

## مدلسازی پویا و غیر تعادلی جذب سولفید هیدروژن توسط محلول دی گلایکول آمین\*

احمد قائمی<sup>(۱)</sup>شهرخ شاه حسینی<sup>(۲)</sup>آزاده کیانی<sup>(۱)</sup>

**چکیده** در این تحقیق، یک مدل پویا و غیر تعادلی بر مبنای مدل فیلمی برای مدلسازی فرآیند جذب سولفید هیدروژن توسعه یافته است. در این مدل از مدل فیلمی پایا که در آن ترکیب و تعامل نفوذ و واکنش های شیمیائی در نظر گرفته شده استفاده شده است. معادلات حاصل از مدلسازی فرآیند شامل مجموعه ای از معادلات دیفرانسیل پاره ای و معمولی بوده که در جهت محور برج انفصال سازی انجام گرفته که با استفاده از روش خطوط (Method of lines) حل شده اند. برای ارزیابی مدل ارائه شده، از داده های صنعتی جذب سولفید هیدروژن در برج سینی دار توسط محلول دی گلایکول آمین استفاده شده است. نتایج شبیه سازی فرآیند در دو حالت پایا و پویا ارائه شده است. مقایسه نتایج شبیه سازی با نتایج تجربی نشان می دهد که مدل ارائه شده پیش بینی خوبی از رفتار فرآیند در شرایط پایا و دینامیکی دارد.

**واژه های کلیدی** مدل غیر تعادلی، شبیه سازی پویا، سولفید هیدروژن ( $H_2S$ )، جذب واکنشدار.

## Dynamic and Nonequilibrium Modeling of $H_2S$ Adsorption Using Glycol Amine Solution

A. Kiani

S. Shahhosseini

A. Ghaemi

**Abstract** In this research, a nonequilibrium stage model has been developed based on the film theory for modeling of  $H_2S$  absorption process. A steady state film model was incorporated into the process model that considers mass transfer between gas and liquid phases in both directions. The method of lines has been used to discretize the set of partial differential equations of the model. The model was validated against the industrial data. The data were obtained from an industrial tray column. The process simulation results are presented in steady and unsteady states. A comparison between the experimental and simulation results showed that the model could reasonably predict the process behavior.

**Key Words** Nonequilibrium Stage Model, Dynamic Simulation,  $H_2S$ , Reactive Absorption Process.

\* نسخه اول مقاله در تاریخ ۸۹/۵/۲۰ و نسخه نهایی آن در تاریخ ۸۹/۱۱/۲۰ به دفتر نشریه رسیده است.

(۱) آزمایشگاه تحقیقاتی شبیه سازی و کنترل فرآیند، دانشکده مهندسی شیمی، دانشگاه علم و صنعت ایران

(۲) نویسنده مسئول، دانشیار، پژوهشگاه علوم و فنون هسته ای، پژوهشکده چرخه سوتخت، آزمایشگاه جداسازی

(۳) دانشجوی دکتری، پژوهشگاه علوم و فنون هسته ای، پژوهشکده چرخه سوتخت، آزمایشگاه جداسازی

مدلسازی پویا و غیرتعادلی جذب سولفید هیدروژن ...

دارای دقت و مزیت بیشتری می باشند که دلیل آن را می توان در موارد زیر جستجو کرد:

- ۱- در فرآیندهای جداسازی واکنش دار انتقال جرم و حرارت پدیده های سرعتی بوده و بوسیله پتانسیل شیمیائی و گرادیان حرارتی به دست می آیند.
- ۲- یکی از مشخصه های مهم فرآیندهای جداسازی واکنش دار، انجام واکنش های شیمیائی می باشد که با سرعت های مختلف در طی فرآیند انجام می گیرند.

با توجه به موارد فوق می توان گفت که مدل های مبتنی بر سرعت برای فرآیندهای جداسازی واکنش دار مناسب می باشند. این مدل ها بر مبنای مدل فیلمی بوده و در آن ها تعامل نفوذی غیر ایده ال ترمودینامیکی و اثر مستقیم واکنش ها بر انتقال جرم و هیدرودینامیک داخلی ستون در نظر گرفته می شود [12]. تاکنون در این مدل ها تنها انتقال جرم از فاز گاز به فاز مایع در نظر گرفته شده است در حالی که در فرآیندهای حقیقی، انتقال جرم در هر دو فاز صورت می گیرد. بنابراین در این تحقیق از مدل فیلمی پایا با فرض انتقال جرم در هر دو جهت استفاده شده است. همچنین اثر واکنش های شیمیائی در فشار تعادلی و ضریب انتقال جرم گاز سولفید هیدروژن نیز اعمال گردیده است.

### مدلسازی

مدل های ریاضی فرآیندهای جداسازی واکنش دار معمولاً شامل محاسبه سرعت انتقال جرم و انتقال حرارت بین فیلم و توده فازها می باشند [14]. در این مدل ها، دستگاه جداسازی به چندین مرحله می خلاف تئوری تقسیم شده و این مراحل توسط موازنده های جرم و انرژی به هم متصل می شوند. در هر یک از این مراحل غیر تعادلی، فازهای گاز و مایع با هم تبادل جرم و انرژی انجام می دهند. معمولاً انتقال جرم در سطح مشترک بخار-مایع با استفاده از مدل فیلمی که در شکل (۱) برای یک مرحله اختیاری ارائه شده است، توصیف می گردد [15]. در این مدل فرض شده که در

