



## شبیه‌سازی ستون جذب سولفید هیدروژن با استفاده از محلول کاستیک و جایگزینی پرکن‌های مختلف جهت کاهش مصرف کاستیک

احمد سعیدی مجد، امیر عباس ایزدپناه\*

گروه مهندسی شیمی، دانشکده مهندسی نفت، گاز و پتروشیمی، دانشگاه خلیج فارس، بوشهر، 7516913817، ایران  
دریافت: 1397/5/12 پذیرش: 1398/2/15

### چکیده

در این مطالعه جذب واکنشی انتخابی به وسیله جذب شیمیایی در محلول آبی کاستیک در نظر گرفته شده است. این مطالعه بر پایه شبیه‌سازی با اسپن پلاس نسخه 9 می‌باشد. برای تعیین بازدهی جداسازی برای شرایط عملیاتی متفاوت در شبیه‌سازی، از مدل مبتنی بر نرخ استفاده شده است. مدل NRTL الکترولیتی برای توصیف رفتار غیر ایده‌آل در فاز مایع استفاده شده است، در حالی که معادله حالت سووا ردلیش-کوانگ برای فاز بخار استفاده شده است. نتایج شبیه‌سازی کارایی بالایی کاستیک برای حذف سولفید هیدروژن را نشان می‌دهد. نتایج شبیه‌سازی نشان می‌دهد غلظت سولفید هیدروژن در گاز خروجی از برج جذب زیر 0/5 ppm می‌باشد. همچنین در مورد جایگزینی پرکن‌های مختلف و اثر آن‌ها روی کاهش مصرف کاستیک بحث شده است. نتایج نشان داد که در یک دبی، غلظت و دمای ثابت جریان کاستیک، پرکن فلکسیمکس فلزی 400 عملکرد بهتر و صرفه اقتصادی مناسب‌تری در جذب سولفید هیدروژن نسبت به سایر پرکن‌های مورد مقایسه دارد.

**کلمات کلیدی:** جذب واکنشی انتخابی، سولفید هیدروژن، کاستیک، برج پر شده، پرکن

\* izadpanah@pgu.ac.ir

## مقدمه

با توجه به مضرات ناخالصی‌های گوگرد، فرایند شیرین‌سازی گاز، یکی از مهم‌ترین فرایندهای تصفیه آن در صنعت می‌باشد. با وجود این، گاهی گوگرد و ترکیبات آن مزاحمت‌هایی را ایجاد می‌کنند. زغال سنگ، ترکیبات نفتی و گاز طبیعی دارای ترکیبات گوگردی هستند. حضور ترکیبات گوگردی بیش از حد مجاز در گاز طبیعی نامطلوب است و مقدار زیاد این ترکیبات بوی ناخوشایندی خواهد داشت. این ترکیبات برای کاتالیست‌های صنعتی، فرسایش‌گر و سمی هستند [۱،۲]. گاز ترش به علت وجود ترکیبات گوگردی غیرمطلوب است و می‌تواند بسیار مضر و حتی باعث مرگ شود. فرایند شیرین‌سازی گاز، یکی از مهم‌ترین فرایندهای تصفیه آن در صنعت می‌باشد. با وجود این، گاهی گوگرد و ترکیبات آن مزاحمت‌هایی را ایجاد می‌کنند. زغال سنگ، ترکیبات نفتی و گاز طبیعی دارای ترکیبات گوگردی هستند حلال‌ها (به‌عنوان مثال آلکانو آمین‌ها یا محلول‌های قلیائی) از طریق واکنش شیمیایی، گاز سولفید هیدروژن را از جریان گاز تا حد مجاز حذف می‌کند. واکنش‌های جذب شیمیایی می‌توانند برگشت‌پذیر و یا برگشت‌ناپذیر باشند. در واکنش‌های برگشت‌پذیر، گازهای اسیدی در برج جذب در فشار جزئی بالا و دمای پایین حذف می‌شوند. واکنش انجام شده در برج دفع در فشار پایین و دمای بالا برگشت می‌یابد. در فرایندهای برگشت‌ناپذیر، حذف سولفید هیدروژن نیازمند جریان دائمی جبرانی از مواد واکنش دهنده است. در حال حاضر روش مناسب حذف ترکیبات گوگردی از جریان گازهای مایع شونده و نفتا، حذف سولفید هیدروژن به کمک همین محلول کاستیک می‌باشد. پس از جذب این ترکیبات، محلول به عنوان کاستیک مستعمل یا سود مصرفی شناخته می‌شود.

