

مدل سازی و شبیه سازی حذف SO_2 از گاز دودکش با استفاده از تماس دهنده های غشایی

مجید مهدویان^۱، صدیقه نوعی^۲

m.mahdavian@qiet.ac.ir

۱- استادیار دانشکده مهندسی شیمی، دانشگاه فناوریهای نوین قوچان

۲- کارشناسی ارشد مهندسی شیمی، دانشگاه فناوریهای نوین قوچان

چکیده

در این مقاله مدل سازی و شبیه سازی جذب شیمیایی SO_2 از جریان گازی خروجی از دودکش ها با استفاده از تماس دهنده غشایی الیاف توخالی مورد بررسی قرار گرفته است. یک مدل ریاضی دو بعدی به منظور بررسی انتقال SO_2 از میان غشاء و جذب آن توسط آب بعنوان حلال جاذب ارائه شده است و سپس معادلات مدل با استفاده از نرم افزار comsol multiphysics بصورت عددی حل شده اند. نتایج حاصل از مدل با نتایج آزمایشگاهی مقایسه و اعتبارسنجی و نشان داده شد که توافق خوبی بین آنها وجود دارد. با توجه به نتایج شبیه سازی راندمان حذف SO_2 با استفاده از تماس دهنده غشایی بیشتر از ۸۰٪ است و در مقادیر بالاتر دبی مایع (بیشتر از 24ml/min) حذف SO_2 تقریباً بصورت کامل انجام خواهد شد. همچنین در این پروژه تاثیر پارامترهای مختلف از جمله دبی گاز و مایع، غلظت، تعداد و طول الیاف و نسبت تخلخل به انحناء بر راندمان فرآیند مورد بررسی قرار گرفته است.

واژگان کلیدی: مدل سازی، شبیه سازی، تماس دهنده غشایی، جذب، SO_2 .

تاریخ دریافت مقاله : ۹۶/۰۶/۱۸

تاریخ پذیرش مقاله : ۹۷/۰۱/۰۲

۱- مقدمه

مشکلات ناشی از گسترش روند مصرف سوخت‌های فسیلی، صدمات جبران ناپذیری بر زندگی انسان‌ها وارد کرده است. امروزه بسیاری از کشتی‌های باربری و نفتکش دنیا از سوخت‌های فسیلی استفاده می‌کنند. اما استفاده از این نوع سوخت‌های فسیلی باعث تولید میزان بسیار زیادی سولفور در سال می‌شود. هر کشتی باربری بزرگ در سال ۵ هزار تن سولفور تولید می‌کند که معادل میزان ایجاد شده از این ماده توسط ۵۰ میلیون دستگاه خودرو است.

در کشور ما مقدار فروش سوخت به کشتی‌ها (بانکرینگ) سالانه حدود ۳ میلیون تن است که بخش عمده آن نفت کوره از سوخت‌های با ایجاد آلاینده‌های فراوان است. در مجموع حدود ۱۳ درصد نفت کوره کشور و حدود ۳ درصد نفت و گاز کشور در بخش کشتیرانی مصرف می‌گردد [۱]. علیرغم مطالعات انجام شده در زمینه کنترل آلاینده‌های گازی و تلاش به منظور بهینه‌سازی عملکرد و کاهش آلاینده‌ها در موتورهای دیزلی [۲] باز هم شاهد انتشار گازهای آلاینده ناشی از مصرف اینگونه سوخت‌ها هستیم که این موضوع اهمیت مطالعه جهت حذف این آلاینده‌ها را روشن می‌سازد.

SO₂ یکی از عوامل مهم تشکیل باران اسیدی است، در هوا به تدریج اکسید شده و تبدیل به SO₃ می‌شود و در ترکیب با بخار آب، اسید سولفوریک را بوجود می‌آورد. همچنین گزارش شده است که این آلاینده در واکنش‌های تخریب‌آزن در استراتوسفر نیز شرکت می‌نماید، لذا حذف SO₂ از جریان‌های گازی یکی از الزامات مهم زیست محیطی و اقتصادی است [۳].

در حال حاضر تکنولوژی‌های مختلفی به منظور سولفورزدایی وجود دارند. جذب گاز با استفاده از یک تماس‌دهنده غشایی گاز-مایع یک فرآیند جداسازی به منظور حذف آلاینده‌های گاز است. به منظور حذف SO₂ از حجم زیادی از جریان گاز، در صورت استفاده از روش‌های متداول مانند اسکرابرها، برج‌های پرشده و ... نیاز به مساحت سطح مقطع زیادی است تا از پدیده طغیان جلوگیری نموده و نهایتاً میزان جذب بیشتری مورد نیاز خواهد بود.

علاوه بر آن روش‌های متداول جداسازی دارای مشکلات عملیاتی از قبیل نیاز به فضای بیشتر، هزینه سرمایه‌گذاری بالا، خوردگی، کانال‌سازی مایع، طغیان و کف هستند. در

این میان تماس‌دهنده‌های غشایی به عنوان یک تکنولوژی جدید برای جذب گازهای سمی ارائه شده‌اند و برای آلاینده‌هایی از قبیل CO، CO₂، SO₂، H₂S، NH₃، VOC و بخارات جیوه مورد استفاده قرار گرفته‌اند [4]. در حالت کلی تماس‌دهنده غشایی شامل یک غشاء میکرومتخلخل است که فازهای گاز و مایع را از یکدیگر جدا می‌سازد. انتقال جرم از طریق نفوذ از درون جریان گاز به داخل غشاء و سپس جذب درون مایع انجام می‌شود.

این روش نسبت به سایر روش‌های متداول دارای مزایایی از قبیل انعطاف پذیری عملیاتی، جریان مستقل گاز و مایع، نسبت سطح به حجم بالاتر، فشردگی ابعاد و افزایش مقیاس راحت‌تر است [۴]. یک تماس‌دهنده غشایی الیاف توخالی وسیله‌ایست که انتقال جرم گاز/مایع و یا مایع/مایع را بدون پراکندگی یک فاز در دیگری فراهم می‌نماید. این روش در کاربردهای متفاوتی از جمله متالورژی، حفاظت محیط زیست و صنایع غذایی کاربرد دارد [۵].

