(t < \frac{8P_m V_e c_0 F}{I_0}\right)$$

که در آن مقادیر پارامترها از رابطه (۶) زیر بدست می‌آید [۱۹].

۳- صحت سنجی نتایج
جدول ۱ مقادیر آزمایشگاهی می‌باشند که یاتیان کو و همکاران در نمونه آزمایشگاهی و ارائه مدل استفاده نمودند. شکل ۱، نشان دهنده شکل شماتیک آن می‌باشد، که جنس الکتروود بکار رفته شده در مدل آزمایشگاهی از آیروژل کربن یکپارچه هایدراکسیکال می‌باشد. برای تأیید نتایج بدست آمده از حل عددی باید این نتایج صحت سنجی شوند. در این پژوهش نتایج حاصل از حل عددی با پژوهش آزمایشگاهی انجام شده توسط یاتیان کو و همکاران

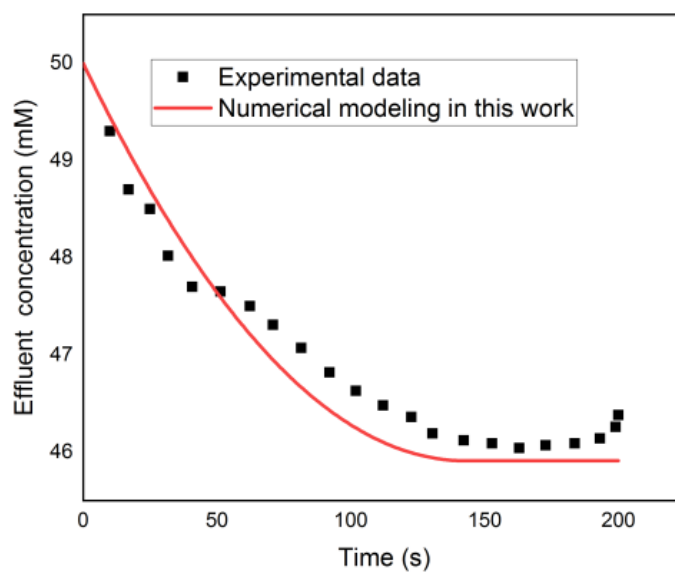
- 1 Boltzmann distribution
- 2 Adsorption
- 3 Desorption

داده‌های آزمایشگاهی از خود نشان داده است، که نتایج آن در شکل ۲ قابل مشاهده است. صحت گذاری شده است. این صحت سنجی برای مقادیری است که در جدول ۱ آمده است. روند نمودار بدست آمده از نتایج، هماهنگی خوبی با



شکل ۱. شکل شماتیک سلول یون‌زدای خازنی

Fig. 1. Schematic diagram of capacitive deionization cell



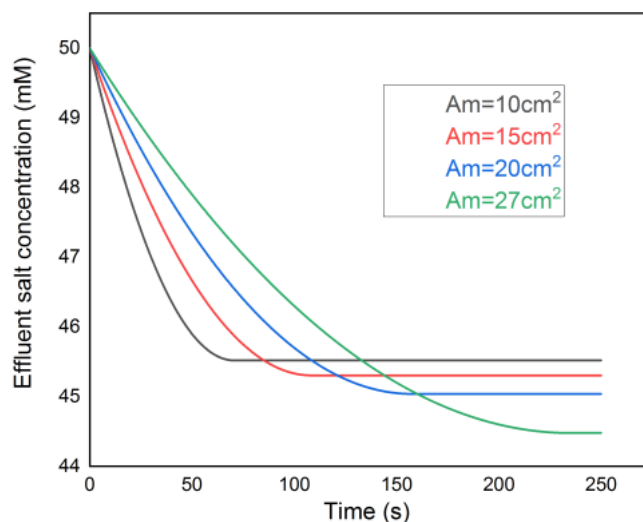
شکل ۲. مقایسه نتایج آزمایشگاهی [۱۹] و مدلسازی عددی بر اساس داده‌های موجود در

Fig. 2. Comparison of the experiment [19] and numerical results based on the data in Table 1

جدول ۱. مقادیر آزمایشگاهی مورد استفاده در این مقاله [۱۹]

Table 1. Laboratory values used in the this work [19]

نام پارامتر	تعریف پارامتر	مقدار	واحد
P_M	مقدار تخلخل در ماکرو منافذ	۰/۵۷	بدون بعد
P_m	مقدار تخلخل در میکرو منافذ	۰/۱	بدون بعد
V_s	حجم کل سل	۱/۵۷	cm^3
L_e	ضخامت الکترودهای متخلخل	۳۰۰	μm
L_s	ضخامت جداساز	۱۰۰	μm
V_e	حجم قسمت الکترودها	۱/۳	cm^3
c_s	غلظت ورودی نمک	۵۰	mM
I_s	جریان شارژ	۵۰	mA
F	ثابت فارادی	۹۶۴۸۵	sA/mol
Q	دبی سیال	۷/۷	ml/min



شکل ۳. نمودار تغییرات غلظت آب خروجی بر حسب زمان، برای سطح مقطع‌های مختلف

Fig. 3. Diagram of changes in output water concentration over time, when the cross section is variable

۴- تفسیر و تحلیل نتایج

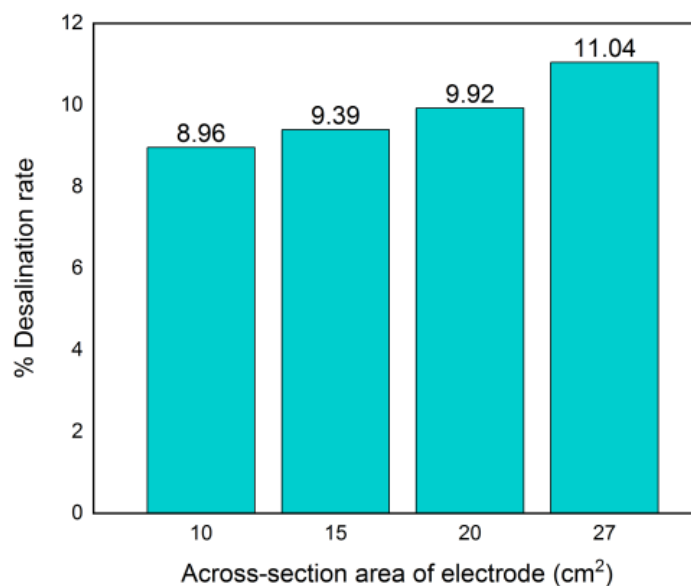
۴-۱- نتایج حاصل از تغییر سطح مقطع الکتروده

