

تخریب تولوئن در یک راکتور تجزیه نوری بستر ثابت: مطالعه تجربی و شبیه- سازی CFD راکتور

سلیمان مصلح*، حدیث خاکسار

گروه مهندسی پلیمر، دانشکده نفت و گاز گچساران، دانشگاه یاسوج

چکیده

در این پژوهش با طراحی و ساخت یک راکتور تجزیه نوری بستر ثابت، عملکرد تخریب تولوئن مورد ارزیابی قرار گرفته است. نقش عوامل موثر بر فرآیند بررسی شد و نتایج نشان داد که در شرایط بهینه، سامانه طراحی شده قادر است تولوئن را تا میزان ۹۵/۳۰٪ تخریب نماید. شبیه‌سازی راکتور بر اساس دینامیک سیالات محاسباتی با هدف پیش‌بینی رفتار هیدرودینامیکی جریان و تعیین غلظت تولوئن در طول راکتور انجام شد. یافته‌ها نشان داد که مدل پیشنهاد شده قادر است با دقت بالایی نرخ تخریب تولوئن را در طول راکتور پیش‌بینی نماید. مقایسه عملکرد سامانه طراحی شده با سایر سامانه‌ها نشان داد که سامانه حاضر نه تنها می‌تواند غلظت بالاتری از تولوئن را در زمان کمتری تخریب نماید، بلکه به مقدار کاتالیزگر نوری کمتری در واحد سطح نیاز دارد که این مساله به لحاظ اقتصادی بسیار حائز اهمیت است. نتایج حاصل از این پژوهش می‌تواند در طراحی راکتورهای تجزیه نوری برای عملکرد در مقیاس صنعتی مفید واقع شود.

مشخصات مقاله

تاریخچه مقاله:
دریافت: ۴ تیر ۱۴۰۰
دریافت پس از اصلاح: ۳ مهر ۱۴۰۰
پذیرش نهایی: ۴ آبان ۱۴۰۰

کلمات کلیدی:

تخریب
شبیه‌سازی
راکتور تجزیه نوری
ترکیبات آلی فرار
دینامیک سیالات محاسباتی

۱- مقدمه

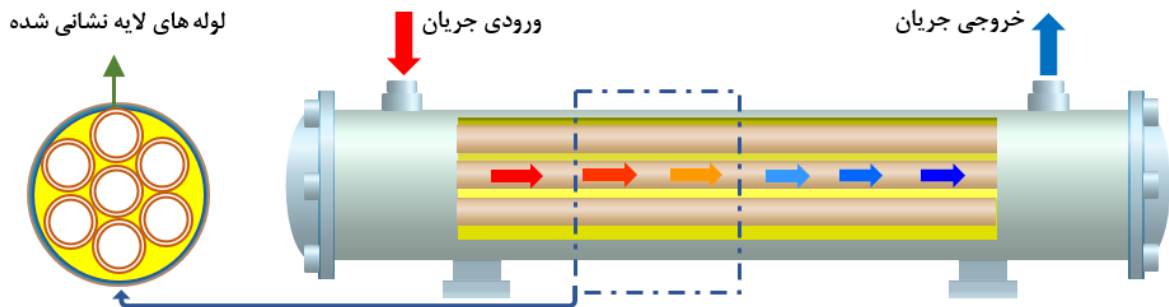
ترکیبات آلی فرار از جمله موادی هستند که انتشار آن‌ها به محیط زیست، خطر بزرگی برای سلامتی انسان و به مخاطره انداختن زیست‌بوم‌های گیاهی و جانوری محسوب می‌شود [۱]. در چند دهه اخیر فناوری‌های مختلفی برای حذف این ترکیبات آلاینده بکار گرفته است که به دلیل مصرف انرژی بالا، فرآیند غیر ایمن به لحاظ زیست‌محیطی و راندمان پایین عملیاتی چندان موفق نبوده‌اند [۲]. در میان ترکیبات آلی فرار، تولوئن یک گاز آلاینده مقاوم است که به شدت سمی بوده و خطری بزرگ برای سلامتی محسوب می‌شود [۳]. هرچند پیش از این از فناوری‌هایی مانند جذب سطحی برای حذف تولوئن استفاده شده است اما چنین فناوری‌هایی نمی‌توانند تولوئن را تجزیه کنند و فقط آن را از یک محیط آلوده جذب کرده و وارد یک فاز دیگر می‌نمایند [۴]. اخیراً، فرآیندهای اکسیداسیون پیشرفته که مبتنی بر تولید رادیکال‌های آزاد با قدرت اکسیدکنندگی بالا می‌باشند، به عنوان یک فناوری کارآمد برای تخریب چنین آلاینده‌هایی با استقبال مواجه شده‌اند [۵]. در این فرآیندها به جای جداسازی آلاینده و یا انتقال آن به فازی دیگر، آلاینده‌ها بطور مستقیم تخریب شده و به مواد بی‌ضرر تبدیل می‌شوند [۶]. از این رو، آلاینده ثانویه دیگری تولید نمی‌شود، که این موضوع علاوه بر اینکه به لحاظ اقتصادی و عملیاتی قابل توجه است، از لحاظ زیست‌محیطی نیز بسیار حائز اهمیت است [۷]. در این مطالعه، فرآیند تخریب با کمک کاتالیزگر نوری به عنوان یکی از روش‌های کارآمد در حوزه فناوری‌های اکسیداسیون پیشرفته برای تصفیه ترکیبات آلی فرار مورد بررسی قرار گرفته است. در ابتدا یک راکتور برای استفاده در حالتی که کاتالیزگر نوری لایه‌نشانی شده باشد، طراحی و ساخته شده است و سپس آزمایشات تخریب تولوئن با استفاده از راکتور مذکور انجام گرفته است. از کاتالیزگر نوری تجاری TiO_2 به دلیل در دسترس بودن، مقرون به صرفه بودن، غیر سمی بودن، پایداری شیمیایی بالا و فعالیت کاتالیزگری قابل قبول استفاده شده است [۸]. از جمله مزایای فرآیند تخریب کاتالیزگری نوری، دمای و فشار عملیاتی محیط، سهولت عملکرد و هزینه عملیاتی پایین است [۹]. راکتورهای تجزیه نوری با توجه به حالت کاتالیزگر مورد استفاده، به دو دسته تقسیم می‌شوند: راکتورهای دوغابی و راکتورهای لایه‌نشانی شده [۱۰]. در حالت دوغابی، کاتالیزگر نوری در پساب یا آلاینده حل شده است و همراه با جریان حرکت می‌کند در حالی که در حالت لایه‌نشانی شده، کاتالیزگر نوری بر روی یک بستر تثبیت شده

