

## مدلسازی فرآیند تولید جوش شیرین با استفاده از گاز آلاینده دی اکسید کربن

بهادر ابول پور<sup>۱\*</sup>، رحیم شمس الدینی<sup>۲</sup>، رامتین حکمت خواه<sup>۳</sup><sup>۱\*</sup> - دانشگاه صنعتی سیرجان، دانشکده مهندسی شیمی<sup>۲</sup> - دانشگاه صنعتی سیرجان، دانشکده مهندسی مکانیک<sup>۳</sup> - دانشکده علوم و فنون نوین، دانشگاه تهران

\* ایمیل نویسنده مسئول: bahadorabolpor1364@yahoo.com

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۰/۰۲/۲۵

تاریخ دریافت: ۹۹/۱۲/۱۴

## چکیده

بی کربنات سدیم در یک برج حبایی با تزریق گاز دی اکسید کربن به محلول های مایع کربنات و بی کربنات سدیم تولید می شود. در این مقاله به بررسی انتقال جرم سه فازی همراه با واکنش های شیمیایی و تبلور پرداخته شده است. در این کار، موازنه مولی بر روی جریانها و اجزای تشکیل دهنده نوشته شده، نظریه دانکورتر برای انتقال جرم بین گاز و فاز مایع و موازنه جمعیت برای به دست آوردن فرمول رشد و هسته زایی بلورهای جامد مورد استفاده قرار گرفته است. به منظور تأیید مدل، نتایج مدل با داده های تجربی مقایسه شده است. در نهایت، اثر پارامترهای مختلف بر روی سرعت رشد و هسته زایی و همچنین توزیع اندازه بلورهای بیکربنات سدیم مورد بررسی قرار گرفت. بنابراین، این مدل توانایی پیشگویی میزان تبدیل گاز دی اکسید کربن و همچنین کمیت و کیفیت بلورهای جامد تولیدی در شرایط گوناگون عملیاتی را داراست. این پیشگوییها نشان می دهد که افزایش فشار گاز ورودی یا کسر مولی گاز دی اکسید کربن در این گاز و یا کاهش دمای مایع موجب افزایش میزان تولید بلورهای جامد بی کربنات سدیم و همچنین درشت تر شدن این بلورها می گردد. اما تنها افزایش فشار گاز ورودی است که موجب افزایش میزان تبدیل گاز دی اکسید کربن می گردد.

## کلمات کلیدی

" بی کربنات سدیم"، " برج حبایی"، " انتقال جرم سه فازی"، " تبلور"، " مدلسازی"

## ۱- مقدمه

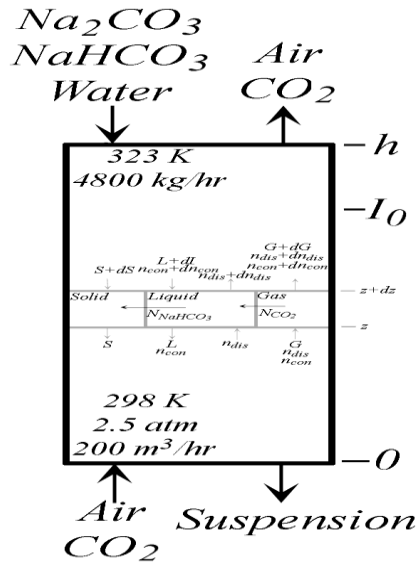
اکسید کربن پیشگویی کند. در نهایت، نتایج مدل با داده های تجربی بی کربنات سدیم از راکتور برج حبایی مجتمع پتروشیمی شیراز مقایسه شده است (Saberi et al., 2009).

## ۲- مدلسازی ریاضی

قطر داخلی و ارتفاع این برج حبایی بترتیب ۱/۲ و ۲۲ متر می باشد. به علت آنتالپی کم واکنش و تعبیه ژاکت آب در اطراف این برج، دمای مایع درون برج ثابت می ماند. محلول کربنات و بیکربنات سدیم از سمت فوقانی برج وارد و مخلوط های گازی دی اکسید کربن و هوا از پایین به برج تزریق می شود. هنگامی که غلظت بی کربنات سدیم تولیدی به حد اشباع آن در محلول می رسد بلورهای جامد شروع به شکل گیری می کنند. شرایط عملیاتی برج در شکل ۱ نشان داده شده است. معادلات انتقال جرم با استفاده از یک حجم کنترل دیفرانسیلی یک بعدی، همانطور که در شکل ۱ نشان داده شده است، به دست آمده اند. وجود یک جریان چرخشی در فاز گاز و مایع موجب استفاده از یک مدل نفوذ شعاعی برای مدلسازی برج گردیده است. واکنش صورت گرفته در طی این فرآیند به صورت زیر تعریف می شود:



برج حبایی به دلیل ساخت و ساز و بهره برداری ساده به طور گسترده ای در صنعت به عنوان تماس دهنده گاز، مایع و جامد استفاده می شود. برج حبایی نه تنها برای اهداف بیوتکنولوژی یا زیست محیطی، بلکه برای واکنش های شیمیایی مرسوم در تولید بی کربنات سدیم استفاده شود. در مطالعه قبلی ما، سرعت تجربی رشد و هسته زایی بلورهای بی کربنات سدیم در برج حباب مجتمع پتروشیمی شیراز با تزریق گاز دی اکسید کربن به محلول های مایع کربنات و بی کربنات سدیم در حالت عملیاتی ناپایدار با اندازه گیری توزیع اندازه بلورهای جامد در زمانهای معین به دست آمده است (Saberi et al., 2009). از آنجا که این پارامترها در شرایط عملیاتی ناپایدار اندازه گیری شده اند و بعلاوه تابعیت قابل توجه ای به این شرایط دارند، استفاده از این مقادیر تجربی، دلیل عمده خطای مدل قبلی ما (Goharrizi & Abolpour, 2012) در پیشگویی توزیع اندازه بلورها در شرایط عملیاتی گوناگون و پایدار می باشد. بنابراین، با استفاده از یک موازنه جمعیت بر روی بلورهای جامد، این پارامترها در شرایط عملیاتی پایدار مختلف جهت استفاده در مدل سازی برج حبایی محاسبه شده اند (Goharrizi & Abolpour, 2015). هدف از این مطالعه، مدل سازی برج حبایی بی کربنات سدیم جهت پیش بینی کمیت و کیفیت تولید بلورهای بی کربنات سدیم، و میزان تبدیل دی اکسید کربن است. در این مدل موازنه مول بر روی سه فاز (گاز، مایع و جامد) نوشته شده و از نظریه دانکورتر<sup>۱</sup> جهت انتقال جرم از فاز گازی به فاز مایع، که به محاسبه جذب گاز در مایع توسط انتقال جرم و واکنش شیمیایی استوار است، استفاده شده است. مدل ریاضی می تواند اثر پارامترهای مختلف، مانند درجه حرارت مایع، فشار گاز و کسر مول دی اکسید کربن در فاز گاز را بر روی کمیت و کیفیت تولید بلورهای سدیم بی کربنات و تبدیل دی

