

سلام الله على من
آمن به



بسمه تعالی

تاییدیه اعضای هیات داوران حاضر در جلسه دفاع از پایان نامه

خانم ثنا جهانشاهی انبوهی پایان نامه ۹ واحدی خود را با عنوان مدل‌سازی و شبیه سازی سینتیکی برج جذب واحد آمین برای جذب دی اکسید کربن در تاریخ ۱۳۸۸/۱۲/۱۲ ارائه کردند.

اعضای هیات داوران نسخه نهایی این پایان نامه را از نظر فرم و محتوا تایید کرده و پذیرش آنرا برای تکمیل درجه کارشناسی ارشد مهندسی شیمی - مهندسی شیمی پیشنهاد می کنند.

عضو هیات داوران	نام و نام خانوادگی	رتبه علمی	امضا
استاد راهنما	دکتر علی حق طلب	استاد	
استاد مشاور	دکتر ابراهیم واشقانی فراهانی	استاد	
استاد ناظر	دکتر مهرداد منطقیان	دانشیار	
استاد ناظر	دکتر حسین بهمنیار	استاد	
مدیر گروه (یا نماینده گروه تخصصی)	دکتر مهرداد منطقیان	دانشیار	

آیین نامه چاپ پایان نامه (رساله) های دانشجویان دانشگاه تربیت مدرس

نظر به اینکه چاپ و انتشار پایان نامه (رساله) های تحصیلی دانشجویان دانشگاه تربیت مدرس، مبین بخشی از فعالیتهای علمی - پژوهشی دانشگاه است بنابراین به منظور آگاهی و رعایت حقوق دانشگاه، دانش آموختگان این دانشگاه نسبت به رعایت موارد ذیل متعهد می شوند:

ماده ۱: در صورت اقدام به چاپ پایان نامه (رساله) ی خود، مراتب را قبلاً به طور کتبی به «دفتر نشر آثار علمی» دانشگاه اطلاع دهد.

ماده ۲: در صفحه سوم کتاب (پس از برگ شناسنامه) عبارت ذیل را چاپ کند:

«کتاب حاضر، حاصل پایان نامه کارشناسی ارشد/ رساله دکتری نگارنده در رشته **مهندسی شیمی** است که در سال ۱۳۸۸ در دانشکده فنی و مهندسی دانشگاه تربیت مدرس به راهنمایی جناب آقای **دکتر علی حق طلب**، مشاوره جناب آقای **دکتر ابراهیم واشقانی فراهانی**

و مشاوره سرکار خانم/جناب آقای دکتر --- از آن دفاع شده است.»

ماده ۳: به منظور جبران بخشی از هزینه های انتشارات دانشگاه، تعداد یک درصد شمارگان کتاب (در هر نوبت چاپ) را به «دفتر نشر آثار علمی» دانشگاه اهدا کند. دانشگاه می تواند مازاد نیاز خود را به نفع مرکز نشر در معرض فروش قرار دهد.

ماده ۴: در صورت عدم رعایت ماده ۳، ۵۰٪ بهای شمارگان چاپ شده رابه عنوان خسارت به دانشگاه تربیت مدرس، تأدیه کند.

ماده ۵: دانشجو تعهد و قبول می کند در صورت خودداری از پرداخت بهای خسارت، دانشگاه می تواند خسارت مذکور را از طریق مراجع قضایی مطالبه و وصول کند؛ به علاوه به دانشگاه حق می دهد به منظور استیفای حقوق خود، از طریق دادگاه، معادل وجه مذکور در ماده ۴ را از محل توقیف کتابهای عرضه شده نگارنده برای فروش، تأمین نماید.

ماده ۶: اینجانب **ثنا جهانشاهی** دانشجوی رشته **مهندسی شیمی**

مقطع **کارشناسی ارشد**

تعهد فوق و ضمانت اجرایی آن را قبول کرده، به آن ملتزم می شوم.

