شبیه سازی حذف فتوکاتالیستی ترکیبهای آلی فرار در راکتور بستر سیال

امىر معتمد داشلى برون، رحمت ستودە قرەباغ*⁺ تهران، دانشگاه تهران، پردىس دانشكدەھاى فنى، دانشكدە مېندسى شىمى

محمد حاج آقازاده ارومیه، دانشگاه علوم پزشکی ارومیه، دانشکده بهداشت، گروه بهداشت حرفهای حسین کاکوئی

تهران، دانشگاه علوم پزشکی تهران، دانشکده بهداشت، گروه بهداشت حرفهای

چكیده: اكسایش فتوكاتالیستی در راكتورهای گوناگون بهعنوان یك روش پذیرفته شده از نظر اقتصادی و زیست محیطی، برای حذف تركیبهای آلی فرار به كار می رود، و در میان راكتورهای گوناگون، راكتور بستر سیال بهعنوان یك راكتور كارآمد برای این منظور استفاده می شود. مدل سازی و شبیه سازی راكتورهای بستر سیال فتوكاتالیستی به منظور افزایش اندازه های راكتور از مقیاس آزمایشگاهی به مقیاس صنعتی و بهینه سازی و كنترل كاركرد آن ضروری است. برای این منظور در این پژوهش، متیل اتیل كتون (MEK، تری كلرواتیلن (CE) و شیولین بهعنوان سه مدل آلاینده انتخاب شد و تبدیل فتوكاتالیستی آنها در راكتور بستر سیال شبیه سازی و کنترل شیمه سازی عملكرد راكتور بستر سیال فتوكاتالیستی، زیرمدل های هیدرودیامیكی و سینتیكی با همدیگر به طور شیمه سازی عملكرد راكتور بستر سیال فتوكاتالیستی، زیرمدل های هیدرودیامیكی و سینتیكی با همدیگر به طور شیمه سازی عملكرد راكتور بستر سیال فتوكاتالیستی، زیرمدل های هیدرودیامیكی و سینتیكی با همدیگر به طور ثری مدل مدن حل شدند. مدل سینتیكی لانگموییر - هینشلوود برای تبدیل فتوكاتالیستی آلایده ما به كار گرفته شد و زیر مدل هیدرودینامیكی انتخاب شد و اعتبار این مدل از روش مقایسه نتیجههای شیه ازی با نتیجههای آزمایشگاهی مورد بررسی قرار گرفت. دیده شد كه توافق خوبی بین نتیجههای تجربی و نتیجههای به دست آماده از این مدل وجود دارد. نتیجههای این مدل سازی و شبیه سازی می و این مدل دینامیك دو فازی با نتیجههای آزمایشگاهی مورد بررسی قرار گرفت. دیده شد كه توافق خوبی بین نتیجههای تجربی و نتیجههای به دست آماده از این مدل وجود دارد. نتیجههای این مدل سازی و شبیه سازی می تواند در پیش بینی عملكرد راكتورهای بستر سیال فتوكاتالیستی

واژه های کلیدی:اکسایش فتو کاتالیستی، راکتور بستر سیال، شبیه سازی راکتور، مدل دینامیک دو فازی.

KEY WORDS: Photocatalytic oxidation, Fluidized bed reactor, Reactor simulation, Dynamic twophase model.

+E-mail: sotudeh@ut.ac.ir

*عهده دار مکاتبات

علمی، پژوهشی

مقدمه

ترکیبهای آلی فرار دارای یک اتم کربن یا بیشتر هستند که فشار بخار بالایی دارند و بهراحتی در اتمسفر منتشر میشوند. به دلیل اینکه این ترکیبها به طور مستقیم وارد هوا میشوند، بهعنوان آلایندههای اصلی دستهبندی میشوند. انتشار ترکیبهای آلی فرار میتواند نقش چشمگیری در تشکیل مه دود شهری بازی کند و باعث تشکیل مواد سمّی به وسیلهی اکسایش فتوشیمیایی در اتمسفر شود. به منظور کاهش مقدار این آلایندهها در محیطزیست، روشهای بسیاری در طی سالهای اخیر مورد بررسی قرار گرفته است [۳ – ۱].

جذب سطحی، احتراق حرارتی و کاتالیستی و تبدیل فتوکاتالیستی از جمله روشهای مورد استفاده برای تصفیه آلایندههای آلی از هوا میباشد [۴]. روشهای جذب سطحی آلایندهها را از بین نمیبرند بلکه فقط آنها را از فاز گازی جدا کرده و به فاز جامد منتقل میکنند. بهدنبال استفاده از جاذب های جامد، مسائل زیست محیطی مانند دفن بهداشتی آنها مطرح میشود [۵]. روش سوختن کاتالیستی یکی دیگر از روشهای مورد استفاده برای تصفیه آلایندههای آلی میباشد که نیاز به منبع گرمایی دارد. این روش بهعنوان یک فرایند با هدر رفت بالای انرژی در غلظتهای پایین ترکیبهای آلی فرار میباشد. افزون بر این، روش سوختن کاتالیستی میتواند تشکیل فراوردههای جانبی مانند دیاکسینها را در پی داشته باشد [۶].