مطالعات بسیاری در زمینه شبیه‌سازی جذب گازهای دی‌اکسیدکربن و سولفید هیدروژن با استفاده از آمین‌ها انجام شده است و جذب گاز به وسیله محلول‌های قلیایی مانند سدیم هیدروکسید و پتاسیم هیدروکسید کم‌تر مورد توجه قرار گرفته است. در سال 2009 لوو<sup>1</sup> [1] و همکاران [1] نرم‌افزارهای مختلف شبیه‌سازی برای حذف دی‌اکسیدکربن از گاز اتمسفر را با هم مقایسه کردند. آنها نرم‌افزارهای Aspen RadFrac، Aspen RateSep، ProMax، ProTreat، CHEMASIM و CO2SIM را آزمایش کردند و با داده‌های دستگاه آزمایشی مقایسه کردند [1]. مدسن<sup>2</sup> [3] و هنسن<sup>3</sup> [4] نیز در سال‌های 2010 و 2011 مقایسه‌هایی را بین نرم‌افزارهای اسپن هایسیس، اسپن پلاس و پرومکس در زمینه جذب دی‌اکسیدکربن در دانشگاه تل‌مارک انجام دادند. در سال 2012 لارس‌اریک<sup>4</sup> [2]، جذب دی‌اکسیدکربن در مونواتانول‌آمین<sup>5</sup> از گاز اتمسفری را با استفاده از نرم‌افزارهای اسپن پلاس و اسپن هایسیس شبیه‌سازی و مقایسه کرد. هدف ایشان مقایسه تفاوت‌های این دو شبیه‌ساز برای مدل‌های تعادلی و محاسبه ستون جذب دی‌اکسیدکربن در شرایط اتمسفری

<sup>1</sup> Luo

<sup>2</sup> Madsen

<sup>3</sup> Hansen

<sup>4</sup> Lars Erik

<sup>5</sup> Monoethanolamine (MEA)



بود. پرکن انتخاب شده در این شبیه‌سازی استاندارد متال‌ملاپک<sup>6</sup> 250 بود [2]. در سال 2012 احمدی [5]، عملکرد دو شبیه‌ساز فرایند مورد استفاده برای جذب دی‌اکسیدکربن، یعنی اسپن‌پلاس و پرومکس را مورد بررسی و مقایسه قرار داد. نتایج به‌دست آمده نشان داد که در بیش‌تر موارد، به ویژه در پیش‌بینی پروفایل جذب و دفع در امتداد ستون، پرومکس در مقایسه با اسپن نتایج نزدیک‌تری نسبت به داده‌های آزمایش واقعی، به‌دست می‌آورد. در یکی از دستگاه‌های آزمایشی به کار رفته، از پرکن‌های منظم و در دیگری از پرکن‌های آی‌ام‌تی‌پی<sup>7</sup> 50 و ملاپک 252 استفاده شده است [5].

انتخاب‌پذیری به صورت تمایل حلال جاذب برای جذب گاز سولفید هیدروژن در گاز دارای دی‌اکسید کربن و سولفید هیدروژن تعریف می‌شود [6]. در سال 2016 چریف<sup>8</sup> و همکاران [7]، نتایج تجربی و شبیه‌سازی شده جذب انتخابی سولفید هیدروژن از بیوگاز را با استفاده از سدیم هیدروکسید در ستون‌های پر شده با پرکن‌های منظم مورد بررسی قرار دادند. این مطالعه بر اساس شبیه‌سازی با استفاده از نرم‌افزار اسپن‌پلاس انجام شده و با داده‌های یک دستگاه آزمایشی صنعتی مقایسه صورت گرفته است. شبیه‌سازی به منظور بررسی تاثیر دما، پارامترهای شیمیایی و هیدرودینامیکی بر جذب سولفید هیدروژن انجام شد [7].

مطالعات بسیار کمی در زمینه مقایسه پرکن‌ها برای جذب سولفید هیدروژن و کمینه کردن مصرف کاستیک، به وسیله ابزارهای شبیه‌سازی منتشر شده است. یکی از چندین مرجع، داده‌های چریف و همکاران است که در آن شبیه‌سازی اسپن‌پلاس با داده‌های یک دستگاه آزمایشی صنعتی مورد مقایسه قرار گرفته شده است [7]. این شبیه‌سازی، جداسازی سولفید هیدروژن در بیوگاز را به طور واقعی پیش‌بینی کرده و با داده‌های موجود تجربی اعتبارسنجی و تایید شده است. در این مرجع، نتایج تجربی و شبیه‌سازی شده حذف سولفید هیدروژن از بیوگاز با استفاده از سدیم هیدروکسید در ستون‌های پر شده با پرکن‌های منظم مورد بررسی قرار گرفته است. آنها از مدل "مبتنی بر نرخ"<sup>9</sup> برای شبیه‌سازی استفاده نمودند. مدل‌های مبتنی بر نرخ بر این فرض است که جداسازی به وسیله انتقال جرم بین فازهای تماس ایجاد می‌شود و از تئوری ماکسول-استفان<sup>10</sup> برای محاسبه انتقال جرم استفاده می‌شود که مراحل تماس در تعادل با یکدیگر هستند، که این یک تقریب و تخمین است، زیرا فازهای تماس هرگز در ستون واقعی در تعادل نیستند [8]. در سال 2020 ساموئل و همکاران<sup>11</sup> [9]، با استفاده از نرم‌افزار اسپن‌هایسیس شبیه‌سازی تصفیه گاز طبیعی به منظور حذف گازهای سولفید هیدروژن و دی‌اکسیدکربن در یک ستون ترکیبی جدید که شامل دی‌اتانول‌آمین و کلسیم هیدروکسید بود را انجام دادند. این شبیه‌سازی با هدف امکان غلبه هرچه بیشتر و بهتر بر مشکلات ناشی از گازهای اسیدی از قبیل خوردگی تجهیزات، کاهش کیفیت گاز طبیعی، خطرات تهدید کننده سلامت انسان

