

مدلسازی فرایند زیست درمانی خاکهای آلوده بر اساس پدیده‌های پراکندگی و جابه جایی

سهیلا یغمائی*، علی اکبر سیف کردی** و هومن شیرزادی***

دانشکده مهندسی شیمی، دانشگاه صنعتی شریف

(دریافت مقاله: ۸۰/۵/۸ - دریافت نسخه نهایی: ۸۰/۱۱/۲۷)

چکیده - یک مدل ریاضی برای بررسی فرایند زیست درمانی در محل، با هدف پاکسازی خاکهای آلوده به مواد آلی ارائه و مورد تجزیه و تحلیل قرار گرفته است. با عبور آب حاوی اکسیژن از بستر متخلخل خاک، میکروارگانیسمهای هوازی فعال شده و تجزیه بیولوژیکی آلاینده‌ها انجام می‌شود. مدل ریاضی سیستم بر اساس پدیده‌های انتقال جابه جایی، پراکندگی و واکنش بیولوژیکی شامل سه معادله دیفرانسیل جزئی و یک معادله دیفرانسیل معمولی است. بدین ترتیب دستگاه معادلات دیفرانسیل از طریق تحلیل ابعادی، ابتدا بدون بعد شده و سپس با استفاده از روش تفاضل محدود به طور عددی حل شده‌اند. بدین ترتیب اثرات پارامترهایی نظیر کمبود ذخیره اکسیژن، رشد توده سلولی و مقاومت در مقابل حرکت آلاینده‌ها در قالب اعداد بدون بعد مورد بررسی و تجزیه و تحلیل قرار می‌گیرد. نتایج شبیه سازی عددی، بیانگر آن است که سرعت تجزیه بیولوژیکی آلاینده‌ها در خاک نه تنها با کمبود ذخیره اکسیژن، همچنین به دلیل مقاومت در مقابل حرکت آلاینده‌ها در داخل شبکه متخلخل محدود می‌شود.

واژگان کلیدی: زیست درمانی، خاک، بستر متخلخل، مدلسازی

Mathematical Modeling of Contaminated Soil Bioremediation Based on Convection Dispersion Phenomena

S. Yaghmaei, A. A. Seifkordi and H. Shirzadi

Department of Chemical Engineering, Sharif University of Technology

Abstract: A mathematical model has been analyzed for in-situ bioremediation with the purpose of remediating organic contaminated soil. Oxygen rich water when passed through the porous media of soil activates the aerobic microorganisms, leading to the biodegradation of the organic content. The model equations comprise three convection-dispersion partial differential equations and one ordinary differential equation. Dimensional analysis of the model equations has been performed and the solution of these equations has been conducted using the finite difference method. The effects of insufficient oxygen supply, growth of biomass and resistance to contaminant migration on the rate of biodegradation have been analyzed by numerically solving the equations.

The results from the numerical simulation indicate that the rate of biodegradation of contaminants in soil may be constrained not only by insufficient oxygen supply, but also by resistance to contaminant migration within the pore network.

Keywords: Bioremediation, Soil, Porous media, modeling

*** - کارشناسی ارشد

** - دانشیار

* - استادیار

| | | | |
|---|--|--------------------|---|
| a | مساحت سطح مشترک به ازای واحد حجم بستر خاکی، L^2/L^3 | v | سرعت مایع در منافذ، L/t |
| C_i | غلظت جزء i در فاز مایع، M/L^3 | t | زمان، t |
| C_{of} | غلظت اکسیژن در محلول ورودی، M/L^3 | x | موقعیت عمودی، L |
| \bar{C}_i | غلظت بدون بعد جزء i در فاز مایع | X | ارتفاع بدون بعد |
| E | ضریب پراکندگی، L^2/t | Y_o | ضریب راندمان اکسیژن |
| J_i^L | فلاکس انتقال از فاز مایع به مرز مشترک، $(M/L^2)/t$ | Y_s | ضریب راندمان سوبسترا |
| J_i^S | فلاکس انتقال از مرکز مشترک به توده فاز جامد، $(M/L^2)/t$ | حروف یونانی | |
| k_d | ثابت سرعت واکنش برای از بین رفتن توده سلولی، t^{-1} | ρ | دانشیه توده بستر خاکی، (M/L^3) خاک خشک |
| k_s | ضریب انتقال جرم سوبسترا، L/t | ε | تخلخل |
| K_o | ثابت اشباع اکسیژن، M/L^3 | μ_m | ماکزیمم سرعت رشد مخصوص توده سلولی، t^{-1} |
| K_s | ثابت اشباع سوبسترا، M/L^3 | θ | زمان بدون بعد |
| K_{di} | ضریب جدایی ایزوترم خطی جز، i | بالانویس | |
| L | ارتفاع بستر خاکی آلوده، L | n | مرحله زمانی n |
| q_i | غلظت جزء i در فاز جامد، M/M خاک خشک | L | فاز مایع |
| \bar{q}_i | غلظت بدون بعد جزء i در فاز جامد | S | فاز جامد |
| r_i^L | سرعت واکنش در فاز مایع، $(M/L^3)/t$ | sf | مرز مشترک |
| r_i^{sf} | سرعت واکنش در مرز مشترک $(M/M)/t$ خاک خشک | زیرنویس | |
| $R_i = 1 + \frac{\rho K_{di}}{\varepsilon}$ | فاکتور تأخیر برای جزء i | i | b و s به ترتیب توده سلولی، اکسیژن و سوبسترا |
| | | j | ژامین نقطه شبکه |

۱- مقدمه

آلاینده‌های موجود در خاک به دو طریق بیولوژیکی و شیمیایی قابل تبدیل‌اند. جانسون و همکارانش [۱] تبدیل غیر بیولوژیکی آلاینده‌ها را در محیط متخلخل مدل کرده‌اند. تبدیل بیولوژیکی آلاینده‌ها در محیط‌های متخلخل نیز توسط محققان مختلفی مدل شده است. از طرفی تعدادی مدل ریاضی در زمینه چگونگی رشد و انتقال میکروارگانیسم، در محیط متخلخل پیشنهاد شده است. در بسیاری از این مدل‌ها با تاکید بر چگونگی تشکیل بیوفیلم، تأثیر این پدیده در درمان بیولوژیکی آلاینده‌ها مورد بحث قرار می‌گیرد [۲-۴]. به عنوان مثال، باوی و ولوچی [۵] یک مدل ۳ ساختاری برای توصیف شکل‌گیری میکروارگانیسم‌ها در محیط‌های متخلخل ارائه داده‌اند، این ساختارها چگونگی تشکیل میکروکولونی‌های چسبنده به

سطوح ذرات، بیوفیلم یکنواخت روی سطح ذرات و میکروارگانیسم‌های معلق در مایع تخلخل را توصیف می‌کنند. سانی و همکارانش [۶] مدلی ارائه کرده‌اند که قادر به پیش بینی عملکرد سیستم پاکسازی در مقیاس بزرگ با استفاده از پارامترهای قابل اندازه‌گیری مربوط به خواص بیولوژیکی خاک است. وادیل و همکارانش [۷] اخیراً یک مدل سه بعدی با در نظر گرفتن انتقال و تجزیه بیولوژیکی در زیر سطح زمین ارائه داده‌اند، در این مدل نفوذ داخل دانه‌ای در بستر متخلخل به عنوان عامل محدود کننده رشد میکروب مورد بررسی قرار گرفته است.

بوردون و بدینت [۸] با توجه به فراوانی آلاینده‌های آلی نظیر هیدروکربنهای نفتی که فقط در مجاور اکسیژن قابل تجزیه بیولوژیکی است مدلی را برای بررسی نقش اکسیژن در زیست

درمانی^۱ (پاکسازی) خاکهای آلوده به این دسته از هیدروکربنها و با تاکید بر آروماتیکها ارائه کرده‌اند.

