

شبیه‌سازی CFD حذف دی‌اکسید کربن از مخلوط گازی توسط تماس دهنده غشایی فیبر توخالی پلی‌وینیلیدین فلوراید

اصغر لشنی زادگان، محمدمهدی سبزه میدانی* و حسین معینی

گروه مهندسی شیمی، دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه یاسوج، ایران

تاریخ دریافت: ۹۴/۸/۱ تاریخ پذیرش: ۹۵/۳/۲۹

چکیده

در این پژوهش با استفاده از تکنیک دینامیک سیالات محاسباتی، مدل دو بعدی حذف دی‌اکسید کربن (CO_2) با یک تماس دهنده غشایی فیبر توخالی از جنس پلی‌وینیلیدین فلوراید مورد بررسی قرار گرفت. در این مدل انتشار محوری و شعاعی لحاظ شده است. همین‌طور جریان همرفت در پوسته و لوله در نظر گرفته شده است. معادلات پیوستگی، مومنتوم و جرم به روش المان محدود حل شده است. نتایج این مدل تطابق خوبی را با داده‌های آزمایشگاهی حذف دی‌اکسید کربن از مخلوط گاز توسط آب را دارد. در سرعت 5 m/s مایع جاذب درصد حذف دی‌اکسید کربن در دمای ثابت 10°C و 40°C به ترتیب $55/36\%$ و $46/25\%$ می‌باشد. در سرعت $0/02 \text{ m/s}$ مخلوط گازی و سرعت 5 m/s مایع جاذب درصد حذف دی‌اکسید کربن در جریان ناهمسو و همسو به ترتیب $51/43\%$ و $23/34\%$ می‌باشد. با افزایش سرعت مایع راندمان حذف افزایش می‌یابد. با افزایش سرعت مخلوط گاز راندمان حذف کاهش می‌یابد. همچنین نشان داده شد که این روش قادر به پیش‌بینی عملکرد تماس دهنده غشایی فیبر توخالی برای جذب دی‌اکسید کربن از مخلوط‌های گازی است.

کلمات کلیدی: دینامیک سیالات محاسباتی، شبیه‌سازی CFD، تماس دهنده غشایی، جذب دی‌اکسید کربن، لی‌وینیلیدین فلوراید

مقدمه

و نقل در سالیان اخیر می‌باشد [۱]. تولید برق از نیروگاه‌های سوخت فسیلی یکی از اصلی‌ترین دلایل انتشار دی‌اکسید کربن می‌باشد [۲]. با این حال، سوخت‌های فسیلی نقشی حیاتی را در تامین انرژی ایفا می‌کنند. اما نیروگاه‌ها و مراکز صنعتی می‌توانند با بهره‌گیری از استراتژی‌های موثر مثل حبس و ذخیره‌سازی کربن دی‌اکسید^۱ از رشد بی‌رویه دی‌اکسید کربن ممانعت کنند.

دی‌اکسید کربن یکی از مهم‌ترین گازهای گلخانه‌ای به‌شمار می‌آید. تولید این گاز تأثیرات مخربی بر روی تغییرات آب و هوایی گذاشته است. غلظت دی‌اکسید کربن پس از عصر صنعتی شدن تاکنون رشد فزاینده‌ای داشته است. این افزایش، نشان‌دهنده رشد سریع صنعت و حمل

۱. (CCS) Carbon Capture and Storage

*مسئول مکاتبات
آدرس الکترونیکی: m.sabzehmeidani@stu.yu.ac.ir

مورد اعتماد جهت پیشرفت صنایع، جایگزینی برای سایر روش‌های معمول جداسازی از جمله تبخیر و تقطیر گردیده است. امکان بهره‌گیری از غشاهای به هم پیوسته در واحدهای عملیاتی پتروشیمی و سایر فرآیندهای صنعتی که در آن جداسازی و انتقال مولکولی صورت می‌پذیرد. در تماس‌دهنده‌های غشایی، غشاهای متخلخل جهت انتقال جرم، درون فازها به کار گرفته می‌شوند. با اینکه جداسازی بر مبنای تعادلات فازی عمل می‌کنند. در جداسازی، غشاها از گزینش ممانعت نمی‌کنند [۷]. کارایی تماس‌دهنده‌های غشایی به غشاهایی که در آن‌ها استفاده می‌شود، وابسته است. به‌طور کلی سعی می‌شود از غشاهایی با خاصیت آگریزی بالا جهت ممانعت از خیس شدگی و مخلوط شدن هنگام تماس بین فازها استفاده گردد. تخلخل بالا در عین حال که سبب شار انتقال جرم بالا می‌شود، سبب بهم آمیختگی حباب‌ها^۱ در عملیات گاز-مایع نیز می‌گردد. با وجود مقاومت کم (به دلیل ضخامت اندک)، کاهش فشار انتقالی^۲ و اتلاف گرما از طریق هدایت در تقطیر غشایی، تکنولوژی تماس‌دهنده‌های غشایی کاربردهای گسترده‌تری دارد. اما حضور یک مقاومت انتقال جرم اضافی (غشا نسبت به خود)، محدود بودن بازه فشار عملیاتی و بالا رفتن هزینه‌ها در صورت استفاده از غشاهایی از جنس پلیمر از معایب این روش به‌شمار می‌رود. با این حال اخیراً از ترکیبات معدنی یا هیبریدی در غشاء برای این تکنولوژی استفاده شده و سبب بهبود عملکرد و کاهش هزینه‌ها شده است [۹ و ۱۰] کیو و کاسلر [۱۰] اولین محققانی بودند که غشاء میکرو متخلخل پلی پروپیلن و هیدروکسید سدیم را به‌عنوان حلال جاذب برای جذب دی‌اکسیدکربن از جریان گاز را توسعه دادند.

CCS روندی متشکل از جداسازی دی‌اکسیدکربن و ذخیره‌سازی آن به مدتی طولانی است. این فرآیند شامل سه مرحله اصلی جداسازی، انتقال و ذخیره‌سازی می‌باشد [۳]. مرحله جداسازی دی‌اکسیدکربن نقش تعیین‌کننده‌ای در مشخص کردن هزینه‌های این فرآیندها دارد. این مرحله حدود ۷۵-۸۰٪ از کل هزینه‌ها را شامل می‌شود. شماری از تکنولوژی‌های جداسازی را می‌توان جهت این امر به کار گرفت، که شامل جذب سطحی، جذب شیمیایی، جداسازی پرودتی، تکنولوژی غشایی و جذب فیزیکی می‌باشد [۴]. در جذب غشایی که غشاء جهت جذب گاز استفاده می‌شود، فیبر غشایی نقش تماس‌دهنده^۱ جریان گاز و مایع را ایفا می‌کند. همین‌طور غشاء نقشی اضافی را نیز در گزینش‌پذیری می‌تواند داشته باشد. این روش مزیت بسیاری در مقایسه با سایر روش‌ها دارد. این روش مستعد سیال‌شدگی، کانالیزه شدن، کف کردن و غیره نیست. اما فشارها در سمت گاز و مایع جهت انتقال دی‌اکسیدکربن مساوی می‌باشد [۵]. در روش جداسازی بر پایه غشاء انتخاب‌پذیری تنها به خود غشاء وابسته است. غشاها معمولاً از یک لایه بسیار نازک انتخابگر و یک لایه محافظ ضخیم با تراوایی بالا تشکیل می‌شوند. جداسازی در فرآیندهای غشایی نتیجه تفاوت در سرعت انتقال اجزاء شیمیایی درون غشا می‌باشد که این اختلاف سرعت انتقال ناشی از اختلاف در نیروی محرکه آن‌ها است. به‌طور کلی اختلاف پتانسیل شیمیایی سبب ایجاد نیروی محرکه شده و اجزاء را از یک سمت غشا به طرف دیگر جابه‌جا می‌کند. این اختلاف پتانسیل می‌تواند از طریق اختلاف فشار هیدرواستاتیکی، غلظت، دما و یا پتانسیل الکتریکی ایجاد گردد. نرخ تراوایی نیز به اختلاف اندازه مولکول‌ها و یا ضریب نفوذ اجزاء بستگی دارد [۶]. فرآیندهای غشایی به دلیل گزینش‌پذیری، عملکرد مطلوب در انتقال یک جز خاص، بهبود عملکرد فرآیندهای مشابه و در نهایت فراهم کردن گزینه

