

مدل سازی رشد میکروبی باکتری *رالستونیا یوتروفا* در تخریب زیستی فنل در راکتور هواراند با لوله مشبک مرکزی

الهام جلیل نژاد*، سیده مژگان حسینی، مهرا نعلبند

گروه مهندسی شیمی، دانشگاه صنعتی ارومیه، ارومیه، ایران

چکیده

بر اساس مشاهدات تجربی، راکتور هواراند با لوله مشبک داخلی به دلیل مهیا کردن شرایط مناسب جهت رشد میکروبی، بازدهی فرآیند زیستی را به میزان قابل توجهی افزایش داده و یکی از بیوراکتورهای پرکاربرد در تصفیه پساب به روش بیولوژیکی است. از این رو مدل سازی و شبیه سازی فرآیند تخریب زیستی در این راکتور برای مقاصد طراحی و بهینه سازی عملکرد راکتور ضروری است. در این پژوهش فرآیند تخریب زیستی فنل توسط باکتری *رالستونیا یوتروفا* و رشد توده زیستی در راکتور هواراند با لوله مشبک داخلی آزمایشگاهی به روش دینامیک سیالات محاسباتی (CFD) شبیه سازی شد. برای روابط جریان حبابی از مدل آشفته $k-\epsilon$ ؛ متداولترین مدل به کار رفته برای تشریح جریان های آشفته استفاده شد. خطوط جریان در نواحی بالارونده و پایین رونده در داخل راکتور هواراند با لوله مشبک داخلی شبیه سازی شده و تغییرات غلظت فنل و پراکندگی غلظت توده زیستی در شرایط ورودی مختلف با نمایش پروفیل های غلظت بدست آمد. تطابق خوب نتایج حاصل با داده های تجربی نشان از اعتبار مدل و صحت شبیه سازی است.

مشخصات مقاله

تاریخچه مقاله:
دریافت: ۶ مرداد ۱۳۹۷
دریافت پس از اصلاح: ۵ بهمن ۱۳۹۷
پذیرش نهایی: ۱۴ اسفند ۱۳۹۷

کلمات کلیدی:

شبیه سازی CFD،
رشد توده زیستی،
راکتور هواراند،
تخریب زیستی فنل،
مدل هلدین.

۱- مقدمه

آلودگی محیط زیست به دلیل رهاسازی ترکیبات خطرناک و مقاوم یکی از دلایل اصلی ایجاد اختلال در محیط زیست می باشد. وجود آلاینده ها حتی به مقدار بسیار کم تاثیرات کوتاه و بلند مدتی بر روی گیاهان، حیوانات و به ویژه سلامتی انسان دارد [۱]. حضور فنل در پساب های صنعتی به عنوان یک ترکیب آروماتیک ساده که در تولید مواد شیمیایی مختلف استفاده می شود، متداول است. با این وجود تنوع بالای اکوسیستم های حاوی آلاینده آلی فنلی از لحاظ زیست محیطی یک چالش محسوب می شود. فرآیندهای زیستی برای تصفیه پساب به علت دوست دار محیط زیست بودن، به صرفه بودن از نظر اقتصادی و میزان قابل توجه کاهش بار آلودگی، کاربردهای گسترده ای پیدا کرده اند [۲]. نوعی هوازی فرآیندهای زیستی با استفاده از باکتری های هوازی که به مقدار قابل توجهی توانایی رشد در محیط های حاوی مواد سمی با بار آلودگی زیاد نظیر مواد فنلی را دارند، در سال های اخیر مورد توجه قرار گرفته اند [۳-۶]. عوامل محیطی مختلف و ارتباط بین آنها بر روی سینتیک تخریب زیستی یک سوپسترای خاص با استفاده از سلول های میکروبی تاثیر می گذارد. به منظور توصیف فرآیند تخریب زیستی و رفتار سلول مدل های ریاضی مختلف مانند معادله هلدین برای اندازه گیری ارتباط بین نرخ ویژه رشد، نرخ ویژه تخریب و تغییرات غلظت به طور گسترده مورد استفاده قرار گرفته اند [۷، ۸]. تخریب هوازی فنل به صورت عمده بر مبنای مسیر شکست ارتو و متا می باشد. نکته جالب توجه در بسیاری از تحقیقات، یافتن ارتباط محتمل بین رشد سلولی و نوع مکانیسم تخریبی آن در حذف ماده آلاینده می باشد که با در نظر گرفتن این مطلب توجه ویژه ای به باکتری رالستونیا یوتروفا بعنوان یک تخریب کننده فعال فنل شده است. هنگامی که بازدهی رشد این باکتری بر روی فنل افزایش می یابد، مسیر کاتابولیکی اورتو، به عنوان مسیر با انرژی بالاتر نسبت به مسیر کاتابولیکی متا، نقش اساسی تر در تخریب فنل داشته و مسیر اصلی تخریب فنل در نظر گرفته می شود [۹].

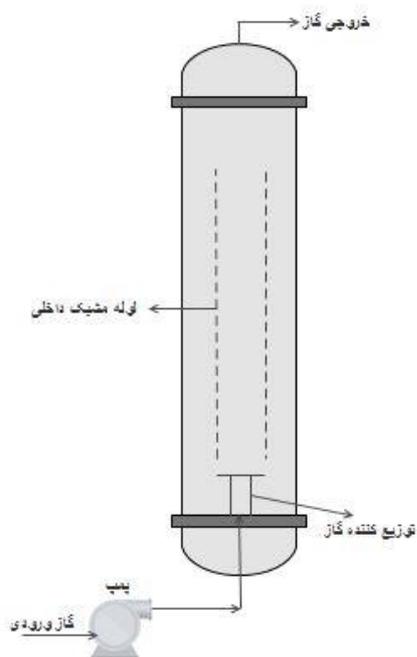
انتخاب بیوراکتور مناسب یک مرحله کلیدی جهت دستیابی به فرآیند تخریب زیستی موفق می باشد. بیوراکتور از لحاظ مهیا کردن محیط کشت مناسب و انتقال جرم (مواد مغذی و اکسیژن) کافی به میکروارگانیسم ها نقش اساسی را در فرآیندهای زیستی ایفا می کند. در میان راکتورهای

