بسم الله الرحمن الرحيم

الهم صل على محمد و آل محمد و عجل فرجهم

١١١٩٢٨

۸۷/۱/۱۰۸۱۰۱
۸۸-۱۲۲

دانشکده مهندسی

پایان نامه دکتری در رشته مهندسی شیمی

استفاده از یک مدل جامع CFD جذب گازهای اسیدی برای شبیه‌سازی دیاگرام جریانی یک واحد شیرین سازی گاز در حالت پایا

توسط

مجید بنی آدم

اساتید راهنما:

دکتر جمشید فتحی

دکتر محمدرضا رحیم‌پور

۱۳۸۸/۱/۲۱

دی ماه ۱۳۸۷

۱۱۱۹۲۸

تقدیم به:

همسر مهربانم و فرزندم امیرحسین

و

مادر دلسوزم و روح پدر بزرگوارم

به نام خدا

استفاده از یک مدل جامع CFD جذب گازهای اسیدی برای شبیه‌سازی دیاگرام جریانی یک واحد شیرین‌سازی گاز در حالت پایا

به وسیله ی:

مجید بنی‌آدم

پایان نامه
ارائه شده به تحصیلات تکمیلی دانشگاه به عنوان بخشی
از فعالیت های تحصیلی لازم برای اخذ درجه دکتری

در رشته ی:

مهندسی شیمی

از دانشگاه شیراز

شیراز

جمهوری اسلامی ایران

ارزیابی شده توسط کمیته پایان نامه با درجه: عالی

دکتر جمشید فتحی کلجاهی، استاد بخش مهندسی شیمی (رئیس کمیته) .....

دکتر محمدرضا رحیم‌پور، استاد بخش مهندسی شیمی (رئیس کمیته) .....

دکتر غلامرضا کریمی، استادیار بخش مهندسی شیمی .....

دکتر رضا اسلاملوئیان، استادیار بخش مهندسی شیمی .....

دکتر محمد تقی حامد موسویان، دانشیار بخش مهندسی شیمی (دانشگاه فردوسی مشهد).....

دیماه ۱۳۸۷

سپاسگزاری

اکنون که نگارش این رساله به پایان رسیده است، بر خود لازم می‌دانم از اساتید ارجمند جناب آقای دکتر فتحی و جناب آقای دکتر رحیم‌پور که سرپرستی پایان‌نامه اینجانب را بر عهده داشته‌اند، تشکر و سپاسگزاری نمایم. همچنین از اساتید محترم جناب آقای دکتر کریمی، جناب آقای دکتر اسلاملوئیان، جناب آقای دکتر علمداری و جناب آقای دکتر حامد موسویان که از نظرات ارزشمندشان سود بردم، قدردانی می‌نمایم.

از کارمندان محترم بخش مهندسی شیمی سرکار خانم شهبازی، خانمها کشاورز، سرکار خانم مهندس کیانی، آقای مهندس همتیان و آقای اژدری سپاسگزاری می‌نمایم. از کلیه دوستان و همکلاسیان دانشگاه شیراز به ویژه جناب آقای دکتر کشاورز، جناب آقای دکتر عباسی، جناب آقای دکتر صباغی، جناب آقای دکتر سرشار، جناب آقای مهندس طلاقت، سرکار خانم مهندس بیمکر، سرکار خانم مهندس فرهمند و جناب آقای مهندس فرهبد که در نهایت صمیمیت در کلیه مراحل تحصیل دوره دکترا و انجام پایان‌نامه از همراهی و کمک ایشان سود بردم تشکر نموده و برای روح بلند مرحوم جناب آقای دکتر سید محمد رضا پناهنده که سراسر پاکی و صفا بود، از درگاه خداوند طلب مغفرت و آرامش دارم.

همچنین مراتب قدردانی خود را از شرکت محترم نفت و گاز جمهوری اسلامی ایران که از این پایان‌نامه حمایت مالی نموده‌اند، اعلام می‌دارم.