1. Hollow Fiber Membrane Contactor (HFMC)
2. Bubble Coalescence
3. Breakthrough Pressure

با استفاده از نرم‌افزار شبیه‌سازی اسپن‌هایسیس مورد بررسی قرار داده‌اند. از این مدل در بهینه‌سازی و روند اقتصادی و بررسی حساسیت پارامترهای فرآیند استفاده می‌شود. هدف از این پژوهش، توسعه یک مدل ریاضی دو بعدی برای روند جدایی دی‌اکسیدکربن، با استفاده از یک حلال آب در یک تماس‌دهنده غشایی فیبر توخالی با استفاده از تکنیک‌های دینامیک سیالات محاسباتی می‌باشد. به منظور اعتبار مدل ریاضی، پیش‌بینی‌های مدل با داده‌های تجربی مربوطه اعتبار سنجی شده است. در نهایت، تاثیر پارامترهای مختلف در بهره‌وری و حذف گاز دی‌اکسیدکربن از مخلوط گازی مورد بررسی قرار گرفته است. شماتیکی از تماس‌دهنده غشایی فیبر توخالی در شکل ۱ (الف) تا (ج) نشان داده شده است.

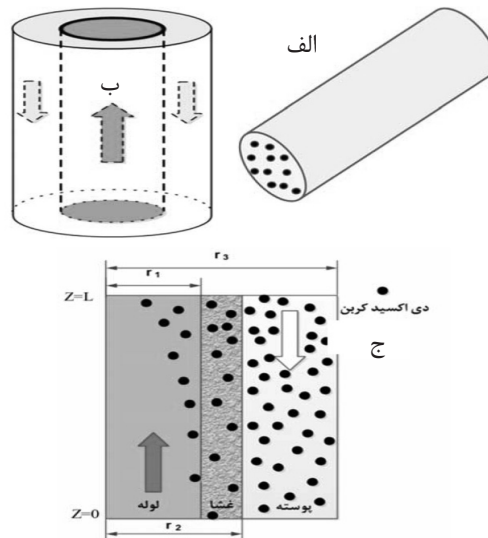
معادلات حاکم

در این مطالعه، یک مدل جامع انتقال جرم دو بعدی متقارن^۱ جهت حذف دی‌اکسیدکربن از مخلوط گازی از طریق غشاء با استفاده از جاذب آب توسعه داده شده است. برای حذف دی‌اکسیدکربن از مخلوط گازی از یک تماس‌دهنده پلی پروپیلنی استفاده شده است. به طوری که دی‌اکسیدکربن در پوسته و سیال جاذب (آب مقطر) در لوله جریان دارند. جریان مخلوط گازی حاوی دی‌اکسیدکربن و نیتروژن، از بالا وارد ماژول تماس‌دهنده در سمت پوسته می‌شوند و جریان مایع جاذب، از پایین وارد ماژول تماس‌دهنده در سمت لوله می‌شود. برای پیش‌بینی انتقال دی‌اکسیدکربن از طریق تماس‌دهنده غشایی فیبر توخالی در فرآیندهای جذب، مدل انتقال، توسعه داده شده است.

در پژوهش‌های متعدد، از غشاهایی مانند پلی پروپیلن^۱ و پلی تترا فلور اتیلن^۲ در تماس‌دهنده‌های غشا برای جذب دی‌اکسیدکربن استفاده شده است [۱۲-۱۴]. با مدل‌سازی جذب دی‌اکسیدکربن از مخلوط‌های گازی در مقیاس صنعتی، هزینه بهینه‌سازی طراحی یا ایجاد طراحی جدید به‌طور چشم‌گیری کاهش یافته است. بنابراین، توجه خاصی به شبیه‌سازی عددی در صنایع می‌شود. تا کنون، شبیه‌سازی تماس‌دهنده غشایی فیبر توخالی توسط محققین متعددی صورت گرفته است [۱۵-۱۷]. وگت و همکاران [۱۷] تماس‌دهنده غشایی را با برج‌های پر شده مقایسه کرده‌اند. به طوری که غشاء با ضخامت‌های دیواره کمتر می‌تواند انتقال جرم از دی‌اکسیدکربن را بالا ببرد. علاوه بر این، غشاء ساخته شده از PTFE هیدروفوبیک می‌تواند یک جایگزین امیدوارکننده را برای منافذ کوچک‌تر از $0.1 \mu m$ باشد.

سهرابی و همکاران [۱۸] جذب شیمیایی دی‌اکسیدکربن توسط مونو اتانول آمین^۳ و دی اتانول آمین^۴ و ان متیل دی اتانول آمین^۵ و پتاسیم کربنات^۶ را با استفاده از تماس‌دهنده غشای توخالی مورد مطالعه قرار داده‌اند. نتایج نشان داد که محلول آمین بهتر از پتاسیم کربنات دی‌اکسیدکربن را جذب می‌کند. زای دیزا و همکاران مدل یک بعدی و مدل دو بعدی برای جذب دی‌اکسیدکربن از طریق حلال با واکنش شیمیایی در یک تماس‌دهنده غشاء الیاف توخالی مورد بررسی قرار داده‌اند. همین‌طور نشان داده‌اند. هر دو روش مدل‌سازی شار جذب شیمیایی دی‌اکسیدکربن را یکسان محاسبه شده است. فایزان و همکاران [۱۹] یک مدل ریاضی با ویژگی‌های ماژول فیبر توخالی توسط نرم‌افزار شبیه‌سازی اسپن‌هایسیس^۷ برای جداسازی دی‌اکسیدکربن از متان مورد مطالعه قرار گرفته است. لاک و همکاران [۲۰] یک مدل ریاضی جذب دی‌اکسیدکربن از گاز طبیعی توسط ماژول غشاء فیبر توخالی برای جریان همسو و ناهمسو در

