

مدل فرایند جذب کربن دی اکسید در برج‌های آکنده به‌وسیله‌ی محلول ۲-آمینو-۲-متیل ۱-پروپانول

سپهر صدیقی^{۱*} و سید رضا سیف محدثی^۲

۱- دکتری، مسئول پروژه، واحد مهندسی واکنش‌های کاتالیستی، پژوهشکده کاتالیست و نانوفناوری، پژوهشگاه صنعت نفت، تهران، ایران
۲- فوق لیسانس، مسئول طرح، واحد مهندسی واکنش‌های کاتالیستی، پژوهشکده کاتالیست و نانوفناوری، پژوهشگاه صنعت نفت، تهران، ایران

دریافت: آبان ۱۳۹۱، بازنگری: آذر ۱۳۹۱، پذیرش: آذر ۱۳۹۱

چکیده: در این پژوهش فرایند جذب گاز کربن دی اکسید در برج‌های آکنده توسط حلال ۲-آمینو-۲-متیل پروپانول، مدل‌سازی و اعتبار سنجی شده است. مدل مبتنی بر نرخی که در این پژوهش ارائه شده، انتقال جرم و گرما، گرمای آزاد شده توسط جذب و تبخیر، حلالیت کربن دی اکسید در محلول آمین، واکنش جذب، ضریب افزونی و تعادل ترمودینامیکی در سطح تماس بین فاز گاز و مایع را در نظر می‌گیرد. معادلات جبری و دیفرانسیلی مدل در محیط برنامه "مطلب" پیاده‌سازی شده و با توابع مناسب به صورت یک مسأله مقدار مرزی به روش عددی حل شده است. نتیجه‌های به‌دست آمده از این مدل با اطلاعات آزمایشگاهی به‌دست آمده از یک برج پایلوت و همچنین با نتیجه‌های به‌دست آمده از مدل ارائه شده توسط پژوهشگر دیگر برای همین فرایند با شرایط مشابه، مقایسه شده‌اند. نتیجه‌ها نشان دادند که مدل ارائه شده در این پژوهش به‌خوبی با نتیجه‌های آزمایشگاهی مطابقت داشته و مدل، تغییرات بار آمین، پروفایل دمای آمین و جز مولی کربن دی اکسید در فاز گاز در طول برج را به ترتیب با خطای میانگین ۱۲،۳۳، ۲،۴۷ و ۸،۴۶ درصد پیش‌بینی می‌کند. همچنین خطای مطلق پیش‌بینی این مدل در مقایسه با مدل ارائه شده توسط پژوهشگری دیگر برای برج جذب مشابه، برای پیش‌بینی جز مولی کربن دی اکسید و دمای محلول آمین به ترتیب ۱۳،۰۹۴ و ۶،۵۶ کاهش یافته است.

واژه‌های کلیدی: مدل‌سازی، کربن دی اکسید، مدل نرخ انتقال جرم، جذب واکنشی، ۲-آمینو-۲-متیل ۱-پروپانول، برج جذب

مقدمه

جریان گاز از طریق ایجاد نیروهای بین مولکولی در فاز مایع حل می‌شوند اما در فرایند جذب شیمیایی در فاز مایع به‌طور عمومی از محلول‌های آلکانول آمین به‌عنوان جاذب استفاده می‌شود. این مواد به‌دلیل ارزان بودن و نیز خاصیت واکنش جذب در صنعت شیرین‌سازی گاز به‌طور گسترده‌ای مورد استفاده قرار گرفته‌اند. محلول‌های آمین مورد استفاده در صنعت به‌عنوان جاذب، مونو اتیل آمین^۱، دی اتیل آمین^۲، تری اتیل آمین^۳، متیل دی اتیل آمین^۴ و ۲-آمینو-۲-متیل پروپانول^۵ هستند که اکثر پژوهش‌های انجام شده نیز با استفاده از این آمین‌ها یا مخلوطی از آن‌ها بوده است [۲].

حذف عامل‌های اسیدی از قبیل کربن دی اکسید در مخلوطی از گازها به‌ویژه در گاز طبیعی به‌دلیل ایجاد خوردگی یا یخ‌زدگی در شبکه انتقال یا تجهیزات فرایندی، بسیار حائز اهمیت است. جذب در فاز مایع متداول‌ترین روش تجاری شیرین‌سازی گاز در پالایشگاه‌ها و فرایندهای شیرین‌سازی گاز به‌ویژه برای جذب گاز کربن دی اکسید است که کمترین هزینه‌های عملیاتی و فرایندی را به‌همراه دارد [۱]. فرایندهای جذب در مایع به دو دسته فیزیکی و شیمیایی تقسیم می‌شوند. در روش جذب فیزیکی ناخالصی‌های

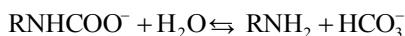
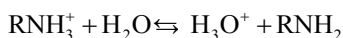
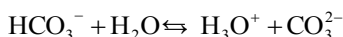
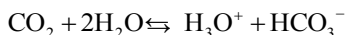
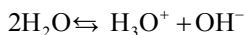
1. Monoethanolamine (MEA) 2. Diethanolamine (DEA) 3. Triethanolamine (TEA) 4. Methyl-diethanolamine (MDEA)
5. 2-amino-2-methyl-1-propanol (AMP)

