

## مدل سازی ریاضی جداسازی دی اکسید کربن از مخلوط گازی نیتروژن و دی اکسید کربن توسط تماس دهنده غشایی الیاف توخالی پلی پروپیلن در حضور محلول آمین ها

محمد رضا طلاقت<sup>۱\*</sup>، احمد رضا بهمنی<sup>۱</sup>

۱. بخش مهندسی شیمی دانشگاه صنعتی شیراز، شیراز، ایران

### چکیده

در این مقاله مدل سازی ریاضی دفع دی اکسید کربن از مخلوط گازی نیتروژن و دی اکسید کربن در حضور آمین ها در یک تماس دهنده غشایی الیاف تو خالی پلی پروپیلن بررسی می شود. مدل سازی در هر دو جهت شعاعی و محوری بر مبنای حالت کاملاً مرطوب برای جریان غیر همسوی گاز-مایع مورد بررسی قرار می گیرد. برای ارزیابی مدل، نتایج حاصل از این مدل سازی با داده های تجربی و نتایج حاصل از نرم افزار COMSOL با یکدیگر مقایسه می شوند. نتایج نشان می دهد که درصد دفع CO<sub>2</sub> با افزایش دبی جریان مایع، تعداد الیاف ها، طول غشا، غلظت حلال و نسبت تخلخل به انحنا افزایش می یابد، ولی با افزایش دبی جریان گاز کاهش می یابد. همچنین، نتایج نشان داد که درصد دفع CO<sub>2</sub> به وسیله این غشا بیشتر از غشای پلی وینیلیدن دی فلوراید و پلی تترافلورو اتیلن در حضور منواتانول آمین است. نهایتاً، نتایج نشان داد که با افزایش خیس شدگی میزان جداسازی این گاز کاهش می یابد.

### مشخصات مقاله

تاریخچه مقاله:

دریافت: ۴ خرداد ۹۵

دریافت پس از اصلاح: ۱۹ بهمن ۹۵

پذیرش نهایی: ۲ خرداد ۹۶

کلمات کلیدی:

حذف دی اکسید کربن

مدل سازی ریاضی

تماس دهنده غشایی

حلال آمینی

الیاف توخالی

جداسازی

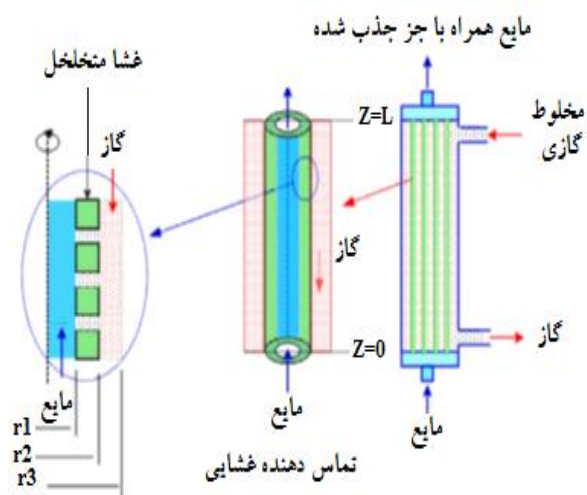
## ۱-مقدمه

در گذشته انرژی مورد نیاز صنایع بیشتر از سوزاندن سوخت‌های فسیلی همچون زغال سنگ، نفت و گاز طبیعی تهیه می‌شد. لذا می‌توان نتیجه گرفت که این صنایع سهم قابل توجهی در انتشار گازهای گلخانه‌ای دارند. گازهایی که در اثر مصرف سوخت‌های فسیلی تولید شده‌اند، شامل گازهای نیتروژن، اکسیژن، بخار آب، دی‌اکسید کربن، دی‌اکسید گوگرد و اکسیدهای نیتروژن دار و مقدار کمی اسید کلریدریک است. امروزه نه تنها توسعه، بلکه ادامه زندگی نیز نیازمند انرژی است. امروزه تأمین انرژی از طریق حامل‌های متنوع چون نفت، گاز، زغال سنگ، فرآورده‌های حاصل آن و انرژی‌های تجدیدپذیر صورت می‌گیرد. با رشد روزافزون صنایع در دنیا و به ویژه در کشورهای صنعتی و نیاز شدید به انرژی، کشورهای توسعه یافته با توجه به فراوانی پراکندگی گاز طبیعی در جهان، هزینه کمتر استخراج، کاهش ذخایر نفتی، آلاینده‌های کمتر محیط زیست در قیاس با سایر سوخت‌های فسیلی در صد جانمایی گاز طبیعی با نفت برآمدند. دولت‌ها و صاحبان صنایع امروزه به دنبال آن دسته از حامل‌های انرژی هستند که آلاینده‌های کمتری تولید می‌کنند. به همین دلیل جهان به گاز طبیعی روی آورده است. در واقع گاز طبیعی در هر واحد انرژی حدود ۲۴ درصد نسبت به نفت خام و ۴۲ درصد نسبت به زغال سنگ، گازهای آلاینده کمتری تولید می‌کند و این بیانگر آن است که می‌توان انرژی بیشتری مصرف و در مقایسه با نفت خام و زغال سنگ، آلاینده‌های کمتری تولید کرد [۱].

روش‌های مختلفی برای جداسازی دی‌اکسید کربن مورد استفاده قرار می‌گیرد که می‌توان به روشهایی مانند جذب شیمیایی، جذب فیزیکی، جذب سطحی با نوسان فشاری و دمایی و تقطیر برودتی اشاره نمود. در این راستا، غشاها برای جداسازی گونه‌های مختلفی از مواد در حالات مایع و گاز توسعه یافته‌اند. با توجه به روش جداسازی با غشاها نسبت به روش‌های دیگری چون تقطیر، جذب سطحی، کریستالیزاسیون و استخراج مایع-مایع جدیدتر است ولی با توجه به کارایی و سهولت استفاده طی دو دهه اخیر، گسترش چشمگیری در استفاده از آن مشاهده شده است [۲].

## ۱-۱- استفاده از غشاء:

یکی از روش‌های نوین برای جداسازی دی‌اکسید کربن از جریان‌های گازی، استفاده از غشاها انتخابگر است که



شکل (۱) شکل کلی تماس دهنده غشایی

می‌توانند دی‌اکسید کربن را از گازهای حاصل از احتراق، گاز طبیعی، نیتروژن و هیدروژن جداسازی کنند. غشا را می‌توان به عنوان یک فاز که اجزای خوراک به صورت انتخابی از آن عبور می‌کنند، تعریف نمود. به عبارت بهتر، غشاء به صورت فازی که اجزای جداشونده خوراک با سرعت‌های متفاوت از آن عبور می‌کنند، عمل می‌کند.

غشاهاى مختلف بسته به نوع عمل جداسازى به شیوه-هاى گوناگون کار می‌کنند [۳]. اکثر غشاهاى پلیمرى مورد استفاده از نوع الیاف توخالی می‌باشند [۲]. با توجه به مزایای نسبی فرآیندهای غشایی نسبت به روش‌های سنتی جذب با حلال، کاربرد این روش در سال‌های اخیر در جهان رو به گسترش بوده است. از مزایای عمده فرآیندهای غشایی می‌توان به اقتصادی بودن فرآیند، کم بودن انرژی مصرفی، کم بودن آثار سوء زیست محیطی و کوچک بودن اندازه این تجهیزات و کاربرد به صورت ترکیبی با ستون‌های جذب اشاره کرد [۴-۵]. تماس دهنده‌های غشایی نوع جدیدی از غشاهاى ریز متخلخل هستند که معمولاً به شکل الیاف توخالی ساخته میشوند. به طور کلی، نقش مهم غشاها جلوگیری از مخلوط شدن دو فاز محلول در یکدیگر است.

کلی‌ترین فرآیند غشایی در شکل (۱) نشان داده شده است که در این جداسازی خوراک به دو بخش بازمانده (آن بخش از خوراک که از غشاء نمی‌گذرد یعنی بازداشته) و تراویده (آن بخش از خوراک که از غشاء عبور می‌نماید) تقسیم می‌شود. غالباً غشاز یک فیلم نازک متخلخل بسیاری ساخته می‌شود ولی این فیلم را می‌توان از موادی مانند بسیار متخلخل سرامیک و مواد فلزی نیز تهیه نمود.

تماس دهنده‌های غشایی گاز - مایع دارای مزایای

بینی ضرایب انتقال جرم فاز گاز و فاز مایع برای جذب دی اکسید کربن توسط حلال های آبی در درون غشای الیاف توخالی پلی پروپیلن ارائه داد. باهومیک و همکارانش<sup>۷</sup> [۱۲] استفاده از یک تماس دهنده ی غشای پلی پروپیلن که با چرخه ی نوسان فشار کار می کرد را مورد بررسی قرار دادند. آن ها در این تحقیق از روشی که به جذب نوسان فشار سریع مشهور است، برای جداسازی دی اکسید کربن استفاده کردند. در سال ۱۹۹۷ چان و لی<sup>۸</sup> [۱۳] جذب دی اکسید کربن توسط حلال کربنات پتاسیم با استفاده از غشای الیاف توخالی را مورد بررسی قرار دادند. آنها از مدول های جریان موازی برای جذب دی اکسید کربن در تماس دهنده های غشای الیاف توخالی به علت سهولت در ساخت و هم چنین مناسب بودنشان برای پیش بینی ضرایب انتقال جرم استفاده کردند. در سال ۱۹۹۸ باهومیک<sup>۹</sup> [۱۴] جذب گاز دی اکسید کربن را از مخلوط گازی  $CO_2/N_2$  و  $CO_2$  خالص توسط جاذب آب در درون غشای الیاف تو خالی ارائه داد. در سال ۲۰۰۲ فرون و جس<sup>۱۰</sup> [۱۵] و هم چنین کومر و همکارانش<sup>۱۱</sup> [۱۶] جذب دی اکسید کربن از گازهای مختلف توسط مایع جاذب جدید کورال<sup>۱۲</sup> با استفاده از غشاهای پلی الفین را مورد آزمایش قرار دادند. وانگ و همکارانش<sup>۱۳</sup> [۱۷] در سال ۲۰۰۴ اثر جاذب دی اتانول آمین (DEA) بر خواص سطحی (ساختار و کشش سطحی) غشاهای الیاف توخالی از جنس پلی پروپیلن مورد بررسی قرار دارند. نتایج این بررسی، تغییر در ساختار حفره ها و زبری سطح را نشان می داد. در سال ۲۰۰۵ یون و همکارانش<sup>۱۴</sup> [۱۸] یک دستگاه فرآیند هیبریدی تماس دهنده غشایی برای جذب دی اکسید کربن از جریان گاز استفاده کردند. آن ها از یک مدل غشایی الیاف توخالی پلی وینیلیدن دی فلوراید (PVDF) حفره دار استفاده کردند و عملکرد آن را با برج های پر شده مقیاسه نمودند. ژانگ و همکارانش<sup>۱۵</sup> در سال ۲۰۰۶ [۱۹] جذب  $CO_2$  توسط تماس دهنده ی غشای الیاف توخالی به کمک آب رقیق و حلال دی اتانول آمین را

بیشتری نسبت به روش های دیگر هستند. این مزیت ها سبب می شود که از غشاها بیشتر به منظور جداسازی گازهای اسیدی ناشی از گازهای سوختی، گازهای طبیعی و جریان های گازی مورد استفاده قرار داده شود و این مسئله منجر به تحقیقات و مشاهدات متعددی در این زمینه شده است. این تحقیقات در بخش ذیل شرح داده شده است.

