شبیه سازی جداسازی دی اکسید کربن با استفاده از غشای فیبری تو خالی توسط MDEA با کمک تکنیک دینامیک سیالات محاسباتی

حسین معینی^۱، مینا بیاتی^۲

۱- دانشجوی کارشناسی ارشد مهندسی شیمی، دانشگاه یاسوج h.moeini90@yahoo.com ۲- دانشجوی کارشناسی ارشد مهندسی شیمی، دانشگاه علم و صنعت bayati_mina@chemeng.iust.ac.ir

چکیدہ

اخیراً افزایش بی رویه مصرف انرژی و انتشار آلایندههای حاصل از احتراق سوختهای فسیلی، تبدیل به مشکلات زیست محیطی در جهان شده است. طبق آمارهای موجود، بیش از ۸۰ درصد این انتشار ناشی از سوخت های فسیلی می باشد، لذا جلوگیری از افزایش انتشار گازهای گلخانهای به ویژه گاز دی اکسید کربن، به دغدغه ای مهم در صنایع مبدل گردیده است. در سالهای اخیر استفاده از غشای فیبری توخالی پتانسیل بالایی برای جایگزینی روشهای متداول جداسازی دی اکسید کربن از جریانهای گازی نشان داده است. در این پژوهش، به بررسی جداسازی دی اکسید کربن با استفاده از غشای فیبری تو خالی توسط MDEA با کمک تکنیک دینامیک سیالات محاسباتی پرداخته شده و پارامترهای موثر در این فرایند مورد ارزیابی قرار گرفته است. کلمات کلیدی: دینامیک سیالات محاسباتی، تماس دهنده غشایی، جذب دی اکسید کربن، محاسبات عددی

۱– مقدمه

انتشار گاز دی اکسید کربن به عنوان یکی از گازهای گلخانه ای، نگرانی های جدی زیست محیطی را در جامعه جهانی سبب شده است. به خصوص در سال های اخیر جلسات متعددی جهت کنترل افزایش دمای زمین برگزار شده است. به عنوان نمونه، کشور چین به عنوان پرجمعیت ترین کشور جهان، نقش زیادی در انتشار این گاز داشته است. میزان انتشار دی اکسید کربن در سال ۲۰۰۲ در کشور چین، حدود ۳۳۲۲ میلیون تن در سال تخمین زده شد [۱]. بیش از ۸۰ درصد این انتشار ناشی از سوخت های فسیلی می باشد [۲]. از این رو محفوظ نگه داشتن دی اکسید کربن از گازهای خروجی از دود کش های صنعتی یکی از راه های موثر جهت ممانعت از انتشار محسوب می گردد. تکنیک های متعدی همچون جذب فیزیکی، جذب سطحی، جداسازی غشایی و تقطیر برودتی جهت جداسازی این گاز پیشنهاد شده است [۳]. جداسازی غشایی روشی است که هم به لحظ انرژی و هم راه اندازی به صرفه است و معایبی چون کانالیزه شدن، سیال شدگی و کف کردن را دارا نیست [۴]. با توجه به اهمیت این مسئله، آزمایش ها ها و مدلسازی های متعددی در این زمینه صورت گرفته است. این مدلسازی ها به منظور پیش بینی

کیم و یانگ [۵] از غشای پلیمری متخلخل برای جدا کردن دی اکسید کربن از یک مخلوط دوتایی استفاده کردند. کیو و کاسلر [۶] اولین محققانی بودند که غشاء میکرو متخلخل پلی پروپیلن و هیدروکسیدسدیم را به عنوان حلال جاذب برای جذب دی اکسید کربن از جریان گاز را مدل کردند. ژو و لو [۷]نیز مدلسازی جذب دی اکسید کربن را با کمک آلکانوآمین مورد بررسی قرار دادند. متیل دی اتانول آمین که با نام اختصاری MDEA شناخته می شود یکی از آمین های جدید است که در جداسازی دی اکسید کربن در صنایع کاربرد فراوان دارد. استفاده از آمینها بر پایه MDEA شناخته می شود یکی از آمین های جدید است که در جداسازی دی اکسید کربن در صنایع کاربرد فراوان دارد. استفاده از آمینها بر پایه MDEA به نسبت سایر مواد مانند DEA و MEA ضمن کاهش مصرف انرژی به دلیل خورندگی کمتر باعث افزایش طول عمر تجهیزات می شود و سازگاری بیشتری با محیط زیست دارد. فرمول شیمیایی این ماده 2(H4OH) CH3N(C2H4OH) می باشد. شکل ظاهری بی رنگ



شده، در این مطالعه جداسازی دیاکسیدکربن با استفاده از غشای فیبری تو خالی توسط MDEA با روش تکنیک دینامیک سیالات محاسباتی انجام پذیرفته است. هندسه ای از تماس دهنده غشایی فیبر توخالی در شکل۱ نشان داده شده است.

