

# شبیه‌سازی عددی فرآیند الکترولیز آب شور به کمک امواج الکترومغناطیسی

اکبر اقبالی، محمدرضا کرفی\*<sup>۱</sup>، محمد حسین صادقی

دانشکده مکانیک، دانشگاه تربیت مدرس، تهران، ایران

## چکیده

در این تحقیق فرآیندهای الکترولیز آب شور و الکترولیز الکترومغناطیسی آب شور در هندسه متقارن محوری و به صورت‌های پایا و وابسته به فرکانس شبیه‌سازی شده است. معادلات پیوستگی و نویر استوکس برای جریان سیال، معادله نرنست پلانک برای انتقال شار جرمی ذرات و معادلات ماکسول برای امواج الکترومغناطیس در نظر گرفته شده‌اند. اعمال امواج الکترومغناطیسی به آب، موجب افزایش جنبش مولکولی شده و در نتیجه با عبور جریان کمتر از قطب‌های آند و کاتد، فرآیند تجزیه املاح صورت می‌پذیرد. همچنین با عبور جریان کمتر از قطب‌ها، سرعت خوردگی نیز کاهش می‌یابد. نتایج شبیه‌سازی نیز حاکی از تاثیر قابل توجه امواج الکترومغناطیس در جداسازی یون‌های کلر و سدیم بوده است. بر اساس نتایج میزان جداسازی یون‌ها در فرآیند الکترولیز الکترومغناطیسی آب شور بیش از سه برابر جداسازی یون‌ها در فرآیند الکترولیز آب شور بوده است. همچنین تاثیر پارامترهای مختلفی چون قطر آند، ولتاژ الکتریکی و غلظت الکترولیت شبیه‌سازی گردیده و نتایج مقایسه شده‌اند. نتایج حاکی از افزایش میزان جداسازی یون‌ها با افزایش هر یک از پارامترهای ولتاژ و غلظت الکترولیت است. این در حالی است که بیشترین و کمترین میزان جداسازی یون‌ها در قطرهای الکتروود ۸ و ۱۶ میلی‌متر حاصل شده است.

واژه‌های کلیدی: الکترولیز، امواج الکترومغناطیسی، شبیه‌سازی عددی

<sup>۱</sup> آدرس پست الکترونیک نویسنده مسئول: karafi@modares.ac.ir

# Numerical Simulation of the saline water electrolysis process using electromagnetic waves

Akbar Eghbali<sup>1</sup>, Mohammad Reza Karafi<sup>1\*</sup>, Mohammad Hossein Sadeghi<sup>1</sup>

1-Faculty of Mechanical Engineering, Tarbiat Modares University, Tehran, Iran

\* Corresponding author e-mail: karafi@modares.ac.ir

## Abstract

The microwave irradiation has used to speed up chemical reactions in comparison of conventional reactions. Because the electromagnetic waves cause increasing the molecular vibrations. Energy consumption is reduced by using electromagnetic waves. As a results, electrodes corrosion rate is reduces. In this article, a numerical method has been used to compare saline water electrolysis and saline water electromagnetic electrolysis reactor. Axisymmetric geometry is considered in simulations and steady and frequency dependent analysis are conducted. Continuity equations and Navier-Stocks equation for fluid flow, and Nernst-Planck equation for mass transfer flow and maxwell equation for electromagnetic waves modeling are taken into the account. At the first, the effect of electromagnetic waves on the ion separation has been investigated. Results have shown that an obvious enhancement has been occurred in ion separation due to electromagnetic irradiation. The dechlorination in saline water electromagnetic electrolysis reactor process has been improved more than three times in compare with saline water electrolysis process. Also, the ion separation has been enhanced linearly by increasing the cell potential and initial salinity. Quantitative results of each parameters are shown in the paper.

**Key Words:** electrolysis, electromagnetic waves, numerical simulation

## علائم و نشانه‌ها

T	چگالی شار مغناطیسی	B
mol/m <sup>3</sup>	غلظت ذره i	c <sub>i</sub>
C/m <sup>2</sup>	چگالی شار الکتریکی	D
m <sup>2</sup> /s	ضریب نفوذ ذره i	D <sub>i</sub>
V/m	شدت میدان الکتریکی	E
A/m	شدت میدان مغناطیسی	H
A/m <sup>2</sup>	چگالی جریان الکتریکی	J
Pa	فشار	p
C/m <sup>2</sup>	چگالی بار الکتریکی	r
m/s	سرعت سیال	u

$Z_i$	عدد بار ذره $i$	-
$\rho$	چگالی سیال	$\text{Kg/m}^3$
$\mu$	ویسکوزیته دینامیکی	Pa.s
$\mu_i$	نرخ مهاجرت یونی ذره $i$	$\text{m}^2/\text{v.s}$
$\Phi$	پتانسیل الکتریکی	V

## (۱) مقدمه

اگرچه نزدیک به سه چهارم سطح زمین را آب پوشانده است، اما تنها ۲/۵ درصد از تمامی آبهای زمین تازه و شیرین بوده که بخش بزرگی از این آبهای شیرین، در یخچال‌ها و توده‌های یخی محصور شده و از دسترس خارج است. پیش‌بینی می‌شود تقاضای آب تا سال ۲۰۵۰، افزایشی ۵۵ درصدی داشته باشد و در نتیجه آن میزان دسترسی به آب پاک و قابل اطمینان کاهش چشمگیری خواهد داشت [۱]. فناوری‌های نمک‌زدایی مختلفی برای جداسازی نمک از آب شور، تولید آب با درصد نمک پایین وجود دارد. بیشتر فناوری‌ها بر روی تقطیر (فرآیندهای حرارتی) یا غشاء برای جداسازی نمک از آب تکیه دارند. در کنار این دو نوع فناوری، فرآیندهای شیمیایی نیز برای جداسازی نمک از آب شور ارائه شده‌اند [۲]. در فرایند الکترولیز محلول آب نمک با جریان مستقیم، هرچه سطح تماس الکترودها با الکترولیت (آب نمک) بیشتر باشد، بازده بالاتری از الکترولیز نیز حاصل می‌گردد. در صورتی که هدف از الکترولیز کاهش نمک‌های محلول در آب باشد، می‌بایست برای غلبه بر انرژی پیوند مولکولی نمک‌ها، چگالی جریان را در سطح لازم حفظ کرد. این امر خود بیانگر این است که مواردی نظیر جریان عبوری از الکترودها و نوع آن، سطح ولتاژ، مساحت الکترودها و فاصله آنها از یکدیگر باید مورد توجه قرار داشته باشند [۳].

توان مصرفی الکترولیز آب نمک برای الکترودهای مختلف و سطوح شوری مختلف توسط لاکاسا و همکاران بررسی شده است [۴]. آنها نشان دادند که برای الکترودهای اکسید ایریدیوم به همراه تیتانیوم<sup>۲</sup> و پلاتین به همراه تیتانیوم<sup>۳</sup>، مصرف انرژی بهینه در محدوده چگالی جریان ۳۰-۵۰ میلی‌آمپر بر سانتیمتر مربع رخ می‌دهد. در سالهای اخیر تلاشهایی بر روی توسعه مدل‌های ریاضی برای توصیف عملکرد الکترولیز صورت گرفته است [۵]. مدل‌های تجربی توسعه یافته به دلیل دقت بالا برای توصیف تاثیر پارامترهای عملکردی، بیشتر مورد توجه بوده‌اند. به ویژه مدل اولبرگ [۶] که مطالعه قابل توجهی بر روی عملکرد الکترولیز داشته است. انرژی باد در کار کیائی و همکاران [۷] و نیز انرژی خورشیدی در کار جیانگ و همکاران [۸] برای الکترولیز استفاده شده است. همچنین کیائی و همکاران [۹] تاثیر شبکه برق را بر روی الکترولیز مورد بررسی قرار داده‌اند. ترکیب الکترولیز با نیروگاه میکرو با هدف کنترل فرآیند توسط گیاهالی و اوساوا [۱۰] صورت گرفته است.

امواج الکترومغناطیسی در محدوده میکروموج (با فرکانس ۳۰۰ مگاهرتز تا ۳۰۰ گیگاهرتز) برای سرعت بخشیدن به واکنش‌های شیمیایی بکار رفته و نرخ واکنش‌ها را در مقایسه با حالت عادی افزایش می‌دهند [۱۱-۱۵]. به عنوان نمونه برای پالایش پساب به کمک امواج الکترومغناطیسی در مقایسه با روشهای گرمایشی مرسوم، مزایای فراوانی چون کارایی

<sup>2</sup> IrO<sub>2</sub>/Ti

<sup>3</sup> Pt/Ti

بالا، زمان واکنش کوتاه، هزینه‌های کم و حذف آلاینده‌های ثانویه مطرح شده است [۱۶-۲۰]. انرژی امواج الکترومغناطیسی برای بهبود سنتز مواد، واکنش‌های پلیمری، علم مواد، نانوفناوری و بیومکانیک بکار رفته و کاربردهای روزافزونی داشته است [۲۱]. دلایل مختلفی برای توجیه توانایی امواج الکترومغناطیسی در بهبود فرآیندهای شیمیایی ارائه شده است. گابریل و همکاران عنوان کرده‌اند که بهبود فرآیندها به دلیل اثرات حرارتی و جنبشی امواج بوده و در نتیجه گرمایش سریع و افزایش دما در استفاده از این امواج مشاهده شده است [۲۲]. از دیدگاه دیگر، این بهبود ناشی از برهم‌کنش‌های گزینشی میدان الکترومغناطیسی در برخورد با مولکولهای ماده مورد آزمایش یا کاتالیست‌هاست و به عنوان اثرات غیرحرارتی امواج الکترومغناطیسی شناخته می‌شود [۲۳ و ۲۴].

ژو و همکاران رویکرد جدیدی از بکارگیری امواج میکروموج برای حذف مونو اکسید نیتروژن<sup>۴</sup> به صورت حذف انتخابی معرفی نمودند [۱۱]. این گروه همچنین واکنش‌های شیمیایی سیستم‌های کاتالیستی ناهمگون را تحت اثر امواج الکترومغناطیسی بررسی کرده‌اند [۱۲]. نتایج آنها نشان می‌دهد که سرعت واکنش‌های شیمیایی که با حضور امواج الکترومغناطیسی حاصل می‌شود، در روش مرسوم و بدون حضور امواج الکترومغناطیسی قابل حصول نخواهد بود. تاثیر گزینشی امواج الکترومغناطیسی در استخراج اکسیژن از مونو اکسید نیتروژن و با حضور کاتالیست<sup>۵</sup> در پژوهش دیگری از همان گروه بررسی شده است [۱۳]. همچنین آنها تاثیر مجموعه‌ای از پارامترهای واکنشی از جمله رفتار گرمایشی امواج الکترومغناطیسی، دمای واکنش، دمای گاز خروجی، توان ورودی امواج و غلظت اکسیژن را بررسی کردند [۱۴]. آنها دریافتند که امواج الکترومغناطیسی دارای تاثیر گزینشی در مود واکنش کاتالیستی هستند. علاوه بر این مشاهده کردند که استفاده از امواج الکترومغناطیسی با هدف گرمایش گزینشی کربن، نتایج ترمودینامیکی متفاوتی برای واکنش‌ها در پی خواهد داشت [۱۵]. در کار دیگر این گروه، تبدیل هیدروژن سولفید<sup>۶</sup> به هیدروژن و فسفر توسط امواج میکروموج مورد بررسی قرار گرفت که تاثیر این امواج در کارایی فرآیند قابل توجه گزارش شده است [۱۶].

