

國家原子能科技研究院
委託研究計畫研究報告

節能蓄熱式吸附濃縮處理系統氣流、熱流及運轉負載特性
模擬分析研究

**Simulation and analysis of the air flow, heat transfer and
operating load characteristics of energy saving heat storage
of adsorption-concentrating treatment system**

計畫編號：112B008

受委託機關(構)：和友檢驗科技有限公司

計畫主持人：徐一量

研究期程：中華民國 112 年 4 月至 112 年 11 月

研究經費：新臺幣 84.5 萬元

國原院聯絡人員：林威廷

報告日期：112 年 11 月 30 日

目 錄

目 錄.....	I
中文摘要.....	1
Abstract.....	3
壹、計畫緣起與目的.....	5
一、計畫緣起.....	5
二、計畫目標.....	6
貳、文獻回顧.....	7
一、揮發性有機物之處理技術.....	7
二、固定污染源之揮發性有機物排放限值.....	9
三、吸附原理.....	11
四、吸附材質特性.....	13
(一) 材質之種類及特性.....	13
(二) 吸附材質之改質特性及再利用材質應用.....	16
五、吸附劑之再生循環.....	19
六、蓄熱式燃燒器(Regenerative Thermal Oxidizer, RTO).....	20
七、數值模擬分析與應用.....	22

參、研究方法與過程.....	25
一、數值分析法.....	25
(一) FLUENT 介紹.....	27
(二) SIMPLE 演算法.....	30
(三) 統御方程式.....	31
(四) 模擬程序.....	35
二、循環再生活性氧化鋁材料吸脫附試驗分析	37
肆、吸脫附濃縮槽流場模擬.....	40
一、吸脫附濃縮槽.....	40
二、流場模擬流程說明.....	41
三、吸脫附濃縮槽流場模擬前處理	42
四、吸脫附濃縮槽流場模擬.....	46
(一) ANSYS FLUENT 多孔介質模擬說明	46
(二) 多孔介質的輸入說明.....	47
(三) 吸脫附濃縮槽流場模擬.....	49
(四) 吸脫附濃縮槽流場模擬結果比較.....	52

五、吸脫附濃縮槽流場模擬小結.....	77
伍、多孔介質燃燒室流場模擬.....	78
一、多孔介質燃燒室.....	78
二、流場模擬流程說明.....	79
三、多孔介質燃燒室.....	79
四、多孔介質燃燒室流場模擬結果比較.....	83
(一)多孔介質燃燒室流場建立.....	84
(二)多孔介質燃燒室效率分析.....	87
五、多孔介質燃燒室流場模擬小結.....	101
陸、循環再生活性氧化鋁材料之吸脫附效率評估.....	102
柒、結論與建議.....	106
一、結論.....	106
二、建議.....	106
捌、參考文獻.....	108

中文摘要

近年來台灣空氣品質不良之指標空氣污染物主要為 PM2.5 及臭氧，而臭氧為光化學污染物，其生成前驅物為揮發性有機物(Volatile Organic Compounds, VOCs)及氮氧化物(NO_x)。近期環保署也積極重視臭氧生成前驅物之 VOCs 排放源之減量可行性調查，VOCs 之管制亦開始受到重視。

為因應聯合國之 SDGs 及配合我國 2050 淨零碳排之相關政策，其攸關我國產業國際競爭力之經濟課題，核能研究所將自製的節能蓄熱式吸附濃縮處理系統，利用多孔介質吸附及雙槽之熱回收系統，以達到節能及提高 VOCs 處理效率，並可應用於半導體相關產業之低 VOCs 濃度與節能概念之污染防制設備應用領域。

本計畫運用數值模擬及吸脫附效率實驗，依據相關文獻及設計參數進行模型建置場及依不同操作條件進行可行性評估，以降低開發時間及成本，本計畫建立節能蓄熱式吸附濃縮系統模型，模擬製程氣流與熱流通過濃縮槽及多孔介質燃燒器時之不同流速與多孔介質之氣流交互作用與負載特性分析，進而模擬不同氣流條件之揮發性有機物吸脫附過程之吸附材料飽和時間分析，以評估該設備最佳化操作參數設定。

以循環再生活性氧化鋁材料進行吸脫附效率之測試，其實驗結果顯示以甲苯之濃度 250 ppm、400 ppm 及 500 ppm，雖然其各為 250 ppm 之 1.61 倍與 2 倍濃度，但其穿透時間比值分別為 0.56 與 0.29，顯示在相似吸附劑材質重量

(300 克)情況下，吸附穿透時間與濃度非為線性比例，其仍受吸附劑填充密度所影響，且脫附溫度約 70~80 °C，但脫附時間約為 256–749 秒即可完全脫附，表示未來實場脫附溫度設定不需要太高。

Abstract

In recent years, air pollutants that have been indicators of poor air quality in Taiwan have mainly been PM_{2.5} and ozone. Ozone is a photochemical pollutant whose precursors are volatile organic compounds (VOCs) and nitrogen oxides (NO_x). Recently, the Environmental Protection Agency has also actively paid attention to the feasibility investigation of the reduction of VOCs emission sources that are precursors to ozone generation, and the control of VOCs has also begun to receive attention.

In response to the SDGs of the United Nations and the relevant policies of China's 2050 net-zero carbon emissions, which are economic issues related to the international competitiveness of our industry, the Nuclear Energy Research Institute has developed a self-made energy-saving regenerative adsorption and concentration treatment system, using porous media adsorption and dual The heat recovery system of the tank can achieve energy saving and improve VOCs processing efficiency, and can be applied to pollution prevention equipment applications with low VOCs concentration and energy-saving concepts in semiconductor and agricultural product-related industries. In order to effectively reduce the design time and evaluate the feasibility and operation efficiency in advance, this project uses the Finite Element Method of numerical simulation software based on partial differential equations to conduct the flow field of the "energy-saving regenerative adsorption and concentration system"(Flow rate, pressure and temperature gradient distribution)analysis and adsorption concentration efficiency simulation, combined with adsorption and desorption efficiency experiments, the results can be used as a reference for the refinement and optimization of relevant operating parameters of the subsequent treatment system.

This project utilizes numerical simulation and adsorption efficiency experiments

to establish a model for an energy-saving heat storage adsorption concentration system. The model is built based on relevant literature and design parameters, and feasibility evaluations are conducted under different operating conditions to reduce development time and costs. The model simulates the interaction and load characteristics of process airflow and heat flow through the concentration tank and porous media burner at different flow rates and with different porous media. It further analyzes the saturation time of volatile organic compound adsorbents during the desorption process under different airflow conditions, aiming to evaluate the optimal operating parameter settings for the equipment. Tests on the adsorption and desorption efficiency are conducted using recycled regenerative alumina. Experimental results show that at concentrations of 250 ppm, 400 ppm, and 500 ppm of toluene, although the concentrations are 1.61 times and 2 times that of 250 ppm, the corresponding penetration time ratios are 0.56 and 0.29. This indicates that the adsorption penetration time is not proportionate to the concentration in cases where the weight of the adsorbent material is similar (300 grams). Moreover, the penetration time is influenced by the filling density of the adsorbent. The desorption temperature is approximately 70~80 °C, but complete desorption can be achieved in about 256-749 seconds, indicating that high desorption temperatures are not necessary for future field settings.

壹、計畫緣起與目的

一、計畫緣起

近年來台灣空氣品質不良之指標空氣污染物主要為 PM2.5 及臭氧，而臭氧為光化學污染物，其生成前驅物為揮發性有機物 (Volatile Organic Compounds, VOCs) 及氮氧化物 (NO_x)。為避免因氮氧化物減量，其減少「滴定效應」作用，而減緩臭氧被反應消耗，導致臭氧濃度升高，環保署於 112 年開始啟動第二期空氣污染防制計畫，定調為精準減量 (NO_x: VOCs 減量比例)，其與環保署第一期空氣污染防制計畫差異為主要針對大型污染源進行 NO_x 之減量，近期環保署也積極重視臭氧生成前驅物之 VOCs 排放源之減量可行性調查，例：電子零組件、表面塗裝、凹版印刷等排放現況調查與研修法規草案，及其他過去未曾進行管制之 VOCs 之農業操作與民生必需品等相關排放源，亦開始受到重視。

揮發性有機化合物 (VOCs) 在常溫下，具易揮發及逸散之污染物，污染源主要為石化產業、工業製程 (PU 合成皮工業、黏性膠帶及塗料業等)、半導體業、印刷業、乾洗業、食品業及以及農藥製造業等。因 VOCs 排放源控制及處理方式會受排放濃度及處理溫度而有差異，包含：熱破壞 (燃燒)、吸收 (包括洗滌)、吸附、冷凝及生物處理法等。選擇控制技術時，必須考慮污染物及排氣本身的物理與化學性質、處理效率以及對控制設備的特殊要求 (如場地、位置、大小、成本等) (環訓所教材)。

為因應聯合國之 SDGs 及配合我國 2050 淨零碳排之相關政策，其攸關我國產業國際競爭力之經濟課題，核能研究所將自製的節能蓄熱式吸附濃縮處理系統，利用多孔介質吸附及雙槽之熱回收系統，以達到節能及提高 VOCs 處理效率，並可應用於半導體及農產品相關產業之低 VOCs 濃度與節能概念之污染防制設備應用領域。為有效降低設計時間及預先評估可行性及運轉效能，本計畫以偏微分方程為架構的數值模擬軟體之有限元素法 (Finite

Element Method)進行「節能蓄熱式吸附濃縮系統」之流場(流速、壓力與溫度梯度分佈)分析與吸附濃縮效能模擬，其成果可供後續處理系統之相關運作參數精進與優化之參考。

二、計畫目標

本計畫使用有限元素法模擬節能蓄熱式吸附濃縮系統之運行及評估本所提供之設備最佳化操作參數設定，探討不同流速和多孔介質條件下之流場及吸附材料飽和時間。本計畫研究目標如下：

- (一) 針對運轉中節能蓄熱式吸附濃縮系統，模擬製程複合性和單一揮發性有機物氣流與熱流通過吸脫附濃縮槽時，不同流速和兩種不同孔洞密度多孔吸附介質條件下，兩道氣流交互作用下的(1)流速分布(2)氣壓分布(3)溫度分佈。
- (二) 針對運轉中節能蓄熱式吸附濃縮系統，模擬製程氣流與熱流通過多孔介質燃燒室時，以不同流速和通過兩種材料比熱容多孔蓄熱元件，兩道氣流交互作用下的(1)流速分布(2)氣壓分布(3)溫度分佈。
- (三) 透過上述建立的數值模型，以計算模擬方式分析吸附濃縮槽吸脫附過程和多孔介質燃燒室模擬分析，並依不同氣流條件分析吸附材料飽和時間，評估本所設備最佳化 操作參數設定。
- (四) 至少蒐集國內外相關文獻 50 篇及彙整揮發性有機物及吸附特性與節能蓄熱式吸附 濃縮燃燒或再利用系統之相關資訊，供節能蓄熱式吸附濃縮系統之優化評估參考。
- (五) 利用採氣袋配置已知至少三種濃度之單一揮發性有機化合物，以測試及評估本所自製循環再生活性氧化鋁材料之吸脫附效率。

貳、文獻回顧

一、揮發性有機物之處理技術

表 2-1 為參考環保署專案計畫之國內經環保局列管之電子零組件製造業之防制設備資料，其相關製程之公私場所防制設備類型為燃燒設備(許可申請效率 99%、實際效率 90~99%)、吸附設備(許可申請效率 50~90%、實際效率 80%)、吸脫附設備(許可申請效率 90~99%)及洗滌設備(許可申請效率 80%、實際效率 30~80%)等，其中以洗滌效率法最差，與本計畫相關之吸脫附及燃燒設備之各別效率皆可達 90%以上。電子零組件製造業主要排放 VOCs 物種為甲苯、甲醇、乙醇、丙酮、丁酮、異丙醇及乙酸乙酯，經環保署專案計畫之實地調查，有五家使用防制設備為焚化設備，檢測結果皆測得因燃燒不完全而產生的二次污染物(如醛類化合物)(環保署專案計畫, 2022)。

表 2-2 為參考環保署專案計畫之國內經環保局列管之凹版印刷業之防制設備資料，根據環保署固定污染源管理資訊系統，目前國內經環保局排放許可列管之凹版印刷業者常用之防制設備類型包含沸石濃縮轉輪+蓄熱式焚化爐(許可申請效率 90~96.1%、實際效率 80~96.1%)、蓄熱式焚化爐(許可申請效率 90~98.8%、實際效率 90~99%)、吸附設備(許可申請效率 3~90.1%、實際效率 3~80%)、洗滌設備(許可申請效率 10~50%、實際效率 10~50%)、生化噴霧塔(許可申請效率 80%、實際效率 80%)及電漿反應器(許可申請效率 70%、實際效率 70%)(環保署專案計畫, 2022)，其中吸附設備及洗滌設備效率最低，與本計畫相關之廢石濃縮轉輪和蓄熱式焚化爐設備之各別效率皆可達 80%以上。

表 2-1 許可列管之電子零組件製造業之防制設備資料

防制設備種類	列管使用家數	設置成本 (萬元)	許可申請效率 (%)	實際處理效率 (%)
燃燒設備	47	450-5000	99	90-99
吸附設備	18	20-3260	50-90	80
吸脫附設備	11	300-1410	90-99	—
洗滌設備	38	20-2000	80	30-80

註：—無資料；資料來源：環保署專案計畫，2022。

表 2-2 許可列管之凹版印刷業之防制設備資料

防制設備種類	列管使用家數	設置成本 (萬元)	實際處理效率(%)
廢石濃縮轉輪加蓄熱式焚化爐	6	50-300	80-96.1
蓄熱式焚化爐	28	20-450	90-99
吸附設備	30	1-1200	3-80
洗滌設備	34	1-20	10-50
生化噴霧塔	1	50	80
電漿反應器	2	25	70

資料來源：環保署專案計畫，2022。

二、固定污染源之揮發性有機物排放限值

環保署尚未訂定相關管制排放標準，目前仍以通則性之「固定污染源空氣污染物排放標準」加以管制。根據環保署傳計畫調查結果顯示(環保署專案計畫，2022)，電子零組件製造業 VOCs 之防制技術已從過去常見之洗滌法、吸附法改為以焚化技術。表 3-3 為國外固定污染源之揮發性有機物排放限值，其中與電子零組件製造業相關之紙張、薄膜和箔塗層之 VOCs 排放，美國環保署之管制方案為紙張、薄膜和箔表面塗層之減少排放量達 90%，而美國加州南岸空氣品質管理區針對 VOCs 排放源之防制設備操作限制，去除效率至少達 95%或排放濃度低於 50 ppm。歐盟在其它塗層之管制為連續過程中，於鋼捲、不鏽鋼、塗層鋼、銅合金或鋁金屬進行塗膜或層壓塗層作業者不同作業方式進行 VOC 排放限值之規範，請參考表 2-3。

表 2-3 國外固定污染源之揮發性有機物排放限值

項目	管制對象與方案	管制單位及特別規定
減少排放量 (%)	<ol style="list-style-type: none"> 管制對象: 適用於紙張、薄膜和箔塗層(包含清潔作業) 實際 VOCs 總排放量大於 6.8 公斤/天(15 磅/天)之公私場所。 管制方案: 紙張、薄膜和箔表面塗層之減少排放量達 90%。 	美國環保署(2007 年 9 月公告)

<p>防制設備操作限制</p>	<ol style="list-style-type: none"> 1. 排放控制系統之去除效率至少達 95%或排放濃度低於 50 ppm。 2. 排放控制系統之收集效率至少應達 90%排放量。 	<p>美國加州南岸空氣品質管理區 (SCAQMD) (1996 年 3 月 8 日修訂)</p>
<p>其他塗層 (含金屬、塑膠、紡織品⁽⁵⁾、織物、薄膜及紙張)</p>	<ol style="list-style-type: none"> 1. 管制對象：在製作連續過程中，於鋼捲、不鏽鋼、塗層鋼、銅合金或鋁金屬進行塗膜或層壓塗層作業者。 2. 排放限值 (mg C/Nm³): 100⁽¹⁾⁽⁴⁾ 50/75⁽²⁾⁽³⁾⁽⁴⁾ 	<p>歐盟(2010 年 11 月 24 日修正公告)</p> <p>註: (1)排放限值是用於封閉條件下的塗層作業(含乾燥流程)。(2)第 1 個排放限值適用於乾燥流程、第 2 個排放限值適用於塗層應用流程。(3)可再利用回收溶劑技術的紡織品塗層流程及塗層應用流程排放限值應為 150。(4)根據第 59 條第 3 款，無法於封閉條件下進行塗層作業可免除規定。(5)第 3 項涵蓋紡織品之滾網印花</p>

資料來源：環保署專案計畫, 2022。

三、吸附原理

吸附分為物理吸附與化學吸附，物理吸附為凡得瓦爾力之作用，為可逆反應，其可藉由溫度或壓力改變而使得吸附物質脫附。化學吸附是吸附質與吸附劑間產生化學反應，吸附劑具選擇性，且不易可逆再使用。本計畫使用為多孔介質吸附材質，屬物理吸附，其可透過吸附累積達一定污染物濃度後再進行脫附，並利用熱處理將其濃度削減，以達污染物排放控制效果。表 3-4 為當溫度固定，其氣態吸附質與固態吸附劑間之平衡吸附等溫曲線分為五類。

表 2-4 吸附等溫曲線類型

曲線類型	特性
Type I isotherm	<ol style="list-style-type: none">1. 具微孔(~20Å)之吸附行為，每個孔隙之容納分子有限。2. 被視為單層吸附，其吸附能力與吸附質比表面積有關。
Type II isotherm (S-shaped or sigmoid)	<ol style="list-style-type: none">1. 屬非孔隙或巨孔吸附劑之行為。2. 被視為多層吸附，多屬學者以 BET 吸附模式來解釋此類型。
Type III isotherm	<ol style="list-style-type: none">1. 屬非孔隙或巨孔吸附劑之行為，吸附劑與吸附質間吸附力弱。2. 低濃度時，吸附量極少，但在吸附分子後具

	有促進其他分子間吸附能力，故在高濃度時具有多層吸附現象。
Type IV isotherm	<ol style="list-style-type: none"> 1. 具中孔(20~500Å)之吸附行為，在高壓下會有遲滯現象。 2. 多層吸附行為大於 Type II isotherm。
Type V isotherm	<ol style="list-style-type: none"> 1. 具中孔(20~500Å)或巨孔(~500Å)之吸附行為，吸附劑與吸附質間吸附力弱。 2. 與 Type III isotherm 相似。

資料來源：Brunauer et al. (1938; 1940)；王卿昧(2003)

等溫吸附模式常用於描述與推估氣體吸附固體表面之原理與現象，表 2-5 為常用之四種吸附模式，其 BET isotherm 較常用於描述多層吸附現象，而各研究會視該吸附劑特性選擇是當知吸附模式進行吸附濃度推估。奈米孔隙之吸附材(活性碳、矽膠、13X 分子篩)吸附 VOCs 之研究是以 Freundlich 等溫吸附平衡模式，證實平衡數據與理論計算之數據之間的相關性(王卿昧, 2003)。相關研究使用商用球狀活性碳，吸附去除甲苯(TOL)及丁酮(MEK)，並搭配電熱再生技術(Electrothermal Swing System, ETS)，研究成果指出在 120、140、160°C三種不同溫度條件下進行再生，吸附 TOL 之 BAC (TOL-BAC)脫附效率介於 54.83–79.68%，而吸附 MEK 之 BAC (MEK-BAC)脫附效率介於 84.67–89.88%之間，兩者均呈現隨著溫度升高，脫附效率也越高(尤皓誌, 2021)。相似研究以高度圓球率之球狀活性碳，應用在處理甲苯(TOL)及丁酮(MEK)吸附去除上；並搭配微波加熱再生技術，結果顯示以 Langmuir、Freundlich 及 Dubinin-Radushkevich(D-R)等溫吸附曲線模式進行擬合均顯示出高擬合度(蕭

世盈,2020)。實場個案研究方面，將 VOCs 與酸性污染物分流後以活性碳流體化床接續電熱焚化系統處理 VOCs 廢氣，效率可達 92%，可符合環保署公告之「半導體製造業空氣污染管制及排放標準」中 VOCs 管道排放標準(削減率 90%)(呂伊涵，2020)。

表 2-5 等溫吸附模式

模式類型	方程式	特性與文獻
Langmuir isotherm	$q = \frac{q_m K_L C}{1 + K_L C}$	適用低濃度污染物之描述
Freundlich isotherm	$q = AC^n$	適用高濃度污染物之描述
Toth isotherm	$q = \frac{q_\infty C}{\sqrt[\beta]{1 + \alpha C^\beta}}$	在均勻吸附表面，可以 Kreundlich Isotherm 表示
BET isotherm	$q = \frac{Bq_0C}{(C_s - C)\left[\frac{1 + (B - 1)C}{C_s}\right]}$	與 Langmuir isotherm 相似，其假設吸附劑表面具一般與局部吸附位置，且任一位置之吸附不受鄰近位置影響

資料來源: Brunauer et al. (1938; 1940)；王卿昧(2003)

四、吸附材質特性

(一) 材質之種類及特性

不同吸附材料之平均比表面積、孔隙體積與 VOCs 吸附量依序為金屬有機骨架(Metal Organic Frameworks, MOFs)>活性碳(Activated Carbons,

ACs)>超交聯聚合物樹脂(Hyperscrosslinked Polymeric Resin, HPR)>沸石(Zeolites)(圖 2-1)，比表面積、孔隙結構及化學官能團是影響吸附材料之三個關鍵因素，將直接決定其吸附 VOCs 的性能(Carter et al., 2011; Dou et al., 2011)。雖然沸石與其他吸附材料相比，沸石的比表面積較小，對 VOCs 的吸附能力較差，但沸石因其孔徑大小可調、疏水性高、熱穩定性好、表面易於改性等特點，被廣泛應用於吸附 VOCs、重金屬離子等環保領域(Tidahy et. Al., 2007; Yousef et al., 2011)，且若沸石與催化活性金屬結合時，在 VOC 之催化燃燒中可表現出顯著改善的性能(Chen et al., 2015; Yan et al., 2017)。

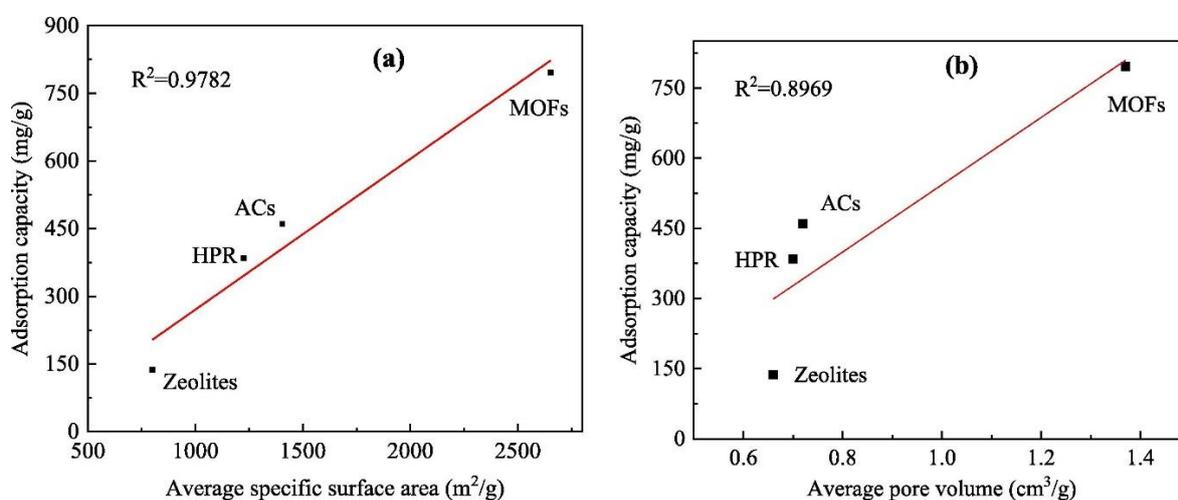


圖 2-1 吸附容量與不同吸附材料之關係:(a)比表面積；(b)孔體積

國外學者指出(Ciesla & Schüth, 1999)，沸石合成中的兩個因素會導致孔徑發生變化，其加入鹽或陰離子，則會增加孔徑體積(pore volume)，且隨鹽量增加，PEO (PolyEthylene Oxide) 親水端的親水性降低，聚苯醚(polyphenyleneoxide) 疏水端的疏水性增加。沸石合成過程中加入鹽類主要是利用其靜電相互作用形成非極性鹽析效應，幫助形成穩定的化合物(Tang et al., 2004)。

沸石材質中之 Si/Al 比是影響 VOCs 吸附性能之重要因素，特別是水存在要處理之氣流中，相關研究測試 VOCs 廢氣中相對濕度增加，AgY(IE)(Si/Al 比= 40)對乙酸丁酯的吸附能力受到強烈抑制，且吸附量減

少 42% (Bhatia et al., 2009)。沸石對 VOCs 的吸附量隨著 Si/Al 比的增加而增加，主要因沸石表面疏水性之增加(Li et al., 2020)。一般沸石之型吸附模型是低壓之單層吸附，隨著 VOCs 相對壓力之增加，孔隙結構發生毛細管凝聚，吸附能力急劇增加。市面常用之沸石為 MCM-41 與 SBA-15 (Hu et al., 2009; Serrano et al., 2004)，其中 MCM-41 應用於吸附低及中等濃度 VOCs，MCM-41 孔壁吸引力因其小孔徑而增強，且等溫吸附模型屬於 I 型，而 SBA-15 具較多中孔與微孔，更適合吸附較高濃度之 VOCs 與大分子化合物(Li et al., 2020)。吸附劑與吸附質之極性亦會影響吸附效果，丙酮蒸氣在二氧化矽-氧化鋁上的平衡吸附容量比甲苯蒸氣高約四倍(Lee et al., 2008)。

以活性碳為例，圖 2-2 為 VOCs 在不同活性碳孔徑之吸附機制。VOCs 分子直徑決定 VOCs 進入吸附劑之有效孔隙。孔徑大於 VOCs 分子直徑的孔隙可成為有效吸附位點。但當孔徑遠大於 VOCs 分子直徑時，吸附劑與 VOCs 分子間的吸附力太弱，孔隙只能起到通道的作用。一般而言，微孔提供了主要的吸附位點，而中孔增強了揮發性有機化合物的擴散(Li et al., 2020)。此外，除 VOCs 之分子大小外，VOCs 之形狀亦會對吸附產生影響。相關研究以 MIL-101 吸附質之孔徑，模擬乙苯、對二甲苯、鄰二甲苯與間二甲苯進入 MIL-101 孔隙之示意圖(圖 2-3)，其中丙酮、苯、甲苯、乙苯與對二甲苯等小體積之 VOCs 以最小直徑平面進入 MIL-101 孔隙，而大尺寸 VOCs(例如:間二甲苯與鄰二甲苯)則不進入孔隙中吸附(Yang et al., 2011)。

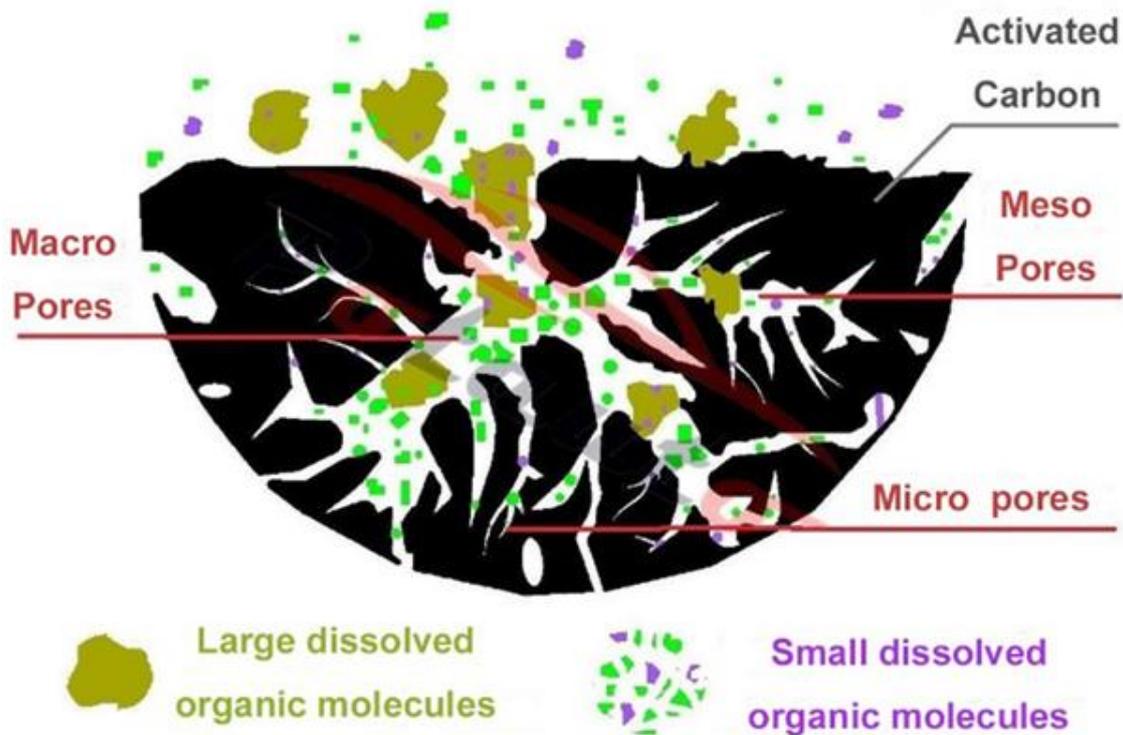


圖 2-2 VOCs 在不同孔隙之吸附機制(資料來源: Li et al., 2020)

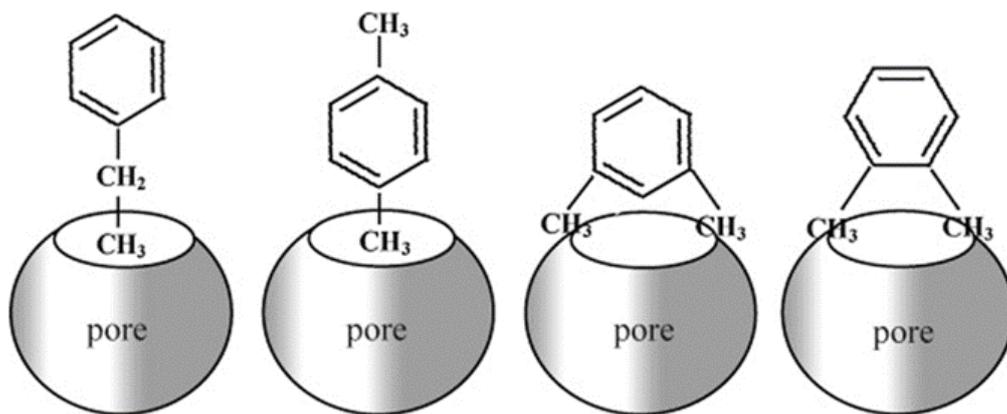


圖 2-3 不同 VOC 進入 MIL-101 孔隙示意圖

(二) 吸附材質之改質特性及再利用材質應用

多孔材料開發研究應用於 VOCs 濃縮有機物質之吸脫附特性研究，其以活性碳、矽及鋅等三合一之材料，測試不同比表面積、孔徑體積及孔徑等因子，評估其 VOCs 之吸脫附差異。相關研究結果顯示，以矽及鋅材料