<sup>6</sup> Standard metal Mellapak 250Y

<sup>7</sup> IMTP 50

<sup>8</sup> Cherif

<sup>9</sup> Rate-Based Model

<sup>10</sup> Maxwell-Stefan Theory

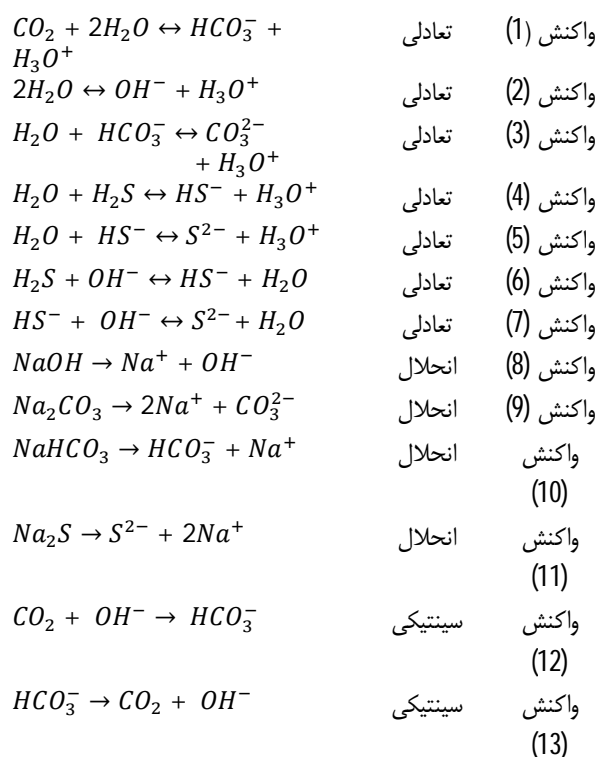
<sup>11</sup> Samuel Eshorame Sanni

و کاهش هزینه‌های پمپاژ و مصرف حلال، انجام شد. در نهایت مقادیر بهینه غلظت حلال‌های جاذب برای حذف هرچه بهتر گازهای اسیدی مشخص گردید [9].

هدف از انجام این مطالعه، شبیه‌سازی حذف سولفید هیدروژن از یک جریان گازی با استفاده از محلول کاستیک و روش جذب واکنشی انتخابی در ستون پر شده به وسیله نرم‌افزار اسپن پلاس می‌باشد. پرکن‌های مختلفی در ستون جذب پر شده استفاده شده است تا عملکرد این پرکن‌ها در کاهش مقدار محلول کاستیک مصرفی و غلظت آن، کاهش انرژی و میزان جذب سولفید هیدروژن مورد بررسی قرار گیرد.

### شیمی سامانه (سازوکار واکنش و ترمودینامیک)

تمامی واکنش‌های مرتبط با فرایند جذب سولفید هیدروژن همراه با دی‌اکسید کربن به وسیله محلول کاستیک در سامانه آبی  $\text{NaOH-CO}_2\text{-H}_2\text{S-CH}_4$  به شرح زیر است [7]:



فرض می‌شود همه واکنش‌ها به جز واکنش دی‌اکسید کربن با یون  $\text{OH}^-$  در تعادل شیمیایی قرار دارند. ثابت‌های تعادل برای واکنش‌های فوق به صورت معادله (1) تابع دما در نظر گرفته شده است [7]:

$$\ln K_{eq} = A + \frac{B}{T} + C \ln T \quad (1)$$

$K_{eq}$  ثابت تعادل است که بدون بُعد است و  $T$  دما بر حسب کلونین می‌باشد.  $A$ ،  $B$ ،  $C$  و  $D$  پارامترهای معادله هستند که در جدول 1 برای هر واکنش نشان داده شده است.



جدول 1. ضرایب استفاده شده در محاسبه ثابت تعادل [7]

C	B	A	واکنش
-36/7816	12092/1	231/465	واکنش (1)
-22/4773	-13445/9	132/899	واکنش (2)
-35/4819	-12431/7	216/05	واکنش (3)
-33/55471	-12995/4	214/582	واکنش (4)
0	-8585/47	-9/74	واکنش (5)

ثابت تعادل برای واکنش (6) می‌تواند از ثابت های تعادل واکنش های (4) و (2) طبق معادله (2) به دست آید.

$$K_{eq.(R6)} = \frac{K_{eq.(R4)}}{K_{eq.(R2)}} \quad (2)$$

هم چنین ثابت تعادل واکنش (6) می‌تواند شبیه به معادله ای که برای وابستگی دمایی ثابت های تعادل واکنش های (1) تا (5) استفاده شد بیان شود. جدول 2 پارامترهای معادله مربوط به ثابت تعادل واکنش (6) را نشان می‌دهد که با توجه به معادله (1) بیان شده است.

جدول 2. ضرایب استفاده شده در محاسبه ثابت تعادل [7]

C	B	A	واکنش
-21/15	-1930	147	واکنش 6

ثابت تعادل واکنش (7) نیز از معادله (2) و با استفاده از ثابت های تعادل واکنش های (2) و (5) به دست می‌آید. برای واکنش های (12) و (13) که به طور سینتیکی کنترل می‌شود، اسپن پلاس از تعریف قانون توان استفاده می‌کند.

$$r = kT^n e^{\left(\frac{-E}{RT}\right)} \prod C_i^{a_i} \quad (3)$$

که  $r$  سرعت واکنش،  $k$  پیش پارامتر نمایی،  $T$  دما،  $n$  توان دما،  $E$  انرژی فعال سازی،  $R$  ثابت جهانی گازها،  $C_i$  غلظت جزئی  $i$  و  $a_i$  ضریب استوکیومتری جزء  $i$  در واکنش است. غلظت برحسب مولاریته است. پارامتر  $n$  برابر صفر است. پارامترهای  $k$  و  $E$  در جدول 3 برای واکنش های (12) و (13) داده شده است. پارامترهای سینتیکی برگرفته شده از کار پینسنت<sup>12</sup> و همکاران در سال 1956 است [11].

