

# Numerical Modeling of Capacitive Deionization Desalination and Studying the Effect of Effective Parameters on Its Performance

A. Jamali Keikha<sup>1</sup>, A. Behzadmehr<sup>2\*</sup>, A. Ebrahimi<sup>3</sup>, M. Kaykhaii<sup>4</sup>, T. Fanaei Sheikholeslami<sup>5</sup>

1. PhD Student, Dept. of Mechanical Engineering, Faculty of Engineering, University of Sistan and Baluchestan, Zahedan, Iran
2. Prof., Dept. of Mechanical Engineering, Faculty of Engineering, University of Sistan and Baluchestan, Zahedan, Iran (Corresponding Author) [amin.behzadmehr@eng.usb.ac.ir](mailto:amin.behzadmehr@eng.usb.ac.ir)
3. Assist. Prof. Dept. of Shipbuilding Engineering, Faculty of Marine Engineering, Chabahar Maritime University, Chabahar, Iran
4. Prof., Dept. of Process Engineering and Chemical Technology, Faculty of Chemistry, Gdansk University of Technology, Gdansk, Poland
5. Assoc. Prof., Dept. of Mechanical Engineering, Faculty of Engineering, University of Sistan and Baluchestan, Zahedan, Iran

(Received Dec. 16, 2022 Accepted Jan. 11, 2023)

#### To cite this article:

Jamali Keikha, A., Behzadmehr, A., Ebrahimi, A., Kaykhaii, M., Fanaei Sheikholeslami, T. 2023. "Numerical modeling of capacitive deionization desalination and studying the effect of effective parameters on its performance" Journal of Water and Wastewater, 34(2), 91-104. Doi: 10.22093/wwj.2023.376970.3308. (In Persian)

## Abstract

Due to the lack of fresh water, production of potable water is one of the important issues for mankind. Capacitive deionization is one of the methods that has recently attracted the attention of researchers due to its simplicity, low price and low energy consumption. The main challenge of this method is high energy consumption at high water concentrations. Therefore, this paper aims to investigate the effect of different effective parameters to improve the system performance. These parameters include feeding voltage, process time, electrode surface area and its capacitance value, overall transfer coefficient, volumetric flow rate and concentration of the feed water, and micropores' volume, whose effects on energy consumption and number of cycles required to produce potable water are investigated. Results showed that the electrode capacitance and micropores' volume decreased the necessary process cycles (reducing desalination process time) to produce potable water without significant changes in the energy consumption. The feeding voltage, volumetric flow rate and concentration of the feed water significantly affected the process time and energy consumption. For feed water concentration between 5 and 25 mM, results showed that the minimum values for the desalination process time, electrode surface area, and overall transfer coefficient, are 400 s, 50 cm<sup>2</sup> and 0.9 μm/s, respectively. To improve the performance of desalination process in the capacitive deionization cell, development on the physical properties (increasing micropores) and the electrical properties (increasing capacitance value) of the electrodes, as the most important parameters, is suggested.

**Keywords:** Desalination, Capacitive Deionization, Parametric Study, Simulation.



مجله آب و فاضلاب، دوره ۳۴، شماره ۲، صفحه: ۹۱-۱۰۴

## مدل‌سازی عددی آب شیرین کن یون‌زدایی خازنی و مطالعه پارامترهای مؤثر بر عملکرد آن

احمد جمالی کیخا<sup>۱</sup>، امین بهزادمهر<sup>۲\*</sup>، ابوذر ابراهیمی<sup>۳</sup>، مسعود کیخوایی<sup>۴</sup>، طاهره فنایی شیخ‌الاسلامی<sup>۵</sup>

۱- دانشجوی دکترا، گروه مهندسی مکانیک، دانشگاه سیستان و بلوچستان، زاهدان، ایران

۲- استاد، گروه مهندسی مکانیک، دانشگاه سیستان و بلوچستان، زاهدان، ایران

(نویسنده مسئول) [amin.behzadmehr@eng.usb.ac.ir](mailto:amin.behzadmehr@eng.usb.ac.ir)

۳- استادیار، گروه مهندسی کشتی‌سازی، دانشگاه دریانوردی و علوم دریایی چابهار، چابهار، ایران

۴- استاد، گروه مهندسی فرایند و تکنولوژی شیمیایی، دانشگاه تکنولوژی جیدانک، جیدانک، لهستان

۵- دانشیار، گروه مهندسی مکانیک، دانشگاه سیستان و بلوچستان، زاهدان، ایران

(دریافت ۱۴۰۱/۹/۲۵ پذیرش ۱۴۰۱/۱۰/۲۱)

برای ارجاع به این مقاله به صورت زیر اقدام فرمایید:

جمالی کیخا، ا.، بهزادمهر، ا.، ابراهیمی، ا.، کیخوایی، م.، فنایی شیخ‌الاسلامی، ط.، ۲۰۲۱، "مدل‌سازی عددی آب شیرین کن یون‌زدایی خازنی و مطالعه پارامترهای مؤثر بر عملکرد آن" مجله آب و فاضلاب، ۳۴(۲)، ۹۱-۱۰۴. Doi: 10.22093/wwj.2023.376970.3308

### چکیده

با توجه به کمبود آب شیرین، تولید آب قابل شرب یکی از مباحث مهم برای بشر است. روش یون‌زدایی خازنی به‌دلیل سادگی، قیمت ارزان و مصرف کم انرژی، یکی از روش‌هایی است که اخیراً مورد توجه پژوهشگران قرار گرفته است. چالش اصلی این روش، مصرف زیاد انرژی در آب با غلظت‌های زیاد است. از این‌رو، در این پژوهش، شناسایی و تعیین شدت اثر مؤلفه‌های دخیل در نمک‌زدایی به این روش، برای حرکت به سمت بهبود عملکرد و ارتقای هر چه بیشتر این روش، انجام شد. این مؤلفه‌ها شامل ولتاژ ورودی، زمان، مساحت و ظرفیت خازنی الکتروود، ضریب انتقال کل، حجم و غلظت آب تغذیه و حجم ریزمانفد هستند که تأثیر آنها بر مصرف انرژی و تعداد چرخه‌های لازم برای تولید آب قابل شرب، بررسی شد. نتایج نشان داد که مؤلفه‌های ظرفیت خازنی و حجم ریزمانفد بدون ایجاد تغییر چشمگیر در مصرف انرژی، موجب کاهش چرخه‌های لازم (کاهش زمان شیرین‌سازی) برای تولید آب قابل شرب شدند. مؤلفه‌های ولتاژ ورودی، حجم و غلظت آب تغذیه، به‌طور مستقیم بر مصرف انرژی و تعداد چرخه‌های موردنیاز برای نمک‌زدایی مؤثرند. نتایج نشان داد برای آب‌های ورودی با غلظت ۵ تا ۲۵ میلی‌مولار حداقل مقدار موردنیاز برای پارامترهای زمان، سطح مقطع الکتروود و ضریب انتقال کل، به ترتیب، ۴۰۰ ثانیه، ۵۰ سانتی‌متر مربع و ۰/۹ میکرومتر در ثانیه هستند. برای بهبود فرایند نمک‌زدایی در سلول یون‌زدایی خازنی، پیشنهاد می‌شود به ارتقای خواص فیزیکی (افزایش ریزمانفد) و الکتریکی (افزایش ظرفیت خازنی) الکتروودها، به‌عنوان مؤلفه‌های مؤثر، پرداخته شود.

**واژه‌های کلیدی:** نمک‌زدایی، یون‌زدایی خازنی، مطالعه پارامتری، شبیه‌سازی

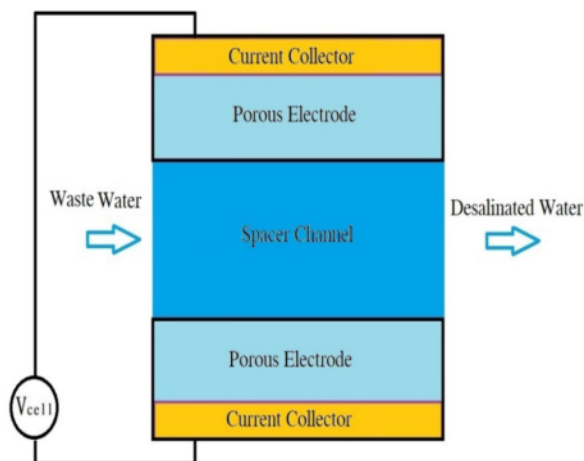
### ۱- مقدمه

روش‌های مبتنی بر تقطیر، مانند تقطیر چند مرحله‌ای (AI-<sup>۱</sup>)،

با توجه به نیاز روزافزون بشر به آب قابل شرب، استفاده از روش‌های شیرین‌سازی آب، توسعه یافته‌اند. به‌طور کلی روش‌های تولید آب شیرین را می‌توان در سه گروه طبقه‌بندی کرد: گروه اول

<sup>1</sup> Multi Effect Distillation





**Fig. 1.** Overview of a capacitive deionization cell

شکل ۱- نمای کلی از یک سلول یون‌زدایی خازنی

۱۹۷۰ و ۱۹۸۰ توسط اورن و سافر (Oren and Soffer, 1978) و مجدداً در دهه ۱۹۹۰ توسط فارمر و همکاران (Farmer et al., 1996) پژوهش‌هایی در این مورد انجام شده است. اخیراً، به دلیل افزایش مشکلات تنش آبی، علاقه پژوهشگران به این فناوری افزایش یافته است. در شکل ۲، تعدادی از انواع ساختارهای سلول نمک‌زدایی خازنی مشاهده می‌شود. شکل A-۲ همان ساختار ابتدایی است که به آن اشاره شد.