## ۲-۱- مروری بر تحقیقات

در سال ۱۹۸۵ کی و کاسلر<sup>۱</sup> [۶] از اولین کسانی بودند که ایده استفاده از غشای الیاف توخالی ریز متخلخل برای جذب دی اکسید کربن با استفاده از غشایی از جنس پلی پروپیلن را در حالت خشک (عدم ورود مایع جاذب به درون غشا) در حضور محلول جاذب هیدروکسید سدیم تحقیق نمودند. آنها دریافتند که شار جرمی هم به فراریت مواد و هم به حلالیت آن ها در آب وابسته است. در سال ۱۹۸۹ یانگ و کاسلر<sup>۲</sup> [۷] اثر جریان های موازی و متقاطع در غشاهای پلی پروپیلن ریز متخلخل را مورد مطالعه قرار دادند. در این مدل آب در درون مجرا و گاز در درون پوسته جریان داشت. در سال ۱۹۹۳ کارور و سیرکار<sup>۳</sup> [۸] آزمایشات جامعی در زمینه ی غشای الیاف تو خالی انجام دادند. آن ها جذب دی اکسید کربن خالص،  $SO_2$  خالص، دی اکسید کربن از مخلوط  $CO_2/N_2$  و  $SO_2$  از مخلوط  $SO_2/Air$  در درون آب را مورد مطالعه قرار دادند. آن ها از مدل جریان موازی با استفاده از الیاف های توخالی پلی پروپیلن دارای حفره های ریز استفاده کردند. در این مدل آب از درون مجرا عبور می کرد. در سال ۱۹۹۳ کریولن و همکارانش<sup>۴</sup> [۹] در زمینه ی جذب دیگر گازهای اسیدی با استفاده از غشا تحقیقاتی انجام دادند. آن ها هم چنین تأثیر واکنش شیمیایی بر روی ضرایب انتقال جرم را توسط شبیه سازی و آزمایش مورد بررسی قرار دادند. در سال ۱۹۹۴ سو و همکارانش<sup>۵</sup> [۱۰] استفاده از تماس دهنده های غشایی را برای جداسازی الفین از مواد اولیه پتروشیمی پیشنهاد نمودند و نقره را به عنوان یک عامل کمپلکس کننده به منظور پیشرفت فلاکس و انتخاب پذیری مورد بررسی قرار دادند. در سال ۱۹۹۶ رانگ والا<sup>۶</sup> [۱۱] روابطی برای پیش

7 Bhaumik et al.

8 Chun and Lee

9 Bhaumik et al.

10 Feron and Jansen

11 Kumar et al.

12 CORAL

13 Wang et al.

14 Yeon et al.

15 Zhang et al.

1 Qi and Cussler

2 Yang and Cussler

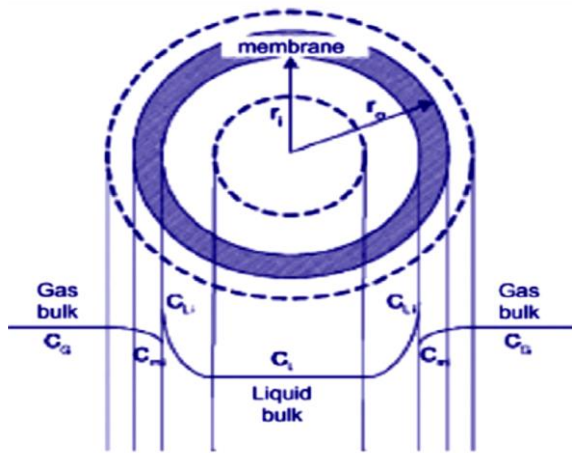
3 Karoor and Sirkar

4 Kreulen et al.

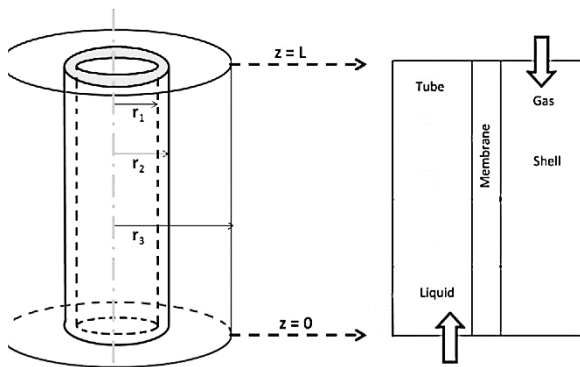
5 Tsou et al.

6 Rangwala

مدلسازی با نتایج بدست آمده از نرم افزار COMSOL و داده های آزمایشگاهی را اشاره نمود.



شکل (۲) فرآیند انتقال جرم در یک غشاء تماس دهنده الیاف تو خالی



شکل (۳) جداسازی در یک تماس دهنده غشایی الیاف تو خالی

## ۲- مدلسازی انتقال جرم به منظور جداسازی

### دی اکسید کربن از مخلوط گازی

عملیات جداسازی  $CO_2$  در حضور تماس دهنده غشایی پلی پروپیلن با استفاده از جاذب های آمینی مختلف در یک مدول الیاف تو خالی در نظر گرفته می شود. در شکل (۲) انتقال جرم در یک تماس دهنده غشایی الیاف تو خالی نشان داده شده است [۵]. در این مدلسازی فاز گازی که شامل مخلوط  $CO_2$  و  $N_2$  است درون پوسته و فاز مایع که همان جاذب می باشد، درون لوله جریان دارند.

جهت جریان فاز گاز و مایع مخالف یکدیگر می باشد. در این فرآیند غشاء بطور کامل خیس در نظر گرفته شده، بدین معنی که حلال به تمام منافذ غشاء نفوذ می کند و جداسازی به دلیل حضور آمین ها، همراه با واکنش شیمیایی می باشد.

مورد مطالعه قراردادند. در سال ۲۰۰۷ یان و همکارانش<sup>۱</sup> [۲۰] بر روی مایع جاذب جدیدی بر پایه نمک اسید آمینی در تماس دهنده های الیاف تو خالی پروپیلن به صورت تجربی مطالعه کردند. در سال ۲۰۰۸ کشاورز و همکارانش [۲۱] مدلی ریاضی برای جذب دی اکسید کربن و سولفید هیدروژن توسط تماس دهنده های غشایی الیاف تو خالی تحت شرایط عدم خیزی در محلول DEA ارائه دادند. پارک و همکاران<sup>۲</sup> [۲۲] از یک غشای الیاف تو خالی از جنس PVDF به منظور جذب  $SO_2$  استفاده نمودند. سیری چای کانوفاپدلت و همکارانش<sup>۳</sup> [۲۳] در سال ۲۰۰۹ دفع دی اکسید کربن در یک تماس دهنده های غشایی سرامیکی در حضور محلول منواتانول آمین (MEA) را مورد مطالعه قراردادند. مرزوک و همکارانش<sup>۴</sup> [۲۴] در سال ۲۰۱۰ دفع دی اکسید کربن از مخلوط گازی  $CO_2/CH_4$  را در فشارهای بالا (تا ۵۰ بار) را مورد بررسی قراردادند.

منصوری زاده [۲۵] در سال ۲۰۱۲ جذب و دفع دی اکسید کربن توسط تماس دهنده های غشایی پلی وینیلیدن دی فلوراید به صورت آزمایشگاهی مورد مطالعه قرارداد. در سال ۲۰۱۳ رهبری سی سخت و همکارانش [۲۶] دفع دی اکسید کربن از آب توسط تماس دهنده های غشایی پلی سولفان را مورد مطالعه قراردادند. آن ها هم چنین دفع دی اکسید کربن را در حضور محلول DEA در یک تماس دهنده های غشایی پلی وینیلیدن دی فلوراید را نیز مورد بررسی قراردادند.

هدف اصلی این مطالعه، مدلسازی ریاضی جداسازی دی اکسید کربن از مخلوط گازی  $CO_2/N_2$  در یک تماس دهنده های غشایی الیاف تو خالی پلی پروپیلن در حضور محلول های آمین شامل n-متیل دی اتانول آمین (MDEA)، ۲-آمین-۲-متیل-۱-پروپانول (AMP)، DEA و MEA به عنوان سرعت دهنده واکنش و همچنین اثر پارامترهای مختلف بر روی این جداسازی است. بررسی هایی که در این تحقیق انجام شده و آن را از سایر پژوهش های مشابه دیگر متمایز می سازد را می توان به بررسی درصد جداسازی دی اکسید کربن توسط سه نوع غشای مختلف پلی پروپیلن (PP)، پلی وینیلیدن دی فلوراید و پلی تترافلورو اتیلن (PTFE)، بعلاوه اثر خیس شدگی بر روی درصد جداسازی دی اکسید کربن به وسیله غشای الیاف تو خالی پلی پروپیلن و مقایسه نتایج حاصل از این

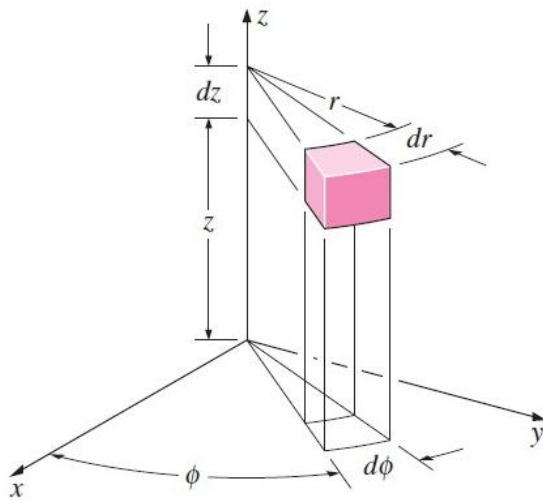
1 Yan et al.