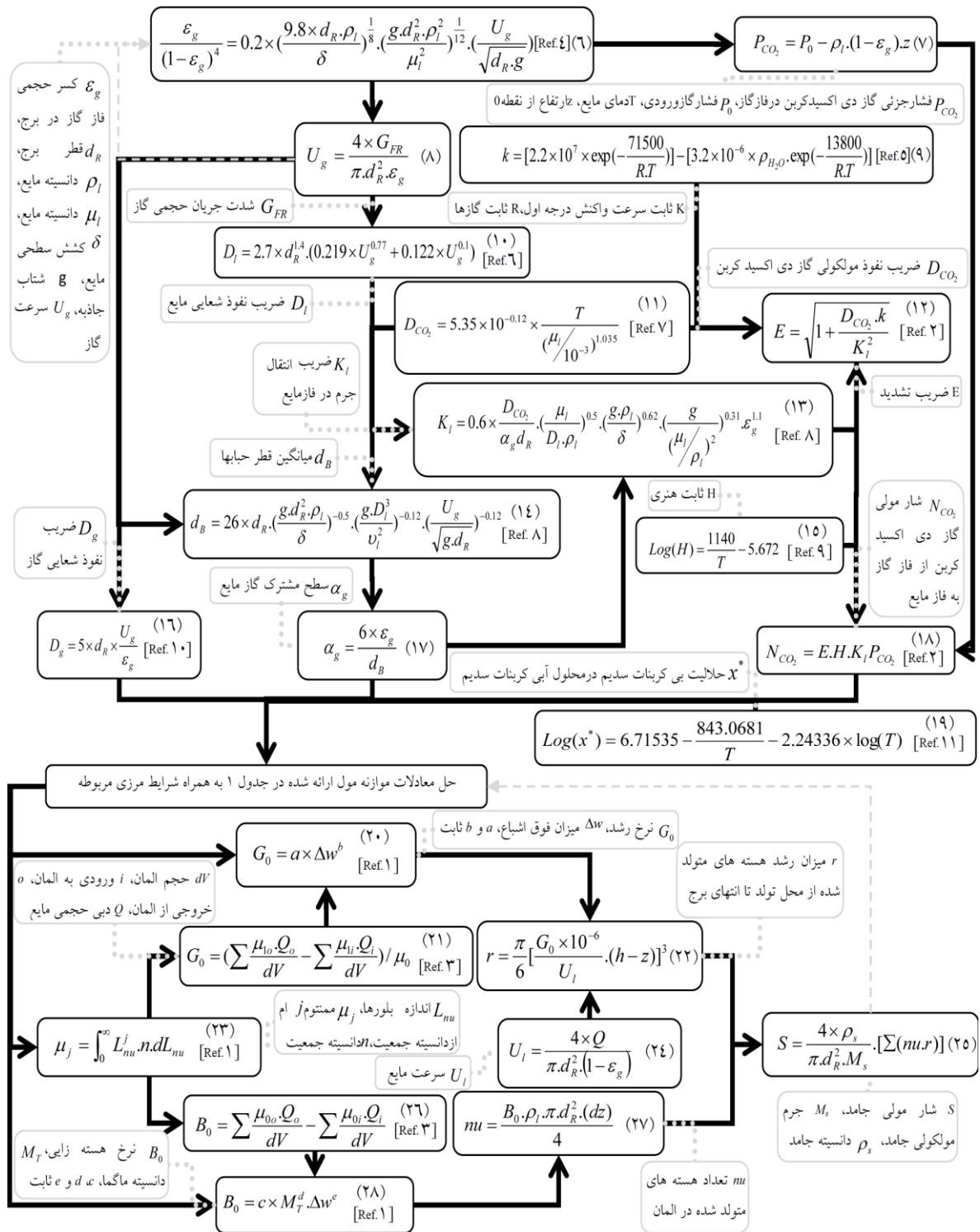


شکل ۱- نمایی از برج حبایی به همراه شرایط عملیاتی و همچنین حجم کنترل دیفرانسیلی بکار گرفته شده در مدلسازی.