نام و نام خانوادگی: **ثنا جهانشاهی**

تاریخ و امضا: اسفند ۸۸



دستورالعمل حق مالکیت مادی و معنوی در مورد نتایج پژوهشهای علمی دانشگاه تربیت مدرس

مقدمه: با عنایت به سیاست‌های پژوهشی دانشگاه در راستای تحقق عدالت و کرامت انسانها که لازمه شکوفایی علمی و فنی است و رعایت حقوق مادی و معنوی دانشگاه و پژوهشگران، لازم است اعضای هیات علمی، دانشجویان، دانش آموختگان و دیگر همکاران طرح، در مورد نتایج پژوهشهای علمی که تحت عناوین پایان‌نامه، رساله و طرحهای تحقیقاتی که با هماهنگی دانشگاه انجام شده است، موارد ذیل را رعایت نمایند:

ماده ۱- حقوق مادی و معنوی پایان‌نامه‌ها / رساله‌های مصوب دانشگاه متعلق به دانشگاه است و هرگونه بهره‌برداری از آن باید با ذکر نام دانشگاه و رعایت آیین‌نامه‌ها و دستورالعمل‌های مصوب دانشگاه باشد.

ماده ۲- انتشار مقاله یا مقالات مستخرج از پایان‌نامه / رساله به صورت چاپ در نشریات علمی و یا ارائه در مجامع علمی باید به نام دانشگاه بوده و استاد راهنما مسئول مکاتبات مقاله باشد. تبصره: در مقالاتی که پس از دانش آموختگی بصورت ترکیبی از اطلاعات جدید و نتایج حاصل از پایان‌نامه / رساله نیز منتشر می‌شود نیز باید نام دانشگاه درج شود.

ماده ۳- انتشار کتاب حاصل از نتایج پایان‌نامه / رساله و تمامی طرحهای تحقیقاتی دانشگاه باید با مجوز کتبی صادره از طریق حوزه پژوهشی دانشگاه و بر اساس آئین‌نامه‌های مصوب انجام می‌شود.

ماده ۴- ثبت اختراع و تدوین دانش فنی و یا ارائه در جشنواره‌های ملی، منطقه‌ای و بین‌المللی که حاصل نتایج مستخرج از پایان‌نامه / رساله و تمامی طرحهای تحقیقاتی دانشگاه باید با هماهنگی استاد راهنما یا مجری طرح از طریق حوزه پژوهشی دانشگاه انجام گیرد.

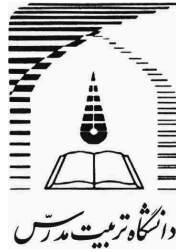
ماده ۵- این دستورالعمل در ۵ ماده و یک تبصره در تاریخ ۱۳۸۴/۴/۲۵ در شورای پژوهشی دانشگاه به تصویب رسیده و از تاریخ تصویب لازم‌الاجرا است و هرگونه تخلف از مفاد این دستورالعمل، از طریق مراجع قانونی قابل پیگیری می‌شود.

نام و نام خانوادگی

ثنا جهانشاهی

امضاء





دانشگاه تربیت مدرس
دانشکده فنی و مهندسی

پایان نامه دوره کارشناسی ارشد مهندسی شیمی - طراحی فرایند

عنوان پایان نامه

مدل سازی و شبیه سازی سینتیکی برج جذب واحد آمین برای جذب دی اکسید کربن

نگارنده

ثنا جهانشاهی انبوهی

استاد راهنما

دکتر علی حق طلب

استاد مشاور

دکتر ابراهیم واشقانی فراهانی

اسفند ۱۳۸۸

خداوند را شاکرم که زندگی‌ام را در مسیری قرار داد تا بتوانم با آموختن، قدمی در جهت تکامل خویش بردارم.

از راهنمایی‌ها و زحمات استاد گرانقدرم جناب آقای دکتر علی حق‌طلب، که همواره دلسوزانه با راهنمایی‌های ارزنده‌شان مرا در رسیدن به اهداف پروژه یاری فرمودند، و همچنین از جناب آقای دکتر ابراهیم واشقانی بخاطر راهنمایی‌ها و زحماتشان کمال تشکر را دارم.

و سپاس بی‌پایان از پدر و مادر بزرگوام که هرچه دارم از برکات وجود آنهاست.

