دانشگاه آزاد اسلامی

واحد تهران جنوب

دانشکده تحصیلات تکمیلی

گروه مهندسی شیمی گرایش طراحی فرآیندهای صنایع نفت

پروژه کارشناسی ارشد

عنوان:

مدل سازی حلالیت گاز CO_2 در مخلوط حلال های آمین دار

استاد راهنما:

نگارش:

فهرست مطالب

عنوان	صفحه
چکیده	
فصل اول : کلیات	
۱-۱-پیش درآمد	۱
فصل دوم: بررسی کارهای انجام شده و مدل های مرسوم	
۲-۱- مروری بر کارهای قبلی	۲
۲-۲- مدل **Chen**	٦
۲-۲-۱- ترمودینامیک مدل	٦
۲-۳- مدل **Li-Mather**	۱۱
۲-۳-۱- ترمودینامیک مدل	۱۲
۲-۳-۲- بهینه سازی پارامترهای برهمکنش	۱٦
۲-٤- ثوابت و داده های تعادلی و دانسیته مواد	۱۷
فصل سوم: آمین ها و مدل های ضرایب فعالیت	
۳-۱- جداسازی گاز ترش به وسیله آمین ها	۱۹
۳-۲- آمین ها و معیار انتخاب	۱۹
۳-۲-۱- مونو اتانل آمین (**MEA**)	۲۰
۳-۲-۲- دی اتانل آمین (**DEA**)	۲۱
۳-۲-۳- دی ایزو پروپانل آمین(**DIPA**)	۲۱

فهرست مطالب

۳-۲-٤- متیل دی اتانل آمین (MDEA) ۲۲

۳-۲-٥- تری اتانل آمین (TEA) ۲۲

۳-۳- محاسبه تعادل فازی- شیمیایی ۲۲

۳-۳-۱- تعادلات شیمیایی و فازی ۲۳

۳-٤- مدلهای ضرایب فعالیت سیستم های غیر الکترولیت ۲٥

۳-٤-۱- مدل NRTL ۲٥

۳-٤-۲- مدل UNIQUAC ۲٦

۳-٤-۳- مدل UNIQUAC-NRF ۲۷

۳-٥- مدلهای ضرایب فعالیت سیستم های الکترولیت ۲۸

۳-٥-۱- مدل Electrolyte-NRTL ۲۸

۳-٥-۲- مدل Electrolyte-NRTL-NRF ۳۰

۳-٥-۳- مدل Electrolyte-UNIQUAC-NRF ۳۲

فصل چهارم : اصلاح مدل (UNIQUAC-NRF)برای الکانل آمین ها

٤-۱- مدل UNIQUAC-NRF برای سیستم های آمین + گاز اسیدی + آب ۳٤

٤-۲- مدل UNIQUAC-NRFبرای سیستم های چند جزیی ٤۰

٤-۳- مشخصات جفت یون ٤۱

فهرست مطالب

٤-٣-١- تشکیل جفت یونها ٤١

٤-٣-٢- غلظت جفت یون ها ٤٢

٤-٣-٣- محاسبه ضرایب فعالیت یونها ٤٣

٤-٤- محاسبه کلی ضرایب فعالیت یونها و مولکولها ٤٥

٤-٤-١- بخش برد کوتاه ٤٥

٤-٤-٢- بخش برد بلند ٤٦

٤-٤-٣- معادله کلی محاسبه ضرایب فعالیت ٤٨

فصل پنجم : حل مدل UNIQUAC-NRF برای مخلوط حلال های آمین دار

٥-١- سیستم های دو جزیی (**Binary System**) ٤٩

٥-٢- سیستم های سه جزیی ٥٠

٥-٢-١- سیستم سه جزیی $MDEA-H_2O-CO_2$ ٥١

٥-٢-٢- سیستم سه جزیی $\mathbf{MEA-H_2O-CO_2}$ ٥٥

٥-٣- سیستم چهارجزیی ٦١

٥-٣-١- سیستم چهار جزیی $MDEA-MEA-H_2O-CO_2$ ٦١

٥-٤- بحث و نتایج ٦٦

٥-٥- نمودارها ٧١

فهرست مطالب

۵-٦- نتیجه گیری ۸۰

پیوست ها ۸۱

منابع ۹۱

فهرست نام ها ۹٤

چکیده انگلیسی

فهرست جداول

عنوان	صفحه
جدول ۲-۱- وابستگی دانسیته حلال های خالص به دما	۱۷
جدول ۲-۲- وابستگی دمایی ثابت دی الکتریک حلال های خالص	۱۷
جدول۲-۳- وابستگی دمایی ثابت تعادلی واکنش های مورد نظر	۱۸
جدول ۲-۴- وابستگی دمایی ثابت هنری دی اکسید کربن	۱۸
جدول ۵-۱- پارمترهای دوجزیی مدل UNIQUAC-NRF برای سیستمهای دوجزیی	۵۰
جدول ۵-۲- پارامترهای r و q حلال ها	۵۰
جدول ۵-۳- پارامترهای برازش شده مدل UNIQUAC-NRF برای سیستم $MDEA-H_2O-CO_2$	۵۵
جدول ۵-۴- پارامترهای برازش شده مدل UNIQUAC-NRF برای سیستم سه تایی$MEA-H_2O-CO_2$	٦۰
جدول ۵-۵- پارامترهای برهمکنش مدل UNIQUAC-NRF برای سیستم $MDEA-MEA-H_2O-CO_2$	٦۵