تبدیل موثر مونو اکسید نیتروژن و تجزیه هیدروژن سولفید به کمک امواج الکترومغناطیسی توسط توکونیتی و همکاران بررسی شد که کاهش چشمگیر انرژی فعالسازی فرآیند به کمک امواج الکترومغناطیسی را به دنبال داشته است [۱۷]. وانگ و وانگ به بازنگری مطالعات صورت گرفته در خصوص تاثیر امواج میکروموج بر روی پالایش پساب پرداختند که نتایج گزارش شده حاکی از کارآمدی این امواج برای این فرآیندها بوده است [۱۸]. از جمله این موارد می‌توان به تاثیر این امواج در حذف فنول از پساب در کار لیو و همکاران اشاره نمود [۱۹]. لی و همکاران نیز تاثیر امواج میکروموج در تسریع شکست پیوند متیل اورنج را بررسی نموده‌اند [۲۰].

شبیه‌سازی فرآیند الکترولیز نیز از جمله مطالعات سالهای اخیر بوده است. آیپک شبیه‌سازی عددی اسیدشویی الکترولیزی فولاد را گزارش داده است [۲۵]. لو و همکاران یک مدل عددی پایا برای الکترولیز آب شور با جابجایی اجباری را ارائه داده است [۲۶]. معادلات نویر استوکس و نرنست پلانک با استفاده از تکنیک المان محدود حل شده است تا نفوذ، جابجایی و مهاجرت یونی را مدل کنند. همچنین کین و بائو حل معادلات کوپل شده‌ی نرنست پلانک، نویر استوکس و ماکسول را برای شبیه‌سازی جریان هیدرودینامیکی به همراه میدان مغناطیسی گزارش کرده‌اند [۲۷].

<sup>4</sup> NO

<sup>5</sup> BaMnxMg1xO<sub>3</sub>

<sup>6</sup> H<sub>2</sub>S

با اینکه مطالعات بسیاری در خصوص تاثیر امواج الکترومغناطیسی بر روی فرآیندهای شیمیایی صورت گرفته است، لکن بررسی تاثیر این امواج بر روی نمک‌زدایی از آب شور بسیار محدود بوده است. در فرآیند الکترولیز آب شور که شکست پیوندها توسط جریان مستقیم الکتریسیته رخ می‌دهد، اعمال امواج الکترومغناطیسی به آب، موجب افزایش جنبش مولکولی شده و در نتیجه با عبور جریان کمتر از قطب‌های آند و کاتد، فرآیند تجزیه املاح صورت می‌پذیرد. همچنین با عبور جریان کمتر از قطب‌ها، سرعت خوردگی و تولید محصولات جانبی که امری نامطلوب محسوب می‌شود نیز کاهش می‌یابد. در نهایت می‌توان اشاره داشت که استفاده از امواج الکترومغناطیسی در الکترولیز آب شور، علاوه بر بهبود بازده انرژی، موجب کنترل بهتر فرآیند با کاهش میزان خوردگی و تولید محصولات جانبی نیز خواهد شد.

در این مقاله تاثیر امواج الکترومغناطیسی بر روی عملکرد الکترولیز آب نمک شبیه‌سازی شده است که مطالعه آزمایشگاهی آن توسط همین گروه صورت گرفته است [۲۸]. جهت ارزیابی مدل، میدان جریان سیال در راکتور با مدل تحلیلی مقایسه شده و در ادامه نتایج شبیه‌سازی الکترولیز آب شور<sup>۷</sup> با الکترومغناطیسی آب شور<sup>۸</sup> مقایسه شده است. در نهایت نیز تاثیر پارامترهایی چون قطر الکترود آند، ولتاژ و شوری محلول بر عملکرد الکترولیز الکترومغناطیسی در فرکانس ۹۰۰ مگاهرتز و مطابق با کار آزمایشگاهی همین گروه [۲۸] شبیه‌سازی شده است.

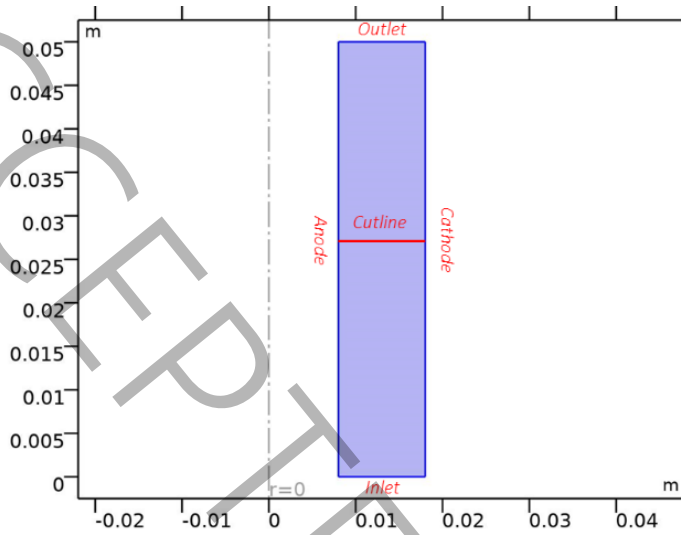
## (۲) ملاحظات شبیه‌سازی

### ۲-۱) هندسه و شرایط مرزی

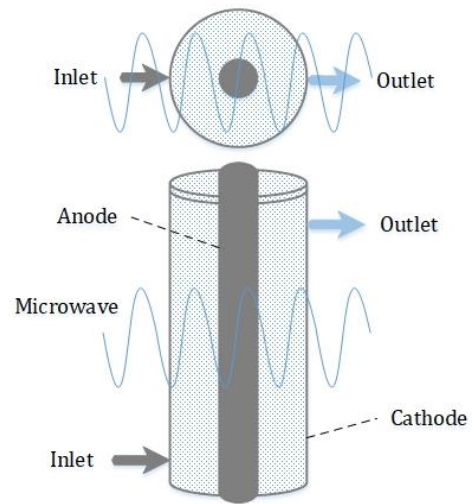
شبیه‌سازی حاضر بر روی یک هندسه متقارن محوری مطابق با کار آزمایشگاهی [۲۸] انجام شده است که دارای طول ۵۰ میلی‌متر، قطر خارجی ۳۶ میلی‌متر و قطر داخلی ۸، ۱۲، ۱۶ و ۲۰ میلی‌متر می‌باشد. مدل هندسی در نظر گرفته شده، در شکل ۱ نشان داده شده است. جریان جرمی ورودی با شوری اولیه معادل ۱۱۰، ۲۲۰، ۳۳۰ و ۴۴۰ مول بر متر مکعب به مدل اعمال می‌شود. مرز پایین ورودی جریان و مرز بالا خروجی جریان در نظر گرفته شده است. مرز سمت چپ که شعاع داخلی محسوب می‌شود به عنوان آند و مرز سمت راست که شعاع خارجی محسوب می‌شود به عنوان کاتد در نظر گرفته شده است. در مش‌بندی تعداد ۱۵۰۰۰ المان در هندسه متقارن محوری ایجاد شده و به علت گرادیان بزرگتر سرعت و غلظت، مناطق نزدیک به دیواره الکترودها دارای مش‌بندی ریزتری خواهند بود.

<sup>7</sup> Electrolysis (EL)

<sup>8</sup> Electromagnetic electrolysis reactor (EMER)



(ب)



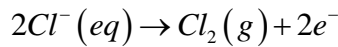
(الف)

شکل (۱) (الف) شمای هندسی و (ب) مدل عددی و شرایط مرزی راکتور الکترولیز الکترومغناطیسی

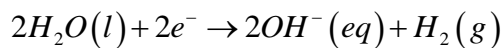
Figure (1): (a) Schematic diagram and (b) computational area of microwave assisted electrolysis reactor system

## ۲-۲ واکنش‌های شیمیایی

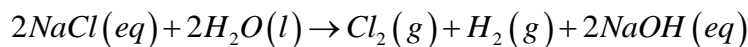
الکترولیز آب‌نمک شامل دو نیم واکنش در الکترودها و یک واکنش کلی در الکترولیت می‌باشد. نیم واکنش آند شامل آزادسازی کلر و نیم واکنش کاتد شامل آزادسازی هیدروژن است. شکستن پیوند نمک محلول در آب نیز در واکنش الکترولیت رخ می‌دهد. مقدار هیپوکلریت سدیم تولید شده مستقیماً با مقدار جریان الکتریکی گذرانده شده از داخل الکترولیت متناسب می‌باشد. فرآیند شیمیایی الکترولیز آب‌نمک به صورت زیر می‌باشد [۲۹].



معادله (۱): واکنش آند



معادله (۲): واکنش کاتد



معادله (۳): واکنش کلی

تعادل ترمودینامیکی کلر در محلول بسیار پیچیده است و در صورتی که pH محلول کوچکتر از ۷/۴۶ باشد، مشابه معادله (۴) اسید هیپوکلروس<sup>۹</sup> و اگر بزرگتر از مقدار مذکور باشد، مشابه معادله (۵) یون هیپوکلریت<sup>۱۰</sup> تشکیل می‌شود [۳۰]:



یونهای سدیم<sup>۱۱</sup>، کلر<sup>۱۲</sup> و هیدروکسید<sup>۱۳</sup> به عنوان یونهای داخل جریان در نظر گرفته شده‌اند.

### ۲-۳) فیزیک‌های مورد استفاده

آبنمک یک سیال تراکم‌ناپذیر نیوتنی است و جریان سیال در ورودی به صورت آرام در نظر گرفته می‌شود. معادلات پیوستگی و نویر استوکس برای تعادل جرم و مومنتوم سیال به صورت زیر تعریف می‌شوند:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0 \quad \text{معادله (۶)}$$

$$\frac{\partial \vec{u}}{\partial t} + \rho (\vec{u} \cdot \nabla) \vec{u} = \nabla p + \nabla \cdot \left[ \nabla \vec{u} + (\nabla \vec{u})^T \right] + \vec{F} \quad \text{معادله (۷)}$$

که در آن چگالی سیال،  $\mu$  بردار سرعت،  $p$  فشار،  $\mu$  ویسکوزیته دینامیکی سیال و  $F$  نیروی حجمی است. در یک محلول یونی که در معرض میدان الکتریکی قرار دارد، انتقال ذرات باردار با سه مکانیزم مهاجرت (ناشی از گرادیان ولتاژ)، جابجایی (ناشی از جریان سیال) و نفوذ (ناشی از گرادیان غلظت) صورت می‌گیرد. در اثر مهاجرت، یونهای مثبت در راستای میدان الکتریکی و از پتانسیل مثبت به سمت پتانسیل منفی مهاجرت نموده و یونهای منفی مسیر معکوس را طی خواهند کرد. شار جرمی ذرات  $i$  در الکترولیت توسط معادله نرنست پلانک بیان می‌شود [۳۱]:

$$\vec{N}_i = -D_i \nabla c_i - Z_i \mu_i c_i \nabla \Phi + \vec{u} c_i \quad \text{معادله (۸)}$$

<sup>۹</sup> HOCl

<sup>۱۰</sup> ClO<sup>-</sup>

<sup>۱۱</sup> Na<sup>+</sup>

<sup>۱۲</sup> Cl<sup>-</sup>

<sup>۱۳</sup> OH<sup>-</sup>

که در آن  $c_i$  غلظت،  $D_i$  ضریب نفوذ،  $\mu_i$  مهاجرت یونی،  $Z_i$  عدد بار ذره  $i$  و  $\Phi$  پتانسیل الکتریکی است. سه انتقال جرم نفوذ، مهاجرت یونی و جابجایی به ترتیب ترمهای اول، دوم و سوم معادله فوق هستند. همچنین معادله پیوستگی جرم ذره  $i$  عبارت است از:

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{N}_i = 0 \quad \text{معادله (۹)}$$

معادلات ماکسول روابط میان مقادیر اساسی امواج الکترومغناطیسی چون شدت میدان الکتریکی  $E$ ، چگالی شار الکتریکی یا جابجایی الکتریکی  $D$ ، شدت میدان مغناطیسی  $H$ ، چگالی شار مغناطیسی  $B$ ، چگالی جریان  $J$  و چگالی بار الکتریکی  $\rho$  را بیان می‌کنند. معادلات می‌توانند به صورت دیفرانسیلی یا انتگرالی بیان شوند. برای میدان‌های عمومی متغیر با زمان، معادلات ماکسول می‌توانند به صورت زیر نوشته شوند [۳۲]:

$$\nabla \times \vec{H} = \vec{J} + \frac{\partial \vec{D}}{\partial t} \quad \text{معادله (۱۰)}$$

$$\nabla \times \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad \text{معادله (۱۱)}$$

$$\nabla \cdot \vec{D} = \rho \quad \text{معادله (۱۲)}$$

$$\nabla \cdot \vec{B} = 0 \quad \text{معادله (۱۳)}$$

معادله اساسی دیگر، معادله پایستگی بار الکتریکی است که عبارت است از:

$$\nabla \cdot \vec{J} = -\frac{\partial \rho}{\partial t} \quad \text{معادله (۱۴)}$$

از بین پنج معادله فوق، تنها سه معادله مستقل هستند. دو معادله اول به همراه معادله پایستگی بار الکتریکی یک سیستم مستقل را تشکیل می‌دهند.

## ۲-۴) رویکردهای عددی

از نرم‌افزار کامسول<sup>۱۴</sup> برای حل معادلات حاکم استفاده شده است. پارامترهای هندسی و فیزیکی مدل در جدول ۱ ارائه شده‌اند که این مشخصات بر اساس مدل آزمایشگاهی و مشخصات فیزیکی یون‌های سدیم و کلر تعیین شده‌اند.

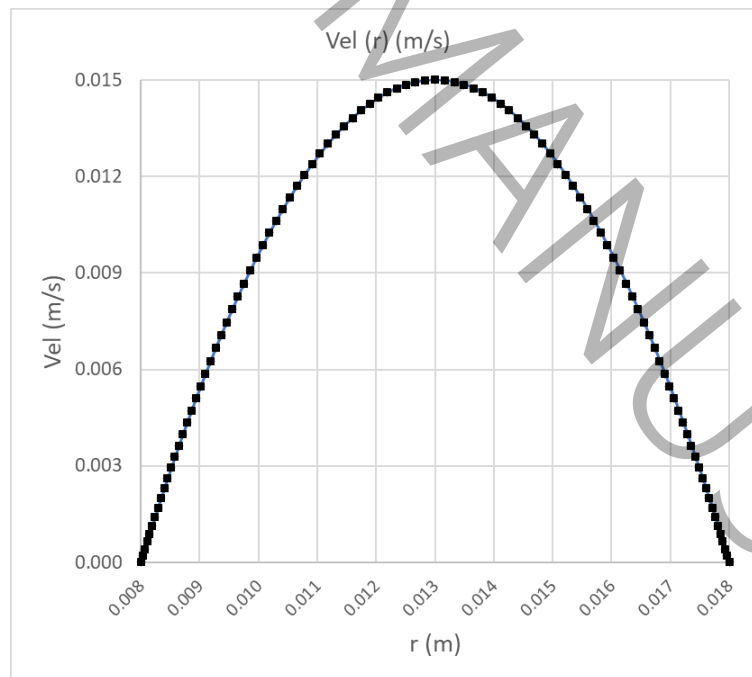


جدول (۱): پارامترهای فیزیکی برای شبیه‌سازی فرآیند الکترولیز و الکترومغناطیسی

Table (1): Physical parameters used in the simulation of EMER

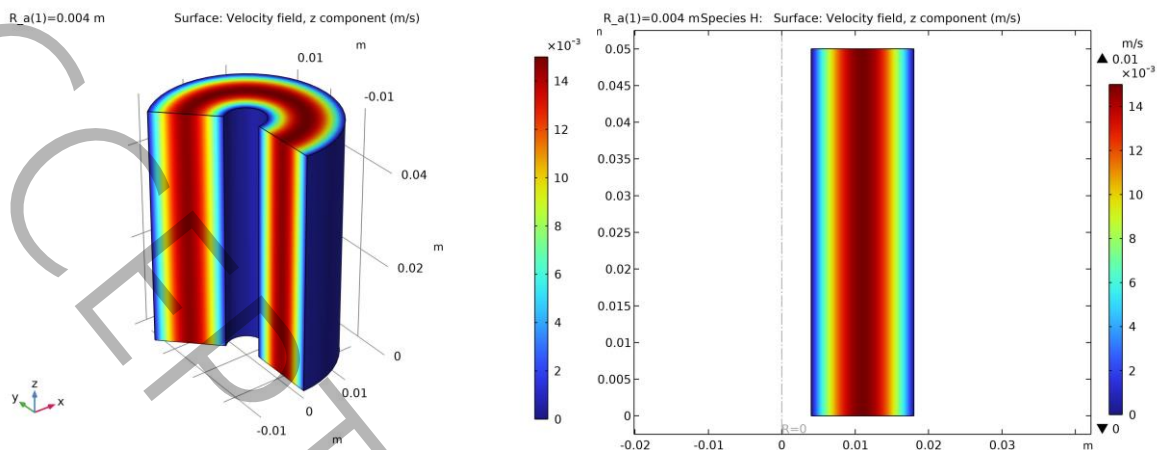
عنوان	مقدار	واحد (یکا)
پتانسیل (ولتاژ)	۱۶-۱۰	V
ضریب نفوذ سدیم	$2/5 \times 10^{-9}$	$m^2/s$
ضریب نفوذ کلر	$2/0 \times 10^{-9}$	$m^2/s$
دما	۲۹۸/۱۵	K
غلظت ورودی سدیم	۴۴۰-۱۱۰	$mol/m^3$
غلظت ورودی کلر	۴۴۰-۱۱۰	$mol/m^3$
طول کانال	۰/۰۵	m
شعاع آند	۱۰-۴	mm
شعاع کاتد	۱۸	mm

به منظور صحت‌سنجی نتایج شبیه‌سازی، میدان سرعت سیال شبیه‌سازی شده برای خروجی کانال در این مدل با حل تحلیلی [۳۳] مقایسه شده است. همانطور که در شکل ۲ مشاهده می‌شود، نتایج شبیه‌سازی تطبیق نزدیکی با نتایج تحلیلی داشته است. لذا با توجه به دقت محاسبات میدان سرعت، پروفیل سرعت تحلیلی به عنوان سرعت ورودی کانال اعمال شده است. همچنین کانتورهای دوبعدی و سه‌بعدی میدان سرعت برای راکتور الکترولیز آب‌نمک در شکل ۳ نشان داده شده است.



شکل (۲) مقایسه نتایج عددی و تحلیلی میدان سرعت در کانال راکتور الکترولیز آب نمک

Figure (2): Comparison between the numerical and analytical results of the axial velocity in the channel



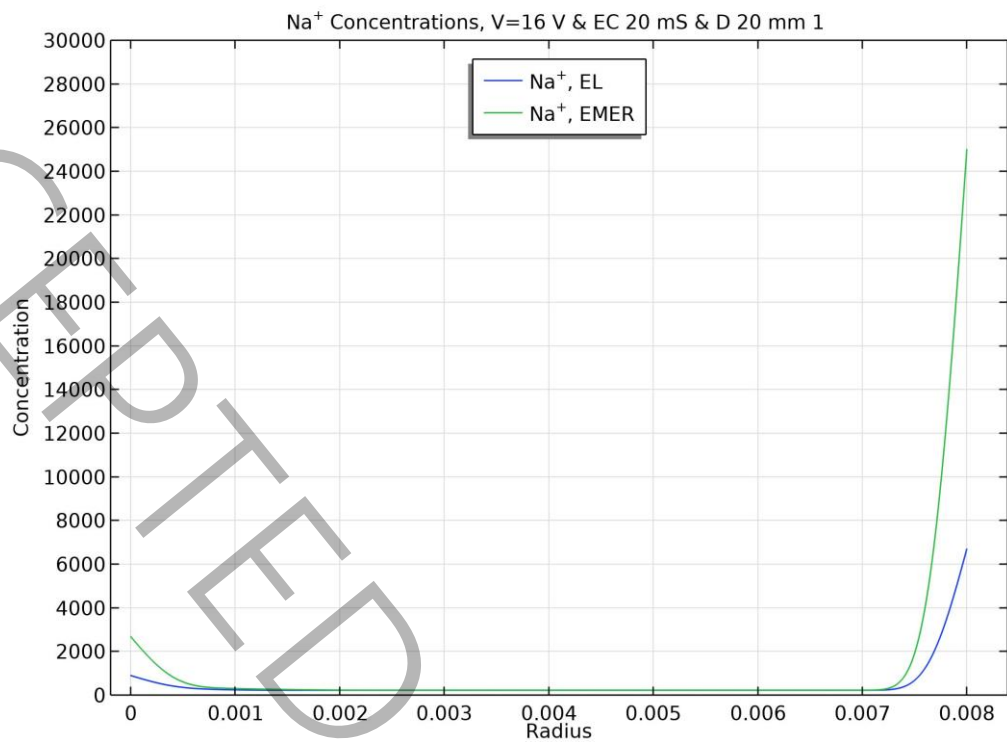
شکل (۳) کانتورهای دوبعدی و سه‌بعدی میدان سرعت در کانال راکتور الکترولیز آب‌نمک