را وقتی سطح مقطع از ۱۰ تا ۲۷ سانتی‌متر مربع تغییر می‌کند را نشان می‌دهد. شکل ۴ درصد آب شیرین شده در اندازه مختلف سطح مقطع را نشان می‌دهد. شکل ۵ زمان لازم برای رسیدن به حداکثر مقدار نمک‌زدایی آب را نشان می‌دهد. مطابق با این شکل‌ها، با افزایش سطح مقطع الکتروده، مقدار درصد نمک‌زدایی آب افزایش و زمان لازم برای رسیدن به حداکثر مقدار آب شیرین شده نیز افزایش می‌یابد. به طوری که، زمانی که سطح

شکل‌های ۳ تا ۵ نتایج ناشی تغییرات سطح مقطع الکتروده به عنوان پارامتر مؤثر را نشان می‌دهد. به منظور بررسی اثر تغییرات سطح مقطع بر روی مقدار نمک‌زدایی آب خروجی، شبیه‌سازی بر روی ۴ اندازه مختلف سطح مقطع صورت گرفت. مقادیر مختلف سطح مقطع عبارتند از: ۱۰، ۱۵، ۲۰، ۲۷ سانتی‌متر مربع. شکل ۳ نمودار تغییرات غلظت خروجی بر حسب زمان

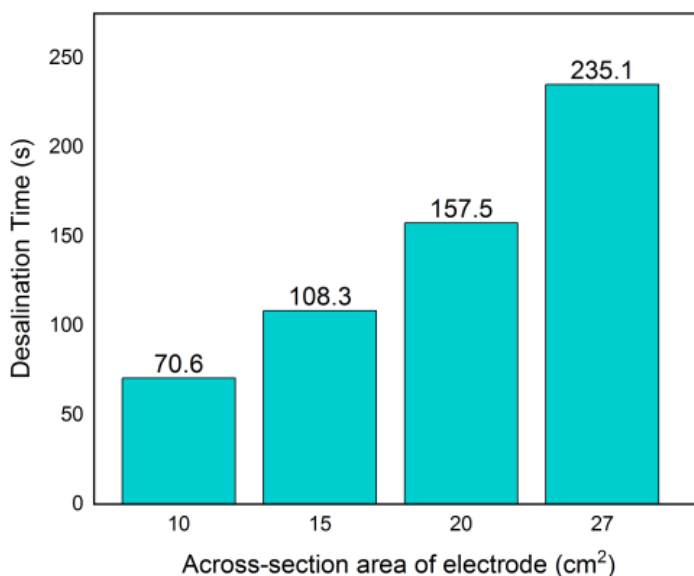
که با افزایش سطح که منتج به افزایش حجم می‌شود، زمان لازم برای رسیدن به حداکثر نمک‌زدایی افزایش یابد که شکل ۴ این نتیجه را تأیید می‌کند. مطابق رابطه $V_e = L_e \times A_m$ ، با افزایش سطح مقطع، حجم سل افزایش پیدا می‌کند، در نتیجه انتظار بر این است که آب ورودی به میزان بیشتری شیرین شده، که شکل ۵ تأیید کننده این موضوع است.

مقطع الکتروود از ۱۰ سانتی‌مترمربع به ۲۷ سانتی‌مترمربع افزایش یافت، مقدار درصد نمک‌زدایی آب از ۸/۹۶ درصد به ۱۱/۰۵ درصد و زمان لازم برای رسیدن به حداکثر مقدار آب شیرین شده از ۷۰/۶ ثانیه به ۲۳۵/۱ ثانیه افزایش یافت. مطابق نتایج حاصل شده با افزایش سطح مقطع غلظت نهایی آب خارج شده کاهش و همچنین میزان زمانی که به حالت نهایی برسد افزایش یافت. مطابق رابطه $t = \lambda P_m V_e c.F/I$ هم انتظار بر این است



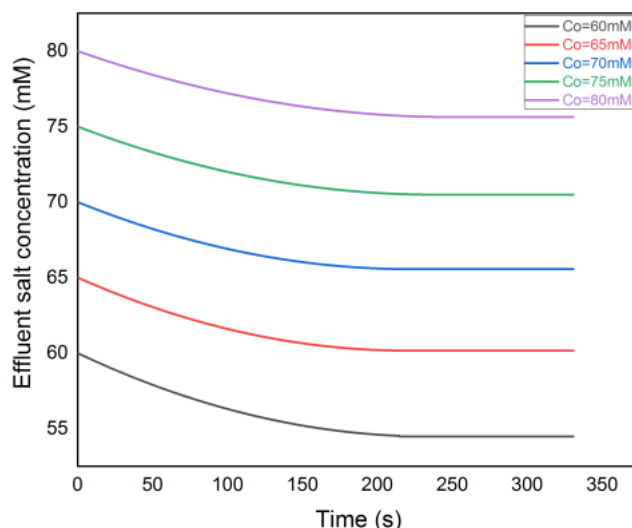
شکل ۴. نمودار درصد نمک‌زدایی آب برای سطح مقطع‌های مختلف

Fig. 4. Diagram of the percentage of water desorption according to the cross-sectional area of the electrode



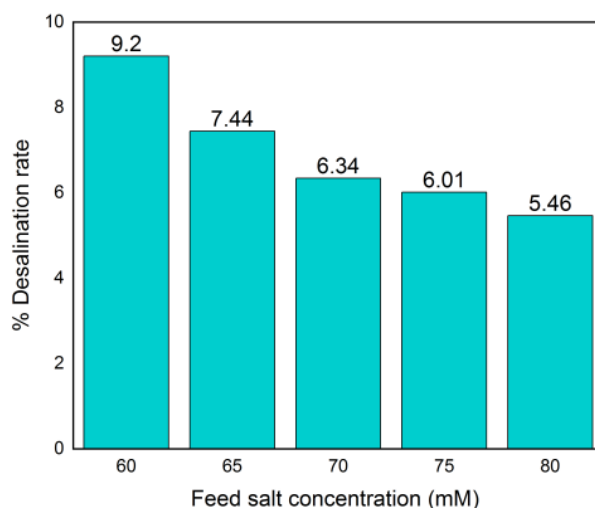
شکل ۵. نمودار زمان نمک‌زدایی آب برای سطح مقطع‌های مختلف

Fig. 5. Diagram of water desalination time according to the cross-sectional area of the electrode



شکل ۶. نمودار تغییرات غلظت آب خروجی بر حسب زمان، زمانی که غلظت ورودی متغیر است

Fig. 6. Diagram of changes in output water concentration over time, when the input concentration varies



شکل ۷. نمودار درصد نمک‌زدایی آب بر حسب غلظت‌های مختلف ورودی آب

Fig. 7. Diagram of percentage of water desalination according to different water inlet concentrations

