

# شبیه‌سازی جذب گاز دی‌اکسید کربن به وسیلهٔ محلول آبی منواتانول آمین در یک واکنشگاه لایه‌ریزان

ناصر مالکی<sup>۱</sup>، سروش زرین آبادی<sup>۲\*</sup>، علیرضا عظیمی<sup>۳</sup>، امیرحسین شهبازی کوتنائی<sup>۳</sup>

۱- دانشجوی دکتری مهندسی شیمی، گروه مهندسی شیمی، واحد ماهشهر، دانشگاه آزاد اسلامی، ماهشهر، ایران

۲- استادیار مهندسی شیمی، دانشکدهٔ فنی مهندسی، واحد اهواز، دانشگاه آزاد اسلامی، اهواز، ایران

۳- استادیار مهندسی شیمی، گروه مهندسی شیمی، واحد ماهشهر، دانشگاه آزاد اسلامی، ماهشهر، ایران

پیام‌نگار: [soroushzarinabadi@iauhvaz.ac.ir](mailto:soroushzarinabadi@iauhvaz.ac.ir)

## چکیده

در این مقاله شبیه‌سازی جذب گاز دی‌اکسید کربن توسط محلول آبی منواتانول آمین در یک واکنشگاه لایه‌ریزان به وسیلهٔ نرم‌افزار کمسول<sup>۱</sup> ارائه شده است. الگوی به‌کار برده شده برای شبیه‌سازی، جنبه‌های بسیاری از فرایندهای واقعی را که در هنگام جذب رخ می‌دهد در نظر گرفته است. فرآیندهای انتقال جرم، حرارت و هیدرودینامیک برای فاز مایع و گاز در نظر گرفته شده است و اثر ضریب انتقال جرم فاز گاز و ضریب انتقال حرارت در شبیه‌سازی لحاظ شده است. واکنش آمین با دی‌اکسید کربن درجه‌دو می‌باشد و در پروفایل سرعت، اثر تنش برشی لحاظ شده است. نتایج شبیه‌سازی نشان داد که فقط بخش بسیار کوچکی از ضخامت لایه ریزان (۰/۰۰۲mm) در انتقال جرم مشارکت می‌کند. در این تحقیق طول واکنشگاه شبیه‌سازی شده، یک متر و قطر داخلی آن ۰/۰۱۳۹ متر بوده است. شبیه‌سازی نشان می‌دهد که افزایش دبی مایع و گاز باعث افزایش میزان جذب گاز توسط محلول آبی MEA می‌شود.

تاریخ دریافت: ۹۷/۱۰/۰۹

تاریخ پذیرش: ۹۸/۱۱/۱۴

شماره صفحات: ۶ تا ۲۱

## کلیدواژه‌ها:

شبیه‌سازی، منواتانول آمین (MEA)، کمسول،

واکنشگاه لایه‌ریزان

## ۱. مقدمه

به نظر می‌رسد که سوخت‌های فسیلی هنوز یک جزء غالب از سبد انرژی جهانی است و نیاز بیشتری به روش‌های مستقیم پاسخ احساس می‌شود. همزمان، اتحادیهٔ اروپا و دولت‌های آن متعهد شده‌اند که تا سال ۲۰۲۰ در مقایسه با سال ۱۹۹۰ انتشار گازهای گلخانه‌ای را ۲۰٪ کاهش دهند. این هدف می‌تواند تا ۳۰٪ تحت شرایطی که توسط اتحادیهٔ اروپایی مشخص می‌شود افزایش یابد [۱]. اثر منفی گازهای گلخانه‌ای بر روی آب و هوا مشخص شده است که با

یکی از نتایج مخرب افزایش تقاضای انرژی جهانی، تغییر وضعیت آب و هوای زمین است. برای کاهش نتایج این افزایش تقاضا، سیاست‌گذاری‌های مختلفی از جمله کاهش انتشار گازهای گلخانه‌ای پذیرفته شده است. در چند سال اخیر، اساساً نفوذ منابع تجدیدپذیر انرژی به‌عنوان یک راه‌حل احتمالی، ترغیب‌کننده می‌باشد. بنابراین،

\* اهواز،

1. Comsol Multiphysics

مایع به‌سمت پایین، دیواره را خیس یا تر می‌کند و جریان گاز در جهت مخالف با مایع در تماس قرار می‌گیرد [۲].

بررسی فرآیند انتقال جرم در واکنشگاه لایه‌ریزان نشان می‌دهد که عوامل متعددی در آن مؤثر هستند؛ در این راستا می‌توان به موارد زیر اشاره کرد.

در موقعیت‌های متعدد بسیاری، مانند واکنش‌های بسپاری (پلیمری) کنترل‌شده توسط نفوذ، یا در فرآیندهای اندام‌شناختی و زیستی فراوانی و در سیستم‌های تخمیر و دفع مواد زائد، دانش انتقال جرم در جریان غیرنیوتونی اهمیت بسیار دارد [۳].

چاوان<sup>۱</sup> و همکارانش معادلهٔ همرفتی نفوذ را در شرایط همدما پایا، بدون واکنش و با خصوصیات فیزیکی ثابت حل کردند. آنها با استفاده از روش مقادیر ویژه و تابع ویژه، یک حل تحلیلی بدست آوردند. حل آنها به مایع‌های شبه پلاستیک که شاخص قانون توانی معکوششان (N) صحیح باشد محدود می‌شود [۳]. پدرس<sup>۲</sup> و همکارانش حلی تحلیلی از معادلهٔ دیفرانسیل حاکم برای جذب گاز در لایه‌ریزان آرام با واکنش همگن درجه اول و مقاومت انتقال جرم گاز ارائه کردند. آنها نیز از روش مقادیر ویژه و تابع ویژه استفاده کردند [۴].

مقایسه ای از میزان انتقال در لایهٔ موجی و صاف ارائه شده‌است که نشان‌دهندهٔ افزایش میزان انتقال جرم در لایهٔ موجی است [۷-۵]. دلیل اصلی این افزایش، وجود همرفتی متقاطع در جریان لایهٔ موجی است که در جریان لایه‌ای صاف ممکن نیست. فشار بخار بالاتر، ظرفیت محرکهٔ بالاتری را برای جذب موجب می‌شود و در نتیجه میزان جذب بالاتری حاصل می‌گردد. از آنجایی که عدد پکلت عملاً بزرگ است نفوذ فقط در جهت عمود بر جریان اهمیت دارد [۷].

خصوصیات انتقال جرم به‌سادگی به مؤلفه‌های کلی مانند عدد رینولدز و عدد اشmitt بستگی ندارد، درحالی‌که با رژیم موجی اساساً تغییر می‌کند [۸]. چرمیتی<sup>۳</sup> و همکارانش اثر دمای لایه به‌روی تولید انرژی را در نظر گرفتند [۹]. هیدرودینامیک لایه مانند توزیع سرعت و تغییرات ورتوسیتی<sup>۴</sup> در موقعیت‌های مختلف لایه‌ریزان می‌تواند انتقال جرم را بهبود دهد [۱۰].

افزایش میزان غلظت این گازها در جو زمین، آب و هوای زمین گرم‌تر خواهد شد و رفع گازهای گلخانه‌ای از منابع مختلف بیش‌ازپیش اهمیت می‌یابد بنابراین می‌توان استفاده از واکنشگاه لایه‌ریزان را به‌عنوان روشی مناسب برای کاهش گازهای گلخانه‌ای - مانند دی‌اکسید کربن - در نظر گرفت [۲].

جذب شیمیایی (یا جذب واکنشی) در واکنشگاه لایه‌ریزان، فرایندی است که در آن گاز با ترکیب شیمیایی و انتقال جرم جذبی، به‌وسیلهٔ فاز مایع جذب می‌شود. سیستم‌های پایه- آمینی، پایه-کربناتی، پایه- آبی یونی و آمونیاک مایع، سیستم‌های نمونه برای جذب شیمیایی هستند [۱].

جذب گازی با استفاده از یک جاذب مایع، یکی از عملیات‌های انتقال جرم معمول است که در صنایع برای جداسازی گازهایی که مفید، سمی یا از نظر محیط زیستی نامطلوب هستند، مورد استفاده قرار می‌گیرد. جداسازی دی‌اکسید کربن (CO<sub>2</sub>) از گازهای خروجی از دودکش، در نیروگاه‌های تولید برق فسیلی، صنایع دارویی، صنایع نفت و غیره، اقدامی در جهت کاهش اثر گازهای گلخانه‌ای تولیدشدهٔ بشر است که نیاز به استفاده از دستگاه‌های تماس گاز- مایع دارد. این دستگاه‌ها باید به صورت مؤثر CO<sub>2</sub> را جدا سازند، به‌نحوی که جریان گاز خروجی با میزان بسیار بالا انجام شود و هیچ‌گونه افت اختلاف فشار زیادی به‌روی جریان وارد نشود، آنچنان‌که نیاز به افزودن یک فرآیند فشرده‌سازی گاز خروجی باشد. بنابراین، برای درمان مقدار زیادی از گازهای فشار کم (نه خیلی بیشتر از فشار اتمسفری) که کاربرد دیگری ندارند، بسیار مهم است تماس دهنده‌های گاز- مایعی به‌نحوی شوند که نیازی به وارد کردن فشار به گازها برای برابر کردن افت فشارهای هیدرودینامیکی در داخل تماس‌دهنده نباشد و اجازه جذب مؤثر گاز را بدهد. برج‌های آکنده، به‌واسطهٔ بازدهی و ظرفیت بالا، به‌صورت گسترده در صنایع برای فرایندهای جداسازی و خالص‌سازی (مانند تقطیر و جذب) شامل تماس گاز و مایع مورد استفاده قرار می‌گیرند؛ اما برای فرایندهایی که شامل مقادیر زیادی از گازهای زائد صنعتی باشد، مناسب نیستند؛ زیرا افت فشار سمت گاز زیادی دارند و نسبت حجم به سطح تماس آنها کافی نیست. بنابراین با توجه به تمام طراحی‌های موجود، برای فرایندهای گازهای خروجی از دودکش و گازهای زائد صنعتی دیگر، تماس‌دهنده‌های لایه‌ای پیوسته، مفیدتر به‌نظر می‌رسند. این دستگاه‌ها، برج‌های عمودی هستند که در آنها جریان