فهرست نمودارها

عنوان	صفحه
۵-۵-۱- حلالیت گاز CO_2 در ۲ کیلو مول MEA و دمای ۴۰ درجه سانتیگراد	۷۱
۵-۵-۲- حلالیت گاز CO_2 در ۲ کیلو مول MEA و دمای ۸۰ درجه سانتیگراد	۷۱
۵-۵-۳- حلالیت گاز CO_2 در ۲ کیلو مول MDEA و دمای ۴۰ درجه سانتیگراد	۷۲
۵-۵-۴- حلالیت گاز CO_2 در ۲۴ درصد وزنی MDEA و ۶ درصد وزنی MEA و دمای ۴۰ درجه سانتیگراد	۷۳
۵-۵-۵- حلالیت گاز CO_2 در ۲۴ درصد وزنی MDEA و ۶ درصد وزنی MEA و دمای ۶۰درجه سانتیگراد	۷۳
۵-۵-۶- حلالیت گاز CO_2 در ۲۴ درصد وزنی MDEA و ۶ درصد وزنی MEA و دمای ۸۰ درجه سانتیگراد	۷٤
۵-۵-۷- حلالیت گاز CO_2 در ۲۴ درصد وزنی MDEA و ۶ درصد وزنی MEA و دمای ۱۰۰ درجه سانتیگراد	۷٤
۵-۵-۸- حلالیت گاز CO_2 در ۱۲ درصد وزنی MDEA و ۱۸ درصد وزنی MEA و دمای ۴۰ درجه سانتیگراد	۷۵
۵-۵-۹- حلالیت گاز CO_2 در ۱۲ درصد وزنی MDEA و ۱۸ درصد وزنی MEA و دمای ۶۰ درجه سانتیگراد	۷۵
۵-۵-۱۰- حلالیت گاز CO_2 در ۱۲ درصد وزنی MDEA و ۱۸ درصد وزنی MEA و دمای ۸۰ درجه سانتیگراد	۷٦

فهرست نمودارها

۵-۵-۱۱- حلالیت گاز CO_2 در ۱۲ درصد وزنی MDEA و ۱۸ درصد وزنی MEA و دمای ۱۰۰ درجه سانتیگراد ۷۶

۵-۵-۱۲- حلالیت گاز CO_2 در ۲ کیلو مول MDEA و ۲ کیلو مول MEA و دمای ۴۰ درجه سانتیگراد ۷۷

۵-۵-۱۳- حلالیت گاز CO_2 در ۲ کیلو مول MDEA و ۲ کیلو مول MEA و دمای ۸۰ درجه سانتیگراد ۷۷

۵-۵-۱۴- اثر دما بر حلالیت گاز CO_2 در ۲۴ درصد وزنی MDEA و ۶ درصد وزنی MEA ۷۸

۵-۵-۱۵- اثر غلظت بر حلالیت گاز CO_2 در دمای ۴۰ درجه سانتیگراد ۷۸

۵-۵-۱۶- اثر دما بر حلالیت گاز CO_2 در ۱۲ درصد وزنی MDEA و ۱۸ درصد وزنی MEA ۷۹

۵-۵-۱۷- اثر غلظت بر حلالیت گاز CO_2 در دمای ۸۰ درجه سانتیگراد ۷۹

چکیده

جداسازی گاز دی اکسید کربن از فرآیندهای اصلی در پالایش گـاز مـی باشـد. بـرای جـدا کردن گاز دی اکسیدی کربن از جریان گاز طبیعی اغلب از روش جذب به همراه واکـنش شـیمیایی توسط حلال های آلکانل آمین استفاده می شود. در این تحقیق مـدل ترمودینـامیکی حلالیـت گـاز دی اکسید کربن در مخلوط آبی از MDEA , MEA مورد مطالعه قرار گرفته است و پارامترهای مدل ارائه شده است.در این مدل برای محاسبه نیروهای برد کوتاه از مدل UNIQUAC-NRF به صورت یک مدل غیر الکترولیتی و برای برای بیان بخش برد بلند از مـدل پیتـزر – دبـای – هوکـل استفاده شده است. این مدل در دماهای مختلـف توسـعه داده شـد و پارامترهـای بـرهمکنش بـرای سیستم مخلوط $MDEA-MEA-H_2O-CO_2$ بدست آمد.

نتایج حاصل از این مدل در مقایسه با مدل Li-Mather از دقت خوب برخوردار می باشد.