پژوهش‌های تونتیواچوتیکول^۵ [۶] است که در آن دقت مدل پانديا در شبیه‌سازی سامانه جذب کربن دی اکسید در مونو اتیل آمین مورد بررسی قرار گرفت. در دیگر پژوهش‌های انجام شده در این زمینه، آلاتیکی^۶ و همکارانش در سال ۱۹۹۳ [۷] به مدل‌سازی فرایند جذب کربن دی اکسید در آمینو متیل پروپانول پرداختند که نتیجه‌های به‌دست آمده از این پژوهش نیز اعتبار سنجی نشد. آبولدهیر^۷ و همکارانش [۸] مدل پانديا را با فرض ثابت بودن دبی گاز و مایع در طول برج آکنده و عدم تغییر ویژگی‌های فیزیکی ترکیب‌ها با دما، به‌وسیله‌ی اطلاعات تجربی منتشر شده در مراجع [۹] مورد بررسی قرار دادند که نتیجه‌ها، مطابقت قابل قبول مدل با داده‌های تجربی را نشان می‌داد. در سال ۲۰۰۶، گابریلسن^۸ و همکارانش [۱۰] پس از جمع‌آوری داده‌های تجربی از برج آکنده جذب کربن دی اکسید در محلول مونو اتیل آمین، مدل فرایند جذب را بر اساس حل معادلات موازنه جرم و انرژی، نفوذ مولکولی اجزا گاز در مایع، واکنش‌های جذب و تغییر دبی مایع و گاز بر اثر تبخیر و انتقال جرم بین فازها ارائه دادند که در مقایسه با پژوهش‌های مشابه، خطای آن در مقایسه با داده‌های آزمایشگاهی مورد قبول بوده است [۱۱]. مشابه با روش ارائه شده توسط گابریلسن، فرایند جذب کربن دی اکسید در مونو اتانول آمین توسط سایمون^۹ و همکارانش [۱۲] گزارش شده است که میانگین خطای مدل در مقایسه با نتیجه‌های به‌دست آمده از پایلوت، قابل قبول است، هرچند در این پژوهش، مقایسه فقط برای نمونه برداری متغیرها از ابتدا، انتها و میانه برج آکنده انجام شد. در این پژوهش نیز، به منظور کامل‌تر نمودن فعالیت‌های انجام شده در زمینه مدل‌سازی فرایند جذب گاز در آلکانو آمین‌ها، فرایند جذب گاز کربن دی اکسید در محلول ۲-آمینو ۲-متیل ۱-پروپانول، بر اساس موازنه همزمان جرم و انرژی در فازهای مایع و گاز با در نظر گرفتن واکنش‌ها و نفوذ مولکولی اجزا در دو فاز گاز و مایع، مدل‌سازی شده است که ویژگی‌های فیزیکی کلیه اجزا در طول برج با توجه به دمای فازها، متغیر فرض می‌شود. برای تخمین این ویژگی‌ها از بانک اطلاعاتی اسپن پلاس^{۱۰} استفاده شده

در حال حاضر بسیاری از شبیه‌سازی‌های تجاری مورد استفاده در فرایند شیرین‌سازی گاز طبیعی، بر اساس مدل‌های تقریبی با فرضیات ساده تهیه شده‌اند. اگر چه این شبیه‌سازی‌ها عملکرد قابل قبول و رضایت بخشی برای شیرین‌سازی گاز با لالال تک آمین و لالال‌های خاص دارد ولی به طور یقین نمی‌تواند اثرات نفوذ مولکولی، سینتیک و ترمودینامیک واکنش‌های جذب گاز ترش را برای مخلوطی از لالال‌ها و حتی لالال‌های جدید بررسی نماید. در نتیجه برای طراحی منطقی، افزایش مقیاس، بهینه‌سازی و کنترل واحدهای شیرین‌سازی گاز با لالال‌های ترکیبی، ضروری است از مدل مبتنی بر نرخ^۱ شامل تعادل ترمودینامیکی، نرخ انتقال جرم و گرما و واکنش‌های موجود در فرایند، بهره‌گیری شود. برج‌های آکنده به دلیل آن که انتقال جرم و گرما بالایی را بین فاز گاز و مایع ایجاد می‌کنند، بیشترین استفاده را در فرایندهای جذب دارا هستند [۱]. در نتیجه، مدل‌سازی فرایند جذب کربن دی اکسید در آلکانو آمین‌ها به‌وسیله‌ی برج جذب آکنده، بسیار مورد توجه پژوهشگران بوده و پژوهش‌های بسیاری، از جذب گازها در محلول‌های آمین در مراجع ارائه شده‌اند. در اولین پژوهش ارائه شده در این زمینه، تریبال^۲ در سال ۱۹۶۹ [۳] برای جذب گازها در برج‌های آکنده، مدلی را بر اساس موازنه جرم و انرژی ارائه داد که فقط شامل جذب فیزیکی بوده و جذب همراه با واکنش را شامل نمی‌شد. به منظور تکمیل این کار، پانديا^۳ [۴] با حل معادلات همزمان جرم و انرژی، در نظر گرفتن واکنش‌های جذب و ایده آل فرض کردن محلول مایع و گاز، مدل فرایند جذب در مونو اتیل آمین را ارائه کرد که نقطه ضعف اصلی آن عدم مقایسه نتیجه‌های مدل با اطلاعات تجربی است. پس از آن در سال ۱۹۸۶، فرومنت^۴ و همکارش نیز در کاری مشابه [۵]، مدلی را برای فرایند جذب کربن دی اکسید در آلکانو آمین‌ها ارائه کردند که هدف اصلی آن برج‌های آکنده تجاری بوده اما اطلاعات عملیاتی برای اعتبارسنجی نتیجه‌های این مدل گزارش نشده است. نخستین پژوهشی که در آن نتیجه‌های به‌دست آمده از مدل به‌وسیله‌ی اطلاعات آزمایشگاهی اعتبارسنجی شد،