### مقدمه

سولفید هیدروژن یک ترکیب غیر مطلوب در مخازن و جریانات گازی به شمار می رود که نه تنها سهم اقتصادی هیدروکربن های با ارزش گازی را کم می کند بلکه دارای اثرات سمی بوده و باعث خوردگی تجهیزات و مسموم کردن کاتالیست ها نیز می گردد. حذف این گاز از جریان های گازی توسط حلal های شیمیائی یا مواد قلیائی، از فرآیندهای مهم صنعتی به شمار می آید. در سال ۱۹۳۰ برای اولین بار آمین ها برای تصفیه گازهای اسیدی مورد استفاده قرار گرفتند. محلول های آمین دارای ساختار و انواع مختلفی بوده و کاربردهای متفاوتی در جذب گازها برخوردار می باشند. انتخاب محلول آمین مناسب به شرایط دمایی، فشار گاز، درصد ترکیب گاز و خلوص مورد نیاز برای گاز تصفیه شده بستگی دارد [1,2].

جذب سولفید هیدروژن از فرآیندهای جذب واکنش دار بوده و واکنش جزء جذب شونده با محلول آمین باعث به وجود آمدن مزیت های فرآیندی مختلفی می شود [3]. واکنش ها باعث کاهش فشار تعادلی اجزاء، افزایش سرعت جذب و در نتیجه، کاهش هزینه های فرآیندی می شوند. طراحی و مدل سازی این فرآیند به تعامل بین پدیده های انتقال جرم، واکنش های شیمیائی و تعادل فازها بستگی دارد. مدل های مختلفی برای مدل سازی فرآیندهای جذب واکنش دار ارائه شده است. این مدل ها به طور کلی به مدل های تعادلی (Equilibrium stage model) و غیرتعادلی (Nonequilibrium stage model) تقسیم می شوند. اساس همه این مدل ها تقسیم دستگاه جذب به مراحل مختلف ثوری بوده و ارتباط این مراحل از طریق معادلات موازنه جرم و انرژی انجام می گیرد [4-9]. اخیراً چندین فرآیند مهم جذب واکنش دار صنعتی با استفاده از این مدل ها به طور موقتی آمیزی مدل سازی شده اند [10-13]. این مدل ها به علت استفاده از فرضیات مختلف دارای دقت و پیچیدگی های متفاوتی می باشند. در این میان مدل های غیرتعادلی مخصوصاً مدل های مبتنی بر سرعت (Rate-based model)

موازنۀ جرم اجزاء در فاز گاز به صورت زیر می باشد:

$$0 = \frac{1}{\Delta z} [G_{j+1}y_{i,j+1} - G_jy_{i,j}] - (N_{i,j}^B a - R_{G,i}^B \Phi_G) A \\ i = 1, \dots, n \quad (3)$$

در معادلات مذکور زیرنویس های I بیانگر جزء ها، j شماره مرحله، G فاز گاز و L فاز مایع می باشند. موازنۀ جرم برای اجزائی که از فاز مایع به فاز گاز منتقل می شوند عبارت است از:

$$0 = \frac{1}{\Delta z} [G_{j+1}y_{s,j+1} - G_jy_{s,j}] + N_{s,j} a A \quad s = 1, \dots, n \quad (4)$$

در معادله (4)، s بیانگر اجزاء منتقل شده از فاز مایع به فاز گاز می باشد. برای تعیین پروفایل محوری دمای فازها، با موازنۀ دیفرانسیلی انرژی برای فازهای گاز و مایع معادله های زیر حاصل می شوند:

$$\frac{\partial E_L}{\partial t} = -\frac{1}{\Delta z} [L_{j-1}h_{L,j-1}^B - L_jh_{L,j}^B] + \\ (q^{lf} a - R_L^B \Phi_L \Delta H_{RL}^0) A \quad (5)$$

$$0 = \frac{1}{\Delta z} [G_{j+1}h_{G,j+1}^B - G_jh_{G,j}^B] - \\ (q^{gf} a - R_G^B \Phi_G \Delta H_{RG}^0) A \quad (6)$$

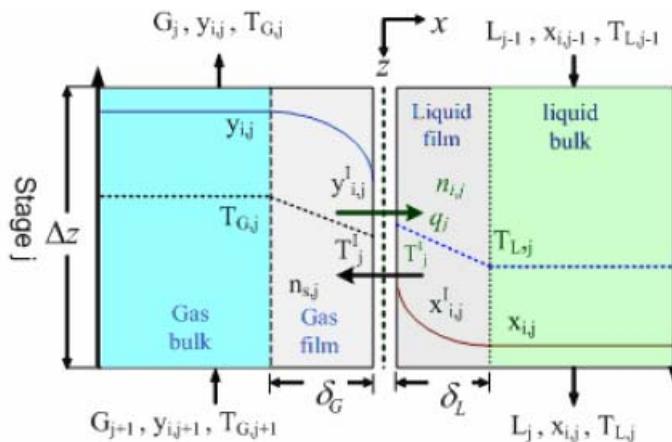
توده مایع و گاز اختلاط کامل انجام گرفته و غلظت ها و دما یکنواخت می باشند.

