



## Simulation of a Photocatalytic Reactor Using Finite Volume and Discrete Ordinate Method: A Parametric Study

M. Nourizade<sup>1</sup>, M. Rahmani<sup>1\*</sup>, A. Javadi<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Chemical Engineering Department, Amirkabir University of Technology, Tehran, Iran

<sup>2</sup>Chemical Engineering Department University of Tehran, Tehran, Iran

**ABSTRACT:** Advanced oxidation processes for wastewater treatment have received recently a great deal of attention. Photocatalytic oxidation processes decompose water pollutants using nano-structured photocatalyst materials, titanium dioxide, and ultraviolet irradiation. Although there is extensive experimental research in this field, designing a photoreactor is still a challenge. An effectual approach to this issue is the application of computational fluid dynamics. The performance of the catalyst, which is activated by ultraviolet irradiation, is one of the important factors affecting photoreactor efficiency. In the case of poor ultraviolet radiation distribution inside the reactor, the performance decreases due to catalyst inactivity. In this study, a computational fluid dynamics model for the simulation of radiation distribution inside a photoreactor was developed and evaluated against experimental data. Simulations were then carried on different catalyst loading, lamp power and wall reflectivity. The result showed that at a low concentration of catalyst (0.4 g/l), the reaction rate increases by up to 50% by increasing the wall reflectivity to 98%. At the lamp power of 2P and P, the reaction rate increases by up to 12.2 % and 11% respectively, meaning only a 1% increase in reaction rate while increasing lamp power.

### Review History:

Received: 2019-07-05

Revised: 2019-11-12

Accepted: 2019-12-09

Available Online: 2019-12-27

### Keywords:

Photocatalytic Reactor

Wastewater treatment

Simulation

Computational fluid dynamics

Catalyst

## 1. INTRODUCTION

In recent years, wastewater treatment has received wide attention due to limited water resources in the world. Advanced Oxidation Processes (AOPs) are one of the promising technologies for wastewater treatment. Photocatalytic oxidation processes involve the use of oxygen and nano-structured photocatalyst materials, predominantly Titanium Dioxide (TiO<sub>2</sub>), activated by Ultraviolet (UV) irradiation [1, 2]. Radiation distribution inside the reactor is one of the key factors to achieve the desired performance. Many studies have been carried out to study the Radiative Transfer Equation (RTE) [3, 4]. Chen et. al. [5] showed that in a UV disinfection reactor, the effect of wall reflection is more influential at higher inactivation levels.

In this study, the radiation distribution inside a photocatalytic reactor was studied by means of Computational Fluid Dynamics (CFD) simulation. The outcome of the CFD model was firstly compared with published experimental results for validation of the model, and then the performance of the reactor at different conditions was analyzed.

## 2. METHODOLOGY

In this research, the simulation of the photocatalytic reactor was done in a three-dimensional computational model by commercial CFD software Ansys Fluent 17.2. Fig.1 shows the computational domain and boundary conditions. The pollutant concentration at the inlet is 0.0011 kg/m<sup>3</sup> and \*Corresponding author's email: m.rahmani@aut.ac.ir

the specific absorption coefficient and scattering are 338 m<sup>2</sup>/kg and 964 m<sup>2</sup>/kg, respectively.

The RTE was solved using the Discrete Ordinate Method (DOM). Transport and chemical reaction were modeled by solving mass, momentum, and species conservation equations. To define the reaction rate as a function of absorbed radiation by the medium, a User Defined Function (UDF) code was written for the below equation;

$$r_p = k_1 \times (LVREA)^m C_j^n \quad (1)$$

where *LVREA* is local volumetric rate of energy absorption, and *k<sub>1</sub>*, *m*, and *n* are equal to 7.5e-6, 1 and 0.82, respectively.

## 3. RESULTS AND DISCUSSION

Mesh independent result obtained at 830000 hexahedral cells. Fig. 2 shows the reaction rate against incident radiation which closely matches the experimental data reported by Puma et al [6].

Fig. 3 shows the reaction rate at two wall reflection values and different catalyst concentrations. As the results show, the reaction rate increases by increasing the catalyst concentration up to 0.4 g/l, although at higher concentrations the absorption coefficient of the medium increases but UV light penetration inside the reactor decreases due to increased turbidity. Fig. 3 shows that by increasing wall reflectivity at low catalyst concentration (<0.4 g/l) the reaction rate increases by up to



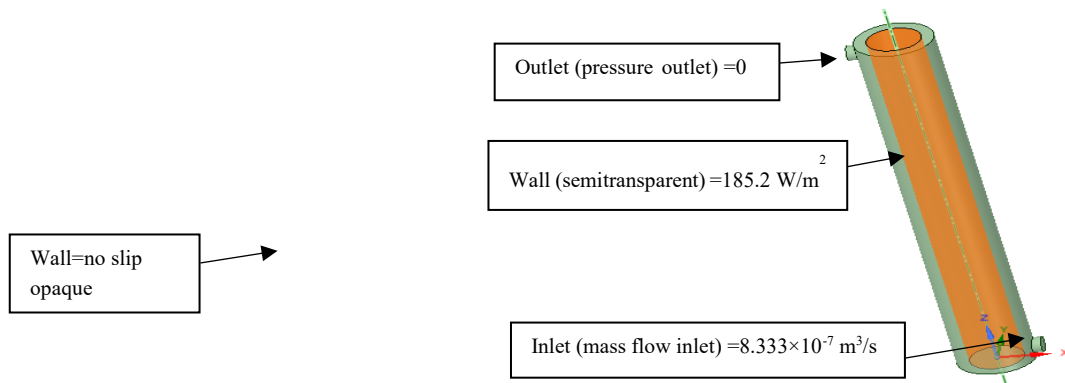


Fig. 1. Schematic of the photoreactor and boundary conditions

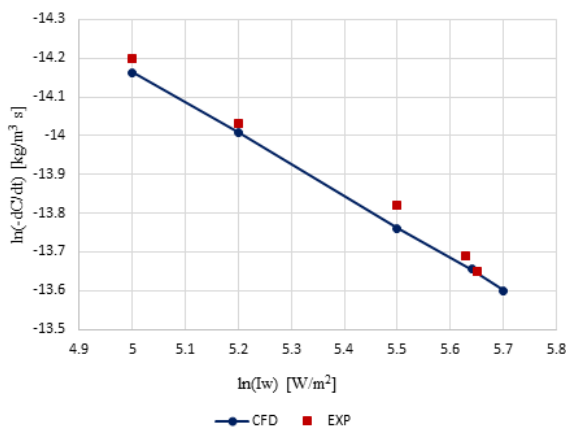


Fig. 2. Validation of the simulation results against experimental data

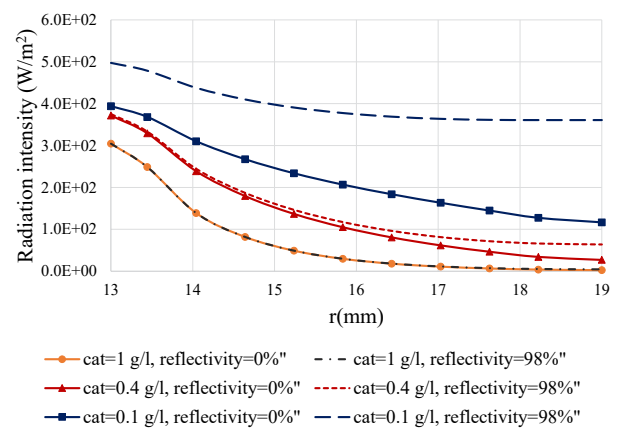


Fig. 4. Radial distribution of radiation intensity at different catalyst concentration and wall reflection

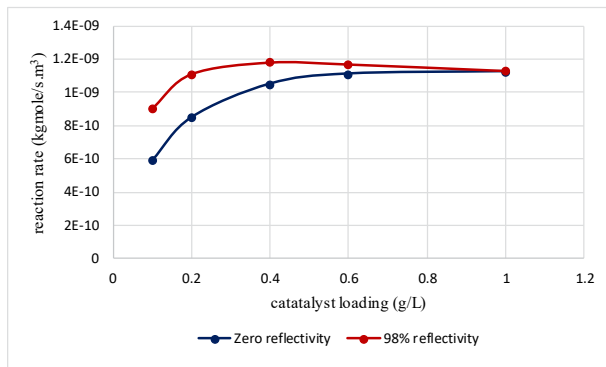


Fig. 3 Effect of wall reflectivity on the reaction rate

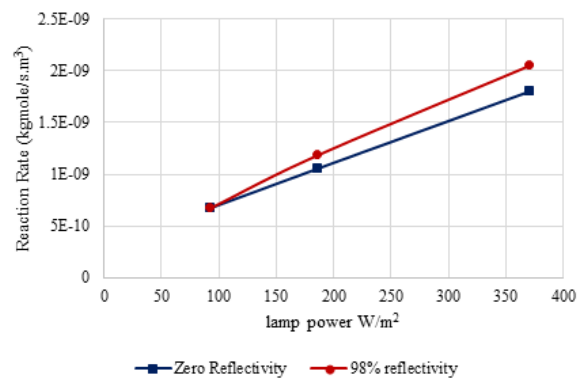


Fig. 5. Reaction rate profile at different lamp power and wall reflection of zero and 98%

50% while the increase of reaction rate for higher catalyst concentrations is only 5%. That is due to the fact that lower catalyst concentration yields a lower absorption coefficient and hence a considerable amount of radiation intensity reaches the photoreactor outer wall. This is shown in Fig. 4.

Radial distribution of radiation intensity at different catalyst concentrations and wall reflection is shown in Fig. 4. As discussed earlier, at low concentrations the photoreactor outer walls get a higher amount of radiation.

Fig. 5 shows that increasing the lamp power from  $P$  (initial

value) to  $2P$  increases reaction rate to 100% and decreasing lamp power to  $0.5P$  reduces reaction rate to 50% of the initial value. To investigate the effect of wall reflection, the reaction rate at the wall reflection of 98% at different lamp powers is also plotted. Results show that increasing wall reflection increases the reaction rate 12.2% at initial lamp power ( $P$ ). The increase of the reaction rate at the lamp power of  $2P$  is 11%. This means that the effectiveness of wall reflectivity is negligibly enhanced by increasing the lamp power.

#### 4. CONCLUSIONS

In the present research work, a slurry photocatalytic reactor was simulated using computational fluid dynamics. Firstly, the model is validated by experimental data reported in the literature. Second, the validated model was used to study the reactor performance at different conditions including catalyst concentration, wall reflectivity, and lamp power.

The results show that the higher wall reflectivity is more effective in lower catalyst concentrations (below 0.4 g/l in this work). At the catalyst concentration of 0.4 and 0.6 g/l, the increase of reaction rate is 50% and 5% when the wall reflection is 98%. Increasing lamp power to 2P increases the reaction rate up to 100% but it has a negligible effect on the received amount of radiation near the outer wall of the photoreactor. Although at low catalyst concentration, increasing lamp power enhances the effectiveness of wall reflectivity.