و بی حرکت است [۱۱]. راکتورهای حالت دوغابی علیرغم اینکه سطح تماس بالاتری را ایجاد می‌کنند، اما به دلیل اینکه نیاز است کاتالیزگر نوری پس از خروج از راکتور از جریان تصفیه شده جدا گردد، هزینه عملیاتی بالایی دارد [۱۲]. مرحله جداسازی ثانویه جزء مراحل پر مصرف انرژی به شمار می‌آید [۱۳]. لذا در این پژوهش از راکتور تجزیه نوری لایه‌نشانی شده استفاده شده است و سعی شده است تا با طراحی یک بستر ویژه، سطح تماس افزایش یابد و محدودیت سطح انتقال جرم پوشش داده شود. همچنین با طراحی یک سامانه توزیع نور مناسب، بر محدودیت انتقال نور غلبه شده است. علیرغم کارایی بالای فناوری تخریب، این فناوری تاکنون در مقیاس بزرگ مورد استفاده قرار نگرفته است که دلیل آن نیز عدم شناخت جامع این فرآیند و موانع پیش روی آن است. برای افزایش مقیاس راکتورهای تجزیه نوری نیاز به شناخت جامع فرآیند، بویژه طراحی دقیق راکتور مورد استفاده و تحلیل پدیده‌هایی مانند انتقال جرم، هیدرودینامیک جریان و سازوکار واکنش است، تا بتوان از این طریق با شناخت و رفع محدودیت‌های موجود، اقدام به طراحی یک راکتور مناسب کرد. دینامیک سیالات محاسباتی یک ابزار بسیار کارآمد جهت مطالعه جامع چنین تجهیزات و فرآیندهای است. در پژوهش حاضر، با استفاده از داده‌های بدست آمده از آزمایشات، فرآیند شبیه‌سازی راکتور تجزیه نوری برای تخریب تولوئن انجام گرفته است. سیستم طراحی شده در این پژوهش شامل یک راکتور با جریان گردشی (Circulating flow reactor) می‌باشد که قابلیت بالایی برای استفاده برای مقیاس صنعتی بویژه در صنایعی که در بخشی از فرآیند آن‌ها آلاینده‌ها بطور مدام تولید و انتشار می‌یابد، دارد. در مطالعه حاضر، شبیه‌سازی راکتور بر اساس دینامیک سیالات محاسباتی با هدف پیش‌بینی رفتار هیدرودینامیکی جریان و تعیین غلظت آلاینده‌ها در طول راکتور انجام شده است که می‌تواند کمک بزرگی در راستای بهینه‌سازی هندسه و ساختار راکتور باشد. اصولاً از دیدگاه مهندسی، طراحی یک راکتور بدون کمک گرفتن از ابزارهای مدل‌سازی و شبیه‌سازی نمی‌تواند منجر به یک طراحی بهینه شود. سامانه طراحی شده نه تنها قادر است غلظت بالاتری از آلاینده‌ها را تخریب نماید، بلکه به مقدار کاتالیزگر نوری کمتری در واحد سطح نیاز دارد که این مساله به لحاظ اقتصادی بسیار حائز اهمیت است.

خارجی راکتور ۶ سانتیمتر است. منبع توزیع نور در اطراف راکتور بوده و نور کاملاً به صورت یکنواخت به درون راکتور تابیده می شود و سبب فعال شدن کاتالیزگرهای نوری می گردد. مشخصات کاتالیزگر مورد استفاده در جدول (۱) ارائه شده است.

۲- راکتور و آزمایشات مربوط به فرآیند تخریب

طرحواره راکتور تجزیه نوری مورد استفاده در تخریب تولوئن در شکل (۱) نشان داده است. این راکتور از چند شاخه لوله شیشه ای از جنس کوارتز ساخته شده است. این لوله ها با استفاده از کاتالیزگر نوری تجاری $TiO_2/P25$ (شرکت Sigma-Aldrich) لایه نشانی شده اند. طول راکتور ۳۰ سانتیمتر و قطر



شکل ۱: طرحواره راکتور مورد استفاده برای تخریب تولوئن

$$P = \frac{c_i u_i A_i - c_o u_o A_o}{c_i u_i A_i} \times 100 \quad (1)$$

که در این رابطه، P نرخ تخریب، C_i و C_o به ترتیب غلظت جریان ورودی و خروجی، u_i و u_o به ترتیب سرعت جریان ورودی و خروجی و A_i و A_o به ترتیب سطح مقطع جریان ورودی و خروجی به راکتور است. طراحی آزمایش برای بررسی سه عامل عملیاتی (جدول (۲)) شامل غلظت اولیه تولوئن (X_1)، مقدار کاتالیزگر لایه نشانی شده در واحد سطح (X_2) و زمان تابش نور (X_3) بر اساس طرح مرکب مرکزی با کمترین تعداد آزمایش (جدول (۳)) بکار گرفته شد. از روش پاسخ سطح که بر مبنای محاسبات ریاضی و آماری عمل می کند برای بررسی تأثیر تکی و ترکیبی عوامل عملیاتی بر میزان تخریب استفاده شد. همچنین، تابع مطلوبیت که یک تابع بین مقدار صفر (شرایط نامطلوب) و یک (شرایط مطلوب) است برای تعیین حالت بهینه فرآیند جهت رسیدن به حداکثر راندمان تخریب بکار گرفته شد [۱۴].

جدول ۱: ویژگی های کاتالیزگر نوری مورد استفاده.

مقدار	مشخصه
۲۱	اندازه ذرات (nm)
۳۵-۶۵	مساحت سطح (m^2/g)
۴/۲۶	دانسیته (g/ml)

لوله های لایه نشانی شده نیز هرکدام دارای طول ۲۰ سانتیمتر و قطر خارجی ۱/۵ سانتیمتر می باشند. نور مورد نیاز برای فعال سازی کاتالیزگرهای نوری با تعبیه لامپ حول راکتور انجام گرفته است به شکلی که توزیع نور کاملاً یکنواختی درون راکتور ایجاد شده است. جریان تولوئن پس از ورود به راکتور به درون شاخه های لایه نشانی شده راه می یابد و با عبور از شاخه ها در معرض حمله رادیکال های آزاد قرار می گیرد و تخریب می گردد. با حرکت به سمت خروجی راکتور، به دلیل سطح تماس و زمان تماس بیشتر، نرخ تخریب افزایش می یابد و در نهایت جریان از راکتور خارج می شود. اندازه گیری غلظت تولوئن در ورودی و خروجی راکتور صورت می گیرد و نرخ تخریب با استفاده از رابطه زیر محاسبه می گردد:

جدول (۲): عوامل عملیاتی و محدوده مورد مطالعه.