در تبدیل فتوکاتالیستی آلایندههای آلی از نیمه هادیهایی مانند تیتانیوم دیاکسید برای حمل فوتون فرایند اکسایش بهمنظور تبدیل ترکیبهای آلی فرار به کربن دیاکسید و آب استفاده میشود. این روش برای تبدیل ترکیبهای آلی فرار در هر دو فاز گاز و مایع میباشد و در میان روشهای تصفیهی آلایندهها، تبدیل فتوکاتالیستی از نظر اقتصادی و زیست محیطی پذیرفته شده است [۷]. تیتانیوم دیاکسید که به طور فزاینده بهعنوان میباشد. افزون بر این واکنش فتوکاتالیستی در دما و فشار محیط میباشد. افزودنی^(۱) صورت میگیرد. همچنین در آینده، اگر بتوان بدون هیچ افزودنی^(۱) صورت میگیرد. همچنین در آینده، اگر بتوان از نور خورشید به عنوان منبع تولید فوتونها استفاده کرد، تبدیل فتوکاتالیستی یک فرایند با ذخیره انرژی به شمار خواهد رفت [۸].

(*****) Emulsion phase

از راکتورهای گوناگون مانند راکتورهای صفحه تخت، مونولیت لانه زنبوری، حلقوی و بستر سیال استفاده شده است. راکتورهای گفته شده بهغیر از راکتور بستر سیال در گروه راکتورهای بستر ثابت تقسیم بندی میشوند. در راکتورهای بستر ثابت، کاتالیست در محل خود ثابت و بدون تحرک است. درحالی که در راکتور بستر سیال، ذراتی که بر روی آنها کاتالیست نشانده شده است، در درون راکتور بهراحتی سیال شده و حرکت میکنند. از آنجایی که در راکتورهای بستر سیال شده و حرکت میکنند. از آنجایی که در راکتورهای بستر سیال شده و حرکت میکنند. از آنجایی که در راکتورهای بستر سیال شده و تماس مؤثری بین فوتونهای نور فرابنفش، کاتالیست جامد و واکنش دهندهها فراهم میشود، در سالهای اخیر مورد توجه پژوهشگران قرار گرفتهاند [۷، ۶].

مدل سازی و شبیه سازی راکتورهای بستر سیال فتو کاتالیستی به منظور افزایش اندازههای راکتور از مقیاس آزمایشگاهی به مقیاس صنعتی و بهینه سازی و کنترل کارکرد آن نیاز است [۱۰]. چون هر دو پدیدهی فیزیکی و شیمیایی با هم در چنین راکتورهایی وجود دارند، لازم است که زیرمدلهای مناسب در مدل سازی در نظر گرفته شود. این زیرمدلها شامل هیدرودینامیک و سینتیک میباشد. زیر مدل هیدرودینامیکی ویژگیهای فیزیکی سامانه را توصیف میکند؛ یعنی تشکیل فاز حباب^(۲) و فاز تعلیق^(۳), ویژگیهای این فازها و برهمکنش بین آنها؛ و زیرمدل سینتیکی پدیدههای شیمیایی را توصیف مینماید که بیانگر واکنشهای مورت گرفته در بستر میباشند. هیدرودینامیک بسترهای سیال در میان سایر تماس دهندههای گاز – جامد مانند بسترهای ثابت ومتحرک پیچیدگی بیشتری دارد [۱۱].

بیشتر مدل های هیدرودینامیکی معرفی شده در منابع بر مبنای نظریهی دوفازی استوار میباشند. طبق این نظریه بستر سیال شده شامل دو فاز مجزای حباب و تعلیق است. فاز حباب در برگیرندهی بخشی از بستر است که غنی از فاز گاز میباشد؛ و فاز تعلیق در برگیرندهی بخشی از بستر است که غنی از فاز جامد میباشد [۱۲]. در این پژوهش، برای پیشبینی رفتار راکتور بستر سیال فتوکاتالیستی از زیرمدل سینتیکی و هیدرودینامیکی مناسب استفاده شد. اعتبار این مدلها از روش مقایسه نتیجههای شبیه سازی با نتیجههای آزمایشگاهی موجود در منابع علمی مورد بررسی قرار گرفت. همچنین در ادامه، اثر پارامترهای عملیاتی یعنی غلظت اولیهی آلاینده و سرعت ظاهری گاز بر روی

⁽¹⁾ Additive

⁽Y) Bubble phase

میزان تبدیل آلایندهها از روش شبیهسازی بررسی شد و دقت آن از روش مقایسه با دادههای آزمایشگاهی مورد ارزیابی قرار گرفت.

