

# شبیه سازی حذف فتوکاتالیستی ترکیب‌های آلی فرار در راکتور بستر سیال

امیر معتمد داشلی برون، رحمت ستوده قره‌باغ\*<sup>+</sup>

تهران، دانشگاه تهران، پردیس دانشکده‌های فنی، دانشکده مهندسی شیمی

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

**چکیده:** اکسایش فتوکاتالیستی در راکتورهای گوناگون به‌عنوان یک روش پذیرفته شده از نظر اقتصادی و زیست محیطی، برای حذف ترکیب‌های آلی فرار به کار می‌رود، و در میان راکتورهای گوناگون، راکتور بستر سیال به‌عنوان یک راکتور کارآمد برای این منظور استفاده می‌شود. مدل‌سازی و شبیه‌سازی راکتورهای بستر سیال فتوکاتالیستی به منظور افزایش اندازه‌های راکتور از مقیاس آزمایشگاهی به مقیاس صنعتی و بهینه‌سازی و کنترل کارکرد آن ضروری است. برای این منظور در این پژوهش، متیل اتیل کتون (MEK)، تری کلرواتیلن (TCE) و تولوئن به‌عنوان سه مدل آلاینده انتخاب شد و تبدیل فتوکاتالیستی آنها در راکتور بستر سیال شبیه‌سازی شد. به منظور شبیه‌سازی عملکرد راکتور بستر سیال فتوکاتالیستی، زیرمدل‌های هیدرودینامیکی و سینتیکی با همدیگر به‌طور همزمان حل شدند. مدل سینتیکی لانگمویر - هینشلوود برای تبدیل فتوکاتالیستی آلاینده‌ها به کار گرفته شد و ثابت‌های سینتیکی آنها با استفاده از نتیجه‌های آزمایشگاهی تعیین شد. همچنین مدل دینامیک دو فاز به‌عنوان زیرمدل هیدرودینامیکی انتخاب شد و اعتبار این مدل از روش مقایسه نتیجه‌های شبیه‌سازی با نتیجه‌های آزمایشگاهی مورد بررسی قرار گرفت. دیده شد که توافق خوبی بین نتیجه‌های تجربی و نتیجه‌های به دست آمده از این مدل وجود دارد. نتیجه‌های این مدل‌سازی و شبیه‌سازی می‌تواند در پیش‌بینی عملکرد راکتورهای بستر سیال فتوکاتالیستی به کار رود.

**واژه‌های کلیدی:** اکسایش فتوکاتالیستی، راکتور بستر سیال، شبیه‌سازی راکتور، مدل دینامیک دو فاز.

**KEY WORDS:** Photocatalytic oxidation, Fluidized bed reactor, Reactor simulation, Dynamic two-phase model.

## مقدمه

ترکیب‌های آلی فرار دارای یک اتم کربن یا بیشتر هستند که فشار بخار بالایی دارند و به راحتی در اتمسفر منتشر می‌شوند. به دلیل اینکه این ترکیب‌ها به طور مستقیم وارد هوا می‌شوند، به عنوان آلاینده‌های اصلی دسته‌بندی می‌شوند. انتشار ترکیب‌های آلی فرار می‌تواند نقش چشمگیری در تشکیل مه دود شهری بازی کند و باعث تشکیل مواد سمی 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. به دنبال استفاده از جاذب‌های 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 به عنوان یک فرایند با هدر رفت بالای انرژی در غلظت‌های پایین ترکیب‌های آلی فرار می‌باشد. افزون بر این، روش سوختن کاتالیستی می‌تواند تشکیل فرآورده‌های 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 به منظور 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 زیست‌محیطی پذیرفته شده است [۷]. تیتانیوم دی‌اکسید که به طور فزاینده به عنوان فتوکاتالیست این فرایندها استفاده می‌شود یک پودر غیر سمی می‌باشد. افزون بر این واکنش فتوکاتالیستی در دما و فشار محیط بدون هیچ افزودنی<sup>(۱)</sup> 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]. در مطالعه اکسایش فتوکاتالیستی ترکیب‌های آلی فرار