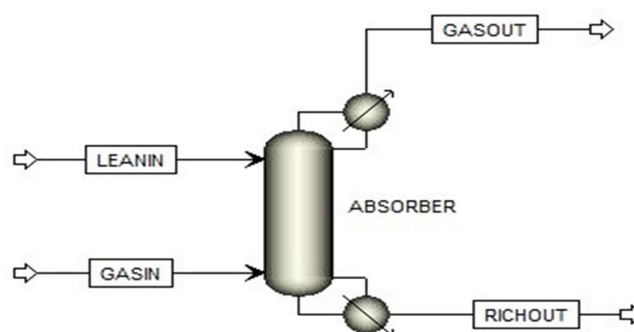
جدول 3. پارامتر  $K$  و  $E$  برای واکنش های سینتیکی [7]

E (کالری بر مول)	K	واکنش
13249	$4/32 \times 10^{13}$	واکنش (12)
29451	$2/83 \times 10^{17}$	واکنش (13)

<sup>12</sup> Pinsent

## ابزار شبیه‌سازی

بررسی کارهای قبلی در مورد شبیه‌سازی ستون‌های پر شده برای حذف گاز سولفید هیدروژن از یک جریان گازی نشان می‌دهد که اکثر محققان از اسپن پلاس به عنوان نرم‌افزار شبیه‌سازی استفاده کرده‌اند. شکل 1 شماتیکی کلی از فرآیند حذف سولفید هیدروژن است که فرآیندی ساده است و در آن گاز از میان برج (معمولاً برج پر شده)، به صورت جریان مخالف از جریان گردشی کاستیک، عبور می‌کند.



شکل 1. نمودار جریان شبیه‌سازی شده با اسپن پلاس

## داده‌های مربوطه

برای شبیه‌سازی برج شستشوی کاستیک از اطلاعات برج شستشوی کاستیک یکی از پتروشیمی‌های واقع در منطقه ویژه اقتصادی انرژی پارس جنوبی استفاده شده است. در این بازه زمانی، واحد مذکور تقریباً در حالت پایا بوده است. اطلاعات استخراج شده از واحد، جهت شبیه‌سازی برج کاستیک در جدول‌های 4، 5، و 6 آمده است.

جدول 4. ترکیب درصد جریان گاز کراکینگ ورودی به برج شستشوی کاستیک مجتمع پتروشیمی

ترکیب درصد وزنی	ترکیب درصد مولی	ترکیبات
0/54	0/56	H <sub>2</sub> O
3/59	33/37	H <sub>2</sub>
9/34	10/93	CH <sub>4</sub>
0/11	0/08	CO
0/03	0/01	CO <sub>2</sub>
0/01	0/01	H <sub>2</sub> S
0/36	0/26	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>
50/80	33/98	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>
31/09	19/40	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>
0/02	0/01	MAPD
1/01	0/45	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub>



0/22	0/09	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>
1/60	0/55	C <sub>4</sub> 's
1/29	0/31	C <sub>5</sub> +

### جدول 5. داده‌های عملیاتی برج شستشوی کاستیک مجتمع پتروشیمی

مقدار	پارامتر
45	دمای گاز ورودی برحسب سانتی‌گراد
17/52	فشار گاز ورودی برحسب بار
13/4	دانسیته گاز ورودی برحسب کیلوگرم بر مترمکعب
141053	دبی جرمی گاز ورودی برحسب کیلوگرم بر ساعت
40	دمای کاستیک ورودی برحسب سانتی‌گراد
17/25	فشار کاستیک ورودی برحسب بار
1094	دانسیته کاستیک ورودی برحسب کیلوگرم بر مترمکعب
3007	دبی جرمی کاستیک ورودی برحسب کیلوگرم بر ساعت
50	دمای آب (BFW) برحسب سانتی‌گراد
17/2	فشار آب (BFW) برحسب بار
992	دانسیته آب (BFW) برحسب کیلوگرم بر مترمکعب
2646	دبی جرمی آب (BFW) ورودی برحسب کیلوگرم بر ساعت

### جدول 6. ویژگی‌های کلی برج شستشوی کاستیک مجتمع پتروشیمی

مقدار	پارامتر
37/8	ارتفاع کل برج بر حسب متر
2/75	قطر برج بر حسب متر
بستر پرکن 1: 9 متر و بستر پرکن 2: 9 متر FLEXIMAX Metal 400	ارتفاع بسترهای پرشده بر حسب متر
کربن استیل (CS)	نوع پرکن
سینی دریچه ای (Valve), 5 عدد	جنس پرکن
سینی Chimney, 1 عدد	نوع سینی‌های به‌کار رفته و تعداد آن‌ها
800	فاصله سینی‌ها از هم بر حسب میلی‌متر

