

مدلسازی ریاضی جذب دی‌متیل فرم‌آمید و اکریلونیتریل در برج‌های جذب آکنده در واحد اکریلیک ۱ شرکت پلی‌اکریل ایران

امیر رحیمی^{۱*}، فخری سیدین آزاد^۲، پژمان روحی^۳

- ۱- گروه مهندسی شیمی، دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه اصفهان (rahimi@eng.ui.ac.ir)
۲- گروه مهندسی شیمی، دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه اصفهان (fsazad@eng.ui.ac.ir)
۳- گروه مهندسی شیمی، دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه اصفهان (as_4044@yahoo.com)

چکیده

این مطالعه با هدف مدلسازی ریاضی و شبیه‌سازی برج‌های جذب دی‌متیل فرم‌آمید و اکریلونیتریل واحد اکریلیک ۱ شرکت پلی‌اکریل ایران انجام شده است. به منظور حصول داده‌های تعادلی و تکمیل پارامترهای مورد نیاز مدل و همچنین در نظر گرفتن تاثیر انحراف از حالت ایده‌آل در فاز مایع، دستیابی به مدل‌های ضریب اکتیویته و معادله حالت مناسب ضروری است. برای محلول دی‌متیل فرم‌آمید و آب مدل ضریب اکتیویته NRTL و معادله حالت PRSV از میان معادله‌های مورد بررسی مناسب‌تر شناخته شد. در خصوص محلول اکریلونیتریل و آب نیز مدل ضریب اکتیویته ون‌لار و ردلیچ-کیستر و معادله حالت PRSV مناسب تشخیص داده شد. نتایج حاصل از مدل با داده‌های صنعتی استخراج شده از واحدهای عملیاتی موجود در شرکت پلی‌اکریل ایران مقایسه و دقت مدل مورد ارزیابی قرار گرفت. این بررسی‌ها نشان داد که نتایج حل معادلات حاکم به شدت تاثیرپذیر از نوع روابط تجربی مورد استفاده در پیش‌بینی ضرایب انتقال جرم و حرارت است. همچنین تاثیر پارامترهای عملیاتی بر نتایج عملکردی برج شامل راندمان جداسازی مورد بررسی قرار گرفت.

مشخصات مقاله

تاریخچه مقاله:

دریافت: ۱۲ شهریور ۱۳۹۱
دریافت پس از اصلاح: ۱ اسفند ۱۳۹۲
پذیرش نهایی: ۱۰ اسفند ۱۳۹۲

کلمات کلیدی:

جذب فیزیکی
دی‌متیل فرم‌آمید
اکریلونیتریل
ضریب اکتیویته
مدلسازی ریاضی

۱- مقدمه

ترکیبات آلی فرار (VOCs) به دلیل ویژگی‌های خاص خود به عنوان آلاینده‌های بحرانی شناخته شده‌اند. این مواد که در اثر فعالیت‌های صنعتی تولید می‌شوند، علاوه بر تبعات زیانبار زیست محیطی، به کاهش سطح سلامتی کارکنان صنعت و ساکنین هم‌جوار کارخانجات تولیدکننده ترکیبات آلی فرار منجر می‌شوند. لذا به دلایل ذکر شده و در برخی موارد جهت پرهیز از اتلاف این مواد، کنترل، تولید و پراکنش ترکیبات آلی فرار به شدت مورد توجه مدیران و مهندسان واحدهای تولیدی و کارخانجات قرار گرفته است.

دی‌متیل فرم‌امید (DMF) به عنوان یکی از حلال‌های بسیار مهم در صنایع شیمیایی مطرح است. از این ماده در کارخانجات تولید فیبرهای اکریلی، بخش‌های تولید مواد دارویی و چرم‌های سنتزی پایه پلی‌یورتان صنایع سلولزی، به عنوان حلال برای رزین‌های چسب‌ها، علف‌کش‌ها و اپوکسی و همچنین خالص‌سازی و جداسازی استیلین استفاده می‌شود [۱].

اکریلونیتریل (AN) با فرمول شیمیایی C_2H_3CN در مقیاس تجاری با اکسیداسیون پروپین در آمونیاک تولید می‌گردد [۲]. کاربرد اصلی این ماده در صنایع فیبرهای اکریلی، الاستومرها، ABS^۱ و لاستیک‌های نیتریلی است. مواجهه انسان با این ماده در طبیعت بسیار کم است و حداکثر مواجهه اغلب در محیط صنعتی و در مجاورت واحدهای فیبرهای اکریلی است.

در شرکت پلی‌اکریل ایران منبع بخارات DMF و AN مخازن ذخیره‌سازی این دو ماده است. در این شرکت بخارات DMF و AN در برج‌های جذب به طور جداگانه جذب می‌شوند. بخارات متصاعد شده به وسیله کانال‌های تعبیه شده به برج‌های جذب هدایت می‌شود. در این واحد عملیاتی چهار برج جذب DMF مشابه با پرکن‌های ساختاریافته فلزی وجود دارد. پرکن‌های مورد استفاده از نوع Mellapak هستند. چهار برج جذب DMF به صورت موازی و کاملاً مستقل از یکدیگر کار می‌کنند. در برج جذب AN از پخش‌کننده مایع نوع میله‌ای استفاده می‌شود. پرکن مورد استفاده در این برج نیز از نوع ساختاریافته می‌باشد. در برج‌های جذب مذکور از آب به عنوان حلال استفاده می‌شود. دو محل نمونه‌گیری در بالا و پایین برج‌ها وجود دارد که در به کمک آن‌ها استخراج داده‌های عملیاتی صورت می‌گیرد. گاز خروجی از برج‌های جذب به اتمسفر و مایع خروجی از آن‌ها جهت بازیابی DMF و AN به برج‌های بازیابی هدایت می‌گردد.