دیگر، با استفاده از روش حدس خطا می توان پارامترهای تبلور را بدست آورد. در ابتدا با حدس زدن مقادیری برای  $a$ ،  $b$ ،  $c$ ،  $d$  و  $e$  برای  $B_0$  (تعداد بلورها در هر ثانیه در هر کیلوگرم محلول) و  $G_0$  (افزایش اندازه بلورها در هر ثانیه) در روابط (۲۱) و (۲۶) که با استفاده از موازنه جمعیت بر روی بلورهای جامد بدست آمده اند (بهترین حدس اولیه می تواند مقادیر تجربی بدست آمده در شرایط ناپایدار باشد) (Saber et al., 2009)، البته توجه شود که این پارامترها می توانند تابع شرایط عملیاتی به ویژه دما نیز باشند که این تابعیت پیشتر در برخی موارد بررسی شده است (Goharrizi & Abolpour, 2015)، با استفاده از روابط (۲۲)، (۲۴)، (۲۵) و (۲۷) مقدار  $S$  محاسبه شده و در معادلات موازنه مول قرار می گیرد. سپس این معادلات حل شده و مقادیر جدیدی برای کلیه پارامترهای مجهول در معادلات موازنه مول بدست می آید. این حلقه تا همگرایی این مقادیر ادامه خواهد یافت. توجه شود که با داشتن مقادیر  $r$  و  $nu$  بدست آوردن پارامترهایی مانند  $M_T$  (جرم بلور به ازاء جرم محلول)،  $L_{nu}$ ،  $n$  (تعداد بلور به ازاء اندازه بلور در واحد جرم محلول) و  $\alpha_s$  (سطح کل بلورها به ازاء حجم کل بلورها)، ساده می باشد.

با توجه به سرعت زیاد واکنش تولید بی کربنات سدیم از دی اکسید کربن، دی اکسید کربن به محض نفوذ به مایع واکنش می دهد. از این رو سرعت واکنش این گاز با سرعت جذبش در مایع برابر است. بنابراین، کسر مولی اجزاء با سرعت جذب دی اکسید کربن و استکیومتری واکنش محاسبه می شود. غلظت بی کربنات سدیم در فاز مایع (مقدار فوق اشباع آن) تابعی از مقدار دی اکسید کربن ورودی از فاز گاز و همچنین میزان بی کربنات سدیم خروجی به فاز مایع می باشد. ارتفاع برج به دو منطقه تقسیم می شود: منطقه اول، از بالا برج (نقطه  $h$ ) تا نقطه ای که بی کربنات سدیم به غلظت اشباع می رسد (نقطه  $I_0$ )، و منطقه دوم، از این نقطه تا پایین برج (نقطه  $0$ ). نقطه  $I_0$  با استفاده از روش سعی و خطا بدست می آید. سپس، کسر مولی اجزاء در فاز گاز و همچنین شدت جریان ورود این گاز در نقطه  $0$  و مقادیر متناظر برای فاز مایع در نقطه  $h$  از معلومات مسئله است. بنابراین، کلیه خواص فیزیکی گاز و مایع، و سپس کلیه پارامترهای هیدرودینامیکی و انتقال جرمی ارائه شده در فلوجارت شکل ۲ را می توان محاسبه کرد. در نهایت، معادلات موازنه مول با شرایط مرزی مربوطه که در جدول ۱ ذکر شده اند را می توان جهت پیدا کردن شدت جریانها و همچنین میزان اجزاء در تک تک فازها بصورت عددی و با استفاده از روش اولر<sup>۱</sup> حل کرد. در ادامه روش مدلسازی و حل مدل ریاضی شرح داده شده است. اولین پارامتری که باید محاسبه گردد  $\mathcal{E}_g$  است که برای محاسبه آن نیاز به داشتن مقدار  $U_g$  می باشد. بنابراین، با استفاده از حلقه<sup>۲</sup> (پیکان خاکستری رنگ در شکل ۲ معرف حلقه می باشد) می توان این مقادیر را از معادلات (۶) و (۸) محاسبه کرد. سپس با استفاده از معادلات (۷)، (۱۰)، (۱۶) و (۲۴) بترتیب مقادیر  $P_{CO_2}$ ،  $D_I$ ،  $D_g$  و  $U_I$  قابل محاسبه است. پارامترهای  $k$ ،  $D_{CO_2}$ ،  $H$  و  $x^*$  تنها با داشتن دمای مایع از روابط (۹)، (۱۱)، (۱۵) و (۱۹) محاسبه می گردند. سپس مقدار  $d_B$  از رابطه (۱۴) و با استفاده از آن مقدار  $\alpha_g$  از رابطه (۱۷) بدست می آید. حال مقدار  $K_I$  از رابطه (۱۳) و بعد مقدار  $E$  از رابطه (۱۲) و در نهایت  $N_{CO_2}$  از رابطه (۱۸) محاسبه می گردد. از طرف

1 Euler  
2 Loop

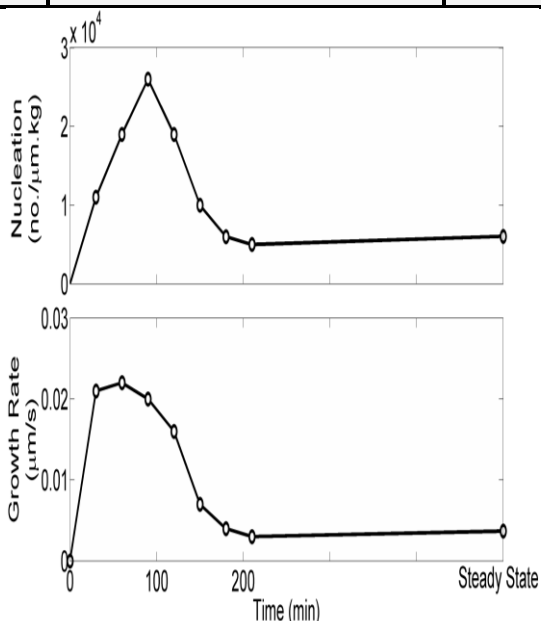


شکل ۲- رویه مدل سازی و حل مدل ریاضی<sup>۱</sup>

1 Ref [11-1]: Akita, K., & Yoshida, F. (1973). , Akita, K., & Yoshida, F. (1974). , Broul, M., Nývlt, J., & Söhnel, O. (1981). , Danckwerts, P. V. (1966)., P. K., & Brown, M. E. (2003). , Goharizi, A. S., & Abolpour, B. (2012)., Goharizi, R. S., & Abolpour, B. (2015). , Pavlica, R. T., & Olson, J. H. (1970)., A., Goharizi, A. S., & Ghader, S. (2009). , Tamimi, A., Rinker, E. B., & Sandall, O. C. (1994). , Wendt, R., Steiff, A., & Weinspach, P. M. (1983).