對於 C 數 ≤ 3 (乙烷、乙烯、丙烷、丙烯)之 VOCs 捕捉效率差，而 C₃-C₁₂ 碳數之 VOCs 捕捉以活性碳 AX-21 最佳，因活性碳材料具微孔特性及具有高比表面積 (王嫻絮，2013)。以多孔性之 γ -Al₂O₃ 及中孔矽為基材，並加上 24 wt.% Cu 為擔載量合成為 Cu-24/LSBA-15，利用氫半導體及光電廠常使用之製程氣體(PH₃)進行吸脫附試驗，結果顯示具高吸附量及再生能力佳之性能(許榮男，2010)。亦有研究以 Na₂O : Al₂O₃ : SiO₂ = 4.5 : 1 : 10 等比例，經高溫鍛燒後形成粒狀沸石。因沸石具有大表面積及孔徑大小一致等性質，一般可作為分子篩。該研究以不同 VOCs 濃度及搭配進固定氣量(固定流量 1.0 L/min)進行沸石吸脫附之試驗，結果顯示 VOCs 之吸附量與進料濃度成正比，而在固定 VOCs 濃度，以調低 VOCs 進流量則延後吸附床之貫穿時間(黃聖樺，2006)。

國外學者採用蒸氣誘導自組裝法製備 (evaporation induced self-assembly, EISA)法將金屬氧化物奈米粒子有效負載到 NaY-沸石(NaY zeolite)上，以提高對 VOCs 之吸附能力。採用動態和靜態吸附實驗研究 Y@M_xO_y (M = Ni, Co, Cu, Mn) 在相對溼度 RH = 0 及 RH = 50%之條件，對甲苯、異丙醇及丙酮進行吸附實驗。與 NaY 沸石相比，Y@M_xO_y 與均勻分散的金屬氧化物納米顆粒顯著提高 VOCs 的吸附能力，並且 Y@CoO 在以下條件下對異丙醇 (189 mg/g) 和丙酮 (124 mg/g) 表現出最佳吸附性能 RH = 50%，但 Y@MnO₂ 顯示出對甲苯的最佳吸附能力 (50 mg/g) (Yin et al., 2022)。濕度對沸石吸附有機物之影響，增加濕度對吸附劑之貫穿時間、貫穿曲線形狀與 VOCs 之吸收特性有顯著影響，而利用苯及水蒸氣共吸附系統之測試可知，與其他 VOCs-水共吸附系統相比，水分的存會使 VOCs 吸收及貫穿時間之減少更大(Tao et al., 2004)。亦有研究探討高濃度與高吸附溫度下活性碳纖維之甲苯的氧化與吸附試驗，結果指出突破時間隨著甲苯濃度的增加而縮短，當甲苯入口濃度增加到 1,200 ppm 時，甲苯的

吸附能力顯著增加，且隨著吸附溫度的升高，甲苯的突破時間和吸附容量降低。當吸附在 200°C 飽和時，甲苯的出口濃度沒有達到 1,200 ppm，因為活性碳纖維表面的氧官能基已經與甲苯反應形成其他化合物(Lin et al., 2013)。

吸附材質之再利用材質應用方面，相關研究以鹼熔水熱技術將焚化底渣合成為 ZSM-20 沸石材料，其具多孔特性，且碘值優於一般活性碳 (2261.58mg/g)，用於測試有機氣體(甲苯、對二甲苯、鄰二氯甲苯)之吸附模式為 Langmuir 等溫吸附模式及擬二階吸附動力模式，而單層飽和吸附量分別為 500mg/g、434.78 mg/g、416.67 mg/g(許育婷，2021)。以焚化底渣為基質加入三種硝酸鹽金屬與三種胺劑合成為具六角結構之 MCM-41 材料，並測試對 VOCs(甲苯與甲醛)之吸附特性，在競爭吸附試驗結果顯示，甲苯及甲醛飽和吸附量分別為 11.65 mg/g 及 1.21 mg/g，證實 MCM-41 於室溫環境可同時吸附兩種有機物之潛力(藍海銘，2019)。以稻殼農業廢棄物製備出多孔二氧化矽材料(微/中孔洞 RSBA-16)，並測試對丙酮之吸附能力，結果顯示 RSBA-16 因具有高總比表面積與高微孔比表面積，其對丙酮之飽和吸附量為 179 mg/g(曾婉婷，2016)。

國外學者以火力電廠之袋濾式集塵之飛灰以鹼性溶液處理，經利用沸石基質加入鐵氧化物或 Fe^{2+}/Fe^{3+} 離子進行合成再利用，其沸石微晶尺寸約為 1-2 μ m 且具有相對高比表面積 (220 至約 500 m^2/g) 之微介孔複合材料。飛灰沸石 (Fly Ash Zeolites, FAZ) 具有高 CO_2 吸附能力，而具體受沸石結構中鐵之影響。在以添加鈷進行飛灰沸石 (Co-FAZ) 進行製備(含 6wt.% 鈷)，在降解不同的 VOCs (丙酮、正己烷、甲苯和 1,2 二氯苯) 具高氧化性，研究證實沸石化程度與 FAZ 中鐵之狀態是催化活性之關鍵參數(Popova et al., 2020)。亦有利用陽離子界面活性劑模板 (CTAB)、陰離子界面活性劑模板 (SDS)、非離子界面活性劑模板 (P123) 及空白模板合成具有不同孔性質

的 Al_2O_3 材料進行甲醛氣體之吸脫附試驗， Al_2O_3 樣品對甲醛的吸附容量為 $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-P123} > \text{Al}_2\text{O}_3\text{-Blank} > \text{Al}_2\text{O}_3\text{-SDS} > \text{Al}_2\text{O}_3\text{-CTAB}$ ，其中 $\text{Al}_2\text{O}_3\text{-P123}$ 表面存在豐富羥基基團，有利於與甲醛分子的化學吸附(Chen et al., 2014)。具有高 $\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$ 比(SAR)的 β 沸石對於 VOCs 的吸附非常重要，Nano-B600 [$\text{SiO}_2/\text{Al}_2\text{O}_3$ ratio (SAR)高達 600，命名為 Nano-B600]具有較大比表面積、介孔體積及較強疏水性，對甲苯有強吸附能力，對於其他有機化合物，Nano-B600 比常用的 ZSM-5 與 Y 沸石表現出更高的吸附能力(Wang et al., 2021)。而高比吸收率(SAR)有利於吸附，但脫附效率不佳，H-ZSM-5(470)對甲苯(87.54 mg/g) 與乙酸乙酯(150.74 mg/g) 具有較高吸附容量，而 H-ZSM-5(300) 對甲苯(87.54 mg/g) 及乙酸乙酯(150.74 mg/g) 具有較高的吸附容量(Yue et al., 2023)。

五、吸附劑之再生循環

為延長吸附劑之使用壽命及污染物處理成本，吸附劑之再生利用也是選用吸附材料之一個重要考量指標。在保有吸附劑之有效的物理及化學性質下，可透過變壓法、變溫法、吹拂氣提法及微波加熱法等，可將 VOCs 分子從吸附劑活性位點進行移除，其中升溫脫附法是設備簡單、能耗低、脫附效率高最常見的 VOCs 脫附方法。隨著溫度的升高，因吸附劑之物理化學結構亦會受到變質，從而影響再吸附能力，可再生週期對不同吸附材料吸附容量及可再生次數之影響如圖 2-4 所示 (Wang et al., 2013; Zhang et al., 2019a,b; Zaitan et al., 2016)，且不同吸附劑之重複使用性，受不同吸附材料之耐熱性不同而影響。

由圖 3-4 可知，活性碳(AC)及沸石皆具有良好之再生與重複使用性，經 5 次脫吸/吸附循環後，其吸附量仍可保持 92%以上，而 HPR 與 MOFs 之吸附容量則分別下降到原來吸附量之 83.6%與 80.9%。在耐熱性方面，活性碳製作因在高溫下碳化與活化，因具有良好的耐熱性，而沸石之耐熱性歸因

於穩定之分子結構。HPR 和 MOFs 材料由於結構上有機化合物的結合，使得 HPR 和 MOFs 材料的孔結構及官能團在高溫下容易發生變化，使吸附，使吸附性能變差(Li et al., 2020)。

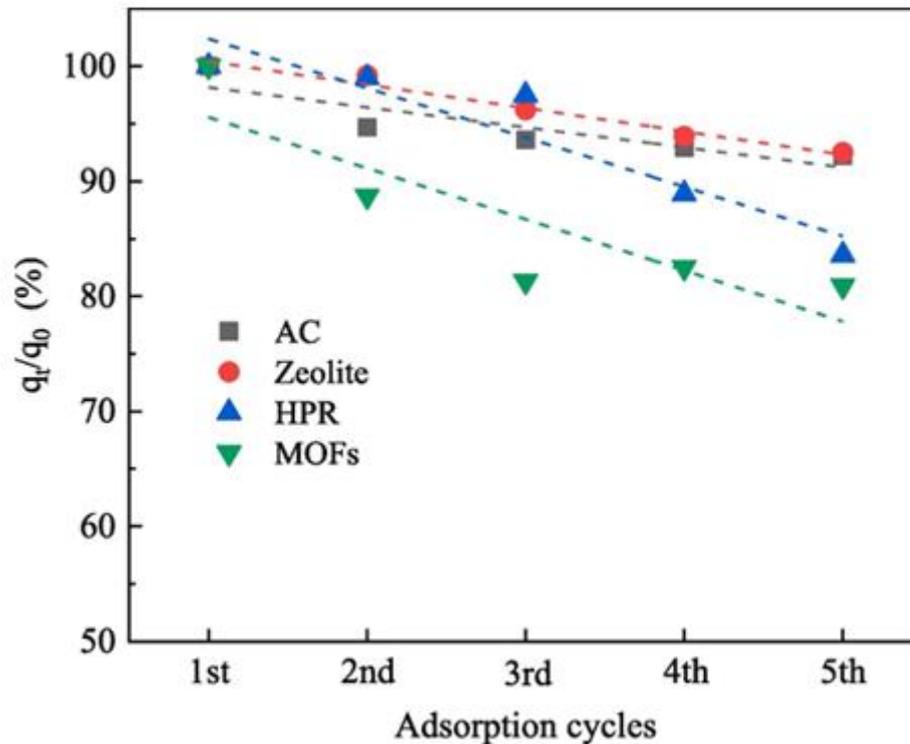


圖 2-4 再生循環對不同吸附材料吸附容量的影響

六、蓄熱式燃燒器(Regenerative Thermal Oxidizer, RTO)

RTO 燃燒器的組成，包括蓄熱體、燃燒室、迴轉閥、風機、控制系統等。蓄熱體 RTO 系統之核心，具有儲存及釋放熱量之作用(Gao et al., 2022)。球形與蜂窩形是工業上常用之主要類型(Wang et al., 2017)。陶瓷蜂窩蓄熱體其具導熱係數高、耐高溫、耐腐蝕等優點，被廣泛應用於 RTO 系統中。燃燒室是有機廢氣中可燃成分燃燒淨化之主要場所，經蓄熱體預熱的廢氣進入燃燒室後燃燒分解，生成二氧化碳及水。當有機氣體被燃燒後產生之熱量即可導入另一座蓄熱體儲存熱量，作為預熱後續將處理之廢氣，即可實現熱能回收及連續處理有機廢氣之功能。

近年已有多篇實廠研究探討 RTO 之相關運作參數及優化實驗，且 RTO 系統已廣泛使用於低 VOCs 濃度與高風量之廢氣處理。相關研究以 RTO 進行試驗，其進入 RTO 之 VOCs 濃度為 655 ppm，經處理後為降為 42 ppm，去除率為 93.6%，且該設備若含濃縮系統之蓄熱式焚燒爐可將去除效率提高到 95%，故沸石轉動系統可提高對相關 VOCs 排放之環境法規之合規程度 (Lee et al., 2014)。相關研究亦指出，旋轉式 RTO 之熱效率回收可達 97%，除使熱能二次回收，同時減少運作中的熱損失 (Gao et al., 2019)。

RTO 系統中 VOCs 的去除率受燃燒器溫度與進風中的 VOCs 濃度等因素影響。相關研究指出，在設備溫度為 760 °C 時，VOCs 去除率最高為 96%，而此時之燃料/氣體比也是最高的，顯示若要維持 RTO 之高去除率及溫度，必須要需要更多之天然氣挹注。當調整溫度降至 730 °C 時，該實驗之去除率仍可保持在約為 95%，但此時之天然氣量則較少。因此，為取得去除率與燃料使用之平衡，該研究選擇 730 °C 作為系統之最佳運行溫度 (Yang et al., 2012)。Sang 等人利用旋轉蓄熱式催化燃燒反應器 (Rotary Regenerator-type Catalytic Combustion Reactor, RRCCR)，結果指出入口速度及濃度都對該反應器的性能有很大影響，且反應器性能對速度之增加與甲烷濃度的降低更敏感 (Sang et al., 2018)。

另外，影響 RTO 系統運行的另一個重要因素是流入空氣中的 VOCs 濃度，當流入較高的 VOCs 濃度可降低燃料添加量，因 VOCs 具輔助燃燒之特性，亦可提高反應器之溫度。另一個值得注意，雖然 RTO 系統中使用兩個熱交換器以避免能源浪費，但處理後排放到大氣中之廢氣溫度仍約在 250 °C。因此，若可在排氣煙囪前裝設一套熱交換器，即可回收廢氣之熱能，並以熱水形式收集熱量，可應用於工廠的其他部門，而該熱交換器將氧化器的最終排氣溫度降低至約 100 °C，回收的熱量為 619709 KJ/h，相當於 241 kg/h 熱蒸汽 (Yang et al., 2012)。

國內相關研究以蜂窩沸石轉動濃縮器 (Honeycomb Zeolite Rotor Concentrator, HZRC) 進行提高去除 TFT-LCD 揮發性有機化合物 (VOC) 效率之優化參數評估。當 HZRC 處理混合化合物之 VOCs 氣流時，具有高沸點之化合物在吸附過程中優先被吸附，而原先吸附在 HZRC 上之低沸點化合物也被高沸點化合物取代。為達到高 VOCs 去除效率的最佳操作參數，結果建議控制污染物氣體入口速度 $<1.5\text{ m/s}$ ，且將濃縮比降低至 8 倍，並將脫附溫度提高至 $200\text{-}225^{\circ}\text{C}$ ，並設定轉速至 6.5 轉/分(Lin & Chang, 2009)。

七、數值模擬分析與應用

實驗之準備及執行，需要大量的時間與人力，為縮短研究時間，提升效率，本計畫擬引用電腦數值模擬技術，先行探討吸附濃縮處理系統氣流、熱流、入口及出口壓力溫度等各項參數對系統效率的影響，再進行實驗二相對照，期望能加速本研究之成果。計算流體動力學(Computational Fluid Dynamics, CFD)模型能夠預測非常複雜的流場，甚至與催化燃燒相結合，用於催化反應器的管理、設計和運行 (Di Benedetto et al., 2010; 2012)。本計畫將引用以偏微分方程為架構的數值模擬軟體 ANSYS FLUENT，其利用有限元素法(Finite Element Method)進行「節能蓄熱式吸附濃縮系統」之流場(流速、壓力與溫度梯度分佈)分析與吸附濃縮效能模擬。流體力學中，在穩態或暫態分析條件下，有限元素法分別是利用一個代數方程式與常微分方程式取代原本的 Navier-Stokes 偏微分方程式，有限元素法的計算方式是利用矩陣的形式來求得這些近似方程式的解(蔡禹昇, 2015)。

ANSYS FLUENT 是以數值方法為基礎的計算流體力學軟體(CFD)，ANSYS FLUENT 軟體在環工領域多數應用於熱流場或焚化爐燃燒效率之設計與模擬分析(李志萍, 2004; 施孟豪, 2015; 賴嘉祥, 1999)。近期已有應用於不同領域，利用水力漩流分離器來降低水中濁度，讓淨水廠降低濁度避免淨水廠設備負擔過高，亦可用於對於淨化設備對細菌淨化效果之差異性探討

(陳家福, 2016; 林佳靜, 2022)。此外，用於污染物之吸脫附模擬亦有相關研究，例如：對於二氧化碳捕捉及脫附裝置之數值模擬應用(林宇騰, 2018; 賴宏昇, 2019)及脫硫設備之氣體流動特性(王旻位, 2016; 柯明宏, 2019)，顯示計算流體力學軟體於環境工程應用已相當廣泛，且可避免及降低在開發設備或規劃相關控制策略前之錯誤設計或開銷，後續只要再加以修正及應證，即可得到很好之預測成果。

此外，用於污染物之吸脫附模擬亦有相關研究，例如：對於二氧化碳捕捉及脫附裝置之數值模擬應用(林宇騰, 2018; 賴宏昇, 2019)及脫硫設備之氣體流動特性(王旻位, 2016; 柯明宏, 2019)，顯示計算流體力學軟體於環境工程應用已相當廣泛，且可避免及降低在開發設備或規劃相關控制策略前之錯誤設計或開銷，後續只要再加以修正及應證，即可得到很好之預測成果。國外學者利用 ANSYS FLUENT 軟體模擬正丁烷於多孔介質區之活性炭之最大吸附容量與貫穿時間分別為 0.2674 g/g 和 924 min，並利用 ANSYS FLUENT 預測與現場實驗數據進行對比，6 個監測點的貫穿時間與貫穿溫度偏差率均小於 5%，結果驗證其計算流體動力學(CFD)的準確性與可行性(Zhao et al., 2021)。應用計算流體動力學(CFD)與多孔介質模型的組合來模擬苯在活性炭上之吸附及多孔介質中的流場，結果顯示當氣體流速與入口苯濃度降低時，總吸附時間增加，且增加氣體流速或床層孔隙率導致壓降降低(Mirzaie et al., 2020)，而研究進而在等溫固定床反應器中，在不同的氣體流速、溫度和苯濃度下進行研究活性炭藉由惰性氣體(N₂)中吸附苯蒸汽之實驗，結果指出隨著 VOCs 濃度從 700 ppm 增加至 1000 ppm，總吸附時間從 25 小時減少到 21 小時，而貫穿點出現得更早(Mirzaie et al., 2021)。亦有學者開發及驗證二維異構計算流體動力學模型，探討氣流中的揮發性有機化合物吸附到珠狀固定床上活性炭過程之質量、熱量與動量傳輸，模擬結果與驗證顯示，該模型預測 VOCs(丙酮、苯、甲苯和 1,2,4-三甲基苯)之貫穿曲線及苯吸附過程之壓

降與溫度，其平均相對絕對誤差為 2.6、11.8 和 0.8%，證實該模型能夠準確模擬吸附器中的傳輸過程，並可應用於未來調整增強吸收器之設計與操作 (Tefera et al., 2013)。Iloeje 等人 (2017) 提出一種精確之旋轉化學循環燃燒反應器簡化模型，其可大幅降低運算成本，並確定變量之間最佳組合及滿足反應器之設計需要，其模型預測的偏差範圍為 3%至 20%。Cheng 等人(2017) 利用 NO_x 還原之旋轉反應器，評估使用固定床反應器來模擬反應器之動態吸附還原過程，其與傳統之固定床反應器相比，在富氧環境下具有較高的 NO_x 去除效率。Sun 等模擬吸附區之氧濃度、吸附與還原時間比等反應條件對旋轉反應器在 CO 還原 NO_x 過程中性能之影響，其結果顯示煙氣中的 SO_2 及 H_2O 對 NO 吸附還原動態過程有嚴重影響(Sun et al., 2019)。國外學者利用 ANSYS FLUENT 15.0 軟體模擬旋轉再生催化燃燒反應器 (Rotary Regenerator-type Catalytic Combustion Reactor, RRCCR)，其評估甲烷氣之入口速度與濃度對反應器的影響，當隨著入口速度的增加，出口氣體溫度及甲烷轉化率降低，但 RRCCR 的性能對速度的增加更為敏感，在設計過程中需要多加注意(Sang et al., 2018)。

參、研究方法與過程

一、數值分析法

數值模擬用於研究之優勢是可進行設備設計與實場建立前之設計參數之調整使測試。其利用數值模擬之模型建構系統依研究設計與理論進行模場方程式之選用，其可減少時間、錯誤率及成本，並可依不同運作條件進行模擬，以探討其可行性，以評估精進之優化參數。實有鑒於此，本計畫使用商用數值模擬軟體 ANSYS FLUENT 建立模型，以模擬運作之吸附濃縮系統之流場及污染物吸附效能。

在模擬分析之初始期，本研究先蒐集模場資料，並建立吸附濃縮系統 3D 模型，並將模場使用之多孔性材料之相關物理特性建置於模型中，以設定模擬所需參數。進而開始進行數值分析程序，首先建立制御方程式，再依據模型的需求建立、選擇所需要之方程式，並帶入數值軟體中，依操作條件之要求設定邊界條件即可進行模擬分析。ANSYS FLUENT 求解統御方程式的數學方法名為 SIMPLE 演算法。

本計畫之吸附濃縮系統設備如圖 3-1 及圖 3-2，本計畫將其系統架構簡化為類似圖 3-3 (Hirose et al., 2007)，關係到系統效率之參數有轉輪吸附介質、孔隙率、入口速度、出口速度、操作溫度、轉輪速度等，但要了解參數為何能影響效率，則需要進一步的針對流場、熱傳、吸附介質進行詳細的分析，比如利用實驗或是數值模擬的方式，深入了解在改變參數後，系統整體的變化，如圖 3-4 為溫度對吸附效率的影響分析圖，發現操作溫度對吸附效率的確有相當的影響(Ncube and Su, 2012)。

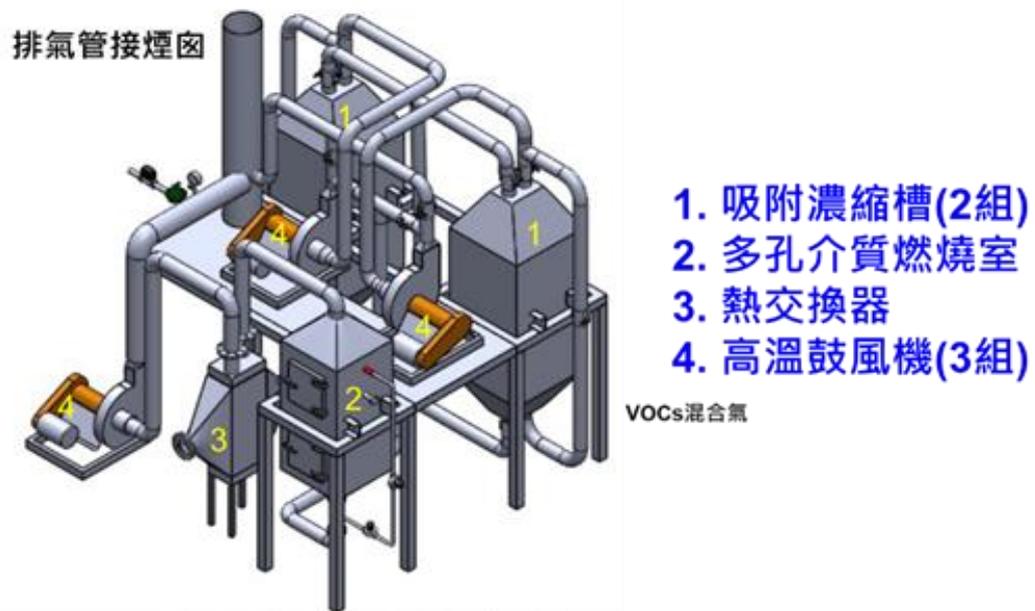


圖 3-1 節能蓄熱式吸附濃縮處理系統圖(資料來源:核能研究所)



圖 3-2 節能蓄熱式吸附濃縮處理系統實體圖(資料來源:核能研究所)

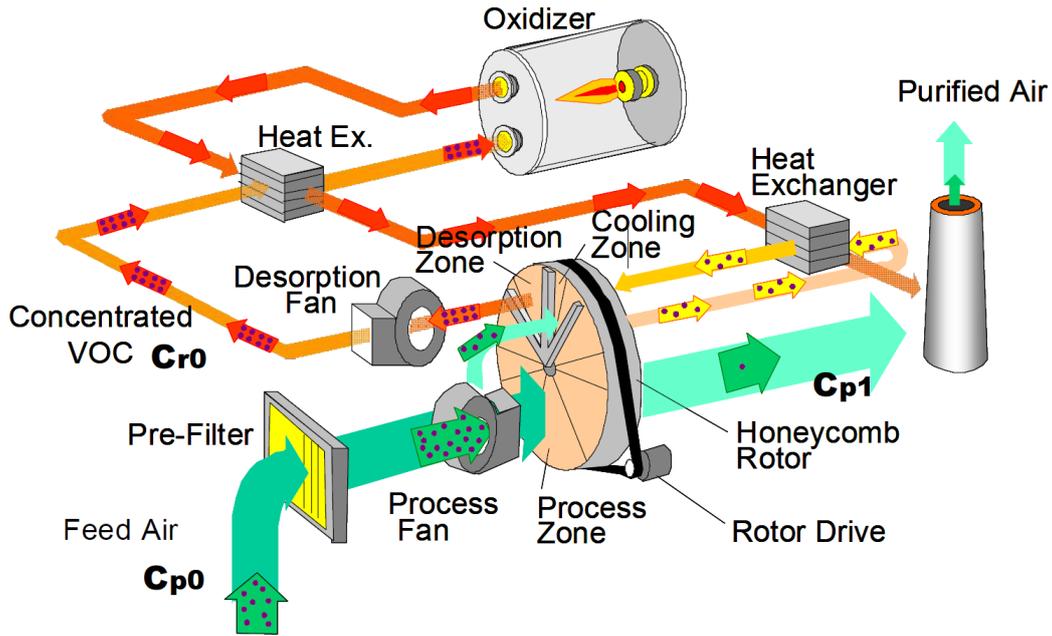


圖 3-3 吸附濃縮系統簡圖(資料來源:Hirose et al., 2007)

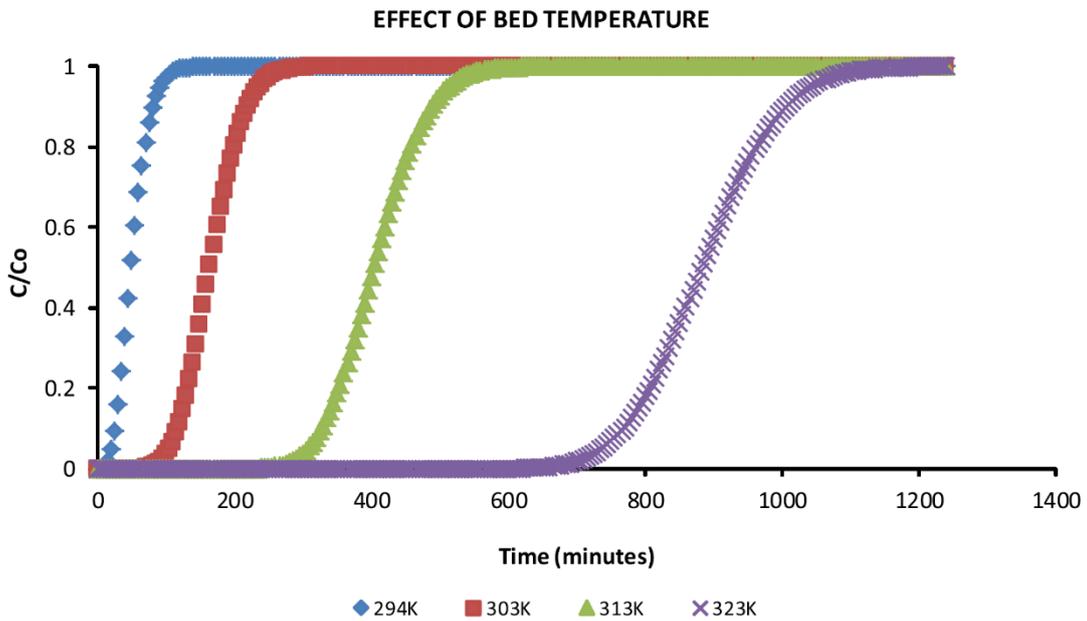


圖 3-4 操作溫度對吸附效率比較圖(資料來源:Ncube and Su, 2012)

(一) FLUENT 介紹

ANSYS FLUENT 是目前國際上較常用的計算流體力學 (Computational Fluid Dynamics, CFD) 模擬軟體，市場佔有率和使用數量始終處於同類軟體第一位，凡是與流體、熱傳遞、化學反應等有關的工

業均可使用。它具有豐富的物理模型、先進的數值計算方法和強大的前後處理功能，在航太、汽車設計、石油天然氣和渦輪機設計等方面都有廣泛的應用。該軟體提供了結構性網格與非結構性網格的設定，除了一般三維流體計算之外，此軟體尚還有自由液面、多相流場(如三相流計算)、MHD 的電漿模組、相變化(melt/solidation)等功能(吳光中等，2012)。

FLUENT 將不同領域的計算軟體組合起來，成為 CFD 計算軟體，軟體間可以方便的進行數值交換，並採用統一的前後處理工具，節省研究者在計算方法、編程、前後處理等方面投入的時間，而將主要精力和智慧用於物理問題本身的探索上。FLUENT 具備了多功能和易用性，可滿足廣泛的需求，其特性可整理如下：

1. 軟體介面

(1) 前處理器

FLUENT 現已結合至 ANSYS 前處理器(如圖 3-5) (吳光中等，2012)，可透過此前處理進行三維建模來建立幾何形狀及生成網格，前處理器，具有以下特色：

- A. 圖形界面人性化：利用滑鼠可在視窗上自由拖曳縮放比例、旋轉視角、點選物件。
- B. 檔案格式一般化：支援 ACIS、IGES、STL 等計算流體力學軟體檔案格式之輸入。
- C. 模型建立簡單化：利用物件自由組合、分離功能，可迅速完成三維複雜幾何模型，並自動建立網格分佈及變形網格之檢驗及調適。
- D. 採用最新技術的體網格生成工具，具有自動劃分網格及網格通過邊界層技術，非均勻的網格尺寸函數，快速生成混合網格的功能。