#### REFERENCES

- [1] M.N. Chong, B. Jin, C.W. Chow, C. Saint, Recent developments in photocatalytic water treatment technology: a review, *Water research*, 44(10) (2010) 2997-3027.
- [2] A. Payan, M. Fattahi, B. Roozbehani, Synthesis, characterization and evaluations of TiO<sub>2</sub> nanostructures prepared from different titania precursors for photocatalytic degradation of 4-chlorophenol in aqueous solution, *Journal of Environmental Health Science and Engineering*, 16(1) (2018) 41-54.
- [3] R.L. Romero, O.M. Alfano, A.E. Cassano, Radiation field in an annular, slurry photocatalytic reactor. 2. Model and experiments, *Industrial & engineering chemistry research*, 42(12) (2003) 2479-2488.
- [4] A. Turolla, D. Santoro, J.R. De Bruyn, F. Crapulli, M. Antonelli, Nanoparticle scattering characterization and mechanistic modelling of UV-TiO<sub>2</sub> photocatalytic reactors using computational fluid dynamics, *Water research*, 88 (2016) 117-126.
- [5] J. Chen, B. Deng, C.N. Kim, Computational fluid dynamics (CFD) modeling of UV disinfection in a closed-conduit reactor, *Chemical Engineering Science*, 66(21) (2011) 4983-4990.
- [6] G. Li Puma, J.N. Khor, A. Brucato, Modeling of an annular photocatalytic reactor for water purification: oxidation of pesticides, *Environmental science & technology*, 38(13) (2004) 3737-3745.

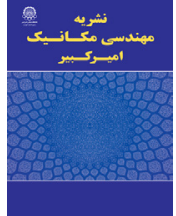
#### HOW TO CITE THIS ARTICLE

M. Nourizade, M. Rahmani, A. Javadi, *Simulation of a Photocatalytic Reactor Using Finite Volume and Discrete Ordinate Method: A Parametric Study*, *Amirkabir J. Mech Eng.*, 53(Special Issue 1) (2021) 141-144.

DOI: 10.22060/mej.2019.16699.6425







## شبیه‌سازی راکتور فتوکاتالیستی به روش حجم محدود و جهت‌های مجزا و مطالعات پارامتریک

ماجده نوری‌زاده<sup>۱</sup>، محمد رحمانی<sup>۱\*</sup>، علی‌یار جوادی<sup>۲</sup>

<sup>۱</sup>دانشکده مهندسی شیمی، دانشگاه صنعتی امیرکبیر، تهران، ایران

<sup>۲</sup>دانشکده مهندسی شیمی، دانشگاه تهران، تهران، ایران

### تاریخچه داوری:

دریافت: ۱۳۹۸-۰۴-۱۴

بازنگری: ۱۳۹۸-۰۸-۲۱

پذیرش: ۱۳۹۸-۰۹-۱۸

ارائه آنلاین: ۱۳۹۸-۱۰-۰۶

### کلمات کلیدی:

راکتور فتوکاتالیستی

تصفیه آب، شبیه‌سازی

دینامیک سیالات محاسباتی

کاتالیست

**خلاصه:** استفاده از روش‌های اکسیداسیون پیشرفته برای تصفیه آب به تازگی بسیار مورد توجه بوده است. تصفیه فتوکاتالیستی آب با استفاده از نانوکاتالیست تیتانیوم دی‌اکسید و نور فرابنفش منجر به تجزیه آلودگی‌های آب می‌شود. با وجود پژوهش‌های تجربی بسیار زیاد، طراحی و مدل‌سازی راکتورهای فتوکاتالیستی همچنان یک چالش است. یکی از راه‌حل‌های موثر برای دستیابی به این مهم استفاده از دینامیک سیالات محاسباتی است. از عوامل موثر بر بازده راکتور فتوکاتالیستی، نحوه عملکرد کاتالیست است که توسط نور فرابنفش فعال می‌شود. در صورت عدم پخش مناسب نور فرابنفش درون راکتور، بخشی از راکتور به دلیل فعال نشدن کاتالیست کارایی نداشته و بازده کاهش می‌یابد. در این کار راکتور شبیه‌سازی شده با داده‌های آزمایشگاهی اعتبارسنجی و سپس اثر غلظت کاتالیست، توان لامپ و انعکاس دیواره بررسی گردید. طبق نتایج با افزایش انعکاس دیواره به میزان ۹۸ درصد در غلظت ۰/۴ گرم بر لیتر کاتالیست، نرخ واکنش به میزان ۵۰ درصد افزایش می‌یابد. با افزایش توان لامپ به دو برابر، میزان نرخ واکنش در حالت دیواره با انعکاس ۹۸ درصد در مقایسه با دیواره با انعکاس صفر، به میزان ۱۲/۲ درصد، افزایش می‌یابد که در مقایسه با افزایش ۱۱ درصد در حالت معمولی توان لامپ، به معنای افزایش ۱/۲ درصدی است.

### ۱- مقدمه

پارچه، کاغذ و پلاستیک حاوی انواع متنوعی از رنگزها هستند [۱]. رنگزها از جمله خطرناک‌ترین گروه‌های ترکیبات شیمیایی یافت شده در پساب‌های صنعتی بوده که بنا به دلایلی از قبیل کاهش قابلیت نفوذ نور و به دنبال آن ایجاد اختلال در انجام فرآیند فتوسنتز در منابع آبی از اهمیت قابل ملاحظه‌ای برخوردار است. همچنین رنگزها به دلیل ساختار پیچیده، اغلب پایدار و مقاوم به تجزیه بیولوژیک بوده که غالباً سمی، سرطان‌زا و جهش‌زا هستند. رنگزها از مهم‌ترین مواد آلوده‌کننده فاضلاب صنایع نساجی است، زیرا بخش قابل توجهی از رنگزای تولیدی در این صنایع مصرف و از طریق فاضلاب وارد محیط زیست می‌شود که تهدید جدی برای محیط زیست و سلامتی انسان است [۱].

یکی از مسائل مهمی که سلامت محیط‌های اکولوژیکی آبی را تهدید کرده و سلامت انسان را به خطر می‌اندازد، ترکیبات مقاوم و سمی هستند که توسط فاضلاب‌های صنعتی وارد محیط زیست می‌گردند. با توجه به آن که منابع آبی قابل استفاده در جهان بسیار محدود می‌باشند، در بسیاری از مناطق مخصوصاً در مناطق خشک بازیابی پساب‌ها به عنوان یکی از منابع مهم آب برای استفاده‌هایی مانند کشاورزی به صورت روزافزونی مورد توجه سازمان‌های تامین آب قرار گرفته است. بخش قابل توجهی از پساب مربوط به صنایع گوناگون مانند صنعت نساجی، رنگ‌سازی، رنگرزی و صنایع تولید کننده چرم،

\* نویسنده عهده‌دار مکاتبات: m.rahmani@aut.ac.ir



امروزه فرآیندهای مشتق شده از فرآیندهای اکسیداسیون پیشرفته<sup>۱</sup> به دلیل عدم محدودیت فرآیندهای بیولوژیکی به نحو مناسبی توانایی حذف آلاینده از پساب را دارند. فرآیند فتوکاتالیستی با نانوذرات دی‌اکسید تیتانیم یکی از فرآیندهای اکسیداسیون پیشرفته است که توانایی آن برای حذف انواع ترکیبات سمی و سخت تجزیه‌پذیر اثبات شده است [۲ و ۳]. این ذرات برخلاف فلزات که حالت الکترونی پیوسته دارند، دارای یک ناحیه خالی از انرژی هستند [۴]. در سال‌های اخیر انواع بهبود یافته دی‌اکسید تیتانیوم مانند نانوکامپوزیت‌های اکسید تیتانیوم-نانوتیوب کربن توسعه داده شده است که بهبود عملکرد قابل توجهی را نشان می‌دهد [۵].

در طول سالیان اخیر پژوهش‌های زیادی در این زمینه انجام شده است که می‌توان به کارهای آزمایشگاهی و شبیه‌سازی راکتور اشاره کرد. با پیشرفت‌های حاصل در زمینه تصفیه فتوکاتالیستی، طراحی دقیق راکتور فتوکاتالیستی از اهمیت ویژه‌ای برخوردار شده است. شبیه‌سازی در بسیاری زمینه‌ها از جمله مدل‌سازی راکتورهای صنعتی و آزمایشگاهی، برای درک بهتر پیرامون نحوه عملکرد آن‌ها، به کار می‌رود [۶]. شناخت هیدرودینامیک راکتور فتوکاتالیستی جهت انجام محاسبات مربوط به تشعشع درون راکتور ضروری است. دلیل این امر، شناخت رفتار هیدرودینامیکی حاکم بر بستر مورد نظر برای محاسبه توزیع کاتالیست درون راکتورهای دوغابی و شناسایی نواحی گردابی و یا ساکن بستر است. در راکتورهای فتوکاتالیستی همگن، معادلات کلاسیک نویر-استوکس برای محاسبات هیدرودینامیکی به کار می‌رود اما برای جریان‌های چندفازی دو رویکرد اولر-اولر و اولر-لاگرانژ برای شبیه‌سازی هیدرودینامیکی وجود دارد. بویجو و همکاران [۷] در شبیه‌سازی سه‌بعدی راکتور حلقوی فتوکاتالیستی از روش اویلر-اولر برای حل معادلات جریان استفاده کردند. نتایج کار آنان نشان داد کانتور ذرات فتوکاتالیست و جریان آب بسیار شبیه به هم می‌باشد. گرچه کار آنان با فرض جریان آشفته بود، اما بسیاری از پژوهشگران در حل با جریان آرام نیز از این فرض استفاده کرده و نتایج قابل قبولی به دست آورده‌اند [۸ و ۹]. از آنجایی که فتوکاتالیست‌ها نیازمند نور فرابنفش برای فعال شدن هستند، نحوه پخش نور یک پارامتر مهم برای طراحی یک راکتور فتوکاتالیستی است. در صورت عدم پخش مناسب نور فرابنفش درون راکتور بخشی

از راکتور به دلیل فعال نشدن کاتالیست کارایی نخواهد داشت و بازده کاهش می‌یابد. بنابراین روش‌های مختلفی برای حل معادله انتقال تابش<sup>۲</sup> و نحوه پخش نور درون راکتورهای فتوکاتالیستی ارائه شده است [۹-۱۲]. اسدالله‌فردی و همکاران [۱۰] برای حل معادله معادله انتقال تابش دو روش مونت کارلو<sup>۳</sup> و جهت‌های مجزا<sup>۴</sup> را با یکدیگر مقایسه کردند. نتایج کار آنان نشان داد هر دو روش نتایج قابل قبولی به دست می‌دهند اما روش جهت‌های مجزا دارای خطای کمتر و نتایج دقیق‌تری است. بسیاری از محققین از روش جهت‌های مجزا برای حل معادله انتقال تابش استفاده کرده‌اند [۷، ۱۳، ۱۴]. در این روش میدان تشعشع به جهت‌های مجزا تقسیم‌بندی شده و معادله انتقال تابش برای هر یک از این جهت‌ها نوشته و حل می‌شود. چن و همکاران [۱۵] با استفاده از نرم‌افزار فلوئنت یک راکتور بسته‌گندزدا را با مدل هیدرودینامیکی رینولدز-کا-اپسیلون<sup>۵</sup> و مدل تابش پی وان<sup>۶</sup> شبیه‌سازی کردند. نتایج آن‌ها نشان داد اثر انعکاس دیواره در نرخ گندزایی بالاتر، تاثیرگذارتر بود.

