

مدلسازی شبکه‌ای بیوفیلتر در تصفیه جریان‌های گازی آلوده به ترکیبات آروماتیک

فرزاد جانی، میترا دادور*

دانشگاه صنعتی امیرکبیر

پست الکترونیکی: dadvar@aut.ac.ir

چکیده

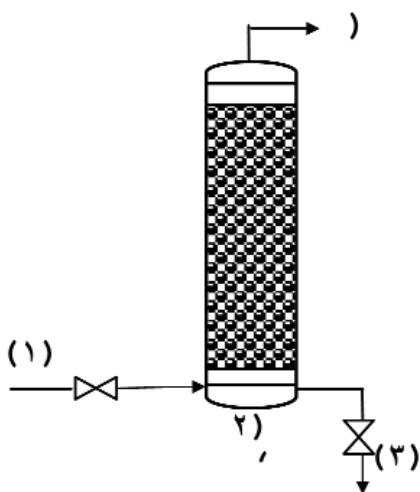
بیوفیلتراسیون یکی از مؤثرترین روش‌های زیستی برای تصفیه جریان هوای آلوده با غلظت کم آلاینده است. راندمان این فرآیند تا حد زیادی به ساختمان فضاهای خالی در بستر بیوفیلتر وابسته است. مدل‌های قبلی برای این فرآیند، بر اساس معادلات انتقال و واکنش در سیستم‌های پیوسته بوده، بدون آن که تأثیر مورفولوژی فضاهای خالی، یعنی اندازه آن‌ها و نحوه اتصالشان در نظر گرفته شود. در این مقاله تصفیه هوای حاوی ترکیبات آروماتیکی (تولوئن، اتیل بنزن و زایلن) با استفاده از مدل شبکه سه بعدی برای فضاهای خالی مدلسازی شده و تأثیر افزایش ضخامت بیوفیلتر بر مورفولوژی فضاهای خالی در نظر گرفته شد. این مدل تأثیر رشد بیومس در ایجاد گرفتگی در بستر، کانالیزه شدن جریان و به دنبال آن افزایش افت فشار و کاهش راندمان حذف آلاینده را پیش بینی کرد. مقایسه نتایج به دست آمده از مدلسازی ریاضی با اطلاعات تجربی توافق خوبی رانشان می‌دهد.

واژگان کلیدی: بیوفیلتر، مدلسازی، مدل شبکه‌ای منافذ، رشد بیومس، TEX.

۱. مقدمه

با تشدید قوانین زیست محیطی به منظور جلوگیری از آلودگی هوا، مسأله کنترل انتشار آلاینده‌های گازی از اهمیت خاصی برخوردار شده است. در صنایع نفت به علت نشت از تانکرهای ذخیره‌کننده محصولات نفتی، شکستن لوله‌های انتقال و عوامل پیش‌بینی نشده دیگر، بعضی از ترکیبات نفتی به دلیل فراریت بالا در هوا منتشر می‌شوند. یکی از انواع هیدروکربن‌های نفتی که متأسفانه توجه کمتری به آلودگی حاصل از آن شده است گروه TEX است. این ترکیبات حدود ۱۸ درصد وزنی بنزین را نیز شامل می‌شوند [۱].

بیوفیلترها از اواسط دهه ۱۹۵۰ جهت کنترل بوی کارخانه‌های کمپوست سازی، تصفیه خانه‌های فاضلاب و بعضی فرآیندهای صنعتی دیگر، مورد استفاده قرار گرفتند. در مورد کاربردهای بالقوه بیوفیلترها می‌توان به صنایع تولیدکننده مواد شیمیایی، مواد دارویی، پلیمر و پلاستیک، صنایع رنگ، فرآیندهای پوشش دهی سطح، صنایع پتروشیمی و صنایع تولید و



شکل ۱: ساختمان بیوفیلتر برای تصفیه جریان‌های گازی آلوده،
(۱) جریان هوای ورودی، (۲) بستر بیوفیلتر، (۳) شیر خروج جریان زمان
شست‌وشوی بستر، (۴) جریان هوای خروجی

مشخصات محیط متخلخل، رابطه‌ای برای تغییرات ضخامت بیوفیلیم با گذشت زمان ارائه نمودند [۱۰]. به خاطر پیچیدگی‌های مکانیسم‌های مختلف در بیوفیلتر، مدل‌سازی آن مشکل است و بیشتر مدل‌های ارائه شده فقط در فرضیاتی مانند درجه سینتیک و شکل بیوفیلیم با هم تفاوت دارند. در مدل حاضر تأثیر مورفولوژی فضاهای خالی، یعنی شکل مسیرهای جریان و نحوه اتصال آن‌ها در محیط متخلخل بستر مورد توجه قرار گرفته است.

در این مقاله ابتدا مدل شبکه‌ای منافذ^۱ که ما از آن استفاده کردیم، توضیح داده می‌شود. سپس مسأله افت فشار در شبکه مورد بررسی قرار می‌گیرد. پس از آن جزییات مدل انتقال جرم و واکنش در شبکه گلوها ارائه می‌شود و در ادامه در مورد روش حل معادلات توضیح داده می‌شود. به منظور ارزیابی نتایج مدل‌سازی، بیوفیلتری با مشخصات ساختمانی ارائه شده در جدول (۱) شبیه‌سازی شده و نتایج مدل ریاضی با داده‌های تجربی این سیستم مقایسه شده است.

جدول ۱: شرایط عملیاتی و مشخصات بیوفیلتر

شبیه‌سازی شده [۱۱]

مقدار	مشخصات
مشخصات بیوفیلتر	
۱/۱۹	ارتفاع (m)
۰/۱	قطر (m)
۰/۱۸۵	فاصله شیرهای نمونه برداری (m)
۱	ارتفاع پر شده (m)
شرایط عملیاتی	
۱۲۰	زمان اقامت‌گاز (s)
۰/۰۰۰۲-۰/۰۰۰۶	غلظت ورودی آلاینده‌ها (kg/m ³)

۲. مدل شبکه‌ای بیوفیلتر

هر چند که در سال‌های اخیر مدل‌های ریاضی فراوانی برای بررسی عملکرد بیوفیلترها ارائه شده است، اما در این مدل‌ها تشریح پدیده‌ها در کل بیوفیلتر با استفاده از معادلات سیستم‌های پیوسته^۲ مورد توجه واقع شده است. به طور کلی، هر محیط متخلخلی را می‌توان معادل با شبکه‌ای از گلوها و گره‌ها در نظر گرفت. در اینجا، مسیرهای عبور جریان در محیط متخلخل را گلو^۳ و محل اتصال آنها به یکدیگر را گره^۴ می‌نامیم.

پالایش نفت اشاره کرد [۲]. در شکل (۱) شمایی از یک بیوفیلتر برای تصفیه جریان‌های گازی آلوده نشان داده شده است.