(2) 運算核心及後處理器

採用多種求解方法和多重網格加速收斂技術，因而 FLUENT 軟體

能達到最佳的收斂速度和求解精度，大大減少求解暫態問題的所需時間。

FLUENT 的後處理可以立即繪製三維圖片、動畫並產生相關報告，具有表面渲染、跡線追蹤等後處理功能。

2.物理模型

- (1) 穩態與暫態流分析
- (2) 可分析所有速度場(次音速、穿音速、超音速與高超音速)
- (3) 非黏滯流、層流與紊流分析
- (4) 牛頓與非牛頓流分析全領域的紊流模型：從簡單的 k- ϵ 模型到漩渦模擬(LES)。
- (5) 熱傳分析：包括強制、自然與混合對流、共軛熱傳，以及輻射。
- (6) 化學移動與反應：包含相同成分與不同成分的燃燒模型與表面反應、渦耗散模型、均衡混合顆粒模型，小火焰模型以及模擬大量氣體燃燒、煤燃燒、液體燃料燃燒的預混合模型，預測 NO_x 生成的模型。
- (7) 自由表面：VOF 模型(Volume of Fluid)，可用於界面的預測、自由表面流動，如海浪。
- (8) 相變模型：分析流體的融化和凝固。
- (9) 分散相模型：如質點、水滴與氣泡的 Lagrangian 軌跡計算，如液滴和濕粒子的蒸發。
- (10) 渦流模型分析。
- (11) 多孔介質模型分析。
- (12) 多種參考座標與移動式網格：例如動態網格能力，處理移動中物體的流場分析。
- (13) 轉子與靜子交換作用的混合平面模型分析。
- (14) 噪音類比分析：預測流動產生的噪音。

3.特殊功能

- (1) 各種參數建模工具，包括風扇、散熱器與熱交換器。
- (2) 多種材料資料庫。
- (3) 可根據使用者的習慣，自行定義函數。

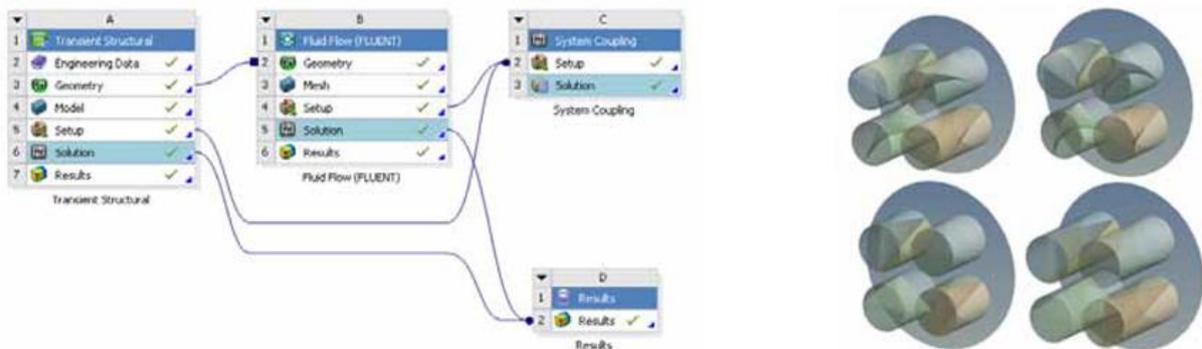


圖 3-5 FLUENT 結合至 ANSYS 前處理器建構三維模型(資料來源:虎門科技，2023，<https://www.cadmen.com/product/13>]

(二) SIMPLE 演算法

本計畫使用之 Fluent 軟體之演算法為求解壓力耦合方程組的半隱式方法(Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations, SIMPLE)，於 1972 年 Patankar 與 Spalding 提出，可求解不可壓縮流與可壓縮流場的數值方法，其主要核心架構為“先猜測數值再修正”直到數值收斂為止。

基礎概念是先猜測一個壓力值以求解離散形式後的動量方程求得速度場，但初始壓力場是一個猜測值，先由此壓力場推出一組速度場，此速度場假若未能滿足連續方程式，則此時需對猜測的壓力場加以修正得到一組新的壓力場，再以此推出一組新的速度場，最後再帶回連續方程式裡判斷是否滿足，倘若依然未滿足，則繼續修正直到滿足為止，SIMPLE 法計算流程可表示為圖 3-6(蔡禹昇，2005)。

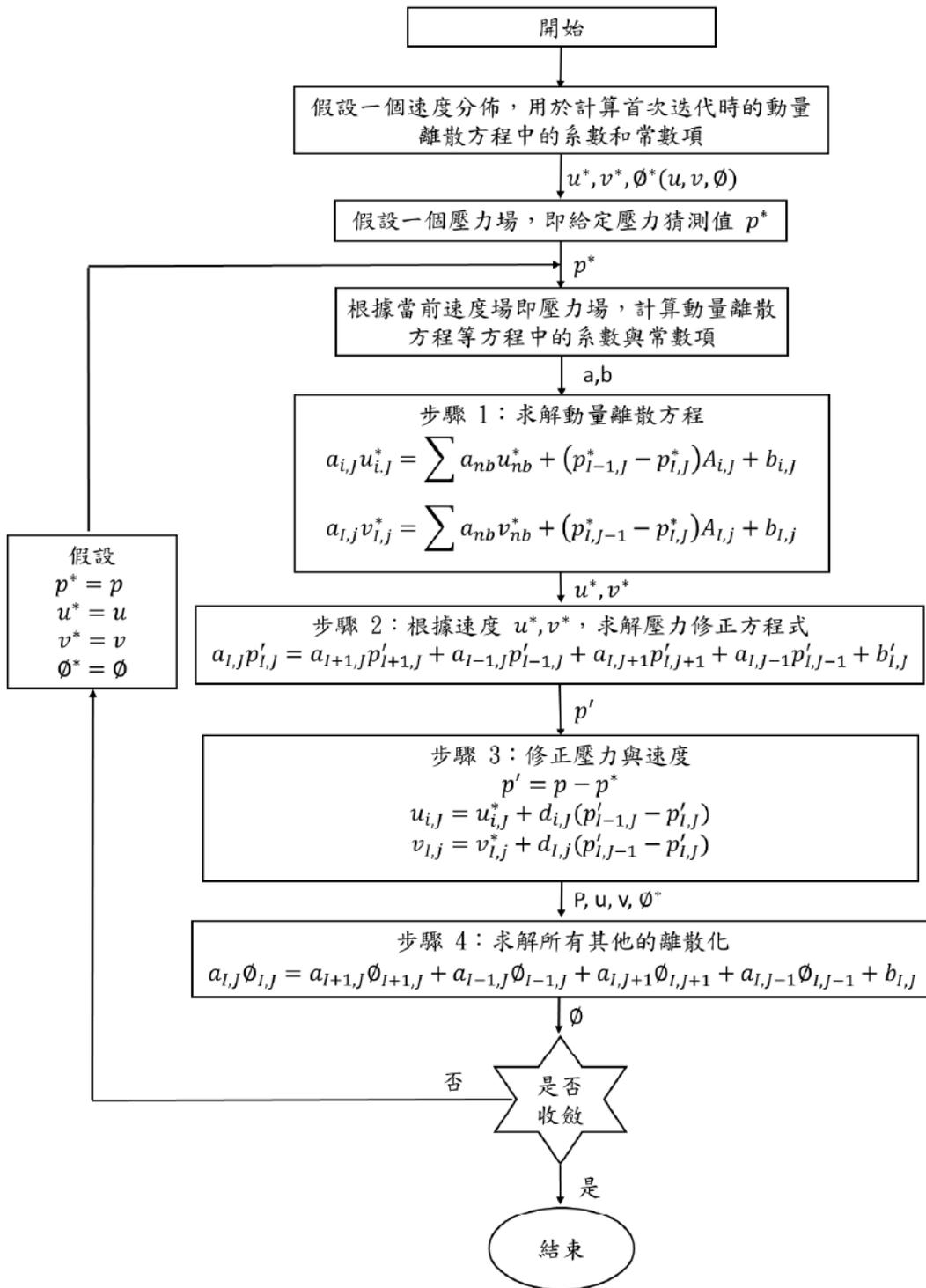


圖 3-6 SIMPLE 法運算流程圖(資料來源：蔡禹昇，2005)

(三) 統御方程式

本計畫利用 FLUENT 數值來求解相關參數對吸附濃縮系統內部熱流場情形，模擬模型為三維暫態下進行，所採用的統御方程式包括連續方

程式、動量方程式、能量方程式，各方程式如下：

1. 達西定律(Darcy law)

描述由於壓力梯度使流體通過空隙流動，在多孔介質中，孔壁會阻礙動量傳遞到孔外部的流體，因此可忽略流體中剪應力造成的動量傳遞。

$$\nabla p = -\frac{\mu}{k} \mathbf{v} \quad (1)$$

其中， p 為壓力(Pa)， \mathbf{v} 為速度(m/s)， μ 為黏度(Pa·s)， k 為滲透率(m²)。

2. 納維爾-斯托克斯方程式 (Navier-Stokes equations)

納維爾-斯托克斯方程式是描述流體運動的統御方程式，此偏微分可以描述質量守恆、流體動量變化、壓力變化、黏滯耗散、重力與溫度之間的關係。在納維爾-斯托克斯方程式中，須假設流體是連續的，另一個假設是所有涉及到的場(例如：壓力，速度，密度，溫度等)全部是可微的。

3. 質量守恆方程式

質量守恆方程式也稱為連續方程式(continuity equation)，從流體中取一邊長分別為 dx, dy, dz 的微小單元體，並設定一控制體積(control volume)，假設 x, y, z 方向的速度(m/s)分別為 $\mathbf{v}_x, \mathbf{v}_y, \mathbf{v}_z$ ，並以 ρ 表示流體密度(kg/m³)。當流體遵守質量守恆定律時，流進單元體的質量減去流出的質量即為質量變化量，對時間微分後，可用來表示單元體的質量時變率。

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}_x}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{v}_y}{\partial y} + \frac{\partial \mathbf{v}_z}{\partial z} \right) = 0 \quad (2)$$

本研究模擬區域為流體及多孔介質內之流體，控制體積包含流體及固體，因此在質量守恆方程式中需要乘上孔隙率(ϵ_p)，多孔材料內流體之連續方程式為

$$\frac{\partial (\epsilon_p \rho)}{\partial t} + \rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}_x}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{v}_y}{\partial y} + \frac{\partial \mathbf{v}_z}{\partial z} \right) = 0 \quad (3)$$

4. 動量守恆方程式

流體中使用的動量守恆方程式

$$\rho \frac{D\mathbf{v}}{Dt} = -\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{v} + \rho \mathbf{g} \quad (4)$$

其中， ρ 為流體密度(kg/m^3)， t 為時間(s)。

若要將此方程式應用在多孔材料，除了原本的流體性質外，需另外考慮多孔固體造成的影響，因此將達西定律加入納維爾-史托克方程式，最終得到本研究使用之方程式。

$$\frac{\rho}{\epsilon_p} \frac{D\mathbf{v}}{Dt} = -\nabla p - \frac{\mu}{k} \mathbf{v} + \mu \nabla^2 \mathbf{v} + \rho \mathbf{g} \quad (5)$$

其中， ρ 為流體密度(kg/m^3)， ϵ_p 為孔隙度， \mathbf{v} 為速度(m/s)， t 為時間(s)， p 為壓力(Pa)， μ 為黏度($\text{Pa} \cdot \text{s}$)， k 為滲透率(m^2)， \mathbf{g} 為重力(m/s^2)。

5. 能量守恆方程式

流體在多孔介質中流動時，熱能藉由熱傳導與熱對流擴散至整個吸附系統。該過程由以下的能量守恆方程式來描述，左側第一項為與時間變化有關的熱源，左側第二項與移動熱源有關，左側第三項為熱傳導所產生的熱源。式(7)為傅立葉熱傳導定律(Fourier's law of heat conduction)。

$$(\rho C_p)_{eff} \frac{\partial T}{\partial t} + \rho C_p \mathbf{v} \cdot \nabla T + \nabla \cdot \mathbf{q} = Q + Q_p + Q_{vd} \quad (6)$$

$$\mathbf{q} = -k_{eff} \nabla T \quad (7)$$

$(\rho C_p)_{eff}$ 為依照流體及固體之體積比例分配後的有效體積熱容量(J/K)， ρ 為流體密度(kg/m^3)， C_p 為流體常壓熱容($\text{J}/(\text{kg} \cdot \text{K})$)， T 為溫度(K)， t 為時間(s)， \mathbf{v} 為速度(m/s)， \mathbf{q} 為熱傳導所產生的熱源(W/m^2)， Q 為熱源(W/m^3)， Q_p 為壓力功(W/m^3)， Q_{vd} 為黏性耗散項(W/m^3)， k_{eff} 為等效熱傳導係數($\text{W}/(\text{m} \cdot \text{K})$)。

6. 吸附動力方程式

Yoon-Nelson Model (Yoon and Nelson, 1984)是廣泛使用的吸附動力模式，從防毒面具的活性碳填充濾毒罐設計與測試，到工業廢氣的吸附床設計 (Kim and Kang, 2004)，在實場操作都有實際應用。Yoon-Nelson Model 為假定氣流通過吸附床中的吸附劑時，部分氣體分子被吸附而部分氣體分子通過，吸附分率的衰減率正比於貫穿分率(P)與吸附分率(Q)的相乘。

$$-\frac{dQ}{dt} \propto QP$$

上式可再一步積分後，可得

$$t = \tau + \frac{1}{k} \ln \frac{c_i}{c_i - c}$$

Q：貫穿分率

P：吸附分率

t：時間(min)

τ ：貫穿濃度發生時間(min)

k：反應速率常數(1/min)

c_i ：VOCs 進流濃度(ppmv)

c：VOCs 經吸附床吸附後之出流濃度(ppmv)

此外，針對不同有機氣體分別通過吸附模組，由下式計算，由已知之氣體濃度 C_0 ，在固定流量 Q_g 下，由貫穿濃度可推算吸附層之質量傳輸帶厚度 Z_a 以及吸附層所需填充厚度 Z ，並可獲得單位吸附材質之平衡吸附量 Y_0 。

$$Q_g \times C_0 \times t_b = [Y_0 \times S \times Z - Z_a \times \rho_b] + [Y_0 \times S \times Z_a \times \rho_b] \times \left(\int_0^{Z_a} C dZ \right) / (C_0 Z_a)$$

經由上述參數可帶入下式中求出吸附層最少材質總量 W ，以作為後續處理有機氣體之依據。

$$W = S \times Z \times \rho_b$$

W ：吸附層最少材質總量(kg)

Q_g ：進流有機氣體流量(m³/min)

S ：吸附層之截面積(m²)

C_0 ：進流有機氣體中溶劑濃度(kg/m³)

C ：有機氣體中溶劑濃度(kg/m³)

Y_0 ：吸附層在溶劑濃度為 C_0 時之平衡吸附量(kg solvent/kg solvent gas)

Z ：吸附層所需填充厚度(m)

Z_a ：吸附層之質量傳輸帶厚度(m)

ρ_b ：吸附輪體之填充密度(kg/m³)

7. UDF 程式撰寫

UDF 為 User Definition Function 的縮寫，顧名思義就是在 ANSYS FLUENT 裡面使用者可自由加入其他的邊界條件或是其他的收斂條件，使用者可自行撰寫程式後再匯入 FLUENT 裡，但需注意的是在此所匯入的程式都必須使用 C 語言的程式法進行編譯，由於本研究部分統御方程式並未內定在 FLUENT 中，必須自行建立 UDF 程式進行模擬。例如，吸附系統之吸附方程式，即可以使用 UDF 進行撰寫並匯入 FLUENT 進行模擬計算。

(四)模擬程序

透過 ANSYS FLUENT 進行熱流場分析之步驟如圖 3-7，在分析

前需先做以下的基本假設：

1. 依實體設備建立三維模型
2. 採用暫態方式模擬
3. 進氣口設定皆為均勻進氣
4. 流體與壁面為無滑移 (no slip)條件，即壁面與流體兩者間無相對運動
5. 不考慮化學反應
6. 假定加熱表面為均勻加熱且恆溫
7. 不考慮熱輻射效應

在執行模擬的步驟，步驟 3 將進行各項參數如轉輪吸附介質、孔隙率、入口速度、出口速度、操作溫度、轉輪速度對吸附濃縮系統效率之相互關係進行探討，期望能找出較佳的系統效率參數。

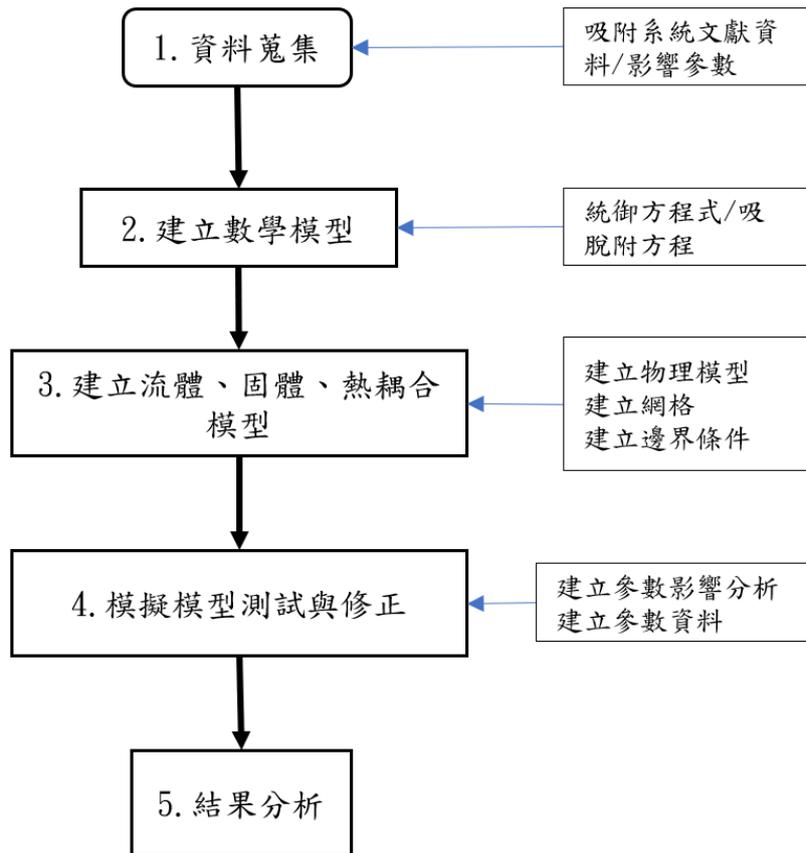


圖 3-7 數值模擬流程圖

二、循環再生活性氧化鋁材料吸脫附試驗分析

本研究配置已知三種濃度之單一揮發性有機化合物(甲苯)，利用反應槽填充適量之循環再生活性氧化鋁材料，進行甲苯吸附測試，並分析出口之甲苯濃度以評估該材料之吸附之穿透時間(圖 3-8)。脫附試驗則以氮氣作為淨化氣體，以相同反應器進行吸附後之循環再生活性氧化鋁材料之脫附測試，甲苯分析儀器為分析設備為 COSMOS XP-3360II-W。

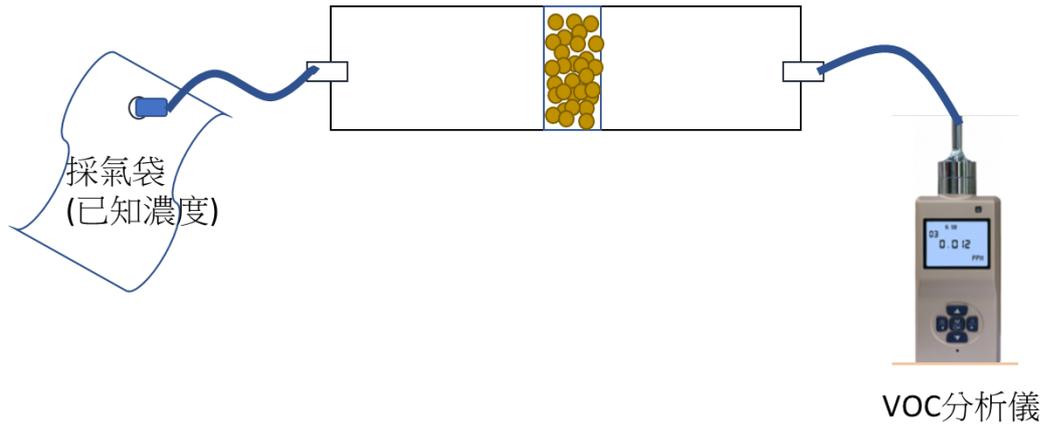


圖 3-8 循環再生活性氧化鋁材料吸附效率分析示意圖

圖 3-9 為甲苯配置在採氣袋經由吸附管之吸附，在分析其穿透濃度。而脫附試驗，是將已吸附飽和之吸附管置入烘箱中，並將烘箱溫度設定溫度 70~80°C，在以流率為 300ml/min 之氮氣吹拂入吸附管中進行脫附試驗(圖 3-10)。

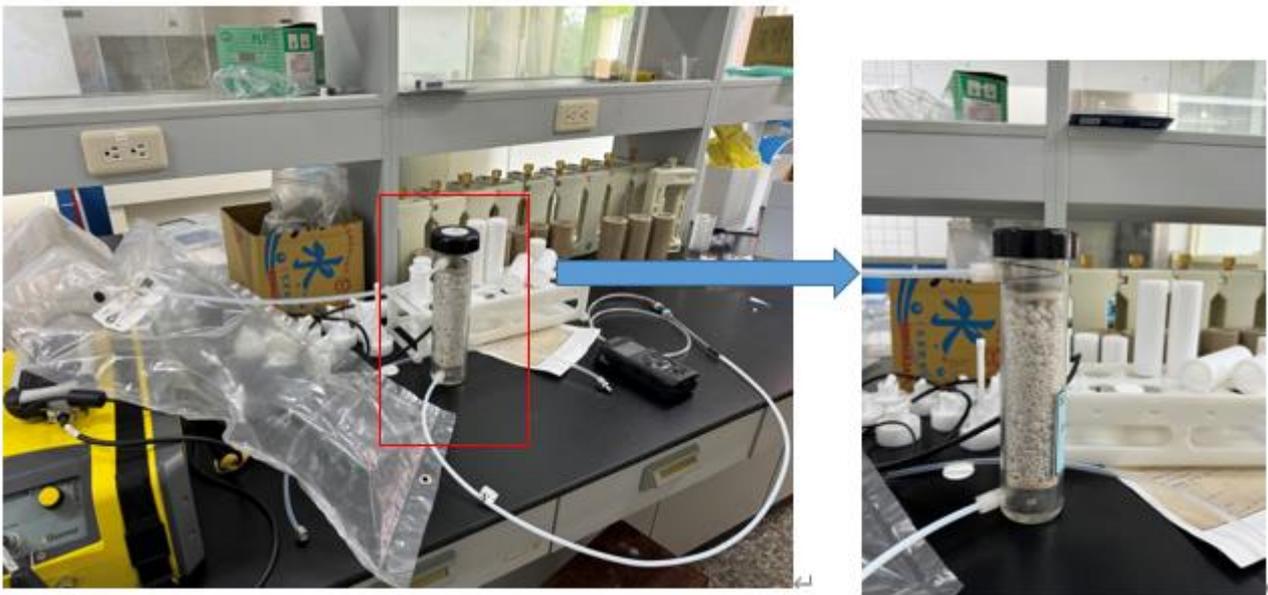


圖 3-9 吸附劑脫附試驗

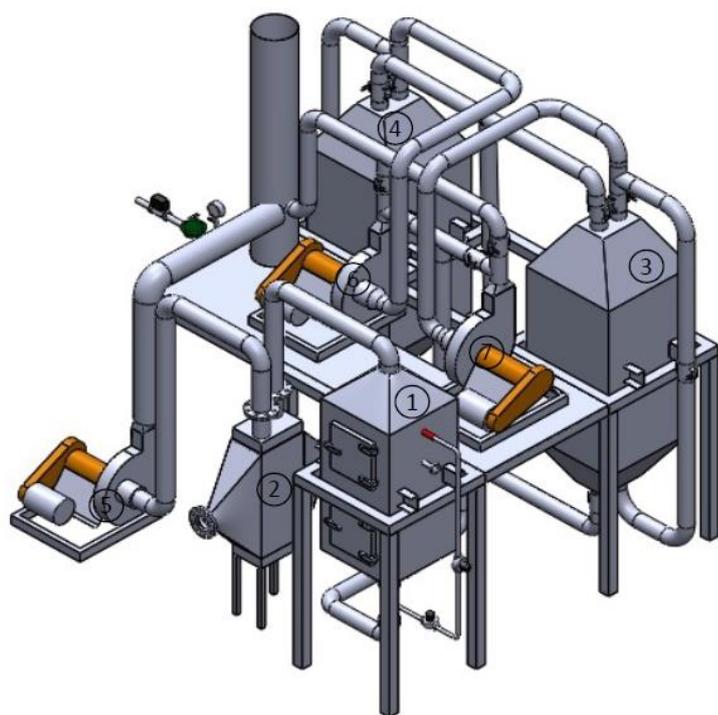


圖 3-10 吸附劑脫附試驗

肆、吸脫附濃縮槽流場模擬

一、吸脫附濃縮槽

本章流場模擬對象為吸脫附濃縮槽，如圖 4-1 標註之編號 3、4 位置，吸脫附濃縮槽之構造如圖 4-2，上下方各有二流道，吸附時 VOCs 廢氣於下方流入上方流出，脫附時熱氣於上方流入下方流出。



①	多孔介質燃燒室
②	熱交換器
③	吸附濃縮槽
④	吸附濃縮槽
⑤	高溫鼓風機
⑥	高溫鼓風機
⑦	高溫鼓風機

圖 4-1 節能蓄熱式吸附濃縮系統圖

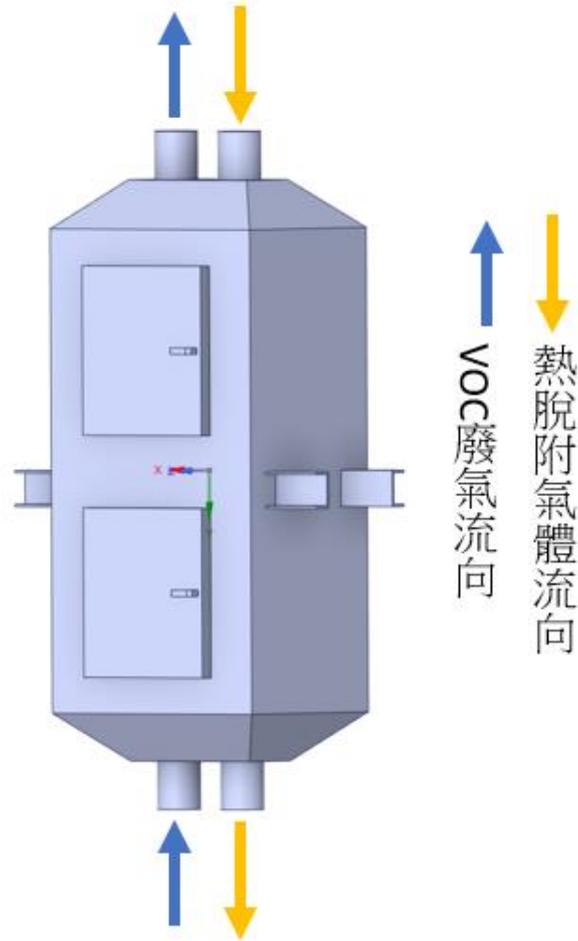


圖 4-2 吸脫附濃縮槽

二、流場模擬流程說明

本研究利用的數值模擬工具為 ANSYS FLUENT，欲進行本案吸脫附濃縮槽之流場模擬，須按模擬工具流程進行，其流程如下圖 4-3，其中包含前處理的模型處理、建模及網格建立，在進入數值分析，將數值分析結果以後處理進行繪圖與比較。

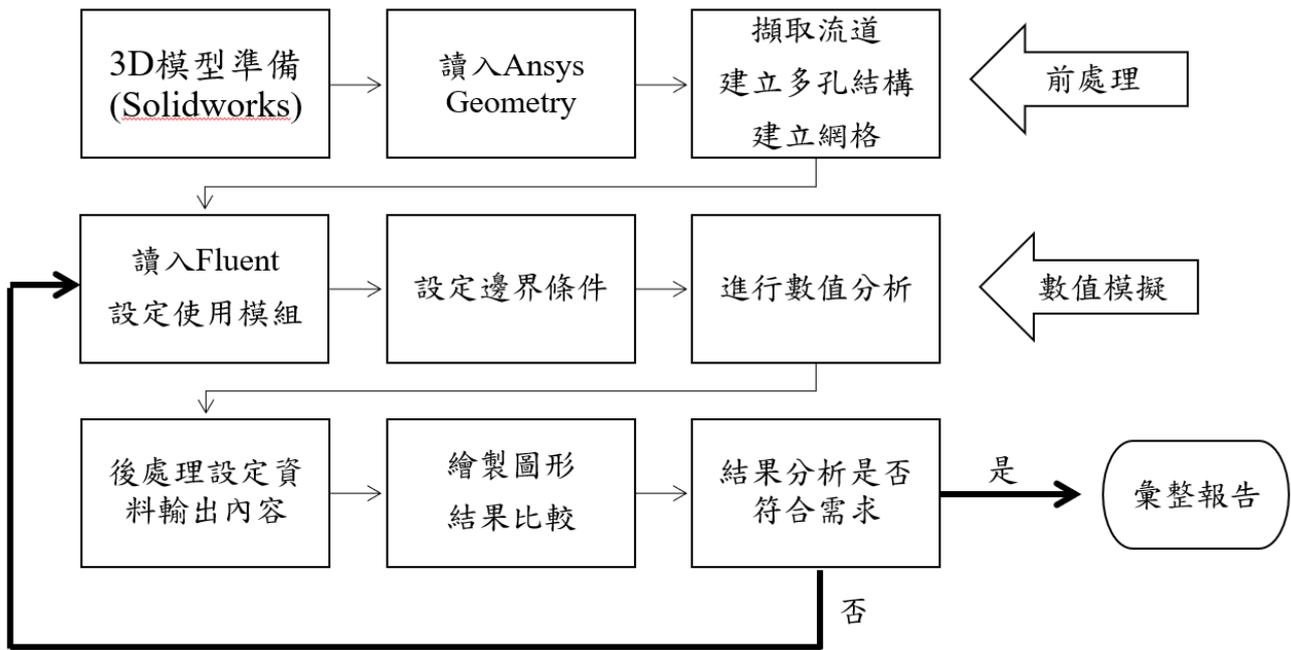
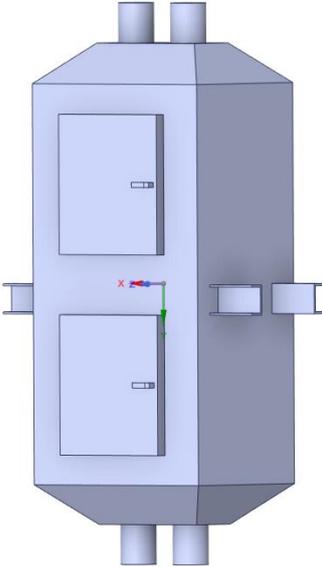
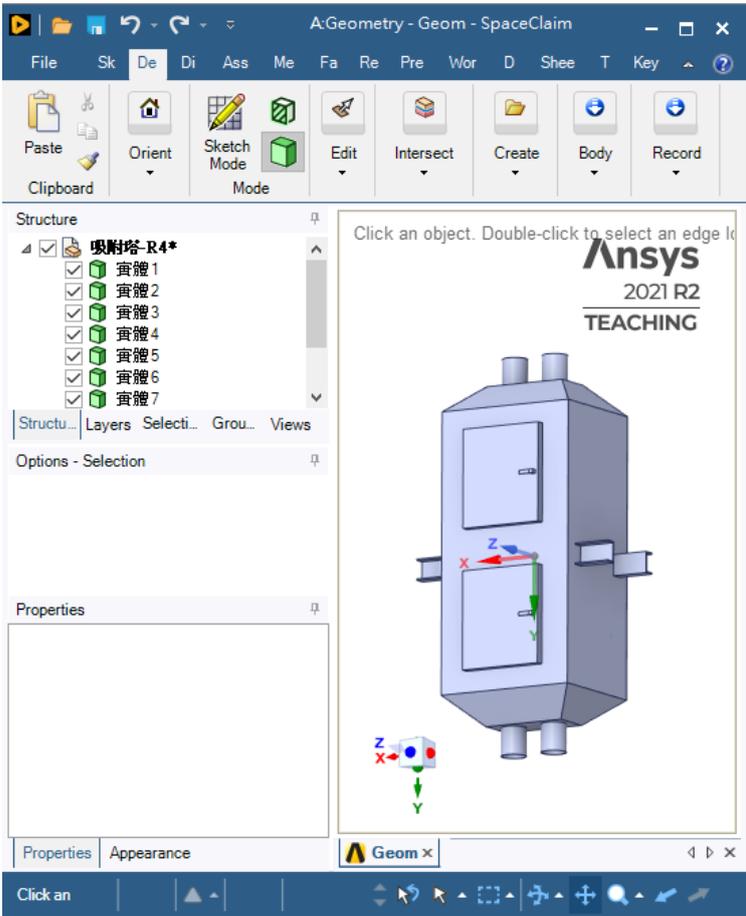