از راکتورهای گوناگون مانند راکتورهای صفحه تخت، مونولیت لانه زنبوری، حلقوی و بستر سیال استفاده شده است. راکتورهای گفته شده به غیر 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. در حالی که در راکتور بستر سیال، ذراتی که بر روی آنها کاتالیست نشاندگی شده است، در درون راکتور به راحتی سیال شده و حرکت می‌کنند. از آنجایی که در راکتورهای بستر سیال شدت جریان‌های به نسبت بالایی از جریان گاز وارد راکتور می‌شود و تماس مؤثری بین فوتون‌های نور فرابنفش، کاتالیست جامد و واکنش دهنده‌ها فراهم می‌شود، در سال‌های اخیر مورد توجه پژوهشگران قرار گرفته‌اند [۷، ۶].

مدل‌سازی و شبیه‌سازی راکتورهای بستر سیال فتوکاتالیستی 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 مدل‌سازی در نظر گرفته شود. این زیرمدل‌ها شامل هیدرودینامیک و سینتیک می‌باشد. زیر مدل هیدرودینامیکی ویژگی‌های فیزیکی سامانه را توصیف می‌کند؛ یعنی تشکیل فاز حباب<sup>(۲)</sup> و فاز تعلیق<sup>(۳)</sup>، ویژگی‌های این فازها و برهم‌کنش بین آنها؛ و زیرمدل سینتیکی پدیده‌های شیمیایی را توصیف می‌نماید که بیانگر واکنش‌های صورت گرفته در بستر می‌باشند. هیدرودینامیک بسترهای سیال در میان سایر تماس‌دهنده‌های گاز - جامد مانند بسترهای ثابت و متحرک پیچیدگی بیشتری دارد [۱۱].

بیشتر مدل‌های 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 شبیه‌سازی 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

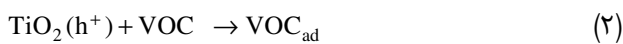
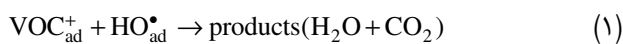
(۱) Additive

(۲) Bubble phase

(۳) Emulsion phase

### زیر مدل سینتیکی

مدل سینتیکی لانگمویر - هینشلوود به طور گسترده‌ای برای توصیف واکنش‌های کاتالیستی استفاده می‌شود [۱۸]. همچنین این مدل به طور گسترده در مدل‌سازی واکنش‌های فتوکاتالیستی استفاده می‌شود [۱، ۱۹]. مدل سینتیکی لانگمویر - هینشلوود می‌تواند به طور موفقیت آمیزی سینتیک واکنش بین دو جزء جذب شده یعنی رادیکال هیدروکسیل و آلایندگی را توصیف کند (معادله ۱). آلایندگی جذب شده در معادله (۱) توسط واکنش‌های معادله‌های (۲) و (۳) تولید می‌شود.



اکسایش فتوکاتالیستی ممکن است نتیجه‌ی یک مکانیسم پیچیده و شامل تعداد زیادی واکنش باشد [۲۰]. اما با توجه به اینکه اندازه‌گیری مقدار واکنش در منابع تنها براساس تبدیل کلی آلایندگی می‌باشد، ساده سازی‌هایی در تحلیل سینتیک صورت گرفته است. در غلظت ثابت اکسیژن و بخار آب (به دلیل اینکه به مقدار زیادی وجود دارند)، فرض می‌شود که فراورده‌ها و مواد واسطه واکنش به طور ضعیف یا غیر رقابتی بر روی سطح کاتالیست جذب می‌شوند [۲۱]. بنابراین سرعت حذف آلایندگی با سطح پوشش<sup>(۲)</sup> آلایندگی ( $\theta_{\text{VOC}}$ ) بر روی کاتالیست تغییر می‌کند (معادله ۴). ثابت‌های مدل لانگمویر - هینشلوود یعنی ثابت سرعت واکنش  $k_{\text{deg}}$  و ثابت جذب  $K_{\text{LH}}$  با استفاده از یک برنامه بهینه ساز برای کمینه کردن مقدار  $\sigma^2$  که با معادله (۵) تعریف می‌شود، به دست می‌آید [۱۸].