ویندسون و همکارانش [۹] مدلی را برای تجزیه بیولوژیکی کربنهای آلی توسط باکتریهای اختیاری^۲ که هم در شرایط هوازی (با استفاده از اکسیژن) و هم در شرایط بی‌هوازی (با استفاده از اکسیژن نیترات) قادر به تجزیه بیولوژیکی هستند ارائه کرده‌اند. این مدل شامل ۹ معادله جفت شده غیر خطی بوده که قادر به توصیف فرایند انتقال، تجزیه آلاینده و رشد و مرگ میکروارگانیسمها در هر دو شرایط ضمن مقایسه آنها با یکدیگر است.

مدلی ریاضی، برای زیست‌درمانی در محیطهای متخلخل توسط یغمایی و همکارانش [۱۰-۱۲] ارائه شده است. در این مدل با فرض در نظر گرفتن خاک به صورت دانه‌های کروی شکل متخلخل (خاکدانه) که آلاینده‌های آلی به صورت یکنواخت در آنها ته نشین شده‌اند چگونگی مصرف آلاینده‌های آلی توسط میکروارگانیسمهای معلق در مایع منافذ و میکروکولونیهای چسبیده به سطح جامد مورد بررسی و تجزیه و تحلیل قرار گرفته است. در این تحقیق با استفاده از بدون بعد کردن معادلات از طریق تحلیل ابعادی اثر پارامترهای مهمی نظیر، غلظت اولیه آلاینده، شعاع خاکدانه، تخلخل و ضریب جذب بر مکانیزم و زمان پاکسازی مورد بررسی قرار گرفته است.

لازم به ذکر است طبق مطالعات انجام شده در این تحقیق در اکثر قریب به اتفاق مدل‌های ارائه شده از مدل مونود برای سینتیک رشد میکروارگانیسم، استفاده شده است. این مدل دارای پارامترهایی نظیر ماکزیمم رشد مخصوص و غلظت مواد محدود کننده و ثابت اشباع مواد محدود کننده است و با تصحیحات انجام شده بر آن (مدل تصحیح شده مونود)، به خوبی قادر به مدل کردن رشد میکروارگانیسم در محیطهای مختلف است [۱۳].

۲- مدل ریاضی

۲-۱- توصیف مدل

در ابتدا آلاینده‌های آلی در داخل بستر خاک ته نشین

شده‌اند. آب به صورت پیوسته از میان بستر عبور داده می‌شود به نحوی که بستر را اشباع کند. میکروارگانیسمهای موجود به دو صورت معلق در فاز مایع منافذ و میکروکولونیهای چسبیده به فاز جامد با استفاده از اکسیژن محلول در آب، آلاینده‌های آلی را مورد تجزیه قرار می‌دهند.

۲-۲ فرضیات مدل

فرضیات کلی زیر در به دست آوردن معادلات مدل برای زیست‌درمانی (پاکسازی بیولوژیکی) خاکهای آلوده در نظر گرفته شده است:

الف- آب در منافذ، فاز مایع را تشکیل می‌دهد و بقیه قسمتهای بستر فاز جامد است. از آنجایی که بستر با آب اشباع شده، فاز گازی وجود ندارد.

ب- فقط سه ماده؛ سوبسترا (آلاینده)، اکسیژن و توده سلولی در تجزیه بیولوژیکی شرکت دارند.

ج- به صورت ماکروسکوپی، جریان یک بعدی در میان فاز مایع حکم فرماست. قسمت تخلخل در هر سطح مقطع از بستر متخلخل ثابت است، بنابراین سرعت مایع در منافذ^۳ بستر ثابت است.

د- جریان جابه جایی و پراکندگی در فاز جامد وجود ندارد.

ه- مجموعه میکروارگانیسمهای موجود در فاز جامد به صورت میکروکولونی در مرز بین فاز جامد و مایع چسبیده‌اند.

و- تجزیه بیولوژیکی توسط میکروکولونیها در فصل مشترک فاز مایع و جامد صورت می‌گیرد و به بیان دیگر واکنشی در توده فاز جامد صورت نمی‌گیرد.

ز- به دلیل کوچک بودن قطر منافذ، ضخامت لایه ساکن فیلم مایع چسبیده به فاز جامد بسیار کم بوده و در نتیجه از گرادیان غلظت در لایه ساکن می‌توان صرف نظر کرد.

۲-۳ استخراج مدل عمومی

نمودار شماتیکی انتقال و تجزیه بیولوژیکی در یک حجم کنترل شده در شکل (۱) نشان داده شده است. موازنه جرم جزء *i* در

$$\rho \frac{\partial q_i}{\partial t} = aj_i^s \quad (4)$$

سرعت انتقال جرم جزء i از فاز مایع به مرز دو فاز برابر مجموع سرعت انتقال آن از مرز تا توده فاز جامد و سرعت مصرف آن در مرز دو فاز باشد.

$$aj_i^L = aj_i^s + \rho(-r_i^{sf}) \quad (5)$$

جایگزین کردن این معادله در معادله (۲) نتیجه می‌دهد:

$$\varepsilon \frac{\partial C_i}{\partial t} = \varepsilon E \frac{\partial^2 C_i}{\partial x^2} - \varepsilon v \frac{\partial C_i}{\partial x} + \varepsilon r_i^L + \rho r_i^{sf} - aj_i^s \quad (6)$$

معادلات (۴) و (۶)، معادلات عمومی انتقال برای جزء i ، به ترتیب در فازهای جامد و مایع هستند. این تعداد معادله منجر به دو نوع از مدل‌های انتقال، تعادلی و غیرتعادلی می‌شود. اگر سرعت جذب و دفع همه اجزا به میزان کافی سریع باشد که غلظتها در فاز مایع، (C_i) در حال تعادل با غلظتها در فاز جامد، (q_i) باشد، نتیجه یک مدل تعادلی است.

از آنجا که سرعت دفع سوپسترا یا آلاینده از ذرات خاک به فاز مایع به طور عمومی با انتقال در داخل شبکه ریزشان کنترل می‌شود؛ بنابراین غلظت سوپسترا در فاز مایع در حال تعادل با غلظت آن در فاز جامد نیست. لذا مدل غیرتعادلی مناسبتر از مدل تعادلی برای پاکسازی بیولوژیکی خاکهای آلوده است.

۲-۴- استخراج مدل غیر تعادلی

همان طوری که قبلاً ذکر شده دو معادله (۴) و (۶)، برای سوپسترا مورد نیازند. از نظر مدل فیلمی، فلاکس جرمی سوپسترا، J_s^s در این معادلات می‌تواند به صورت زیر بیان شود:

$$(-J_s^s) = k_s' (q_s - q_s^*) \quad (7)$$

که q_s^* غلظت سوپسترا در فاز جامد است که در حال تعادل با غلظت آن در فاز مایع است برای مثال:

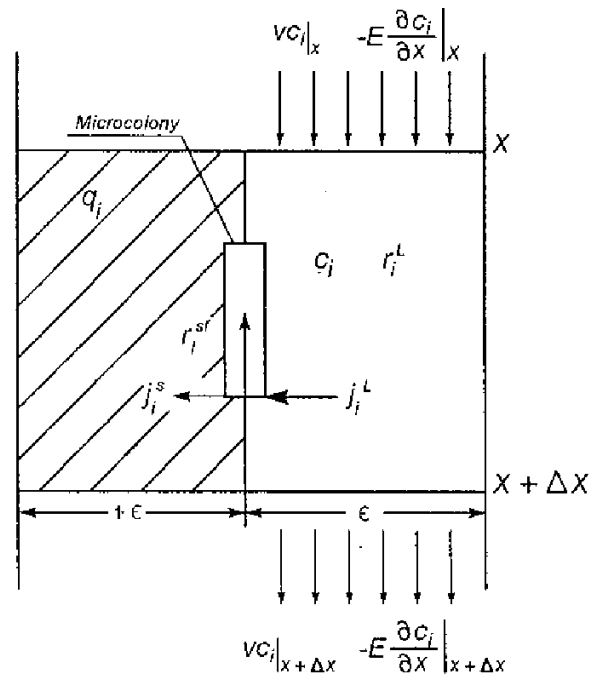
$$q_s^* = K_{ds} C_s \quad (8)$$

جایگزین کردن این عبارت در معادله (۷) منجر می‌شود به

$$(-J_s^s) = k_s \left(\frac{q_s}{K_{ds}} - C_s \right) \quad (9)$$

که

$$k_s = k_s' K_{ds} \quad (10)$$



شکل ۱- نمودار شماتیکی انتقال و پاکسازی بیولوژیکی در یک حجم کنترل

فاز مایع به صورت زیر است:

$$\varepsilon A(\Delta x) \frac{\partial C_i}{\partial t} = \varepsilon A \left(-E \frac{\partial C_i}{\partial x} + vC_i \right) \Big|_x - \varepsilon A \left(-E \frac{\partial C_i}{\partial x} + vC_i \right) \Big|_{x+\Delta x} + \varepsilon A(\Delta x) r_i^L - A(\Delta x) aj_i^L \quad (1)$$

که i بیانگر s, o و b به ترتیب سوپسترا، اکسیژن و توده سلولی است. A مساحت سطح مقطع، a مساحت فصل مشترک هر واحد حجم از بستر است و ε تخلخل بستر یا کسر حجمی قسمت توده فاز مایع است. با تقسیم کردن دو طرف معادله (۱)

بر Δx و نزدیک کردن Δx به سمت صفر نتیجه می‌شود:

$$\varepsilon \frac{\partial C_i}{\partial t} = \varepsilon E \frac{\partial^2 C_i}{\partial x^2} - \varepsilon v \frac{\partial C_i}{\partial x} + \varepsilon r_i^L - aj_i^L \quad (2)$$

موازنه جرم مربوط به فاز جامد به صورت زیر است.

$$\rho A(\Delta x) \frac{\partial q_i}{\partial t} = A(\Delta x) aj_i^s \quad (3)$$

ρ دانسیته توده بستر است. معادله بالا می‌تواند به صورت زیر ساده شود.

رفتن است. سرعت رشد توده سلولی به شکل میکروکولونیها در مرز دو فاز، r_b^{sf} ، به صورت زیر است.

$$r_b^{sf} = \mu_m q_b \left(\frac{C_s}{K_s + C_s} \right) \left(\frac{C_o}{K_o + C_o} \right) - k_d q_b \quad (19)$$

که q_b غلظت میکروکولونیها در مرز دو فاز بر مبنای جرم فاز جامد است. به طور مشابه، سرعت تجزیه سوبسترا توسط میکروارگانیسمهای معلق در فاز مایع، $-r_s^L$ ، به این صورت بیان می شود.

$$(-r_s^L) = \frac{\mu_m}{Y_s} C_b \left(\frac{C_s}{K_s + C_s} \right) \left(\frac{C_o}{K_o + C_o} \right) \quad (20)$$

سرعت تجزیه سوبسترا توسط میکروارگانیسمها در مرز دو فاز، $-r_s^{sf}$ است.

$$(-r_s^{sf}) = \frac{\mu_m}{Y_s} q_b \left(\frac{C_s}{K_s + C_s} \right) \left(\frac{C_o}{K_o + C_o} \right) \quad (21)$$

سرعت مصرف اکسیژن در توده فاز مایع، $-r_o^L$ ، و در مرز دو فاز، $-r_o^{sf}$ ، به ترتیب به صورت زیر است.

$$(-r_o^L) = \frac{\mu_m}{Y_o} C_b \left(\frac{C_s}{K_s + C_s} \right) \left(\frac{C_o}{K_o + C_o} \right) \quad (22)$$

$$(-r_o^{sf}) = \frac{\mu_m}{Y_o} q_b \left(\frac{C_s}{K_s + C_s} \right) \left(\frac{C_o}{K_o + C_o} \right) \quad (23)$$

با جایگزینی عبارات سنتتیکی بالا و رابطه تعادلی (۷) توده سلولی، معادله (۱۵) در معادله‌های (۱۱)، (۱۴) و (۱۶) به ترتیب نتیجه می دهد.

$$\frac{\partial C_s}{\partial t} = E \frac{\partial^2 C_s}{\partial x^2} - v \frac{\partial C_s}{\partial x} + \frac{k_s a}{\varepsilon} \left(\frac{q_s}{K_{ds}} - C_s \right) - \frac{\mu_m}{Y_s} \times$$

$$R_b C_b \left(\frac{C_s}{K_s + C_s} \right) \left(\frac{C_o}{K_o + C_o} \right) \quad (24)$$

$$\frac{\partial C_o}{\partial t} = E \frac{\partial^2 C_o}{\partial x^2} - v \frac{\partial C_o}{\partial x} - \frac{\mu_m}{Y_s} R_b C_b \left(\frac{C_s}{K_s + C_s} \right) \times$$

$$\left(\frac{C_o}{K_o + C_o} \right) \quad (25)$$

$$R_b \frac{\partial C_b}{\partial t} = E \frac{\partial^2 C_b}{\partial x^2} - v \frac{\partial C_b}{\partial x} + \mu_m R_b C_b \left(\frac{C_s}{K_s + C_s} \right) \times$$

$$\left(\frac{C_o}{K_o + C_o} \right) - k_d R_b C_b \quad (26)$$

جایگزین کردن معادله (۹) در معادله (۶) و (۴) به ترتیب نتیجه می دهد:

$$\varepsilon \frac{\partial C_s}{\partial t} = \varepsilon E \frac{\partial^2 C_s}{\partial x^2} - \varepsilon v \frac{\partial C_s}{\partial x} + \varepsilon r_s^L + \rho r_s^{sf} + a k_s \left(\frac{q_s}{K_{ds}} - C_s \right) \quad (11)$$

$$\rho \frac{\partial q_s}{\partial t} = -a k_s \left(\frac{q_s}{K_{ds}} - C_s \right) \quad (12)$$

فلاکس اکسیژن J_o^s به دلیل آن که فاز جامد به سختی اکسیژن جذب می کند، قابل صرف نظر کردن است. بنابراین

$$\frac{\partial q_o}{\partial t} = 0 \quad (13)$$

$$\varepsilon \frac{\partial C_o}{\partial t} = \varepsilon E \frac{\partial^2 C_o}{\partial x^2} - \varepsilon v \frac{\partial C_o}{\partial x} + \varepsilon r_o^L + \rho r_o^{sf} \quad (14)$$

سرعت تبدیل توده سلولی به صورت میکروکولونیهای چسبیده و میکروارگانیسمهای معلق، توسط انتقال در داخل شبکه روزنه فاز جامد، کنترل نمی شوند، به دلیل اینکه میکروکولونیها به طور عمده در مرز بین فازهای جامد و مایع قرار دارند. بنابراین، یک جذب و دفع تعادلی موضعی وجود دارد که می تواند به صورت زیر بیان شود:

$$q_b = K_{db} C_b \quad (15)$$

K_{db} ضریب جدایی توده سلولی است. با جایگزینی معادله (۱۵) در معادله (۴) و ترکیب کردن نتیجه آن با معادله (۶) عبارت زیر به دست می آید.

$$\varepsilon R_b \frac{\partial C_b}{\partial t} = \varepsilon E \frac{\partial^2 C_b}{\partial x^2} - \varepsilon v \frac{\partial C_b}{\partial x} + \varepsilon r_b^L + \rho r_b^{sf} \quad (16)$$

$$R_b = 1 + \frac{\rho K_{db}}{\varepsilon} \quad (17)$$

این عبارت جمله فاکتور تأخیر توده سلولی شناخته می شود. جمله‌های واکنش در معادلات (۱۱)، (۱۴) و (۱۶) می توانند در قالب مدل مونود بیان شوند [۱۳].