1. Mass Transfer Rete-Based	2. Treybal	3. Pandya	4. Froment	5. Tontiwachwuthikul
6. Alatiqi	7. Aboudhier	8. Gabrielsen	9. Simon	10. Aspen plus

پروپانول که در فاز مایع انجام می‌شوند به صورت ذیل قابل بیان هستند که محلول آمین به صورت RNH₂ نمایش داده شده است:



گستره بار کربن دی اکسید (نسبت مولی کربن دی اکسید به مول آمین اولیه) بین ۰٫۰۱ تا ۱ در محلول آمین، حضور یون‌های کربن دی اکسید و هیدروکسید، قابل چشم‌پوشی است هم‌چنین واکنش بین کربن دی اکسید و یون هیدروکسید با گروه آمین نیز قابل چشم‌پوشی است در نتیجه واکنش کربن دی اکسید در محلول آمین می‌تواند به صورت تقریبی زیر نوشته شود:



مدل برج جذب

به دلیل ماهیت فرایند جذب، برای توسعه مدل مورد نظر، موازنه جرم و انرژی به طور دیفرانسیلی در طول بستر برقرار می‌شود. مدل ارائه شده در این پژوهش بر اساس مدل توسعه داده شده توسط پانديا [۴] است که از نظریه فیلمی در فاز مایع و گاز استفاده کرده و شامل فرضیات زیر است:

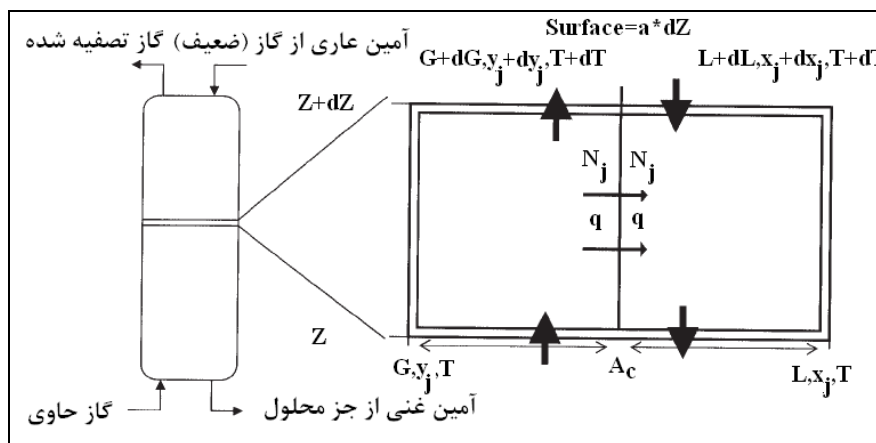
است. در نهایت، نتیجه‌های به دست آمده از این مدل، با داده‌های تجربی [۶] و نتیجه‌های مدل ارائه شده توسط گابریلسن [۱۰] مقایسه شده‌اند.

توسعه مدل

در هنگام مدل‌سازی فرایند جذب گاز در مایع به همراه واکنش‌های شیمیایی، یکی از مهم‌ترین متغیرهایی که باید مدنظر قرار گیرد، دمای گاز و مایع در طول برج است که در اصل به دلیل جذب گاز اسیدی در داخل محلول آمین و تبخیر حلال، روی می‌دهد. این تغییرات دمایی به طور مستقیم روی شدت واکنش‌های شیمیایی، ویژگی‌های فیزیکی گاز و مایع و تعادل ترمودینامیکی تأثیر دارد. مورد دیگر که در برج‌های جذب آمین باید مد نظر قرار گیرند، واکنش‌های شیمیایی در داخل محلول است. هنگامی که جزیی از گاز به داخل محلول نفوذ می‌کند، به دلیل واکنش با آمین به سرعت مصرف شده در نتیجه نیروی راننده^۱ نسبت به حالتی که واکنش وجود ندارد، بسیار بیشتر است. بنابراین، مدل توسعه داده شده برای این فرایند باید شامل موازنه انرژی در طول برج بوده و واکنش‌های شیمیایی در فاز مایع را شامل شود.

شیمی فرایند

واکنش‌های تعادلی جذب کربن دی اکسید در محلول آمینو متیل



شکل ۱ المان جزیی در برج آکنده جذب آمین

1. Driving force

جز مولی اجزا در فاز مایع، ΔH_{H_2O} و ΔH_{CO_2} به ترتیب گرما جذب کربن دی اکسید در آمین و گرما چگالش آب و C_p ظرفیت گرمای مولی هستند.