سطوح مورد مطالعه					عوامل
Low (-1)	Central (0)	High (+1)	-a	+a	
۲۰۰۰	۳۰۰۰	۴۰۰۰	۱۰۰۰	۵۰۰۰	X_1
۱۰	۱۵	۲۰	۵	۲۵	X_2
۶۰	۹۰	۱۲۰	۳۰	۱۵۰	X_3

می‌توان با توجه به تقارن هندسه، نتایج را به نیمه دیگر تعمیم داد. مش‌بندی هم برای حوزه حرکت سیال و هم لوله‌های لایه-نشانی شده انجام گرفته است. با توجه به اینکه واکنش در حوزه دوم، یعنی لوله‌های لایه نشانی شده صورت می‌گیرد، توجه به کیفیت مش‌بندی این بخش بسیار حائز اهمیت است. از آنجا که طراحی راکتور به گونه‌ای است که جهت حرکت سیال به موازات لوله‌های لایه نشانی شده است، این امکان را فراهم می‌کند که با لحاظ المان‌های منشوری (prism) در بخش اصلی هندسه، تعداد المان‌های نهایی را کاهش داد. از مش شش وجهی برای هندسه استفاده شده است و شبکه‌بندی نهایی شامل ۹۷۶۰۰۰ المان است که برای اعتبارسنجی استقلال از مش مورد استفاده قرار گرفته است.

از معادلات ناویر استوکس و پیوستگی برای توصیف هیدرودینامیک جریان در راکتور تجزیه نوری، به صورت زیر استفاده شد [۱۵]:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u) = 0 \quad (2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho u) + \nabla \cdot (\rho u u) = -\nabla P + \nabla \cdot (\mu \nabla u) \quad (3)$$

که در این معادلات، u معرف سرعت جریان، P معرف فشار، ρ دانسیته و μ ویسکوزیته جریان است. از معادله بقای جرم به صورت زیر برای تعیین غلظت تولوئن در هر نقطه از راکتور استفاده شد [۱۶ و ۱۷]:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_i) + \nabla \cdot (\rho u Y_i) = \nabla \cdot (\rho D_{i,m} \nabla Y_i) + R_i \quad (4)$$

که در این معادله، Y_i جزء جرمی، $D_{i,m}$ ضریب نفوذ مولکولی و R_i ترم مربوط به واکنش تخریب است. نرخ تخریب تولوئن نیز

جدول (۳): ماتریس طراحی آزمایش

Run	X_1	X_2	X_3	P
۱	۳۰۰۰	۱۵	۹۰	۵۵/۳۱
۲	۳۰۰۰	۱۵	۹۰	۵۵/۳۵
۳	۳۰۰۰	۵	۹۰	۳۲/۸۲
۴	۲۰۰۰	۲۰	۱۲۰	۹۵/۳۰
۵	۲۰۰۰	۱۰	۶۰	۳۴/۱۴
۶	۵۰۰۰	۱۵	۹۰	۳۶/۷۰
۷	۲۰۰۰	۲۰	۶۰	۵۹/۶۹
۸	۳۰۰۰	۱۵	۹۰	۵۵/۲۶
۹	۱۰۰۰	۱۵	۹۰	۷۴/۰۶
۱۰	۳۰۰۰	۱۵	۳۰	۱۶/۷۸
۱۱	۳۰۰۰	۱۵	۹۰	۵۵/۴۰
۱۲	۲۰۰۰	۱۰	۱۲۰	۷۲/۷۴
۱۳	۴۰۰۰	۲۰	۶۰	۳۸/۰۲
۱۴	۳۰۰۰	۱۵	۹۰	۵۵/۳۶
۱۵	۳۰۰۰	۱۵	۱۵۰	۹۳/۹۸
۱۶	۴۰۰۰	۲۰	۱۲۰	۷۶/۶۲
۱۷	۴۰۰۰	۱۰	۱۲۰	۵۴/۰۶
۱۸	۳۰۰۰	۱۵	۹۰	۵۵/۳۸
۱۹	۴۰۰۰	۱۰	۶۰	۱۵/۵۶
۲۰	۳۰۰۰	۲۵	۹۰	۷۷/۹۴

۳- مدل‌سازی و روش حل

مدل‌سازی راکتور تجزیه نوری با استفاده از نرم‌افزار کامسول بر اساس روش المان محدود انجام شده است. هندسه و مش‌بندی راکتور در شکل (۲) نشان داده شده است. از آنجا که هندسه متقارن است، برای کاهش زمان شبیه‌سازی، فقط نیمی از هندسه در نظر گرفته شد. پس از پایان شبیه‌سازی

تخریب تولوئن در یک راکتور تجزیه نوری بستر ثابت: مطالعه تجربی و شبیه‌سازی CFD راکتور

$$C_s(0, \text{Catalytic Wall}) = 0 \quad (9)$$

$$-n \cdot (-D\nabla C) = 0 \quad (10)$$

$$-n \cdot (-D\nabla C) = R(\text{Catalytic Wall}) \quad (11)$$

$$-n \cdot (-D\nabla C + Cu) = 0 \quad (12)$$

که n بردار نرمال و C_t غلظت تولوئن در هر لحظه می‌باشد. از آن‌جا که اینکه انتظار می‌رود تغییرات غلظت محلی بزرگی بین توده سیال (تولوئن) و سطح کاتالیزگرهای تثبیت شده وجود داشته باشد، یک مش بسیار ریز برای حوزه سیال در این ناحیه (یعنی سطوح لایه‌نشانی شده با کاتالیزگر) در نظر گرفته شد. در فرآیند گسسته‌سازی، برای حل معادلات حاکم از حل گر حالت پایدار استفاده شد و شرط همگرایی برای حل عددی با کنترل مقدار باقیمانده‌ها با معیار حداقل مقدار 10^{-5} برای پیوستگی و اندازه حرکت و مقدار 10^{-4} برای غلظت در نظر گرفته شد. علاوه بر این متغیرهای مورد نظر در سطوح مختلف حوزه محاسباتی به عنوان شاخص همگرایی (حداقل ۵۰ تکرار بدون تغییرات) تحت کنترل قرار گرفتند. برای انجام شبیه‌سازی، مدل در دو مرحله حل شد. ابتدا میدان جریان (معادلات انتقال جرم و اندازه حرکت) و سپس معادله مربوط به سینتیک واکنش حل گردید. حرکت سیال در یک حالت ثابت حل شده و سپس واکنش تجزیه نوری در یک حالت گذرا با گام زمانی ۱ ثانیه، شبیه‌سازی شد.