سرعت رشد توده سلولی به شکل میکروارگانیسمهای معلق

در فاز مایع، r_b^L ، به صورت زیر بیان شده است.

$$r_b^L = \mu_m C_b \left(\frac{C_s}{K_s + C_s} \right) \left(\frac{C_o}{K_o + C_o} \right) - k_d C_b \quad (18)$$

که جمله اول سمت راست برای رشد و جمله دوم برای از بین

$$\frac{\partial \bar{C}_o}{\partial \theta} = \frac{1}{Pe} \frac{\partial^2 \bar{C}_o}{\partial X^2} - \frac{\partial \bar{C}_o}{\partial X} - N_{r,1} W \bar{C}_b \left(\frac{\bar{C}_s}{\bar{K}_s + \bar{C}_s} \right) \left(\frac{\bar{C}_o}{\bar{K}_o + \bar{C}_o} \right) \quad (35)$$

$$\frac{\partial \bar{C}_b}{\partial \theta} = \frac{1}{R_b Pe} \frac{\partial^2 \bar{C}_b}{\partial X^2} - \frac{1}{R_b} \frac{\partial \bar{C}_b}{\partial X} + N_{r,1} \bar{C}_b \left(\frac{\bar{C}_s}{\bar{K}_s + \bar{C}_s} \right) \times \left(\frac{\bar{C}_o}{\bar{K}_o + \bar{C}_o} \right) - N_{r,2} \bar{C}_b \quad (36)$$

$$\frac{\partial \bar{q}_s}{\partial \theta} = \frac{St_m}{R_s - 1} (\bar{q}_s - \bar{C}_s) \quad (37)$$

$$Pe = \frac{Lv}{E} \quad (38)$$

$$N_{r,1} = \frac{\mu_m L}{v} \quad (39)$$

$$N_{r,2} = \frac{k_d L}{v} \quad (40)$$

$$St_m = \frac{k_s a L}{v \varepsilon} \quad (41)$$

$$R_s = 1 + \frac{\rho K_{ds}}{\varepsilon} \quad (42)$$

$$\bar{K}_s = \frac{K_s}{C_{sO}^*} \quad (43)$$

$$\bar{K}_o = \frac{K_o}{C_{of}} \quad (44)$$

$$W = \frac{C_{sO}^* R_s Y_s}{C_{of} Y_o} \quad (45)$$

در میان اعداد بدون بعد، $N_{r,1}$ و $N_{r,2}$ که در معادلات (۳۹) و (۴۰) تعریف شده‌اند به ترتیب اعداد بدون بعد واکنشی، برای رشد و از بین رفتن توده سلولی اند. R_s در معادله (۴۲)، فاکتور تأخیر سوبسترا و W در معادله (۴۵)، نسبت بیشترین مقدار توده سلولی قابل تولید از سوبسترای قابل دسترسی به توده سلولی قابل تولید از اکسیژن قابل دسترس است. بنابراین، می‌تواند به عنوان عدد فاکتور ذخیره اکسیژن^۱ در نظر گرفته شود. برای یک بستر خاکی با ارتفاع L و مساحت سطح مقطع A ، مقدار سوبسترای که در ابتدا در فاز مایع قرار گرفته است، $LA\varepsilon C_{sO}^*$ است و مقدار سوبسترای که در ابتدا در فاز جامد قرار گرفته است، $LA\rho q_{sO}$ است. مجموع این دو مقدار، کل مقدار سوبسترا در بستر $LA\varepsilon C_{sO}^* R_s$ است که R_s در معادله (۴۲) تعریف شده است.

این سه معادله با هم به علاوه معادله (۱۲) به صورت زیر بازنویسی شده:

$$\frac{\partial q_s}{\partial t} = \frac{-k_s a}{\rho} \left(\frac{q_s}{K_{ds}} - C_s \right) \quad (27)$$

مدل غیرتعادلی را تشکیل می‌دهند.

۲-۵- آنالیز ابعادی

برای درک و تجزیه و تحلیل مدل، مناسب است که معادلات را بدون بعد کرده و کلیه اعداد بدون بعد استخراج شود. برای این منظور متغیرهای بدون بعد زیر تعریف شده‌اند:

$$\theta = \frac{tv}{L} \quad (28)$$

$$X = \frac{x}{L} \quad (29)$$

$$\bar{C}_s = \frac{C_s}{C_{sO}^*} \quad (30)$$

$$\bar{C}_o = \frac{C_o}{C_{of}} \quad (31)$$

$$\bar{C}_b = \frac{C_b R_b}{C_{sO}^* R_s Y_s} \quad (32)$$

$$\bar{q}_s = \frac{q_s}{q_{sO}} = \frac{q_s / K_{ds}}{C_{sO}^*} \quad (33)$$

در این تعاریف C_{of} غلظت اکسیژن در محلول خوراک ورودی و C_{sO}^* غلظت سوبسترا در فاز مایع است که با غلظت اولیه سوبسترا در فاز جامد، q_{sO} ، در تعادل خواهد بود باید توجه داشت که در تعریف غلظت بدون بعد سلولی، \bar{C}_b ، صورت به عنوان کل توده سلولی به شکل میکروارگانیسمهای معلق در فاز مایع و هم میکروکولونیهای چسبیده در مرز دو فاز است و مخرج به عنوان بیشترین مقدار توده سلولی قابل تولید از سوبسترای قابل دسترس است که در بستر قرار گرفته است. با جایگزینی متغیرهای بدون بعد در معادلات (۲۴) تا (۲۷) به ترتیب نتیجه می‌دهد:

$$\frac{\partial \bar{C}_s}{\partial \theta} = \frac{1}{Pe} \frac{\partial^2 \bar{C}_s}{\partial X^2} - \frac{\partial \bar{C}_s}{\partial X} + St_m (\bar{q}_s - \bar{C}_s) - N_{r,1} R_s \bar{C}_b \left(\frac{\bar{C}_s}{\bar{K}_s + \bar{C}_s} \right) \left(\frac{\bar{C}_o}{\bar{K}_o + \bar{C}_o} \right) \quad (34)$$

$$\begin{aligned} \text{At } X = 0 \quad \bar{C}_s(\theta, 0) &= 0.00, \bar{C}_o(\theta, 0) = 1.00 \\ \bar{C}_b(\theta, 0) &= 0.01 \\ \text{At } X = 1 \quad \frac{\partial \bar{C}_i}{\partial X} &= 0 \quad i = s, o, b \end{aligned}$$

۳- روش حل عددی و الگوریتم آن

معادلات مدل که در قسمت قبل بسط داده شدند از سه معادله دیفرانسیل جزئی^۸ (PDE) پراکندگی-جابجایی و یک معادله دیفرانسیل معمولی^۹ (ODE) تشکیل شده‌اند. دو مشکل اساسی در حل این معادلات وجود دارد. اول آنکه اگر جمله جابه جایی به جمله پراکندگی غالب باشد به صورت معکوس تحت تأثیر نوسانات عددی و آمیزش عددی افزوده قرار می‌گیرد [۱۴ و ۱۵] و دیگر آنکه، سه معادله PDE توسط جمله‌های واکنش غیرخطی به هم و به معادله ODE متصل شده‌اند.