1. Polypropylene
2. Polytetrafluoroethylene (PTFE)
3. MEA
4. DEA
5. MDEA
6. Potassium Carbonate
7. Aspen HYSYS
8. Axisymmetric



شکل ۱ (الف) شماتیک یک تماس‌دهنده غشایی فیبر توخالی (HFMC) (ب) شماتیک مدل دو بعدی (ج) یک فیبر توخالی.

$$r = r_2 \quad C_{CO_2-shell} = C_{CO_2-membrane} \quad (3)$$

$$r = r_3 \quad \frac{\partial C_{CO_2-shell}}{\partial r} = 0 (\text{symmetry}) \quad (4)$$

$$z = 0 \quad -n \cdot D_i \nabla c_i = 0 \quad (5)$$

$$z = L \quad C_{CO_2-shell} = C_0 \quad (6)$$

برای توصیف توزیع سرعت برای فیبر توخالی از مدل جریان سطح آزاد هاپیل استفاده شده است. این مدل برای پروفایل سرعت سمت پوسته به صورت رابطه زیر می‌شود [۲۲].

$$V_{z-shell} = 2u \left[1 - \left(\frac{r_2}{r_3} \right)^2 \right] \times \left[\frac{(r/r_3)^2 - (r_2/r_3)^2 + 2 \ln(r_2/r)}{3 + (r_2/r_3)^4 - 4(r_2/r_3)^2 + 4 \ln(r_2/r_3)} \right] \quad (7)$$

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

$$z = 0 \quad V_{z-tube} = V_0 \quad (8)$$

$$z = L \quad p = p_0 \quad (9)$$

و r_3 نیز به صورت زیر تعریف می‌گردد [۲۳]. در این مدل‌سازی از معادله (۷) استفاده شده است.

$$r_3 = \left(\frac{1}{1-\phi} \right)^{1/2} r_2 \quad (10)$$

که در این رابطه ϕ جز حجمی فضای خالی است و از رابطه زیر محاسبه می‌شود. R نیز شعاع تماس‌دهنده غشایی و n تعداد فیبرهای استوانه‌ای

فرضیات مدل عبارتند از: شرایط حالت پایا و هم‌دما، توسعه یافتگی کامل سرعت سیال مایع در فیبر توخالی، ایدال بودن گاز، مفروض گرفته شدن قانون هنری برای فصل مشترک گاز-مایع و جریان آرام برای تماس‌دهنده گاز و مایع و در نهایت حالت غیر مرطوب برای مخلوط گازی. میزان جریان گاز از 0.02 تا 0.05 m/s و سرعت سیال مایع از 0.05 تا 0.2 m/s متغیر است.

معادلات سمت پوسته

معادله انتقال جرم برای تمام اجزاء به صورت زیر نوشته می‌شود [۲۱].

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

که در اینجا C_i غلظت (mol/m^3)، D_i ضریب نفوذ اجزاء (m^2/s)، u بردار سرعت (m/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 اجزاء 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 دی‌اکسیدکربن شرایط مرزی به صورت زیر اعمال شده است:

$$C_{CO_2-tube} = 0 \quad z=0 \quad (21)$$

$$-n.D_i \nabla C_i = 0 \quad z = L \quad (22)$$

در داخل لوله جریان انتقالی در جهت شعاع نادیده گرفته شده است زیرا حلال جاذب در جهت محوری (جهت z) حرکت می‌کند. همین‌طور توزیع سرعت در داخل مجرا (لوله) به‌صورت جریان آرام نیوتنی فرض شده است [۲۶].

$$V_{z-tube} = 2u \left[1 - \left(\frac{r}{r_1} \right)^2 \right] \quad (23)$$

که r_1 شعاع لوله و u سرعت متوسط سیال جاذب (m/s) می‌باشند. بازده حذف دی‌اکسیدکربن فیبر از رابطه زیر محاسبه می‌شود که وابسته به $C_{i,i}$ غلظت ورودی (mol/m^3) و $C_{i,o}$ غلظت خروجی حلال جاذب (mol/m^3) می‌باشند.

$$\eta(\%) = \left(1 - \frac{C_{i,o}}{C_{i,i}} \right) \quad (24)$$

ضریب نفوذ دی‌اکسیدکربن در آب توسط ورستگ و ساجی از رابطه زیر به‌دست می‌آید [۲۵].

$$D_{CO_2,H_2O} = 2.35 \times 10^{-6} \exp\left(\frac{-2119}{T}\right) \quad (25)$$

ضریب نفوذ دی‌اکسیدکربن در نیتروژن نیز از رابطه ویلک-چنگ^۱ محاسبه می‌شود [۲۷].

$$D_{AB} = 7.4 \times 10^{-8} \frac{\sqrt{\phi_B M_B T}}{\mu V_A^{0.6}} \quad (26)$$

در این تحقیق حذف دی‌اکسیدکربن در تماس‌دهنده فیبری غشایی توسعه داده شده است. ساختار مواد غشاء از جنس پلی‌وینیلیدین فلورید (PVDF) می‌باشد. ویژگی‌های ماژول تماس‌دهنده فیبر تو خالی نیز در جدول ۱ آورده شده است. طول غشاء شبیه‌سازی شده $L = 0.15$ m تعداد فیبرهای آن ۳۰ عدد می‌باشند. همچنین غلظت دی‌اکسیدکربن در فاز مایع برای همه موارد صفر در نظر گرفته شده است.

نتایج و بحث

مجموعه معادلات دیفرانسیل پیوستگی، مومنتوم و جرم به روش اجزاء محدود حل شده است. برای شبکه‌بندی تماس‌دهنده غشایی فیبر تو خالی، از المان مثلثی استفاده می‌شود.

1. Wilke-Chang Equation

موجود در تماس‌دهنده و r_2 شعاع خارجی فیبر استوانه‌ای تو خالی و r_3 شعاع سیال اطراف غشاء که تحت تاثیر غشا می‌باشد [۲۳].

$$1 - \phi = \frac{nr_2^2}{R^2} \quad (11)$$

معادلات سمت غشا

در غشا فیبر تو خالی گاز حاوی دی‌اکسیدکربن در جریان است. به دلیل حضور پدیده نفوذ، معادله انتقال اجزاء به‌صورت زیر نوشته می‌شود.

$$D_{CO_2-mem} \left[\frac{\partial^2 C_{CO_2-mem}}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C_{CO_2-mem}}{\partial r} + \frac{\partial^2 C_{CO_2-mem}}{\partial z^2} \right] = 0 \quad (12)$$

ضریب نفوذ دی‌اکسیدکربن در غشا نیز از رابطه زیر محاسبه می‌شود که به تخلخل و تورسیتی وابسته است [۲۴].

$$D_{CO_2-membrane} = \frac{D_{CO_2-shell} \times \varepsilon}{\tau} \quad (13)$$

شرایط مرزی اعمال شده در غشا به‌صورت زیر می‌باشند.

$$r = r_1 \quad C_{CO_2-membrane} = \frac{C_{CO_2-tube}}{m} \quad (14)$$

$$r = r_2 \quad (15)$$

در نهایت حلالیت دی‌اکسیدکربن از رابطه زیر محاسبه می‌شود [۲۵].

$$m = \frac{HE}{RT} \quad (16)$$

ضریب هنری دی‌اکسیدکربن نیز از رابطه زیر محاسبه می‌گردد [۲۵].

$$HE = 2894900 \times \exp\left(\frac{-2044}{T}\right) \left(\text{Pa.m}^3/\text{mol}\right) \quad (17)$$

معادلات سمت لوله

برای مدل‌سازی جز دی‌اکسیدکربن در قسمت مجرا (لوله) معادله انتقال اجزاء به‌صورت زیر در

نظر گرفته می‌شود.