جدول ۱- معادلات موازنه مول به همراه شرایط مرزی مربوطه

ناحیه	گاز	مایع	جامد
$h$	$\frac{d}{dz}(G \cdot y_{CO_2}) = 0$	$x_{Na_2CO_3} = x_{Na_2CO_3in}, x_{NaHCO_3} = x_{NaHCO_3in}, x_{H_2O} = x_{H_2Oin}$ $L = L_{in}$	$S = 0$
$h$ ↓ $I_0$	$\frac{dG}{dz} = -N_{CO_2} \cdot \alpha_g$	$\frac{dL}{dz} = 0$ $\frac{\epsilon_1 \cdot D_l}{U_l} \cdot L \cdot \frac{d^2}{dz^2}(x_{Na_2CO_3}) + L \cdot \frac{d}{dz}(x_{Na_2CO_3}) = N_{CO_2} \cdot \alpha_g$ $\frac{\epsilon_1 \cdot D_l}{U_l} \cdot L \cdot \frac{d^2}{dz^2}(x_{NaHCO_3}) + L \cdot \frac{d}{dz}(x_{NaHCO_3}) = -2 \times N_{CO_2} \cdot \alpha_g$ $\frac{\epsilon_1 \cdot D_l}{U_l} \cdot L \cdot \frac{d^2}{dz^2}(x_{H_2O}) + L \cdot \frac{d}{dz}(x_{H_2O}) = N_{CO_2} \cdot \alpha_g$	
$I_0$	$\frac{\epsilon_g \cdot D_g}{U_g} \cdot \frac{d^2}{dz^2}(G \cdot y_{CO_2}) - \frac{d}{dz}(G \cdot y_{CO_2}) = N_{CO_2} \cdot \alpha_g$	$x_{Na_2CO_3} = x_{Na_2CO_3I_0}, x_{H_2O} = x_{H_2OI_0}, x_{NaHCO_3} = x_{NaHCO_3I_0}^*$ $L = L_{I_0}$	
$I_0$ ↓ $0$		$\frac{dL}{dz} = N_{NaHCO_3} \cdot \alpha_s$ $\frac{\epsilon_1 \cdot D_l}{U_l} \cdot \frac{d^2}{dz^2}(L \cdot x_{Na_2CO_3}) + \frac{d}{dz}(L \cdot x_{Na_2CO_3}) = N_{CO_2} \cdot \alpha_g$ $\frac{\epsilon_1 \cdot D_l}{U_l} \cdot \frac{d^2}{dz^2}(L \cdot x_{NaHCO_3}) + \frac{d}{dz}(L \cdot x_{NaHCO_3}) = N_{NaHCO_3} \cdot \alpha_s - 2 \times N_{CO_2} \cdot \alpha_g$ $\frac{\epsilon_1 \cdot D_l}{U_l} \cdot \frac{d^2}{dz^2}(L \cdot x_{H_2O}) + \frac{d}{dz}(L \cdot x_{H_2O}) = N_{CO_2} \cdot \alpha_g$	$\frac{dS}{dz} = -N_{NaHCO_3} \cdot \alpha_s$
$0$	$G = G_{in}$ $y_{CO_2} = y_{CO_2in}$	$\frac{d}{dz}(x_{Na_2CO_3}) = 0, \frac{d}{dz}(x_{NaHCO_3}) = 0, \frac{d}{dz}(x_{H_2O}) = 0$	



شکل ۳- مقایسه نتایج مدل (پایدار) با داده های تجربی (ناپایدار) از سرعت رشد و هسته زایی بلورهای جامد. (Saberi et al., 2009)

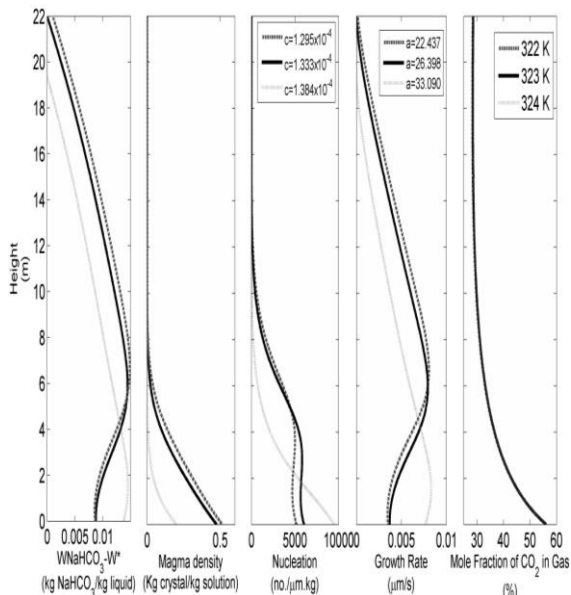
### ۳- ارزیابی مدل

به منظور بررسی دقت پیشگوییهای مدل، در این قسمت به مقایسه میان نتایج مدل با داده های تجربی پرداخته شده است (Saberi et al., 2009). این ارزیابی در سه زمینه صورت گرفته تا توانایی مدل ریاضی در تخمین سرعت های رشد و هسته زایی بلورها، توزیع اندازه این بلورها و همچنین شرایط محصول خروجی از پایین برج از نظر میزان فوق اشباع بودن مایع و همچنین دانسیته بلورهای جامد در آن، سنجیده شود. همانطور که در شکل های ۳ تا ۵ مشاهده می شود، مدل ریاضی با دقت قابل قبولی شرایط کمی و کیفی محصول برج را پیشگویی می نماید. باید توجه شود که داده های آزمایشگاهی در شرایط ناپایدار بدست آمده است. بدین صورت که از لحظه شروع بکار برج با بازه های زمانی مشخص از خروجی پایین برج نمونه گیری شده و با استفاده از این نمونه ها پارامترهای مشخص شده در این شکلها اندازه گیری شده اند. جزئیات بیشتر در مورد شرایط آزمایش در مرجع (Saberi et al., 2009) آورده شده است. از طرف دیگر مدل به پیشگویی این پارامترها در شرایط پایدار می پردازد.

