

# ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΔΑΚΤΥΛΙΟΕΙΔΟΥΣ ΦΩΤΟΚΑΤΑΛΥΤΙΚΟΥ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑ. ΜΕΛΕΤΗ ΤΗΣ ΔΙΑΜΟΡΦΩΣΗΣ ΤΗΣ ΡΟΗΣ ΚΑΙ ΕΠΙΔΡΑΣΗ ΣΤΗ ΜΕΤΑΤΡΟΠΗ ΑΕΡΙΩΝ ΡΥΠΩΝ.

Π. Παπαγκίκας<sup>1</sup>, Ε. Πουλάκης<sup>1</sup>, Κ. Φιλιππόπουλος<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup>Σχολή Χημικών Μηχανικών, ΕΜΠ, Αθήνα, Ελλάδα

(\*[kphilip@chemeng.ntua.gr](mailto:kphilip@chemeng.ntua.gr))

## ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Στην παρούσα εργασία μελετάται η επίδραση της ροής των αέριων ρύπων εντός ενός δακτυλιοειδούς φωτοκαταλυτικού αντιδραστήρα, αλλά και η επίδραση αυτής στην οξειδωση του n-πεντανίου ( $C_5H_{12}$ ). Έγιναν ιχνηθετήσεις, που είχαν την μορφή παλμικής επιβολής, πεντανίου σε διοξείδιο του άνθρακα για την κατανόηση της διαμόρφωσης της κατανομής του ρευστού εντός του δοχείου. Οι επιβολές αυτές έγιναν χωρίς την παρουσία χημικής αντίδρασης και σε συνθήκες περιβάλλοντος. Η πειραματική διάταξη αποτελείται από μια δεκάπορτη βάνα, από την οποία περνάει η ποσότητα του πεντανίου που χρησιμοποιείται για τις επιβολές (1ppm), από τον αντιδραστήρα (Μήκους 20cm, λάμπα διαμέτρου 15.74mm, διάμετρος αντιδραστήρα 23.11mm), σωληνώσεις και ένα φωτιοϊονικό ανιχνευτή (PID). Το πρώτο ζήτημα που προέκυψε, είναι η εξαγωγή του σήματος του αντιδραστήρα από την επιβολή απαλείφοντας την επίδραση των επιμέρους συσκευών της διάταξης. Οι επιβολές έγιναν σε πέντε διαφορετικές ογκομετρικές παροχές (50,75,100,150 & 200 mL/min), ενώ οι μετρήσεις στον ανιχνευτή πραγματοποιήθηκαν μετά από αραιώση του μίγματος με άζωτο. Συγκεκριμένα, μελετήθηκαν δύο συστήματα, στο ένα είχε αφαιρεθεί ο αντιδραστήρας, ενώ στο δεύτερο υπήρχε στη διάταξη. Το συνολικό σύστημα, θεωρήθηκε ότι είναι ο αντιδραστήρας σε σειρά με τις σωληνώσεις και τον ανιχνευτή. Όποτε, για την εξαγωγή του σήματος του αντιδραστήρα χρησιμοποιήσαμε τη μέθοδο της αποσυνέλιξης των δύο σημάτων με τη χρήση μετασχηματισμών Fourier. Τα σήματα που προέκυψαν από τις πέντε παροχές επειδή είχαν λευκό θόρυβο (white noise) λόγω της μεθόδου της αποσυνέλιξης χρησιμοποιήθηκε κατάλληλο φίλτρο για την απαλοιφή του. Στη συνέχεια, από τα σήματα που αντιστοιχούν στον αντιδραστήρα υπολογίζονται οι χρόνοι παραμονής και έπειτα η διασπορά για την κάθε παροχή διαφορετικά, αλλά και οι αρχικές ποσότητες και συγκεντρώσεις. Όπως είναι αναμενόμενο, για δεδομένο όγκο στις μικρότερες παροχές ο μέσος χρόνος παραμονής είναι μικρότερος σε σχέση με τις μεγαλύτερες ενώ οι ποσότητες είναι παρόμοιες. Με αυτά τα δύο μεγέθη στη συνέχεια υπολογίζεται ο αδιάστατος αριθμός Peclet. Με τα παραπάνω δεδομένα, έγινε προσαρμογή αρχικά στο μοντέλο Αντιδραστήρων Πλήρους Ανάμειξης (CSTR) σε Σειρά όπου προέκυψε ότι στις μικρότερες παροχές το σύστημα αντιστοιχεί σε περισσότερους αντιδραστήρες και όσο αυξάνεται η παροχή αυτοί μειώνονται. Επιπλέον χρησιμοποιήθηκε και το μοντέλο Αξονικής Διασποράς με οριακές συνθήκες κλειστού-κλειστού δοχείου για παλμική επιβολή και έγινε σύγκριση των αποκρίσεων, που προέκυψαν από τους αντίστοιχους Peclet, του μοντέλου με τις πειραματικές. Τέλος, έγινε προσομοίωση του αντιδραστήρα στο Comsol Multiphysics, με το μοντέλο της στρωτής ροής (Laminar Flow) σε μόνιμη κατάσταση, για τις παραπάνω παροχές. Για δεδομένη αντίδραση (αντίστοιχη κινητική) υπολογίζεται η επιτυγχάνομενη μετατροπή του αντιδραστήρα για τα παραπάνω μοντέλα προσομοίωσης του συστήματος και η απόκλιση της από τους ιδανικούς αντιδραστήρες (πλήρους ανάμειξης και εμβολικής ροής).