ساختار بعدی سلول توسط جانسون و نیومن در طول دهه ۱۹۷۰ توسعه داده شد که در آن جریان تغذیه به‌طور مستقیم از طریق خود الکترودها و به موازات جهت میدان الکتریکی اعمال شده هدایت می‌شود (شکل B-۲). این سیستم، سلول CDI با جریان عبوری از الکترودها<sup>۷</sup> نامیده می‌شود (Johnson and Newman, 1971) توسعه این ساختار تقریباً ۴۰ سال رها شد. تا اینکه در سال ۲۰۱۱ آوراها و همکاران، از الکترودهای جریان عبوری در یک سلول سه الکترودی برای بررسی مؤلفه‌های عملکردی، مانند بازده شارژ، استفاده کردند. آنها همچنین نشان دادند که این ساختار امکان شارژ سریع سلول را نسبت به ساختارهایی که جریان بین صفحات الکترودها جریان دارد، فراهم می‌کند (Avraham et al., 2011). مزیت اصلی این سلول، عدم استفاده از لایه جداکننده ضخیم است که به‌عنوان کانال جریان نیز عمل می‌کند و اجازه می‌دهد تا ضخامت جداکننده تا ۱۰ میکرومتر کاهش یابد. این کاهش در فضا

بر فشار، مانند اسمز معکوس<sup>۱</sup> (Spiegler and El-Sayed, 2001) و اسمز مستقیم<sup>۲</sup> (Kucera, 2019)، گروه سوم روش‌های مبتنی بر الکتریسیته، مانند الکترودیالیز (Kucera, 2019) و نمک‌زدایی خازنی<sup>۳</sup> (Lin et al., 2020, Ryu et al., 2010) که نمک‌زدایی الکتروشیمیایی نیز نامیده می‌شود. نمک‌زدایی خازنی، روشی نسبتاً جدید است که در دهه‌های اخیر مورد توجه قرار گرفته است. از جمله مزایای این روش در مقایسه با سایر روش‌ها می‌توان به مصرف کم انرژی، سادگی ساختار، قیمت کم و بازده زیاد، اشاره کرد (Lenz et al., 2020).

یون‌زدایی خازنی یک روش کنترل شده الکتروشیمیایی برای حذف نمک از آب تغذیه با اعمال اختلاف ولتاژ الکتریکی بین دو الکترودها متخلخل است که در آن، محلول آب و نمک در داخل «کانال میانی»<sup>۴</sup> جریان می‌یابد و ذرات نمک به‌صورت یون‌های مثبت و منفی، تحت تأثیر میدان الکتریکی، به‌صورت الکترواستاتیک نگه داشته می‌شوند. سپس جذب خازنی با استفاده از لایه دوگانه الکتریکی<sup>۵</sup> تشکیل شده روی سطوح داخلی حفرات این الکترودها رخ می‌دهد (Porada et al., 2013). در نتیجه، آب شیرین تولید می‌شود. پس از مدتی، تمام حجم منافذ درون ذره‌ای<sup>۶</sup> قابل دسترس، اشباع شده و دستگاه به ظرفیت ذخیره‌سازی خود می‌رسد. به‌منظور بازیابی الکترودها، با صفر یا معکوس کردن ولتاژ، یون‌ها از الکترودها جدا می‌شوند. در نتیجه، یک جریان آب با غلظت نمک زیاد ایجاد می‌شود و پس از آن الکترودها ظرفیت جذب یون را دوباره به دست می‌آورند. از آنجایی که در حالت ایده‌آل، هیچ واکنش شیمیایی رخ نمی‌دهد، این فرایند کاملاً فیزیکی است و دستگاه‌های CDI را قادر می‌سازد تا با حداقل نیاز به تعمیر و نگهداری، زمان بهره‌برداری طولانی داشته باشند. نمای کلی این روش در شکل ۱ نشان داده شده است (Porada et al., 2013).

این روش نمک‌زدایی، توسط بلر و مورفی در دهه ۱۹۶۰ به ثبت رسیده است (Blair and Murphy, 1960). سپس در دهه‌های

<sup>1</sup> Reverse Osmosis (RO)

<sup>2</sup> Forward Osmosis

<sup>3</sup> Capacitive Deionization (CDI)

<sup>4</sup> Spacer Channel

<sup>5</sup> Electrical Double Layer

<sup>6</sup> Intraparticle Pores

<sup>7</sup> Flow-Through Electrode CDI

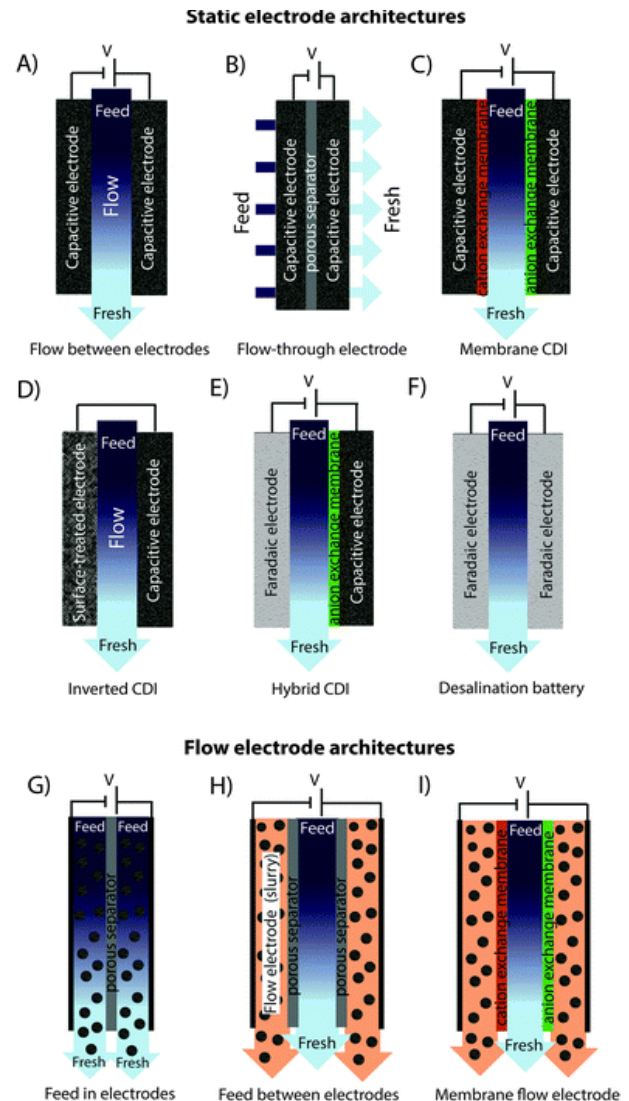


یک تغییر بسیار مهم در ساختار سلول CDI، زمانی رخ داد که در سال ۲۰۰۶ لی و همکاران، سلول CDI غشایی<sup>۱</sup> را معرفی کردند که شامل استفاده از غشاهای تبادل یونی جداکننده هر الکترو است (Lee et al., 2006) (شکل ۲-۲). کانال‌های آب تغذیه در سلول‌های MCDI توسط غشاهای تبادل آنیونی<sup>۲</sup> در آند و غشاهای تبادل کاتیونی<sup>۳</sup> در کاتد احاطه می‌شوند (He et al., 2021, Shi et al., 2018, Zhang and Reible, 2020, Zhao, 2013)

همان طور که پژوهش‌ها نشان می‌دهند، مزیت اصلی افزودن غشا به سلول‌های CDI، بهبود کلی در کارایی بار است، زیرا غشاهای یون‌های همانم جریان عبوری را جذب می‌کنند و می‌توانند ذخیره نمک را در حفره‌های بزرگ الکترو افزایش دهند (Biesheuvel et al., 2011, Hemmatifar et al., 2016)

در سال ۲۰۱۵ گائو و همکاران، سلول CDI را با استفاده از یک آند کربنی با سطح اصلاح شده، معرفی کردند که منجر به پیکربندی جدیدی به نام CDI معکوس<sup>۴</sup> شد (i-CDI، شکل ۲-۲). این سلول از الکترو زئروژل<sup>۵</sup> کربن دارای بار منفی در سطح (این بار از طریق عملیات شیمیایی سطح ایجاد شده است) به عنوان آند و زئروژل کربن ساده به عنوان کاتد استفاده می‌کند (Gao et al., 2015, Tang et al., 2019a). دلیل اینکه چرا به آن "CDI معکوس" می‌گویند این است که سلول رفتار معکوس نشان می‌دهد، به این معنی که شارژ سلول منجر به دفع یون‌ها از لایه‌های دوگانه الکتریکی الکترو می‌شود و تخلیه سلول منجر به جذب الکتریکی یون می‌شود. عملکرد این سلول، برخلاف خوردگی نسبتاً سریع یک سلول CDI معمولی که از یک جفت الکترو زئروژل کربن ساده استفاده می‌کند، برای ۶۰۰ ساعت کار مداوم در ولتاژ سلول ۰/۸ ولت حفظ شد (Gao et al., 2015).

