

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

حسین معینی<sup>۱</sup>، مینا بیاتی<sup>۲</sup>

۱- دانشجوی کارشناسی ارشد مهندسی شیمی، دانشگاه یاسوج [h.moeini90@yahoo.com](mailto:h.moeini90@yahoo.com)

۲- دانشجوی کارشناسی ارشد مهندسی شیمی، دانشگاه علم و صنعت [bayati\\_mina@chemeng.iust.ac.ir](mailto:bayati_mina@chemeng.iust.ac.ir)

### چکیده

اخیراً افزایش بی‌رویه 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 سوخت‌های فسیلی می‌باشد، لذا جلوگیری از افزایش انتشار گازهای گلخانه‌ای به ویژه گاز دی‌اکسیدکربن، به دغدغه‌ای مهم در صنایع مبدل گردیده است. در سال‌های اخیر استفاده از غشای فیبری توخالی پتانسیل بالایی برای جایگزینی روش‌های متداول جداسازی دی‌اکسیدکربن از جریان‌های گازی نشان داده است. در این پژوهش، به بررسی جداسازی دی‌اکسید 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.

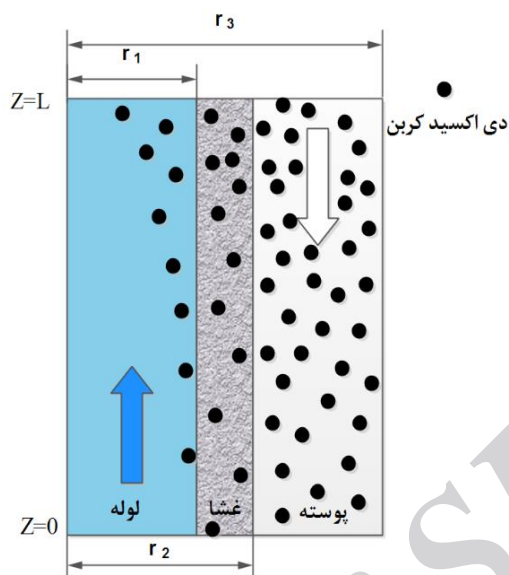
**کلمات کلیدی:** دینامیک سیالات محاسباتی، تماس دهنده غشایی، جذب دی اکسید کربن، محاسبات عددی

### ۱- مقدمه

انتشار گاز دی‌اکسیدکربن به عنوان یکی از گازهای گلخانه‌ای، نگرانی‌های جدی زیست محیطی را در جامعه جهانی سبب شده است. به خصوص در سال‌های اخیر جلسات متعددی جهت کنترل افزایش دمای زمین برگزار شده است. به عنوان نمونه، کشور چین به عنوان پرجمعیت‌ترین کشور جهان، نقش زیادی در انتشار این گاز داشته است. میزان انتشار دی‌اکسیدکربن در سال ۲۰۰۲ در کشور چین، حدود ۳۳۲۲ میلیون تن در سال تخمین زده شد [۱]. بیش از ۸۰ درصد این انتشار ناشی از سوخت‌های فسیلی می‌باشد [۲]. از این رو محفوظ نگه داشتن دی‌اکسیدکربن از گازهای خروجی از دودکش‌های صنعتی یکی از راه‌های موثر جهت ممانعت از انتشار محسوب می‌گردد. تکنیک‌های متعددی 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 لحاظ انرژی و هم راه‌اندازی به صرفه است و معایبی چون کانالیزه شدن، سیال شدگی و کف کردن را دارا نیست [۴]. با توجه به اهمیت این مسئله، آزمایش‌ها و مدلسازی‌های متعددی در این زمینه صورت گرفته است. این مدلسازی‌ها به منظور پیش‌بینی عملکرد فرایند و بررسی پارامترهای موثر انجام شده است.