چکیده

امروزه بازیابی دی‌اکسیدکربن از گازهای دودکش خروجی از واحدهای نیروگاهی و پالایشگاهی به عنوان مهمترین منابع تولید گازهای گلخانه‌ای، یکی از اساسی‌ترین دغدغه‌های فعالیت در زمینه مسائل زیست محیطی می‌باشد. در راستای تحقیقات و تلاش‌های انجام شده، در این تحقیق سعی شده با استفاده از روشی جدید و نگاهی متفاوت، مدل‌سازی غیر تعادلی-سینتیکی فرایند جذب CO_2 توسط محلول‌های آلکانول‌آمین در برجهای سینی دار واحد جذب صورت گیرد. در مدل مذکور هر مرحله از برج به صورت ترکیبی متوالی از یک جعبه فرضی انتقال جرم و یک راکتور در نظر گرفته شده است. انتقال جرم در جعبه فرضی بصورت فیلم تئوری در نظر گرفته شده و واکنش نیز در قالب یک راکتور ناپیوسته¹ فرض شده است.

برنامه کامپیوتری مدل مذکور توسط نرم‌افزار *MATLAB*، برای جذب دی‌اکسیدکربن در سه سامانه² مختلف حلال آلکانول‌آمین از جمله محلول متیل‌دی‌اتانول‌آمین (*MDEA*)، محلول مونواتانول‌آمین (*MEA*) و محلول دی‌گلایکول‌آمین (*DGA*) نوشته شده است. مقایسه نتایج حاصل از مدل مذکور با نتایج حاصل از یک شبیه‌سازی دقیق عددی برج جذب انجام شد. مقایسه با نتایج داده‌های واقعی برج جذب *MEA* واحد آمونیاک پتروشیمی رازی، و نیز مقایسه با نتایج حاصل از شبیه‌سازی با استفاده از نرم افزارهای *ASPEN* و *Hysys* که به ترتیب از مدل‌های *Electrolyte-NRTL* و *Kent-Eisenberg* برای محاسبات تعادلی آنها استفاده شده، حاکی از صحت عملکرد مدل مذکور می‌باشد. همچنین اثر پارامترهای مختلف مانند دما، شدت جریان و غلظت حلال و ... بر عملکرد برج جذب مورد بررسی قرار گرفت.

کلمات کلیدی: برج جذب، جذب دی‌اکسیدکربن، جذب سینتیکی، متیل‌دی‌اتانول‌آمین، مونواتانول‌آمین، دی‌گلایکول‌آمین.

1 batch
2 System

فهرست مطالب

صفحه

عنوان

فصل اول: مقدمه

۱-۱- مقدمه ۱

۲-۱- اهداف و فصول پایان نامه ۳

فصل دوم: بررسی روش‌های مختلف جداسازی گاز CO_2

۱-۲- مقدمه ۵

۲-۲- انتخاب فرایند مناسب برای بازیابی CO_2 ۸

۳-۲- بررسی اجمالی روش‌های مختلف بازیابی CO_2 ۱۰

۱-۳-۲- جذب سطحی ۱۰

۲-۳-۲- بازیابی CO_2 با استفاده از روش تبرید (تقطیر دما پائین) ۱۲

۳-۳-۲- بازیابی CO_2 با استفاده از غشاء ۱۲

۴-۳-۲- جذب فیزیکی ۱۴

۵-۳-۲- جذب شیمیایی ۱۵

۱-۵-۳-۲- شرح کلی فرآیند آمین ۱۵

۲-۵-۳-۲- تحقیقات انجام شده درباره روش جذب ۱۸

۳-۵-۳-۲- مزایا و معایب حلال‌های شیمیایی نسبت به حلال‌های فیزیکی ۳۰

۴-۲- انتخاب روش مناسب با توجه به شرایط عملیاتی ۳۱

فصل سوم: تحقیقات انجام شده در زمینه جذب با استفاده از حلال شیمیایی

۱-۳- مقدمه ۳۳

۳۵	۲-۳-۲- روش تعادلی (ترمودینامیکی)
۳۸	۳-۳-۳- روش غیر تعادلی (سینتیکی)
۳۹	۱-۳-۳- توسعه روش غیر تعادلی توسط <i>Danckwerts</i>
۴۲	۲-۳-۳- استفاده از روش غیر تعادلی برای مدل سازی برج جذب پرشده
۴۸	۳-۳-۳- مدل سازی برج جذب CO_2 با استفاده از حلال <i>MDEA</i> فعال شده
۴۹	۱-۳-۳-۳- تشریح مدل
۵۱	۴-۳-۳- مدل سازی با کمک نرم افزار <i>Aspen Plus</i>
۵۲	۵-۳-۳- مدل سازی برج جذب CO_2 با استفاده از حلال <i>MEA</i> و برج پرشده ساختاری
۵۳	۶-۳-۳- تحقیقات درباره مدل غیر تعادلی در داخل کشور