شکل ۱- شماتیک یک تماس دهنده غشایی فیبر توخالی

۲- معادلات حاکم

در این مطالعه، یک مدل جامع انتقال جرم دو بعدی، جهت حذف CO2 از مخلوط گازی از طریق غشاء با استفاده از جاذب MDEA (متیل دی اتانول آمین) توسعه داده شده است. برای حذف دی اکسید کربن از مخلوط گازی از یک تماس دهنده پلی پروپیلنی استفاده شده است. به طوری که دیاکسیدکربن در پوسته و سیال جاذب متیل دی اتانول آمین در لوله جریان دارند. جریان مخلوط گازی حاوی دیاکسیدکربن و نیتروژن، از بالا وارد ماژول تماس دهنده در سمت پوسته می شوند و جریان مایع جاذب، از پایین وارد ماژول تماس دهنده در سمت لوله می شود. برای پیش بینی انتقال دیاکسیدکربن از طریق تماس دهنده غشایی فیبر توخالی در فرآیندهای جذب، مدل انتقال، توسعه داده شده است. فرضیات مدل عبارتند از: شرایط حالت پایا و همدما، توسعه یافتگی کامل سرعت سیال مایع در فیبر توخالی، ایده آل بودن گاز، مفروض گرفته شدن قانون هنری برای فصل مشترک گاز-مایع و جریان آرام برای تماس دهنده گاز و مایع و در نهایت حالت غیر مرطوب برای مخلوط گازی فرض شده است.

۲-۱- معادلات سمت یوسته

معادله انتقال جرم برای تمام جزا به صورت زیر نوشته میشود[۹].

$$\nabla \cdot (-D_i C_i + C_i u) + \frac{\partial C_i}{\partial t} = R_i$$

(mol/m³.s) که در اینجا C_i غلظت (mol/m³.s) فریب نفوذ اجزا (m²/s). u بردار سرعت (m/s) و R_i ترم واکنش شیمیایی (mol/m³.s) میباشند. معادله انتقال جرم جز دی اکسید کربن برای قسمت پوسته برای حالت پایا به شکل زیر بیان شده است. در این معادله شار اجزا از قانون فیک پیروی می کند.

$$D_{CO_2-shell}\left[\frac{\partial^2 C_{CO_2-shell}}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial C_{CO_2-shell}}{\partial r} + \frac{\partial^2 C_{CO_2-shell}}{\partial z^2}\right] = V_{z-shell}\frac{\partial C_{CO_2-shell}}{\partial z} \tag{(Y)}$$

برای قسمت پوسته و جز دی اکسید کربن شرایط مرزی به صورت زیر اعمال شده است:

$$r = r_2 \quad C_{Co_2 - shell} = C_{Co_2 - membrane}, \ r = r_3 \quad \frac{\partial C_{Co_2 - shell}}{\partial r} = 0(symmetry) \tag{(7)}$$

$$z=0$$
 Convective flux, $z=L$ $C_{CO_2-shell}=C_0$ (٤)

برای توصیف توزیع سرعت برای فیبر توخالی از مدل جریان سطح آزاد هاپل استفاده شده است. این مدل برای پروفایل سرعت سمت پوسته به صورت رابطه زیر میشود[۱۰].

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

شعاعهای r_2 و r_3 به صورت شماتیک در شکل ۱ نشان داده شده است. به جای رابطه بالا می توان از معادله مومنتم نیز استفاده نمود. شرایط مرزی برای معادله مومنتم به صورت زیر اعمال میشود.

$$z = 0$$
 v_{z-tube}=v₀, $z = L$ p=p₀

و
$$r_3$$
 نيز به صورت زير تعريف مى گردد. (۷)
$$r_3 = \left(\frac{1}{1-\phi}\right)^{1/2} r_2$$

که در این رابطه ϕ جز حجمی فضای حالی است و از رابطه زیر محاسبه می شود؛ R شعاع تماس دهنده غشایی و n تعداد فیبرهای استوانه ای موجود در تماس دهنده میباشند.

