



Original Article

Numerical Modeling of Radiative Transfer in NETmix Photocatalytic Reactors Using Hamiltonian-Based Ray Tracing in COMSOL

Ahmad Hamzavi and Mohsen Emami *

Department of Mechanical Engineering, Isfahan University of Technology, Isfahan, Iran

Abstract: In this paper, a numerical study was carried out to optimize the light intensity distribution over the photocatalytic surface of a NETmix reactor by examining the influence of five key parameters: irradiation angle, light source power, arrangement type, number of sources, and the distance between the sources and the catalyst surface. The exact geometry of the reactor was modeled using the Ray Optics module in COMSOL Multiphysics, and the light intensity distribution was simulated for 25 different combinations of these parameters. Qualitative and quantitative results from radiation contours and average light intensity showed that a hexagonal arrangement provides the most uniform light distribution, while specific parameter values—including an angle of 100° , power of 10 W, square arrangement, 72 LEDs, and a distance of 10 mm—produced the highest average irradiance of 899.9 W/m^2 . Analysis of the results indicated that selecting the optimal combination of optical parameters plays a decisive role in enhancing photocatalytic performance; optimizing only one variable without considering others will not yield satisfactory results. This study can serve as a foundation for effective optical design in purification, synthesis, and photochemical processes by providing a comprehensive numerical framework for analyzing light distribution in photocatalytic reactors.

Keywords: Photocatalytic Reactor, Radiative Transfer, Ray Tracing Method, Wavefront Propagation, Hamiltonian Optics.

Received: May 26, 2025; Revised: Jul. 22, 2025; Accepted: Jul. 29, 2025; Published Online: Aug. 18, 2025.

* Corresponding Author: mohsen@iut.ac.ir

How to Cite: Hamzavi Ahmad and Emami Mohsen, Numerical modeling of radiative transfer in netmix photocatalytic reactors using hamiltonian-based ray tracing in COMSOL, Journal of Computational Methods in Engineering; 2025, 44(1), 103-131; DOI: 10.47176/jcme.44.1.1051





مدل‌سازی عددی انتقال تابش در راکتور فوتوکاتالیستی نت میکس با استفاده از روش ردیابی پرتو همیلتونی در کامسول

احمد حمزوی و محسن دوازده‌امامی

دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان

چکیده- در این مقاله، به منظور بهینه‌سازی توزیع شدت نور بر سطح فوتوکاتالیستی یک راکتور NETmix، تأثیر پنج پارامتر کلیدی شامل زاویه تابش، توان منبع نوری، نوع آرایش، تعداد منابع نور، و فاصله منبع تا سطح کاتالیست به صورت عددی مورد بررسی قرار گرفت. هندسه دقیق راکتور با استفاده از ماژول Ray Optics در نرم‌افزار کامسول مدل‌سازی شد و توزیع شدت تابش برای ۲۵ ترکیب مختلف از این پارامترها شبیه‌سازی گردید. نتایج کیفی و کمی حاصل از کانتورهای تابش و میانگین شدت نور نشان داد که آرایش شش ضلعی یکنواخت‌ترین توزیع نور را فراهم می‌کند، در حالی که ترکیب خاصی از پارامترها شامل زاویه ۱۰۰ درجه، توان ۱۰ وات، آرایش مربعی، تعداد ۷۲ ال‌ای‌دی و فاصله ۱۰ میلی‌متر، بیشترین مقدار میانگین تابش به میزان ۸۹۹۰۹ وات بر متر مربع را ایجاد کرده است. تحلیل نتایج نشان داد که انتخاب ترکیب بهینه‌ای از پارامترهای نوری، نقش تعیین‌کننده‌ای در بهبود عملکرد فوتوکاتالیستی دارد؛ به طوری که بهینه‌سازی تنها یک متغیر، بدون در نظر گرفتن تأثیر متقابل سایر پارامترها، نمی‌تواند به نتایج مطلوب منجر شود. این پژوهش با ارائه یک چارچوب عددی جامع برای تحلیل توزیع تابش در راکتورهای فوتوکاتالیستی، می‌تواند به عنوان مبنایی برای طراحی مؤثر سیستم‌های نوری در کاربردهایی نظیر تصفیه، سنتز و فرایندهای فتوشیمیایی مورد استفاده قرار گیرد.

واژه‌های کلیدی: راکتور فوتوکاتالیستی، میدان تابشی، روش ردیابی پرتو، معادله انتقال تابش، ضریب شکست متغیر.

دریافت مقاله: ۱۴۰۴/۰۳/۰۵، بازنگری: ۱۴۰۴/۰۴/۳۱، پذیرش: ۱۴۰۴/۰۵/۰۷، اولین انتشار: ۱۴۰۴/۰۵/۲۷

* نویسنده مسئول، رایانامه: mohsen@iut.ac.ir



فهرست علائم

I	شدت تابش (W/m^2)	$\hat{S}$	بردار واحد جهت انتشار پرتو
I_0	شدت اولیه تابش در ابتدای مسیر (W/m^2)	T	زمان (s)
I_b	شدت تابش زمینه - تابش سیاه جسمی ($W/m^2 \cdot sr$)	V_e	عدد آبه - نشانگر میزان پراکندگی کروماتیکی
N	ضریب شکست محیط	$\alpha(r)$	ضریب جذب - وابسته به مکان (m^{-1})
n_1	ضریب شکست محیط اول	Φ	تابع فاز پراکندگی (sr^{-1})
n_2	ضریب شکست محیط دوم	θ_1	زاویه برخورد پرتو نسبت به خط عمود در محیط اول (rad)
nd	ضریب شکست در طول موج مشخص	θ_2	زاویه شکست پرتو نسبت به خط عمود در محیط دوم (rad)
$\vec{q}$	موقعیت لحظه‌ای پرتو در فضا (m)	ω	فرکانس زاویه‌ای به عنوان تابع همیلتونی (rad/s)
$\vec{k}$	بردار موج (m^{-1})	σ	ضریب پراکندگی در موقعیت (m^{-1})
$\kappa(r)$	ضریب جذب در موقعیت r	s(r)	فضای زاویه‌ای برای یکپارچه‌سازی جهت‌ها (sr)
S	مسیر طی شده توسط پرتو (m)	Ω'	

۱- مقدمه

پدید آورند. فرآیندهای فوتوکاتالیستی سال‌هاست که به عنوان یکی از راهکارهای زیست محیطی در کشورهای صنعتی دنیا به کار می‌روند.

رویکردهای فوتوکاتالیستی موجود در طبیعت و صنایع را می‌توان در دو مورد زیر خلاصه کرد:

- فوتوکاتالیست‌های طبیعی (فوتوستز): فوتوستز موفق‌ترین عمل فوتوکاتالیستی طبیعی است. این فرایند، به عنوان نتیجه هوشمندانه میلیاردها سال تکامل طبیعت، منبع اصلی تأمین انرژی در طبیعت بوده است. کربوهیدرات‌ها محصولات اصلی این واکنش‌های فوتوکاتالیستی هستند.
- فوتوکاتالیست‌های مصنوعی: هنگامی که واکنش‌های احیا و اکسیداسیون به طور عمدی از هم جدا نشوند، فرایند حاصل یک فرایند فوتوکاتالیستی است که شامل واکنش‌های فوتوکاتالیستی همگن و ناهمگن می‌شود.

با افزایش آگاهی جوامع از خطرات جبران‌ناپذیر استفاده گسترده از مواد آلاینده و انتشار آن‌ها به محیط زیست، کاهش تأثیرات آن‌ها در دو دهه اخیر حائز اهمیت شده است. رعایت دقیق استانداردهای زیست محیطی منوط به کنترل آلاینده‌هایی است که بوسیله فرایندهای تصفیه بیولوژیکی حذف نمی‌شوند، و فرآیندهای دیگری به منظور حذف آن‌ها مورد نیاز است؛ بدین منظور از کاتالیست‌ها استفاده می‌شود.

کاتالیست ماده‌ای است که با شرکت در واکنش‌های شیمیایی، سرعت آن‌ها را افزایش می‌دهد، اما خود دچار تغییر نمی‌شود و در پایان واکنش مجدداً قابل استفاده است. واژه فوتوکاتالیست به کاتالیست‌هایی اطلاق می‌شود که در حضور نور فعال می‌شوند. بخش عمده این مواد اکسیدهای جامد نیمه‌هادی هستند که با جذب فوتون‌های نور، یک جفت الکترون-حفره در آن‌ها ایجاد می‌شود. این جفت الکترون-حفره می‌تواند با مولکول‌هایی که در سطح این ذرات قرار دارند واکنش داده و فرآیندهای خاصی را

می‌تواند باعث افزایش فوتواکتیویته^۱ (تغییر فیزیکی یا شیمیایی در پاسخ به نور) شود به طوری که نیازی به پتانسیل خارجی نباشد [۷]. تحقیقاتی که در سال ۱۹۸۰ توسط واگنر و سامورجانی انجام شد باعث تولید هیدروژن بر روی سطح تیتانات استرانسیم^۲ و تولید هیدروژن و متان از TiO_2 و PtO_2 ، در اتانول شد [۸]. تحقیق و توسعه در زمینه فوتوکاتالیست‌ها، تا به امروز ادامه دارد اما تاکنون اهداف تجاری در این مورد به اندازه کافی توسعه نیافته‌اند.

فرآیند فوتوکاتالیستی اساساً بر روی مواد نیمه‌رسانا صورت می‌گیرد. نیمه‌رساناها ساختار نواری دارند. نوار رسانش^۳ با نوار ظرفیت^۴ فاصله‌ای دارد که به آن بند گپ^۵ می‌گویند. زمانی که انرژی فوتون بیش از بند گپ باشد، الکترون در نوار ظرفیت برانگیخته شده و به نوار رسانش می‌رود و حفره در نوار ظرفیت ایجاد می‌شود. این الکترون و حفره برانگیخته شده عامل اکسایش و کاهش هستند. شکل (۱) ساختار نواری یک فوتوکاتالیست نیمه رسانا را نشان می‌دهد. مشخصه مهم در مواد فوتوکاتالیست نیمه‌رسانا، عرض بند گپ و سطح نوار ظرفیت و سطح نوار رسانش است. به عبارت ساده‌تر، بندگپ حداقل انرژی مورد نیاز برای حرکت الکترون از نوار ظرفیت تا نوار رسانش است، جایی که می‌تواند آزادانه جریان پیدا کند. تفاوت در این شکاف انرژی سبب تمایز مواد رسانا، نیمه رسانا و عایق می‌شود.

مشخصه مهم در مواد فوتوکاتالیست نیمه‌رسانا، عرض بند گپ و سطح نوار ظرفیت و سطح نوار رسانش است. به عبارت ساده‌تر، بندگپ حداقل انرژی مورد نیاز برای حرکت الکترون از نوار ظرفیت تا نوار رسانش است، جایی که می‌تواند آزادانه جریان پیدا کند. تفاوت در این شکاف انرژی سبب تمایز مواد رسانا، نیمه رسانا و عایق می‌شود.

بسیاری از اکسیدهای فلزی، سولفیدها و نیتrideهای که بر پایه کاتیون‌های فلزی گروه d^0 و d^{10} هستند خاصیت فوتوکاتالیستی دارند. فوتوکاتالیست‌هایی که بر پایه کاتیون‌های فلزی فعال با اوربیتال d خالی می‌باشند به عنوان گروه d^0 تعریف می‌شوند و فوتوکاتالیست‌های که بر پایه کاتیون‌های فلزی معمولی با اوربیتال

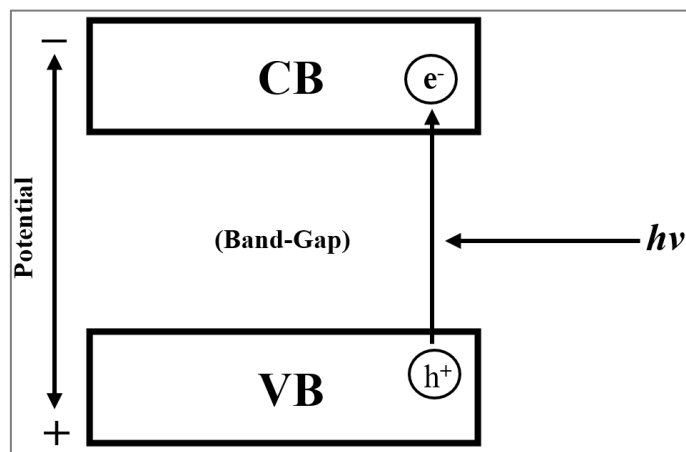
یکی از نقاط عطف مهم در توسعه فناوری‌های فوتوکاتالیستی، کشف قابلیت تجزیه آب با استفاده از الکتروکاتالیست TiO_2 تحت تابش نور فرابنفش بود که نخستین بار توسط فوجیشیما و همکارانش مطرح و بعدها به‌طور کامل بررسی شد [۱]. این دستاورد، آغازگر موجی از تحقیقات در زمینه کاربرد نانومواد در سامانه‌های تبدیل انرژی شد، که در سال‌های اخیر نیز به‌صورت گسترده در منابع مروری به آن پرداخته شده است.

TiO_2 به دلیل ویژگی‌های منحصربه‌فردی مانند پایداری شیمیایی بالا، هزینه‌ی پایین، در دسترس بودن، عدم سمی بودن، و ظرفیت بالا برای اکسیداسیون گونه‌های آلی و معدنی، به‌عنوان یکی از مؤثرترین و پرکاربردترین فوتوکاتالیست‌ها شناخته می‌شود [۲، ۳]. با این حال، یکی از محدودیت‌های اصلی TiO_2 آن است که تنها تحت تابش نور فرابنفش فعال می‌شود، چرا که گاف انرژی آن در حدود 3.2 الکترون‌ولت است و تنها بخش کوچکی از طیف نور خورشید (کمتر از 5%) را در بر می‌گیرد.

در پاسخ به این محدودیت، پژوهش‌های گسترده‌ای در سال‌های اخیر به‌منظور توسعه و بهبود عملکرد فوتوکاتالیستی TiO_2 و سایر نیمه‌رساناها انجام شده است. استراتژی‌هایی مانند دوپ کردن با فلزات واسطه یا عناصر غیرفلزی، اصلاح سطحی با ایجاد نقص‌های بلوری کنترل‌شده و ترکیب با مواد حساس به نور مرئی، از جمله روش‌هایی هستند که برای افزایش پاسخ‌دهی در طیف مرئی و ارتقاء بازده تبدیل انرژی فوتونی به واکنش‌های شیمیایی استفاده شده‌اند [۴، ۵].

افزون بر این، مفاهیم جدیدی نظیر سامانه‌های Z -شکل و فوتوکاتالیست‌های پلاسمونیک، نیز معرفی شده‌اند تا بازده واکنش‌های فوتوشیمیایی را با استفاده از بهره‌گیری هم‌زمان از جذب نور، جدایش بارهای نوری، و واکنش‌های سطحی ارتقاء دهند [۶].

از گذشته، محققان همواره در پی یافتن راهکارهایی برای افزایش بهره‌وری و کاربردپذیری فوتوکاتالیست‌ها بوده‌اند. در همین راستا، در سال ۱۹۷۷ نوزیک کشف کرد که ترکیب فلز نجیب در فرآیند فوتولیز الکتروشیمیایی، مانند پلاتین و طلا،



شکل ۱. ساختار نواری فوتوکاتالیست نیمه رسانا.

H	IIA										III A										IVA	VA	VI A	VII A	He
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne								
Na	Mg	III B	IV B	VB	VI B	VII B	VII I			IB	IIB	Al	Si	P	S	Cl	Ar								
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr								
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe								
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn								

Ti⁴⁺
3d⁰4s⁰

Zr⁴⁺
4d⁰5s⁰

Nb⁵⁺
4d⁰5s⁰

Mo⁶⁺
4d⁰5s⁰

Ta⁵⁺
5d⁰6s⁰

W⁶⁺
5d⁰6s⁰

d⁰ metal
oxide

Ga³⁺
3d¹⁰4s⁰

Ge⁴⁺
3d¹⁰4s⁰

In³⁺
4d¹⁰5s⁰

Sn⁴⁺
4d¹⁰5s⁰

Sb⁵⁺
4d¹⁰5s⁰

d¹⁰
metal
oxide

شکل ۲. عناصر اصلی تشکیل دهنده فوتوکاتالیست‌های پر کاربرد [۹].