در پژوهشی که در سال ۲۰۱۲ منتشر شد، پاستا و همکاران ساختار جدیدی به نام «باتری نمک زدایی» را معرفی کردند (Pasta et al., 2012) (شکل ۲-۲) که به روشی مشابه سلول CDI عمل می‌کند، اما در بخش عمده‌ای از مواد الکترو، به جای ذخیره یون در دو لایه‌های الکتریکی، با بهره‌گیری از فرایندهای فاراداییک، ذخیره



**Fig. 2.** CDI structures using static electrodes (A-F) and current electrodes (G-I) (Suss et al., 2015)  
شکل ۲-۲ ساختارهای CDI با استفاده از الکترودهای ساکن (A-F) و الکترودهای جریان (G-I) (Suss et al., 2015)

اجازه می‌دهد تا سلول‌های فشرده‌تر با مقاومت یونی کمتر و نمک‌زدایی سریع‌تر (به علت کاهش زمان انتشار نسبت به حالتی که جریان از بین الکترودها عبور می‌کند) حاصل شود (Suss et al., 2015, Zhao et al., 2013). در این ساختار باید مقیاس تخلخل الکترودها از هر دو نوع میکرومتری و نانومتری باشد، تا آب در منافذ میکرومتری با فشار متوسط سیال جریان یابد و منافذ نانومتری برای جذب نمک استفاده شود (Suss et al., 2015).

<sup>1</sup> Membrane Capacitive Deionization (MCDI)

<sup>2</sup> Anion Exchange Membranes (AEM)

<sup>3</sup> Cation Exchange Membrane (CEM)

<sup>4</sup> Inverted CDI

<sup>5</sup> Xerogel

نسبت به سیستم‌های CDI با الکتروود ساکن افزایش دهد. بنابراین CDI می‌تواند جریان‌های با شوری بیشتر را نمک‌زدایی کند. پورادا و همکاران، نوع متفاوتی از آرایش را برای سلول CDI پیشنهاد کردند که در آن با استفاده از "الکتروود در حرکت"<sup>۵</sup> فرایند یون‌زدایی انجام می‌شود. در پژوهش آنها که در سال ۲۰۱۲ منتشر شد، جفت‌های سلولی از سیم‌ها یا میله‌های نازک با سیم‌های آندی نزدیک به سیم‌های کاتد ساخته می‌شوند (Porada et al., 2012). مدل‌سازی و شبیه‌سازی فرایندهای مربوط به یک سلول CDI نیز به دفعات در پژوهش‌ها انجام شده که از آن جمله می‌توان به شبیه‌سازی سلول CDI با استفاده از نرم‌افزار مدلیکا توسط لenz و همکاران (Lenz et al., 2020)، و به‌طور مشابه کار ریو و همکاران (Ryu et al., 2010) با استفاده از سیمولینک نرم‌افزار MATLAB، اشاره کرد. در این پژوهش‌ها، نسبت تأثیر مؤلفه‌های دخیل در عملکرد سلول یون‌زدایی خازنی و همچنین عملکرد مالی این روش نسبت به روش‌های دیگر بررسی شد و رقابت‌پذیری بودن این روش را در مقایسه با سایر روش‌های تصفیه آب مانند RO و MSF در غلظت‌های کم، اثبات کرد.

رامرسکرچن و همکاران یک مدل را برای سلول FECDI حالت پایدار که با ولتاژ ثابت کار می‌کند، ارائه کردند. ذخیره یون‌ها در منافذ ذرات کربن با استفاده از مدل دانان اصلاح شده مدل‌سازی شده است. شبیه‌سازی‌های انجام شده با این مدل، مطابقت خوبی با نتایج تجربی داشته و به درستی تأثیر زیاد نرخ جریان دوغاب در الکتروود را بر عملکرد نمک‌زدایی، پیش‌بینی می‌کند (Rommerskirchen et al., 2018).

روش کولپلینگ (تولید آب با استفاده از ترکیب سیستم RO و سیستم توسط یائو و جی شبیه‌سازی شده و با حالت RO مقایسه شد (Yao and Ji, 2020). در این مدل، فشار و جریان آب تغذیه و مصرف انرژی ویژه سیستم RO به ترتیب ۶/۳۴ مگاپاسکال، ۱۴ مترمکعب در روز و ۱۳/۶۳ کیلووات-ساعت بر مترمکعب است. فشار آب تغذیه، جریان آب تغذیه و مصرف انرژی ویژه سیستم RO+MCDI، با یک مرحله یون‌زدایی، به ترتیب ۴/۷۲ مگاپاسکال، ۱۴ مترمکعب در روز و ۱۱ کیلووات-ساعت بر مترمکعب است. در سیستمی با سه مرحله یون‌زدایی، فشار آب

در پیوندهای شیمیایی انجام می‌شود (Chang et al., 2019). باتری نمک‌زدایی که آنها آزمایش کردند از یک الکتروود نانومیله مثبت  $\text{Na}_{2-x}\text{Mn}_5\text{O}_{10}$  و یک الکتروود منفی Ag/AgCl تشکیل شده بود که مصرف انرژی ۰/۲۹ Wh/l برای حذف ۲۵ درصد نمک را ثبت کرد.

لی و همکاران در سال ۲۰۱۴ با الهام از این کار، یک الکتروود باتری (اکسید منگنز سدیم) و یک الکتروود خازنی (کربن متخلخل) را در یک سلول نمک‌زدایی واحد ترکیب کردند و آن را "CDI ترکیبی" نامیدند (شکل ۲-E). این سیستم، جذب نمک بیش از ۳۱ میلی‌گرم بر گرم را در مقایسه با سلول‌های کاملاً خازنی که تا آن زمان به حدود ۱۵ میلی‌گرم بر گرم رسید، نشان داد (Lee et al., 2014).

یکی از جدیدترین پیشرفت‌ها در ساختار CDI، معرفی الکتروودهای جریان کربن در سال ۲۰۱۳ توسط جون و همکاران بود (Jeon et al., 2013). مفهوم الکتروود جریان CDI یا FECDI<sup>۱</sup> (شکل ۲-I تا G)، از الکتروودهای مبتنی بر جریان سیال<sup>۲</sup> می‌آید که برای سیستم‌های ذخیره انرژی الکتروشیمیایی، مانند خازن جریان الکتروشیمیایی<sup>۳</sup> و باتری‌های یون لیتیوم نیمه جامد توسعه یافته‌اند (Ma et al., 2019).

در FECDI، آبی که از طریق یک سلول منفرد جریان دارد را می‌توان به‌طور مداوم نمک‌زدایی کرد، زیرا تخلیه بار ذرات کربن در دوغاب<sup>۴</sup> می‌تواند به‌عنوان یک فرایند جداگانه در پایین دست سلول رخ دهد (Jeon et al., 2013) و مشکل عملکرد منقطع را در سیستم‌های متداول CDI حل کند، زیرا بازیابی الکتروودها در این روش، باعث توقف فرایند نمک‌زدایی نمی‌شود. همچنین، می‌تواند پیچیدگی‌هایی که در سیستم‌های متداول CDI برای عملیات متناوب (شارژ و دشارژ) در زمینه جابه‌جایی سیال وجود داشت را حل کند (زیرا جریان‌های نمک‌زدایی و جریان‌های آب نمک در زمان‌های مختلف، از کانال یکسانی عبور می‌کردند). دومین مزیت اصلی این است که FECDI، با وارد کردن مداوم ذرات کربن بدون بار به سلول CDI، می‌تواند ظرفیت موجود برای نمک‌زدایی را

<sup>1</sup> Flow Electrode CDI (FECDI)

<sup>2</sup> Slurry-Based Electrodes

<sup>3</sup> Electrochemical Flow Capacitor

<sup>4</sup> Slurry

<sup>5</sup> Electrodes in Motion



که در آن

$J_i$  برحسب  $\text{mol/m}^2/\text{s}$  تعریف می‌شود،  $A$  مساحت الکترود -آند یا کاتد- و  $V_{mi}$  حجم ریزمنافذ در تمام الکترودهای دارای علامت مشابه است. برای به دست آوردن جریان خارجی با واحد آمپر، می‌توان  $J$  را در ثابت فارادی ( $F$ ) ضرب کرد. چگالی جریان به نیروی محرکه انتقال و  $\Delta\phi_{tr}$  بستگی دارد، که برابر ولتاژ اعمالی منهای افت ولتاژهای هر دو الکترود است (معادله ۳).