در فرآیند تجزیه فتوکاتالیستی، نحوه اثرگذاری پارامترهای مختلف بر فرایند فتوکاتالیستی، با انجام واکنش‌های متعدد راکتوری به دست می‌آید که مستلزم زمان و هزینه بالا است، استفاده از روش‌های دینامیک سیالات محاسباتی (سی‌اف‌دی)<sup>۷</sup> روشی نوین، کم‌هزینه و سریع است. در این روش پس از اعتبارسنجی مدل با داده‌های آزمایشگاهی می‌توان شبیه‌سازی‌های مختلفی را طرح و اجرا کرد. نحوه پخش نور در یک راکتور فتوکاتالیستی از مهم‌ترین پارامترها برای طراحی است و به عوامل مختلفی از قبیل هندسه راکتور، جنس و ضریب انعکاس دیواره‌های راکتور و غلظت کاتالیست بستگی دارد. اگرچه کارهای بسیار زیادی جهت بررسی نحوه تابش و مقدار بهینه پارامترهای موثر بر آن انجام گرفته است اما گزارش جامعی درخصوص چگونگی اثر انعکاس دیواره، توان لامپ و غلظت‌های مختلف کاتالیست بر نحوه پخش نور درون راکتور فتوکاتالیستی دوغابی با استفاده از سی‌اف‌دی انجام نشده است. هدف از این کار بررسی پدیده‌های انتقال همراه با واکنش شیمیایی و تشعشع و تاثیر پارامترهای مختلف روی سیستم فتوکاتالیستی به‌وسیله روش دینامیک سیالات محاسباتی

2 Radiative Transfer Equation

3 Monte Carlo

4 Discrete Ordinate

5 Reynolds  $\kappa$ - $\epsilon$

6 P1

7 Computational Fluid Dynamics (CFD)

فتوکاتالیستی از روش اویلر-اویلر در حالت چندفازی (ذرات کاتالیست-جامد) و معادلات نویر استوکس در حالت همگن برای حل معادلات جریان استفاده کردند. نتایج کار آنان نشان داد پراکندگی ذرات کاتالیست در راکتور یکنواخت است و می‌توان سیستم را همگن در نظر گرفت. بسیاری از محققین در حل با جریان آرام از این فرض استفاده کرده و نتایج قابل قبولی به دست آورده‌اند [۹، ۱۴، ۱۹]. در راکتورهای فتوکاتالیستی همگن، معادلات کلاسیک نویر-استوکس برای محاسبات هیدرودینامیکی به کار برده می‌شوند.

شبیه‌سازی انجام شده در این کار، سه‌بعدی با جریان آرام و پایا است. برای بررسی رفتار جریان، معادلات پیوستگی و مومنتوم به کار برده شده به قرار زیر است [۲۰]:

$$\nabla(\rho\bar{v}) = 0 \quad (1)$$

$$\nabla \cdot (\rho\bar{v}\bar{v}) = -\nabla P + \nabla \cdot \bar{\tau} + \rho g \quad (2)$$

فرض شده است که سیال، نیوتونی، غیرقابل تراکم و با دمای ثابت است که دارای خواص فیزیکی ثابت است.

برای هر جزء شیمیایی  $i$  درون دامنه محاسباتی، معادله موازنه جرم به صورت زیر است:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_i) + \nabla \cdot (\rho\bar{v} Y_i) = \nabla \cdot J_i + R_i \quad (3)$$

که در آن  $Y_i$  جزء جرمی  $i$  در مخلوط،  $J_i$  شار نفوذی و  $R_i$  نرخ تولید (یا مصرف) آن توسط واکنش است که در ادامه شرح داده شده‌است. بردار سرعت،  $\bar{v}$ ، موازنه جرم را به محاسبات هیدرودینامیکی کوپل می‌کند. شار نفوذی با استفاده از قانون اول فیک به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$J_i = -\rho D_{i,m} \nabla Y_i \quad (4)$$

ضریب نفوذ ( $D$ ) مواد آلی در آب در ۳۰۰ کلوبین برابر با  $9^{-9}$   $1 \times 10$  مترمربع بر ثانیه در نظر گرفته شده است [۲۱].

## ۲-۲- معادله انرژی و انتقال تابشی

معادله انرژی را می‌توان متشکل از دو بخش حرارتی و تابشی در نظر گرفت. در راکتورهای فتوکاتالیستی، به دلیل غلظت پایین آلاینده، اثرات دمایی ناشی از واکنش ناچیز است و معادله انتقال

است. برای شبیه‌سازی راکتور از نرم‌افزار تجاری انسیس فلوینت ۱۷/۲ بهره برده شده است. فلوینت از پرکاربردترین نرم‌افزارهای تجاری مورد استفاده در حوزه سی‌اف‌دی است. در این نرم‌افزار معادلات دیفرانسیل پاره‌ای بقای جرم، انرژی و مومنتوم با استفاده از روش گسسته‌سازی حجم محدود و نیز معادله انتقال تابش با روش جهت‌های مجزا به معادلات جبری تبدیل می‌شوند. در روش حجم محدود، معادلات عمومی بقا در شکل انتگرالی استفاده می‌گردند، محدوده حل به تعداد معینی حجم کنترل تقسیم شده و معادلات در آن محدوده حل می‌گردند. کمیت‌ها در مرکز گره‌ها محاسبه شده و جهت به دست آوردن مقادیر روی سطوح باید درون‌یابی انجام گیرد [۱۶].

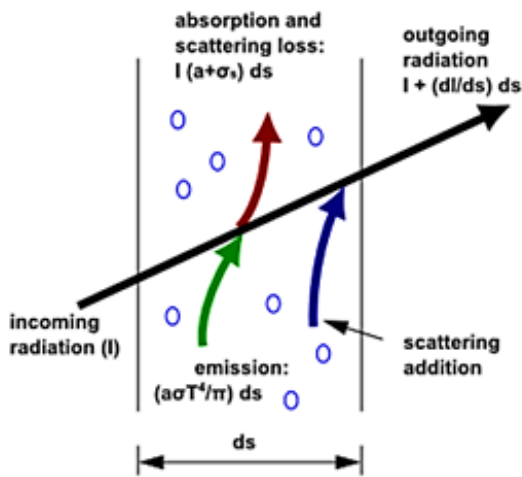
## ۲-۲- مدل‌سازی نظری

با توجه به مطالعات و نتایج آزمایشگاهی پوما و همکاران [۱۷]، راکتور فتوکاتالیستی در نظر گرفته شده برای شبیه‌سازی در پژوهش حاضر، با راکتور فتوکاتالیستی آزمایشگاهی ایشان مطابق دارد. راکتور در نظر گرفته شده برای شبیه‌سازی استوانه‌ای با قطر خارجی ۰/۳۸ متر، قطر داخلی ۰/۲۶ متر و ارتفاع ۰/۲۵۵ متر می‌باشد. شبیه‌سازی در سه بعد انجام شده است. در این کار از حلگر مبتنی بر فشار و الگوریتم سیمپل<sup>۱</sup> استفاده شده است. همگرایی حل عددی از طریق دستیابی به مقدار باقی‌مانده‌های  $10^{-6}$  برای متغیرهای معادله پیوستگی، مومنتوم و تابش و مقدار  $10^{-4}$  برای غلظت حاصل شده است (نمودار همگرایی در پیوست الف آورده شده است). شبیه‌سازی متشکل از سه بخش است. میدان سرعت با استفاده از معادلات پیوستگی و مومنتوم به دست می‌آید، همچنین از حل معادله تابش، شدت تابش و مقدار انرژی جذب شده در هر نقطه از راکتور به دست می‌آید. معادلات مومنتوم و تابش در این مطالعه مستقل از هم هستند چرا که تابش اثری بر هیدرودینامیک جریان ندارد [۱۸] اما هر دو پدیده به‌طور مستقیم بر نرخ واکنش اثرگذار می‌باشند. نرخ واکنش تابعی از مقدار انرژی جذب شده<sup>۲</sup> است که نیازمند حل معادلات تابش و نویر استوکس می‌باشد.

## ۲-۱- مدل‌سازی هیدرودینامیک راکتور و انتقال جرم

بویجو و همکاران [۷] در شبیه‌سازی سه‌بعدی راکتور حلقوی

1 Simple  
2 Local Volumetric Rate of Energy Absorption (LVREA)



شکل ۱. نحوه توزیع تابش  
**Fig 1. Radiation distribution profile**

است [۲۲]. با حل این معادله می‌توان میدان تابش را در هر نقطه از راکتور به دست آورد. در این پژوهش از روش جهت‌های مجزا و حجم محدود برای حل معادله انتقال تابش استفاده شده است. شبکه‌بندی فضایی توسط مش‌بندی هندسه و شبکه‌بندی در جهت تابش مقدار ۶×۶ معین گردید. ضرایب جذب و پراکنش حجمی با استفاده از حاصل‌ضرب پارامترهای مربوطه در غلظت کاتالیست به دست می‌آیند:

$$K_{\lambda} = K_{\lambda}^* W_{cat} \quad (7)$$

$$\sigma_{\lambda} = \sigma_{\lambda}^* W_{cat} \quad (8)$$

که در آن  $W_{cat}$  غلظت کاتالیست بر حسب  $g/m^3$  است.

پارامتر دیگری که برای حل معادله تابش مورد نیاز است تابع حالت می‌باشد. در این کار از فرم غیرایزوتروپیک خطی استفاده شده است:

$$P(\theta) = (1 + A \cos \theta) \quad (9)$$

که در آن A برابر با -۱، ۰ و ۱ به ترتیب برای پراکنش رو به عقب<sup>۵</sup>، یکسان<sup>۶</sup> و جلو<sup>۷</sup> خواهد بود. تابع حالت غیرایزوتروپیک خطی با A برابر با صفر توسط بسیاری از محققین در مدل‌سازی راکتورهای دوغایی (کاسانو و آلفانو [۲۲]، رومرو و همکاران [۱۲]، پریک و

تابشی مستقل از بخش حرارتی معادله انرژی است. از طرفی، اثرات دمایی بر سینتیک واکنش‌های فتوکاتالیستی قابل ملاحظه نیست. به همین دلیل در مدل‌سازی راکتور فتوکاتالیستی به‌طور معمول نیازی به حل معادله انرژی حرارتی وجود ندارد [۱۸، ۲۲، ۲۳].