بررسی‌های اولیه نشان می‌دهد مطالعات درخور و قابل ذکری درخصوص حذف این ترکیبات از فاز گاز به روش جذب توسط حلال در دسترس نیست. اگرچه در کشورهای روسیه، ایتالیا و ژاپن در سال‌های ۱۹۷۰ تا ۱۹۹۰ میلادی مطالعاتی بر روی جذب DMF از جریان گاز صورت گرفته است، ولی تعداد بسیار معدودی از این پژوهش‌ها کاربردی شده است [۳، ۴]. جذب با مایع از روش‌هایی است که برای جداسازی DMF به کار برده شده است [۵]. در تحقیقات صورت گرفته توسط پژوهشگران مختلف [۶، ۷] ضمن اشاره به دشواری پیش‌گیری از تبخیر DMF، ضرورت جذب این ماده به سبب ملاحظات بهداشتی و زیست‌محیطی آشکار گردیده است.

در خصوص جذب AN نیز در سال‌های اخیر مطالعات محدودی انجام شده است که از آن جمله می‌توان به جذب اکریلونیتریل بر روی بستر سیلیس اشاره کرد. در این فرایند، اکریلونیتریل در دمای $163^{\circ}C$ - بر روی بستری از سیلیس جذب می‌گردد. دشواری تامین شرایط آزمایشگاهی (دمای بسیار کم) از جمله مشکلات اصلی این روش محسوب می‌شود [۸]. روش دیگر برای جذب AN جذب آن توسط آب در یک برج جذب می‌باشد. با وجود اینکه استفاده از این روش در برخی منابع یافت می‌شود، اما در خصوص مدلسازی آن و بررسی تاثیر پارامترهای عملیاتی بر میزان جذب تاکنون هیچ‌گونه مطالعه‌ای صورت نگرفته است.

تاکنون مطالعات فراوانی در زمینه مدلسازی عمومی برج‌های جذب آکنده انجام شده است و کماکان این مطالعات در خصوص سیستم‌های مدنظر تکرار و انجام می‌شود. وجوه تمایز مطالعات جدید در زمینه فرایند جذب توسط حلال در یک برج آکنده نوع مواد درگیر، داده‌های تعادلی و شیمی فیزیکی و ملاحظات طراحی است. در این مطالعه نیز یک مدل کلی درخصوص جذب فیزیکی بخارات DMF و AN توسط آب در یک برج جذب پرشده توسعه داده می‌شود. استخراج داده‌های تعادلی مربوط به سیستم‌های مورد مطالعه نیز از ویژگی‌های خاص این مطالعه است. هدف از توسعه این مدل، بررسی عملکرد برج‌های جذب این بخارات در واحد اکریلیک ۱ شرکت پلی‌اکریل ایران می‌باشد. برای این منظور با نمونه‌گیری از برج‌های مذکور در واحد عملیاتی، داده‌های صنعتی مربوط به کسر مولی جزء جذب‌شونده و دمای فازهای گاز و مایع به دست آمده و با مقادیر پیش‌بینی شده توسط مدل ریاضی مقایسه می‌گردد.

¹ Acrylonitrile-Butadien-Styren

۲- مدلسازی ریاضی

سیستم مورد مطالعه یک برج جذب پرشده با پرکن‌های ساختار یافته است. حرکت دو فاز به صورت مختلف‌الجهت می‌باشد. فرضیات مورد استناد در مدلسازی صورت گرفته عبارتند از:

- از مقاومت انتقال حرارت در فاز مایع صرف‌نظر می‌شود.
- برج جذب نسبت به محیط آدیاباتیک فرض می‌شود.
- عملکرد سیستم یک عملکرد پایا می‌باشد.
- توزیع مایع در بالای برج به صورت کاملاً یکنواخت صورت می‌گیرد.
- از وجود هر نوع توزیع شعاعی برای متغیرهای مورد جستجو در برج صرف‌نظر می‌شود.

نتیجه بکارگیری فرض دوم، صرف‌نظر کردن از انتقال حرارت در جهت شعاعی است. این فرض نیز با توجه به قطر کم برج‌های مورد مطالعه در این تحقیق قابل قبول می‌باشد. در ادامه معادلات حاکم بر عملکرد برج جذب مورد مطالعه استخراج و ارائه می‌شود.

۲-۱- معادله‌های موازنه جرم و انرژی فاز گاز

با در نظر گرفتن یک المان طولی از برج، معادلات بقای جرم جزئی برای DMF و بخار آب در فاز گاز به صورت زیر نوشته می‌شود. یادآور می‌شود تبخیر حلال (آب) در مدلسازی برج جذب هدف در نظر گرفته شده است.

$$\frac{dY_D}{dz} = \frac{k_{gD} a_e (P_D^* - P_D)}{G_s} \quad (1)$$

$$\frac{dY_W}{dz} = \frac{k_{gW} a_e (P_W^* - P_W)}{G_s} \quad (2)$$

به طوری که، Y_D و Y_W به ترتیب کسرهای مولی DMF و بخار آب در فاز گاز، k_{gD} و k_{gW} به ترتیب ضرایب انتقال جرم DMF و بخار آب در فاز گاز و G_s دبی هوای ورودی به برج است.

همچنین معادله دیفرانسیل تغییرات دمای گاز در طول برج بصورت زیر به دست می‌آید [۹]:

$$\frac{dT_g}{dz} = \frac{-h_g a_e (T_g - T_l)}{G_s C_m} \quad (3)$$

۲-۲- معادله‌های موازنه جرم و انرژی فاز مایع

در خصوص معادلات موازنه جرم در فاز مایع، با در نظر گرفتن حلالیت بالای اجزاء جذب شوند در آب نیازی به تبیین معادلات موازنه جرم در فاز مایع نخواهد بود. راستی‌آزمایی این فرض، با محاسبه ضرایب انتقال جرم و حرارت مورد بررسی قرار گرفت. برای این منظور، ضریب انتقال جرم در فاز مایع با

استفاده از معادله (۱۳) و ضریب انتقال جرم فاز گاز به کمک معادله (۱۴) محاسبه گردید. محاسبات نشان می‌دهد در برج‌های جذب DMF و AN مورد مطالعه، ضریب انتقال جرم فاز مایع در حدود 10^6 برابر ضرایب انتقال جرم در فاز گاز است.