### شبیه‌سازی با اسپن پلاس

اسپن پلاس یک ابزار مدل‌سازی فرایند برای طراحی، بهینه‌سازی و نظارت بر عملکرد برای صنایع مختلفی مانند صنایع شیمیایی، پلیمری، فلزات، مواد معدنی و نیروگاه‌های زغال‌سنگ است. از مزایای اسپن پلاس

می‌توان به : کاهش هزینه‌های سرمایه با بیش از 10٪، بهبود دقت مدل مبتنی بر نرخ در مقایسه با مدل مبتنی بر تعادل<sup>13</sup>، بهبود ROI (بازگشت سرمایه) و تصمیم‌گیری‌های سرمایه‌گذاری بهتر با کاهش خطرات اندازه‌گیری‌های ناکافی. اسپن پلاس بسته‌های اطلاعاتی زیادی را برای مدل‌سازی فرایندهای صنعتی فراهم می‌کند. این بسته‌ها به کاربران اجازه می‌دهد تا با استفاده از قابلیت‌های الکترولیت و همچنین با توجه به واکنش‌های سینتیکی دی‌اکسید کربن در فاز مایع، به طور دقیق فرایندهای تصفیه گاز ترش را مدل کنند. برای سامانه NaOH-CO<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>S-CH<sub>4</sub> روش ELECNRTL استفاده می‌شود. ELECNRTL از Electrolyte NRTL [11] برای روش ضریب فعالیت فاز مایع استفاده می‌کند که به طور منطقی نشان دهنده فعل و انفعالات فیزیکی گونه‌ها در یک محلول الکترولیتی چند جزئی آبی است. برای فاز بخار، ELECNRTL از معادله حالت سواو ردلیش کوانگ<sup>14</sup> [12] برای تعیین ضریب فوگاسیته استفاده می‌کنند، که در آن غیر ایده‌آل بودن فاز گاز در نظر گرفته شده است. اسپن ELECNRTL را برای طراحی دقیق سامانه‌های الکترولیت مانند جذب گاز با آمین و یا کاستیک توصیه می‌کند. برای سامانه‌های همراه با واکنش‌های شیمیایی، روند پیش فرض پایه NRTL<sup>15</sup> [13] است که شامل کاربردهای فراوان برای سامانه‌های شیمیایی کم فشار ایده‌آل و غیرایده‌آل است. اگر این فرایند شامل واکنش الکترولیتی باشد، روش NRTL توسط ELECNRTL جایگزین خواهد شد و "الکترولیت ویزارد"<sup>16</sup> باید برای تعریف واکنش‌ها و گونه‌های یونی مورد استفاده قرار گیرد. روش قدیمی مدل‌سازی ستون‌های جذب و دفع با استفاده از مدل مبتنی بر تعادل است. در این مدل، ستون به چندین بخش تقسیم می‌شود و فرض می‌شود که فاز بخار و مایع خروجی هر مرحله در تعادل با یکدیگر هستند [14]. این فرضیه برای ساده‌سازی مدل استفاده می‌شود و در واقعیت به ندرت اتفاق می‌افتد. انحراف از تعادل با استفاده از سینی مانند بازده مورفری برای ستون سینی دار یا ارتفاع معادل (HETP) برای ستون‌های پر شده تصحیح می‌شود [15]. برای فرایندهای جداسازی واکنشی، انحراف از مدل تعادل زیاد است و استفاده از بازدهی‌ها کارایی خوبی ندارد [15]. از این رو مدل‌های مبتنی بر نرخ برای مدل‌سازی این سامانه‌ها پیشنهاد می‌شود. این مدل فرض می‌کند که تعادل بخار و مایع تنها در سطح مشترک رخ می‌دهد. در این کار، مدل تقطیر RadFrac برای مدل‌سازی ستون‌های جذب استفاده شده است، که مدل دقیقی برای شبیه‌سازی جذب و دفع است، خصوصاً وقتی که واکنش‌های شیمیایی در حال رخ دادن باشد. مدل مبتنی بر نرخ در مدل‌سازی ستون‌های جذب و دفع از تئوری دو فیلم در مدل انتقال جرم و حرارت استفاده می‌کند [5]. جریان مخلوط به عنوان یک مدل جریان در این کار انتخاب شد. در این مدل، خواص حجمی برای هر فاز همانند شرایط خروجی آن مرحله است زمانی که آن مرحله را ترک کند [17]. بر خلاف برخی نرم‌افزارها، ارتفاع پرکن برای ستون جذب را می‌توان در اسپن پلاس تعریف کرد و در نتیجه شبیه‌سازی را آسان‌تر می‌توان انجام داد. بنابراین در این تحقیق تلاش بر این خواهد بود که نتایج