برای یک دسته فوتون با شدت I و طول موج  $\lambda$  در جهت S و زاویه  $\Omega$  در محیط با ضریب جذب حجمی  $\kappa_{\lambda}$  و ضریب پخش حجمی  $\sigma_{\lambda}$ ، معادله تابش به‌صورت زیر است [۲۲]:

$$\frac{dI_{\lambda,\Omega}(s,t)}{ds} + [\kappa_{\lambda}(s,t)]I_{\lambda,\Omega}(s,t) + [\sigma_{\lambda}(s,t)]I_{\lambda,\Omega}(s,t) = j_v^e(s,t) + \frac{1}{4\pi}\sigma_{\lambda}(s,t)\int_0^{4\pi} p(\Omega' \rightarrow \Omega)I_{\lambda,\Omega}(s,\Omega')d\Omega' \quad (5)$$

EMISSION                      SCATTERING-IN

ABSORPTION                      SCATTERING-OUT

تابش در یک نقطه از فضا  $s(x)$  با زاویه انتشار  $\Omega$  ممکن است به دلایل زیر تغییر کند (شکل ۱): یک: جذب فوتون ناشی از صدور<sup>۱</sup>، که در راکتورهای فتوکاتالیستی به دلیل بالا نبودن دما در نظر گرفته نمی‌شود. دو: از دست دادن فوتون به دلیل جذب شدن توسط محیط<sup>۲</sup>. سه: از دست دادن فوتون به دلیل پراکنش<sup>۳</sup>. چهار: جذب فوتون ناشی از پراکنش محیط اطراف<sup>۴</sup>. در یک راکتور دوغایی فتوکاتالیستی، سوسپانسیون کاتالیست به‌عنوان یک محیط شبه‌همگن و همچنین ضرایب جذب و دفع در یک طول موج خاص، ثابت در نظر گرفته می‌شود. با این فرض که انتشار در یک راکتور فتوکاتالیستی با دمای پایین، ناچیز است معادله انتقال تابش به فرم زیر خواهد بود [۲۲ و ۲۴]:

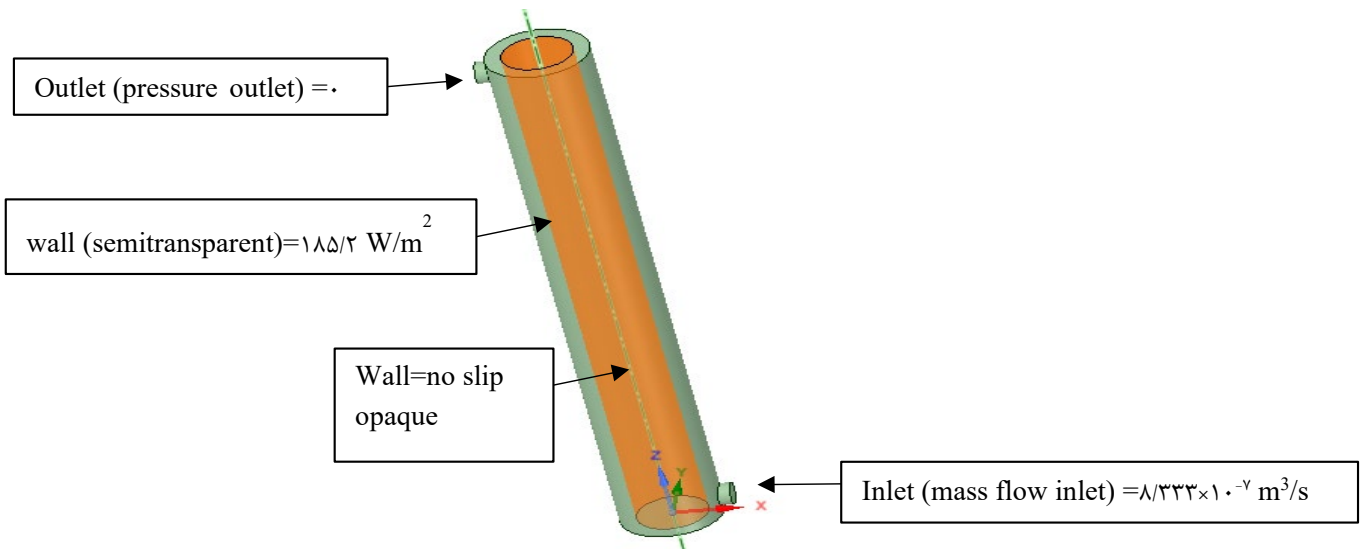
$$\frac{dI_{\lambda,\Omega}(s,t)}{ds} + \kappa_{\lambda}I_{\lambda,\Omega}(s,t) + \sigma_{\lambda}I_{\lambda,\Omega}(s,t) = \frac{1}{4\pi}\sigma_{\lambda}(s,t)\int_0^{4\pi} p(\Omega' \rightarrow \Omega)I_{\lambda,\Omega}(s,\Omega')d\Omega' \quad (6)$$

که در آن I شدت یک دسته فوتون با طول موج  $\lambda$  در جهت S و زاویه  $\Omega$ ،  $\kappa_{\lambda}$  ضریب جذب حجمی محیط،  $\sigma_{\lambda}$  ضریب پخش حجمی محیط و تابع حالت  $p(\Omega' \rightarrow \Omega)$  نشان‌دهنده نحوه پراکنش فوتون‌ها

- 1 Emission
- 2 Absorption
- 3 Scattering-Out
- 4 Scattering-In

- 5 Backward
- 6 Isotropic
- 7 Forward





شکل ۲. هندسه راکتور و شرایط مرزی

Fig 2. Reactor geometry and boundary conditions

جدول ۱. شرایط عملیاتی

Table 1. Operating conditions

ضریب پراکنش جرمی محیط	ضریب جذب جرمی محیط	غلظت ایزوپروتورن در ورودی	دبی سیال ورودی
۹۶۴ m <sup>2</sup> /kg	۳۳۸ m <sup>2</sup> /kg	۰/۰۰۱۱ kg/m <sup>3</sup>	۸/۳۳۳ × ۱۰ <sup>-۷</sup> m <sup>3</sup> /s

۴-۲- شرایط مرزی و عملیاتی

یک راکتور با قطر خارجی ۰/۰۳۸ متر، قطر داخلی ۰/۰۲۶ متر و ارتفاع ۰/۲۵۵ متر در این مطالعه انتخاب شده است. شرایط فیزیکی و متغیرهای عملیاتی برای شبیه‌سازی در جدول ۱ و شکل ۲ آورده شده است.

۵-۲- روش حل مساله

به منظور دستیابی به مدل مناسب ریاضی و شبیه‌سازی راکتور فتوکاتالیستی از نرم‌افزار انسیس فلونت استفاده شده است. فلونت از پرکاربردترین نرم‌افزارهای تجاری به حوزه سی‌اف‌دی می‌باشد. در این نرم‌افزار معادلات دیفرانسیلی بقای جرم، انرژی و مومنتوم با استفاده از روش گسسته‌سازی حجم محدود به معادلات جبری تبدیل می‌شوند. در روش حجم محدود معادلات عمومی بقا در شکل انتگرالی استفاده می‌گردند، محدوده حل به تعداد معینی حجم کنترل مجاور هم تقسیم شده و معادلات در آن محدوده حل می‌گردند. کمیت‌ها

همکاران [۲۵] استفاده شده است.

۳-۲- مدل سرعت واکنش

در این کار از معادله سینتیکی به دست آمده توسط پوما و همکاران [۱۷] استفاده شده است

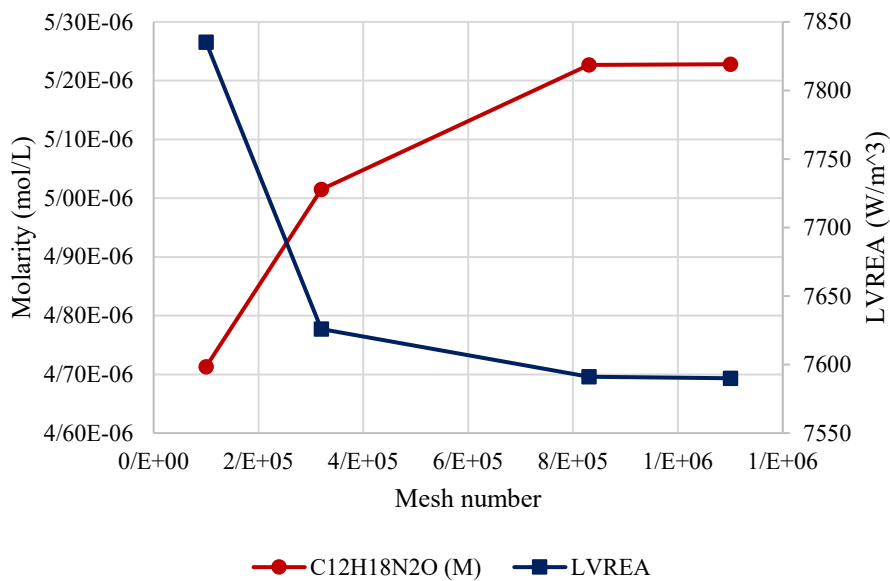
$$r_p = k_1 \times (LVREA)^m C_j^n \quad (10)$$

که در آن  $k_1$  ثابت واکنش برحسب  $\text{kg}^{(1-n)} \text{s}^{-1} \text{m}^{3m+3n-3} \text{W}^{-m}$  و  $C_j$  غلظت جزء  $j$  برحسب  $\text{kgm}^{-3}$  است. پوما و همکاران [۱۷] مجموعه‌ای از آزمایش‌های هدفمند را انجام دادند و پس از تنظیم نتایج، پارامترهای سینتیکی معادله فوق با کاتالیست دگوسا پی ۲۵ را به دست آوردند. مطابق کار آنان  $m$  و  $n$  به ترتیب برابر با ۰/۸۲ و ۱ و  $k_1$  برابر با  $7/6 \times 10^{-5} \text{kg}^{(1-n)} \text{s}^{-1} \text{m}^{3m+3n-3} \text{W}^{-m}$  است.

جدول ۲. استقلال از شبکه

Table 2. Mesh independency

LVREA(W/m <sup>3</sup> )	C <sub>12</sub> H <sub>18</sub> N <sub>2</sub> O × ۱۰ <sup>۶</sup> (M)	تعداد سلول های شبکه
۷۸۳۵/۲۳۹	۴/۷۱۳	۱۰۰۰۰۰
۷۶۲۵/۹۰۸	۵/۰۱۵	۳۲۰۰۰۰
۷۵۹۱/۰۱۷	۵/۲۲۷	۸۳۰۰۰۰
۷۵۹۰/۰۱۷	۵/۲۲۸	۱۱۰۰۰۰۰



شکل ۳. استقلال از شبکه

Fig 3. Mesh independency

تقسیم می‌کند. حلگر سی اف دی از این المان‌ها، برای ایجاد حجم‌های کنترل استفاده می‌نماید. این المان‌ها براساس شکل آن‌ها دسته‌بندی می‌شوند. در این کار تعداد ۸۳۰۰۰۰ مش شش وجهی با روش کات سل<sup>۲</sup> تولید و برای شبیه‌سازی راکتور استفاده شد.