Figure (3): 2D and 3D velocity contour of the saline water electrolysis reactor

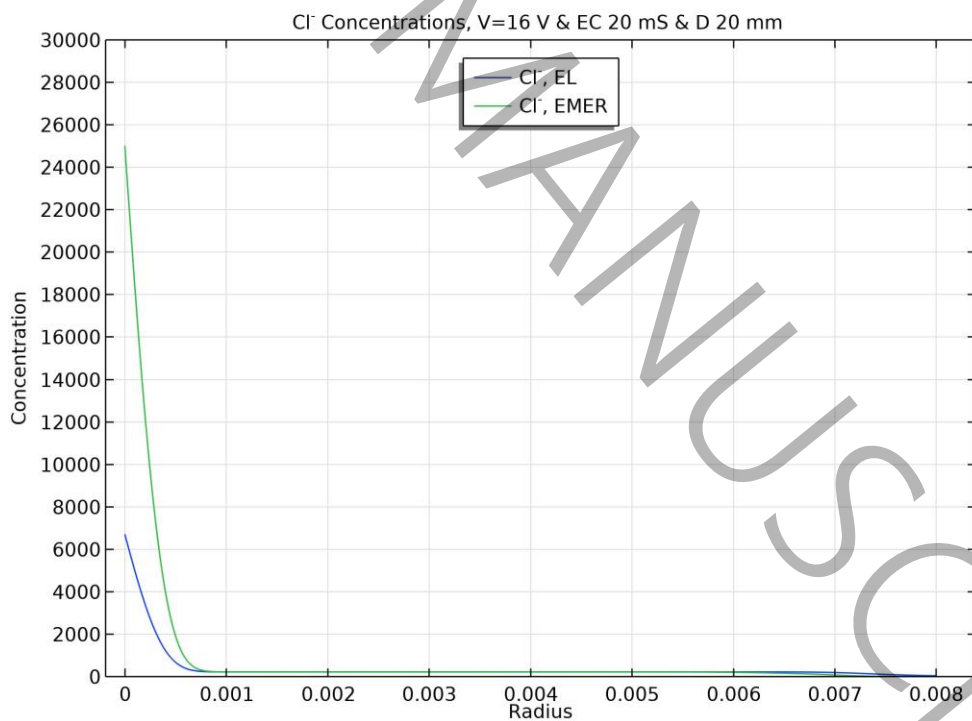
## (۳) نتایج شبیه‌سازی

### ۳-۱) تاثیر امواج الکترومغناطیسی

مقایسه غلظت یون‌های کلر و سدیم میان شبیه‌سازی الکترولیز و الکترولیز الکترومغناطیسی برای ولتاژ اعمالی ۱۶ ولت و قطر آند ۲۰ میلی‌متر در شکل ۴ ارائه شده است. از نتایج شکل ملاحظه می‌شود که برای هر دو راکتور الکترولیز و الکترولیز الکترومغناطیسی، یون کلر بیشتر در سمت الکتروود آند و یون سدیم بیشتر در سمت الکتروود کاتد جمع شده‌اند. نتیجه مهم و قابل توجه دیگر اینکه میزان تجمع یون‌های کلر و سدیم (به ترتیب در الکترودهای آند و کاتد) در فرآیند الکترولیز الکترومغناطیسی بیشتر از فرآیند الکترولیز است. لذا نتایج نشان می‌دهد که امواج الکترومغناطیسی فرآیند الکترولیز را از ۱۲/۴ درصد تا ۴۲/۱ درصد بهبود بخشیده است. اختلاف میان دو نمودار می‌تواند ناشی از کاهش انرژی مورد نیاز برای جداسازی یون‌ها و افزایش نرخ واکنش در حضور امواج الکترومغناطیسی باشد. در حقیقت اثرات غیر حرارتی امواج الکترومغناطیسی منجر به برهم‌کنش میان میدان‌های الکتریکی و مولکولهای قطبی الکترولیت شده و از این طریق حرکت یون‌ها و مولکول‌ها در میدان الکتریکی ساده‌تر خواهد شد. این پدیده در نهایت منجر به جداسازی بهتر و بیشتر یون‌ها در حضور امواج الکترومغناطیسی خواهد شد.



(الف)

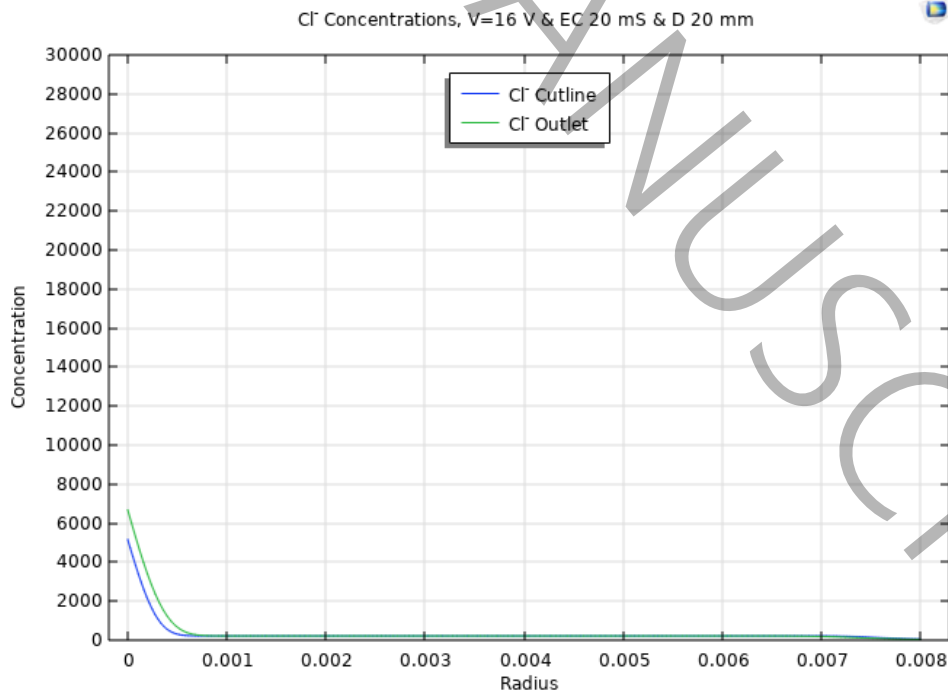
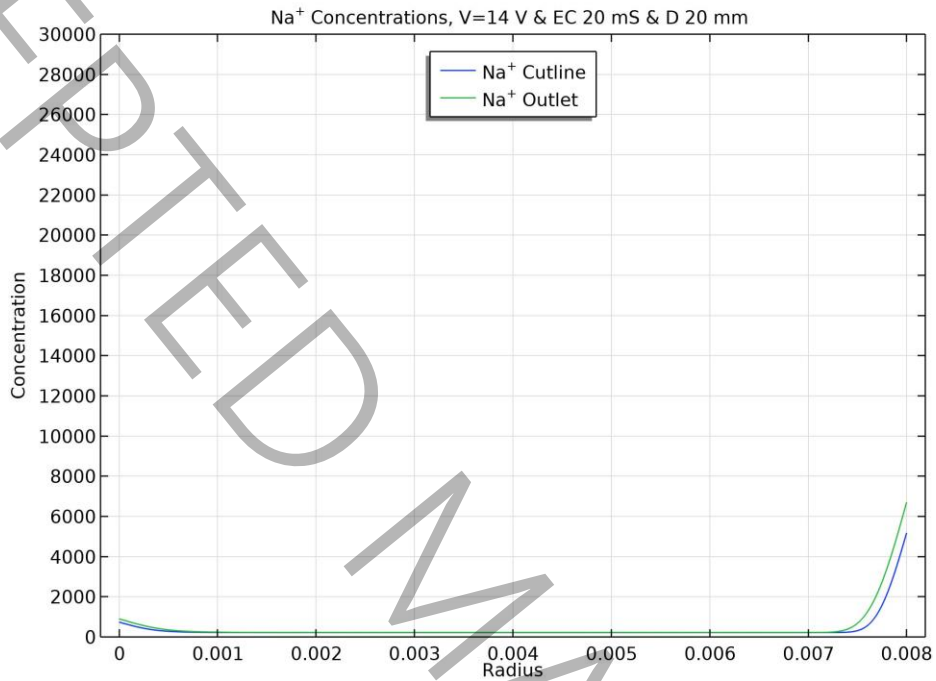


(ب)

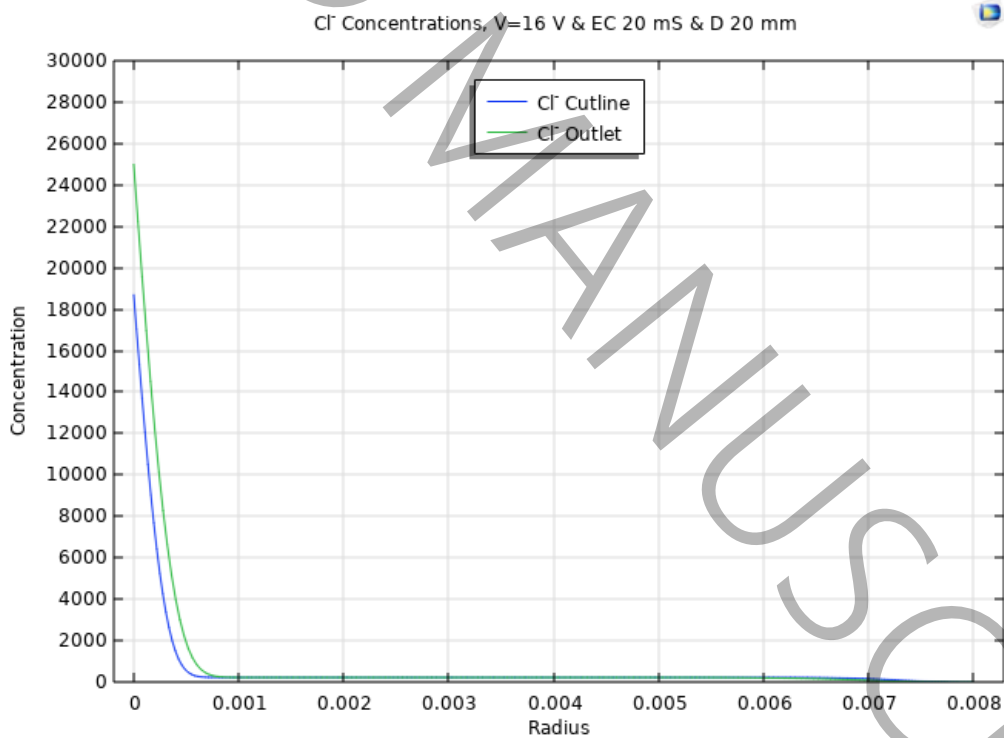
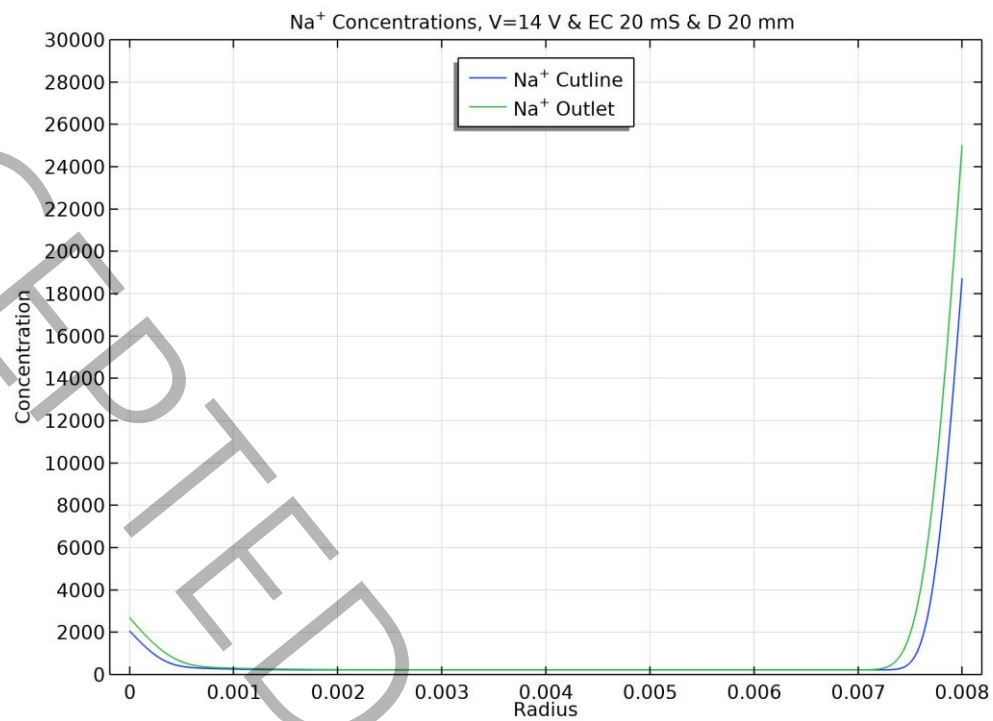
شکل (۴): مقایسه‌ی توزیع غلظت یونهای سدیم (الف) و کلر در خط خروجی راکتورهای الکترولیز و الکترومغناطیسی

Figure (4): Comparison of (a) Cl<sup>-</sup> and (b) Na<sup>+</sup> concentrations at outlet between EL and EMER

همچنین پروفیل مقایسه‌ی توزیع غلظت یونهای کلر و سدیم برای خطوط میانه و خروجی راکتورهای الکترولیز و الکترولیز الکترومغناطیسی در شکل ۵ ارائه شده است. موقعیت خطوط میانه و خروجی در شکل ۱-ب قابل مشاهده می‌باشد. همچنان ملاحظه می‌شود که فرآیند الکترولیز در حضور امواج الکترومغناطیس بهبود چشمگیری داشته است. نکته قابل تامل دیگری که از مقایسه نتایج خط میانی و خروجی حاصل می‌شود این است که طول راکتور به مقدار مناسبی در نظر گرفته شده است و عمده فرآیند در هر دو راکتور تا خط میانی شکل گرفته است.