فصل چهارم: مدل سازی برج جذب

۵۸	۱-۴- مقدمه
۵۸	۲-۴- چهار چوب کلی مدل
۵۸	۱-۲-۴- تئوری بخش واکنش
۵۸	۱-۱-۲-۴- سامانه جذب با <i>MEDA</i>
۶۰	۲-۱-۲-۴- سامانه جذب با <i>MEA</i>
۶۱	۳-۱-۲-۴- سامانه جذب با <i>DGA</i>
۶۱	۲-۲-۴- تئوری بخش انتقال جرم
۶۲	۳-۲-۴- مدل سازی برج جذب
۶۵	۱-۳-۲-۴- موازنه انرژی پیرامون کل برج و محاسبه T_l^N و T_g^N
۶۶	۲-۳-۲-۴- موازنه جرم پیرامون کل برج
۶۷	۳-۳-۲-۴- جعبه انتقال جرم و محاسبه $y^{(N)}$
۶۸	۴-۳-۲-۴- محاسبات جعبه راکتور
۷۱	۳-۴- محاسبه متغیرها و داده های مورد نیاز مدل

۷۱	۱-۳-۴- محاسبه پارامترهای مربوط به انتقال جرم
۷۱	۱-۱-۳-۴- محاسبه فشار بخار تعادلی
۷۳	۲-۳-۴-۴- محاسبه پارامترهای مربوط به انتقال جرم
۷۵	۲-۳-۴- محاسبه پارامترهای مربوط به انتقال حرارت
۷۵	۱-۲-۳-۴- ظرفیت گرمایی فاز مایع
۷۶	۲-۲-۳-۴- ظرفیت گرمایی فاز گاز
۷۸	۳-۲-۳-۴- آنتالپی ناشی از واکنش و جذب
۷۸	۴-۲-۳-۴- محاسبه پارامتر سینتیکی واکنش
۷۹	۴-۴- الگوریتم محاسبات مدل

فصل پنجم: بحث و نتایج

۸۱	۱-۵- مقدمه
۸۱	۲-۵- برج جذب <i>MDEA</i>
۹۹	۳-۵- برج جذب <i>MEA</i>
۹۰	۴-۵- برج جذب <i>DGA</i>
۹۴	۵-۵- مقایسه حلال ها

فصل ششم: نتیجه گیری و پیشنهادها

۹۸	۱-۶- نتیجه گیری
۹۹	۲-۶- پیشنهادها

علائم و نشانه ها

$a =$	<i>specific contact area (cm^2/cm^3)</i>
$A =$	<i>cross sectional area of the column (cm^2)</i>
$C =$	<i>concentration in the bulk of liquid (gmole/L)</i>
$C_p =$	<i>heat capacity (j/kgK)</i>
$C_{CO_2} =$	<i>concentration of CO_2 in the liquid phase entering reactor (gmole/lit)</i>
$D =$	<i>diameter of column (cm)</i>
$D_i =$	<i>diffusivity of component i (m^2/s)</i>
$G =$	<i>molar flux of gas phase entering the column (gmole/$cm^2.s$)</i>
$G_{inert} =$	<i>molar flux of inert gas entering the column (considering all components except CO_2) (gmole/$cm^2.s$)</i>
$H =$	<i>Henry's constant (kg.atm/mol)</i>
$j =$	<i>tray number</i>
$k_1 =$	<i>forward first-order rate constant (1/s)</i>
$k_{-1} =$	<i>backward first-order rate constant (1/s)</i>
$k_2 =$	<i>forward second-order rate constant ($m^3/mol.s$)</i>
$k_{-2} =$	<i>backward second-order rate constant ($m^3/mol.s$)</i>
$K_{G_i} =$	<i>overall mass transfer coefficient of component i (gmole/$cm^2.s.atm$)</i>
$K_c =$	<i>equilibrium constant</i>
$k_g =$	<i>local mass transfer coefficient of gas phase (gmole/$cm^2.s.atm$)</i>
$k_l =$	<i>local mass transfer coefficient of liquid phase (cm/s)</i>
$L =$	<i>volume flow rate of liquid phase (cm^3/s)</i>
$MW_i =$	<i>molecular weight of i component (g/gmole)</i>
$N =$	<i>total Number of column trays</i>
$N_{CO_2} =$	<i>mass transfer flux of CO_2 based on mass transfer contact area (gmole/$cm^2.s$)</i>
$N'_{total}^{(j)} =$	<i>total amount of absorbed CO_2 from first tray to j^{th} tray (gmole/$cm^2.s$)</i>
$N'_{tray}^{(j)} =$	<i>mass transfer flux of CO_2 between $(j+1)^{th}$ tray and j^{th} tray based on cross sectional area (gmole/$cm^2.s$)</i>
$P =$	<i>column total pressure (atm)</i>