$$R_{\text{VOC}} = k_{\text{deg}} \theta_{\text{VOC}} = k_{\text{deg}} \frac{K_{\text{LH}} C_{\text{VOC}}}{1 + K_{\text{LH}} C_{\text{VOC}}} \quad (4)$$

$$\sigma^2 = \sum_{i=1}^N \frac{(R_{\text{VOCexp},i} - R_{\text{VOCc},i})^2}{N - K} \quad (5)$$

که  $N$  بیان کننده‌ی تعداد کل آزمایش‌ها،  $K$  تعداد پارامترهایی که باید تعیین شود (در این مطالعه  $K$  برابر با ۲ است)،  $R_{\text{VOCc},i}$  سرعت واکنش محاسبه شده برای آزمایش  $i$  و  $R_{\text{VOCexp},i}$  سرعت واکنش تجربی به دست آمده برای آزمایش  $i$  می‌باشد که به صورت معادله (۶) بیان می‌شود.

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

### بخش نظری

#### مدل سازی و شبیه‌سازی

بر اساس مطالب عنوان شده در بخش قبل، به منظور مدل‌سازی یک راکتور بستر سیال لازم است که زیرمدل‌های هیدرودینامیکی و سینتیکی که به ترتیب توصیف کننده‌ی پدیده‌ی فیزیکی و شیمیایی است، در نظر گرفته شوند. در میان مدل‌های هیدرودینامیکی موجود در منابع علمی، مدل دینامیک دو فاز (DTP)<sup>(۱)</sup>، به دلیل نزدیکی به پدیده‌های واقعی در راکتورهای بستر سیال، در این پژوهش مورد استفاده قرار گرفت [۱۳]. همچنین به منظور توصیف پدیده‌ی شیمیایی از مدل سینتیکی لانگمویر - هینشلوود که به طور گسترده برای توصیف واکنش‌های کاتالیستی به کار می‌رود، استفاده شد. به منظور شبیه‌سازی راکتور بستر سیال لازم است که زیر مدل هیدرودینامیکی با زیر مدل سینتیکی به طور همزمان حل شوند.

#### زیر مدل هیدرودینامیکی

در مدل DTP همانند سایر مدل‌های دو فاز، بستر سیال شده به دو فاز حباب و تعلیق تقسیم می‌شود. اما برخلاف مدل دو فاز ساده، فرضیه‌های به کار رفته در آن واقعی‌تر 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 می‌شود. در این مدل با انجام آزمایش در سرعت‌های گوناگون با استفاده از دو نمونه ذره‌های جامد به عنوان نماینده گروه‌های گلدات  $A$  و  $B$  و محاسبه احتمال حضور ذره‌های جامد در هر یک از فازهای حباب و تعلیق روابطی برای محاسبه پارامترهای هیدرودینامیکی ارائه شده است [۱۳، ۱۴]. با توجه به اینکه کاتالیست مورد استفاده در این مطالعه در گروه‌بندی گلدات  $B$  قرار می‌گیرد، از رابطه‌های ارائه شده برای این گروه‌بندی برای ارزیابی پارامترهای هیدرودینامیکی استفاده شده است. معادله‌های 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.

(۱) Dynamic Two Phase (DTP)

(۲) Surface Coverage

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 جزء A در فاز امولسیون
$\bar{C}_A = \frac{U_{mf}}{U_0}(1 - \delta)C_{Ae} + \frac{U_b}{U_0}\delta C_{Ab}$	غلظت متوسط جزء A
$\varepsilon_b = 1 - 0.146 \exp\left[\frac{-(U_0 - U_{mf})}{4.439}\right]$	تخلخل فاز حباب [۱۴]
$\varepsilon_e = \varepsilon_{mf} + 0.2 - 0.059 \exp\left[\frac{-(U_0 - U_{mf})}{0.429}\right]$	تخلخل فاز امولسیون [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 امولسیون

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 سیالیت [۱۵]
$D_b = 0.21H^{0.8}(U_0 - U_{mf})^{0.42} \exp[-0.25(U_0 - U_{mf})^2 - 0.1(U_0 - U_{mf})]$	قطر حباب [۱۶]
$U_b = U_0 - U_e + u_{br} \quad u_{br} = 0.711\sqrt{gD_b}$	سرعت حباب [۱۷]
$\frac{1}{K_{be}} = \frac{1}{K_{bc}} + \frac{1}{K_{ce}} \quad K_{bc} = 4.5\left(\frac{U_e}{D_b}\right) + 5.85\left(\frac{D_{AB}^{1/2}g^{1/4}}{D_b^{5/4}}\right)$	ضرایب انتقال جرم بین فازها [۱۷]
$K_{ce} = 6.77\left(\frac{D_{AB}\varepsilon_e u_{br}}{D_b^3}\right)^{1/2}$	

جدول ۳- ویژگی‌های راکتور و شرایط عملیاتی.