برای استخراج معادله موازنه انرژی مربوط به فاز مایع، در ابتدا موازنه آنتالپی کل در یک طول دیفرانسیلی از برج به صورت زیر برقرار می‌گردد:

$$(L + dL)C_{pl}(T_l + dT_l - T_0) \Big|_{z+\Delta z} + G_s H \Big|_z = LC_{pl}(T_l - T_0) \Big|_z + G_s (H + dH) \Big|_{z+\Delta z} \quad (4)$$

که در آن آنتالپی فاز گاز (H) عبارت است از،

$$H = C_m(T_g - T_0) + \lambda_D Y_D + \lambda_W Y_W \quad (5)$$

با ترکیب معادلات (۳) و (۵) و قرار دادن آن در معادله (۴)، معادله زیر برای محاسبه تغییرات دمای مایع در طول برج به دست می‌آید:

$$\frac{dT_l}{dz} = \frac{G_s}{LC_{pD}} \left\{ C_m \frac{dT_g}{dz} + (C_{pD}(T_g - T_0) - C_{pDI}(T_l - T_0)) + dH_R \frac{dY_D}{dz} + (C_{pW}(T_g - T_0) - C_{pDI}(T_l - T_0)) + dH_R \frac{dY_D}{dz} + (C_{pW}(T_g - T_0) - C_{pWI}(T_l - T_0) + \lambda_w) \frac{dY_W}{dz} \right\} \quad (6)$$

در معادلات فوق، λ_D و λ_W به ترتیب گرمای نهان تبخیر DMF و آب، C_m ظرفیت گرمایی ویژه فاز گاز، C_{pD} و C_{pW} به ترتیب ظرفیت گرمایی ویژه DMF و آب در فاز گاز و C_{pDI} و C_{pWI} به ترتیب ظرفیت گرمایی ویژه DMF و آب در فاز مایع هستند.

۳- داده های تعادلی و پارامترهای مورد نیاز

۳-۱- خواص ترمودینامیکی

پیشتر ذکر شد که یکی از ویژگی‌های این تحقیق استخراج داده‌های تعادلی مربوط به سیستم آب-دی‌متیل‌فرم‌آمید و سیستم آب-اکریلونیتریل است. چگونگی استخراج و تأیید این داده‌ها در ادامه آورده می‌شود.

محللول‌های مورد مطالعه (DMF-H₂O و AN-H₂O) به دلیل ایجاد پیوند هیدروژنی دارای انحراف از حالت ایده‌آل هستند. لذا به منظور در نظر گرفتن این انحراف در محاسبه داده‌های تعادلی و سایر خواص ترموفیزیکی از مدل ضریب اکتیویته استفاده شده است. در مورد محللول AN-H₂O دوفازی شدن فاز مایع در غلظت‌های بالای AN در آب مسئله قابل

برای معادله‌های حالت Zudkevich, Kabai dennar و PRSV به نمودار داده‌های تجربی نزدیک است، در شکل (ب) به مقایسه معادله‌های مذکور در غلظت‌های بالای DMF پرداخته شده است.

برای محلول AN-H₂O تحقیقی پیرامون مدل ضریب اکتیویته مطابق یافته‌های وولپیسلی^[۱۲] صورت گرفت. نتایج این بررسی نشان داد که دو مدل ردلیچ-کیستر و ون لار برای پیش‌بینی ضریب اکتیویته AN در محلول AN-H₂O مناسب می‌باشند. پارامترهای این مدل‌ها عبارتند از:

$$D_{12} = 0.096, C_{12} = -0.319, B_{12} = 1/105, \text{کیستر-ردلیچ} \\ E = 0.900, D = 1/100, C = 1/000$$

$$\text{ون لار: } M_{21} = 0.860, M_{12} = 1/554$$

به کمک نرم‌افزار HYSYS و با استفاده از داده‌های موجود مربوط به مدل ضریب اکتیویته، داده‌های VT به دست آمد و با مقادیر واقعی مقایسه گردید. همان‌طور که نمودار VT در شکل ۲ نشان می‌دهد، معادله حالت PRSV نتایج نزدیک‌تری به مقادیر آزمایشگاهی دارد.

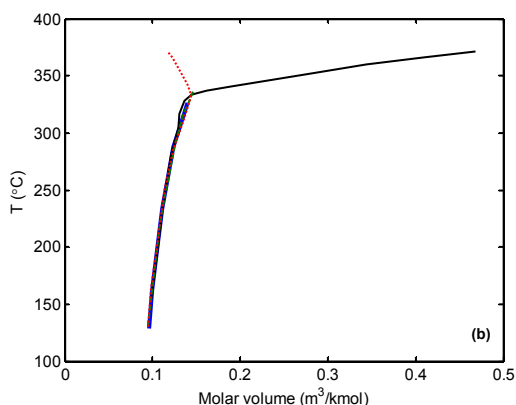
تاملی است. این خاصیت موجب می‌گردد تا میزان حلال مصرفی (آب) در برج جذب AN به مراتب بیشتر از برج جذب DMF باشد. نسبت L/G در برج جذب AN مطابق با داده‌های اخذ شده از واحد اکریلیک شرکت پلی‌اکریل ایران حدود ۶/۹۱ است، در حالی که این نسبت در برج جذب DMF حدود ۰/۰۵ می‌باشد.

ضرایب اکتیویته DMF و آب در محلول DMF-H₂O از مطالعه ویپیچ^[۱۰] و زیالون و همکاران^[۱۱] به دست آمد. با توجه به اینکه مدل NRTL برای ترکیبات قطبی به عنوان مدلی مناسب ارزیابی می‌شود، داده‌های مذکور بر روی این مدل برازش گردید. نتایج حاصل در جدول ۱ ارائه شده است.