بخش نظری

مدلسازی و شبیهسازی

بر اساس مطالب عنوان شده در بخش قبل، بهمنظور مدل سازی یک راکتور بستر سیال لازم است که زیرمدل های هیدرودینامیکی و سینتیکی که بهترتیب توصیف کنندهی پدیدهی فیزیکی و شیمیایی است، در نظر گرفته شوند. در میان مدل های هیدرودینامیکی موجود در منابع علمی، مدل دینامیک دو فازی ((TP)^(۱)) موجود در منابع علمی، مدل دینامیک دو فازی ((TP)^(۱)) به دلیل نزدیکی به پدیدههای واقعی در راکتورهای بستر سیال به منظور توصیف پدیده ی شیمیایی از مدل سینتیکی بهمنظور توصیف پدیده ی شیمیایی از مدل سینتیکی لانگمویر – هینشلوود که به طور گسترده برای توصیف واکنش های بستر سیال لازم است که زیر مدل هیدرودینامیکی با زیر مدل سینتیکی به طور همزمان حل شوند.

زير مدل هيدروديناميكي

در مدل DTP همانند سایر مدلهای دو فازی، بستر سیال شده به دو فاز حباب و تعليق تقسيم مي شود. اما بر خلاف مدل دو فازی ساده، فرضیههای به کار رفته در آن واقعی تر هستند. در این مدل فاز تعلیق در شرایط حداقل سیالیت باقی نمیماند و ذرههای جامد در هر دو فاز حباب و تعلیق وجود دارند. بنابراین پیشرفت واکنش در هر دو فاز در نظر گرفته میشود. همچنین جریان گاز در هر دو فاز به صورت جریان قالبی فرض می شود. در این مدل با انجام آزمایش در سرعتهای گوناگون با استفاده از دو نمونه ذرههای جامد به عنوان نماینده گروههای گلدارت A و B و محاسبه احتمال حضور ذرههای جامد در هر یک از فازهای حباب و تعلیق روابطی برای محاسبه پارامترهای هیدرودینامیکی ارایه شده است [۱۳، ۱۴]. با توجه به اینکه کاتالیست مورد استفاده در این مطالعه در گروهبندی گلدارت B قرار می گیرد، از رابطههای ارایه شده برای این گروهبندی برای ارزیابی پارامترهای هیدرودینامیکی استفاده شده است. معادله های موازنه جرم برای جزء شرکت کنندهی A در فاز حباب و تعلیق در جدول ۱ آمده است. همچنین رابطههای سیال سازی و انتقال جرم مورد نیاز در جدول ۲ آمده است.

علمی، پژوهشی

زیر مدل سینتیکی

مدل سینتیکی لانگموییر _ هینشلوود به طور گستردهای برای توصیف واکنشهای کاتالیستی استفاده می شود [۱۸]. همچنین این مدل به طور گسترده در مدل سازی واکنشهای فتوکاتالیستی استفاده می شود [۱، ۱۹]. مدل سینتیکی لانگموییر _ هینشلوود می تواند به طور موفقیت آمیزی سینتیک واکنش بین دو جزء جذب شده می تواند به طور موفقیت آمیزی سینتیک واکنش بین دو مادله ۱). یعنی رادیکال هیدروکسیل و آلاینده را توصیف کند (معادله ۱). آلاینده جذب شده در معادلهی (۱) توسط واکنش های معادله های (۲) و (۳) تولید می شود.

 $VOC_{ad}^{+} + HO_{ad}^{\bullet} \rightarrow products(H_2O + CO_2)$ (1)

$$\operatorname{TiO}_{2}(h^{+}) + \operatorname{VOC} \rightarrow \operatorname{VOC}_{ad}$$
 (Y

$$\mathrm{TiO}_{2}(\mathbf{h}^{+}) + \mathrm{VOC}_{\mathrm{ad}} \to \mathrm{VOC}_{\mathrm{ad}}^{+} \tag{(\%)}$$