با استفاده از مدل سینتیکی لانگمویر-هینشلوود به صورت زیر محاسبه شد [۱۸ و ۱۹]:

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = k I_{ic}^n \frac{KC_i}{1 + \sum_j KC_j} \quad (5)$$

که در این معادله k ثابت سرعت واکنش و I_{ic}^n شدت تابش موضعی است. برای تخریب بسیاری از ترکیبات آلی، رابطه (۵) به صورت زیر ساده‌سازی شده است [۲۰]:

$$\frac{dC}{dt} = kC \quad (6)$$

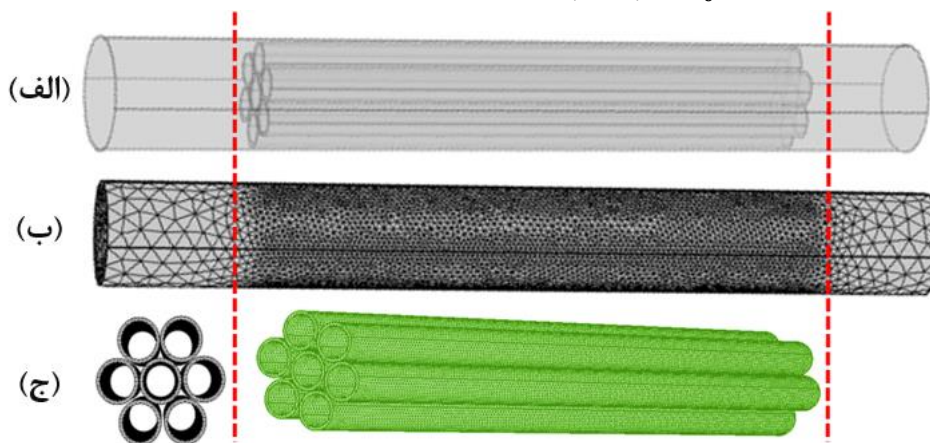
که k ثابت سرعت درجه اول مشاهده شده، C غلظت بر حسب میلی‌گرم و t زمان است.

در ورودی راکتور شرط مرزی سرعت و در خروجی آن، فشار اتمسفری به عنوان شرط مرزی در نظر گرفته شد، در صورتی که برای دیواره‌ها شرط عدم لغزش انتخاب گردید. شار نفوذی برابر با صفر برای دیواره‌ها به عنوان شرط مرزی غلظت تعریف گردید.

برای شبیه‌سازی معادلات (۲) تا (۶)، شرایط اولیه و مرزی نشان داده شده در روابط (۷) تا (۱۲) استفاده شد. معادلات (۳) و (۴) با استفاده از حل گر وابسته به زمان حل شد، زیرا غلظت با گذشت زمان تغییر می‌کند.

$$C(t, 0, 0, 0) = C_t \quad (7)$$

$$C(0, 3D) = C_0 \quad (8)$$



شکل ۲- هندسه (الف) و مش‌بندی (ب و ج).

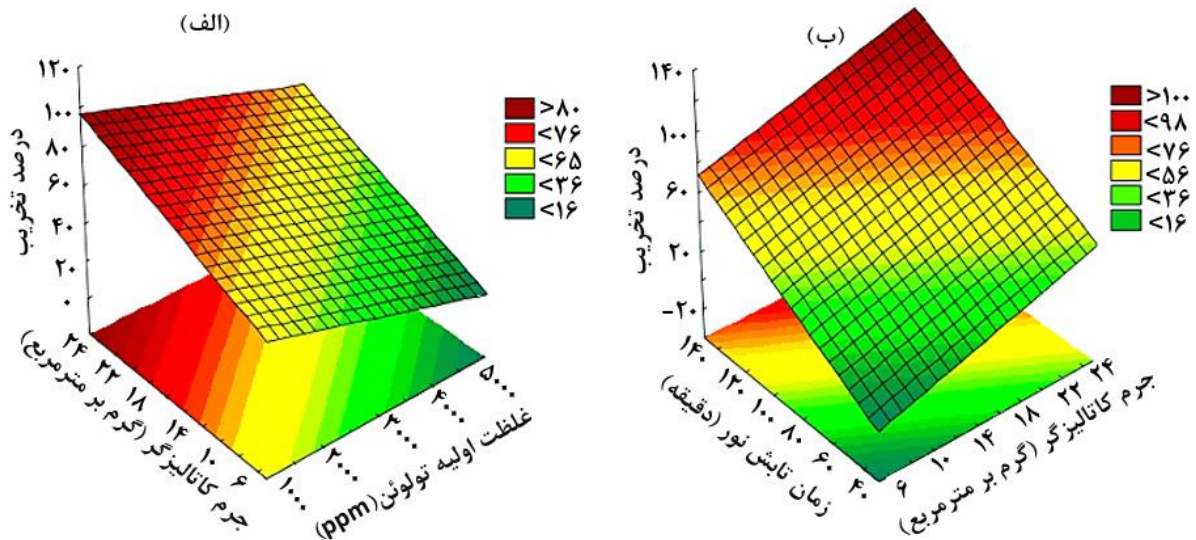
نرخ تخریب تولوئن افزایش پیدا می‌کند. این امر به دلیل پوشش دادن کامل سطح راکتور بوده که سبب می‌شود محل‌های فعال بیشتری در اختیار مولکول‌های تولوئن قرار گرفته و راندمان تخریب افزایش یابد. بررسی رفتار غلظت اولیه تولوئن بر راندمان فرآیند نشان از تاثیرات معکوس دارد (۳-الف). با افزایش غلظت

۴- نتایج و بحث

از نمودارهای سه بُعدی پاسخ سطح برای بررسی تأثیر برهمکنش عوامل عملیاتی بر میزان نرخ تخریب تولوئن استفاده شده است. همانگونه که در شکل (۳-الف) مشاهده می‌شود، با افزایش مقدار کاتالیزگر نوری لایه‌نشانی شده در واحد سطح،

رادیکال‌های آزاد بیشتری تولید می‌گردد، نرخ تخریب تولوئن افزایش می‌یابد (۳-ب).