<sup>13</sup> Equilibrium-Based Model

<sup>14</sup> Soave-Redlich-Kwong

<sup>15</sup> Non-random-two-liquid

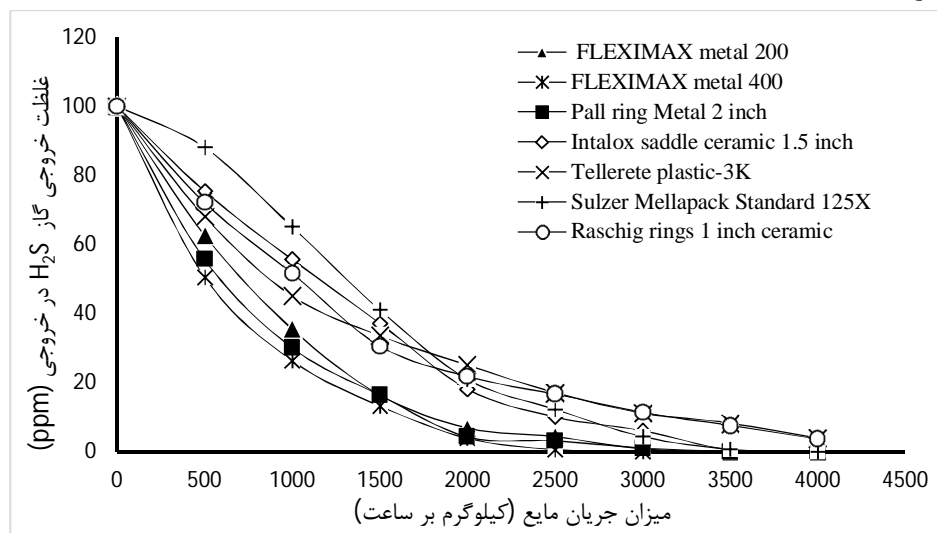
<sup>16</sup> Electrolyte wizard



حاصل از شبیه‌سازی با اسپن پلاس به نتایج تجربی نزدیک باشد تا بتوان رفتار ستون واقعی جذب را بهتر پیش‌بینی کرد.

### نتایج شبیه‌سازی

پس از تایید پارامترهای فیزیکی و شیمیایی، شبیه‌سازی اسپن پلاس برای ستون جذب پر شده، با استفاده از مدل مبتنی بر نرخ انجام شد. اطلاعات مربوط به ستون جذب مورد استفاده در شبیه‌سازی و همچنین مقادیر ورودی‌های گاز و مایع در جدول 4 و 5 و 6 تعریف شده است. هنگام طراحی این ستون پر شده، به حداقل رساندن جریان مایع به منظور کاهش مصرف کاستیک و انرژی (پمپ) و به حداکثر رساندن جذب سولفید هیدروژن در ستون به وسیله انتخاب پرکن مناسب، برای ما مطلوب خواهد بود. با این حال باید محتوی سولفید هیدروژن در جریان خروجی تا نزدیک به صفر کاهش یابد. نمودار شکل 2 که نتایج شبیه‌سازی با اسپن پلاس است، اثر دبی جریان کاستیک در جذب سولفید هیدروژن را بر روی پرکن‌های مختلفی که در برج شستوی کاستیک استفاده می‌شود، مورد بررسی قرار می‌دهد. همان‌طور که نتایج نشان می‌دهد، افزایش دبی جریان کاستیک، جذب سولفید هیدروژن را بهبود می‌بخشد. با توجه به شکل 2 مشاهده می‌شود هر چهقدر دبی محلول کاستیک افزایش یابد میزان جذب سولفید هیدروژن افزایش می‌یابد ولی بعد از یک دبی مشخص (3007 کیلوگرم بر ساعت)، غلظت سولفید هیدروژن نزدیک به صفر رسیده است. همچنین مشاهده می‌شود در یک دبی کاستیک ثابت، به ترتیب، پرکن‌های فلکسیمکس فلزی 400، پال‌رینگ 2 اینچ و فلکسیمکس فلزی 200 بیش‌ترین میزان جذب سولفید هیدروژن را نسبت به سایر پرکن‌های استفاده شده در شبیه‌سازی داشته‌اند.



شکل 2 اثر میزان جریان مایع کاستیک در جذب  $H_2S$  بر روی پرکن‌های مختلف

در جدول 7 میزان دبی جریان کاستیک برای انواع پرکن‌های استفاده شده در شبیه‌سازی با هدف کاهش میزان سولفید هیدروژن موجود در گاز خروجی به کم‌تر از 0/5 ppm مورد مقایسه قرار گرفته و نشان داده

شده است که در یک دبی کاستیک ثابت پرکن‌های فلکسیمکس فلزی 400، فلکسیمکس فلزی 400 و پال‌رینگ 2 اینچ کم‌ترین میزان مصرف کاستیک را برای رساندن میزان سولفید هیدروژن گاز خروجی به کم‌تر از 0/5 ppm را داشته‌اند. در جدول 7 نیز میزان مصرف کاستیک و هزینه‌های آن در هر سال برای انواع پرکن‌ها و میزان اختلاف هزینه مصرف کاستیک پرکن‌ها با بستر پرکن فلکسیمکس فلزی 200 بیان شده است. قیمت کاستیک با توجه به شاخص قیمت تولید کنندگان<sup>17</sup> کاستیک در ماه مارچ 2020، با ارزش 225 دلار آمریکا به ازای هر تن کاستیک تعیین شده است.