معادلات به دست آمده به روش تفاضلهای محدود [۱۶ و ۱۷] قابل حل هستند. به طور خلاصه در این روش تفاضلهای محدود را در معادلات مشتقها جایگزین می‌کنیم. دو فرمولی که عمدتاً در اینجا مورد استفاده قرار می‌گیرند عبارت‌اند از:

$$f'(x) \cong \frac{1}{h} [f(x+h) - f(x)]$$

$$f''(x) \cong \frac{1}{h^2} [f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)]$$

اگر فرمول کلی معادله دیفرانسیل جزئی به صورت زیر در نظر گرفته شود

$$\frac{\delta^2}{\delta x^2} u(x, t) = \frac{\delta}{\delta t} u(x, t)$$

با جایگزینی روابط بالا در معادله فوق و فرض $\Delta t = k$ و $\Delta x = h$ خواهیم داشت:

$$\frac{1}{h^2} [u(x+h, t) - 2u(x, t) + u(x-h, t)]$$

اکنون می‌توان از رابطه بالا استفاده کرد و با جلو رفتن گام به گام در زمان t پاسخ را به دست آورد. بدین ترتیب که اگر $u(x, t)$ را به ازای $0 \leq x \leq 1$ و $0 \leq t \leq t_0$ بدانیم، آن گاه رابطه‌ها اجازه می‌دهند تا جواب را برای $t = t_0 + k$ به دست آوریم.

بنابراین بیشترین مقدار توده سلولی قابل تولید از سوستر، $LA\epsilon C_{sO}^* R_s Y_s$ است. در حالتی که اکسیژن و سوستر از بستر خارج نشوند، بیشترین مقدار توده سلولی قابل تولید از سوستر برابر آن مقدار تولید از اکسیژن است که برابر $t_m v A \epsilon C_{of} Y_o$ است. در اینجا v سرعت در منفذ آب و t_m کمترین زمان لازم برای تکمیل فرایند تجزیه بیولوژیکی تحت شرایط جریان لوله‌ای در حالتی است که مقاومت انتقال جرم قابل صرف نظر کردن است. این و معادله (۴۵) منتهی می‌شوند به صورت:

$$\frac{t_m v}{L} = \frac{C_{sO}^* R_s Y_s}{C_{of} Y_o} = W \quad (46)$$

بنابراین، W را می‌توان همچنین به عنوان حداقل زمان بدون بعد برای تکمیل شدن یک فرایند تجزیه بیولوژیکی تعریف کرد. عدد دمکهلر^۷ برای تجزیه بیولوژیکی خاکهای آلوده، (Da) ، را می‌توان با تقسیم کردن معادله (۳۹) بر (۴۱) به دست آورد:

$$Da = \frac{N_{r,t}}{St_m} = \frac{\mu_m}{k_s(a/\epsilon)} \quad (47)$$

این عدد نسبت سرعت رشد مخصوص ماکزیم را به ماکزیم سرعت انتقال سوستر نشان می‌دهد. وقتی که حلالیت آبی سوستر در پاکسازی بیولوژیکی خاکهای آلوده به میزان قابل ملاحظه‌ای پایین است، طوری که C_{sO}^* از ثابت اشباع سوستر K_s خیلی کوچکتر باشد، ثابت اشباع بدون بعد سوستر، \bar{K}_s ، خیلی بزرگتر از واحد خواهد شد. لذا یک عدد دمکهلر اصلاح شده، (Da') ، به صورت زیر تعریف می‌شود.

$$D'_a = \frac{\mu_m / \bar{K}_s}{k_s(a/\epsilon)} \quad (48)$$

توجه داشته باشید که D'_a به صورت معکوس با ضریب انتقال جرم سوستر، k_s ، متناسب است.

۲-۶- شرایط مرزی اولیه

شرایط مرزی اولیه زیر، برای حل عددی معادلات دیفرانسیل به دست آمده، در نظر گرفته شده است:

$$\begin{aligned} \text{At } \theta = 0 \quad \bar{C}_s(0, X) &= 1.00, \bar{q}_s(0, X) = 1.00 \\ \bar{C}_o(0, X) &= 0.05, \bar{C}_b(0, X) = 0.01 \end{aligned}$$

معادله فوق را می توان به صورت زیر بازنویسی کرد:

$$u(x, t+k) = su(x+h, t) + (1-2s)u(x, t) + su(x-h, t)$$

که در آن $S=k/h^2$

برای یافتن جواب تقریبی معادله توسط رایانه بایستی مقادیر h و k را در معادله فوق انتخاب کنیم. بدین ترتیب مقادیر تقریبی $u(x, t+k)$ صریحاً برحسب $u(x, t)$ به دست می آیند. البته برای برقراری شرط پایداری باید $k \leq h^2/2$ اختیار شود و چون لازم است h نسبتاً کوچک باشد، تا تقریب مشتقها توسط تفاضلهای محدود نیز با دقت کافی باشد، لذا k ی متنظر با این h خود بایستی بسیار کوچک انتخاب شود. برای مثال برای $h=0.1$ مقدار $k=0.005$ است که برای حل معادلات دیفرانسیل مدل از نرم افزار مطلب استفاده شده و برنامه حل معادلات از طریق روش تفاضلهای محدود نوشته شده است.

۴- بحث بر نتایج

برای شبیه سازی عددی پارامترهای مورد نظر در قالب اعداد بدون بعد مطابق با جدول (۱) انتخاب شده اند.

اثرات پارامترهای مدل بر روی سرعت پاکسازی بیولوژیکی با تأکید بر روی عدد دمکهلر اصلاح شده، D'_a ، فاکتور تأخیر سوبسترا، R_s و عدد ذخیره اکسیژن، W ، مورد تحلیل و بررسی قرار گرفته است. شکلهای (۲) تا (۴) اثر D'_a را بر سرعت پاکسازی بیولوژیکی نشان می دهند. D'_a بیانگر نسب ماکزیمم سرعت رشد مخصوص به سرعت انتقال مخصوص سوبستراست.

زمانی که ماکزیمم سرعت رشد مخصوص ثابت شده باشد، هر قدر D'_a بزرگتر باشد، سرعت انتقال کوچکتر خواهد بود و یا مقاومت برای انتقال سوبسترا بزرگتر خواهد بود. وقتی که D'_a برابر ۱ باشد، \bar{C}_s کوچکتر از \bar{q}_s خواهد بود، نمودار ۲ را ببینید. تفاوت بین \bar{C}_s و \bar{q}_s بیانگر خروج حالت سیستم از حالت تعادل است که با سرعت انتقال سوبسترا اندازه گیری می شود. زمانی که D'_a به ۰/۵ کاهش می یابد، سرعت انتقال سوبسترا افزایش می یابد ولی تفاوت بین \bar{q}_s و \bar{C}_s به میزان