برای وقوع یک واکنش فوتوکاتالیستی، لازم است تا ۴ مرحله زیر اجرا شود:

- جذب انرژی نور برای تولید جفت‌های الکترون-حفره
- جدایش بارهای برانگیخته (بار مثبت حفره و بار منفی الکترون)
- انتقال الکترون‌ها و حفره‌ها به سطح فوتوکاتالیست

d پر می‌باشند به عنوان گروه d^{۱۰} تعریف می‌شوند. شکل (۲) عناصر اصلی تشکیل دهنده فوتوکاتالیست‌های پر کاربرد را نشان می‌دهد.

مهم‌ترین فوتوکاتالیست این دو گروه دی اکسید تیتانیوم است که یکی از مناسب‌ترین مواد فوتوکاتالیستی برای تجزیه آلاینده‌ها در زیر نور است.

• استفاده از بارهای موجود در سطح برای واکنش‌های اکسایش و احیا

بارهای برانگیخته سطحی که عمر طولانی‌تری دارند، امکان وقوع واکنش‌های اکسیداسیون و احیا را فراهم می‌کنند. در فرایند کاتالیست نوری^۶، با جذب نور خورشید (یا نورهای مصنوعی) واکنش تخریب^۷ از منظر ترمودینامیکی به صورت خود به خودی انجام می‌شود. برای مثال این فرایند می‌تواند در تخریب آلاینده‌های آلی موجود در آب به کار رود.

سال‌ها است که تحقیقات بسیاری در زمینه شناخت و توسعه واکنش‌های فوتوکاتالیستی و کاربرد آن‌ها در حل مسائل زیست محیطی صورت گرفته است. در سال‌های اخیر با شناخت بیشتر این فناوری و رشد تکنولوژی تحقیقات صورت گرفته نیز به صورت چشمگیری افزایش یافته‌اند. بسیاری از تحقیقات به صورت پیوسته به سمت کاربردی شدن سوق می‌یابند. با توجه به مزایایی که فوتوکاتالیست‌ها زمینه‌های مختلف ایجاد می‌کنند توانایی بالایی برای کاربردی شدن در زمینه‌های مختلف دارند. اکسیداسیون کاتالیستی یکی از راهکارهای موثر و کم‌هزینه برای تصفیه هوا، به‌ویژه تصفیه هوای داخل ساختمان است. تاکنون تحقیقات بسیاری بر روی اکسیداسیون کاتالیستی در مقیاس محدود با استفاده از نور ماوراءبنفش^۸ انجام شده است. این تحقیقات عموماً بر روی حذف آلاینده‌هایی نظیر NOx ها [۱۰]، SOx ها [۱۱]، VOC ها [۱۲] و بوهای نامطبوع [۱۳] انجام گرفته است.

از اواخر دهه ۱۹۷۰، فرایندهای کاتالیستی به عنوان ابزاری موثر برای حل مشکلات زیست محیطی مورد بررسی قرار گرفتند. به صورت خاص، این فرایند در زمینه انرژی با تحقیقات فوجیشیما و هوندا [۱۴] در جداسازی الکتریکی اجزای آب با کمک نور و الکترودهای دی اکسید تیتانیوم انجام شد. در سال ۱۹۹۲ تحقیقات پرال و اولیس [۱۵] بر روی کاربرد اکسیداسیون کاتالیستی ارگانیک‌های فاز گازی، به ارائه یک روش موثر برای پاک‌سازی آلاینده‌های هوا منجر شد. آن‌ها با استفاده از یک مدل

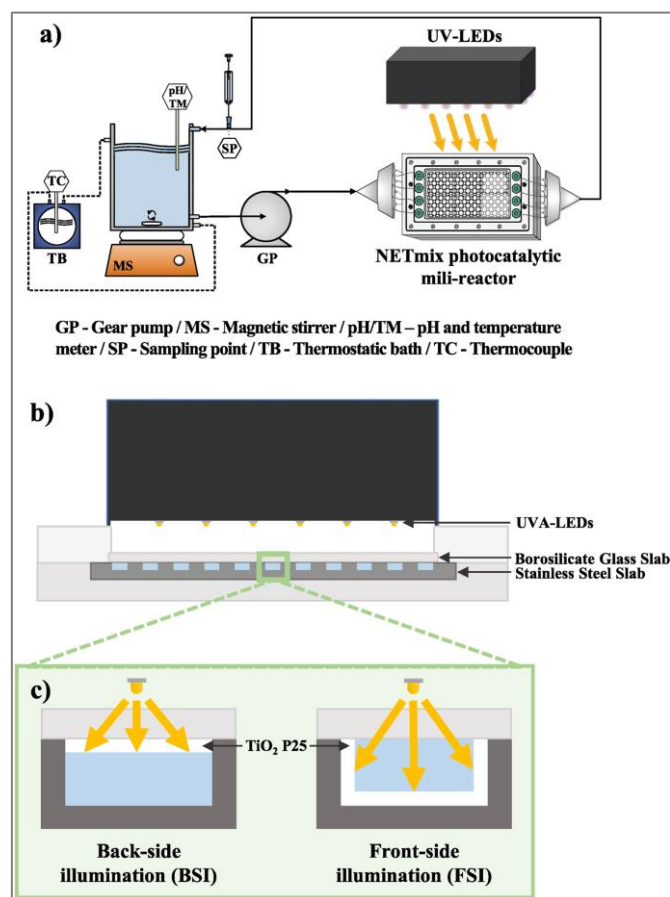
کاهش معناداری را در غلظت فرمالدهید و سایر ترکیبات مضر هوا به وسیله واکنش کاتالیستی نشان دادند.

با افزایش نگرانی‌ها در مورد کیفیت هوای داخل ساختمان، VOC ها به عنوان آلاینده‌های اصلی آلودگی هوای داخلی به محبوب‌ترین اهداف تحقیقات در زمینه اکسیداسیون کاتالیستی تبدیل شده‌اند [۱۶].

افزایش نرخ شهرنشینی و صنعتی شدن شهرها منجر به انتشار سریع آلودگی هوا (به عنوان مثال، ترکیبات آلی فرار (VOCs)، ترکیبات حاوی نیتروژن (NOx) و دی اکسید گوگرد (SO₂) شده است [۲۰-۱۷]. در بین آلاینده‌های مختلف هوا، NOx ها عمده‌تاً از اکسید نیتروژن (NO) و دی اکسید نیتروژن (NO₂) تشکیل شده‌اند. در محیط اتمسفر، NO معمولاً در غلظت‌های پایین وجود دارد اما بسیار خطرناک است و می‌تواند منجر به باران اسیدی شود [۲۱]. بنابراین، چگونگی حذف موثر NOx ها هنوز یک مسئله مبهم است که باید حل شود. در حال حاضر، روش‌های سستی تصفیه NOx ها عمده‌تاً شامل جذب، کاهش کاتالیستی و کاتالیست حرارتی است [۲۲].

یکی از پارامترهای حائز اهمیت نوع طراحی راکتور از نظر مسیر عبور گاز است. طرح‌های مختلف راکتور مانند راکتور از نوع کانالی یکپارچه به دلیل ساختار لانه زنبوری، نسبت سطح به حجم بالا به همراه افت فشار کم را فراهم می‌کند [۲۴-۲۳]. به طور معمول، آلاینده‌ها در راکتورهای کاتالیستی با کاتالیست موجود روی یک سطح، تصفیه می‌شوند. راکتورهای کاتالیستی در مقیاس آزمایشگاهی که برای ایجاد مدل‌های آزمایشگاهی طراحی شده‌اند، راکتور صفحه تخت و راکتور حلقوی هستند که کاتالیست روی دیواره راکتور تثبیت شده است. سایر مدل‌های راکتور به گونه‌ای طراحی شده‌اند که بیشترین مساحت از کاتالیست برای برهمکنش و بیشترین تشعشع را داشته باشند، از این رو به عملکرد بهتری دست می‌یابند.

در دهه‌های اخیر، فوتوکاتالیست‌های ناهمگن به عنوان یک سیستم مؤثر برای تجزیه و حذف آلاینده‌های گازی و مایع در



شکل ۳. فوتوراکتور NETmix توسعه یافته توسط سنتوس و همکاران [۳۹].

فوتوکاتالیستی معرفی شده‌اند. این راکتورها با استفاده از شبکه‌ای از محفظه‌های استوانه‌ای و کانال‌های منشوری که جریان را به‌طور مؤثر تقسیم و برهم می‌زنند، قادر به ایجاد شرایط اختلاط مطلوب حتی در جریان‌های آرام هستند [۳۵، ۳۶]. این طراحی منحصر به فرد باعث می‌شود که مساحت انتقال جرم افزایش یابد و همچنین مسیر نوری کوتاه‌تر شده و تابش نور به سطح کاتالیست به‌طور مؤثرتری توزیع شود [۳۷، ۳۸]. شکل (۳) یک نمونه فوتوراکتور NETmix توسعه یافته توسط سنتوس و همکاران [۳۹] را نشان می‌دهد.

همانطور که در شکل (۳) نشان داده شده است، راکتور NETmix می‌تواند در دو پیکربندی مختلف به کار رود: در پیکربندی FSI^۹ کاتالیست روی صفحه جلویی (شیشه‌ای) قرار گرفته و نور از طریق آن وارد می‌شود، در حالی که در پیکربندی

محیط‌های مختلف، از جمله سیستم‌های تهویه هوا، توجه قابل ملاحظه‌ای را به خود جلب کرده‌اند [۲۵، ۲۶].

انتقال جرم و فوتون دو فاکتور کلیدی در فوتوکاتالیست‌ها هستند که هرگونه محدودیت در این زمینه می‌تواند به‌طور قابل توجهی بر راندمان راکتور تأثیر بگذارد [۳۰-۲۷]. از جمله این محدودیت‌ها، مناطق سایه‌دار در راکتورهای فوتوکاتالیستی هستند که به دلیل هندسه نامناسب یا نقص در تابش نور به سطح کاتالیست، عملکرد راکتور را تحت تأثیر قرار می‌دهند [۳۱]. علاوه بر این، اختلاط ناکافی مایعات و گازها در داخل راکتور می‌تواند موجب کاهش سطح تماس بین کاتالیست و آلاینده‌ها شده و از این رو بازده فرآیند را کاهش دهند [۳۲-۳۴].

در این راستا، راکتورهای میکروساختاری مانند NETmix که توسط گروه تحقیقاتی LSRE-LCM در کشور پرتغال توسعه یافته است، به‌عنوان یک نوآوری در زمینه طراحی راکتورهای

BSI^{۱۰}، کاتالیست بر روی صفحه فولاد ضدزنگ پشتی نصب می‌شود و تابش نور از پشت وارد می‌شود [۳۹،۴۰].

در پیکربندی FSI، تابش نور به نزدیکی سطح تماس مایع و کاتالیست می‌رسد، که احتمال بازترکیب حامل‌های بار (الکترون‌ها و حفره‌ها) را کاهش می‌دهد و از این رو راندمان واکنش بهبود می‌یابد. اما در BSI، جفت‌های الکترون-حفره در عمق کاتالیست تشکیل می‌شوند که می‌تواند باعث افزایش بازترکیب و کاهش کارایی فرآیند شود.

مدل‌سازی نوری از جمله ابزارهای مهم برای بهینه‌سازی طراحی فوتوراکتورها هستند. در این زمینه، استفاده از شبیه‌سازی Ray Tracing برای تحلیل توزیع تابش در داخل راکتور فوتوکاتالیستی و مقایسه پیکربندی‌های مختلف از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است [۴۱]. شبیه‌سازی Ray Tracing این امکان را می‌دهد که بدون نیاز به انجام آزمایش‌های فیزیکی، تأثیرات هندسه و تابش نور را بر عملکرد فوتوراکتور بررسی و نقاط ضعف طراحی را شناسایی نمود [۴۲،۴۳].

هدف از این مطالعه، بررسی و مدل‌سازی تابش نوری در راکتور NETmix با هدف اکسیداسیون فوتوکاتالیستی به وسیله شبیه‌سازی Ray Tracing است.

۲- تحقیقات گذشته

در مطالعه‌ای که توسط ماتیا‌زو و همکاران [۴۴] انجام شده است، یک راکتور فوتوکاتالیستی از نوع NETmix به منظور بررسی میدان تابش ایجادشده توسط منابع نوری (LED) مدل‌سازی شده است. هدف اصلی این مطالعه بررسی تأثیر موقعیت‌های مختلف منابع نوری (LEDها) بر توزیع شدت تابش در ناحیه واکنش راکتور و بهینه‌سازی بازده فوتوکاتالیستی از طریق طراحی مناسب سیستم نوری است. ساختار راکتور NETmix در این تحقیق بر پایه معماری مدولار و شبکه‌ای طراحی شده است تا امکان افزایش سطح واکنش و کنترل جریان به شکل دقیق فراهم شود. شکل (۴) فوتوراکتور توسعه یافته توسط ماتیا‌زو و همکاران نشان داده شده است [۴۴].

همانطور که در شکل (۴) قابل مشاهده است، راکتور NETmix در این پژوهش، به صورت یک مکعب مستطیل با ابعاد تقریبی $60 \times 30 \times 12$ میلی‌متر طراحی شده که شامل یک پنجره نوری شفاف در بخش فوقانی، یک ناحیه میانی برای عبور نور و جریان سیال، و یک بستر فوتوکاتالیستی در بخش تحتانی است. فضای بین پنجره و بستر، ناحیه‌ی انتقال تابش و جذب فوتون‌ها محسوب می‌شود. از این‌رو طراحی و جانمایی منبع نوری نقش حیاتی در کیفیت عملکرد راکتور دارد. پنجره‌ی شفاف که به‌طور معمول از شیشه یا پلی‌کربنات ساخته می‌شود، اجازه عبور نور از منبع LED به داخل راکتور را می‌دهد و به‌عنوان سطح اصلی تابش عمل می‌کند.

هندسه داخلی راکتور شامل چندین سلول اختلاط^{۱۱} است که به صورت سری و تکرارشونده در امتداد مسیر جریان قرار گرفته‌اند. این ساختار باعث افزایش یکنواختی مخلوط شدن جریان‌ها، کاهش زمان اقامت غیرمفید، و افزایش سطح تماس بین تابش و فوتوکاتالیست می‌شود. ورود و خروج جریان سیال از طریق کانال‌هایی با مقاطع منظم انجام می‌شود که به‌صورت پیوسته با دیواره‌های داخلی راکتور تلفیق شده‌اند.

در این مطالعه، منابع نوری (LEDها) به صورت صفحات مستطیلی مدل‌سازی شده‌اند که با زاویه‌ها و فواصل مختلف نسبت به پنجره راکتور قرار گرفته‌اند. موقعیت‌های مختلف نصب LEDها به صورت عمودی (در فاصله‌ی نزدیک بالای پنجره)، با زاویه‌های مورب، و یا در فواصل دورتری از پنجره بوده‌اند. همچنین شرایط تابش در حالت تک‌منبعی و چندمنبعی بررسی شده است.

در این تحقیق به‌منظور مدل‌سازی میدان تابش، از روش عددی مبتنی بر حل معادله انتقال تابش^{۱۲} استفاده شده است. حل این معادله به صورت عددی و با استفاده از روش تفکیک زاویه‌ای^{۱۳} انجام شده است، که در آن دامنه زاویه‌ای مسیرهای نوری به تعدادی جهت محدود تفکیک می‌شود. برای هر سناریوی موقعیت LEDها، توزیع دوبعدی شدت تابش در بستر فوتوکاتالیستی محاسبه شده است.