چکیده

استفاده از یک مدل جامع CFD جذب گازهای اسیدی برای شبیه‌سازی دیاگرام جریانی یک واحد شیرین‌سازی گاز در حالت پایا

به وسیله‌ی:

مجید بنی‌آدم

در این پایان‌نامه از روشهای بسته‌ای- همزمان و بسته‌ای- ترتیبی برای شبیه‌سازی ستونهای جذب و دفع واحد شیرین‌سازی گاز استفاده شده و یک مدل ریاضی برای ستونهای جذب و دفع گازهای اسیدی توسط متیل دی‌اتانول آمین توسعه داده شده است. این روشها مبتنی بر موازنه جرم و انرژی بوده و واکنش‌های شیمیایی بین ماده حل شونده و حلال را در نظر می‌گیرد. اعمال روش بسته‌ای- همزمان برای واحد، تولید یک دستگاه معادلات غیرخطی با ۳۱ معادله و ۳۱ مجهول می‌نماید. حل همزمان این معادلات شرایط عملیاتی در هر قسمت از واحد را محاسبه می‌کند. در روش بسته‌ای- ترتیبی محاسبات به این ترتیب انجام می‌شود که خروجی هر دستگاه، اطلاعات ورودی به بسته دیگر را تامین می‌نماید. داده‌های به دست آمده از یک پالایشگاه صنعتی برای ارزیابی مدل استفاده شده و سپس تغییرات پارامترهای مختلف در واحد مورد بررسی قرار گرفته است. همچنین یک مدل دو بعدی برای سرعت مایع بر روی برجهای سینی‌دار بر اساس چهارچوب مکانیک سیالات محاسباتی از نوع اولرین- اولرین توسعه داده شده است. سپس یک مدل سلولی بر مبنای تئوری دو فیلمی برای محاسبات توزیع غلظت و دما ارائه و به روشهای عددی حل شده است. نتایج به دست آمده به وسیله داده‌های صنعتی توزیع دما، غلظت و سرعت را بر روی سینی‌ها نشان می‌دهد. مقدار این توزیع‌ها از پایین به بالا کاهش می‌یابد. نهایتا یک ستون پرشده منظم توسط صفحات چین‌خورده به عنوان یک روش جایگزین برای جذب گازهای اسیدی توسط آمین به صورت ریاضی مدلسازی گردیده است. در این مدل معادلات انتقال جرم و حرارت برای فیلم مایع و گاز که به صورت متقابل در کانالهایی در حال حرکت هستند، ارائه شده است. توزیع غلظت در عمق فیلم مایع بدون در نظر گرفتن منطقه تعادلی به دست آمده است. مطابق نتایج مدل، عملکرد ستون پرشده از نظر جذب سولفید هیدروژن در مقایسه با برج سینی‌دار مطلوب‌تر می‌باشد. همچنین توزیع قابل ملاحظه‌ای از غلظت و دما در طول برج مشاهده می‌گردد.