انتقال گرما و جرم

به منظور محاسبه ضریب انتقال گرما در سطح مشترک فاز گاز و مایع، از آنالوژی چیلتون-کلبرن^۱ استفاده می‌شود [۱۳] که بر این اساس، ضریب انتقال گرما بین فاز گاز و مایع عبارتست از:

$$h = k_G \left(\frac{\rho_G (c_p / M_{w,L}) \lambda^2}{D^2} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (۹)$$

در معادله ۹، $M_{w,L}$ ، وزن مولکولی فاز مایع، C_p ظرفیت گرمای فاز گاز، ρ_G دانسیته فاز گاز، λ کشش سطحی فاز مایع و D و k_G به ترتیب ضریب انتقال جرم و نفوذ مولکولی فاز مایع هستند. در نتیجه شار گرمای بین فاز گاز و مایع به صورت ذیل قابل محاسبه است:

$$q = h(T_G - T_L) \quad (۱۰)$$

شار انتقال جرم اجزا سبک بین مرز مایع و گاز نیز از عبارت زیر محاسبه می‌شود:

$$N_i = K_{Gi} (p_i - p_i^*) \quad (۱۱)$$

در رابطه فوق، N فلاکس مولی، K_{Gi} ضریب کلی انتقال گرما، p فشار جزئی در فاز گاز و p_i^* فشار تعادلی جز مربوط است. در ضمن اجزای فرار (i)، آب و گاز کربن دی اکسید فرض شده‌اند. با فرض این که ضریب انتقال جرم آب در فاز مایع بسیار ناچیز است، خواهیم داشت:

$$K_{G,H_2O} = k_{G,H_2O} \quad (۱۲)$$

هم‌چنین با استفاده از نظریه لایه گاز-مایع^۲، ضریب انتقال جرم کلی کربن دی اکسید عبارتست از:

$$\frac{1}{K_{G,CO_2}} = \frac{1}{k_{G,CO_2}} + \frac{H_{CO_2}}{Ek_{L,CO_2}} \quad (۱۳)$$

در عبارت فوق H_{CO_2} ثابت هنری کربن دی اکسید، E ضریب

الف- مقاومت انتقال گرما در فاز مایع در برابر فاز گاز ناچیز فرض می‌شود.

ب- واکنش در فیلم مایع بسیار سریع است.

ج- مقاومت انتقال جرم برای حلال در فیلم مایع ناچیز است.

د- سطح تماس ویژه برای انتقال جرم و گرما یکسان هستند.

ه- از اختلاط محوری صرف‌نظر می‌شود.

و- برج جذب آدیاباتیک فرض می‌شود.

ز- هر دو فاز مایع و گاز، ایده آل فرض می‌شوند.

در نتیجه با توجه به شکل ۱، موازنه جرم و انرژی در طول برج آکنده، به صورت گروه معادله‌های دیفرانسیل زیر نوشته خواهند شد:

$$\frac{dG}{dz} = -(N_{CO_2} + N_{H_2O})aA_C \quad (۱)$$

$$\frac{dy_{CO_2}}{dz} = \frac{N_{CO_2}aA_C(y_{CO_2} - 1) + N_{H_2O}y_{CO_2}aA_C}{G} \quad (۲)$$

$$\frac{dy_{H_2O}}{dz} = \frac{N_{H_2O}aA_C(y_{H_2O} - 1) + N_{CO_2}y_{H_2O}aA_C}{G} \quad (۳)$$

$$\frac{dL}{dz} = -N_{H_2O}aA_C \quad (۴)$$

$$\frac{dX_{CO_2}}{dz} = \frac{(N_{H_2O}X_{CO_2} - N_{CO_2})aA_C}{G} \quad (۵)$$

$$\frac{dx_{H_2O}}{dz} = \frac{[N_{H_2O}(X_{H_2O} - 1) + N_{CO_2}]aA_C}{L} \quad (۶)$$

$$\frac{dT_G}{dz} = -\frac{qaA_C}{GC_{p,G}} \quad (۷)$$

$$\frac{dT_L}{dz} = \frac{(N_{CO_2}C_{p,CO_2} + N_{H_2O}C_{p,H_2O})aA_C(T_L - T_G)}{LC_{p,L}} \quad (۸)$$

$$-\frac{qaA_C}{LC_{p,L}} + \frac{(N_{CO_2}\Delta H_{CO_2} + N_{H_2O}\Delta H_{H_2O})}{LC_{p,L}}$$

که در آن‌ها G دبی مولی گاز، L دبی مولی مایع، T_G دمای گاز، T_L دمای مایع، a سطح ویژه انتقال جرم، A_C سطح مقطع برج جذب، q فلاکس انتقال گرما، y جز مولی اجزا در فاز گاز، X

در نهایت نیز گرما جذب گاز کربن دی اکسید در محلول آمینو متیل پروپانول، از رابطه زیر قابل محاسبه است [۱۷]:

$$\Delta H_{CO_2} = R(-8161 + 47652 \frac{\theta}{T_L}) \quad (۱۹)$$

R در معادله فوق ثابت گاز ایده آل است.