1. V. V. Chavan  
2. Henrik Pedersen  
3. Imen Chermi  
4. Vorticity

## جدول ۱. مؤلفه‌های آزمایشگاهی و خصوصیات

شیمی فیزیکی سیستم CO<sub>2</sub>-MEA

$1/67 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$	$Q_G$ ، میزان جریان گاز
$1/04 \times 10^{-4} / 72 \times 10^{-4} \text{ m}^3/\text{s}$	$Q_L$ ، میزان جریان مایع
۲۹۸ K	T، دما
۱ atm	P، فشار
۱ m	L، طول ستون واکنشگاه
۱/۳۹ cm	d، قطر داخلی ستون واکنشگاه
$1/248 \text{ kg/m}^3$	$\rho_G$ ، چگالی مخلوط گازی
$1/72 \times 10^{-5} \text{ kg/m/s}$	$\mu_G$ ، گرانیوی مخلوط گازی
$2/41 \times 10^{-3} \text{ kg/m/s}$	$\mu_L$ ، گرانیوی مایع (30% MEA)
$1010 \text{ kg/m}^3$	$\rho_L$ ، چگالی مایع
$1/1 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$	$D_B$ ، ضریب نفوذ برای MEA در فاز مایع
$1/67 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$	$D_G$ ، ضریب نفوذ برای CO <sub>2</sub> در فاز گاز
$1/42 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$	$D_A$ ، ضریب نفوذ برای CO <sub>2</sub> در فاز مایع
$0/316 \times 10^{-3} \text{ kmol/m}^3 \text{ kPa}$	H <sub>0</sub> ، ثابت قانون هنری
0/4۸۳۷ W/m K	k <sub>f</sub> ، ضریب هدایت گرمایی
۶۵۰۰ kJ/kmol	-ΔH <sub>R</sub> ، حرارت واکنش
۱۹۵۰۰ kJ/kmol	-ΔH <sub>S</sub> ، حرارت انحلال

در این مقاله، هدف شبیه‌سازی فرایند جذب گاز دی‌اکسید کربن توسط محلول آبی مونو اتانول آمین در واکنشگاه لایه‌ریزان است. همچنین تأثیر مؤلفه‌های عملیاتی بر فرآیند جذب شبیه‌سازی شده و اندازه ضخامت از مایع که در فرآیند جذب مشارکت می‌نماید، محاسبه شده‌است. به منظور مقایسه نتایج شبیه‌سازی با شرایط واقعی، از داده‌های تجربی منبع شماره ۲ استفاده شده‌است. مرحله بعدی تحقیق بررسی فرآیند جذب دی‌اکسید کربن، توسط دی‌اتانول آمین (DEA) در واکنشگاه لایه‌ریزان می‌باشد و ارائه معادله‌ای تجربی برای ضریب انتقال جرم در محدوده رینولدز گاز و مایع آرام است.

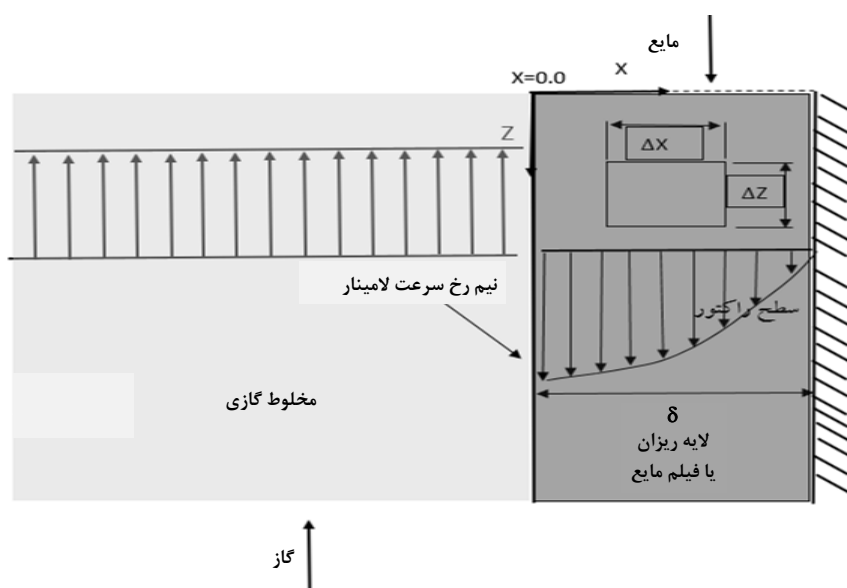
## ۲. توصیف کیفی الگو

الگو در شکل (۱) نمایش داده شده‌است.

در پایین واکنشگاه، گاز و مایع برای نخستین بار با یکدیگر در تماس قرار می‌گیرند و از آنجایی که بیشترین اختلاف غلظت در سطح تماس وجود دارد، انتقال جرم بسیار بالا است. این شرایط از پایین تا بالای واکنشگاه ادامه دارد، بنابراین وقتی جریان مخالف و موازی مقایسه شوند، انتقال جرم در جریان مخالف بیشتر می‌باشد [۱۱].

## ۳. شرایط سیستم

خصوصیات شیمی فیزیکی مورد نیاز برای مدل و شرایط آزمایشگاهی سیستم در جدول (۱) آورده شده‌است:



شکل ۱. واکنشگاه لایه‌ریزان و سیستم مختصات مربوطه.

$$r_{CO_2} = -k_2 C_{CO_2} C_{MEA} \quad (6)$$

این عبارت می‌تواند جنبش‌شناسی درجه اول نسبت به آمین، مشاهده شده در محلول آبی MEA را توضیح دهد. آمین‌های درجه اول مانند MEA به راحتی با دی‌اکسید کربن واکنش می‌دهند و کاربامیت پایدار شکل می‌گیرد و بارگذاری دی‌اکسید کربن با توجه به استوکیومتری واکنش ۰/۵ مول دی‌اکسید کربن به ازای یک مول از آمین می‌باشد. ثابت میزان واکنش درجه دو  $k_2$  برای  $CO_2$ -MEA از رابطه مشخص شده به وسیله هیگاتا<sup>۳</sup> و همکارانش (۱۹۷۹) معین می‌شود:

$$\log k_2 = 10.99 - \frac{2152}{T} \quad (7)$$

معادله زیر برای محاسبه ضریب انتقال جرم گاز ( $k_G$ ) استفاده می‌شود:

$$Sh_G = 0.0387 Re_G^{0.66} Re_L^{0.115} Sc_G^{0.5} \quad (8)$$

این معادله برای  $Re_G \in [115; 350]$  و  $Re_L \in [4; 32]$  در  $298 K$  معتبر است [۲]. وابستگی به  $Re_L$  احتمالاً به واسطه تغییرات در سطح تماس دو فاز و افزایش آشفتگی فازهای سیال می‌باشد [۱۲].

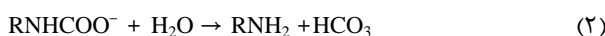
برای پیش‌بینی میزان انتقال جرم، فرض می‌شود که واکنش بین  $CO_2$  و MEA آنی باشد و واکنش کاربامید به بیکربنات در مقایسه با انتقال جرم آهسته است. عدد هتا محاسبه شده است و تفسیر آن برای رژیم جنبش‌شناسی بر مبنای نوشته‌های چاپ شده نشان دهنده یک واکنش آنی است. عدد هتا در مطالعه اخیر برای ضخامت فیلم ۰/۵mm بیشتر از ۳ می‌باشد و در ناحیه واکنش سریع است. این موضوع مشخص می‌کند که می‌توان واکنش را آنی در نظر گرفت. بر مبنای این موضوع و با توجه به حلالیت بالای  $CO_2$  در محلول آبی MEA، از مقاومت انتقال جرم فاز مایع صرف نظر می‌گردد. ضخامت لایه با انجام دادن موازنه تکانه جهش (مونتوم) در فاز مایع تخمین زده می‌شود. معادله‌های الگو به صورت زیر مشخص می‌شوند:

#### ۴. سیستم $CO_2/MEA$ : جنبش‌شناسی‌های (سینیتیک) واکنش

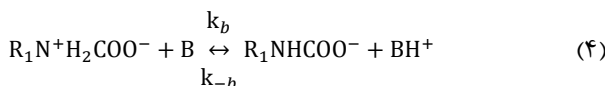
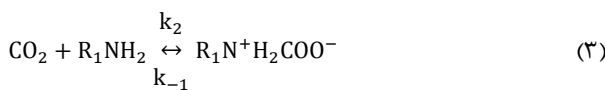
بر مبنای نوشته‌های چاپ شده و مطالعه‌های آزمایشگاهی، این نتیجه به دست آمده است که در نسبت مولی آمین/ $CO_2$  کمتر از ۰/۵ فقط واکنش تشکیل کاربامید<sup>۱</sup> رخ می‌دهد:



با این وجود، در نسبت‌های آمین/ $CO_2$  نزدیک به ۰/۵ لازم است که تبدیل کاربامید به بیکربنات در نظر گرفته شود.