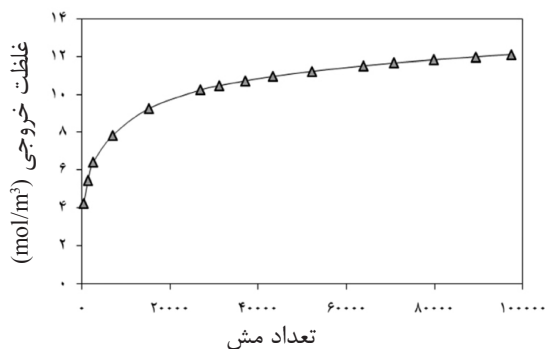
$$D_{CO_2-tube} \left[\frac{\partial^2 C_{CO_2-tube}}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C_{CO_2-tube}}{\partial r} + \frac{\partial^2 C_{CO_2-tube}}{\partial z^2} \right] = V_{z-tube} \frac{\partial C_{CO_2-tube}}{\partial z} \quad (18)$$

شرایط مرزی اعمال شده در سمت لوله به‌صورت زیر می‌باشند.

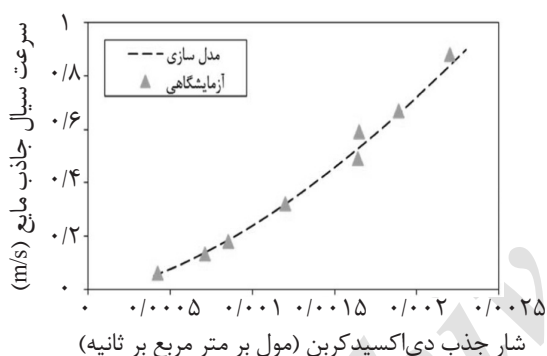
$$\frac{\partial C_{i-tube}}{\partial r} = 0 \quad (\text{symmetry}) \quad r = 0 \quad (19)$$

$$C_{CO_2-tube} = C_{CO_2-membrane} \times m \quad r = r_1 \quad (20)$$

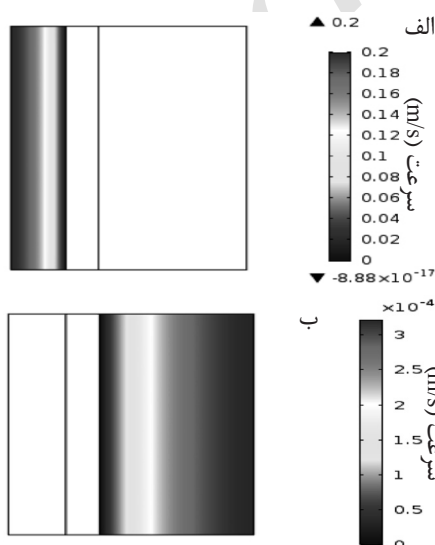
لوله HFMC با سرعت ورودی 0.2 m/s در شکل ۴ (الف) و توزیع سرعت هوا در سمت پوسته HFMC در شکل ۴ (ب) نشان داده شده است. پروفایل سرعت به طور کامل، توسعه یافته می باشد.



شکل ۲ تاثیر اثر تعداد سلول ها بر غلظت خروجی تماس دهنده غشایی.



شکل ۳ مقایسه بین مدل و داده های آزمایشگاهی [۲۶].



شکل ۴ پروفایل توزیع سرعت (الف) سیال جاذب (آب) در سمت لوله (ب) هوا در سمت پوسته.

جدول ۱ ویژگی های ماژول آزمایشگاهی [۲۶].

اندازه	ویژگی ها
۱۴	قطر ماژول (mm)
۰/۹۵	قطر خارجی فیبر (mm)
۰/۶۰	قطر داخلی فیبر (mm)
۱۵۰	طول موثر فیبر (mm)
۳۰	تعداد فیبرها
۲۷۰	طول ماژول (mm)
۵۸۲	چگالی پکینک (m^2/m^3)

توزیع مش برای بهبود دقت حل معادله در اطراف غشاء به دلیل تغییرات گرادیان زیاد افزایش یافته است. حل عددی به کمک نرم افزار کامسول^۱ انجام گرفته است. در روش های عددی، حل یک مسئله جریان (سرعت، فشار، غلظت و غیره) در گره های داخلی هر سلول صورت می گیرد. دقت مربوط به یک حل عددی از تعداد سلول های موجود در شبکه پیروی می کند. در حالت کلی تعداد سلول های زیاد دقت محاسبات عددی را افزایش می دهد. اما قیمت مورد نیاز و زمان محاسبه نیز افزایش می یابد. در این محاسبه برای رسیدن به دقت کافی در لایه غشا از یک توزیع مش ریزتر استفاده شده است. برای حذف تاثیر المان های مختلف شبکه بر روی نتایج بررسی های مختلفی انجام گرفته است. همان طور که در شکل ۲ اثر تعداد مش های بر میزان غلظت خروجی تماس دهنده غشایی نشان داده شده است. برای عدم وابستگی نتایج به شبکه بندی تماس دهنده غشایی فیبر توخالی (HFMC)، تعداد سلول انتخاب شده است. همان طور که در شکل ۳ مشاهده می شود نتایج شبیه سازی برای تغییرات شار جذب دی اکسید کربن با سرعت سیال جریان مایع با داده های آزمایشگاهی [۲۶] تطابق خوبی را نشان می دهد. در دمای 20°C و فشار 1 atm شرایط اعتبار سنجی مدل بوده است.

پروفایل توزیع سرعت

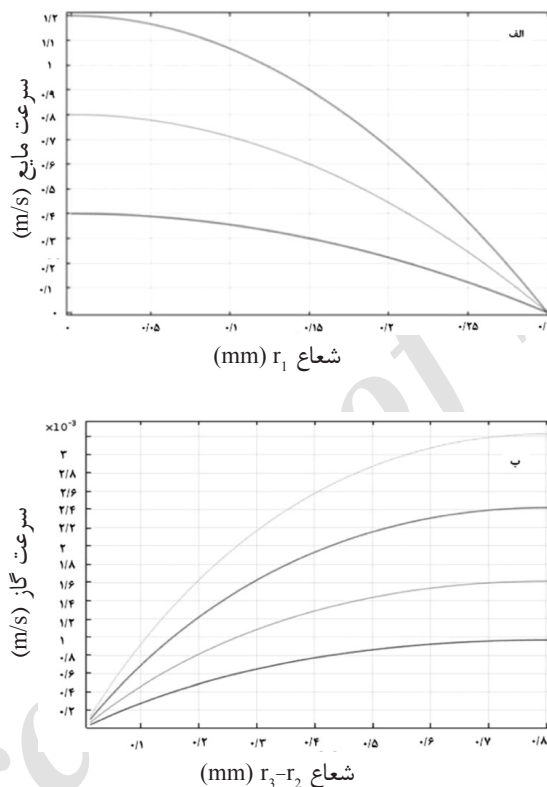
پروفایل توزیع سرعت حلال جاذب (آب) در سمت

نشان داده شده است.