圖 4-3 流場模擬流程圖

三、吸脫附濃縮槽流場模擬前處理

本節說明前處理的各項流程，分別為讀入 3D 模型，轉換為 ANSYS FLUENT 可作業之流場，隨後畫出多孔介質區域，再與原流場進行刪除重疊區域，完成後即可進行網格建立，各階段如下表進行說明。

表 4-1 吸脫附濃縮槽模型建立程序表

說明	擷圖
Solidworks 3D 模型	
讀入 Ansys Geometry	

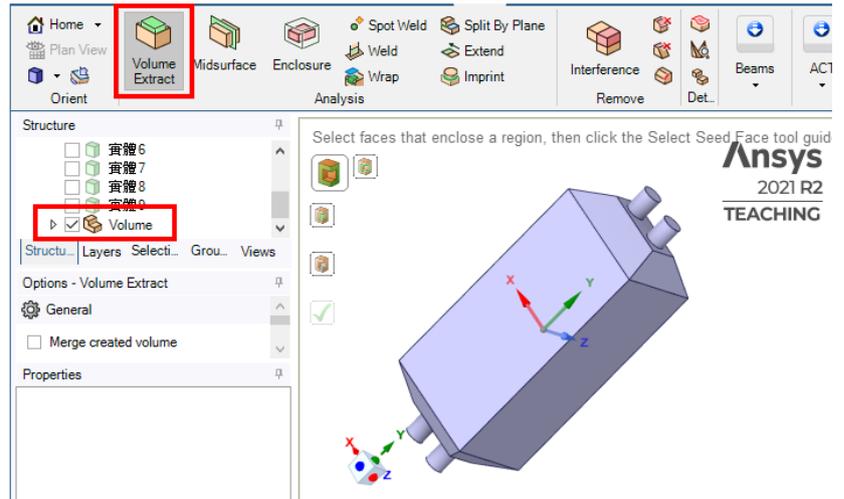
擷取流道，Solidwork 模型

為外殼，需擷取流體流道，

作為流體模擬區域

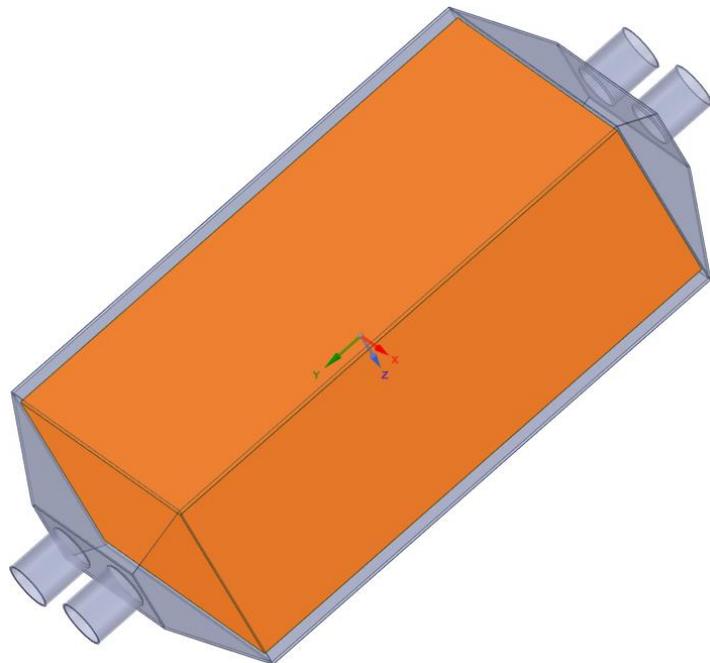
Prepare→Volume

Extract(紅框)

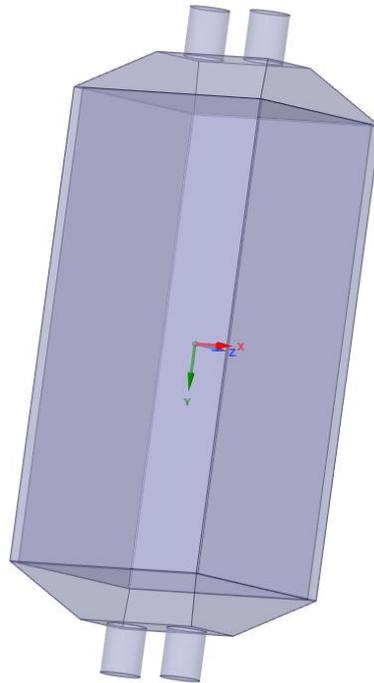


建立多孔結構區域

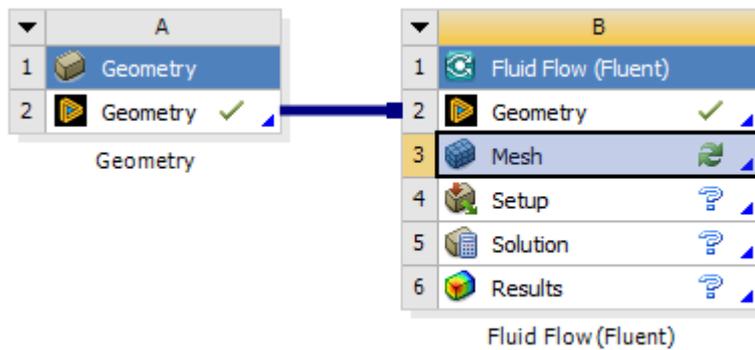
(Sketch→Pull) (橘色)



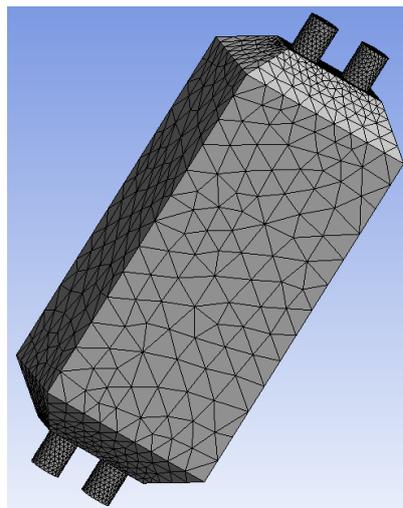
去除流道與多孔區域重疊
區域 Combine→ (No
Merge)

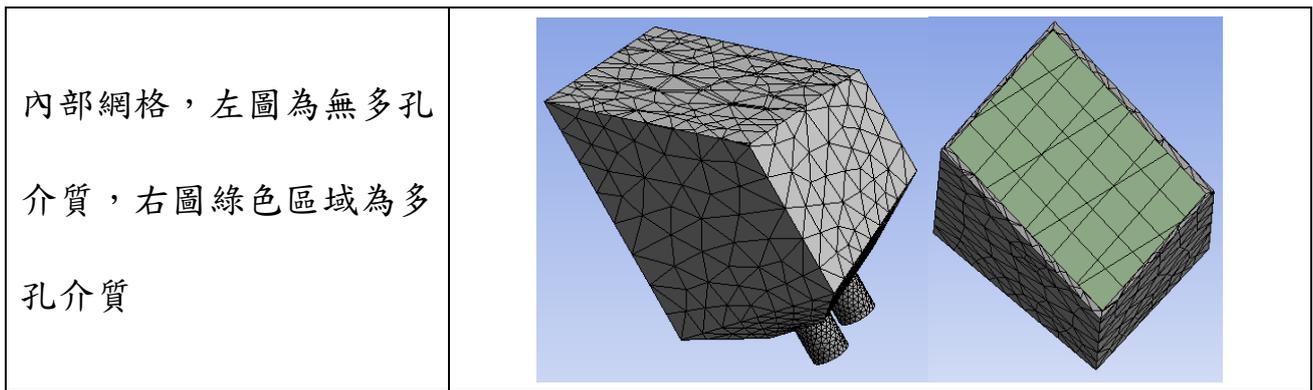


將擷取之流道及多孔結構
匯入 Ansys Mesh 進行網
格建立



表面網格





四、吸脫附濃縮槽流場模擬

(一) ANSYS FLUENT 多孔介質模擬說明

ANSYS FLUENT 多孔介質模型可用於各種單相和多相問題，包括流經填充床、濾紙、穿孔板，流量分配器和管束(packed beds, filter papers, perforated plates, flow distributors)。[66]

多孔介質模型在定義為“多孔”的模型區域中結合了憑經驗確定的流阻。本質上，多孔介質模型只不過是控制動量方程中的附加 momentum sink。因此，模擬時應注意以下的假設和限制：

1. 由於物理上存在的體積堵塞未在模型中表示，因此預設情況下 ANSYS FLUENT 根據體積流量使用並報告多孔介質內部的體積速度(volumetric flow rate)，以確保多孔介質界面上速度向量的連續性。作為更準確的替代方案，您可以指示 ANSYS FLUENT 使用多孔介質內的真實（物理）速度。在多相流系統中，所有相都具有相同的孔隙率。
2. 多孔介質對紊流流場的影響只是近似的。
3. 一般來說， ANSYS FLUENT 多孔介質模型（無論是單相還是多相）都假設孔隙率是各向同性的，並且會隨空間和時間而變化。
4. 表面速度公式和物理速度公式可用於多相多孔介質。
5. 多孔介質動量阻力和熱源項在每個相上分別計算。
6. 不考慮多孔介質和衝擊波之間的相互作用。

7. 預設情況下， ANSYS FLUENT 假定多孔介質固體和多相流體流之間的熱平衡。因此，固體溫度是通過相溫度來估計的。
8. 在移動參考系中應用多孔介質模型時， ANSYS FLUENT 將在啟用相對速度阻力公式時應用相對參考系或絕對參考系
9. 在穿過多孔介質的層流中，壓降通常與速度成正比，忽略對流加速和擴散，多孔介質模型可簡化為達西定律：

$$\nabla p = -\frac{\mu}{\alpha} \vec{v}$$

(二)多孔介質的輸入說明

當對多孔區域進行模擬時，有如下的特性可於程式介面中依序輸入。

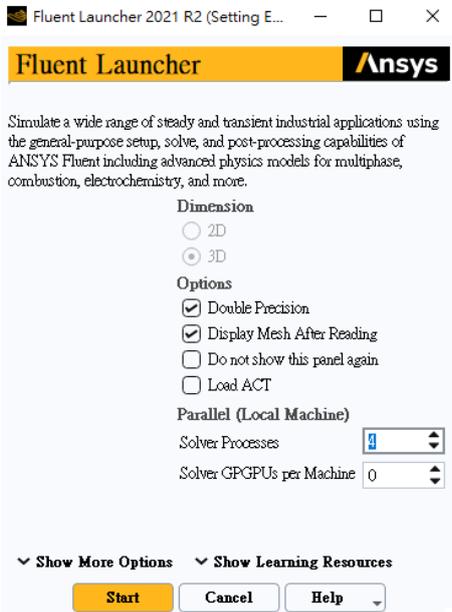
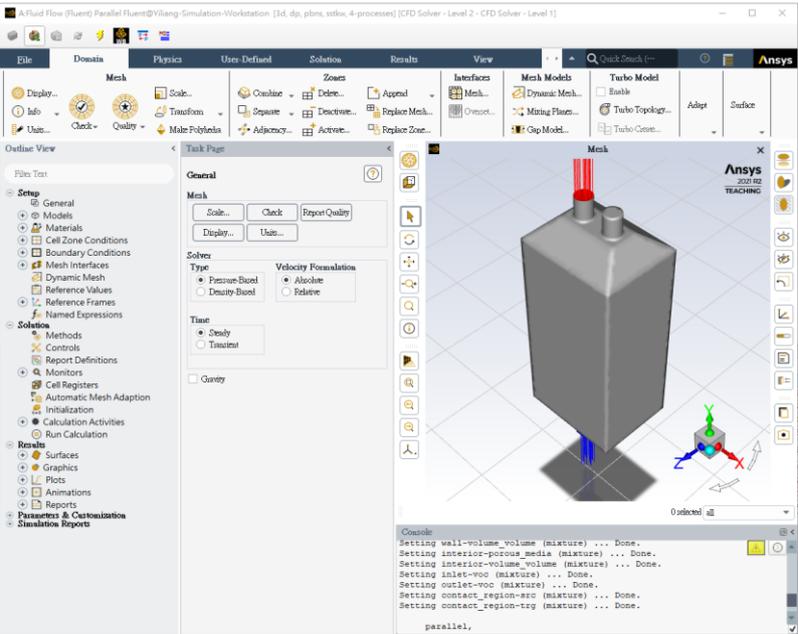
1. 定義多孔區域。
2. 在單元區域條件任務頁面中定義多孔速度公式。(選擇輸入)
3. 識別流經多孔介質的流體材料。
4. 如果合適的話，啟用多孔區域的反應，並選擇反應機制。
5. 啟用相對速度阻力公式。默認情況下，此選項已啟用，並考慮移動的多孔介質。
6. 設置黏性阻力係數和慣性阻力係數，並定義它們所應用的方向向量。或者，指定冪律模型的係數。
7. 指定多孔介質的孔隙率。孔隙率是多孔區域內流體的體積分數（即介質的開放體積分數）。孔隙率用於預測介質中的傳熱，如果要將介質表示為完全開放（沒有固體介質的影響），則應將孔隙率設置為 1.0（默認值）。當孔隙率等於 1.0 時，介質的固體部分不會對介質中的傳熱或熱/反應源項產生影響。
8. 選擇多孔介質中包含的材料（僅對於包含傳熱的模型需要）。請注意，多孔區域中所選材料的比熱容只能作為常數值輸入。

9. 設置多孔介質非固體部分（或任何其他來源，例如質量或動量）的體積熱生成率。（選擇輸入）
10. 為流體區域中的解變量(solution variables)設置任何固定值（選擇輸入）。
11. 如果合適的話，抑制多孔區域中的紊流黏度。
12. 指定旋轉軸和/或區域運動（如果相關）。

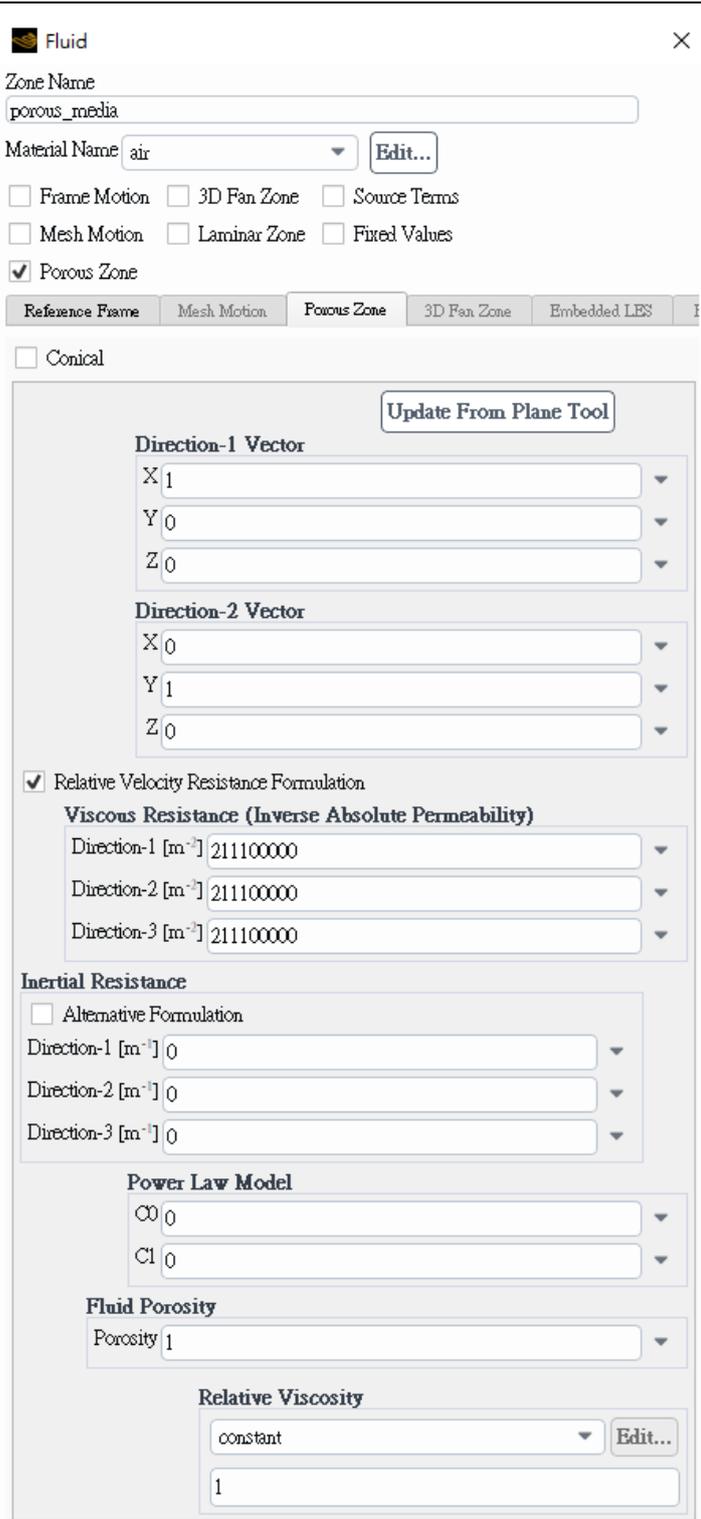
(三)吸脫附濃縮槽流場模擬

依循前二節 ANSYS FLUENT 對孔隙介質(Porous Media)模擬的說明、限制與輸入，本案依此依序透過前處理建立的模型與網格，進行參數輸入與模擬，FLUENT 參數輸入與模擬程序整理如下表。

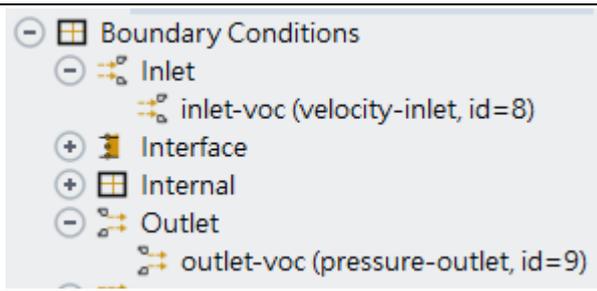
表 4-2 吸脫附濃縮槽流場模擬程序表

說明	擷圖
<p>FLUENT 啟動畫面，使用雙精度，4 個執行序</p>	
<p>FLUENT 主畫面，依序執行左側各項參數輸入，如紊流模式、單元特性、邊界條件及模擬參數</p>	

多孔介質參數參數輸入畫面，依序輸入多孔介質參數(本次未納入熱傳及化學反應)



邊界條件：速度進口、壓力出口



解析方法設定

Solution Methods ?

Pressure-Velocity Coupling

Scheme: Coupled

Flux Type: Rhie-Chow: distance based Auto Select

Spatial Discretization

Gradient: Least Squares Cell Based

Pressure: Second Order

Momentum: Second Order Upwind

Turbulent Kinetic Energy: First Order Upwind

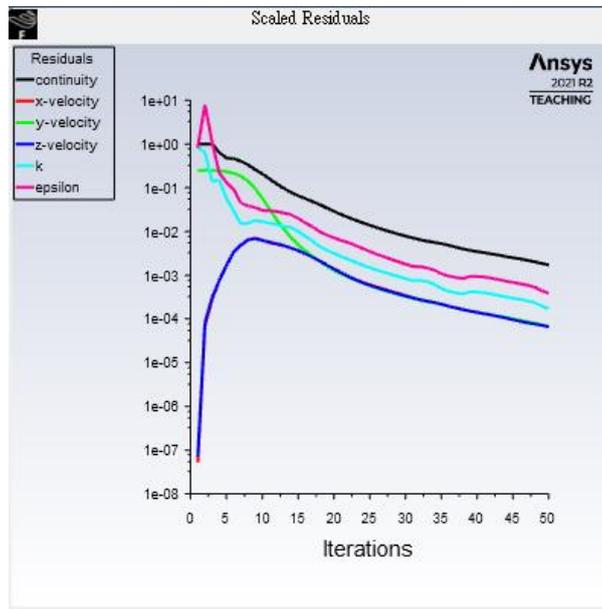
Turbulent Dissipation Rate: First Order Upwind

Transient Formulation: Non-Iterative Time Advancement
 Frozen Flux Formulation
 Pseudo Transient
 Warped-Face Gradient Correction
 High Order Term Relaxation

Structure Transient Formulation:

Default

疊代殘值圖



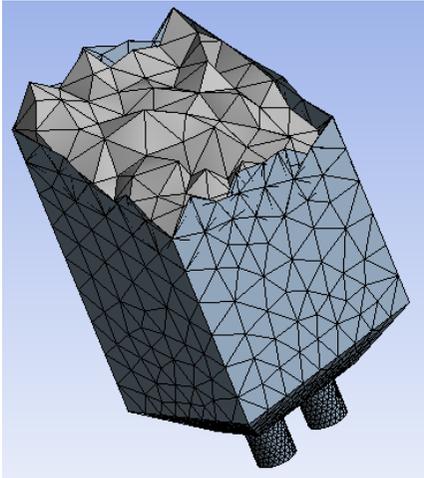
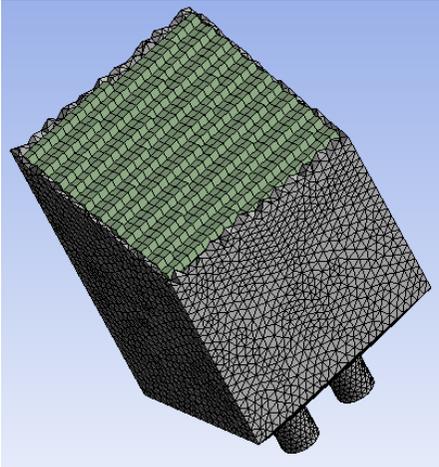
(四)吸脫附濃縮槽流場模擬結果比較

本計畫針對多孔介質模擬應用於節能蓄熱式吸附濃縮處理系統之吸脫附濃縮槽建立流場模型，結合多孔介質進行流場模擬，確認多孔介質模擬之程序。在建立多孔介質模擬之流場分析，為後續吸附反應模擬完成準備工作後。將各項運作參數建立於模擬流場中，如壓力、流量、濃度等，進行吸脫附效率的模擬評估。

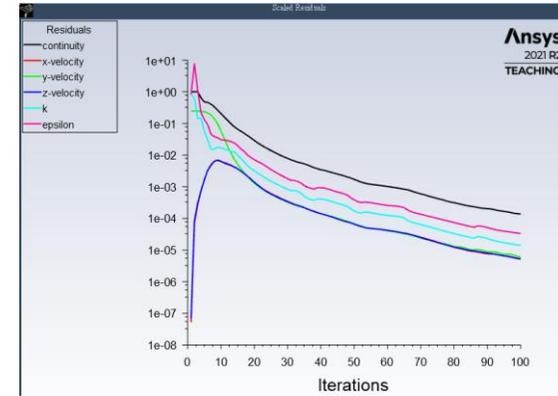
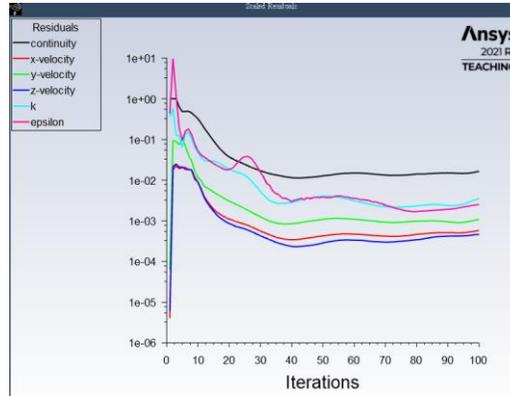
1. 吸附濃縮槽流場評估

本節針對吸脫附濃縮槽分別以無多孔介質與有多孔介質，流場的不同以下表進行比較，二者均以穩態疊代 100 次進行模擬比較。

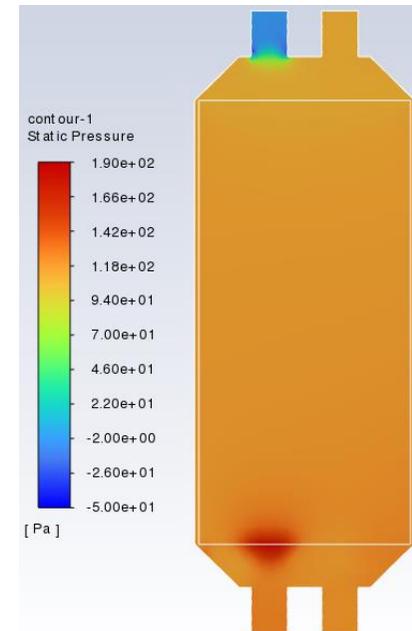
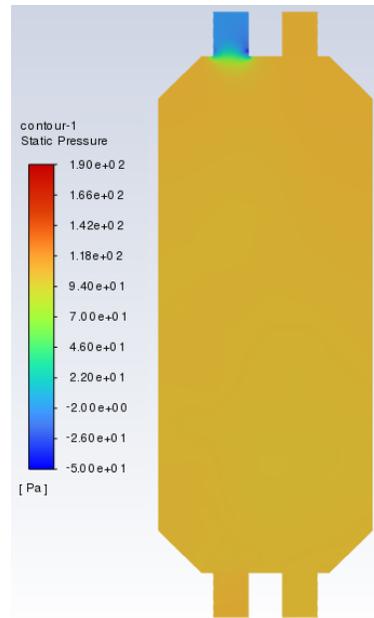
表 4-3 吸附濃縮槽流場評估比較表

比較項目	無多孔介質	具多孔介質
模型		
	因無多孔介質，內部為流道	綠色部分為多孔介質

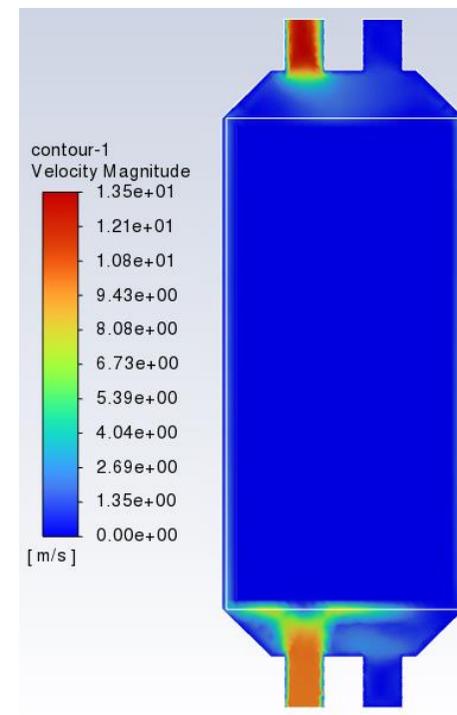
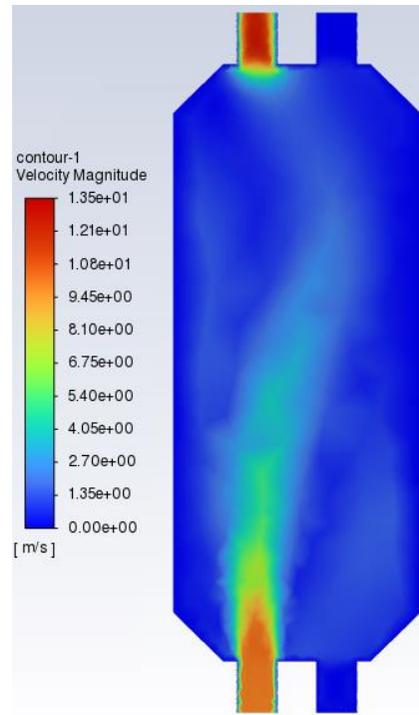
殘值收斂圖