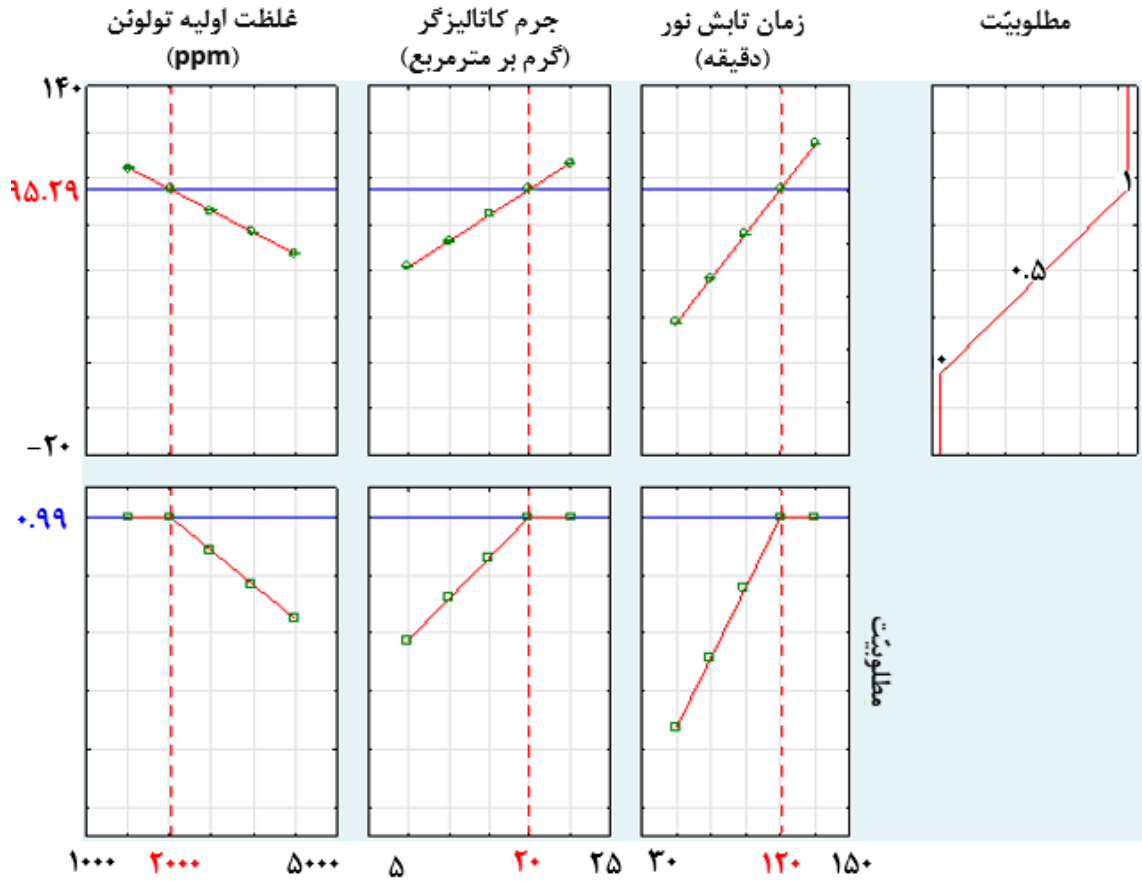
تولوئن، مولکول‌های کمتری قادر خواهند بود در تماس با رادیکال‌های آزاد قرار گرفته و تخریب گردند. همچنین یافته‌ها نشان داد با افزایش زمان تابش نور، به دلیل اینکه سطح لایه نشانی شده مدت زمان بیشتری در معرض نور قرار گرفته و



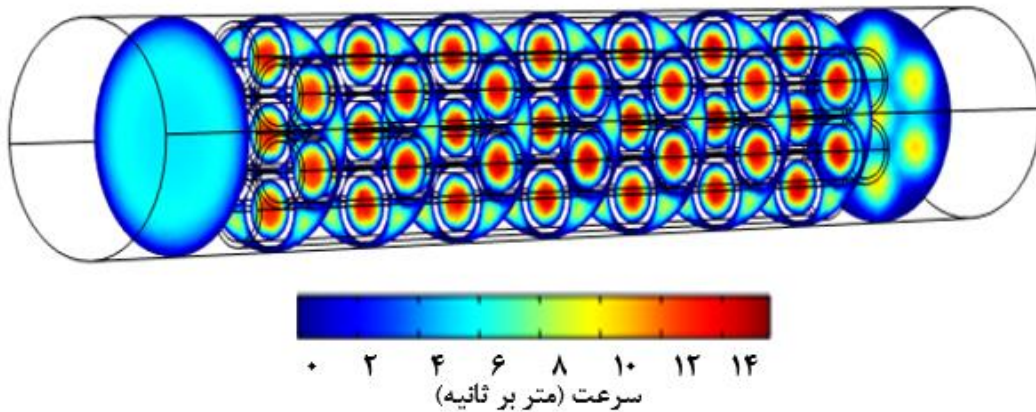
شکل ۳- نمودارهای سه بُعدی پاسخ سطح برای بررسی تأثیرات ترکیبی عوامل عملیاتی.

شود، نرخ تخریب تولوئن بیشتر است. دلیل این پدیده، دریافت بیشتر نور از منبع و در پی آن فعالیت بیشتر کاتالیزگر نوری می‌باشد. در شکل (۷)، تغییرات غلظت تولوئن در طول راکتور نشان داده شده است. با مقایسه نمودار با پروفایل غلظت می‌توان دقت پیش‌بینی را مشاهده کرد. از این نتایج می‌توان در بهینه‌سازی نهایی جهت طراحی یک راکتور با ابعاد بهینه استفاده نمود. اعتبارسنجی نتایج حاصل از شبیه‌سازی با استفاده از داده‌های آزمایشگاهی انجام شد. در آزمایشات تجربی از سه غلظت مختلف تولوئن (۲۰۰۰ ppm، ۳۰۰۰ ppm و ۵۰۰۰ ppm) در ورودی راکتور استفاده گردید و غلظت خروجی از راکتور در زمان‌های مختلف اندازه‌گیری شد. مقدار کاتالیزگر نوری لایه-نشانی شده معادل 20 g/m^2 در نظر گرفته شده است. در مدل CFD نیز مطابق با همان شرایط آزمایشگاهی، شبیه‌سازی صورت گرفته و غلظت تولوئن در خروجی راکتور در زمان‌های مختلف توسط مدل ارائه شده، تعیین گردید. همانگونه که در شکل (۸) نشان داده شده است، توافق بسیار خوبی بین نتایج آزمایشگاهی و نتایج حاصل از مدل CFD برقرار بوده و مدل پیشنهادی قادر است غلظت خروجی تولوئن از راکتور را با دقت بالایی پیش‌بینی نماید.