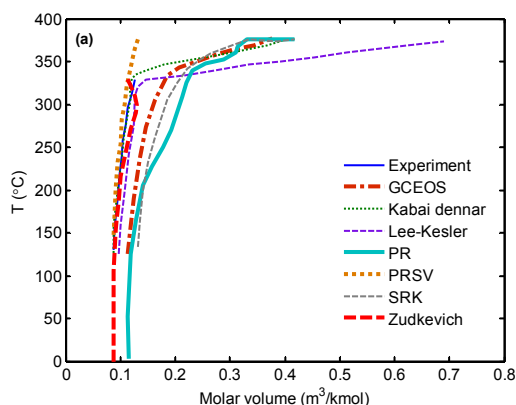
به کمک نرم‌افزار HYSYS و با مدنظر قرار دادن مدل ضریب اکتیویته صحیح، داده‌های VT به دست آمد و با مقادیر آزمایشگاهی موجود در مراجع مقایسه گردید. در شکل (الف) داده‌های بدست آمده از مدل ضریب اکتیویته حاصل از نتایج آزمایشگاهی^[۱۱,۱۰] با نتایج حاصل از هفت معادله حالت دیگر مقایسه گردیده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود، معادله حالت PRSV تطابق بهتری با مقادیر آزمایشگاهی دارد. از آنجایی که در شکل ۱ (الف) نقاط حباب در فشارهای مختلف

جدول (۱) ضرایب اکتیویته آب و DMF در محلول

کسر مولی (X)	۰/۰۲۵۲	۰/۰۵۴۹	۰/۱۳۴۲	۰/۲۵۸۶	۰/۴۸۱۹	۰/۶۷۶۷
γ_{DMF}	۰/۸۳	۰/۸۷۳	۰/۹۳۰	۰/۹۶۲	۰/۹۸۳	۰/۹۸۵
γ_{H2O}	۰/۹۹۹	۰/۹۹۷	۰/۹۹۱	۰/۹۸۴	۰/۹۷۲	۹/۹۶۹



(ب)



(الف)

شکل (۱) نمودار VT محلول DMF و H₂O؛ (الف) کسر مولی DMF = ۰/۰۰۰۱، (ب) کسر مولی DMF = ۰/۵

d_{eq} قطر معادل پرکن‌های ساختاریافته، از رابطه زیر محاسبه می‌شود [۱۶]:

$$d_{eq} = \frac{(bh - 2\delta s)^2}{bh} \sqrt{\frac{(bh - 2\delta s)^2}{2h} + \frac{(bh - 2\delta s)^2}{2b} + \frac{bh - 2\delta s}{2h}} \quad (11)$$

۳-۴- تخلخل پرکن، ε

تخلخل خصوصیتی از پرکن است که با استفاده از نتایج آزمایشگاهی توسط سازنده پرکن به دست آمده و در اختیار خریدار قرار می‌گیرد. در پرکن‌های ساختاریافته با سطح مقطع مثلثی (که در برج‌های مورد مطالعه به کار رفته است)، به جهت ساختار منظم، این خصوصیت با توجه به ابعاد مشخصه پرکن قابل محاسبه است:

$$\varepsilon = \frac{d_a a_p}{4} \quad (12)$$

۳-۵- ضریب انتقال جرم در فاز مایع

برای محاسبه این پارامتر از رابطه هیگبی [۱۷] استفاده شده است:

$$k_l = 2 \sqrt{\frac{D}{\pi t}} \quad (13)$$

۳-۶- ضریب انتقال جرم در فاز گاز

برای محاسبه ضریب انتقال جرم از روابط موجود در جدول ۲ استفاده شده است.

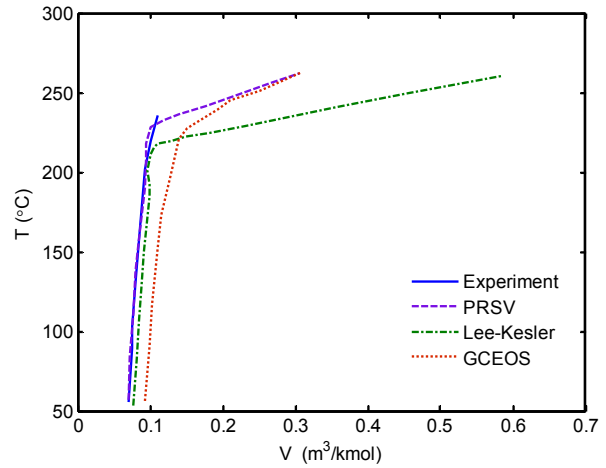
برای استفاده از روابط جدول ۲، به ضریب نفوذ مولکولی آب و DMF در فاز گاز نیاز است. برای این منظور از رابطه والک-لی [۲۱] استفاده شده و رابطه زیر برازش گردیده است:

$$D_g = 1.3938 \times 10^{-10} T_g^{1.9491} \quad (14)$$

همچنین ضریب نفوذ در فاز مایع از رابطه زیر به دست می‌آید:

$$D_l = \mu_l (3.77045 \frac{T}{\mu_l})^{X1} (2.7843 \frac{T}{\mu_l})^{X2} (1 + \frac{\partial \log \gamma_A}{\partial \log \gamma_B}) \quad (15)$$

در رابطه فوق، ضریب نفوذ مولکولی در فاز مایع تابعی از ضریب اکتیویته اجزاء است.



شکل (۲) نمودار VT محلول AN و آب (کسر مولی AN = ۰/۰۰۱)

۳-۲- ضریب انتقال حرارت در فاز گاز، h_g

با توجه به تشابه انتقال جرم و حرارت ($J_H = J_D$) و با استفاده از رابطه زیر محاسبه می‌شود [۱۳]:

$$J_H = \frac{h_g}{C_p G} Pr^{2/3} \quad (7)$$

۳-۳- سطح ویژه پرکن

پرکن‌های مورد استفاده در برج جذب DMF از نوع Mellapak 250X می‌باشد. از آنجایی که پرکن‌های مورد استفاده در برج جذب AN جز هیچ‌یک از پرکن‌های شناخته شده نبود، با همکاری کارشناسان شرکت پلی‌اکریل ایران، اندازه‌گیری‌های لازم بر روی پرکن‌ها انجام گرفت. این اندازه‌گیری‌ها شامل ابعاد و زوایای مشخصه پرکن و ضخامت فلز بکار رفته است. سپس با استفاده از رابطه زیر سطح موثر خشک پرکن محاسبه گردید:

$$a_p = \frac{4S}{bh} \quad (8)$$

تاکنون روابط مختلفی برای محاسبه سطح موثر انتقال جرم در پرکن‌ها به دست آمده است. روابط مورد استفاده عبارتند از [۱۴]:

$$\frac{a_e}{a_p} = \begin{cases} (0.5 + 0.0058 Fr) & Fr \leq 0.85 \\ 1 & Fr > 0.85 \end{cases} \quad (9)$$

و

$$\frac{a_e}{a_p} = \sqrt{\frac{d_{eq}}{4} \left(\frac{h_l}{\hat{\varepsilon}}\right)^{1.5} (9.8 \rho_l \varepsilon \frac{(\sin \alpha)^2}{3 \mu_l u_l})} \quad (10)$$

در روابط فوق، ε تخلخل، ρ_l دانسیته مایع، u_l سرعت ظاهری فاز مایع و h_l میزان ماندگی مایع است.