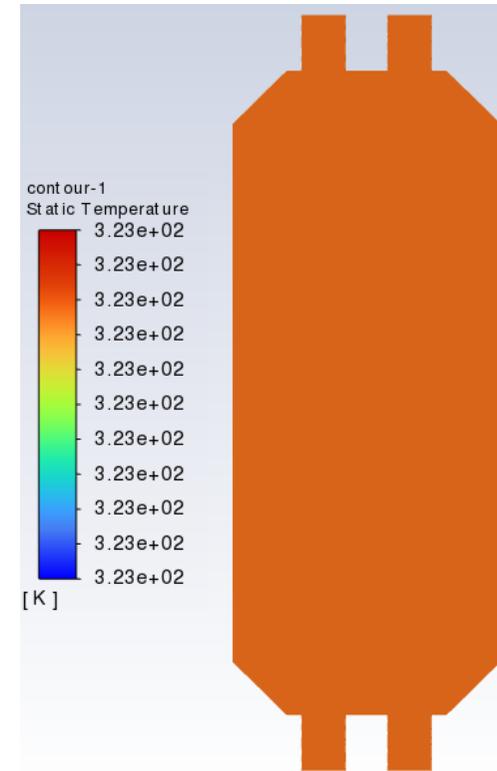
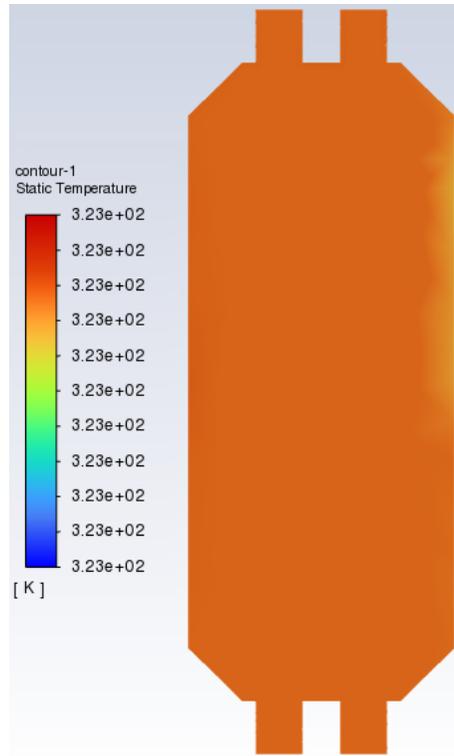
壓力場：內部有多孔介質，在流場進口處產生局部高壓，吸附槽內部壓力也因多孔介質的存在，產生流阻，使得內部壓力較高



速度場：內部在有多孔介質的情況下，流場一入進口即轉向，內部流速低，在內部無多孔介質的情況下，流體先擴張，再會即於出口。



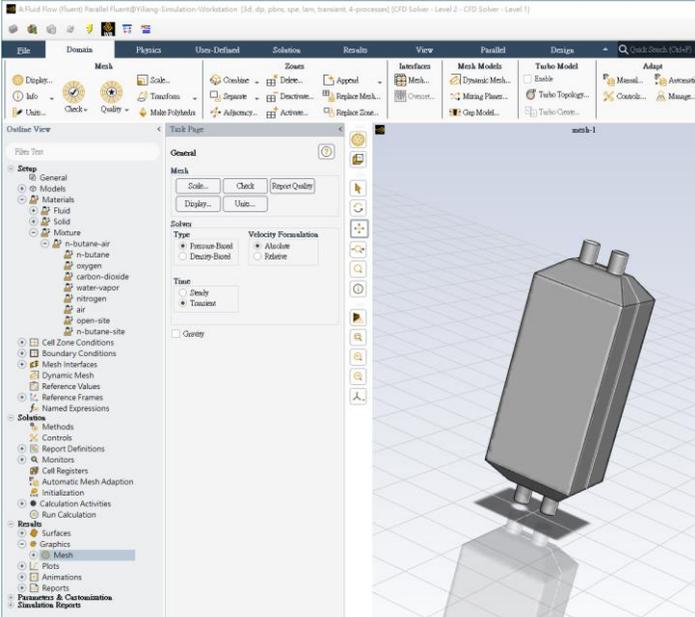
溫度場：內部在有多孔介質的情況下，流場一致性較高，故溫度分布也較一致，在內部無多孔介質的情況下，溫度場也幾近均勻，二者於溫度場差別不大。



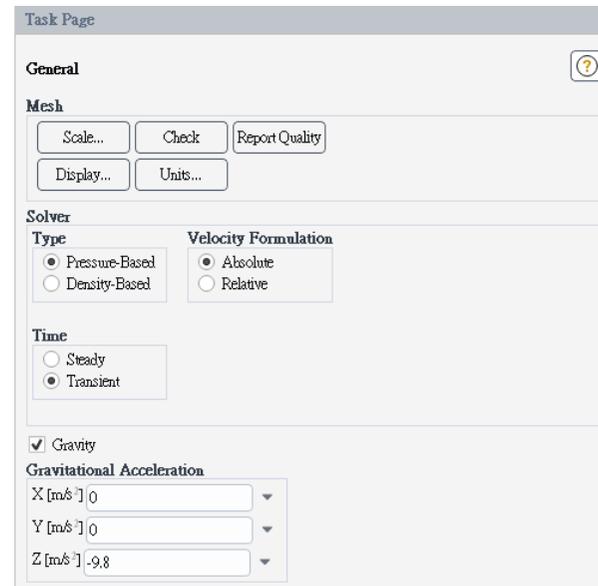
2. 吸脫附濃縮槽之吸脫附效率模擬

本節針對吸脫附濃縮槽之吸脫附模擬進行說明，為進行吸脫附模擬，除延續前節所建立之多孔介質模型建立外，必須在多孔介質區域建立吸脫附之化學反應，建立吸脫附化學反應模擬之流程如下表。

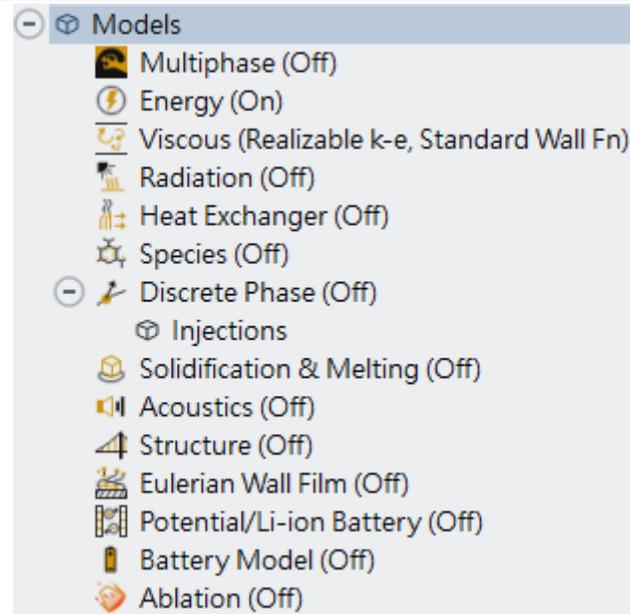
表 4-4 吸脫附濃縮槽之吸脫附模擬程序表

說明	擷圖
<p>延續前節建立之模型， 進入 CFD Solver</p>	

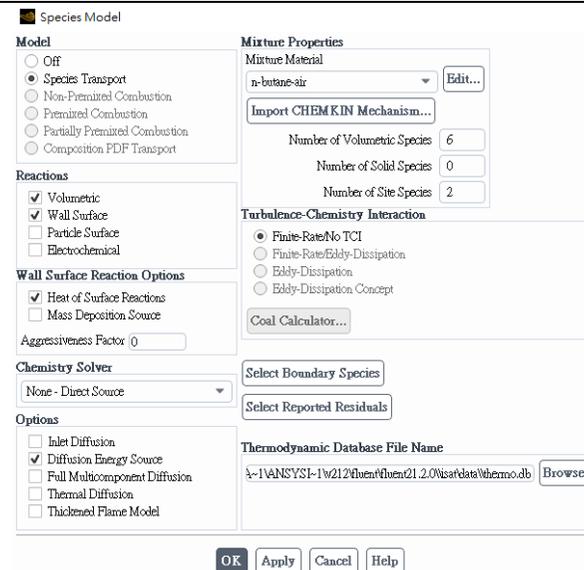
設定為暫態(Transient)模擬



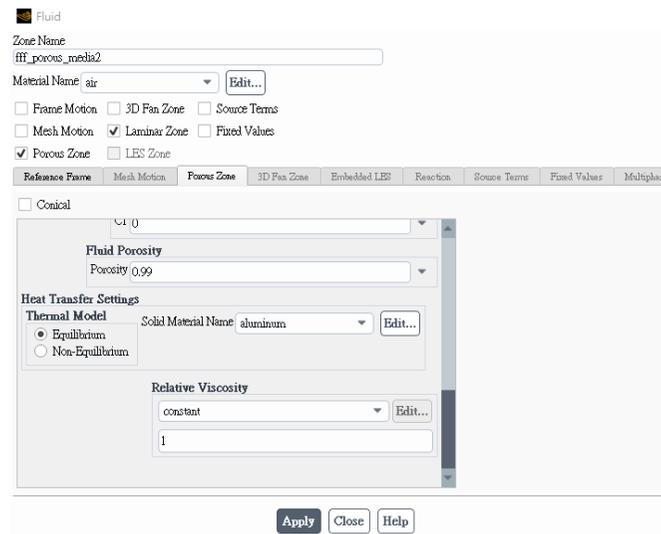
設定模式，Energy(ON)



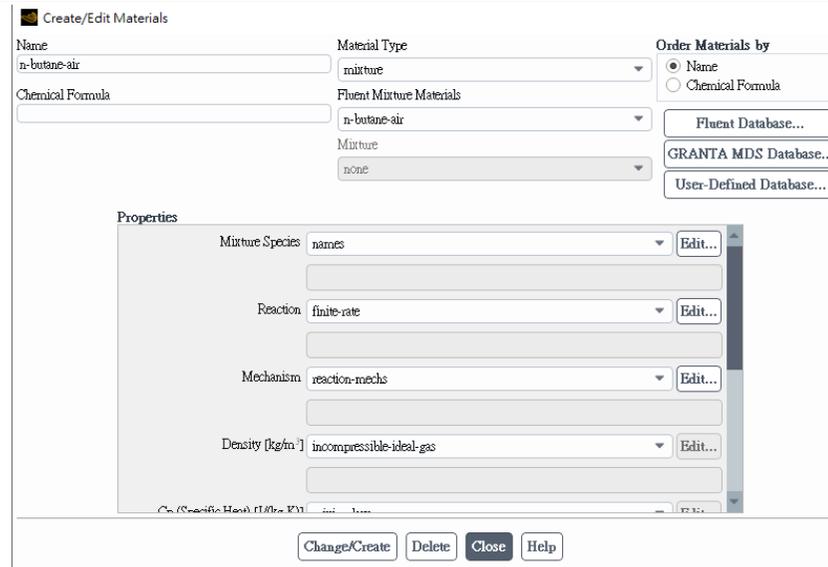
Models→Species 按鈕，彈出 Species Model (組分輸運模型) 對話方塊。在 Model 中選擇 Species Transport, Reactions 中勾選 Volumetric 和 Wall Surface



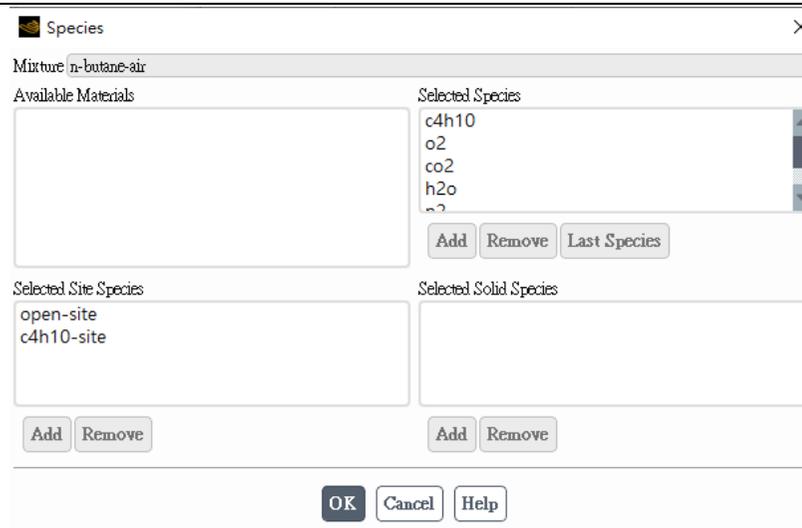
Materials→Fluid
 →Create/Edit 彈出所示
 Create/Edit Materials (材
 料) 對話方塊，創建物質
 air, n-butane, n-butane-site
 和 open-site



按一下 Mixture Species 右
 側按鈕 Edit 彈出設置對話
 方塊。



選擇 Mixture Species 右側
按鈕，設置定義混合物組
分



按一下 Reaction 右側按鈕
Edit 彈出設置對話方塊，
設置定義兩個化學反應

Reactions

Mixture: n-butane-air Total Number of Reactions: 2

Reaction Name: reaction-1 ID: 1 Reaction Type: Volumetric Wall Surface Particle Surface Electrochemical

Number of Reactants: 2 Number of Products: 1

Species	Stoich. Coefficient	Rate Exponent
c4h10	1	1
open-site	1	1

Species	Stoich. Coefficient	Rate Exponent
c4h10-site	1	0

Arrhenius Rate

Pre-Exponential Factor: 10000
Activation Energy [J/kgmol]: 0
Temperature Exponent: 0

Include Backward Reaction Specify...
 Third-Body Efficiencies Specify...
 Pressure-Dependent Reaction Specify...
 Coverage-Dependent Reaction Specify...

Mixing Rate

A: 4 B: 0.5

OK Cancel Help

Reactions ×

Mixture: n-butane-air Total Number of Reactions: 2

Reaction Name: reaction-2 ID: 2 Reaction Type:

Volumetric
 Wall Surface
 Particle Surface
 Electrochemical

Number of Reactants: 1 Number of Products: 2

Species	Stoich. Coefficient	Rate Exponent	Species	Stoich. Coefficient	Rate Exponent
c4h10	1	1	c4h10	1	0
			air	1	0

Arrhenius Rate

Pre-Exponential Factor: 10

Activation Energy [J/kgmol]: 0

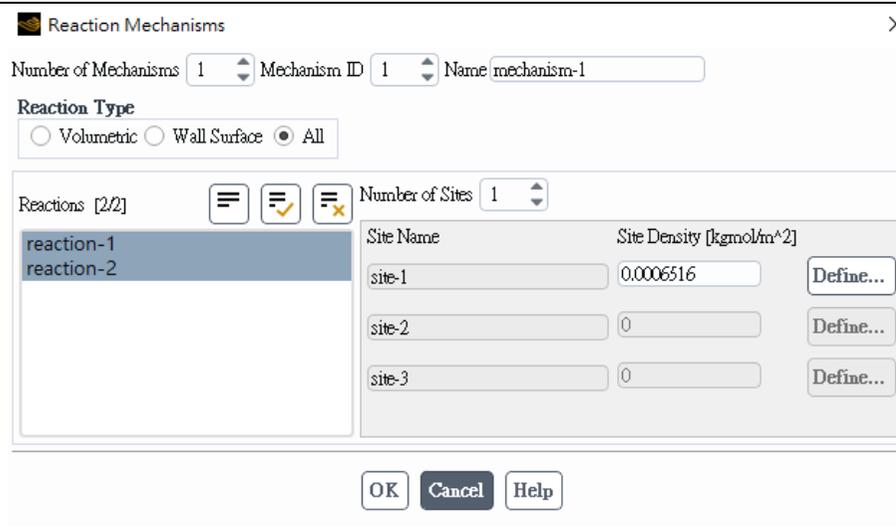
Temperature Exponent: 0

Include Backward Reaction Specify...
 Third-Body Efficiencies Specify...
 Pressure-Dependent Reaction Specify...
 Coverage-Dependent Reaction Specify...

Mixing Rate

A: 4 B: 0.5

按一下 Mechanism 右側按鈕 Edit 彈出設置對話方塊，設置反應機理，按一下 Define 按鈕，彈出 Site Parameters 對話方塊進行設置



Reaction Mechanisms

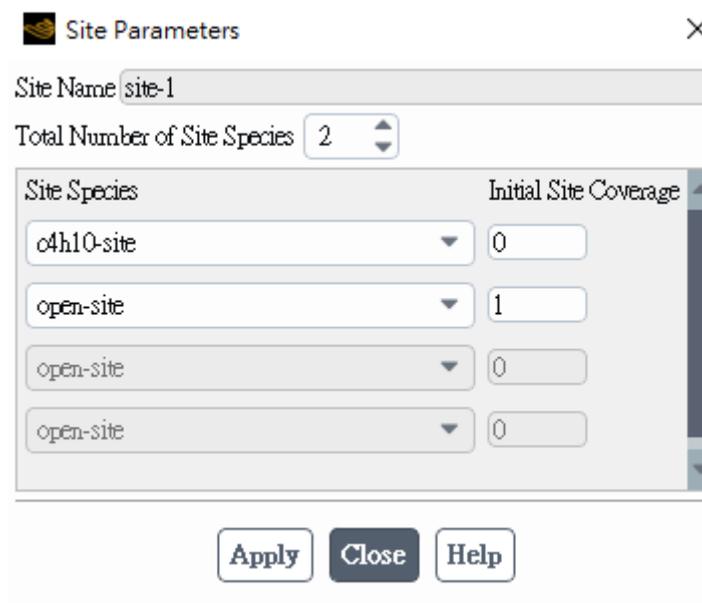
Number of Mechanisms: 1 Mechanism ID: 1 Name: mechanism-1

Reaction Type: Volumetric Wall Surface All

Reactions [2/2] Number of Sites: 1

Site Name	Site Density [kgmol/m ²]	Define...
site-1	0.0006516	Define...
site-2	0	Define...
site-3	0	Define...

OK Cancel Help



Site Parameters

Site Name: site-1

Total Number of Site Species: 2

Site Species	Initial Site Coverage
c4h10-site	0
open-site	1
open-site	0
open-site	0

Apply Close Help

Material 選擇 Solid，創建
固體物質 Carbon-bax1500
和 aluminum

Create/Edit Materials

Name: carbon-bax1500

Material Type: solid

Order Materials by:
 Name
 Chemical Formula

Chemical Formula: c-bax1500

Fluent Solid Materials: carbon-bax1500 (c-bax1500)

Mixture: none

Buttons: Fluent Database..., GRANTA MDS Database..., User-Defined Database...

Properties

Density [kg/m³]: constant (dropdown) Edit...
448

Cp (Specific Heat) [J/(kg K)]: constant (dropdown) Edit...
900

Thermal Conductivity [W/(m K)]: constant (dropdown) Edit...
1

Buttons: Change/Create, Delete, Close, Help

在 Cell Zone Conditions 面板中，按兩下 porous-1，彈出計算域設置對話方塊，選擇 Porous Zone 輸入多孔介質特性和 Reaction 輸入反應參數

Fluid

Zone Name: porous_media

Material Name: n-butane-air [Edit...]

Frame Motion 3D Fan Zone Source Terms Reaction

Mesh Motion Fixed Values

Porous Zone

Reference Frame | Mesh Motion | **Porous Zone** | 3D Fan Zone | Embedded LES | Reaction | Source Terms | Fixed Values | Multiphase

Conical

Update From Plane Tool

Direction-1 Vector

X1: [dropdown]

Y0: [dropdown]

Z0: [dropdown]

Direction-2 Vector

X0: [dropdown]

Y1: [dropdown]

Z0: [dropdown]

Relative Velocity Resistance Formulation

Viscous Resistance (Inverse Absolute Permeability)

Apply Close Help

Fluid

Zone Name: porous_media

Material Name: n-butane-air [Edit...]

Frame Motion 3D Fan Zone Source Terms Reaction

Mesh Motion Fixed Values

Porous Zone

Reference Frame | Mesh Motion | Porous Zone | 3D Fan Zone | Embedded LES | **Reaction** | Source Terms | Fixed Values | Multiphase

Surface-to-Volume Ratio [m⁻¹]: 1500

Reaction Mechanism: mechanism-1

設定邊界條件
入口設定進氣速度及溫度
出口為壓力邊界條件

Velocity Inlet

Zone Name
inlet-voc

Momentum Thermal Radiation Species DPM Multiphase Potential Structure UDS

Velocity Specification Method Magnitude, Normal to Boundary

Reference Frame Absolute

Velocity Magnitude [m/s] 1

Supersonic/Initial Gauge Pressure [Pa] 0

Apply Close Help

初始化及模擬條件設定
為防止流場不穩定，開始
之 Time Step 為 1(200
Iterations)

Task Page

Run Calculation ?

Check Case... Preview Mesh Motion...

Time Advancement

Type: Fixed Method: User-Specified

Parameters

Number of Time Steps: 200 Time Step Size [s]: 1

Max Iterations/Time Step: 5 Reporting Interval: 1

Profile Update Interval: 1

Options

Extrapolate Variables

Report Simulation Status

Solution Processing

Statistics

Data Sampling for Time Statistics

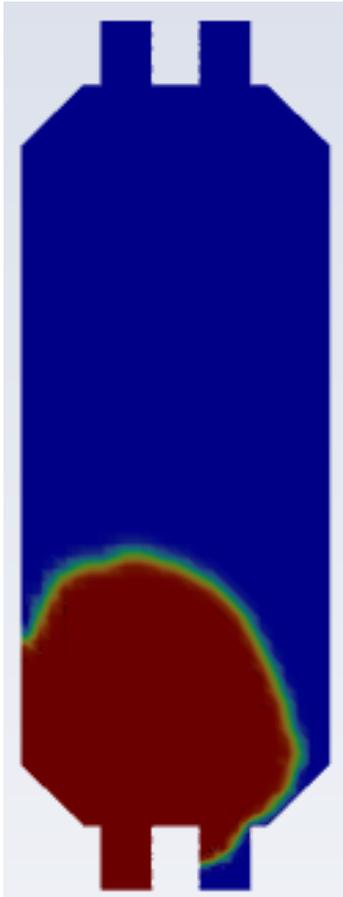
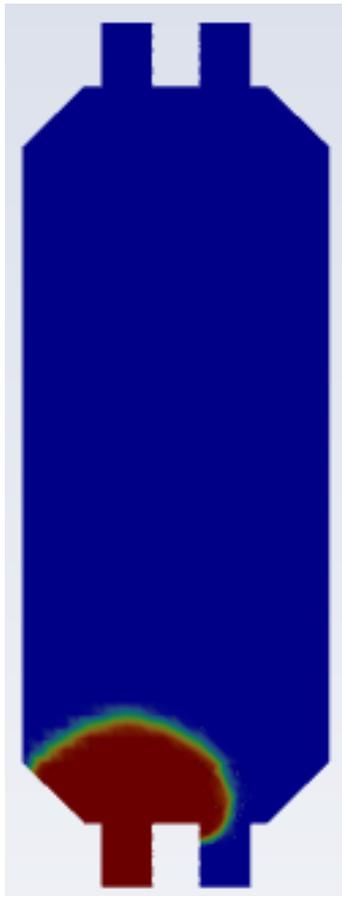
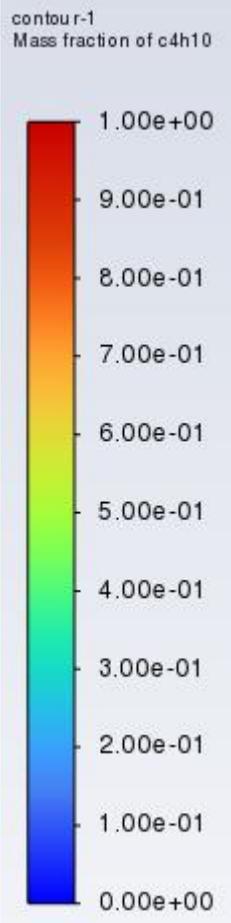
Data File Quantities...

Solution Advancement

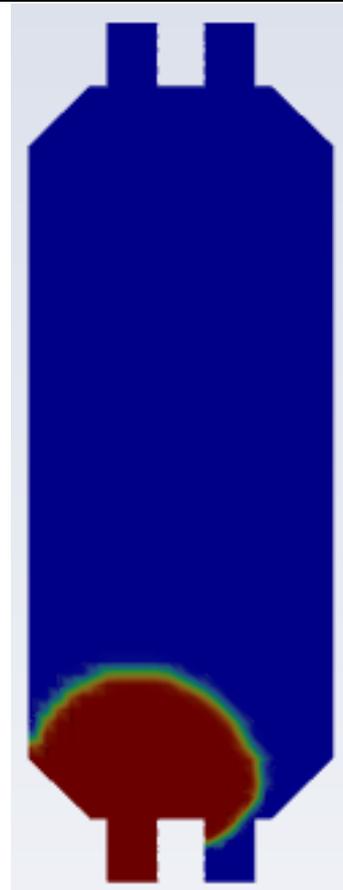
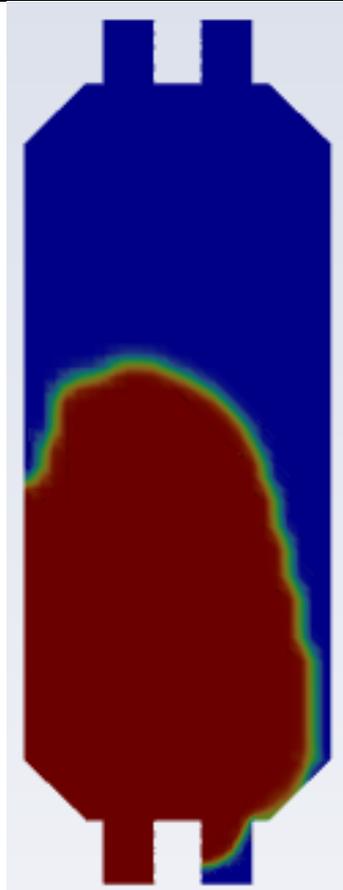
Calculate

完成上述吸脫附濃縮槽之吸附模擬之參數設定後，下表針對二種不同進口速度進行吸脫附濃縮槽之吸附分
時比較。可發現在不同參數下，透過模擬的方式，可清楚了解吸脫附濃縮槽建立的過程，可提供最佳化參數給
予系統之運作。

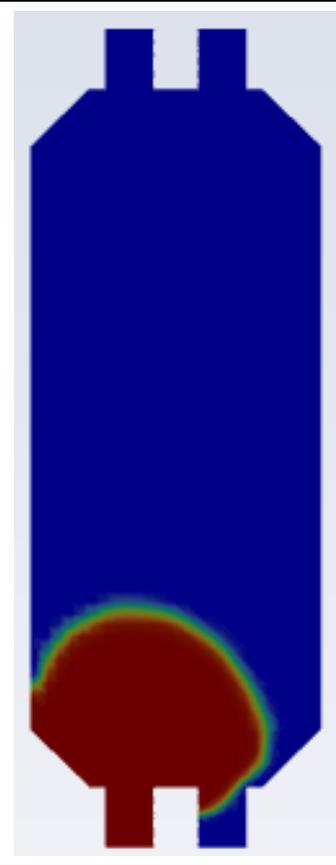
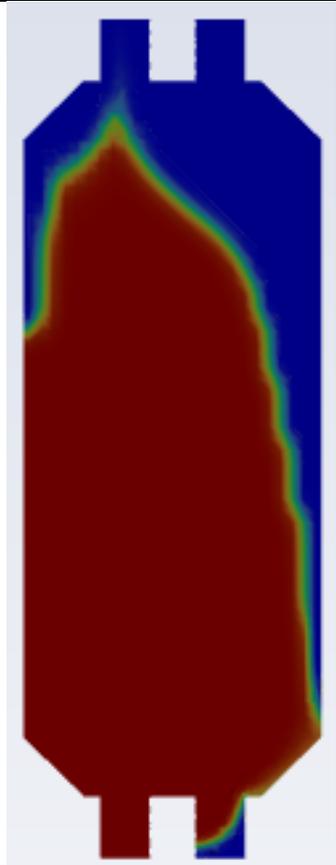
表 4-5 吸脫附濃縮槽之吸附模擬比較表

比較項目	進口流速 5m/s	進口流速 1m/s	
<p>50 秒 進口速度 高，也代表 有較多的 VOC 進入吸 附槽，吸附 區域較大</p>			 <p>contour-1 Mass fraction of c4h10</p>

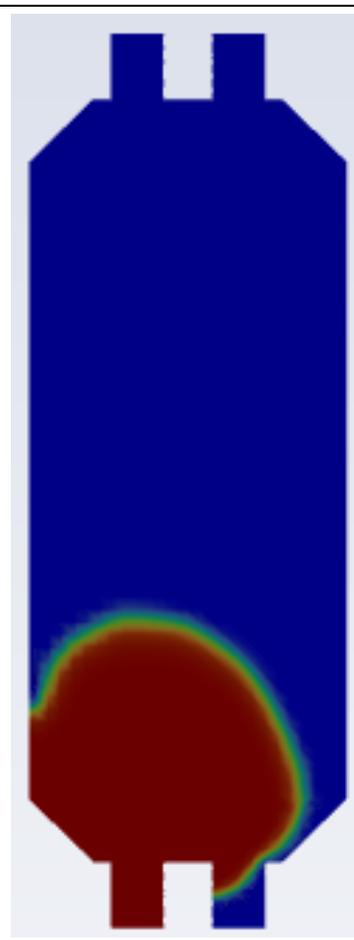
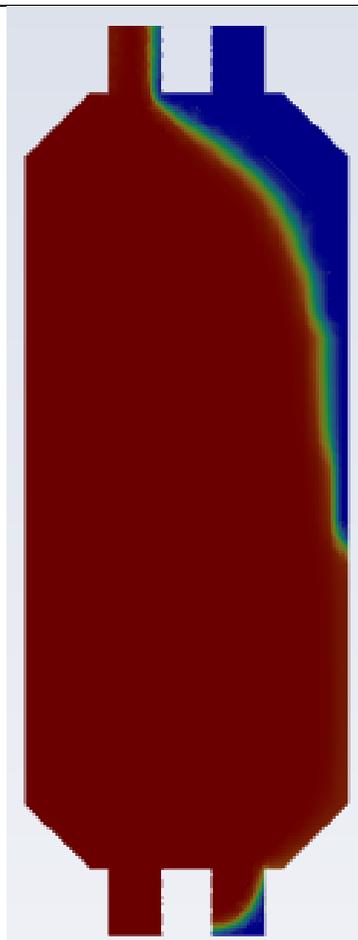
100 秒