فهرست مطالب

عنوان — صفحه

فصل اول: مقدمه ۱

فصل دوم: مروری بر کارهای انجام شده ۳

۲-۱- مروری بر کارهای انجام شده در زمینه شبیه سازی در حالت پایا ۳

۲-۲- مروری بر کارهای انجام شده در زمینه شبیه سازی برج جذب و دفع ۵

۲-۳- مروری بر کارهای انجام شده در زمینه مدل‌سازی جریان سیال بر روی سینی ۹

۲-۴- مروری بر کارهای انجام شده در زمینه برج‌های پرشده منظم ۱۱

فصل سوم: محاسبات تعادلی سیستم محلول آمین و گازهای اسیدی ۱۳

۳-۱- سینتیک جذب H_2S و CO_2 ۱۳

۳-۱-۱- مکانیسم واکنش H_2S با $MDEA$ ۱۳

۳-۱-۲- مکانیسم واکنش CO_2 با $MDEA$ ۱۴

۳-۱-۳- واکنش CO_2 با $MDEA$ ۱۵

۳-۲- تعادل سیستم H_2S-CO_2-MDEA ۱۸

۳-۲-۱- بیان مسئله تعادل ۱۸

۳-۲-۲- مشخصات تعادل ۱۹

۳-۳- معادلات حاکم در فاز مایع ۲۱

۳-۴- معادلات حاکم در فاز بخار ۲۴

فصل چهارم: شبیه‌سازی دیاگرام جریانی واحد شیرین‌سازی گاز ۲۶

۴-۱- مقدمه ۲۶
۴-۲- شرح واحد شیرین کردن گاز توسط محلول آمین ۲۶
۴-۳- مکانیسم جذب گاز در حلالهای واکنشی ۲۷
۴-۴- معادلات حاکم بر فیلم مایع در سیستم $MDEA-CO_2-H_2S$ ۳۰
۴-۴-۱- شرایط مرزی معادلات حاکم بر فیلم مایع ۳۳
۴-۴-۲- شکل بی‌بعد معادلات حاکم ۳۶
۴-۴-۳- عامل بهبود جذب گاز ۳۹
۴-۵- فرآیند دفع ۴۰
۴-۵-۱- محاسبه غلظت اجزاء در فاز مایع ۴۱
۴-۶- معادلات حاکم بر فیلم مایع در برج دفع ۴۱
۴-۶-۱- عامل بهبود دفع گاز ۴۳
۴-۷- موازنه انرژی سینی ۴۴
۴-۸- موازنه جرم و انرژی در اطراف جوش آور ۴۵
۴-۸-۱- موازنه جرم ۴۶
۴-۸-۲- موازنه انرژی جوش‌آور ۴۷
۴-۹- تانک تبخیر ناگهانی ۴۷
۴-۱۰- روابط کمکی برای محاسبات شبیه‌سازی سینی ۴۷
۴-۱۰-۱- ضرایب انتقال جرم فیزیکی ۴۸
۴-۱۰-۲- سطح مشترک گاز و مایع ۴۸
۴-۱۰-۳- دانسیته و ویسکوزیته محلول آمین ۴۹
۴-۱۰-۴- ضرایب نفوذ در محلول‌های آبی آلکانول آمین ۴۹
۴-۱۰-۵- محاسبه گرمای ویژه ۵۱

فصل پنجم: شبیه‌سازی پایای دیاگرام جریانی واحد شیرین‌سازی گاز ۵۲

۵-۱- مقدمه ۵۲
۵-۲- لزوم ساده‌سازی دیاگرام جریانی فرآیند شیرین سازی گاز طبیعی ۵۲

۵-۳- مدل دیاگرام جریانی به روش بسته‌ای- ترتیبی ۵۴
۵-۴- شبیه‌سازی دیاگرام واحد شیرین‌سازی به روش بسته‌ای- همزمان ۵۵
۵-۵- روش حل مدلهای ریاضی ۵۸
۵-۵-۱- روش حل مدل بسته‌ای- ترتیبی ۵۸
۵-۵-۲- روش حل مدل بسته‌ای- همزمان ۵۹
۵-۵-۳- روش حل مدل برج جذب و دفع ۶۲
۵-۵-۴- روش حل مدل سینی ۶۲
۵-۶- بحث و نتایج شبیه‌سازی دیاگرام جریانی واحد شیرین‌سازی ۶۴
۵-۷- نتیجه‌گیری ۸۰
فصل ششم: کاربرد مدل CFD برای شبیه‌سازی جذب گازهای اسیدی ۸۲

۶-۱- مقدمه ۸۲
۶-۲- الگوی جریان فاز گاز ۸۲
۶-۳- مدل کردن جریان مایع بر روی سینی مشبک ۸۳
۶-۴- مدل نهایی برای عملکرد سینی ۸۷
۶-۴-۱- کاربرد مدل سلولی هیگلر برای بقای جرم ۸۸
۶-۵- حل مدل ۸۹
۶-۶- بحث و نتایج ۹۱
۶-۷- اثر پارامترهای مختلف بر عملکرد واحد شیرین‌سازی ۹۹
۶-۸- نتیجه‌گیری ۱۰۵
فصل هفتم: مقایسه عملکرد برج پر شده منظم با برج سینی‌دار ۱۰۷

۷-۱- مقدمه ۱۰۷
۷-۲- روشهای ممکن برای ارائه مدل ۱۰۷
۷-۳- مشخصات هندسی و جریان سیال در برج پر شده منظم ۱۰۸
۷-۴- معادلات انتقال جرم و انرژی ۱۱۱
۷-۵- روش حل مدل ۱۱۵