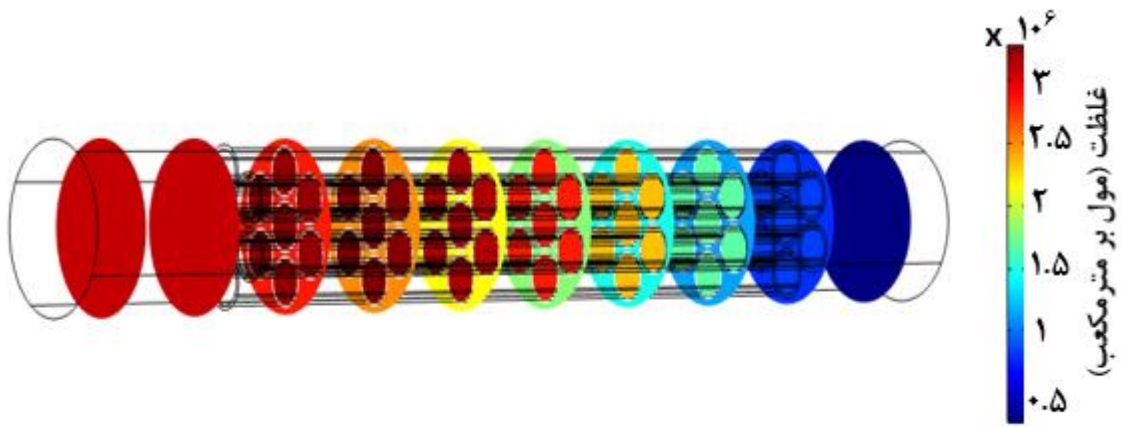
نتایج بهینه‌سازی فرآیند بر اساس تابع مطلوبیت نشان می‌دهد که حداکثر میزان درصد تخریب تولوئن برابر با $95/30$ است (شکل (۴)). این میزان تخریب در شرایط بهینه پارامترهای عملیاتی شامل غلظت اولیه 200 ppm تولوئن، مقدار کاتالیزگر نوری لایه نشانی شده معادل 20 g/m^2 و زمان تابش 120 دقیقه حاصل می‌شود. مقدار مطلوبیت در این حالت برابر با $0/99$ است. شکل (۵)، میدان سرعت در حالت پایا را نشان می‌دهد. بیشترین مقدار سرعت جریان تولوئن در ورودی و خروجی راکتور است. نتایج نشان می‌دهد که جریان آرام است. افت فشار به میزان 5 Pa در لوله‌ها مشاهده گردید. شبیه‌سازی میدان سرعت در ترکیب سایر معادلات حاکم بر فرآیند به پیش‌بینی دقیق غلظت تولوئن در راکتور کمک می‌کند. شکل (۶) پروفایل غلظت تولوئن در حالت پایا را در سطح مقطع راکتور برای غلظت ورودی $0/002 \text{ mol/L}$ نشان می‌دهد. این پروفایل به خوبی قابلیت مدل‌سازی به روش دینامیک سیالات محاسباتی را آشکار می‌کند، به ویژه در مواردی که تعیین تجربی مقدار غلظت در هر نقطه از راکتور به سادگی امکان‌پذیر نمی‌باشد. همانگونه که مشاهده می‌شود، هرچه از مرکز لوله‌ها بصورت شعاعی به سمت بیرون حرکت



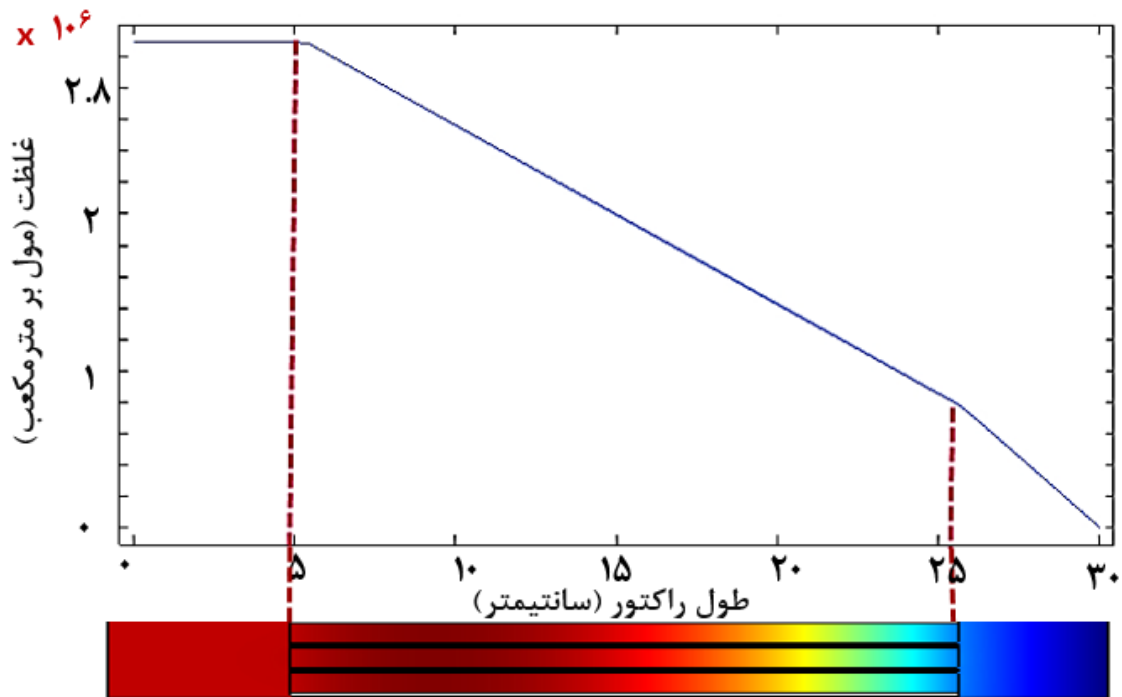
شکل ۴- بهینه سازی فرآیند تخریب تولوئن بر اساس تابع مطلوبیت