بیوفیلترها شامل بستری حاوی مواد آلی مانند زغال سنگ، کمپوست یا مواد معدنی سازگار هستند که هم به عنوان نگهدارنده توده زنده فعال و هم به عنوان منبع مغذی برای رشد میکروب‌ها مورد استفاده قرار می‌گیرند. میکروارگانیسم‌ها در یک بیوفیلیم روی سطح بستر یا در لایه آب اطراف آکنه‌های بستر رشد می‌کنند. هوای آلوده ضمن عبور از بستر بیوفیلتر، آلاینده‌های خود را به بیوفیلیم تشکیل شده یعنی جایی که تجزیه بیولوژیکی توسط توده زنده انجام می‌شود، انتقال می‌دهد. مواد آلاینده در بیوفیلیم توسط میکروارگانیسم‌ها مصرف شده یا تخریب خواهند شد، به این ترتیب میزان آلاینده در جریان هوای خروجی از بیوفیلتر کاهش می‌یابد. در بیوفیلترها فرآیندهایی مانند جذب سطحی، نفوذ، جذب توسط مایع و تجزیه زیستی آلاینده صورت می‌گیرد. با مدل‌سازی ریاضی این فرآیند، می‌توان میزان کاهش یک آلودگی خاص در بیوفیلتر را پیش بینی کرد [۳]. با توجه به استفاده روز افزون از بیوفیلترها، تلاش گسترده‌ای به منظور مدل‌سازی این سیستم‌ها آغاز شد. مدل‌سازی بیوفیلتر توسط اوتنگراف (۱۹۷۷) شروع شد. او از فرض‌های ساده کننده‌ای برای انتقال جرم و سینتیک واکنش استفاده کرد و معادلات را به صورت تحلیلی حل کرد. سپس با مقایسه نتایج مدل‌سازی با داده‌های آزمایشگاهی مربوط به حذف تولوئن، اتیل استات، بوتیل استات و بوتانل از هوای آلوده به ارزیابی نتایج پرداخت [۴]. در مدلی که توسط زاروک و همکاران (۱۹۹۳) ارائه شد، متانول و اکسیژن سابسترات‌های مؤثر بر سرعت واکنش در نظر گرفته شد و نتایج به دست آمده از این مدل با نتایج آزمایشگاهی مربوط به حذف متانول مقایسه شد [۵]. در سال ۱۹۹۳ شریف دین و همکاران مدلی با در نظر گرفتن محدودیت اکسیژن و کربن در سینتیک واکنش ارائه کردند [۶]. دشیوسس و همکاران (۱۹۹۴) برای اولین بار رفتار گذرا در بیوفیلیم و جزییات فرآیندهای نفوذ و واکنش در آن را مورد توجه قرار داده و نتایج به دست آمده از مدل‌سازی با اطلاعات تجربی مربوط به حذف مخلوط متیل اتیل کتون و متیل ایزوبوتیل کتون مقایسه کردند [۶]. در سال ۱۹۹۵ تأثیر تغییر غلظت ورودی آلاینده در مدلی توسط هودگ و دوینی مورد بررسی قرار گرفت. در این مدل از توزیع آلاینده در بیوفیلیم صرف نظر شده و واکنش درجه یک در نظر گرفته شد. نتایج این مدل‌سازی با اطلاعات مربوط به حذف اتانول ارزیابی شد [۷]. در مدل‌سازی دیگری نکوین و همکاران (۱۹۹۷) به بررسی میزان حذف ترکیبات آروماتیکی (تولوئن، اتیل بنزن و زایلن) پرداخته و نتایج خود را با نتایج تجربی مقایسه کردند [۸]. زاروک و همکاران در سال ۱۹۹۷ مدلی را با در نظر گرفتن شرایط ناپایدار برای مخلوط آلاینده‌ها توسعه دادند و نتایج این مدل با داده‌های تجربی مخلوط بنزن و تولوئن مقایسه شد [۹]. آلونسو و همکاران در سال ۱۹۹۷ مدلی را برای شبیه‌سازی بیوفیلتر جهت تصفیه تولوئن ارائه کردند و در آن با توجه به ابعاد آکنه‌های کربن فعال و

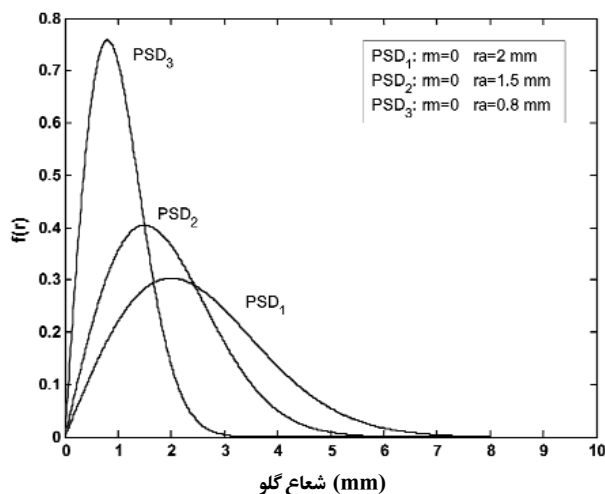
1-Pore network model
3-Pore

2-Continuum
4-Node

شکل (۲) نشان دهنده توزیع اندازه گلوها است که در شبیه سازی‌های انجام شده از آن‌ها استفاده شد. در مورد گلوها فرض شد که طول آن‌ها با هم مساوی باشد. البته مانند شعاع گلوها، طول گلوها را نیز می‌توان با استفاده از یک توزیع آماری به دست آورد اما چون اطلاعات تجربی در مورد طول گلوها وجود ندارد، طول آن‌ها مساوی در نظر گرفته شده‌اند به طوری که:

$$\frac{l}{r_a} \approx 10 \quad (2)$$

که l طول گلو است [۱۴ و ۱۳].



شکل ۲: توابع $f(r)$ بر حسب r که در محاسبات استفاده شده‌اند

با توجه به این که ارتفاع پر شده بیوفیلتر شبیه سازی شده، برابر با ۱۰۰ cm است، بنابراین با فرض این که شعاع متوسط گلوها ۰/۲ cm و طول گلوها ۲ cm باشد، می‌توان بستر پر شده بیوفیلتر را به صورت یک شبکه مکعبی سه بعدی $۵۰ \times ۵۰ \times ۵$ با عدد اتصال $Z=۶$ در نظر گرفت. در اینجا لازم به توضیح است که در روش مدلسازی که ما ارائه کرده ایم می‌توان از هر نوع شکل شبکه‌ای و با هر معادله $f(r)$ استفاده کرد.

۳. فرضیات و معادلات حاکم بر مدل

در این مدل، فضای متخلخل بیوفیلتر به صورت شبکه‌ای از گلوهای استوانه‌ای در نظر گرفته شده که در گره‌ها به یکدیگر متصل‌اند و فرض شده که گره‌ها نقاط اختلاط کامل جریان باشند. موازنه جرم در هر گره، با مسیرهای اطراف آن صورت می‌گیرد. شکل (۳) ساختمان گلوهای عبور جریان و نیز مکانیسم‌های انتقال در آن‌ها را نشان می‌دهد. از آنجاکه طول گلوها نسبت به قطر آن‌ها زیاد است، هر یک از آن‌ها را می‌توان یک محیط پیوسته در نظر گرفته و معادلات جریان گاز در داخل آن‌ها و همچنین معادلات انتقال جرم آلاینده به بیوفیلیم و انجام واکنش در آن را نوشت.

عدد اتصال Z ، نشان دهنده تعداد گلوهای است که در هر گره به هم متصل شده‌اند. به هر حال می‌توان از هر نوع شبکه‌ای که با ساختمان محیط متخلخل نزدیکی بیشتری داشته باشد، استفاده کرد. اما در صورتی که عدد اتصال متوسط در دو شبکه یکسان باشد، رفتار شبکه‌ها کاملاً مشابه خواهد بود [۱۲].