مقاومت در کانال اسپیسر یک مقاومت خطی است، زیرا تمام بارها باید از یک الکترود از طریق کانال به دیگری منتقل شوند. در داخل الکترود وضعیت متفاوت است، زیرا بار به روشی توزیع شده ذخیره می‌شود و پروفیل غلظت یون به طور فزاینده‌ای به داخل الکترود نفوذ می‌کند: در ابتدا تقریباً هیچ مقاومتی وجود ندارد، زیرا یون‌ها درست در کنار سطح تماس ذخیره می‌شوند. اما با گذشت زمان، یون‌ها برای رسیدن به منافذ غیراشباع باید به فواصل دورتر جابه‌جا شوند.

پورادا و همکاران فرض می‌کنند که در هر لحظه از زمان، غلظت نمک در منافذ درشت الکترودها برابر کانال میانی (جایی که آب در آن جریان دارد) است (Porada et al., 2013). بنابراین، یک رابطه واحد بین  $J$ ،  $\Delta\phi_{tr}$  و  $c$  (غلظت نمک که در هر لحظه در همه سیستم ثابت فرض می‌شود) می‌توان به دست آورد (معادله ۲)

$$J_i = kc\Delta\phi_{tr} \quad (2)$$

که در آن

$k$  یک ضریب انتقال کل مؤثر ( $\text{m/s}$ ) و  $\Delta\phi_{tr}$  ولتاژ بدون بعد است (افتی که انتقال را هدایت می‌کند، یعنی ولتاژ بین ناحیه بیرونی الکترودها). این افت ولتاژ با معادله ۳ که ارتباط بین ولتاژ سلول  $V_{cell}$  و افت‌های ولتاژ در ناحیه بیرونی  $\Delta\phi_{tr}$  و ناحیه نزدیک به الکترودها  $\Delta\phi_{st} + \Delta\phi_D$  را بیان می‌کند، ارائه می‌شود

$$\frac{V_{cell}}{V_T} = \Delta\phi_{tr} + 2|\Delta\phi_D + \Delta\phi_{st}| \quad (3)$$

$$V_T = \frac{RT}{F} \approx 25.7\text{mV} \quad (4)$$

که در آنها

تغذیه، جریان آب تغذیه و مصرف انرژی ویژه به ترتیب  $4/2$  مگا پاسکال،  $14$  مترمکعب در روز و  $9/83$  کیلووات-ساعت بر مترمکعب گزارش شده است. نتایج این پژوهش نشان می‌دهد که به جز کاهش مصرف انرژی ویژه، کاهش فشار موردنیاز برای آب تغذیه نیز رخ می‌دهد. این امر موجب شده تا از هزینه زیاد تهیه پمپ فشار، کاسته شود. همچنین، می‌توان از غشاهای ارزان تری در قسمت RO بهره برد (Yao and Ji, 2020).

با توجه به آنچه که بیان شد، شناسایی مؤلفه‌های مؤثر و تعیین شدت اثر هر یک از آنها در شیرین‌سازی آب به روش نمک‌زدایی خازنی از اساسی‌ترین مسائل مربوط به این حوزه است که به خوبی به آن پرداخته نشده است. در این پژوهش، به شناسایی و بررسی میزان تأثیر هر یک از مؤلفه‌ها بر توان موردنیاز برای نمک‌زدایی و همچنین خلوص آب نمک‌زدایی شده به روش یون‌زدایی خازنی، پرداخته شد. این مؤلفه‌ها شامل: ولتاژ سلول، حجم ریزمنافذ، غلظت نمک، حجم آب تغذیه، مساحت الکترود، ظرفیت خازنی الکترود، زمان و ضریب انتقال کل هستند. بر اساس نتایج به دست آمده، برای حرکت به سمت بومی‌سازی فناوری یون‌زدایی خازنی و بهبود شرایط استفاده از این روش برای تولید آب شیرین، پیشنهادهایی ارائه شده است.

## ۲- تعریف مسئله و معادلات حاکم

یک سلول ساده یون‌زدایی خازنی، متشکل از دو الکترود است که به کلکتور جریان متصل هستند و در فاصله‌ای از یکدیگر قرار می‌گیرند (کانال میانی) که معمولاً با یک ماده متخلخل به عنوان جداکننده (اسپیسر) پر می‌شود تا آب تغذیه بتواند از طریق آن بین الکترودها جریان یابد (شکل ۱). روابط و معادلات حاکم بر این سلول در ادامه بیان می‌شوند که به کمک برنامه‌نویسی رایانه‌ای، فرایندهای سلول، مدل‌سازی شده و نتایج آن ارزیابی می‌شود.

مدل‌سازی سلول (با فرض یک سلول متقارن)، مبتنی بر تعادل چگالی بار یونی در ریزمنافذ درون ذره ( $\sigma_{mi}$ ) است که به چگالی جریان الکتریکی ( $J$ )، از یک الکترود به الکترود دیگر مربوط می‌شود که در معادله ۱ نشان داده شده است (Porada et al., 2013)

$$v_{mi} \frac{d\sigma_{mi}}{dt} = J_i \cdot A \quad (1)$$



$$V_{\text{tot}}C_0 + V_{\text{mi}}C_{\text{ions},\text{mi},0} = V_{\text{tot}}C + V_{\text{mi}}C_{\text{ions},\text{mi}} = V_{\text{mi}}\gamma_{\text{CDI}} \quad (8)$$

غلظت یونی در ریزتخلخل‌ها،  $C_{\text{ions},\text{mi}}$ ، با ترکیب معادله  $C_{\text{ions},\text{mi}} = C_{\text{cations},\text{mi}} + C_{\text{anions},\text{mi}} = 2c e^{\mu_{\text{att}}}$  و معادله ۵ به دست می‌آید که منجر به معادله ۹ می‌شود که ترکیب آن با تعادل تعداد مول‌ها (معادله ۸) به معادلات ۱۰ تا ۱۲ منجر می‌شود

$$C_{\text{ions},\text{mi}} = \sqrt{\sigma_{\text{mi}}^2 + (2ce^{\mu_{\text{att}}})^2} \quad (9)$$

$$c = \frac{\sqrt{b_{\text{CDI}}^2 - \beta_{\text{CDI}}(\sigma_{\text{mi}}^2 - \gamma_{\text{CDI}}^2) - b_{\text{CDI}}}}{2\beta_{\text{CDI}}} \quad (10)$$

$$\beta_{\text{CDI}} = (2e^{\mu_{\text{att}}})^2 - \left(\frac{V_{\text{tot}}}{V_{\text{mi}}}\right)^2 \quad (11)$$

$$b_{\text{CDI}} = 2\gamma_{\text{CDI}} \frac{V_{\text{tot}}}{V_{\text{mi}}} \quad (12)$$

بنابراین، اکنون مدلی بر اساس یک معادله‌ی دیفرانسیل (معادله ۱) در دسترس است که طبق معادلات کمکی ۷ تا ۱۲ برای غلظت نمک و چگالی جریان قابل استفاده هستند (Porada et al., 2013).

### ۳- صحت‌سنجی

معادلات حاکم بر یک سلول یون‌زدایی خازنی برای آزمایش دسته‌ای ارائه شد. بر اساس این معادلات و در نظر گرفتن یک سلول ساده متقارن (مانند شکل ۱) و نوشتن برنامه رایانه‌ای، مدل‌سازی سلول بر اساس کار پورادا و همکاران انجام شد (Porada et al., 2013). بیان این نکته مهم است که آنها به جای ثابت فرض کردن ظرفیت لایه استرن، از تابعی تجربی استفاده کردند که در آن  $C_{\text{st},\text{vol}}$  با افزایش بار زیاد می‌شود (معادله ۱۳).