۷-۶- نتایج و بحث ۱۱۶
۷-۷- نتیجه‌گیری ۱۲۲
فصل هشتم: نتایج و پیشنهادات ۱۲۴

۸-۱- نتایج ۱۲۴
۸-۲- پیشنهادات ۱۲۵

فهرست منابع ۱۲۷

فهرست جدول‌ها

عنوان و شماره — صفحه

جدول شماره۳-۱: پارامترهای جزء مول- مبنای واکنشهای تعادلی و ثوابت هنری ۲۰
جدول شماره۴-۱: تعاریف توابع موجود در معادلات دیفرانسیل حاکم فیلم مایع ۳۳
جدول شماره۴-۲: معادلات دیفرانسیل حاکم برای سیستم $MDEA-CO_2-H_2S$ ۳۳
جدول شماره۴-۳: شرایط مرزی برای سیستم $MDEA-CO_2-H_2S$ ۳۵
جدول شماره۴-۴: فهرست گروه‌ها و پارامترهای بی‌بعد ۳۷
جدول شماره۴-۵: معادلات بی‌بعد سرعت واکنش ۳۸
جدول شماره۴-۶: توابع بی‌بعد ۳۸
جدول شماره۴-۷: معادلات دیفرانسیل سیستم $MDEA-CO_2-H_2S$ ۳۸
جدول شماره۴-۸: معادلات دیفرانسیل حاکم بر سیستم $MDEA-CO_2-H_2S$ ۴۲
جدول شماره۴-۹: ضرایب هدایت حرارتی محدود برای یونها در دمای K ۲۹۸/۱۵ ۵۰
جدول شماره۴-۱۰: ثابت های معادله گرمای ویژه مایع و گاز ۵۱
جدول شماره۵-۱: مشخصات برج جذب ۶۵
جدول شماره۵-۲: مشخصات برج دفع ۶۵
جدول شماره۵-۳: مشخصات جریان گاز ترش ورودی به برج جذب ۶۵
جدول شماره۵-۴: مشخصات آمین سبک در گردش ۶۶
جدول شماره۵-۵: محاسبه جریان آمین سبک از دو روش ۶۶
جدول شماره۵-۶: مشخصات جریان گاز شیرین خروجی از برج جذب از دو روش ۶۷
جدول شماره۵-۷: مشخصات جریان آمین غنی خروجی از برج جذب از دو روش ۶۸
جدول شماره۵-۸: مشخصات گاز خروجی از برج دفع از دو روش ۶۸
جدول شماره۶-۱: مشخصات برج سینی‌دار جذب گازهای اسیدی ۹۱
جدول شماره۶-۲: شرایط گاز خوراک و آمین سبک ۹۱

جدول شماره۶-۳: مقایسه نتایج برای گاز شیرین و آمین غلیظ ۹۲
جدول شماره۷-۱: مشخصات هندسی و پارامترهای مدل بستر ۱۱۶
جدول شماره۷-۲: مشخصات برج با سینی‌های مشبک ۱۱۷
جدول شماره۷-۳: شرایط جریانهای گاز شیرین و ترش، آمین رقیق و غلیظ ۱۱۷

فهرست شکل‌ها

عنوان صفحه

شکل شماره ۲-۱: توالی سلسله مراتب شبیه‌سازی فرآیند به وسیله نمودار پیازگونه ۴
شکل شماره ۴-۱: دیاگرام یک واحد شیرین‌سازی گاز به وسیله آمین ۲۷
شکل شماره ۴-۲: توصیف تئوری دو لایه‌ای برای فرآیند جذب واکنشی گاز ۲۸
شکل شماره ۴-۳: نمایی از یک سینی ۴۴
شکل شماره ۴-۴: جوش آور ۴۵
شکل شماره ۵-۱: دیاگرام واحد شیرین سازی برای روش بسته‌ای- ترتیبی ۵۴
شکل شماره ۵-۲: دیاگرام واحد شیرین سازی برای روش بسته‌ای- همزمان ۵۶
شکل شماره ۵-۳: دیاگرام جریانی محاسبات بسته‌ای- ترتیبی ۶۰
شکل شماره ۵-۴: دیاگرام جریانی محاسبات بسته‌ای- همزمان ۶۱
شکل شماره ۵-۵: دیاگرام محاسبات یک سینی ۶۴
شکل شماره ۵-۶: تغییرات دبی جریان فاز گاز در طول برج جذب ۶۹
شکل شماره ۵-۷: تغییرات دبی جریان فاز مایع در طول برج جذب ۷۰
شکل شماره ۵-۸: تغییرات دبی جریان فاز گاز در طول برج دفع ۷۱
شکل شماره ۵-۹: تغییرات دبی جریان فاز مایع در طول برج دفع ۷۱
شکل شماره ۵-۱۰: تغییرات عامل بهبود جذب در طول برج جذب ۷۲
شکل شماره ۵-۱۱: تغییرات عامل بهبود دفع در طول برج دفع ۷۳
شکل شماره ۵-۱۲: تغییرات درصد مولی اجزاء فاز گاز در طول برج جذب ۷۴
شکل شماره ۵-۱۳: تغییرات کسر مولی اجزاء فاز مایع در طول برج دفع ۷۵
شکل شماره ۵-۱۴: نمودار تغییرات دمای جریان‌های گاز و مایع در طول برج جذب ۷۶
شکل شماره ۵-۱۵: نمودار تغییرات دمای جریان‌های گاز و مایع در طول برج دفع ۷۷
شکل شماره ۵-۱۶: نمودار تغییرات سرعت جذب در طول برج جذب ۷۸
شکل شماره ۵-۱۷: نمودار تغییرات سرعت دفع در طول برج دفع ۷۸