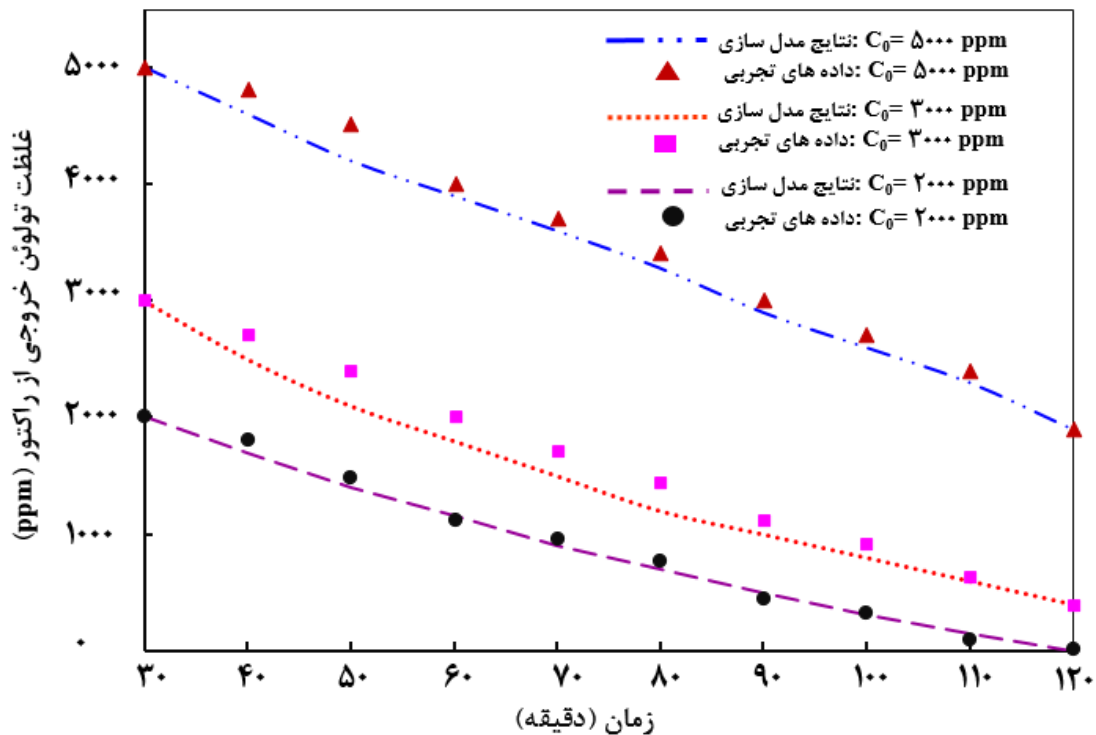
شکل ۵- پروفایل سرعت سیال در طول راکتور



شکل ۶- پروفایل غلظت تولوئن در سطح مقطع راکتور.



شکل ۷- تغییرات غلظت تولوئن در طول راکتور.



شکل ۸- اعتبارسنجی نتایج حاصل از مدل CFD با استفاده از داده‌های آزمایشگاهی.

کمتری تخریب نماید، بلکه به مقدار کاتالیزگر نوری کمتری در واحد سطح نیاز دارد که این مساله به لحاظ اقتصادی بسیار حائز اهمیت است.

مقایسه عملکرد سامانه طراحی شده برای تخریب تولوئن با سایر مطالعات پیشین نشان از راندمان بالای عملیاتی سامانه حاضر دارد (جدول (۴)). مقایسه نتایج نشان می‌دهد که سامانه حاضر نه تنها می‌تواند غلظت بالاتری از تولوئن را در زمان

جدول (۴): مقایسه عملکرد سامانه طراحی شده برای تخریب تولوئن با سایر سامانه‌ها.

سیستم	نوع کاتالیزگر نوری	غلظت اولیه تولوئن (ppm)	مقدار کاتالیزگر (g/m^2)	زمان تابش (دقیقه)	راندمان تخریب
Closed-circulation reactor[۲۱]	ZnO	۵۰	-	۱۲۰	٪۵۰
Closed-circulation reactor[۲۲]	TiO ₂	۰/۴	۳۸/۳	۱۰۰	۹۳/٪۳
Fixed bed photoreactor[۲۳]	TiO ₂ /Mo-TiO ₂	۲۵۰	-	۱۲۰	٪۵۰
Batch quartz photoreactor[۲۴]	NiWO ₄	۵۰	-	۱۸۰	٪۶۲/۳
سیستم حاضر	TiO ₂ /P25	۲۰۰۰	۲۰	۱۲۰	۹۵/٪۳۰

۵- نتیجه گیری

را تا میزان ۹۵/۳۰٪ تخریب نماید. همچنین، یک مدل سه بُعدی بر اساس تکنیک دینامیک سیالات محاسباتی برای پیش‌بینی دقیق غلظت تولوئن در راکتور ارائه شد. از داده‌های آزمایشگاهی برای اعتبارسنجی مدل استفاده گردید که یافته‌ها نشان داد توافق بسیار مطلوبی بین داده‌های آزمایشگاهی و نتایج حاصل از شبیه‌سازی برقرار است.

تخریب تولوئن به عنوان یکی ترکیب آلی فرار با استفاده از یک راکتور تجزیه نوری لایه نشانی شده انجام شد. نقش عوامل موثر بر فرآیند از جمله غلظت اولیه، زمان تابش نور در راکتور و مقدار کاتالیزگر نوری بر واحد سطح مورد بررسی قرار گرفت. نتایج با استفاده از روش‌های آماری تحلیل شد و یافته‌ها نشان داد که در شرایط بهینه، سامانه طراحی شده قادر است تولوئن