اکسایش فتوکاتالیستی ممکن است نتیجه یی یک مکانیسم پیچیده و شامل تعداد زیادی واکنش باشد [۲۰]. اما با توجه به اینکه اندازه گیری مقدار واکنش در منابع تنها براساس تبدیل کلی آلاینده می باشد، ساده سازی هایی در تحلیل سینتیک صورت گرفته است. در غلظت ثابت اکسیژن و بخار آب (به دلیل اینکه به مقدار زیادی وجود دارند)، فرض می شود که فراورده ها و مواد واسطه واکنش به طور ضعیف یا غیر رقابتی بر روی سطح کاتالیست جذب می شوند [۲۱]. بنابراین سرعت حذف آلاینده با سطح پوشش^(۲) آلاینده (θ_{VOC}) بر روی کاتالیست تغییر می کند (معادله ۴). ثابتهای مدل لانگموییر _ هینشلوود یعنی ثابت سرعت واکنش هرو و ثابت جذب الا استفاده از یک برنامه سرعت واکنش ایر ایر کمینه کردن مقدار σ^2 که با معادله (۵) تعریف می شود، به دست می آید [۸].

$$R_{VOC} = k_{deg} \theta_{VOC} = k_{deg} \frac{K_{LH} C_{VOC}}{1 + K_{LH} C_{VOC}}$$
(*)

$$\sigma^{2} = \sum_{i=1}^{N} \frac{(R_{VOCexp,i} - R_{VOCc,i})^{2}}{N - K}$$
 (d)

که N بیان کننده ی تعداد کل آزمایش ها، K تعداد پارامترهایی $R_{VOCc,i}$ ، (تمایش ها، K باید تعیین شود (در این مطالعه K برابر با ۲ است) مرعت سرعت واکنش محاسبه شده برای آزمایش i واکنش تجربی به دست آمده برای آزمایش i میباشد که به صورت معادله (۶) بیان می شود.

⁽Y) Surface Coverage

⁽¹⁾ Dynamic Two Phase (DTP)

جدول ۱_ معادلههای DTP.

$\frac{dC_{Ab}}{dz} = -\frac{K_{be}(C_{Ab} - C_{Ae})}{U_b} + \frac{R_{Ab}(1 - \varepsilon_b)\rho_s}{U_b}$	موازنه جزء A در فاز حباب
$\frac{dC_{Ae}}{dz} = \frac{K_{be}\delta(C_{Ab} - C_{Ae})}{U_e(1 - \delta)} + \frac{R_{Ae}(1 - \varepsilon_e)\rho_s}{U_e}$	موازنه جز ۲ در فاز امولسيون
$\overline{C}_{A} = \frac{U_{mf}}{U_{0}} (1 - \delta) C_{Ae} + \frac{U_{b}}{U_{0}} \delta C_{Ab}$	غلظت متوسط جز ، A
$\varepsilon_{\rm b} = 1 - 0.146 \exp\left[\frac{-(U_0 - U_{\rm mf})}{4.439}\right]$	تخلخل فاز حباب [۱۴]
$\varepsilon_{\rm e} = \varepsilon_{\rm mf} + 0.2 - 0.059 \exp\left[\frac{-(U_0 - U_{\rm mf})}{0.429}\right]$	تخلخل فاز امولسيون [۱۴]
$\varepsilon = (1 - \delta)\varepsilon_e + \delta\varepsilon_b$	میانگین تخلخل بستر
$\delta = 0.534 - 0.534 \exp\left[\frac{-(U_0 - U_{mf})}{0.413}\right]$	جزء فاز حباب [۱۴]
$U_{e} = \frac{U_{0} - \delta U_{b}}{1 - \delta}$	سرعت گاز در فاز امولسيون

جدول ۲_ معادلههای سیالسازی و انتقال جرم.

$\frac{U_{mf}\rho_g d_p}{\mu_g} = \sqrt{27.2^2 + 0.0408Ar} - 27.2$	حداقل سرعت سياليت [18]
$D_{b} = 0.21 H^{0.8} (U_{0} - U_{mf})^{0.42} \exp[-0.25(U_{0} - U_{mf})^{2} - 0.1(U_{0} - U_{mf})]$	قطر حباب [۱۶]
$U_{b} = U_{0} - U_{e} + u_{br}$ $u_{br} = 0.711\sqrt{gD_{b}}$	سرعت حباب [۱۷]
$\frac{1}{K_{be}} = \frac{1}{K_{bc}} + \frac{1}{K_{ce}} \qquad K_{bc} = 4.5 \left(\frac{U_e}{D_b}\right) + 5.85 \left(\frac{D_{AB}^{1/2} g^{1/4}}{D_b^{5/4}}\right)$	ضرایب انتقال جرم بین فازها [۱۷]
$K_{ce} = 6.77 \left(\frac{D_{AB} \varepsilon_e u_{br}}{D_b^3}\right)^{1/2}$	