شکل ۷ درصد آب شیرین شده و شکل ۸ زمان لازم برای رسیدن به حداکثر مقدار نمک‌زدایی آب را در غلظت ورودی مختلف نشان می‌دهد. مطابق شکل ۷ و ۸، با افزایش غلظت ورودی، مقدار درصد نمک‌زدایی آب کاهش و زمان لازم برای رسیدن به حداکثر مقدار آب شیرین شده افزایش می‌یابد. به طوری که، زمانی که غلظت ورودی از ۶۰ میلی‌مولار به ۸۰ میلی‌مولار افزایش یافت، مقدار درصد نمک‌زدایی آب از ۹/۲ درصد به ۵/۴۷ درصد کاهش و زمان لازم برای رسیدن به حداکثر مقدار آب شیرین شده از ۲۱۵

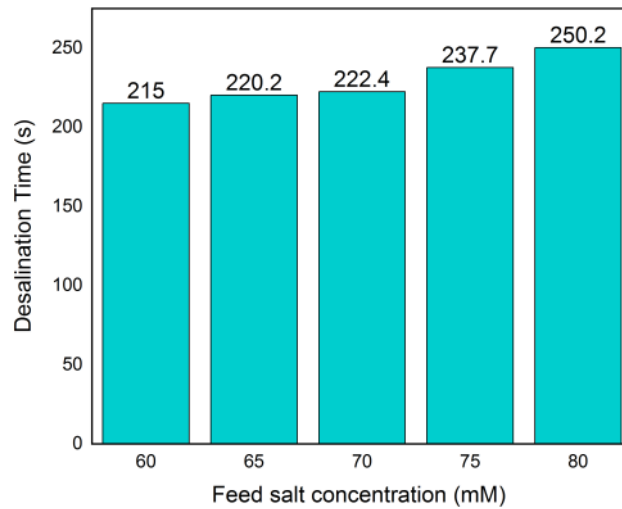
۲-۴- نتایج حاصل از تغییر غلظت ورودی

شکل‌های ۶ تا ۸، نتایج ناشی از تغییرات غلظت ورودی به عنوان پارامتر مؤثر را نشان می‌دهد. به منظور بررسی اثر تغییرات غلظت ورودی بر روی مقدار نمک‌زدایی آب خروجی، شبیه‌سازی برای ۵ غلظت مختلف ورودی به سلول صورت گرفت. مقادیر مختلف غلظت ورودی عبارتند از: ۶۰، ۶۵، ۷۰، ۷۵، ۸۰ میلی‌مولار. شکل ۶ نمودار تغییرات غلظت خروجی بر حسب زمان را وقتی غلظت ورودی از ۶۰ تا ۸۰ میلی‌مولار تغییر می‌کند را نشان می‌دهد.

۴-۳- نتایج حاصل از تغییر جریان اعمالی

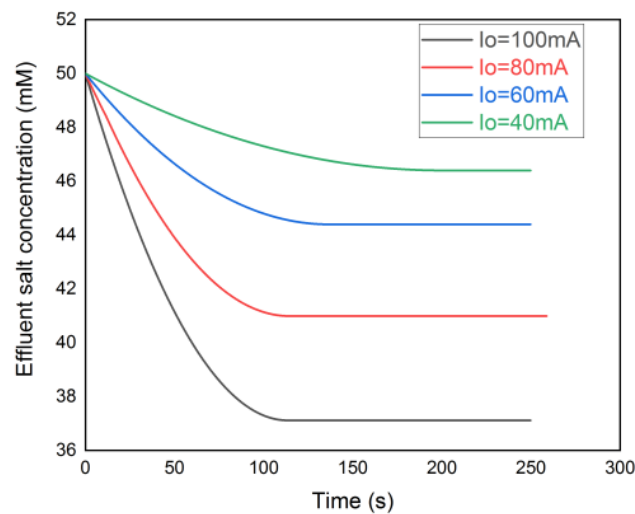
شکل‌های ۹ تا ۱۱، نتایج ناشی از تغییرات جریان اعمالی به عنوان پارامتر مؤثر را نشان می‌دهد. به منظور بررسی اثر تغییرات جریان اعمالی بر روی مقدار نمک‌زدایی آب خروجی، شبیه‌سازی برای ۴ جریان اعمالی مختلف ورودی به سلول صورت گرفت. مقادیر مختلف جریان اعمالی عبارتند از: ۴۰، ۶۰، ۸۰، ۱۰۰ میلی‌آمپر. شکل ۹ نمودار تغییرات غلظت خروجی بر حسب زمان را وقتی جریان از ۴۰ تا ۱۰۰ میلی‌آمپر تغییر می‌کند را نشان می‌دهد. شکل ۱۰

ثانیه به ۲/۲۵۰ ثانیه افزایش یافت. با افزایش غلظت ورودی مطابق رابطه $t = \lambda P_m V_e c F / I$. انتظار بر این است زمان لازم برای نمک‌زدایی نیز افزایش یابد، که شکل ۷ بیان‌کننده این تطابق است. با افزایش غلظت آب ورودی، وقتی دیگر پارامترها ثابت می‌باشند، انتظار این است که الکتروود توان کم‌تری برای نمک‌زدایی داشته باشد، یا هر چه غلظت ورودی افزایش پیدا کند، عملکرد سل جهت نمک‌زدایی افت می‌کند، نتایج شکل ۸ به خوبی این انتظار را تأیید می‌کنند.



شکل ۸. نمودار زمان نمک‌زدایی آب بر حسب غلظت‌های مختلف ورودی آب

Fig. 8. Diagram of water desalination time chart based on the level of different water inlet concentrations

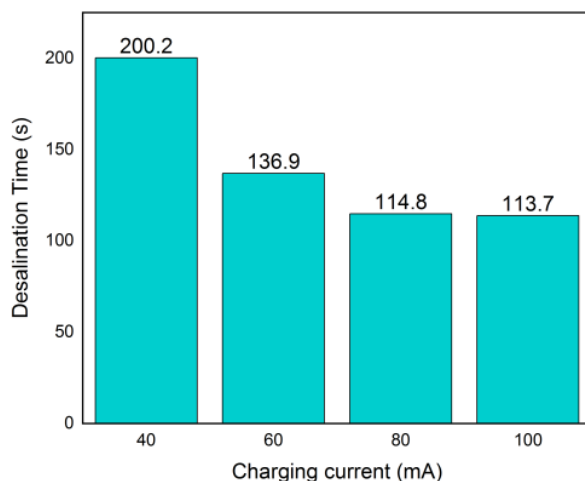


شکل ۹. نمودار تغییرات غلظت آب خروجی بر حسب زمان، زمانی که جریان اعمالی دستگاه متغیر است