شکل شماره ۵-۱۸: نمودار تغییرات غلظت اجزاء در فیلم فاز مایع در برج جذب ۷۹
شکل شماره ۵-۱۹: نمودار تغییرات غلظت اجزاء در فیلم فاز مایع در برج دفع ۸۰
شکل شماره ۶-۱: مدل دو بعدی یک سینی، گذر جریان مایع ۸۸
شکل شماره ۶-۲: موازنه جرم و انرژی برای یک سلول ۸۹
شکل شماره ۶-۳: تقسیم‌بندی فضای سینی ۹۰
شکل شماره ۶-۴: خطوط جریان روی سینی شماره ۱، $u_{L0}=0.0845\,\mathrm{m\,s^{-1}}$ ۹۳
شکل شماره ۶-۵: خطوط جریان روی سینی شماره ۱۰، $u_{L0}=0.0785\,\mathrm{m\,s^{-1}}$ ۹۳
شکل شماره ۶-۶: خطوط جریان روی سینی شماره ۲۰، $u_{L0}=0.0778\mathrm{m\,s^{-1}}$ ۹۴
شکل شماره ۶-۷: توزیع دما برحسب کلوین روی سینی شماره ۱ ۹۵
شکل شماره ۶-۸: توزیع دما برحسب کلوین روی سینی شماره ۱۰ ۹۵
شکل شماره ۶-۹: توزیع دما برحسب کلوین روی سینی شماره ۲۰ ۹۶
شکل شماره ۶-۱۰: توزیع درصد مولی H_2S در سینی شماره ۱ ۹۶
شکل شماره ۶-۱۱: توزیع درصد مولی H_2S در سینی شماره ۱۰ ۹۷
شکل شماره ۶-۱۲: توزیع درصد مولی H_2S در سینی شماره ۲۰ ۹۷
شکل شماره ۶-۱۳: توزیع درصد مولی CO_2 در سینی شماره ۱ ۹۸
شکل شماره ۶-۱۴: توزیع درصد مولی CO_2 در سینی شماره ۱۰ ۹۸
شکل شماره ۶-۱۵: توزیع درصد مولی CO_2 در سینی شماره ۲۰ ۹۹
شکل شماره ۶-۱۶: اثر نرخ گردش آمین بر درصد مولی گازهای اسیدی گاز شیرین ۱۰۰
شکل شماره ۶-۱۷: اثر غلظت آمین بر درصد مولی گازهای اسیدی گاز شیرین ۱۰۱
شکل شماره ۶-۱۸: اثر غلظت آمین بر سرعت جذب گازهای اسیدی ۱۰۲
شکل شماره ۶-۱۹: اثر غلظت آمین بر سرعت دفع گازهای اسیدی ۱۰۲
شکل شماره ۶-۲۰ اثر دمای آمین بر ترکیب گاز شیرین ۱۰۳
شکل شماره ۶-۲۱ اثر دمای آمین بر سرعت جذب گازهای اسیدی ۱۰۴
شکل شماره ۶-۲۲ اثر غلظت آمین بر عامل انتخاب پذیری ۱۰۴
شکل شماره ۷-۱ مشخصات هندسی یک صفحه چین‌خورده ۱۰۸
شکل شماره ۷-۲ شماتیک جریان مایع و گاز و توزیع غلظت در کانالها ۱۱۰
شکل شماره ۷-۳ توزیع سرعت فیلم مایع ۱۱۸
شکل شماره ۷-۴ ترکیب گاز بر حسب ارتفاع برج پرشده و تعداد سینی ۱۲۰