جدول 7. مقایسه میزان دبی جریان و هزینه‌های کاستیک برای انواع پرکن‌های استفاده شده در شبیه‌سازی با هدف کاهش میزان سولفید هیدروژن موجود در گاز خروجی به کم‌تر از 0/5 ppm

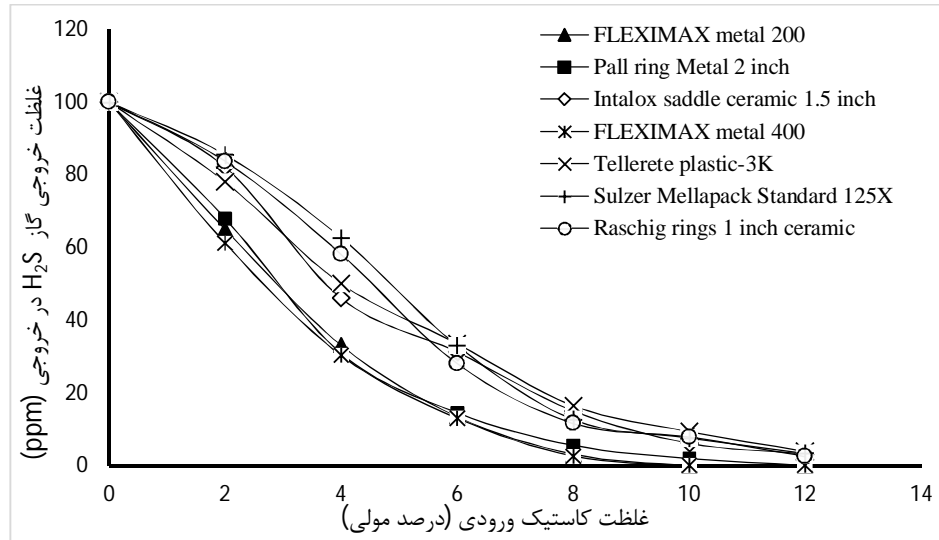
نوع پرکن	میزان سولفید هیدروژن موجود در گاز خروجی (ppm)	دبی جریان کاستیک (kg/h)	درصد افزایش دبی نسبت به پرکن فلکسیمکس	اختلاف هزینه مصرف کاستیک در هر ساعت نسبت به فلکسیمکس 200 (\$/hr)
این‌تالوکس سادل	< 0/5	3282	9/15	61/88
سرامیکی 1/5 اینچ	< 0/5	3318	10/35	70/00
ثلرت پلاستیکی -3k	< 0/5	3007	0	0
فلکسیمکس فلزی 200	< 0/5	3225	7/25	49/05
سولزر ملاپک 125X	< 0/5	3095	2/93	19/80
پال رینگ فلزی 2 اینچ	< 0/5	3190	6/09	41/18
راشینگ‌رینگ	< 0/5	2890	-3/90	-26/32
سرامیکی 1 اینچ	< 0/5			
فلکسیمکس فلزی 400	< 0/5			

با توجه به اطلاعات به دست آمده و مقایسه آن‌ها می‌توان گفت که مناسب‌ترین پرکن برای جایگزینی پرکن فلکسیمکس فلزی 200 که هم کم‌ترین اختلاف هزینه مصرف کاستیک و هم ارزان‌تر از آن باشد، پرکن فلکسیمکس فلزی 400 می‌باشد.

پارامتر کلیدی دیگری که بر عملکرد کلی ستون جذب تاثیر گذاری بالایی دارد، غلظت کاستیک ورودی است. شکل 3 که با اسپن پلاس شبیه‌سازی شده است، اثر غلظت کاستیک ورودی و پرکن‌های مختلف استفاده شده را در جذب سولفید هیدروژن نشان می‌دهد. نتایج نشان می‌دهد هر اندازه غلظت کاستیک

<sup>17</sup> Producer Price Index

ورودی افزایش یابد، میزان جذب سولفید هیدروژن افزایش می‌یابد ولی بعد از یک غلظت مشخص (10 درصد مولی)، غلظت سولفید هیدروژن در خروجی از برج نزدیک به صفر رسیده است. همچنین مشاهده می‌شود در یک غلظت ثابت کاستیک پرکن‌های فلکسیمکس فلزی 400، فلکسیمکس فلزی 200 و پال‌رینگ 2 اینچ، میزان جذب سولفید هیدروژن بیش‌تری را نسبت به سایر پرکن‌های استفاده شده در شبیه‌سازی نشان می‌دهند.



شکل 3. اثر غلظت کاستیک ورودی در جذب  $H_2S$  بر روی پرکن‌های مختلف

### نتیجه‌گیری

جذب شیمیایی انتخابی، روشی مناسب برای حذف سولفید هیدروژن می‌باشد که یک ترکیب آلاینده در جریان گاز ترش است. این در حالی است که جذب گازهای دیگر مانند دی‌اکسیدکربن پایین نگه داشته شده و در نتیجه مصرف کاستیک کاهش خواهد یافت. در این تحقیق تلاش بر این بود که جریان کاستیک ورودی به ستون، به منظور کاهش مصرف کاستیک، انرژی و به حداکثر رساندن جذب سولفید هیدروژن در ستون به وسیله انتخاب پرکن مناسب، کاهش داده شود. برای این منظور با شبیه‌سازی ستون جذب با مدل ترمودینامیکی ELECNRTL و روش مبتنی بر نرخ، اثر تغییرات دبی و غلظت جریان مایع کاستیک ورودی و پرکن مختلف روی میزان جذب سولفید هیدروژن ارزیابی و بررسی شد. از داده‌های واقعی یکی از پتروشیمی‌ها برای شبیه‌سازی برج شستشوی کاستیک استفاده شد. نتایج نشان داد که نرم‌افزار اسپن پلاس می‌تواند رفتار برج کاستیک را به طور مؤثر پیش بینی کرده و نتایج مورد اطمینان به‌دست آورد. هم‌خوانی و توافق خوبی بین نتایج شبیه‌سازی اسپن پلاس و داده‌های تجربی به‌دست آمده است. نتایج نشان داد که با افزایش غلظت کاستیک ورودی به برج، میزان جذب سولفید هیدروژن افزایش می‌یابد. در یک غلظت ثابت کاستیک، فلکسیمکس متال 400، میزان جذب سولفید هیدروژن بیش‌تری را نسبت به سایر پرکن‌های استفاده شده در شبیه‌سازی نشان می‌دهد. با افزایش دبی جریان کاستیک ورودی به برج، میزان جذب

