

## مطالعه تجزیه فتوکاتالیزوری رنگ‌زاهای راکتیو از پساب‌های نساجی: مدل‌سازی عددی اجزای محدود و کارهای تجربی

خشایار بدیعی<sup>۱\*</sup>

badii@icrc.ac.ir

فرامرز دولتی ارده‌جانی<sup>۲</sup>

سید ضیاءالدین شفایی تنکابنی<sup>۳</sup>

نیاز محمد محمودی<sup>۴</sup>

فرخ‌لقا امینی<sup>۴</sup>

تاریخ پذیرش: ۸۶/۱۲/۱۶

تاریخ دریافت: ۸۶/۹/۲۰

### چکیده

پساب‌های محتوی رنگ‌زاهای راکتیو که ممکن است از صنایع مختلف تولید شود اثرات و پیامدهای زیست محیطی بسیاری به همراه دارد. از این رو بررسی امکان حذف این مواد رنگی از پساب‌ها قبل از تخلیه آن‌ها به محیط زیست اطراف از اهمیت اساسی برخوردار است. در این تحقیق یک مدل ساده ریاضی که به روش عددی اجزاء محدود بسط داده شده است، ارائه شده که قادر است فرآیند حذف مواد رنگی راکتیو را از پساب‌های صنعتی شبیه‌سازی نماید. مدل ریاضی ارائه شده توسط ترکیبی از نرم افزارهای *SEEP/W* و *CTRAN/W* حل شده است. مدل ابتدا توسط یک مثال در مورد حمل یک ماده آلاینده در سیستم جریان آب در یک محیط متخلخل که به دو روش عددی و تحلیلی بررسی شده است، کالیبره شد. پس از کالیبراسیون مدل، نتایج حاصل از مدل‌سازی با نتایج به دست آمده از یک تحقیق در مقیاس آزمایشگاهی جهت حذف یک رنگ‌زای سیپاکرونی راکتیو نارنجی ۱۰۷ با فتوکاتالیز  $(UV/TiO_2/H_2O_2)$  در یک راکتور ناپیوسته (*Batch reactor*) و همچنین با نتایج حاصل از حل تحلیلی مدل مقایسه شد و همپوشانی مناسبی به دست آمد. بررسی‌های تجربی نشان داد که رنگ‌زاهای سیپاکرونی همچون رنگ‌زای راکتیو نارنجی ۱۰۷ در اثر تابش فرابنفش و در حضور فتوکاتالیزور و عامل اکسیدکننده همچون آب اکسیژنه کاملاً رنگ‌بری شده و به ترکیبات معدنی تبدیل می‌شوند. اگرچه تولید چنین پساب‌هایی توسط صنایع مختلف تقریباً اجتناب ناپذیر است، ولی با استفاده از نتایج حاصل از چنین شبیه‌سازی‌هایی می‌توان به طراحی مناسب برنامه‌های مدیریت زیست محیطی پساب‌های صنعتی به منظور به حداقل رساندن اثرات نامطلوب آن پرداخت.

**واژه‌های کلیدی:** تصفیه فتوکاتالیزوری، مدل‌سازی عددی، روش اجزای محدود، پساب‌های محتوی مواد رنگی، رنگ‌زاهای راکتیو،

*CTRAN/W, SEEP/W*

۱- استادیار، پژوهشگاه علوم و فناوری رنگ، گروه پژوهشی رنگ و محیط‌زیست\* (مسئول مکاتبات)

۲- دانشیار، دانشگاه صنعتی شاهرود، دانشکده مهندسی معدن، نفت و ژئوفیزیک

۳- استاد، دانشگاه صنعتی شاهرود، دانشکده مهندسی معدن، نفت و ژئوفیزیک

۴- کارشناس ارشد، پژوهشگاه علوم و فناوری رنگ، گروه پژوهشی رنگ و محیط‌زیست

## مقدمه

است (۱۵). تقسیم مدل به اجزای محدود و تعیین برخی از خصوصیات فیزیکی سیستم تحت مدل سازی در محیط نرم افزار SEEP/W انجام می شود، ولی شبیه سازی حذف مواد رنگی از پسابها با استفاده از نرم افزار CTRN/W و اطلاعات خروجی از نرم افزار SEEP/W صورت می پذیرد.

SEEP/W یک نرم افزار گرافیکی ۳۲ بیتی است که تحت سیستم های عامل ویندوز 95، 98، Me، NT، 2000 و XP کار می کند. این برنامه برای تحلیل جریان آب در سدهای خاکی و محیط متخلخل زیر زمین تهیه شده است. دامنه کاربرد این نرم افزار طرح های مختلف ژئوتکنیکی، هیدروژئولوژیکی، مهندسی عمران، شیمی و معدن است (۱۵). از این نرم افزار همچنین جهت شبیه سازی مشکلات آب در معدن استفاده شده است (۱۶ و ۱۷). در این تحقیق از نرم افزار SEEP/W برای ایجاد مدل یک بعدی راکتور و تقسیم آن به قسمت های کوچک استفاده شده است. در صورتی که در سیستم تحت مدل سازی جریان سیال مطرح باشد، از این نرم افزار برای حل معادله اساسی جریان آب و تولید مولفه های سرعت استفاده می گردد.

CTRN/W نیز یک نرم افزار اجزای محدود می باشد که قادر است حرکت آلاینده ها را در محیط های متخلخل، همچون سنگ و خاک، شبیه سازی نماید. در این شبیه سازی ها از فرآیندهای مختلفی همچون نفوذ (diffusion)، پراکندگی (dispersion)، جذب سطحی (adsorption)، تخریب و تلاشی رادیواکتیوی (radioactive decay) و فرآیندهای متکی به تراکم و زمان (time and density dependencies) می توان استفاده کرد (۱۵). این نرم افزار می تواند در صورت نیاز مؤلفه های سرعت محاسبه شده توسط نرم افزار SEEP/W را دریافت نموده و حرکت آلاینده ها را در محیط هایی که در آن ها سیال جریان دارد مدل سازی نماید.