بررسی جذب گازهای متفاوت با استفاده از حلال‌های مختلف در غشاهای آبریز توسط پژوهشگران انجام شده است و این نتیجه حاصل شده است که شدت انتقال جرم خیلی بیشتر از موارد مشابه در برج‌های پرشده است. همچنین نتایج تحقیقات نشان می‌دهد با وجود اینکه غشاء مقاومت اضافی را در مقابل انتقال جرم ایجاد می‌نماید ولی مساحت سطح بیشتر در این نوع از مدول‌ها باعث افزایش انتقال جرم می‌شود [۶]. یکی از انواع تماس‌دهنده‌های غشایی، غشاء الیاف توخالی با جریان مخالف گاز و مایع در دو سمت غشاء و سطح مشترک سیال/سیال در لبه منافذ غشاء است. در این روش انتقال جرم از طریق نفوذ از سطح مشترک انجام می‌شود و لذا غشاء نقش انتخابی را ندارد. نیروی محرکه گرادیان غلظت مبتنی بر انحلال‌پذیری است [۷].

تا به حال برخی مطالعات مدل‌سازی و آزمایشگاهی در زمینه جداسازی گاز با استفاده از تماس‌دهنده‌های غشایی انجام شده است. لی و همکارانش [8]، به بررسی جذب SO₂ در تماس‌دهنده‌های غشایی الیاف توخالی پرداختند. آنها ضریب انتقال جرم و راندمان حذف در جریان‌های متفاوت از گاز و مایع و نیز جاذبه‌های مختلف را مورد بررسی قرار دادند، همچنین تاثیر پارامترهای عملیاتی مختلف بر راندمان را ارزیابی نمودند.

بر فرآیند جذب پرداختند. در پروژه حاضر جذب SO_2 از هوا با استفاده از آب در یک تماس‌دهنده غشایی الیاف توخالی گاز- مایع مورد بررسی قرار گرفته است. یک مدل دوبعدی به منظور بررسی این فرآیند ارائه و به منظور حل معادلات از روش‌های CFD استفاده شده است. به منظور تعیین توزیع سرعت در پوسته (مسیر جریان گاز) از مدل هاپل استفاده شده است [۱۲، ۱۳]. هدف نهایی شبیه‌سازی تعیین غلظت SO_2 در تماس‌دهنده غشایی و بررسی تاثیر پارامترهای عملیاتی مختلف بر راندمان فرآیند بوده و در نهایت مدل ارائه شده با نتایج و اطلاعات آزمایشگاهی اعتباردهی شده است.

۲- مواد و روش‌ها

مطابق با شرایط آزمایشگاهی درصد SO_2 در جریان گازی ورودی یک درصد حجمی در نظر گرفته شده است. جریان گازی مخلوطی از هوا و SO_2 است که از درون پوسته عبور داده شده و مایع جاذب (آب) بصورت متقابل به داخل لوله وارد می‌شود. فشار گاز و دما مطابق با شرایط آزمایشگاهی 1 atm و 25°C در نظر گرفته شده است. نتایج مدل ارائه شده با نتایج آزمایشگاهی جذب SO_2 از هوا توسط آب در یک تماس‌دهنده غشایی پلی پروپیلنی الیاف توخالی مقایسه و اعتبار دهی شده است. خصوصیات غشاء الیاف توخالی مورد استفاده و شرایط عملیاتی در جدول (۱) ارائه شده است.

جدول (۱) خصوصیات مدول تماس‌دهنده غشایی الیاف توخالی و شرایط آزمایشگاهی [۱۴، ۱۵].

Parameter	Value
Membrane module	Celgard X20
Fiber inner radius(μm)	120
Fiber outer radius(μm)	150
Fiber porosity(%)	40
Fiber tortuosity	2.5
Module inner radius(cm)	0.4572
Fiber length(cm)	18
Number of fibers	75
Pore diameter(μm)	0.03
Gas inlet pressure(atm)	1
Temperature(K)	298
Gas flow rate(ml/min)	200
Liquid flow rate(ml/min)	12

جی اون و همکارانش [۹]، جذب SO_2 در تماس‌دهنده های غشایی متخلخل و آبگریز در دوجنس $PVDF^1$ و $PTFE^2$ و خواص سطح مشترک غشاء و مایع را بررسی و رابطه مربوط به فشار شکست میانی را ارائه نمودند. نتایج نشان داد که فشار شکست میانی در غشاء PTFE بیشتر از غشاء PVDF است. پارک و همکارانش [۱۰]، جذب SO_2 از گازهای خروجی دودکش در یک تماس‌دهنده غشایی الیاف توخالی گاز- مایع را مورد بررسی قرار دادند. غشاء الیاف توخالی آبگریز با تخلخل کم از پلی‌وینیلیدن فلوراید و N-متیل-۲-پیرولیدین توسط فرآیند وارونگی فاز تر جت- خشک ساخته شد و تاثیر متغیرهای عملیاتی گوناگون از قبیل سرعت جریان گاز و مایع، غلظت گاز SO_2 در جریان ورودی، غلظت و ماهیت جاذب روی بازده حذف بررسی شد.

لوئیس و همکارانش [۷] به مدلسازی جذب در یک تماس‌دهنده غشایی الیاف توخالی پرداختند و تاثیر نوع ماده جاذب در ترشدگی غشاء را بعنوان یک پارامتر مهم با استفاده از ثابت هنری بررسی نمودند. آنها همچنین عدم تشابه بین ماده جاذب و جزء نفوذ کننده و افزایش ثابت هنری را بر سرعت مورد نیاز فاز مایع، افت فشار در تماس‌دهنده غشایی و هزینه عملیاتی را ارزیابی نمودند. کشاورز و همکارانش [۶] فرآیند جذب در تماس‌دهنده‌های غشایی بر اساس فرضیه توزیع نامنظم الیاف غشا را مدلسازی و مدل ارائه شده را با مدل پلاگ و مدل هاپل مقایسه نمودند و عملکرد غشاء در حضور تاثیرات مجراسازی در پوسته را با استفاده از مدل ریاضی ارائه شده بررسی نمودند.