مدل جنبش‌شناختی پذیرفته شده برای جذب  $CO_2$  در محلول آبی MEA، سازوکار زویترین<sup>۲</sup> نامیده می‌شود. در این الگوی واکنش بین  $CO_2$  و آلکانول آمین‌ها از طریق تشکیل زویترین و سپس پروتون‌زدایی توسط یک باز، B انجام می‌شود:



معادله میزان واکنش رفت کل با توجه به سازوکار ذکر شده و فرض حالت شبه یکنواخت برای غلظت زویترین به دست می‌آید:

$$r_{CO_2} = -\frac{C_{CO_2} C_{MEA}}{1/k_2 + k_{-1}/k_2 \Sigma(k_b C_b)} \quad (5)$$

در معادله بالا  $C_{MEA}$  غلظت MEA و  $C_{CO_2}$  غلظت دی‌اکسید کربن می‌باشد. غلظت MEA ترم دوم در مخرج بسیار کوچک است و می‌توان از آن صرف نظر کرد. با در نظر گرفتن واکنش برگشت میزان واکنش ساده شده حاصل می‌شود:

3. Hikita

1. Carbamate  
2. Zwitterion

$$\tau_G = f\rho_G u_G^2 \quad (13)$$

در این معادله  $u_G$  سرعت گاز می‌باشد. ضریب اصطکاک  $f$ ، به وسیله رابطه پیشنهادی هن استوک و هانراتی<sup>۱</sup> ارزیابی می‌شود [۱۳]. در این رابطه بی‌نظمی‌ها در سطح لایه‌ریزان مایع در نظر گرفته شده‌است:

$$\frac{f}{2} = \begin{cases} \frac{8}{Re_G} & Re_G < 2000 \\ \frac{Re_G^{0.33}}{3050} & 2000 < Re_G < 4000 \\ \frac{0.04}{Re_G^{0.25}} & Re_G > 4000 \end{cases} \quad (14)$$

برای محاسبه طبیعت جریان دوفازی، ضریب اصطکاک برای  $Re_G > 4000$  که به وسیله رابطه بالا مشخص شده‌است، باید در عبارت  $(1 + 100F)$  ضرب شود. برای لایه، مایع آرام  $F$  از رابطه پایین به دست می‌آید:

$$F = \frac{\beta(Re_L) v_L \rho_L}{Re_G^{0.9} v_G \rho_G} \left[ 1 - \exp\left(-\frac{\tau_G}{\rho_L g \delta}\right) \right] \quad (15)$$

و

$$\beta = \left[ \left( 0.707 Re_L^{1/2} \right)^{2.5} + \left( 0.0379 Re_L^{0.9} \right)^{2.5} \right]^{0.4} \quad (16)$$

## II. موازنه جرم

۱. نفوذ در جهت  $z$  قابل اغماض است.
۲. خصوصیات فیزیکی مایع در کل سطح تماس مایع و گاز صرف نظر از تغییرات غلظت در هنگام جذب گاز دی‌اکسید کربن ثابت در نظر گرفته می‌شود.
۳. ضخامت لایه‌ریزان در مقایسه با قطر ستون واکنشگاه کوچک فرض می‌شود.
۴. لایه‌ریزان مایع نسبت به محور واکنشگاه متقارن است.
۵. حلالیت دی‌اکسید کربن در مایع واکنش‌دهنده و محصولات واکنش از قانون هنری تبعیت می‌کند.
۶. مایع واکنش‌دهنده در دمای کاری غیر فرار در نظر گرفته می‌شود.

## ۵. معادله‌های الگو

الگوسازی شامل سه فرآیند جرم، تکانه‌جهش و حرارت می‌شود تا بتوان اثر دما و غلظت را به روی میزان جذب مطالعه نمود. معادله‌های حاصل؛ هم معادله‌های دیفرانسیل معمولی (ODE) و هم معادله‌های دیفرانسیل جزئی (PDE) با طبیعت غیرخطی را در بر می‌گیرند.

معادله‌های دیفرانسیل مزدوج که برای واکنش زیر نوشته می‌شوند:

$$A(G) + bB(L) \rightarrow \text{محصول} \quad (9)$$

عبارتند از:

### فاز مایع

#### I. موازنه تکانه‌جهش

معادله دیفرانسیل حاکم که موازنه تکانه‌جهش را شرح می‌دهد، به صورت زیر است:

$$\frac{d\tau_{xz}}{dx} = \rho g \quad (10)$$

$$\text{At } x = 0 \quad \text{سطح تماس گاز و مایع} \quad \tau_{xz} = \tau_i = -\tau_G$$

$$\text{At } x = \delta \quad \text{سطح دیواره واکنشگاه} \quad u_i = 0$$

در این معادله  $\tau_{xz}$  مشخص‌کننده تنش برشی،  $\rho$  چگالی سیال و  $g$  شتاب ثقل زمین است. با اعمال شرایط مرزی توزیع سرعت ( $u_L$ ) به صورت معادله (۱۱) است:

$$u_L = \frac{g}{2\nu_L} \delta^2 \left( 1 - \left( \frac{x}{\delta} \right)^2 \right) - \frac{\tau_G \delta}{\mu_L} \left( 1 - \left( \frac{x}{\delta} \right) \right) \quad (11)$$

در این معادله  $\nu_L$  گرانیوی جنبشی مایع است. ضخامت لایه‌ریزان ( $\delta$ ) با استفاده از میزان حجمی جریان مایع که با انتگرال‌گیری از رابطه توزیع سرعت (بالا) بدست می‌آید، محاسبه می‌شود:

$$Q_L = \frac{\rho_L g}{3\mu_L} \delta^3 - \frac{\tau_G}{2\mu_L} \delta^2 \quad (12)$$

در این رابطه:

• برای آمین (A)

## II. موازنه انرژی [۱]

$$\frac{dw_G C_G T_G}{dz} = h_G (T_{x=0} - T_G) \quad (26)$$

در این معادله  $w_G$  دبی مولی گاز تقسیم بر محیط تر شده واکنشگاه است. از معادله‌های الگو و شرایط مرزی می‌توان متوجه شد که اثر  $h_G$  (ضریب انتقال حرارت فاز گاز) و  $K_G$  (ضریب انتقال جرم فاز گاز) در این الگو در نظر گرفته شده است.

بعضی از پژوهشگران لایه لایه‌ریزان را در جاذب گاز، غیرنیوتونی در نظر گرفته‌اند [۳ و ۴]. الگوهای مختلفی - از تحلیلی تا عددی - برای الگوسازی واکنشگاه لایه‌ریزان استفاده شده است [۲۴-۱۵ و ۱۱-۴].

## ۶. روش حل

حل ریاضی معادلات دیفرانسیل حاصل شده با استفاده از روش‌های تحلیلی امکان‌پذیر نیست و ناگزیر نیازمند استفاده از روش‌های عددی است که این کار با نرم‌افزار کمسول انجام می‌شود.

برای حل الگو، نرم‌افزار کمسول مالتی فیزیک نسخه ۵/۱ استفاده شده است؛ ابتدا هندسه الگو به صورت دو بعدی برای نرم‌افزار تعریف، سپس معادله‌های حاکم در واکنشگاه لایه‌ریزان با انتقال اجزای رقیق<sup>۲</sup>، انتقال حرارت در سیالات<sup>۳</sup>، و شکل ضریب مرزی PDE<sup>۴</sup> در نرم‌افزار مشخص شد. شرایط مرزی نیز برای هر بخش تعریف شد.

در حل عددی از مش با نوع از توزیع پیش تعریف شده<sup>۵</sup> استفاده می‌شود (توزیع ۱ در جهت x: تعداد المان‌ها ۲۰۰ و نسبت المان ۰/۰۱، توزیع ۲ در جهت z: تعداد المان‌ها ۵۰ و نسبت المان ۰/۰۱).

در نتیجه، حافظه و زمان محاسبه بهینه هستند.

از مطالعه پایا<sup>۶</sup> برای حل الگو استفاده شد.