در مدل شبکه‌ای بیوفیلتر، مکانیسم‌های انتقال و واکنش در بیوفیلیم، در هر یک از گلوهای بستر متخلخل و در شبکه گلوها یعنی کل بیوفیلتر بررسی می‌شود. مدل شبکه‌ای ارائه شده، پدیده‌های انتقال و واکنش در بیوفیلتر را به طور واقع بینانه‌تری در نظر گرفته و اثر رشد بیوفیلیم در تغییر ساختمان فضاهای خالی را نیز در نظر می‌گیرد. کوچک شدن و گرفتگی گلوها در اثر رشد بیومس بر عملکرد بیوفیلتر تأثیرگذار است، به طوری که جریان هوا در گلوها محدود شده و افت فشار افزایش خواهد یافت. همچنین سطح بیومس مورد نیاز جهت تخریب زیستی آلاینده کاهش یافته و راندمان حذف آلاینده در بیوفیلتر کاهش پیدا می‌کند. با افزایش گرفتگی گلوها توسط بیومس، کانال‌های خاصی برای عبور جریان در بستر ایجاد می‌شود و به این ترتیب با غیریکنواخت شدن توزیع گاز، بازدهی حذف آلاینده در بستر کم می‌شود. اصولاً در طراحی بیوفیلتر سعی می‌شود که گرفتگی گلوها را با استفاده از پرکن‌های بزرگ‌تر و با هزینه بیشتر تقلیل دهند. در این مدل، ساختار گلوهای بیوفیلتر به صورت شبکه مکعبی از گلوهای استوانه‌ای با طول ثابت و شعاع متغیر در نظر گرفته شده است. در مقایسه با مدل‌های قبلی ارائه شده برای بیوفیلتر، مدل شبکه‌ای با در نظر گرفتن ساختمان فضاهای خالی یعنی اندازه گلوها و نحوه اتصال آن‌ها، می‌تواند تأثیر این فضاها را در پدیده‌های انتقال و واکنش پیش‌بینی کند.

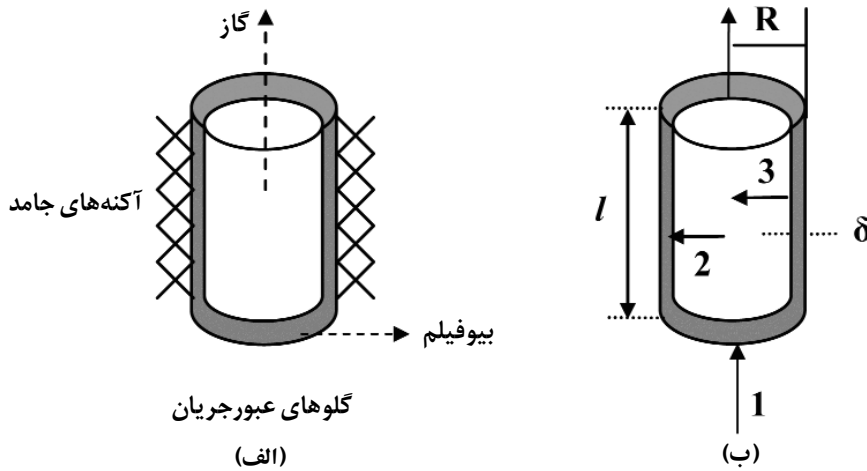
در مدلسازی پدیده‌های انتقال و واکنش در محیط‌های متخلخل اغلب از توزیع اندازه گلوها^۱ (PSD) صحبت می‌شود که عملاً مقصود توزیع آماری شعاع مؤثر گلوها است. اگرچه گلوها دارای شکل نامنظم هستند اما شعاع مؤثر در باریک‌ترین نقطه عامل کنترل‌کننده نفوذ و حرکت مواد درون آن‌ها می‌باشد.

شعاع مؤثر گلوها از تابع توزیع احتمال^۲ (PDF) به دست می‌آید. در محاسبات انجام شده ما از PDF زیر برای $f(r)$ که نمونه واقع بینانه‌ای برای محیط متخلخل می‌باشد، استفاده کرده ایم:

$$f(r) = \frac{r - r_m}{(r_a - r_m)^2} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{r - r_m}{r_a - r_m} \right)^2 \right] \quad (1)$$

که در آن r_m و r_a به ترتیب شعاع متوسط و شعاع حداقل گلوها می‌باشد. البته توزیع اندازه گلوها را می‌توان به روش‌های دیگری نیز اندازه‌گیری کرد [۱۳].

1-Pore Size Distribution
2-Probability Density Function



شکل ۳: الف- ساختمان گلوها در محیط متخلخل بستر، ب- مکانیسم‌های انتقال در هر یک از گلوها، (۱) انتقال آلاینده در جهت محور گلو توسط جابه‌جایی، (۲) نفوذ آلاینده در جهت شعاعی به بیوفیلیم، (۳) نفوذ و واکنش در بیوفیلیم

ساختمان شبکه‌ای گره‌ها و گلوها در یک شبکه دو بعدی در شکل (۴) نشان داده شده است. با توجه به این شکل، علاوه بر گره‌های داخلی شبکه، دو گره فرضی در ورودی و خروجی در نظر گرفته می‌شود. در جریان آرام، دبی جریان در گلوئی که بین دو گره k_1 و k_2 قرار دارد، توسط رابطه‌هاگن پویسوله به دست می‌آید [۱۵]:

$$Q_{kj} = (p_{k_1} - p_{k_2}) \frac{\delta(R_j - \bar{a}_j)^4}{i_v \delta l_j} \quad (3)$$

که Q_{kj} شدت جریان حجمی در گلوها، P_{k_1} و P_{k_2} فشار در ورودی و خروجی هر گلو، μ یا گره‌های دو طرف همان گلو، ویسکوزیته گاز، l_j طول گلو، δ_j ضخامت بیوفیلیم در گلو و R_j شعاع اولیه گلومی باشد. در گره‌ها معادله موازنه جرم کلی به صورت زیر است:

$$\sum_{j=1}^6 Q_j = 0 \quad (4)$$

این معادله برای مجموعه گلوهای متصل به هر گره به طور مجزا نوشته می‌شود. در دو گره فرضی و مرزهای ورودی و خروجی، دبی معین در نظر گرفته شده و در جهات عمود بر جهت اصلی حرکت، شرایط مرزی پر بودیک در نظر گرفته شده است. از حل همزمان معادلات مربوط به گره‌ها، فشار در هر گره به دست می‌آید.