استفاده شده در پژوهش های مختلف برای تیمار پساب، بیوراکتور هواراند به دلیل دارا بودن طراحی ساده، مصرف انرژی کم، مقدار کم تنش برشی، مهیا کردن محیط کشت مناسب و اختلاط کامل بسیار مورد توجه است. راکتور هواراند معمولی با حضور یک لوله داخلی مرکزی به دو ناحیه بالارونده و پایین رونده تقسیم شده که اختلاف دانسیته سیال بین این دو ناحیه به عنوان نیروی محرکه موجب به گردش درآمدن مایع در این نواحی می شود. بهبود عملکرد راکتور هواراند با بکارگیری یک لوله مشبک داخلی به جای لوله داخلی معمولی بدست آمده است. خواص هیدرودینامیکی این راکتور اصلاح شده در متون مختلفی مطالعه شده است [۱۰، ۱۱]. در مطالعه جامع انجام شده توسط وو و همکاران، انتقال جرم، اختلاط مایع و نگهداشت گاز در راکتور هواراند با لوله مشبک داخلی ارزیابی شده و بهبود پارامترهای هیدرودینامیکی در مقایسه با راکتور هواراند معمولی و ستون حبابی نشان داده شده است. مطالعات کمی بر روی راکتور هواراند با لوله مشبک داخلی انجام شده که محدود به تحقیقات آزمایشگاهی می باشند [۱۲]. در تحقیقی که توسط گومز دژسوس و همکاران انجام شده، از راکتور هواراند با لوله مشبک داخلی جهت زدایش ۲-۴-۶ تری کلروفنل با مخلوط میکروبی استفاده کرده اند و نتایج بسیار رضایت بخشی از لحاظ پارامترهای انتقال جرمی و بازدهی بالای حذف آلاینده گزارش شده است [۱۳]. همچنین تحقیق انجام شده توسط جلیل نژاد و وهاب زاده مربوط به مطالعه عملکرد سلول های رالستونیا یوتروفا در تخریب زیستی نفتالن در بیوراکتور هواراند با لوله مشبک داخلی بوده که در راکتور هواراند با لوله مشبک داخلی به علت هوادهی و اختلاط بهتر سیستم، تخریب کامل آلاینده نفتالن در غلظت های بالا انجام شده است [۱۴].

امروزه دینامیک سیالات محاسباتی (CFD^۱) به عنوان ابزاری قدرتمند و مقرون به صرفه برای شبیه سازی رفتار جریان و فهم پیچیدگی های هیدرودینامیکی سیستم های چندفازی در ستون های حبابی، بیوراکتورهای غشایی و راکتورهای هواراند جهت پیش بینی جریان سیال، انتقال حرارت، انتقال جرم، واکنش و سایر پدیده های مرتبط بکار می رود [۱۵-۱۷]. در سال های اخیر مطالعات CFD گسترده ای بر روی راکتورهای هواراند به منظور شبیه سازی سیستم های دوفازی گاز-مایع انجام شده است [۱۶، ۱۸، ۱۹]. استفاده از

¹computational fluid dynamics

رفته و آزمایش‌ها با وارد کردن شش غلظت اولیه فنل در بازه 25mg/L تا 600 به راکتور صورت گرفته‌است.



شکل ۱- شماتیک آزمایشگاهی بیوراکتور.

دما در طول فرآیند ثابت و برابر 30°C می‌باشد. هوادهی از طریق یک اسپارجر شیشه‌ای در پایین قسمت بالارونده با سرعت $2/82\text{cm/s}$ به داخل راکتور انجام گرفته‌است. به منظور انجام آزمایش‌ها تخریب‌زیستی فنل به عنوان تنها سوبسترای مورد استفاده برای رشد *Ralstonia eutropha* بکار رفته و آزمایش‌ها با وارد کردن شش غلظت اولیه فنل در بازه 25mg/L تا 600 به راکتور صورت گرفته‌است.

با توجه به شرایط ذکر شده در مقاله آزمایشگاهی شرایط عملیاتی بیوراکتور به شرح زیر بوده است: pH محیط کشت $6/8-7$ ، میزان تلقیح اولیه باکتری به میزان 10% حجمی ($OD=0/1$)، مقدار نهایی توده سلولی حدود 19mg/L و دمای بهینه رشد باکتری 30°C می‌باشد.

۲-۲- معادلات حاکم

مدل‌سازی این مسئله در دو مرحله انجام می‌شود؛ در مرحله اول، جریان سیال توسط معادله دیفرانسیل اپراتوری بر حسب میدان سرعت و فشار بیان شده و در شرایط مرزی مربوطه حل می‌شود. هدف از این مرحله تعیین میدان سرعت است که برای تعیین آن حل معادله دیفرانسیل انتقال جرم مورد نیاز است. در مرحله دوم، معادله انتقال جرم توام با واکنش شیمیایی تعریف شده و با جایگذاری میدان سرعت

CFD برای شبیه‌سازی فرآیندهای زیستی در بیوراکتور بر پایه حل عددی معادلات مربوط به هیدرودینامیک و ادغام آن با معادلات انتقال واکنشی و در نهایت به تصویر کشیدن توزیع غلظت گونه‌های درگیر در واکنش، می‌تواند برای درک بهتر پدیده‌های انتقال در داخل بیوراکتور، پیشرفت در طراحی و بهبود عملکرد آن مفید باشد. مزایای اصلی استفاده از دینامیک سیالات محاسباتی برای شبیه‌سازی سامانه‌های تصفیه پساب به این شرح است: تصویر کاملی از کل میدان جریان و فضای در دسترس سیال ارائه می‌دهد، که انجام این کار به روش آزمایشگاهی بسیار مشکل است؛ می‌تواند برای بررسی اثر شرایط مختلف بر فرآیند استفاده شود و تغییرات غلظت آلاینده را در طول مسیر جریان در نظر می‌گیرد.

با توجه به کمبود پژوهش‌های پیشین در زمینه شبیه‌سازی رشد میکروبی در فرآیندهای تخریب‌زیستی، در این تحقیق یک بیوراکتور هواراند با لوله مشبک داخلی آزمایشگاهی به منظور بررسی عملکرد راکتور در تخریب‌زیستی فنل و رشد توده‌زیستی و همچنین تاثیر غلظت اولیه بر روی میزان رشد توده‌زیستی به روش دینامیک سیالات محاسباتی شبیه‌سازی شده و نتایج حاصل از شبیه‌سازی با داده‌های تجربی موجود مقایسه و اعتبارسنجی شده‌است.

۲- تشریح روش انجام کار

۲-۱- تعریف مسئله

در این پژوهش بیوراکتور هواراند با لوله مشبک داخلی مورد مطالعه توسط رنجبر و همکاران با استفاده از نرم‌افزار COMSOL Multiphysics V5.2 به روش المان محدود شبیه‌سازی شده و نتایج حاصل با نتایج تجربی مقایسه و اعتبارسنجی شده‌است [۲۰]. شماتیک بیوراکتور مذکور در شکل ۱ نمایش داده شده‌است که از یک ستون استوانه‌ای شیشه‌ای با ارتفاع 42cm ، قطر داخلی 5cm و حجم کاری 540mL که لوله مشبک داخلی در مرکز آن و 10cm بالاتر از قسمت پایین راکتور قرار گرفته‌بود، تشکیل شده‌است. این لوله داخلی از جنس فولاد ضدزنگ با مش 12 و ارتفاع 25cm و قطر داخلی $1/5\text{cm}$ است.

دما در طول فرآیند ثابت و برابر 30°C می‌باشد. هوادهی از طریق یک اسپارجر شیشه‌ای در پایین قسمت بالارونده با سرعت $2/82\text{cm/s}$ به داخل راکتور انجام گرفته‌است. به منظور انجام آزمایش‌ها تخریب‌زیستی فنل به عنوان تنها سوبسترای مورد استفاده برای رشد *Ralstonia eutropha* بکار

کره‌های با قطر ثابت (۵ میلی‌متر) در نظر گرفته شده و از برهم‌کنش‌های بین حباب‌ها صرفه‌نظر شده است.