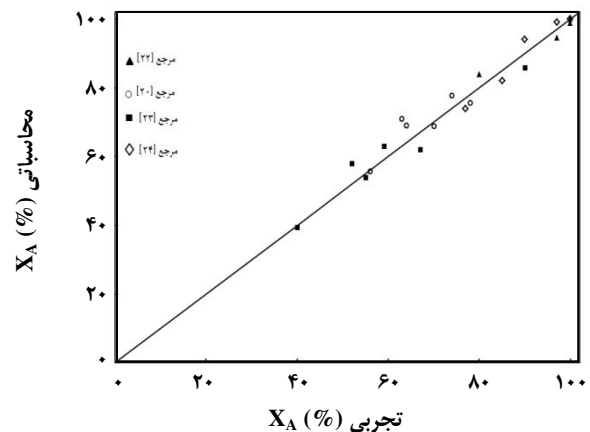
ویژگی‌ها	واحد	مرجع [۲۲]	مرجع [۲۰]	مرجع [۲۳]	مرجع [۲۴]
آلاینده	-	MEK	TCE	Toluene	Toluene
H	mm	۱۰۰	۲۲۰	۱۳۵	۳۰۲
$D_i$	mm	۲۶	۳۹	۳۹	-
$D_o$	mm	۴۰	۵۵	۴۹	۴۰
$d_p$	$\mu\text{m}$	۷۴-۲۵۰	۲۵۰ - ۵۹۰	۱۲۵-۴۲۵	۲۵۰ - ۵۰۰
$\rho_s$	$\text{kg/m}^3$	۳۲۴۶	۲۱۹۰	۱۴۰۰	۱۳۹۰
C	ppm	۱۰۰ - ۸۰۰	۱۰۰ - ۵۰۰	۵-۳۵	۰٫۹-۲۰۰
$U_{mf}$	cm/s	۱٫۱۷	۱٫۷	۱٫۰۶ - ۱٫۲۳	۲٫۰۱۷
U	cm/s	$U_{mf}-4U_{mf}$	$U_{mf}-6U_{mf}$	۱ - ۶	۶٫۶۳
$k_{deg}$	$\mu\text{mol/g s}$	۰٫۷۵	۱۳٫۲۳	۰٫۱۸۳	۰٫۶۷ ppm/s
$K_{LH}$	Lit/ $\mu\text{mol}$	۰٫۰۰۴۴	۰٫۱۵۸۳	۴٫۳۶۷	-

### نتیجه‌ها 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 لانگمویر - 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 آلاینده‌ی آلی یعنی متیل اتیل کتون، تری کلرواتیلن و تولوئن در شکل ۱ نشان داده می‌شود. در این شکل دیده می‌شود که مدل DTP پیش بینی قابل قبولی از درصد تبدیل آلاینده‌ها ارایه می‌دهد. چون همان‌گونه که در پیش‌تر اشاره شد، این مدل فرضیه‌های واقعی تری را در نظر می‌گیرد. هر چند تفاوتی میان نتیجه‌های به دست آمده از مدل سازی و نتیجه‌های تجربی دیده می‌شود ولی بیشترین خطای دیده شده ۱۲ درصد است که قابل قبول می‌باشد.