P_i	=	<i>partial pressure of component i in the bulk gas phase (atm)</i>
P_i^*	=	<i>equilibrium partial pressure of component i in gas phase (atm)</i>
r	=	<i>reaction rate (gmole/L.s)</i>
T_g	=	<i>temperature of gas phase (K)</i>
T_l	=	<i>temperature of liquid phase (K)</i>
V	=	<i>volume of liquid on tray (cm³)</i>
W_{am}	=	<i>amine mass fraction in the bulk of liquid phase</i>
x_{CO_2}	=	<i>mole fraction of CO₂ in the bulk of liquid phase (in both reacted and unreacted form)</i>
X_i	=	<i>conversion of i component in reactor.</i>
y	=	<i>CO₂ mole fraction in the bulk of gas phase</i>

Greek letters

ρ	=	<i>density (kg/m³)</i>
μ	=	<i>viscosity (Pa.s)</i>
Φ	=	<i>amine molar flow rate (kg mole/hr)</i>
ΔH	=	<i>sum of the heats of both reaction and absorption (j/mole)</i>

Superscripts

e	=	<i>equilibrium condition</i>
j	=	<i>tray number</i>
R	=	<i>reactor</i>
t	=	<i>total</i>

Subscripts

am	=	<i>amine</i>
g	=	<i>gas phase</i>
i	=	<i>species</i>
l	=	<i>liquid phase</i>

فهرست جدول‌ها

عنوان	صفحه
جدول ۱-۲- خواص فیزیکی و شیمیایی دی‌اکسیدکربن.....	۶
جدول ۲-۲- عوامل تاثیرگذار بر انتخاب فرایند جداسازی گازها.....	۸
جدول ۳-۲- سهولت ساخت واحد صنعتی و افزایش ظرفیت برای بسیاری از واحدهای متعارف.....	۱۰
جدول ۴-۲- مشخصات اصلی واحد آزمایشگاهی بازیابی CO_2	۱۹
جدول ۵-۲- مقایسه بار مولی و نرخ حلال در گردش حلالهای مختلف با حلال <i>Econamine</i> در فشار اتمسفر.....	۲۱
جدول ۶-۲- هزینه‌های عملیاتی و سرمایه‌ای واحد بازیابی ۲۰۰ تن در روز با حلال <i>Econamine FG</i>	۲۲
جدول ۷-۲- نتایج تجربی جذب و دفع با استفاده از نمک‌های پتاسیم آمینواسیدها.....	۲۴
جدول ۸-۲- نتایج تجربی جذب با استفاده از حلال <i>50% MDEA+5% piperazine</i> در $T=40\text{ C}$ و $P=1\text{ atm}$	۲۵
جدول ۹-۲- نتایج تجربی دفع با استفاده از حلال <i>50% MDEA+5% piperazine</i> در $T=40\text{ C}$ و $P=1\text{ atm}$	۲۵
جدول ۱۰-۲- مقایسه افت حلال <i>MEA</i> و <i>PSR</i>	۲۶
جدول ۱۱-۱- مقایسه میزان خوردگی در دو حلال مورد استفاده.....	۲۷
جدول ۱۲-۲- نتایج آزمایش خوردگی.....	۲۹
جدول ۱۳-۲- خواص حلال‌های معمول که در جذب CO_2 استفاده می‌شوند.....	۳۰