نتایج حاصل از این تحقیق نشان داد مدل ارائه شده برای بررسی عملکرد غشاهای تجاری و دو مدل ساده تر پلاگ و هاپل برای بررسی رفتار تماس‌دهنده های غشایی آزمایشگاهی مناسب است. رضوی و همکارانش [۱۱] روشی را برای شبیه‌سازی جذب CO_2 با استفاده از محلول آمونیاک در یک تماس‌دهنده غشایی ارائه نمودند که نتایج حاصل نشان دادن مدل ارائه شده برای بررسی حذف CO_2 از مخلوط گازی در تماس‌دهنده های غشایی مناسب است. حسین زاده و همکارانش [۱۲] مدل ریاضی برای جذب هم زمان CO_2 و SO_2 با استفاده از محلول متیل اتیل آنیلین در یک تماس‌دهنده غشایی ارائه نمودند و سپس با استفاده از مدل ارائه شده به بررسی توزیع غلظت و تاثیر پارامترهای عملیاتی

² Poly Tetra Fluoro Ethylene

¹ Poly Vinylidene Fluoride

۳- مدل انتقال جرم

به منظور بررسی انتقال SO₂ از میان غشاء، یک مدل ریاضی دوبعدی ارائه گردید. در ارائه این مدل فرض شده که غشاء غیر تر باشد بطوریکه منافذ غشاء از گاز پر شده و نحوه تماس دو فاز گاز و مایع در داخل غشاء بصورت متقابل است. جریان گاز در داخل پوسته و جریان مایع جاذب در داخل لوله است. در توسعه مدل، نفوذ شعاعی و محوری در داخل لوله، در میان غشاء و در امتداد پوسته در نظر گرفته شده است.

۳-۱- معادلات مدل

ابتدا موازنه جرم دو بعدی و پایا برای سه بخش لوله، غشاء و پوسته انجام شد. جاذب در (Z=0) به داخل لوله و مخلوط گاز در (Z=L) به داخل پوسته تزریق شده است. SO₂ از طریق نفوذ از بالک گازی به داخل غشاء و سپس جذب در حلال مایع زدوده می‌شود. در توسعه مدل فرضیات زیر در نظر گرفته شده است:

(a) شرایط پایا و همدم (ایزوترمال)

(b) پروفیل سرعت کاملاً توسعه یافته برای مایع

(c) مدل هاپل برای بدست آوردن توزیع سرعت در سمت پوسته استفاده شده است.

(d) رفتار گاز ایده ال فرض شده است.

(e) قانون هنری برای سطح مشترک گاز-مایع قابل کاربرد است.

(f) جریان آرام برای گاز و مایع در غشاء

(g) شرایط غیر تر (Non-wetted) که در آن مخلوط گاز منافذ غشاء را پر نمی‌نماید.

(h) هیچ گونه واکنشی در سمت پوسته (فاز گاز) رخ نمی‌دهد. این مطلب بایستی در نظر گرفته شود که با توجه به جنس پروپیلنی غشاء و خاصیت آگریزی آن، جاذب موردنظر نمی‌تواند به داخل منافذ غشاء نفوذ نماید. لذا فرض عدم تر شدگی غشاء در شبیه‌سازی مورد استفاده قرار گرفت.

۳-۱-۱- معادلات سمت لوله

معادله پیوستگی در یک سیستم جذبی شیمیایی با استفاده از رابطه (۱) بیان می‌شود:

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

به ترتیب غلظت، فلاکس نفوذی، سرعت واکنش جزء i، C_i (mol/m³), J_i (mol/m².s), R_i (mol/m³.s), V (m/s) و $(s)t$

سرعت و زمان هستند. برای تعیین فلاکس نفوذی جزء i، قانون فیک استفاده می‌شود. معادله پیوستگی پایا برای جذب SO₂ در سمت لوله در رابطه (۲) بیان شده است:

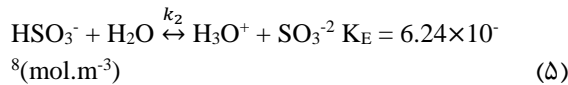
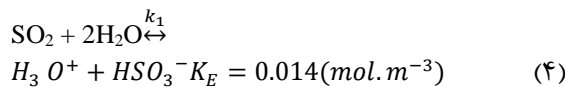
$$D_{i-tube} \left[\frac{\partial^2 C_{i-tube}}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C_{i-tube}}{\partial r} + \frac{\partial^2 C_{i-tube}}{\partial z^2} \right] = V_{z-tube} \frac{\partial C_{i-tube}}{\partial z} - R_i \quad (2)$$

r و z به ترتیب اشاره به مختصات شعاعی و محوری دارد. توزیع سرعت در سمت لوله بصورت جریان آرام نیوتنی در نظر گرفته شده است:

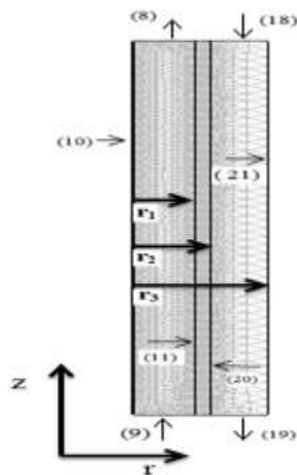
$$V_{z-tube} = 2\bar{V}_{tube} \left[1 - \left(\frac{r}{r_1} \right)^2 \right] \quad (3)$$

\bar{V}_{tube} (m/s) سرعت متوسط در سمت لوله و r_1 شعاع داخلی الیاف است.