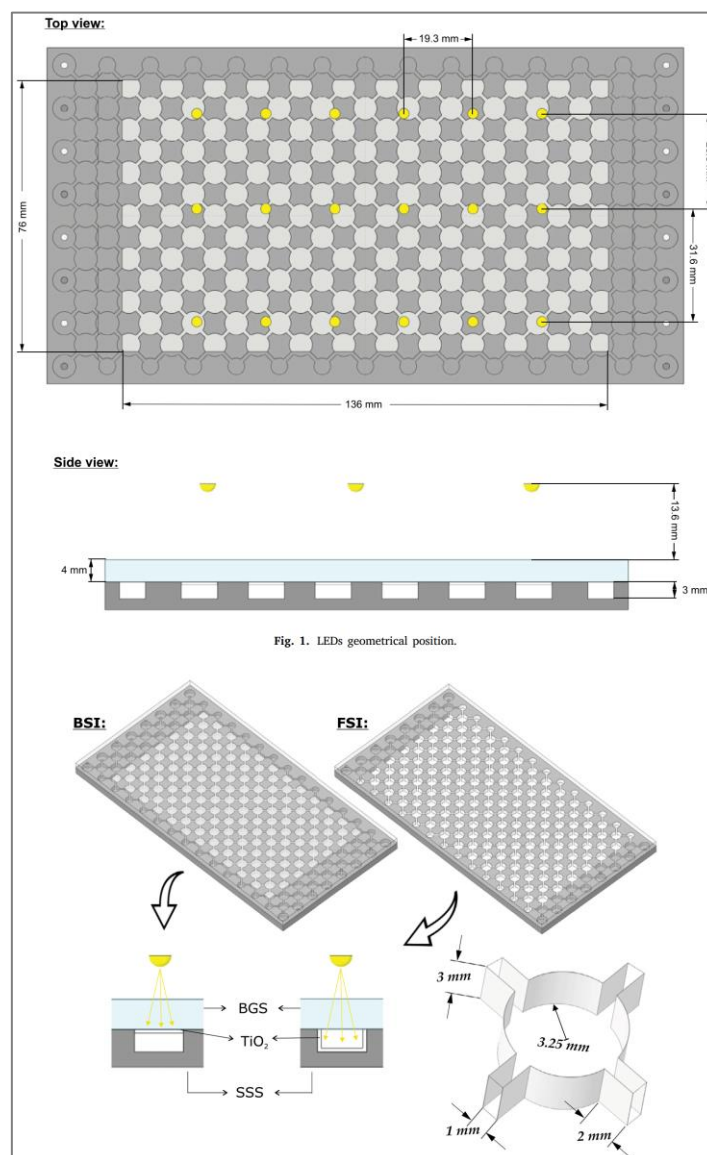


Fig. 1. LEDs geometrical position.

شکل ۴. فوتوراکتور توسعه یافته توسط ماتیازو و همکاران [۴۴].

نرخ تبدیل فوتوکاتالیستی و شدت تابش اندازه‌گیری شده در نقاط مختلف بستر انجام شده است. راکتور NETmix استفاده شده در این مقاله، به دلیل طراحی دقیق، ساختار قابل توسعه، و قابلیت کنترل دقیق جریان و تابش، یک گزینه بسیار مناسب برای مطالعه فرآیندهای نوری در مقیاس‌های کوچک محسوب می‌شود. طراحی مدولار این راکتور امکان تنظیم آسان تعداد واحدها، اندازه، و جهت‌دهی به نور را فراهم کرده که در مطالعات بهینه‌سازی، تحلیل CFD، و مدلسازی تابشی بسیار ارزشمند است.

نتایج شبیه‌سازی نوری در این تحقیق نشان دادند که افزایش تعداد منابع نوری باعث بهبود پوشش نوری راکتور شده ولی تا حد مشخصی کارآمد است، به گونه‌ای که پس از آن، بازده نوری اشباع می‌شود. این نکته در طراحی مهندسی سیستم‌های نوری بسیار حیاتی است، چراکه افزایش بیش از حد منابع نوری بدون افزایش متناسب بازده، منجر به مصرف بی‌رویه انرژی می‌شود. در این تحقیق، تطبیق نتایج عددی با داده‌های تجربی انجام شده و نشان داده شد که مدل عددی توانایی بالایی در بازنمایی واقعیت فیزیکی داخل راکتور دارد. این تطبیق از طریق مقایسه

۱-۲ نوآوری‌های پژوهش حاضر

یافته‌های این مقاله پایه‌ای برای توسعه مدل‌های عددی دقیق‌تر، از جمله استفاده از نرم‌افزارهای تحلیلی مانند COMSOL Ray Optics فراهم می‌سازد که با دقت بیشتر و قابلیت حل معادلات همیلتونی پرتوهای نور، امکان تحلیل دقیق‌تر پدیده‌های نوری در این نوع راکتورها را فراهم می‌آورند. در کار حاضر نیز همین هندسه با همان شرایط نوری، با استفاده از COMSOL Ray Optics مدل‌سازی و نشان داده شده است که نتایج حاصل از حل تحلیلی در کامسول تطابق بهتری با واقعیت فیزیکی و داده‌های تجربی دارد.

پژوهش حاضر به بررسی توزیع تابش نوری در راکتور فوتوکاتالیستی NETmix با استفاده از رویکردی عددی و تحلیلی پرداخته است. علیرغم وجود مطالعات متعدد در زمینه مدل‌سازی و طراحی سامانه‌های فوتوکاتالیستی، مطالعه حاضر جنبه‌هایی از مسئله را مد نظر قرار داده است که در تحقیقات پیشین کمتر بررسی شده‌اند. نوآوری‌های پژوهش حاضر را می‌توان به صورت زیر خلاصه کرد:

۱. به‌کارگیری روش عددی Ray Tracing در نرم‌افزار

کامسول:

در این مطالعه از ماژول Ray Optics نرم‌افزار کامسول Multiphysics استفاده شده است که امکان حل تحلیلی- عددی معادلات حاکم بر انتشار نور را فراهم می‌کند. این رویکرد موجب بهبود دقت در مدل‌سازی مسیر پرتوهای نوری و تعامل آن‌ها با سطوح و محیط راکتور شده است.

۲. بررسی جامع و همزمان چندین پارامتر کلیدی:

در این پژوهش اثر همزمان پنج پارامتر اصلی شامل زاویه انتشار منبع نور، توان منبع نور، آرایش هندسی منابع نوری، تعداد منابع نوری و فاصله آن‌ها از سطح فوتوکاتالیست بر توزیع تابش بررسی شده است. در مطالعات قبلی عموماً فقط تعداد محدودی از این پارامترها بررسی شده‌اند، درحالی‌که پژوهش حاضر امکان بررسی تعامل بین این پارامترها را فراهم کرده است.

۳. تعیین پیکربندی بهینه منابع نوری با استفاده از رویکرد

عددی:

رویکرد عددی اتخاذشده در این مطالعه، امکان بررسی سیستماتیک و سریع پیکربندی‌های گوناگون منابع نوری را فراهم کرده است. استفاده از مدل‌سازی عددی به جای رویکردهای تجربی و آزمون و خطا، منجر به کاهش قابل توجه زمان و هزینه در طراحی راکتور شده است.

۴. اعتبارسنجی با داده‌های تجربی:

نتایج به‌دست‌آمده از این مطالعه با نتایج تجربی و همچنین نتایج مدل‌سازی ارائه‌شده در مقاله مرجع مقایسه و اعتبارسنجی شده است. انحراف کمتر از ۲ درصد نسبت به داده‌های تجربی و دقت مناسب در مقایسه با روش‌های دیگر، اعتبار مدل استفاده‌شده را تأیید می‌کند.

به طور کلی، پژوهش حاضر با تأکید بر جنبه‌های عددی و تحلیلی مدل‌سازی توزیع نور، رویکردی جدید برای مطالعه و طراحی راکتورهای فوتوکاتالیستی NETmix ارائه می‌دهد که می‌تواند به‌عنوان پایه‌ای برای تحقیقات بعدی در این حوزه تلقی گردد.

۲-۲ مقایسه روش همیلتونی با مونت کارلو و حجم محدود

مدل‌سازی انتقال تابش در محیط‌های نوری با استفاده از رویکردهای مختلف عددی امکان‌پذیر است که انتخاب آن‌ها به نوع محیط (شفاف یا پراکنده)، پیچیدگی هندسه، و دقت مورد انتظار وابسته است. سه روش رایج در این زمینه شامل روش همیلتونی^{۱۴}، روش مونت‌کارلو^{۱۵}، و روش حجم محدود^{۱۶} می‌باشند که در ادامه مقایسه می‌شوند.

۱. روش همیلتونی

- **ماهیت:** مبتنی بر معادلات دیفرانسیل مرتبه اول مشتق‌شده از فرمول‌بندی همیلتونی کلاسیک.
- **کاربرد:** بسیار مناسب برای محیط‌های شفاف یا با پراکندگی کم با ضریب شکست متغیر.

- **دقت:** وابسته به تعداد زاویه‌های گسسته‌شده و کیفیت مش؛ ممکن است در هندسه‌های بسیار پیچیده دچار نوسانات عددی شود.
- **مزیت عددی:** روش قطعی، بدون نویز آماری، امکان کوپله با معادلات حرارت و سیال.
- **محدودیت:** نیاز به مش‌بندی بسیار دقیق، مشکل در محیط‌های کاملاً شفاف، هزینه زاویه‌ای زیاد.

۳- معادلات حاکم

مدلسازی دقیق میدان تابشی در راکتورهای فوتوکاتالیستی، به‌ویژه در راکتورهای دارای ساختار پیچیده مانند NETmix، اهمیت اساسی در تحلیل عملکرد آن‌ها دارد. در این حوزه، عموماً دو رویکرد متفاوت در شبیه‌سازی مسیر پرتوهای نوری مورد استفاده قرار می‌گیرند: رویکرد آماری بر پایه الگوریتم مونت‌کارلو و رویکرد تحلیلی بر پایه فرمول‌بندی همیلتونی. در مقاله مرجع، ماتیازو و همکاران [۴۴] با استفاده از ANSYS SPEOS و روش مونت‌کارلو اقدام به مدلسازی میدان تابشی در راکتور NETmix کرده‌اند. در این مطالعه، با مدلسازی این راکتور در نرم‌افزار کامسول، از الگوریتم ردیابی پرتو جبهه موج استفاده شده است که از نظر دقت عددی و حل تحلیلی، مزایای قابل توجهی را ارائه می‌دهد.

در روش مونت‌کارلو، مسیر پرتوها به‌صورت آماری با نمونه‌گیری تصادفی از موقعیت‌ها و زوایای انتشار انجام می‌شود. معادله پایه در این روش، معادله انتقال تابش است:

$$\frac{dI(r, \hat{s})}{ds} = -\kappa(r)I + \kappa(r)I_b + \sigma_s(r) \int_0^{4\pi} \Phi(\hat{s}', \hat{s}) I(\hat{s}') d\Omega' \quad (1)$$

که در آن I شدت تابش، κ ضریب جذب، σ_s ضریب پراکندگی، Φ تابع فاز پراکندگی است. به‌دلیل طبیعت آماری این روش و نوسانات تصادفی، نیاز به تعداد بالای پرتوها برای همگرایی اجتناب‌ناپذیر است. این مسئله، به‌ویژه در محیط‌های کم‌پراکندگی مانند NETmix، دقت مدل را محدود می‌کند [۴۴].

- **دقت:** بالا در تعیین مسیر پرتوها در محیط‌های غیرپخشنده. خطاهای آن اغلب ناشی از گسسته‌سازی زمانی و تعداد ناکافی پرتوها است.
- **مزیت عددی:** امکان موازی‌سازی بالا (به دلیل استقلال مسیر هر پرتو)، سرعت اجرای بسیار خوب، مناسب برای هندسه‌های پیچیده.
- **محدودیت:** برای محیط‌هایی با پراکندگی بالا، دقت آن کاهش می‌یابد، چون فقط شکست و بازتاب را مدل می‌کند و نه پراکندگی چندگانه.

۲. روش مونت‌کارلو

- **ماهیت:** مبتنی بر روش‌های تصادفی برای شبیه‌سازی مسیر هزاران یا میلیون‌ها پرتو که به‌صورت تصادفی از منبع گسیل می‌شوند و در طول مسیر ممکن است جذب، پراکنده یا منعکس شوند.
- **کاربرد:** مناسب‌ترین روش برای مدلسازی دقیق محیط‌های با پراکندگی بالا، مانند بافت‌های زیستی، آئروسول‌ها یا مه.
- **دقت:** بسیار بالا در صورت استفاده از تعداد کافی نمونه (نمونه‌برداری آماری). بدون نیاز به مش‌بندی دقیق.
- **مزیت عددی:** مدلسازی دقیق تعاملات پیچیده نور با محیط‌های پخشنده، انعطاف‌پذیری بالا.
- **محدودیت:** زمان محاسبه بسیار طولانی، حساس به نویز آماری (به‌ویژه در نقاط با انرژی پایین).

۳. روش حجم محدود

- **ماهیت:** مبتنی بر حل مستقیم معادله انتقال تابش با گسسته‌سازی حوزه فضایی، زاویه‌ای و طیفی. یک روش قطعی است.
- **کاربرد:** مناسب برای محیط‌های با جذب و پراکندگی میانه تا زیاد، مانند کوره‌ها، توربین‌های احتراقی، یا مایعات کدر.

دقت و پایداری حل دارد. اگر گام زمانی خیلی بزرگ انتخاب شود، ممکن است جزئیات دقیق تغییرات مسیر پرتو ثبت نشوند و دقت حل کاهش یابد؛ و اگر خیلی کوچک باشد، اگرچه دقت بالاتر می‌رود، اما هزینه محاسباتی به شدت افزایش می‌یابد.

در مرز بین دو محیط با ضریب شکست متفاوت، کامسول جهت پرتو شکسته شده را به صورت عددی از قانون اسنل^{۱۹} محاسبه می‌کند [۴۷]:

$$n_1 \sin(\theta_1) = n_2 \sin(\theta_2) \quad (۳)$$

و شدت پرتو نیز در طول مسیر با معادله جذب نمایی^{۲۰} کاهش می‌یابد:

$$\frac{dI}{ds} = -\alpha(\vec{r})I \Rightarrow I(s) = I_0 e^{-\int \alpha(\vec{r}) ds} \quad (۴)$$

در این رابطه، $\alpha(\vec{r})$ ضریب جذب وابسته به مکان است و s پارامتر مسیر پرتو می‌باشد. در کامسول، این انتگرال مسیر به صورت عددی و در کنار حل معادلات موقعیت پرتو محاسبه می‌شود. نرم‌افزار، مسیر پرتو را به بخش‌های کوچک گسسته تقسیم کرده و مقدار $\alpha(\vec{r})$ را در هر گام محاسبه می‌کند. سپس با استفاده از روش‌های عددی مانند مجموع مستطیلی^{۲۱} یا انتگرال‌گیری تطبیقی، مقدار تقریبی انتگرال $\int \alpha(\vec{r}) ds$ را به دست می‌آورد.

این محاسبه به صورت وابسته به مسیر پرتو^{۲۲} و هم‌زمان با ردیابی پرتو انجام می‌شود، به طوری که تضعیف شدت در هر گام، متناسب با ضریب جذب و طول گام محاسبه می‌گردد. به علاوه، کامسول این امکان را فراهم می‌سازد که وابستگی α به عوامل مختلفی مانند دما، چگالی یا میدان جریان در مدل لحاظ شود. در نتیجه، شدت نهایی پرتو در انتهای مسیر، با در نظر گرفتن تغییرات محیطی و خواص ماده، با دقت بالایی به دست می‌آید [۴۸].

از منظر هندسی، کامسول امکان تعریف سطوح اپتیکی مانند لنزها یا آینه‌ها را با دقت بالا فراهم می‌کند. اشکال هندسی مانند سطوح غیرکروی می‌توانند به صورت تابع تحلیلی وارد شده یا از مدل‌های CAD سه بعدی استخراج شوند.