Fig. 9. Diagram of changes in output water concentration over time, when the operating flow of the device varies

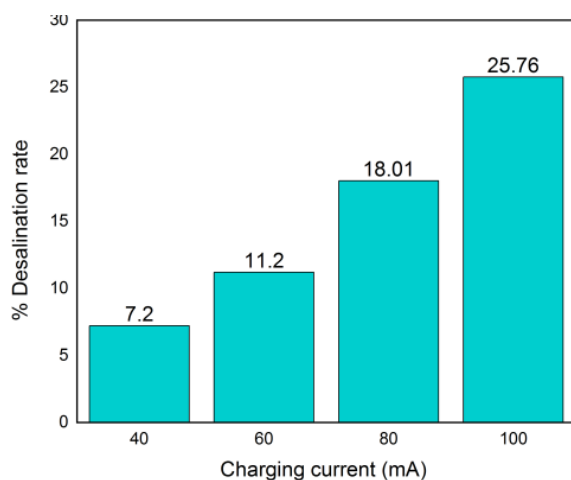
توجیه می‌کنند. مطابق رابطه $t = \frac{8P_m V_e C F}{I}$ با افزایش جریان اعمالی زمان لازم برای نمک‌زدایی آب افزایش می‌یابد، شکل ۱۱ به خوبی این را نشان می‌دهد. در هنگام افزایش جریان الکتریکی پدیده‌ای که ممکن است با آن روبرو شویم، پدیده الکترولیز آب می‌باشد. حداقل پتانسیل لازم جهت ایجاد فرآیند الکترولیز $1/229$ ولت می‌باشد [۲۰]، با توجه به این که دستگاه در مقاومت $1/1$ کار می‌کند، در نتیجه مطابق رابطه $I = V / R$ ، جریان لازم برای رسیدن به الکترولیز آب حدود $1/11$ آمپر می‌باشد، که خیلی بزرگ‌تر از میزان جریان کاری سل یعنی 50 میلی آمپر است، در نتیجه امکان رخ دادن این پدیده فیزیکی وجود ندارد.

درصد آب شیرین شده و شکل ۱۱ زمان لازم برای رسیدن به حداکثر مقدار نمک‌زدایی آب را در جریان اعمالی مختلف نشان می‌دهد. مطابق شکل ۹ تا شکل ۱۱، با افزایش جریان اعمالی، مقدار درصد نمک‌زدایی آب افزایش و زمان لازم برای رسیدن به حداکثر مقدار آب شیرین شده کاهش می‌یابد. به طوری که، زمانی که جریان اعمالی از 40 میلی آمپر به 100 میلی آمپر افزایش یافت، مقدار درصد نمک‌زدایی آب از $7/2$ درصد به $25/76$ درصد افزایش و زمان لازم برای رسیدن به حداکثر مقدار آب شیرین شده از $200/2$ ثانیه به $113/7$ ثانیه کاهش یافت با افزایش جریان اعمالی، قدرت الکترودها برای نمک‌زدایی آب می‌بایست افزایش پیدا کند، چون الکتروود راحت‌تر می‌تواند یون‌ها را به خود جذب کند. شکل‌های ۱۰ و ۱۱ نیز به خوبی این عملکرد را



شکل ۱۰. نمودار درصد نمک‌زدایی آب بر حسب جریان اعمالی مختلف

Fig. 10. Diagram of the percentage of water desalination according to different applied flow



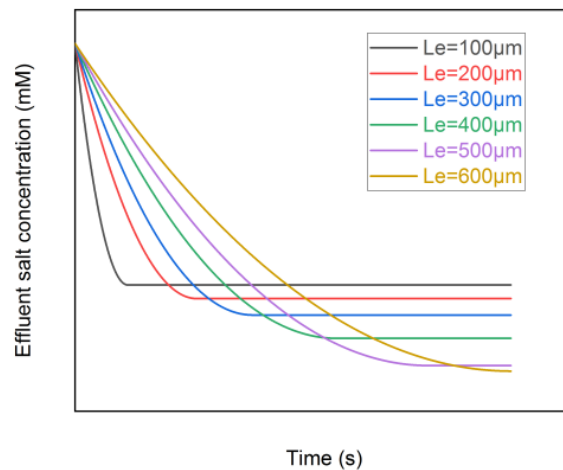
شکل ۱۱. نمودار زمان نمک‌زدایی آب بر حسب جریان اعمالی مختلف

Fig. 11. Diagram of water desalination time according to different applied flow

مقدار آب شیرین شده افزایش می‌یابد. به طوری که، زمانی که ضخامت الکتروود از ۱۰۰ میکرومتر به ۶۰۰ میکرومتر افزایش یافت، مقدار درصد نمک‌زدایی آب از ۷/۲۲ درصد به ۹/۸ درصد افزایش و زمان لازم برای رسیدن به حداکثر مقدار آب شیرین شده از ۴۲/۷ ثانیه به ۳۵۰ ثانیه افزایش یافت. با افزایش ضخامت الکتروود، مطابق رابطه $V_e = L_e \times A_m$ ، حجم سل افزایش پیدا می‌کند، در نتیجه می‌توان انتظار داشت که آب ورودی به میزان بیشتری شیرین شده که شکل ۱۳ نشان دهنده این موضوع است. مطابق رابطه $t = \frac{\lambda P_m V_e c F}{I}$ هم انتظار بر این است که با افزایش ضخامت که منتج به افزایش حجم می‌شود، زمان لازم برای رسیدن به حداکثر نمک‌زدایی افزایش یابد که شکل ۱۴ نتایج این بخش را تأیید می‌کند.