فعالیت های صنعتی، اغلب موجب بروز مشکلات آلودگی و تبعات زیست محیطی می شوند. صنایع نساجی نیز از این قاعده مستثنی نبوده و مقادیر زیادی پساب های آلوده که در مواردی حاوی فلزات سنگین هستند، تولید می کنند که اگر قبل از این که تصفیه شوند به محیط زیست اطراف تخلیه گردند، صدمات و ضایعات جبران ناپذیری را به بار خواهند آورد (۱، ۲ و ۳). در سراسر دنیا محققان به دنبال یافتن روش های مناسب جهت تصفیه پساب های آلوده هستند. تاکنون فرآیندهای فیزیکی و شیمیایی مختلفی برای این منظور استفاده شده است. که در این فرآیندها از روش هایی چون ته نشین شدن و رسوب گذاری مستقیم آلاینده ها (۴)، فتوکاتالیز (۳، ۵ و ۶)، جذب سطحی (۷)، ترکیب جذب و فتوکاتالیز (۸) و غیره استفاده شده است.

مدل ها به عنوان یک ابزار مناسب در پیش بینی بسیاری از پیامدهای زیست محیطی نقش به سزایی بازی می کنند. یک مدل، الگو و نماینده ای از آنچه در یک سیستم واقعی اتفاق می افتد است. هدف اصلی مدل سازی این است که فهم و بینش ما را در باره فرآیندهایی که در داخل یک سیستم واقعی در حال وقوع است، افزایش دهد و چگونگی رفتار سیستم را در آینده پیش بینی نماید. به کمک مدل ها می توان نحوه اجرای روش های تصفیه و کم کردن اثرات آلودگی را طراحی، بهینه سازی و دقیقاً پیش بینی نمود (۹).

مدلسازی اثرات زیست محیطی پساب های صنعتی، به خصوص صنایع معدنی، توسط محققان زیادی انجام گرفته است (۱۰، ۱۱، ۱۲ و ۱۳). در صنایع رنگ و نساجی با وجود کارهای تجربی فراوانی که برای به حداقل رساندن اثرات زیست محیطی پسابها انجام یافته، ولی در خصوص مدل سازی فرآیندهای رنگبری تحقیقات کمتری صورت پذیرفته است (۱۴) و کار در این زمینه ضروری است. در این مقاله روشی جهت مدل سازی تصفیه مواد رنگی راکتیو از پساب های صنایع نساجی ارایه شده است. مدل سازی به روش عددی اجزای محدود و به کمک ترکیبی از نرم افزارهای SEEP/W و CTRN/W انجام گرفته

## ابزار مدل سازی

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -kC \quad (۳)$$

چنان که گفته شد، برای مدل سازی فرآیند تصفیه مواد رنگی راکتیو از پساب های صنایع نساجی از ترکیب نرم افزارهای SEEP/W و CTRN/W استفاده گردید. این نرم افزارها به ترتیب معادلات زیر را حل می کنند:

چنان که گفته شد، برای مدل سازی فرآیند تصفیه مواد رنگی راکتیو از پساب های صنایع نساجی از ترکیب نرم افزارهای SEEP/W و CTRN/W استفاده گردید. این نرم افزارها به ترتیب معادلات زیر را حل می کنند:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( K_x \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( K_y \frac{\partial h}{\partial y} \right) = \frac{\partial \theta}{\partial t} - W \quad (۱)$$

$$\left( \theta + \rho_d \frac{\partial S}{\partial C} \right) \frac{\partial C}{\partial t} = \theta D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - U \frac{\partial C}{\partial x} - \lambda \theta C - \lambda S \rho_d \quad (۲)$$

که در آن ها:

$\theta$  = آب محتوی حجمی

$t$  = زمان

$K_x, K_y$  = مولفه های ضریب نفوذ پذیری

$y, x$  = مختصات کارترین

$C$  = غلظت

$W$  = نرخ تغذیه یا تخلیه بر واحد حجم

$\rho_d$  = تراکم کلی محیط متخلخل

$S$  = جذب سطحی

$h$  = ارتفاع هیدرولیکی

$D$  = ضریب پراکندگی هیدرودینامیکی

$U$  = سرعت داریسی

$\lambda$  = ضریب تخریب

## کالیبراسیون مدل

قبل از انجام مدل سازی عددی اجزای محدود برای تصفیه پساب های حاوی رنگزای راکتیو، مدل ابتدا برای یک مشکل زیست محیطی مربوط به حمل یک ماده آلاینده در سیستم جریان آب های زیر زمینی به کار گرفته شد. در این مثال فرآیندهای جذب سطحی و تخریب رادیواکتیوی نادیده در نظر گرفته شد و فرض گردید که مهاجرت ماده واکنش کننده تنها توسط فرآیندهای پهنرفت (advection) و پراکندگی هیدرودینامیکی کنترل می شود. نتایج حاصل از مدل سازی با نتایج به دست آمده از معادله تحلیلی زیر (۱۷) مقایسه گردید.