سینتیک واکنش‌ها

سینتیک جذب گاز کربن دی اکسید در محلول آمین تاکنون مورد پژوهش دانشمندان زیادی بوده ولی هنوز نظر قطعی در مورد درجه اول یا دوم بودن این واکنش وجود ندارد [۱۹]. همان‌طور که پیش از این نیز اشاره شد، در این پژوهش این واکنش درجه دوم فرض شده و ثابت واکنش آن به صورت زیر منظور شده است [۱۹]:

$$k_2 = 1.943 \times 10^7 \exp(-5176.49/T_L) \quad (۲۰)$$

ویژگی‌های فیزیکی ترکیب‌های موجود در فرایند جذب ویژگی‌های فیزیکی مورد استفاده برای مدل، در جدول ۱ ارائه شده‌اند. در ضمن در این مقاله برای محاسبه گرمای ویژه، ضریب رسانایی گرمایی، گرانیوی و دانسیته گاز، از قانون اختلاط خطی اجزا^۱، استفاده شده است.

جدول ۱ مرجع محاسبه ویژگی‌های فیزیکی مورد نیاز برای مدل برج جذب

منبع	ویژگی‌های فیزیکی	منبع	ویژگی‌های فیزیکی
بانک اطلاعاتی اسپن	گرماوی ویژه اجزای گازی	بانک اطلاعاتی اسپن	گرانیوی اجزای گازی
بانک اطلاعاتی اسپن	ضریب هدایت گرمایی اجزای گازی	بانک اطلاعاتی اسپن	دانسیته اجزای گازی
لی و اچ. اس. یو ^۱ [۲۳]	دانسیته مایع	واسکوئز ^۲ و همکاران [۲۰]	کشش سطحی مایع
هنی ^۲ و همکاران [۲۴]	گرانیوی محلول مایع	لای و لی ^۳ [۲۱]	ضریب نفوذ کربن دی اکسید
چیو ^۳ و همکاران [۲۵]	گرماوی ویژه مایع	اوندان ^۴ و همکاران [۲۲]	سطح ویژه آکنه

1. Li & HSU 2. Henni 3. Chiu 4. Vasquez 5. Lai & Li 6. Onda

1. Enhancement factor 2. Versteeg 3. Cussler 4. Diffusion coefficient 5. Billet & Schultes
6. Loading 7. Antoine 8. Park 9. Linear Mixing Rule

افزونی^۱ و k_G و k_L به ترتیب ضریب انتقال جرم در فاز گاز و مایع هستند. در این پژوهش، برای محاسبه ثابت هنری، از روابط ارائه شده توسط ورستیگ^۲ و همکارانش استفاده شده است [۱۴]. برای محاسبه ضریب افزونی نیز از نتیجه‌های کسلر^۳ به شرح زیر بهره‌گیری می‌شود [۱۵]:

$$E = \sqrt{M} \coth(\sqrt{M}) \quad (۱۴)$$

$$M = \frac{D_{CO_2} r}{k_L^2} \quad (۱۵)$$

در عبارت فوق، ضریب نفوذ^۴ کربن دی اکسید در مایع، و r نرخ واکنش است که از نوع درجه دوم به صورت زیر قابل محاسبه است:

$$r = k_2 C_{AMP}^2 \quad (۱۶)$$

در عبارت فوق، k_2 ثابت واکنش و C_{AMP} غلظت مولی آمین در فاز مایع هستند.

در نهایت در این پژوهش، ضرایب انتقال جرم و سطح تماس بین فاز مایع و گاز (k_G و k_L) در یک برج کنده، با استفاده از روابط ارائه شده توسط شولتز و بیلت^۵ محاسبه می‌شوند [۱۶].

تعداد ترمودینامیکی فرایند جذب

به منظور محاسبه فشار جزئی گاز کربن دی اکسید در محلول آمین، از رابطه تعادلی محلول آمین (مایع)-گاز ارائه شده توسط گابریئلسن و همکارانش [۱۷] در سال ۲۰۰۵ استفاده می‌شود:

$$P_{CO_2}^* = K_{CO_2} X_{CO_2} \frac{\theta}{1-\theta} \quad (۱۷)$$

در رابطه فوق X_{CO_2} جز مولی کربن دی اکسید در فاز مایع و θ بار^۶ کربن دی اکسید است که نسبت مول کربن دی اکسید در فاز مایع به غلظت اولیه آمین (آمین ضعیف) تعریف می‌شود. فشار بخار آب نیز توسط معادله آنتوان^۷ محاسبه می‌شود.

برای محاسبه K_{CO_2} نیز که در سال ۲۰۰۲ توسط پارک^۸ و همکارانش از ترکیب قانون هنری و ثابت تعادل شیمیایی به دست آمده، از رابطه زیر استفاده می‌شود [۱۸]:

$$\ln K_{CO_2} = 37.3 - \frac{8161}{T_L} + 23826 \frac{\theta}{T_L^2} \quad (۱۸)$$

پایاده‌سازی و حل معادله‌های فرایند جذب

برای حل دستگاه معادله‌های جبری و دیفرانسیلی حاکم بر سامانه جذب آمین (معادله‌های ۱ تا ۱۹)، از نرم افزار مطلب^۱ نسخه ۲۰۱۰ استفاده شده و با توجه به این که معادله‌های دیفرانسیلی این فرایند از نوع مقدار مرزی^۲ است، از فرمان bvp5c موجود در جعبه ابزار نرم افزار مطلب، بهره گرفته شده است. مقادیر مرزی معادله‌ها، جز مولی اجزا، دبی و دمای جریان‌های مایع و گاز ورودی هستند که به ترتیب از بالا و پایین، به طور متقابل^۳ وارد برج جذب می‌شوند.