علمى، پژوهشى

۶+

ویژگیها	واحد	مرجع [۲۲]	مرجع [۲۰]	مرجع [٢٣]	مرجع [۲۴]
آلاينده	-	МЕК	TCE	Toluene	Toluene
Н	mm)	۲۲۰	۱۳۵	۳۰۲
D _i	mm	75	٣٩	٣٩	-
D _o	mm	۴.	۵۵	۴٩	۴.
d _p	μm	۷۴–۲۵۰	۲۵۰ _ ۵۹۰	120-620	۲۵۰ _ ۵۰۰
ρ _s	kg/m ³	٣٢۴۶	۲۱۹۰	14	१८८२
С	ppm	١٠٠ _ ٨٠٠	۱۰۰ _ ۵۰۰	۵–۳۵	•/٩-٢٠٠
U _{mf}	cm/s	١/١٢	١,٧	۱/۲۶ - ۱/۲۳	۲/۰۱۷
U	cm/s	U _{mf} -۴U _{mf}	U_{mf} - $\mathcal{F}U_{mf}$	۶_۱	۶,۶۳
k _{deg}	µmol/g s	۰ _/ ۷۵	١٣/٢٣	•/188	۰ _/ ۶۷ ppm/s
K _{LH}	Lit/ µmol	•/••۴۴	٠/١٥٨٣	4,754	

جدول ۳_ویژگیهای راکتور و شرایط عملیاتی.



شکل ۱_ مقایسه نتیجههای به دست آمده از شبیهسازی با نتیجههای تجربی بهدست آمده از مراجع.

که در آن، Q بیان کنندهی شدت جریان جریان در ورودی راکتور، Cvoc,ou و Cvoc,ou بهترتیب غلظت آلاینده در ورودی و خروجی راکتور و W وزن فتوکاتالیست در داخل راکتور میباشد. که به صورت معادله (۶) بیان می شود.

$$R_{\rm VOC\,exp} = \frac{Q(C_{\rm VOC,in} - C_{\rm VOC,out})}{W}$$
(8)

علمی، پژوهشی

نتيجهها و بحث

به منظور تعیین اعتبار مدل در شبیه سازی راکتورهای بستر سیال فتوکاتالیستی از مجموعه دادههای تجربی ارایه شده در مقالهها استفاده شده است. ویژگیهای راکتورها و شرایط عملیاتی آنها در جدول ۳ آمده است. همچنین ثابتهای سینتیکی مدل لانگموییر _ هینشلوود برای تبدیل فتوکاتالیستی هر یک از آلایندههای آلی که در راکتورهای جدول ۳ بررسی شده است، محاسبه شد و نتیجههای به دست آمده از آن در جدول ۳ آمده است.

نمودار مقایسهای درصد تبدیل محاسبه شده در برابر دادههای تجربی برای سه آلاینده ی آلی یعنی متیل اتیل کتون، تری کلرواتیلن و تولوئن در شکل ۱ نشان داده می شود. در این شکل دیده می شود که مدل DTP پیش بینی قابل قبولی از درصد تبدیل آلایندهها ارایه می دهد. چون همان گونه که در پیش تر اشاره شد، این مدل فرضیههای واقعی تری را در نظر می گیرد. هر چند تفاوتی میان نتیجههای به دست آمده از مدل سازی و نتیجههای تجربی دیده می شود ولی بیشترین خطای دیده شده ۱۲ درصد است که قابل قبول می باشد.

اثر غلظت اولیه آلاینده بر روی میزان تبدیل آن در یک سرعت ظاهری مشخص در شکلهای ۲ و ۳ نمایش داده شده است. با توجه به شکل ۲ دیده می شود که با افزایش غلظت متیل اتیل کتون از ۲۰۰ ppm به ۸۰۰ و همچنین با افزایش

غلظت تواوئن از ۳pm ۴ به ۲۰۰ درصد تبدیل آنها کاهش مییابد. نتیجههای همانندی توسط *لیم و کیم* [۲۰] برای اکسایش فتوکاتالیستی تری کلرواتیلن در یک راکتور بستر سیال به دست آمد (شکل ۳). آنها گزارش کردهاند که تبدیل کامل تری کلرواتیلن با افزایش غلظت از ۳۰۰ به ۲۰۰ کاهش نمییابد. چون سیال سازی کاتالیست باعث افزایش میزان انتقال نور فرابنفش به سطح کاتالیست و بیشتر غلظت تری کلرواتیلن باعث کاهش میزان تخریب آن میشود. که این می تواند به دلیل محدود بودن تعداد سایتهای فعال بر روی فتوکاتالیست تیتانیوم دی اکسید باشد. همچنین نتیجههای همانند دیگری توسط ز*انگ و لیاو* [۳۳] برای تبدیل فتوکاتالیستی تولوئن در یک راکتور بستر سیال گزارش شد (شکل ۳).