## معادله ریاضی

اگر در معادله ۲ از عبارت های پهنرفت  $(U \frac{\partial C}{\partial x})$ ، پراکندگی و

پخش مولکولی  $(\theta D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2})$  و جذب  $(\lambda S \rho_d)$  صرف نظر

شود در این صورت معادله ریاضی برای رنگبری رنگزاهای راکتیو شامل فرآیند اکسیداسیون فتوکاتالیزوری به صورت زیر ارائه می گردد:

(۴)

$$C = \frac{C_0}{2} \left\{ \operatorname{erfc} \left( \frac{x-Vt}{2\sqrt{Dt}} \right) + \exp \left( \frac{Vx}{D} \right) \operatorname{erfc} \left( \frac{x+Vt}{2\sqrt{Dt}} \right) \right\}$$

که در آن:

 $C_0 =$  غلظت اولیه ماده آلاینده $v =$  سرعت متوسط خطی $\operatorname{erfc} =$  تابع خطای مکمل (۱۸)

در سیستم جریان برابر صفر در نظر گرفته شد  $(C(x, 0) = 0.0 \text{ mg/mm}^3)$  تعداد گام‌های زمانی معادل ۵۰ در نظر گرفته شد. نتایج شبیه‌سازی برای گام‌های زمانی ۲۰، ۳۰، ۴۰ و ۵۰ که در زمان‌های ۲۰۰۰، ۳۰۰۰، ۴۰۰۰ و ۵۰۰۰ ثانیه به دست آمده‌است، با غلظت‌های محاسبه شده برای ماده آلاینده توسط فرمول تحلیلی ۴ در شکل ۱ مقایسه شده‌است که توافق کاملاً نزدیک بین غلظت‌های پیش‌بینی شده توسط مدل اجزای محدود و روش تحلیلی مشاهده می‌گردد.

### مطالعه موردی و پارامترهای ورودی مدل

داده‌های ورودی مدل از نتیجه تحقیقات انجام یافته روی رنگ‌بری پساب‌های نساجی به روش تصفیه فتوکاتالیزی انتخاب شده است. بحث کامل این تحقیق در مرجع شماره ۱ آمده است. در زیر بحث مختصری از روش کار آزمایشگاهی آمده است.

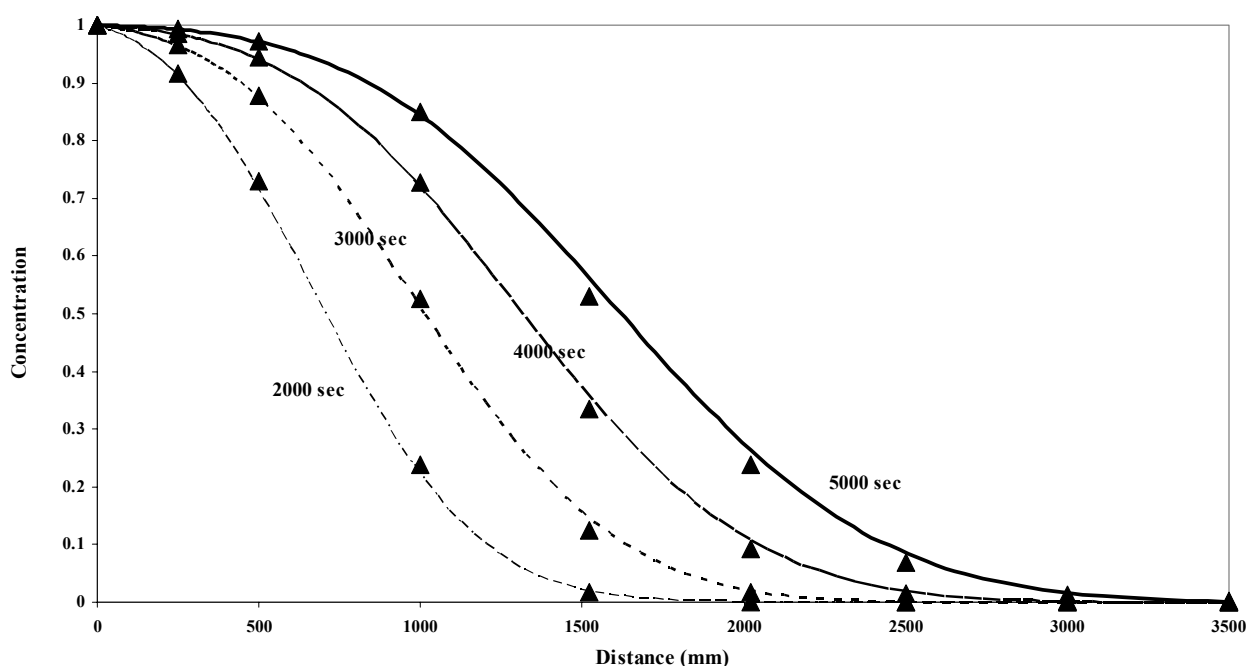
### مواد و وسایل

- ◀ آب اکسیژنه ۳۰ درصد (Merck)،
- ◀ دی اکسید تیتانیوم (Merck)،
- ◀ دو عدد لامپ فرابنفش ۱۵ وات (Philips)،
- ◀ pH متر (Hach)،
- ◀ دستگاه اسپکتروفوتومتر (UV/Vis Cecil 2021)،
- ◀ پمپ هوادهی (Hailea)،
- ◀ پمپ شناور (Marquis-250L/H) و
- ◀ رنگ‌زاهای سیباکرونی که در جدول ۱ مشخصات این رنگ‌زاهای آمده است.

در این شبیه‌سازی یک بعدی، ابتدا یک ردیف تقسیمات با نرم‌افزار SEEP/W ایجاد شد. تقسیمات اجزای محدود شامل ۵۰ جزء و ۲۵۳ گره (node)، به طول ۳۵۰۰ میلی‌متر و به ارتفاع ۶۰ میلی‌متر است. آب محتوی حجمی به صورت یک مقدار ثابت برابر ۰/۵ منظور شد. اختلاف ارتفاع هیدرولیکی در دو مرز مدل و ضریب نفوذپذیری طوری انتخاب شدند تا یک سرعت متوسط خطی برابر با ۰/۳ در جهت حرکت از حل معادله اساسی جریان آب در محیط متخلخل محاسبه گردد. سپس مدل در حالت پایا (steady-state) اجرا شد. برای مدل‌سازی حمل آلاینده از نرم‌افزار CTRN/W استفاده شد. یک ضریب پراکندگی (dispersivity) برابر ۱۵۰ میلی‌متر و ضریب پخش مولکولی (molecular diffusion) معادل صفر در نظر گرفته شد. در این صورت ضریب پراکندگی هیدرودینامیکی به صورت زیر محاسبه گردید:

$$D = \alpha_L v + D_{dif} = 150 \times 0.3 + 0 = 45 \text{ mm}^2 / \text{s} \quad (۵)$$