کیم و یانگ [۵] از غشای پلیمری متخلخل برای جدا کردن دی‌اکسیدکربن 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 دی‌اکسیدکربن از جریان گاز را مدل کردند. ژو و لو [۷] نیز مدلسازی جذب دی‌اکسیدکربن را با کمک آلکانوآمین مورد بررسی قرار دادند. متیل دی اتانول آمین که با نام اختصاری MDEA شناخته می‌شود یکی از آمین‌های جدید است که در جداسازی دی‌اکسیدکربن 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 خوردندگی کمتر باعث افزایش طول عمر تجهیزات می‌شود و سازگاری بیشتری با محیط زیست دارد. فرمول شیمیایی این ماده  $CH_3N(C_2H_4OH)_2$  می‌باشد. شکل ظاهری بی‌رنگ است. این ماده به لحاظ شیمیایی پایدار است و بدون اینکه تجزیه شود می‌تواند تا نقطه جوش گرم شود [۸]. از این رو با توجه به نکات ذکر

شده، در این مطالعه جداسازی دی‌اکسیدکربن با استفاده از غشای فیبری تو خالی توسط MDEA با روش تکنیک دینامیک سیالات محاسباتی انجام پذیرفته است. هندسه‌ای از تماس دهنده غشایی فیبر تو خالی در شکل ۱ نشان داده شده است.



شکل ۱- شماتیک یک تماس دهنده غشایی فیبر تو خالی

## ۲- معادلات حاکم

در این مطالعه، یک مدل جامع انتقال جرم دو بعدی، جهت حذف CO<sub>2</sub> 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 تو خالی در فرآیندهای جذب، مدل انتقال، توسعه داده شده است. فرضیات مدل عبارتند از: شرایط حالت پایا و همدم، توسعه یافتگی کامل سرعت سیال مایع در فیبر تو خالی، 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 پوسته

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

$$\nabla \cdot (-D_i C_i + C_i u) + \frac{\partial C_i}{\partial t} = R_i \quad (1)$$

که در اینجا  $C_i$  غلظت ( $\text{mol}/\text{m}^3$ )،  $D_i$  ضریب نفوذ اجزا ( $\text{m}^2/\text{s}$ )،  $u$  بردار سرعت ( $\text{m}/\text{s}$ ) و  $R_i$  ترم واکنش شیمیایی ( $\text{mol}/\text{m}^3 \cdot \text{s}$ ) می‌باشند. معادله انتقال جرم جز دی‌اکسیدکربن برای قسمت پوسته برای حالت پایا به شکل زیر بیان شده است. در این معادله شار اجزا از قانون فیک پیروی می‌کند.

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

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

$$r = r_2 \quad C_{CO_2-shell} = C_{CO_2-membrane}, \quad r = r_3 \quad \frac{\partial C_{CO_2-shell}}{\partial r} = 0 (\text{symmetry}) \quad (3)$$

$$z = 0 \quad \text{Convective flux}, \quad z = L \quad C_{CO_2-shell} = C_0 \quad (4)$$

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].

$$V_{z-shell} = 2u \left[ 1 - \left( \frac{r_2}{r_3} \right)^2 \right] \times \frac{(r/r_3)^2 - (r_2/r_3)^2 + 2 \ln(r_2/r)}{3 + (r_2/r_3)^4 - 4(r_2/r_3)^2 + 4 \ln(r_2/r_3)} \quad (5)$$

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

$$z = 0 \quad v_{z-tube} = v_0, \quad z = L \quad p = p_0 \quad (6)$$

و  $r_3$  نیز به صورت زیر تعریف می‌گردد.

$$r_3 = \left( \frac{1}{1-\phi} \right)^{1/2} r_2 \quad (7)$$

که در این رابطه  $\phi$  جز حجمی فضای خالی است و از رابطه زیر محاسبه می‌شود؛  $R$  شعاع تماس دهنده غشایی و  $n$  تعداد فیبرهای استوانه ای موجود در تماس دهنده می‌باشند.

(۸)

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

## ۲-۲- معادلات سمت غشا

در غشا فیبر توخالی گاز حاوی دی‌اکسیدکربن در جریان است. به دلیل حضور پدیده نفوذ، معادله انتقال اجزا به صورت زیر نوشته می‌شود.