سرعت گاز معادل مجموع سرعت‌های نشان داده شده در معادله ۴ می‌باشد:

$$u_g = u_l + u_{slip} + u_{drift} \quad (4)$$

که u_{slip} سرعت نسبی بین فازها و u_{drift} سرعت راندگی است. دانسیته گاز از قانون گاز ایده‌آل طبق رابطه زیر محاسبه می‌شود:

$$\rho = \frac{(p+p_{ref})M}{RT} \quad (5)$$

که M وزن مولکولی گاز، R ثابت گاز ایده‌آل، T دما و P_{ref} فشار مرجع که یک متغیر عددی با مقدار پیش‌فرض 1 atm می‌باشد [۲۱].

کسر حجمی مایع از رابطه زیر بدست می‌آید:

$$\varphi_l = 1 - \varphi_g \quad (6)$$

می‌توان از معادله مومنتوم برای فاز گازی و با خلاصه کردن آن با ایجاد تعادل بین نیروی درآگ (F_D) و گرادیان فشار، مدلی به منظور محاسبه سرعت لغزش بصورت زیر بدست آورد [۲۲، ۲۳]:

$$\varphi_g \nabla p = F_D \quad (7)$$

در این معادله F_D برابر است با:

$$F_D = -\varphi_d C_d \frac{3}{4} \frac{\rho_l}{d_b} |u_{slip}| u_{slip} \quad (8)$$

که d_b بیانگر قطر حباب و C_d نشان‌دهنده ضریب درآگ می‌باشد. با توجه به اینکه در سیستم دوفازی بدون در نظر گرفتن نیروی لیفت، حباب‌ها در فاز مایع بدون حرکت مانده و بدون در نظر گرفتن نیروی درآگ حباب‌ها شتاب بی-نهایت می‌گیرند در نتیجه از مدل ارائه شده توسط سوکولچین^۲ به منظور محاسبه نیروهای درآگ و لیفت استفاده شده است. مبنای انتخاب تمامی روابط بکار رفته معادلات حاکم بر جریان آشفته حبابی دوفازی می‌باشد که در تحقیقات مشابه نیز بکار رفته‌اند [۲۱]. مطابق مدل بیان شده توسط سوکولچین و همکاران برای حباب‌های با قطر بزرگتر از ۲ میلی‌متر ضریب درآگ برابر است با:

(نتایج مرحله قبل) حل می‌شود. هدف اصلی در این پژوهش، تعیین توزیع غلظت توده زیستی درون بیوراکتور است. مدل اویلر-اویلر به طور کلی، مدل ماکروسکوپی برای جریان سیال دوفازی است که در آن معادله موازنه مومنتوم و معادله پیوستگی، دینامیک هر یک از فازها را بیان می‌کنند. مدل جریان حبابی ساده‌سازی مدل دوسیالی با تکیه بر فرضیات زیر می‌باشد:

- ◀ دانسیته گاز در مقایسه با دانسیته مایع ناچیز است.
 - ◀ حرکت حباب‌های گازی نسبت به مایع توسط ویسکوزیته درآگ و نیروهای فشاری تعیین می‌شود.
 - ◀ هر دو فاز تحت میدان فشاری یکسان می‌باشند.
- بر اساس این فرضیات، می‌توان با ترکیب معادلات مومنتوم و پیوستگی معادله انتقال فاز گازی را به منظور محاسبه کسر حجمی حباب‌ها بدست آورد.
- معادله مومنتوم:

$$\varphi_l \rho_l \frac{\partial u_l}{\partial t} + \varphi_l \rho_l u_l \cdot \nabla u_l = -\nabla p \nabla \cdot \left[\varphi_l \left(\frac{\mu_l}{\mu_T} \right) (\nabla u_l + \nabla u_l^T - \frac{2}{3} (\nabla u_l) I) \right] + \varphi_l \rho_l g + F \quad (1)$$

در معادله ۱ متغیرهای u_l سرعت، ρ دانسیته، φ کسر حجمی فاز، P فشار، g شتاب گرانشی، F نیروی حجمی اضافی، μ_l ویسکوزیته دینامیکی مایع و μ_T ویسکوزیته آشفته را نشان می‌دهند. همچنین زیرنویس‌های l و g به ترتیب بیانگر فاز مایع و فاز گاز می‌باشند [۱۸].

معادله پیوستگی:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_l \varphi_l + \rho_g \varphi_g) + \nabla \cdot (\rho_l \varphi_l u_l + \rho_g \varphi_g u_g) = 0 \quad (2)$$

معادله انتقال مومنتوم فاز گاز بصورت زیر می‌باشد:

$$\frac{\partial \rho_g \varphi_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_g \varphi_g u_g) = -m_{gl} \quad (3)$$

که m_{gl} میزان انتقال جرم از گاز به مایع است. برای محاسبه میزان انتقال جرم از فاز گاز به مایع نیازمند اطلاعات مربوط به حبابهای هوای وارد شده به فاز مایع مورد نیاز می‌باشد که به منظور ساده‌سازی، تمامی حبابهای ورودی بصورت

²Sokolichin

$$C_d = \frac{0.622}{\frac{1}{E\ddot{\sigma}} + 0.235} \quad (9)$$

ترم S_k بعنوان پارامتر تلاطم ناشی از حرکت حباب‌ها عبارتست از:

$$S_k = -C_k \varphi_g \nabla p \cdot u_{slip} \quad (15)$$

مقادیر مناسبی برای پارامترهای C_k و C_e تعیین نشده‌است. در تحقیقات مختلف مقادیر آن‌ها در محدوده $0.1 < C_k < 1$ و $1/92 < C_e < 1$ ارائه شده‌است [۲۱، ۲۷، ۲۸].

روابط انتقال اجزای رقیق که برای محاسبه غلظت حل-شونده در یک حلال استفاده می‌شود یک محیط مدل‌سازی را برای مطالعه گونه‌های شیمیایی منتقل شده از طریق نفوذ و همرفت فراهم می‌کند. مدل انتقال گونه‌های رقیق، موازنه جرم را برای یک یا چند گونه i بصورت زیر حل می‌کند:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} + \nabla \cdot (-D_i \nabla C_i) + u \cdot \nabla C_i = R_i \quad (16)$$

معادله ۱۶ شامل مکانیسم‌های انتقال نفوذ و همرفتی می‌باشد که در آن C_i بیانگر غلظت گونه‌ها، D ضریب نفوذ، R_i عبارت میزان واکنش گونه‌ها و u مولفه سرعت می‌باشد. مولفه شار N در ارتباط با معادله موازنه جرم است و در صورتیکه نفوذ و همرفتی تنها مکانیسم‌های انتقال باشند، شار چنین تعریف می‌شود:

$$N_i = -D \nabla C + u C \quad (17)$$

۲-۲-۱- سینتیک واکنش

بر اساس نتایج آزمایشگاهی بدست آمده در تحقیق رنجبر و همکاران، معادله هلدین تعریف شده در معادله ۱۸ بهترین مدل سینتیکی توصیف‌کننده رفتار رشد توده‌زیستی *رالستونیا یوتروفا* در تخریب فنل می‌باشد که به‌عنوان معادله نرخ واکنش زیستی در شبیه‌سازی CFD استفاده شده‌است [۲۰]:

$$\mu = \frac{\mu_{max} S}{(K_S + S + \frac{S^2}{K_I})} \quad (18)$$

که در این معادله μ نرخ ویژه رشد، S غلظت فنل، μ_{max} بیشینه نرخ ویژه رشد، K_S ثابت نیمه اشباع و K_I ثابت بازدارندگی می‌باشند. مطابق مطالعه تجربی، پارامترهای سینتیکی مدل به صورت زیر بدست آمده‌اند:

$$\mu_{max} = 0.772 \text{ (h}^{-1}\text{)}, K_S = 10.4 \text{ mg/L}, K_I = 772 \text{ mg/L}$$

$E\ddot{\sigma}$ عدد Eötvös بوده و برابر است با:

$$E\ddot{\sigma} = \frac{g \rho_l d_b^2}{\sigma} \quad (10)$$

که g شتاب گرانش و σ ضریب کشش سطحی می‌باشد [۲۲، ۲۴-۲۶].