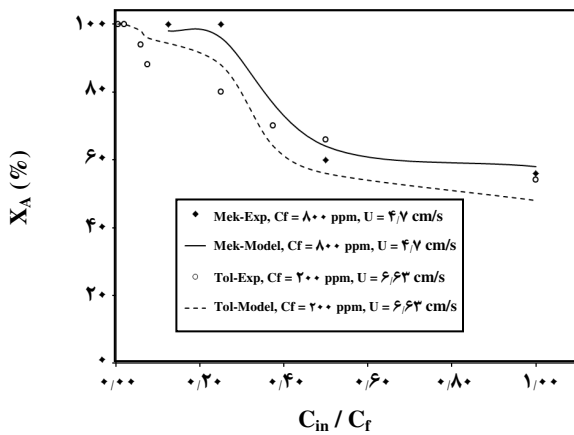
اثر غلظت اولیه آلاینده بر روی میزان تبدیل آن در یک سرعت ظاهری مشخص در شکل‌های ۲ و ۳ نمایش داده شده است. با توجه به شکل ۲ دیده می‌شود که با افزایش غلظت متیل اتیل کتون از ۲۰۰ ppm به ۸۰۰ و همچنین با افزایش



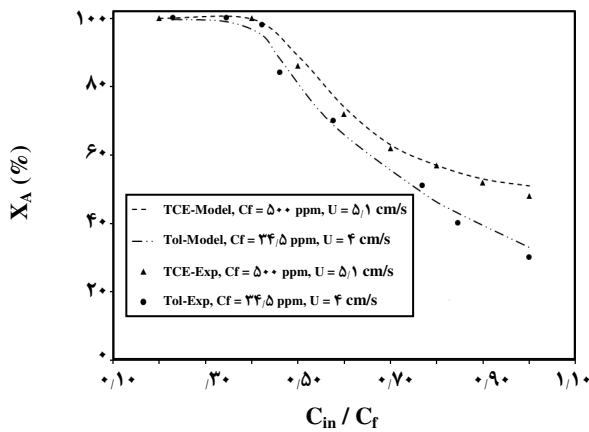
شکل ۱- مقایسه نتیجه‌های به دست آمده از شبیه‌سازی با نتیجه‌های تجربی به دست آمده از مراجع.

که در آن،  $Q$  بیان کننده‌ی شدت جریان جریان در ورودی راکتور،  $C_{VOC,in}$  و  $C_{VOC,out}$  به ترتیب غلظت آلاینده در ورودی و خروجی راکتور و  $W$  وزن فتوکاتالیست در داخل راکتور می‌باشد. که به صورت معادله (۶) بیان می‌شود.

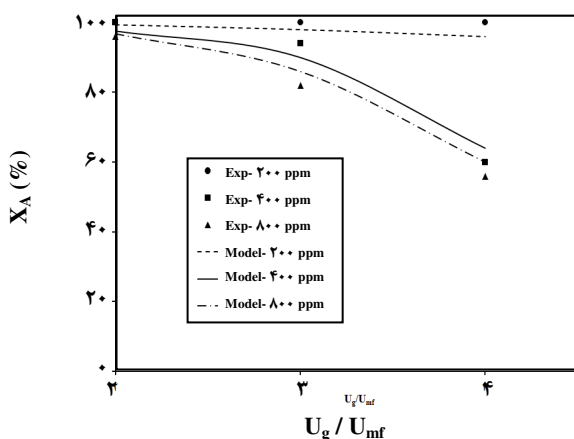
$$R_{VOCexp} = \frac{Q(C_{VOC,in} - C_{VOC,out})}{W} \quad (6)$$



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



شکل ۳- نتیجه‌های تجربی و شبیه‌سازی اثر غلظت اولیه تری کلرواتیلن [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].

غلظت تولوئن از ۴ ppm 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 ۱۰۰ ppm به ۲۰۰ کاهش نمی‌یابد. چون سیال سازی کاتالیست باعث افزایش میزان انتقال نور فرابنفش به سطح کاتالیست و همچنین بهبود تماس بین کاتالیست و آلاینده می‌شود. اما افزایش بیشتر غلظت تری کلرواتیلن باعث کاهش میزان تخریب آن می‌شود. که این می‌تواند به دلیل محدود بودن تعداد سایت‌های فعال بر روی فتوکاتالیست تیتانیوم دی اکسید باشد. همچنین نتیجه‌های همانند دیگری توسط زانگ و لیاو [۲۳] 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. همان‌گونه که در شکل‌ها دیده می‌شود، نتیجه‌های به دست آمده از این مدل در توافق خوبی با نتیجه‌های تجربی می‌باشد. 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  $U_{mf}$  به چهار برابر  $U_{mf}$  میزان تبدیل متیل اتیل کتون کاهش چشمگیری می‌یابد. حاج آقازاده و همکاران [۲۲] گزارش کردند که در سرعت‌های بالا، حباب‌ها به یکدیگر می‌پیوندند 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 همکاران [۲۶] 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 به طور 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