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

ضریب نفوذ دی‌اکسیدکربن در غشا نیز از رابطه زیر محاسبه می‌شود که به تخلخل و ترویستی وابسته است [۱۱].

$$D_{CO_2-membrane} = \frac{D_{CO_2-shell} \times \varepsilon}{\tau} \quad (10)$$

شرایط مرزی اعمال شده در غشا به صورت زیر می‌باشند.

$$r = r_1 \quad C_{CO_2-membrane} = \frac{C_{CO_2-tube}}{m}, \quad r = r_2 \quad C_{CO_2-shell} = C_{CO_2-membrane} \quad (11)$$

## ۳-۲- معادلات سمت لوله

برای مدل سازی جز دی اکسید کربن در قسمت مجرا (لوله) معادله انتقال اجزا به صورت زیر در نظر گرفته می شود .

$$D_{CO_2-tube} \left[ \frac{\partial^2 C_{CO_2-tube}}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C_{CO_2-tube}}{\partial r} + \frac{\partial^2 C_{CO_2-tube}}{\partial z^2} \right] = V_{z-tube} \frac{\partial C_{CO_2-tube}}{\partial z} \quad (12)$$

شرایط مرزی اعمال شده در سمت لوله به صورت زیر می باشد.

$$r = 0 \quad \frac{\partial C_{i-tube}}{\partial r} = 0 (\text{symmetry}), r = r_1 \quad C_{CO_2-tube} = C_{CO_2-membrane} \times m \quad (13)$$

$$z = 0 \quad C_{CO_2-tube} = 0, z = L \quad \text{شار جا به جایی} \quad (14)$$

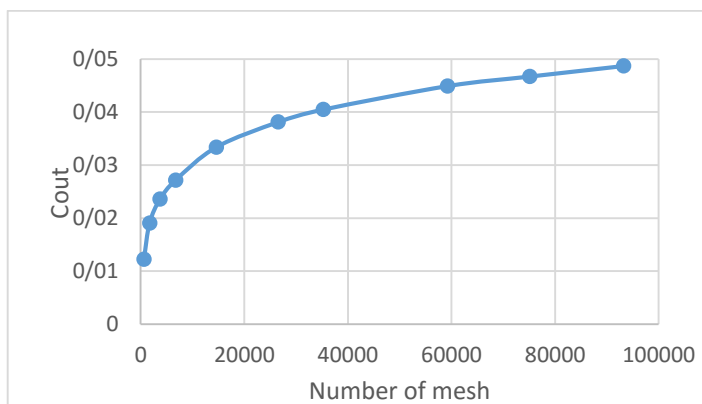
در داخل لوله جریان انتقالی در جهت شعاع نادیده گرفته شده است زیرا حلال جاذب در جهت محوری (جهت z) حرکت می کند. همین طور توزیع سرعت در داخل مجرا (لوله) به صورت جریان آرام نیوتنی فرض شده است [۱۲].

$$V_{z-tube} = 2u \left[ 1 - \left( \frac{r}{r_1} \right)^2 \right] \quad (15)$$

که شعاع لوله و  $u$  سرعت متوسط سیال جاذب (m/s) می باشد. بازده حذف دی اکسید کربن فیبر از رابطه زیر محاسبه می شود که وابسته به  $C_{l,i}$  غلظت ورودی ( $\text{mol/m}^3$ ) و  $C_{l,o}$  غلظت خروجی حلال جاذب ( $\text{mol/m}^3$ ) می باشد.

$$\eta(\%) = \left( 1 - \frac{C_{l,o}}{C_{l,i}} \right) \quad (16)$$

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  $L = 0.24\text{m}$  و تعداد فیبرهای آن 50 عدد می باشد. 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 تو خالی (HFMC)، تعداد ۹۳۲۵۶ سلول انتخاب شده است. نحوه استقلال از مش در شکل ۲ نشان داده شده است.