بیشتر کاربردهای جریان حبابی در زمینه جریان آشفته است که از یک مدل آشفته جهت حل مولفه سرعت میانگین استفاده می‌شود. برای روابط جریان حبابی از مدل آشفته $k-\epsilon$ ؛ متداولترین مدل استفاده شده برای تشریح جریان-های آشفته استفاده شده که دو معادله انتقال برای متغیرهای انرژی جنبشی آشفته k و میزان اتلاف انرژی ϵ حل می‌شود. ویسکوزیته آشفته طبق رابطه زیر محاسبه می‌شود که C_μ ثابت مدل است [۲۱، ۲۶]:

$$\mu_T = \rho_l C_\mu \frac{k^2}{\epsilon} \quad (11)$$

معادله انتقال برای انرژی جنبشی آشفته k مطابق معادله ۱۲ است:

$$\rho_l \frac{\partial k}{\partial t} + \rho_l u_l \cdot \nabla k = \nabla \cdot \left[\left(\mu_l + \frac{\mu_T}{\sigma_k} \right) \nabla k \right] + P_k - \rho_l \epsilon + S_k \quad (12)$$

که مولفه تولید P_k ناشی از حرکت نسبی بین حباب‌های گازی و مایع است که بصورت زیر بدست می‌آید:

$$P_k = \mu_T \left(\nabla u_l : (\nabla u_l + (\nabla u_l)^T) \right) - \frac{2}{3} (\nabla \cdot u_l)^2 - \frac{2}{3} \rho k \nabla \cdot u_l \quad (13)$$

همچنین میزان اتلاف انرژی جنبشی ϵ بصورت زیر مدل شده-است:

$$\rho_l \frac{\partial \epsilon}{\partial t} + \rho_l u_l \cdot \nabla \epsilon = \nabla \cdot \left[\left(\mu_l + \frac{\mu_T}{\sigma_\epsilon} \right) \nabla \epsilon \right] + C_{\epsilon 1} \frac{\epsilon}{k} C_{\epsilon 1} P_k - \rho_l C_{\epsilon 2} \frac{\epsilon^2}{k} + C_{\epsilon 3} S_k \frac{\epsilon}{k} \quad (14)$$

در معادلات قبلی، u_l مولفه سرعت میانگین فاز مایع می‌باشد. ثوابت استفاده‌شده در مدل $k-\epsilon$ عبارتند از:

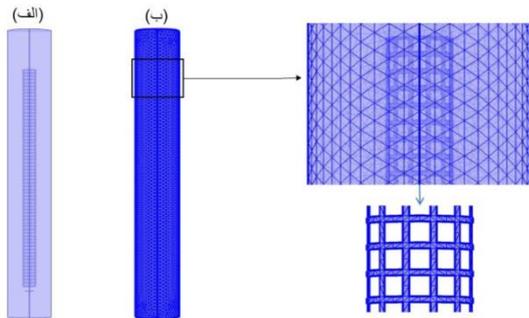
$$1/3, \sigma_\epsilon = 1, \sigma_k = 1/92, C_{\epsilon 2} = 1/44, C_{\epsilon 1} = 0.09 C_\mu =$$

۳-۲- شرایط مرزی

هر یک از معادلات مومنتوم، پیوستگی و انتقال جرم برای حل نیاز به شرایط اولیه و مرزی مناسب دارند. به منظور حل معادلات هیدرودینامیک، با توجه به اینکه مایع در داخل راکتور نگهداری شده و تنها فاز گاز از طریق یک توزیع کننده وارد راکتور می شود، شار ورودی گاز در قسمت زیرین لوله داخلی به صورت حاصل ضرب سرعت ورودی ($2/82 \text{ cm/s}$) در چگالی سیال و شرط خروجی گاز در بالای راکتور و در فشار اتمسفریک وارد شده است. ورودی فنل در قسمت کف راکتور بعنوان شرط مرزی inflow تعریف شده است. در تمامی دیواره ها شرط عدم لغزش برای فاز مایع و لغزش آزاد برای فاز گاز برقرار است. همچنین برای حل معادلات انتقال جرم شرط مرزی در ورودی از نوع غلظت ثابت و شرط مرزی در خروجی که مولفه عمودی شار نفوذی اجزا را صفر خواهد کرد، بکار برده شده است. دیواره های بیوراکتور (استوانه) نفوذ ناپذیرند، بنابراین شار نفوذی و همرفتی اجزای شیمیایی در این دیواره ها برابر صفر است. همچنین با توجه به متقارن بودن هندسه راکتور، شرط مرزی تقارن برای ساده سازی معادلات و کاهش زمان محاسبات تعریف شده است.

۳-۲-۴- حل عددی توسط نرم افزار

در این مطالعه از نرم افزار COMSOL Multiphysics 5.2 برای شبیه سازی، مش بندی و حل معادلات استفاده شد. معادلات دیفرانسیل پاره ای در این نرم افزار بر اساس روش عددی المان محدود حل می شوند. فاز گاز هوا و فاز مایع آب و همچنین اندازه حباب ها ۵ میلی متر در نظر گرفته شده است. هندسه سه بعدی بیوراکتور طراحی شده توسط نرم افزار شامل یک استوانه و یک لوله مشبک داخلی در شکل ۲-الف و ساختار مش بندی بیوراکتور شامل 244700 المان در شکل ۲-ب نشان داده شده است. برای انجام شبیه سازی گام زمانی $0/01$ ثانیه و معیار همگرایی 10^{-3} انتخاب شد. معادلات حاکم به همراه شرایط مرزی در نرم افزار پیاده سازی شده و توسط یک دستگاه لپ تاپ Acer مجهز به ۵ هسته پردازنده و ۶ گیگابایت حافظه فیزیکی (RAM) پردازش شد.



شکل ۲- (الف) هندسه سه بعدی بیوراکتور. (ب) مش تولید شده بیوراکتور.