برای حل این مدل، حجم کل آب نمک، حجم ریزمنفذها و سطح هندسی الکتروود (همه الکتروودهای هم علامت) را می‌توان از هندسه تجربی و آنالیز الکتروود به دست آورد. از بررسی مدل‌سازی انجام شده با داده‌های تعادلی، می‌توان مقداری را برای  $C_{\text{st},\text{vol},0}$  و  $\alpha$

$\Delta\varphi_{\text{D}} + \Delta\varphi_{\text{st}}$  افت ولتاژ بدون بُعد در هر یک از الکتروودها است  $\Delta\varphi_{\text{D}}$  افت در ناحیه نزدیک به الکتروود است که به آن لایه دیفیوژ می‌گویند و  $\Delta\varphi_{\text{st}}$  افت مربوط به لایه‌ی نازک چسبیده به الکتروود است که لایه استرن نامیده می‌شود که به دلیل فرض تقارن، در عدد ۲ ضرب شده است. برای محاسبه مقدار ولتاژ بدون بُعد در الکتروودها از معادلات ۵ و ۶ استفاده می‌شود

$$\Delta\varphi_{\text{D}} = \sinh^{-1} \frac{-\sigma_{\text{mi}}}{2ce^{\mu_{\text{att}}}} \quad (5)$$

$$\Delta\varphi_{\text{st}} = -\frac{\sigma_{\text{mi}}F}{C_{\text{st},\text{vol}}V_{\text{T}}} \quad (6)$$

که در آن

$\sigma_{\text{mi}}$  چگالی بار در ریزمنافذ (با واحد  $\text{mol}/\text{m}^3$ )،  $c$  غلظت نمک آب تغذیه،  $\mu_{\text{att}}$  ضریبی برای تعیین تأثیر جاذبه شیمیایی یون در هنگام انتقال از خارج به داخل ذرات الکتروود،  $F$  ثابت فارادی و  $C_{\text{st},\text{vol}}$  ظرفیت لایه استرن است.

با ترکیب معادلات ۲، ۳، ۵ و ۶، پورادا و همکاران یک معادله برای  $J$  به عنوان تابعی از  $C_{\text{st},\text{vol}}$  و  $c$  به دست آوردند (معادله ۷)

$$J_i = kc \left( \frac{V_{\text{cell}}}{V_{\text{T}}} - \frac{2\sigma_{\text{mi}}F}{C_{\text{st},\text{vol}}V_{\text{T}}} - 2\sinh^{-1} \left( \frac{\sigma_{\text{mi}}}{2ce^{\mu_{\text{att}}}} \right) \right) \quad (7)$$

در نهایت، لازم است طبق قانون بقای جرم، تعادلی نوشته شود که بیان کند تعداد کل مول‌های نمک در سیستم حفظ می‌شود. با فرض نمک تک ظرفیتی، تعداد مول‌های یون در ریزمنافذ یک الکتروود برابر با جمع تعداد مول‌های مولکول نمک در ریزمنافذ هر دو الکتروود است. معادله ۸، مقدار کل مولکول‌های نمک را در سیستم، تقسیم بر حجم ریزمنافذ، با مؤلفه‌ای که به عنوان  $\gamma_{\text{CDI}}$  تعریف می‌شود، توصیف می‌کند.

زیرنویس "0" به زمان صفر (لحظه‌ای که در آن ولتاژ اعمال می‌شود) اشاره دارد. حجم کل سیال در سلول با عبارت  $V_{\text{tot}}$  نشان داده می‌شود که بدون در نظر گرفتن حجم ریزمنافذ محاسبه شده است



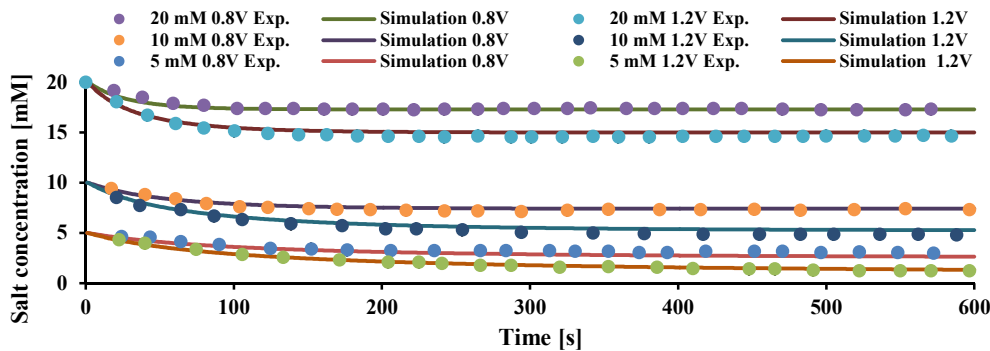


Fig. 3. Changes of salt concentration with respect to time in batch mode CDI experiment and comparison with experimental results (Porada et al., 2013)

شکل ۳- تغییرات غلظت نمک نسبت به زمان در آزمایش CDI در حالت دسته‌ای و مقایسه با نتایج تجربی (Porada et al., 2013)

رسیدن به میزان شوری کمتر از ۲۰۰ میلی‌گرم در لیتر انجام شد و در نهایت مقدار انرژی مصرفی و تعداد چرخه‌های طی شده برای تولید آب شیرین ارزیابی شد (شکل‌های ۴ تا ۱۱). مؤلفه‌های مورد بررسی، همان گونه که در جدول ۱ قابل مشاهده هستند، شامل ۸ مؤلفه ولتاژ ورودی به سلول، حجم ریزمنافذ، ظرفیت لایه استرن، غلظت اولیه، حجم کل سیال، مساحت الکترود، زمان و ضریب انتقال کل هستند. ظرفیت لایه استرن بر اساس محاسبه تقریبی از طریق ولتامتری چرخه‌ای محاسبه شد. حجم کل سیال بدون در نظر گرفتن ریز تخلخل‌ها محاسبه شد و ضریب انتقال کلی برای سلول، متوسط‌گیری شد.

سه مؤلفه ولتاژ ورودی، غلظت اولیه و زمان، وابستگی به ساختار سلول ندارند و بقیه مؤلفه‌ها با ساختمان سلول مرتبطند که

جدول ۱- مؤلفه‌های مؤثر در یک سلول یون‌زدایی خازنی

Table 1. Effective parameters in a capacitive deionization cell

No.	Parameter	Value	Range
1	Input voltage	$V_{\text{cell}} = 1.2\text{V}$	0.8-1.4
2	Volume of micropores	$v_{\text{mi}} = 0.8\text{mL}$	0.8-2.0
3	Stern layer capacity	$C_{\text{st, vol}} = 0.2 \text{ GF/m}^3$	0.145-0.21
4	Initial concentration	$c_0 = 20\text{mM}$	15-25
5	Total volume of fluid	$v_{\text{tot}} = 200\text{mL}$	50-150
6	Electrode area	$A = 250 \text{ cm}^2$	5-245
7	Time	$t = 600 \text{ s}$	30-1500
8	Total transport coefficient	$k = 1.5 \mu\text{m/s}$	0.5-2.1

$\mu_{\text{att}}$  محاسبه کرد. با برازش زمانی داده‌ها، مؤلفه ضریب انتقال کل ( $k$ ) نیز قابل دستیابی خواهد بود

$$C_{\text{st, vol}} = C_{\text{st, vol, 0}} + \alpha_{\text{CDI}} \sigma_{\text{mi}}^2 \quad (13)$$

تأثیر گام زمانی برای مقدار مختلفی بررسی شد و گام زمانی یک ثانیه برای مدل انتخاب شد. در نهایت، با استفاده از مقدار مؤلفه‌های ورودی در پژوهش پورادا و همکاران (Porada et al., 2013) و حل معادلات برای غلظت‌های ۵، ۱۰ و ۲۰ میلی‌مولار و ولتاژ سلول ۰/۸ و ۱/۲ ولت، نتایج به دست آمده از مدل‌سازی با نتایج تجربی پورادا و همکاران (Porada et al., 2013) مقایسه شد که مطابقت خوبی (خطای خیلی کمتر از ۰/۵ واحد) با داده‌های تجربی از خود نشان داد. شکل ۳، مقایسه نتایج تجربی با نتایج حاصل از مدل‌سازی را نشان می‌دهد. از آنجا که نتایج مدل‌سازی، با نتایج آزمایشگاهی مطابقت خوبی دارد، می‌توان از مدل ایجاد شده برای مطالعه مؤلفه‌های مؤثر بر نمک‌زدایی خازنی بهره برد.