(الف)



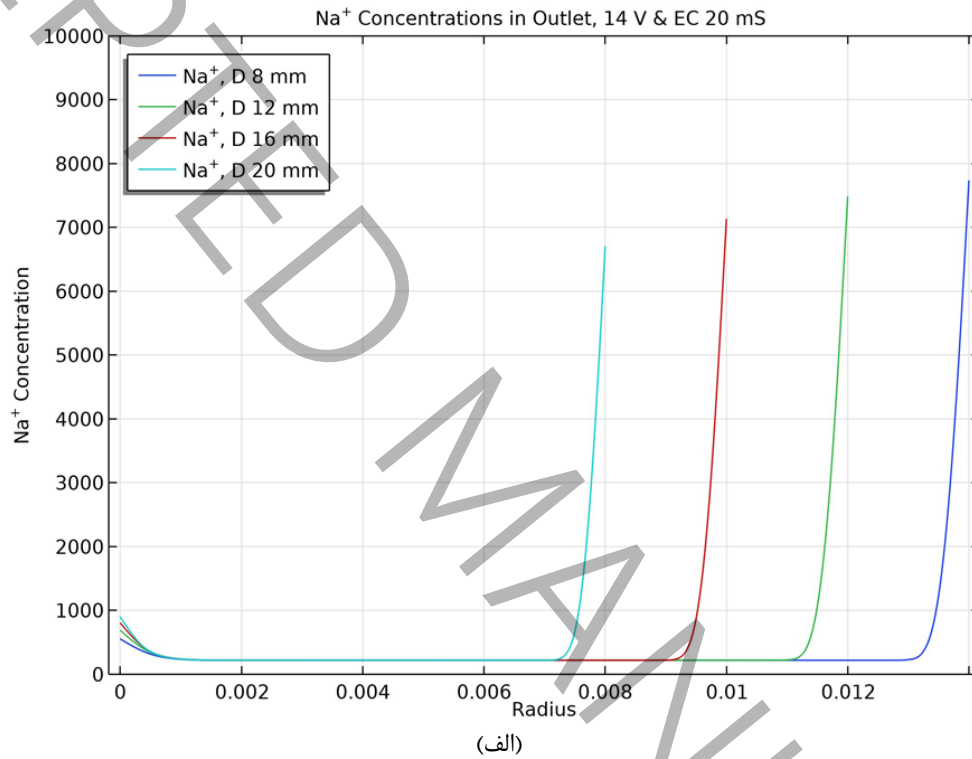
(ب)

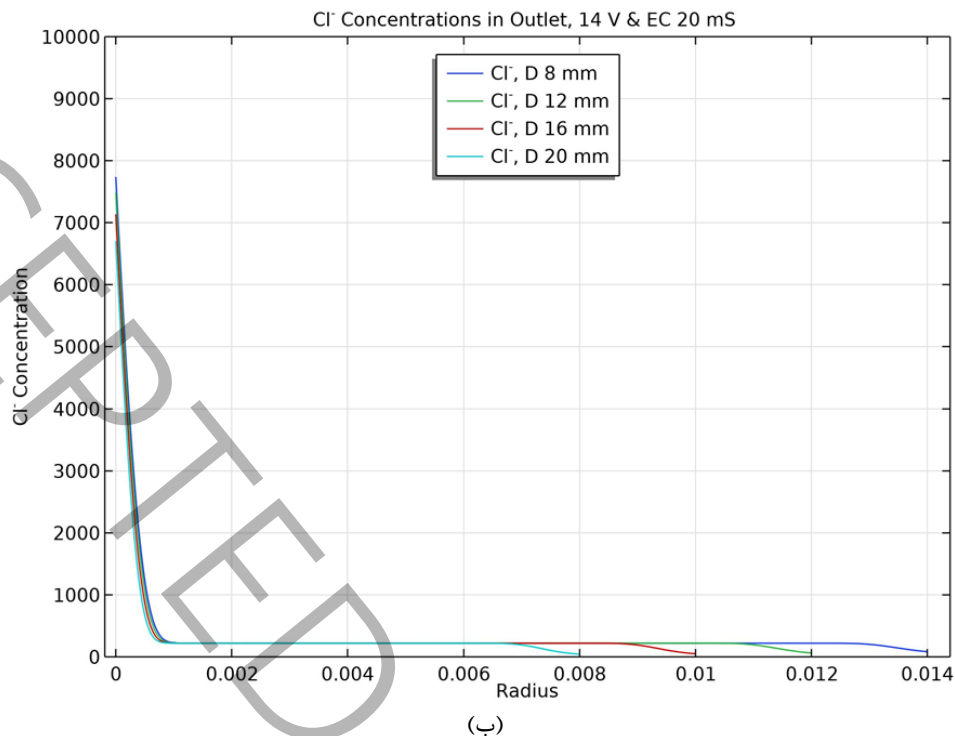
شکل (۵) مقایسه‌ی توزیع غلظت یونهای کلر و سدیم در خطوط میانه و خروجی (الف) الکترولیز و (ب) الکترومغناطیسی

Figure (5): Comparison of Cl<sup>-</sup> and Na<sup>+</sup> concentrations between cutline and outlet for (a) EL and (b) EMER

### ۳-۲) تاثیر قطر الکترود آند

شکل ۶ غلظت یونهای سدیم و کلر برای چهار قطر مختلف آند و در فرآیند الکترولیز را نشان می‌دهد. ملاحظه می‌شود که با افزایش قطر آند از ۸ به ۲۰ میلی‌متر، فاصله میان الکترودها از ۱۴ به ۸ میلی‌متر کاهش یافته و میزان غلظت یون در نزدیکی الکترود نیز کاهش می‌یابد و بهترین نتیجه برای قطر آند ۸ میلی‌متر (معادل فاصله ۱۴ میلی‌متری الکترودها) حاصل می‌شود. با افزایش قطر الکترود در فرآیند الکترولیز، جداسازی یون‌ها از ۱۲/۴ درصد برای قطر ۸ میلی‌متر تا ۱۰/۷ درصد برای قطر ۲۰ میلی‌متر کاهش می‌یابد.

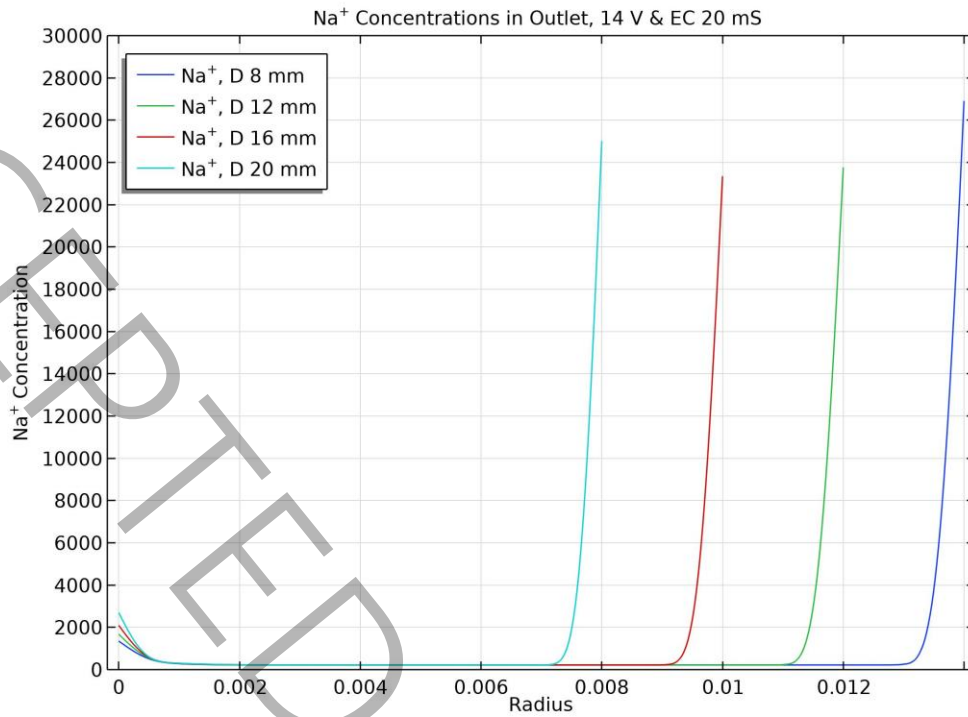




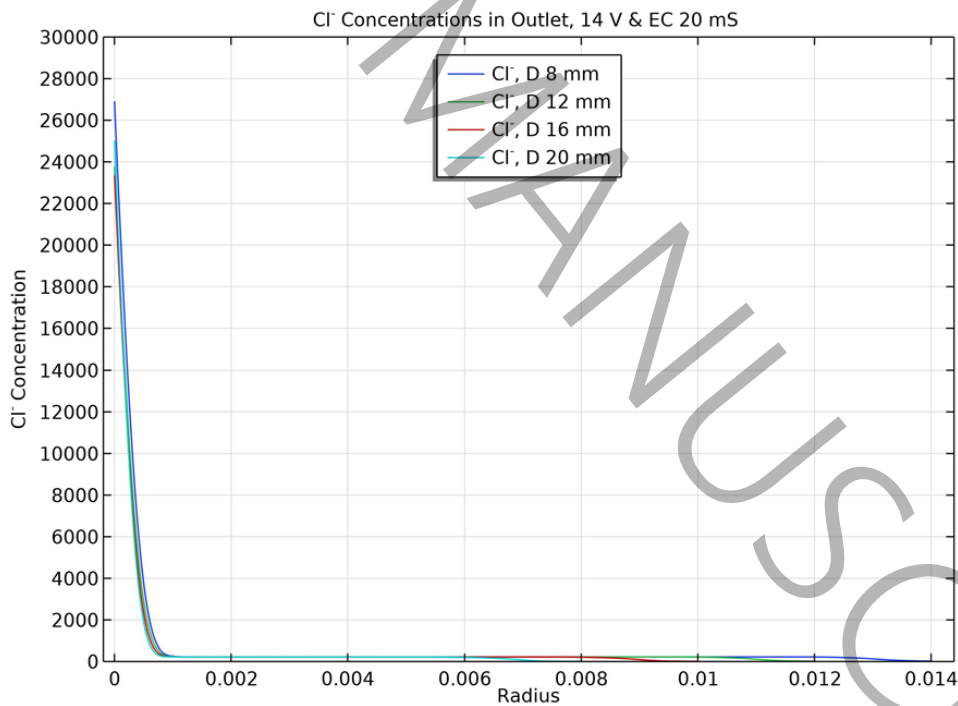
شکل (۶): مقایسه توزیع غلظت یونهای سدیم و کلسیم در فرآیند الکترولیز برای قطرهای مختلف

Figure (6): The (a) Cl<sup>-</sup> and (b) Na<sup>+</sup> concentrations at the EL outlet and several electrode diameters

همچنین غلظت یونهای سدیم و کلسیم برای چهار قطر مختلف آند و در فرآیند الکترولیز الکترومغناطیسی در شکل ۷ نشان داده شده است. ملاحظه می‌شود که با افزایش قطر آند از ۸ تا ۱۶ میلی‌متر، غلظت یون در نزدیکی الکترود کاهش می‌یابد ولی این روند کاهشی با افزایش قطر آند از ۱۶ به ۲۰ میلی‌متر ادامه نمی‌یابد. کمترین میزان غلظت یون در نزدیکی الکترودها و در شبیه‌سازی الکترولیز الکترومغناطیسی برای قطر آند ۱۶ میلی‌متر رخ می‌دهد. کاهش غلظت یون بر اثر افزایش قطر آند از ۸ تا ۱۶ میلی‌متر به دلیل کاهش فاصله میان الکترودها رخ می‌دهد و افزایش غلظت یون بر اثر افزایش قطر آند از ۱۶ تا ۲۰ میلی‌متر به دلیل افزایش سطح موثر آند رخ می‌دهد. طبق نتایج، بیشترین و کمترین جداسازی یون‌ها در فرآیند الکترولیز الکترومغناطیسی به ترتیب ۴۳/۱ درصد برای قطر ۸ میلی‌متر و ۳۷/۴ درصد برای قطر ۱۶ میلی‌متر بدست آمده است.