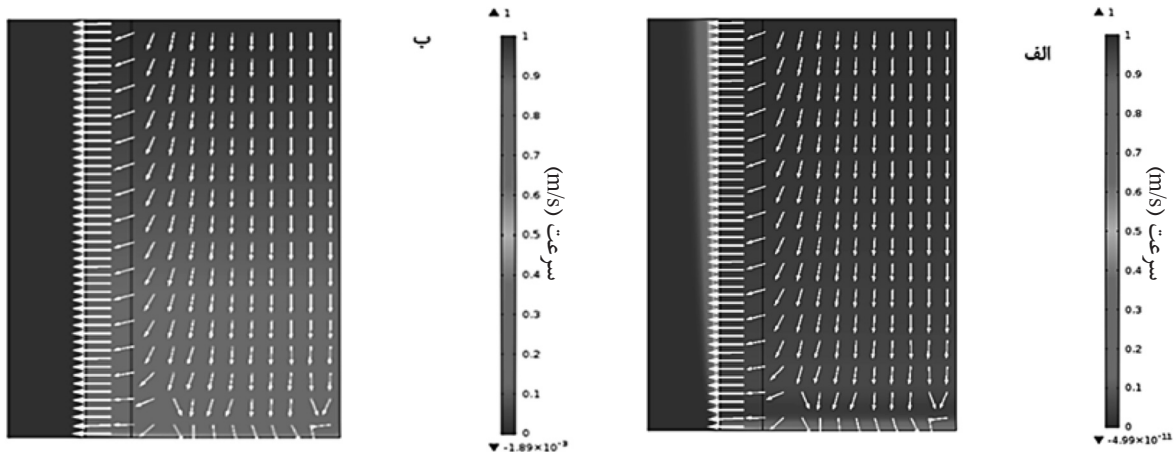
پروفایل توزیع غلظت

پروفایل بی بعد توزیع غلظت دی‌اکسیدکربن در سمت لوله، غشاء و پوسته تماس‌دهنده غشایی فیبر توخالی در شکل ۶ نشان داده شده است.

همچنین در پروفایل سرعت سهموی، سرعت ماکزیم در مرکز لوله دو برابر سرعت متوسط ورودی می‌باشد. پروفایل سرعت سیال جاذب با سرعت ورودی مایع ۰/۲، ۰/۴ و ۰/۶ m/s در شکل ۵ (الف) نشان داده شده است. پروفایل سرعت گاز در سمت پوسته سرعت با ورودی ۰/۰۶، ۰/۱، ۰/۱۵ و ۰/۲ m/s در شکل ۵ (ب)



شکل ۵ پروفایل توزیع (الف) سرعت سیال جاذب (ب) با سرعت ورودی مایع ۰/۲ و ۰/۴ و ۰/۶ (ب) هوا در سمت پوسته سرعت ورودی گاز ۰/۰۶ و ۰/۱ و ۰/۱۵ و ۰/۲.



شکل ۶ پروفایل غلظت دی‌اکسیدکربن و بردار شار انتقال جرم (الف) مایع ۰/۲ و (ب) سرعت مایع ۵ m/s و سرعت گاز در هر دو حالت ۰/۰۲ بر ثانیه.

به سمت پوسته غلظت دی اکسیدکربن در هوا به بیشترین میزان خود می‌رسد. با افزایش غلظت اولیه میزان افزایش غلظت در لوله و غشا و پوسته مشاهده می‌شود.

تاثیر دما بر راندمان حذف

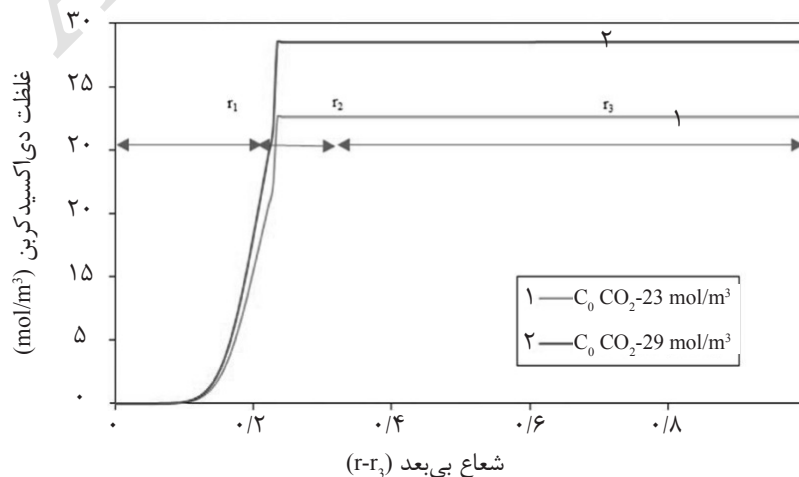
برای تعیین شرایط بهینه، راندمان حذف شاخص اندازه‌گیری قابل توجه و مهمی برای فرآیند جذب محسوب می‌شود. درصد حذف دی اکسیدکربن به صورت زیر قابل اندازه‌گیری است [۲۸].

$$\eta = \frac{(vC)_{inlet} - (vC)_{outlet}}{(vC)_{inlet}} \times 100 = 100 \left(1 - \frac{C_{outlet}}{C_{inlet}} \right) \quad (27)$$

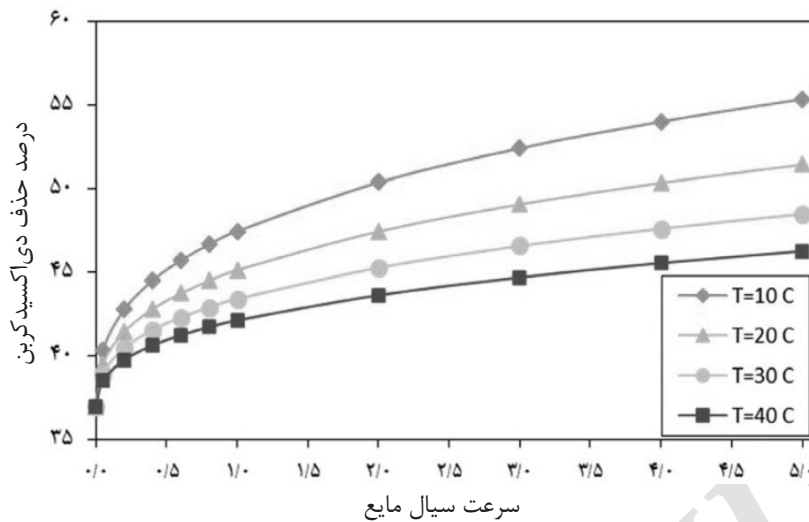
که در آن v نرخ جریان حجمی و C میانگین غلظت دی اکسیدکربن در داخل پوسته تماس‌دهنده غشایی فیبر توخالی در جهت محوری می‌باشند. متوسط غلظت دی اکسیدکربن در گاز ورودی و خروجی سمت پوسته ماژول برای تعیین درصد حذف دی اکسیدکربن اندازه‌گیری شده است. شکل ۸ اثر سرعت حلال جاذب (آب مقطر) بر درصد حذف دی اکسیدکربن در دماهای مختلف جاذب مایع را نشان می‌دهد. نتایج شبیه‌سازی تایید می‌کند که درصد حذف دی اکسیدکربن با افزایش سرعت مایع جاذب افزایش یافته است.