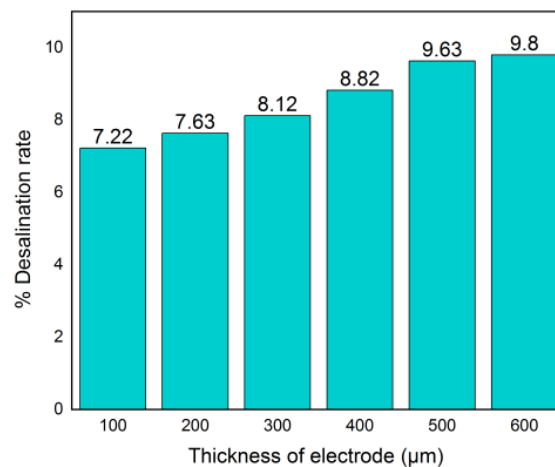
۴-۴- نتایج حاصل از تغییر ضخامت الکتروود

شکل‌های ۱۲ تا ۱۴ نتایج ناشی از تغییرات ضخامت الکتروود به عنوان پارامتر مؤثر را نشان می‌دهد. به منظور بررسی اثر تغییرات ضخامت الکتروود بر روی مقدار نمک‌زدایی آب خروجی، شبیه‌سازی برای ۵ ضخامت مختلف الکتروود سلول صورت گرفت. مقادیر مختلف ضخامت الکتروود عبارتند از: ۱۰۰، ۲۰۰، ۳۰۰، ۴۰۰، ۵۰۰ و ۶۰۰ میکرومتر. شکل ۱۲ نمودار تغییرات غلظت خروجی بر حسب زمان را وقتی ضخامت الکتروود از ۱۰۰ تا ۶۰۰ میکرومتر تغییر می‌کند را نشان می‌دهد. شکل ۱۳ درصد آب شیرین شده و شکل ۱۴ زمان لازم برای رسیدن به حداکثر مقدار نمک‌زدایی آب را در ضخامت الکتروود مختلف نشان می‌دهد. مطابق شکل‌های ۱۲ تا ۱۴ با افزایش ضخامت الکتروود، مقدار درصد نمک‌زدایی آب و زمان لازم برای رسیدن به حداکثر



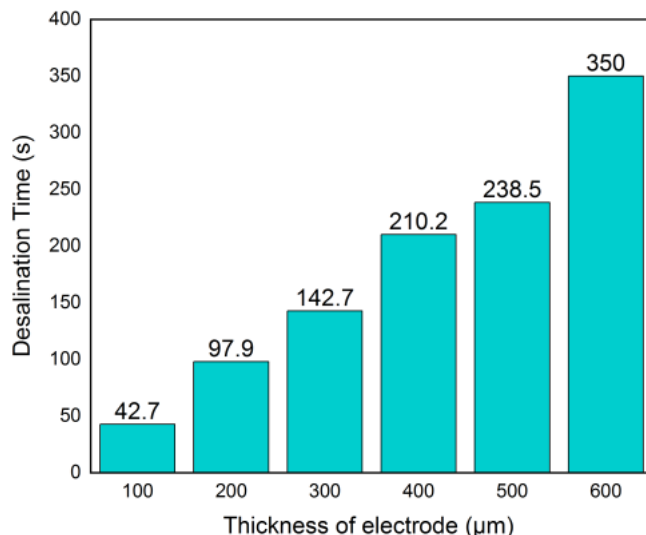
شکل ۱۲. نمودار تغییرات غلظت آب خروجی بر حسب زمان برای ضخامت‌های مختلف الکتروود

Fig. 12. Diagram of changes in output water concentration over time for different electrode thicknesses



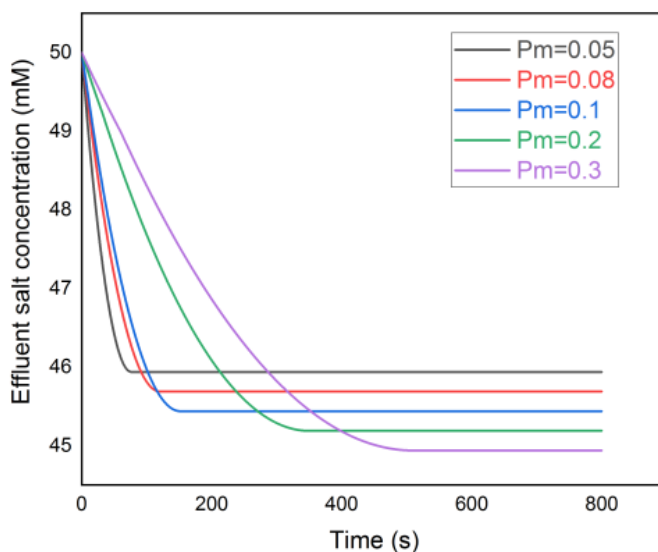
شکل ۱۳. نمودار درصد نمک‌زدایی آب بر حسب ضخامت مختلف الکتروود

Fig. 13. Diagram of the percentage of water desorption according to the thickness of the electrode



شکل ۱۴. نمودار زمان نمک‌زدایی آب بر حسب ضخامت مختلف الکترود

Fig. 14. Diagram of water desorption time according to different thickness of electrode



شکل ۱۵. نمودار تغییرات غلظت آب خروجی بر حسب زمان، زمانی که تخلخل متغیر است

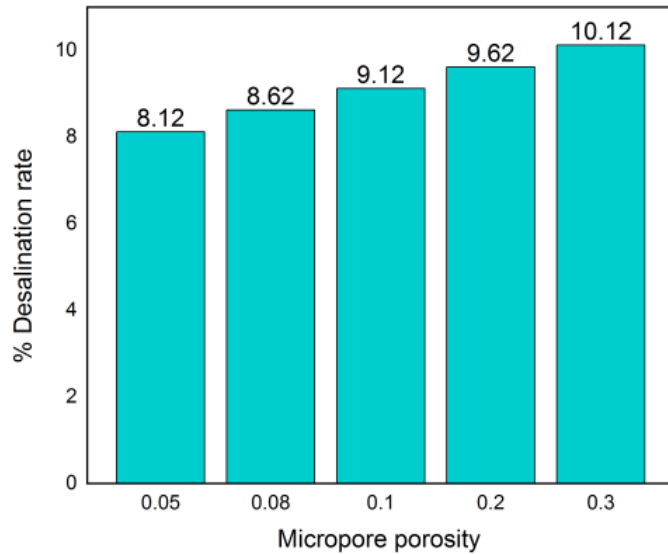
Fig. 15. Diagram of changes in output water concentration over time, when porosity is variable

۰/۱، ۰/۲ و ۰/۳. شکل ۱۵ نمودار تغییرات غلظت خروجی بر حسب زمان را وقتی تخلخل الکترود از ۰/۰۵ تا ۰/۳ تغییر می‌کند را نشان می‌دهد. شکل ۱۶ درصد آب شیرین شده و شکل ۱۷ زمان لازم برای رسیدن به حداکثر مقدار نمک‌زدایی آب را در تخلخل الکترود مختلف نشان می‌دهد. مطابق شکل‌های ۱۵ تا ۱۷ با افزایش تخلخل الکترود، مقدار درصد نمک‌زدایی آب

۴-۵- نتایج حاصل از تغییر تخلخل الکترود شکل‌های ۱۵ تا ۱۷، نتایج ناشی تغییرات تخلخل الکترود به عنوان پارامتر مؤثر را نشان می‌دهد. به منظور بررسی اثر تغییرات تخلخل الکترود بر روی مقدار نمک‌زدایی آب خروجی، شبیه‌سازی برای ۵ مقدار مختلف تخلخل سلول صورت گرفت. مقادیر مختلف تخلخل الکترود عبارتند از: ۰/۰۵، ۰/۰۸،