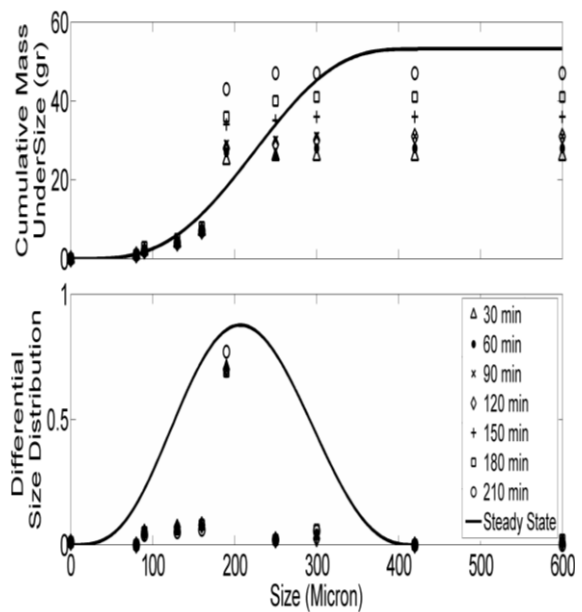
بلورها چون علاوه بر وابستگی به میزان فوغ اشباعیت مایع تابع دانسیته ماگما نیز می باشد، تغییرات سرعت هسته زایی بلورها تا حدودی نسبت به تغییرات فوق اشباعیت مایع در طول برج دارای تأخیر است. در بررسیهای پیش رو باید به این نکات بسیار مهم توجه شود، چراکه با توجه به قابل توجه شدن سرعت رشد و هسته زایی بلورهای جامد در پایین برج و رابطه پیچیده و متقابلشان با فوق اشباعیت مایع، این سه پارامتر رفتاری متناسب با یکدیگر خواهند داشت.

#### ۴-۱- اثر دمای مایع

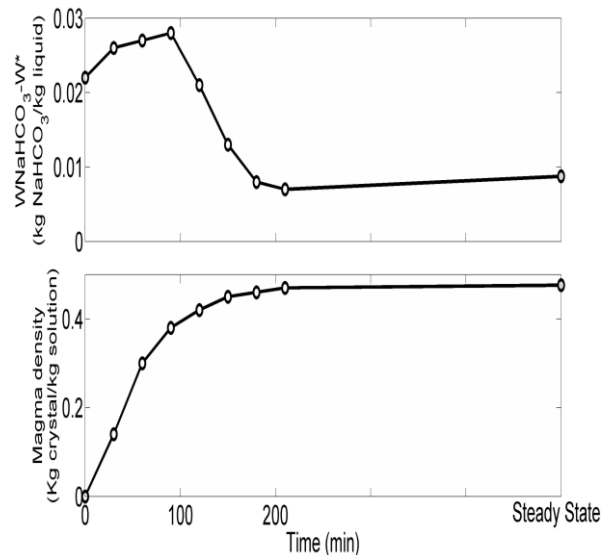
شکل ۶ تاثیر تغییر دمای مایع بر روی فوق اشباعیت مایع، دانسیته ماگما، نرخ رشد و هسته زایی بلورها و همچنین کسر مولی گاز دی اکسید کربن در حبابهای گاز در طول برج را نشان می دهد. همانطور که در این شکل دیده می شود، افزایش دما موجب کاهش میزان تولید بلورهای جامد بی کربنات سدیم (دانسیته ماگما) شده در حالی که تاثیر زیادی بر روی میزان جذب دی اکسید کربن از حبابهای گاز ندارد. لذا ریشه این کاهش تولید در تاثیر دمای مایع بر روی سنتیک تبلور می باشد. افزایش دما موجب افزایش غلظت اشباع مایع شده (با توجه به رابطه (۱۹)) و در نتیجه فوق اشباعیت مایع کاهش می یابد و البته وقوع نقطه  $I_0$  در برج به تأخیر می افتد. رفتار مشاهده شده در نمودار فوق اشباعیت مایع در شکل ۶ کاملاً گویای این مطلب است. البته اصولاً افزایش دما با افزایش سرعت واکنش و همچنین انتقال جرم، موجب افزایش سرعت رشد و هسته زایی بلورهای جامد در فوق اشباعیت مایع و دانسیته ماگمای یکسان (پارامترهای  $a$  و  $c$  در روابط (۲۰) و (۲۸)) می گردد، اما با توجه به وابستگی  $B_0$  و  $G_0$  به فوق اشباعیت مایع و کاهش این پارامتر با افزایش دما، این افزایش در کل موجب کاهش سرعت های رشد و هسته زایی بلورها و در نتیجه کاهش میزان تولید بلورهای جامد در برج می گردد. این دلیلی است برای تولید بلورهایی به نسبت کوچکتر در ازای دمای مایع بالاتر (شکل ۷ را ببینید). توجه شود که کاهش دما کمتر از ۳۲۳ کلون تاثیر زیادی بر روی کمیت و کیفیت تولید بلورهای جامد بی کربنات سدیم ندارد.



شکل ۶- پیشگویی های مدل از تاثیر دمای مایع بر روی فوق اشباعیت مایع، دانسیته ماگما، سرعت هسته زایی و رشد بلورها و همچنین کسر مولی گاز دی اکسید کربن در حبابهای گاز در طول برج حبابی.