سه بخش لوله، غشاء و پوسته، نحوه مش بندی و شرایط مرزی (مطابق با روابط ۲۱، ۲۰، ۱۹، ۱۸، ۱۱، ۱۰، ۹، ۸) در شکل (۱) نشان داده شده است. با توجه به انجام واکنش شیمیایی بین SO₂ و آب، ترم R_i که مربوط به واکنش شیمیایی است با توجه به معادله سرعت جاگذاری می‌شود. روابط مربوط به واکنش گاز SO₂ و آب در روابط (۷-۴) بیان شده است:



در صورتی که pH کمتر از ۵-۴ باشد، می‌توان از تشکیل SO₃-2 صرف‌نظر کرد. با توجه فرض pH کمتر از ۵-۴، معادله سرعت واکنش با استفاده از رابطه (۶) بیان می‌شود [۱۶].



شکل (۱) زیر دامنه های مدل و نحوه مش بندی. سه زیردامنه به ترتیب از چپ به راست عبارتند از لوله (مسیر جاذب)، غشاء و پوسته (مسیر گاز)

آزاد هاپل نیز استفاده نمود. در این مدل جریان سیال در سمت پوسته، بصورت سیالی در نظر گرفته می شود که اطراف لیف را احاطه کرده است و هیچ برهم کنشی بین الیاف وجود ندارد [6,7,12,13] که در این مقاله نیز برای بیان توزیع سرعت در پوسته در محدوده شعاعی (۲۶۳,۹۶۴۵) - ۱۵۰ میکرومتر) از این مدل استفاده شده است. لذا با استفاده از این مدل معادله سرعت بصورت رابطه (۱۵) خواهد بود:

$$V_{z-shell} = 2 \bar{V}_{shell} \left[1 - \left(\frac{r_2}{r_3} \right)^2 \right] \times \left[\frac{(r/r_3)^2 - (r_2/r_3)^2 + 2 \ln(r_2/r)}{3 + (r_2/r_3)^4 - 4(r_2/r_3)^2 + 4 \ln(r_2/r_3)} \right] \quad (15)$$

\bar{V}_{shell} و r_3 به ترتیب سرعت متوسط جریان مایع در پوسته و شعاع موثر پوسته می باشد که r_3 از معادله (۱۶) پیروی می کند:

$$r_3 = r_2 \left(\frac{1}{1-\varepsilon} \right)^{1/2} \quad (16)$$

در رابطه (۱۶) ε جزء حجمی فضای خالی (درصد تخلخل) است که با استفاده از رابطه (۱۷) تعیین می گردد:

$$1 - \varepsilon = \frac{N r_2^2}{\Phi^2} \quad (17)$$

در رابطه (۱۷) N تعداد الیاف و Φ شعاع داخلی مدول است. شرایط مرزی در سمت پوسته با استفاده از روابط (۲۱-۱۸) بیان شده است:

$$Z = L, C_{SO_2-shell} = C_{SO_2-initial} \quad (18)$$

$$Z = 0, N_{SO_2-shell} = C_{SO_2} V_{z-shell} \quad (19)$$

$$r = r_2, C_{SO_2-shell} = C_{SO_2-membrane} \quad (20)$$

$$r = r_3, \frac{\partial C_{SO_2-shell}}{\partial r} = 0 \quad (21)$$

۳-۱-۳- معادلات بخش غشاء

معادله پیوستگی حالت پایا برای انتقال SO_2 به داخل غشاء، با توجه به این مطلب که انتقال جرم در این بخش با استفاده از نفوذ است بصورت نفوذ است به صورت رابطه (۲۲) بیان می شود:

$$D_{i-mem} \left[\frac{\partial^2 C_{i-mem}}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial C_{i-mem}}{\partial r} + \frac{\partial^2 C_{i-mem}}{\partial z^2} \right] = 0 \quad (22)$$

ضریب نفوذ غشاء در رابطه (۲۳) بیان شده است:

$$D_{SO_2-mem} = D_{SO_2-bulk} \left(\frac{\varepsilon}{\tau} \right) \quad (23)$$

در رابطه (۲۳) ε تخلخل و τ انحنا غشاء است و D_{SO_2-bulk} ضریب نفوذ SO_2 در فاز گاز است. شرایط مرزی در بخش غشاء در روابط (۲۴-۲۶) بیان شده است:

$$r = r_1, C_{SO_2-membrane} = \frac{C_{SO_2-tube}}{H} \quad (24)$$

$$-R_{SO_2} = k_1 [C_{SO_2}] - \frac{k_1}{K_E} [C_{HSO_3^-}]^2 \quad (6)$$

با توجه به رابطه (۶)، واکنش وابسته به غلظت HSO_3^- است لذا نفوذ این جزء نیز در فاز مایع باید در نظر گرفته شود. معادله سرعت واکنش برای جزء HSO_3^- مطابق رابطه (۷) است:

$$-R_{HSO_3^-} = -k_1 + \frac{k_1}{K_E} [C_{HSO_3^-}]^2 \quad (7)$$

لذا معادله کلی انتقال جرم در سمت لوله بایستی برای این جزء نیز نوشته شود. شرایط مرزی در نظر گرفته شده برای معادلات در سمت لوله در روابط (۱۱-۸) بیان شده است:

$$Z = L, N_{SO_2} = C_{SO_2} V_{z-tube}, N_{HSO_3^-} = C_{HSO_3^-} V_{z-tube} \quad (8)$$

$$Z = 0, C_{SO_2-tube} = 0, C_{HSO_3^-} = 0 \quad (9)$$

شرط شار جابجایی بیان می دارد تمام جرم عبوری از میان این مرز بصورت جابجایی است و هرگونه شار نفوذی از میان مرز مورد نظر صفر است.

$$r = 0, \frac{\partial C_{SO_2-tube}}{\partial r} = 0, \frac{\partial C_{HSO_3^-} = 0}{\partial r} \quad (10)$$

$$r = r_1, C_{SO_2-tube} = C_{SO_2-mem} \times H, \frac{\partial C_{HSO_3^-} = 0}{\partial r} \quad (11)$$

۳-۱-۲- معادلات سمت پوسته

معادله پیوستگی حالت پایا برای SO_2 در سمت پوسته غشاء، در مختصات استوانه ای با توجه به قانون نفوذ فیک در رابطه (۱۲) بیان شده است:

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

با توجه به معادله (۱۲) به منظور تعیین غلظت در سمت پوسته بایستی معادله ممنوم و معادله پیوستگی به صورت هم زمان حل شوند. توزیع سرعت در بخش پوسته با استفاده از حل معادله ممنوم (معادلات ناویراستوک) بدست می آید (معادلات ۱۳ و ۱۴).

$$-\nabla \cdot \eta (\nabla V_{z-shell} + (\nabla V_{z-shell})^T) + \rho (V_{z-shell} \cdot \nabla) V_{z-shell} + \nabla P = F \quad (13)$$

$$V_{z-shell} = 0 \quad (14)$$

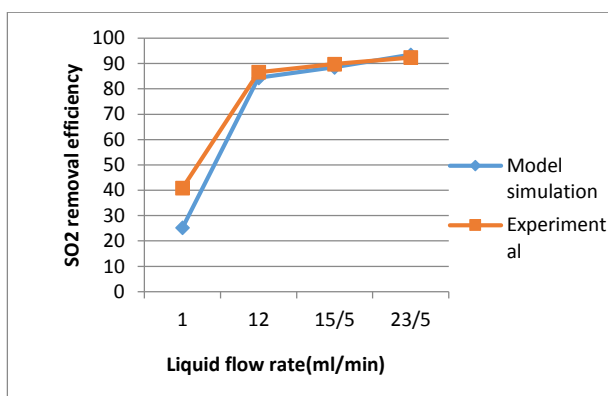
در رابطه فوق ρ, η و V, P به ترتیب فشار، سرعت، دانسیته سیال و ویسکوزیته دینامیکی می باشند. معادله ناویر استوک جریان سیالات ویسکوز را از طریق موازنه ممنوم برای هر یک از اجزا بیان می نماید که در این معادلات فرض بر این است که ویسکوزیته و دانسیته سیال ثابت هستند [16]. برای بیان توزیع سرعت در سمت پوسته می توان از مدل سطح

$$C_{outlet} = \frac{\int_{r=0}^{r=r_1} \int_{z=0}^{z=L} c(r) dA}{\int_{r=0}^{r=r_1} \int_{z=0}^{z=L} dA} \quad \text{at } Z = L \quad (28)$$

در رابطه (۲۸)، $A(m^2)$ مساحت سطح مقطع لوله است. به منظور بررسی صحت مدل ارائه شده نتایج حاصل از شبیه سازی با نتایج آزمایشگاهی موجود [14] برای جداسازی SO_2 از هوا با استفاده از تماس دهنده غشایی مقایسه گردید، شکل (۲). همانگونه که در شکل (۲) مشاهده می گردد بین نتایج حاصل از شبیه سازی و نتایج آزمایشگاهی تطابق خوبی برقرار است. در بررسی تاثیر دبی مایع در راندمان حذف همانطور که در شکل (۲) مشاهده می شود با افزایش دبی مایع شدت انتقال جرم افزایش و راندمان حذف SO_2 نیز افزایش خواهد یافت بطوریکه با افزایش دبی مایع از ۱ به ۲۳٫۵ میلی لیتر بر دقیقه، راندمان حذف SO_2 از ۲۵ به ۹۳ درصد افزایش خواهد یافت. در دبی های کمتر از مایع راندمان حذف کمتر است و با افزایش دبی مایع شیب تغییرات راندمان بیشتر از دبی های بالاتر است چراکه در دبی های کمتر مقدار جاذب موجود برای جذب کمتر است و لذا انتقال به داخل فاز مایع توسط مقاومت فیلم مایع محدود می شود. حال آنکه در دبی های بالاتر این مقاومت کمتر شده و جذب SO_2 با سهولت بیشتری انجام می گیرد لذا شدت انتقال SO_2 به داخل مایع جاذب افزایش می یابد.

۲-۴- توزیع غلظت در تماس دهنده غشایی

شکل (۳) توزیع غلظت SO_2 در سمت پوسته، غشاء و لوله را نشان می دهد. مخلوط گازی شامل SO_2 و هوا در $(z=L)$ ، مرزی که در آن غلظت SO_2 بیشترین مقدار است



شکل (۲) مقایسه نتایج آزمایشگاهی [11,12] با نتایج حاصل از شبیه سازی، $Q_g=200(ml/min)$ ، غلظت $SO_2=1\%vol$ ، $N=75$ ، $L=0.18(m)$

$$r = r_2, C_{SO_2-membrane} = C_{SO_2-tube} \quad (25)$$

$$Z = 0, Z = L \quad \nabla C_{SO_2-membrane} = 0 \quad (26)$$

۲-۳- حل عددی معادلات مدل

معادلات مربوط به پوسته، لوله و غشاء با در نظر گرفتن شرایط مرزی مربوطه، با استفاده از نرم افزار comsol multi physics حل شد. این نرم افزار از روش جزء محدود (FEM) برای حل عددی معادلات استفاده می نماید. آنالیز جزء محدود با استفاده از حل کننده عددی UMFPACK (version 4,2) با مش بندی مناسب و کنترل خطا ترکیب می شود. کاربرد بودن، توانایی و دقت این روش برای تماس دهنده های غشایی اثبات شده است [۱۶]. شکل (۱) بخشی از مش بندی مورد استفاده برای بررسی رفتار انتقال گاز در غشاء را نشان می دهد. در قسمت مش بندی نرم افزار comsol، این نرم افزار مش های مثلثی که از نظر اندازه ایزوتروپ هستند ایجاد می نماید و سپس با توجه به مقیاس بندی تعداد زیادی عنصر تشکیل خواهد شد. با توجه به اختلاف زیاد بین طول و قطر خارجی غشاء از فاکتور مقیاس ۹۰ در جهت z استفاده شده است. این نرم افزار بعد از مش بندی بطور خودکار هندسه سیستم را مقیاس بندی نموده که در نتیجه آن مش بندی غیرایزوتروپ با تعداد ۳۴۵۶ عنصر ایجاد شده است. در شبیه سازی انجام شده استقلال توزیع غلظت از مش بندی از طریق مش بندی های متفاوت صورت گرفت و این نتیجه حاصل شد که در مش بندی و تعداد المان های انتخاب شده، تغییری در غلظت SO_2 خروجی در فاز گاز ایجاد نمی گردد.