#### ۴- مطالعه پارامتری

با انجام اعتبارسنجی و اطمینان از صحت مدل ریاضی و روش حل آن، اکنون می‌توان مؤلفه‌های مؤثر در نمک‌زدایی و میزان تأثیر آنها را در تولید آب قابل شرب، بررسی کرد که در آن، حداکثر مقدار نمک برای آب قابل شرب ۲۰۰ میلی‌گرم در لیتر (مقدار مجاز اعلام شده برای فلز سدیم، از سوی سازمان استاندارد (Torabian and Zamani, 2020) در نظر گرفته شد. بر این اساس، محاسبات تا





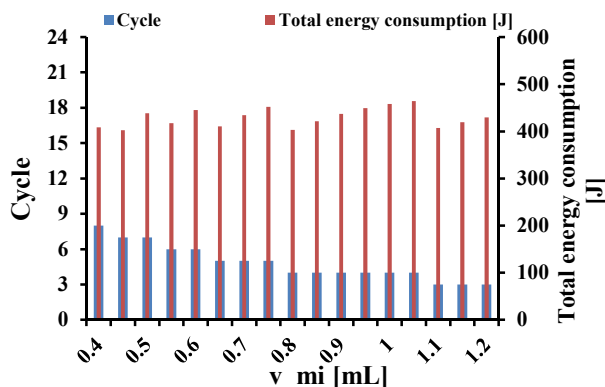


Fig. 5. Effect of micropores on energy consumption and the cycles required to produce potable water

شکل ۵- تأثیر ریزمنافذ بر مصرف انرژی و چرخه‌های لازم برای تولید آب قابل شرب

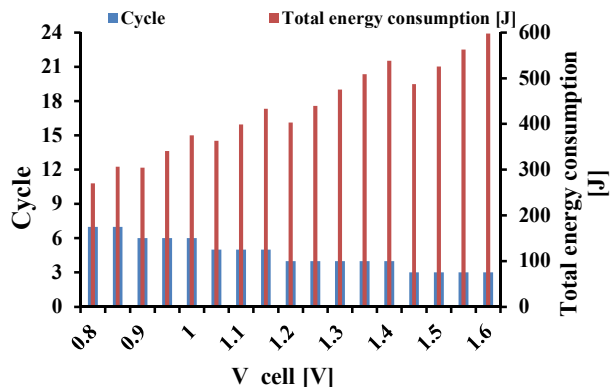


Fig. 4. Effect of external voltage on energy consumption and the cycles required to produce potable water

شکل ۴- تأثیر ولتاژ خارجی بر مصرف انرژی و چرخه‌های لازم برای تولید آب قابل شرب

در شکل ۵، تأثیر ریزمنافذ بر مصرف انرژی و چرخه‌های لازم برای تولید آب قابل شرب، ارزیابی شده است که نشان می‌دهد افزایش ریزمنافذ با کاهش تعداد چرخه‌های لازم برای تولید آب قابل شرب، تغییری در مصرف انرژی ایجاد نکرده است. دلیل این موضوع را می‌توان افزایش مکان‌های استقرار یون در الکترود دانست. چون با افزایش ریزمنافذ، محل‌های قرارگیری یون‌ها افزایش می‌یابد و در نتیجه در زمان کوتاه‌تر (چرخه‌های کمتر) آب قابل شرب در دسترس خواهد بود. پس مواد متخلخل با سطح ویژه بیشتر و مسیر دسترسی به ریزمنافذ کوتاه‌تر، برای استفاده در سلول یون‌زدایی خازنی مناسب هستند. نتیجه‌ای که سوس و همکاران نیز به آن اشاره کرده‌اند (Suss et al., 2015).

ظرفیت لایه استرن نیز همان گونه که در شکل ۶ مشاهده می‌شود، با کاهش چرخه‌های تصفیه آب، در تسریع تولید آب قابل شرب از سلول CDI مؤثر است. افزایش نمک‌زدایی با تغییر ظرفیت لایه استرن، تأثیری در انرژی مصرفی برای تولید آب شیرین ندارد. این ظرفیت بر اساس جنس ماده و با استفاده از روش ولتامتری چرخه‌ای به طور تقریبی قابل اندازه‌گیری است. پیشرفت در توسعه مواد جدید می‌تواند منجر به تولید موادی با ظرفیت‌های بیشتر برای استفاده در ساخت الکترودهای بهبودیافته شود.

غلظت آب تغذیه به عنوان یک مؤلفه ورودی می‌تواند به عنوان هدف نیز برگزیده شود، زیرا یکی از اهداف مهم در پژوهش‌ها، دستیابی به سلولی است که در غلظت‌های هر چه بیشتر، بتواند به

تأثیر هر یک از آنها به تفکیک در شکل‌های ۴ تا ۱۱ ارزیابی شده است.

بیان این نکته حائز اهمیت است که در شکل‌های ۴ تا ۱۱، با تغییر تعداد چرخه‌ها، روند تغییر انرژی مصرفی متفاوت می‌شود (به طور مثال، شکل ۴). این موضوع به دلیل در نظر گرفتن مرز شوری ۲۰۰ میلی‌گرم در لیتر برای آب تولید شده به روش CDI است. یعنی شوری آب تولیدی ممکن است هر عدد کمتر از ۲۰۰ را داشته باشد و در نتیجه هر چه اختلاف بیشتر شود (آب خالص‌تر شود)، انرژی بیشتری مصرف می‌شود.

شکل ۴ نشان می‌دهد که ولتاژ اعمال شده به سلول یون‌زدایی خازنی، یکی از اساسی‌ترین مؤلفه‌های دخیل در نمک‌زدایی است. ولی به دلیل افزایش مصرف انرژی و نیز پایین بودن ولتاژ الکترولیز آب (حدود ۱/۲۳ ولت)، عملاً افزایش ولتاژ بیشتر از مقداری که در پژوهش‌ها گزارش شده غیرممکن به نظر می‌آید (ولتاژ کل سلول ۲/۴ ولت که نتیجه آن با در نظر گرفتن تقارن در سلول، ۱/۲ ولت برای هر الکترود خواهد بود (Tang et al., 2019b)).

در خصوص افزایش مصرف انرژی، می‌توان گفت که با افزایش اختلاف پتانسیل الکتریکی، تلفات انرژی در اجزای مختلف سلول یون‌زدایی خازنی افزایش می‌یابد. این تلفات را می‌توان با تلفات در اتصالات، سیم‌ها و جمع‌کننده جریان الکتریکی، سطوح مشترک، کانال میانی، غشا (در صورت وجود) و الکترود، معرفی کرد. کار روی بهبود هر یک از این موارد می‌تواند به بهبود مصرف انرژی در سلول یون‌زدایی خازنی منجر شود.



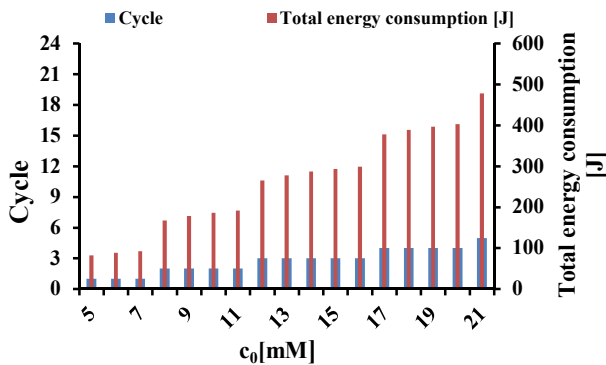


Fig. 7. Effect of initial concentration on energy consumption and the cycles required to produce potable water

شکل ۷- تأثیر غلظت اولیه بر مصرف انرژی و چرخه‌های لازم برای تولید آب قابل شرب

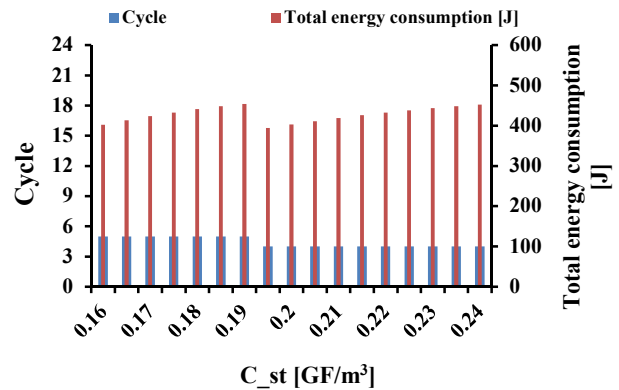


Fig. 6. Effect of stern layer capacity on energy consumption and the cycles required to produce potable water

شکل ۶- تأثیر ظرفیت لایه استرن بر مصرف انرژی و چرخه‌های لازم برای تولید آب قابل شرب

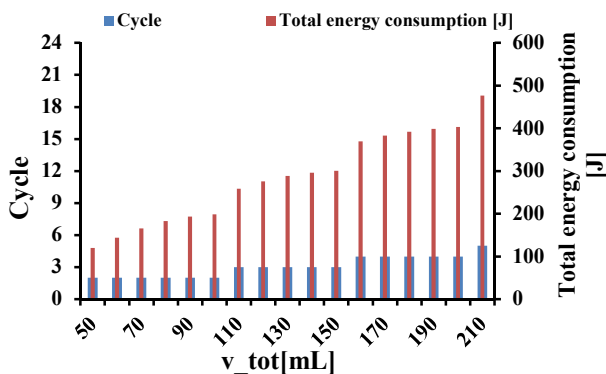


Fig. 8. Effect of feed water volume on energy consumption and the cycles required to produce potable water

شکل ۸- تأثیر حجم آب تغذیه بر مصرف انرژی و چرخه‌های لازم برای تولید آب قابل شرب

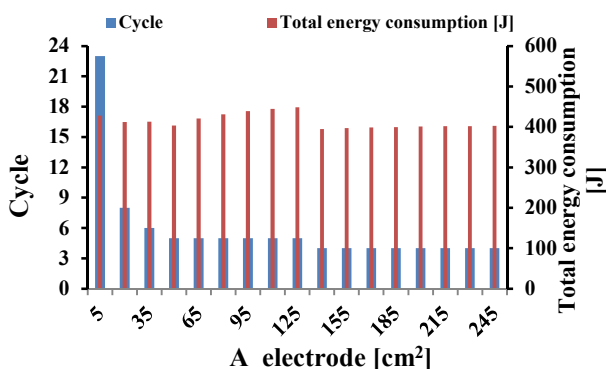


Fig. 9. Effect of electrode area on energy consumption and the cycles required to produce potable water