### ۳- نتایج

#### ۳-۰- استقلال از شبکه

به منظور بررسی استقلال نتایج از شبکه‌بندی، چهار شبکه‌بندی مختلف با تعداد ۱۰۰۰۰۰، ۳۲۰۰۰۰، ۸۳۰۰۰۰ و ۱۱۰۰۰۰۰ برای شبیه‌سازی در نظر گرفته شده است. نتایج حاصل برای غلظت آلاینده

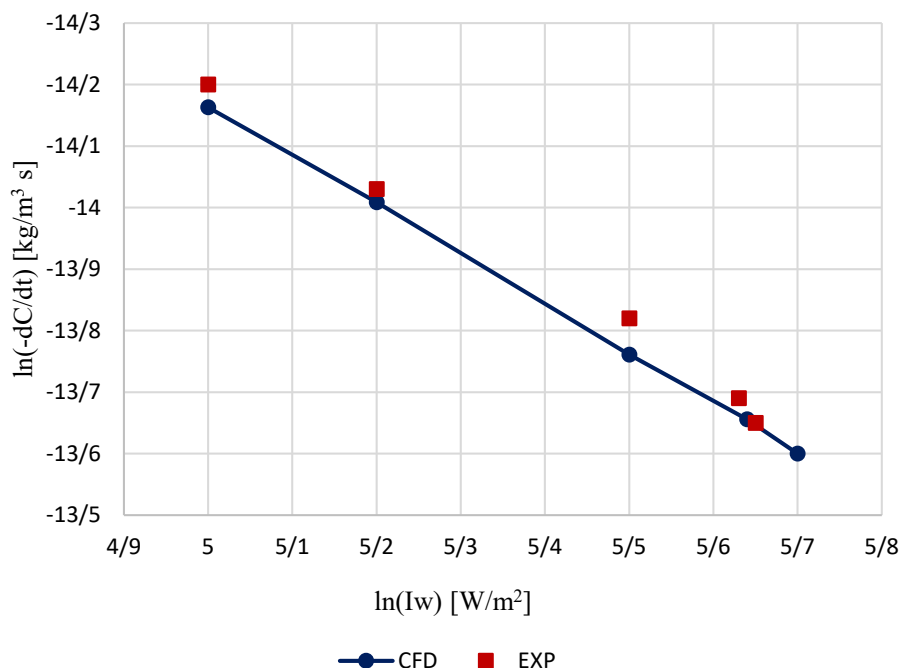
در مرکز گره‌ها محاسبه شده و جهت به دست آوردن مقادیر روی سطوح باید درون‌یابی انجام گیرد. با گسسته‌سازی معادلات حاکم بر جریان در حجم کنترل‌ها، معادلات دیفرانسیل جزئی، به یک دستگاه از معادلات جبری تبدیل می‌شوند و سپس تمامی معادلات جبری به صورت عددی حل می‌شوند. روش حجم محدود برای تمام هندسه‌های پیچیده کاربرد دارد.

#### ۲-۶- شبکه‌بندی راکتور

به منظور شبکه‌بندی سیستم مورد بررسی، از نرم‌افزار شبکه‌بندی انسیس<sup>۱</sup> استفاده شده است. شبکه، هندسه را به تعداد زیادی المان

2 Cut Cell

1 Ansys Meshing



شکل ۴. مقایسه نتایج شبیه‌سازی با داده‌های آزمایشگاهی

Fig 4. Validation of the simulation results with experimental data

جدول ۳. خطای نسبی و مطلق بین نتایج شبیه‌سازی و آزمایشگاهی

Table 3. Absolute and relative errors between CFD results and experimental data

خطای مطلق	خطای نسبی (درصد)	نتایج آزمایشگاهی پوما و همکاران [۱۷]		نتایج شبیه‌سازی	
		$\ln(Iw)$ [W/m <sup>2</sup> ]	$\ln(-dC/dt)$ [kg/m <sup>3</sup> .s]	$\ln(Iw)$ [W/m <sup>2</sup> ]	$\ln(-dC/dt)$ [kg/m <sup>3</sup> .s]
		۰/۰۳۷	-۰/۲۶۰۵۶	۵	-۱۴/۲
۰/۰۲۱	-۰/۱۴۹۶۸	۵/۲	-۱۴/۰۳	۵/۲	-۱۴/۰۰۹
۰/۰۵۹	-۰/۴۲۶۹۲	۵/۵	-۱۳/۸۲	۵/۵	-۱۳/۷۶۱
۰/۰۳۴	-۰/۲۴۸۶۳	۵/۶۳	-۱۳/۶۹	۵/۶۴	-۱۳/۶۵۶
۰/۰۰۵	-۰/۳۶۶۳	۵/۶۵	-۱۳/۶۵	۵/۷	-۱۳/۶

مناسب تشخیص داده شد.

در خروجی راکتور و متوسط انرژی جذب شده درون راکتور در جدول ۲ ارائه شده است.

### ۱-۳- اعتبارسنجی با داده آزمایشگاهی

همان‌طور که در شکل ۴ نشان داده شده است، ابتدا مقادیر متوسط نرخ واکنش با استفاده از نتایج آزمایشگاهی به دست آمده توسط پوما و همکاران [۱۷] اعتبارسنجی گردید.

داده‌های موجود در جدول ۲، در شکل ۳ با یکدیگر مقایسه شده‌اند.

با توجه به شکل ۳ و ثبات نتایج با تغییر شبکه‌بندی از تعداد ۸۳۰۰۰۰ به ۱۱۰۰۰۰۰، تعداد ۸۳۰۰۰۰ سلول برای شبیه‌سازی

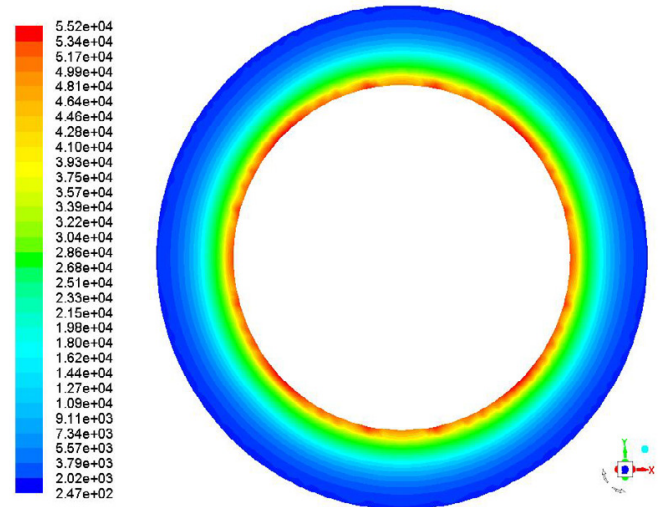
راکتور در اطراف لامپ می‌باشد و با افزایش فاصله در جهت شعاعی میزان جذب کاهش می‌یابد. مقدار جذب و شدت کاهش شعاعی وابسته به غلظت کاتالیست درون راکتور است.

### ۲-۳- اثر غلظت کاتالیست بر میزان جذب انرژی و نرخ واکنش

نرخ واکنش و انرژی جذب شده برای دو حالت ضریب انعکاس‌پذیری سطح دیواره برابر با صفر و ۹۸ درصد در غلظت‌های مختلف در شکل‌های ۶ و ۷ رسم شده است. همانطور که نتایج شکل‌های ۶ و ۷ نشان می‌دهد، با افزایش غلظت کاتالیست تا ۰/۴ گرم بر لیتر، نرخ واکنش در ابتدا افزایش می‌یابد اما در غلظت‌های بالاتر از ۰/۴ تقریباً ثابت است. اگرچه ضریب جذب محیط با افزایش غلظت کاتالیست افزایش می‌یابد اما به دلیل بالا رفتن کدورت، نفوذپذیری نور فرابنفش درون راکتور کاهش یافته و در نتیجه نرخ واکنش و انرژی جذب شده ثابت می‌ماند. نتایج شکل ۶ نشان می‌دهد در غلظت‌های پایین کاتالیست (۰/۴ گرم بر لیتر و کمتر)، به دلیل کوچک بودن ضریب جذب محیط، با افزایش ضریب انعکاس دیواره به ۹۸ درصد، نرخ واکنش تا ۵۰ درصد افزایش می‌یابد این افزایش ناشی از این امر است که محیط دارای غلظت کمتری از کاتالیست دارای ضریب جذب پایین‌تر بوده و در نتیجه میزان قابل توجهی از تابش توسط دیواره‌های راکتور دریافت می‌شود، در حالی که در غلظت‌های

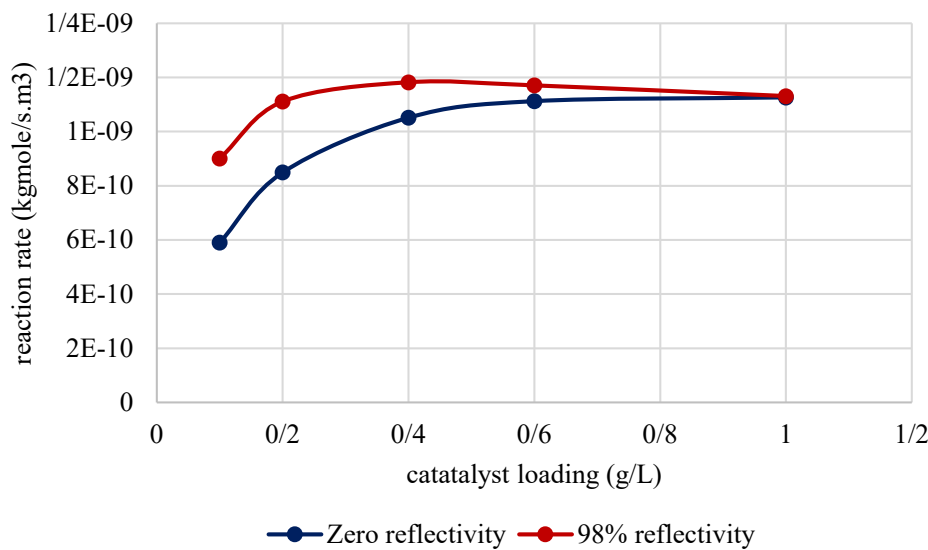
نتایج حاصل از شبیه‌سازی با دقت خوبی با نتایج آزمایشگاهی تطابق دارد به طوری که متوسط خطا ۰/۲۹ درصد و بیشینه آن ۰/۴۹ درصد می‌باشد. در جدول ۳ خطای نسبی و مطلق بین نتایج عددی و آزمایشگاهی آورده شده است.