2 Park et al.

3 Koonaphapdeelert et al.

4 Marzouk et al.

$$s_z = r \Delta \phi \Delta r \quad (3)$$



شکل (۴) نمایی از یک المان استوانه‌ای

پ

$$s_\phi = r \Delta r \Delta z \quad (4)$$

$$\Delta V = r \Delta r \Delta z \Delta \phi \quad (5)$$

با جایگذاری روابط (۲) تا (۴) در معادله (۱) و تقسیم معادله حاصل شده بر رابطه (۵) و با استفاده از تعریف مشتق میتوان نوشت:

$$-\left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (N_{Ar} r) + \frac{\partial N_{Az}}{\partial z} + \frac{\partial N_{A\phi}}{r \partial \phi} \right] \quad (6)$$

$$\pm R_A = \frac{\partial C_A}{\partial t}$$

با استفاده از قانون فیک داریم:

$$N_{Ar} = J_{Ar} + C_A V_r = -D_{AB} \frac{\partial C_A}{\partial r} + C_A V_r \quad (7)$$

$$N_{Az} = J_{Az} + C_A V_z = -D_{AB} \frac{\partial C_A}{\partial z} + C_A V_z \quad (8)$$

$$N_{A\phi} = J_{A\phi} + C_A V_\phi = -D_{AB} \frac{\partial C_A}{\partial \phi} + C_A V_\phi \quad (9)$$

$J$ ،  $V$ ،  $D$  و  $r$  به ترتیب نشان دهنده شار نفوذی، سرعت، ضریب نفوذ و شعاع می باشند. با جایگذاری روابط (۷) تا (۹) در معادله (۶) خواهیم داشت:

$$-\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[ -D_{AB} r \frac{\partial C_A}{\partial r} + C_A r V_r \right] - \frac{\partial}{\partial z} \left[ -D_{AB} \frac{\partial C_A}{\partial z} + C_A V_z \right] - \frac{\partial}{r \partial \phi} \left[ -D_{AB} \frac{\partial C_A}{\partial \phi} + C_A V_\phi \right] \pm R_A = \frac{\partial C_A}{\partial t} \quad (10)$$

جداسازی  $CO_2$  در قسمت غشاء به کمک نفوذ و واکنش شیمیایی و در قسمت لوله همراه با واکنش شیمیایی انجام می شود. در پوسته، غشاء و لوله نفوذ محوری و شعاعی حاکم می باشد در حالی که تنها در پوسته و لوله جابجایی در نظر گرفته می شود. نوع جریان گاز در پوسته نیز توسط مدل سطح آزاد هاپل<sup>۱</sup> مشخص می شود. در شکل (۳) نمایی از جداسازی  $CO_2$  در حضور تماس دهنده غشایی نشان داده شده است.

مخلوط گاز از سمت پوسته وارد می شود ( $z=L$ )، در صورتی که حلال مایع از سمت لوله وارد می شود ( $z=0$ ). دی اکسید کربن مخلوط گازی، توسط غشاء از طریق نفوذ و سپس جذب همراه با واکنش توسط حلال حذف می شود [۵]. فرآیند جداسازی شامل سه مرحله اصلی می باشد [۵]:

- انتقال گاز حل شده از میان توده فاز گاز تا سطح غشاء
- انتقال از میان حفره های غشاء.
- انتقال از سطح مشترک مایع و غشاء به داخل توده مایع

برای دستیابی به معادلات حاکم نوشتن موازنه جرم الزامی است. فرضیات مورد استفاده در مدل سازی عبارتند از:

- (۱) شرایط پایا است.
- (۲) گاز ایده آل فرض شده است.
- (۳) جریان فازهای گاز و مایع در تماس دهنده آرام است.
- (۴) پروفایل سرعت برای فاز گازی در پوسته و برای فاز مایع در مجرا به طور کامل گسترش یافته است.
- (۵) در سطح تماس بین غشاء و فاز گازی قانون هنری<sup>۲</sup> برقرار است.

(۶) غشاء کاملاً خیس در نظر گرفته شده است.

با توجه به شکل (۴)، برای یک المان ثابت حجم (که برابر با  $\Delta r \Delta z \Delta \phi$  می باشد) با استفاده از قانون بقای جرم می توان موازنه جرم را به صورت زیر نوشت:

$$N_{Ar} M_A S_r \Big|_r - N_{Ar} M_A S_r \Big|_{r+\Delta r} + N_{Az} M_A S_z \Big|_z - N_{Az} M_A S_z \Big|_{z+\Delta z} + N_{A\phi} M_A S_\phi \Big|_\phi - N_{A\phi} M_A S_\phi \Big|_{\phi+\Delta \phi} \quad (1)$$

$$\pm r \Delta r \Delta z \Delta \phi M_A R_A = M_A r \Delta r \Delta z \Delta \phi \frac{\partial C_A}{\partial t}$$

$N$ ،  $S$ ،  $R$  و  $C$  به ترتیب نشان دهنده فلاکس کلی انتقال جرم، مساحت، سرعت واکنش شیمیایی و غلظت می باشند.

هم چنین داریم:

$$s_r = r \Delta z \Delta \phi \quad (2)$$

1 Happel  
2 Henry's law

در رابطه بالا  $u$  سرعت متوسط جریان در لوله و  $r_1$  شعاع پوسته می باشد. شرایط مرزی عبارتند از:

$$r = 0, \frac{\partial C_{i-tube}}{\partial r} = 0, \quad (17)$$

(symmetry,  $i = CO_2$ ; solvent)

$$r = r_1, C_{CO_2-tube} = C_{CO_2-membrane}; \quad (18)$$

$$C_{sol-tube} = C_{sol-membrane}$$

$$z = 0; C_{CO_2-tube} = C_{CO_2-membrane}; \quad (19)$$

$$C_{sol-tube} = C_{sol-tube, initial}$$

تقارن در جهت شعاع الیاف توخالی و جاذب غیر فرار نیز جزء فرضیات است. هم چنین از قانون هنری برای ارتباط دادن غلظت جزء حل شونده در فصل مشترک فاز مایع-غشاء استفاده شده است.

### ۲-۲-۲-مدل سازی قسمت غشاء:

در این قسمت به دلیل نفوذ حلال به منافذ غشاء، علاوه بر ترم نفوذ، جداسازی با واکنش شیمیایی نیز همراه است در صورتی که ترم جابجایی برابر با صفر می باشد. بنابراین معادلات حاکم به صورت زیر می باشد:

$$V_z = V_\phi = V_r = \frac{\partial C_A}{\partial \phi} = \frac{\partial^2 C_A}{\partial \phi^2} = 0 \quad (20)$$

$$D_{CO_2-membrane} \left[ \frac{\partial^2 C_{CO_2-membrane}}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C_{CO_2-membrane}}{\partial r} + \frac{\partial^2 C_{CO_2-membrane}}{\partial z^2} \right] + R_{CO_2} = 0 \quad (21)$$

$$D_{sol-membrane} \left[ \frac{\partial^2 C_{sol-membrane}}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C_{sol-membrane}}{\partial r} + \frac{\partial^2 C_{sol-membrane}}{\partial z^2} \right] + R_{sol} = 0 \quad (22)$$

شرایط مرزی عبارتند از:

$$r = r_1; C_{CO_2-membrane} = C_{CO_2-tube}; \quad (23)$$

$$C_{sol-membrane} = C_{sol-tube}$$

با فرض ثابت بودن غلظت کل رابطه زیر حاصل می شود:

$$\frac{\partial C_A}{\partial t} + V_r \frac{\partial C_A}{\partial r} + V_z \frac{\partial C_A}{\partial z} + \frac{1}{r} V_\phi \frac{\partial C_A}{\partial \phi} = D_{AB} \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial C_A}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 C_A}{\partial \phi^2} \right] \pm R_A \quad (11)$$

معادله (۱۱)، معادله کلی انتقال جرم در مختصات استوانه در هر سه جهت  $(r, z, \phi)$  می باشد. با استفاده از فرضیات موجود معادلات حاکم بر هر سه ناحیه لوله، غشاء و پوسته بدست می آید. سمت راست معادله بالا، بیانگر ترم های نفوذ و واکنش می باشد، در صورتی که سمت چپ معادله، ترم جابجایی را بیان می کند. به عبارت دیگر میتوان نوشت:

$$-\nabla N_i \pm R_i = V_z \frac{\partial C_i}{\partial z} \quad (12)$$

### ۲-۱-۲-مدل سازی قسمت لوله:

در ناحیه لوله حرکت جریان در راستای طول است لذا:

$$V_\phi = V_r = \frac{\partial C_A}{\partial \phi} = \frac{\partial^2 C_A}{\partial \phi^2} = 0 \quad (13)$$

با توجه به فرضیات، معادلات حاکم برای حل شونده و حلال، معادله برای ناحیه لوله به صورت زیر نوشته می شود:

$$D_{CO_2-tube} \left[ \frac{\partial^2 C_{CO_2-tube}}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C_{CO_2-tube}}{\partial r} + \frac{\partial^2 C_{CO_2-tube}}{\partial z^2} \right] + R_{CO_2} \quad (14)$$

$$= V_{z-tube} \frac{\partial C_{CO_2-tube}}{\partial z}$$

$$D_{sol-tube} \left[ \frac{\partial^2 C_{sol-tube}}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C_{sol-tube}}{\partial r} + \frac{\partial^2 C_{sol-tube}}{\partial z^2} \right] + R_{sol} \quad (15)$$

$$= V_{z-tube} \frac{\partial C_{sol-tube}}{\partial z}$$

چون که قطر الیاف بسیار کم می باشد، توزیع سرعت در لوله از جریان آرام نیوتنی پیروی می کند و پروفایل داخل لوله ها سهمی می باشد [۲۷].

$$V_{z-tube} = 2u \left[ 1 - \left( \frac{r}{r_1} \right)^2 \right] \quad (16)$$

توخالی پلی پروپیلن در حضور محلول آمین ها

$$r = r_3; \frac{\partial C_{CO_2-shell}}{\partial r} = 0 \quad (31)$$

$$z = L; C_{CO_2-shell} = C_{CO_2-shell, initial} \quad (32)$$

پارامترهای استفاده شده در مدل سازی و سرعت واکنش دی اکسید کربن با آمین ها و پارامترهای سینتیکی واکنش به ترتیب در جدول های (۱) و (۲) آمده است. در جدول (۳) نیز خواص فیزیکی غشای مورد استفاده آورده شده است.