عملکرد مدل DTP در پیش بینی میزان تبدیل آلایندهها در غلظتهای گوناگون از آنها را میتوان در شکل ۲ و ۳ دید. همان گونه که در شکلها دیده می شود، نتیجههای به دست آمده از این مدل در توافق خوبی با نتیجههای تجربی می باشد. بنابراین این مدل به طور قابل قبولی قادر به پیش بینی میزان تبدیل آلاینده در غلظتهای اولیهی گوناگون است.

شکل ۴ نشان دهندهی اثر سرعت ظاهری گاز بر روی میزان تبدیل فتوکاتالیستی متیل اتیل کتون میباشد. در غلظتهای بالاتر، با افزایش سرعت ظاهری گاز از دو برابر ₁m به چهار برابر U_mf میزان تبدیل متیل اتیل کتون کاهش چشمگیری مییابد. *حاج آقازاده* و همکار*ان* [۲۲] گزارش کردند که در سرعتهای بالا، حبابها به یکدیگر میپوندند و باعث افزایش تخلخل بستر میشوند. افزایش تخلخل بستر منجر به کاهش زمان اقامت گاز در بستر و در نتیجه کاهش میزان تبدیل متیل اتیل کتون میشود [۲۵]. کیو و همکار*ان* [۶۲] در بررسی اکسایش فتوکاتالیستی تولوئن در یک راکتور بستر سیال، کاهش میزان تبدیل آلاینده با افزایش شدت جریان گاز از ۵ به ۱۵ لیتر بر دقیقه را گزارش کردند.

همچنین عملکرد مدل DTP در پیش بینی میزان تبدیل متیل اتیل کتون در سرعتهای ظاهری گاز گوناگون در شکل ۴ نشان داده شده است. با توجه به شکل، دیده میشود که مدل بهطور قابل قبولی قادر به پیش بینی نتیجههای تجربی در سرعتهای گوناگون است؛ هر چند در غلظتهای بالاتر با افزایش سرعت ظاهری گاز نتیجههای به دست آمده از شبیه سازی بیشتر از نتیجههای تجربی است. دلیل این افزایش پیشبینی با توجه به رابطههای تخلخل فاز حباب و تعلیق در جدول ۱، این است که



شکل ۲ نتیجههای تجربی و شبیهسازی اثر غلظت اولیه متیل اتیل کتون [۲۰] و تولوئن [۴۳] بر روی میزان تبدیل آنها.



شکل ۳ـ نتیجههای تجربی و شبیهسازی اثر غلظت اولیه تریکلرواتیلن [۲۰] و تولوئن [۲۳] بر روی میزان تبدیل آنها.



شکل ۴ نتیجههای تجربی و شبیهسازی اثر سرعت ظاهری گاز بر روی میزان تبدیل متیل اتیل کتون [۲۲].

علمی، پژوهشی

در مدل DTP مقدارهای تخلخل در فاز حباب و تعلیق بیشتر از مقدار واقعی تخمین زده می شود. محاسبه نشدن دقیق این پارامترها هیدرودینامیکی توسط مدل DTP به این علت است که مقدار ثابتهای مورد استفاده در مجموعه معادلههای یاد شده در جدول ۱ برای ذرههای گلدارت B بر مبنای سامانه گاز – جامدی متفاوت از سامانههای مورد استفاده در این پژوهش تعیین شده است. در سامانههای مورد استفاده در این پژوهش، سرعت کمینه سیال سازی کمتر از سامانهای است که آزمایشهای مدل DTP روی آن انجام شده است؛ به همین علت طبق معادلههای یاد شده در جدول ۱ مقدارهای تخلخل در فاز تعلیق و حباب بیشتر از مقدارهای واقعی محاسبه می شوند، و در نتیجه میزان درصد تبدیل آلایندهها بیشتر از مقدارهای تجربی پیش بینی می شود.