شکل ۵، متوسط حجمی انرژی جذب شده را در صفحه‌ای عمود بر راکتور در مرکز آن با غلظت ۰/۴ گرم بر لیتر کاتالیست نشان می‌دهد. همانطور که شکل نشان می‌دهد، بیشترین میزان جذب انرژی درون



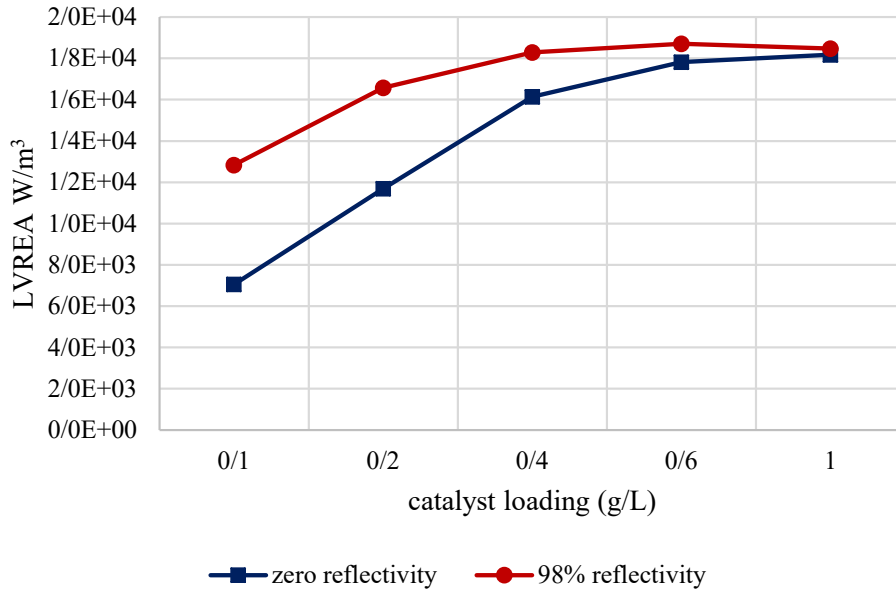
شکل ۵. پروفایل شعاعی متوسط حجمی انرژی جذب شده

Fig 5. Radial profile of LVREA



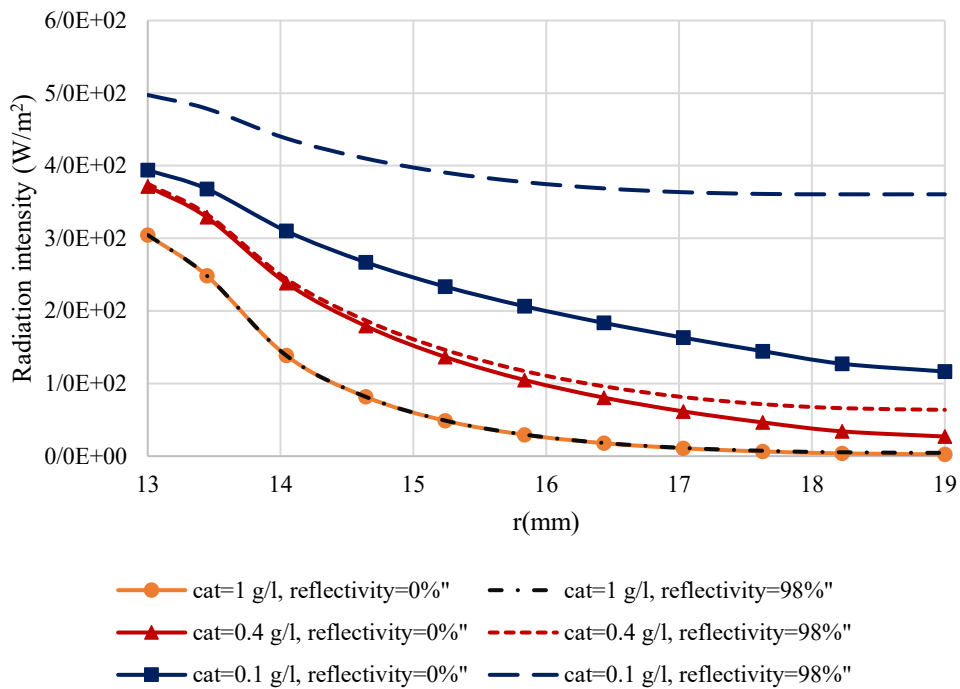
شکل ۶. نرخ واکنش در غلظت‌های مختلف کاتالیست در دو حالت ضریب انعکاس‌پذیری سطح دیواره صفر و ۹۸ درصد

Fig 6. Reaction rate at different catalyst concentration and wall reflection of zero and 98%



شکل ۷. متوسط انرژی جذب شده در غلظت‌های مختلف کاتالیست در دو حالت ضریب انعکاس‌پذیری سطح دیواره صفر و ۹۸ درصد

Fig 7. LVREA at different catalyst concentration and wall reflection of zero and 98%

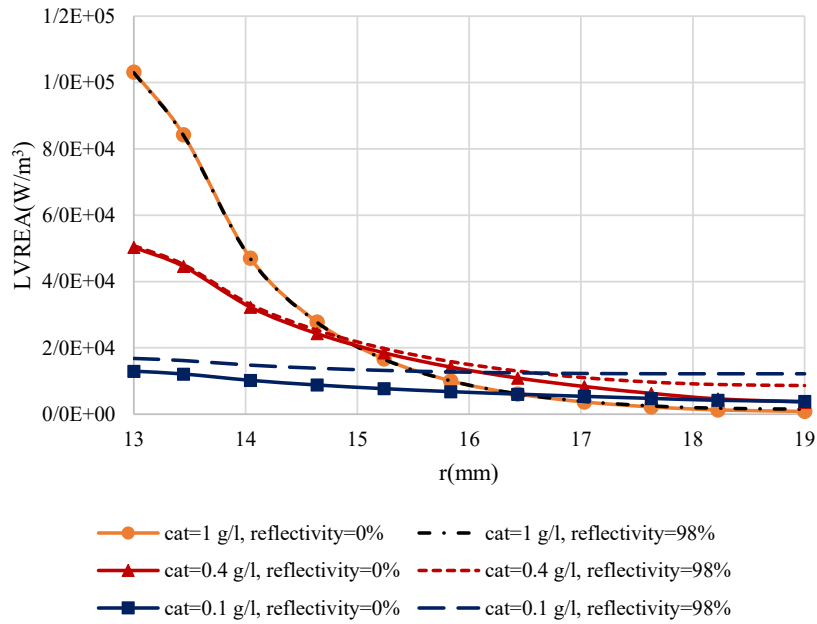


شکل ۸. شدت تابش شعاعی در دو حالت انعکاس‌پذیری سطح راکتور صفر و ۹۸ درصد

Fig 8. Radial irradiation intensity at wall reflection of 0 and 98%

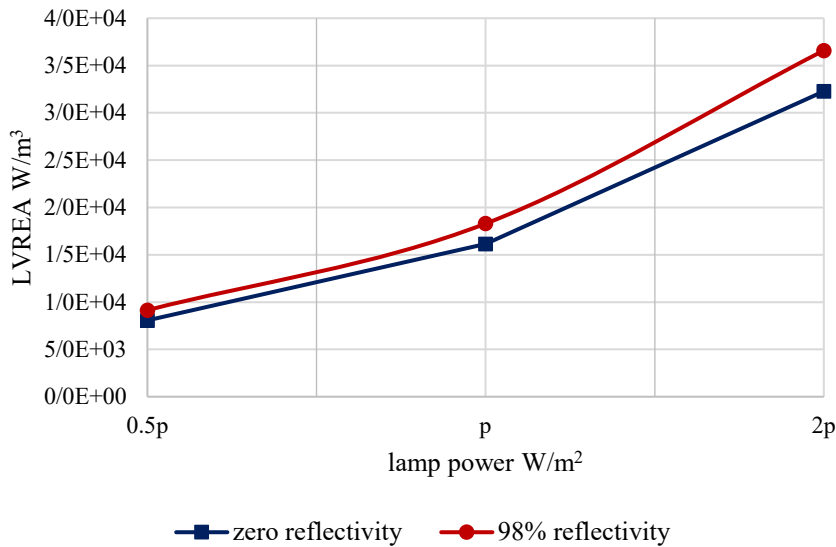
کاتالیست در شکل ۷ نمایش داده شده است. همانطور که شکل نشان می‌دهد با افزایش غلظت کاتالیست میزان انرژی جذب شده در راکتور افزایش می‌یابد که به دلیل افزایش ضریب جذب محیط است. از

زیاد (۰/۶ گرم بر لیتر و بیشتر) این افزایش تنها ۵ درصد است چرا که مقدار تابش رسیده در غلظت بالای کاتالیست به دیواره بسیار اندک است. میزان انرژی دریافت شده در راکتور در غلظت‌های مختلف



شکل ۹. متوسط انرژی جذب شده به صورت شعاعی در دو حالت انعکاس پذیری سطح راکتور صفر و ۹۸ درصد

Fig 9. Radial LVREA profile at wall reflection of 0 and 98%



شکل ۱۰. متوسط انرژی جذب شده در توان‌های مختلف لامپ در دو حالت ضریب بازگشت دیواره صفر و ۹۸ درصد

Fig 10. LVREA profile at different lamp power and wall reflection of zero and 98%

طرفی اثر انعکاس دیواره بر میزان انرژی جذب شده در غلظت‌های بالاتر کاتالیست کاهش می‌یابد.

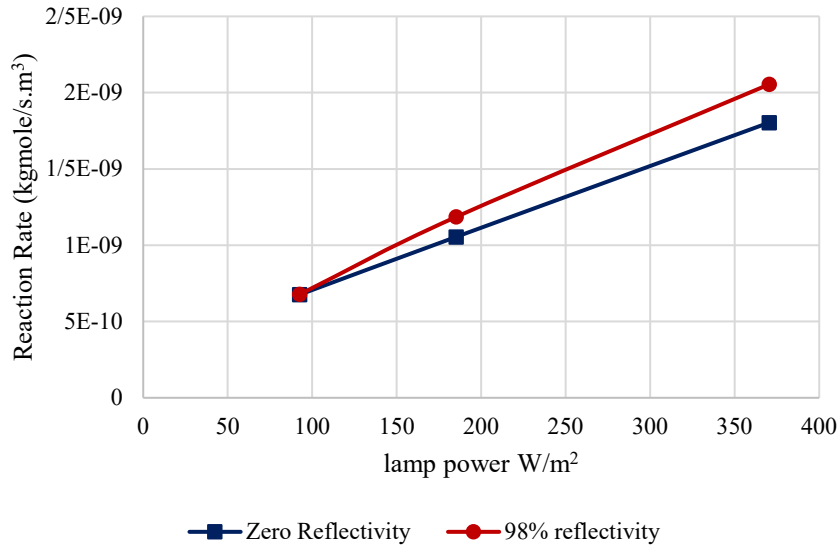
معادله ۹ بیانگر ضخامت اپتیکی<sup>۱</sup> راکتور فتوکاتالیستی است. ضخامت اپتیکی راکتور فتوکاتالیستی تابعی از ضرایب جذب و پراکنش محیط  $(\sigma + \kappa)$ ، ضخامت فضای واکنش  $[R(1-\eta)]$  و غلظت فتوکاتالیست می‌باشد. ضخامت اپتیکی از نظر فیزیکی به

جدول ۴. ضخامت اپتیکی راکتور فتوکاتالیستی در غلظت‌های مختلف کاتالیست

Table 4. Optical thickness of the photoreactor at different catalyst concentrations