جدول (۱) سرعت واکنش آمین ها

$R_B$ (mol m <sup>-3</sup> s <sup>-1</sup> )	$R_C$ (mol m <sup>-3</sup> s <sup>-1</sup> )
MEA (B), DEA (B), AMP (B)	
$\frac{C_{CO_2} C_B}{\frac{1}{k_{2,B}} + \frac{1}{\left( \frac{k_{2,B} k_{H_2O}}{k_{-1}} C_{H_2O} + \frac{k_{2,B} k_B}{k_{-1}} C_B \right)}}$	
MDEA (B)	
$k_{2,B} C_{CO_2} C_B$	

جدول (۲) پارامتر های سینتیکی آمین های خالص در دمای

۲۹۸ درجه کلوین

$k_{2,B}$ (m <sup>3</sup> mol <sup>-1</sup> s <sup>-1</sup> )	$\frac{k_{2,B} k_{H_2O}}{k_{-1}}$ (m <sup>6</sup> mol <sup>-2</sup> s <sup>-1</sup> )	$\frac{k_{2,B} k_B}{k_{-1}}$ (m <sup>6</sup> mol <sup>-2</sup> s <sup>-1</sup> )
MEA (B)+H <sub>2</sub> O		
۶/۳۵۸	۹/۵۸×۱۰ <sup>-۶</sup>	۱/۵۸×۱۰ <sup>-۳</sup>
DEA (B)+H <sub>2</sub> O		
۲/۳۷۵	۲/۲×۱۰ <sup>-۶</sup>	۰/۴۳۷×۱۰ <sup>-۳</sup>
AMP (B)+H <sub>2</sub> O		
۰/۸۱	۲/۶۴×۱۰ <sup>-۶</sup>	۲/۳۳۵×۱۰ <sup>-۳</sup>
MDEA (B)+H <sub>2</sub> O		
۵/۲۱×۱۰ <sup>-۳</sup>		

جدول (۳): خواص فیزیکی غشای الیاف توخالی پلی پروپیلن

پارامتر (واحد)	مقدار	پارامتر (متر مربع بر ثانیه)	مقدار
r <sub>1</sub> (mm)	۰/۱۱	D <sub>MDEA-membrane</sub>	۱۲/۴۲×۱۰ <sup>-۱۱</sup>
r <sub>2</sub> (mm)	۰/۱۵	D <sub>AMP-membrane</sub>	۱۱/۳۴×۱۰ <sup>-۱۱</sup>
r <sub>3</sub> (mm)	۰/۲۶۴۵	D <sub>CO2-tube</sub> (محلول آبی MDEA)	۱/۴۴×۱۰ <sup>-۹</sup>
L (m)	۰/۲۲۸۶	D <sub>CO2-tube</sub> (محلول آبی AMP)	۱/۱۸×۱۰ <sup>-۹</sup>

$$r = r_2; C_{CO_2-membrane} = m C_{CO_2-shell};$$

$$\frac{\partial C_{sol-membrane}}{\partial r} = 0 \quad (24)$$

که در آن m حلالیت فیزیکی دی اکسید کربن در حلال است.

۲-۳- مدل سازی قسمت پوسته:

معادلات حاکم برای حل شونده و حلال با توجه به عدم وجود واکنش شیمیایی را می توان به صورت زیر در نظر گرفت:

$$V_\phi = V_r = \frac{\partial C_A}{\partial \phi} = \frac{\partial^2 C_A}{\partial \phi^2} = 0 \quad (25)$$

$$D_{i-shell} \left[ \frac{\partial^2 C_{i-shell}}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C_{i-shell}}{\partial r} \right] + V_{z-shell} \frac{\partial C_{i-shell}}{\partial z} = 0 \quad (26)$$

برای بدست آوردن توزیع سرعت در ناحیه پوسته از مدل هایل استفاده می شود [۲۸]. این مدل به طور عمده برای تماس دهنده های غشایی مورد استفاده قرار می گیرد. پروفایل سرعت به صورت زیر خواهد بود:

$$V_{z-shell} = 2u \left[ 1 - \left( \frac{r_2}{r_3} \right) \right] \times \left[ \frac{(r/r_3)^2 - (r_2/r_3)^2 + 2 \ln(r_2/r)}{3 + (r_2/r_3)^4 - 4(r_2/r_3)^2 + 4 \ln(r_2/r_3)} \right] \quad (27)$$

u برابر با سرعت متوسط در سمت پوسته است. r<sub>2</sub> و r<sub>3</sub> به ترتیب شعاع داخلی پوسته و شعاع خارجی الیاف می باشند. شعاع داخلی پوسته را از رابطه زیر بدست می آید:

$$r_3 = \left( \frac{1}{1-\phi} \right)^{\frac{1}{2}} r_2 \quad (28)$$

در رابطه (۲۸)، ϕ جزء حجمی فضای خالی تماس دهنده

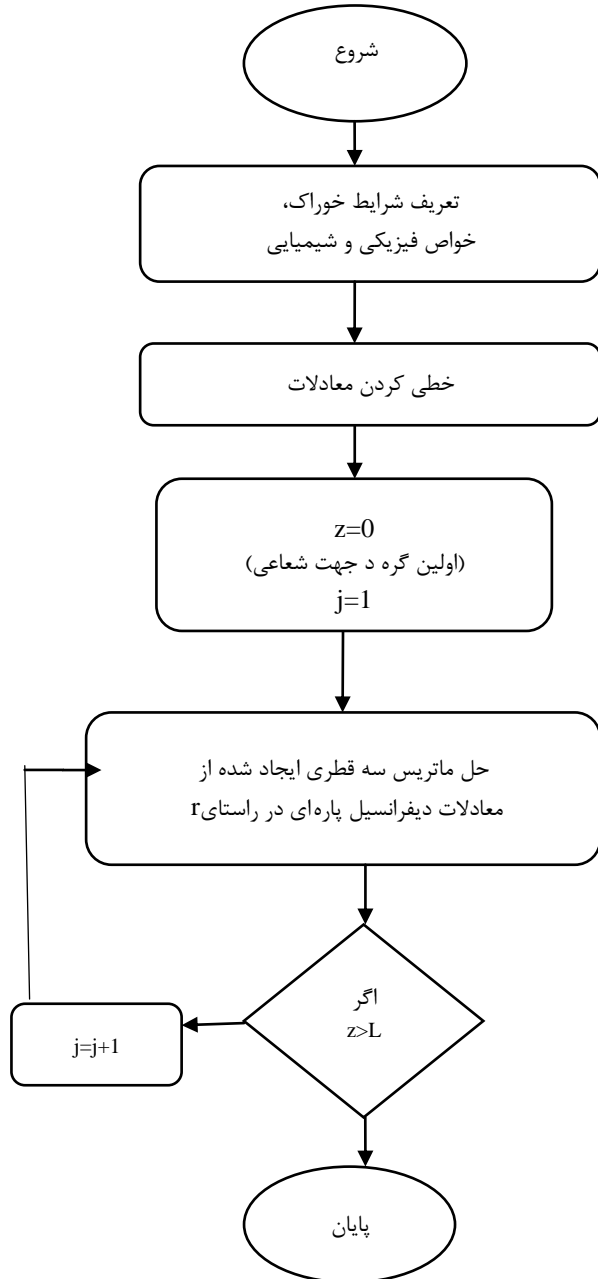
می باشد و مقدار آن از رابطه زیر بدست می آید:

$$1 - \phi = \frac{nr_2^2}{Ri^2} \quad (29)$$

در این رابطه، n تعداد الیاف و R<sub>i</sub> شعاع داخلی مدول است. شرایط مرزی عبارتند از:

$$r = r_2; C_{CO_2-shell} = C_{CO_2-membrane} \quad (30)$$

های تجربی و نتایج حاصل از مدلسازی و نرم افزار COMSOL بر قرار است. میزان تغییرات درصد حذف دی اکسید کربن بر اساس سرعت های مختلف فاز مایع در سرعت ثابت فاز گاز در شکل (۶) نشان داده شده است.