در سمت چپ مدل (ورودی مدل) یک شرط مرزی با غلظت ثابت برابر با  $C(0, t) = 1.0 \text{ mg/mm}^3$  انتخاب شد. در سمت راست یا خروجی مدل نیز یک شرط مرزی با غلظت ثابت برابر  $C(\infty, t) = 0.0 \text{ mg/mm}^3$  انتخاب گردید. غلظت اولیه



شکل ۱- مقایسه غلظت‌های محاسبه شده به صورت تابعی از فاصله در چهار گام زمانی ۲۰۰۰، ۳۰۰۰، ۴۰۰۰ و ۵۰۰۰ ثانیه توسط روش‌های عددی اجزاء محدود (خطوط) و تحلیلی (▲).

استفاده شده است. محلول‌های رنگی رنگ‌زاهای سیباکرونی با غلظت ۵۰ میلی گرم بر لیتر و به حجم ۵ لیتر حاوی آب اکسیژنه ( $H_2O_2$ ) با غلظت‌های متفاوت به داخل فتوراکتور تزریق گردید. از آب اکسیژنه به عنوان عامل اکسید کننده استفاده شد. در طول فرآیند اکسیداسیون فتوکاتالیزوری محلول‌های مورد آزمایش هوادهی می‌شوند. در فواصل زمانی مختلف از محلول مورد آزمایش نمونه‌برداری شده و طیف UV-Vis آن با دستگاه رسم گردید تا میزان تجزیه رنگ‌زا مورد بررسی قرار گیرد. pH محلول نیز در طول فرآیند تجزیه اندازه‌گیری شده است. آزمایش‌ها و اندازه‌گیری‌ها تحت شرایط دما و فشار آزمایشگاه انجام گرفت. داده‌های حاصل از این آزمایش تجربی در جدول ۲ خلاصه شده است.

مطالعات تجربی نشان داد که آب اکسیژنه اثرات مختلفی در فرآیند تجزیه فتوکاتالیزوری دارد. سرعت رنگ‌بری رنگ‌زاهای سیباکرونی با افزایش غلظت آب اکسیژنه از صفر تا ۳۰۰ mg/l افزایش می‌یابد حال آن‌که با بیشتر شدن غلظت

جدول ۱- مشخصات رنگ‌زاهای سیباکرونی مورد استفاده در این تحقیق.

نام عمومی رنگ‌زا	نام تجاری رنگ‌زا	گروه رنگ‌زا
C. I. Reactive Orange 107	Cibacron Orange	-
C.I. Reactive Red 152	Cibacron Red BE	آزو
C.I. Reactive Blue 8	Cibacron Blue TGRE	آزو تری کلرو پیریمیدینیل

در این مقاله نتایج مدل‌سازی عددی تنها با نتایج به دست آمده از فرآیند تجزیه فتوکاتالیزوری رنگ‌زای راکتیو نارنجی ۱۰۷ (C. I. Reactive Orange 107) مورد مقایسه قرار گرفته است.

#### کارهای تجربی

در این بررسی جهت تصفیه پساب‌های محتوی رنگ‌زاهای راکتیو از یک فتوراکتور کاتالیزوری مجهز به دو لامپ فرابنفش ۱۵ وات و فتو- کاتالیست دی اکسید تیتانیم

### مرحله الف: ایجاد مدل اجزای محدود

در مرحله اول شبیه سازی، یک مدل تک بعدی متشکل از یک ردیف تقسیمات شامل ۵۰ جزء و ۲۵۳ گره به طول ۳۸۰ میلی‌متر و به ارتفاع ۴۰ میلی‌متر توسط نرم‌افزار SEEP/W ایجاد گردید. آب محتوی حجمی به صورت مقدار ثابت برابر ۱ وارد گردید. اختلاف ارتفاع هیدرولیکی در دو مرز مدل صفر انتخاب شد که این موضوع با قرار دادن دو مقدار مساوی ارتفاع (شرط مرزی ارتفاع ثابت) در دو انتهای مدل تأمین شد. معادله اساسی جریان آب در حالت پایا اجرا شد، در نتیجه سرعت متوسط خطی تقریباً برابر با صفر برای کلیه گره‌های سیستم حاصل گردید که این وضعیت برای شرایط موجود در داخل راکتور ناپیوسته ضمن انجام فرآیند رنگ‌بری هماهنگی دارد. فایل مربوط به این مرحله از مدل‌سازی Reactor\_ini.sez نامیده و ذخیره شد. شکل ۲ مدل اجزای محدود این شبیه‌سازی را نشان می‌دهد.

آب اکسیژنه از این مقدار تا ۱۲۰۰ mg/l تغییر چندانی در مدت زمان رنگ‌بری حاصل نمی‌شود (۱).

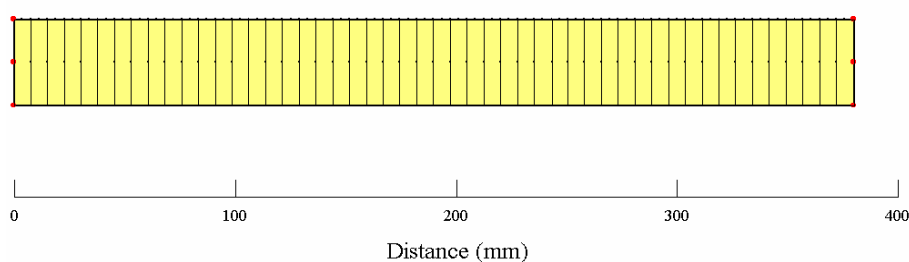
جدول ۲- داده‌های مربوط به نرخ رنگ‌بری در فواصل زمانی مختلف برای غلظت آب اکسیژنه ۳۰۰ mg/l (۱).