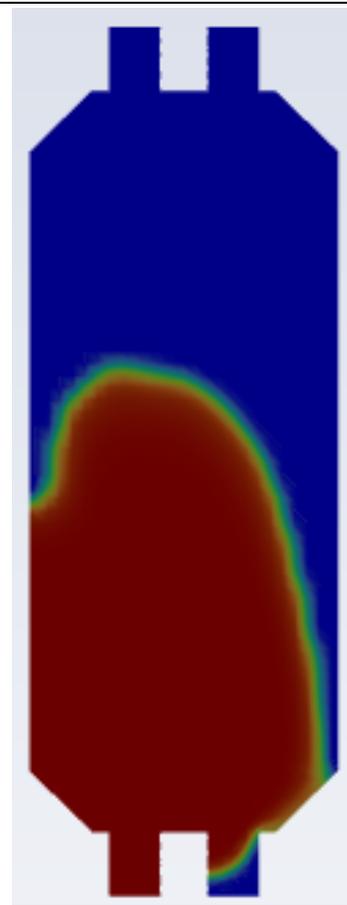
200 秒
進口 5m/s
飽和吸附材
以到達出口

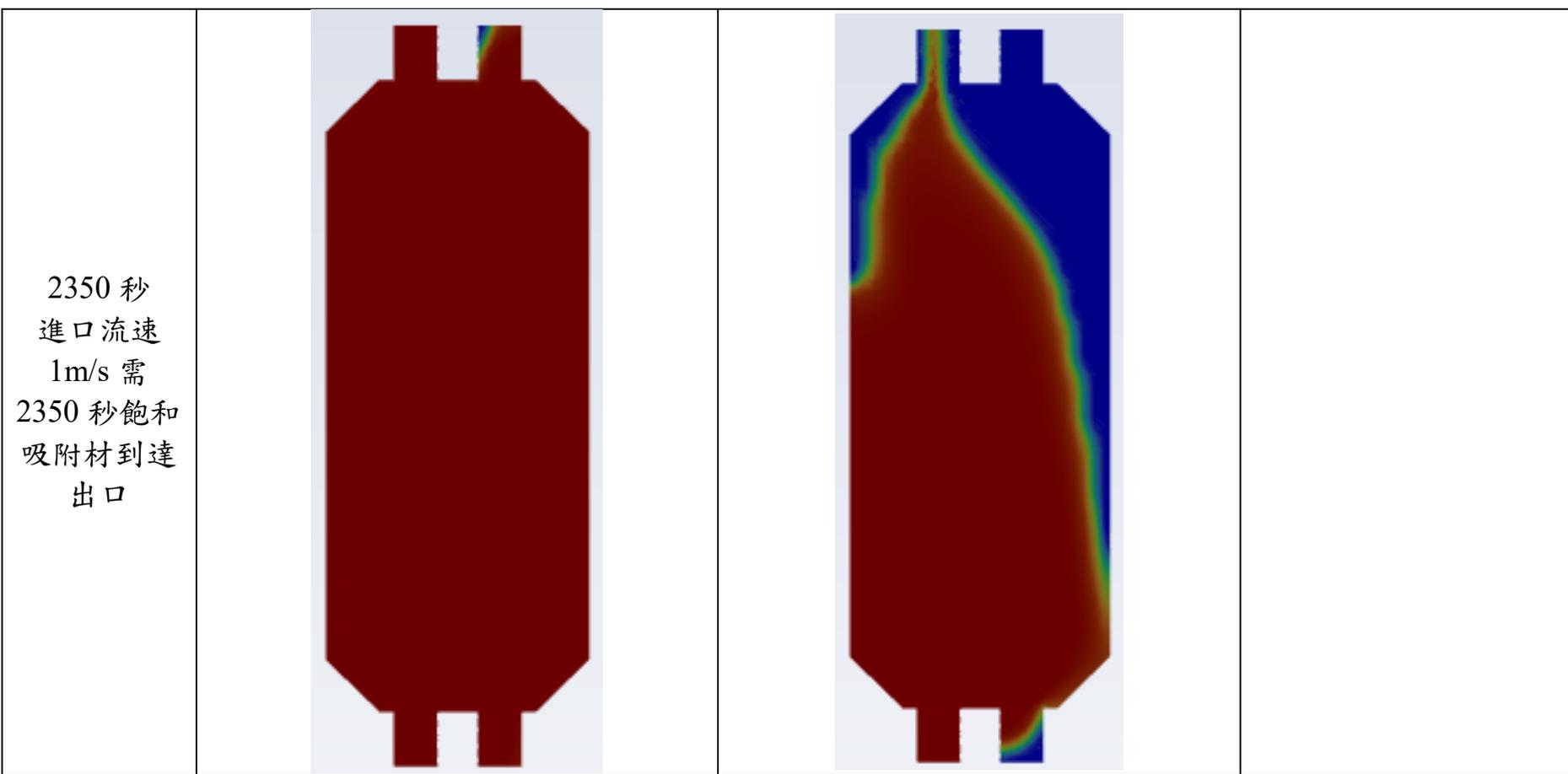


400 秒

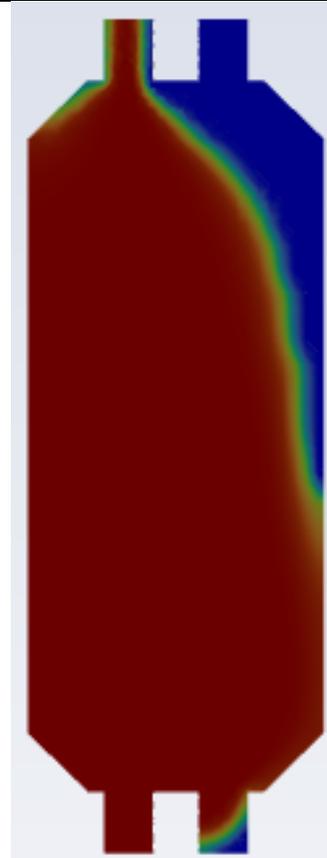


1400 秒

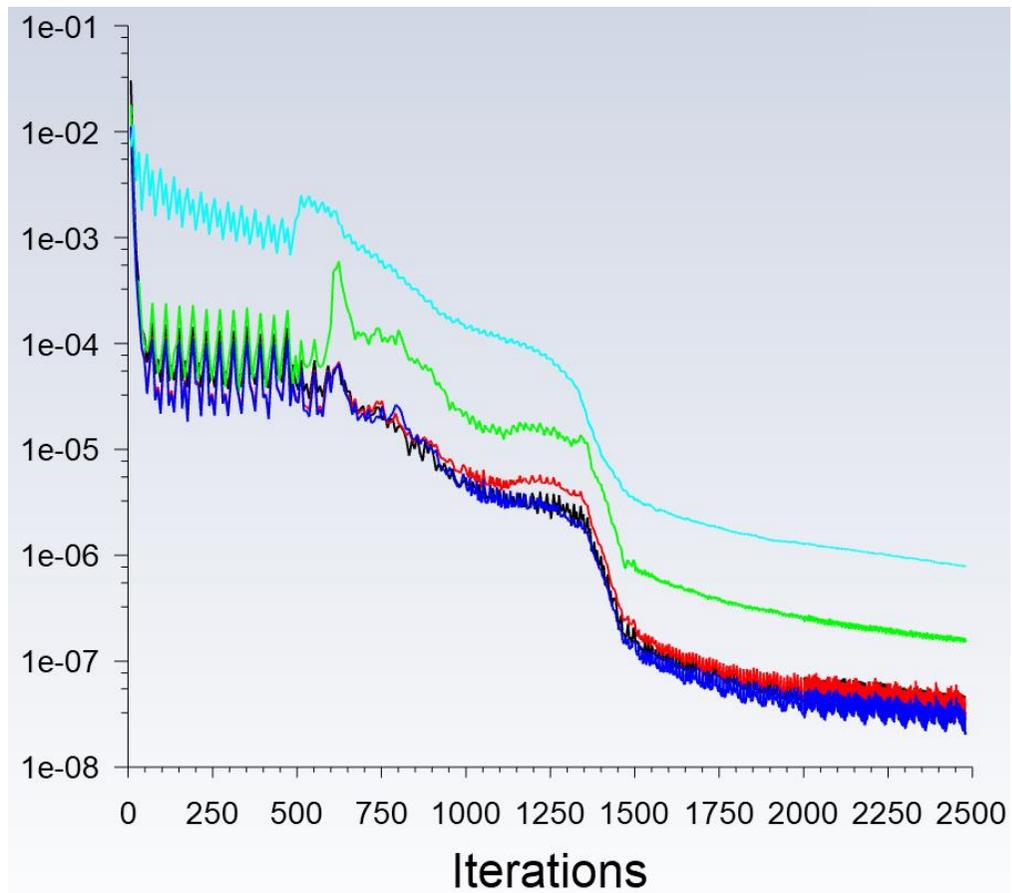




3300



收斂殘值圖



五、吸脫附濃縮槽流場模擬小結

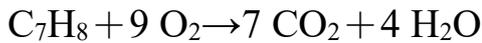
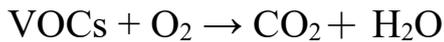
針對吸脫附濃縮槽結合多孔介質進行流場模擬，確認多孔介質模擬之程序，並建立多孔介質模擬初步流場分析，隨後加入吸附反應於模擬中，進行吸脫附槽之吸脫附模擬，完成以下工作：

- (一) 完成脫附槽之多孔介質輸入參數，建立模型與流場。
- (二) 納入化學反應，進行吸脫附濃縮槽吸附及脫附模擬分析。
- (三) 進行吸脫附濃縮槽吸附模擬，可提供實驗吸脫附最佳化參數分析。

伍、多孔介質燃燒室流場模擬

一、多孔介質燃燒室

蓄熱式燃燒室，基本原理是在高溫條件下(>800°C)將有機廢氣(VOCs)氧化生成 CO₂ 和 H₂O，從而淨化廢氣，並回收分解時所釋放的熱量，以達到節能環保的雙重目的，是一種高效穩定的處理有機廢氣的節能型環保裝置。蓄熱式燃燒爐具有通量大、壓降低及效率高等優點，能有效地去除有機廢氣中揮發性有機溶劑(VOCs)達 95 % ~ 99 %，且其熱回收效率亦可達 95 % 以上，其效率可達到各國環保法規之要求，以解決空氣污染問題。燃燒室保持一定的溫度，在一定的停留時間下，廢氣所含的 VOCs 成份被完全氧化成 H₂O 及 CO₂，其代表性反應如下：



蓄熱爐過往都用柵格結構的耐火磚砌成,如冶金工業、玻璃工業中常見的熱風爐，近代蓄熱體都採用陶瓷材料,並做成窩狀結構藉以提高熱效率和降低氣體通過時的流動阻力。在蓄熱室中,常放置陶瓷材料製成的蓄熱填充物,主要類型有散堆填料和規整填料兩大類。評價蓄熱體的優劣,主要是其熱效率和氣流通過時的壓力損失,而這方面又與蓄熱體的結構形狀、尺寸大小和材質(熱容,熱導率,輻射率)有關。

本章流場模擬對象為多孔介質燃燒室(如圖 5-1)，與系統圖 4-1 標註之編號 1 位置，上下方各有一流道，於下方進氣上方加熱後流出。

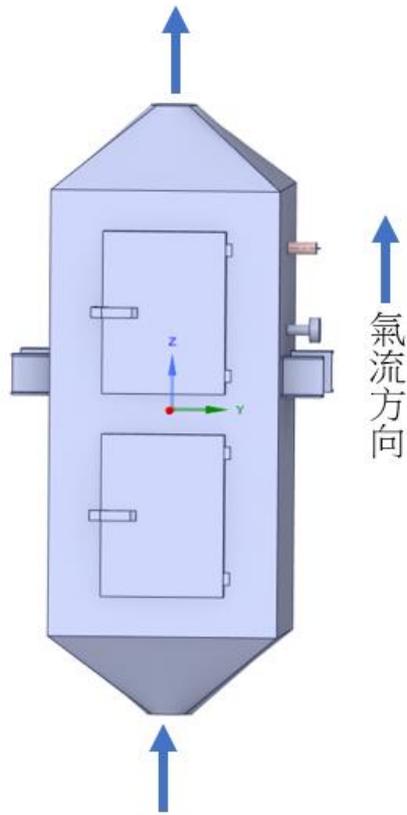


圖 5-1 多孔介質燃燒室

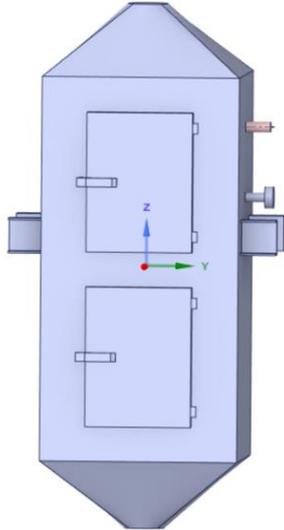
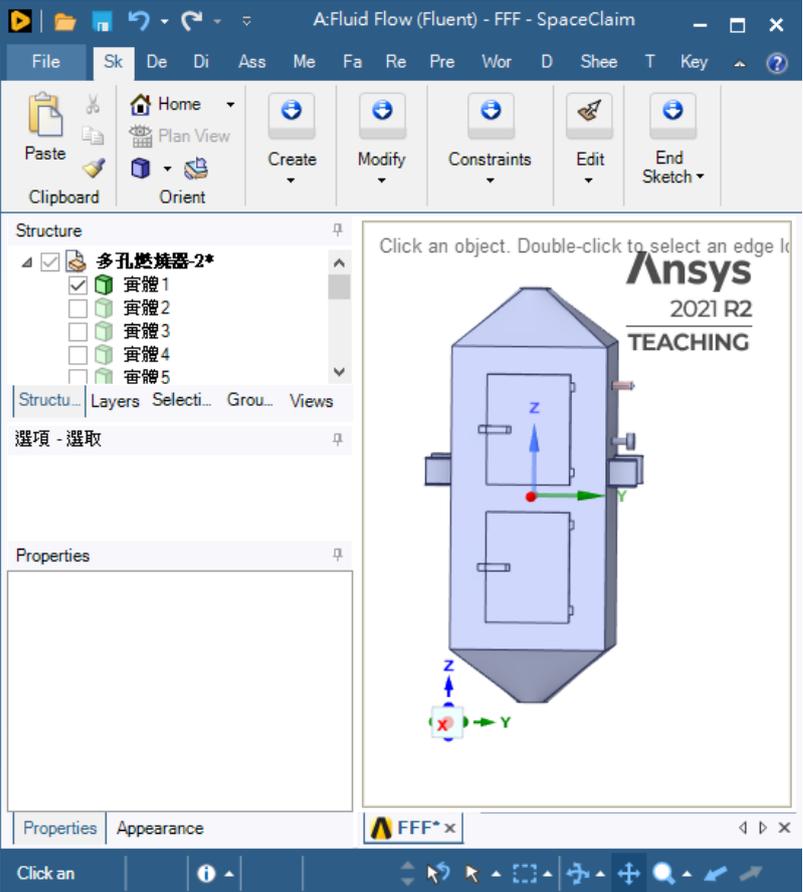
二、流場模擬流程說明

針對多孔介質燃燒室，模擬的流程與吸脫附濃縮槽之流場模擬相似，須按模擬工具流程進行如流程圖 3-3 進行，一樣包含前處理的模型處理、建模及網格建立，在進入數值分析，將數值分析結果以後處理進行繪圖與比較。

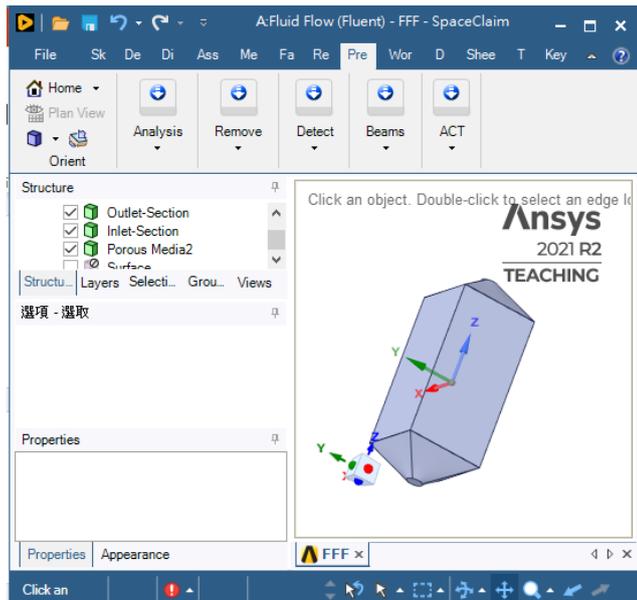
三、多孔介質燃燒室

本節說明前處理的各項流程，分別為讀入 3D 模型，轉換為 ANSYS FLUENT 可作業之流場，隨後畫出多孔介質區域，再與原流場進行刪除重疊區域，完成後即可進行網格建立，各階段如下表進行說明。

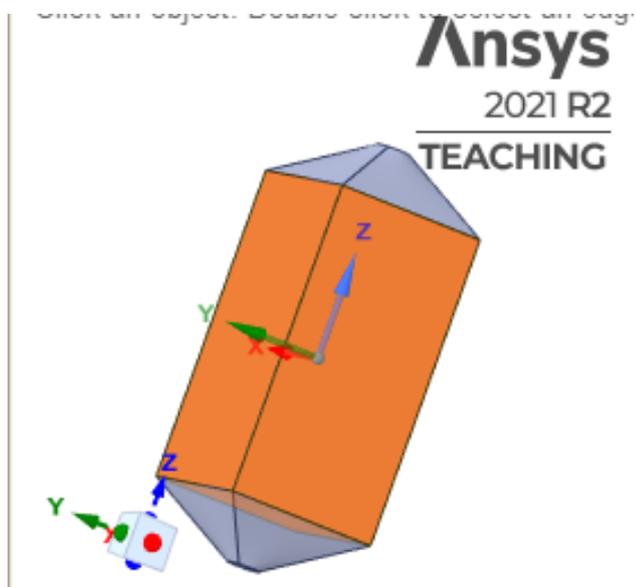
表 5-1 多孔介質燃燒室模型建立程序表

說明	擷圖
<p>Solidworks 3D 模型</p>	
<p>讀入 Ansys Geometry</p>	

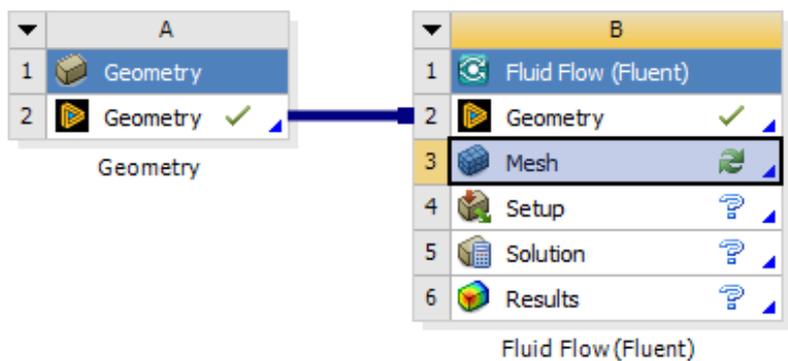
擷取流道，Solidwork 模型
 為外殼，需擷取流體流道，
 作為流體模擬區域
 Prepare→Volume Extract



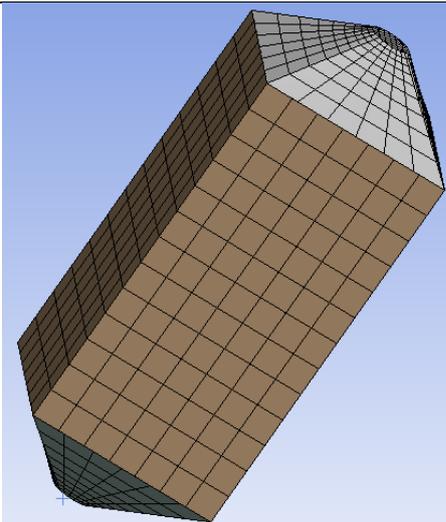
建立多孔結構區域
 (Sketch→Pull) (橘色)



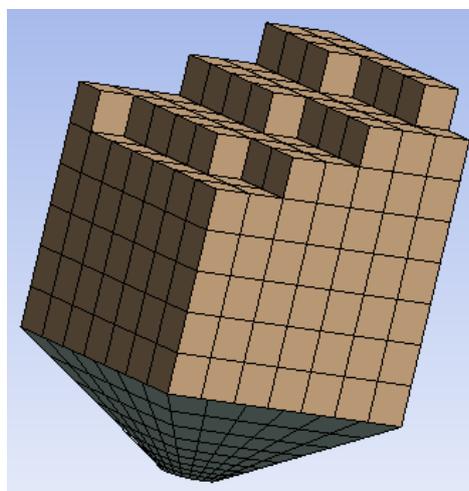
將擷取之流道及多孔結構
 匯入 Ansys Mesh 進行網
 格建立



表面網格



內部網格，上半部為多孔
介質



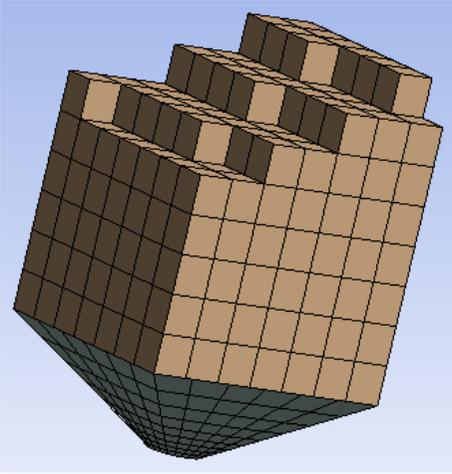
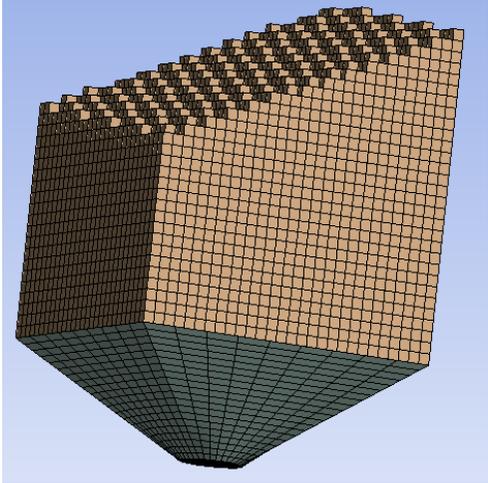
四、多孔介質燃燒室流場模擬結果比較

多孔介質燃燒室之流場模擬，遵循吸脫附濃縮槽流場模擬相同的限制與步驟進行多孔介質燃燒室流場模擬結果比較，本計畫建立多孔介質模擬應用於節能蓄熱式吸附濃縮處理系統，確認多孔介質模擬之程序，並建立多孔介質模擬初步流場分析，再配合實驗參數，如流量、入口溫度等參數完成多孔介質燃燒室熱傳模擬評估分析。

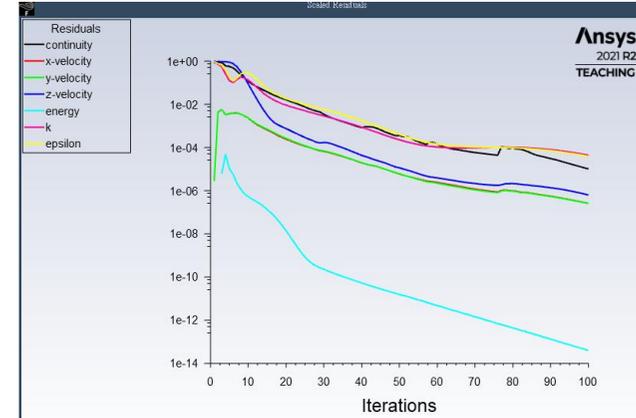
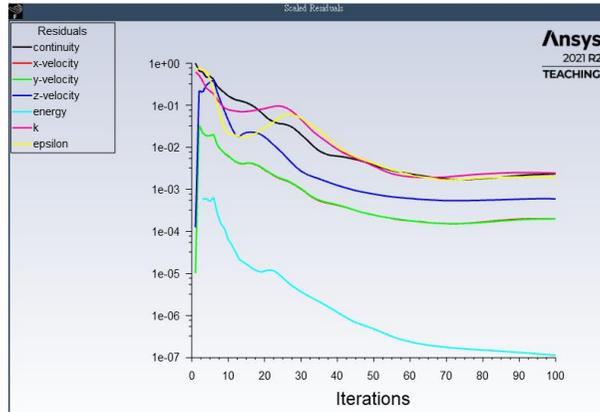
(一)多孔介質燃燒室流場建立

本節針對多孔介質燃燒室分別以無多孔介質與有多孔介質，流場的不同以下表進行比較，二者均以穩態疊代 100 次進行模擬比較。

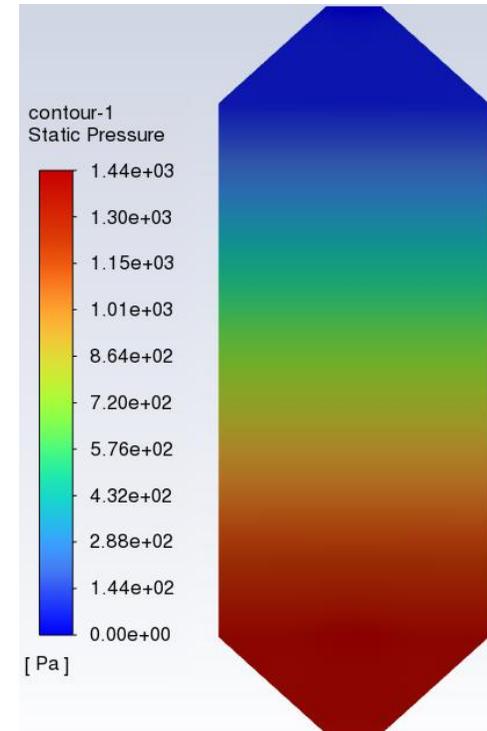
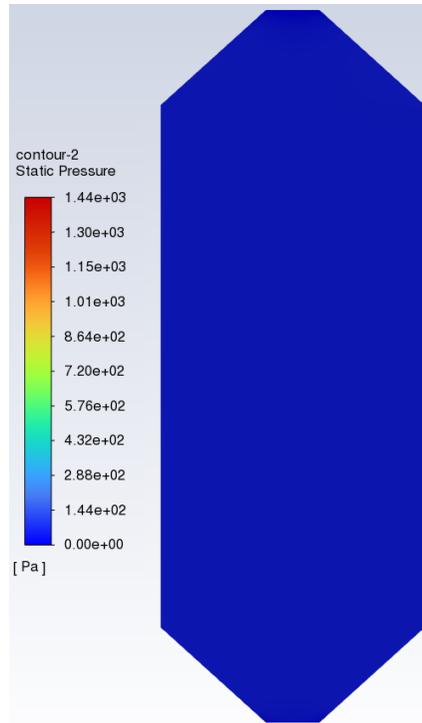
表 5-2 多孔介質燃燒室流場評估比較表

比較項目	無多孔介質	具多孔介質
模型		
	<p>因無多孔介質，內部為流道</p>	<p>上部為多孔介質</p>

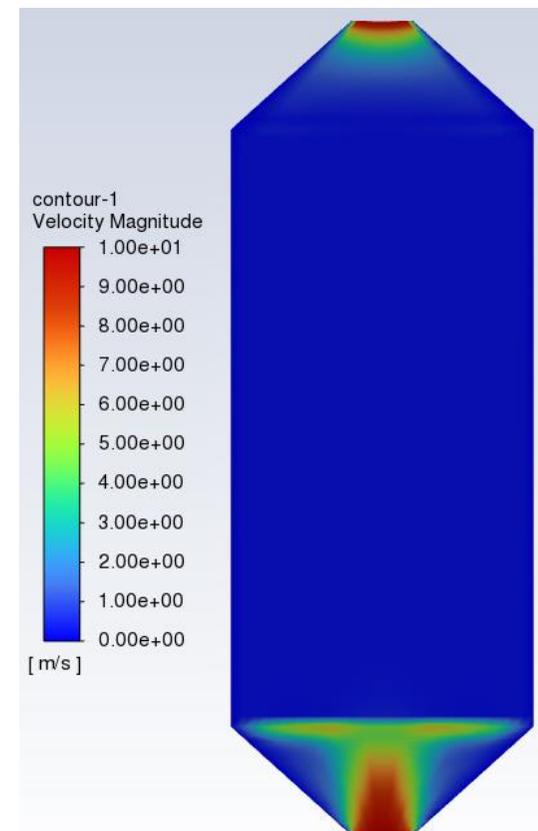
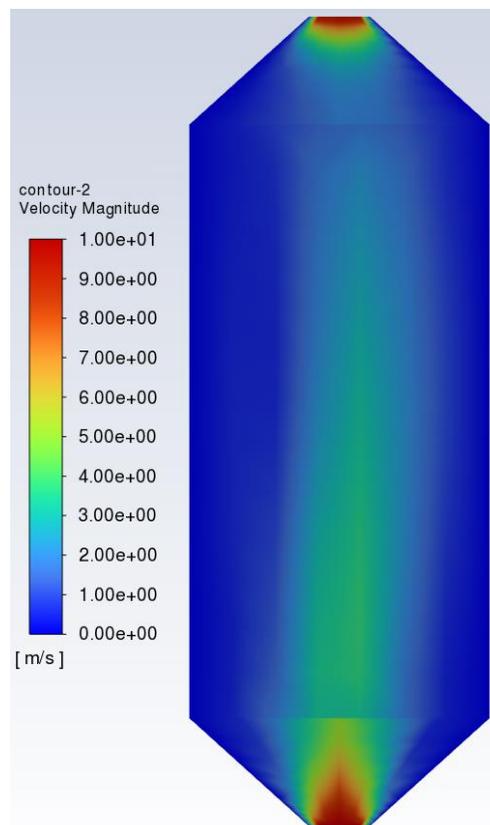
殘值收斂圖