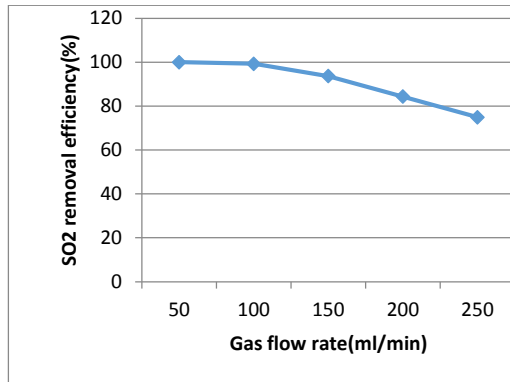
۴- بحث و نتایج

۴-۱- اعتباردهی به مدل

راندمان حذف SO_2 با استفاده از رابطه (۲۷) قابل محاسبه است:

$$Removal\ efficiency\ \% = 100 \frac{(\theta C)_{inlet} - (\theta C)_{outlet}}{(\theta C)_{inlet}} = 100 \left(1 - \frac{C_{outlet}}{C_{inlet}} \right) \quad (27)$$

پارامتر $C_{inlet} (mol/m^3)$ غلظت SO_2 در جریان ورودی و $C_{outlet} (mol/m^3)$ غلظت SO_2 در جریان گاز خروجی از غشاء، $\theta (m^3/s)$ دبی حجمی گاز است. به دلیل ناچیز بودن تغییرات غلظت SO_2 در ورودی و خروجی، می توان دبی را ثابت در نظر گرفت [۱۵].



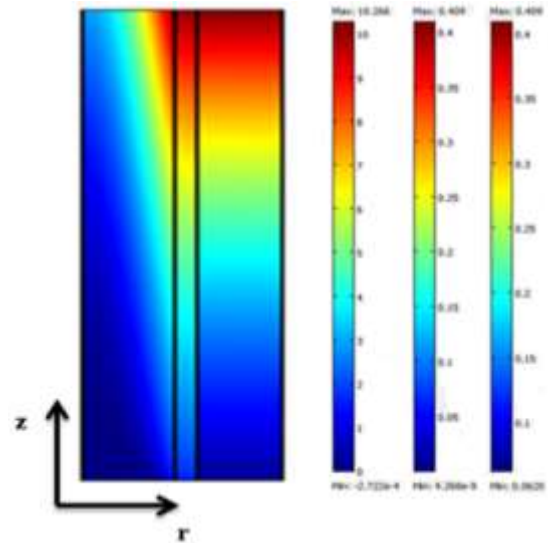
شکل (۴) تاثیر شدت جریان گاز بر راندمان حذف SO₂،
 $L=0.18(m)$ ، $N=75$ ، $SO_2=1\%vol$ ، غلظت، $Q_L=12(ml/min)$

۴-۴- تاثیر غلظت SO₂ بر راندمان حذف

شکل (۵) نمودار تغییر راندمان حذف SO₂ را با تغییر غلظت در جریان ورودی در دبی ثابت گاز و مایع نشان می‌دهد. با افزایش غلظت SO₂ در فاز گاز، میزان جاذب مورد نیاز به منظور جذب افزایش خواهد یافت لذا با افزایش غلظت SO₂ در دبی ثابت از مایع، راندمان حذف کاهش خواهد یافت.

۴-۵- تاثیر طول و تعداد الیاف بر راندمان حذف SO₂

شکل (۶-الف) نمودار تغییرات راندمان حذف SO₂ را در طول های متفاوت از الیاف نشان می‌دهد. همانطور که در شکل (۶-الف) نشان داده شده است با افزایش طول الیاف راندمان فرآیند نیز افزایش می‌یابد. با افزایش طول الیاف، زمان و سطح تماس بین دو فاز گاز و مایع افزایش می‌یابد لذا میزان انتقال جرم و جذب SO₂ به داخل فاز مایع نیز افزایش خواهد یافت. همانطور که در شکل (۶-ب) نشان داده شده است با افزایش طول الیاف از ۰٫۱ به ۰٫۵ متر، راندمان حذف از ۷۰ به ۹۸ درصد افزایش می‌یابد. شکل (۶-ب) نمودار تغییرات راندمان حذف SO₂ را بر حسب تعداد الیاف نشان می‌دهد. تاثیر تعداد الیاف بر راندمان حذف SO₂ با توجه به تاثیر این پارامتر بر مساحت موثر انتقال جرم و نیز سرعت مایع جاذب مورد بررسی قرار گرفته است. با افزایش تعداد الیاف، با توجه به رابطه (مساحت لوله=تعداد الیاف*مساحت سطح مقطع عرضی لیف) سطح محاسبه شده برای قسمت لوله افزایش می‌یابد و در نتیجه سطح موجود برای انتقال جرم افزایش خواهد یافت، نیز با افزایش سطح لوله با توجه به رابطه (سرعت سیال در لوله=مساحت سطح مقطع عرضی لوله/دبی مایع جاذب) سرعت حرکت



شکل (۳) توزیع غلظت SO₂ در تماس‌دهنده غشایی
 $SO_2=1\%vol$ ، غلظت، $Q_L=12(ml/min)$ ، $Q_g=200(ml/min)$
 $L=0.18(m)$ ، $N=75$