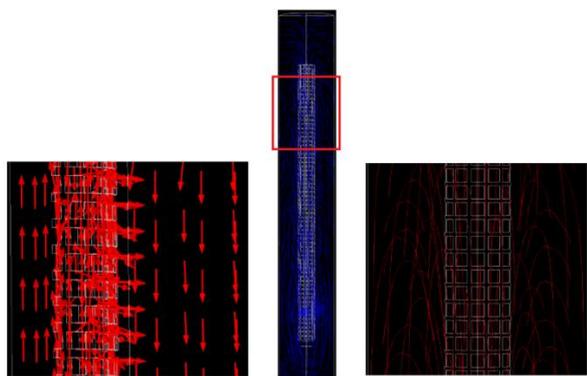
۳- تحلیل نتایج

۳-۱- اعتبارسنجی

به منظور اعتبارسنجی مدل شبیه سازی در مطالعه حاضر، رشد توده زیستی و رفتار آن در شش غلظت ورودی متفاوت فنل $50, 140, 320, 480, 560$ و 600 (معادل $0/53, 1/48, 3/4, 5/1, 5/95, 6/37$ mol/m^3 ارزیابی و با نتایج آزمایشگاهی بدست آمده توسط رنجبر و همکاران مقایسه شده است [۲۰]. همان طور که در شکل ۳ دیده می شود، نتایج شبیه سازی تطابق خوبی با داده های تجربی دارند. حداکثر مقدار خطا در حدود 8% می باشد که می توان ناشی از روش حل عددی، مش بندی هندسه، شرایط مرزی و فرضیات ساده سازی مسئله باشد.

همچنین مشاهده می شود که اختلاف بین نتایج آزمایشگاهی و شبیه سازی در غلظت های بالاتر بیشتر است. علت این اختلاف تاثیر بازدارندگی فنل در غلظت های بالا بوده که با استفاده از معادله هلدین در مدل شبیه سازی تاثیر داده شده است. تطابق خوب نتایج نشان می دهد که مدل سازی مسئله قابل اطمینان بوده و این مدل می تواند برای مقاصد بعدی مورد استفاده قرار گیرد.

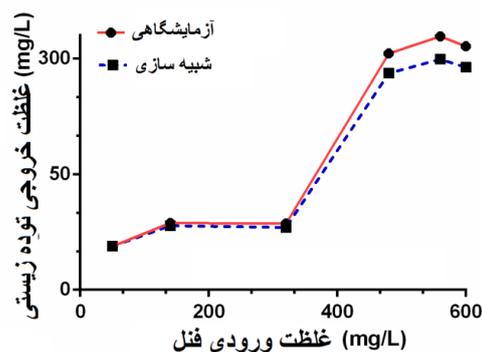
جریان در قسمت بالارونده رو به بالا بوده که به دو صورت محوری و شعاعی از لوله مشبک داخلی خارج شده است. در قسمت پایین رونده جریان رو به پایین حرکت کرده و در نهایت در انتهای لوله داخلی (بخش پایین راکتور) دوباره وارد لوله مشبک مرکزی می‌شود. بنابراین، الگوی جریان بوجود آمده در این راکتور به صورت ترکیبی از جریان‌های محوری و شعاعی می‌باشد که منجر به افزایش ضریب انتقال جرم اکسیژن و بهبود قابل توجه اختلاط در این سیستم می‌شود.



شکل ۴- الگوهای خطوط جریان مایع در داخل بیوراکتور (سرعت ورودی گاز ۲/۸۲ cm/s است).

۳-۴- شبیه‌سازی عملکرد باکتری رالستونیا یوتروفا در راکتور هواراند با لوله مشبک داخلی

به دلیل برتری راکتور هواراند با لوله مشبک داخلی جهت انتقال اکسیژن و مواد معدنی به سلول‌های باکتریایی، این راکتور به‌عنوان راکتور مورد استفاده در بررسی تخریب فنل انتخاب شده‌است. در تحقیق حاضر با استفاده از مدل سینتیکی هلدین در سرعت ظاهری گاز ۲/۸۲ cm/s فرآیند رشد باکتری رالستونیا بر روی فنل برای مصرف آن به عنوان منبع کربن و انرژی در راکتور هواراند با لوله مشبک داخلی برای مطالعه انتخاب شده و بررسی کمی و کیفی رشد رالستونیا یوتروفا و رفتار آن برای مصرف غلظت‌های مختلف فنل شبیه‌سازی و نتایج آن ارائه شده‌است. در ابتدا از روش CFD برای شبیه‌سازی رفتار رشد توده‌زیستی در زمان‌های مختلف استفاده شد. شکل ۵ تغییرات غلظت توده‌زیستی را در زمان‌های ۱، ۴۰، ۸۰، ۱۲۰، ۱۶۰ و ۱۸۵ ثانیه برای غلظت اولیه فنل ۵۶۰ mg/L ($5/95 \text{ mol/m}^3$) در داخل بیوراکتور نشان می‌دهد.



شکل ۳- مقایسه نتایج شبیه‌سازی و داده‌های تجربی غلظت

خروجی توده‌زیستی در شش غلظت ورودی متفاوت فنل.

۳-۲- بررسی عدم وابستگی نتایج به اندازه مش

برای شبکه‌بندی هندسه راکتور از مش tetrahedral و با سه سایز coarse، normal و fine استفاده شد. به‌منظور تعیین مش بهینه و اثبات مستقل از مش بودن محاسبات، نتایج غلظت خروجی توده‌زیستی در غلظت ورودی ۳۲۰ mg/L با سه مش مختلف ارزیابی گردید (جدول ۱). مطابق جدول ۱، اختلاف نتایج شبیه‌سازی به ازای مش سوم نسبت به مش دوم ناچیز است بنابراین، مش دوم به عنوان مش بهینه در نظر گرفته شد. بنابراین محاسبات به ازای این مش و مش‌های ریزتر (تعداد المان بیشتر) یکسان بوده و مستقل از نوع مش است. همچنین تطابق خوب نتایج تجربی و شبیه‌سازی، مناسب بودن مش‌بندی انجام شده با حضور تعداد مش‌های مناسب و بهینه را به وضوح نشان می‌دهد (بیشینه اندازه المان = 0.00265 و کمینه اندازه المان = 9.97×10^{-4}).

جدول ۱- بررسی عدم وابستگی به مش.

شماره	تعداد المان	غلظت خروجی توده زیستی (mol/m^3)
۱	$1/4 \times 10^5$	۲/۹
۲	$2/4 \times 10^5$	۳/۱۱
۳	$7/2 \times 10^5$	۳/۱۲

۳-۳- خطوط جریان

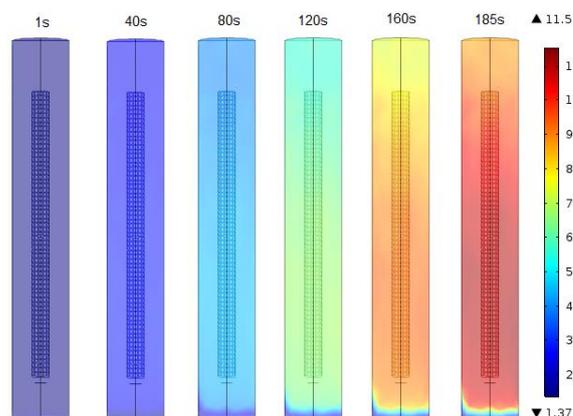
خطوط جریان در نواحی بالارونده و پایین‌رونده در داخل راکتور هواراند با لوله مشبک داخلی و همچنین گردش مایع ناشی از نیروی محرکه ایجاد شده بر اساس اختلاف دانسیته بین دو ناحیه بالارونده و پایین‌رونده و تاثیر حضور لوله مشبک داخلی به وضوح در شکل ۴ نشان داده شده‌است. خطوط

همان توده زیستی در غلظت اولیه فنل 320 mg/L (320 mol/m^3) در شکل ۶ آورده شده است. مطابق شکل ۶-الف با افزایش زمان فرآیند تخریب زیستی فنل در راکتور، توده زیستی رشد کرده (شکل ۶-ب) و غلظت آن افزایش می‌یابد. طبق نتایج تجربی بدست آمده توسط رنجبر و همکاران غلظت نهایی فنل به صفر و توده زیستی به $7/38 \text{ mol/m}^3$ (190 mg/L) رسیده که با مقدار خطای ۷٪ در شکل ۶ نشان داده شده است [۲۰].