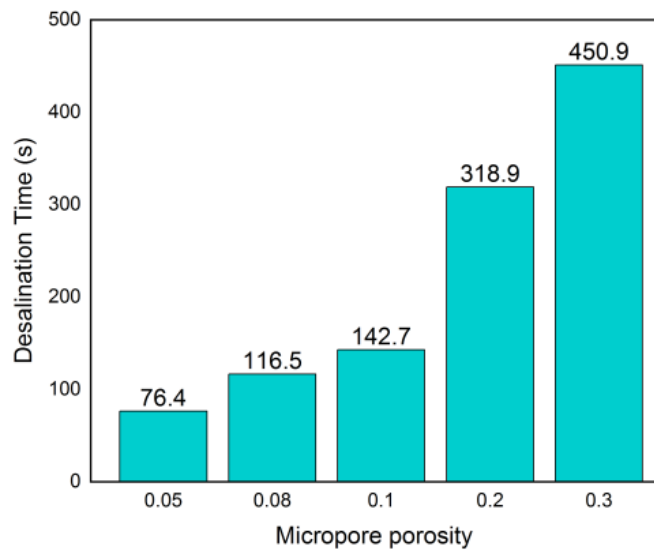
که آب را بیشتر شیرین کند، شکل ۱۶ نتایج این موضوع را به خوبی نمایش می‌دهد. یعنی با افزایش میزان تخلخل از ۰/۰۵ به ۰/۳، درصد نمک‌زدایی آب افزایش پیدا کرد. همچنین مطابق رابطه $t = \lambda P_m V_e c \cdot F / I$ و شکل ۱۷ زمان لازم برای رسیدن به حداکثر مقدار نمک‌زدایی با افزایش تخلخل افزایش پیدا می‌کند.

از ۸/۱۲ به ۱۰/۱۲ درصد افزایش و زمان لازم برای رسیدن به حداکثر مقدار آب شیرین شده افزایش می‌یابد. به طوری که، زمانی که تخلخل الکتروود از ۰/۰۵ به ۰/۳ افزایش یافت، زمان لازم برای رسیدن به حداکثر مقدار آب شیرین شده از ۷۶/۴ ثانیه به ۴۵۰/۹ ثانیه افزایش یافت. با افزایش درصد تخلخل در واقع سطح تماس دبی آبی که می‌خواهیم آن را شیرین نموده با الکتروود افزایش پیدا می‌کند در نتیجه این امکان برای سل ایجاد می‌شود



شکل ۱۶. نمودار درصد نمک‌زدایی آب بر حسب تخلخل‌های مختلف الکتروود

Fig. 16. Diagram of percentage of water desalination in terms of different electrode porosity



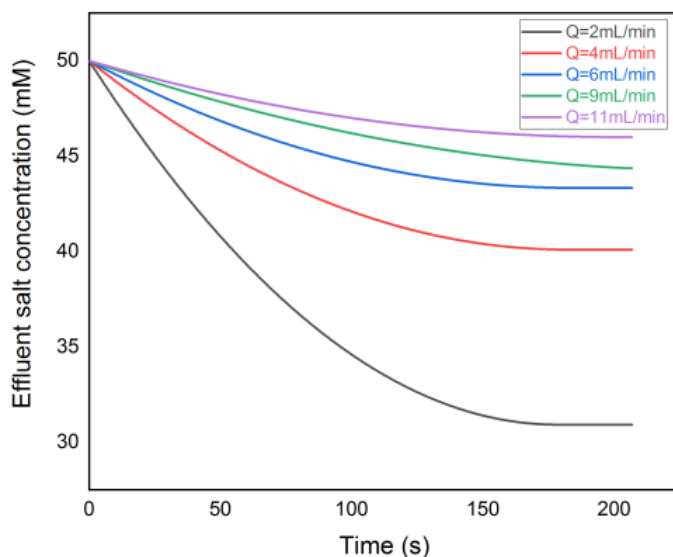
شکل ۱۷. نمودار زمان نمک‌زدایی آب بر حسب تخلخل‌های مختلف الکتروود

Fig. 17. Diagram of water desalination time according to different electrode porosity

بر دقیقه. شکل ۱۸ نمودار تغییرات غلظت خروجی بر حسب زمان را وقتی دبی جریان از ۲ تا ۱۱ میلی‌لیتر بر دقیقه تغییر می‌کند را نشان می‌دهد. شکل ۱۹ درصد آب شیرین شده و شکل ۲۰ زمان لازم برای رسیدن به حداکثر مقدار نمک‌زدایی آب را در دبی جریان مختلف نشان می‌دهد. مطابق شکل‌های ۱۸ تا ۲۰، با افزایش دبی جریان اعمالی، مقدار درصد نمک‌زدایی

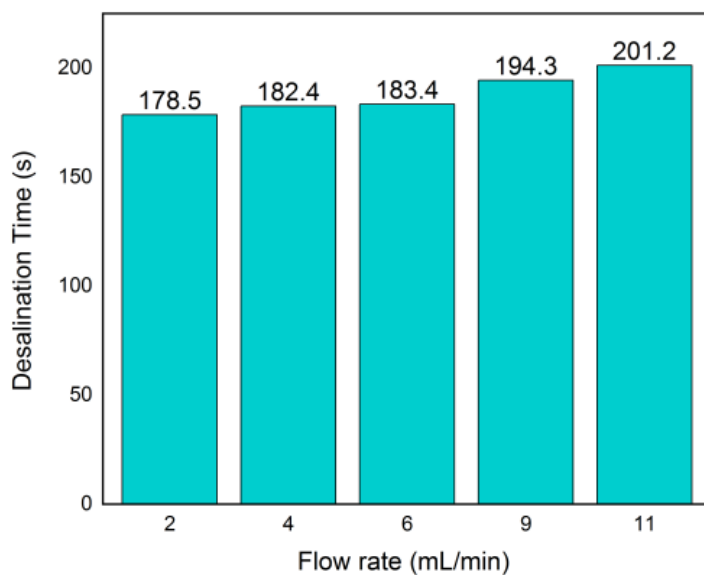
۴-۶- نتایج حاصل از تغییر دبی جریان

شکل‌های ۱۸ تا ۲۰، نتایج ناشی تغییرات دبی جریان به عنوان پارامتر مؤثر را نشان می‌دهد. به منظور بررسی اثر تغییرات دبی جریان بر روی مقدار نمک‌زدایی آب خروجی، شبیه‌سازی برای ۵ دبی مختلف ورودی به سلول صورت گرفت. مقادیر مختلف دبی جریان عبارتند از: ۲، ۴، ۶، ۹ و ۱۱ میلی‌لیتر