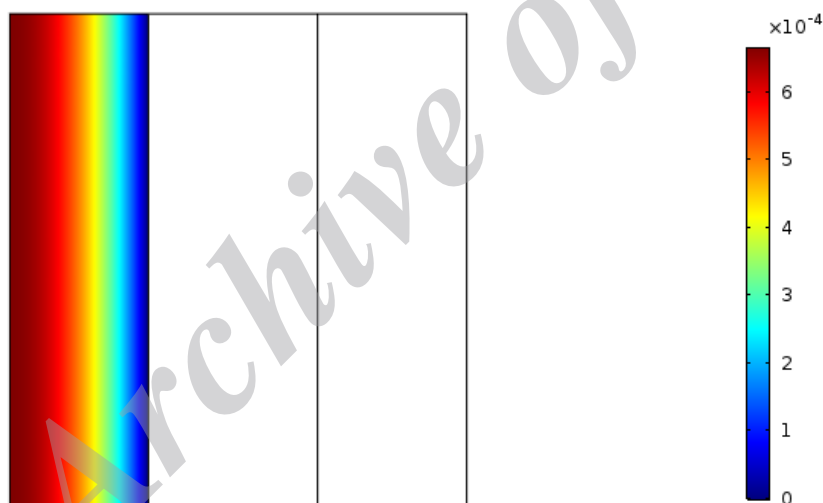
شکل ۲- استقلال از مش

جدول ۱- ویژگی های مازول آزمایشگاهی [۱۳]

ویژگی ها	اندازه
قطر مازول (متر)	۰/۰۲۱
قطر خارجی فیبر (میلی متر)	۹/
قطر داخلی فیبر (میلی متر)	۲
طول موثر فیبر (متر)	۰/۲۴
تعداد فیبر ها	۵۰

### ۳- پروفایل سرعت

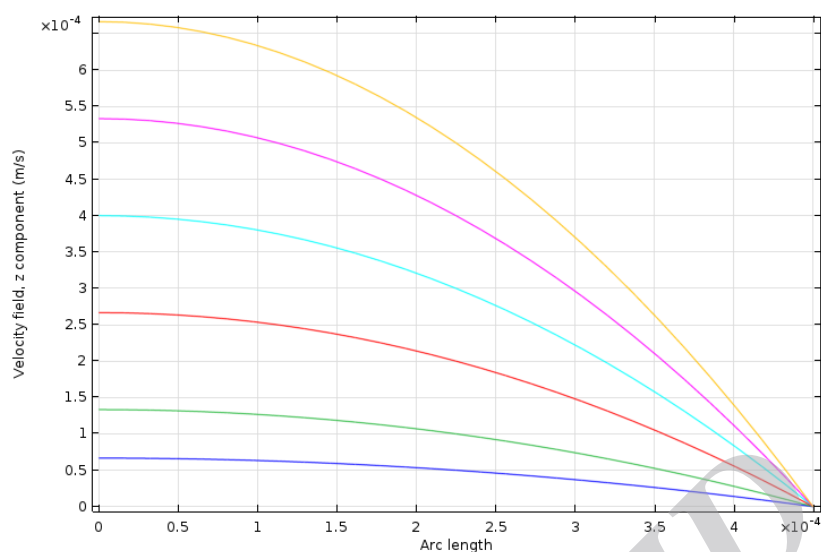
پروفایل توزیع سرعت حلال جاذب متیل دی اتانول آمین در سمت لوله پلی پروپیلنی با سرعت ورودی ۰/۰۵ متر بر ثانیه در شکل ۳ نشان داده شده است. پروفایل سرعت به طور کامل، توسعه یافته می باشد.