- جدول ۲-۱۴ - فرایندهای مناسب برای بازیابی CO_2 از گازهای مختلف.....۳۲
- جدول ۲-۱۵ - فناوری های مورد استفاده در دنیا برای بازیابی CO_2 حاصل از گازهای دودکش.....۳۲
- جدول ۳-۱ - معادلات موازنه برای یک المان از برج جذب ۵۵
- جدول ۴-۱ - مقادیر ظرفیت گرمایی نقصانی بصورت $\left(\frac{C_p - C_p^o}{R}\right)^{(0)}$ بر حسب T_r و P_r۷۷
- جدول ۴-۲ - مقادیر ظرفیت گرمایی نقصانی بصورت $\left(\frac{C_p - C_p^o}{R}\right)^{(1)}$ بر حسب T_r و P_r۷۷
- جدول ۵-۱ - اطلاعات عملیاتی و متغیرهای معلوم برج جذب *MDEA* ۸۲
- جدول ۵-۲ - انحراف نتایج مدل جدید و نتایج دو شبیه سازی با پایه تعادلی^۱، نسبت به نتایج مدلسازی عددی *S. van Loo* ۸۵
- جدول ۵-۳ - اطلاعات عملیاتی و متغیرهای معلوم برج جذب *MEA*.....۸۷
- جدول ۵-۴ - انحراف نتایج مدل جدید و نتایج دو شبیه سازی با پایه تعادلی، نسبت به داده‌های مجتمع پتروشیمی رازی.....۸۹

1 - equilibrium-based models

فهرست شکل‌ها

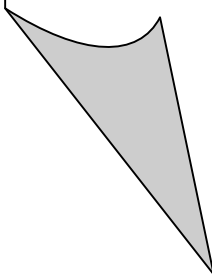
صفحه	عنوان
۷	شکل ۱-۲- نمایشی از فرایندهای مورد استفاده برای بازیابی CO_2
۹	شکل ۲-۲- رشد فناوری و مصرف فرایندهای جداسازی
۱۱	شکل ۳-۲- نمودار جریان فرایند جذب سطحی برای بازیابی CO_2
۱۳	شکل ۴-۲- فرایند جذب گاز در مایع
۱۵	شکل ۵-۲- روندنمای ساده شده فرایند جذب و دفع بدون استفاده از برج دفع با بخار
	شکل ۶-۲- روندنمای ساده شده فرایند جذب و دفع در محلول آمین CO_2 (هرکدام از برج‌ها می‌تواند
۱۶	سینی‌دار باشد)
۲۰	شکل ۷-۲- راندمان جذب CO_2 در مقابل نسبت مایع به گاز دودکش
۲۰	شکل ۸-۲- تعداد مول CO_2 جذب شده توسط MEA
۲۱	شکل ۹-۲- تاثیر دما بر روی میزان جذب
۲۸	شکل ۱۰-۲- گرمای جذب CO_2 با استفاده از آلکانول آمین
۲۸	شکل ۱۱-۲- نمودار تعادلی آمین - آب - CO_2
۲۹	شکل ۱۲-۲- نمودار درصد بازیابی CO_2 بصورت تابعی از انرژی مورد نیاز برای احیاء
۲۹	شکل ۱۳-۲- میزان CO_2 جذب شده بصورت تابعی از بخار مصرفی
۳۹	شکل ۱-۳- نمای شماتیک یک مرحله غیرتعادلی
۴۱	شکل ۲-۳- فاکتور E_i برای واکنش‌های بسیار سریع
۴۲	شکل ۳-۳- فاکتور افزایش برای واکنش‌های درجه دوم
۴۳	شکل ۴-۳- جزء دیفرانسیلی برج پرشده