در نرم‌افزار کمسول از روش المان محدود و حل‌کننده غیرخطی برای حل ماتریس ناهمگون حاصل از معادلات فرآیند جذب استفاده خواهد شد.

$$u_L \frac{\partial C_A}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ D_A \frac{\partial C_A}{\partial x} \right] - k C_A C_B \quad (17)$$

• برای دی‌اکسید کربن (B)

$$u_L \frac{\partial C_B}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ D_B \frac{\partial C_B}{\partial x} \right] - k C_A C_B \quad (18)$$

## III. موازنه انرژی

$$u_L \frac{\partial T}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left[ \alpha \frac{\partial T}{\partial x} \right] + \frac{\Delta H_R}{\rho c_p} k C_A C_B \quad (19)$$

شرایط مرزی عبارتند از:

برای دیواره یا  $x=\delta$

$$\frac{\partial C_A}{\partial x} = 0, \quad \frac{\partial C_B}{\partial x} = 0 \quad (20)$$

$$-k_\lambda \frac{\partial T}{\partial x} = U(T_{x=0} - T_R) \quad (21)$$

برای سطح تماس دو فاز یا  $x=\delta$

$$k_G(C_{AG} - C_A H_0) = -D_A \frac{\partial C_A}{\partial x}, \quad \frac{\partial C_B}{\partial x} = 0, \quad (22)$$

$$h_G(T - T_G) - k_\lambda \frac{\partial T}{\partial x} = (-\Delta H_S) D_A \frac{\partial C_A}{\partial x} \quad (23)$$

در  $z=0$

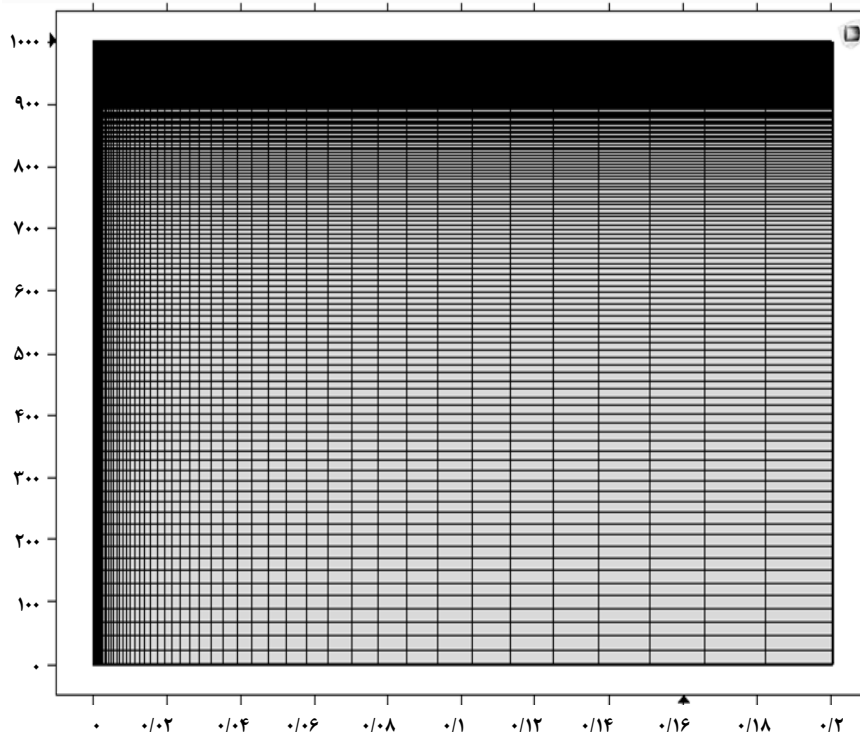
$$C_B = C_B^0, \quad T = T_0, \quad C_A = 0 \quad (24)$$

## فاز گاز

I. موازنه جرم

$$\frac{dw_G C_{AG}}{dz} = k_G(C_{AG} - H_0 C_A) \quad (25)$$

1. COMSOL Multiphysics 5.1
2. Transport of Diluted Species(tds)
3. Heat Transfer in Fluids(ht)
4. Coefficient Form Boundary PDE
5. Predefined Distribution Type
6. Stationary Study



شکل ۲. توزیع مش برای یک مایع لایه‌ریزان.

MEA نشان می‌دهند. در شکل (۶) رنگ مشکی نشان‌دهنده غلظت بالای دی‌اکسیدکربن است و واکنش در این منطقه با سرعت بالا در حال رخ دادن است. رنگ سفید، نشان‌دهنده غلظت صفر برای دی‌اکسیدکربن می‌باشد و هیچ واکنشی در این منطقه رخ نمی‌دهد. رنگ‌های بین مشکی و سفید، نشانگر غلظتی کمتر از دی‌اکسیدکربن در فاز مایع است و در این منطقه نیز واکنش با سرعت بالا رخ می‌دهد. بنابراین واکنش در سطح تماس گاز و لایه مایع آغاز شده و به درون فاز مایع ادامه می‌یابد. شکل (۷) نیز نشانگر تغییرات غلظت دی‌اکسیدکربن در داخل فاز مایع در راستای z است و برای داشتن تصویری بهتر از غلظت دی‌اکسیدکربن در فاز مایع و واکنش بین دی‌اکسیدکربن و MEA ارائه شده است. در این نمودار، مشخص است که غلظت دی‌اکسیدکربن در فاز مایع در بالای واکنشگاه نسبت به پایین واکنشگاه کاهش می‌یابد. همچنین همان‌گونه که مشخص است واکنش  $CO_2$  و آمین در ضخامت بسیار کمی از لایه مایع (۰/۰۰۲mm) رخ می‌دهد و بخش زیادی از ضخامت مایع در فرآیند جذب گاز مشارکت نکرده، بدون واکنش از پایین واکنشگاه خارج می‌شود.

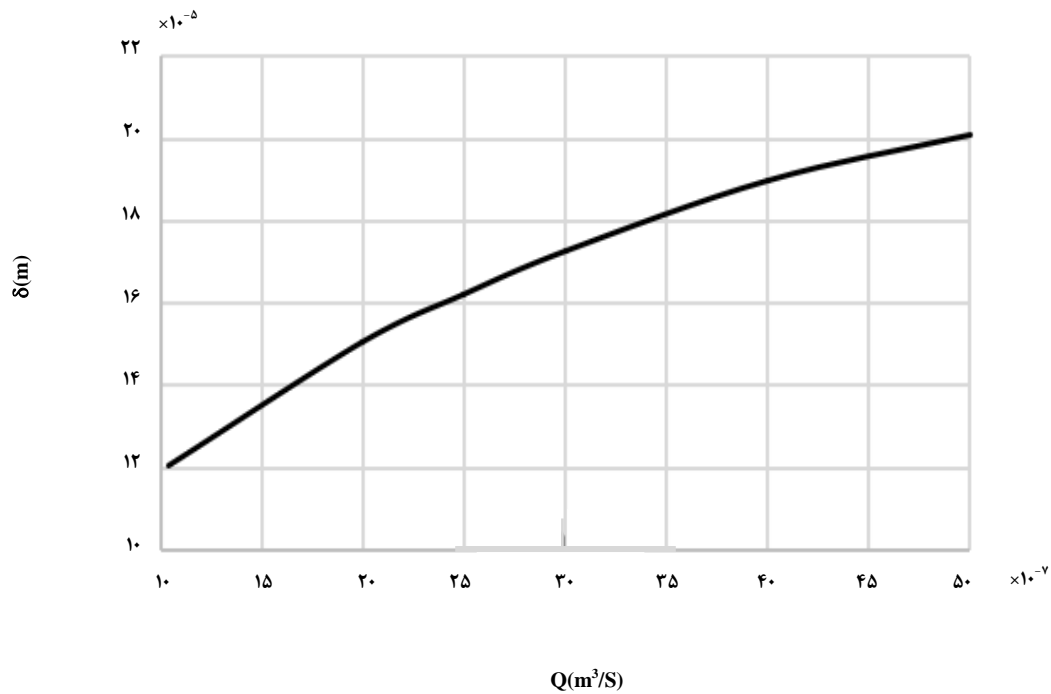
## ۷. نتایج و بحث

پروفایل سرعت در واکنشگاه به ضخامت مایع لایه‌ریزان وابسته است که با استفاده از روش حدس و خطا SSM<sup>۱</sup> و معادله (۱۲) می‌توان  $\delta$  را برای مقادیر مختلف جریان مایع محاسبه نمود و شکل (۳) را رسم کرد. از اندازه ضخامت نمایش داده شده می‌توان به این نتیجه رسید که میزان تغییرات ضخامت در محدوده جریان مایع، بسیار کم است. پروفایل سرعت با توجه به معادله (۱۱) با استفاده از نرم‌افزار کمسول در شکل (۴) رسم شده است. در معادله (۱۱) اثر تنش برشی به وسیله شاخص  $T_G$  در نظر گرفته می‌شود.

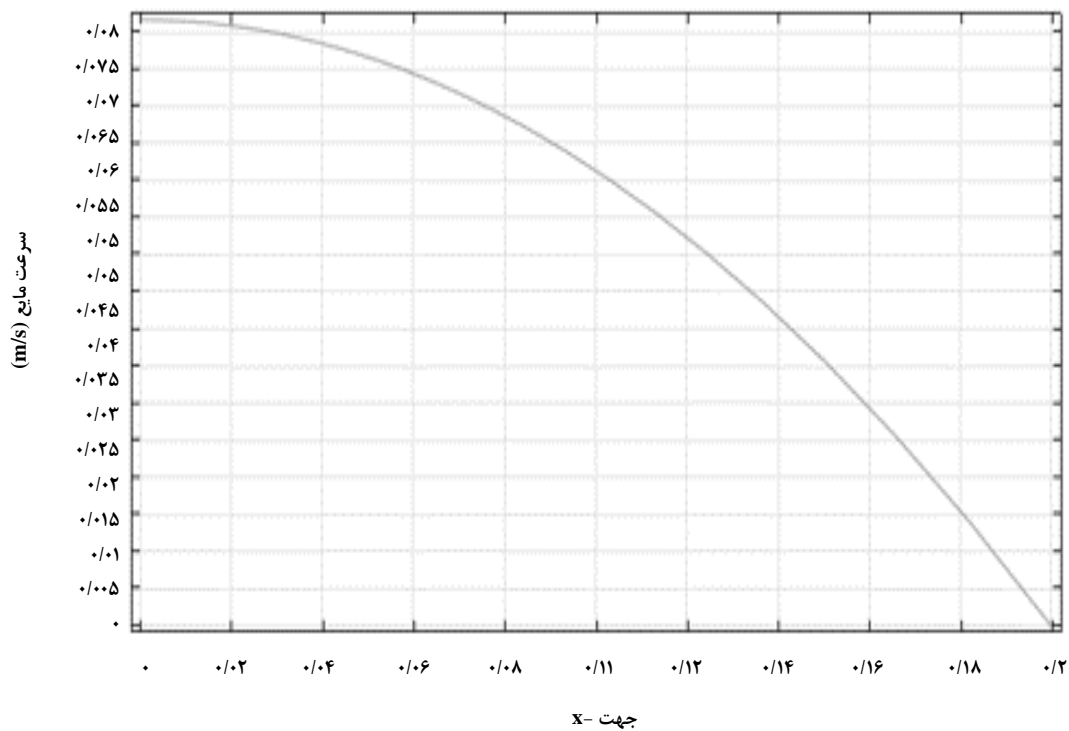
شکل (۵) نشان‌دهنده تغییرات غلظت دی‌اکسیدکربن فاز گازی در طول واکنشگاه می‌باشد. در این شکل مقدار دی‌اکسیدکربن از  $4/8 \text{ mol/m}^3$  در پایین واکنشگاه به  $1/5 \text{ mol/m}^3$  در وسط واکنشگاه رسیده است و نشان می‌دهد که بیشتر جذب در بخش کوچکی از واکنشگاه انجام می‌گیرد. دلیل این موضوع اختلاف غلظت گاز و آمین در بخش ورودی گاز به واکنشگاه می‌باشد که عامل اصلی انتقال جرم است.