شکل ۳- پروفایل توزیع سرعت سیال جاذب در سمت لوله

### ۳-۱- پروفایل توزیع سرعت

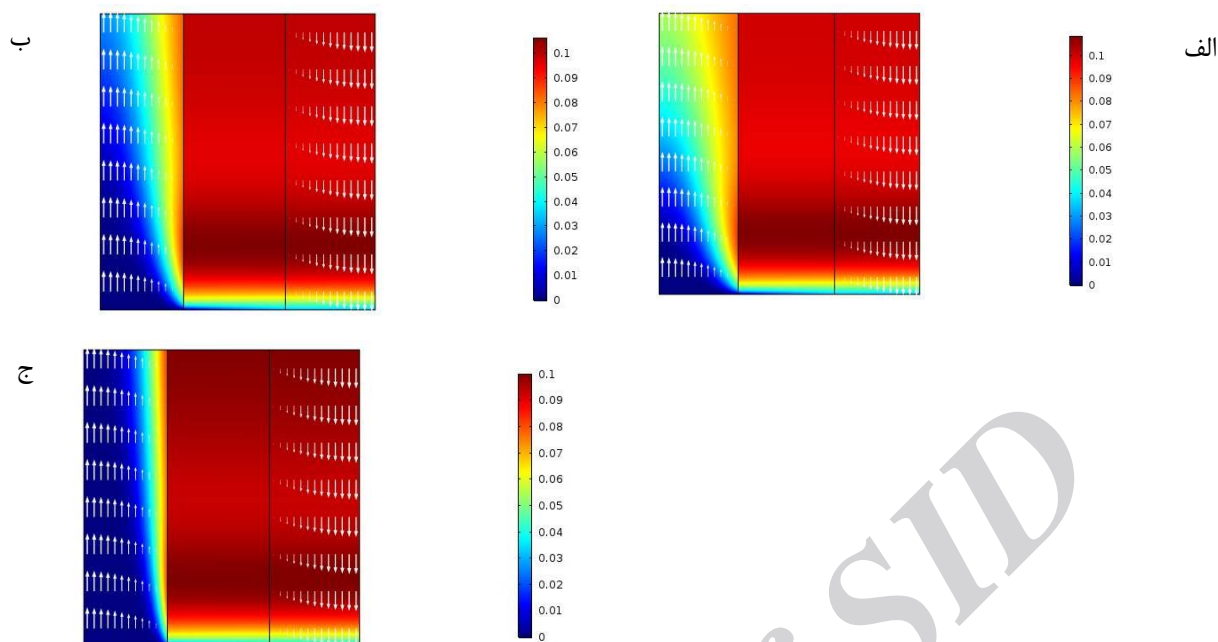
پروفایل سرعت سهموی، سرعت ماکزیمم در مرکز لوله دو برابر سرعت متوسط ورودی می باشد. پروفایل سرعت سیال جاذب با سرعت های ورودی مایع مختلف در شکل ۴ نشان داده شده است.



شکل ۴- پروفایل توزیع سرعت سیال جاذب با سرعت ورودی مختلف

#### ۴- پروفایل توزیع غلظت

پروفایل توزیع غلظت دی‌اکسیدکربن در سمت لوله، غشاء و پوسته تماس دهنده غشایی فیبر توخالی در شکل ۵ نشان داده شده است. بیشترین غلظت دی‌اکسیدکربن در سمت پوسته و غلظت دی‌اکسید کربن در فاز مایع ورودی صفر می‌باشد و در طول لوله، سیال جاذب MDEA، دی‌اکسید کربن را جذب می‌کند. دی‌اکسید کربن موجود در مخلوط گازی داخل پوسته، با توجه به تفاوت غلظت بین پوسته و غشاء، به سطح غشاء منتقل می‌شود. انتقال جرم دی‌اکسید کربن در داخل پوسته و لوله توسط انتشار و جابجایی منتقل می‌گردد. چون جریان در جهت Z می‌باشد، پدیده غالب انتقال جرم در پوسته و لوله جابجایی و در داخل غشا نفوذ است. دی‌اکسیدکربن از سمت غشا به سمت لوله در حرکت می‌باشد. همانطور که در شکل دیده می‌شود افزایش سرعت مایع جاذب ورودی، میزان جذب دی‌اکسید کربن در طول غشا را بالا می‌برد. 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) و ۰/۰۵ 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 ماکزیمم نیز در مرکز لوله دو برابر سرعت متوسط ورودی به دست آمد. نتایج این شبیه‌سازی 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 می‌باشد.

## مراجع

1. P. Freund, "Making deep reductions in CO<sub>2</sub> emissions from coal-fired power plant using capture and storage of CO<sub>2</sub>," 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 CO<sub>2</sub> 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](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 Swaaij, "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 CO<sub>2</sub> 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 CO<sub>2</sub> Removal in a Polypropylene Hollow Fiber Membrane Contactor," *Int. J. Chem. Eng.*, vol. 2014, p. 7, 2014.

Archive of SID



## Simulation of CO<sub>2</sub> separating by hollow fiber membrane with MDEA with computational Fluid Dynamics

Hussein moeini<sup>1</sup>, Mina bayati<sup>2</sup>

1. MSc student, Yasouj University, h.moeini90@yahoo.com

2. 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 CO<sub>2</sub> 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 co<sub>2</sub> separations from gas streams.

In this article, CO<sub>2</sub> 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, Co<sub>2</sub> adsorption, Numeric calculating.