(٨)

(6)

$$1 - \phi = \frac{nr_2^2}{R^2}$$

۲-۲- معادلات سمت غشا

در غشا فیبر توخالی گاز حاوی دی کسید کربن در جریان است. به دلیل حضور پدیده نفوذ، معادله انتقال اجزا به صورت زیر نوشته می شود.

$$D_{CO_2-membrane} \left[\frac{\partial^2 C_{CO_2-membrane}}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C_{CO_2-membrane}}{\partial r} + \frac{\partial^2 C_{CO_2-membrane}}{\partial z^2} \right] = 0 \qquad (9)$$

$$I(1) = 0 \qquad (9)$$

$$D_{CO_2-membrane} \left[(1) - (1) + \frac{1}{r} \frac{\partial C_{CO_2-membrane}}{\partial r} + \frac{\partial^2 C_{CO_2-membrane}}{\partial z^2} \right] = 0 \qquad (9)$$

$$D_{Co_2-membrane} = \frac{D_{Co_2-shell} \times \mathcal{E}}{\tau}$$
(1.)

$$r = r_1 \qquad C_{Co_2 - membrane} = \frac{C_{Co_2 - tube}}{m}, r = r_2 \qquad C_{Co_2 - shell} = C_{Co_2 - membrane}$$
(11)

۲–۳– معادلات سمت لوله

برای مدل سازی جز دیاکسیدکربن در قسمت مجرا (لوله) معادله انتقال اجزا به صورت زیر در نظر گرفته میشود .

$$D_{CO_2-tube}\left[\frac{\partial^2 C_{CO_2-tube}}{\partial r^2} + \frac{1}{r}\frac{\partial C_{CO_2-tube}}{\partial r} + \frac{\partial^2 C_{CO_2-tube}}{\partial z^2}\right] = V_{z-tube}\frac{\partial C_{CO_2-tube}}{\partial z}$$
(17)

شرایط مرزی اعمال شده در سمت لوله به صورت زیر میباشند.

$$r = 0 \quad \frac{\partial C_{i-tube}}{\partial r} = 0(symmetry), r = r_1 \quad C_{Co_2-tube} = C_{Co_2-membrane} \times m \tag{17}$$

$$z = 0$$
 $C_{Co_2-tube} = 0, z = L$ شار جا به جایی $C_{Co_2-tube} = 0, z = L$ (14)

در داخل لوله جریان انتقالی در جهت شعاع نادیده گرفته شده است زیرا حلال جاذب در جهت محوری (جهت z) حرکت میکند. همین طور توزیع سرعت در داخل مجرا (لوله) به صورت جریان آرام نیوتنی فرض شده است[۱۲].

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

که r_1 شعاع لوله و u سرعت متوسط سیال جاذب (m/s) میباشند. بازده حذف دی کسید کربن فیبر از رابطه زیر محاسبه می شود که وابسته به r_1 غلظت ورودی (mol/m³) و $C_{l,o}$ غلظت خروجی حلال جاذب (mol/m³) میباشند.

$$\eta(\%) = \left(1 - \frac{C_{l,o}}{C_{l,i}}\right) \tag{17}$$

در این تحقیق حذف دی اکسید کربن در تماس دهنده فیبری غشایی شبیه سازی شده است. ساختار مواد غشاء از جنس پلی پروپیلن (PP) می باشد. ویژگی های ماژول تماس دهنده فیبر تو خالی نیز در جدول ۱ آورده شده است. طول غشاء شبیه سازی شده است. ح و تعداد فیبرهای آن 50 عدد می باشند. همچنین غلظت دی اکسید کربن در فاز مایع برای همه موارد صفر در نظر گرفته شده است. حل عددی به کمک نرم افزار کامسول انجام گرفته است. دقت شبیه سازی عددی تابع تعداد سلول های موجود در شبکه می باشد. به طوری که با افزایش تعداد سلول ها دقت محاسبات عددی افزایش می یابد. برای عدم وابستگی نتایج به شبکه بندی تماس دهنده غشایی فیبر توخالی (HFMC) ، تعداد ۲۵۹۶ سلول ها دقت محاسبات عددی افزایش می یابد. برای عدم وابستگی تا یو می موجود در شبکه می باشد. به طوری که با افزایش تعداد ملول ها دقت محاسبات عددی افزایش می یابد. برای عدم وابستگی نتایج به شبکه بندی تماس دهنده غشایی فیبر توخالی (HFMC) ، تعداد