جدول ۱- پارامترهای مورد استفاده در شبیه سازی عدد

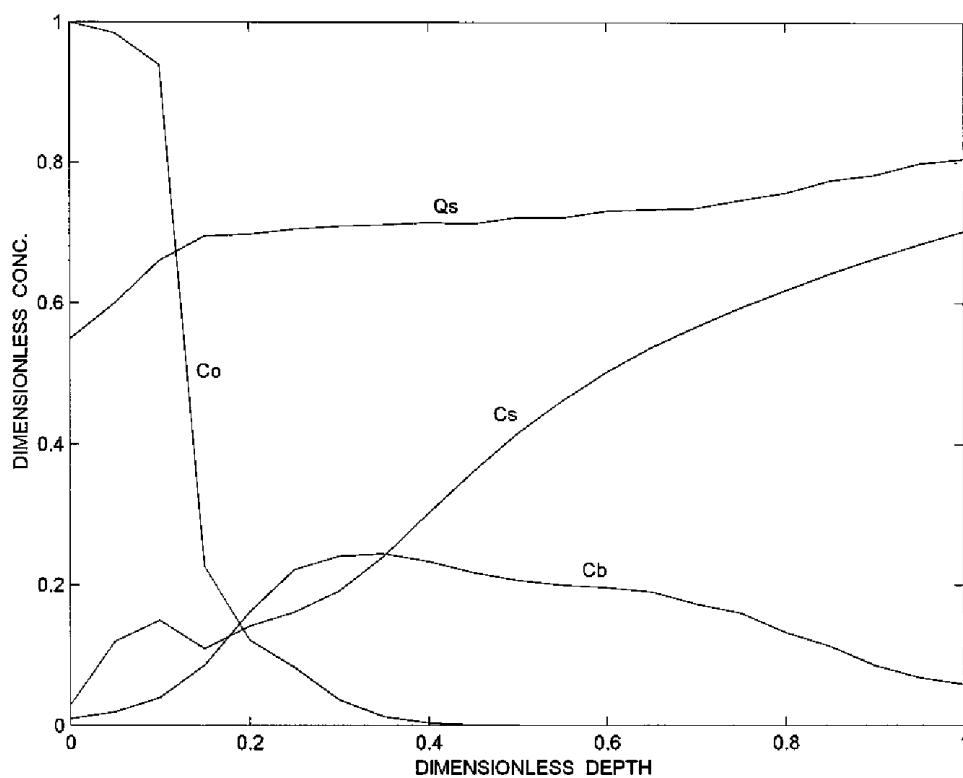
| | |
|------------------|-------------------------|
| $N_{r,1} = 12$ | $N_{r,2} = 0.2$ |
| $\bar{K}_s = 3$ | $\bar{K}_o = 0.05$ |
| $Pe = 100$ | $W = 6,12.5$ |
| $R_s = 20,60,80$ | $R_b = 50$ |
| $St_m = 4,8,40$ | $\bar{D}_a = 0.1,0.5,1$ |

قابل ملاحظه ای ادامه پیدا می کند، نمودار (۳) را ببینید. هنگامی که D'_a ، بیشتر کاهش داده شود تا به ۰/۱ برسد، سرعت انتقال سوبسترا آن قدر شدید می شود که \bar{C}_s و \bar{q}_s نزدیک می شود. یک مقایسه بین نمودار (۲) و (۴) نشان می دهد که با کوچکتر شدن D'_a ، سرعت پاکسازی بیولوژیکی سریعتر می شود.

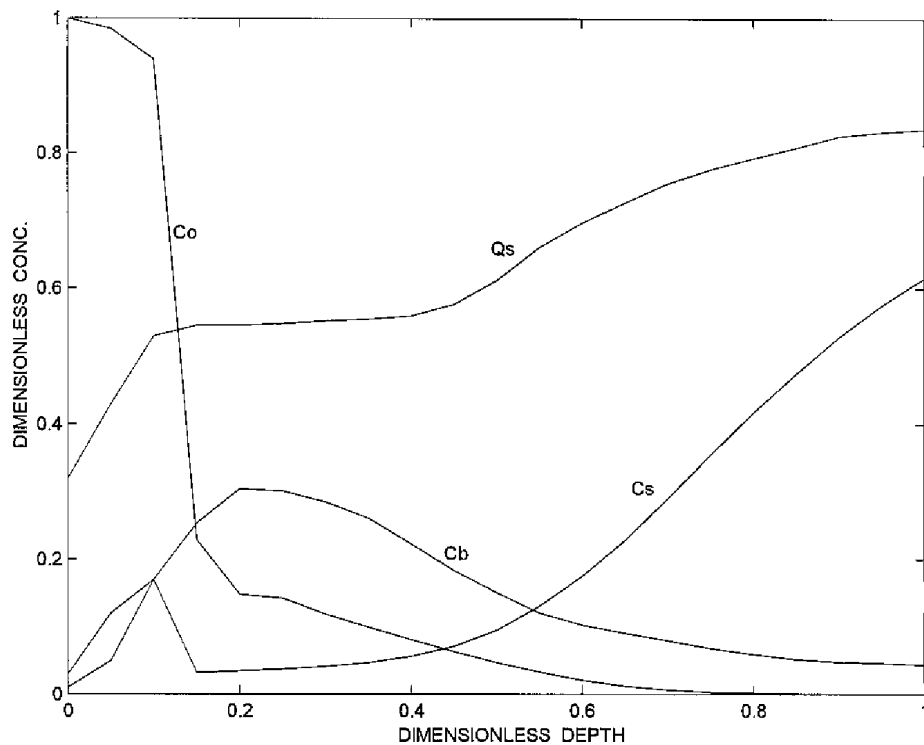
سرعت زیست درمانی (پاکسازی بیولوژیکی) همچنین تحت تأثیر فاکتور تأخیر، R_s ، است. طبق تعریف R_s بزرگی ثابت تعادل سوبسترا، K_{ds} ، را بیان می کند. با بزرگتر شدن R_s ، K_{ds} بزرگتر و مطابق با معادلات (۷) و (۹)، گرادیان غلظت و یا نیروی محرک انتقال جرم کوچکتر خواهد شد.

یک مقایسه بین نمودارهای (۴) و (۵) بیان می کند که وقتی R_s از ۲۰ به ۶۰ افزایش می یابد و D'_a ، ۰/۱ باقی می ماند، تفاوت بین \bar{C}_s و \bar{q}_s زیاد می شود و به عبارت دیگر رفتار غیر تعادلی افزایش می یابد. دلیل آن هم این است که سرعت انتقال سوبسترا کاهش می یابد. R_s در پاکسازی خاکهای آلوده ممکن است از ۶۰ بزرگتر باشد. هر قدر R_s بزرگتر باشد سرعت انتقال سوبسترا کاهش می یابد و بنابراین سرعت پاکسازی بیولوژیکی کاهش می یابد.

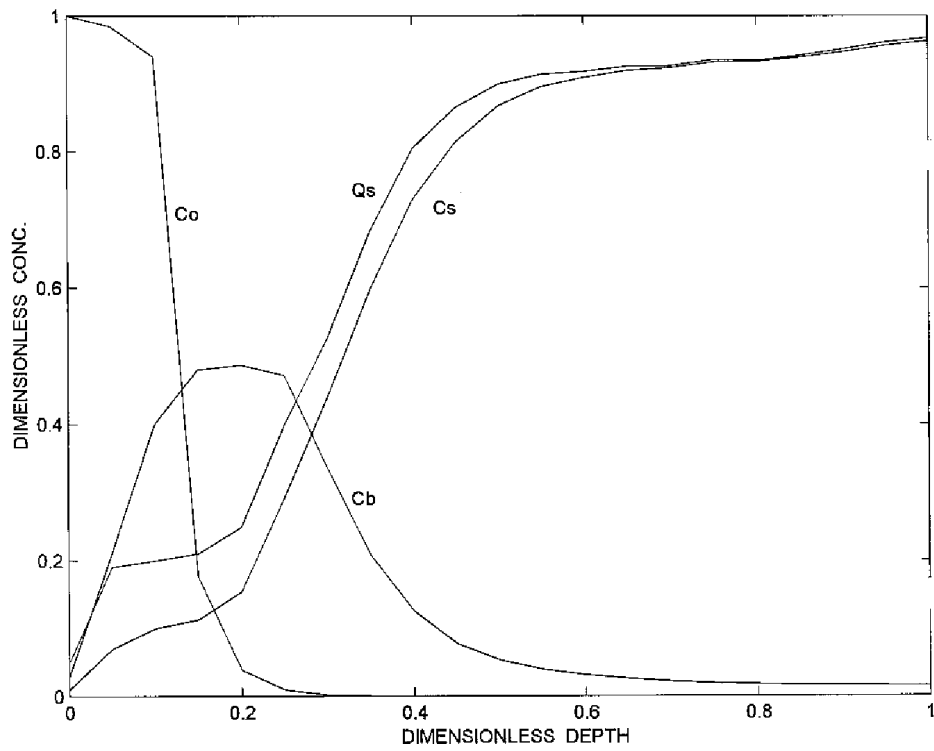
عدد ذخیره اکسیژن، W ، فاکتور دیگری است که بر پاکسازی بیولوژیکی مؤثر است؛ مطابق با معادله (۴۵)، این پارامتر، بیانگر نسبت ماکزیمم مقدار توده سلولی تولید شده از سوبسترای قابل دسترسی به مقدار آن از اکسیژن قابل دسترس است. هر قدر W بزرگتر باشد اکسیژن قابل دسترسی کمتر خواهد بود. شکلهای (۳) تا (۵) بیانگر این مطلب هستند که وقتی W ، ۱۲/۵ و D'_a و یا R_s کوچک باشند، اکسیژن در فاز