بیشترین غلظت دی اکسیدکربن در سمت پوسته می‌باشد. در حالی که، غلظت دی اکسیدکربن در فاز مایع ورودی صفر می‌باشد و در طول لوله، سیال جاذب، دی اکسیدکربن را جذب می‌کند. دی اکسیدکربن موجود در مخلوط گازی داخل پوسته، با توجه به تفاوت غلظت بین پوسته و غشاء، به سطح غشاء منتقل می‌شود. انتقال جرم دی اکسیدکربن در داخل پوسته و لوله توسط انتشار و جابه‌جایی منتقل می‌گردد. چون جریان در جهت z می‌باشد، پدیده غالب انتقال جرم در پوسته و لوله جابه‌جایی و در داخل غشا نفوذ می‌باشند. دی اکسیدکربن از سمت غشا به سمت لوله در حرکت می‌باشد. همان‌طور که در شکل دیده می‌شود افزایش سرعت مایع جاذب ورودی، میزان جذب دی اکسیدکربن در طول غشا را بالا می‌برد. این تغییرات غلظت از الف تا ب در شکل ۶ قابل مشاهده است.

تغییرات غلظت دی اکسیدکربن در دو غلظت اولیه ۲۳ و ۲۹ مول بر متر مکعب در راستای شعاع فیبر در شکل ۷ نشان داده شده است. غلظت دی اکسیدکربن در حلال در داخل فیبر در ابتدای لوله بسیار اندک می‌باشد ولی با حرکت به سمت غشا غلظت دی اکسیدکربن افزایش می‌یابد. و سپس با رسیدن



شکل ۷ تغییرات غلظت دی اکسیدکربن در راستای شعاع.



شکل ۸ درصد حذف دی‌اکسیدکربن با تغییرات سرعت سیال (متر بر ثانیه) در دماهای متفاوت.

ناهمسو نسبت به جریان همسو چشم‌گیر تر است.

تاثیر تخلخل فیبر بر راندمان حذف

در شکل ۱۰ درصد حذف دی‌اکسیدکربن در تخلخل‌های مختلف فیبر نشان داده شده است. در مدل‌سازی انجام شده تاثیر تخلخل از ۰/۴ تا ۰/۸ مورد بررسی قرار گرفته است. با افزایش تخلخل فیبر طبق رابطه ۱۳ میزان ضریب نفوذ گاز دی‌اکسیدکربن در غشاء فیبر افزایش می‌یابد و به دنبال آن شار انتقال دی‌اکسیدکربن در سطح غشاء زیاد می‌شود و راندمان حذف دی‌اکسیدکربن به صورت خطی بالا می‌رود. همان‌طور که مشاهده می‌شود با افزایش سرعت مایع درصد حذف دی‌اکسیدکربن افزایش می‌یابد. اما ترم تخلخل عامل تاثیر گذارتری می‌باشد.

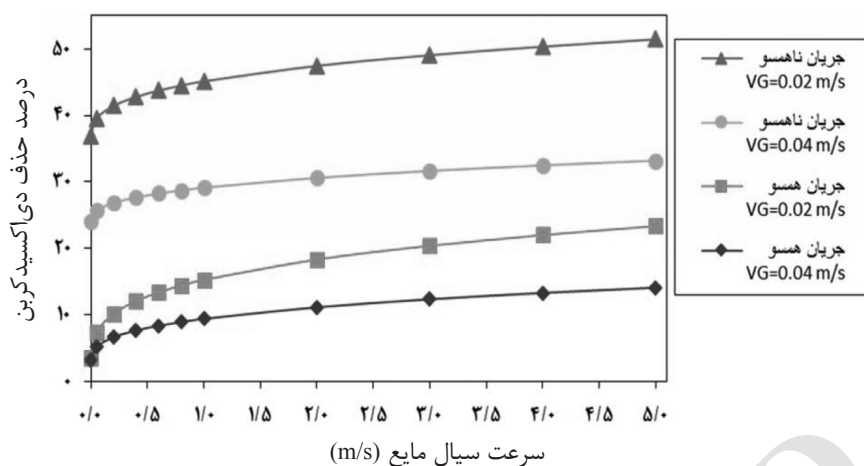
تاثیر سرعت جریان گاز و مایع بر راندمان حذف

در شکل ۱۱ درصد حذف دی‌اکسیدکربن در سرعت‌های مختلف مایع جاذب و گاز نشان داده شده است. همان‌طور که مشخص است با افزایش سرعت گاز درصد حذف دی‌اکسیدکربن کاهش می‌یابد. چون زمان اقامت مخلوط گازی و زمان تماس جاذب با مخلوط گازی کم می‌شوند. با افزایش سرعت مایع درصد حذف دی‌اکسیدکربن افزایش می‌یابد.

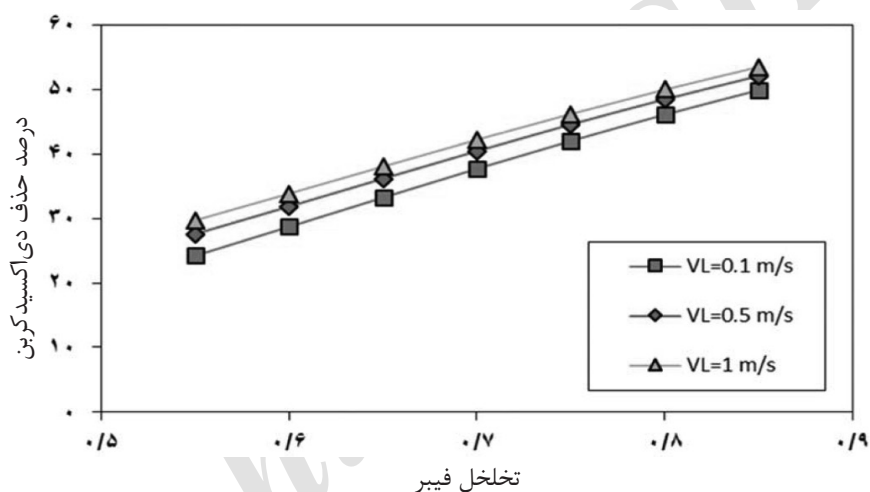
به‌طوری‌که با افزایش دما میزان جذب گاز دی‌اکسیدکربن در مایع جاذب کاهش یافت. در دمای ثابت ۱۰ °C، درصد حذف دی‌اکسیدکربن در سرعت ۵ m/s مایع جاذب به میزان ۵۵/۳۶٪ و همین‌طور درصد حذف دی‌اکسید در دمای ثابت ۴۰ °C در سرعت ۵ m/s مایع جاذب به میزان ۴۶/۲۵٪ رسید. به‌طور کلی نشان داده شده است که با افزایش دما میزان حلالیت گاز در مایع کاهش می‌یابد.