شکل ۹- تأثیر مساحت الکترود بر مصرف انرژی و چرخه‌های لازم برای تولید آب قابل شرب

راحتی نمک‌زدایی را انجام داده و میزان نمک در آب تصفیه شده را به حداقل برساند. در شکل ۷، میزان تأثیر این مؤلفه بر انرژی مصرفی و چرخه‌های لازم برای تولید آب قابل شرب نمایش داده شده است. همان‌طور که دیده می‌شود، انرژی لازم برای تولید آب قابل شرب، با افزایش غلظت آب تغذیه، افزایش می‌یابد و این افزایش به‌گونه‌ای است که در غلظت‌های زیاد، مصرف انرژی به شدت افزایش می‌یابد (Hemmatifar et al., 2016). یکی از مهمترین دلایل این افزایش مصرف انرژی را می‌توان به افزایش تلفات انرژی (شکل ۴) در چرخه تولید آب قابل شرب، جستجو کرد؛ زیرا با افزایش غلظت آب تغذیه، چرخه‌های موردنیاز برای یون‌زدایی افزایش می‌یابد و در نتیجه، تلفات انرژی تکرار شده و انباشت تلفات موجب افزایش تصاعدی مصرف انرژی شده است.

در شکل ۸، مشاهده می‌شود که با افزایش حجم آب تغذیه، چرخه‌هایی که باید طی شود تا آب به‌صورت قابل شرب درآید، در حال افزایش است. همچنین، مصرف انرژی نیز روند صعودی دارد. این تأثیر تقریباً به‌صورت خطی است، زیرا با افزایش حجم آب تغذیه، یون‌های ورودی به سلول نیز به‌طور خطی در حال افزایش هستند.

شکل ۹، تأثیر مساحت الکترود بر مصرف انرژی و چرخه‌های لازم برای تولید آب قابل شرب را نشان می‌دهد. در این شکل، عدم وابستگی فرایند یون‌زدایی به مساحت الکترود (با در نظر گرفتن مقدار حداقلی حدود ۵۰ سانتی‌متر مربع) قابل مشاهده



تأثیر ضریب انتقال کل، در شکل ۱۱ بررسی شده است. این مؤلفه عملاً بر نتایج بی‌اثر است. دلیل کم‌اثر بودن ضریب انتقال کل را می‌توان به افت شدید ولتاژ در دو لایه الکتریکی ( $\Delta\varphi_D + \Delta\varphi_{st}$ ) مرتبط دانست، چون پتانسیل باقیمانده ( $\Delta\varphi_{II}$ ) برای جابه‌جایی یون‌ها در کانال میانی بسیار کم بوده و این موضوع موجب کاهش اثر ضریب انتقال کل بر توابع هدف شده است (معادله ۲). همچنین از شکل ۱۱، مقدار مناسب برای ضریب انتقال کل  $0.9/0$  میکرومتر بر ثانیه به دست آمد.

### ۵- نتیجه‌گیری

در این پژوهش، شبیه‌سازی سلول یون‌زدایی خازنی انجام شد. بعد از مقایسه نتایج شبیه‌سازی با نتایج تجربی و انجام صحت‌سنجی، بررسی مؤلفه‌های مؤثر در نمک‌زدایی انجام شد. ولتاژ ورودی به سلول، حجم ریزمنافذ، ظرفیت لایه استرن، غلظت اولیه، حجم کل سیال، مساحت الکترود، زمان و ضریب انتقال کل، هشت مؤلفه‌ای بودند که تأثیر آنها بر مصرف انرژی و تعداد چرخه‌های لازم برای تولید آب قابل شرب (چرخه‌های بیشتر مستلزم زمان بیشتر است)، ارزیابی شد که در نهایت موارد زیر به‌عنوان نتایج حاصل از این بررسی گزارش شد:

۱- دو مؤلفه ظرفیت خازنی و حجم ریزمنافذ الکترودها باعث صرفه‌جویی در زمان (کاهش چرخه‌های لازم برای یون‌زدایی)، بدون افزایش مصرف انرژی شدند. با پیشرفت مواد و توسعه ساختارهای جدید و در نتیجه ساختن الکترودهایی با تخلخل زیاد (ریزمنافذ فراوان) و بهبود خواص الکتریکی (افزایش ظرفیت لایه استرن)، می‌توان به توسعه هرچه بیشتر این فناوری امیدوار شد.

۲- مؤثرترین مؤلفه در زمینه نمک‌زدایی خازنی را می‌توان ولتاژ ورودی به سلول در نظر گرفت، ولی باید محدودیت‌های ناشی از الکترولیز آب در ولتاژهای زیاد و افزایش تلفات انرژی، خصوصاً تلفات آهنی، را مورد توجه قرار داد.

۳- مؤلفه‌های زمان، مساحت الکترود و ضریب انتقال کلی، تأثیرات کمی بر میزان جذب نمک نشان می‌دهند. البته این عدم وابستگی، بعد از مقدار حداقلی قابل دستیابی است. این مقدار برای زمان، مساحت الکترود و ضریب انتقال کل، به ترتیب  $400$  ثانیه،  $50$  سانتی‌متر مربع و  $0.9/0$  میکرومتر بر ثانیه به دست آمدند.

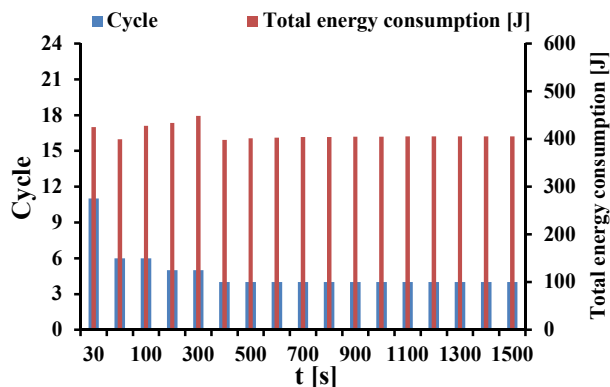


Fig. 10. Effect of time on energy consumption and the cycles required to produce potable water

شکل ۱۰- تأثیر زمان بر مصرف انرژی و چرخه‌های لازم برای تولید آب قابل شرب

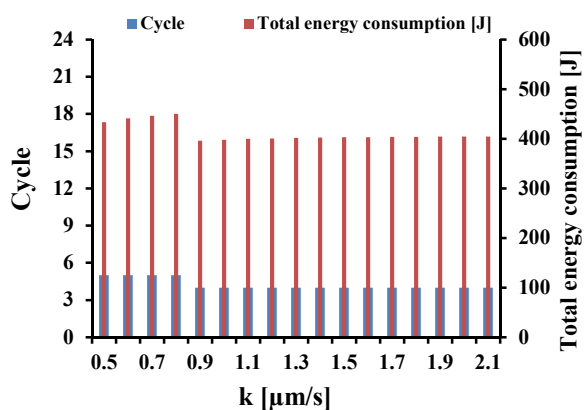


Fig. 11. Effect of the total transport coefficient on energy consumption and the cycles required to produce potable water

شکل ۱۱- تأثیر ضریب انتقال کل، بر مصرف انرژی و چرخه‌های لازم برای تولید آب قابل شرب

است.

در مورد تحلیل این موضوع می‌توان گفت که تغییرات مساحت الکترود، بدون تغییر در حجم ریزتخلخل‌ها لحاظ شده و این موضوع سبب عدم تأثیر این مؤلفه در توابع هدف شده است.

با بررسی شکل ۱۰ می‌توان زمان مناسب برای فرایند یون‌زدایی را مشخص کرد. همان‌گونه که در این شکل مشخص است، برای زمان‌های بیش از  $400$  ثانیه، عملاً در مصرف انرژی و تعداد چرخه‌های لازم برای تولید آب قابل شرب، تغییری ایجاد نشده است. زمان  $400$  ثانیه را می‌توان حداقل زمان لازم برای رسیدن و استقرار یون‌ها در ریزتخلخل‌ها در نظر گرفت.



## ۶- قدردانی

نویسندگان، از شرکت آب و فاضلاب سیستان و بلوچستان، به دلیل حمایت مالی از این پژوهش، قدردانی می‌کنند.