در شکل (1):  $\delta$  ضخامت فیلم ها، z جهت محور برج، n شار انتقال جرم، T دما، q شار انتقال حرارت، x کسر مولی اجزاء فاز مایع، L دبی فاز گاز و  $\Delta Z$  ارتفاع المان می باشند. زیر نویس های i اجزاء، G فاز گاز، L فاز مایع و ز شماره مرحله می باشند. همچنین بالانویس I بیانگر خصوصیات در سطح مشترک است. برای مدل سازی پویا، معادلات موازنۀ جرم اجزاء به صورت زیر نوشته می شوند:

$$\frac{d}{dt} u_{Li,j} = \frac{1}{\Delta z} [L_{j-1}x_{i,j-1} - L_jx_{i,j}] + \\ (N_{i,j}^B a + R_{Li,j}^B \Phi_L) A \quad i = 1, \dots, n \quad (1)$$

$$u_{Li,j} = x_{i,j} U_{Lt,j} = x_{i,j} (\Phi_L c_{Lt,j} A) \quad i = 1, \dots, n \quad (2)$$

که در آن  $U$  ماندگی مولی،  $R$  سرعت واکنش در فاز مایع، a سطح مشترک،  $\Phi$  ماندگی حجمی مایع، A سطح مقطع برج، c غلظت کلی محلول و n تعداد اجزاء در فاز مایع می باشند. به علت دانسیته پایین گاز می توان از تغییرات ماندگی صرف نظر کرد. بنابراین



شکل ۱ شماتیک مدل فیلمی برای یک مرحله از برج سینی دار

مدلسازی پویا و غیرتعادلی جانب سولفید هیدروژن ...

پارامترهای معادله‌ی (۱۲) توسط Kenig ارائه شده است [۱۶]. با جاگذاری مشتق معادله‌ی (۱۲) در معادله‌ی (۱۳)، شار انتقال جرم سولفید هیدروژن به دست می‌آید:

$$N_{H_2S} = -\frac{D_{H_2S}}{\delta} \frac{dC_{H_2S}}{d\xi} \quad (13)$$

ضخامت فیلم  $\delta$  پارامتر مهمی است و از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید [۳].

$$\delta = \frac{D}{K_l} \quad (14)$$

که در آن اگر ضرائب نفوذ  $D$  و انتقال جرم  $K_l$  برای فاز گاز باشد، ضخامت فیلم گاز و اگر برای فاز مایع باشد، ضخامت فیلم مایع به دست می‌آید.

### محاسبه پارامترها و خواص فیزیکی

دقت نتایج حاصل از مدلسازی و شبیه سازی به روش انجام محاسبات و پارامترهای مدل که شامل تعادل ترمودینامیکی، هیدرودینامیک ستون، واکنش شیمیایی و خواص فیزیکی می‌باشند، بستگی دارد. تعادل فازها و ترکیب اجزاء در سطح مشترک فرض شده از رابطه‌ی زیر به دست می‌آید:

$$y_{i,j}^I = K_{i,j} x_{i,j}^I \quad i=1, \dots, n \quad (15)$$

که در آن  $K_{i,j}$  بیانگر ثابت تعادل جزء  $i$  در مرحله‌ی  $j$  بوده و از مدل‌های ترمودینامیکی به دست می‌آید. فرآیندهای جداسازی واکنش دار اغلب در سامانه‌های الکتروولیت آبی اتفاق می‌افتد. در این تحقیق برای محاسبه ترکیب تعادلی در سطح مشترک از مدل Kent Eisenberg استفاده شده است [۱۷]. برای Nernst-Hartley محاسبه ضرائب نفوذ مایع از معادله که برای سامانه‌های الکتروولیت ارائه شده استفاده شده است [۳]. همچنین ضرائب نفوذ گاز در فشار پایین با

که در آن‌ها  $E$  انرژی داخلی،  $h$  آنتالپی،  $q$  شار انتقال حرارت و  $\Delta H$  آنتالپی استاندارد می‌باشند. در سطح مشترک فیلم‌ها موازن‌های انرژی شامل ترمومولت هدایت، جا به جائی و آنتالپی مخصوص محصولات می‌باشد:

$$q^{gf} = -\frac{\lambda^{gf}}{\delta^{gf}} (T^i - T^{gb}) + \sum_{i=1}^m N_i^{gf} h_i^{gf} \quad (V)$$

$$q^{lf} = -\frac{\lambda^{lf}}{\delta^{lf}} (T^{lb} - T^i) + \sum_{i=1}^m N_i^{lf} h_i^{lf} \quad (8)$$

بر اساس معادله پیوستگی، معادلات موازن‌های انرژی در سطح مشترک را می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$0 = q^{gf} - q^{lf} \quad (9)$$

موازن‌های توده با نوشتمن معادله مجموع کسر مولی‌ها برای فازهای گاز و مایع تکمیل می‌شود:

$$\sum_{i=1}^n x_i^B = 1 \quad (10)$$

$$\sum_{i=1}^n y_i^B = 1 \quad (11)$$

در معادلات فوق، بالنویس‌های  $B$  بیانگر توده،  $g$  فاز گاز،  $f$  فیلم و  $l$  فاز مایع می‌باشند. در این تحقیق برای محاسبه شارهای انتقال جرم از مدل فیلمی پایا استفاده شده است. با مدلسازی ناحیه فیلمی، معادله زیر برای محاسبه غلظت سولفید هیدروژن به دست می‌آید [۱۶]:

$$C_{H_2S}(\xi, t) = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-q_n t} \sin(\pi n \xi) a_n + \sum_{n=1}^{\infty} \left[ \int_0^t e^{-q_n(t-\tau)} f_n(\tau) d\tau \right] \sin(\pi n \xi) + C_{H_2S}^I(t) + \xi \left[ C_{H_2S}^b(t) - C_{H_2S}^I(t) \right] \quad (12)$$

سپس در جهت محور برج عمل انفصل سازی انجام گرفته و معادلات دیفرانسیلی به معادلات دیفرانسیلی معمولی و جبری تبدیل می شوند. برای حل مجموعه معادلات از روش خطوط استفاده شده است. الگوریتم حل دستگاه معادلات فرآیند در شکل (۲) آمده است. معادلات به دست آمده در محیط نرم افزار Matlab به طور همزمان حل شده اند. نتایج حاصله جهت شبیه سازی برای ۴۰ مرحله از ستون ارائه شده اند. افزایش تعداد مراحل تغییری در نتایج حاصله ایجاد نکرده و فقط زمان انجام محاسبات را بیشتر می کند.