شکل (۶) و شکل (۷) تغییرات غلظت دی‌اکسیدکربن را در لایه مایع

1. Sequential Search Method

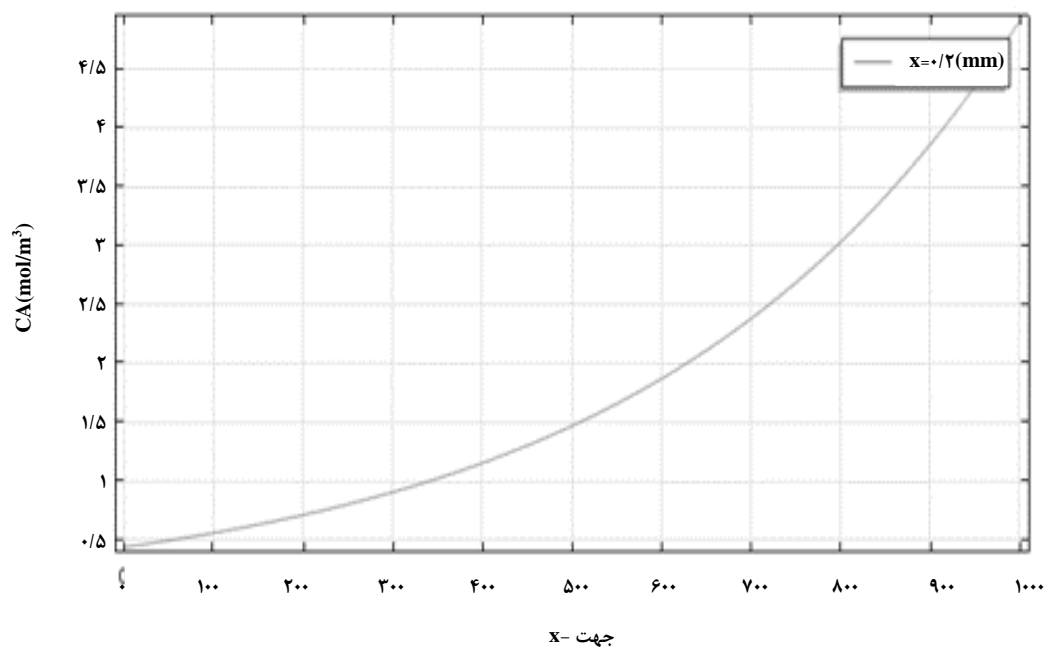


شکل ۳. جریان مایع ( $m^3/s$ ) در مقابل ضخامت لایه ریزان مایع (m).

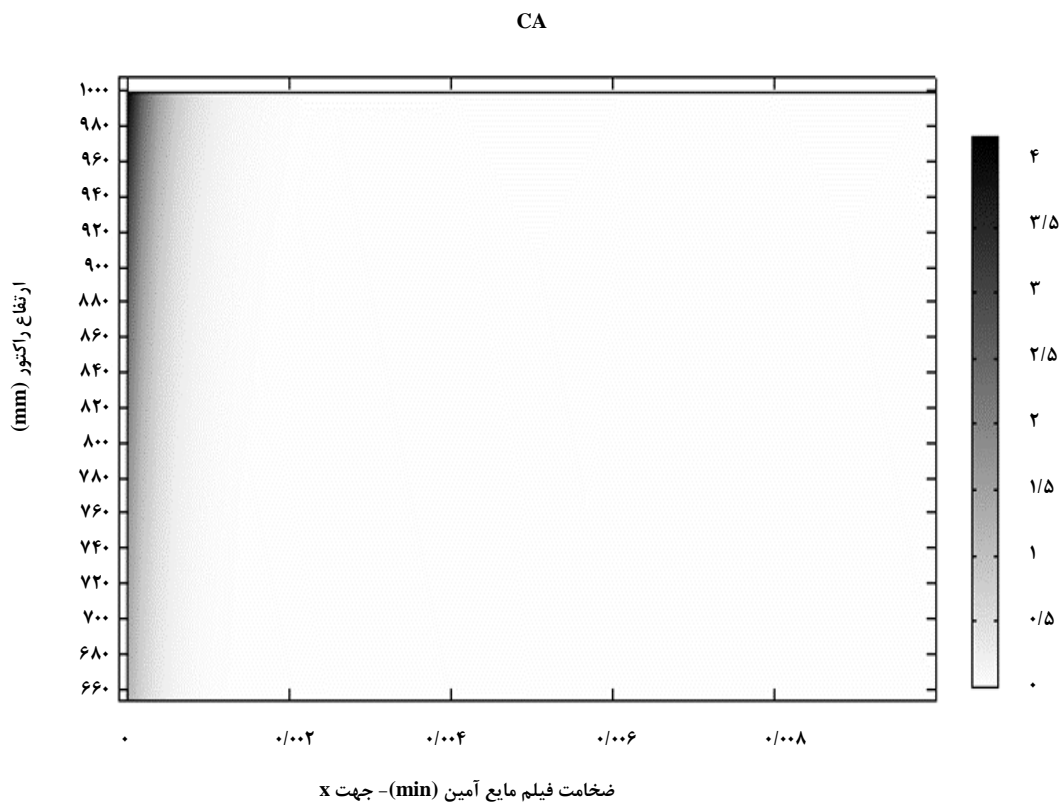


شکل ۴. پروفایل سرعت مایع (میزان جریان مایع  $5 \times 10^{-7} m^3/s$ ) در جهت x (mm) - کمسول.

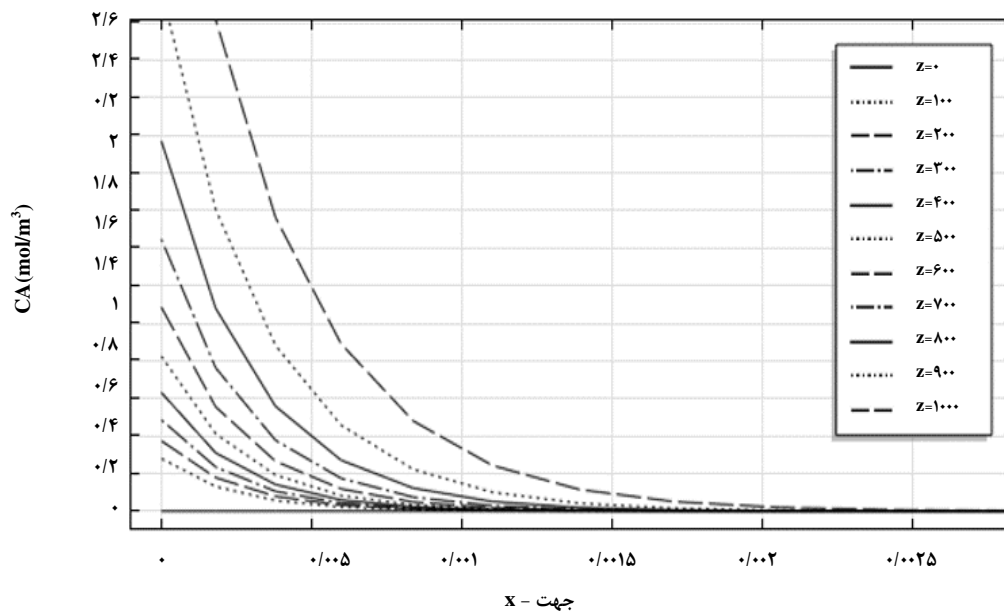




شکل ۵. غلظت CO<sub>2</sub> در فاز گاز (جریان مایع  $5 \times 10^{-7} \text{ m}^3/\text{s}$  - جریان گاز  $5 \times 10^{-5} \text{ m}^3/\text{s}$  - غلظت گاز ۱۲٪ - غلظت مایع ۳۰٪) - کمسول.