(الف)



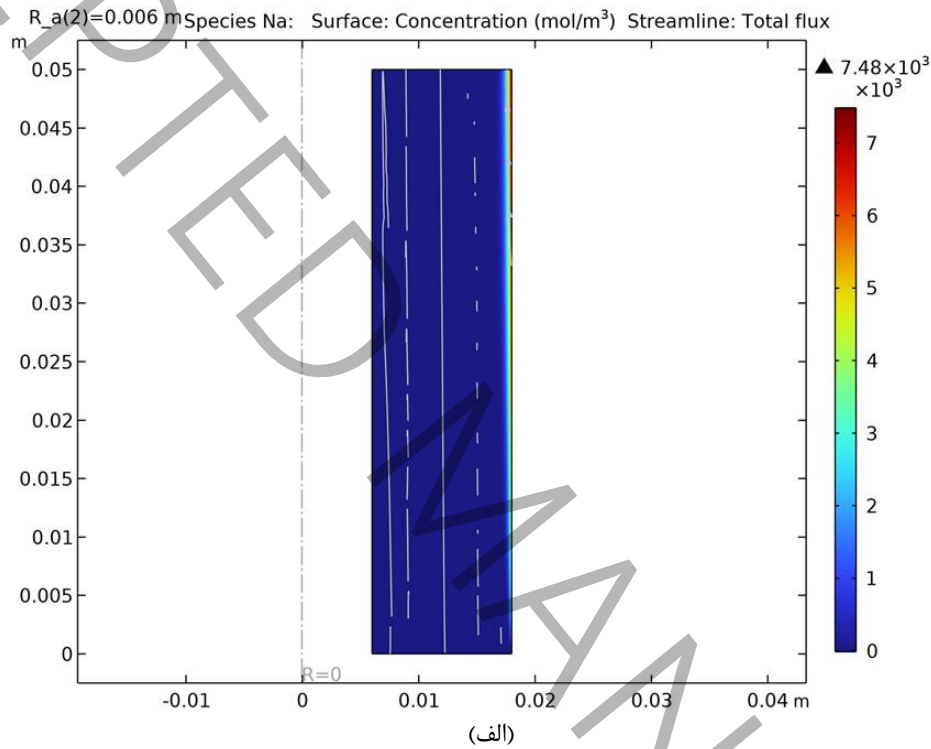
(ب)

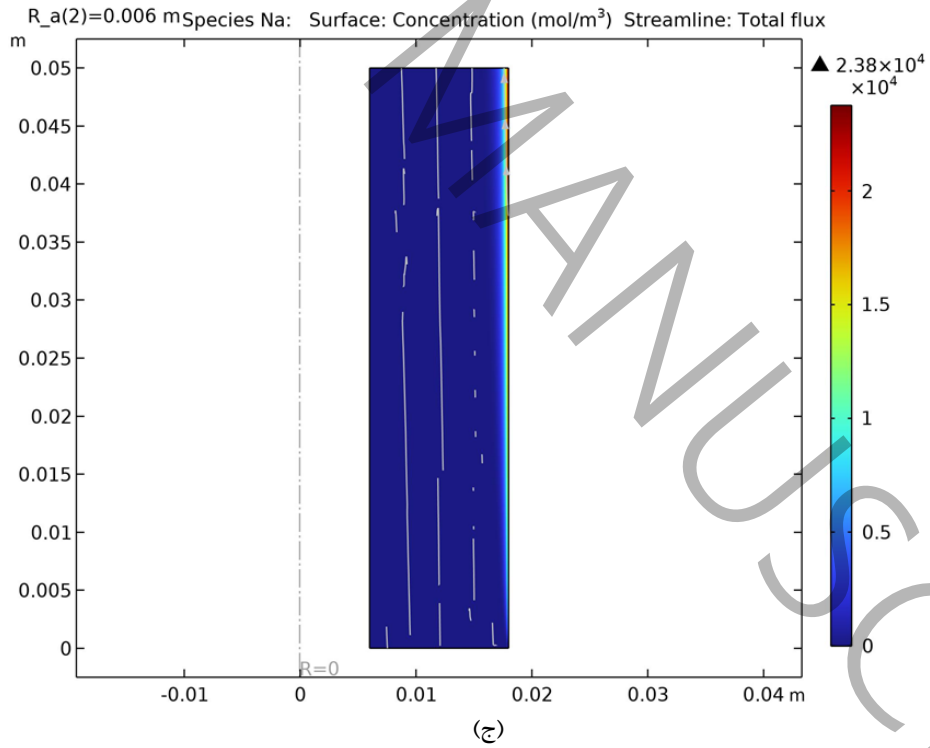
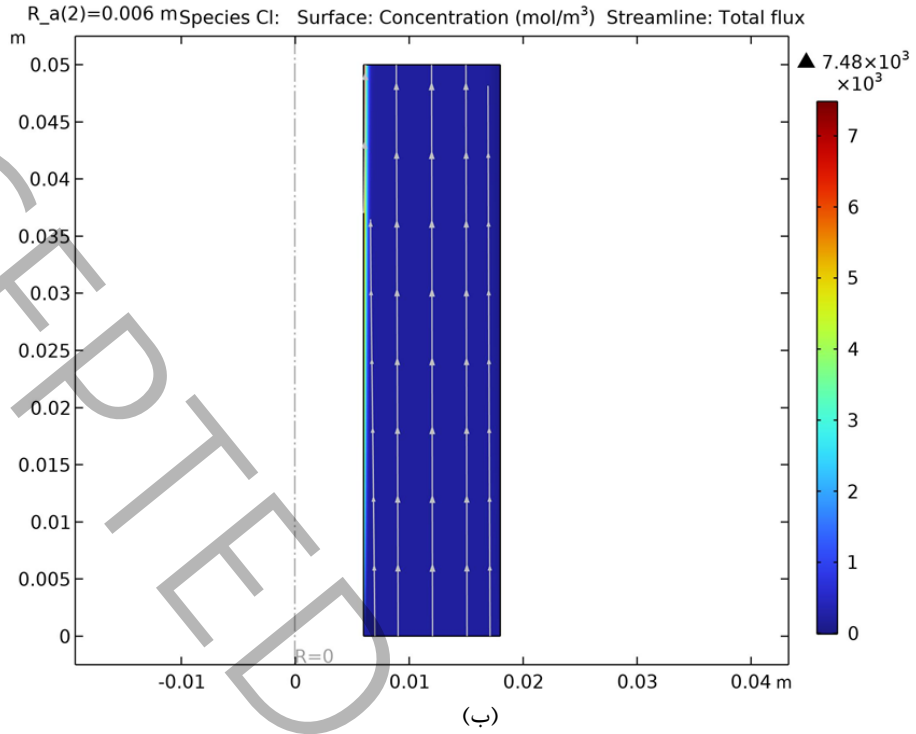
شکل (۷): مقایسه توزیع غلظت یونهای سدیم و کلر در فرآیند الکترومغناطیسی برای قطرهای مختلف

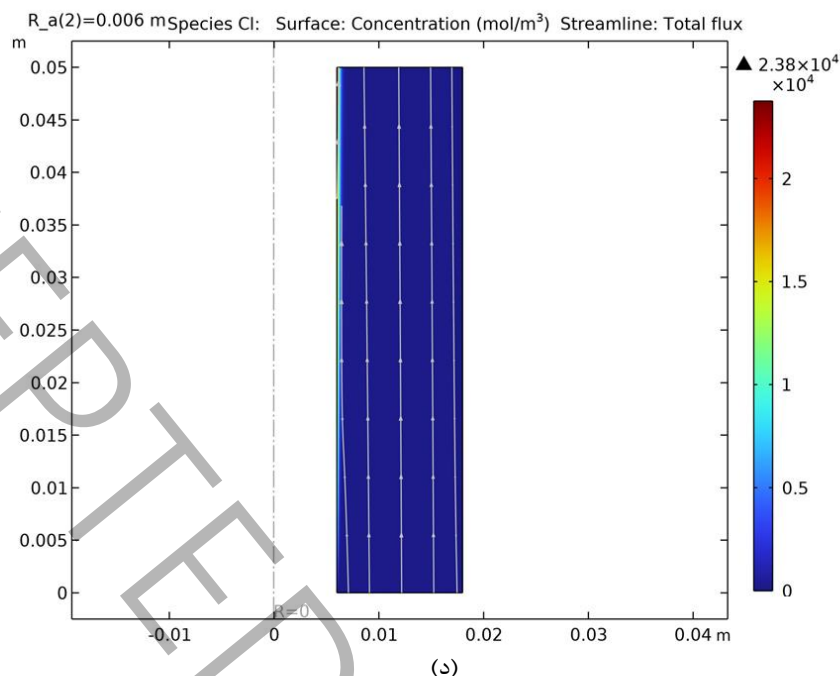
Figure (7): The (a) Cl<sup>-</sup> and (b) Na<sup>+</sup> concentrations at the EMER outlet and several electrode diameters



کانتور دوبعدی غلظت یونهای کلر در نزدیکی الکترودها و برای شبیه‌سازی فرآیندهای الکترولیز و الکترولیز الکترومغناطیسی در شکل ۸ نشان داده شده است. اختلاف غلظت یون میان فرآیندهای الکترولیز و الکترولیز الکترومغناطیسی نیز در این کانتورها مشخص است که نشان دهنده تاثیر امواج الکترومغناطیسی در بهبود فرآیند الکترولیز می‌باشد. ملاحظه می‌شود که حداکثر یون جدا شده در فرآیند الکترولیز مطابق با شکل ۶ و برابر با  $7480$  مول بر متر مکعب و حداکثر یون جدا شده در فرآیند الکترولیز الکترومغناطیسی مطابق با شکل ۷ و برابر با  $23800$  مول بر متر مکعب می‌باشد. این نتایج حاکی از بهبود فرآیند جداسازی در حضور امواج الکترومغناطیسی است.