بحث و نتیجه گیری

نتیجه‌های شبیه‌سازی با مدل ارائه شده در این پژوهش برای برج جذب کربن دی اکسید توسط محلول ۲-آمین-۲-متیل پروپانول با نتیجه‌های آزمایشگاهی که توسط تونتیواچوتیکول و همکارانش [۶] در مقیاس پایلوت انجام شده، اعتبار سنجی شده است. همچنین دقت مدل با نتیجه‌های مدل ارائه شده توسط گابریلسن [۱۰] مقایسه شده است. مشخصات برج، شرایط ورودی گاز و محلول آمین در جدول‌های ۲ و ۳ ارائه شده‌اند. متغیرهای قابل اندازه گیری در این برج، پروفایل جز مولی کربن دی اکسید در گاز، بار و دمای محلول آمین در طول برج هستند. مدل ارائه شده باید بتواند به‌عنوان یک نرم افزار کاربردی جهت طراحی و کنترل عامل‌های عملیاتی برج، متغیرهای مورد نظر را با دقت بالا محاسبه کند.

در شکل‌های ۲ و ۳، تغییرهای کربن دی اکسید در فاز گاز و دمای فاز مایع در طول برج که به وسیله‌ی مدل به‌دست آمده در برابر اطلاعات تجربی مقایسه شده‌اند. نتیجه‌ها نشان می‌دهد که مدل به‌طور قابل قبولی قادر به شبیه‌سازی تغییرهای این متغیرهاست. در جدول ۴ خطای میانگین مطلق^۴ بین نتیجه‌های به‌دست آمده از مدل ارائه شده در این پژوهش، با اطلاعات تجربی و مدل گابریلسن ارائه شده است. نتیجه‌ها نشان می‌دهند که خطای به‌دست آمده از این مدل در پیش بینی جز مولی کربن دی

اکسید در فاز گاز و دمای محلول آمین به ترتیب ۸/۴۶ و ۲/۴۷ درصد هستند که بسیار کمتر از خطای مدل گابریلسن (۲۲/۴ و ۸/۰۳) هستند. دلیل اصلی این افزایش در دقت مدل، لحاظ کردن تغییرات ویژگی‌های خواص فیزیکی گاز با دما بوده است که در هر نقطه از برج با توجه به شرایط عملیاتی، از بانک اطلاعاتی نرم افزار اسپن، استخراج شده است.

جدول ۲ مشخصات برج جذب آمین

مقدار	مشخصه
۰/۱	قطر برج (متر)
۶/۵۵	ارتفاع آکنه (متر)
Ceramic Berl Saddles (۱۲/۷ میلی‌متر)	نوع آکنه

جدول ۳ شرایط ورودی گاز و محلول آمین

مقدار	مشخصه
۰/۱۱۶۲	دبی گاز (مول بر ثانیه)
۰/۱۰۵۹	دبی محلول آمین (متر مکعب بر ساعت)
۱۵ درجه سانتی‌گراد	دمای گاز و مایع
۲	غلظت آمین (کیلو مول بر متر مکعب)
۱۰۱/۳	فشار (کیلو پاسکال)

جدول ۴ مقایسه نتیجه‌های به‌دست آمده از مدل با داده‌های آزمایشگاهی و مدل گابریلسن

خطای مدل گابریلسن [۲۶]	خطای مدل در این پژوهش	
۲۲/۴	۸/۴۶	جز مولی کربن دی اکسید در فاز گاز
۸/۰۳	۲/۴۷	دمای محلول آمین
۳/۱۵	۱۲/۳۳	بار کربن دی اکسید در محلول آمین