جدول (۲) روابط ارائه شده برای محاسبه ضریب انتقال جرم در فاز گاز

شماره معادله	رابطه تجربی	پژوهشگران
(۱۶)	$k_g = \frac{0.0338 D_g}{S} \left[\frac{(U_{Ge} + U_{Le}) \rho_g S}{\mu_g} \right]^{0.8} \left(\frac{\mu_g}{D_g \rho_g} \right)^{0.33}$	براوو و همکاران [۱۸]
(۱۷)	$k_g = \frac{0.054 D_g}{S} \left[\frac{(U_{Ge} + U_{Le}) \rho_g S}{\mu_g} \right]^{0.8} \left(\frac{\mu_g}{D_g \rho_g} \right)^{0.33}$	روخا و همکاران [۱۹]
(۱۸)	$k_g^2 = \frac{4 D_g \mu_g}{3.14 d_{eq} \left[\varepsilon - \left(\frac{4 Ft}{8} \right)^{2/3} \left(\frac{3 \mu_l U_l}{\rho_l \varepsilon g_{eff} \sin \alpha} \right) \right]^{1/3}}$	سو و همکاران [۲۰]

جدول (۳) مشخصات برج‌های جذب DMF و AN در شرکت پلی‌اکریل ایران

برج جذب AN	برج‌های جذب DMF			پارامتر
	برج شماره ۳	برج شماره ۲	برج شماره ۱	
۱۰/۵	۷/۳۵	۷/۳۵	۷/۳۵	طول برج (m)
۰/۲۳۴	۰/۸۰۴	۰/۷	۰/۵۶	دبی مایع (l/s)
۲۸/۹	۱۴۴۹۰	۴۰۸۰	۶۹۵۰	دبی گاز (l/s)
۰/۲۵۴	۰/۰۰۰۲۵	۰/۰۰۰۱	۰/۰۰۰۱۱	کسر مولی جزء جذب‌شونده ورودی در فاز گاز
۴۲	۴۲	۷۰	۷۴	دمای گاز ورودی (°C)
۱۳	۲۵	۲۵	۲۵	دمای مایع ورودی (°C)

۴- نتایج و تحلیل

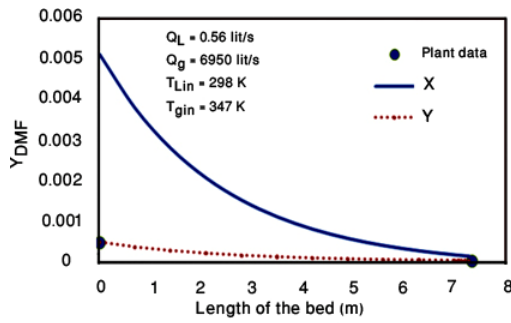
مشخصات برج‌های جذب DMF و AN مربوط به واحد اکریلیک ۱ شرکت پلی‌اکریل ایران در جدول ۳ آورده شده است. البته مشخصات ابعادی مشخصات این پرکن مطابق با مشخصات ابعادی هیچ‌یک از پرکن‌های شناخته شده نبوده و ضرورت داشت تا در این تحقیق اندازه‌گیری‌های ابعادی بر روی آن‌ها انجام گیرد.

۴-۱- مطالعه عملکرد برج جذب DMF

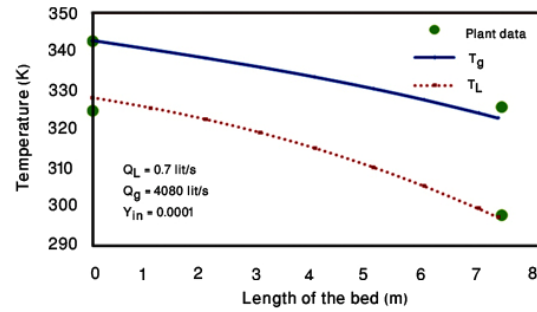
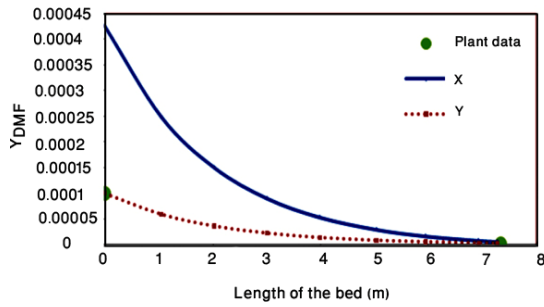
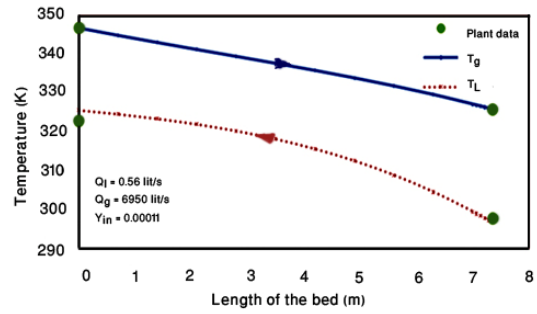
در این بخش عملکرد یک برج جذب با جریان ناهمسو و حاوی پرکن‌های ساختاریافته برای جذب DMF در شرایط عملیاتی مختلف مورد بررسی قرار گرفته است. شکل‌های ۳ تا ۵ توزیع دمای فازهای مایع و گاز و توزیع کسر مولی DMF در فاز گاز در طول برج‌های شماره ۱، ۲ و ۳ را نشان می‌دهد. از آنجایی که برج شماره ۴ دارای شرایط عملیاتی مشابه با برج شماره ۱ می‌باشد، نتایج این برج به طور جداگانه ترسیم نشده است. در پایین برج که میزان کسر مولی جزء جذب‌شونده زیاد است، نیروی محرکه انتقال جرم بیشتر است. لذا شیب تغییرات

کسر مولی در فاز گاز در پایین برج زیاد و با حرکت به سمت بالای برج کاهش می‌یابد. نمودار تغییرات دما در طول برج‌ها عمدتاً منتج از دو اثر انتقال جرم و حرارت همزمان است. تبخیر حلال موجب کاهش دمای مایع در طول برج می‌گردد. از طرفی دیگر، به دلیل بالا بودن دمای فاز گاز، در اثر تبادل حرارت دمای فاز گاز کاهش و انرژی حرارتی به مایع منتقل می‌شود و اثر متضادی نسبت به انتقال حرارت ناشی از انتقال جرم برجای می‌گذارد. با توجه به نمودارهای به دست آمده، اثر غالب، انتقال حرارت جابجایی گاز به مایع است که باعث افزایش دمای مایع می‌شود.