شکل (۵) الگوریتم محاسبات با استفاده از نرم افزار متلب

m	۰/۸	D <sub>CO2-membrane</sub> (محلول آبی MDE)	۲/۸۸×۱۰ <sup>-۹</sup>
D <sub>AMP-tube</sub> (m <sup>2</sup> /s)	۶۵×۱۰ <sup>-۱۰</sup>	D <sub>CO2-membrane</sub> (محلول آبی AMP)	۲/۳۶×۱۰ <sup>-۹</sup>
D <sub>MDEA-tube</sub> (m <sup>2</sup> /s)	۶/۲۱×۱۰ <sup>-۱۰</sup>	D <sub>CO2-shell</sub>	۱/۳۹×۱۰ <sup>-۵</sup>

### ۳- روش حل عددی

روابط ریاضی ارائه شده مربوط به ۳ فاز مایع، غشاء و گاز شامل یک دستگاه معادلات پاره ای بوده که به منظور توزیع غلظت در راستای محوری و شعاعی باید به صورت همزمان حل شوند. در هر دو جهت طول و شعاع الیاف ها به ترتیب به المان های  $\Delta z$  و  $\Delta r$  تقسیم می شود. به منظور ساده سازی با توجه به عدم نفوذ حلال در فاز گاز، معادلات ناحیه پوسته خطی می باشند. در فاز مایع و غشاء برای معادلات هر جزء با توجه به وابستگی به جزء دیگر در رابطه واکنش شیمیایی، معادلات به صورت غیر خطی می باشند. به دلیل پیچیدگی سیستم از نظر ریاضی، از یک تکنیک عددی برای حل معادلات استفاده شده است. به منظور حل معادلات در نرم افزار متلب از روش تفاضل محدود استفاده شده است. به منظور جلوگیری از بوجود آمدن محدودیت عدم پایداری، جملات مربوط به نفوذ به صورت ضمنی بسط داده شده اند. با توجه به تعداد زیاد گره ها در راستای شعاعی و محوری فرض می شود که غلظت اجزاء واکنش شیمیایی در راستای محوری تغییر چندانی نمی کند. بنابراین می توان فرض کرد که غلظت این اجزا در هر گره در یک شعاع ثابت، برابر با مقدار آن در گره قبلی در راستای محوری می باشد. با اعمال این فرض جملات مربوط به واکنش شیمیایی به صورت خطی درآمده و سپس دستگاه معادلات خطی در راستای شعاعی که به صورت یک ماتریس سه قطری می باشد به صورت همزمان و با استفاده از روش توماس حل شده است. الگوریتم حل برنامه در شکل (۵) آورده شده است.

### ۴- بحث و نتایج

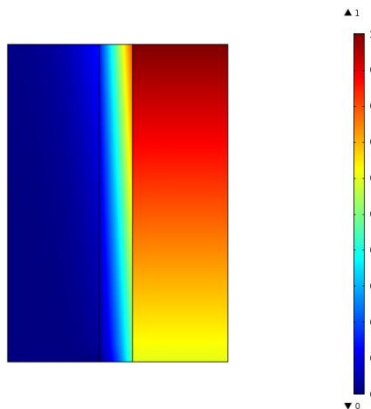
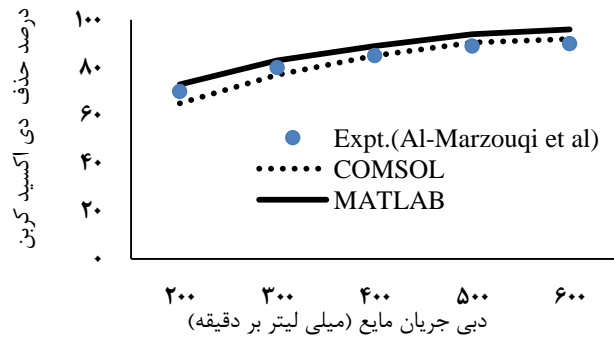
#### ۴-۱- اعتبار سنجی مدل

به منظور صحت اطمینان از مدل سازی نتایج بدست آمده از مدل با داده های تجربی و نرم افزار COMSOL با یکدیگر مقایسه شد. چون داده های تجربی برای جداسازی دی اکسید کربن از مخلوط گازی CO<sub>2</sub>/N<sub>2</sub> توسط این آمین ها در دسترس نبود لذا از داده های مربوط به جداسازی دی اکسید کربن از مخلوط گازی CO<sub>2</sub>/CH<sub>4</sub> توسط MEA استفاده شد [۲۹] و نتایج حاصل نشان داد که تطابق خوبی بین داده



مدلسازی ریاضی جداسازی دی اکسید کربن از مخلوط گازی نیتروژن و دی اکسید کربن توسط تماس دهنده غشایی الیاف توخالی پلی پروپیلن در حضور محلول آمین ها

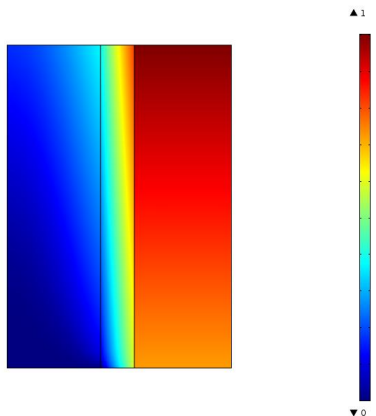
شکل (۶) مقایسه بین درصد حذف دی اکسید کربن در سرعت های مختلف فاز مایع در حضور حلال MEA حاصل از داده های تجربی و نتایج حاصل از مدل سازی و نرم افزار COMSOL ( $C_{MEA-initial}=15 \text{ mol/m}^3$ ,  $C_{CO2-initial}=4 \text{ mol/m}^3$ ,  $Q_{gas}=500$ , mL/min)



شکل (۸) غلظت بدون بعد دی اکسید کربن ( $C/C_0$ )

در حضور محلول AMP

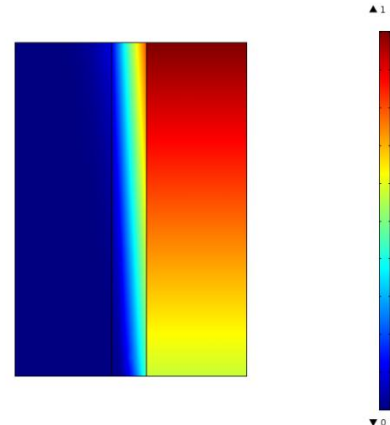
( $n=3600$ ,  $Q_{liq}=500 \text{ mL/min}$ ,  $Q_{gas}=500 \text{ mL/min}$ ,  $\varepsilon/\tau=0.2$ ) ( $L=0.2286 \text{ m}$ ,  $C_{o,AMP}=0.005 \text{ M}$ ,  $T=298^\circ\text{K}$ )



شکل (۱۰) غلظت بدون بعد دی اکسید کربن ( $C/C_0$ ) در حضور محلول

MDEA

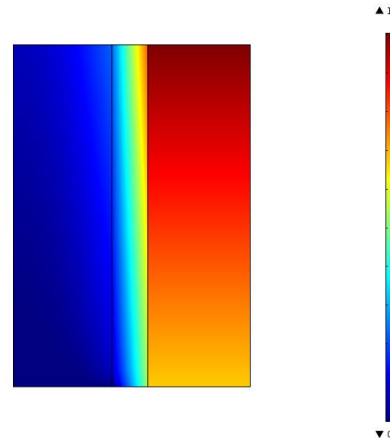
( $n=3600$ ,  $Q_{liq}=500 \text{ mL/min}$ ,  $Q_{gas}=500 \text{ mL/min}$ ,  $\varepsilon/\tau=0.2$ ) ( $L=0.2286 \text{ m}$ ,  $C_{o,MDEA}=0.005 \text{ M}$ ,  $T=298^\circ\text{K}$ )



شکل (۷) غلظت بدون بعد دی اکسید کربن ( $C/C_0$ )

در حضور محلول MEA

( $n=3600$ ,  $Q_{liq}=500 \text{ mL/min}$ ,  $Q_{gas}=500 \text{ mL/min}$ ,  $\varepsilon/\tau=0.2$ ) ( $L=0.2286 \text{ m}$ ,  $C_{o,MEA}=0.005 \text{ M}$ ,  $T=298^\circ\text{K}$ )



شکل (۹) غلظت بدون بعد دی اکسید کربن ( $C/C_0$ ) در حضور محلول

DEA

( $n=3600$ ,  $Q_{liq}=500 \text{ mL/min}$ ,  $Q_{gas}=500 \text{ mL/min}$ ,  $\varepsilon/\tau=0.2$ ) ( $L=0.2286 \text{ m}$ ,  $C_{o,DEA}=0.005 \text{ M}$ ,  $T=298^\circ\text{K}$ )

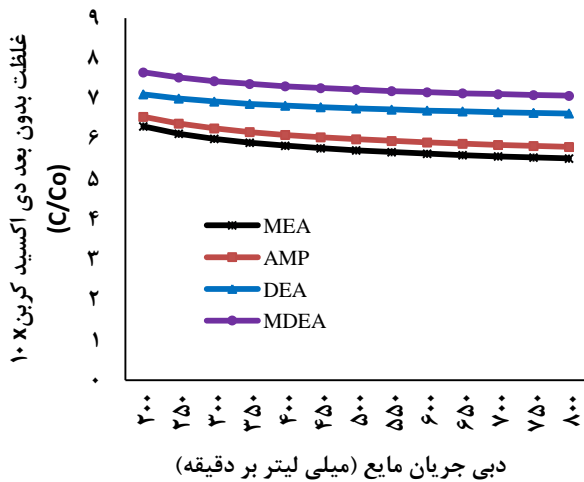
به منظور تعیین توزیع غلظت دی اکسید کربن در تماس دهنده غشای الیاف توخالی پلی پروپیلن از مخلوط خوراک، مخلوط گازی از بالای تماس دهنده ( $y=H$ ) یعنی جایی که دی اکسید کربن دارای حداکثر غلظت است وارد می شود. در صورتی که حلال مایع از قسمت پایین تماس دهنده ( $y=0$ )، یعنی جایی که غلظت دی اکسید کربن صفر است وارد می شود. چون حلال کاملاً مرطوب در نظر گرفته شده

درصد حذف دی اکسید کربن از رابطه زیر بدست می آید:

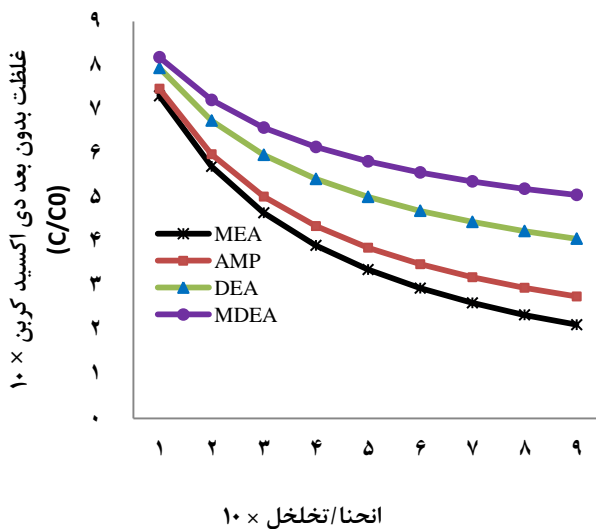
$$\% \text{ Removal} = 100 \left( 1 - \frac{C_{outlet}}{C_{inlet}} \right) \quad (33)$$

۴-۲- اثر پارامترهای مختلف بر روی دفع دی اکسید کربن از مخلوط گازی:

عبور از این قسمت توسط حلال در قسمت لوله جذب می‌شود. همان طوری که از این شکل‌ها مشاهده می‌شود جذب دی اکسید کربن در حضور محلول MEA از همه محلول آمین‌ها به علت سرعت بالای واکنش MEA با دی اکسید کربن نسبت به آمین‌های دیگر بیشتر و در حضور محلول MDEA از همه آنها کمتر است. شکل (۱۱) اثر دبی جریان گاز (اثر ترم جابه جایی در پوسته) بر روی میزان جذب دی اکسید کربن را نشان می‌دهد.