۲.۳ انتقال جرم آلاینده‌ها در فاز گاز

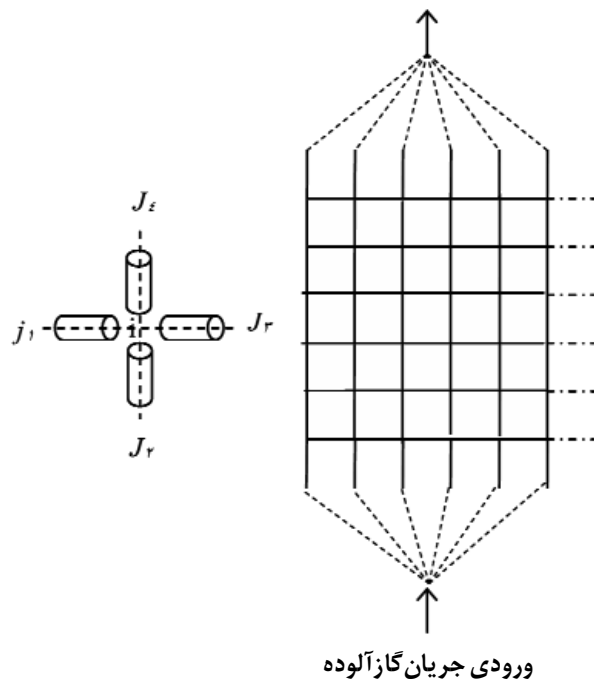
از آن جاکه رشد بیومس در گلوها در مقایسه با تغییرات غلظت آلاینده بسیار کند است، بنابراین معادلات انتقال جرم بر اساس شرایط یکنواخت نوشته شده و اثر تغییر قطر گلوها به واسطه رشد بیوفیلیم به صورت شبه یکنواخت لحاظ خواهد شد. بنابراین با فرض حالت شبه پایدار و جریان آرام، موازنه جرم در مختصات استوانه‌ای برای فاز گاز نوشته می‌شود. در فاز گاز از نفوذ در جهت محوری صرف نظر می‌شود. جریان گاز عبوری از

مجموعه معادلاتی که در این مدل استفاده شد، شامل معادلات افت فشار در بستر، انتقال جرم آلاینده‌ها در فاز گاز و بیوفیلیم، سینتیک واکنش در بیوفیلیم، انتقال در گره‌ها و تغییر ضخامت بیوفیلیم به شرح زیر است:

۱.۳ افت فشار در بستر بیوفیلتر

فضاهای خالی در بیوفیلتر توسط شبکه‌ای مکعبی از گلوهای استوانه‌ای با طول ثابت و قطر متغیر در نظر گرفته می‌شود. قطر گلوها با استفاده از تابع توزیع اندازه منافذ (PSD) تعیین می‌شود.

جریان گاز تصفیه شده



شکل ۴: ساختمان شبکه‌ای گره‌ها و گلوها در شبکه دو بعدی

مرزی (۱۱) انتقال جرم از بیوفیلیم به پایه ذرات در سطح بیوفیلیم صورت نمی‌گیرد.

$$r = R \frac{\partial C_i^b}{\partial r} = 0 \quad (11)$$

۴.۳ سینتیک واکنش در لایه زیستی

فرض می‌شود که واکنش در سطح بیوفیلیم از رابطه مونود پیروی نماید

$$\mu_i = \mu_{\max} \frac{C_i^b}{C_i^b + K_s} \quad [16]$$

که در آن، μ_{\max} ماکزیمم نرخ رشد و K_s ثابت اشباعیت در رابطه مونود است. لذا سینتیک واکنش غیر خطی می‌باشد.

۵.۳ انتقال جرم در گره‌ها

از آن جاکه فرض کردیم که در گره‌ها هیچ گونه جذب یا واکنش شیمیایی انجام نمی‌شود و گره‌ها فقط محل اتصال بین گلوها هستند، بنابراین کل جریان آلاینده ورودی و خروجی به گره برابر است. معادله انتقال جرم آلاینده در گره‌ها به صورت زیر است:

$$\sum_j A_j \left(D_d^g \frac{dC}{dz} + v_{g_j} C_j \right) = 0 \quad (13)$$

که A_j سطح عبور جریان، C_j غلظت و v_{g_j} سرعت جریان گاز در گلوله‌ی جاست. در رابطه بالا D_d^g ضریب پراکندگی^۲ گاز در جهت محوری است و در واقع فرض شده است که در انتقال در گره‌ها، مکانیسم‌های جابه‌جایی و پراکندگی مؤثر باشند:

$$D_d^g = D_i^g + \frac{R^2 v_g^2}{48 D_i^g} \quad (14)$$

که D_i^g ضریب نفوذ در گاز، R شعاع گلوها و v_g سرعت گاز در گلوها است [۱۷]. ضریب نفوذ آلاینده در بیوفیلیم برابر با ضریب نفوذ آلاینده در آب فرض شده است. روابط (۳) - (۱۲) به طور توأم با روابط موازنه جرم در هر گره (رابطه ۱۳) حل می‌شوند.

۶.۳ تغییر ضخامت بیوفیلیم

رابطه تغییر ضخامت بیوفیلیم بر اساس نتایج آلونسو در سال ۱۹۹۷ به دست آمده است [۱۰]:

$$\frac{\partial \delta}{\partial t} = - \sum_i \left(\frac{D_i^b Y_i}{X_v} \nabla C_i^b \right)_{r=R-\delta} \quad (15)$$

ضخامت اولیه بیوفیلیم $1/5 \times 10^{-4}$ m در نظر گرفته شده است.

در جدول (۲) مقادیر پارامترهای فیزیکی مورد استفاده در مدلسازی و در جدول (۳) مقادیر پارامترهای بیولوژیکی و شیمیایی مورد استفاده در مدلسازی آورده شده است.

گلوها به صورت قالبی^۱ در نظر گرفته شده است. انتقال جرم برای فاز گاز در داخل گلوها بر اساس معادله زیر به دست می‌آید:

$$v_g \frac{\partial C_i^g}{\partial z} - D_i^g \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial C_i^g}{\partial r} \right) = 0 \quad (5)$$

که، v_g سرعت متوسط در جهت محوری در داخل گلوها C_i^g ، غلظت آلاینده در فاز گاز، D_i^g ضریب نفوذ آلاینده در فصل مشترک گاز-بیوفیلیم، جهت شعاعی و z جهت محوری در گلو می‌باشد. شرایط مرزی عبارت‌اند از:

$$z = 0 \quad C_i^g = C_{in}^g \quad (6)$$

$$r = 0 \quad \frac{\partial C_i^g}{\partial r} = 0 \quad (7)$$

در معادله (۵) ترم نفوذ، نشان دهنده نفوذ آلاینده به قسمت بیوفیلیم است. به طوری که اگر ضخامت بیوفیلیم در داخل گلو δ باشد، در فصل مشترک گاز و بیوفیلیم شرط مرزی زیر برقرار است:

$$r = R - \delta \quad D_i^g \frac{\partial C_i^g}{\partial r} \Big|_g = D_i^b \frac{\partial C_i^b}{\partial r} \Big|_b \quad (8)$$

در رابطه بالا C_i^b غلظت آلاینده در بیوفیلیم، D_i^b ضریب نفوذ در بیوفیلیم و R شعاع اولیه گلو است.