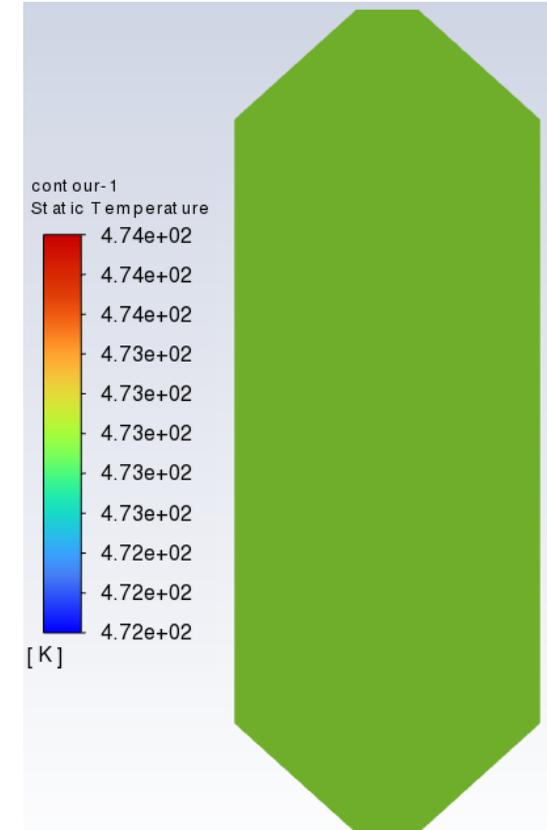
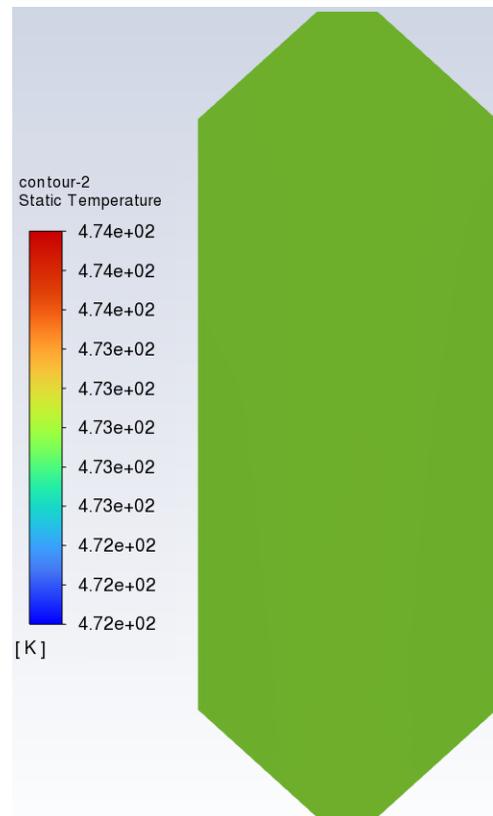
壓力場：內部有多孔介質存在，在流場進口處產生局部高壓，燃燒室內部壓力也因多孔介質的存在，產生流阻，使得內部壓力較無多孔介質高相當多



速度場：內部在有
多孔介質的情況
下，流場一入進口
即轉向，內部流速
低，在內部無多孔
介質的情況下，流
體順暢通往出口。



溫度場：內部在有無多孔介質的情況下，因未模擬燃燒現象，故溫度分布一致，在內部有無多孔介質的情況下，溫度場幾近均勻，二者於度場差別不大。



(二)多孔介質燃燒室效率分析

本節進行多孔介質燃燒室效率分析，蓄熱介質基本特性會影響熱流傳遞與蓄熱特性，下表為蓄熱材基本特性，將輸入於模擬軟體，進行模擬。[資料來源：<https://heater.heat-tech.biz/tc/infrared-panel-heater/science-of-the-infrared-rays/7747.html>]

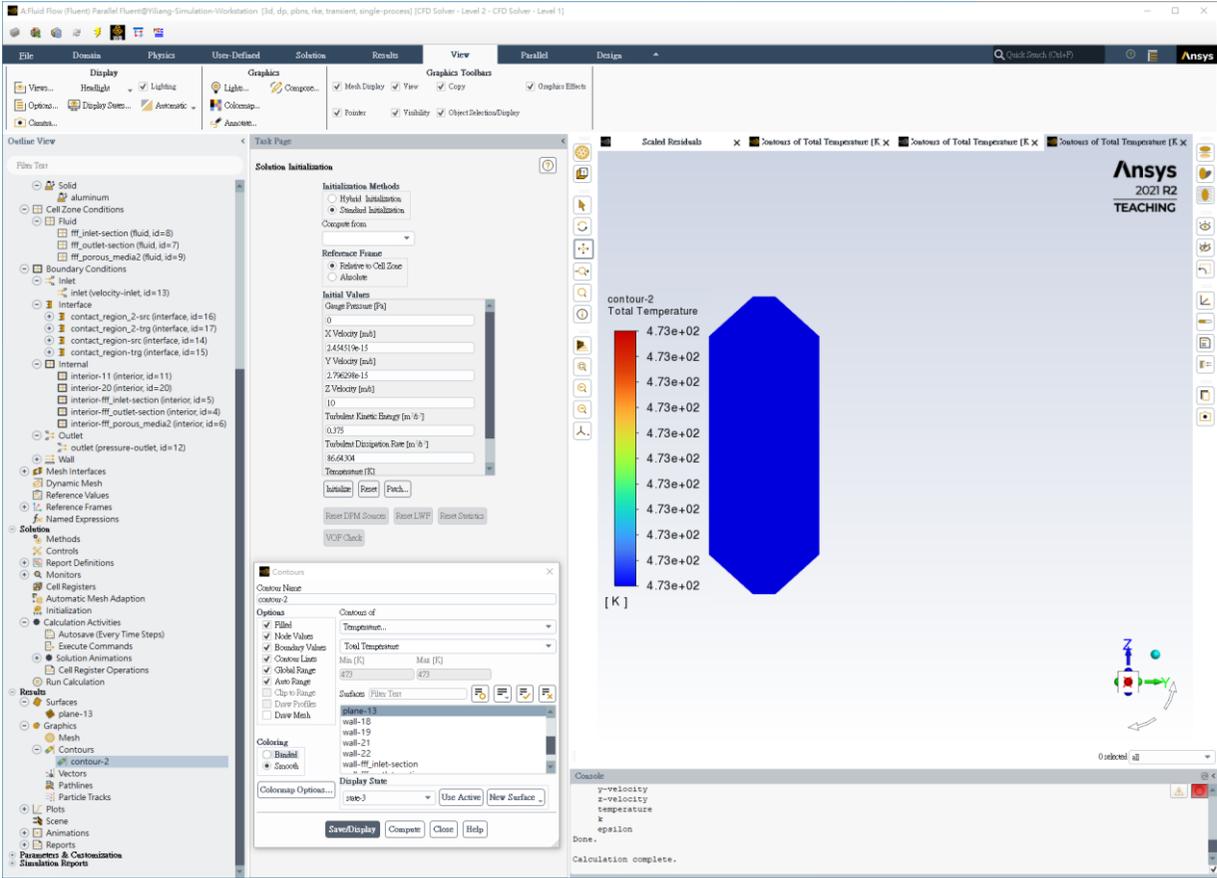
表 5-3 蓄熱材基本特性表

玻璃陶瓷	基準溫度[°C]	密度[g/cm ³]	比熱[J/g °C]	導熱係數[W/m K]
氧化鋁陶瓷 99.7%	20	3.9	0.8	29
氧化鋁陶瓷 93%	20	3.6	0.8	16
鎂橄欖石陶瓷	20	2.8	0.88	3.3
滑石陶瓷	20	2.7	0.84	2.5
瓷(瓷)	200	2.5	0.8	0.15
瓷絕緣子	20~100	2.4	0.8	1.4
陶器	20	2.2-2.5	1.05	1-1.6
玻璃(板)	20	2.7	0.84	0.76
玻璃(用於溫度計)	20	2.59	0.8	0.95
石英玻璃	20	2.21	0.71	1.35

蘇打玻璃	20	2.59	0.75	0.74
火石玻璃	20	3.15-3.9	0.5	0.6

下表說明進行多孔介質燃燒室效率分析的各項流程。

表 5-4 多孔介質燃燒室效率分析流程表

說明	擷圖
<p>延續前節建立之模型， 進入 CFD Solver</p>	 <p>The screenshot displays the ANSYS Fluent interface during the CFD Solver setup phase. The 'Solution Initialization' dialog box is active, showing options for initialization methods (Hybrid and Standard) and initial values for various parameters like pressure, velocity, and temperature. The 'Contours' panel on the right shows a temperature contour plot of the combustion chamber, with a color scale ranging from 4.73e+02 K to 4.73e+02 K. The 'Outline View' on the left provides a hierarchical view of the model's components, including solids, fluids, interfaces, and boundary conditions.</p>

設定為暫態(Transient)模擬

Task Page

General ?

Mesh

Scale... Check Report Quality

Display... Units...

Solver

Type

Pressure-Based
 Density-Based

Velocity Formulation

Absolute
 Relative

Time

Steady
 Transient

Gravity

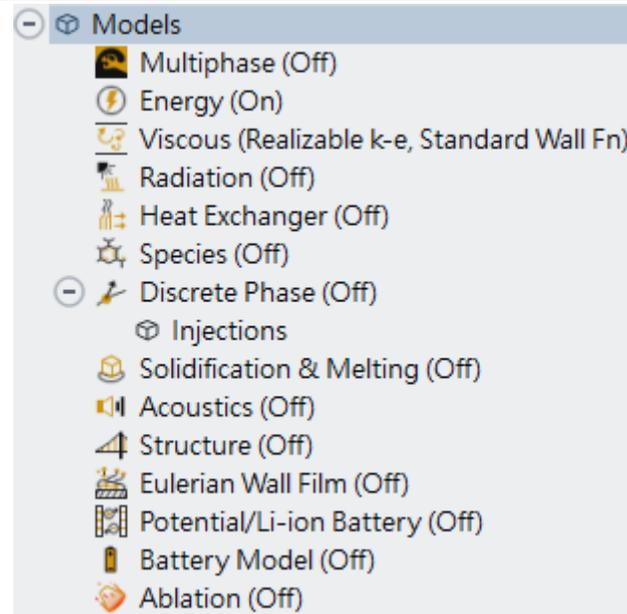
Gravitational Acceleration

X [m/s²] 0

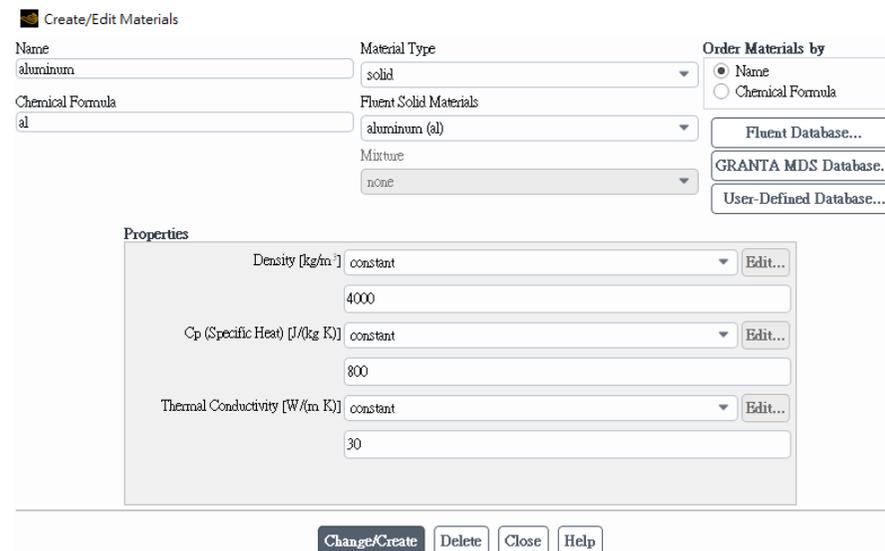
Y [m/s²] 0

Z [m/s²] -9.8

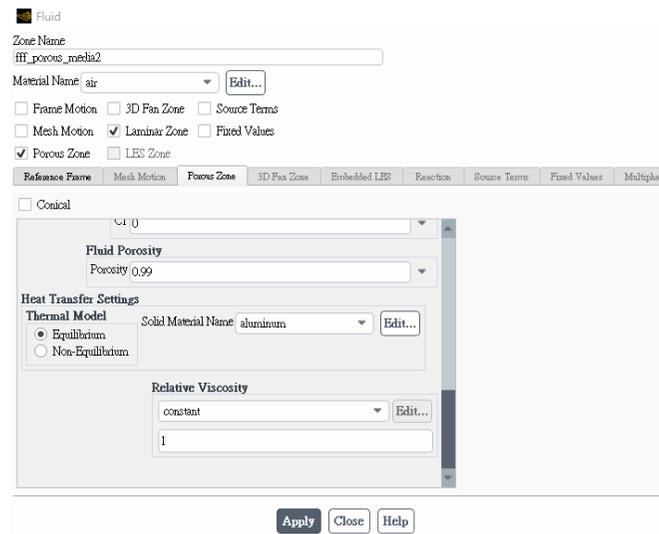
設定模式，Energy(ON)進行熱傳模擬



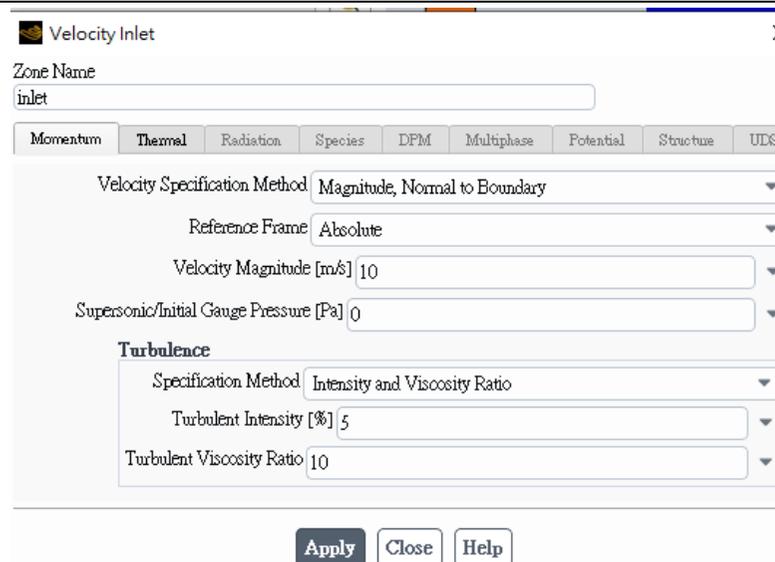
設定多孔介質熱特性，如
比熱、熱傳係數
密度 4000 kg/m^3
比熱 800 J/kgK
熱傳係數 30 W/mK



設定多孔介質特性，如孔隙率(孔隙率 (Porosity) 是表徵材料的孔隙部分的物理量，定義為孔隙的體積與材料總體積的比率，所以總是在 0 到 1 之間)



設定邊界條件
入口設定進氣速度及溫度
出口為壓力邊界條件



初始化及模擬條件設定
為防止流場不穩定，開始
之 Time Step 為 0.01(100
Iterations)
0.1 50 Iterations
0.5 20 Iterations
進行比較

Task Page

Run Calculation 

Check Case... Preview Mesh Motion...

Time Advancement

Type: Fixed Method: User-Specified

Parameters

Number of Time Steps: 100 Time Step Size [s]: 0.01

Max Iterations/Time Step: 5 Reporting Interval: 1

Profile Update Interval: 1

Options

Extrapolate Variables

Report Simulation Status

Solution Processing

Statistics

Data Sampling for Time Statistics

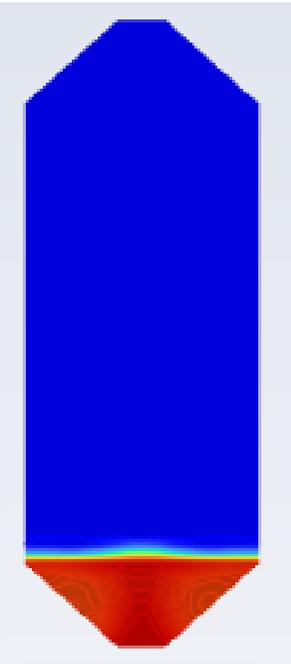
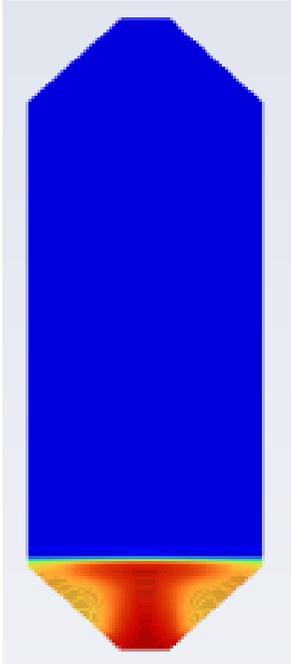
Data File Quantities...

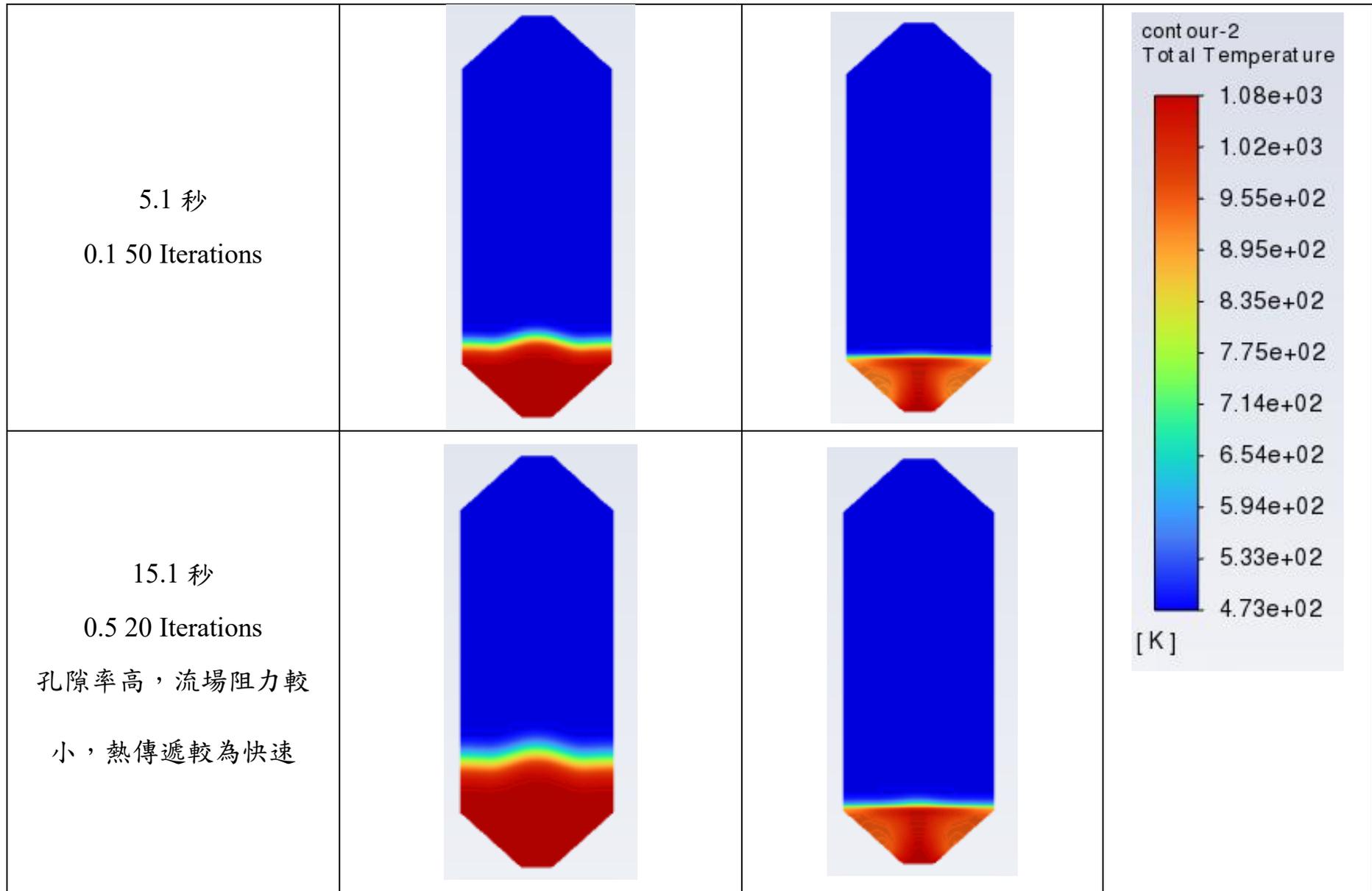
Solution Advancement

Calculate

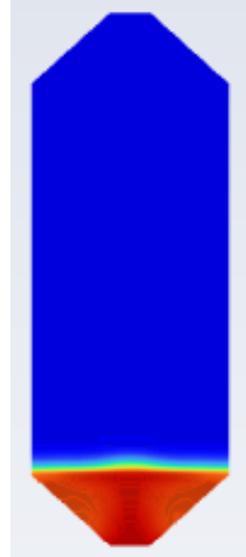
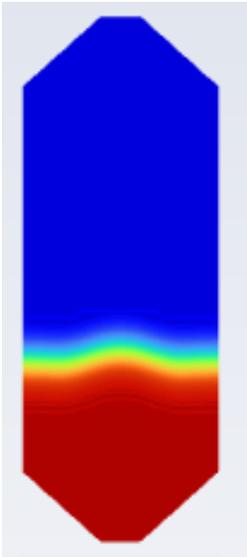
完成上述多孔介質燃燒室之參數設定後，下表針對二種不同孔隙率進行燃燒室溫度場建立之分時比較。可發現在不同參數下，透過模擬的方式，可清楚了解燃燒室溫度場建立的過程，可提供最佳化參數給予系統之運作。

表 5-5 多孔介質燃燒室效率分析比較表

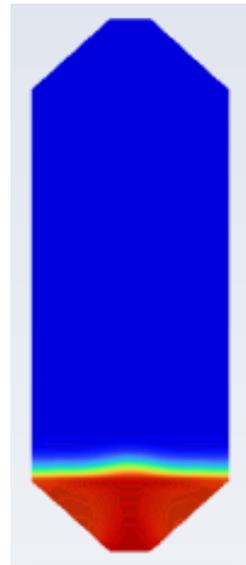
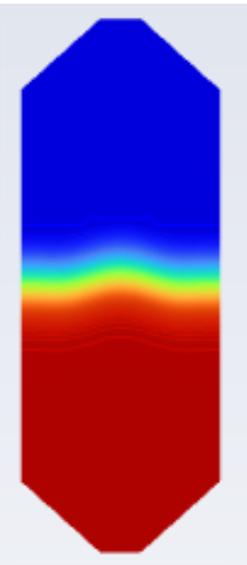
比較項目	入口流速 10m/s， 800°C 孔隙率 0.99	入口流速 10m/s， 800°C 孔隙率 0.75	Color Bar
0.1 秒 0.01 100Iterations			

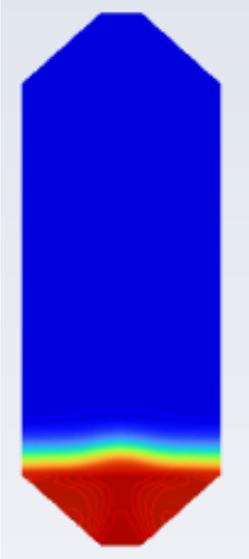
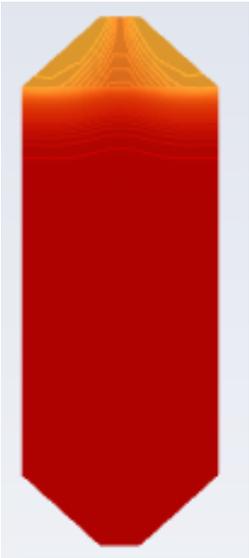
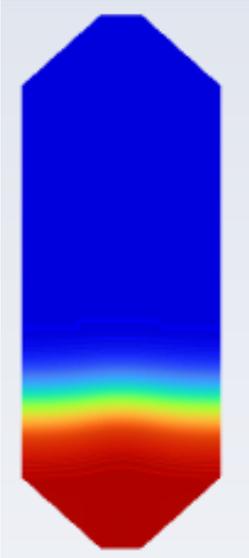


25.1 秒
0.5 20 Iterations

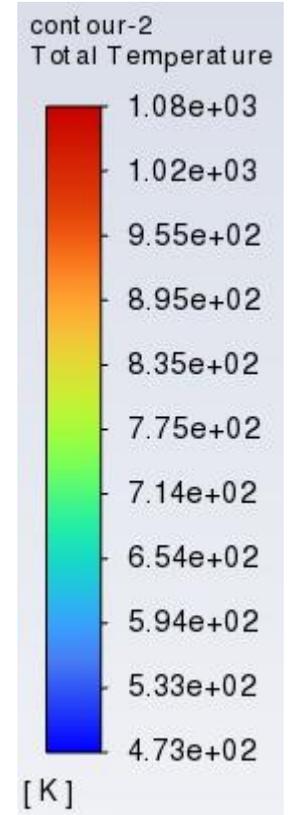
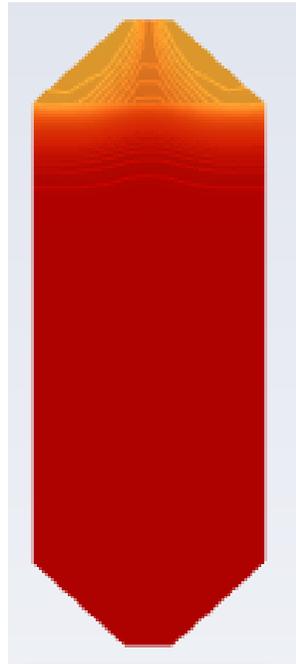


45.1 秒
0.5 40 Iterations

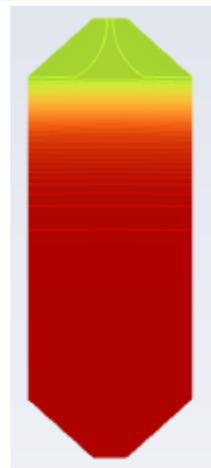
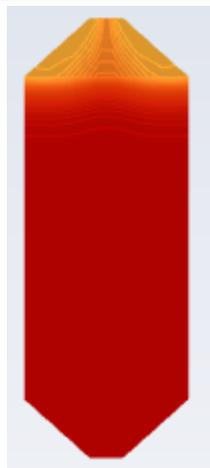


<p>95.1 秒 0.5 100 Iterations 孔隙率 0.99 燃燒室可完成 燃燒室溫度建立</p>	 A vertical cross-section of a combustion chamber showing a temperature distribution. The top section is yellow and orange, indicating high temperatures, while the rest of the chamber is a uniform red, indicating a stable temperature profile.	 A vertical cross-section of a combustion chamber showing a pressure distribution. The top section is dark blue, indicating low pressure, while the bottom section shows a gradient from red to yellow to green, indicating a pressure gradient.	
<p>396 秒</p>	 A vertical cross-section of a combustion chamber showing a temperature distribution. The top section is yellow and orange, indicating high temperatures, while the rest of the chamber is a uniform red, indicating a stable temperature profile.	 A vertical cross-section of a combustion chamber showing a pressure distribution. The top section is dark blue, indicating low pressure, while the bottom section shows a gradient from red to yellow to green, indicating a pressure gradient.	

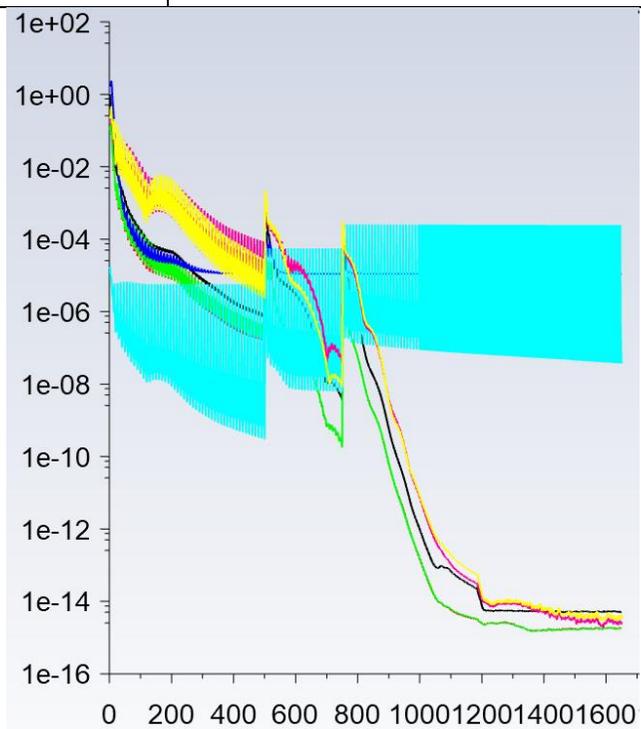
996 秒



2208 秒
燃燒室溫度建立



收斂殘值圖



五、多孔介質燃燒室流場模擬小結

針對多孔介質燃燒室結合多孔介質進行流場模擬，確認多孔介質模擬之程序，並建立多孔介質模擬初步流場分析，後續針對燃燒熱傳反應模擬進行評估，比較不同參數的熱傳效應，完成以下工作及發現：

- (一) 確認建立的模擬流程，可有效模擬多孔介質燃燒室之溫度場建立。
- (二) 所建立的模擬流程，可找出多孔介質燃燒室溫度場建立所需的時間。
- (三) 所建立的模擬流程，可針對不同參數進行比對，已模擬取代實驗，縮短系統調整時間。
- (四) 配合實驗數據，調整多孔介質之輸入參數。
- (五) 利用建立的模擬流程，可進行多孔介質燃燒室最佳化參數分析。

陸、循環再生活性氧化鋁材料之吸脫附效率評估

表 6-1 為本研究配製甲苯氣體進行吸附及每批次使用吸附劑之淨重，其配製甲苯氣體濃度為 250 ppm、400 ppm 及 500 ppm，其使用採氣袋配置，進行吸附試驗之溫度為室溫(25°C)條件下進行，且採氣袋抽引速度以分析儀器之抽取速度為主，並利用三位數天平進行吸附劑秤重，其分別填充 305.374 克、305.868 克及 305.669 克。圖 6-1 為甲苯 250 ppm 之吸附劑吸附實驗，其吸附穿透時間為 82 秒，而飽和時間為 2072 秒。圖 6-2 為已吸附飽和 250 ppm 甲苯吸附劑之脫附實驗，其共需要 634 秒完全脫附。

圖 6-3 為甲苯 400 ppm 之吸附劑吸附實驗，其吸附穿透時間為 46 秒，而飽和時間為 1239 秒。圖 6-4 為已吸附飽和 400 ppm 甲苯吸附劑之脫附實驗，其共需要 749 秒完全脫附。

圖 6-5 為甲苯 500 ppm 之吸附劑吸附實驗，其吸附穿透時間為 24 秒，而飽和時間為 286 秒。圖 6-6 為已吸附飽和 500 ppm 甲苯吸附劑之脫附實驗，其共需要 256 秒完全脫附。

表 6-1 配置甲苯濃度及使用吸附劑淨重

測試編號	配製甲苯濃度 (採氣袋濃度: ppm)	每批次秤取之吸附劑淨重 (g)
1	250	305.374
2	400	305.868
3	500	305.669