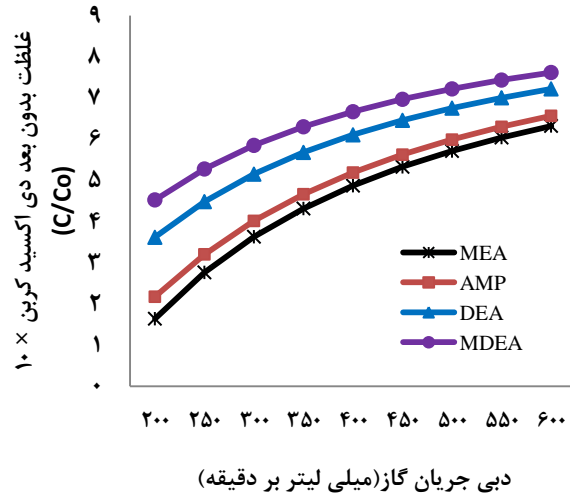


شکل (۱۲) اثر دبی جریان مایع بر روی جذب CO<sub>2</sub> در تماس دهنده غشایی الیاف توخالی (n=3600, Q<sub>gas</sub>=500 mL/min, ε/τ=0.2, L=0.2286 m) (C<sub>0,solvent</sub>=0.005 M, T=298°K)

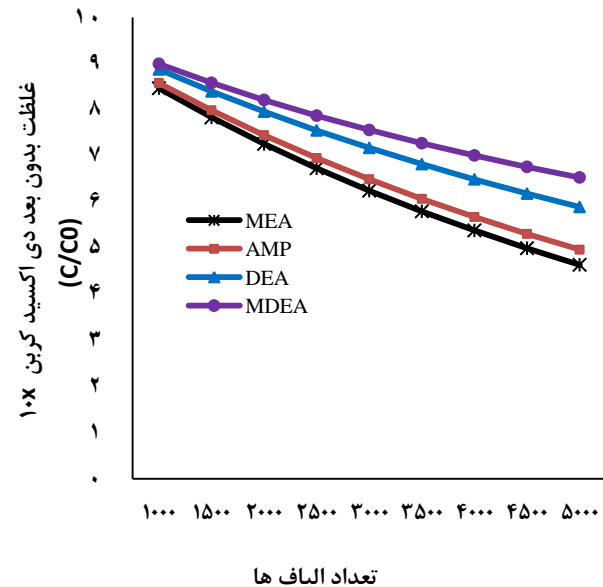


شکل (۱۴) اثر نسبت تخلخل به انحنا بر روی میزان جذب CO<sub>2</sub> در تماس دهنده غشایی الیاف توخالی (n=3600, Q<sub>liq</sub>=500 mL/min, Q<sub>gas</sub>=500 mL/min) (L=0.2286 m, C<sub>0,solvent</sub>=0.005 M, T=298°K)

است حلال در تمام نقاط غشاء نفوذ می‌نماید. توزیع غلظت دی اکسید کربن در درون پوسته، غشا و لوله تماس دهنده‌ی غشایی حاصل از نتایج مدل‌سازی برای یک جریان غیر همسوی گازو مایع در درون یک تماس دهنده غشایی پلی پروپیلن، در شکل‌های (۷) تا (۱۰) نشان داده شده است. هنگامی که گاز از درون پوسته عبور می‌نماید به علت اختلاف غلظت، دی اکسید کربن به درون غشا جریان یافته و پس از



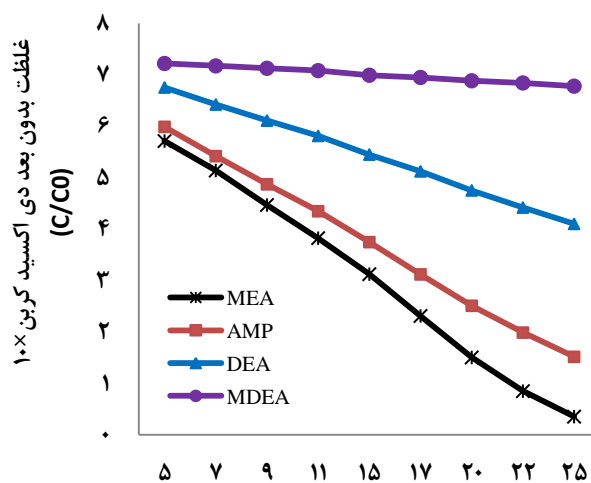
شکل (۱۱) اثر دبی جریان گاز بر روی جذب CO<sub>2</sub> در تماس دهنده الیاف توخالی (n=3600, Q<sub>liq</sub>=500 mL/min, ε/τ=0.2, L=0.2286 m) (C<sub>0,solvent</sub>=0.005 M, T=298°K)



شکل (۱۳) اثر تعداد الیاف ها بر روی جذب CO<sub>2</sub> در تماس دهنده غشایی الیاف توخالی (n=3600, Q<sub>liq</sub>=500 mL/min, Q<sub>gas</sub>=500 mL/min, ε/τ=0.2) (L=0.2286 m, C<sub>0,solvent</sub>=0.005 M, T=298°K)

غلظت  $CO_2$  خروجی در فاز گاز کاهش می یابد و میزان جذب دی اکسید کربن افزایش خواهد یافت

تأثیر تعداد الیاف های تماس دهنده ی غشایی بر روی جذب دی اکسید کربن در حضور آمین های مختلف در شکل (۱۳) نشان داده شده است. این شکل نشان می دهد که با افزایش تعداد الیاف، غلظت خروجی  $CO_2$  در قسمت پوسته کاهش می یابد و میزان جذب  $CO_2$  افزایش می یابد زیرا با افزایش تعداد الیاف، سطح تماس انتقال جرم افزایش می یابد.



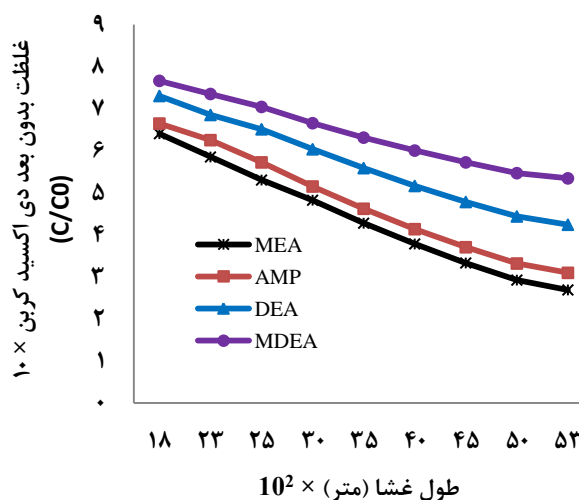
غلظت حلال (مول بر لیتر)  $\times 10^3$

شکل (۱۶) اثر غلظت حلال بر روی بازدهی جذب  $CO_2$  در تماس دهنده ی غشایی الیاف توخالی ( $n=3600, Q_{liq}=500 \text{ mL/min}, Q_{gas}=500 \text{ mL/min}, \epsilon/\tau=0.2$ ) ( $L=0.2286 \text{ m}, T=298^\circ\text{K}$ )

شکل (۱۶) تغییرات غلظت خروجی دی اکسید کربن نسبت به افزایش غلظت حلال ورودی را نشان می دهد. این شکل نشان می دهد که غلظت خروجی دی اکسید کربن با افزایش غلظت حلال ورودی کاهش می یابد. همچنین مشاهده می شود که در یک غلظت معین از حلال، غلظت خروجی دی اکسید کربن در حضور محلول MEA از همه کمتر است در صورتی که غلظت خروجی دی اکسید کربن در حضور محلول MEA از همه بیشتر است. زیرا قدرت جذب محلول MEA بیشتر دیگر آمین ها می باشد

طبق شکل (۱۱) در یک دبی ثابت مایع و ثابت بودن دیگر پارامترها، با افزایش دبی جریان گاز میزان جذب دی اکسید کربن به علت کم شدن زمان تماس گاز با غشای مورد استفاده کاهش می یابد

غلظت خروجی دی اکسید کربن در دبی های متفاوت مایع در شکل (۱۲) آورده شده است. همان گونه که مشاهده می شود با افزایش دبی جریان مایع میزان جذب دی اکسید کربن نیز افزایش می یابد. زیرا با افزایش دبی جریان مایع گردایان غلظت  $CO_2$  در فاز مایع نیز افزایش می یابد در نتیجه

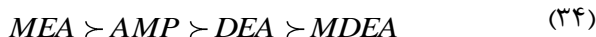


شکل (۱۵) اثر طول غشا بر روی بازدهی جذب  $CO_2$  در تماس دهنده ی غشایی الیاف توخالی ( $n=3600, Q_{liq}=500 \text{ mL/min}, Q_{gas}=500 \text{ mL/min}, \epsilon/\tau=0.2$ ) ( $C_{o,solvent}=0.005 \text{ M}, T=298^\circ\text{K}$ )

شکل (۱۴) تأثیر نسبت تخلخل به انحنا بر میزان جذب را نشان می دهد. همان طور که مشاهده می شود با افزایش نسبت تخلخل به انحنا غلظت خروجی  $CO_2$  در فاز گاز کاهش می یابد و میزان جذب دی اکسید کربن افزایش می یابد زیرا با افزایش نسبت تخلخل به انحنا ضریب انتقال جرم  $CO_2$  در داخل غشا که تابع نسبت تخلخل به انحنا است افزایش خواهد یافت. هم چنین با افزایش میزان تخلخل به انحنا مقاومت انتقال جرم  $CO_2$  در داخل غشا کاهش می یابد در نتیجه مقاومت کل انتقال جرم  $CO_2$  کاهش پیدا می کند.