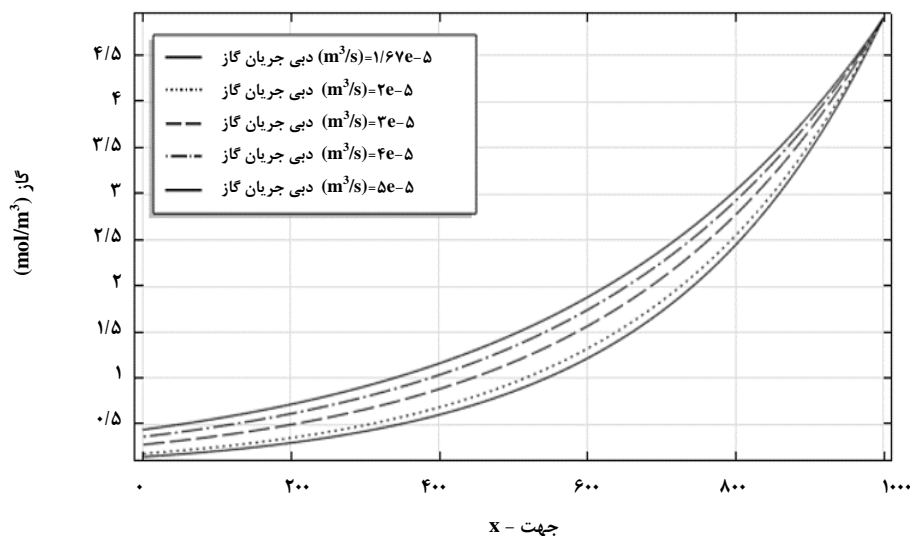
شکل ۶. غلظت CO<sub>2</sub> در لایه مایع محلول آمین در حالت بزرگ‌نمایی (جریان مایع  $5 \times 10^{-7} \text{ m}^3/\text{s}$  - جریان گاز  $5 \times 10^{-5} \text{ m}^3/\text{s}$  - غلظت گاز ۱۲٪ - غلظت مایع ۳۰٪) - کمسول.



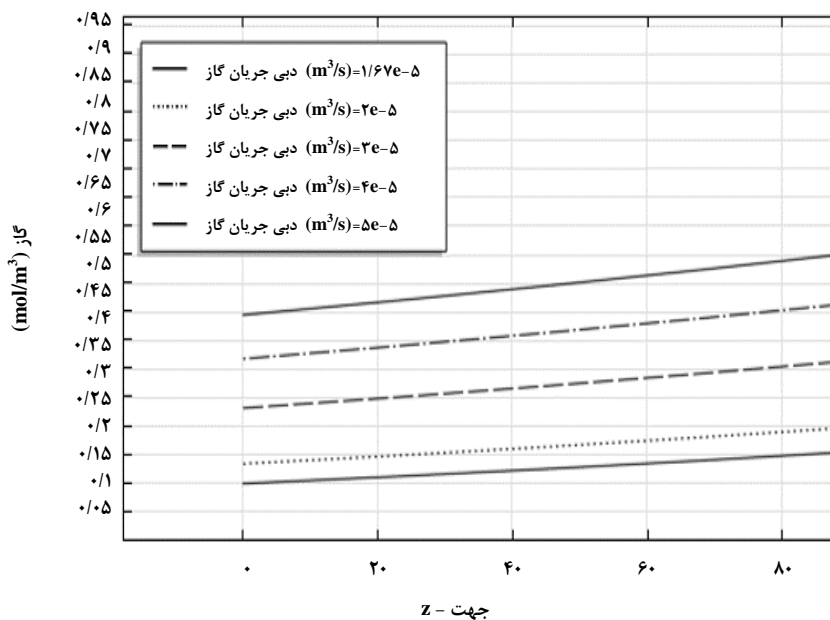
شکل ۷. غلظت  $\text{CO}_2$  در لایه مایع محلول آمین در حالت بزرگ‌نمایی (جریان مایع  $5 \times 10^{-7} \text{ m}^3/\text{s}$  - جریان گاز  $5 \times 10^{-5} \text{ m}^3/\text{s}$  - غلظت گاز ۱۲٪ - غلظت مایع ۳۰٪) - کمسول.

را نشان می‌دهد. افزایش دبی گاز باعث افزایش غلظت دی‌اکسید کربن در جریان گاز خروجی از واکنشگاه می‌شود؛ دلیل این افزایش در غلظت خروجی، کاهش زمان ماند دی‌اکسید کربن در واکنشگاه است.

تأثیر شاخص‌های مختلف عملیاتی بر عملیات جذب در شکل‌های بعدی بررسی شده‌است. شکل (۸) الی شکل (۱۱) تغییرات غلظت دی‌اکسید کربن در داخل واکنشگاه در فاز گاز را برای شرایط متفاوت عملیاتی مشخص می‌کند. شکل (۸) و شکل (۹) اثر دبی گاز



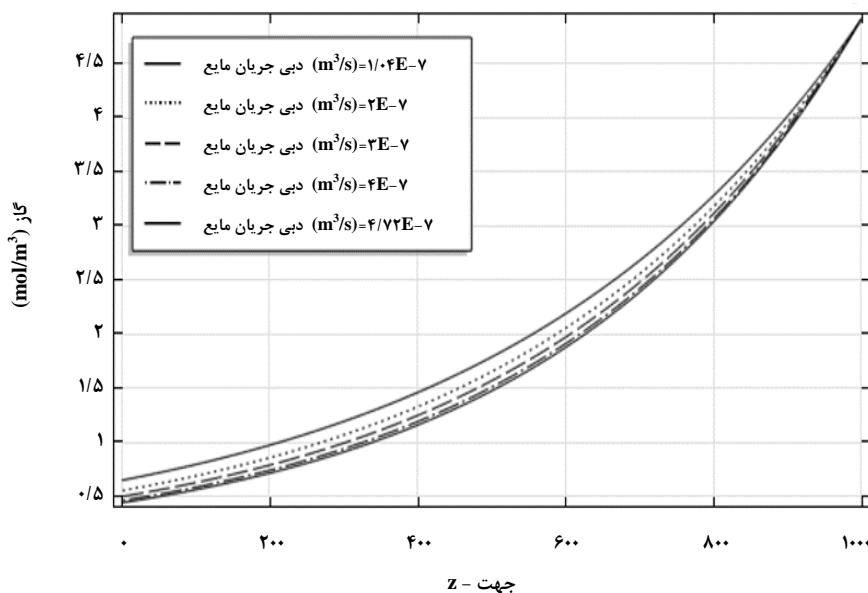
شکل ۸. تغییرات غلظت  $\text{CO}_2$  درون فاز گاز در واکنشگاه برای میزان جریان‌های مختلف گاز (جریان مایع  $5 \times 10^{-7} \text{ m}^3/\text{s}$  - غلظت گاز ۱۲٪ - غلظت مایع ۳۰٪) - کمسول.



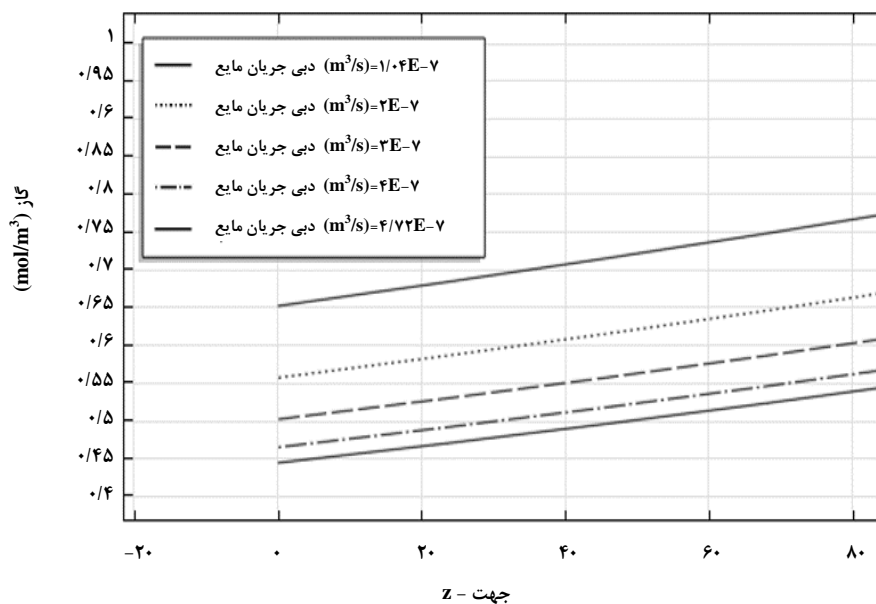
شکل ۹. تغییرات غلظت  $\text{CO}_2$  درون فاز گاز در واکنشگاه برای میزان جریان های مختلف گاز (جریان مایع  $5 \times 10^{-7} \text{ m}^3/\text{s}$  - جریان گاز  $5 \times 10^{-5} \text{ m}^3/\text{s}$  - غلظت گاز ۱۲٪ - غلظت مایع ۳۰٪ - در حالت بزرگنمایی) - کمسول.

شکل (۱۰) و شکل (۱۱) اثر دبی مایع را ارائه می دهد. افزایش دبی مایع باعث کاهش غلظت دی اکسید کربن در جریان گاز خروجی از واکنشگاه می شود. در این ارتباط، باید به افزایش ضخامت لایه ریزان

مایع با توجه به شکل (۳) اشاره کرد که موجب افزایش انتقال جرم می شود.