در مقابل، روش ردیابی پرتو در کامسول مبتنی بر حل عددی یک زوج دستگاه معادلات دیفرانسیل مرتبه اول برای موقعیت لحظه‌ای پرتو $\vec{q}$ و بردار موج $\vec{k}$ است. این دستگاه معادلات از فرمول‌بندی همیلتونی در مکانیک کلاسیک الهام گرفته شده، با این تفاوت که در اینجا فرکانس زاویه‌ای ω نقش تابع همیلتونی را بازی می‌کند. این معادلات به صورت زیر تعریف می‌شوند [۴۵]:

$$\frac{d\vec{q}}{dt} = \nabla_{\vec{k}} \omega(\vec{q}, \vec{k}) \quad (۲)$$

$\frac{d\vec{k}}{dt} = -\nabla_{\vec{q}} \omega(\vec{q}, \vec{k})$ در محیط‌های همگن که ضریب شکست n مقدار ثابتی دارد، معادلات همیلتونی به مسیریابی منجر می‌شوند که در آن‌ها پرتوها با سرعت ثابت و در خط مستقیم حرکت می‌کنند؛ به بیان دیگر، بردار موج $\vec{k}$ تغییر نمی‌کند و پرتو هیچ گونه انحرافی از مسیر خود ندارد. این وضعیت متناظر با انتشار ساده نور در خلأ یا مواد یکنواخت است.

اما در محیط‌های ناهمگن، که در آن‌ها ضریب شکست n تابعی از مکان است، معادلات همیلتونی منجر به تغییر بردار موج در طول مسیر حرکت پرتو می‌شوند. در این حالت، نور دیگر در مسیر مستقیم حرکت نمی‌کند و انحراف مسیر رخ می‌دهد که بسته به تغییرات مکانی ضریب شکست، مسیر پرتوها می‌تواند خمیده، منحنی یا متمرکز و حتی پراکنده شود. این پدیده برای مدل‌سازی سیستم‌های نوری با ساختار پیچیده، مانند لنزهای تدریجی یا محیط‌های پلاسمونیک، اهمیت زیادی دارد.

در کامسول، این رفتار خمیده شدن مسیر پرتوها از طریق حل عددی معادلات دیفرانسیل همیلتونی مدل‌سازی می‌شود. روش‌های متداول برای انتگرال‌گیری این معادلات، از جمله روش رونگه-گوتا^{۱۷} مرتبه چهارم یا سایر روش‌های چندمرحله‌ای، به کار گرفته می‌شوند. این روش‌ها در واقع مسیر پرتو را به صورت گام زمانی^{۱۸} پیش‌بینی می‌کنند [۴۶].

در این فرایند، گام زمانی به معنای فاصله زمانی بین هر مرحله از انتگرال‌گیری عددی است. این پارامتر نقش بسیار مهمی در

۲. یکنواختی توزیع نور

در بسیاری از راکتورهای جریان پیوسته، توزیع ناهمگون تابش باعث می‌شود بخشی از سطح کاتالیست در معرض تابش بالا و بخشی دیگر در سایه قرار گیرد. این مسئله منجر به کاهش راندمان کلی، عملکرد موضعی ضعیف و حتی تخریب فوتوکاتالیست در نواحی با تابش بالا می‌شود. بنابراین، طراحی سیستم نوری برای دستیابی به پروفایل یکنواخت تابش روی سطح فعال، یک هدف کلیدی در طراحی راکتور محسوب می‌شود.

۳. زاویه تابش و موقعیت منبع نور

زاویه ورود نور به سطح، بر مسیر و چگالی پرتوهای نوری تأثیر می‌گذارد. تابش عمود بر سطح، معمولاً منجر به بیشترین جذب می‌شود؛ در حالی که زاویه‌های مایل ممکن است منجر به انعکاس بیشتر یا کاهش تمرکز پرتوها گردد. از سوی دیگر، موقعیت منبع نوری نسبت به سطح فوتوکاتالیستی (از نظر فاصله و آرایش) در تعیین ناحیه تابش دیده، چگالی انرژی و حتی ناحیه سایه^{۳۳} نقش دارد.

در مجموع، طراحی بهینه سیستم نوری در راکتورهای فوتوکاتالیستی تأثیر مستقیمی بر بازده واکنش، مصرف انرژی و مقیاس‌پذیری دارد. با توجه به پیچیدگی تعاملات بین شدت، یکنواختی، زاویه و طیف تابش، مدلسازی عددی و تحلیل‌های نوری دقیق، ابزاری حیاتی برای طراحی و بهینه‌سازی این راکتورها به‌شمار می‌رود.

به‌منظور تحلیل شدت تابشی که به سطح فوتوکاتالیستی می‌رسد، از نرم‌افزار کامسول نسخه ۶/۲ همراه با ماژول Ray Optics استفاده شد. این ماژول امکان مدلسازی پیشرفته عبور، بازتاب و جذب پرتوهای نور را با دقت بالا در هندسه‌های پیچیده و مواد مختلف فراهم می‌کند. در این مطالعه، از رویکرد FSI برای بازسازی توزیع فضایی پرتوها در بستر استفاده شده است.

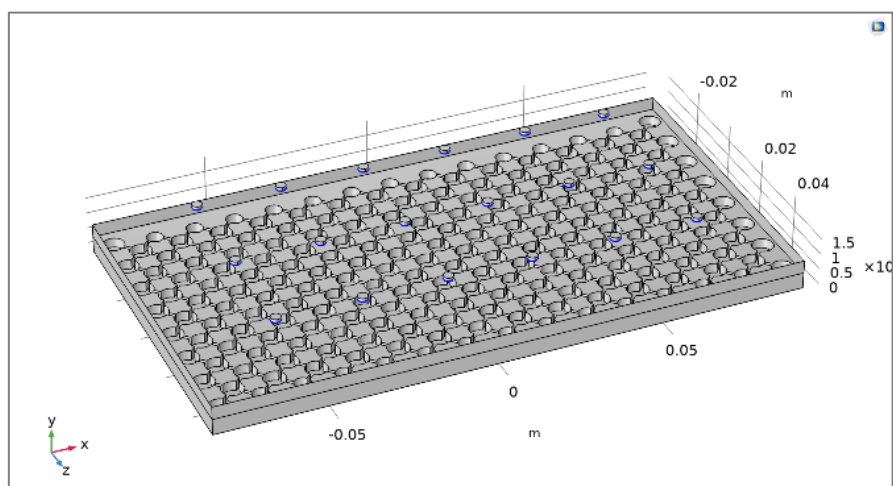
در این تحقیق، مدلسازی هندسی و نوری راکتور NETmix در محیط کامسول انجام شده و نتایج حاصل، ارائه شده است. در جمع‌بندی، باید گفت که رویکرد تحلیلی مبتنی بر ردیابی جبهه موج در کامسول، با تکیه بر حل دقیق معادلات دیفرانسیل، گسسته‌سازی دقیق هندسه، پشتیبانی از سطوح اپتیکی پیشرفته، و قابلیت کوپل چندفیزیکی، انتخاب بسیار مناسب‌تری برای مدلسازی تابش در راکتورهای پیچیده مانند NETmix است. این رویکرد در کنار پایداری عددی، امکان تعمیم به مدل‌های حرارتی، جریانی و واکنشی را نیز فراهم کرده و ابزاری قوی برای طراحی و بهینه‌سازی راکتورهای نوری در مقیاس آزمایشگاهی و صنعتی محسوب می‌شود.

۴- شبیه‌سازی عددی

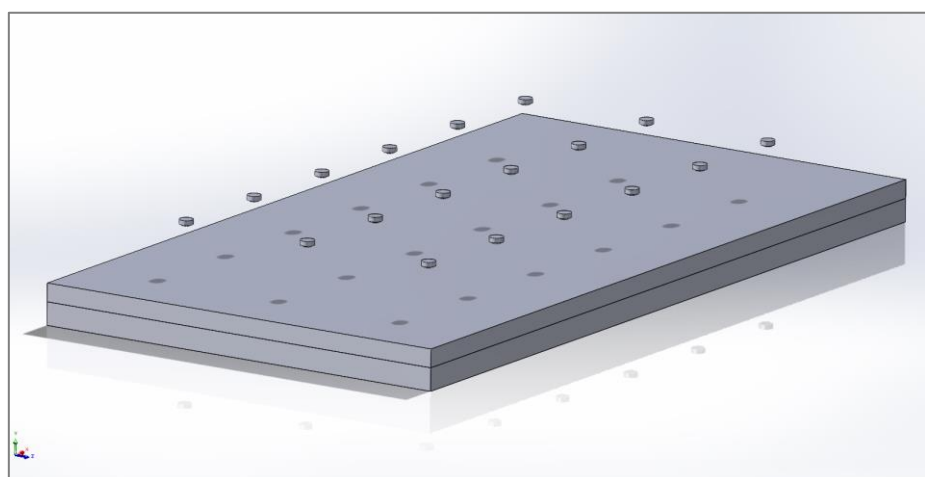
در راکتورهای فوتوکاتالیستی، نور منبع انرژی اصلی برای فعال‌سازی کاتالیست و آغاز واکنش اکسیداسیون-کاهش است. فرایند فوتوکاتالیستی به‌واسطه برانگیختگی الکترون‌ها از نوار ظرفیت به نوار رسانش در نیمه‌هادی‌هایی نظیر TiO_2 ، ZnO و $\text{g-C}_3\text{N}_4$ آغاز می‌شود. این فرایند نیازمند فوتون‌هایی با انرژی کافی (معمولاً برابر یا بزرگ‌تر از گاف انرژی نیمه‌هادی) است و از این‌رو ماهیت، شدت، زاویه و یکنواختی تابش نوری از عوامل تعیین‌کننده در بازدهی راکتور محسوب می‌شوند. در ادامه پارامترهای مهم بر بازدهی نوری فوتوراکتورها بررسی می‌شود.

۱. شدت تابش

شدت تابش مؤلفه‌ای حیاتی در تعیین نرخ تولید حامل‌های بار (الکترون-حفره) و در نتیجه، نرخ واکنش فوتوکاتالیستی است. با افزایش شدت نور، احتمال برانگیختگی بیشتر شده و واکنش سریع‌تر انجام می‌شود. با این حال، افزایش بیش‌ازحد شدت می‌تواند منجر به اشباع نوری و کاهش بازده کوانتومی شود، به‌ویژه در حالتی که جداسازی حامل‌های بار ناکارآمد باشد.



شکل ۵. فوتوراکتور NETmix شبیه‌سازی شده در نرم افزار کامسول.



شکل ۶. نمونه موقعیت هندسی LEDها در اطراف پنجره فوتوراکتور.

در شکل (۵) فوتوراکتور NETmix شبیه‌سازی شده در نرم افزار کامسول نشان داده شده است.

۴-۱- منابع نوری

به منظور شبیه‌سازی فوتوراکتور، منابع نوری به صورت سطوح روشن^{۲۴} تعریف شدند که معادل LEDهای مورد استفاده در آزمایش تجربی هستند. برای این منظور، تعداد مشخصی منبع نوری با ویژگی‌های زیر ایجاد شدند:

- سطح انتشار هر LED مطابق با ابعاد واقعی؛
- توان نوری خروجی هر LED برابر با ۰/۹ وات؛
- طیف تابشی با پیک در طول موج ۳۶۵ نانومتر و عرض نیم حداکثر ۹ نانومتر؛

• توزیع شدت تابش زاویه‌ای طبق داده‌های سازنده. در شکل (۶) موقعیت هندسی LEDها در اطراف پنجره فوتوراکتور با آرایش قرارگیری مشابه مقاله مرجع نمایش داده شده است:

۴-۲- شرایط مرزی

در این مطالعه، جهت شبیه‌سازی انتشار تابش نوری در راکتور فوتوکاتالیستی NETmix از نرم‌افزار کامسول ۶/۲ با ماژول Ray Optics استفاده شده است. تنظیمات مدل شامل تعریف مواد، مشخصات هندسی، شرایط مرزی و پارامترهای نوری مطابق با

واقعیت فیزیکی و داده‌های موجود در مقالات مرجع صورت گرفته است.

مشخصات هندسی راکتور:

هندسه راکتور مطابق با راکتور توسعه یافته توسط ماتیاو و همکاران [۴۴] در نرم افزار طراحی شده است. پنجره نوری در وجه بالایی راکتور قرار دارد و تابش از طریق منابع LED نصب شده بر این پنجره وارد راکتور می‌شود. بستر فوتوکاتالیستی TiO_2 در کف راکتور قرار دارد و سایر دیواره‌ها از جنس فولاد ضد زنگ در نظر گرفته شده‌اند. منابع نوری LED به صورت آرایه‌هایی با تعداد، زاویه تابش، فاصله و توان‌های مختلف مطابق جدول ۱ در نقاط متقارن اطراف پنجره قرار گرفته‌اند.

مواد به کاررفته و خواص اپتیکی:

در مدل شبیه‌سازی شده، سه ماده با اهمیت اپتیکی شامل شیشه بوروسیلیکات^{۲۵}، کاتالیست TiO_2 از نوع ۲۵P، و فولاد ضدزنگ^{۲۶} تعریف شدند. خواص اپتیکی این مواد به شرح زیر است [۴۹]:

- شیشه بوروسیلیکات:

$$n_d (\lambda=589.6 \text{ nm}) = 1/4714$$

$$V_e = 65/41$$

سطح به صورت صیقلی^{۲۷} مدل شده و معادلات فرنل برای بازتاب استفاده شده‌اند.

- فولاد ضدزنگ (بدنه راکتور):

- خاصیت حجمی به صورت "Opaque" تعریف شده است؛

- خاصیت سطحی به صورت "Mirror" با ضریب بازتاب ۹۰٪ وارد شده است.

- سطح بستر فوتوکاتالیستی TiO_2 :

$$n_d (\lambda=589.6 \text{ nm}) = 2/6142$$

$$V_e = 9/87$$

شرایط مرزی در نرم افزار:

شرایط مرزی به صورت زیر اعمال شد:

- پرتوهای نور تنها از سطح پنجره وارد می‌شوند.
- طیف تابشی: پیک در طول موج ۳۶۵ نانومتر با نیم پهنای طیفی ۹ نانومتر.
- شدت تابش: متغیر بین ۱۸ تا ۹۰ وات بر اساس پیکربندی‌ها.
- زاویه انتشار: بین ۶۰ تا ۱۴۰ درجه.
- تمام سطوح داخلی از جمله بستر کاتالیستی، سطوح فلزی و شیشه دارای خصوصیات بازتابی مشخص هستند.
- امکان شکست و بازتاب پرتوها در مرز بین مواد با ضریب شکست متفاوت (مطابق قانون اسنل) فعال شده است.
- بازتاب چندباره پرتوها بین دیواره‌ها و سطح کاتالیستی فعال شد (حداکثر تا ۱۰۰۰ برخورد).
- مدلسازی در کامسول به صورت Release from Surface با تنظیم زاویه انتشار و توان خروجی برای هر مورد از جدول ۱.
- تراکم پرتوها در تنظیمات شبیه‌سازی به گونه‌ای تعیین شد که هر LED حدود 10^6 پرتو منتشر می‌کند تا دقت عددی کافی در محاسبه شدت تابش تضمین گردد. افزایش تعداد پرتوها باعث بهبود نمونه‌برداری از میدان تابش، کاهش خطای آماری، و افزایش دقت محاسبه شدت تابش در نقاط مختلف حوزه می‌شود. تراکم ناکافی می‌تواند منجر به نتایج ناپایدار و تخمین نادرست شدت شود.
- رفتار انعکاسی و پراکندگی با استفاده از مدل‌های برداری مبتنی بر جبهه موج در کامسول محاسبه شده است.
- بازتاب‌های غیرواقعی از لبه‌های دامنه شبیه‌سازی حذف شده‌اند. بازتاب‌های غیرواقعی به انعکاس‌هایی گفته

معیار همگرایی حل در طول شبیه‌سازی حفظ شده است تا از پایداری عددی و دقت نتایج اطمینان حاصل شود.