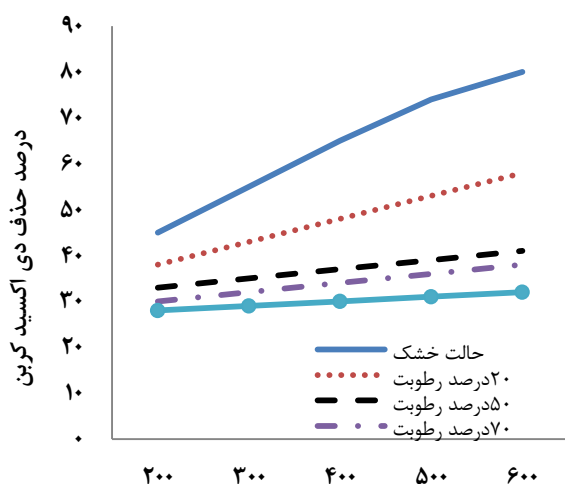
تأثیر طول غشا بر میزان جذب دی اکسید کربن در شکل (۱۵) نشان داده شده است. این شکل نشان می دهد که با افزایش طول غشا زمان تماس فاز مایع و گاز افزایش می یابد در نتیجه غلظت خروجی  $CO_2$  کاهش می یابد که این نشان دهنده ی افزایش میزان جذب دی اکسید کربن است.

نتیجه گرفت که ترتیب جذب  $CO_2$  در آمین ها به صورت زیر است:



### ۵- نتیجه گیری کلی

هدف اصلی از این مقاله، جداسازی دی اکسید کربن از مخلوط گازی  $CO_2/N_2$  در تماس دهنده‌ی غشایی الیاف توخالی پلی پروپیلن با استفاده از محلول‌های آبی n-متیل دی اتانول آمین (MDEA)، ۲-آمین-۲-متیل-۱- پروپانول (AMP)، دی اتانول آمین (DEA) و منواتانول آمین (MEA) به عنوان سرعت دهنده واکنش در یک تماس دهنده غشایی الیاف تو خالی پلی پروپیلن است. مدلی دو بعدی به منظور مدل سازی دفع دی اکسید کربن توسط محلول‌های آبی آمین در تماس دهنده‌ی غشایی الیاف توخالی و در حالت کاملاً مرطوب و در شرایطی که واکنش شیمیایی صورت می‌گیرد برای هر سه قسمت پوسته، غشا و لوله ارائه شده است که در آن از هر دو ترم نفوذ محوری و شعاعی استفاده شده است. در این مدل سازی گاز از درون پوسته و مایع از درون لوله به صورت جریان غیرهمسو عبور داده شده است. تأثیر پارامترهایی همچون: تعداد الیافهای غشایی، دبی جریان گاز، دبی جریان مایع، نسبت تخلخل به انحنای طول غشا و غلظت حلال شیمیایی در میزان جذب دی اکسید کربن مورد بررسی قرار گرفت. نتایج حاصل از مدل سازی نشان می‌دهد که درصد

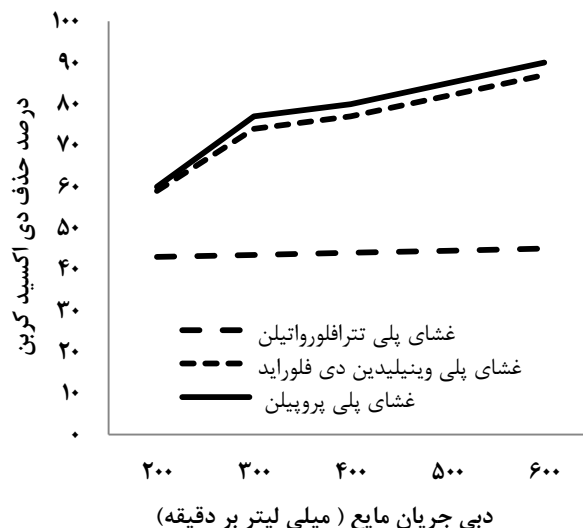


دبی جریان مایع ( میلی لیتر بر دقیقه)

شکل (۱۸) میزان درصد حذف دی اکسید کربن در

حالت های خشک، نیمه خشک و کاملاً خیس غشای پلی پروپیلن  
( $C_{MEA-initial}=10 \text{ mol/m}^3$ ,  $C_{CO_2-initial}=4 \text{ mol/m}^3$ ,  $Q_{gas}=500 \text{ mL/min}$ )

جذب دی اکسید کربن با محلول آبی MEA از دیگر آمین ها بیشتر است. هم چنین این مدل سازی نشان می‌دهد که



دبی جریان مایع ( میلی لیتر بر دقیقه)

شکل (۱۷) اثر دبی جریان مایع (MEA) بر روی درصد حذف دی اکسید کربن برای غشاهای مختلف  
( $C_{MEA-initial}=10 \text{ mol/m}^3$ ,  $C_{CO_2-initial}=4 \text{ mol/m}^3$ ,  
( $Q_{gas}=500 \text{ mL/min}$ ,  $Q_{liquid}=500 \text{ mL/min}$ )

هم چنین اثر دبی جریان مایع (MEA) بر روی درصد

حذف دی اکسید کربن برای غشاهای مختلف مانند PP، PVDF و PTFE مطالعه و بررسی شد. نتایج حاصل از این بررسی در شکل (۱۷) نشان داده شده است. نتایج حاصل از این مطالعه نشان می‌دهد که درصد حذف دی اکسید کربن بوسیله غشای الیاف توخالی پلی پروپیلن بیشتر از الیاف توخالی پلی PVDF و PTFE است.

در نهایت اثر خیس شدگی بر روی غشای الیاف توخالی پلی پروپیلن بر روی میزان درصد حذف دی اکسید کربن در دبی های مختلف از جریان مایع (MEA) بررسی شد. نتایج حاصل از این بررسی در شکل (۱۸) مشاهده می‌شود. این شکل نشان می‌دهد که با افزایش درصد خیس شدگی میزان حذف دی اکسید کربن به دلیل مقاومت در مقابل انتقال جرم کاهش می‌یابد. بنابراین خشک بودن غشاها سبب افزایش درصد حذف دی اکسید کربن از مخلوط گازی شامل نیتروژن و دی اکسید کربن می‌شود.

کلیه‌ی نتایج بدست آمده گویای این مطلب است که در شرایط یکسان میزان جذب دی اکسید کربن از مخلوط گازی  $CO_2/N_2$  توسط محلول آبی MEA بیشتر از دیگر آمین‌ها می‌باشد زیرا سرعت واکنش MEA با دی اکسید کربن بالا است. درحالی‌که میزان جذب دی اکسید کربن از این مخلوط گازی توسط محلول آبی MDEA از دیگر آمین‌ها کمتر می‌باشد که این به علت سرعت واکنش پایین این آمین با دی اکسید کربن است. از مطالب گفته شده این طور می‌توان

## مراجع

- [۱] مدائنی، سید سیاوش، و اسماعیلی، مجید، (۱۳۸۵)، جداسازی گازها توسط فرآیندهای غشایی، انتشارات دانشگاه رازی، کرمانشاه، ایران.
- [۲] کاغذچی، طاهره، و سهرابی، مرتضی، (۱۳۸۷)، انتقال جرم تریبال/ابر تریبال، انتشارات دانشگاه صنعتی امیرکبیر (پلی تکنیک تهران)، ایران.
- [۳] بابالو، علی اکبر، و آسا، فرناز، (۱۳۹۲)، مروری بر عملکرد انواع فرایندهای غشایی به منظور جداسازی دی اکسید کربن از جریان های گازی، فصلنامه تخصصی علمی ترویجی فرآیند نو، شماره ۴۴، ص ۶۰-۵۰.
- [۴] یگانی، رضا، و اکبری، علی، (۱۳۹۱)، مطالعه پارامترهای موثر بر عملکرد تماس دهنده های غشایی الیاف توخالی برای جداسازی دی اکسید کربن از گاز طبیعی، فصلنامه تخصصی علمی ترویجی فرآیند نو، شماره ۳۹، ص ۵۶-۴۲.
- [۵] خواجه نوری، مسعود، و اصغری، مرتضی، (۱۳۹۱)، مروری بر مهمترین غشاهای پلیمری در تماس دهنده های غشایی الیاف تو خالی گاز-مایع به منظور زدایش گازهای اسیدی، فصلنامه تخصصی علمی ترویجی فرآیند نو، شماره ۴۰، ص ۴۶-۳۶.
- [6] Z. Qi and E. Cussler, "Microporous hollow fibers for gas absorption: II. Mass transfer across the membrane," *Journal of membrane science*, vol. 23, pp. 333-345, 1985.
- [7] M.-C. Yang and E. Cussler, "Artificial gills," *Journal of membrane science*, vol. 42, pp.273-284., 1989.
- [8] S. Karoor and K. K. Sirkar, "Gas absorption studies in microporous hollow fiber membrane modules," *Industrial & engineering chemistry research*, vol. 32, pp. 674-684, 1993.
- [9] H. Kreulen, C. Smolders, G. Versteeg, and W. Van Swaaij, "Microporous hollow fibre membrane modules as gas-liquid contactors Part 2. Mass transfer with chemical reaction," *Journal of Membrane Science*, vol. 78, pp. 217-238, 1993.
- [10] D. T. Tsou, M. W. Blachman, and J. C. Davis, "Silver-facilitated olefin/paraffin separation in a liquid membrane contactor system," *Industrial & engineering chemistry research*, vol. 33, pp. 3209-3216, 1994.
- [11] H. A. Rangwala, "Absorption of carbon dioxide into aqueous solutions using hollow fiber membrane contactors," *Journal of Membrane Science*, vol. 112, pp. 229-240, 1996.