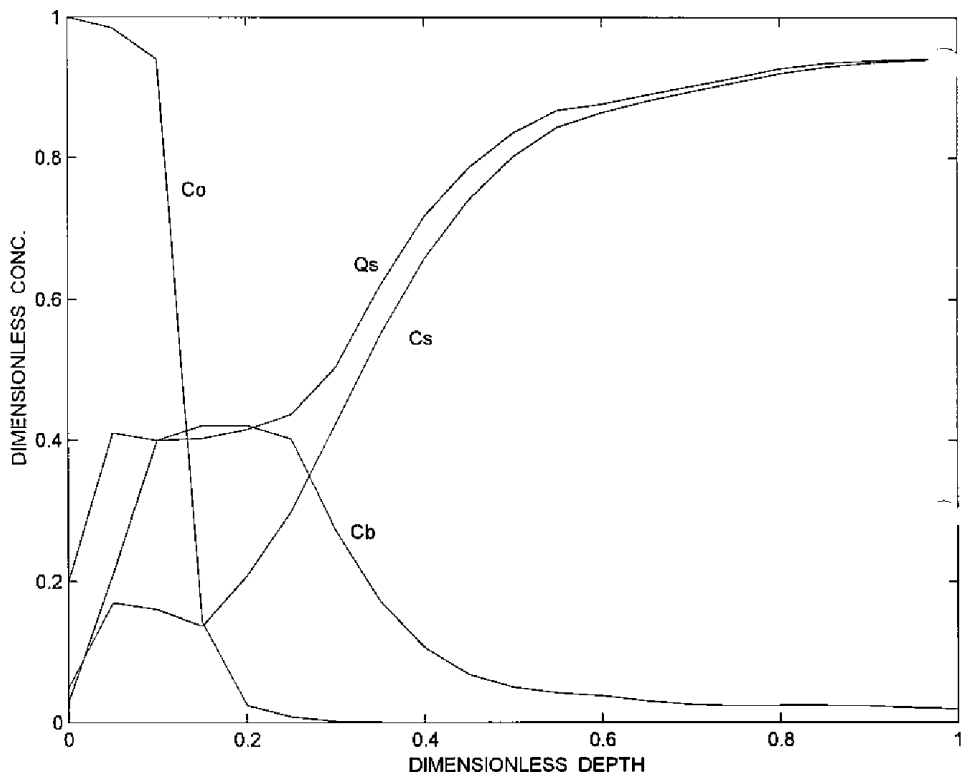
شکل ۲- پروفیل غلظت بر اساس عمق بدون بعد
 $\theta=3$ و $D'_a=1$, $R_s=20$, $W=12.5$



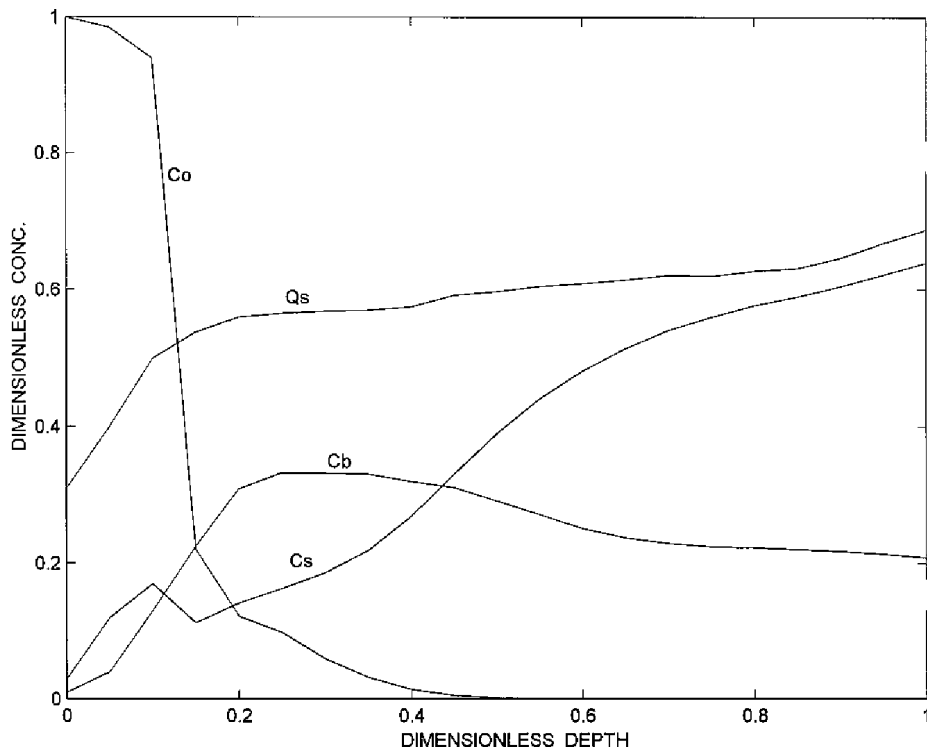
شکل ۳- پروفیل غلظت بر اساس عمق بدون بعد
 $\theta=3$ و $D'_a=0.5$, $R_s=20$, $W=12.5$



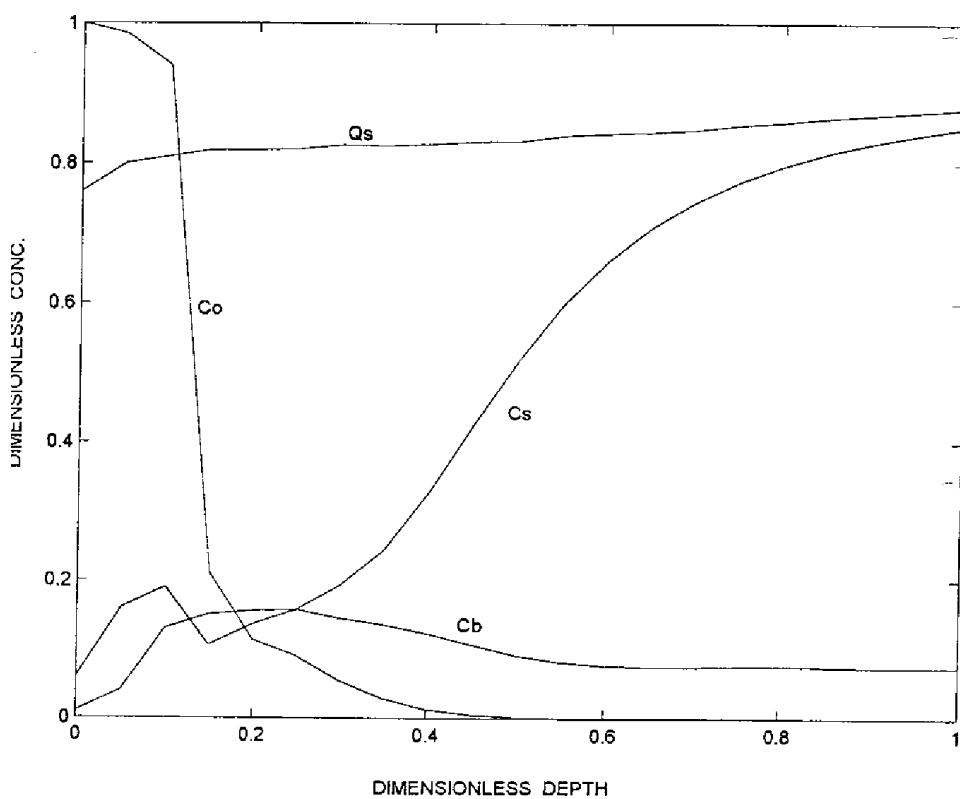
شکل ۴- پروفیل غلظت بر اساس عمق بدون بعد
 $\theta=3$ و $D'_a = 0.1$ ، $R_s=20$ ، $W=12.5$