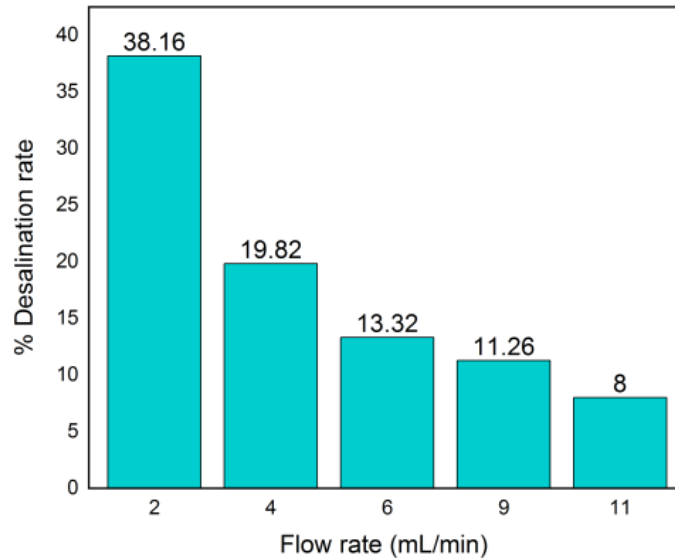
شکل ۱۸. نمودار تغییرات غلظت آب خروجی بر حسب زمان، زمانی که دبی جریان متغیر است

Fig. 18. Diagram of changes in output water concentration over time, when the flow rate fluctuates



شکل ۱۹. نمودار درصد نمک‌زدایی آب بر حسب دبی جریان مختلف ورودی آب

Fig. 19. Diagram of desalination percentage by discharge of different inlet flows



شکل ۲۰. نمودار زمان نمک‌زدایی آب بر حسب دبی جریان مختلف ورودی آب

Fig. 20. Water desalination time diagram in terms of different water inlet discharge rates

با توجه معادله استفاده شده در حل مسئله، اگر درصد نمک‌زدایی آب و زمان لازم برای رسیدن به حداکثر نمک‌زدایی آب را به عنوان دو پارامتری که با آن می‌توان عملکرد دستگاه را مورد سنجش قرار داد در نظر بگیریم، بدیهی است که افزایش در درصد نمک‌زدایی آب و کاهش زمان لازم برای رسیدن به حداکثر نمک‌زدایی آب، نشان دهنده بهبود در عملکرد دستگاه و بهینه کار کردن دستگاه می‌باشد. از شکل‌های میله‌ای نتایج زیر حاصل می‌شود. با افزایش حدود ۴ برابری در دبی جریان، درصد نمک‌زدایی آب حدود ۷۹ درصد کاهش و زمان لازم برای رسیدن به حداکثر نمک‌زدایی آب حدود ۱۲ درصد افزایش یافت. زیرا با افزایش دبی سطوح الکتروود فرصت کافی برای شیرین کردن آب را ندارد، در نتیجه با افزایش دبی به طور قطع عملکرد دستگاه کاهش می‌یابد.

با افزایش حدود ۱/۵ برابری در جریان اعمالی، درصد نمک‌زدایی آب حدود ۷۲ درصد افزایش و زمان لازم برای رسیدن به حداکثر نمک‌زدایی آب حدود ۷۶ درصد کاهش یافت. زیرا با افزایش جریان اعمالی، قدرت الکتروودها برای نمک‌زدایی آب می‌بایست افزایش پیدا می‌کند، چون الکتروود راحت‌تر می‌تواند یون‌ها را به خود جذب کند. در نتیجه با افزایش جریان اعمالی به طور قطع عملکرد دستگاه افزایش می‌یابد.

با افزایش حدود ۵ برابری در تخلخل، درصد نمک‌زدایی آب ۲۵ درصد و زمان لازم برای رسیدن به حداکثر نمک‌زدایی آب حدود ۵ برابر افزایش یافت. زیرا با افزایش درصد تخلخل در واقع سطح تماس دبی آبی که می‌خواهیم آن را

آب کاهش و زمان لازم برای رسیدن به حداکثر مقدار آب شیرین شده افزایش می‌یابد. به طوری که زمانی که دبی جریان اعمالی از ۲ میلی‌لیتر بر دقیقه به ۱۱ میلی‌لیتر بر دقیقه افزایش یافت، مقدار درصد نمک‌زدایی آب از ۳۸/۲ درصد به ۸ درصد کاهش و زمان لازم برای رسیدن به حداکثر مقدار آب شیرین شده از ۱۷۸/۵ ثانیه به ۲۰/۱/۲ ثانیه افزایش یافت. با افزایش دبی جریان، وقتی دیگر پارامترها ثابت است در بردارنده این مفهوم است که سل باید حجم بیشتری را با همان شرایط نمک‌زدایی کند. در نتیجه می‌توان پیش‌بینی کرد که عملکرد سل کاهش یابد، چون الکتروود فرصت کافی برای شیرین کردن آب را ندارد، از طرفی زمان لازم نیز برای رسیدن به حداکثر میزان آب شیرین شده باید افزایش یابد. شکل ۱۸ تا شکل ۲۰ نیز این نتیجه را به خوبی نشان می‌دهد.

۵- نتیجه‌گیری

با توجه به نیاز روز افزون به آب و کمبود آب شیرین موجود در جهان و لزوم بررسی روش‌های مختلف در نمک‌زدایی آب، در این پژوهش به بررسی عددی آب شیرین‌کن خازنی پرداخته شد. اخیراً پژوهشگران به ارائه مدل‌های مختلف برای پیش‌بینی رفتار دستگاه آب شیرین‌کن خازنی پرداختند. مدل یاتیان کو و همکاران مدلی است که غلظت خروجی از آب را بر حسب زمان به طور خوبی پیش‌بینی می‌کند. هدف در این پژوهش بررسی پارامترهای تأثیرگذار در خروجی بود.