در کامسول، گام زمانی می‌تواند به‌صورت خودکار توسط حل‌گر کنترل شود. در این حالت، نرم‌افزار از الگوریتم‌های تطبیقی^{۲۸} استفاده می‌کند تا اندازه گام زمانی را بر اساس میزان تغییرات متغیرها در طول حل تنظیم کند. اگر تغییرات سیستم سریع و غیرخطی باشد (مانند عبور پرتو از ناحیه با گرادیان زیاد ضریب شکست)، حل‌گر به‌طور خودکار گام زمانی را کاهش می‌دهد تا دقت حل حفظ شود. برعکس، در نواحی یکنواخت که تغییرات آهسته است، گام زمانی بزرگ‌تر انتخاب می‌شود تا زمان محاسباتی کاهش یابد. این تنظیم خودکار، تعادلی بین دقت عددی و بازده محاسباتی ایجاد می‌کند و به جلوگیری از ناپایداری‌های عددی یا خطاهای تجمعی در حل معادلات دیفرانسیل کمک می‌نماید.

دقت ردیابی پرتو در محیط‌های با پراکندگی بالا: در این مطالعه، محیط شبیه‌سازی‌شده دارای شفافیت نسبی بالا و فاقد ذرات معلق پراکنده (مانند آئروسول‌ها یا سوسپانسیون‌های کلئیدی) در مقیاس مؤثر بر مسیر نور بوده است. بنابراین، مدل بر اساس فرض غالب بودن جذب نسبت به پراکندگی تنظیم شده و از مدل‌سازی پراکندگی چندگانه صرف‌نظر شده است. لازم به ذکر است که در محیط‌های با ضریب پراکندگی بالا، روش ردیابی پرتو کلاسیک مکن است دقت خود را از دست دهد و استفاده از روش‌های مبتنی بر انتقال تابش یا مدل مونت‌کارلو توصیه می‌شود. این محدودیت در بخش بحث نتایج مورد توجه قرار گرفته است.

اثرات گرمایی ناشی از تابش: در این مدل، ضریب شکست به‌صورت تابعی از مکان تعریف شده است، اما اثرات وابسته به دما از جمله تغییرات ضریب شکست ناشی از گرمایش موضعی (Thermal Lensing) لحاظ نشده‌اند. با توجه به توان تابشی مورد استفاده و شرایط محیطی، فرض شده است که گرمایش موضعی به‌اندازه‌ای نیست که تغییرات قابل توجهی در توزیع ضریب شکست ایجاد کند. با این حال، در مدل‌های آتی می‌توان از

می‌شود که از مرزهای مصنوعی مدل ایجاد می‌شوند، در حالی که در شرایط واقعی چنین بازتابی وجود ندارد. به‌عنوان مثال، برخورد پرتو به دیواره مرزی مدل و بازتاب آن می‌تواند باعث افزایش کاذب شدت تابش شود. برای جلوگیری از این اثر، در شبیه‌سازی از شرایط مرزی جذب‌کننده یا حذف‌کننده پرتو استفاده شد.

۴-۳- پیاده‌سازی عددی

در کامسول، معادلات همیلتونی مربوط به موقعیت پرتو $\vec{q}$ و بردار موج $\vec{k}$ مطابق معادله (۲) به‌صورت پیش‌فرض در ماژول Ray Optics پیاده‌سازی شده‌اند. این معادلات، که از ساختار مکانیک همیلتونی الهام گرفته‌اند، به‌طور خودکار توسط نرم‌افزار در هنگام ردیابی پرتو در محیط‌های با ضریب شکست متغیر حل می‌شوند.

در این مطالعه، از تنظیمات پیش‌فرض کامسول برای حل این معادلات استفاده شده است و تغییری در ساختار آن‌ها یا روش عددی حل‌گر اعمال نگردیده است. تنها پارامترهای فیزیکی مانند توزیع ضریب شکست و شرایط مرزی مطابق با ویژگی‌های مدل تعریف شده‌اند. در نتیجه، رفتار خم‌شدن پرتوها و تغییر بردار موج در پاسخ به گرادیان ضریب شکست، به‌طور مستقیم از حل خودکار معادلات همیلتونی حاصل شده است.

اگرچه مقایسه نتایج عددی با داده‌های تجربی صورت گرفته است، برای ارزیابی دقت عددی، تحلیل حساسیت نسبت به تعداد پرتوهای شبیه‌سازی‌شده نیز انجام شده است. در این بررسی، با افزایش تعداد پرتوها از 10^5 تا 10^7 ، تغییرات شدت تابش در نقاط کلیدی دامنه بررسی شد. نتایج نشان داد که پس از مقدار 10^6 پرتو به ازای هر منبع، تغییرات ناچیز بوده و پاسخ عددی همگرا شده است.

همچنین، از آنجا که معادلات پرتو در کامسول به‌صورت عددی حل می‌شوند، حل‌گر با استفاده از گام‌های زمانی تطبیقی و خطای نسبی کمتر از 10^{-3} کنترل می‌شود. این مقدار به‌عنوان

معادلات کوپله‌ی انتقال حرارت و تغییرات اپتیکی برای بررسی دقیق‌تر این اثر استفاده کرد.

محاسبات موازی و همگرایی حل: در نرم افزار کامسول مسیر هر پرتو مستقل از سایرین محاسبه می‌شود. این ویژگی مدل را برای محاسبات موازی بسیار مناسب می‌سازد و کارایی را در هندسه‌های بزرگ با منابع نوری متعدد به‌طور مؤثر افزایش می‌دهد. با توجه به پیچیدگی هندسه راکتور و تعداد زیاد پرتوهای منتشرشده (حدود 10^6 پرتو به ازای هر منبع نوری)، شبیه‌سازی با حجم محاسباتی نسبتاً بالایی همراه بوده است. برای بهینه‌سازی زمان حل و کاهش هزینه محاسباتی، قابلیت رایانش موازی^{۲۹} در کامسول مورد استفاده قرار گرفت. شبیه‌سازی‌ها بر روی سیستم چند هسته‌ای انجام شدند و تخصیص خودکار پرتوها به هسته‌های مختلف موجب افزایش چشمگیر در سرعت حل شد.

۴-۴- موارد شبیه‌سازی

در تحقیق حاضر، به‌منظور دستیابی به درک عمیق‌تر از رفتار نوری در راکتور NETmix، مجموعه‌ای از ۲۵ شبیه‌سازی عددی مستقل انجام شده است. در طراحی این شبیه‌سازی‌ها، پنج پارامتر کلیدی که بنا بر مرور تحقیقات گذشته، نقش مهمی در توزیع تابش در سیستم‌های فوتوکاتالیستی دارند، به‌صورت مستقل و ترکیبی بررسی شده‌اند. این پارامترها عبارتند از:

- **زاویه تابش 30° LEDها:** زاویه انتشار نور هر LED می‌تواند بر تمرکز یا پخش تابش روی سطح کاتالیستی تأثیر مستقیم داشته باشد. انتخاب زاویه مناسب می‌تواند تعادل بین شدت بالا و یکنواختی تابش را برقرار سازد.
- **توان LEDها:** اگرچه توان نوری بالا موجب افزایش تابش می‌شود، اما در طراحی بهینه باید توزیع این انرژی و عدم تمرکز شدید در نقاط خاص نیز مدنظر قرار گیرد.
- **آرایش قرارگیری LEDها:** در این تحقیق، پنج الگوی چیدمان مختلف شامل مستطیلی، مربعی، دایره‌ای، شش‌ضلعی و مورب (قطری) بررسی شده‌اند. ساختار

هندسی چیدمان نقش مهمی در یکنواختی تابش بر سطح فوتوکاتالیست دارد.

- **تعداد LEDها:** با افزایش تعداد منابع نوری، شدت و پوشش تابشی ممکن است بهبود یابد، اما از سوی دیگر افزایش بیش از حد منابع می‌تواند منجر به هم‌پوشانی غیرمؤثر یا اتلاف انرژی شود.
- **فاصله LEDها تا سطح فوتوکاتالیستی:** این فاصله تأثیر مستقیم بر تراکم نوری و ناحیه مؤثر تابش دارد. کاهش بیش‌ازحد این فاصله ممکن است منجر به تمرکز شدید نور در مرکز و کاهش پوشش در لبه‌ها شود.

در حالی که مطالعات گذشته، از جمله مقاله مرجع [۴۴]، به‌طور محدود فقط بر بررسی برخی از این پارامترها متمرکز بوده‌اند، در این پژوهش تمامی پارامترهای فوق‌مورد ارزیابی قرار گرفته‌اند. این امر بستری مناسب برای بهینه‌سازی هم‌زمان پارامترها با هدف بیشینه‌سازی راندمان جذب نوری فراهم می‌کند. جدول (۱) موارد شبیه‌سازی شده در تحقیق حاضر را نشان می‌دهد.

با استفاده از خروجی این شبیه‌سازی‌ها، تحلیل دقیقی از توزیع تابش بر سطح فوتوکاتالیستی انجام خواهد شد. هدف نهایی این پژوهش، دستیابی به پیکربندی بهینه LEDها است که بیشترین میزان تابش متوسط را بر سطح کاتالیست فراهم کند.

۵- اعتبارسنجی

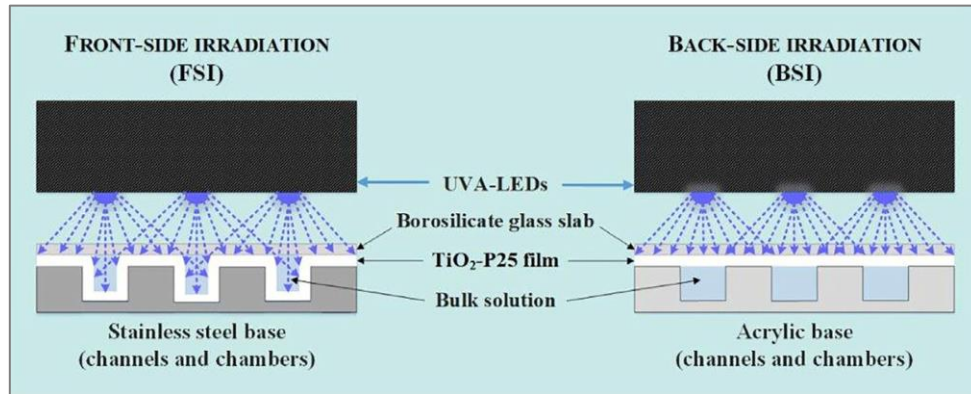
به‌منظور اطمینان از دقت و صحت مدل‌سازی انجام‌شده با Ray Optics Module COMSOL در شبیه‌سازی میدان تابش در راکتور فوتوکاتالیستی NETmix، اعتبارسنجی نتایج عددی با داده‌های موجود در مقاله‌ی مرجع [۴۴] انجام شد. این مقاله، نتایج حاصل از حل معادله انتقال تابش (RTE) با استفاده از روش DOM، با داده‌های تجربی اندازه‌گیری‌شده در راکتور ساخته‌شده توسط فیلهو و همکاران [۵۰]، مقایسه و اعتبارسنجی شده است.

جدول ۱. موارد شبیه‌سازی شده در تحقیق حاضر.

شماره	فاصله LED تا سطح (mm)	تعداد LED	آرایش قرارگیری LED	توان LED (W)	زاویه انتشار LED (°)
۱	۱۰	۱۸	مستطیل	۱	۶۰
۲	۵۰	۳۶	مربع	۲	۶۰
۳	۱۰۰	۵۶	دایروی	۳	۶۰
۴	۱۵۰	۷۲	شش ضلعی	۵	۶۰
۵	۲۰۰	۹۰	مورب	۱۰	۶۰
۶	۱۵۰	۵۶	مربع	۱	۸۰
۷	۲۰۰	۷۲	دایروی	۲	۸۰
۸	۱۰	۹۰	شش ضلعی	۳	۸۰
۹	۵۰	۱۸	مورب	۵	۸۰
۱۰	۱۰۰	۳۶	مستطیل	۱۰	۸۰
۱۱	۵۰	۹۰	دایروی	۱	۱۰۰
۱۲	۱۰۰	۱۸	شش ضلعی	۲	۱۰۰
۱۳	۱۵۰	۳۶	مورب	۳	۱۰۰
۱۴	۲۰۰	۵۶	مستطیل	۵	۱۰۰
۱۵	۱۰	۷۲	مربع	۱۰	۱۰۰
۱۶	۲۰۰	۳۶	شش ضلعی	۱	۱۲۰
۱۷	۱۰	۵۶	مورب	۲	۱۲۰
۱۸	۵۰	۷۲	مستطیل	۳	۱۲۰
۱۹	۱۰۰	۹۰	مربع	۵	۱۲۰
۲۰	۱۵۰	۱۸	دایروی	۱۰	۱۲۰
۲۱	۱۰۰	۷۲	مورب	۱	۱۴۰
۲۲	۱۵۰	۹۰	مستطیل	۲	۱۴۰
۲۳	۲۰۰	۱۸	مربع	۳	۱۴۰
۲۴	۱۰	۳۶	دایروی	۵	۱۴۰
۲۵	۵۰	۵۶	شش ضلعی	۱۰	۱۴۰

فوتوراکتور نشان می‌دهد که پیکربندی FSI در مجموع عملکرد مؤثرتری دارد و انتخاب مناسب‌تری برای کاربردهای صنعتی و آزمایشگاهی محسوب می‌شود. شکل (۷) تفاوت توزیع نور را در دونوع BSI و FSI فوتوکاتالیست NETmix نشان می‌دهد [۴۰]. همانطور که در شکل (۷) قابل مشاهده است، در حالت FSI، تابش نوری مستقیماً به سطح فعال فوتوکاتالیست می‌تابد؛ همان

در مقاله مرجع مطالعه میدان تابش در راکتور NETmix با استفاده از الگوریتم پرتونگاری غیرترتیبی برای ۱۸ منبع نوری LED و دو آرایش متفاوت لایه‌ی فوتوکاتالیست، یعنی FSI و BSI، انجام شده است. اگرچه تحلیل‌های عددی نشان داده‌اند که پیکربندی BSI از یکنواختی تابش بالاتری برخوردار است، بررسی دقیق‌تر رفتار سیستم و شرایط واقعی بهره‌برداری از



شکل ۷. تفاوت توزیع نور در دونوع FSI و BSI فوتوکاتالیست NETmix [۴۰].

نشان می‌دهند که با انتخاب مناسب پارامترهای هندسی مانند فاصله بین LEDها، فاصله از پنجره راکتور و موقعیت نسبی آن‌ها نسبت به مرکز راکتور، می‌توان به پیکربندی‌هایی رسید که هم دارای جذب نوری بالا (تا ۴۰٪) و هم یکنواختی قابل قبول (تا حدود ۹۵٪) باشند. بنابراین می‌توان گفت که پیکربندی FSI، با وجود پیچیدگی‌های نوری بیشتر، از نظر تماس مؤثر با جریان سیال، بهره‌وری از سطح فعال کاتالیست، سهولت طراحی و قابلیت بهینه‌سازی نوری، گزینه‌ای برتر نسبت به BSI محسوب می‌شود. این موضوع در کاربردهای صنعتی که بهره‌برداری بهینه از تمام سطح کاتالیست و افزایش نرخ واکنش اهمیت دارد، برجسته‌تر خواهد بود. بنابر این ملاحظات، در تحقیق حاضر پیکربندی FSI به منظور پیکربندی اصلی انتخاب شده است.