$C_A$	غلظت جزء A، mol/L
$D_{AB}$	ضریب نفوذ، $m^2/s$
$D_b$	قطر متوسط حباب، m
$D_i$	قطر داخلی راکتور، m
$D_o$	قطر خارجی راکتور، m
$d_p$	قطر ذره، m
G	شتاب جاذبه، $m/s^2$
H	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
P	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
T	دمای عملیاتی راکتور، K
W	وزن فتوکاتالیست، 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 یونانی

$\delta$	جزء فاز حباب
$\theta$	سطح پوشش
$\rho_g$	دانسیته گاز، $kg/m^3$
$\rho_s$	دانسیته جامد، $kg/m^3$
$\mu_g$	ویسکوزیته گاز، Pa s
$\varepsilon$	میانگین تخلخل بستر
$\varepsilon_b$	تخلخل فاز حباب
$\varepsilon_e$	تخلخل فاز تعلیق

در مدل DTP مقدارهای تخلخل در فاز حباب و تعلیق بیشتر از مقدار واقعی تخمین زده می‌شود. 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 سیال‌سازی 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 می‌شوند، و در نتیجه میزان درصد تبدیل آلاینده‌ها بیشتر از مقدارهای تجربی پیش بینی می‌شود.

### نتیجه‌گیری

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 فتوکاتالیستی برخوردار است. همچنین اثر پارامترهای عملیاتی 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 آلاینده‌ها نسبت به تغییرهای غلظت اولیه‌ی آلاینده و سرعت ظاهری گاز به طور دقیق همانند نتیجه‌های تجربی است؛ به طوری که هم نتیجه‌های به دست آمده از شبیه‌سازی و هم داده‌های تجربی نشان دادند که افزایش غلظت اولیه‌ی آلاینده‌ها و افزایش سرعت ظاهری گاز باعث کاهش میزان آلاینده‌ها می‌شود. می‌توان انتظار داشت که راکتور بستر سیال بتواند به طور مؤثر برای تبدیل فتوکاتالیستی آلاینده آلی فرار به کار رود؛ با این وجود برای کارایی بیشتر راکتور پیدا کردن غلظت اولیه مناسب آلاینده و سرعت ظاهری مناسب گاز نیاز است. برای این منظور، می‌توان با استفاده از شبیه‌سازی راکتور بستر سیال فتوکاتالیستی با استفاده از مدل DTP پیش از انجام آزمایش مقدار غلظت اولیه مناسب آلاینده و سرعت ظاهری مناسب گاز را پیش‌بینی کرد.

### فهرست نمادها

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

out	خروجی		زیر نویسها
TCE	تری کلرواتیلن	b	حباب
		e	تعلیق
		in	ورودی
		MEK	متیل اتیل کتون

تاریخ دریافت: ۱۳۹۱/۱۰/۲۴ ؛ تاریخ پذیرش: ۱۳۹۲/۱۱/۲

## 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 TiO<sub>2</sub> Catalyst and Parabolic Trough Concentrator](#), *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 TiO<sub>2</sub>/SiO<sub>2</sub> Mixed Oxides: Effect of Manganese Concentration and Activation Temperature Towards Catalytic Combustion of Volatile Organic 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 TiO<sub>2</sub> 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 TiO<sub>2</sub>](#), *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).



- [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 Fluidized-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 TiO<sub>2</sub> in a Fluidized Bed Reactor](#), *Fresenius Environmental Bulletin*, **22** (2012).
- [23] Zhang X., Liao C., [Photocatalytic Degradation of Toluene by Nano-TiO<sub>2</sub> in a Fluidized Bed](#), *Bepress*, p. 73 (2007).
- [24] Prieto O., Feroso 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).