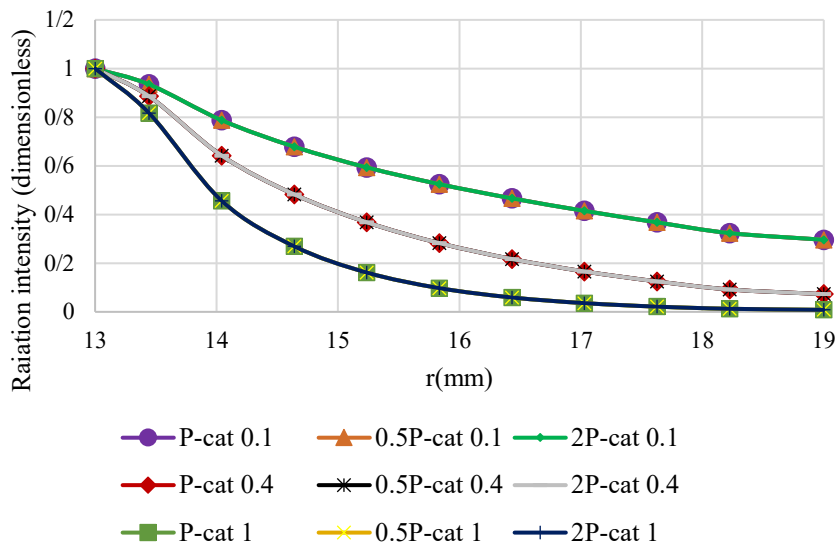
غلظت کاتالیست (g/l)	ضخامت اپتیکی
۰/۱	۱/۵۶۲۴
۰/۴	۶/۲۴۹۶
۰/۶	۹/۳۷۴۴
۰/۹	۱۴/۰۶۱۶

1 Optical Thickness



شکل ۱۱. متوسط نرخ واکنش در توان‌های مختلف لامپ در دو حالت ضریب انعکاس‌پذیری سطح دیواره صفر و ۹۸ درصد

Fig 11. Reaction rate profile at different lamp power and wall reflection of zero and 98%



شکل ۱۲. مقایسه شدت تابش بی‌بعد به صورت شعاعی در توان‌های مختلف لامپ

Fig 12. Radial profile of dimensionless irradiation intensity at different lamp powers

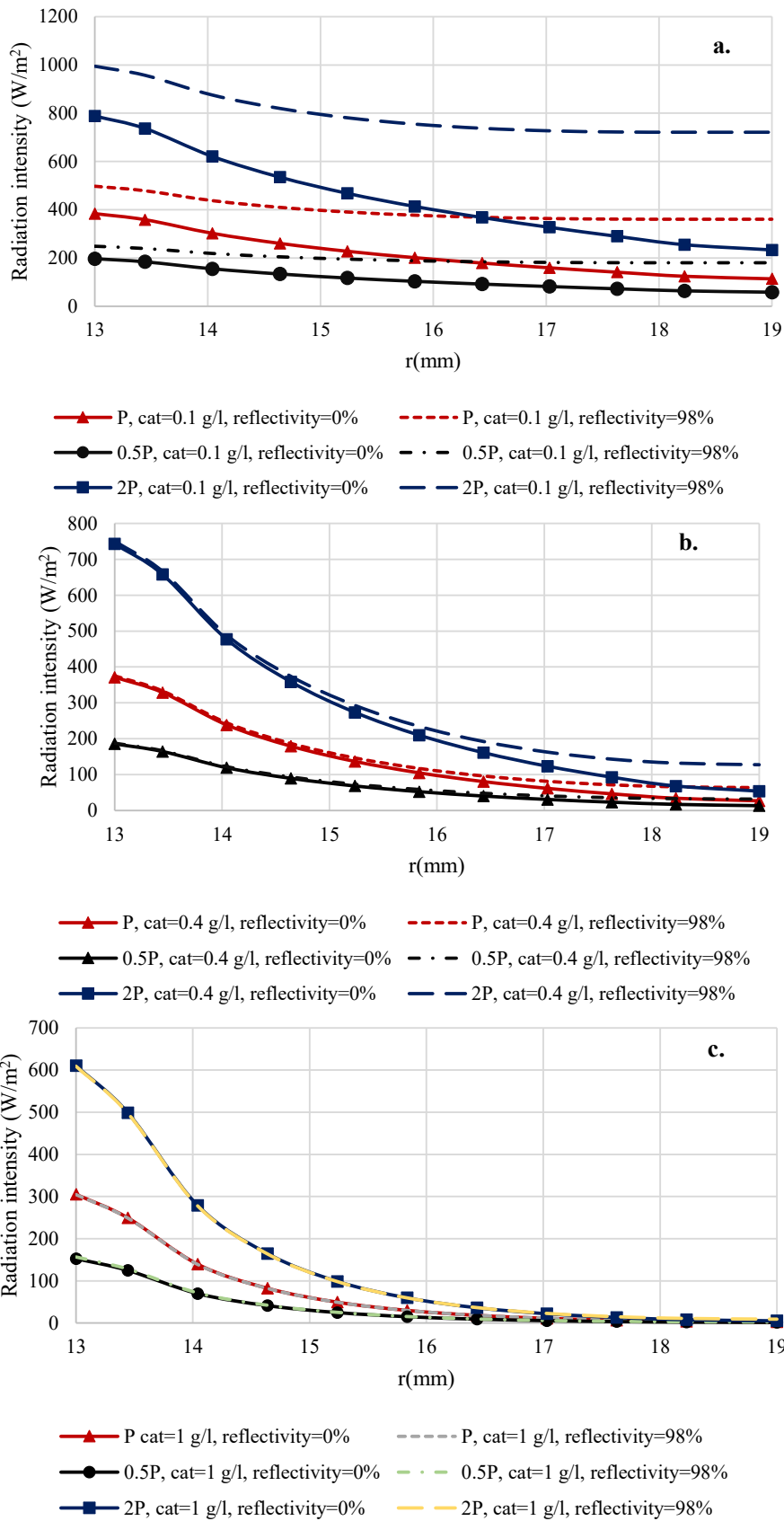
بهبود یافته برای این راکتور حدود ۶ می‌باشد.

$$\tau = (\sigma + \kappa)R(1 - \eta)C_{cat} \quad (11)$$

مقدار و نحوه کاهش شدت تابش در طراحی قطر داخلی و خارجی راکتور اهمیت بالایی دارد. برای بررسی اثر محیط بر چگونگی کاهش

معنای نسبت ضخامت فضای واکنش به فاصله پویش آزاد فوتون‌ها<sup>۱</sup> در سوپانسیون می‌باشد [۱۱]. جدول ۴ ضخامت اپتیکی راکتور فتوکاتالیستی در غلظت‌های مختلف کاتالیست آورده شده است. با توجه به نتایج به دست آمده در شکل‌های ۷ و ۱۰، ضخامت اپتیکی

1 Photons Mean Free Path



شکل ۱۳. مقایسه شدت تابش به صورت شعاعی در توان‌های مختلف لامپ و در غلظت کاتالیست برابر با الف) ۰/۱ گرم بر لیتر ب) ۰/۴ گرم بر لیتر ج) ۱ گرم بر لیتر

Fig 13. Radial profile of irradiation at different lamp power and catalyst concentration a. 0.1g/l, b. 0.4g/l and c. 1g/l



نشان می‌دهد اثر ضریب انعکاس‌پذیری سطح دیواره در توان دو برابری لامپ تنها یک درصد بیشتر از توان اولیه لامپ بوده است. پروفایل شدت تابش به تابش اولیه (تابش بی‌بعد) در توان‌های مختلف لامپ، دو برابر و نیم برابر مقدار اولیه ( $P=1.85/2$ ) در شکل ۱۲ رسم شده است. نتایج نشان می‌دهد، نحوه کاهش شدت تابش بی‌بعد به صورت شعاعی تابعی از ضریب جذب محیط (که متأثر از غلظت کاتالیست است) است به طوری که در فاصله ۱ میلی‌متری از لامپ ( $r=14\text{ mm}$ ) در غلظت ۱ گرم بر لیتر، میزان تابش به ۴۷ درصد مقدار اولیه و در غلظت ۰/۱ گرم بر لیتر به ۸۰ درصد مقدار اولیه کاهش می‌یابد. اگرچه استفاده از لامپ با توان بالا اثر مستقیمی بر افزایش نرخ واکنش دارد اما تابش بی‌بعد، تابعی از ضریب جذب محیط می‌باشد و همواره درصد ثابتی از توان لامپ به دیواره‌های راکتور می‌رسد، به طوری که در غلظت‌های کاتالیست برابر با ۱ و ۰/۴ گرم بر لیتر حدود یک درصد و در غلظت ۰/۱ گرم بر لیتر حدود ۷ درصد میزان تشعشع لامپ به دیواره‌ها می‌رسد. این عدد مستقل از توان لامپ می‌باشد و تنها تابعی از غلظت کاتالیست است.

در شکل ۱۳ نمودار مقایسه‌ای شدت تابش به صورت شعاعی در توان‌های مختلف لامپ و در غلظت کاتالیست برابر با ۰/۱، ۰/۴ و ۱ گرم بر لیتر آورده شده است. همانطور که در توضیح شکل ۱۲ ذکر شد همواره مقدار ثابتی از توان لامپ به دیواره‌های راکتور می‌رسد که تابعی از غلظت کاتالیست می‌باشد. شکل ۱۳ نشان می‌دهد که افزایش توان لامپ باعث افزایش میزان تابش رسیده به دیواره‌ها شده و در نتیجه با افزایش ضریب انعکاس، متوسط تابش درون راکتور افزایش می‌یابد اما در غلظت‌های بالا (۱ گرم بر لیتر) به دلیل ناچیز بودن میزان تابش رسیده به دیواره‌ها افزایش ضریب انعکاس‌پذیری حتی در توان‌های بالای لامپ، بی‌اثر است. در نتیجه افزایش توان لامپ برای بهره‌بردن از اثر انعکاس‌پذیری دیواره‌ها، تنها زمانی سودمند خواهد بود که غلظت مناسبی از کاتالیست انتخاب شود.

#### ۴- نتیجه‌گیری

در این پژوهش راکتور دوغابی فتوکاتالیستی با استفاده از دینامیک سیالات محاسباتی شبیه‌سازی شده است. ابتدا نتایج حاصل از شبیه‌سازی با داده‌های آزمایشگاهی معتبر اعتبارسنجی شده و سپس از مدل اعتبارسنجی شده برای بررسی رفتار سیستم و پیش‌بینی

شدت تابش و میزان جذب انرژی در راکتور، نمودار شدت تابش و انرژی جذب شده به صورت شعاعی در غلظت‌های مختلف کاتالیست ۱ گرم بر لیتر، ۰/۴ گرم بر لیتر و ۰/۱ گرم بر لیتر به ترتیب در شکل‌های ۸ و ۹ رسم شده است. شکل ۸ نشان می‌دهد که در غلظت‌های کاتالیست بالاتر از ۰/۴ گرم بر لیتر، میزان تابش در جهت شعاعی به سرعت افت می‌کند و عمده میزان تابش در نزدیکی لامپ است در نتیجه حجمی از راکتور که مقدار تابش کمتری در مقایسه با غلظت‌های پایین‌تر کاتالیست دریافت می‌کند، بیشتر است. این امر بر اثرگذاری انعکاس دیواره بر شدت تابش درون راکتور نیز تأثیرگذار بوده است. به گونه‌ای که در غلظت کاتالیست برابر با ۰/۱ گرم بر لیتر، افزایش ضریب انعکاس دیواره به ۹۸ درصد متوسط تابش درون راکتور را ۷۵ درصد افزایش داده این در حالیست که در غلظت ۱ گرم بر لیتر افزایشی در متوسط تابش مشاهده نمی‌شود. در شکل ۹ متوسط انرژی جذب شده به صورت شعاعی رسم شده است. نتایج شکل ۹ نشان می‌دهد که در غلظت‌های بالاتر از ۰/۴ گرم بر لیتر میزان انرژی جذب شده در نقاط دور از لامپ (از میانه راکتور به بعد) به شدت کاهش می‌یابد بنابراین می‌بایست در غلظت‌های بالاتر کاتالیست از راکتور با قطر کوچکتر استفاده کرد. استفاده از دیواره‌هایی با ضریب انعکاس بالاتر نیز تنها در غلظت‌های پایین موثر است.