در مطالعه حاضر، هندسه دقیق راکتور NETmix، شرایط مرزی، ویژگی‌های نوری و نحوه قرارگیری منابع نوری (LEDها) مطابق با اطلاعات ذکرشده در مقاله مرجع با آرایش FSI بازسازی شده است. سپس با استفاده از ماژول Ray Optics در کامسول و اعمال روش ردیابی پرتو جبهه موج، میدان تابش در نواحی مختلف راکتور شبیه‌سازی شده است. در این مقایسه، پارامتر کلیدی شدت تابش کل جذب‌شده در سطح بستر فوتوکاتالیستی به عنوان معیار اصلی در نظر گرفته شده است. مقادیر حاصل از مدل‌سازی در کامسول با مقادیر منتشرشده در مقاله مرجع و نتایج آزمایشگاهی تحقیق فیلهو و همکاران [۵۰]، مقایسه شده‌اند. نتایج این مقایسه در جدول (۲) آمده است.

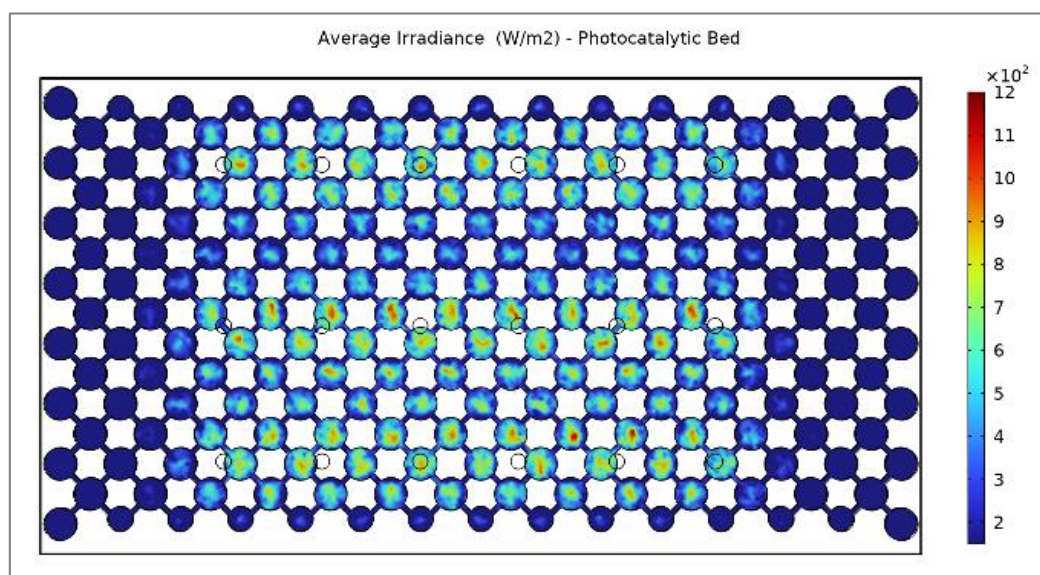
سطحی که در تماس مستقیم با جریان سیال واکنش‌دهنده قرار دارد. این امر موجب افزایش بهره‌وری از نور جذب شده و افزایش احتمال برخورد فوتون‌ها با نواحی فعال‌تر کاتالیست می‌شود. از سوی دیگر، در حالت BSI، نور از پشت یک حامل یا سطح واسط وارد سیستم می‌شود که می‌تواند منجر به تضعیف بخشی از تابش یا عدم تابش به نقاط کلیدی سطح واکنش شود. علاوه بر این، سطح تماس کاتالیست در حالت FSI تقریباً چهار برابر بیشتر از BSI است. این سطح وسیع‌تر به معنای امکان درگیر شدن بخش‌های بیشتری از فوتوکاتالیست در واکنش نوری است، که نهایتاً می‌تواند راندمان کلی واکنش را افزایش دهد، حتی اگر مقدار جذب نوری موضعی کمی پایین‌تر باشد. این نکته به‌ویژه در سیستم‌هایی مانند NETmix که اختلاط شدید و آشفته‌گی جریان سیال وجود دارد، اهمیت ویژه‌ای دارد، چرا که توزیع مجدد سیال به سطح گسترده‌تر اجازه می‌دهد به‌طور مؤثرتری درگیر واکنش شود.

از جنبه طراحی و یکپارچه‌سازی سیستم، نوردهی از سمت جلوی کاتالیست در حالت FSI امکان استفاده آسان‌تر از سیستم‌های اپتیکی مکمل مانند لنزها، بازتاب‌دهنده‌ها و ابزارهای متمرکزکننده نور را فراهم می‌آورد. همچنین، موقعیت‌دهی و نگهداری سیستم نوری در این پیکربندی ساده‌تر بوده و از نظر صنعتی نیز مقرون به صرفه‌تر است.

هرچند مقدار ضریب تغییرات تابش در FSI بالاتر از BSI گزارش شده است (به‌طور میانگین حدود دو برابر)، اما نتایج مقاله

جدول ۲. شدت تابش کل جذب‌شده در سطح بستر فوتوکاتالیستی، مقایسه نتایج تحقیق حاضر، مقاله مرجع [۴۴] و داده‌های تجربی [۵۰].

پارامتر	نتایج شبیه‌سازی حاضر به وسیله COMSOL Ray Optics	نتایج شبیه‌سازی مرجع به وسیله ANSYS SPEOS	نتایج آزمایشات تجربی
شدت تابش کل	W/m^2 ۲۷۱	W/m^2 ۲۸۵	W/m^2 ۲۶۶
درصد انحراف از داده تجربی	۹.۱٪	۱.۷٪	-

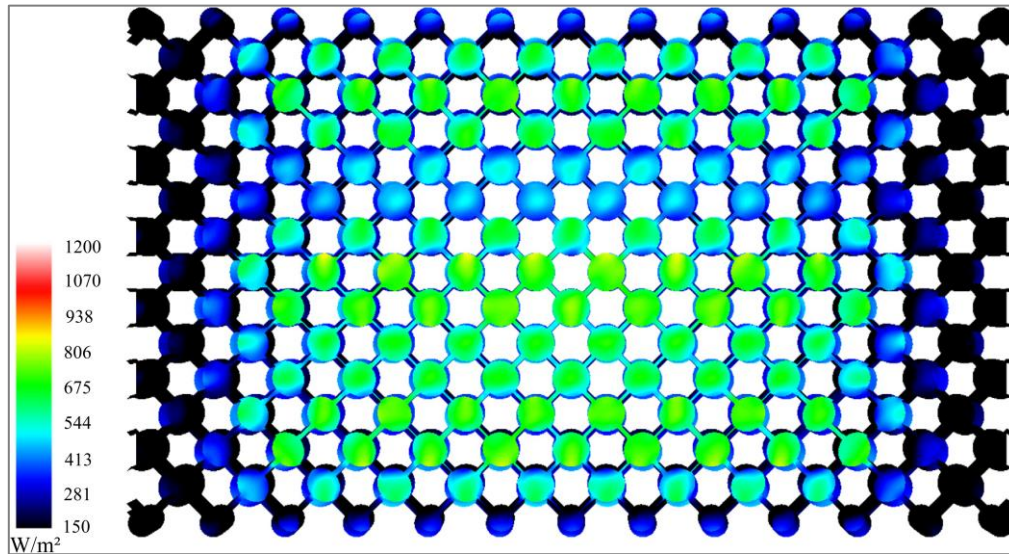


شکل ۸. توزیع تابش متوسط روی بستر فوتوکاتالیستی شبیه‌سازی شده در نرم‌افزار COMSOL Ray Optics.

نمایش دقیق توزیع تابش بر سطح بستر فوتوکاتالیستی، نقش کلیدی در مدل‌سازی نرخ واکنش نوری و تحلیل برهم‌کنش‌های جریان-سازه-تابش در راکتورهای نوری ایفا می‌کند. در این بخش، توزیع تابش شبیه‌سازی شده در نرم‌افزار COMSOL Ray Optics Module با نتایج ارائه‌شده در مقاله مرجع [۴۴] که از نرم‌افزار ANSYS SPEOS مبتنی بر روش مونت‌کارلو استفاده کرده است، مقایسه می‌شود.

شکل (۸) توزیع تابش متوسط روی بستر فوتوکاتالیستی شبیه‌سازی شده در نرم‌افزار COMSOL Ray Optics را نشان می‌دهد. این شبیه‌سازی با هندسه و پارامترهای مشابه مقاله مرجع و جهت اعتبارسنجی انجام شده است. شکل (۹) توزیع تابش متوسط روی بستر فوتوکاتالیستی شبیه‌سازی شده توسط مقاله مرجع [۴۴] را نشان می‌دهد.

همان‌طور که جدول ۲ نشان می‌دهد، مدل‌سازی انجام‌شده در کامسول با استفاده از روش تحلیلی wavefront ray-tracing توانسته است نتایج بسیار نزدیک‌تری به داده‌های تجربی ارائه‌شده در مقاله داشته باشد. انحراف نتایج مدل کامسول از داده‌های تجربی کمتر از ۲٪ است، درحالی‌که انحراف نتایج عددی مقاله مرجع که بر پایه DOM بنا شده است، به بیش از ۷٪ می‌رسد. این اختلافات قابل‌توجه عمدتاً ناشی از دقت بالاتر روش ردیابی پرتو در کامسول به دلیل مدل‌سازی واقعی‌تر پدیده‌های نوری از جمله شکست در مرزها، انعکاس‌های چندگانه، و انکسار در محیط‌های ناهمگن است. همچنین، استفاده از حل مستقیم معادلات همپلتونی برای موقعیت پرتو و بردار موج، دقت بالاتری در تحلیل مسیر پرتوها فراهم می‌کند که در روش‌های مبتنی بر تفکیک زاویه‌ای قابل‌دستیابی نیست.



شکل ۹. توزیع تابش متوسط روی بستر فوتوکاتالیستی ارائه شده توسط ماتیازو و همکاران [۴۴].

در نتیجه، اعتبارسنجی انجام شده نشان می دهد که مدلسازی میدان تابش در راکتور NETmix با استفاده از کامسول، قابلیت بالایی در بازنمایی دقیق میدان نوری و رفتار فوتونها دارد و می تواند به عنوان ابزاری قدرتمند در طراحی و بهینه سازی سیستم های فوتوکاتالیستی مورد استفاده قرار گیرد.

۶- نتایج و بحث

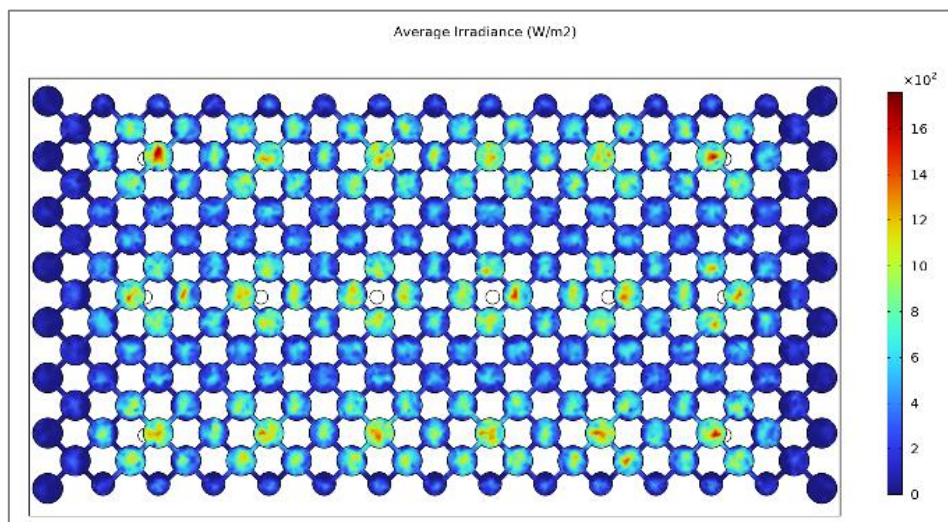
در این مطالعه، با بهره گیری از ماژول COMSOL Ray Optics و اعمال شرایط مرزی مناسب برای هندسه NETmix، تأثیر پنج پارامتر کلیدی در توزیع تابش بر سطح فوتوکاتالیستی به صورت جداگانه و ترکیبی بررسی شده است. این پارامترها که در بخش قبل به طور کامل توضیح داده شدند شامل موارد زیر هستند:

۱. زاویه تابش LEDها
۲. توان LEDها
۳. آرایش قرارگیری LEDها
۴. تعداد LEDها
۵. فاصله LEDها تا سطح فوتوکاتالیستی

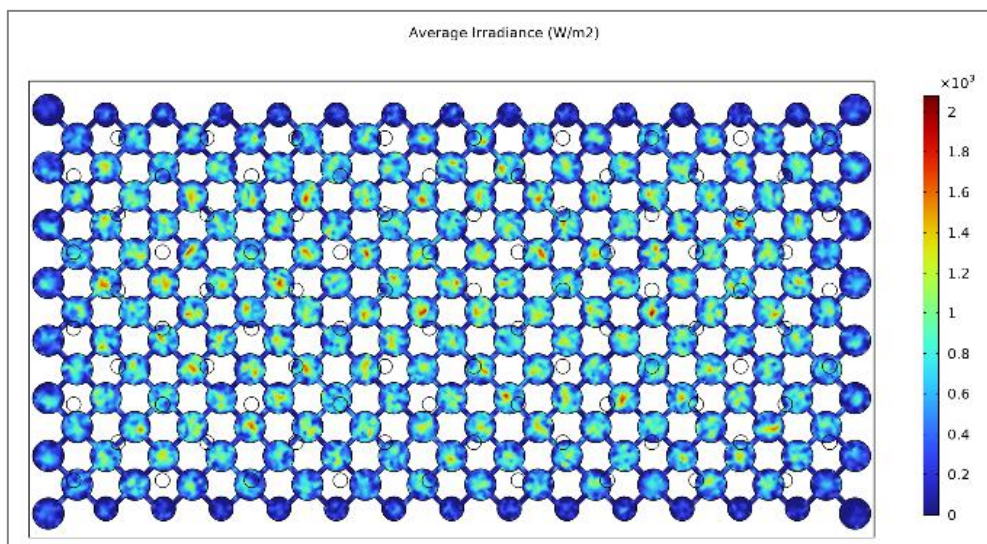
در کامسول روش ردیابی پرتو بر پایه جبهه موج استفاده می شود که قابلیت نمایش مستقیم و دقیق تابش روی سطح کاتالیست را فراهم می سازد. در این روش، تغییرات مکانی شدت تابش با وضوح بالا و تفکیک لبه ها بر روی سطح نشان داده می شود و نواحی داغ (hot spots) یا سایه دار به صورت دقیق قابل تشخیص هستند. این ویژگی به ویژه در هندسه های پیچیده ای مانند NETmix اهمیت زیادی دارد.

در مقابل، مدل مرجع [۴۴] در ANSYS SPEOS توزیع تابش را به صورت کانتورهای هم سطح و یکنواخت نمایش می دهد. در این رویکرد، شدت تابش به صورت میانگین گیری حجمی یا سطحی ارائه شده که گرچه از نظر بصری قابل فهم است، اما جزئیات موضعی و تغییرات سریع شدت تابش را از بین می برد. به ویژه در نواحی با انحنا یا انسداد جزئی، این مسئله می تواند به بزرگنمایی یا کوچکنمایی شدت تابش منجر شود.

مدل کامسول با قابلیت تعیین دقیق محل برخورد پرتو با سطح و کوپل کامل تابش در مرز جامد-سیال، بازنمایی فیزیکی دقیق تری از شار تابشی موضعی فراهم می کند. این ویژگی در شبیه سازی های FSI به درک بهتر از تأثیرات تابش بر انتقال حرارت و الگوهای جریان منجر می شود.



شکل ۱۰. مورد شماره ۱ - زاویه انتشار: ۶۰ درجه، توان LEDها: ۱ وات، آرایش قرارگیری LEDها: مستطیل، تعداد LEDها: ۱۸، فاصله LEDها تا سطح: ۱۰ میلی متر.



شکل ۱۱- مورد شماره ۸ - زاویه انتشار: ۸۰ درجه، توان LEDها: ۳ وات، آرایش قرارگیری LEDها: شش ضلعی، تعداد LEDها: ۹۰، فاصله LEDها تا سطح: ۱۰ میلی متر.