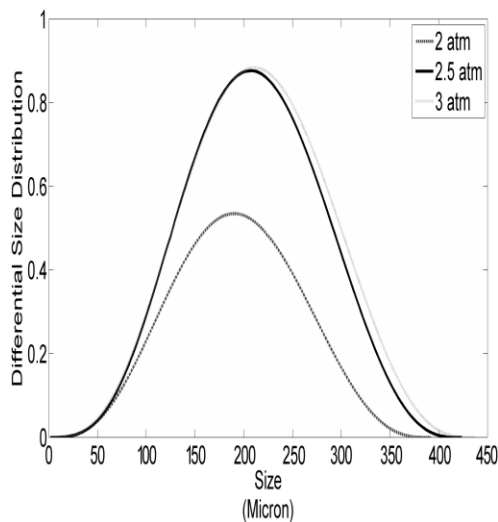
شکل ۴- مقایسه نتایج مدل (پایدار) با داده های تجربی (ناپایدار) (Saberi et al., 2009) از توزیع اندازه بلورهای جامد به دو صورت تجمعی و دیفرانسیلی در محصول برج.



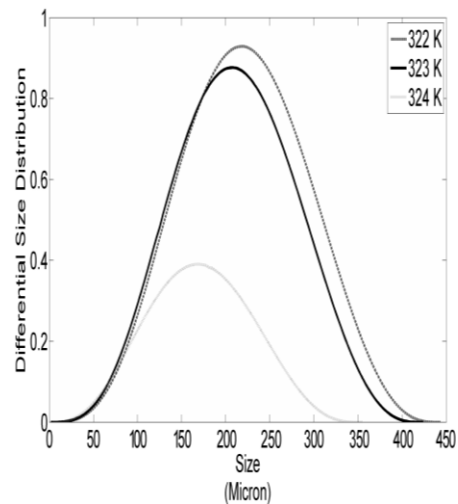
شکل ۵- مقایسه نتایج مدل (پایدار) با داده های تجربی (ناپایدار) از فوق اشباعیت مایع و دانسیته ماگما در محصول برج (Saberi et al., 2009).

#### ۴-۲- بحث و تحلیل نتایج

میزان فوق اشباعیت مایع از بی کربنات سدیم تابعی پیچیده از میزان انتقال دی اکسید کربن از فاز گاز به مایع و از طرف دیگر میزان انتقال بی کربنات سدیم از فاز مایع به جامد می باشد. از طرفی سرعت رشد و هسته زایی بلورهای جامد تابعی مستقیم از میزان فوق اشباعیت مایع از این جزء می باشد. لذا هر گونه تغییری که موجب افزایش سرعت رشد و هسته زایی بلورها گردد به معنی انتقال دهنده بیشتر این جزء از فاز مایع به جامد بوده و منجر به کاهش فوق اشباعیت مایع و در نتیجه کاهش سرعت های رشد و هسته زایی بلورهای جامد می باشد. این پدیده عامل اصلی تغییرات پیچیده فوق اشباعیت مایع، سرعت رشد و هسته زایی بلورها و همچنین دانسیته ماگما در طول برج می باشد. با توجه به اینکه سرعت رشد بلورها تنها تابعی از میزان فوق اشباعیت مایع دارد، در طول برج تغییراتی کاملاً مشابه خواهند داشت. اما در مورد سرعت هسته زایی



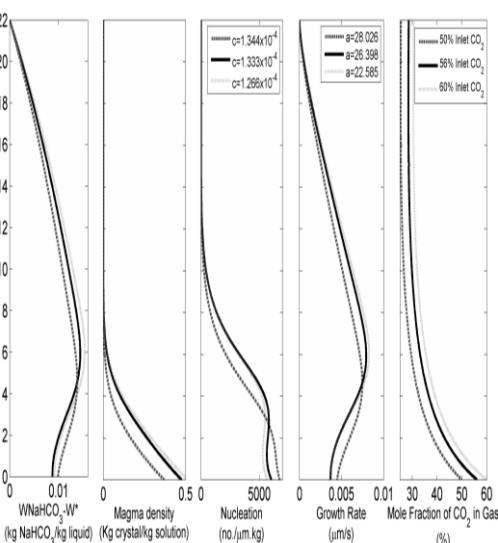
شکل ۹- پیشگویی های مدل از تاثیر فشار گاز ورودی بر روی توزیع اندازه بلورهای جامد تولیدی در محصول پایین برج.



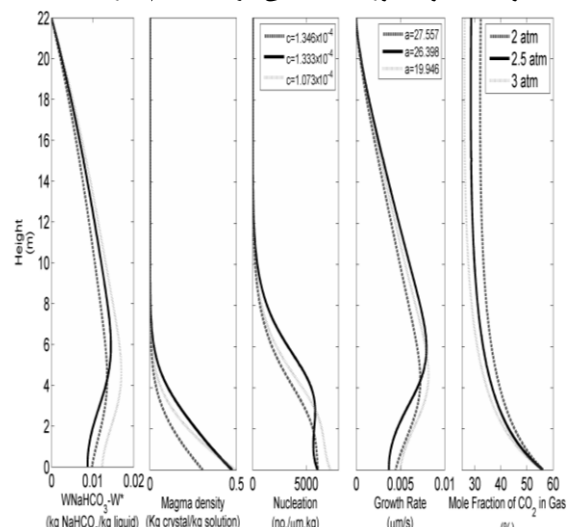
شکل ۷- پیشگویی های مدل از تاثیر دمای مایع بر روی توزیع اندازه بلورهای جامد تولیدی در محصول پایین برج.