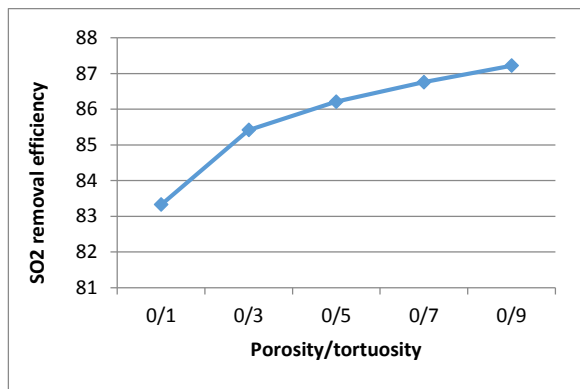
حلال مایع (آب) در $(z=0)$ ، مرزی که در آن غلظت گاز SO₂ در فاز مایع صفر در نظر گرفته شده است، جریان می‌یابد. زمانیکه مخلوط گاز در داخل پوسته در جریان است به دلیل اختلاف غلظت (نیروی محرکه)، جزء گازی مورد نظر (SO₂) به سمت غشاء انتقال می‌یابد و سپس با استفاده از جاذب در حال حرکت در داخل لوله جذب شده و هم زمان واکنش شیمیایی بین آب و SO₂ انجام می‌شود. مکانیسم انتقال جرم در لوله و پوسته جابجایی و نفوذ است. در جهت z مکانیسم غالب در انتقال جابجایی است زیرا سیال در جهت z دارای سرعت است در حالیکه در جهت r به دلیل ناچیز بودن سرعت مکانیزم غالب در انتقال جرم نفوذ است. مکانیسم انتقال جرم در بخش غشاء بصورت نفوذ بوده و سپس جزء مورد نظر توسط جاذب در حال حرکت در سمت لوله جذب می‌شود.

۴-۳- تاثیر دبی گاز بر راندمان حذف

با توجه به شکل (۴) همانطور که انتظار می‌رود افزایش شدت جریان گاز در تماس‌دهنده غشایی باعث کاهش زمان ماند در تماس‌دهنده و در نتیجه کاهش زمان تماس بین دو فاز گاز و مایع و کاهش میزان جذب SO₂ خواهد شد و در نتیجه راندمان فرآیند کاهش خواهد یافت. با افزایش دبی گاز از ۵۰ به ۲۵۰ میلی لیتر بر دقیقه، راندمان حذف از ۹۹٫۹۹ به ۷۵ درصد کاهش می‌یابد، همچنین شدت کاهش راندمان حذف SO₂ با افزایش دبی گاز، در دبی های بالاتر بیشتر است.

۴-۶- بررسی اثر تغییر نسبت تخلخل به انحنا بر راندمان حذف

با توجه به رابطه (۲۳)، نسبت تخلخل به انحنا بر ضریب نفوذ از میان غشاء و نهایتاً انتقال جرم کلی تاثیر گذار است. به منظور بررسی تاثیر این پارامتر بر راندمان، تغییر نسبت تخلخل به انحنا بین ۰,۱ و ۰,۹ مورد ارزیابی قرار گرفت (شکل (۷)). مقدار این نسبت با توجه به مقدار تخلخل بین ۰,۱۵ و ۰,۷۵ و انحنا بین ۲ و ۳ که در غشاهای متخلخل متداول وجود دارد ارائه شده است [۱۶]. همانطور که در شکل (۷) مشاهده می‌گردد با تغییر این نسبت از ۰,۱ به ۰,۹ مقدار راندمان از ۸۳ به ۸۷ درصد افزایش می‌یابد.

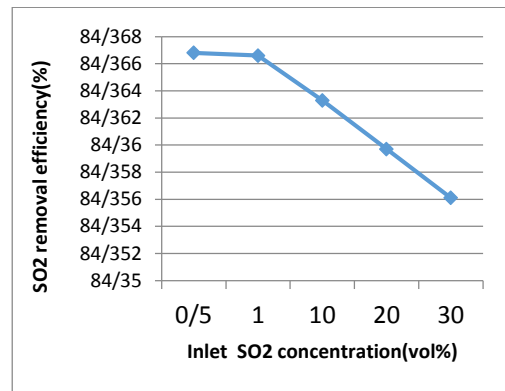


شکل (۷) تاثیر نسبت تخلخل به انحنا بر راندمان حذف SO_2 . $Q_g = 200$ (ml/min), $Q_L = 12$ (ml/min), $N = 75$, $L = 0.18$ (m), $1\% vol = SO_2$ غلظت.

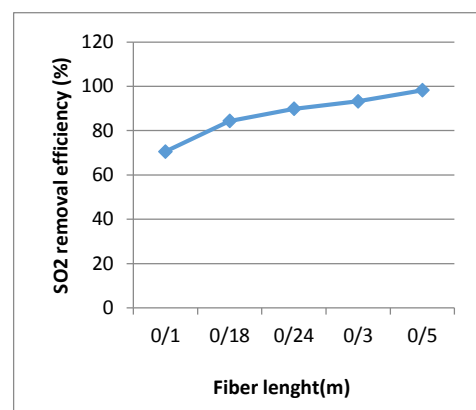
۵- نتیجه گیری

در این پروژه جذب شیمیایی SO_2 توسط آب در یک تماس دهنده غشایی الیاف توخالی مورد بررسی قرار گرفت. یک مدل ریاضی دوبعدی به منظور بررسی جذب SO_2 در تماس دهنده ارائه شد. مدل براساس حل هم زمان معادلات برای جزء گازی در سه بخش، پوسته، غشاء و لوله تماس دهنده غشایی ارائه گردید. روش FEM برای حل هم زمان معادلات دیفرانسیل انتقال جرم استفاده و نتایج حاصل از شبیه‌سازی با نتایج آزمایشگاهی برای جذب SO_2 در آب اعتباردهی شد. نتایج شبیه‌سازی نشان داد که با افزایش دبی گاز، کاهش دبی مایع و افزایش غلظت SO_2 در جریان ورودی، راندمان حذف گاز آلاینده کاهش می‌یابد و با افزایش تعداد و طول الیاف درصد جداسازی SO_2 افزایش می‌یابد. نتایج حاصل از این پروژه نشان داد که مدل انتقال جرم ارائه شده می‌تواند به منظور پیش بینی عملکرد

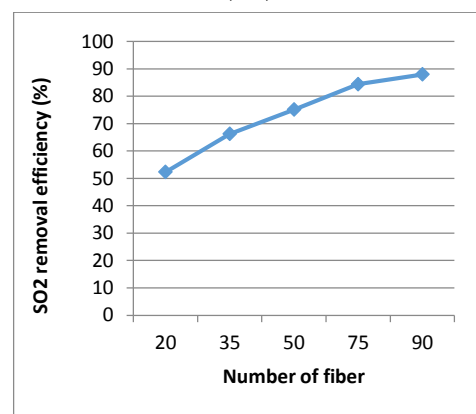
مایع در داخل آن کاهش و زمان تماس دو فاز افزایش و در نتیجه راندمان حذف SO_2 افزایش خواهد یافت. همانطور که در شکل (۶-ب) مشخص است با افزایش تعداد الیاف از ۲۰ به ۹۰ راندمان حذف SO_2 از ۵۲٪ به ۸۸٪ افزایش می‌یابد.