افزایش غلظت محلول آمین، دبی مایع، نسبت تخلخل به انحناء، طول غشا و تعداد الیاف غشایی به کار گرفته شده باعث جذب هر چه بیشتر دی اکسید کربن می شود اما کاهش دبی جریان گاز به علت افزایش زمان تماس آن با غشا، باعث افزایش جذب می شود. در یک شرایط مساوی میزان دفع دی اکسید کربن از مخلوط گازی در تمام حالات برای محلول آبی DEA از محلول آبی دیگر آمین ها نیز بیشتر می باشد. هم چنین درصد حذف دی اکسید کربن توسط غشاهای مورد بررسی شامل PP، PVDF و PTFE نشان داد که درصد حذف دی اکسید کربن در حضور غشای الیاف توخالی پلی پروپیلن بیشتر از الیاف توخالی پلی PVDF و PTFE است. در نهایت بررسی ها نشان داد که خشک بودن غشا ها سبب افزایش درصد حذف دی اکسید کربن از مخلوط گازی شامل نیتروژن و دی اکسید کربن می شود.

## فهرست علائم و اختصارات

C	غلظت ( $\text{mol/m}^2$ )
$C_{\text{CO}_2\text{-tube}}$	غلظت دی اکسید کربن در درون مجرا ( $\text{mol/m}^2$ )
$C_{\text{CO}_2\text{-membrane}}$	غلظت دی اکسید کربن در درون غشا ( $\text{mol/m}^2$ )
$C_{\text{CO}_2\text{-shell}}$	غلظت دی اکسید کربن در درون پوسته ( $\text{mol/m}^2$ )
$C_{\text{sol-tube}}$	غلظت حلال در درون مجرا ( $\text{mol/m}^2$ )
$C_{\text{sol-membrane}}$	غلظت حلال در درون غشا ( $\text{mol/m}^2$ )
$C_{\text{CO}_2\text{-shell, initial}}$	غلظت اولیه $\text{CO}_2$ در درون پوسته ( $\text{mol/m}^2$ )
$C_{\text{sol-shell, initial}}$	غلظت اولیه حلال در درون مجرا ( $\text{mol/m}^2$ )
$D_{\text{CO}_2\text{-tube}}$	ضریب نفوذ دی اکسید کربن در درون مجرا ( $\text{m}^2/\text{s}$ )
$D_{\text{CO}_2\text{-membrane}}$	ضریب نفوذ دی اکسید کربن در درون غشا ( $\text{m}^2/\text{s}$ )
$D_{\text{CO}_2\text{-shell}}$	ضریب نفوذ دی اکسید کربن در درون پوسته ( $\text{m}^2/\text{s}$ )
$D_{\text{sol-tube}}$	ضریب نفوذ حلال در درون مجرا ( $\text{m}^2/\text{s}$ )
$D_{\text{sol-membrane}}$	ضریب نفوذ حلال در درون غشا ( $\text{m}^2/\text{s}$ )
L	طول غشاء (متر)
M	حلالیت فیزیکی
N	شار کلی انتقال جرم (مول بر مترمربع بر ثانیه)
n	تعداد الیافها
R	واکنش شیمیایی
S	سطح مقطع جهت انتقال جرم (مترمربع)
$r_1$	شعاع داخلی مجرا (متر)
$r_2$	شعاع خارجی مجرا (متر)
$r_3$	شعاع خارجی پوسته مجرا (متر)
u	سرعت متوسط (متر بر ثانیه)
tube $V_y$	سرعت در درون مجرا (متر بر ثانیه)
shell $V_y$	سرعت در درون پوسته (متر بر ثانیه)
$\phi$	جزء حجمی فضای خالی تماس دهنده

- membrane contactors without wetting," *Fuel Processing Technology*, vol. 88, pp. 501-511, 2007.
- [21] P. Keshavarz, J. Fathikalajahi, and S. Ayatollahi, "Mathematical modeling of the simultaneous absorption of carbon dioxide and hydrogen sulfide in a hollow fiber membrane contactor," *Separation and Purification Technology*, vol. 63, pp. 145-155, 2008.
- [22] H. H. Park, B. R. Deshwal, I. W. Kim, and H. K. Lee, "Absorption of SO<sub>2</sub> from flue gas using PVDF hollow fiber membranes in a gas-liquid contactor," *Journal of Membrane Science*, vol. 319, pp. 29-37, 2008.
- [23] S. Koonaphaddeert, Z. Wu, and K. Li, "Carbon dioxide stripping in ceramic hollow fibre membrane contactors," *Chemical Engineering Science*, vol. 64, pp. 1-8, 2009.
- [24] S. A. Marzouk, M. H. Al-Marzouqi, M. H. El-Naas, N. Abdullatif, and Z. M. Ismail, "Removal of carbon dioxide from pressurized CO<sub>2</sub> - CH<sub>4</sub> gas mixture using hollow fiber membrane contactors," *Journal of Membrane Science*, vol. 351, pp. 21-27, 2010.
- [25] A. Mansourizadeh, "Experimental study of CO<sub>2</sub> absorption/stripping via PVDF hollow fiber membrane contactor," *Chemical Engineering Research and Design*, vol. 90, pp. 555-562, 2012.
- [26] M. Rahbari-Sisakht, A. Ismail, D. Rana, T. Matsuura, and D. Emadzadeh, "Carbon dioxide stripping from water through porous polysulfone hollow fiber membrane contactor," *Separation and Purification Technology*, vol. 108, pp. 119-123, 2013.
- [27] R. B. Bird, W. E. Stewart, and E. N. Lightfoot, *Transport phenomena*: John Wiley & Sons, 1960.
- [28] J. Happel, "Viscous flow relative to arrays of cylinders," *AIChE Journal*, vol. 5, pp. 174-177, 1959.
- [29] Al-Marzouqi, M., El-Naas, M., Marzouk, S., Abdullatif, N. (2008). Modeling of chemical absorption of CO<sub>2</sub> in membrane contactors. *Separation and Purification Technology*, 62(3), 499-506.
- [12] S. Bhaumik, S. Majumdar, and K. Sirkar, "Hollow-fiber membrane-based rapid pressure swing absorption," *AIChE Journal*, vol. 42, pp. 409-421, 1996.
- [13] M.-S. Chun and K.-H. Lee, "Analysis on a hydrophobic hollow-fiber membrane absorber and experimental observations of CO<sub>2</sub> removal by enhanced absorption," *Separation science and technology*, vol. 32, pp. 2445-2466, 1997.
- [14] D. Bhaumik, S. Majumdar, and K. Sirkar, "Absorption of CO<sub>2</sub> in a transverse flow hollow fiber membrane module having a few wraps of the fiber mat," *Journal of Membrane Science*, vol. 138, pp. 77-82, 1998.
- [15] P. H. Feron and A. E. Jansen, "CO<sub>2</sub> separation with polyolefin membrane contactors and dedicated absorption liquids: performances and prospects," *Separation and Purification Technology*, vol. 27, pp. 231-242, 2002.
- [16] P. Kumar, J. Hogendoorn, P. Feron, and G. Versteeg, "New absorption liquids for the removal of CO<sub>2</sub> from dilute gas streams using membrane contactors," *Chemical Engineering Science*, vol. 57, pp. 1639-1651, 2002.
- [17] R. Wang, D. Li, C. Zhou, M. Liu, and D. Liang, "Impact of DEA solutions with and without CO<sub>2</sub> loading on porous polypropylene membranes intended for use as contactors," *Journal of Membrane Science*, vol. 229, pp. 147-157, 2004.
- [18] S.-H. Yeon, K.-S. Lee, B. Sea, Y.-I. Park, and K.-H. Lee, "Application of pilot-scale membrane contactor hybrid system for removal of carbon dioxide from flue gas," *Journal of Membrane Science*, vol. 257, pp. 156-160, 2005.
- [19] H.-Y. Zhang, R. Wang, D. T. Liang, and J. H. Tay, "Modeling and experimental study of CO<sub>2</sub> absorption in a hollow fiber membrane contactor," *Journal of Membrane Science*, vol. 279, pp. 301-310, 2006.
- [20] S.-p. Yan, M.-X. Fang, W.-F. Zhang, S.-Y. Wang, Z.-K. Xu, Z.-Y. Luo, *et al.*, "Experimental study on the separation of CO<sub>2</sub> from flue gas using hollow fiber

## Mathematical modeling of carbon dioxide separation from gaseous mixture N<sub>2</sub>/CO<sub>2</sub> using polypropylene hollow membrane contactor in the presence of aqueous amines

Mohammad Reza Talaghat<sup>\*1</sup>- Ahmad Reza Bahmani<sup>2</sup>

1. Department of chemical engineering of Shiraz University of technology, Shiraz, Iran

---

### ABSTRACT

In this paper, the mathematical modeling of carbon dioxide removal from the gas mixture of N<sub>2</sub>/CO<sub>2</sub> in a polypropylene hollow fiber membrane contactor in the presence of amines is studied. Modeling was performed in both axial and radial directions under the fully-wet condition for countercurrent gas-liquid flow arrangement. To evaluate the model, the results of this model with experimental data and results of COMSOL software were compared. The results showed that, the CO<sub>2</sub> removal efficiency increased with the increase of the liquid flow rate, number of fibers, membrane length, porosity-to-tortuosity ratio and solvent concentration, but, decrease by increasing gas flow rate. The results show that percentage of CO<sub>2</sub> removal by the polypropylene hollow fiber membrane is higher than the polyvinylidene fluoride and polytetrafluoroethylene hollow fiber membranes in the presence of MEA. Finally, the results showed that by increasing the wetting, the removal of gas is reduced.

---

### ARTICLE INFO

Article history:

Received: May 24, 2016

Revised in: February 07, 2017

Accepted: May 22, 2017

---

Key words:

CO<sub>2</sub> removal,  
mathematical modeling,  
membrane contactor,  
hollow fiber,  
Amine solvent,  
separation

---

All right reserved.

---

\* Corresponding author  
talaghat@sutech.ac.ir