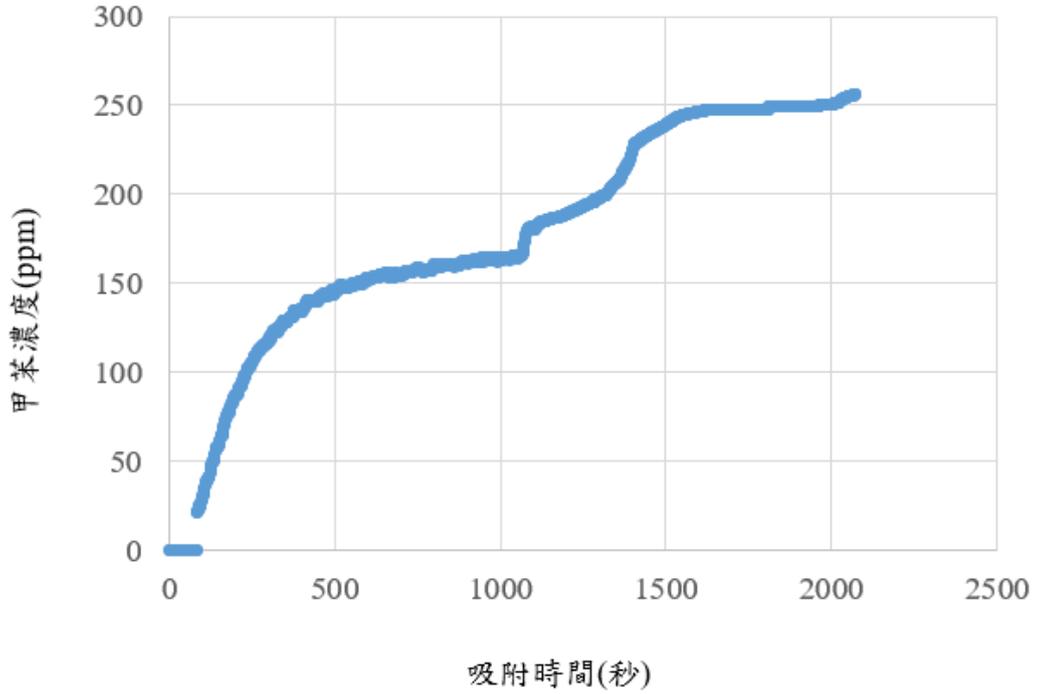


圖 6-1 甲苯 250 ppm 之吸附劑吸附實驗(25°C)

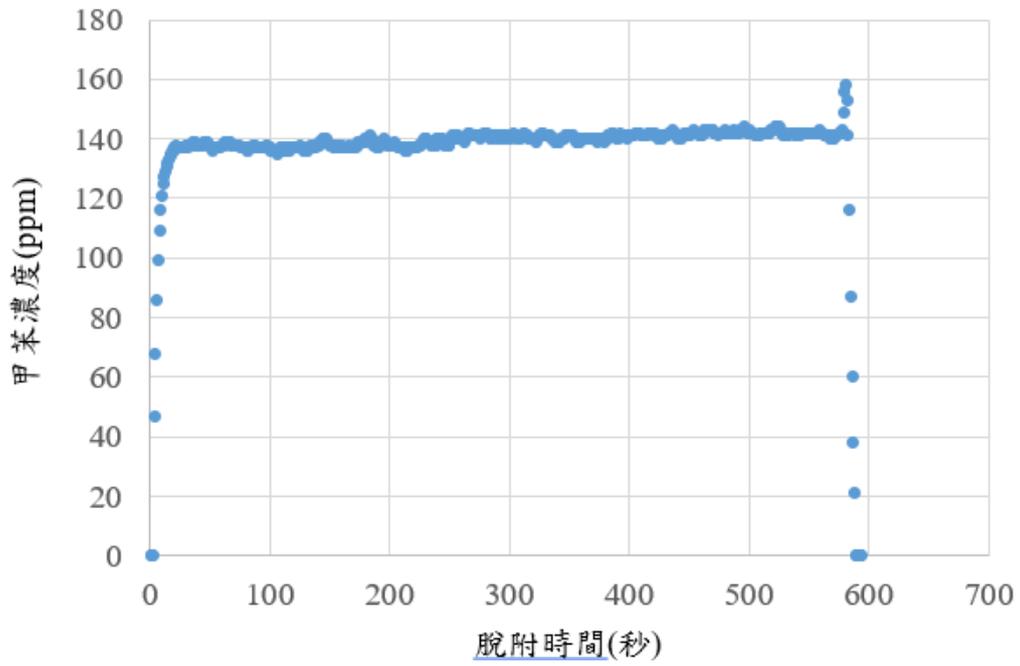


圖 6-2 甲苯 250 ppm 飽和吸附劑之脫附實驗

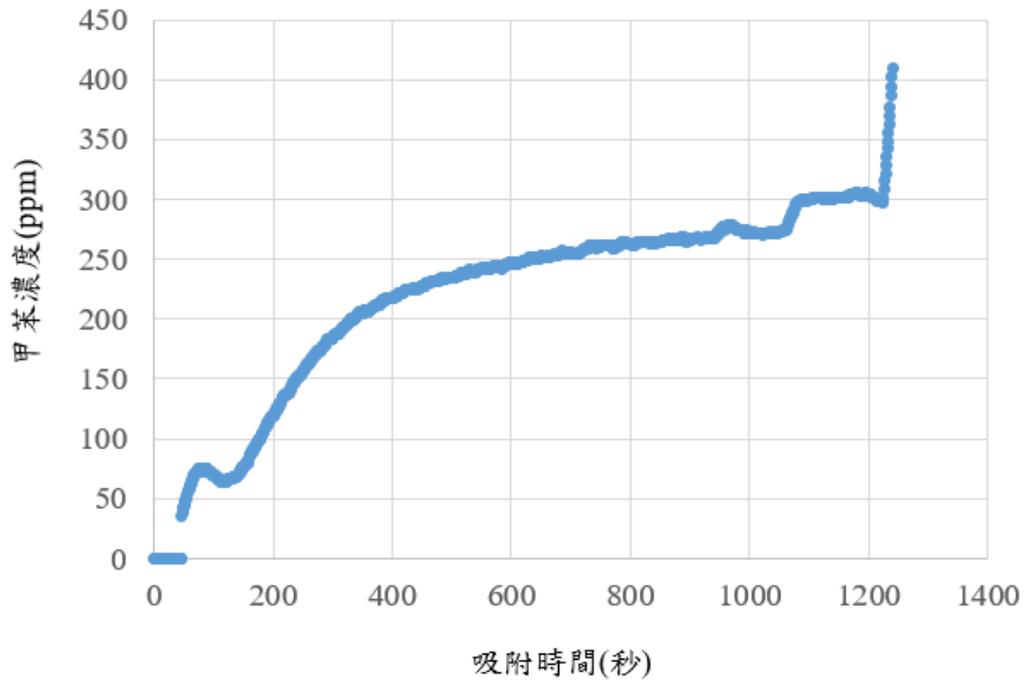


圖 6-3 吸附 400 ppm 甲苯吸附劑之吸附實驗(25°C)

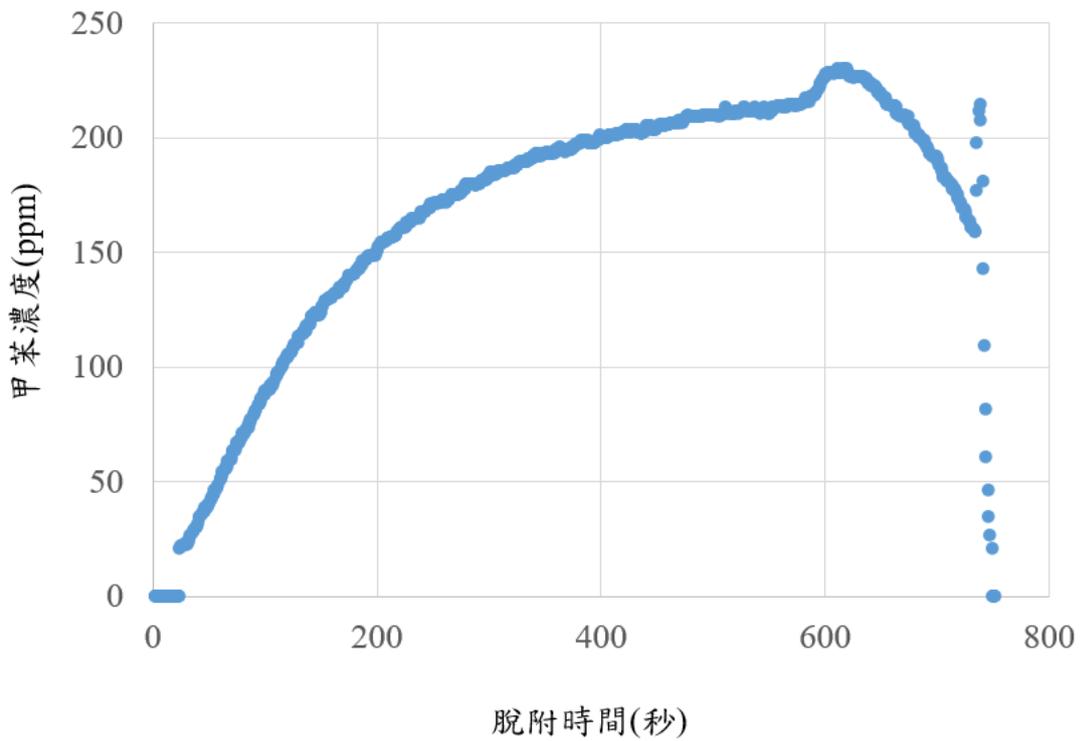


圖 6-4 甲苯 400 ppm 飽和吸附劑之脫附實驗

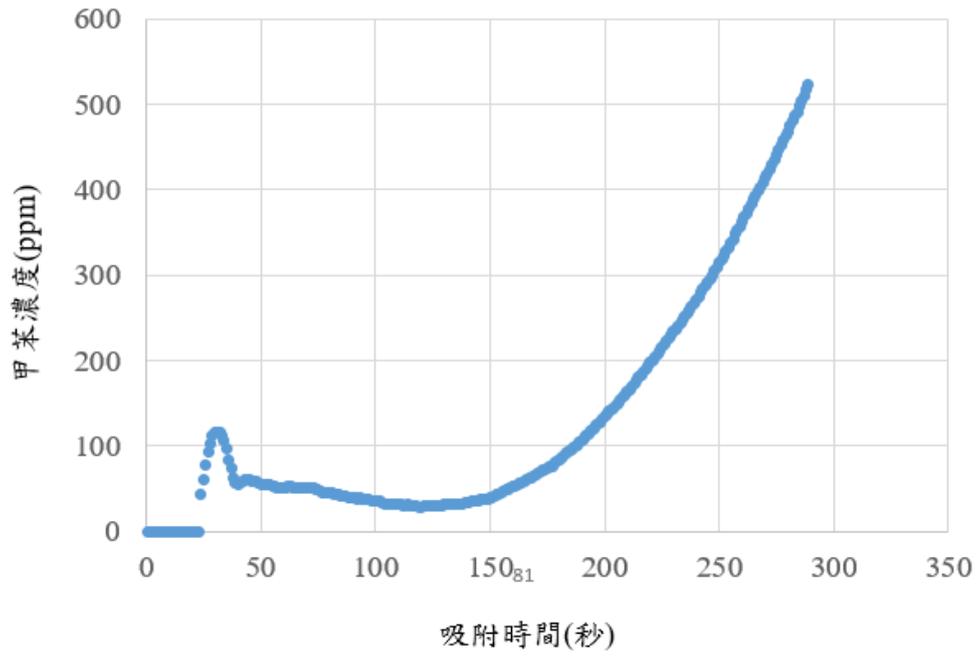


圖 6-5 吸附 500 ppm 甲苯吸附劑之吸附實驗(25°C)

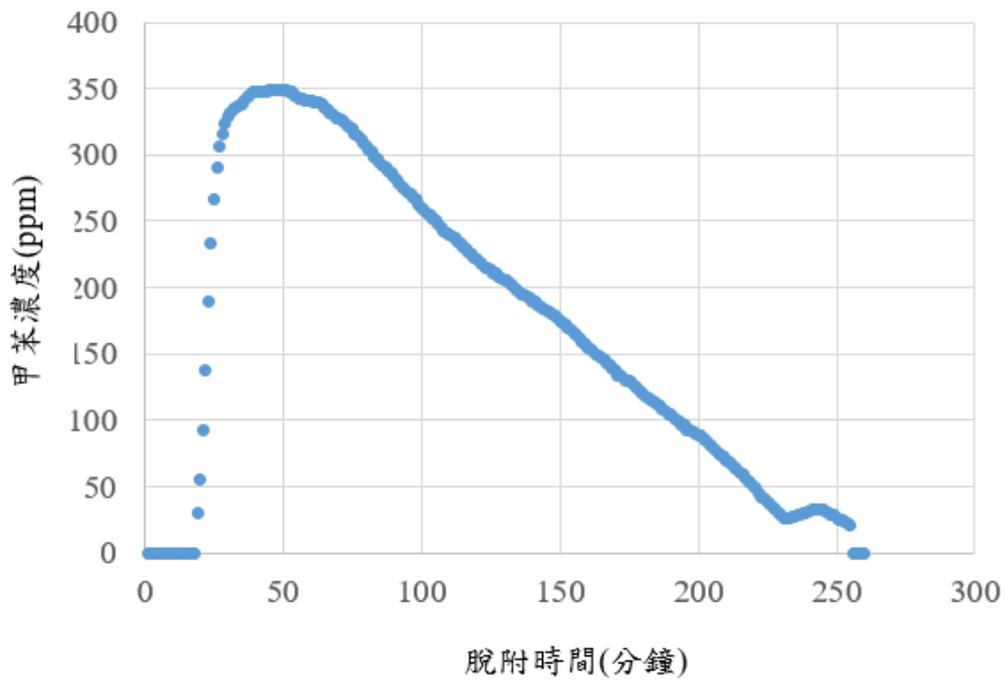


圖 6-6 甲苯 500 ppm 飽和吸附劑之脫附實驗

柒、結論與建議

一、結論

- (一) 循環再生活性氧化鋁材料吸脫附試驗分析，其配置濃度 250 ppm、400 ppm 及 500 ppm，雖然其各為 250 ppm 之 1.61 倍與 2 倍濃度，但其穿透時間比值分別為 0.56 與 0.29，顯示其不同甲苯濃度之吸附劑材質重量都約為 300 克，但仍受吸附劑空間密度所影響。
- (二) 脫附試驗之溫度約 70~80°C，但脫附時間約為 256–749 秒即可完全脫附，表示未來實場脫附溫度設定不需要太高，亦可減少耗能。
- (三) 透過電腦模擬，進行吸附濃縮槽及多孔介質燃燒室模擬，經由模擬模型的建立，以及各項模擬參數的建立，逐步建立以電腦模擬預測吸附濃縮槽及多孔介質燃燒室之流場，後續可透過與系統各項參數相配合，找出系統最佳化參數。

二、建議

- (一) 本研究使用之循環再生活性氧化鋁材料吸脫附試驗分析，其配置濃度 250 ppm、400 ppm 及 500 ppm 為批次採氣袋，在吸附穿透時間過長會導致氣袋氣體不足時，需再更換採氣袋，為避免吸附試驗中斷，建議後續可使用連續配置氣體濃度之氣體恆定量儀器進行測試，才能推估吸附劑吸附量。
- (二) 脫附試驗之因需透過烘箱進行吸附劑加熱，建議後續可加入加溫脫附

氣體一起進行脫附試驗，較與實場之設計一致。

(三) 隨著本計畫濃縮系統的逐步建立，電腦模擬也需配合實驗參數，進行更相符的模擬結果。

捌、參考文獻

1. 蔡禹昇，2015，開發以 ANSYS-Fluent 為架構之數值模擬法探討行星式 MOCVD 反應腔體內之三維氣體流場，國立中央大學／機械工程學系，博士論文。
2. 李志萍，2004，旋轉窯焚化爐操作特性及應用於處理事業廢棄物之研究。(博士)，國立臺灣大學／生物產業機電工程學研究所，博士論文。
3. 施孟豪，2015，模擬利用水熱處理進行有害事業廢棄物的資源化技術成效，國立屏東科技大學環境工程與科學系所，碩士論文。
4. 賴嘉祥，1999，流體化床焚化爐二相流模擬分析，國立中山大學環境工程研究所，碩士論文。
5. 陳家福，2016，CFD_FLUENT 模擬應用於不同設置位置之 UVGI 淨化設備對細菌淨化效果之差異性探討，明志科技大學／環境與安全衛生工程系環境工程碩士班，碩士論文。
6. 林佳靜，2022，以數值模擬進行水力漩流參數分析提升分離效率之研究，中台科技大學環境與安全衛生工程系碩士班，碩士論文。
7. 林宇騰，2018，管狀碳源捕捉裝置之數值模擬，國立交通大學機械工程研究所，碩士論文。
8. 賴宏昇，2019，二氧化碳捕捉及脫附裝置之數值模擬，國立交通大學機械工程研究所，碩士論文。
9. 王昱位，2016，沼氣固體吸附脫硫及仔豬熱水保溫系統之研究，國立嘉義大學生物機電工程系研究所，碩士論文。
10. 柯明宏，2019，以 CFD 模擬氣體於固態脫硫反應柱流場變化之研究，國立嘉義大學生物機電工程系研究所，碩士論文。
11. 王嫻絮，2013，多孔材料用於揮發性有機物質的吸脫付特性研究，國立中

- 央大學化學系碩士班，碩士論文。
12. 許育婷，2021，焚化底渣合成環保吸附材料及其應用效能與特性研究，逢甲大學環境工程與科學學系碩士班，碩士論文。
 13. 藍海銘，2019，焚化底渣合成 MCM-41 同時吸附低濃度甲苯及甲醛之研究，明志科技大學，環境與安全衛生工程系環境工程碩士班，碩士論文。
 14. 曾婉婷，2016，以稻殼廢棄物資源化製備多孔洞矽基吸附材料及其應用於空氣汙染控制之研究，國立交通大學，環境工程系所，博士論文。
 15. 許榮男，2010，以金屬氧化物吸附劑處理毒性氫化物氣體之研究，國立交通大學，環境工程系所，博士論文。
 16. 黃聖樺，2006，Y 型沸石之製備與吸附性研究，義守大學生物技術與化學工程研究所碩士班，碩士論文。
 17. 工業技術研究院綠能與環境研究所，固定污染源揮發性有機物排放調查及減量推動計畫，期末報告(初稿)，環保署專案計畫，2022 年 11 月。
 18. 王卿昧，2003，奈米孔隙吸附劑吸附 VOCs 之吸附平衡研究，中原大學化學工程研究所，碩士論文。
 19. 尤皓鈺，2021，球狀活性碳對揮發性有機物的吸附與電熱再生，國立臺灣大學環境工程研究所，碩士論文。
 20. 蕭世盈，2020，球狀活性碳對揮發性有機物的吸附與微波再生，國立臺灣大學環境工程研究所，碩士論文。
 21. 呂伊涵，2020。半導體產業揮發性有機物以活性碳流體化床吸附 VOCs 處理效率之研究-以某二極體製造廠為例，國立臺北科技大學環境工程與管理研究所，碩士論文。

22. 吳光中、宋婷婷、張毅，2012，Fluent 基礎入門與案例精通，電子工業出版社 2012 年 08 月出版
23. Bhatia, S., Abdullah, A. Z., & Wong, C. T. (2009). Adsorption of butyl acetate in air over silver-loaded Y and ZSM-5 zeolites: Experimental and modelling studies. *Journal of hazardous materials*, 163(1), 73-81.
24. Brunauer, S., Emmett, P. H., & Teller, E. (1938). Adsorption of gases in multimolecular layers. *Journal of the American chemical society*, 60(2), 309-319.
25. Brunauer, S., Deming, L. S., Deming, W. E., & Teller, E. (1940). On a theory of the van der Waals adsorption of gases. *Journal of the American Chemical society*, 62(7), 1723-1732.
26. Carter, E. M., Katz, L. E., Speitel Jr, G. E., & Ramirez, D. (2011). Gas-phase formaldehyde adsorption isotherm studies on activated carbon: correlations of adsorption capacity to surface functional group density. *Environmental science & technology*, 45(15), 6498-6503.
27. Chen, D., Qu, Z., Sun, Y., & Wang, Y. (2014). Adsorption-desorption behavior of gaseous formaldehyde on different porous Al₂O₃ materials. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, 441, 433-440.
28. Chen, C., Wang, X., Zhang, J., Bian, C., Pan, S., Chen, F., ... & Xiao, F. S. (2015). Superior performance in catalytic combustion of toluene over mesoporous ZSM-5 zeolite supported platinum catalyst. *Catalysis Today*, 258, 190-195.
29. Cheng, X., Zhang, X., Zhang, M., Sun, P., Wang, Z., & Ma, C. (2017). A simulated rotary reactor for NO_x reduction by carbon monoxide over Fe/ZSM-5 catalysts. *Chemical Engineering Journal*, 307, 24-40.
30. Ciesla, U., & Schüth, F. (1999). Ordered mesoporous materials. *Microporous and mesoporous materials*, 27(2-3), 131-149.

31. Di Benedetto, A., Di Sarli, V., & Russo, G. (2010). Effect of geometry on the thermal behavior of catalytic micro-combustors. *Catalysis today*, 155(1-2), 116-122.
32. Di Benedetto, A., Landi, G., Di Sarli, V., Barbato, P. S., Pirone, R., & Russo, G. (2012). Methane catalytic combustion under pressure. *Catalysis Today*, 197(1), 206-213.
33. Dou, B., Hu, Q., Li, J., Qiao, S., & Hao, Z. (2011). Adsorption performance of VOCs in ordered mesoporous silicas with different pore structures and surface chemistry. *Journal of hazardous materials*, 186(2-3), 1615-1624.
34. Gao, M., Mao, M., Shi, J., Liu, Y., Chen, Q., & Li, J. (2022) A review of the treatment techniques of VOC. *Applied Mathematics and Nonlinear Sciences*.
35. Guo Y., Wang W., Li M.G., (2019). New VOCs governance technology - rotary RTO. *J. Coating and Protection*. 40(7),40-45.
36. Hirose, T., Okano, H., Yamada, K., Furuki, K., & Fujioka, Y. (2007, November). Continuous VOC (Volatile Organic Compounds) Concentrators by Thermal Swing Honeycomb Rotor Adsorbent. In *Extended Abstracts of 2007 AIChE Annual Meeting*.
37. Hu, Q., Li, J. J., Hao, Z. P., Li, L. D., & Qiao, S. Z. (2009). Dynamic adsorption of volatile organic compounds on organofunctionalized SBA-15 materials. *Chemical engineering journal*, 149(1-3), 281-288.
38. Iloeje, C. O., Zhao, Z., & Ghoniem, A. F. (2017). A reduced fidelity model for the rotary chemical looping combustion reactor. *Applied Energy*, 190, 725-739.
39. Kim, B. H., & Kang, M. (2004). Characteristics of chlorobenzene adsorption on oxidative treated activated carbon. *J Korea Soc Waste Manag*, 21(43), 319-327.
40. Lee, S. W., Park, H. J., Lee, S. H., & Lee, M. G. (2008). Comparison of adsorption

- characteristics according to polarity difference of acetone vapor and toluene vapor on silica–alumina fixed-bed reactor. *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*, 14(1), 10-17.
41. Lee, J. T., & Chen, S. J. (2014). Analysis of VOCs Removal Efficiencies by Zeolite Boiling Stone Rolling System. In *Applied Mechanics and Materials* (Vol. 446, pp. 1287-1291). Trans Tech Publications Ltd.
 42. Li, X., Zhang, L., Yang, Z., Wang, P., Yan, Y., & Ran, J. (2020). Adsorption materials for volatile organic compounds (VOCs) and the key factors for VOCs adsorption process: A review. *Separation and Purification Technology*, 235, 116213.
 43. Lin, Y. C., & Chang, F. T. (2009). Optimizing operating parameters of a honeycomb zeolite rotor concentrator for processing TFT-LCD volatile organic compounds with competitive adsorption characteristics. *Journal of hazardous materials*, 164(2-3), 517-526.
 44. Lin, C. L., Cheng, Y. H., Liu, Z. S., & Chen, J. Y. (2013). Adsorption and oxidation of high concentration toluene with activated carbon fibers. *Journal of Porous Materials*, 20, 883-889.
 45. Mirzaie, M., Talebizadeh, A. R., & Hashemipour, H. (2020). CFD simulation of benzene adsorption on pistachio activated carbon porous media. *Frontiers in Heat and Mass Transfer (FHMT)*, 14.
 46. Mirzaie, M., Talebizadeh, A. R., & Hashemipour, H. (2021). Mathematical modeling and experimental study of VOC adsorption by Pistachio shell–based activated carbon. *Environmental Science and Pollution Research*, 28, 3737-3747.
 47. Ncube, M., & Su, Y. (2012). The removal of volatile organic compounds from supply air using a desiccant column–A theoretical study. *International Journal of*

Sustainable Built Environment, 1(2), 259-268.

48. Ruthven, D. M. (1984). *Principles of adsorption and adsorption processes*. John Wiley & Sons.
49. Popova, M., Boycheva, S., Lazarova, H., Zgureva, D., Lázár, K., & Szegedi, Á. (2020). VOC oxidation and CO₂ adsorption on dual adsorption/catalytic system based on fly ash zeolites. *Catalysis Today*, 357, 518-525.
50. Sang, Z., Bo, Z., Lv, X., & Weng, Y. (2018). Numerical investigations of the influencing factors on a rotary regenerator-type catalytic combustion reactor. *Catalysts*, 8(5), 173.
51. Serrano, D. P., Calleja, G., Botas, J. A., & Gutierrez, F. J. (2004). Adsorption and hydrophobic properties of mesostructured MCM-41 and SBA-15 materials for volatile organic compound removal. *Industrial & engineering chemistry research*, 43(22), 7010-7018.
52. Sun, P., Cheng, X., Wang, Z., Lai, Y., Ma, C., & Chang, J. (2019). NO_x reduction by CO over ASC catalysts in a simulated rotary reactor: effect of reaction conditions. *Journal of the Energy Institute*, 92(3), 488-501.
53. Tang, J., Yu, C., Zhou, X., Yan, X., & Zhao, D. (2004). The anion sequence in the phase transformation of mesostructures templated by non-ionic block copolymers. *Chemical communications*, (19), 2240-2241.
54. Tao, W. H., Yang, T. C. K., Chang, Y. N., Chang, L. K., & Chung, T. W. (2004). Effect of moisture on the adsorption of volatile organic compounds by zeolite 13X. *Journal of Environmental Engineering*, 130(10), 1210-1216.
55. Tidahy, H. L., Siffert, S., Lamonier, J. F., Cousin, R., Zhilinskaya, E. A., Aboukaïs, A., ... & Leclercq, G. (2007). Influence of the exchanged cation in Pd/BEA and Pd/FAU zeolites for catalytic oxidation of VOCs. *Applied Catalysis B*:

Environmental, 70(1-4), 377-383.

56. Tefera, D. T., Jahandar Lashaki, M., Fayaz, M., Hashisho, Z., Philips, J. H., Anderson, J. E., & Nichols, M. (2013). Two-dimensional modeling of volatile organic compounds adsorption onto beaded activated carbon. *Environmental science & technology*, 47(20), 11700-11710.
57. Wang, J., Cao, S., Sun, Y., Meng, X., Wei, J., Ge, Y., ... & Mo, G. (2021). β Zeolite nanostructures with a high SiO₂/Al₂O₃ ratio for the adsorption of volatile organic compounds. *ACS Applied Nano Materials*, 4(12), 13257-13266.
58. Wang, X., Yuan, X., Han, S., Zha, H., Sun, X., Huang, J., & Liu, Y. N. (2013). Aniline modified hypercrosslinked polystyrene resins and their adsorption equilibriums, kinetics and dynamics towards salicylic acid from aqueous solutions. *Chemical engineering journal*, 233, 124-131.
59. Wang, B., Rui, M., Xue, G. C., & Zhang, L. (2017). Research progress on thermal oxidation technology for industrial organic waste gas. *Chemical Industry and Engineering Progeress*, 36(11), 4232-4242.
60. Yue, X., Wang, S., Li, D., Zhao, Y., Wang, S., & Ding, W. (2023). Experimental and Numerical Investigations on the Adsorption/Desorption Performance of Low-Concentration VOCs over H-ZSM-5 with Different SiO₂/Al₂O₃ Ratios. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 62(12), 5408-5419.
61. Yousef, R. I., El-Eswed, B., & Ala'a, H. (2011). Adsorption characteristics of natural zeolites as solid adsorbents for phenol removal from aqueous solutions: kinetics, mechanism, and thermodynamics studies. *Chemical engineering journal*, 171(3), 1143-1149.
62. Yan, Y., Wang, L., Zhang, H., & Zhang, X. (2017). Catalytic combustion of isopropanol over Co-Mn mixed oxides modified ZSM-5 zeolite membrane

- catalysts coated on stainless steel fibers. *Separation and Purification Technology*, 175, 213-221.
63. Yang, K., Sun, Q., Xue, F., & Lin, D. (2011). Adsorption of volatile organic compounds by metal–organic frameworks MIL-101: Influence of molecular size and shape. *Journal of hazardous materials*, 195, 124-131.
64. Yin, T., Meng, X., Wang, S., Yao, X., Liu, N., & Shi, L. (2022). Study on the adsorption of low-concentration VOCs on zeolite composites based on chemisorption of metal-oxides under dry and wet conditions. *Separation and Purification Technology*, 280, 119634.
65. Yang, J., Chen, Y., Cao, L., Guo, Y., & Jia, J. (2012). Development and field-scale optimization of a honeycomb zeolite rotor concentrator/recuperative oxidizer for the abatement of volatile organic carbons from semiconductor industry. *Environmental science & technology*, 46(1), 441-446.
66. Yoon, Y. H., & Nelson, J. H. (1984). Application of gas adsorption kinetics I. A theoretical model for respirator cartridge service life. *American industrial hygiene association journal*, 45(8), 509-516.
67. Zhang, X., Gao, B., Fang, J., Zou, W., Dong, L., Cao, C., ... & Wang, H. (2019a). Chemically activated hydrochar as an effective adsorbent for volatile organic compounds (VOCs). *Chemosphere*, 218, 680-686.
68. Zhang, X., Shi, X., Chen, J., Yang, Y., & Lu, G. (2019b). The preparation of defective UiO-66 metal organic framework using MOF-5 as structural modifier with high sorption capacity for gaseous toluene. *Journal of Environmental Chemical Engineering*, 7(5), 103405.
69. Zaitan, H., Manero, M. H., & Valdés, H. (2016). Application of high silica zeolite ZSM-5 in a hybrid treatment process based on sequential adsorption and

- ozonation for VOCs elimination. *Journal of Environmental Sciences*, 41, 59-68.
70. Zhao, F., Zhu, L., Wang, Z., Hou, Y., Chen, J., Wang, C., & Xu, D. (2021). Experimental and Numerical Investigation into the Heat-and Mass-Transfer Processes of n-Butane Adsorption on Activated Carbon. *ACS omega*, 6(27), 17162-17172.
71. ANSYS FLUENT 12.0/12.1 Documentation , <https://www.afs.enea.it/project/neptunius/docs/fluent/html/ug/node233.htm>