## بحث و نتایج

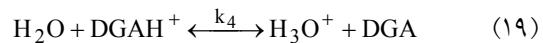
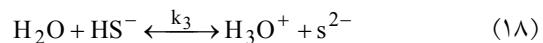
شبیه سازی فرآیند جذب سولفید هیدروژن توسط محلول دی گلایکول آمین برای یک واحد صنعتی که شرایط عملیاتی آن در جدول (۱) ارائه گردیده، به انجام رسیده است. داده های تجربی استفاده شده برای ارزیابی مدل، از واحد شیرین سازی پالایشگاه تهران، آن هم در شرایط عملیاتی پایا گرفته شده اند. از داده های مذکور برای ارزیابی نتایج شبیه سازی فرآیند برای حالت دینامیکی و پایا استفاده شده است.

نتایج شبیه سازی شامل پارامترهای عملیاتی نظیر دمای فازها، غلاظت اجزاء در فازها و دبی فازها می باشند که در هر نقطه از برج محاسبه شده اند. شکل (۳) کسر مولی جزء سولفید هیدروژن در فاز گاز و در طول برج جذب را نشان می دهد. با توجه به اینکه حلالیت سولفید هیدروژن در محلول دی گلایکول آمین زیاد می باشد، قسمت عمدۀ آن در ابتدای ستون، جذب شده و در نتیجه، غلاظت سولفید هیدروژن موجود در فاز گاز در مراحل بالای برج به صفر می رسد.

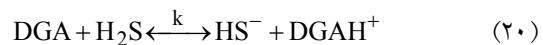
استفاده از معادله Wilke-Lee محاسبه گردیده است [18]. برای محاسبه هیدرودینامیک فرآیند نیز از روابط انتقال جرم، سطح مشترک، ماندگی مایع و افت فشار ارائه شده در مقالات استفاده شده است [19,21].

## سینتیک و واکنش های شیمیایی

در این تحقیق برای ارزیابی مدل ارائه شده، از فرآیند جذب سولفید هیدروژن توسط محلول دی گلایکول آمین استفاده شده است. حلالیت گاز سولفید هیدروژن در محلول دی گلایکول آمین بالا بوده و سریع جذب می شود. واکنش های تعادلی این سامانه که در تووده مایع اتفاق می افتد، به صورت زیر می باشند:



واکنش مهمی که در فیلم مایع اتفاق می افتد:



واکنش شیمیایی سولفید هیدروژن با آمین آنی و تعادلی است. ثوابت سرعت تابع دما می باشند که مقادیر آنها در مقالات ارائه شده اند [20].