۳.۲ انتقال جرم آلاینده‌ها در بیوفیلیم

فرض می‌کنیم که میکروارگانیسم‌ها به صورت یکنواخت در سطح گلوها توزیع شده‌اند، سینتیک واکنش توسط رابطه مونود بیان می‌شود و از تأثیر محدودیت غلظت اکسیژن صرف نظر می‌شود، بنابراین سرعت واکنش تنها به غلظت آلاینده بستگی دارد. فاز مایع و گاز در فصل مشترک در حال تعادل بوده و غلظت آلاینده در فصل مشترک توسط رابطه هنری به هم مرتبط می‌شوند. آن‌گاه در مختصات استوانه‌ای، نفوذ و واکنش در بیوفیلیم توسط معادله زیر بیان می‌شود:

$$D_i^b \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial C_i^b}{\partial r} \right) - \frac{\mu_i X_v}{Y_i} = 0 \quad (9)$$

که D_i^b ضریب نفوذ مؤثر آلاینده در بیوفیلیم، C_i^b غلظت آلاینده i در بیوفیلیم و X_v دانسیته بیومس است. μ_i نرخ رشد میکروپ و Y_i بهره تولید بیومس برای آلاینده i است. دو شرط مرزی برای رابطه (۹) در نظر گرفته می‌شود. در شرط مرزی اول (رابطه (۱۰)) غلظت آلاینده i در سطح مشترک بیوفیلیم، C_i^b با حاصل ضرب ثابت هنری، m_i در غلظت آلاینده مورد نظر در فصل مشترک با فاز گاز، C_i^g ، مساوی است.

$$r = R - \delta \quad C_i^b = m_i C_i^g \quad (10)$$

که، R شعاع گلوله استوانه‌ای و δ ضخامت بیوفیلیم است. بر اساس شرط

2-Dispersion

1-Plug

جدول ۲: مقادیر پارامترهای فیزیکی مورد استفاده در مدل سازی

[۱۸]

پارامتر	مقدار
D_T^g (m ² /s)	$8/4 \times 10^{-6}$
D_E^g (m ² /s)	$7/6 \times 10^{-6}$
D_X^g (m ² /s)	$7/1 \times 10^{-6}$
D_T^b (m ² /s)	$8/49 \times 10^{-10}$
D_E^b (m ² /s)	$8/09 \times 10^{-10}$
D_X^b (m ² /s)	$7/8 \times 10^{-10}$
m_T (-)	۰/۲۶
m_E (-)	۰/۳۴
m_X (-)	۰/۲۲

جدول ۳: مقادیر پارامترهای بیولوژیکی و شیمیایی مورد استفاده

در مدل سازی [۱۹]

پارامتر	مقدار
μ_T (1/s)	$5/2 \times 10^{-6}$
μ_E (1/s)	$4/6 \times 10^{-6}$
μ_X (1/s)	$3/4 \times 10^{-6}$
K_T (kg/m ³)	$1/3 \times 10^{-3}$
K_E (kg/m ³)	$0/5 \times 10^{-3}$
K_X (kg/m ³)	2×10^{-3}
Y_T (-)	۰/۱۸۷
Y_E (-)	۰/۱۸۷
Y_X (-)	۰/۱۸۷
δ (m)	$1/5 \times 10^{-4}$
X_v (kg/m ³)	۲

۴. روش حل معادلات

برای انجام محاسبات مراحل زیر انجام شده است:

(۱) - شبکه گلوها و حفره ها با استفاده از PDF در نظر گرفته شده و عدد

اتصال معین ساخته شده است.

(۲) - دبی جریان در ورودی شبکه و هم چنین غلظت هر یک از مواد آلاینده در ورودی شبکه ($z=0$) به عنوان شرایط مرزی معین در جهت اصلی انتقال در نظر گرفته شده است. در دو جهت دیگر از شرایط مرزی پریودیک استفاده شده است.

(۳) - با نوشتن معادله (۴) برای همه گره ها و حل دستگاه معادلات خطی حاصل، توزیع فشار در شبکه و در واقع فشار در گره ها تعیین می شود، که با استفاده از آن سرعت و دبی جریان در هر گلو محاسبه می شود.

(۴) - سپس توزیع غلظت در شبکه محاسبه شده است. برای این کار معادلات (۵) و (۹) با استفاده از روش تفاضل محدود^۱ بسط داده شده به طوری که غیر از نقاط ورودی و خروجی در هر گلو، در جهت طولی ۲ گرید و در جهت شعاعی ۷ گرید داخل هر گلو در نظر گرفته شده است. در جهت شعاعی ۳ گرید در قسمت فاز گاز، یکی روی فصل مشترک و ۳ تا هم در فاز بیوفیلیم واقع شده اند. پس به ازای هر گرید یک معادله به دست می آید. معادله (۱۳) را نیز برای همه گره ها می نویسیم. مقدار $\frac{dC_{j,i}}{dz}$ در معادله (۱۳) را به طور تقریبی از رابطه زیر به دست می آوریم:

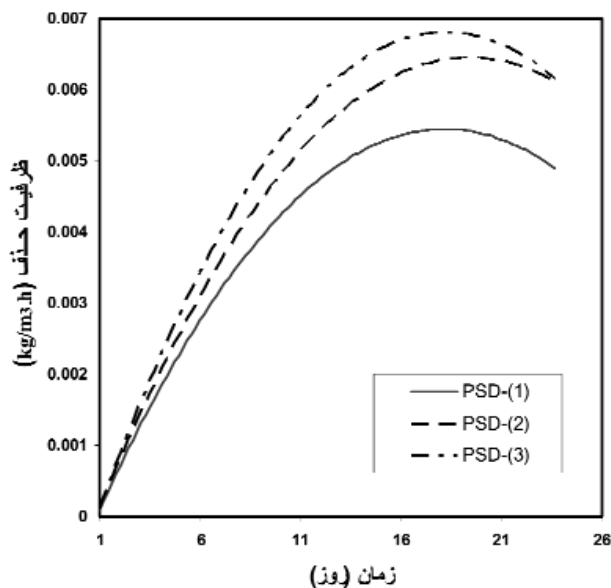
$$\frac{dC_{j,i}}{dz} = \frac{C_{j,i} - \bar{C}_{j,i}}{l/3} \quad (16)$$

که در آن $C_{j,i}$ ، غلظت آلاینده i در گره مورد نظر، $\bar{C}_{j,i}$ متوسط غلظت در جهت شعاعی در گرید مجاور به آن گره و فاصله بین گره و گرید مزبور می باشد. بنابراین تعداد کل معادلات در شبکه برابر با تعداد گره ها بعلاوه ۱۴ برابر تعداد گلوها و ۲ معادله برای گره های فرضی در ورودی و خروجی شبکه می شود. از آنجاکه سینتیک واکنش غیر خطی است، این دستگاه معادلات غیر خطی بوده و برای حل ابتدا با روش نیوتن رافسون خطی سازی می شود.

(۵) - پس از محاسبه توزیع غلظت آلاینده در شبکه، شبکه دیگری با همان PSD و عدد اتصال ساخته و محاسبات را برای آن تکرار کردیم. نتیجه نهایی از متوسط گیری بر روی ۱۰ نمونه شبکه محتمل به دست آمده است. این روش، روش مونت کارلونا نام داشته و از آن برای از بین بردن عدم قطعیت ناشی از کاربرد اعداد تصادفی در تعیین شعاع گلوها استفاده شده است.

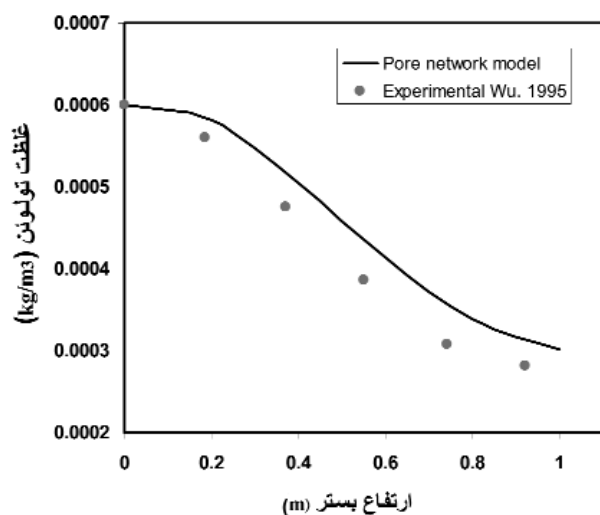
(۶) - اکنون با داشتن توزیع غلظت آلاینده در بیوفیلیم و در جهت شعاعی می توان از معادله (۱۶)، مقدار $\frac{\partial \delta}{\partial t}$ را تعیین کرده و سپس ضخامت جدید بیوفیلیم در هر گلو را بر حسب زمان تعیین کرد. مراحل (۱) تا (۵) را بر اساس ضخامت جدید بیوفیلیم در گلوها برای زمان بعدی تکرار می کنیم. در صورتی که ضخامت بیوفیلیم در بعضی از گلوها از شعاع آن ها بزرگ تر

باشد، آن گلوها بسته شده و دیگر در انتقال در شبکه تأثیر ندارند و محاسبات را برای گلوهای باقیمانده تکرار می‌کنیم. محاسبات فوق توسط نرم افزاری که برای این منظور ایجاد کردیم، انجام شده است.