تاثیر جریان همسو و ناهمسو بر راندمان حذف

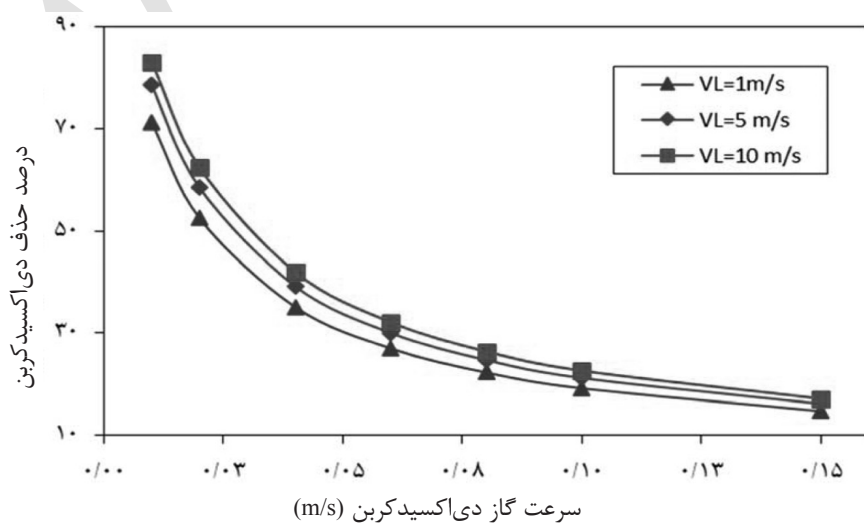
در شکل ۹ درصد حذف دی‌اکسیدکربن در سرعت‌های مختلف مایع جاذب نشان داده شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود درصد حذف دی‌اکسیدکربن در جریان ناهمسو بیشتر از جریان همسو می‌باشد. به‌طوری‌که در سرعت ۰/۰۲ m/s مخلوط گازی و سرعت ۵ m/s مایع جاذب در جریان ناهمسو، درصد حذف دی‌اکسیدکربن ۵۱/۴۳٪ ولی درصد حذف دی‌اکسیدکربن در همان شرایط در جریان همسو، ۲۳/۳۴٪ می‌باشد. با افزایش سرعت گاز میزان راندمان حذف کاهش می‌یابد چون مدت اقامت گاز در کنار مایع جاذب کاهش یافته است. به‌طوری‌که در سرعت ۰/۰۴ m/s مخلوط گازی و سرعت ۵ m/s مایع جاذب، راندمان حذف جریان ناهمسو و همسو به ۳۳/۱۷ و ۱۴/۰۶٪ کاهش می‌یابد. همچنین این کاهش میزان درصد حذف در جریان



شکل ۹ درصد حذف دی‌اکسیدکربن در سرعت‌های مختلف جریان همسو و ناهمسو.



شکل ۱۰ درصد حذف دی‌اکسیدکربن در تخلخل‌های مختلف فیبر توخالی.

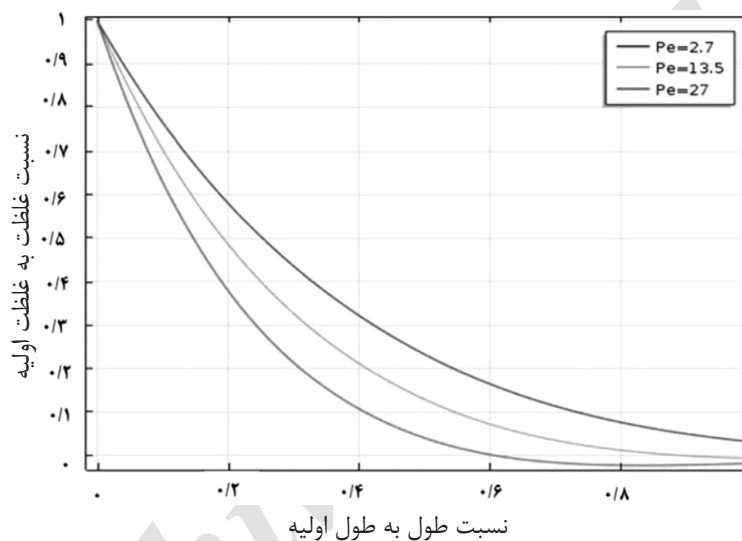


شکل ۱۱ درصد حذف دی‌اکسیدکربن در سرعت‌های (متر بر ثانیه) مختلف گاز و مایع.

تاثیر عدد بدون بعد پکلت^۱

عدد پکلت نسبت انتقال به نفوذ در جهت عکس را در جریان بررسی می‌کند. جریان محوری کندتر منجر به انتشار پروفایل غلظت یکنواخت‌تر در طول غشاء تماس‌دهنده غشایی می‌شود. با افزایش عدد پکلت جریان محوری را افزایش می‌دهد. که در شکل ۱۲ اثر عدد بدون بعد پکلت بر غلظت دی‌اکسیدکربن در طول غشاء نشان داده شده است.

چون در سرعت بالا میزان جاذب تازه بیشتری در تماس با مخلوط گازی قرار گرفته گرادیان غلظت بیشتری ایجاد کرده و میزان بیشتری دی‌اکسیدکربن از مخلوط گازی حذف می‌شود. همچنین تاثیر سرعت گاز نسبت به سرعت مایع در میزان درصد حذف دی‌اکسیدکربن بسیار چشم‌گیرتر است. به طوری که در سرعت 0.02 m/s گاز و در سرعت 1 m/s و 10 مایع جاذب، راندمان حذف دی‌اکسیدکربن به ترتیب $52/49\%$ و $62/44\%$ می‌باشد.



شکل ۱۲ تاثیر عدد بدون بعد پکلت بر غلظت دی‌اکسیدکربن در طول غشاء در پکلت 2.7 ، 13.5 و 27 .

در سرعت 0.02 m/s مخلوط گازی و سرعت 5 m/s مایع جاذب در جریان ناهمسو به ترتیب درصد حذف دی‌اکسیدکربن $51/43\%$ و $23/34\%$ می‌باشد. همچنین درصد حذف دی‌اکسیدکربن با افزایش سرعت مایع جذب افزایش و با افزایش دما میزان جذب گاز دی‌اکسیدکربن در مایع جاذب کاهش را نشان داده است. به طوری که در دمای ثابت 10°C درصد حذف دی‌اکسیدکربن در سرعت 5 m/s مایع جاذب به میزان $55/36\%$ می‌باشد. همچنین درصد حذف دی‌اکسیدکربن در جریان ناهمسو بیشتر از جریان همسو می‌باشد و همچنین تاثیر سرعت گاز نسبت به سرعت مایع در میزان درصد حذف دی‌اکسیدکربن بسیار چشم‌گیرتر است.