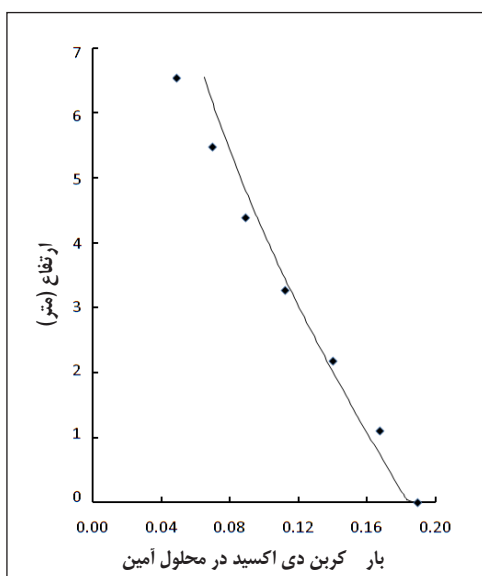
1. Matlab

2. Boundary value problem

3. Counter current

4. Average absolute deviation

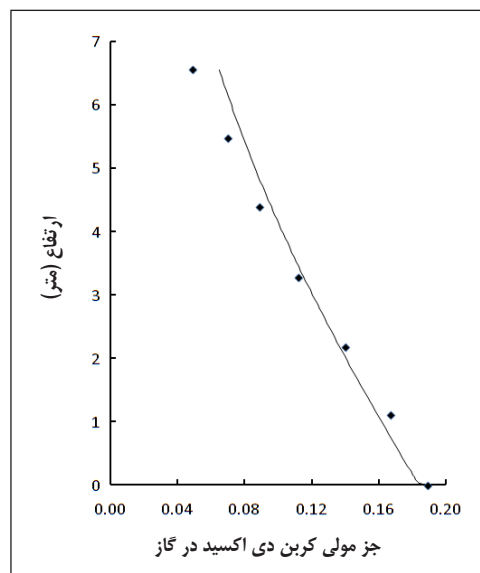
بار آمین دارد اما خطای مدل در قسمت‌های انتهایی برج کمی افزایش یافته است. با مراجعه به جدول ۴ این موضوع روشن می‌شود که خطای این مدل از مدل ارایه شده توسط گاربلسن بیشتر است که علت آن می‌تواند تفاوت در روش محاسبه ضریب افزونی بین دو مدل باشد. در روش گاربلسن برای محاسبه ضریب افزونی از نتیجه‌های کرولن و هافتیجر [۲۷] استفاده شده که روشی پیچیده‌تر برای محاسبه ضریب افزونی است. با این حال روش استفاده شده در این پژوهش در نهایت سادگی، خطای قابل قبولی را برای محاسبه بار آمین نتیجه می‌دهد.



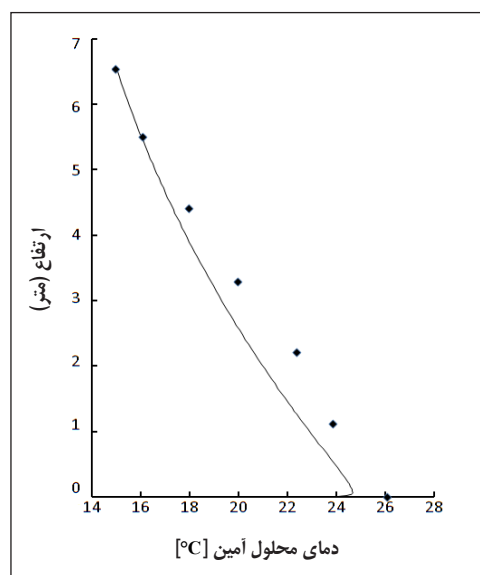
شکل ۳ پروفایل تغییر دمای محلول آمین (فاز مایع) نسبت به طول برج جذب

نتیجه‌گیری

در این پژوهش با توجه به اهمیت حذف کربن دی اکسید از جریانهای گازی و نیاز به مدلی دقیق برای افزایش مقیاس، طراحی و کنترل فرایند جذب در برج آمین، مدلی اساسی بر مبنای موازنه جرم و انرژی و شدت انتقال جرم و گرما در فرایند جذب کربن دی اکسید در محلول ۲-آمینو-۲-متیل-۱-پروپانول ارایه شده است. در این مدل، حلالیت کربن دی اکسید در محلول آمین، تغییرهای دما در طول برج، تغییرهای ویژگی‌های فیزیکی اجزا با دما و واکنش کربن دی اکسید در محلول آمین و ضریب فزونی واکنش،



شکل ۲ پروفایل تغییر جز مولی کربن دی اکسید در فاز گاز نسبت به طول برج جذب



شکل ۳ پروفایل تغییر دمای محلول آمین (فاز مایع) نسبت به طول برج جذب

مقایسه نتیجه‌های به دست آمده از بار کربن دی اکسید در محلول آمین توسط مدل ارایه شده در این مقاله و اطلاعات تجربی، در شکل ۴ ارایه شده است. نتیجه‌ها حاکی از آن است که نتیجه‌های مدل دقت قابل قبولی در پیش بینی پروفایل تغییرات

و ۸/۴۶ درصد پیش بینی کند. همچنین نتیجه‌های آن در مقایسه با مدلی ارایه شده توسط پژوهشگری دیگر برای برج جذب مشابه، خطای کمتری را نشان می‌دهد. روش ارایه شده در این پژوهش، به طور مشابه برای دیگر آلکانو آمین‌ها نیز قابل استفاده است.

لحاظ شده است. مقایسه نتیجه‌های به دست آمده با اطلاعات آزمایشگاهی برج جذب در مقیاس پیلوت نشان می‌دهد که مدل قادر است تغییرهای بار آمین، پروفایل دمای آمین و جز مولی کربن دی اکسید در فاز گاز در طول برج را با خطای میانگین ۱۲/۳۳، ۲/۴۷