شکل ۶: ظرفیت حذف زایلین نسبت به زمان برای سه نمونه PSD انتخاب شده در مدل شبکه ۳ بعدی

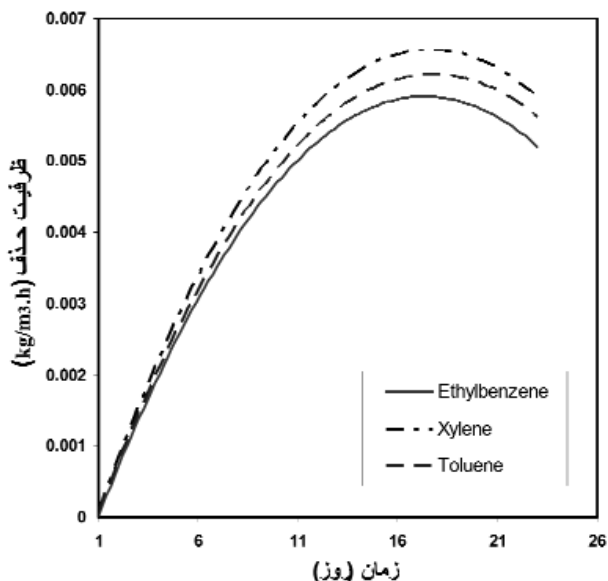
در شکل (۷) تغییرات غلظت TEX نسبت به ارتفاع بستر نشان داده شده است. همان طور که مشاهده می‌شود، غلظت آلاینده نسبت به ارتفاع بستر به تدریج کاهش پیدا می‌کند. خطوط پیوسته نتایج حاصل از مدل شبکه ۳ بعدی را نشان می‌دهد. غلظت آلاینده در نقاط مختلف از ارتفاع بستر، در واقع میانگین غلظت آلاینده در گلوهای واقع در آن ارتفاع است.



الف

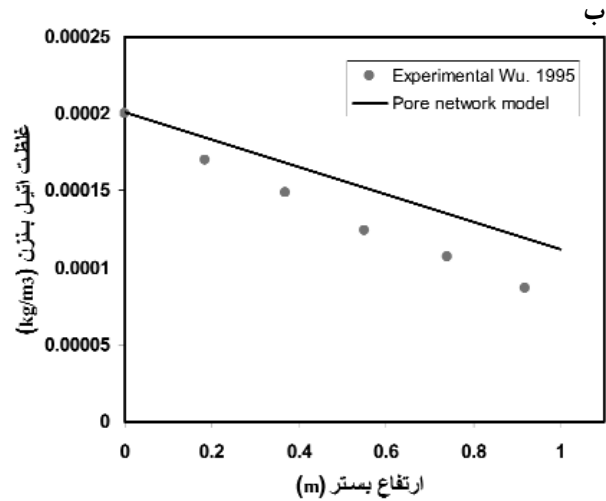
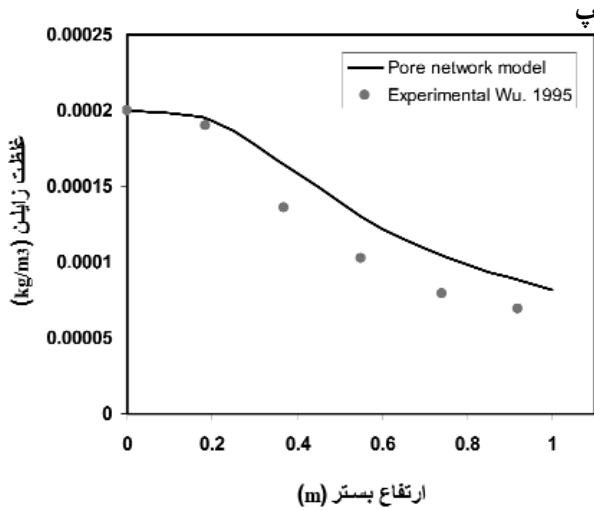
۵. نتایج مدلسازی

شکل (۵) تغییرات ظرفیت حذف TEX را نسبت به زمان نشان می‌دهد. با گذشت زمان در اثر رشد بیومس، غلظت بیومس افزایش و غلظت مواد آلاینده کاهش پیدا خواهد کرد. داده‌های این نمودار از مدل شبکه ۳ بعدی به دست آمد. برای محاسبه غلظت آلاینده در خروجی بیوفیلتر در هر زمان، میانگین غلظت در گلوهای واقع در شیر نمونه برداری خروجی در نظر گرفته شد. در این جا غلظت ورودی هر یک از آلاینده‌ها، 0.0004 kg/m^3 برای تولوئن، اتیل بنزن و زایلین انتخاب شد. زمان اقامت گاز در بستر ۱۲۰s در نظر گرفته شده است.



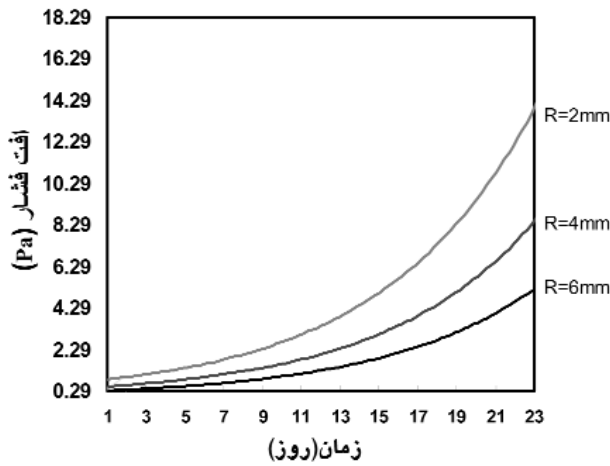
شکل ۵: ظرفیت حذف TEX نسبت به زمان در مدل شبکه ۳ بعدی

باید توجه داشت که برای رسیدن ضخامت بیوفیلیم به مقدار مؤثری که قادر به کاهش غلظت آلاینده باشد، یک زمان وقفه وجود خواهد داشت. در این جا ضخامت بیوفیلیم در لحظه صفر، $1/5 \times 10^{-4} \text{ m}$ فرض شد، بنابراین در شکل (۵) ظرفیت حذف از ابتدا شروع به افزایش می‌کند. از روز ۱۸ به تدریج ظرفیت حذف آلاینده کاهش پیدا می‌کند، زیرا به دلیل گرفتگی گلوها و تجمع بیومس، تعدادی از گلوها از شبکه حذف شده و سطح بیوفیلیم مورد نیاز جهت مصرف آلاینده کم می‌شود. مقایسه بین غلظت خروجی از بیوفیلتر و غلظت ورودی به آن نشان می‌دهد که بازدهی بیوفیلتر حدوداً بین ۴۵ تا ۵۵ درصد است که راندمان نسبتاً خوبی در