شکل (۵) تاثیر غلظت SO_2 بر راندمان حذف. $Q_g = 200$ (ml/min), $Q_L = 12$ (ml/min), $N = 75$, $L = 0.18$ (m).



(الف)



(ب)

شکل (۶) (الف) تاثیر طول الیاف بر راندمان حذف SO_2 و (ب) تاثیر تعداد الیاف بر راندمان حذف SO_2 . $Q_g = 200$ (ml/min), $Q_L = 12$ (ml/min), $1\% vol = SO_2$ غلظت.

- [12] Hosseinzadeh, A., Hosseinzadeh, M., Vatani, A., Mohammadi, T., "Mathematical Modeling for the Simultaneous Absorption of CO₂ and SO₂ using MEA in Hollow Fiber Membrane Contactors", *Chemical Engineering and Processing*, Vol.111, pp.35-45, 2017.
- [13] Sohrabi, M.R., Marjani, A., Moradi, S., Davallo, M., and Shirazian, S., "Mathematical Modeling and Numerical Simulation of CO₂ Transport Through Hollow-Fiber Membranes", *Applied Mathematical Modelling*, Vol.35, No.45, pp.174-188, 2017.
- [14] Karoor, S., and Sirkar K.K., "Gas Absorption Studies in Microporous Hollow Fiber Membrane Modules", *Ind. Eng. Chem. Res*, Vol.32, pp.674-684, 1993.
- [15] Keshavarz, P., Fathikalajahi, J., Ayatollahi, S., "Mass Transfer Analysis and Simulation of a Hollow Fiber Gas-Liquid Membrane Contactor", *Iranian Journal of Science & Technology, Transaction B*, Vol.32, No.B6, pp.585-599, 2008.
- [16] Rezakazemi, M., Niazi, M., Mirfendereski, Z., Shirazian, M., Mohammadi, S., and Pak, T., "CFD Simulation of Natural Gas Sweetening in a Gas-Liquid Hollow-Fiber Membrane Contactor", *Chemical Engineering Journal*, Vol.168, pp.1217-1226, 2011.
- تماس‌دهنده های غشایی برای جداسازی سایر گازها و نیز سایر سیستم های واکنشی و غیرواکنشی استفاده شود. همچنین مدل انتقال جرم ارائه شده ابزاری را برای طراحی فرآیندهای جذب چندجزئی گازها فراهم می‌نماید.
- ۶- مراجع**
- [۱] آمارنامه مصرف فرآورده های نفتی انرژی زا ۹۲- شرکت ملی پخش فرآورده های نفتی ایران.
- [۲] عباس زارع نژاد اشکذری، اثر تغییرات در شاخصه های سامانه پاشش سوخت به منظور بهینه سازی عملکرد آلاینده‌ها در موتورهای دیزلی تزریق مستقیم، فصل نامه علمی-پژوهشی دریافنون، سال سوم، شماره ۱، بهار و تابستان ۱۳۹۵.
- [3] Jeon, H., Ahn, H., Song, I., Jeong, H.-K., Lee, Y., and Lee, H.-K., "Absorption of Sulfur Dioxide by Porous Hydrophobic Membrane Contactor", *Desalination*, Vol.234, pp.252-260, 2008.
- [4] Park, H.H., Deshwal, B.R., Kim, I.W., and Lee, H.K.; "Absorption of SO₂ from Flue Gas using PVDF Hollow Fiber Membranes in a Gas-Liquid Contactor", *Journal of Membrane Science*, Vol.319, pp.29-37, 2008.
- [5] Xue, J.q., Li, J.x., Lu, X., Mao, W.b., Wang, Y.j., and Wu, M., "Absorption of Sulfur Dioxide using Membrane and Enhancement of Desorption with Ultrasound", *Transactions Of Nonferrous Metals Society Of China*, Vol.20, pp.930-934, 2010.
- [6] Keshavarz, P., Ayatollahi, S., Fathikalajahi, J., "Mathematical Modeling of Gas-Liquid Membrane Contactors using Random Distribution of Fibers", *J.Membr.Sci*, Vol.352, pp.98-108, 2008.
- [7] Luis, P., Garea, A., and Irabien, A., "Modelling of a Hollow Fibre Ceramic Contactor for SO₂ Absorption" *Separation and Purification Technology*, Vol.72, pp.174-179, 2010.
- [8] Lee, H. K., Jo, H. D., Choi, W.K., Park, H.H., Lim, C.W., and Lee, Y.T., "Absorption of SO₂ in Hollow Fiber Membrane Contactors using Various Aqueous Absorbents" , *Desalination*, Vol.200, pp.604-605, 2006.
- [9] H. Jeon, H. Ahn, I. Song, H.K. Jeong, Y. Lee, H.K. Lee;" Absorption of Sulfur Dioxide by Porous Hydrophobic Membrane Contactor" *Desalination*, Vol. 234, 252-260(2008)
- [10] Park, H. H., Deshwal, B. R., Kim, I.W., and Lee, H.K., "Absorption of SO₂ from Flue Gas using PVDF Hollow Fiber Membranes in a Gas-Liquid Contactor" ,*J. Membr. Sci*3, Vol.19, pp.29-37, 2008.
- [11] Razavi, S. M. R ., Rezakazemi, M., Albadarin, A. B., Shirazian, S., "Simulation of CO₂ Absorption by Solution of Ammonium Ionic Liquid in Hollow-Fiber Contactors", *Chemical Engineering and Processing*, Vol.108, pp.27-34, 2016.