فواصل زمانی نمونه برداری (دقیقه)	k (min <sup>-1</sup> )	R <sup>2</sup>
۱۰	۰,۰۶۵۸	۱
۱۵	۰,۰۶۸۷	۰,۹۹۹
۲۰	۰,۰۷۶۵	۰,۹۸۹
۲۵	۰,۰۹۰۰	۰,۹۶۶
۳۰	۰,۱۰۳۹	۰,۹۵۶

### روش مدل‌سازی فرآیند رنگ‌بری

فرآیند مدل‌سازی حذف مواد رنگی راکتیو از پساب‌های نساجی در سه مرحله مختلف انجام پذیرفت که در ادامه مورد بررسی قرار می‌گیرد:

### One Dimensional Batch reaction Simulation



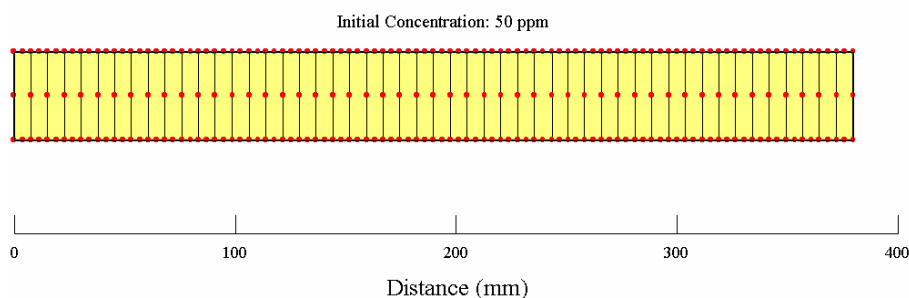
شکل ۲- مدل اجزای محدود فتوراکتور ناپیوسته.

### مرحله ب: ایجاد شرایط اولیه مدل

مدل عدد ثابت ۵۰ میلی گرم بر لیتر لحاظ شد که بیانگر غلظت اولیه رنگ‌زای راکتیو در محلول است. با انتخاب یک گام زمانی بسیار کوچک ( $1 \times 10^{-2}$  ثانیه)، مدل در یک شرایط شبیه حالت پایا اجرا گردید (شکل ۳).

در مرحله دوم شبیه سازی، ابتدا فایل Reactor\_ini.sez در محیط نرم‌افزار CTRN/W فرا خوانده شد و تحت نام Reactor\_ini.ctz به عنوان یک شرط اولیه برای شبیه سازی اصلی ذخیره گردید. برای تمام گره‌های

## One Dimensional Batch reaction Simulation

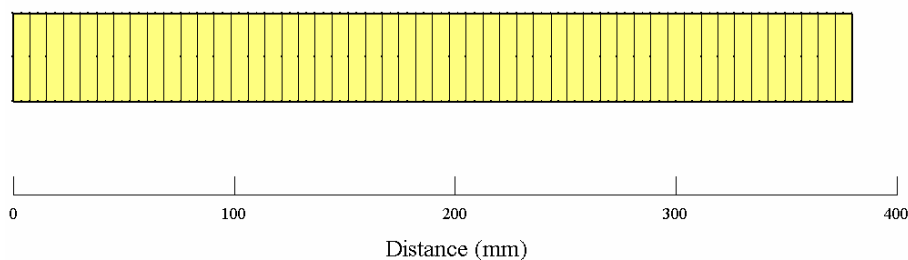


شکل ۳- مدل شرط اولیه.

مدل برداشته شده است. در این مرحله نتایج شبیه‌سازی مرحله دوم (فایل Reactor\_ini.ctz) به عنوان یک فایل اولیه فرا خوانده شد.

مرحله پ: مدل تابع زمان حذف ماده رنگ‌زا  
مرحله نهایی مدل‌سازی فرآیند رنگ‌بری در شکل ۴ نشان داده شده است. غلظت اولیه ماده رنگ‌زا از تمامی گره‌های

## One Dimensional Batch reaction Simulation



شکل ۴- مدل نهایی فرآیند رنگ‌بری.

$$T = \frac{\ln 2}{k} \times 60 \quad (۶)$$

که در آن  $k$  برحسب  $\frac{1}{\text{min}}$  می‌باشد و  $T$  بر حسب ثانیه بیان می‌گردد.