شکل ۷: تغییرات غلظت TEX نسبت به ارتفاع بیوفیلتر

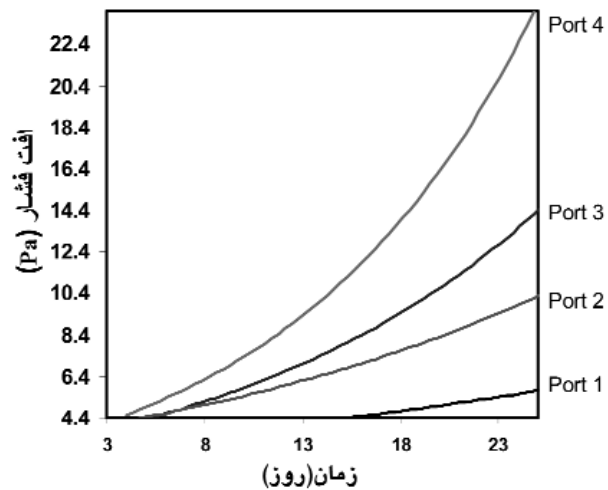
در مدل شبکه سه بعدی، الف-تولون، ب-اتیل بنزن، پ-زایلن



شکل ۹: تأثیر اندازه گلوها بر افت فشار نسبت به زمان در مدل شبکه سه بعدی

شکل (۱۰) درصد گلوهای بسته شده در یک شبکه سه بعدی را بر حسب زمان نشان می دهد. به دلیل کم بودن درصد گلوهای گرفته شده تا روز ۱۱۴ از نشان دادن مقادیر مربوط به این زمان صرف نظر شده است. در ابتدای شروع عملیات بیوفیلتر، ضخامت بیوفیلیم اندک بوده، بنابراین جریان هوای ورودی به راحتی از گلوهای متخلخل بستر بیوفیلتر عبور کرده و به لایه زیستی نفوذ پیدا می کند. با گذشت زمان در اثر رشد زیاد بیومس، تعدادی از گلوهای عبور جریان دچار گرفتگی شده و بسته می شوند. این پدیده باعث کاهش راندمان حذف آلاینده و نیز کانالیزه شدن جریان در گلوها شده و راندمان حذف آلاینده کاهش پیدا می کند. بر اساس تئوری پرکولاسیون، هرگاه در یک شبکه سه بعدی مکعبی، ۷۵٪ از گلوها بسته شوند، جریان در آن شبکه متوقف شده و ارتباط بین ورودی و خروجی از بین می رود [۱۳]، در صورتی که مدل های پیوسته قادر به پیش بینی این رفتار نمی باشند.

شکل (۸) نشان دهنده افت فشار در ارتفاع بستر نسبت به زمان است. شیرهای نمونه برداری به فاصله ۱۸/۵cm از هم در نظر گرفته شده اند. به علت ایجاد گرفتگی در گلوهای عبور جریان در اثر رشد بیومس، افت فشار به تدریج زیاد شده و این مسأله به دلیل مسدود شدن مسیرهای عبور جریان گاز است.



شکل ۸: افت فشار در ارتفاع بستر با گذشت زمان در مدل شبکه سه بعدی

در شکل (۹) تأثیر اندازه گلوها بر افت فشار ایجاد شده در بستر نشان داده شده است. همان گونه که در این شکل مشاهده می شود، گلوهایی که دارای اندازه کوچک تر هستند، افت فشار بالاتری در بستر ایجاد خواهند کرد تا جایی که در اثر رشد بیومس و افزایش ضخامت لایه زیستی، این گلوها نیز دچار گرفتگی شده و افت فشار به مراتب بیشتر می شود. بنابراین بیوفیلترهای با اندازه گلوهای کوچک تر، سریع تر مسدود شده و دچار افزایش افت فشار می شوند.

غلظت آلاینده در آن‌ها است. این مسأله باعث کانالیزه شدن جریان گاز در محیط متخلخل بستر می‌شود.

همان‌طور که ملاحظه می‌شود، بیومس با شدت زیادی رشد می‌کند، اما تجمع بیومس موجب کوچک شدن قطر گلوها و حتی مسدود شدن آنها خواهد شد، بنابراین سطح انتقال جرم در گلوها کم می‌شود. به طوری که از یک زمان به بعد راندمان حذف آلاینده کاهش پیدا می‌کند.

۶. بحث و نتیجه گیری

مهم‌ترین نتایج به دست آمده از مدلسازی شبکه‌ای بیوفیلتر عبارت‌اند از:

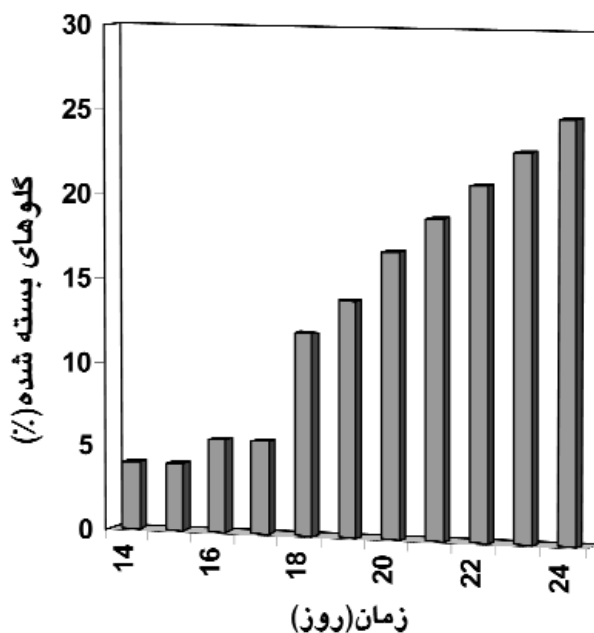
۱- نتایج مدلسازی انجام شده با استفاده از مدل شبکه‌ای نشان دهنده تأثیر زیاد ساختمان فضاهای خالی بر پدیده‌های انتقال و واکنش و در نتیجه کارایی بیوفیلتر می‌باشد.

۲- در مدل شبکه‌ای بیوفیلتر، تأثیر هتروژن بودن محیط متخلخل بر انتقال جرم و خصوصیات واکنش با دقت زیادی قابل بررسی می‌باشد. در این‌جا از این مدل برای پیش‌بینی عملکرد یک سیستم بیولوژیکی در تصفیه چند آلاینده استفاده شد.

۳- نتایج حاصل از مدل شبکه‌ای، برای تصفیه مواد آلاینده در بیوفیلتر به طور قابل قبولی با نتایج تجربی توافق دارد.