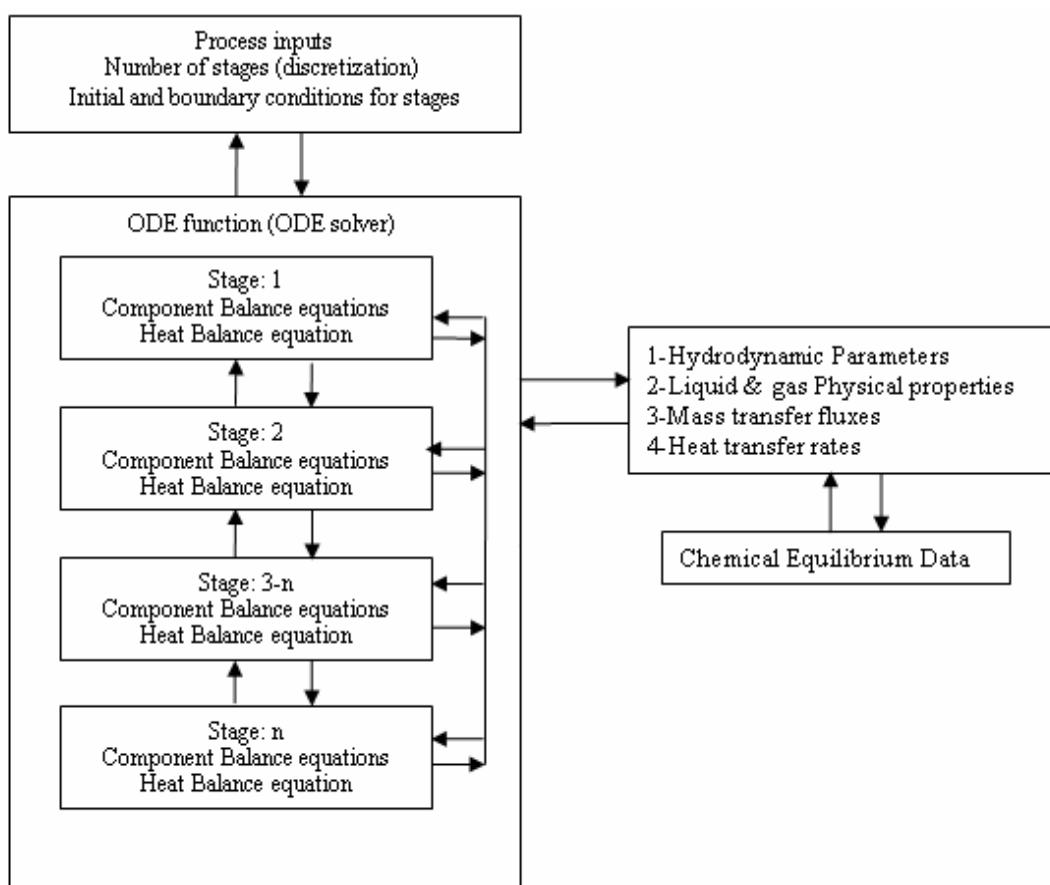
## روش حل معادلات مدل

معادلات حاصل از مدل سازی فرآیند شامل مجموعه ای از معادلات دیفرانسیل معمولی و پاره ای می باشد. برای هر مرحله از ستون، معادلات نوشته می شوند.

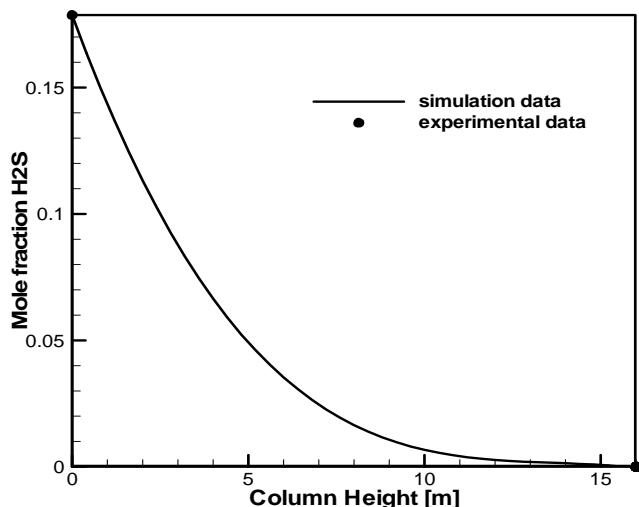
مذلمسازی پویا و غیرتعادلی جانب سوپرگید هیدروژن ...

جدول شماره ۱ شرایط عملیاتی برج جذب

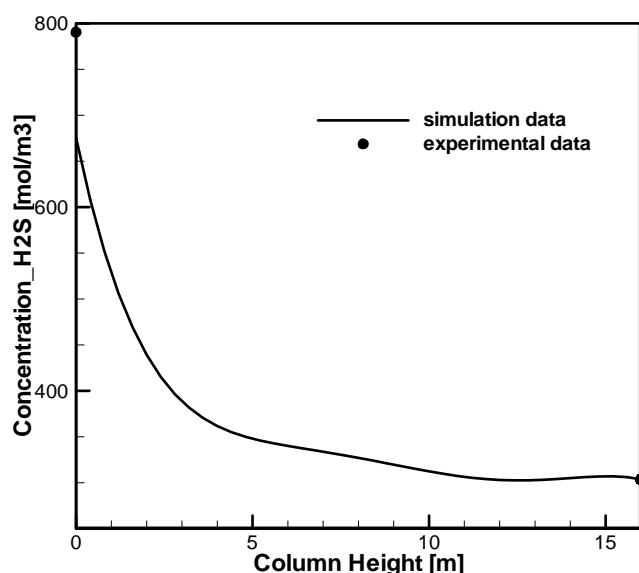
Parameter	Value
Inlet gas flow rate, G(mol/s)	159.07
Inlet liquid flow rate, L(m <sup>3</sup> /s)	0.00826
Inlet gas temperature, T <sub>G</sub> (K)	303.5
Inlet liquid temperature, T <sub>L</sub> (K)	303.5
Inlet gas composition, y <sub>i</sub> (mol %)	H <sub>2</sub> S:17.8, CO <sub>2</sub> :0.7, CH <sub>4</sub> :80.7, SO <sub>2</sub> :0.8
Inlet liquid loading ,H <sub>2</sub> S (mol/mol amine)	0.114
Outlet gas composition, H <sub>2</sub> S (ppm)	20
Amine molarity, (mol/m <sup>3</sup> )	2670.6684
Absorber pressure, P(bar)	3.94



شکل ۲ الگوریتم حل دستگاه معادلات فرآیند



شکل ۳ پروفایل کسر مولی سولفید هیدروژن در فاز گاز در طول برج جذب



شکل ۴ پروفایل غلظت سولفید هیدروژن در فاز مایع در طول برج جذب

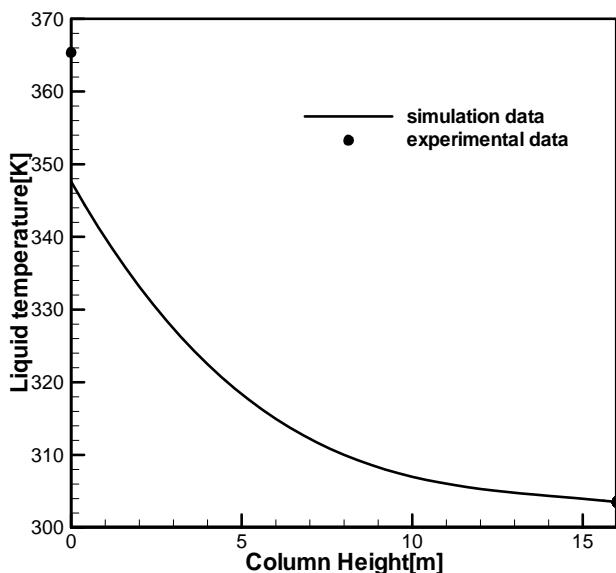
بیشتر می باشد.