مراجع

- development and industrial upscaling”, *Interface Science and Technology*, 761-790.
- [11] A. Manassero, M.L. Satuf, O.M. Alfano (2017) “Photocatalytic reactors with suspended and immobilized TiO₂: Comparative efficiency evaluation”, *Chemical Engineering Journal*, 326, 29-36.
- [12] R. Molinari, C. Lavorato, P. Argurio (2017) “Recent progress of photocatalytic membrane reactors in water treatment and in synthesis of organic compounds”, *Catalysis Today*, 281, 144-164.
- [13] B.M. da Costa Filho, V.J. Vilar (2020) “Strategies for the intensification of photocatalytic oxidation processes towards air streams decontamination: A review”, *Chemical Engineering Journal*, 391, 123531.
- [14] M. Bahmani, K. Dashtian, D. Mowla, F. Esmaeilzadeh, M. Ghaedi (2021) “Robust charge carrier by Fe₃O₄ in Fe₃O₄/WO₃ core-shell photocatalyst loaded on UiO-66 (Ti) for urea photo-oxidation”, *Chemosphere*, 267, 129206.
- [15] K. Tong, L. Yang, X. Du (2020) “Modelling of TiO₂-based packing bed photocatalytic reactor with Raschig rings for phenol degradation by coupled CFD and DEM”, *Chemical Engineering Journal*, 400, 125988.
- [16] A. Yusuf, G. Palmisano (2021) “Three-dimensional CFD modelling of a photocatalytic parallel-channel microreactor”, *Chemical Engineering Science*, 229, 116051.
- [17] C. Casado, J. Marugán, R. Timmers, M. Muñoz, R. van Grieken (2021) “Comprehensive multiphysics modeling of photocatalytic processes by computational fluid dynamics based on intrinsic kinetic parameters determined in a differential photoreactor”, *Chemical Engineering Journal*, 310, 368-380.
- [18] H. Shen, F. Du, Y. Liu, Y. Huang, Y. Zhang, Z. Wang, Q. Wu, W. He (2019) “CFD investigation of the statistical characteristics of NO_x photo-catalytic degradation in a glass curtain wall in hazy winter weather”, *Sustainable Cities and Society*, 50, 101668.
- [19] F. Khodadadian, M.W. De Boer, A. Poursaeidesfahani, J.R. Van Ommen, A.I. Stankiewicz, R. Lakerveld (2018) “Design, characterization and model validation of a LED-based photocatalytic reactor for gas phase applications”, *Chemical Engineering Journal*, 333, 456-466.
- [1] S. Zhang, J. You, C. Kennes, Z. Cheng, J. Ye, D. Chen, J. Chen, L. Wang (2018) “Current advances of VOCs degradation by bioelectrochemical systems: a review”, *Chemical Engineering Journal*, 334, 2625-2637.
- [2] M. Sun, X. Wang, Z. Chen, M. Murugananthan, Y. Chen, Y. Zhang (2020) “Stabilized oxygen vacancies over heterojunction for highly efficient and exceptionally durable VOCs photocatalytic degradation”, *Applied Catalysis B: Environmental*, 273, 119061.
- [3] S. Liang, Y. Shu, K. Li, J. Ji, H. Huang, J. Deng, D.Y. Leung, M. Wu, Y. Zhang (2020) “Mechanistic insights into toluene degradation under VUV irradiation coupled with photocatalytic oxidation”, *Journal of hazardous materials*, 399, 122967.
- [4] T. Zou, C. Xie, Y. Liu, S. Zhang, Z. Zou, S. Zhang (2013) “Full mineralization of toluene by photocatalytic degradation with porous TiO₂/SiC nanocomposite film”, *Journal of Alloys and Compounds*, 552, 504-510.
- [5] A. Shojaei, H. Ghafourian, L. Yadegarian, K. Lari, M.T. Sadatipour (2021) “Removal of volatile organic compounds (VOCs) from waste air stream using ozone assisted zinc oxide (ZnO) nanoparticles coated on zeolite”, *Journal of Environmental Health Science and Engineering*, 1-10.
- [6] X. Zeng, B. Li, R. Liu, X. Li, T. Zhu (2020) “Investigation of promotion effect of Cu doped MnO₂ catalysts on ketone-type VOCs degradation in a one-stage plasma-catalysis system”, *Chemical Engineering Journal*, 384, 123362.
- [7] Y. Liu, C. Zhu, J. Sun, Y. Ge, F. Song, Q. Xu (2020) “In situ assembly of CQDs/Bi₂WO₆ for highly efficient photocatalytic degradation of VOCs under visible light”, *New Journal of Chemistry*, 44, 3455-3462.
- [8] D. Chen, Y. Cheng, N. Zhou, P. Chen, Y. Wang, K. Li, S. Huo, P. Cheng, P. Peng, R. Zhang (2020) “Photocatalytic degradation of organic pollutants using TiO₂-based photocatalysts: A review”, *Journal of Cleaner Production*, 268, 121725.
- [9] K. Kaur, R. Badru, P.P. Singh, S. Kaushal, Photodegradation of organic pollutants using heterojunctions: A review, *Journal of Environmental Chemical Engineering*, 8 (2020) 103666.
- [10] S. Mosleh, M. Ghaedi (2021) “Photocatalytic reactors: Technological status, opportunities, and challenges for

تخریب تولوئن در یک راکتور تجزیه نوری بستر ثابت: مطالعه تجربی و شبیه‌سازی CFD راکتور

- chitosan/activated carbon/TiO₂”, Journal of Environmental Chemical Engineering, 7, 103455.
- [23] M. Cui, S. Pan, Z. Tang, X. Chen, X. Qiao, Q. Xu (2017) “Physiochemical properties of nn heterostructured TiO₂/Mo-TiO₂ composites and their photocatalytic degradation of gaseous toluene”, Chemical Speciation & Bioavailability, 29, 60-69.
- [24] V.-D. Dao, T.D. Nguyen, N. Van Noi, N.M. Ngoc, T.-D. Pham, P. Van Quan, H.T. Trang (2019) “Superior visible light photocatalytic activity of g-C₃N₄/NiWO₄ direct Z system for degradation of gaseous toluene”, Journal of Solid State Chemistry, 272, 62-68.
- [20] H. Dou, D. Long, X. Rao, Y. Zhang, Y. Qin, F. Pan, K. Wu (2019) “Photocatalytic degradation kinetics of gaseous formaldehyde flow using TiO₂ nanowires”, ACS Sustainable Chemistry & Engineering, 7, 4456-4465.
- [21] J. Liu, P. Wang, W. Qu, H. Li, L. Shi, D. Zhang (2019) “Nanodiamond-decorated ZnO catalysts with enhanced photocorrosion-resistance for photocatalytic degradation of gaseous toluene”, Applied Catalysis B: Environmental, 257, 117880.
- [22] S.N. SM, M. Maiya (2019) “Photocatalytic degradation of gaseous toluene using self-assembled air filter based on

The Photocatalytic Degradation of Toluene in a Fixed-Bed Reactor: Experimental Study and CFD Simulation of the Reactor

Soleiman Mosleh*, Hadis Khaksar

Polymer Engineering Department, Faculty of Gas and Petroleum, Yasouj University, Gachsaran, Iran

ABSTRACT

In this research, the degradation performance of toluene has been evaluated by the design and construction of a fixed-bed photocatalytic reactor. The role of effective operational parameters was investigated, and obtained results indicated that the designed system could degrade toluene up to %95.30 at optimal conditions. The simulation of the reactor was carried out using a three-dimensional CFD to the prediction of the hydrodynamic behavior and determination of the toluene concentration along the reactor. Findings showed that the proposed model could predict the degradation rate of toluene along the reactor. The comparison of the designed system performance with other systems revealed that the current system not only could degrade toluene with higher concentration at a shorter time but also requires less photocatalyst mass per unit area, which is very important economically. The results of this study can be used in the design of photocatalytic reactors for action on an industrial scale.

ARTICLE INFO

Article history:

Received: July 31, 2021

Received in revised form: October 4, 2021

Accepted: October 26, 2021

Key words:

Photocatalytic Degradation
Simulation
Reactor
Volatile Organic Compound
CFD

All right reserved.

* Corresponding author
Mosleh@yu.ac.ir