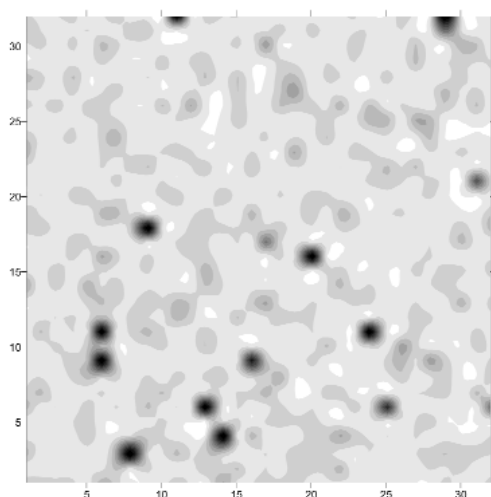
۴- مشاهده شد که رشد بیومس تأثیر زیادی بر حذف ترکیبات فرار آلی در بیوفیلتر دارد. رشد زیاد بیومس منجر به گرفتگی گلوها، افزایش افت فشار و به دنبال آن کاهش راندمان حذف آلاینده خواهد شد.

۵- با توجه به نتایج مدلسازی، بازدهی بیوفیلتر در تصفیه ترکیبات TEX، حدود ۴۵ تا ۵۵ درصد به دست آمد.

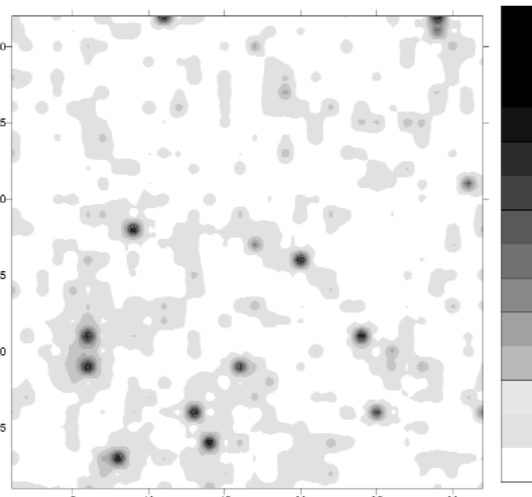


شکل ۱۰: درصد گلوهای بسته شده نسبت به زمان در مدل شبکه سه بعدی

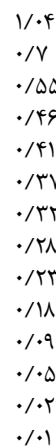
در شکل (۱۱)، نتایج حاصل از رشد بیومس در یک نمونه مدل شبکه دو بعدی 30×30 به صورت تصویری از سطح مقطع بستر نشان داده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود، با گذشت زمان میزان رشد بیومس در بستر افزایش پیدا می‌کند. تجمع بیومس در نقاط نزدیک به ورودی بستر به صورت نواحی پررنگ‌تر ایجاد شده است. رشد بیومس به طور غیر یکنواخت می‌باشد و این به دلیل یکسان نبودن اندازه گلوها و نیز اختلاف



ب



الف



شکل ۱۱: توزیع غلظت بیومس در شبکه دو بعدی 30×30 از بستر بیوفیلتر. رنگ نشان دهنده غلظت بیومس (kg/m^3) است. جهت ورود جریان از پایین است. الف- توزیع غلظت بیومس پس از ۲ روز، ب- توزیع غلظت بیومس پس از ۱۸ روز

- [4] S.P.P. Ottengraf, A.H.C. Van den Oever, "Kinetics of organic compound removal from waste gases with a biological filter", *Biotechnol. Bioeng.*, 25 (12), 3089-3102, (1983).
- [5] S. M. Zarook, B.C. Baltzis, Y.S Oh, R. Bartooha, "Biofiltration of methanol vapor", *Biotechnol. Bioeng.*, 41, 512-524, (1993).
- [6] J.S. Devinny, M.A. Deshusses, T.S. Webster, "Biofiltration for air pollution control", Lewis Publishers, Washington DC, (1999).
- [7] D.S Hodeg, J.S. Devinny, "Modeling removal of air contaminants by biofiltration", *J. Environ. Eng.*, 121 (1), 21-23, (1995).
- [8] H.D. Nguyen, C. Sato, J. Wu, R.W. Douglass, "Modeling biofiltration of gas streams containing TEX components", *J. Environ. Eng.*, 123 (6), 615-621, (1997).
- [9] S.M. Zarook, A.A. Shaikh, Z. Ansar, "Development, experimental validation and dynamic analysis of a general transient biofilter model", *Chem. Eng. Sci.* 52 (5), 759-773, (1997).
- [10] C. Alonso, M.T. Suidan, G.A. Sorial, F.L. Smith, P. Biswas, P.J. Smith, R.C. Brenner, "Gas Treatment in Trickle-Bed Biofilters: Biomass, How Much Is Enough?", *Biotechnol. Bioeng.*, 54, 6, 621-634, (1997).
- [11] J. Wu, "Degradation of contaminated air streams containing toluene, ethylbenzene and o-xylene by biofiltration", PhD dissertation, Oklahoma State Univ., Stillwater, Okla, (1995).
- [12] M. Sahimi, T.T. Tsois, "Transient diffusion and conduction in heterogeneous media: Beyond the classical effective medium approximation", *Ind. Eng. Chem. Res.*, 36, 3043, (1997).
- [13] M. Sahimi, "Flow and Transport in Porous Media and Fractured Rock", VCH, Weinheim, Germany, (1995).
- [14] M. Dadvar, M. Sahimi, "Pore network model of deactivation of immobilized glucose isomerase in packed-bed reactors". Part III: Multiscale modeling, *Chem. Eng. Sci.* 58, 4935 - 4951, (2003).
- [15] V.L. Wylie, "Fluid Mechanics", 8th Ed., McGraw-Hill, New York, (1985).
- [16] M.L. Shuler, F. Kargi, "Bioprocess Engineering: Basic Concepts", Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, (2001).
- [17] R. Aris, "On the dispersion of a solute in a fluid flowing through a tube", *Proc. R. Soc., Lond.*, A235, 67, (1956).
- [18] J.H. Montgomery, "Groundwater chemicals, desk reference", CRC Lewis Publishers, Boca Raton, Fla, (1996).
- [19] H.D. Nguyen, C. Sato, J. Wu, R.W. Douglass, "Modeling biofiltration of gas streams containing TEX components", *J. Environ. Eng.*, 123(6), 615-621, (1997).

زیر نویس ها و بالانویس ها		علائم و نشانه ها	
تولون	T	سطح مقطع گلو	A
اتیل بنزن	E	غلظت در بیوفیلیم	C^b
زایلن	X	غلظت در گاز	C^g
ورودی	in	ضریب نفوذ در بیوفیلیم	D^b
خروجی	out	ضریب اختلاط فاز گاز	D_d^g
مقدار اولیه	O	ضریب نفوذ در گاز	D^g
آلاینده i	i	ثابت اشباعیت میکروبی	K_s
بیوفیلیم	b	طول گلو	l
گاز	g	ثابت هنری	m
گره K	k	فشار	P
گلولی z	z	شدت جریان حجمی گاز	Q
		بعد شعاعی	r
		شعاع گلو	R
		زمان	t
		سرعت محوری گاز	V_g
		دانسیته بیومس	X_v
		بهره تولید بیومس	Y
		بعد طولی	Z
		عدد اتصال	Z
		ضخامت بیوفیلیم	δ
		نرخ رشد میکروب	μ
		ماکزیمم نرخ رشد میکروب	μ_{max}
		ویسکوزیته گاز	μ_v

مراجع

- [1] WHO (World Health Organisation) Working Group, "Environmental Health Criteria", World Health Organisation, (1985).
- [2] C. Kennes, F. Thalasso, "Waste gas biotreatment technology", *J. chem. Technol. Biotechnol.*, 72, 303, (1998).
- [3] T.S. Webster, J.S. Devinny, "Biofiltration: Encyclopedia of Environmental analysis and Remediation", 2, (1998).