#### ۴-۲- اثر فشار گاز ورودی

افزایش فشار گاز ورودی موجب افزایش نرخ انتقال دی اکسید کربن از فاز گاز به مایع (در نتیجه کاهش بیشتر کسر مولی دی اکسید کربن در طول برج) می گردد. با توجه به سرعت زیاد واکنش (۳-۱) این امر موجب افزایش غلظت بی کربنات سدیم در فاز مایع و در نتیجه افزایش میزان فوق اشباعیت مایع از این جزء می گردد. از طرفی این افزایش سرعت رشد و هسته زایی بلورها را افزایش می دهد که به معنی انتقال بیشتر این جزء از فاز مایع به جامد و در نتیجه کاهش فوق اشباعیت مایع و در نتیجه کاهش سرعت های رشد و هسته زایی بلورهای جامد می باشد. این پیچیدگی بیشتر توضیح داده شده است اما نکته قابل توجه این است که افزایش فشار گاز ورودی در کل موجب افزایش میزان تبدیل گاز دی اکسید کربن در حبابهای گاز و همچنین افزایش میزان تولید بلورهای جامد (دانسیته ماگما) در محصول پایین برج می گردد. شکل ۸ نشان دهنده تغییرات گفته شده در این قسمت می باشد. همانطور که شکل ۹ مشاهده می شود افزایش فشار گاز ورودی موجب درشت تر شدن بلورهای جامد تولیدی نیز می گردد. در این قسمت نیز مشاهده می شود که افزایش فشار گاز ورودی بیش از ۲/۵ اتمسفر تاثیر زیادی بر روی کمیت و کیفیت تولید بلورهای جامد بی کربنات سدیم ندارد.

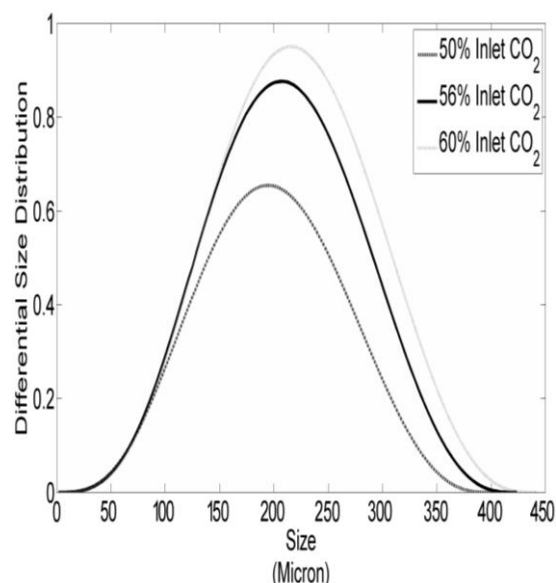


شکل ۱۰- پیشگویی های مدل از تاثیر کسر مولی دی اکسید کربن در گاز ورودی بر روی فوق اشباعیت مایع، دانسیته ماگما، سرعت هسته زایی و رشد بلورها و همچنین کسر مولی گاز دی اکسید کربن در حبابهای گاز در طول برج حبابی.



شکل ۸- پیشگویی های مدل از تاثیر فشار گاز ورودی بر روی فوق اشباعیت مایع، دانسیته ماگما، سرعت هسته زایی و رشد بلورها و همچنین کسر مولی گاز دی اکسید کربن در حبابهای گاز در طول برج حبابی.

که استفاده از نرخ رشد و هسته زایی بلورهای جامد که توسط آزمایش در شرایط عملیاتی ناپایدار برج بدست آمده است ( $G_0 = 1.381 \times 10^{-4} \times \Delta w^{1.53}$  و  $B_0 = 26.685 \times M_T^{.42} \cdot \Delta w^{1.31}$ ) (Saber et al., 2009) با مقادیری که توسط مدل برای حالت پایدار عملیاتی برج بدست آمده است ( $G_0 = 1.333 \times 10^{-4} \times \Delta w^{1.53}$  و  $B_0 = 26.398 \times M_T^{.42} \cdot \Delta w^{1.31}$ ) تقریباً یکسان است که همین امر می تواند تصدیق بر صحت پیشگوییهای مدل باشد. اما بررسی ها در سایر شرایطهای عملیاتی با مقادیر متفاوت دمای مایع، فشار گاز ورودی و همچنین کسر مولی دی اکسید کربن در این گاز نشان می دهد که ضرایب روابط نرخ رشد و هسته زایی بلورها (پارامترهای  $a$  و  $c$  در روابط (۲۰) و (۲۸)) تابعی از شرایط عملیاتی است و این در حالی است که توانها (پارامترهای  $b$ ،  $d$  و  $e$  در روابط (۲۰) و (۲۸)) تغییری از خود نشان نمی دهند. بنابراین تغییر شرایط عملیاتی تنها شدت وابستگی نرخ رشد و هسته زایی بلورها نسبت به فوق اشباعیت مایع و همچنین دانسیته ماگما را تحت تاثیر قرار می دهد نه چگونگی این وابستگی را. در موارد متعددی پیشگوییهای مدل در حالت پایدار با نتایج تجربی ناپایدار مقایسه شده تا درستی پیشگوییها تأیید گردد. در نهایت پیشگوییهای مدل نشان می دهد که افزایش فشار گاز ورودی یا کسر مولی گاز دی اکسید کربن در این گاز و یا کاهش دمای مایع موجب افزایش میزان تولید بلورهای جامد بی کربنات سدیم و همچنین درشت تر شدن این بلورها می گردد. اما تنها افزایش فشار گاز ورودی است که موجب افزایش نرخ جذب دی اکسید کربن از حبابهای گاز و در نتیجه تبدیل بیشتر این جزء می گردد.



شکل ۱۱- پیشگویی های مدل از تاثیر کسر مولی دی اکسید کربن در گاز ورودی بر روی توزیع اندازه بلورهای جامد تولیدی در محصول پایین برج.