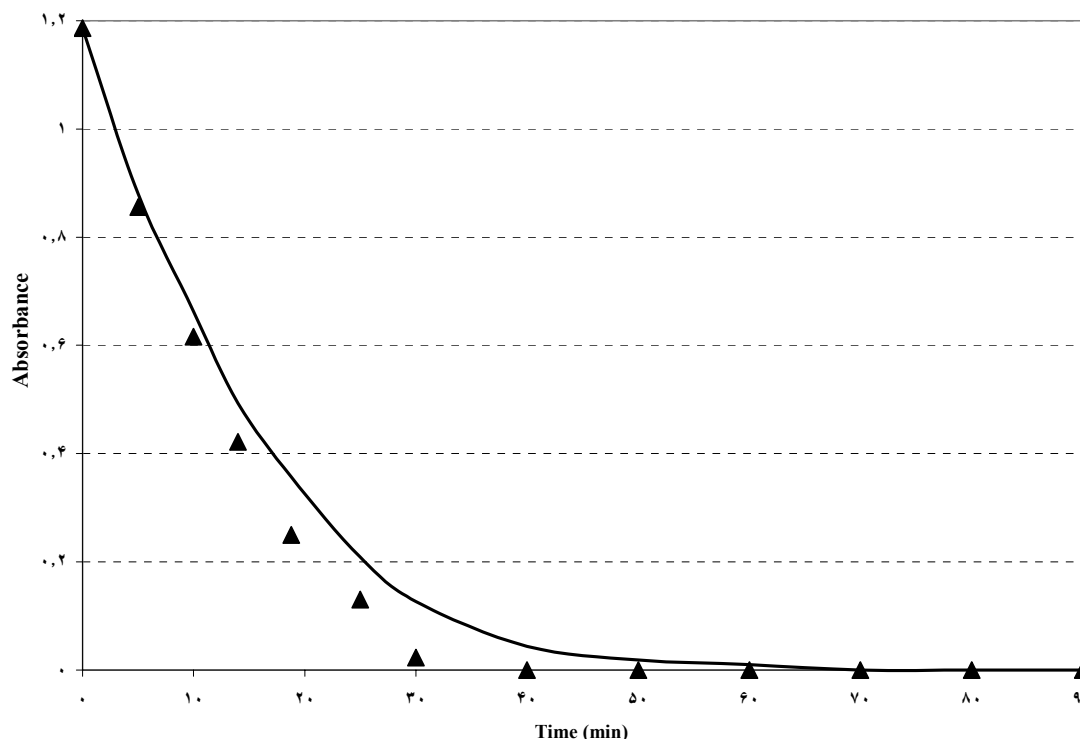
قابل ذکر است که در گام‌های زمانی مختلف اصلاحاتی بر اساس جدول ۱ روی  $k$  اعمال گردید تا مقادیر پیش‌بینی شده توسط مدل با نتایج تجربی و شرایط آزمایشگاهی هماهنگی داشته باشد. پس از وارد کردن داده‌های لازم، مدل در یک شرایط ناپایا اجرا شد و نتایج در فایل‌های Reactor\_1.ctz، Reactor\_2.ctz و ... ذخیره گردید.

از مدل انتقال پراکندگی-پهنرفت (advection-dispersion) و شیوه انتگرال‌گیری زمانی (Backward difference) استفاده شده است. تعداد تکرارها جهت گرفتن جواب مطلوب ۲۰۰ انتخاب شد. تعداد گام‌های زمانی ۸ انتخاب شد. برای نادیده گرفتن اثر پراکندگی هیدرودینامیکی ( $D$ )، ضرایب پراکندگی طولی و عرضی یک عدد بسیار کوچک ( $1 \times 10^{-20}$  mm) انتخاب شدند. ضریب نرخ کاهش ماده رنگ‌زا توسط رابطه زیر به نیمه عمر تخریب ماده رادیو اکتیو تبدیل شده و توسط پنجره "KeyIn material properties" به مدل داده شده است.

## نتایج

Orange 107، برای غلظت آب اکسیژنه ۳۰۰ میلی گرم بر لیتر و در یک طیف جذب ۴۱۱ نانومتر مقایسه می نماید.

شکل ۵ نتایج آزمایشگاهی و پیش‌بینی‌های مدل C. I. Reactive برای تصفیه پساب های حاوی رنگزای



شکل ۵- مقایسه نتایج مدل‌سازی و داده‌های تجربی برای تصفیه پساب‌های حاوی رنگزای C. I. Reactive Orange 107، برای غلظت آب اکسیژنه ۳۰۰ میلی‌گرم بر لیتر و در یک طیف جذب ۴۱۱ (▲ داده‌های تجربی و — نتایج مدل‌سازی).

آب اکسیژنه ۴۵۰ میلی‌گرم بر لیتر و در یک طیف جذب ۴۱۱ نانومتر مقایسه می نماید.

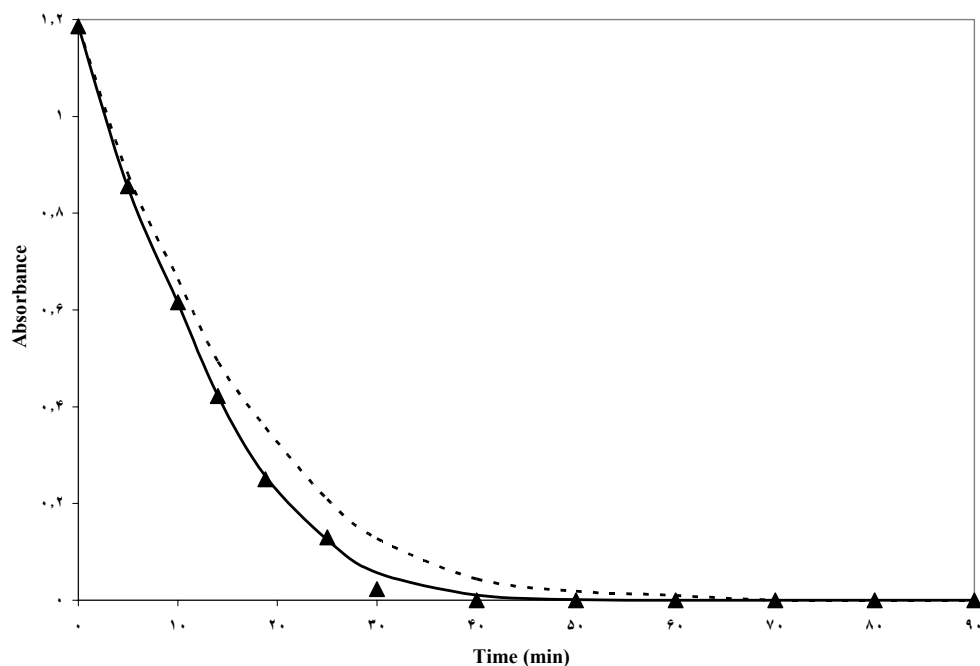
نرخ کاهش غلظت (k)،  $0.0487 \text{ 1/min}$  است. در این مثال در طول مدت شبیه‌سازی k ثابت فرض شده است. نتایج شبیه‌سازی عددی و تحلیلی تطابق مناسبی با داده‌های تجربی در ۱۰ دقیقه پس از آغاز فرآیند رنگ‌بری دارند. از این زمان به بعد غلظت‌های پیش‌بینی شده توسط مدل‌های عددی و تحلیلی با غلظت‌های اندازه‌گیری شده تفاوت دارند. این موضوع بیانگر این واقعیت است که سرعت واکنش احتمالاً از مرتبه ۲ است که در تحقیق بعدی بررسی خواهد شد.