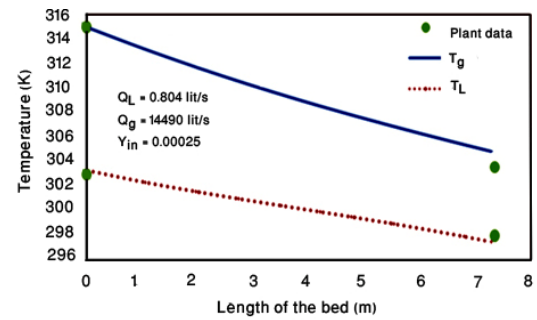
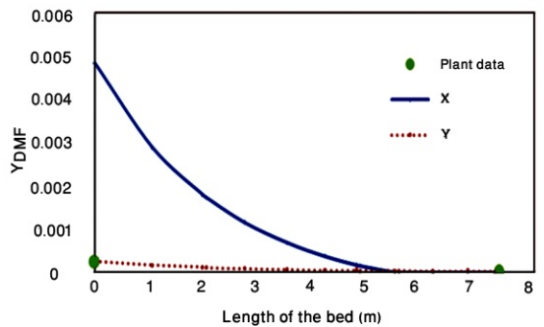
در شکل‌های ۳ تا ۵ نتایج به دست آمده از مدل با داده‌های عملیاتی مربوط به برج‌های موجود در شرکت پلی‌اکریل ایران نیز مقایسه گردیده است. با توجه به اینکه در برج‌های موجود تنها در نقاط پایین و بالای برج امکان نمونه‌گیری وجود داشت، برای هر نمودار تنها دو داده عملیاتی ارائه شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود، نتایج مدل مطابقت بسیار خوبی با داده‌های واحد عملیاتی دارد.



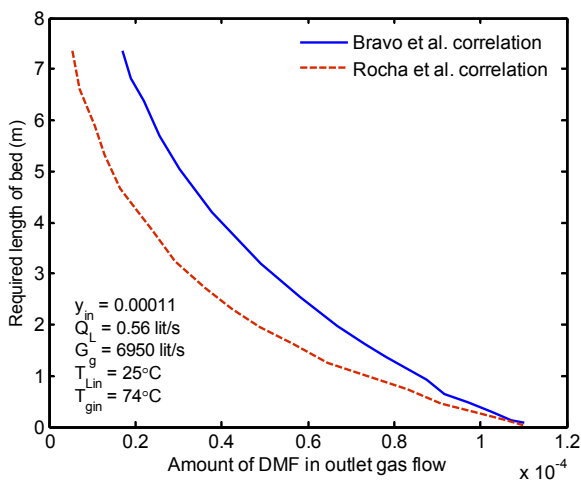
شکل (۳) توزیع کسر مولی DMF در فاز گاز و توزیع دمای فاز گاز و مایع در طول برج جذب DMF شماره ۱



شکل (۴) توزیع کسر مولی DMF در فاز گاز و توزیع دمای فاز گاز و مایع در طول برج جذب DMF شماره ۲



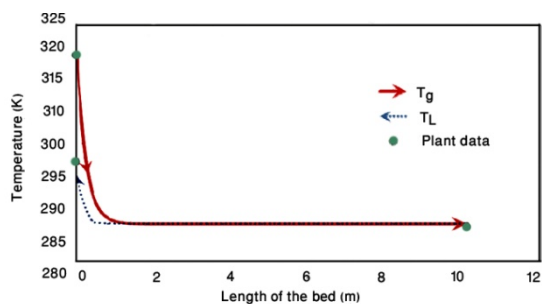
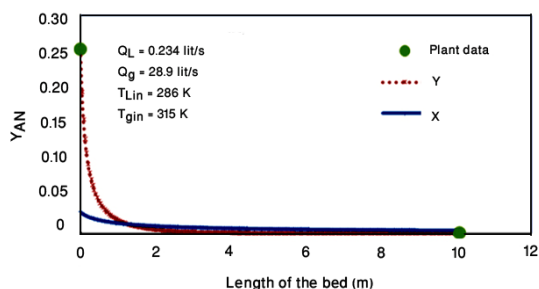
شکل (۵) توزیع کسر مولی DMF در فاز گاز و توزیع دمای فاز گاز و مایع در طول برج جذب DMF شماره ۳



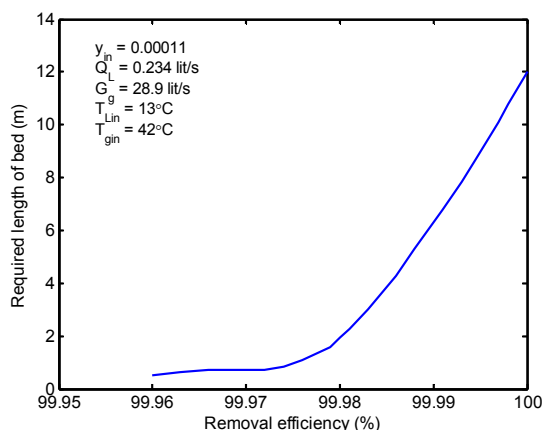
شکل (۶) اثر بکارگیری روابط مختلف برای محاسبه ضریب انتقال جرم در فاز گاز بر طول برج مورد نیاز برای جذب DMF

در شکل ۶ اثر استفاده از دو رابطه تجربی مختلف که برای محاسبه ضریب انتقال جرم در فاز گاز ارائه شده است بر میزان خروجی نشان داده شده است. ضریب انتقال جرم پیش‌بینی شده توسط رابطه تجربی براوو و همکاران^[۱۸] کمتر از رابطه روخا و همکاران^[۱۹] است و بنابراین طول مورد نیاز برای برج کمتر به دست آمده است. این مسئله موضوع بسیار مهمی در مدلسازی فرایندها است. روابط تجربی مربوط به محاسبه پارامترهای مدل تاثیر بسزایی در نتایج مدل داشته و این امر متأسفانه چندان مطلوب نیست، چرا که این تفاوت‌ها می‌تواند یک دست‌آویز غیرعلمی برای تطبیق غیرواقعی نتایج مدل با داده‌های آزمایشگاهی یا صنعتی گردد. به نظر می‌رسد ضروری است تا طی مطالعاتی جامع، دقت روابط تجربی و تاثیرپذیری مدل‌های ریاضی از آن‌ها به طور جداگانه مورد تجزیه و تحلیل قرار گیرد.