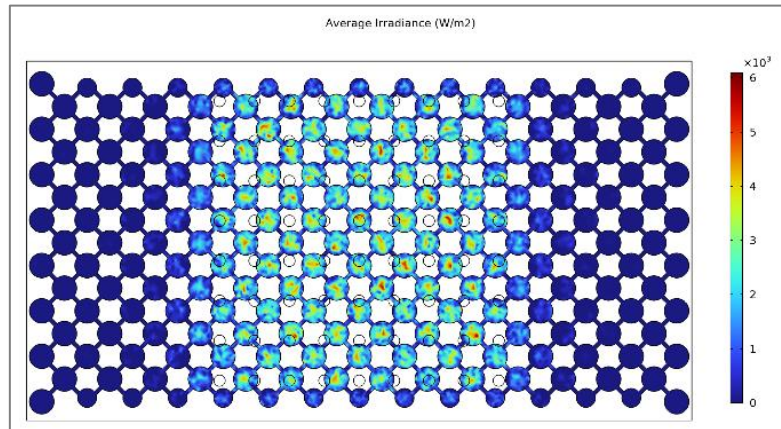
کانتورها بر حسب W/m^2 ترسیم شده‌اند و بیانگر شدت متوسط انرژی نورانی هستند که به سطح فوتوکاتالیستی برخورد می‌کند. شکل ۱۰ مورد شماره ۱ از جدول (۱) با آرایش مستطیل را نشان می‌دهد.

شکل ۱۱ مورد شماره ۸ از جدول (۱) با آرایش شش ضلعی را نشان می‌دهد.

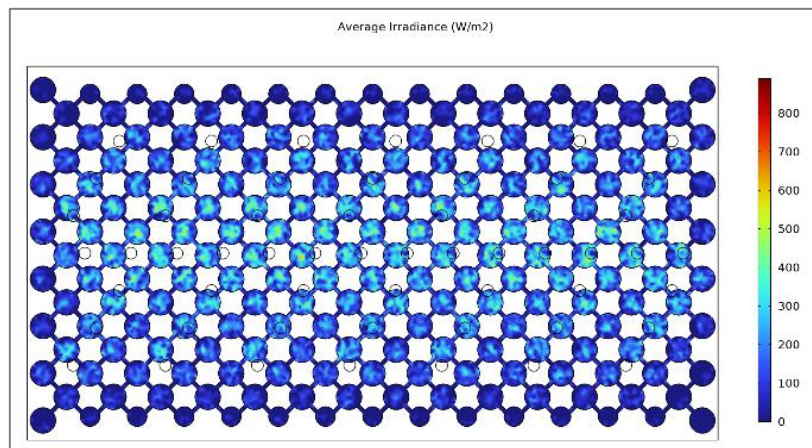
در مجموع ۲۵ حالت مختلف شبیه‌سازی شده است که نمایانگر ترکیب‌های مختلف این پارامترها هستند.

۱-۶- مشاهده کیفی توزیع تابش

شکل‌های (۱۰) تا (۱۴)، کانتورهای شدت تابش^{۳۱} را برای چند نمونه از حالات با بیشترین تابش متوسط نمایش می‌دهند. این



شکل ۱۲. مورد شماره ۱۵ - زاویه انتشار: ۱۰۰ درجه، توان LEDها: ۱۰ وات، آرایش قرارگیری LEDها: مربع، تعداد LEDها: ۷۲، فاصله LEDها تا سطح: ۱۰ میلی متر.



شکل ۱۳- مورد شماره ۱۷ - زاویه انتشار: ۱۲۰ درجه، توان LEDها: ۲ وات، آرایش قرارگیری LEDها: مورب، تعداد LEDها: ۵۶، فاصله LEDها تا سطح: ۱۰ میلی متر.

۳-۶- تحلیل نتایج

در این پژوهش، به منظور ارزیابی دقیق توزیع تابش نوری در سطح فوتوکاتالیستی راکتور NETmix، ۲۵ شبیه‌سازی عددی با ترکیب‌های مختلفی از پنج پارامتر کلیدی انجام شد. در این بخش، اثر پنج پارامتر کلیدی شامل زاویه تابش، توان منبع نوری، نوع آرایش هندسی LEDها، تعداد منابع نوری، و فاصله آن‌ها از سطح فوتوکاتالیست بر توزیع تابش نوری مورد بررسی قرار گرفته است. نتایج به‌دست‌آمده از مدلسازی عددی در کامپوس نشان می‌دهد که ترکیب این پارامترها تأثیر معناداری بر یکنواختی و شدت میانگین تابش در سطح فعال دارد.

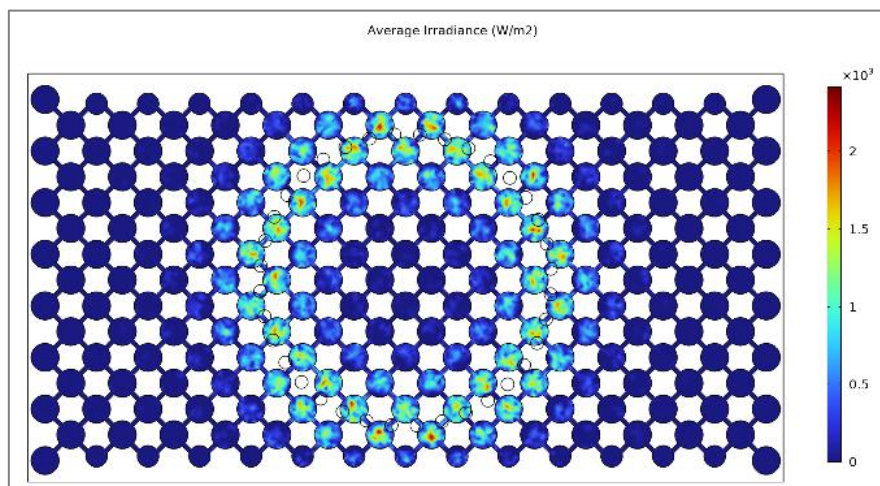
شکل ۱۲ مورد شماره ۱۵ از جدول (۱) با آرایش مربع را نشان می‌دهد.

شکل ۱۳ مورد شماره ۱۷ از جدول (۱) با آرایش مورب را نشان می‌دهد.

شکل ۱۴ مورد شماره ۲۴ از جدول (۱) با آرایش دایروی را نشان می‌دهد.

۲-۶- تحلیل کمی پارامترها

به‌منظور ارزیابی کمی عملکرد نوری، شاخص شدت تابش متوسط بر بستر فوتوکاتالیستی برای هر یک از ۲۵ حالت استخراج شده‌اند که در جدول (۳) قابل مشاهده است.



شکل ۱۴- مورد شماره ۲۴ - زاویه انتشار: ۱۴۰ درجه، توان LEDها: ۵ وات، آرایش قرارگیری LEDها: دایروی، تعداد LEDها: ۳۶، فاصله LEDها تا سطح: ۱۰ میلی‌متر.

۶-۳-۱- تحلیل کیفی توزیع تابش

شکل‌های (۱۰) تا (۱۴) کانتورهای شدت تابش را برای نمونه‌هایی از حالات با بیشترین شدت تابش نمایش می‌دهند. این کانتورها به‌خوبی بیانگر نحوه پخش انرژی نوری بر سطح فوتوکاتالیستی و نواحی تمرکز یا افت تابش هستند. مشاهدات کیفی نشان می‌دهد که آرایش شش‌ضلعی بیشترین یکنواختی توزیع تابش را بر سطح ایجاد می‌کند. این آرایش، به‌دلیل ساختار شش‌ضلعی و همپوشانی مؤثر پرتوها، نواحی تاریک را کاهش داده و یکنواختی نوری مطلوبی فراهم می‌سازد. این ویژگی در موردهایی مثل شبیه‌سازی شماره ۸ به‌وضوح قابل مشاهده است.

از سوی دیگر، مورد شماره ۱۵ بیشترین مقدار شدت تابش متوسط را به خود اختصاص داده است (۸۹۹/۹ وات بر متر مربع). این حالت شامل زاویه انتشار ۱۰۰ درجه، توان ۱۰ وات، آرایش مربعی، تعداد ۷۲ و فاصله بسیار کم (۱۰ میلی‌متر از سطح) است. ترکیب توان بالا، تعداد زیاد منابع نوری، فاصله نزدیک، و زاویه انتشار میانی، در کنار آرایش مربعی منجر به حداکثر تابش متمرکز در نواحی هدف شده است.

۶-۳-۲- تحلیل کمی تأثیر پارامترها

با بررسی نتایج جدول (۳) می‌توان تأثیر هر یک از پارامترهای بررسی‌شده را به تفکیک تحلیل کرد:

• زاویه تابش:

- زاویه‌های ۸۰ تا ۱۰۰ درجه بیشترین عملکرد نوری را داشتند. در این بازه، تعادل خوبی بین تمرکز و پخش پرتوها برقرار می‌شود.
- زاویه‌های کوچک باعث تمرکز نور در ناحیه مرکزی می‌شوند و لبه‌ها تیره می‌مانند.
- زاویه‌های خیلی باز، یکنواختی بهتری ایجاد می‌کنند اما افت شدید در شدت دارند.
- محدوده ۱۰۰-۱۴۰ درجه در اکثر حالات عملکرد مناسبی نشان داده است.
- زاویه‌های بیش از ۱۴۰ درجه باعث خروج بخشی از تابش از دامنه مفید می‌شوند.
- با وجود کاهش توان میانگین، در فواصل بالاتر، یکنواختی توزیع تابش معمولاً بهبود می‌یابد.

• توان LEDها:

- افزایش توان به‌تنهایی منجر به افزایش شدت تابش شده، ولی تنها در صورت ترکیب با فاصله مناسب و تعداد LED کافی مؤثر واقع شده است. به‌عنوان مثال،

○

جدول ۳. نتایج شبیه‌سازی عددی.

شماره	زاویه انتشار (°)	توان LED (W)	آرایش قرارگیری LED	تعداد LED	فاصله LED تا سطح (mm)	نتایج: شدت تابش متوسط (W/m ²)
۱	۶۰	۱	مستطیل	۱۸	۱۰	۳۸۰/۷
۲	۶۰	۲	مربع	۳۶	۵۰	۵۷/۳
۳	۶۰	۳	دایروی	۵۶	۱۰۰	۱۶/۱
۴	۶۰	۵	شش ضلعی	۷۲	۱۵۰	۷/۱
۵	۶۰	۱۰	مورب	۹۰	۲۰۰	۵/۸
۶	۸۰	۱	مربع	۵۶	۱۵۰	۰/۶
۷	۸۰	۲	دایروی	۷۲	۲۰۰	۰/۵
۸	۸۰	۳	شش ضلعی	۹۰	۱۰	۵۱۶/۲
۹	۸۰	۵	مورب	۱۸	۵۰	۵۲/۰
۱۰	۸۰	۱۰	مستطیل	۳۶	۱۰۰	۱۸/۰
۱۱	۱۰۰	۱	دایروی	۹۰	۵۰	۶/۰
۱۲	۱۰۰	۲	شش ضلعی	۱۸	۱۰۰	۱/۸
۱۳	۱۰۰	۳	مورب	۳۶	۱۵۰	۰/۹
۱۴	۱۰۰	۵	مستطیل	۵۶	۲۰۰	۰/۶
۱۵	۱۰۰	۱۰	مربع	۷۲	۱۰	۸۹۹/۹
۱۶	۱۲۰	۱	شش ضلعی	۳۶	۲۰۰	۰/۱
۱۷	۱۲۰	۲	مورب	۵۶	۱۰	۱۲۲/۳
۱۸	۱۲۰	۳	مستطیل	۷۲	۵۰	۱۰/۲
۱۹	۱۲۰	۵	مربع	۹۰	۱۰۰	۳/۲
۲۰	۱۲۰	۱۰	دایروی	۱۸	۱۵۰	۲/۰
۲۱	۱۴۰	۱	مورب	۷۲	۱۰۰	۰/۴
۲۲	۱۴۰	۲	مستطیل	۹۰	۱۵۰	۰/۲
۲۳	۱۴۰	۳	مربع	۱۸	۲۰۰	۰/۲
۲۴	۱۴۰	۵	دایروی	۳۶	۱۰	۲۱۶/۳
۲۵	۱۴۰	۱۰	شش ضلعی	۵۶	۵۰	۲۵/۱

- در مورد ۱۵ با توان ۱۰ وات و فاصله ۱۰ میلی‌متر، بیشترین تابش مشاهده شد. در حالی که مورد ۵ با همان توان ولی فاصله ۲۰۰ میلی‌متر تنها ۵/۸ (W/m²) تابش دارد.
- توان‌های بالاتر منجر به افزایش شدت موضعی می‌شوند ولی با افزایش بازتاب داخلی همراه‌اند.
- در برخی موارد، توان بیش از حد باعث تجمع گرما یا توزیع غیریکنواخت شده است.

- فاصله کمتر از ۵۰ میلی‌متر بهترین نتایج را ایجاد کرده است. با افزایش فاصله به بالای ۱۰۰ میلی‌متر، شدت تابش به‌صورت قابل‌توجهی کاهش یافته است.
- کاهش فاصله باعث تمرکز بهتر نور و کاهش تلفات ناشی از پراکندگی می‌شود، اما در صورت نبود یکنواختی می‌تواند منجر به نقاط داغ گردد.
- در فواصل بالا، نقش نوع سطح فوتوکاتالیست (پخشی یا صیقلی) بیشتر نمایان می‌شود.

۷- نتیجه‌گیری

این مطالعه با هدف شناسایی و تحلیل تأثیرگذارترین پارامترهای نوری در عملکرد فوتوکاتالیستی یک راکتور NETmix انجام شد. با بهره‌گیری از ماژول Ray Optics نرم‌افزار کامسول، توزیع شدت تابش بر سطح فوتوکاتالیستی تحت ۲۵ ترکیب مختلف از پنج پارامتر کلیدی مدل‌سازی گردید.

مهم‌ترین دستاوردهای این پژوهش عبارتند از:

- زاویه انتشار ۸۰ تا ۱۰۰ درجه، بهینه‌ترین عملکرد را از نظر تعادل بین پخش و تمرکز نور نشان داد.
- فاصله کوتاه (۱۰-۱۵ میلی‌متر) بین LED و سطح فوتوکاتالیستی منجر به بیشترین چگالی تابش مؤثر شد.
- آرایش شش‌ضلعی به‌طور مشخص بهترین یکنواختی تابش را ایجاد کرده و توزیع نوری پایدار و قابل اطمینانی فراهم نمود.
- عملکرد نوری به‌شدت به ترکیب هماهنگ پارامترها وابسته است؛ تمرکز بر یک عامل بدون لحاظ شرایط دیگر ممکن است نتیجه مطلوبی نداشته باشد.
- استفاده از زاویه و فاصله بسیار زیاد یا بسیار کم در بیشتر حالات به توزیع غیربهینه تابش منجر می‌شود.
- تحلیل عددی و کیفی هم‌راستا نشان می‌دهند که تنظیم همزمان چند پارامتر کلیدی برای بهینه‌سازی سیستم نوری راکتور ضروری است.

- استفاده از توان‌های میانی در ترکیب با تعداد مناسب LED، تعادل خوبی برقرار کرده است.

• تعداد LEDها:

- تعداد زیاد LEDها نیز تأثیر مثبت دارد، به شرط آنکه فاصله بهینه و آرایش مناسب لحاظ شود. مورد ۳ با ۵۶ LED ولی فاصله ۱۰ میلی‌متر، تنها $16/1 \text{ (W/m}^2\text{)}$ تولید کرده است، که نشان‌دهنده اهمیت فاصله است.
- افزایش تعداد به‌طور مستقیم باعث افزایش یکنواختی و حذف نقاط سایه‌دار می‌شود.
- با این حال، افزایش بیش از حد بدون تنظیم سایر پارامترها، به بازده پایین انرژی منجر شده است.
- افزایش تعداد LED در زاویه‌های کم تأثیر کمتری در بهبود یکنواختی دارد.