شکل (۸): مقایسه کانترهای دوبعدی غلظت یونهای (الف) سدیم و (ب) کلر در الکترولیز، (ج) سدیم و (د) کلر در الکترولیز الکترومغناطیسی و قطر ۱۲ میلیمتر

Figure (8): 2D ion concentration contours along the reactor for (a) Na<sup>+</sup> in EL, (b) Cl<sup>-</sup> in EL, (c) Na<sup>+</sup> in EMER, and (d) Cl<sup>-</sup> in EMER

### ۳-۳ تاثیر پتانسیل (ولتاژ) الکتروود

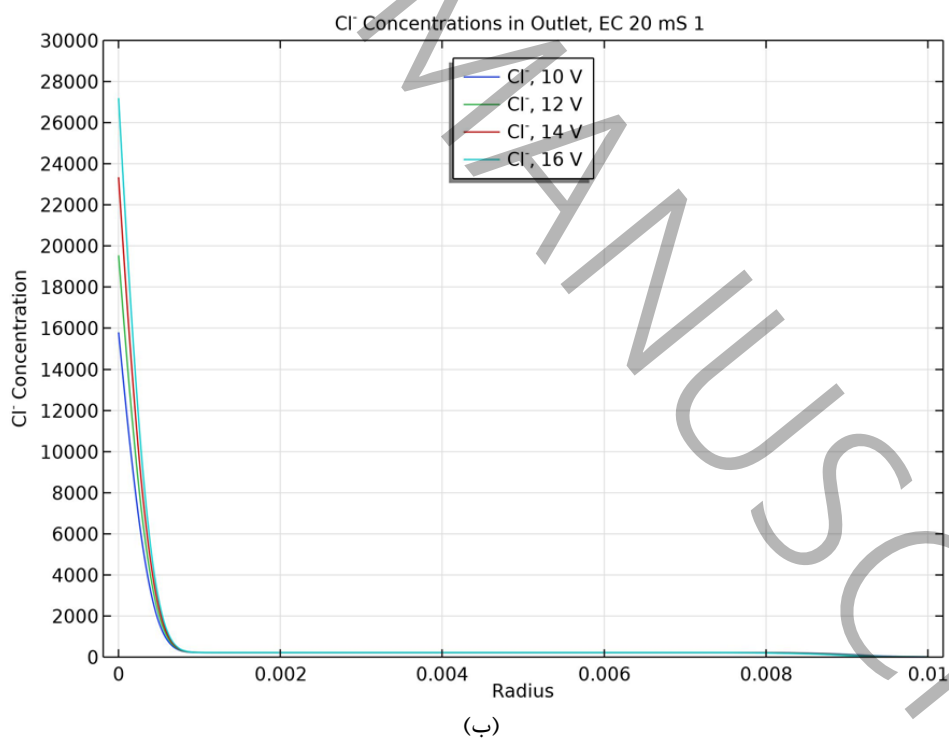
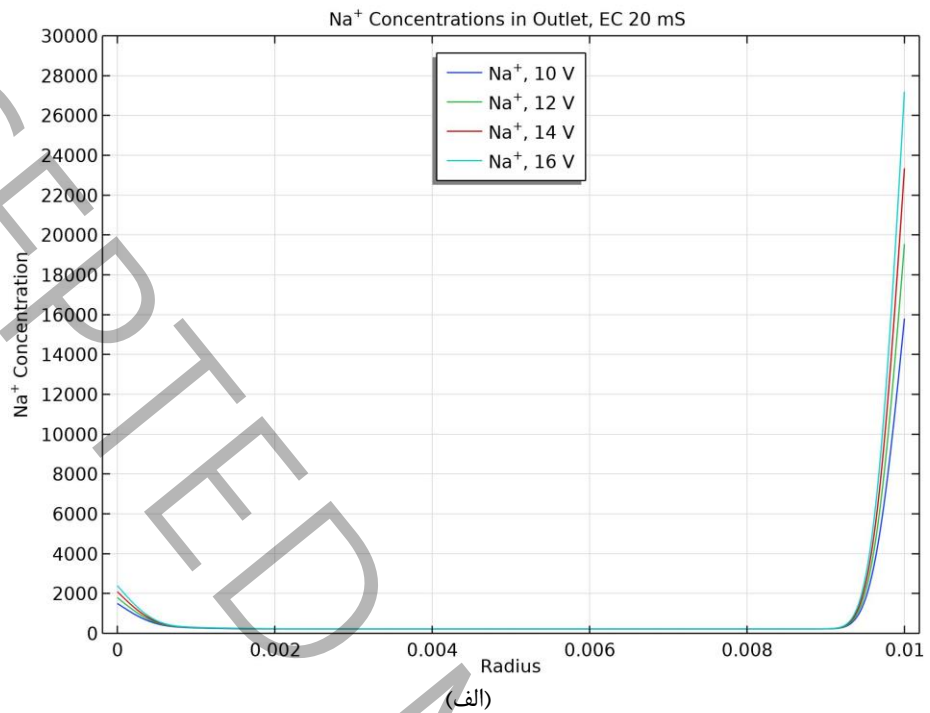
مقایسه‌ی توزیع غلظت یونهای کلر و سدیم فرآیند الکترولیز الکترومغناطیسی برای پتانسیل‌های آند مختلف در شکل ۹ ارائه شده است. همانطور که انتظار می‌رود، با افزایش پتانسیل الکتروود آند، عملکرد فرآیند بهبود می‌یابد. با افزایش پتانسیل الکتروود، مهاجرت یونها به سمت الکتروودها افزایش یافته و غلظت یونها در نزدیکی الکتروود افزایش خواهد داشت. با افزایش پتانسیل الکتروودها از ۱۰ تا ۱۶ ولت، جداسازی یونها بطور تقریباً خطی از ۲۵/۳ تا ۴۳/۵ درصد افزایش می‌یابد.

برای صحت‌سنجی نتایج شبیه‌سازی، میزان جداسازی یون کلر در شبیه‌سازی با نتایج کار آزمایشگاهی [۲۸] در جدول ۲ مقایسه شده است. مشاهده می‌شود که اختلاف میان نتایج شبیه‌سازی و آزمایشگاهی در محدوده قابل قبولی قرار دارد.

جدول (۲): مقایسه نتایج شبیه‌سازی با نتایج کار آزمایشگاهی [۲۸]

Table (2): The Cl<sup>-</sup> concentration comparison between simulations and experiments

ولتاژ الکتروود [V]	جداسازی یون در کار آزمایشگاهی [%]	جداسازی یون در شبیه‌سازی [%]	میزان انحراف [%]
۱۰	۱۹/۵	۲۱/۵	۱۰/۲۶
۱۲	۲۹/۵	۳۱/۳	۶/۱۰
۱۴	۳۵/۵	۳۷/۴	۵/۳۵

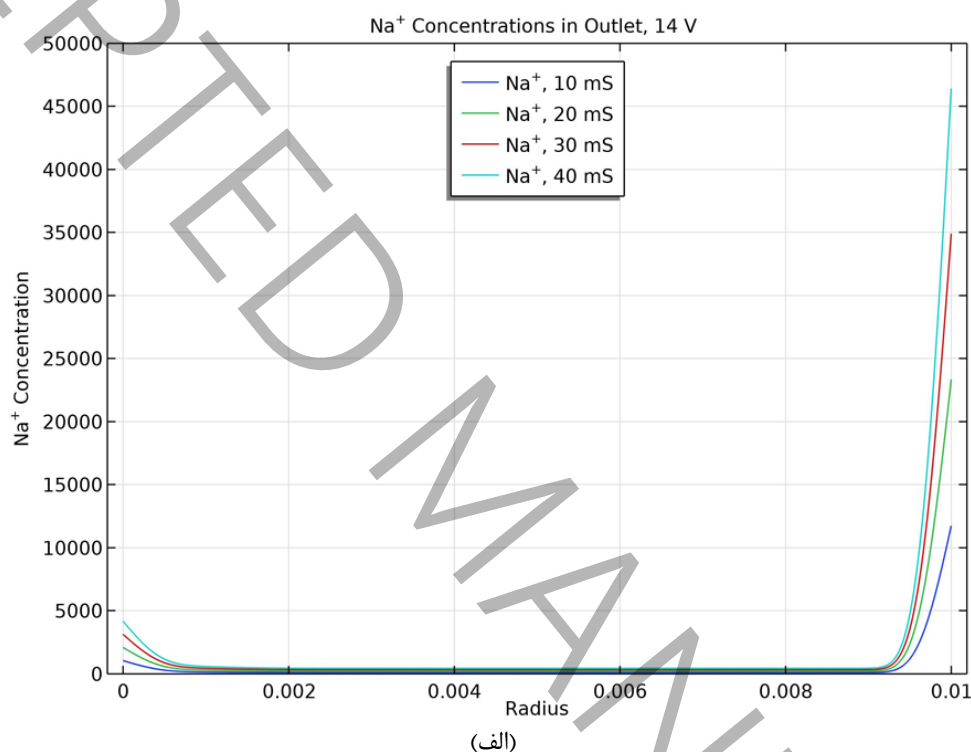


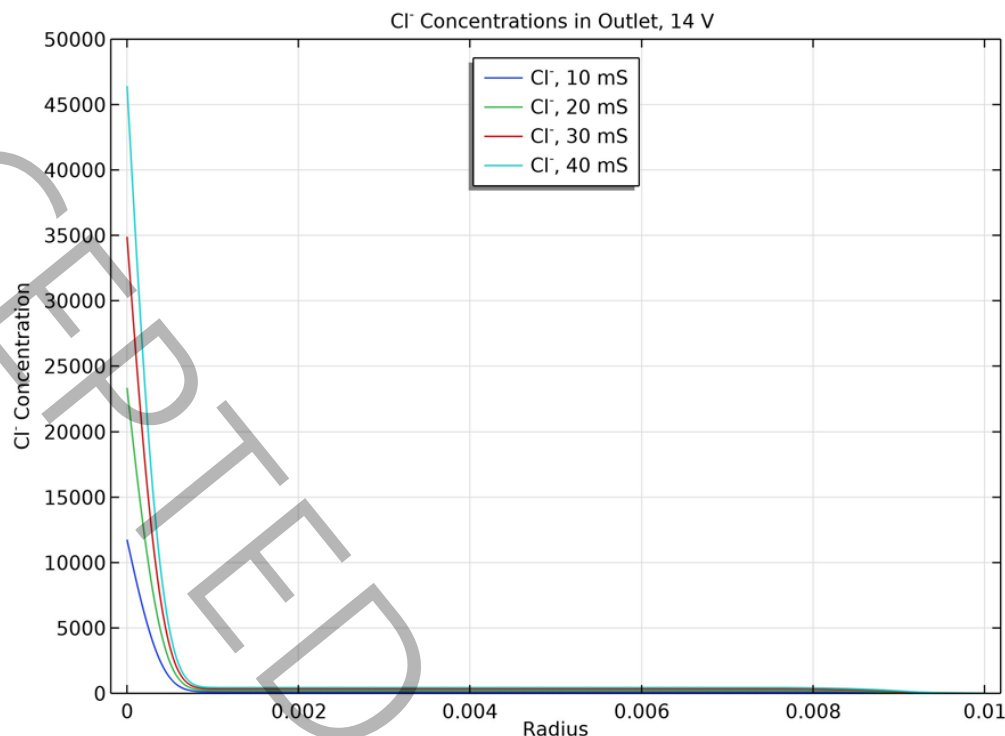
شکل (۹): مقایسه توزیع غلظت یونهای سدیم و کلر در فرآیند الکترومغناطیسی برای پتانسیل‌های آند مختلف

Figure (9): The (a) Na<sup>+</sup> and (b) Cl<sup>-</sup> concentrations at the EMER outlet and several cell potentials

### ۳-۴) تاثیر شوری محلول (غلظت الکترولیت)

مقایسه‌ی توزیع غلظت یونهای کلر و سدیم فرآیند الکترومغناطیسی برای غلظت‌های مختلف الکترولیت در شکل ۱۰ ارائه شده است. مشاهده می‌شود که افزایش غلظت الکترولیت منجر به بهبود عملکرد فرآیند می‌شود. این امر به دلیل تاثیر افزایش هدایت الکتریکی محلول منجر به بهبود فرآیند شده و لذا غلظت یونها در نزدیکی الکترودها افزایش خواهد یافت. با افزایش شوری محلول از ۱۰ تا ۴۰ میلی‌زیمنس، میزان جداسازی یونها بطور خطی افزایش یافته و درصد جداسازی یونها در محدوده ۳۷ درصد پایدار باقی می‌ماند.