نتيجهگيري

در این پژوهش، راکتور بستر سیال اکسایش فتوکاتالیستی ترکیبهای آلی فرار از هوا شبیهسازی شد. با مقایسهی نتیجههای به دست آمده از شبیهسازی و دادههای تجربی، دیده شد که مدل DTP از دقت بالایی در شبیهسازی راکتور بستر سیال فتوكاتاليستى برخوردار است. همچنين اثر پارامترهاى عملياتى یعنی غلظت اولیهی آلاینده و سرعت ظاهری گاز بر روی میزان تبدیل آلایندهها از روش شبیهسازی بررسی شد. نتیجههای 🎔 به دست آمده از شبیهسازی نشان دادند که رفتار میزان تبدیل ألايندهها نسبت به تغييرهاي غلظت اوليهي ألاينده و سرعت ظاهری گاز به طور دقیق همانند نتیجههای تجربی است؛ بهطوری که هم نتیجههای به دست آمده از شبیهسازی و هم دادههای تجربی نشان دادند که افزایش غلظت اولیهی الایندهها و افزایش سرعت ظاهري گاز باعث كاهش ميزان آلايندهها مي شود. مي توان انتظار داشت که راکتور بستر سیال بتواند به طور مؤثر برای تبدیل فتوكاتاليستي آلاينده آلي فرار به كار رود؛ با اين وجود براي كارايي بيشتر راكتور پيدا كردن غلظت اوليه مناسب ألاينده و سرعت ظاهری مناسب گاز نیاز است. برای این منظور، میتوان با استفاده از شبیه سازی راکتور بستر سیال فتو کاتالیستی با استفاده از مدل DTP پیش از انجام آزمایش مقدار غلظت اولیه مناسب آلاینده و سرعت ظاهری مناسب گاز را پیش بینی کرد.

فهرست نمادها

 $d_p{}^3\rho_g(\rho_s-\rho_g)g/{\mu_g}^2$ عدد ارشمیدس،

ی، پژوهشی

C _A	غلظت جزء A، mol/L ا
D_{AB}	ضریب نفوذ، m²/s
D_b	قطر متوسط حباب، m
D _i	قطر داخلی راکتور، m
Do	قطر خارجی راکتور، m
d _p	قطر ذره، m
G	شتاب جاذبه، m/s ²
Н	ارتفاع بستر، m
K _{bc}	ضریب انتقال جرم حباب به ابر، 1/s
K _{be}	ضریب انتقال جرم حباب به تعلیق، 1/s
K _{ce}	ضریب انتقال جرم ابر به تعلیق، 1/s
K _{LH}	ثابت جذب، L/mol
k _{deg}	ثابت واکنش، mol/g s
Р	فشار عملیاتی راکتور، Pa
Q	شدت جریان کلی جریان، L/s
R	سرعت واکنش، mol/g s
R _{Ab}	سرعت واکنش در فاز حباب، mol/g s
R _{Ae}	سرعت واکنش در فاز تعلیق، mol/g s
Т	دمای عملیاتی راکتور، K
W	وزن فتوكاتاليست، g
U	سرعت ظاهری گاز، m/s
U_b	سرعت حباب، m/s
U _e	سرعت تعلیق، m/s
U_{mf}	حداقل سرعت سیالیت، m/s
u _{br}	سرعت صعود حباب، m/s
Z	موقعیت بالای توزیع کننده، m

حروف يوناني

Ar

δ	جزء فاز حباب
θ	سطح پوشش
$ ho_g$	دانسیته گاز، kg/m ³
$ ho_s$	دانسیته جامد، kg/m ³
$\mu_{\rm g}$	ویسکوزیته گاز، Pa s
3	ميانگين تخلخل بستر
ε _b	نخلخل فاز حباب
ε _e	نخلخل فاز تعليق

امیر معتمد داشلی برون و همکاران

out	خروجى		زیر نویسها
TCE	ترى كلرواتيلن	b	حباب
		e	تعليق
		in	ورودى
	تاريخ دريافت : ۱۳۹۱/۱۰/۲۴ ؛ تاريخ پذيرش : ۱۳۹۲/۱۱/۲	MEK	متيل اتيل كتون