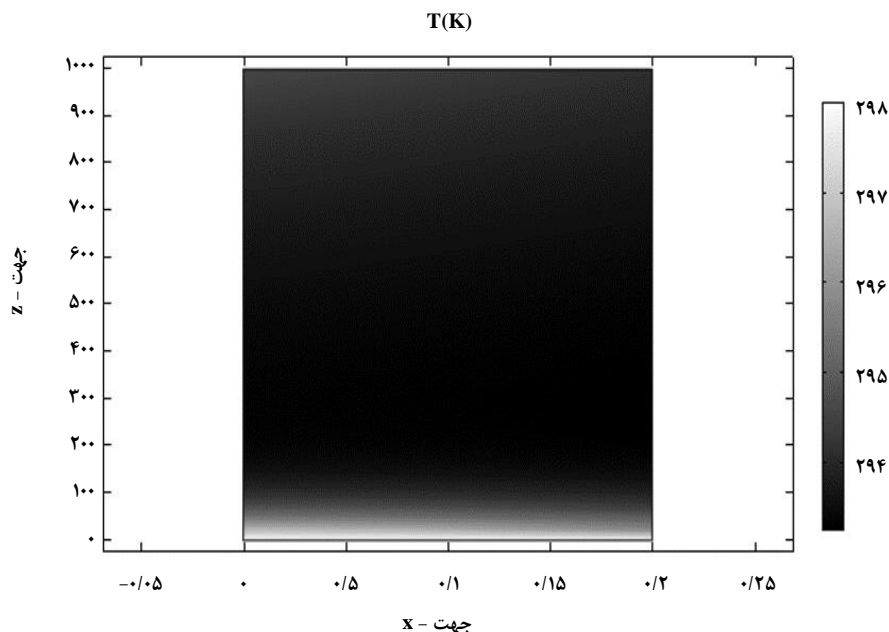


شکل ۱۰. تغییرات غلظت  $\text{CO}_2$  درون فاز گاز در واکنشگاه لایه ریزان برای میزان جریان های مختلف مایع (جریان مایع  $5 \times 10^{-7} \text{ m}^3/\text{s}$  - جریان گاز  $5 \times 10^{-5} \text{ m}^3/\text{s}$  - غلظت گاز ۱۲٪ - غلظت مایع ۳۰٪) - کمسول.



شکل ۱۱. تغییرات غلظت  $\text{CO}_2$  درون فاز گاز در واکنشگاه لایه‌ریزان برای میزان جریان‌های مختلف مایع (جریان مایع  $5 \times 10^{-7} \text{ m}^3/\text{s}$  - جریان گاز  $5 \times 10^{-5} \text{ m}^3/\text{s}$  - غلظت گاز ۱۲٪ - غلظت مایع ۳۰٪ - در حالت بزرگ‌نمایی) - کمسول.

شکل (۱۲) تغییرات دما در داخل ضخامت فاز مایع و در طول واکنشگاه را ارائه می‌دهد. همان‌گونه که مشاهده می‌کنید به‌واسطهٔ انتقال حرارت دمای مایع در وسط واکنشگاه به‌سمت دمای مایع سردکننده میل می‌نماید. بررسی‌های شبه‌سازی نشان می‌دهد که انتقال حرارت تأثیر زیادی به‌روی انتقال جرم و میزان جذب نهایی ندارد.



شکل ۱۲. دمای مایع در لایهٔ مایع محلول آمین (جریان مایع  $5 \times 10^{-7} \text{ m}^3/\text{s}$  - جریان گاز  $5 \times 10^{-5} \text{ m}^3/\text{s}$  - غلظت گاز ۱۲٪ - غلظت مایع ۳۰٪) - کمسول.

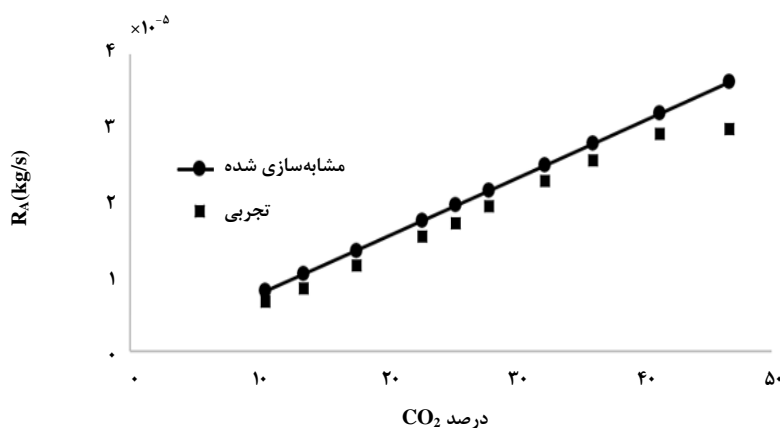
ارائه شده است. مشاهده می‌کنید با افزایش سرعت گاز در واکنشگاه میزان جذب نیز افزایش می‌یابد. این رفتار به واسطهٔ افزایش بی‌نظمی‌های ایجاد شده در سطح تماس دو فاز ناشی از افزایش  $Re_G$  است.

در شکل (۱۵) تغییرات میزان جذب در مقابل سرعت مایع ورودی ارائه شده است. همان‌گونه که مشاهده می‌کنید با افزایش سرعت مایع در واکنشگاه میزان جذب افزایش چندانی نمی‌یابد. دلیل این افزایش را می‌توان ناشی از افزایش ضخامت لایهٔ مایع دانست که به واسطهٔ آن گرادبان غلظت نیز افزایش خواهد یافت [۲].

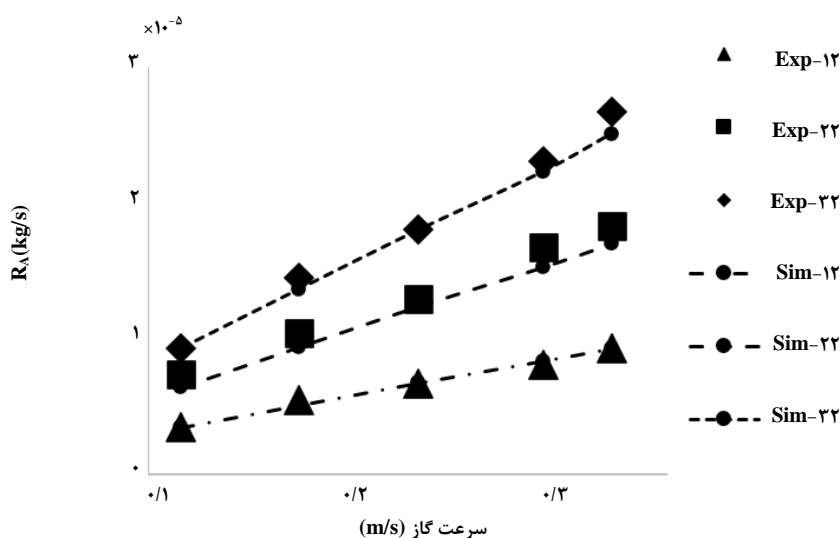
با استفاده از حاصل ضرب غلظت دی‌اکسید کربن گاز و دبی حجمی آن می‌توان میزان جذب گاز را برای شرایط مختلف آزمایشگاهی حساب کرد.

از شکل (۱۳) نقاط مشخص‌کنندهٔ داده‌های تجربی است و خطوط مشخص‌کنندهٔ شبیه‌سازی و داده‌های خروجی از نرم‌افزار می‌باشد) کاملاً مشخص است که با افزایش میزان دی‌اکسید کربن در گاز ورودی و در نتیجه افزایش فشار بخار آن، میزان جذب گاز نیز افزایش می‌یابد، زیرا افزایش مول دی‌اکسید کربن سبب کاهش مقاومت انتقال جرم سمت گاز می‌شود.

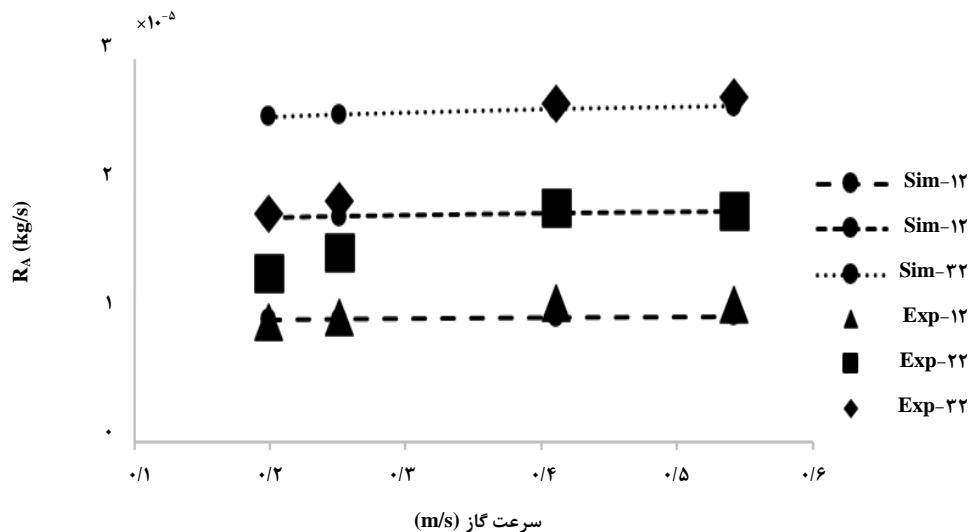
در شکل (۱۴) تغییرات میزان جذب در مقابل سرعت گاز ورودی



شکل ۱۳. مقایسهٔ میزان جذب پیش‌بینی شده ( $R_A$ ) با داده‌های تجربی [۲] (اثر تغییر درصد گاز ورودی).