- شکل ۳-۵- نمای شماتیک واحد پایلوت جذب CO_2 ۴۶
- شکل ۳-۶- مقایسه بین نتایج آزمایشگاهی و نتایج بدست آمده از مدل توسعه داده شده توسط
Gabrielsen ۴۶
- شکل ۳-۷- فلوجارت مدل جذب CO_2 -آمین ۴۷
- شکل ۳-۸- پایلوت *UBC*، مقایسه نتایج واقعی و شبیه‌سازی برای سیستم CO_2 -AMP ۴۸
- شکل ۳-۹- نمای شماتیک برج جذب سینی‌دار جهت جذب CO_2 ۴۹
- شکل ۳-۱۰- استفاده از *RateFrac* برای مدل‌سازی جذب واکنشی ۵۲
- شکل ۳-۱۱- مقایسه بین نتایج تجربی و نتایج بدست آمده از مدل ۵۳
- شکل ۳-۱۲- یک المان از برج جذب ۵۴
- شکل ۳-۱۳- پروفایل غلظت خروجی CO_2 برای فعال کننده های مختلف ۵۶
- شکل ۳-۱۴- تاثیر شدت جریان مایع ورودی ۵۶
- شکل ۴-۱- شماتیکی از برج جذب CO_2 از دیدگاه مدل‌سازی مورد نظر ۷۵
- شکل ۴-۲- سینی شماره *N*ام (پایین برج) ۷۷
- شکل ۴-۳- الگوریتم شبیه‌سازی برج جذب CO_2 با استفاده از مدل کینتیکی - غیر تعادلی جدید ۸۰
- شکل ۵-۱- پروفایل فشار جزئی دی‌اکسیدکربن در طول برج و مقایسه نتایج مدل جدید با نتایج مدل
Electrolyte-NTRL, S. van Loo و *Kent-Eisenberg* ۸۳
- شکل ۵-۲- پروفایل دما در طول برج و مقایسه نتایج مدل جدید با نتایج مدل *S. van Loo* ۸۴
- شکل ۵-۳- تعداد سینی‌های مورد نیاز برج جذب بر حسب تغییرات دما، دبی مولی و کسر جرمی
 موجود در حلال ورودی به برج و تغییر فشار کل برج ۸۵
- شکل ۵-۴- پروفایل فشار جزئی دی‌اکسیدکربن در طول برج و مقایسه نتایج مدل جدید با داده‌های
 مجتمع پتروشیمی رازی، *Electrolyte-NTRL* و *Kent-Eisenberg* ۸۸

- شکل ۵-۵- پروفایل دما در طول برج و مقایسه نتایج مدل جدید با داده‌های مجتمع پتروشیمی رازی، *Electrolyte-NTRL* و *Kent-Eisenberg* ۸۹
- شکل ۶-۵- پروفایل فشار جزئی دی‌اکسیدکربن در طول برج و مقایسه نتایج مدل جدید با مدل‌های *Electrolyte-NTRL* و *Kent-Eisenberg* ۹۱
- شکل ۷-۵- پروفایل دما در طول برج و مقایسه نتایج مدل جدید با مدل‌های *Electrolyte-NTRL* و *Kent-Eisenberg* ۹۱
- شکل ۸-۵- پروفایل ویسکوزیته فاز مایع در طول برج ۹۲
- شکل ۹-۵- کسر جرمی آمین واکنش نداده در فاز مایع ۹۳
- شکل ۱۰-۵- پروفایل بار مولی CO_2 در فاز مایع ۹۳
- شکل ۱۱-۵- کسر مولی CO_2 در حالت ملکولی (واکنش نداده) ۹۴
- شکل ۱۲-۵- پروفایل فشار جزئی دی‌اکسیدکربن در طول برج برای سه حلال *MEA*, *MDEA* و *DGA* ۹۵
- شکل ۱۳-۵- پروفایل دما در طول برج برای سه حلال *MEA*, *MDEA* و *DGA* ۹۵
- شکل ۱۴-۵- تعداد سینی‌های مورد نیاز به ازای استفاده از حلال‌های مختلف ۹۶

فصل اول

مقدمه



۱-۱- مقدمه

غلظت بالای دی‌اکسیدکربن و دیگر گازهای گلخانه‌ای در اتمسفر یکی از معضلات اصلی انقلاب صنعتی می‌باشد. سوخت‌های فسیلی هنوز هم بعنوان مهمترین منبع انرژی شناخته می‌شوند و از طرف دیگر بزرگترین منبع تولید گازهای گلخانه‌ای هستند که باعث گرم شدن زمین می‌شوند.