در شکل ۶ پیش‌بینی‌های مدل و اندازه‌گیری‌های تجربی یادشده با داده‌های به دست آمده از حل تحلیلی رابطه ۳ مقایسه شده‌است که توافق کاملاً نزدیک بین نتایج سه روش مشاهده می‌گردد. معادله تحلیلی مذکور به قرار زیر است (۱۷):

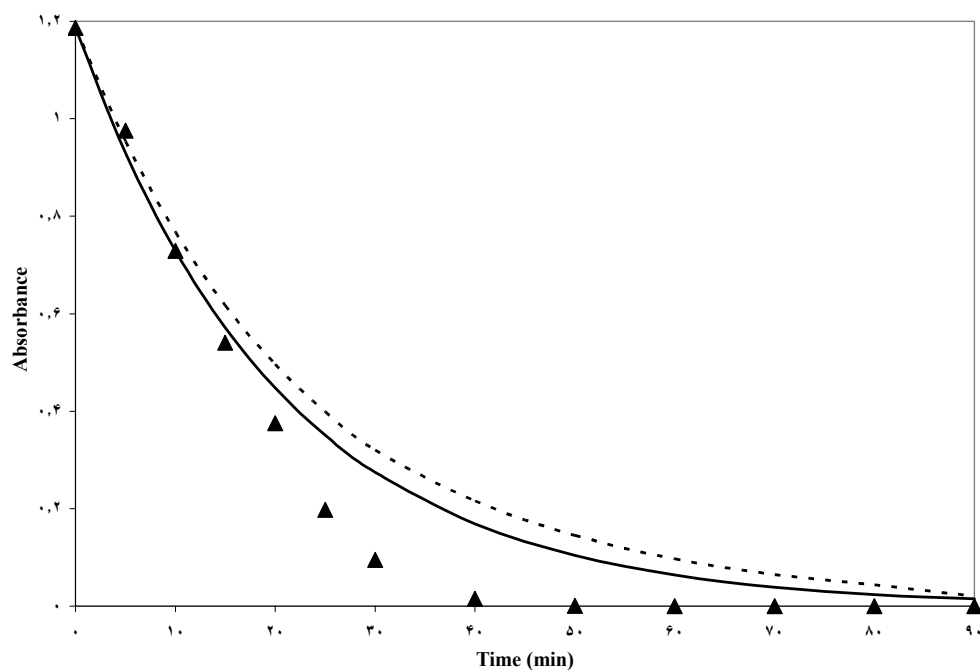
$$C(x,t) = C_0 \exp(-kt) \quad (7)$$

شکل ۷ نتایج آزمایشگاهی و پیش‌بینی‌های مدل‌سازی عددی و مدل تحلیلی برای تصفیه پساب های حاوی رنگزای C. I. Reactive Orange 107 برای غلظت





شکل ۶- مقایسه نتایج مدل سازی عددی، داده های تجربی و فرمول تحلیلی برای تصفیه پساب های حاوی رنگزای C. I. Reactive Orange 107، برای غلظت آب اکسیژنه ۳۰۰ میلی گرم بر لیتر و در یک طیف جذبی ۴۱۱ (▲ داده های تجربی، — حل تحلیلی و ... حل عددی).



شکل ۷- مقایسه نتایج مدل سازی عددی، داده های تجربی و فرمول تحلیلی برای تصفیه پساب های حاوی رنگزای C. I. Reactive Orange 107، برای غلظت آب اکسیژنه ۴۵۰ میلی گرم بر لیتر و در یک طیف جذبی ۴۱۱ (▲ داده های تجربی، — حل تحلیلی و ... حل عددی).

## نتیجه گیری

حذف مواد رنگی و آلاینده‌های فلزی موجود در پساب‌های صنعتی خصوصاً صنایع نساجی، قبل از تخلیه آن‌ها به منابع آب‌های سطحی و یا زیرزمینی از موضوعات بسیار مهم زیست‌محیطی به شمار می‌رود. در این مقاله فرآیند رنگ‌بری فتوکاتالیزوری رنگ‌زای C. I. Reactive Orange 107 در یک فتوراکتور ناپیوسته مورد بررسی قرار گرفته است. همچنین با استفاده از ترکیبی از نرم‌افزارهای SEEP/W و CTRN/W و به روش عددی اجزای محدود فرآیند رنگ‌بری رنگ‌زای راکتیو از پساب‌های نساجی شبیه‌سازی شده است. پیش‌بینی‌های مدل‌سازی عددی با نتایج آزمایشگاهی و نتایج حاصل از حل تحلیلی مدل، مقایسه و هماهنگی قابل قبولی بین نتایج سه روش حاصل شد. مطالعات تجربی نشان داد که سینتیک رنگ‌بری و تجزیه رنگ‌زای مورد بررسی از مرتبه اول پیروی می‌کند. به علاوه سرعت رنگ‌بری در غلظت آب اکسیژنه  $300 \text{ mg/l}$  به مقدار حداکثر خود می‌رسد. از تلفیق نتایج مدل‌سازی و داده‌های تجربی می‌توان نتیجه گرفت که در اوایل فرآیند رنگ‌بری توافق خوبی بین مقادیر شبیه‌سازی شده و اندازه‌گیری شده به دست آمده است. با گذشت زمان اختلاف زیاد شده به طوری که در مراحل نهایی فرآیند حذف رنگ به بیشترین مقدار خود می‌رسد. قدر مسلم آن است که غلظت آب اکسیژنه به عنوان عامل اکسید کننده با گذشت زمان کاهش یافته و احتمالاً سرعت واکنش از مرتبه ۲ است که نیاز به بررسی بیشتر دارد. به نظر می‌رسد که فرآیند تجزیه فتوکاتالیزوری توانسته است تا رنگ‌زاهای سیباکرونی را تجزیه کرده و به مواد معدنی همچون آب، دی اکسید کربن و اسیدهای معدنی تبدیل نماید. ذکر این نکته لازم است که استفاده از چنین مدل‌هایی می‌تواند ما را در پیش‌بینی بسیاری از پیامدهای زیست‌محیطی یاری نماید. به کمک این مدل‌ها می‌توان نحوه اجرای روش‌های تصفیه و کم کردن اثرات آلودگی را طراحی، بهینه‌سازی و دقیقاً پیش‌بینی نمود.