و ساخت برج بسیار حائز اهمیت است. با کمک این شکل می توان ارتفاع مورد نیاز برای برج را پیش بینی کرد.



شکل (۸) توزیع کسر مولی AN در فاز گاز و توزیع دمای فازهای گاز و مایع در طول برج جذب AN



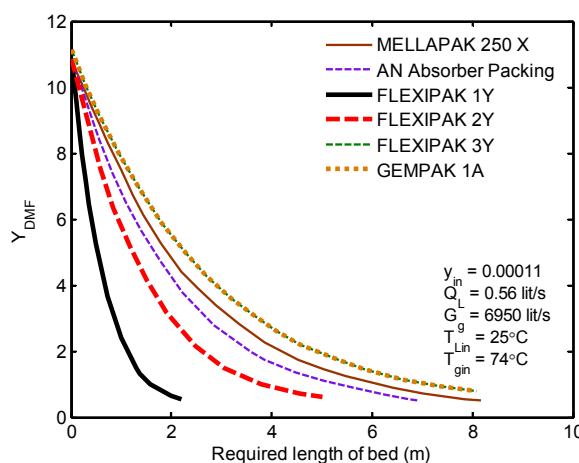
شکل (۹) طول مورد نیاز برای مقدار جداسازی مشخصی از AN

۵- نتیجه گیری کلی

یک مدل ریاضی برای مدلسازی و شبیه سازی برج های جذب دی متیل فرم آمید (DMF) و اکریلونیتریل (AN) واحد اکریلیک ۱ شرکت پلی اکریل ایران ارائه گردید. با توجه به خطای مدل نسبت به مقادیر صنعتی و همچنین محدودیت های برج های صنعتی، مدل ریاضی به خوبی قادر است داده های حاصل از برج های عملیاتی را پیش بینی کند. همچنین نتایج اصلی زیر به دست آمد:

- با بررسی خواص ترمودینامیکی محلول دی متیل فرم آمید- آب مشخص گردید که مدل ضریب

در شکل ۷ تاثیر استفاده از پرکن های ساختاریافته متفاوت بر توزیع غلظت DMF در طول برج شماره ۳ نشان داده شده است. تفاوت در ابعاد و زوایای مشخصه پرکن بر روی سطح موثر انتقال حرارت و در نتیجه بر روی طول برج مورد نیاز تاثیر چشمگیری دارد. استفاده از پرکن های ساختاریافته با سطح موثر بالاتر نیازمند صرف هزینه بیشتر برای خرید است. البته در این صورت، با کاهش طول برج مورد نیاز نیز هزینه ساخت برج نیز کاهش می یابد. این دو اثر متضاد اقتصادی یکی از مسائل مورد توجه کارشناسان طراحی است.



شکل (۷) تاثیر پرکن های مختلف بر طول برج مورد نیاز و توزیع کسر مولی DMF برای جذب مقدار مشخصی DMF

۴-۲- مطالعه عملکرد برج جذب AN

در شکل ۸ کسر مولی AN در فاز گاز و همچنین تغییرات دمای فازهای گاز و مایع در طول برج نشان داده شده است. نتایج به دست آمده از مدل با داده های عملیاتی مقایسه گردیده و تطابق بسیار خوبی مشاهده می شود. مشابه با برج های جذب DMF در اینجا نیز روند کاهشی دمای فاز گاز و افزایشی دمای فاز مایع نشان دهنده اثر انتقال حرارت جابجایی بر اثر دمایی انتقال جرم است. حداقل و حداکثر خطای مدل برای پیش بینی عملکرد برج جذب AN به ترتیب ۱/۷ و ۱۱/۵٪ می باشد.

در شکل ۹ تاثیر میزان درصد جداسازی مشخصی از AN بر روی طول برج مورد نیاز نشان داده شده است. همان طور که انتظار می رود، با افزایش درصد جداسازی طول برج مورد نیاز افزایش می یابد. نکته مهم این است که با افزایش میزان جداسازی شیب منحنی طول مورد نیاز نیز افزایش می یابد. این مسئله به منظور در نظر گرفتن ملاحظات اقتصادی در طراحی