مراجع

- [1] Tan, L.S.; Shariff, A.M.; Lau, K.K.; Bustam, M.A.; J. Industrial and Engineering Chemistry, 18, 1874-1883, 2012.
- [2] Wu, S.H.; Caparanga, A.R.; Leron, R.B.; Li, M.H.; J. Experimental Thermal and Fluid Science, In Press, 2013, <http://dx.doi.org/10.1016/j.expthermflusci.2013.01.012>
- [3] Treybal, E.; J. Industrial & Engineering Chemistry. 61(7), 36-41, 1969.
- [4] Pandya, J.D.; J. Chemical Engineering Communication, 19, 343-361, 1983.
- [5] Froment, G.; Deleze, L.; J. Computers & Chemical Engineering, 10, 493-504, 1986.
- [6] Tontiwachwuthikul, P.; Meisen, A.; Lim, J.; J. Chemical Engineering Science, 47(2), 381-390, 1992.
- [7] Alatiqi, I.; Sabri, M.; Bouhamra, W.; Alper, E.; J. Gas Sep Purification, 8, 3-11, 1993.
- [8] Aboudheir, A.; Tontiwachwuthikul, P.; Idem, R.; J. Ind. Eng. Chem. Res. 45, 2553-2557, 2006.
- [9] Aroonwilas, A.; "High Efficiency Structured Packing for CO₂ Absorber Using 2-Amino-2-methyl-1-propanol (AMP)", M.Sc. Thesis University of Regina, Canada, 1996.
- [10] Gabrielsen, J.; Michelsen, M.; Stenby, E.; Kontogeorgis, G.; J. AIChE, 52(10), 3443-3451, 2006.
- [11] Gabrielsen, J.; Svendsen, H.; Michelsen, M.; Stenby, E.; Kontogeorgis, G.; J. Chem Eng Sci., 62, 2397-2413, 2007.
- [12] Simon, L.L.; Elias, Y.; J. Chemical Engineering Research and Design, 89, 1684-1692, 2011.
- [13] Bird, R.B.; Stewart, W.E.; Lightfoot, E.N.; "Transport Phenomena", John Wiley & Sons, Inc., New jersey, 2002.
- [14] Versteeg, G.F.; Van-Dijk, L.; Van-Swaaij, W.; J. Chem. Eng. Commun., 144, 113-158, 1996.
- [15] Cussler, E.L.; "Diffusion-Mass Transfer in Fluid Systems", 3rd edition, Cambridge University Press, Cambridge, 2002.
- [16] Billet, R.; Schultes, M.; J. Chem. Eng. Res. Des., 77, 498-504, 1999.
- [17] Gabrielsen, J.; Michelsen, M.; Stenby, E.; Kontogeorgis, G.; J. Ind. Eng. Chem. Res., 44, 3348-3354, 2005.
- [18] Park, S.; Lee, K.; Hyun, J.; Kim, S.; J. Ind. Eng. Chem. Res., 41, 1658-1665, 2002.
- [19] Saha, A.K.; Bandyopadhyay, S.; Biswas, A.; J. Chem. Eng. Sci., 50, 3587-3598, 1995.
- [20] Vazquez, G.; Alvarez, E.; Navaza, J.; Rendo, R.; Romero, E.; J. Chem. Eng. Data. 42, 57-59, 1997.
- [21] Li, M.; Lai, M.; J. Chem. Eng. Data, 40, 486-492, 1996.
- [22] Onda, K.; Takeuchi, H.; Okumoto, Y.; J. Chem. Eng. Jpn., 1, 56-62, 1968.
- [23] Hsu, C.; Li, M.; J. Chem. Eng. Data 42, 502-507, 1997.
- [24] Henni, A.; Hromek, J.; Tontiwachwuthikul, P.; Chakma, A.; J. Chem. Eng. Data., 48, 551-556, 2003.
- [25] Chiu, L.F.; Liu, H.F.; Li, M.H.; J. Chem. Eng. Data, 44, 631-636, 1999.
- [26] Afkhamipour, M.; Khorrami, Z.; Ggolizadeh, A.; "Rate-based Modeling for CO₂ Absorption into AMP Solution in a Random Packed Column", 2nd International Conference on Chemistry and Chemical Engineering IPCBEE, 14, 2011.
- [27] Krevelen, D.; Hofstijzer, P.; Part I. General Theory., Rec. Trav. Chim., 67, 498-504, 1948.

Rate Based Modeling of Carbon-Dioxide Absorption Process in Packed Bed Columns Using 2-Amino 2-Methyl Propanol

S. Sadighi^{1,*} and R. Seif-Mohaddecy²

1. Ph.D, Department of Reaction Engineering, Catalysis and Nanotechnology Division, Research Institute of Petroleum Industry (RIPI), Tehran, Iran
2. MSc, Department of Reaction Engineering, Catalysis and Nanotechnology Division, Research Institute of Petroleum Industry (RIPI), Tehran, Iran

Received: November 2012, Revised: December 2012, Accepted: December 2012

Abstract: This contribution proposes the modeling and validating results of a CO₂ packed bed absorber operating with 2-Amino 2-Methyl Propanol (AMP). The rate-based model presented in this work considers mass transfer, heat of absorption and evaporation, solubility of CO₂ inside the amin solution, absorption reaction, enhancement factor, thermodynamic equilibrium, and mass diffusion resistances in gas and liquid interface. All differential and algebraic equations of the mathematical model are implemented in the MATLAB program, and they are solved numerically as a boundary value problem using the corresponding MATLAB function. Then, the proposed model is validated against both the experimental and modeling results gathered from the literature. The results obtained by the presented model in this research are in good agreement with the pilot plant data, and it can predict the mole fraction of CO₂ in gas phase, liquid temperature and CO₂ loading with the AAD% of 8.46, 2.47 and 12.33, respectively. Moreover, in comparison with the results of the other proposed model in the literature, the AAD% of the predicted CO₂ mole fraction in the gas phase and temperature of the liquid decrease to the extent of 13.094% and 5.56%, respectively.

Keywords: Modeling, Carbon-dioxide, Rate-based model, Reactive Absorption, AMP