سولفید هیدروژن افزایش می‌یابد. در یک دبی جریان ثابت کاستیک، پرکن فلکسیمکس متال 400 در اسپن پلاس، میزان جذب سولفید هیدروژن بیش تر و میزان مصرف کاستیک کم‌تری را نسبت به سایر پرکن‌های استفاده شده در شبیه‌سازی نشان می‌دهد.

### فهرست نمادها

$a_i$	ضریب استوکیومتری جزء $i$
D و C, B, A	پارامترهای معادله (1)
$C_i$	غلظت جزئی $i$ ( $\text{mol liter}^{-1}$ )
E	انرژی فعال‌سازی، ( $\text{cal mol}^{-1}$ )
k	پیش پارامتر نمایی
$K_{eq}$	ثابت تعادل
n	توان دما
r	سرعت واکنش
T	دما، (K)

### زیرنویس‌ها

eq	در تعادل
----	----------



## منابع

- [1] Luo, X., et al. "Comparison and validation of simulation codes against sixteen sets of data from four different pilot plants." *Energy Procedia* 1.1 (2009): 1249-1256.
- [2] L ErikØi, Lars. "Comparison of Aspen HYSYS and Aspen Plus simulation of CO<sub>2</sub> absorption into MEA from atmospheric gas." *Energy Procedia* 23 (2012): 360-369.
- [3] Madsen, JN. Process simulation programs for CO<sub>2</sub> Absorption. Master Thesis, Telemark University College, 2010.
- [4] Hansen, E. Aspen HYSYS and Aspen Plus simulation programs for CO<sub>2</sub> absorption. Master Thesis, Telemark University College, 2011.
- [5] I. Process, S. Engineering, and F. Ahmadi, "Assessing the Performance of Aspen Plus and Promax for the Simulation of CO<sub>2</sub> Capture Plants," *Promax*, p. 72, 2012.
- [6] م. افخمی پور، ر. آذین، ش. عصفوری، "مدل سازی جذب انتخابی گاز هیدروژن سولفید توسط محلول متیل دی اتانول آمین در برج جذب پرشده،" *نشریه شیمی و مهندسی شیمی ایران*. vol. 31, no. 2, pp. 27-39, 2012.
- [7] H. Cherif *et al.*, "Experimental and simulation results for the removal of H<sub>2</sub>S from biogas by means of sodium hydroxide in structured packed columns," *World Acad. Sci. Eng. Technol. Int. J. Bioeng. Life Sci.*, vol. 3, no. 1, 2016.
- [8] I. Applications *et al.*, "Dynamic modelling of CO<sub>2</sub> absorption for post combustion capture in coal-fired power plants," vol. 88, no. 12, 2009, pp. 2455-2462.
- [9] Sanni, Samuel Eshorame, et al. "Optimization of natural gas treatment for the removal of CO<sub>2</sub> and H<sub>2</sub>S in a novel alkaline-DEA hybrid scrubber." *Egyptian Journal of Petroleum* 29.1 (2020): 83-94.
- [10] B. R. W. Pinsent, L. Pearson, and F. J. W. Roughton, "The kinetics of combination of carbon dioxide with hydroxide ions," *Trans. Faraday Soc.*, vol. 52, 1956, pp. 1512-1520.
- [11] H. Renon and J. M. Prausnitz, "Estimation of parameters for the NRTL equation for excess Gibbs energies of strongly nonideal liquid mixtures," *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, vol. 8, no. 3, 1969, pp. 413-419.
- [12] G. Soave, "Equilibrium constants from a modified Redlich-Kwong equation of state," *Chem. Eng. Sci.*, vol. 27, no. 6, 1972, pp. 1197-1203.
- [13] H. Renon and J. M. Prausnitz, "Local compositions in thermodynamic excess functions for liquid mixtures," *AIChE J.*, vol. 14, no. 1, 1968, pp. 135-144.
- [14] R. Treybal, "Mass-transfer." McGraw-Hill International Editions, 1981.
- [15] J. Peng, S. Lextrait, T. F. Edgar, and R. B. Eldridge, "A comparison of steady-state equilibrium and rate-based models for packed reactive distillation columns," *Ind. Eng. Chem. Res.*, vol. 41, no. 11, 2002, pp. 2735-2744.
- [16] N. Asprion, "Nonequilibrium rate-based simulation of reactive systems: simulation model, heat transfer, and influence of film discretization," *Ind. Eng. Chem. Res.*, vol. 45, no. 6, 2006, pp. 2054-2069.
- [17] A. Kothandaraman, *Carbon dioxide capture by chemical absorption: a solvent comparison study*, vol. 72, no. 1. 2010.