شکل ۵- پروفیل غلظت بر اساس عمق بدون بعد
 $\theta=3$ و $D'_a = 0.1$ ، $R_s=60$ ، $W=12.5$



شکل ۶- پروفیل غلظت بر اساس عمق بدون بعد
 $\theta=3$ و $D'_a = 0.5$, $R_s=20$, $W=0$



شکل ۷- پروفیل غلظت بر اساس عمق بدون بعد
 $\theta=3$ و $D'_a = 0.5$, $R_s=80$, $W=12.5$

۵- نتیجه گیری

یک مدل ریاضی به منظور بررسی فرایند زیست درمانی خاکهای آلوده بر اساس پدیده‌های پراکندگی و جابه جایی مورد مطالعه قرار گرفته است. معادلات مدل شامل سه معادله دیفرانسیل جزئی و یک معادله دیفرانسیل معمولی بوده که از طریق تحلیل ابعادی می‌توان در قالب اعداد بدون بعدی همچون اعداد پکلت، دمکهلر، فاکتور ذخیره اکسیژن و ... فرایند، را مورد تجزیه و تحلیل قرار داد.

نتایج شبیه سازی مدل فوق بیانگر آن است که سرعت تجزیه بیولوژیکی آلاینده‌ها در خاک نه تنها با کمبود اکسیژن، همچنین به دلیل مقاومت در مقابل حرکت آلاینده‌ها در داخل شبکه متخلخل، محدود می‌شود.

مابع به سرعت مصرف می‌شود و ذخیره اکسیژنی ناکافی در فاز مابع، محدود کننده خواهد شد. یک مقایسه بین نمودار (۳) و (۶) این مطلب را روشن می‌سازد که در صورت کاهش W از $12/5$ به 6 ، سرعت از ذخیره اکسیژن ناکافی کمتر خواهد شد و اثر مقاومت در مقابل توزیع سوبسترا به طور قابل ملاحظه‌ای غلبه خواهد کرد. باید توجه داشت که افزایش R_s می‌تواند مرحله محدود کنندگی سرعت را برای W یکسان، تغییر دهد. برای مثال با افزایش R_s از 20 به 80 و باقی ماندن W در عدد $12/5$ ، می‌توان از اشکال (۳) و (۷) ملاحظه کرد که تفاوت بین \bar{C}_s و \bar{q}_s به طور قابل ملاحظه‌ای افزایش می‌یابد و مقدار \bar{C}_s نیز کاهش می‌یابد که بیانگر این مطلب است که مقاومت در مقابل توزیع سوبسترا عامل محدود کننده است.

واژه نامه

- | | | |
|-------------------|--------------------------|-----------------------------------|
| 1. bioremediation | 4. partition coefficient | 7. Damkohler |
| 2. facultative | 5. retardation factor | 8. partial differential equation |
| 3. pore velocity | 6. oxygen supply factor | 9. ordinary differential equation |

مراجع

- Janssen, L. P., Prins, J., Hoffman, A. C., Meijer, R. J., and Veen, A. W. L., "Modeling Migration of Contaminants in Soil," *Chemical Engineering Communication*, Vol. 89, pp. 37-47, 1990.
- Rifai, H. S., Bedient, P. B., Wilson, J. T., Miller, K. M., and Armstrong, J. M., "Biodegradation Modeling at Aviation Fuel Spill Site," *Environmental Engineering*, Vol. 114, pp. 1007-1029, 1988.
- Ramaswami, A., and Lnthy, R. G., "Mass Transfer and Bioavailability of PAH Compounds in Coal Tar NAPL-Slurry System," *Environmental Science and Technology*, Vol. 31, pp. 2260-2267, 1997.
- Baek, N. H., Clesceri, L. S., and Clesceri, N. L., "Modeling of Enhanced Biodegradation in Unsaturated Soil Zones," *Environmental Engineering*, Vol. 115, pp. 150-172, 1989.
- Baveye, P., and Valocchi, A., "An Evaluation of Mathematical Models of the Transport of Biologically Reacting Solutes in Saturated Soils and Aquifers," *Water Resources Research*, Vol. 25, pp. 1413-1421, 1989.
- Suny, I. A., Lion, L. W., and Shuler, M., "Microscale Based Modeling of Polynuclear Aromatic Hydrocarbon Transport and Biodegradation in Soil," *Biotechnology and Bioengineering*, Vol. 51, pp. 1-14, 1996.
- Waddill, D. W., Student Member, ASCE, and Widdowson, M. A., "Three-Dimensional Model for Subsurface Transport and Biodegradation," *Environmental Engineering*, Vol. 124, pp. 336-344, 1998.
- Borden, R. C. and Bedient, P. B., "Transport of Dissolved Hydrocarbons Influenced by Oxygen-Limited Biodegradation, 1. Theoretical Development," *Water Resources Research*, Vol. 22, pp. 173-180, 1986.
- Windowson, M. A., Molz, F. J., and Benefield, L. D., "A Numerical Transport Model for Oxygen-and Nitrate-Based Respiration Linked to Substrate and Nutrient Availability in Porous Media," *Water Resources Research*, Vol. 24, pp. 1553-1560, 1988.
- Yaghmaei, S., "Modeling, Simulation and Analysis of Bioremediation of Soil Aggregates," *Proceeding*

- of the 4th National Iranian Chemical Engineering Congress, Vol. 3, pp. 265-270, Iran, Tehran, 1999.
11. Yaghmaei, S., Vossoughi, M., and Alemzadeh, I., Seifkordi, A. A., "Computer Simulation of Contaminated soil Intrinsic Bioremediation," *Iranian Journal of science and technology*, Vol. 26, pp. 187-196, 2000.
 12. Yaghmaei, S., "Bioremediation of PAHs contaminated soil," Ph.D. thesis, Dept. of Chemical Eng. Sharif University of Technology, Tehran, I. R., Iran, 2000.
 13. Bailey, J. E., and Ollis, D. F., *Biochemical Engineering Fundamentals*, pp. 373-456, McGraw-Hill, New York, 1985.
 14. Finlayson, B. A., *Nonlinear Analysis in Chemical Engineering*, pp. 231-265, McGraw-Hill, New York, 1980.
 15. Oran, E. S. and Boris, J. P., *Numerical Simulation of Reactive Flow*, pp. 79-133, Elsevier, New York, 1987.
 16. Strang, W. G., and Fix, G. J., *An Analysis of the Finite Element Method*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, 1973,
 17. Zienkiewicz, O., *The Finite-Element Method in Engineering Science*, McGraw-Hill, London, 1971.