۱۶

جدول ۱- ویژگی های ماژول ازمایشگاهی [۱۴]				
اندازه	ویژگیها			
•/•71	قطر ماژول (متر)			
/۹	قطر خارجی فیبر (میلی متر)			
٢	قطر داخلی فیبر (میلی متر)			
•/74	طول موثر فيبر(متر)			
۵۰	تعداد فيبر ها			

[11]	زمایشگاهی	ای ماژول اُ	َ – ویژگی ه	جدول ۱
------	-----------	-------------	-------------	--------

۳- پروفایل سرعت

پروفایل توزیع سرعت حلال جاذب متیل دی اتانول آمین در سمت لوله پلی پروپیلنی با سرعت ورودی ۰/۰۵ متر بر ثانیه در شکل۳ نشان داده شده است. پروفایل سرعت به طور کامل، توسعه یافته میباشد.



۳–۱– پروفایل توزیع سرعت

پروفایل سرعت سهموی، سرعت ماکزیم در مرکز لوله دو برابر سرعت متوسط ورودی میباشد. پروفایل سرعت سیال جاذب با سرعت های ورودی مایع مختلف در شکل ۴ نشان داده شده است.



۴-پروفايل توزيع غلظت

پروفایل توزیع غلظت دیاکسیدکربن در سمت لوله، غشاء و پوسته تماس دهنده غشایی فیبر توخالی در شکل۵ نشان داده شده است. بیشترین غلظت دیاکسیدکربن در سمت پوسته و غلظت دی اکسید کربن در فاز مایع ورودی صفر میباشد و در

طول لوله، سیال جاذبMDEA ، دی اکسید کربن را جذب می کند. دی اکسید کربن موجود در مخلوط گازی داخل پوسته، با توجه به تفاوت غلظت بین پوسته وغشاء، به سطح غشاء منتقل میشود. انتقال جرم دی اکسید کربن در داخل پوسته و لوله توسط انتشار و جابجایی منتقل می گردد. چون جریان در جهت z می باشد، پدیده غالب انتقال جرم در پوسته و لوله جابجایی و در داخل غشا نفوذ است. دی اکسیدکرین از سمت غشا به سمت لوله در حرکت می باشد. همانطور که در شکل دیده می شود افزایش سرعت مایع جاذب ورودی، میزان جذب دی اکسید کربن در طول غشا را بالا می برد. این تغییرات غلظت از الف تا ج در شکل ۵ قابل مشاهده است.



شکل ۵– پروفایل سرعت مایع ۰/۰۰۵ متر بر ثانیه (الف) و سرعت مایع ۰/۰۱ متر بر ثانیه (ب) ۰/۰۵ ۰ متر بر ثانیه (ج) سرعت گاز در هر سه حالت ۰/۰۱ بر ثانیه

۵- نتیجه گیری

چنانکه گفته شد استفاده از تماس دهندههای غشایی فیبر توخالی در صنعت در مقابل با روشهای سنتی افزایش چشمگیری داشته است. بنابراین توجه خاصی به شبیه سازی عددی این تماس دهندههای غشایی در صنایع میشود. در این مطالعه، یک مدل جامع دو بعدی برای حذف دی اکسید کربن از مخلوط گازی از طریق غشاء با استفاده از جاذب MDEA توسعه داده شد. مجموعه معادلات دیفرانسیل پیوستگی، مومنتم و جرم به روش اجزا محدود مورد بررسی قرار گرفت. پروفایل سرعت سهموی و سرعت ماکزیم نیز در مرکز لوله دو برابر سرعت متوسط ورودی به دست آمد. نتایج این شبیه سازی نشان داد افزایش سرعت مایع جاذب ورودی، میزان جذب دی اکسید کربن در طول غشا را بالا میبرد و هم چنین پروفایل سرعت به طور کامل، توسعه یافته می باشد.