## منابع

- آرامی، م.؛ محمودی، ن.م.؛ یوسفی لیمایی، ن. و سلمان تبریزی، ن.؛ اردیبهشت ۱۳۸۳، پنجمین کنگره ملی مهندسی نساجی ایران، دانشگاه صنعتی امیر کبیر.
- Georgiou, D., Melidis, P., Aivasidis, A., and Gimouhopoulos, K. (2002). Degradation of azo-reactive dyes by ultraviolet radiation in the presence of hydrogen peroxide. *Dyes and Pigments*, 52, 69-78.
- Hachem, C., Bocquillon, F., Zahraa, O., and Bouchy, M. (2001). Decolourization of textile industry wastewater by the photocatalytic degradation process. *Dyes and Pigments*, 49, 117- 125.
- Wu, J., Eiteman, M.A., and Law, S.E. (1998). Evaluation of membrane filtration and ozonation processes for treatment of reactive dye wastewater. *Journal of Environmental Engineering*, 124, 272-277.
- Zahraa, O. Chen, H. Y., and Bouchy, M. (1999). Photocatalytic degradation of 1,2-dichloroethane on suspended  $\text{TiO}_2$ . *Journal of Advanced Oxidation Technology*, 4, 167-173.
- آرامی، م.؛ محمودی، ن.م.؛ سلمان تبریزی، ن.؛ بحرینی، ذ. "رنگ‌بری و تجزیه فتوکاتالیزوری رنگ‌زای راکتیو قرمز ۱۹۸ با فرآیند  $\text{UV/TiO}_2/\text{H}_2\text{O}_2$ "، ۲۹ مهر تا ۱ آبان ۱۳۸۲، هشتمین کنگره ملی مهندسی شیمی، دانشگاه فردوسی مشهد.
- آرامی، م.؛ یوسفی لیمایی، ن.؛ محمودی، ن.م.؛ سلمان تبریزی، ن. "رنگ‌بری رنگ‌زاهای مستقیم ۲۲ و قرمز ۸۰ از پساب‌های نساجی توسط جاذب طبیعی پوست پرتقال"، ۲۹ مهر تا ۱ آبان ۱۳۸۲، هشتمین کنگره ملی مهندسی شیمی، دانشگاه فردوسی مشهد.
- Chen, H.Y., Zahraa, O., and Bouchy, M. (1999). Inhibition by inorganic ions of the adsorption and the photocatalytic

- stream affected by acid mine drainage. *Hydrological Processes*, 15, p.1979-1992.
14. Chakraborty S., De S., DasGupta S. and Basu J.K. (2005). Adsorption study for the removal of a basic dye: experimental and modeling. *Chemosphere*, 58, 1079-1086.
  15. GEO-SLOPE International, Ltd. (2002). SEEP/W for finite element seepage analysis, <http://www.geo-slope.com/products/seepw.asp>
  16. Doulati Ardejani F., Singh R.N., Baafi E.Y. and Porter I. (2003). A finite element model to: 1. Predict groundwater inflow to surface mining excavations. *Journal of the International Mine Water Association (IMWA)*, 22, 31-38.
  17. Doulati Ardejani F., Singh R.N., Baafi E.Y. and Porter I. (2003). A finite element model to: 2. Simulate groundwater rebound problems in backfilled open cut mines. *Journal of the International Mine Water Association (IMWA)*, 22, 39-44.
  18. Reddi, L.N. and Inyang, H.I. (2000). *Geoenvironmental engineering. principles and applications*, Marcel Dekker, Inc., New York, 494p.
  - degradation of organic contaminants in TiO<sub>2</sub> aqueous suspension. *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry*; 108, 37-44.
  9. Edwards, J.S., Ren, T.X. and Jozefowicz, R. (1995). Using computational fluid dynamics (CFD) to solve mine safety and health problems. *APCOM xxv 1995, Technical Proceedings, Application of Computers and Operations Research in the Minerals Industries*, Brisbane, Australia, 9-14 July 1995, 41-47.
  10. Doulati Ardejani, F., Singh R.N., and Baafi E.Y. (2002). A numerical finite volume model for prediction of pollution potential of open cut mine backfill. 6th Annual Environmental Engineering Research Event 2002 conference, Blackheath NSW, Australia, ISBN: 0-9580158-1-3.
  11. Singh, R.N., and Doulati Ardejani, F. (2003). Evaluation of factors affecting pyrite oxidation and subsequent pollutant generation in backfilled open cut coal mines. 8<sup>th</sup> International Congress on Mine Water and the Environment, Johannesburg, South Africa, 19<sup>th</sup> – 22<sup>nd</sup> October 2003, 173-186.
  12. Nitzsche, O. and Vereecken, H. (2002). Modeling of sorption and exchange processes in column experiments and large scale field studies. *Mine Water and the Environment*, 21, 15-23.
  13. McKnight, D.M., Kimball, B.A. and Runkel, R.L. (2001). pH dependence of iron photoreduction in a rocky mountain