#### ۳-۳- اثر توان لامپ بر میزان جذب انرژی و نرخ واکنش

برای بررسی اثر توان لامپ بر میزان جذب انرژی در راکتور با انعکاس ۹۸ درصد دیواره، میزان انرژی جذب شده و نرخ واکنش در توان‌های مختلف لامپ با غلظت کاتالیست ۰/۴ گرم بر لیتر به ترتیب در شکل‌های ۱۰ و ۱۱ رسم شده است. نتایج شکل ۱۱ نشان می‌دهد با دو برابر کردن توان اولیه لامپ (۲P)، نرخ واکنش به میزان ۱۰۰ درصد افزایش پیدا می‌کند، همچنین کاهش توان لامپ به نصف مقدار اولیه، نرخ واکنش را ۵۰ درصد کاهش می‌دهد. در ادامه اثر توان لامپ در انعکاس‌پذیری سطح دیواره ۹۸ درصد بررسی شد. نتایج نشان می‌دهد افزایش انعکاس‌پذیری دیواره در مقایسه با دیواره بدون انعکاس، نرخ واکنش را ۱۲/۲ درصد افزایش می‌دهد، در حالی که این میزان از افزایش در توان اولیه لامپ به کار رفته در راکتور ۱۱ درصد است. با کاهش توان لامپ به نصف مقدار اولیه، هیچگونه افزایشی در نرخ واکنش با افزایش انعکاس دیواره مشاهده نمی‌شود. این مقایسه

$s, z$	فاصله (m)
$d$	قطر (m)
<b>علائم یونانی</b>	
$\kappa$	ضریب جذب تابش محیط ( $m^{-1}$ )
$\sigma$	ضریب پراکنش محیط ( $m^{-1}$ )
$\theta$	مختصات زاویه‌ای (Radian)
$\varphi$	زاویه فضایی (Radian)
$\eta$	شعاع المان لامپ در مدل حجمی (m)
$\rho$	دانسیته ( $kg/m^3$ )
$\omega$	فرکانس زاویه‌ای (steradian)
$\zeta$	عدد بی‌بعد قطر ذره
$\lambda$	طول موج (Hz)
$\eta$	نسبت قطر داخلی به قطر خارجی (بی‌بعد)
<b>زیرنویس</b>	
$U$	فوتون
$i$	جزء
$cat$	کاتالیست

عملکرد آن در شرایطی متفاوت بهره گرفته شده است.

ابتدا اثر غلظت کاتالیست بر میزان جذب انرژی و نرخ واکنش در دو حالت ضریب انعکاس‌پذیری سطح دیواره برابر با صفر و ۹۸ درصد بررسی گردید. نتایج نشان می‌دهد اثر انعکاس دیواره در غلظت‌های پایین کاتالیست، به دلیل میزان جذب پایین محیط واکنش، بر نرخ واکنش بیشتر است. افزایش انعکاس دیواره به میزان ۹۸ درصد در غلظت‌های ۰/۴ و ۰/۶ گرم بر لیتر کاتالیست، نرخ واکنش را به ترتیب به میزان ۵۰ درصد و پنج درصد افزایش می‌دهد. در ادامه اثر توان لامپ بر میزان جذب انرژی و نرخ واکنش بررسی شد. اگرچه افزایش توان لامپ به دو برابر مقدار اولیه، نرخ واکنش را ۱۰۰ درصد افزایش می‌دهد اما اثر چشمگیری بر میزان تابش رسیده به دیواره‌های راکتور ندارد. با دو برابر کردن توان لامپ نرخ واکنش در حالت دیواره با ضریب انعکاس ۹۸ درصد به میزان ۱۲/۲ درصد افزایش می‌یابد که در مقایسه با افزایش ۱۱ درصدی برای شدت اولیه لامپ به معنای بهبود ۱/۲ درصدی است. در انتها اثر غلظت کاتالیست و توان لامپ بر چگونگی کاهش تشعشع در محیط بررسی شد. نتایج نشان داد پروفایل شعاعی تابش در راکتور تابع شدیدی از غلظت کاتالیست می‌باشد این در شرایطی است که افزایش توان لامپ اثری بر تابش بی‌بعد نداشته و در هر غلظت از کاتالیست همواره درصد ثابتی از تابش اولیه سطح لامپ به دیواره‌های راکتور می‌رسد.

### فهرست علائم

#### علائم انگلیسی

$A$	مساحت ( $m^2$ )
$C$	غلظت ( $mol/m^3$ )
$R$	نرخ واکنش (در معادله (۳)) ( $mol/m^3s$ )
$R$	شعاع خارجی (در معادله (۹)) (m)
$T$	دمای مطلق (K)
$M$	جرم مولی (g/mol)
$h$	طول راکتور (m)
$W$	غلظت کاتالیست ( $kg/m^3$ )
$r$	فاصله شعاعی (m)

### منابع و مراجع

- [1] P.C. Vandevivere, R. Bianchi, W. Verstraete, Treatment and reuse of wastewater from the textile wet-processing industry: Review of emerging technologies, Journal of Chemical Technology and Biotechnology, 72(4) (1998) 289-302.
- [2] A. Payan, M. Fattahi, B. Roozbehani, Synthesis, characterization and evaluations of TiO<sub>2</sub> nanostructures prepared from different titania precursors for photocatalytic degradation of 4-chlorophenol in aqueous solution, Journal of Environmental Health Science and Engineering, 16(1) (2018) 41-54.
- [3] R. Shahbazi, A. Payan, M. Fattahi, Preparation, evaluations and operating conditions optimization of nano TiO<sub>2</sub> over graphene based materials as the photocatalyst for

- [13] R. Brandi, O. Alfano, A. Cassano, Evaluation of radiation absorption in slurry photocatalytic reactors. 1. Assessment of methods in use and new proposal, *Environmental science & technology*, 34(12) (2000) 2623-2630.
- [14] C. Casado, J. Marugán, R. Timmers, M. Muñoz, R. van Grieken, Comprehensive multiphysics modeling of photocatalytic processes by computational fluid dynamics based on intrinsic kinetic parameters determined in a differential photoreactor, *Chemical Engineering Journal*, 310 (2017) 368-380.
- [15] J. Chen, B. Deng, C.N. Kim, Computational fluid dynamics (CFD) modeling of UV disinfection in a closed-conduit reactor, *Chemical Engineering Science*, 66(21) (2011) 4983-4990.
- [16] A. Fluent, 14.5, theory guide; ansys, Inc., Canonsburg, PA, (2012).
- [17] G. Li Puma, J.N. Khor, A. Brucato, Modeling of an annular photocatalytic reactor for water purification: oxidation of pesticides, *Environmental science & technology*, 38(13) (2004) 3737-3745.
- [18] H.W. Oh, *Applied computational fluid dynamics*, BoD-Books on Demand, 2012.
- [19] M. Bagheri, M. Mohseni, Computational fluid dynamics (CFD) modeling of VUV/UV photoreactors for water treatment, *Chemical Engineering Journal*, 256 (2014) 51-60.
- [20] R.B. Bird, *Transport phenomena*, *Applied Mechanics Reviews*, 55(1) (2002) R1-R4.
- [21] J. Delgado, Molecular diffusion coefficients of organic compounds in water at different temperatures, *Journal of phase Equilibria and Diffusion*, 28(5) (2007) 427-432.
- [22] A.E. Cassano, O.M. Alfano, Reaction engineering of suspended solid heterogeneous photocatalytic reactors, *Catalysis today*, 58(2-3) (2000) 167-197.
- [23] H. Photocatalysis, *From Fundamentals to Green Applications*, in, Springer, Berlin, 2016.
- [24] Y. Boyjoo, M. Ang, V. Pareek, Some aspects of photocatalytic reactor modeling using computational degradation of phenol, *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry*, 364 (2018) 564-576.
- [4] M.N. Chong, B. Jin, C.W. Chow, C. Saint, Recent developments in photocatalytic water treatment technology: a review, *Water research*, 44(10) (2010) 2997-3027.
- [5] S.A. Mirzaee, N. Jaafarzadeh, H.T. Gomes, S. Jorfi, M. Ahmadi, Magnetic titanium/carbon nanotube nanocomposite catalyst for oxidative degradation of Bisphenol A from high saline polycarbonate plant effluent using catalytic wet peroxide oxidation, *Chemical Engineering Journal*, 370 (2019) 372-386.
- [6] S.R. Hirshorn, L.D. Voss, L.K. Bromley, *NASA Systems Engineering Handbook*, (2017).
- [7] Y. Boyjoo, M. Ang, V. Pareek, CFD simulation of a pilot scale slurry photocatalytic reactor and design of multiple-lamp reactors, *Chemical Engineering Science*, 111 (2014) 266-277.
- [8] M. Martín-Sómer, C. Pablos, R. van Grieken, J. Marugán, Influence of light distribution on the performance of photocatalytic reactors: LED vs mercury lamps, *Applied Catalysis B: Environmental*, 215 (2017) 1-7.
- [9] A. Turolla, D. Santoro, J.R. De Bruyn, F. Crapulli, M. Antonelli, Nanoparticle scattering characterization and mechanistic modelling of UV-TiO<sub>2</sub> photocatalytic reactors using computational fluid dynamics, *Water research*, 88 (2016) 117-126.
- [10] G. Asadollahfardi, M. Noori, M. Asadi, M. Taherioun, The comparison of discrete ordinate and Monte Carlo methods in solving of the radiation transfer equations in a heterogenous reactor, *Journal of Water Supply: Research and Technology—AQUA*, 67(1) (2017) 109-118.
- [11] G.L. Puma, A. Brucato, Dimensionless analysis of slurry photocatalytic reactors using two-flux and six-flux radiation absorption-scattering models, *Catalysis Today*, 122(1-2) (2007) 78-90.
- [12] R.L. Romero, O.M. Alfano, A.E. Cassano, Radiation field in an annular, slurry photocatalytic reactor. 2. Model and experiments, *Industrial & engineering chemistry research*, 42(12) (2003) 2479-2488.

intensity distribution in heterogenous photocatalytic reactors, Asia-Pacific Journal of Chemical Engineering, 3(2) (2008) 171-201.

fluid dynamics, Chemical Engineering Science, 101 (2013) 764-784.

[25] V. Pareek, S. Chong, M. Tadé, A.A. Adesina, Light

چگونه به این مقاله ارجاع دهیم

M. Nourizade, M. Rahmani, A. Javadi, *Simulation of a Photocatalytic Reactor Using Finite Volume and Discrete Ordinate Method: A Parametric Study*, Amirkabir J. Mech Eng., 53(Special Issue 1) (2021) 573-588.

DOI: 10.22060/mej.2019.16699.6425