شکل های (۵) و (۶) به ترتیب گرادیان دمایی فاز مایع و فاز گاز را نشان می دهند. فرآیند جذب یک فرآیند گرمایزا بوده و به علت جذب زیاد در پایین برج، تغییرات دمایی فاز مایع در بیشتر می باشد. دمایی فاز گاز در ابتدای ورود گاز به برج به علت تماس آن با فاز مایع افزایش یافته و سپس به علت پائین بودن

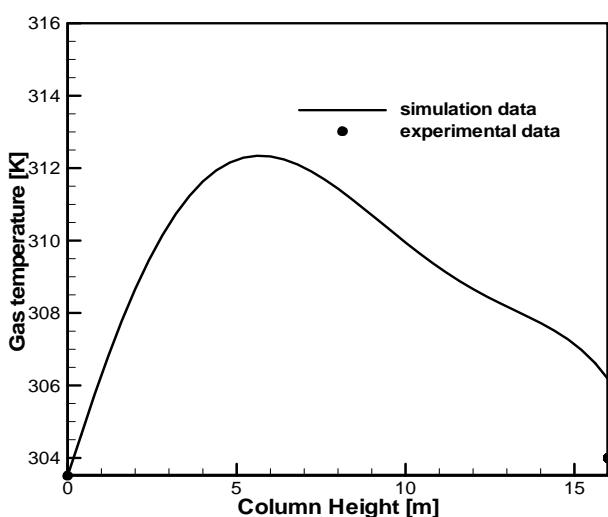
شکل (۴) غلظت سولفید هیدروژن موجود در فاز مایع را در طول برج نشان می دهد. همان طور که در شکل نشان داده شده است مقدار سولفید هیدروژن جذب شده به وسیله محلول در طول برج از بالا به پایین افزایش پیدا می کند. به علت جذب بیشتر سولفید هیدروژن در پایین برج، تغییرات غلظت محلول در پایین برج در قیاس با تغییرات آن در بالای برج

در ابتدای ورود به برج افزایش یافته و در ادامه با حرکت گاز به سمت بالا، درجه حرارت آن در مقیاس با مایع بیشتر می‌شود که نتیجه رخداد اخیر، تغییر مسیر انتقال حرارت از سمت فاز گاز به سمت فاز مایع می‌باشد کاهش درجه حرارت فاز گاز می‌گردد.

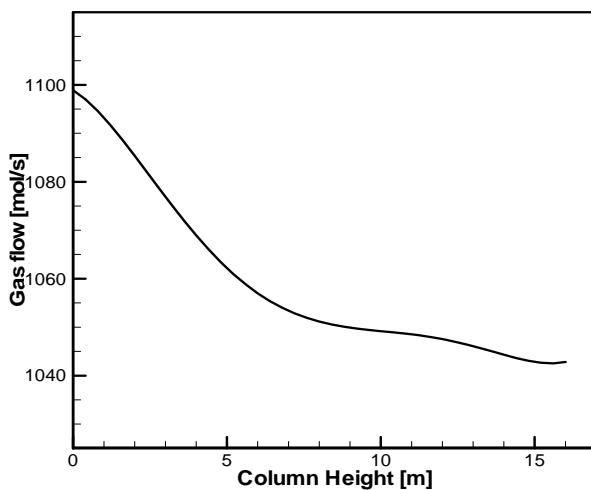
دماهای مایع در قسمت‌های بالای برج، سیر نزولی پیدا می‌کند. با توجه به این‌که درجه حرارت مایع در برخورد با گاز ورودی به دلیل جذب سولفید هیدروژن افزایش می‌یابد و نیز به دلیل اختلاف درجه حرارت بین دو فاز، گرما از فاز مایع به فاز گاز منتقل می‌شود. به علت پایین بودن ظرفیت حرارتی فاز گاز، دمای گاز



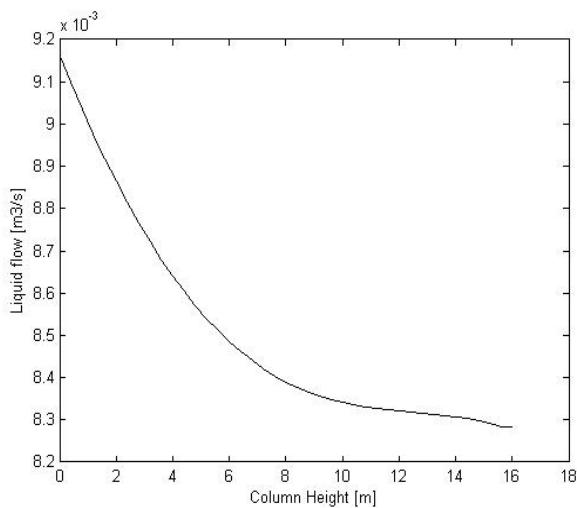
شکل ۵ پروفایل دمای فاز مایع در طول برج جذب



شکل ۶ پروفایل دمای فاز گاز در طول برج جذب



شکل ۷ پروفایل دبی جریان گاز در طول برج جذب



شکل ۸ پروفایل دبی فاز مایع در طول برج جذب

نتایج حاصل از شبیه سازی فرآیند در جدول (۲) ارائه گردیده است. برای مقایسه نتایج، از خطای نسبی استفاده شده است.