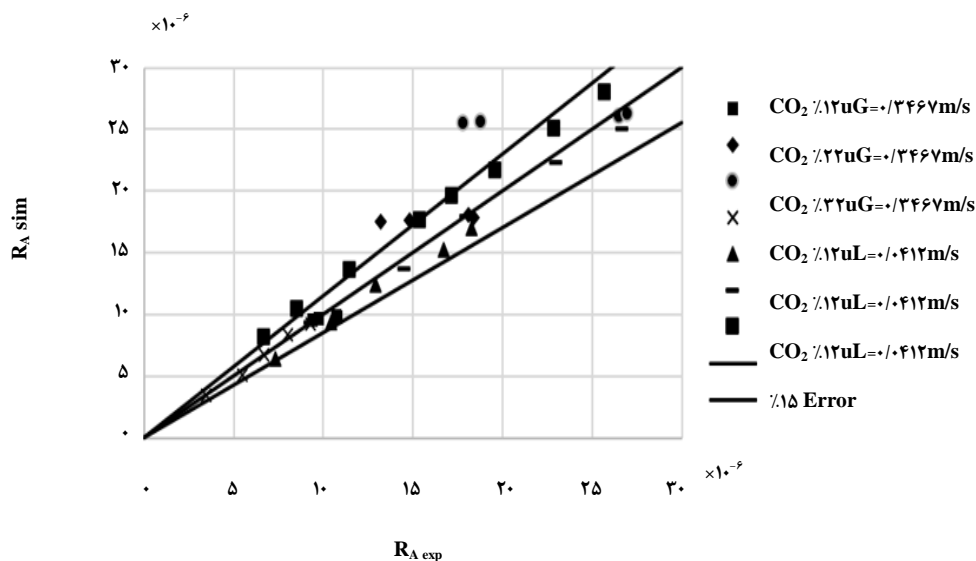
شکل ۱۴. مقایسهٔ میزان جذب پیش‌بینی شده ( $R_A$ ) با داده‌های تجربی [۲] (اثر تغییر میزان دبی گاز - سرعت مایع  $0.142 \text{ m/s}$  - غلظت مایع  $30\%$ ).



شکل ۱۵. مقایسه میزان جذب پیش‌بینی شده ( $R_A$ ) با داده‌های تجربی [۲] (اثر تغییر میزان دبی مایع) - سرعت گاز  $0.3467 \text{ m/s}$  - غلظت مایع  $30\%$ .

شده‌است. این رابطه از داده‌های آزمایشگاهی برای دی‌اکسید کربن  $12\%$  به دست آمده‌است.

شکل (۱۶) مقایسه‌ای از داده‌های تجربی و داده‌های شبه‌سازی شده توسط الگوی ریاضی را ارائه می‌دهد. توجه به این موضوع اهمیت دارد که در الگو برای محاسبه ضریب انتقال جرم از معادله (۸) استفاده



شکل ۱۶. مقایسه داده‌های تجربی [۲] با داده‌های شبه‌سازی شده توسط الگو<sup>۲</sup>.

1. Exp: مشابه سازی شده  
2. Sim: تجربی

- [6] Wasden, F. K., Dukler, A. E., "A Numerical Study of Mass Transfer in Free Falling Wavy Films", *AICHE Journal* September 1990 Vol. 36 No. 9, (1379-1390).
- [7] Conlisk, A. T., "Falling Film Absorption on a Cylindrical Tube", *AICHE Journal* Vol. 38 No. 11, (1716-1728), November (1992).
- [8] Yang, R., Jou, D., "Heat and Mass Transfer on the Wavy Film Absorption Process", *The Canadian journal of chemical engineering*, Vol. 71, (533-538) August (1993).
- [9] Sisoiev, G. M., Matar, O. K., Lawrence, C. J., "Absorption of gas into a wavy falling film", *Chemical Engineering Science* 60 827-838, (2005).
- [10] Chermiti, I., Hidouri N., Brahim, A. B., "Effect of a falling gas-liquid absorption film temperature on entropy generation", *Heat Mass Transfer* 49:1101-1108, (2013).
- [11] Yang, L., Du, K., Niu, X., Zhang, Y., Li, Y., "Numerical investigation of ammonia falling film absorption outside vertical tube with nanofluids", *International Journal of Heat and Mass Transfer* 79 241-250, (2014).
- [12] Danish, M., Sharma, R. K., Ali, S., "Gas absorption with first order chemical reaction in a laminar falling film over a reacting solid wall", *Applied Mathematical Modelling* 32 901-929, (2008).
- [13] Akanksha, Pant, K. K., Srivastava, V. K., "Mass transport correlation for CO<sub>2</sub> absorption in aqueous monoethanolamine in a continuous film contactor", *Chemical Engineering and Processing* 47 920-928, (2008).
- [14] Charpentier, J. C., "Mass Transfer Rates in Gas-Liquid Absorbers and Reactors, in *Advances in Chemical Engineering*", Vol. 11, Academic Press, New York, USA, pp 1-133, (1981).
- [15] Hikita, H., Asai, S., Katsu, Y., Ikuno, S., "Absorption of carbon dioxide into aqueous monoethanolamine solutions", *AICHE. J.* 25 793-800, (1979).
- [16] Hikita, H., Ishimi, K., Hara, M., Matsunami, T., "Gas Absorption in Laminar Falling Films of Pseudoplastic Liquids", *The Canadian journal of chemical engineering*, Vol 62, (352-356), June (1984).
- [17] Blauwhoff, P. M. M., Van Swaaij, W. P. M., "Simultaneous Mass Transfer of H<sub>2</sub>S and CO<sub>2</sub> with Complex Chemical Reactions in an Aqueous IX-isopropanolamine Solution", *Chem. Eng. Process.*, 19 67-83, (1985).
- [18] Gutierrez-Gonzalez, J., Mans-Teixido, C., Costa-Lopez, J., "Improved Mathematical Model for a Falling Film Sulfonation Reactor", *Ind. Eng. Chem. Res.*, Vol. 27, (1701-1707), No. 9, (1988).
- [19] Riazi, M. R., "Modeling of gas absorption into turbulent films with chemical reaction", *Gas. Sep. Purif.* Vol. 10. No. 1, pp. 41-46, (1996).

## ۸. نتیجه‌گیری کلی

برای کاهش غلظت CO<sub>2</sub> از گازهای خروجی دودکش، می‌توان از محلول آبی MEA (مونواتانول آمین) استفاده کرد. واکنشگاه لایه‌ریزان ابزاری بسیار مفید برای دستیابی بدین منظور است که شاخص‌های عملیاتی را می‌توان برای رسیدن به مقدار مطلوب، کنترل کرد. شبیه‌سازی مورد استفاده در این مقاله فرآیندهای انتقال جرم، حرارت و هیدرودینامیک برای فاز مایع و گاز را در نظر می‌گیرد و اثر ضریب انتقال جرم فاز گاز و ضریب انتقال حرارت در شبیه‌سازی را لحاظ می‌کند. شبیه‌سازی عددی واکنشگاه لایه‌ریزان با استفاده از محیط برنامه‌کسول مالتی فیزیکی ۱/۵ حل شده‌است و تصویر واضحی از واکنش رخ داده در واکنشگاه به دست داده‌است. افزایش دبی مایع و گاز باعث افزایش میزان جذب گاز توسط محلول آبی MEA می‌گردد، همچنین شبیه‌سازی نشان می‌دهد که ضخامت بسیار کمی از لایه مایع (۰/۰۰۲mm) در واکنش مشارکت می‌کند.

## ۹. تشکر و قدردانی

بایسته‌است از دانشگاه آزاد اسلامی واحد ماهشهر، به پاس زحمتهایی که برای نگارش و تهیه این مقاله پذیرا شده‌است، سپاسگزاری کنیم.

## مراجع

- [1] Koronaki, I. P., Prentza, L., Papaefthimiou, V., "Modeling of CO<sub>2</sub> capture via chemical absorption processes. An extensive literature review", *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 50 547-566, (2015).
- [2] Akanksha, Pant, K. K., Srivastava, V. K., "Carbon dioxide absorption into mono-ethanolamine in a continuous film contactor", *Chemical Engineering Journal* 133 229-237 (2007).
- [3] Chavan, V. V., Mashelkarr, R. A., "Gas Absorption in Falling Non-Newtonian Films", *Chem. Eng. J.* 4 223-228, (1972).
- [4] Pedersen, H., Prenosil, J. E., "Gas absorption in laminar falling films with first order homogenous reaction and gas phase mass transfer resistances", *Int. J. Heat Mass Transfer*. Vol. 24 pp. 299-304, (1981).
- [5]

1. COMSOL Multi-Physics 5.1

- [20] Dabir, B., Riazi, M. R., Davoudirad, H. R., "Modeling of falling film reactors", *Chemical Engineering Science*, Vol. 51, No. 11, pp. 2553-2558, (1996).
- [21] Jesús-Alfonso, T. O., Giovanni, M. M., Oscar-Yesid S. P., Francisco-José, S. C., "Mathematical Model of a Falling Film Reactor for Methyl Ester Sulfonation," *Chemical Product and Process Modeling*: Vol. 4: Iss. 5, Article 12, (2009).
- [22] Bo, S., Ma, X., Lan, Z., Chen, J., Chen, H., "Numerical simulation on the falling film absorption process in a counter-flow absorber", *Chemical Engineering Journal* 156 607–612 609, (2010).
- [23] Puxty, G., Rowland, R., Attalla, M., "Describing CO<sub>2</sub> mass transfer in amine/ammonia mixtures – no shuttle mechanism required", *Energy Procedia* 4 1369–1376, (2011).
- [24] Al-Malah, K. I., "Evaluation of Mass Transfer Coefficient of Gas Absorption into Falling Liquid Film", *Chem Eng Process Tech* 1(3): 1018, (2013).
- [25] Hu, J., Yang, X., Yu, J., Daia, G., "Numerical simulation of Carbon Dioxide (CO<sub>2</sub>) Absorption and Interfacial Mass Transfer across Vertically Wavy Falling Film", *Chem. Eng. Sci.*, 116, pp. 243-253, (2014).