## References

- Al-Karaghoul, A. & Kazmerski, L. L. 2013. Energy consumption and water production cost of conventional and renewable-energy-powered desalination processes. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 24, 343–356. <https://doi.org/10.1016/J.RSER.2012.12.064>.
- Avraham, E., Noked, M., Cohen, I., Soffer, A. & Aurbach, D. 2011. The dependence of the desalination performance in capacitive deionization processes on the electrodes PZC. *Journal of The Electrochemical Society*, 158(12), P168. <https://doi.org/10.1149/2.078112jes>.
- Biesheuvel, P. M., Zhao, R., Porada, S. & Van Der Wal, A. 2011. Theory of membrane capacitive deionization including the effect of the electrode pore space. *Journal of Colloid and Interface Science*, 360, 239–248. <https://doi.org/10.1016/j.jcis.2011.04.049>.
- Blair, J. W. & Murphy, G. W. 1960. Electrochemical Demineralization of Water with Porous Electrodes of Large Surface Area. In: Alexander, A. H., Scribner, B. F., Edelstein, S. M., Sparks, W. J., McCrone Jr, W. C., Ullyot, G. E., et al., ed. *Saline Water Conversion*, 206–223. <https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ba-1960-0027.ch020>.
- Chang, J., Duan, F., Cao, H., Tang, K., Su, C. & Li, Y. 2019. Superiority of a novel flow-electrode capacitive deionization (FCDI) based on a battery material at high applied voltage. *Desalination*, 468, 114080. <https://doi.org/10.1016/J.DESAL.2019.114080>.
- Farmer, J. C., Fix, D. V., Mack, G. V., Pekala, R. W. & Poco, J. F. 1996. Capacitive deionization of NaCl and NaNO<sub>3</sub> solutions with carbon aerogel electrodes. *Journal of the Electrochemical Society*, 143, 159–169. <https://doi.org/10.1149/1.1836402>.
- Gao, X., Omosebi, A., Landon, J. & Liu, K. 2015. Surface charge enhanced carbon electrodes for stable and efficient capacitive deionization using inverted adsorption-desorption behavior. *Energy and Environmental Science*, 8, 897–909. <https://doi.org/10.1039/c4ee03172e>.
- He, Z., Liu, S., Lian, B., Fletcher, J., Bales, C., Wang, Y., et al. 2021. Optimization of constant-current operation in membrane capacitive deionization (MCDI) using variable discharging operations. *Water Research*, 204, 117646. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2021.117646>.
- Hemmatifar, A., Palko, J. W., Stadermann, M. & Santiago, J. G. 2016. Energy breakdown in capacitive deionization. *Water Research*, 104, 303–311. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2016.08.020>.
- Jeon, S. I., Park, H. R., Yeo, J. G., Yang, S., Cho, C. H., Han, M. H., et al. 2013. Desalination via a new membrane capacitive deionization process utilizing flow-electrodes. *Energy and Environmental Science*, 6(5), 1471–1475. <https://doi.org/10.1039/c3ee24443a>.
- Johnson, A. M. & Newman, J. 1971. Desalting by means of porous carbon electrodes. *Journal of the Electrochemical Society*, 118(3), 510. <https://doi.org/10.1149/1.2408094>.
- Kucera, J. 2019. *Desalination: Water from Water*. 2<sup>nd</sup> Edition, Wiley. John Wiley & Sons, New York, USA.



- Lee, J., Kim, S., Kim, C. & Yoon, J. 2014. Hybrid capacitive deionization to enhance the desalination performance of capacitive techniques. *Energy and Environmental Science*, 7(11), 3683-3689. <https://doi.org/10.1039/c4ee02378a>.
- Lee, J. B., Park, K. K., Eum, H. M. & Lee, C. W. 2006. Desalination of a thermal power plant wastewater by membrane capacitive deionization. *Desalination*, 196, 125–134. <https://doi.org/10.1016/j.desal.2006.01.011>.
- Lenz, M., Wagner, R., Hack, E. & Franzreb, M. 2020. Object-oriented modeling of a capacitive deionization process. *Frontiers in Chemical Engineering*, 2, 3. <https://doi.org/10.3389/fceng.2020.00003>.
- Lin, P., Liao, M., Yang, T., Sheng, X., Wu, Y. & Xu, X. 2020. Modification of metal-organic framework-derived nanocarbons for enhanced capacitive deionization performance: a mini-review. *Frontiers in Chemistry*, 8, 575350. <https://doi.org/10.3389/fchem.2020.575350>.
- Ma, J., Liang, P., Sun, X., Zhang, H., Bian, Y., Yang, F., et al. 2019. Energy recovery from the flow-electrode capacitive deionization. *Journal of Power Sources*, 421, 50–55. <https://doi.org/10.1016/j.jpowsour.2019.02.082>.
- Oren, Y. & Soffer, A. 1983. Water desalting by means of electrochemical parametric pumping: I. the equilibrium properties of a batch unit cell. *Journal of Applied Electrochemistry*, 13(4), 473-487. <https://doi.org/10.1007/BF00617522>.
- Oren, Y. & Soffer, A. 1978. Electrochemical parametric pumping. *Journal of the Electrochemical Society*, 125(6), 869-875. <https://doi.org/10.1149/1.2131570/XML>.
- Pasta, M., Wessells, C. D., Cui, Y. & La Mantia, F. 2012. A desalination battery. *Nano Letters*, 12(2), 839-843. <https://doi.org/10.1021/nl203889e>.
- Porada, S., Sales, B. B., Hamelers, H. V. M. & Biesheuvel, P. M. 2012. Water desalination with wires. *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 3(12), 1613–1618. <https://doi.org/10.1021/jz3005514>.
- Porada, S., Zhao, R., Van Der Wal, A., Presser, V. & Biesheuvel, P. M. 2013. Review on the science and technology of water desalination by capacitive deionization. *Progress in Materials Science*, 58(8), 1388-1442. <https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2013.03.005>.
- Rommerskirchen, A., Ohs, B., Hepp, K. A., Femmer, R. & Wessling, M. 2018. Modeling continuous flow-electrode capacitive deionization processes with ion-exchange membranes. *Journal of Membrane Science*, 546, 188–196. <https://doi.org/10.1016/j.memsci.2017.10.026>.
- Ryu, J. H., Kim, T. J., Lee, T. Y. & Lee, I. B. 2010. A study on modeling and simulation of capacitive deionization process for wastewater treatment. *Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers*, 4, 506–511. <https://doi.org/10.1016/J.JTICE.2010.04.003>.
- Shi, W., Ye, C., Xu, X., Liu, X., Ding, M., Liu, W., et al. 2018. High-performance membrane capacitive deionization based on metal-organic framework-derived hierarchical carbon structures. *ACS Omega*, 3(8), 8506–8513. <https://doi.org/10.1021/acsomega.8b01356>.
- Spiegler, K. S. & El-Sayed, Y. M. 2001. The energetics of desalination processes. *Desalination*, 134, 109–128. [https://doi.org/10.1016/S0011-9164\(01\)00121-7](https://doi.org/10.1016/S0011-9164(01)00121-7).
- Suss, M. E., Porada, S., Sun, X., Biesheuvel, P. M., Yoon, J. & Presser, V. 2015. Water desalination via capacitive deionization: What is it and what can we expect from it? *Energy and Environmental Science*, 8(8), 2296-2319. <https://doi.org/10.1039/c5ee00519a>.



- Tang, K., Kim, Y. H., Chang, J., Mayes, R. T., Gabitto, J., Yiacoumi, S., et al. 2019a. Seawater desalination by over-potential membrane capacitive deionization: opportunities and hurdles. *Chemical Engineering Journal*, 357, 103–111. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2018.09.121>.
- Tang, W., Liang, J., He, D., Gong, J., Tang, L., Liu, Z., et al. 2019b. Various cell architectures of capacitive deionization: recent advances and future trends. *Water Research*, 150, 225-251. <https://doi.org/10.1016/j.watres.2018.11.064>.
- Torabian, A., Zamani, M., 2020. *Drinking Water - Physical and Chemical Specifications*. Institute of Standards and Industrial Research of Iran (ISIRI), Tehran, Iran. (In Persian)
- Yao, S. & Ji, M. 2020. A small RO and MCDI coupled seawater desalination plant and its performance simulation analysis and optimization. *Processes*, 8(8), 944. <https://doi.org/10.3390/PR8080944>.
- Zhang, X. & Reible, D. 2020. Exploring the function of ion-exchange membrane in membrane capacitive deionization via a fully coupled two-dimensional process model. *Processes*, 8(10), 1312. <https://doi.org/10.3390/PR8101312>.
- Zhao, R. 2013. Theory and Operation of Capacitive Deionization Systems. Doctoral Dissertation. Wageningen University, Wageningen, The Netherlands.
- Zhao, R., Porada, S., Biesheuvel, P. M. & Van Der Wal, A. 2013. Energy consumption in membrane capacitive deionization for different water recoveries and flow rates, and comparison with reverse osmosis. *Desalination*, 330, 35-41. <https://doi.org/10.1016/J.DESAL.2013.08.017>.



This work is licensed under a [Creative Commons Attribution 4.0 International License](https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/)