مراجع

- [1] Alberici R.M., Jardim W.F., Photocatalytic Destruction of VOCs in the Gas-Phase Using Titanium Dioxide, *Applied Catalysis B: Environmental*, **14**, p. 55 (1997).
- [2] Avila P., Bahamonde A., Blanco J., Sanchez B., Cardona A., Romero M., Gas-Phase Photo-Assisted Mineralization of Volatile Organic Compounds by Monolithic Titania Catalysts, *Applied Catalysis B: Environmental*, **17**, p. 75 (1998).
- [3] Beauchet R., Magnoux P., Mijoin J., Catalytic Oxidation of Volatile Organic Compounds (VOCs) Mixture (Isopropanol/o-xylene) on Zeolite Catalysts, *Catalysis Today*, **124**, p. 118 (2007).
- [4] Sano T., Negishi N., Takeuchi K., Matsuzawa S., Degradation of Toluene and Acetaldehyde with Pt-Loaded TiO₂ Catalyst and Parabolic Trough Concentratorr, *Solar Energy*, 77, p. 543 (2004).
- [5] Kim K.J., Kang C.S., You Y.J., Chung M.C., Woo M.W., Jeong W.J. et al., Adsorption-Desorption Characteristics of VOCs Over Impregnated Activated Carbons, *Catalysis today*, 111, p. 223 (2006).
- [6] Samantaray S.K., Parida K., Modified TiO₂/SiO₂ Mixed Oxides: Effect of Manganese Concentration and Activation Temperature Towards Catalytic Combustion of Volatile Oorganic Compounds, *Applied Catalysis B: Environmental*, **57**, p. 83 (2005).
- [7] Bouzaza A., Laplanche A., Photocatalytic Degradation of Toluene in the Gas Phase: Comparative Study of Some TiO₂ Supports, *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry*, **150**, p. 207 (2002).
- [8] Sano T., Negishi N., Kutsuna S., Takeuchi K., Photocatalytic Mineralization of Vinyl Chloride on TiO₂, *Journal of Molecular Catalysis A: Chemical*, 40, p. 168 (2001).
- [9] Motamed Dashliborun A., "Experimental Study and Modeling of Photocatalytic Oxidation of Volatile Organic Compound (VOC) by Titanium Dioxide Nanoparticles in a Fluidized Bed Reactor," M.Sc. Thesis, University of Tehran, Iran (2012).
- [10] Jafari R., Sotudeh-Gharebagh R., Mostoufi N., Modular Simulation of Fluidized Bed Reactors *Chemical Engineering & Technology*, 27, p. 123 (2004).
- [11] Karimi Golpayegani M., "Photocatalysis for Waste Gas Treatment: Kinetics and Fluidized Bed Reactor Modeling," M.Sc. Thesis, University of Calgary, Canada (2008).

علمی، پژوهشی

۶۴

- [12] Jafari R., Sotudeh-Gharebagh R., Mostoufi N., Two-Phase Simulation of Gas-Solid Fluidized Bed Reactors by Tanks-in-Series Model, *Nashrieh Shimi va Mohandesi Shimi Iran*, 23(2), p. 33 (2004). [in Persian].
- [13] Mostoufi N., Cui H., Chaouki J., A Comparison of Two-and Single-Phase Models for Ffluidized-Bed Reactors, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 40, p. 5526 (2001).
- [14] Cui H., Mostoufi N., Chaouki J., Characterization of Dynamic Gas-Solid Distribution in Fluidized Beds, *Chemical Engineering Journal*, **79**, p. 133 (2000).
- [15] Wen C., Yu Y., A Generalized Method for Predicting the Minimum Fluidization Velocity, *AIChE Journal*, **12**, p. 610 (1966).
- [16] Cai P., Schiavetti M., De Michele G., Grazzini G., Miccio M., Quantitative estimation of bubble size in PFBC, *Powder technology*, 80, p. 99 (1994).
- [17] Kunii D., Levenspiel O., "Fluidization Engineering": Butterworth-Heinemann Boston; (1991).
- [18] Fogler H. S., "Elements of Chemical Reaction Engineering", London: Prentice-Hall International; (1999).
- [19] Peral J., Domnech X., Ollis F., Heterogeneous Photocatalysis for Purification, Decontamination and Deodorization of Air, Wiley Online Library, p. 117 (1997).
- [20] Lim T.H., Kim S.D., Trichloroethylene Degradation by Photocatalysis in Annular Flow and Annulus Fluidized Bed Photoreactors, *Chemosphere*, 54, p. 305 (2004).
- [21] Tomašić V., Jović F., Gomzi Z., Photocatalytic Oxidation of Toluene in the Gas Phase: Modelling an Annular Photocatalytic Reactor., *Catalysis Today*, **137**, p. 350 (2008).
- [22] Hajaghazadeh M., Kakooei H., Motamed Dashliborun A., Sotudeh-Gharebagh R., Golbabaie F., Afshar S. et al., Photocatalytic Degradation of Methyl Ethyl Kketone by Nano TiO₂ in a Fluidized Bed Reactor, *Fresenius Environmental Bulletin*, 22 (2012).
- [23] Zhang X., Liao C., Photocatalytic Degradation of Toluene by Nano-TIO₂ in a Fluidized Bed, *Bepress*, p. 73 (2007).
- [24] Prieto O., Fermoso J., Irusta R., Photocatalytic Degradation of Toluene in Air Using a Fluidized Bed Photoreactor, *International Journal of Photoenergy*, **2007**, p. 1 (2007).
- [25] Lim T.H., Kim S.D., Photo-Degradation Characteristics of TCE (Trichloroethylene) in an Annulus Fluidized Bed Photoreactor, *Korean Journal of Chemical Engineering*, 21, p. 905 (2004).
- [26] Kuo H., Wu C., Hsu R., Continuous Reduction of Toluene Vapours from the Contaminated Gas Stream in a Fluidised Bed Photoreactor, *Powder Technology*, **195**, p. 50 (2009).