منابع

- [1] A.J. Toth, Modelling and Optimisation of Multi-Stage Flash Distillation and Reverse Osmosis for Desalination of Saline Process Wastewater Sources, Membranes, 10 (10) (2020) 265.
- [2] C. Xie, L. Zhang, Y. Liu, Q. Lv, G. Ruan, S.S. Hosseini, A direct contact type ice generator for seawater freezing desalination using LNG cold energy, Desalination, 435 (2018) 293-300.
- [3] T. Mezher, H. Fath, Z. Abbas, A. Khalid, Techno-economic assessment and environmental impacts of desalination technologies, Desalination, 266 (2020) 263-273.
- [4] S. Porada, R. Zhao, A. van der Wal, V. Presser, P.M. Biesheuvel, Review on the science and technology of water desalination by capacitive deionization, Progress in Materials Science, 58(8) (2013) 1388-1442.
- [5] M. Anderson, A. L. Cudero, J. Palma, Capacitive deionization as an electrochemical means of saving energy and delivering clean water. Comparison to present desalination practices: Will it compete?, Electrochimica Acta, 55 (2010) 3845-3856.
- [6] J.C. Farmer, D.V. Fix, G.V. Mack, R.W. Pekala, J.F. Poco, Capacitive deionization of NH_4ClO_4 solutions with carbon aerogel electrodes, Journal of Applied Electrochemistry, 26(10) (1996) 1007-1018.
- [7] A.M. Johnson, W. VENOLIA, The electrosorb process for desalting water, (1970).
- [8] A.M. Johnson, J. Newman, Desalting by Means of Porous Carbon Electrodes, Journal of The Electrochemical Society, 118(3) (1971) 510.
- [9] M.E. Suss, T.F. Baumann, W.L. Bourcier, C.M. Spadaccini, K.A. Rose, J.G. Santiago, M. Stadermann, Capacitive desalination with flow-through electrodes, Energy & Environmental Science, 5(11) (2012) 9511-9519.
- [10] A. Hemmatifar, M. Stadermann, J.G. Santiago, Two-Dimensional Porous Electrode Model for Capacitive Deionization, The Journal of Physical Chemistry C, 119

شیرین نموده با الکتروود افزایش پیدا می‌کند در نتیجه این امکان برای سل ایجاد می‌شود که آب را بیشتر شیرین کند.

با افزایش حدود ۵ برابری در طول الکتروود، درصد نمک‌زدایی آب حدود ۳۵ درصد افزایش یافت و زمان لازم برای رسیدن به حداکثر نمک‌زدایی آب حدود ۷ برابر شد. زیرا با افزایش طول الکتروود، در واقع حجم الکتروود را زیاد شده، در نتیجه آب به مقدار بیشتری شیرین شده است.

با افزایش حدود ۳۳ درصدی در غلظت ورودی، درصد نمک‌زدایی آب حدود ۴۰ درصد کاهش و زمان لازم برای رسیدن به حداکثر نمک‌زدایی آب حدود ۱۶ درصد افزایش یافت. زیرا با افزایش غلظت آب ورودی، وقتی دیگر پارامترها ثابت می‌باشند، انتظار این است که الکتروود توان کم‌تری برای نمک‌زدایی داشته باشد در نتیجه با افزایش غلظت ورودی به طور قطع عملکرد دستگاه کاهش می‌یابد.

با افزایش حدود ۱/۷ برابری سطح مقطع، درصد نمک‌زدایی آب حدود ۳۵ درصد افزایش یافت و زمان لازم برای رسیدن به حداکثر نمک‌زدایی آب حدود ۲ برابر شد. زیرا با افزایش سطح مقطع الکتروود، در واقع حجم الکتروود را زیاد شده، در نتیجه آب به مقدار بیشتری شیرین شده است.

۶- فهرست علائم

مقدار تخلخل در ماکرو منافذ	P_M
مقدار تخلخل در میکرو منافذ	P_m
حجم کل سلول (cm^3)	V_s
سطح مقطع الکتروود (cm^2)	A_m
ضخامت الکتروودهای متخلخل (μm)	L_e
ضخامت جداساز (μm)	L_s
حجم قسمت الکتروودها (cm^3)	V_e
غلظت ورودی نمک (mM)	c_i
غلظت خروجی نمک (mM)	c_e
جریان شارژ (mA)	I
ثابت فارادی (sA/mol)	F
دبی سیال (ml/min)	Q
یون‌زدایی خازنی	CDI

علائم یونانی

λ کارایی شارژ محلی

- Tailoring the pressure drop and fluid distribution of a capacitive deionization device, *Desalination*, 449 (2019) 111-117.
- [16] P.M. Biesheuvel, B. van Limpt, A. van der Wal, Dynamic Adsorption/Desorption Process Model for Capacitive Deionization, *The Journal of Physical Chemistry C*, 113(14) (2009) 5636-5640.
- [17] Y.A.C. Jande, W.S. Kim, Predicting the lowest effluent concentration in capacitive deionization, *Separation and Purification Technology*, 115 (2013) 224-230.
- [18] Y. Jande, W.-S. Kim, Desalination using capacitive deionization at constant current, *Desalination*, 329 (2013) 29-34.
- [19] Y. Qu, P.G. Campbell, A. Hemmatifar, J.M. Knipe, C.K. Loeb, J.J. Reidy, M.A. Hubert, M. Stadermann, J.G. Santiago, Charging and Transport Dynamics of a Flow-Through Electrode Capacitive Deionization System, *The Journal of Physical Chemistry B*, 122(1) (2018) 240-249.
- [20] L. Chen, X. Dong, F. Wang, Y. Wang, Y. Xia, Base-acid hybrid water electrolysis, *Chemical Communications*, 52(15) (2016) 3147-3150.
- (44) (2015) 24694-24681.
- [11] E.N. Guyes, A.N. Shocron, A. Simanovski, P.M. Biesheuvel, M. Suss, A one-dimensional model for water desalination by flow-through electrode capacitive deionization, (2017).
- [12] P.M. Biesheuvel, H.V.M. Hamelers, M.E. Suss, Theory of Water Desalination by Porous Electrodes with Immobile Chemical Charge, *Colloids and Interface Science Communications*, 9 (2015) 1-5.
- [13] A.N. Shocron, M.E. Suss, The effect of surface transport on water desalination by porous electrodes undergoing capacitive charging, *Journal of physics. Condensed matter: an Institute of Physics journal*, 29(8) (2017) 084003.
- [14] P.M. Biesheuvel, M.Z. Bazant, Nonlinear dynamics of capacitive charging and desalination by porous electrodes, *Physical Review E*, 81(3) (2010) 031502.
- [15] K. Laxman, A. Husain, A. Nasser, M. Al Abri, J. Dutta,

چگونه به این مقاله ارجاع دهیم

A. Abolghasemi, S. Seddighi, *Simulation of Effective Parameters on Desalination Water Using Capacitive Deionization Method*, *Amirkabir J. Mech Eng.*, 53(11) (2022) 5595-5612.

DOI: [10.22060/mej.2021.19769.7104](https://doi.org/10.22060/mej.2021.19769.7104)