به منظور شبیه‌سازی تاثیر غلظت اولیه فنل، عملکرد رشد توده زیستی در راکتور هواراند با لوله مشبک داخلی در غلظت-های ورودی فنل مختلف $50, 140, 320, 480, 560 \text{ mg/L}$ و $0/53, 1/48, 3/4, 5/1, 5/95, 6/37 \text{ mol/m}^3$ و غلظت اولیه توده زیستی $1/37 \text{ mol/m}^3$ در سرعت ظاهری گاز ورودی برابر با $2/82 \text{ m/s}$ مورد بررسی قرار گرفت. شکل ۷-الف ج-پروفیل‌های غلظت توده زیستی حاصل از شبیه‌سازی را در سه زمان مختلف برای هر یک از غلظت‌های ورودی در داخل راکتور هواراند با لوله مشبک داخلی در پایان فرآیند تخریب زیستی نشان می‌دهد.

مقایسه نتایج شبیه‌سازی و تجربی که در بخش ۳-۱ به آن پرداخته شد، نشان‌دهنده دقت و کیفیت بالای پروفیل‌های غلظت توده زیستی ارائه شده در این بخش می‌باشد. علاوه بر این، شبیه‌سازی می‌تواند نتایج پراکندگی متغیرها در کل جریان را ارائه دهد که شکل ۷ پراکندگی غلظت توده زیستی در داخل راکتور را نشان می‌دهد. غلظت کمتر توده زیستی مشاهده شده در قسمت بالای راکتور به دلیل حرکت و زمان اقامت کم حباب‌ها در این ناحیه بوده که وارد ناحیه پایین-رونده شده و یا از قسمت بالای راکتور آزاد شده و در نتیجه منجر به عدم اکسیژن‌رسانی کافی به سلول‌های باکتری و رشد آن‌ها در این ناحیه می‌شوند.

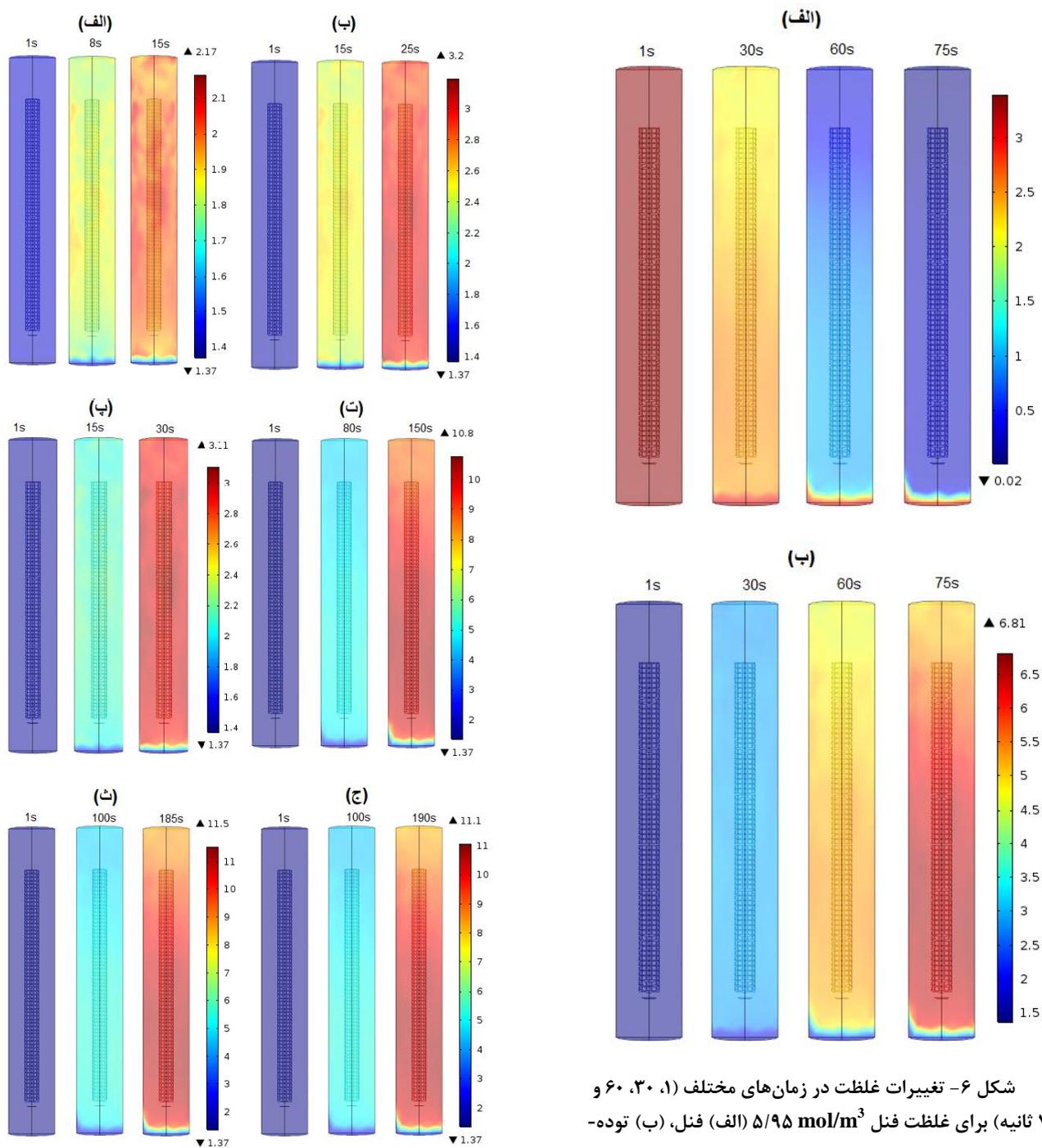
با توجه به ناپیوسته بودن فرآیند در تحقیق حاضر، تغییرات غلظت در داخل راکتور در طول زمان‌های مختلف انجام فرایند ظاهر شده است. با توجه به شکل ۵ در شروع فرآیند غلظت پایین توده زیستی در راکتور دیده می‌شود که با گذشت زمان به دلیل تخریب و مصرف فنل و تاثیر مستقیم زمان تماس توده سلولی و آلاینده، روند افزایشی را طی کرده و در نهایت با تامین زمان تماس موثر کافی در طول راکتور منجر به رشد آن در ستون می‌شود.