مراجع

1. P. Freund, "Making deep reductions in CO2 emissions from coal-fired power plant using capture and storage of CO2," Proc. Inst. Mech. Eng. Part A J. Power Energy, vol. 217, no. 1, pp. 1–7, Feb. 2003.

2. R. J. A. Marland, G., T.A. Boden, "Global, Regional, and National Fossil-Fuel CO2 Emissions," In Trends: A Compendium of Data on Global Change. Carbon Dioxide Information Analysis Center, Oak Ridge National Laboratory U.S. Department of Energy, Oak Ridge, Tenn., U.S.A. http://cdiac.ornl.gov/trends/emis/tre_ira.html, 2008.

3. Agrawal, R., "Simplified Method for the Synthesis of Gas Separation Membrane Cascades With Limited Numbers of Compressors," Chem. Eng. Sci. 52(6), 1029–1044, 1997.

4. Boucif, N., A. Sengupta and K. K. Sirkar, "Hollow Fiber Gas Permeator With Countercurrent or Cocurrent Flow: Series Solutions," Ind. Eng. Chem. Fundamentals 25(2), 217–228, 1986.

5. Y.-S. Kim, S.-M. Yang, Absorption of carbon dioxide through hollow fiber membranes using various aqueous absorbents, Sep. Purif. Technol. 21, 101–109, 2000.

6. Basaran, O. A. and S. R. Auvil, "Asymptotic Analysis of Gas Separation by a Membrane Module," AICHE J. 34(10), 1726–1731, 1988.

7. E. L. Qi, Z., Cussler, "Microporous hollow fibers for gas absorption. I. Mass transfer in the liquid," J. Memb. Sci., vol. 23, no. 321–332, 1985.

8. G.Y. Zhu, B.L. Luo, L.L. Xin, Gas-liquid mass transfer of reactionmembrane separation coupled process, Eng. Chem. Metall. 20 (2), 118–124, 1999.

9. T. Liu, J.F. Shi, J.N. Xu, X.Z. Wu, Solvent vapor absorption with hydrophobic microporous hollow-fiber membrane modules, Eng. Chem. Metall. 20 (1), 11–16, 1999.

10. R. B. Bird, W. E. Stewart, and E. N. Lightfoot, Transport Phenomena. Wiley, 2007.

11. J. Happel, "Viscous flow relative to arrays of cylinders," AIChE J., vol. 5, no. 2, pp. 174–177, 1959.

12. 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," Sep. Purif. Technol., vol. 63, no. 1, pp. 145–155, 2008.

13. G. F. Versteeg and W. Van Swaalj, "Solubility and diffusivity of acid gases (carbon dioxide, nitrous oxide) in aqueous alkanolamine solutions," J. Chem. Eng. Data, vol. 33, no. 1, pp. 29–34, 1988.

14. A. Mansourizadeh, "Experimental study of CO2 absorption/stripping via PVDF hollow fiber membrane contactor," Chem. Eng. Res. Des., vol. 90, no. 4, pp. 555–562, 2012.

15. S. J. Zhien Zhang, Yunfei Yan, Li Zhang, "Numerical Simulation and Analysis of CO2 Removal in a Polypropylene Hollow Fiber Membrane Contactor," Int. J. Chem. Eng., vol. 2014, p. 7, 2014.

Simulation of CO2 separating by hollow fiber membrane with MDEA with computational Fluid Dynamics

Hussein moeini¹, Mina bayati²

MSc student, Yasouj University, h.moeini90@yahoo.com
 MSc student, Iran University of Science and Technology, bayati_mina@chemeng.iust.ac.ir

Abstract

Recently, increasing energy consumption and pollutants resulting from the burning of fossil fuels have caused environmental problems. According to available statistics, more than 80 percent of the pollutants diffusions are from fossil fuels. So stopping the diffusion of Greenhouse Gases specially CO2 has become an important concern in the industry. In recent years, using of Hollow fiber membranes has shown a great potential for substituting the common methods of co2 separations from gas streams.

In this article, CO2 separating by hollow fiber membrane with MDEA with Computational Fluid Dynamics is discussed; and effective parameters in this process are recognized.

Key words: Computational Fluid Dynamics, Membrane contactor, Co2 adsorption, Numeric calculating.