مراجع

- [1] A. Fiorito, F. Larese, S. Molinari, and T. Zanin (1997) "Liver function alterations in synthetic leather workers exposed to dimethylformamide", *American Journal of Industrial Medicine*, 32(3), 255-260.
- [2] S. Budavari (1996) *The Merck Index*, Merck Company, Rahway, NJ.
- [3] V. M. Kareeva, V. B. Krasha, and N. I. Suitka (1978) *Removal of DMF from gases*.
- [4] K. Seki (1986) *Recovery of dimethylformamide*.
- [5] Z. Shunhua, S. Xijin, and P. Ning (2008) "Recovery technology of DMF from wet type polyurethane synthetic leather waste gas", *Chinese Journal of Chemical Engineering*, 16(3), 461-464.
- [6] S. J. Feng (2005) "Current status of leather industry", *World Plastics*, 23(10), 30-32.
- [7] G. L. Xie (2003) "Current situation and development of PU leather in Chineses mainland", *Polyurethane Industry*, 18(4), 1-4.
- [8] F. Tao, W. S. Sim, G. Q. Xu, and M. H. Qiao (2001) "Selective binding of the cyano group in acrylonitrile adsorption on Si(100)-2×1", *Journal of the American Chemical Society*, 123(38), 9397-9403.
- [9] A. Niksiar, and A. Rahimi (2009) "Energy and exergy analysis for cocurrent gas spray cooling systems based on the results of mathematical modeling and simulation", *Energy*, 34(1), 14-21.
- [10] G. Wypych (2001) *Handbook of Solvents*, ChemTec Publishing-Wiliam Andrew, Toronto-NewYork.
- [11] S. Y. Xiaolan, Q. Li, and Z. Chen (1998) "Vapor-liquid equilibria study for water DMF-formic acid", *J. Chem. Ind. Eng.*, 49(3), 347-352.
- [12] G. Volpiceli (1979) "Vapor-liquid and liquid-liquid equilibria of the system acrylinitrile-acetonitrile-water", *Journal of Chemical Engineering*, 13, 150-154.
- [13] B. M. Suryavanshi, and L. R. Dongre (2006) *Transport Phenomena*, Nirali Prakashan.
- [14] E. Brunazzi, G. Nardini, A. Paglianti, and L. Potarca (1995) "Interfacial area of mellapark packing: absorption of 1,1,1-trichloroethane by genesorb 300", *Chemical Engineering & Technology*, 18, 248.
- [15] J. R. Fair, and J. L. Bravo (1990) "Distillation columns containing structured packings", *Chemical Engineering Progress*, 86, 19.
- [16] Z. Olujic (2004) "Predicting the efficiency of corrugated sheet structured packing with large specific surface area", *Chemical and Biochemical Engineering Quarterly*, 18(2), 89-96.
- [17] R. Hiegbie (1935) "The rate of absorption of the pure gas in to a still liquid during short periods of exposure", *Transactions of the American Institute of Chemical Engineers*, 31, 365.
- [18] J. L. Bravo, J. A. Rocha, and J. R. Fair (1986) "Pressure drop in structured packing", *Hydrocarbon Processing*, 56, 45-49.
- [19] J. A. Rocha, J. L. Bravo, and J. R. Fair (1996) "Distillation columns containing structured packings: A comprehensive model for their performance. 2. Mass-transfer models", *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 35, 1660.
- [20] Z. P. Xu (2000) "Predicting of mass transfer in packed columns containing structured packings", *Trans IChem., Part A*, 78, 91-98.
- [21] R. B. Treybal (1968) *Mass transfer operation*, McGraw-Hill, New York.

اکتیویته NRTL و معادله حالت PRSV نسبت به مدل‌های دیگر مناسب‌تر می‌باشند. برای محلول اکریلونیتریل-آب، مدل ضریب اکتیویته ون لار و ردلیچ-کیستر و معادله حالت PRSV مناسب تشخیص داده شد.

• روابط تجربی مربوط به محاسبه پارامترهای مدل تاثیر بسزایی در نتایج دل داشته و این تفاوت‌ها می‌تواند یک دست‌آویز غیرعلمی برای تطبیق غیرواقعی نتایج مدل با داده‌های آزمایشگاهی یا صنعتی گردد.

علائم اختصاری

a_e	سطح موثر انتقال جرم پراکن (m^2/m^3)
a_p	سطح پراکن (m^2/m^3)
C	ظرفیت گرمایی ویژه (J/mol.K)
D	ضریب نفوذ مولکولی (m^2/s)
D_c	قطر برج (m)
d_{eq}	قطر معادل کانال (m)
d_{hg}	قطر هیدرولیک کانال گاز (m)
G	دبی گاز ($\text{mol}/\text{m}^2.\text{s}$)
G_s	دبی گاز عاری از جزء جذب‌شونده ($\text{mol}/\text{m}^2.\text{s}$)
k_g	ضریب انتقال جرم در فاز گاز ($\text{kmol}/\text{m}^2.\text{s.kPa}$)
k_l	ضریب انتقال جرم در فاز مایع (m/s)
L	دبی مایع ($\text{mol}/\text{m}^2.\text{s}$)
P	فشار (Pa)
P_A^*	فشار بخار خالص A (Pa)
T	دما (K)
U_{ge}	سرعت واقعی فاز گاز (m/s)
U_{le}	سرعت واقعی فاز مایع (m/s)
u	سرعت متوسط سیال (m/s)
X	کسر مولی در فاز مایع
Y	کسر مولی در فاز گاز
	حروف یونانی
ρ	دانسیته مایع (kg/m^3)
μ	ویسکوزیته ($\text{kg}/\text{m.s}$)
λ_i	گرمای نهان تبخیر (J/mol)
ε	تخلخل بستر پر شده (-)
γ	ضریب اکتیویته

Mathematical modeling of DMF and AN absorptions in packed towers in Acrylic No.1 unit of Iran Polyacryl Corporation

Amir Rahimi^{1,*}, Fakhry Seyedeyn-Azad², Pejman Rouhi³

1- Department of Chemical Engineering, University of Isfahan, Isfahan, Iran (rahimi@eng.ui.ac.ir)

2- Department of Chemical Engineering, University of Isfahan, Isfahan, Iran (fsazad@eng.ui.ac.ir)

3- Department of Chemical Engineering, University of Isfahan, Isfahan, Iran
(as_4044@yahoo.com)

ABSTRACT

In this study, mathematical modeling and simulation of Dimethylformamide (DMF) and Acrylonitrile (AN) absorber columns of Acrylic No. 1 unit of Iran Polyacryl Corporation were performed. An investigation and comparison of different activity coefficient models and equation of states showed that NRTL model for predicting activity coefficient and PRSV for equation of state were suitable for DMF-water. For an AN-water solution, Van Laar and Redlich-Kister were suitable for predicting activity coefficient and PRSV for equation of state. The results of the model were compared with the data obtained from the plant. It was shown that the results of solution of basic equation were influenced with different correlation for predicting of mass and heat transfer coefficient, effective area of heat and mass transfer as well as geometric structure of the packing. The effects of different operation parameters on the result of the model such as separation efficiency are also investigated.

ARTICLE INFO

Article history:

Received: September 02, 2012

Revised: February 20, 2014

Accepted: March 01, 2014

Key words:

Physical absorption

Dimethyl formamide

Acrylonitrile

Activity coefficient

Mathematical modeling

All right reserved.

* Corresponding author