شکل ۵- تغییرات غلظت توده زیستی در زمان‌های مختلف (۱)، $40, 80, 120, 160$ و 185 ثانیه) برای غلظت فنل $5/95 \text{ mol/m}^3$.

تماس موثر بوجود آمده در راکتور را می‌توان به جریان گردشی منظم بین دو ناحیه بالارونده و پایین‌رونده، جریان متقاطع در لوله مشبک داخلی در طول انجام واکنش زیستی و همچنین هوادهی خوب سیستم و تامین اکسیژن مورد نیاز تخریب زیستی هوازی؛ که از ویژگی‌های قابل توجه راکتور هواراند با لوله مشبک داخلی می‌باشند، نسبت داد که میزان رشد سلول‌های باکتری را افزایش می‌دهد. بهبود بازدهی سیستم زیستی در اثر بهبود پارامترهای هیدرودینامیکی راکتور (مثل افزایش نگهداشت گاز و ضریب حجمی انتقال جرم اکسیژن) با تامین بهتر و در دسترس قرار دادن سریعتر اکسیژن و دیگر مواد مغذی تاثیر مثبتی در رشد سلول‌ها دارد که این امر نیز باعث بهبود عملکرد راکتور هواراند با لوله مشبک داخلی نسبت به راکتور هواراند معمولی می‌شود [۱۴].

نمونه‌ای از نتایج بدست‌آمده در تحقیق حاضر برای نشان دادن وابستگی رشد توده زیستی و مصرف فنل توسط



شکل ۶- تغییرات غلظت در زمان‌های مختلف (۱، ۳۰، ۶۰ و ۷۵ ثانیه) برای غلظت فنل $5/95 \text{ mol/m}^3$ (الف) فنل. (ب) توده-زیستی.

شکل ۷- پروفیل غلظت توده زیستی در داخل

بیوراکتور. (الف)، (ب)، (پ)، (ت)، (ث) و (ج) به ترتیب کانتورهای غلظت برای مربوط به غلظت‌های فنل $0/53$ ، $1/48$ ، $3/4$ ، $5/1$ ، $5/95$ و $6/37$ می‌باشند.

F_D : نیروی دراگ (N)
 C_D : بدون بعد) ضریب دراگ
 P : فشار (Pa)
 u : سرعت
 d_b : قطر حباب (m)
 F : نیروی حجمی (N/m^3)
 g : ثابت گرانش (m/s^2)
 S_k : انرژی جنبشی آشفته ($kg/(m.s^3)$)

حروف یونانی

φ : کسر حجمی فاز
 μ : ویسکوزیته موثر (Pa.s)
 μ_T : ویسکوزیته آشفته (Pa.s)
 σ : کشش سطحی (N/m)
 ε : میزان تلفات انرژی آشفته (m^2/s^3)

مراجع

- [1] K. Mohanty, D. Das, and M. N. Biswas (2008) "Treatment of phenolic wastewater in a novel multi-stage external loop airlift reactor using activated carbon", *Separation and Purification Technology*, 58, 311-319.
- [2] H. Jamshidian, S. Khatami, A. Mogharei, F. Vahabzadeh, and A. Nickzad (2013) "Cometabolic degradation of para-nitrophenol and phenol by *Ralstonia eutropha* in a Kissiris-immobilized cell bioreactor", *Korean Journal of Chemical Engineering*, 30, 2052–2058.
- [3] A. Gunay, and M. Cetin, (2013) "Determination of aerobic biodegradation kinetics of olive oil mill wastewater" *International Biodeterioration & Biodegradation*, 85, 237-242.
- [4] E. Jalilnejad, and F. vahabzadeh, (2013) "Models for the biodegradation kinetics of naphthalene by *ralstonia eutropha*", *Polycyclic Aromatic Compound*, 33, 451-466.

[5] حامد حیدری و سیدمرتضی ضمیر (۱۳۹۴) "تخریب زیستی بیسفنل توسط باکتری رالستونیا یوتروفا"، کنفرانس بین المللی محیط زیست و منابع طبیعی، شیراز، موسسه عالی علوم و فناوری خوارزمی.

[6] نوید اعتباری علمداری، علیرضا حبیبی و فرزانه وهاب زاده (۱۳۹۳) "تخریب زیستی فنل توسط رالستونیا ایوتروفای تثبیت یافته بر سنگ آذرین در راکتور بستر چکنده"، پنجمین

همچنین بهم پیوستگی حباب‌ها در بالای ناحیه بالارونده (لوله داخلی) منجر به تشکیل حباب‌های بزرگ به‌ویژه در سرعت‌های پایین گاز ورودی می‌شود که به دلیل ایجاد سطح تماس کم نسبت به حباب‌های ریز، برای انتقال جرم سودمند نیست. شکستن حباب‌های بزرگ توسط لوله داخلی منجر به تجمع تعداد زیادی از حباب‌های کوچک در ناحیه پایین‌رونده راکتور می‌شود. در نتیجه به دلیل حضور حباب‌های کوچک با سطح تماس زیاد و زمان اقامت بیشتر نسبت به حباب‌های بزرگ، تخریب زیستی و رشد زیادتری در این منطقه اتفاق افتاده و باعث ایجاد غلظت‌های بالاتر توده‌زیستی در این ناحیه از راکتور می‌شود که در شکل ۷ به وضوح قابل مشاهده است.

۴- نتیجه‌گیری

نتایج بدست‌آمده از مدل CFD استفاده‌شده برای شبیه‌سازی بیوراکتور هواراند با لوله مشبک داخلی، به صورت ترکیبی از جریان سیال دوفازی و مدل سینتیکی، به‌منظور بررسی رفتار تخریب‌زیستی فنل و رشد باکتری‌های رالستونیا یوتروفا در داخل راکتور و تطابق خوب آن با نتایج تجربی، دقت بالای مدل شبیه‌سازی ارائه شده را نشان می‌دهد. مدل CFD با به‌تصویر کشیدن رفتار دینامیکی غلظت توده‌زیستی و فنل در داخل راکتور اطلاعات مفیدی جهت بهینه‌سازی، طراحی و ساخت راکتور و همچنین تسهیل استراتژی‌های افزایش مقیاس، بدست می‌دهد. همچنین استفاده از مدل CFD برای شبیه‌سازی واکنش‌های آنزیمی در راکتور هواراند با لوله مشبک داخلی جهت بهبود فهم کلی از کاربردهای صنعتی این راکتور جدید در تصفیه پساب، مفید و موثر می‌باشد.