• آرایش قرارگیری:

- آرایش شش‌ضلعی منجر به پراکندگی یکنواخت‌تر تابش شد، حتی در مواردی که شدت متوسط کمتر از پیشینه بود. یکنواختی در کاربردهای فتوشیمیایی بسیار حائز اهمیت است زیرا از ایجاد نواحی واکنش‌پذیر و واکنش‌ناپذیر جلوگیری می‌کند.
- آرایش‌های مربعی و مستطیلی عملکرد خوبی در تمرکز انرژی دارند ولی نواحی تاریک نیز ممکن است ایجاد شود. آرایش دایروی و مورب معمولاً عملکرد ضعیف‌تری در یکنواختی یا شدت داشته‌اند.
- آرایش دایروی برای نواحی متمرکز و کوچک مؤثر بوده ولی در پوشش گسترده ضعف دارد.
- آرایش مورب در برخی شبیه‌سازی‌ها باعث ایجاد نواحی تاریک در بین منابع شده است.
- تأثیر نوع آرایش در حضور زاویه‌های تابش زیاد شدیدتر می‌شود.

• فاصله LEDها تا سطح فوتوکاتالیستی:

شناسایی ترکیب‌های بهینه عملکرد نوری شد، بلکه نقش نسبی هر پارامتر را نیز روشن ساخت.

نتایج این تحقیق می‌تواند به عنوان پایه‌ای برای طراحی صنعتی سیستم‌های فتوراکتور، تصفیه آب، هوا، یا کاربردهای سنتز فتوشیمیایی استفاده شود.

این پژوهش گامی مؤثر در جهت طراحی و بهینه‌سازی سیستم نوری راکتورهای فوتوکاتالیستی است. برخلاف اکثر مطالعات پیشین که تنها یک یا دو پارامتر را بررسی می‌کردند، در این مطالعه تمامی پارامترهای مؤثر به صورت ترکیبی و سیستماتیک شبیه‌سازی شده‌اند. این رویکرد نه تنها باعث

واژه نامه

- | | | |
|---------------------------------|--------------------------------------|----------------------------|
| 1. Photoactivity | 12. Radiative Transfer Equation, RTE | 22. Path-Dependent |
| 2. SrTiO ₃ | 13. Discrete Ordinates Method, DOM | 23. Shadow Zone |
| 3. Conduction Band (CB) | 14. Hamiltonian Ray Tracing | 24. Illuminated Surface |
| 4. Valence Band (VB) | 15. Monte Carlo | 25. Borosilicate Glass |
| 5. Band Gap | 16. Finite Volume Method (FVM) | 26. Stainless Steel |
| 6. Photocatalysis | 17. Runge-Kutta | 27. Polished Surface |
| 7. Degredation | 18. Time-Stepping | 28. Adaptive Time Stepping |
| 8. Ultraviolet Light (UV Light) | 19. Snell's Law | 29. Parallel Computing |
| 9. Front-Side Illumination | 20. Exponential Absorption Law | 30. Beam Angle |
| 10. Back-Side Illumination | 21. Riemann sum | 31. Irradiance |
| 11. Mixing Units | | |

References

منابع

1. Hashimoto, K., Irie, H., and Fujishima, A., "TiO₂ photocatalysis: a historical overview and future prospects", *Japanese Journal of Applied Physics*, Vol. 44, No. 12R, p. 8269, 2005.
2. Chen, X. and Mao, S. S., "Titanium dioxide nanomaterials: synthesis, properties, modifications, and applications", *Chemical Reviews*, Vol. 107, No. 7, pp. 2891-2959, 2007.
3. Kudo, A. and Miseki, Y., "Heterogeneous photocatalyst materials for water splitting", *Chemical Society Reviews*, Vol. 38, No. 1, pp. 253-278, 2009.
4. Zhang, J. and Nosaka, Y., "Mechanism of the OH radical generation in photocatalysis with TiO₂ of different crystalline types", *The Journal of Physical Chemistry C*, Vol. 118, No. 20, pp. 10824-10832, 2014.
5. Low, J., Yu, J., Jaroniec, M., Wageh, S., and Al-Ghamdi, A. A., "Heterojunction photocatalysts", *Advanced Materials*, Vol. 29, No. 20, p. 1601694, 2017.
6. Wang, Q., and Domen, K., "Particulate photocatalysts for light-driven water splitting: mechanisms, challenges, and design strategies", *Chemical Reviews*, Vol. 120, No. 2, pp. 919-985, 2019.
7. Coronado, J. M., "A historical introduction to photocatalysis", in *Design of Advanced Photocatalytic Materials for Energy and Environmental Applications*, pp. 1-4, London: Springer London, 2013.
8. Wagner, F. T., and Somorjai, G. A., "Photocatalytic and photoelectrochemical hydrogen production on strontium titanate single crystals", *Journal of the American Chemical Society*, Vol. 102, No. 17, pp. 5494-5502, 1980.
9. Tee, S. Y., Win, K. Y., Teo, W. S., Koh, L. D., Liu, S. H., Teng, C. P., and Han, M. Y., "Recent progress in energy-driven water splitting", *Advanced Science*, Vol. 4, No. 5, p. 1600337, 2017.
10. Lasek, J., Yu, Y.-H., and Wu, J. C. S., "Removal of NO_x by photocatalytic processes", *Journal of Photochemistry and Photobiology C: Photochemistry Reviews*, Vol. 14, pp. 29-52, 2013.
11. Sun, Y., Zwolińska, E., and Chmielewski, A. G., "Abatement technologies for high concentrations of NO_x and SO₂ removal from exhaust gases: A review", *Critical Reviews in Environmental Science and Technology*, Vol. 46, No. 2, pp. 119-142, 2016.
12. Wang, S., Ang, H. M., and Tade, M. O., "Volatile organic compounds in indoor environment and photocatalytic oxidation: State of the art", *Environment International*, Vol. 33, No. 5, pp. 694-705, 2007.
13. Peral, J., Domènech, X., and Ollis, D. F., "Heterogeneous photocatalysis for purification, decontamination and deodorization of air", *Journal of Chemical Technology & Biotechnology: International Research in Process, Environmental AND Clean Technology*, Vol. 70, No. 2, pp. 117-140, 1997.

14. Fujishima, A., and Honda, K., "Electrochemical photolysis of water at a semiconductor electrode", *Nature*, Vol. 238, No. 5358, pp. 37-38, 1972.
15. Peral, J. and Ollis, D. F., "Heterogeneous photocatalytic oxidation of gas-phase organics for air purification: acetone, 1-butanol, butyraldehyde, formaldehyde, and m-xylene oxidation", *Journal of Catalysis*, Vol. 136, No. 2, pp. 554-565, 1992.
16. Zhao, J., and Yang, X., "Photocatalytic oxidation for indoor air purification: a literature review", *Building and Environment*, Vol. 38, No. 5, pp. 645-654, 2003.
17. He, C., Cheng, J., Zhang, X., Douthwaite, M., Patisson, S., and Hao, Z., "Recent advances in the catalytic oxidation of volatile organic compounds: a review based on pollutant sorts and sources", *Chemical Reviews*, Vol. 119, No. 7, pp. 4471-4568, 2019.
18. Chen, R., Li, J., Wang, H., Chen, P., Sun, Y., Zhou, Y., and Dong, F., "Photocatalytic reaction mechanisms at a gas-solid interface for typical air pollutant decomposition", *Journal of Materials Chemistry A*, Vol. 9, No. 36, pp. 20184-20210, 2021.
19. Shah, V., Jacob, D. J., Li, K., Silvern, R. F., Zhai, S., Liu, M., Lin, J., and Zhang, Q., "Effect of changing NO_x lifetime on the seasonality and long-term trends of satellite-observed tropospheric NO₂ columns over China", *Atmospheric Chemistry and Physics*, Vol. 20, No. 3, pp. 1483-1495, 2020.
20. Wang, J., Li, J., Ye, J., Zhao, J., Wu, Y., Hu, J., Liu, D., et al., "Fast sulfate formation from oxidation of SO₂ by NO₂ and HONO observed in Beijing haze", *Nature Communications*, Vol. 11, No. 1, p. 2844, 2020.
21. Yang, J., Wang, X., Wang, H., Dong, F., and Zhu, M., "CsPbBr₃ perovskite nanocrystal: A robust photocatalyst for realizing NO abatement", *ACS ES&T Engineering*, Vol. 1, No. 6, pp. 1021-1027, 2021.
22. Nguyen, V.-H., Nguyen, B.-S., Huang, C.-W., Le, T.-T., Nguyen, C. C., Nhi Le, T. T., Heo, D., et al., "Photocatalytic NO_x abatement: Recent advances and emerging trends in the development of photocatalysts", *Journal of Cleaner Production*, Vol. 270, p. 121912, 2020.
23. Tahir, M. and Saidina Amin, N. A., "Photocatalytic CO₂ reduction with H₂O vapors using montmorillonite/TiO₂ supported microchannel monolith photoreactor", *Chemical Engineering Journal*, Vol. 230, pp. 314-327, 2013.
24. Singh, M., Salvadó-Estivill, I., and Li Puma, G., "Radiation field optimization in photocatalytic monolith reactors for air treatment", *AIChE Journal*, Vol. 53, No. 3, pp. 678-686, 2007.
25. Herrmann, J. M., "Heterogeneous photocatalysis: fundamentals and applications to the removal of various types of aqueous pollutants", *Catalysis Today*, Vol. 53, No. 1, pp. 115-129, 1999.
26. Ollis, D. F., "Photocatalytic purification and remediation of contaminated air and water", *Comptes Rendus de l'Academie des Sciences Series IIC Chemistry*, Vol. 3, No. 6, pp. 405-411, 2000.
27. Mills, A., and Le Hunte, S., "An overview of semiconductor photocatalysis", *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry*, Vol. 108, No. 1, pp. 1-35, 1997.
28. Marinho, B.A., Cristovao, R.O., Djellabi, R., Caseiro, A., Miranda, S.M., Loureiro, J.M., Boaventura, R.A., Dias, M.M., Lopes, J.C.B. and Vilar, V.J., "Strategies to reduce mass and photon transfer limitations in heterogeneous photocatalytic processes: Hexavalent chromium reduction studies", *Journal of Environmental Management*, Vol. 217, pp. 555-564, 2018.
29. Kayahan, E., Urbani, D., Dambruoso, P., Massi, A., Braeken, L., Van Gerven, T. and Leblebici, M.E., "Overcoming mass and photon transfer limitations in a scalable reactor: Oxidation in an aerosol photoreactor", *Chemical Engineering Journal*, Vol. 408, p. 127357, 2021.
30. Pan, L., Zhang, M., Mei, H., Yao, L., Jin, Z., Liu, H., Zhou, S., Yao, Z., Zhu, G., Cheng, L. and Zhang, L., "3D bionic reactor optimizes photon and mass transfer by expanding reaction space to enhance photocatalytic CO₂ reduction", *Separation and Purification Technology*, Vol. 301, p. 121974, 2022.
31. Enesca, A., "The influence of photocatalytic reactors design and operating parameters on the wastewater organic pollutants removal—a mini-review", *Catalysts*, Vol. 11, No. 5, p. 556, 2021.
32. Ahmed, S., Rasul, M.G., Sattar, M.A. and Jahirul, M.I., "Phenol degradation of waste and stormwater on a flat plate photocatalytic reactor with TiO₂ on glass slide: An experimental and modelling investigation", *Journal of Water Process Engineering*, Vol. 47, p. 102769, 2022.
33. Chaudhuri, A., Zondag, S.D., Schuurmans, J.H., van der Schaaf, J. and Noël, T., "Scale-up of a heterogeneous photocatalytic degradation using a photochemical rotor-stator spinning disk reactor", *Organic Process Research & Development*, Vol. 26, No. 4, pp. 1279-1288, 2022.
34. Llamas, J.D., Lesage, F. and Wild, G., "Influence of gas flow rate on liquid distribution in trickle-beds using perforated plates as liquid distributors", *Industrial & Engineering Chemistry Research*, Vol. 48, No. 1, pp. 7-11, 2009.
35. Marinho, B.A., Martin de Vidales, M.J., Mazur, L.P., Paulista, L., Cristóvão, R.O., Mayer, D.A., Loureiro, J.M., Boaventura, R.A., Dias, M.M., Lopes, J.C.B. and Vilar, V.J., "Application of a micro-meso-structured reactor (NETmix) to promote photochemical UVC/H₂O₂ processes—oxidation of As(III) to As(V)", *Photochemical & Photobiological Sciences*, Vol. 17, No. 9, pp. 1179-1188, 2018.

36. Sathyanarayana, R., Kumar, V., Pujar, G.H., Poojary, B., Shankar, M.K. and Yallappa, S., "Hydroxy-benzimidazoles as blue-green emitters: Synthesis, structural and DFT studies," *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry*, Vol. 401, p. 112751, 2020.
37. Miranda, S.M., Matiazzo, T., Padoin, N., Soares, C., Silva, T.F. and Vilar, V.J., "Photocatalytic oxidation of n-decane in a NETmix photoreactor: Insights into the reactor geometry and illumination mechanism," *Chemical Engineering Journal*, Vol. 497, p. 154705, 2024.
38. Matos, J., Santos, R.J., Dias, M.M. and Lopes, J.C.B., "Mixing in the NETmix reactor," *Frontiers in Chemical Engineering*, Vol. 3, p. 771476, 2021.
39. Santos, S. G., et al., "A step forward on NETmix reactor for heterogeneous photocatalysis: kinetic modeling of As (III) oxidation", *Chemical Engineering Journal*, Vol. 405, p. 126612, 2021.
40. Santos, S. G., et al., "Intensifying heterogeneous TiO₂ photocatalysis for bromate reduction using the NETmix photoreactor", *Science of the Total Environment*, Vol. 664, pp. 805-816, 2019.
41. Pelzers, R.S., Yu, Q.L. and Mangkuto, R.A., "Radiation modeling of a photo-reactor using a backward ray-tracing method: an insight into indoor photocatalytic oxidation," *Environmental Science and Pollution Research*, Vol. 21, No. 19, pp. 11142-11154, 2014.
42. Rastgaran, A., Fatoorehchi, H., Khallaghi, N., Larimi, A. and Borhani, T.N., "Modelling of photocatalytic CO₂ reduction into value-added products in a packed bed photoreactor using the ray tracing method," *Carbon Capture Science & Technology*, Vol. 8, p. 100118, 2023.
43. Schneider, J., et al., "Understanding TiO₂ photocatalysis: Mechanisms and materials," *Chemical Reviews*, Vol. 114, No. 19, pp. 9919-9986, 2014.
44. Matiazzo, T., Ramaswamy, K., Vilar, V. J. P., Padoin, N., and Soares, C., "Radiation field modeling of the NETmix milli-photocatalytic reactor: effect of LEDs position over the reactor window", *Chemical Engineering Journal*, Vol. 429, p. 131670, 2022.
45. COMSOL, "The Ray-Tracing Method in COMSOL Multiphysics", COMSOL Blog.
46. COMSOL, "The Ray-Tracing Method in COMSOL Multiphysics", COMSOL Support.
47. COMSOL, "Snell's Law and Refraction", COMSOL Documentation.
48. COMSOL, "Time-stepping Methods in Ray Tracing", COMSOL Documentation.
49. J. R. DeVore, "Refractive indices of rutile and sphalerite", *Journal of the Optical Society of America*, Vol. 41, No. 6, pp. 416-419, 1951.
50. da Costa Filho, B. M., Araujo, A. L., Padrão, S. P., Boaventura, R. A., Dias, M. M., Lopes, J. C. B., and Vilar, V. J. P., "Effect of catalyst coated surface, illumination mechanism and light source in heterogeneous TiO₂ photocatalysis using a mili-photoreactor for n-decane oxidation at gas phase", *Chemical Engineering Journal*, Vol. 366, pp. 560-568, 2019.