غلظت CO_2 در اتمسفر در سال ۱۹۹۶ به بیش از $355 ppmv$ رسیده است و نسبت به دو قرن اخیر بیش از ۲۵٪ و نسبت به سال ۱۹۵۸ بیش از ۱۰٪ افزایش یافته است و سالانه غلظت CO_2 حدوداً ۰/۵٪ یا $1/8 ppmv/year$ افزایش پیدا می‌کند. افزایش آگاهی در مورد خطرات تغییرات آب و هوایی باعث ایجاد علاقه به انجام تحقیقاتی در مورد جداسازی گاز گلخانه‌ای CO_2 از سال ۱۹۸۹ گردید. اهمیت جداسازی CO_2 به تدریج در تمام دنیا رواج یافت و بر طبق قرارداد بین‌المللی در مورد تغییرات آب و هوایی در کیوتو، تعهدی برای کاهش میزان آلودگی CO_2 به میزان ۶٪ کمتر از سطح سال ۱۹۹۰ توسط بسیاری از کشورها ایجاد شد.

اگرچه انتشار CO_2 از منابع مختلفی نظیر نیروگاه‌ها، صنایع مختلف، گرمایش خانگی و وسایل نقلیه صورت می‌گیرد، اما بیشترین تحقیقات در مورد بازیابی CO_2 بر روی واحدهای نیروگاهی و صنایع مختلف صورت گرفته است. اضافه کردن یک سامانه بازیابی CO_2 هنوز هم به عنوان تنها راه حل برای کاهش انتشار این گاز گلخانه‌ای شناخته می‌شود. محصول CO_2 بازیابی شده را می‌توان به عنوان خوراک در بسیاری از صنایع غذایی، شیمیایی و همچنین نفتی مورد استفاده قرار داد که در کاهش هزینه های اقتصادی و افزایش بازده تاثیر بسزایی دارد. بطور کلی علاقه به بازیابی CO_2 از گازهای دودکش به چند دلیل عمده از جمله تجارت CO_2 تولیدی، استفاده در ازدیاد برداشت نفت (EOR) و کاهش انتشار گازهای گلخانه‌ای توسعه پیدا کرده است.

فناوری‌های بسیاری برای کاهش CO_2 در دنیا رواج یافته‌اند که در این میان در حال حاضر روش‌های جداسازی مرسوم بصورت صنعتی و یا نیمه‌صنعتی را به چند فرایند عمده ذیل می‌توان تقسیم نمود:

- فرایند جذب فیزیکی با حلال
- فرایند جذب شیمیایی با حلال
- فرایند جذب سطحی
- فرایند بازیابی با استفاده از غشاء
- استفاده از سامانه تبرید
- روش‌های زیستی

در میان روش‌های مختلف برای بازیابی CO_2 ، معمولا روش جذب شیمیایی با استفاده از حلال آلکانول‌آمین به عنوان روشی که از نظر فناوری تکامل یافته تر بوده و در ضمن دارای هزینه کمتری می‌باشد برای استفاده در واحدهای نیروگاهی استفاده می‌گردد. سامانه جذب و دفع به دلیل اینکه امکان احیاء محلول به شکل پیوسته و ایجاد چرخه تقریبا پیوسته را بوجود می‌آورد بیشتر مورد علاقه می‌باشد. از متداول‌ترین حلال‌های این روش، سری آلکانول‌آمین‌ها، مخصوصا حلال‌های MEA ، $MDEA$ ، DEA ، AMP و DGA و... مورد استفاده قرار گرفته است [۱].

مدل‌سازی واحدهای تصفیه‌گاز با حلال‌های آلکانول‌آمین به دو روش عمده تعادلی و انتقال جرم انجام می‌گیرند، که هر کدام مزایا و معایب خاصی را به دنبال دارند. در صورتیکه بتوان در مدل‌سازی از روش غیرتعادلی استفاده کرد و پارامترهای مورد نیاز این روش را به دقت ارزیابی نمود، این روش دقیقترین جواب‌ها را بدست می‌دهد.

نظر به این که حلال‌های مورد استفاده در جذب CO_2 ، هر کدام مزایای ویژه خود را دارند، امروزه این فلسفه قوت گرفته است که مخلوط این حلال‌ها می‌تواند باعث فزونی مزایا و مرتفع نمودن کاستی‌های هر حلال گردد [۲۹]. لیکن با توجه به آن که روش‌های مدل‌سازی یادشده قابلیت توسعه