مدلسازی و شبیه سازی فرآیند جذب حاضر دینامیکی بوده و می توان تغییرات پارامترهای فرآیند را به صورت تابعی از زمان در طول برج به دست آورد. در شکل (۹) غلظت سولفید هیدروژن در مراحل مختلف به صورت تابع زمان داده شده است. مشاهده می شود که پس از مدتی، غلظت مراحل مختلف به حالت پایا رسیده است. در شکل زیر المان ۴۰ بیانگر پایین برج و المان ۱ بیانگر بالای برج می باشد.

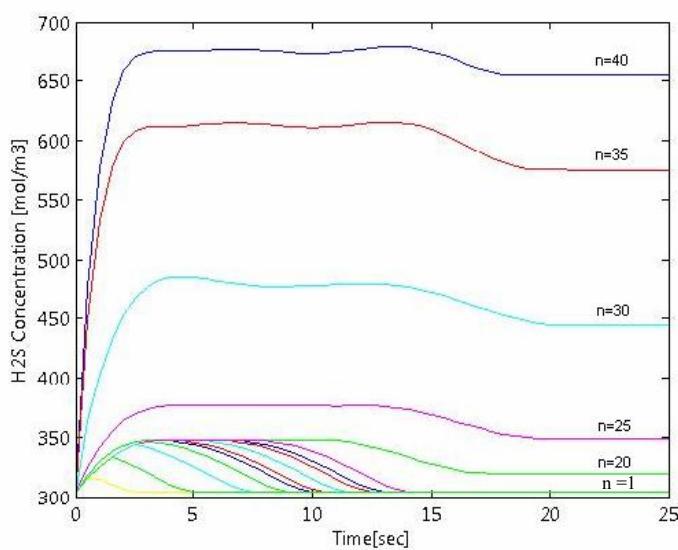
شکل (۷) تغییرات دبی جریان فاز گاز را در طول ستون نشان می دهد. به علت جذب زیاد سولفید هیدروژن در پایین برج، تغییرات دبی در قسمت مذکور شدیدتر می باشد، این در حالی است که در بالای برج، تغییرات دبی برج عملاً ناچیز می باشد.

جذب سولفید هیدروژن در فاز مایع باعث می شود که در طول برج دبی محلول در حال حرکت به سمت پایین افزایش یابد (البته این افزایش دبی ناچیز می باشد). در شکل (۸) این مسئله به وضوح دیده می شود. تغییرات جریان در پایین برج به علت جذب بیشتر سولفید هیدروژن خیلی بیشتر می باشد.

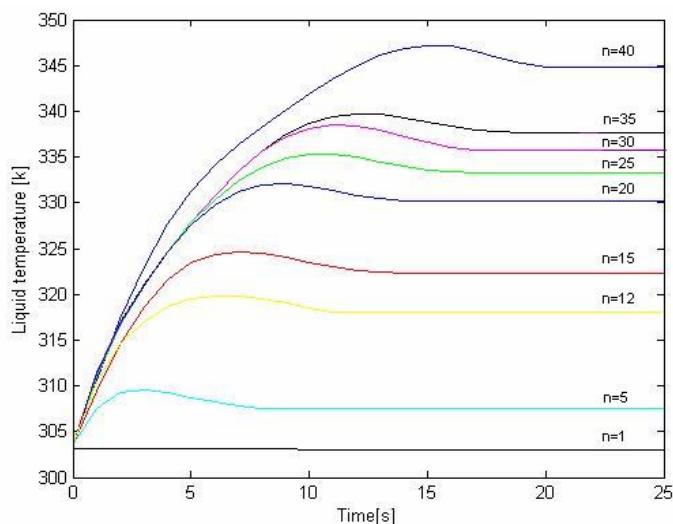
مدلسازی پویا و غیرتعادلی جاذب سولفید هیدروژن ...

جدول ۲ مقادیر پارامترهای حاصل از شبیه سازی فرآیند

Process data	Simulation results	RD%
$T_G [K]$	306.1603	0.71
$G \left[ \frac{mol}{s} \right]$	135.92	2.83
$L \left[ \frac{m^3}{s} \right]$	0.0092	3.15
$T_L [K]$	347.383	4.92
$C_{H_2S} \left[ \frac{mol}{m^3} \right]$	675.311	15.58
$y_{H_2S} [\text{ppm}]$	23	15



شکل ۹ تغییرات غلظت سولفید هیدروژن با زمان در المان‌های مختلف برج



شکل ۱۰ تغییرات دمای محلول با زمان در المان‌های مختلف برج

فرآیندهای جذب واکنش دار مخصوصاً برای جذب واکنش دار سولفید هیدروژن در محلول دی گلایکول آمین ارائه گردید. در معادلات انتقال جرم، برهمکنش واکنش شیمیائی با نفوذ در ناحیه فیلمی در نظر گرفته شد. معادلات حاصل از مدلسازی فرآیند حاضر در محیط نرم افزار Matlab به طور همزمان حل گردید. مقایسه نتایج شبیه سازی با داده های تجربی نشان داد که مدل به خوبی رفتار فرآیند را در شرایط عملیاتی داده شده در حالات پایا و پویا پیش بینی می نماید. نتایج نشان داد که بیشتر پدیده های انتقال در پائین برج صورت گرفته و در نتیجه، تغییرات قابل ملاحظه ای را در متغیرهای پائین برج ایجاد کرده است. این نتایج می توانند در طراحی و تعیین طول بهینه برج مورد استفاده قرار گیرد.