1. Peclet Number

نتیجه‌گیری

در این مطالعه، یک مدل دو بعدی برای حذف دی‌اکسیدکربن از مخلوط گازی از طریق غشاء با استفاده از جاذب آب توسعه داده شد. مجموعه معادلات دیفرانسیل پیوستگی، مومنتوم و جرم به روش اجزاء محدود به کمک نرم‌افزار Comsol Multiphysics حل شده است. نتایج شبیه‌سازی با داده‌های آزمایشگاهی تطابق خوبی را نشان داده است. غلظت دی‌اکسیدکربن مخلوط گازی در راستای شعاعی فیبر توخالی تماس‌دهنده غشایی کاهش یافته است. با افزایش سرعت مایع راندمان حذف افزایش می‌یابد و با افزایش سرعت گاز راندمان حذف کاهش می‌یابد. به طوری

مراجع

- [1]. UNEP, "No Title United Nations Environment Programme, Introduction to Climate Change," 2005.
- [2]. Freund P. "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.
- [3]. IPCC, "Intergovernmental panel on climate change (IPCC) special report on carbon dioxide capture and storage", Cambridge Univ. Press. Cambridge, UK., 2005.
- [4]. Davidson R. M., "Post-combustion carbon capture from coal fired plants – solvent scrubbing", IEA Clean Coal Cent., 2007.
- [5]. Favre E., "Carbon dioxide recovery from post-combustion processes: Can gas permeation membranes compete with absorption?", J. Memb. Sci., Vol. 294, No. 1–2, pp. 50–59, May 2007.
- [6]. Shrikar Chakravarti and Amitabh Gupta, B. H., "Advanced Technology for the Capture of Carbon Dioxide from Flue Gases", First Natl. Conf. Carbon Sequestration.
- [7]. Drioli E., Curcio E. and di Profio G., "State of the art and recent progresses in membrane contactors", Chem. Eng. Res. Des., Vol. 83, No. 3, pp. 223–233, Mar. 2005.
- [8]. Picard C., Larbot A., Tronel-Peyroz E. and Berjoan R., "Characterisation of hydrophilic ceramic membranes modified by fluoroalkylsilanes into hydrophobic membranes", Solid State Sci., Vol. 6, No. 6, pp. 605–612, Jun. 2004.
- [9]. Brodard F., Romero J., Belleville M. P., Sanchez J., Combe-James C., Dornier M. and Rios, G. M., "New hydrophobic membranes for osmotic evaporation process", Sep. Purif. Technol., Vol. 32, No. 1–3, pp. 3–7, Jul. 2003.
- [10]. Qi Z. and Cussler E. L., "Microporous hollow fibers for gas absorption. I. Mass transfer in the liquid", J. Memb. Sci., Vol. 23, Issue 3, pp. 321–332, May 1985.
- [11]. El-Naas M. H., Al-Marzouqi M., Marzouk S. A. and Abdullatif N., "Evaluation of the removal of CO₂ using membrane contactors: Membrane wettability", J. Memb. Sci., Vol. 350, No. 1–2, pp. 410–416, Mar. 2010.
- [12]. Falk-Pedersen O. and Dannström H., "Separation of carbon dioxide from offshore gas turbine exhaust", Energy Convers. Manag., Vol. 38, Supple, pp. S81–S86, 1997.
- [13]. Yan S., Fang M. X., Zhang W. F., Wang S. Y., Xu, Z. K., Luo Z. Y. and Cen K.F., "Experimental study on the separation of CO₂ from flue gas using hollow fiber membrane contactors without wetting", Fuel Process. Technol., Vol. 88, No. 5, pp. 501–511, May 2007.
- [14]. Hoff K. A., Juliussen O., Falk-Pedersen O. and Svendsen H. F., "Modeling and experimental study of carbon dioxide absorption in aqueous alkanolamine solutions using a membrane contactor", Ind. Eng. Chem. Res., Vol. 43, No. 16, pp. 4908–4921, Aug. 2004.
- [15]. Dindore V. Y., Brilman D. W. F. and Versteeg G. F., "Modelling of cross-flow membrane contactors: Mass transfer with chemical reactions", J. Memb. Sci., Vol. 255, No. 1–2, pp. 275–289, Jun. 2005.
- [16]. Keshavarz P., Fathikalajahi J. and Ayatollahi S., "Analysis of CO₂ separation and simulation of a partially wetted hollow fiber membrane contactor", J. Hazard. Mater., Vol. 152, No. 3, pp. 1237–1247, Apr. 2008.

- [17]. Vogt M., Goldschmidt R., Bathen D., Epp B. and Fahlenkamp H., "Comparison of membrane contactor and structured packings for $\{CO_2\}$ absorption", Energy Procedia, Vol. 4, pp. 1471–1477, 2011.
- [18]. Sohrabi M. R., Marjani A., Moradi S., Davallo M. and Shirazian S., "Mathematical modeling and numerical simulation of $\{CO_2\}$ transport through hollow-fiber membranes", Appl. Math. Model., Vol. 35, No. 1, pp. 174–188, 2011.
- [19]. Ahmad F., Lau K. K., Lock S. S. M., Rafiq S., Khan A. U. and Lee M., "Hollow fiber membrane model for gas separation: Process simulation, experimental validation and module characteristics study," J. Ind. Eng. Chem., Vol. 21, pp. 1246–1257, 2015.
- [20]. Lock S. S. M., Lau K. K., Ahmad F. and Shariff A. M., "Modeling, simulation and economic analysis of $\{CO_2\}$ capture from natural gas using cocurrent, countercurrent and radial crossflow hollow fiber membrane," Int. J. Greenh. Gas Control, Vol. 36, pp. 114–134, 2015.
- [21]. Bird R. B., Stewart W. E. and Lightfoot E. N., Transport Phenomena. Wiley, 2007.
- [22]. Happel J., "Viscous flow relative to arrays of cylinders", AIChE J., Vol. 5, No. 2, pp. 174–177, 1959.
- [23]. Zhang Z., Yan Y., Zhang L. and Ju S., "Numerical simulation and analysis of CO_2 removal in a polypropylene hollow fiber membrane contactor," Int. J. Chem. Eng., Vol. 2014, 2014.
- [24]. Keshavarz P., Fathikalajahi J. and Ayatollahi S., "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.
- [25]. Versteeg G. F. and Van Swaaij W., "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.
- [26]. Mansourizadeh A., "Experimental study of CO_2 absorption/stripping via PVDF hollow fiber membrane contactor", Chem. Eng. Res. Des., Vol. 90, No. 4, pp. 555–562, 2012.
- [27]. Bird R. B., "Transport phenomena", Appl. Mech. Rev., Vol. 55, No. 1, pp. R1–R4, 2002.
- [28]. Yunfei Yan Zh. Zh., Zhang L. and S. J., "Numerical simulation and analysis of CO_2 removal in a polypropylene hollow fiber membrane contactor", Int. J. Chem. Eng., Vol. 2014, p. 7, 2014.