شکل شماره ۷-۵ توزیع غلظت در فیلم مایع بر حسب فاصله بدون بعد از دیواره ۱۲۱
شکل شماره ۷-۶ توزیع دمای مایع بر حسب ارتفاع برج پرشده و شماره سینی ۱۲۲

فهرست نشانه‌های اختصاری

نشانه	توضیح	واحد
a	نسبت سطح فصل مشترک به حجم بستر	m^{-1}
a_e	نسبت سطح فصل مشترک موثر به حجم بستر	m^{-1}
a_t	کل سطح فصل مشترک به حجم بستر	m^{-1}
A	مساحث	m^2
A_a	سطح فعال	m^2
A_{bub}	سطح حباب‌ها	m^2
A_h	سطح مقطع سوراخهای سینی	m^2
A_n	سطح سینی	m^2
A_{tower}	سطح مقطع برج	m^2
b	عرض صفحه چین خورده، عمود بر محور ستون	m
b_0	عرض صفحه چین خورده، عمود بر مسیر جریان	m
C	غلظت	mol/m^3
C_D	ضریب کشش	بدون بعد
C_p	ظرفیت گرمایی ویژه	$J/mol.K$
D	ضریب نفوذ	m^2/S
$\bar{D}$	ضریب نفوذ متوسط یون	m^2/S
D_e	ضریب نفوذ گردابه‌ای	m^2/S
D_L	ضریب نفوذ مایع	m^2/S
D_G	ضریب نفوذ گاز	m^2/S
D_{pac}	قطر ستون پرشده	m
d_G	قطر حباب	m
d_h	قطر هیدرولیک کانال	m
D_{hole}	قطر سوراخهای سینی	m

E	عامل بهبود	بدون بعد
F	دبی مولی	$kmole/h$
f	فوگاسیته گاز	Pa
f_w	فوگاسیته آب	Pa
f_W^0	فوگاسیته آب در فشار P^0	Pa
F	دبی جرمی	kg/h
g	شتاب تقل زمین	m/S^2
G	دبی فاز گاز	kg/h
GPD	افت فشار در گاز	Pa
h	ارتفاع چین‌خوردگی	m
h_{cl}	ارتفاع واضح مایع	m
h_f	ارتفاع سرجوش	m
h	آنتالپی ویژه	J/kg
h_L	ارتفاع مایع روی سینی	m
h_w	ارتفاع بند سینی	m
k_l°	ضریب انتقال جرم	m/S
K	ثابت بولتزمن	بدون بعد
L	دبی فاز مایع	kg/h
M	وزن مولکولی	g/mol
$\dot{m}$	دبی جرمی	kg/S
$\mathbf{M}_{L.G}$	انتقال مومنتوم بین فازی	kg/m^2S^2
N_{Re}	عدد رینولدز	بدون بعد
Sc	عدد اشمیت	بدون بعد
P	فشار	Pa
Q	دبی حجمی	m^3/S
$r_{p,k}$	انتقال ممنتوم در اثر انتقال جرم	kg/m^2S^2
R	ثابت جهانی گازها	$J/mol.K$
s	عرض صفحه چین خورده عمود بر محور ستون	m
s_0	عرض صفحه چین خورده عمود بر مسیر جریان	m
S_e	سطح خیس شده بستر پرشده	m^2
S_t	کل سطح بستر پرشده	m^2
T	دما	K

u	سرعت در جهت x	m/S
v	سرعت در جهت y	m/S
x	فاصله مؤلفه افقی کارتزین	m
x	جزء مولی فاز مایع	بدون بعد
y	فاصله مؤلفه عمودی کارتزین	m
y	جزء مولی فاز گاز	بدون بعد
z	ضریب تراکم پذیری	بدون بعد