منحنی ها نشان می دهند که به علت واکنش سولفید هیدروژن با محلول، سولفید هیدروژن در محلول مصرف می شود، اما باعث جذب بیشتر آن در المان های اولیه شده و در المان های بعدی (بالای برج) مقدار سولفید هیدروژن در فاز گاز ناچیز مانده و مقدار جذب نیز پائین می آید. شکل (۱۰) تغییرات دمای فاز مایع را با زمان در المان های مختلف برج نشان می دهد. مشاهده می شود که در المان های پائین برج تغییرات دمای محلول نسبت به المان های بالای برج خیلی بیشتر می باشد. این تغییرات به خاطر این است که بیشترین جذب در پائین برج انجام می گیرد و در نتیجه، گرمای جذب باعث می شود که تغییرات دمای مایع در پائین برج خیلی بیشتر از دیگر نواحی آن باشد.

### نتیجه گیری

در این تحقیق یک مدل پویای غیر تعادلی برای

### مراجع

1. Kohl, A. L., Nieisen, R. B. Gas purification, 5th Edition, Gulf publishing company, Houston, (1997).
2. Chakma, A. Formulated solvents: New opportunities for energy efficient separation of acid gases, Energy Sources. Vol 21, pp 51-62, (1999).
3. Taylor, R., Krishna, R., Multicomponent Mass Transfer. (WILRY, New York), (1993).
4. Kucka, L. Muller, I, Kenig, E.Y, Gorak, A., On the modelling and simulation of sour gas absorption by aqueous amine solutions. *Journal of Chemical Engineering Science*, Vol 58, pp 3571-3578, (2004).
5. Seader J.D. The rate-based approach for modeling staged separations, *Journal of Chemical Engineering progress*, Vol 85, pp 41-49, (1989).
6. Henley, E. J., Seader, J. D., Equilibrium stage separation operations in chemical Engineering, WILY, New York, (1981).
7. Higler, A., Taylor, R. and Krishna, R., Modeling of a reactive separation process using a Nonequilibrium stage model, *Journal of Computers & Chemical Engineering*, Vol 22, pp 111-118, (1998).
8. Kenig, E. Y., Kucka, L., Gorak, A., Rigorous Modeling of Reactive Absorption Processes, *Journal of Chemical Engineering &Technology*, Vol 26 2003, pp 631-646.

9. Asprion N., Nonequilibrium rate-basedd simulation of reactive systems: simulation Model, Heat transfer, and influence of film discretization, *Journal of Industrial & Engineering Chemistry Research*, Vol 45, pp 2054-2069, (2006).
10. Brettschneider, O., Thiele, R., Faber, R., Thielert, H. and Wozny, G., Experimental Investigation and simulation of the chemical absorptionina packed column for the system NH<sub>3</sub>-CO<sub>2</sub>H<sub>2</sub>S-NaOH-H<sub>2</sub>O, *Journal of separation and purification Technology*, Vol 39, pp 139-159, (2004).
11. Baghli, N.A.At., Pruess, S.A., Yesavage, V.F., Selim, M.S., A rate based model for the design Of gas absorbers for the removal of CO<sub>2</sub> and H<sub>2</sub>S using aqueous solutions of MEA and DEA. *Journal of Fluid phase Equilibria*, Vol 185, pp 31-43, (2002).
12. Kloeker, M., Kenig, E. Y., Hoffmann, A., Kreis, P. and Gorak, A., Rate-based Modelling and simulation of reactive separations in gas/ vapor liquid systems, *Journal of Chemical Engineering and Process*, Vol 44, pp 617-629, (2005).
13. Mandal, B. P., Guha, M., Biswas, A. K., Bandyopadhyay, S. S., Removal of CO<sub>2</sub> by Absorption in aqueous MDEA/MEA and AMP/MEA solutions, *Journal of Chemical Engineering Science*, Vol, 56, pp 621-6224, (2002).
14. Ghaemi, A., Shahhosseini, Sh., Ghannadi, M., Nonequilibrium Modeling of Reactive Absorption Processes, *Chemical Engineering Communications*, 196, pp 1076-1089, (2009).
15. Kenig, E. Y., Butzmann, F., Kucka, L. and Gorak, A., Comparison of numerical and Analytical solutions of a multicomponent reaction-mass-transfer problem in terms, *Journal of Chemical Engineering Science* Vol 55, pp 1483-1496, (2000).
16. Kenig, E.Y., Schneider, R. and Gorak, A., Multicomponent unsteady-state film model: a general analytical solution to the linearized diffusion-reaction problem, *Chemical Engineering Journal*, 83, pp 85–94, (2001).
17. Kent, R. L., Eisenberg, B, Better Data for Amine Treating, *Hydrocarbon process*, Vol 55(2) pp 87-90, (1976).
18. Reid, R.C., Prausnitz, J. M., and Poling, B, E., *The properties of gases and liquids*, (New York: McGraw-hill), (1987).
19. Pherocki, R. Moniuk, W., Plate efficiency in the process of absorption with chemical reaction-experiments and example calculations, *Journal of Chemical Engineering*, Vol 39, pp 37-46, (1988).
20. Dingman, J. C., Jackson, J. L., Moore, T. F., Branson, J. A., Equilibrium Data for H<sub>2</sub>S-CO<sub>2</sub>-Diglycolamine Agent-Water System. *Proceedings of the 2nd International Conference 62nd Annual Gas Processors*, Association Convention, San Francisco, CA. pp 14-16, March (1983).
21. Kister, H. Z., *Distillation design*, 1th, (Mc Graw-Hill), (1992).