#### ۴- نتیجه گیری

در این نوشته به مدلسازی و بررسی عوامل تاثیرگذار بر روی کمیت و کیفیت تولید بلورهای جامد بی کربنات سدیم در واحد سودااش پتروشیمی شیراز پرداخته شده است. این مدلسازی برپایه موازنه مول سه فازي توأم با پدیده های جذب و واکنش شیمیایی و همچنین موازنه جمعیت بلورهای جامد استوار شده و قابلیت پیشگویی سنتتیک تبلور، میزان جذب دی اکسید کربن، میزان تولید بلورهای جامد بی کربنات سدیم و توزیع اندازه این بلورها را داراست. این مدلسازی نشان می دهد

#### منابع

- Akita, K., & Yoshida, F. (1973). Gas holdup and volumetric mass transfer coefficient in bubble columns. Effects of liquid properties. *Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development*, 12(1), 76-80.
- Akita, K., & Yoshida, F. (1974). Bubble size, interfacial area, and liquid-phase mass transfer coefficient in bubble columns. *Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development*, 13(1), 84-91.
- Broul, M., Nývlt, J., & Söhnel, O. (1981). Solubility in inorganic two-component systems (Vol. 6). Elsevier Scientific Publishing Company.
- Danckwerts, P. V. (1966). The absorption of carbon dioxide into solutions of alkalis and amines (with some notes on hydrogen sulfide and carbonyl sulfide). *The Chemical Engineer*, 244-280.
- Gallagher, P. K., & Brown, M. E. (2003). Handbook of thermal analysis and calorimetry.
- Goharrizi, A. S., & Abolpour, B. (2012). Estimation of sodium bicarbonate crystal size distributions in a steady-state bubble column reactor. *Research on Chemical Intermediates*, 38(7), 1389-1401.
- Goharrizi, R. S., & Abolpour, B. (2015). Estimation of nucleation and growth rate of sodium bicarbonate crystals in a steady-state bubble column reactor. *Research on Chemical Intermediates*, 41(3), 1459-1471.
- Pavlica, R. T., & Olson, J. H. (1970). Unified design method for continuous-contact mass transfer operations. *Industrial & Engineering Chemistry*, 62(12), 45-58.
- Saber, A., Goharrizi, A. S., & Ghader, S. (2009). Precipitation kinetics of sodium bicarbonate in an industrial bubble column crystallizer. *Crystal Research and Technology: Journal of Experimental and Industrial Crystallography*, 44(2), 159-166.
- Tamimi, A., Rinker, E. B., & Sandall, O. C. (1994). Diffusion coefficients for hydrogen sulfide, carbon dioxide, and nitrous oxide in water over the temperature range 293-368 K. *Journal of Chemical and Engineering data*, 39(2), 330-332.
- Wendt, R., Steiff, A., & Weinspach, P. M. (1983). Flüssigphasenrückvermischung in blasensäulenreaktoren. *Chemie Ingenieur Technik*, 55(10), 796-797.

# Modeling The Sodium-Bicarbonate Production Process Using Carbon Dioxide

Document Type: Research Paper

Authors

Bahador Abolpour<sup>1</sup>; Rahim Shamsoddini<sup>2</sup>; Ramtin Hekmatkhah<sup>3</sup>

1\*. Assistant Professor, Department of Chemical Engineering, Sirjan University of Technology, Sirjan, Iran

2. Assistant Professor, Department of Mechanical Engineering, Sirjan University of Technology, Sirjan, Iran

3. Department of Aerospace Engineering, The Faculty of New Sciences and Technologies, The University of Tehran, Tehran, Iran

## Abstract

Sodium bicarbonate is produced in a bubble column by injection carbon dioxide gas into the carbonate and bicarbonate liquid solutions. This paper investigated a triple-phase mass transfer coupled with chemical reactions and crystallization. In this work, a mole balance has been written on flows and components, utilized the Danckwerts theory for mass transfer between gas and liquid phase and a population balance to obtain the nucleation and growth formula. The model results compared with the experimental data for validation. Finally, the effects of several parameters were investigated on the sodium bicarbonate crystal nucleation and growth rate and also crystals size distribution. Therefore, this model can predict the carbon dioxide conversion and the quantity and quality of produced solid crystals in various operating conditions. These predictions show that the production of sodium bicarbonate crystals and the size of these crystals increase by increasing the inlet gas pressure or inlet carbon dioxide mole fraction or decreasing the liquid temperature. But, the carbon dioxide conversion increases by increasing the inlet gas pressure.

## Introduction

Bubble towers are widely used in industry as gas, liquid and solid contactors due to their simple construction and operation. The bubble tower should be used not only for biotechnological or environmental purposes, but also for conventional chemical reactions in the production of sodium bicarbonate. In our previous study, the experimental growth rate and nucleation of sodium bicarbonate crystals in the bubble tower of Shiraz Petrochemical Complex by gas injection Carbon monoxide to liquid solutions of sodium carbonate and bicarbonate in unstable operating state is obtained by measuring the size distribution of solid crystals at certain times. Because these parameters are measured under unstable operating conditions and also have significant dependence on these conditions, the use of these experimental values is the main reason for the error of our previous modeling predicting crystal size distribution under conditions. It is a diverse and stable operation. Therefore, using a population balance on solid crystals, these parameters have been calculated under different stable operating conditions for use in bubble tower modeling.

## Methodology

The inner diameter and height of this tower are inner diameter and the height of this bubble tower is 1.2 and 22 meters, respectively. Due to the low enthalpy of reaction and the installation of a water jacket around the tower, the temperature of the liquid inside the tower remains constant. A solution of sodium carbonate and bicarbonate enters from the top of the tower and carbon dioxide and air gas mixtures are injected into the tower from below. When the concentration of sodium bicarbonate produced reaches its saturation level in solution, solid crystals begin to form. Mass transfer equations are obtained using a one-dimensional differential



control volume. The presence of a rotational flow in the gas and liquid phases has led to the use of a radial diffusion model to model the tower.

### **Conclusion**

In this paper, the factors affecting the quantity and quality of production of solid sodium bicarbonate crystals in the soda unit of Shiraz Petrochemical have been studied. This modeling is based on three-phase mole balance with adsorption and chemical reaction phenomena as well as solid crystal population balance and has the ability to predict the crystallization synthesis, carbon dioxide uptake, sodium bicarbonate solid crystal production and size distribution of these crystals. This modeling shows the use of growth rate and nucleation of solid crystals obtained by experiments in unstable operating conditions of the tower.

### **Keywords**

Sodium bicarbonate; Bubble column; Triple phase mass transfer; Crystallization; Modeling