علامات یونانی

α	ضریب هدایت دمای مولکولی	m^2/S
β	سطح آزاد جزئی	بدون بعد
δ	ضخامت لایه مایع	m
δ	ضریب فعالیت آب	بدون بعد
ε_{AB}	انرژی جذب مولکولی	J
φ	کسر حجمی هر فاز	بدون بعد
φ	ضریب تجمع مولکولی حلال	بدون بعد
ϕ_{H2O}	ضریب فوگاسیته فاز بخار	بدون بعد
γ_{H2O}	ضریب فعالیت	بدون بعد
η	بازدهی جذب	بدون بعد
θ_L	زمان اقامت مایع در روی سینی	S
Γ	انتقال جرم بین فازی	kg/m^3S
μ	ویسکوزیته دینامیکی	$kg/m.S$
ν	ویسکوزیته سینماتیکی	m^2/S
ρ	دانسیته	kg/m^3
σ	کشش سطحی فاز مایع	N/m
υ	حجم مولی	m^3/mol
υ_{H2O}	حجم مولی آب	m^3/mol
ψ	جزء ماندگی	بدون بعد
τ	تنش برشی	Pa

بالانویس

نشانه	توضیح
tr	انتقال

زیرنویس

نشانه	توضیح
avg	متوسط
A, B, i	نشان دهنده یک جزء
blk	توده
G	فاز گاز
in.	ورودی
k	شماره فاز
L	فاز مایع
m	مخلوط
n	شماره سینی
O. / Out	خروجی
S	حلال
T	آشفتگی

مقدمه

هدف از این مطالعه، شبیه‌سازی دیاگرام جریانی در حالت پایا[1] برای یک واحد شیرین‌سازی گاز طبیعی می‌باشد. به این نحو که بتوان با داشتن شرایط جریانهای ورودی به واحد شرایط جریانهای درونی و خروجی را به دست آورد. شرایط و مشخصات مورد نظر شامل دبی، ترکیب مواد و دمای آنهاست. با داشتن این شرایط، کلیه اطلاعات و مشخصات دیگر این جریانها به کمک روابط ترمودینامیکی و معادلات حالات فاز بخار و مایع قابل تعیین خواهند بود. معمولا چنین شبیه‌سازی‌هایی برای حل مسائل مربوط به طراحی، بهینه‌سازی، محاسبات اقتصادی، ایمنی، کنترل آلودگی محیط زیست، کنترل فرآیند و نظایر آن مورد نیاز می‌باشد (لوری[2] ۱۹۹۷). در این صورت می‌توان به طور مثال اثرات ایجاد شده ناشی از تغییر در غلظت یک ماده در خوراک را در کلیه مراحل فرآیند شبیه‌سازی بررسی نموده و با توجه به این نتایج، شرایط مطلوب عملیاتی را تعیین نمود.

مدلسازی فرآیند انجام شده در واحد شیرین‌سازی در سه دستگاه عمده انجام می‌شود. این دستگاهها عبارتند از: برج جذب گازهای اسیدی و شیرین‌سازی گاز طبیعی توسط محلول آمین، دستگاه تبخیر آنی برای جداسازی اولیه گازهای اسیدی از محلول آمین غنی و برج دفع برای احیای محلول آمین غنی و دفع گازهای اسیدی از آن. برای شبیه‌سازی این فرآیند از مدلهای سرعت- مبنا، دینامیک سیالات محاسباتی و برج پرشده منظم استفاده شده است. مدل ریاضی و نتایج به دست آمده در هر روش در بخشهای جداگانه ارائه می‌گردد.

در روش سرعت- مبنا یک سینی به شکل یک تانک کاملا مخلوط در نظر گرفته می‌شود و سپس فرآیند انتقال گازهای اسیدی به آمین به وسیله روش تئوری دو فیلمی[3] توصیف می‌شود. در این روش ابتدا معادلات حاکم در فیلم مایع نوشته شده و سپس با محاسبه شیب غلظت بر حسب فاصله از سطح مشترک، تعیین سرعت انتقال گازهای اسیدی مقدور می‌گردد.

روش دوم مدلسازی فرآیند جذب با استفاده از مدلهای دینامیک سیالات محاسباتی است. در این روش سرعت مایع بر روی سینی در نقاط مختلف به دست می‌آید. برای این منظور

---

[1] Steady-state flowsheeting
[2] Lory
[3] Two-film theory