نامگذاری متغیرها

K_S : ثابت نیمه اشباع (mg/L)
 K_i : ثابت بازدارندگی (mg/L)
 μ : نرخ ویژه رشد ($mg_{naph}/mg_{cell}\cdot h$)
 m_g : نرخ انتقال جرم گاز-مایع ($kg/m^3\cdot s$)
 S : غلظت فنل (mg/L)
 R_i : میزان واکنش گونه‌ها ($mol/m^3\cdot s$)
 D_i : ضریب نفوذ (m^2/s)

- [18] R. Davarnejad, E. Bagheripoor, and A. Sahraei (2012) "CFD Simulation of Scale Influence on the Hydrodynamics of an Internal Loop Airlift Reactor", *Scientific Research*, 4, 668-674.
- [19] H. P. Luo, and M. H. Al-Dahhan (2011) "Verification and validation of CFD simulations for local flow dynamics in a draft tube airlift bioreactor", *Chemical Engineering Science*, 66, 907-923.
- [20] S. Ranjbar, H. K. Aghtaei, E. Jalilnejad, and F. Vahabzadeh (2016) "Application of an airlift reactor with a net draft tube in phenol bio-oxidation using *Ralstonia eutropha*", *Desalination and Water Treatment*, 57, 1-13.
- [21] M. Ebrahimifakhar, E. Mohsenzadeh, S. Moradi, M. Moraveji, and M. Salimi (2011) "CFD simulation of the hydrodynamics in an internal air lift reactor with two different configurations", *Frontiers of Chemical Science and Engineering*, 5, 455-462.
- [22] M. K. H. AL-Mashhadani, S. J. Wilkinson, and W. B. Zimmerman (2015) "Airlift bioreactor for biological applications with micro-bubble mediated transport processes", *Chemical Engineering Science*, 137: 243-253.
- [23] D. Kuzmin, S. Turek, and H. Haario (2005) *Finite Element Simulation of Turbulent Bubbly Flows in Gas-liquid Reactors*, Ergebnisberichte Angew, University of Dortmund.
- [24] R. Davarnejad, and M. K. Moraveji (2011) "CFD Modeling of Geometrical Parameters Effects on the Hydrodynamics and Mass Transfer in an Airlift Reactor", *World Applied Sciences Journal*, 15, 890-898.
- [25] A. Sokolichin, G. Eigenberger and A. Lapin (2004) "Simulations of buoyancy driven bubbly flow: Established simplifications and open questions", *AIChE Journal*, 50, 24-49.
- [26] P. Lestinsky, P. Vayrynen, M. Vecer, and K. Wichterle (2012) "Hydrodynamics of airlift reactor with internal circulation loop: Experiment vs. CFD simulation", *Procedia Engineering*, 42, 892 - 907.
- [27] M. K. Moraveji, B. Sajjadi, M. Jafarkhani, and R. Davarnejad (2011) "Experimental investigation and CFD simulation of turbulence effect on hydrodynamic and mass transfer in a packed bed airlift internal loop reactor", *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 38, 518-524.
- [28] S. M. Mousavi, A. Jafari, S. Yaghmaei, M. Vossoughi, and I. Turunen (2008) "Experiments and CFD simulation of ferrous bio-oxidation in a bubble column bioreactor", *Computers and Chemical Engineering*, 32, 1681-1688.
- [7] B. Jajuee, A. Margaritis, D. Karamanev, and M. A. Bergougnou, (2007) "Kinetics of Biodegradation of p-Xylene and Naphthalene and Oxygen Transfer in a Novel Airlift Immobilized Bioreactor", *Biotechnology and Bioengineering*, 96, 232-243.
- [8] A. Kermanshahpour, D. Karamanev, and A. Margaritis, (2005) "Biodegradation of petroleum hydrocarbons in an immobilized cell airlift bioreactor" *Water Research*, 39, 3704-3714.
- [9] A. Amani, E. Jalilnejad, and S. M. Mousavi, (2018) "Simulation of phenol biodegradation by *Ralstonia eutropha* in packed-bed bioreactor with batch recycle mode using CFD", *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*, 59, 310-319.
- [10] Y. G. Farouzatu, (2010) *Mixing characteristics of draft tube airlift bioreactor using the electrical resistance tomography*, Theses and dissertations, Ryerson University.
- [11] S. Sanjari, F. Vahabzadeh, A. Naderifar, and M. Pesaran, (2014) "Hydrodynamics and mass transfer coefficients of airlift reactors with net draft tubes of different sizes: Production of cyclodextrin glucanotransferase using *Bacillus sp. DSM 2523*", *Starch-Starke*, 66, 935-46.
- [12] J. Y. Wu, and W. T. Wu (1991) "Fed-Batch Culture of *Saccharomyces cerevisiae* in an Airlift Reactor with net draft tube", *Biotechnology progress*, 7, 230-233.
- [13] A. G. D. Jesu's, F. J. R. Baez, L. L. Amezcua, C. J. rez-Rami'rez, N. Ruiz-Ordaz, and J. G. Mayer (2008) "Biodegradation of 2,4,6-trichlorophenol in a packed-bed biofilm reactor equipped with an internal net draft tube riser for aeration and liquid circulation", *Journal of Hazardous Materials*, 161, 1140-1149.
- [14] E. Jalilnejad, and F. Vahabzadeh (2014) "Use of a packed-bed airlift reactor with net draft tube to study kinetics of naphthalene degradation by *Ralstonia eutropha*", *Environmental Science and Pollution Research*, 21, 4592-4604.
- [15] E. Amini, M. R. Mehrnia, S. M. Mousavi, and N. Mostoufi (2013) "Experimental study and computational fluid dynamics simulation of a full-scale membrane bioreactor for municipal wastewater treatment application", *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 52, 9930-9939.
- [16] S. M. Mousavi, S. A. Shojaosadati, J. Golestani, and F. Yazdian, (2010) "CFD simulation and optimization of effective parameters for biomass production in a horizontal tubular loop bioreactor", *Chemical Engineering and processing*, 49, 1249-1258.
- [17] W. A. Al-Masry (2006) *Analysis of Bubble Column Hydrodynamics Using Computational Fluid Dynamics*, King Saud University.

Modeling of microbial growth of *Ralstonia eutropha* in biodegradation process of phenol in an airlift bioreactor with concentric net draft

Elham Jalilnejad*, Seyedeh mozhgan hosseini, Mehran Nalband

Faculty of Chemical Engineering, Urmia University of Technology, Urmia, Iran

ABSTRACT

According to the experimental observations, airlift reactor with net draft tube provided a suitable medium for microbial reactions, hence improved process efficiency and is a recommended bioreactor for wastewater bio-treatment. However, modeling and simulation of biodegradation process in this special bioreactor seems essential to proper design and optimization of the performance of the reactor. In this work, the biodegradation process of phenol with *Ralstonia eutropha* cells and microbial growth is simulated in a lab-scale airlift reactor with net draft tube using computational fluid dynamics (CFD). The k- ϵ model, as the most common model used for description of turbulent flow, is used for the simulation of the present bubbly flow. Flow pathlines in the riser and downcomer sections of the airlift reactor is simulated and the phenol concentration variations and biomass distribution in different inlet conditions were demonstrated by simulated concentrations contours. Good agreement was found between simulation and experimental results which validated the model and proved the accuracy of the simulation.

All right reserved.

ARTICLE INFO

Article history:

Received: July 28, 2018

Received in revised form: January 25, 2019

Accepted: March 5, 2019

Key words:

CFD Simulation, biomass growth, Airlift Reactor, Phenol biodegradation, Haldane model

* Corresponding author
e.jalilnejad@uut.ac.ir