(ب)

شکل (۱۰): مقایسه توزیع غلظت یونهای (الف) سدیم و (ب) کلر در فرآیند الکترولیز الکترومغناطیسی برای غلظت‌های مختلف الکترولیت

Figure (10): The (a) Na<sup>+</sup> and (b) Cl<sup>-</sup> concentrations at the EMER outlet and several salinities

#### (۴) جمع‌بندی

در این مقاله الکترولیز و الکترولیز الکترومغناطیسی آب‌نمک در یک هندسه متقارن محوری بر مبنای روش المان محدود به صورت عددی شبیه‌سازی و نتایج آنها مقایسه شد. همچنین تاثیر پارامترهای مختلفی چون قطر آند، پتانسیل الکتروود و شوری محلول الکترولیت نیز به صورت عددی بررسی شده است. میزان جدایی یونها در فرآیند الکترولیز الکترومغناطیسی در مقایسه با الکترولیز افزایش چشمگیری داشته است که ناشی از تاثیر امواج الکترومغناطیسی در فرآیند الکترولیز است. در شبیه‌سازی فرآیند الکترولیز، افزایش قطر آند منجر به کاهش جدایی یونها و کاهش غلظت یونها در نزدیکی الکتروودها می‌شود. در حالی که برای الکترولیز الکترومغناطیسی با افزایش قطر آند از ۸ تا ۱۶ میلیمتر، جدایی یونها کاهش یافته و با افزایش قطر آند از ۱۶ تا ۲۰ میلیمتر، جدایی یونها افزایش می‌یابد. در نتیجه بیشترین جدایی یونها برای هر دو فرآیند در قطر ۸ میلیمتر رخ داده و کمترین جدایی یونها برای فرآیندهای الکترولیز و الکترولیز الکترومغناطیسی به ترتیب در قطرهای ۲۰ و ۱۶ میلیمتر رخ می‌دهد. میزان شوری بهینه معادل با بالاترین جدایی یونها برابر با ۴۰ میلی‌زیمنس بدست آمد. افزایش جدایی یونها به دلیل افزایش هدایت الکتریکی محلول با افزایش شوری آن است.

- [1] United Nations World Water Assessment Programme (WWAP). The United Nations World Water Development Report, (2014) (Water and Energy. Paris, UNESCO, 2014).
- [2] A. N. Mabrouk, H. E. S. Fath, Technoeconomic study of a novel integrated thermal MSF– MED desalination technology, *desalination*, 371 (2015) 115-125.
- [3] C.L. Yang, J. McGarrahan, Electrochemical coagulation for textile effluent decolorization, *Journal of Hazardous Materials.*, 127 (1-3) (2005) 40-47.
- [4] E. Lacasa, E. Tsolaki, Z. Sbokou, M. A. Rodrigo, D. Mantzavinos, and E. Diamadopoulos, Electrochemical disinfection of simulated ballast water on conductive diamond electrodes, *Chemical Engineering Journal*, 223 (2013) 516-523.
- [5] P. Oliveira, C. Bourasseau, and B. Bouamama, Low-temperature electrolysis system modelling: A review, *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 78, (2017) 280-300.
- [6] O. Ulleberg, Modeling of advanced alkaline electrolyzers: a system simulation approach, *International Journal of Hydrogen Energy*, 28(1) (2003) 21-33.
- [7] M. Kiaee, P. Chladek, D. In eld, and A. Cruden, Utilisation of alkaline electrolyzers to improve power system frequency stability with a high penetration of wind power, *IET Renewable Power Generation*, 8(5) (2014) 529-536.
- [8] W. Jiang, Identification and Power Electronic Module Design of a Solar Powered Hydrogen Electrolyzer, *IEEE Asia-Pac Power and Energy Engineering Conference*, (2012) 1-4.
- [9] M. Kiaee, A. Cruden, D. In eld, Y. Ma, T. G. Douglas, The impact on the electrical grid of hydrogen production from alkaline electrolyzers, *IEEE Universities Power Engineering Conference (UPEC), 45th International Universities Power Engineering Conference UPEC2010*, (2010) 1-6.
- [10] N. Gyawali and Y. Ohsawa, Integrating fuel cell/Electrolyzer/Ultracapacitor system into a stand-alone Microhydro plant, *IEEE Transactions on Energy Conversion*, 25(4) (2010) 1092-1101.
- [11] W. Xu, J. Zhou, Y. Ou, Y. Luo, Z. You, Microwave selective effect: a new approach towards oxygen inhibition removal for highly-effective NO decomposition by microwave catalysis over BaMnxMg1-xO3 mixed oxides at low temperature under excess oxygen, *Chemical Communications*, 51(19) (2015) 4073-4076.
- [12] W. Xu, J. Zhou, Z. You, Y. Luo, Y. Ou, Microwave irradiation coupled with physically mixed MeOx (Me=Mn, Ni) and Cu-ZSM-5 catalysts for the direct decomposition of nitric oxide under excess oxygen, *ChemCatChem*, 7(3) (2015) 450-458.
- [13] W. Xu, J. Zhou, Z. Su, Y. Ou, and Z. You, Microwave catalytic effect: a new exact reason for microwave-driven heterogeneous gas-phase catalytic reactions, *Catalysis Science & Technology*, 6(3) (2016) 698-702.

- [14] J. Zhou, W. Xu, Z. You, Z. Wang, Y. Luo, L. Gao, C. Yin, R. Peng, L. Lan, A new type of power energy for accelerating chemical reactions: the nature of a microwave driving force for accelerating chemical reactions, *Scientific reports* 6(1), (2016) 25149.
- [15] W. Xu, J. Cai, J. Zhou, Y. Ou, W. Long, Z. You, Y. Luo, Highly-effective direct decomposition of NO through microwave catalysis over BaMeO<sub>3</sub> (Me=Mn Co, Fe) mixed oxides at low temperature under excess oxygen, *ChemCatChem*, 8(2) (2016) 417-425.
- [16] W. Xu, X. Hu, M. Xiang, M. Luo, R. Peng, L. Lan, and J. Zhou, Highly effective direct decomposition of H<sub>2</sub>S into H<sub>2</sub> and S by microwave catalysis over CoS-MoS<sub>2</sub>/γ-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> microwave catalysts, *Chemical Engineering Journal*, 326 (2017) 1020-1029.
- [17] W. Xu, M. Luo, R. Peng, M. Xiang, X. Hu, L. Lan, J. Zhou, Highly effective microwave catalytic direct decomposition of H<sub>2</sub>S into H<sub>2</sub> and S over MeS-based (Me = Ni, Co) microwave catalysts, *Energy Conversion and Management*, 149 (2017) 219-227.
- [18] N. Wang, P. Wang, Study and application status of microwave in organic wastewater treatment – a review, *Chemical Engineering Journal*, 283 (2016) 193-214.
- [19] Z. Liu, H. Meng, H. Zhang, J. Cao, K. Zhou, J. Lian, Highly efficient degradation of phenol wastewater by microwave induced H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>-CuOx/GAC catalytic oxidation process, *Separation and Purification Technology*, 193 (2018) 49-57.
- [20] Y. Lei, X. Lin, H. Liao, New insights on microwave induced rapid degradation of methyl orange based on the joint reaction with acceleration effect between electron hopping and Fe<sup>2+</sup> -H<sub>2</sub>O<sub>2</sub> reaction of NiFeMnO<sub>4</sub> nanocomposites, *Separation and Purification Technology*, 192 (2018) 220-229.
- [21] G. Lv, X. Xing, L. Liao, P. An, H. Yin, L. Mei, Z. Li, Synthesis of birnessite with adjustable electron spin magnetic moments for the degradation of tetracycline under microwave induction, *Chemical Engineering Journal*, 326 (2017) 329-338.
- [22] D.R. Baghurst, and D.M.P. Mingos, A new reaction vessel for accelerated syntheses using microwave dielectric super-heating effects, *Journal of the Chemical Society, Dalton Transactions*, 7 (1992) 1151-1155.
- [23] C. O. Kappe, D. Dallinger, and S. S. Murphree, *Practical microwave synthesis for organic chemists*, Wiley Online Library, (2009).
- [24] A. De la Hoz, A. Diaz-Ortiz, and A. Moreno, Microwaves in organic synthesis. Thermal and non-thermal microwave effects, *Chemical Society Reviews*, 34(2) (2005) 164-178.
- [25] N. Ipek, N. Lior, and A. Eklund, "Improvement of the electrolytic metal pickling process by inter-electrode insulation," *Ironmaking & steelmaking*, 32(1) (2005) 87-96.
- [26] J. Lu, D. J. Li, L. L. Zhang, and Y.-X. Wang, Numerical simulation of salt water electrolysis in parallel-plate electrode channel under forced convection, *Electrochimica Acta*, 53(2) (2007) 768-776.
- [27] M. Qin and H. H. Bau, When MHD-based microfluidics is equivalent to pressure-driven flow, *Microfluidics and nanofluidics*, 10 (2011) 287-300.



- [28] A. Eghbali, M. R. Karafi, and M. H. Sadeghi, The Effects of Current Density, Cell Potential, Time, Salinity, Electrode Diameter, and Material on Microwave-Assisted Saline Water Electrolysis: An Experimental Study, *Water Conservation Science and Engineering*, 8(1) (2023) 13.
- [29] S. Jiang, Y. Liu, H. Qiu, C. Su, and Z. Shao, High selectivity electrocatalysts for oxygen evolution reaction and anti-chlorine corrosion strategies in seawater splitting, *Catalysts*, 12(3) (2022) 261.
- [30] G. Amikam, P. Nmingativ, and Y. Gendel, Chlorine-free alkaline seawater electrolysis for hydrogen production, *International Journal of Hydrogen Energy*, 43(13) (2018) 6504-6514.
- [31] P. Shukla, K. K. Singh, P. Tewari, and P. Gupta, Numerical simulation of flow electrolyzers: Effect of obstacles, *Electrochimica Acta*, 79 (2012) 57-66.
- [32] D. K. Cheng, *Field and wave electromagnetics*, Pearson Education India, (1989).
- [33] T. Abbasov, H. Bilgili, and A. Sarımeşeli Paçacı, Quasi-Newtonian Approach determination of velocity profile for the fully developed axial power law fluid flow in concentric annuli, *Asia-Pacific Journal of Chemical Engineering*, 16(6) (2021) 2710.