

اثر تعادل بخار-مایع بر جذب گاز CO₂ توسط محلول آبی پپرازین و مایع یونی به روش طراحی آزمایش مرکب مرکزی

سهیلا زارع^۱، عبدالرسول پوران فرد^{۲*}

۱. دانشجوی دکترای، گروه مهندسی شیمی، دانشکده فنی مهندسی، دانشگاه یاسوج، یاسوج، ایران

۲. استادیار گروه مهندسی شیمی، دانشکده فنی و مهندسی، دانشگاه یاسوج، یاسوج، ایران

آدرس پست الکترونیک نویسنده مسئول مکاتبات: r.pouranfard@yu.ac.ir

مقاله علمی-ترویجی

صفحه ۸۰ - ۹۳

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۲/۰۵/۲۸

تاریخ دریافت: ۱۴۰۲/۰۳/۲۲

چکیده

در این پژوهش، جذب گاز CO₂ توسط محلول آبی پپرازین و مایع یونی به روش سطح پاسخ (RSM) بر اساس طراحی مرکب مرکزی (CCD) به منظور طراحی آزمایش‌ها، ساخت مدل‌ها و یافتن شرایط عملیاتی بهینه برای دستیابی به پاسخ‌های مطلوب در محدوده دما، فشار و زمان مورد بررسی قرار گرفت. طراحی و بهینه‌سازی این گروه از واحدهای جداسازی، مستلزم داشتن داده‌های دقیق تعادلی و ترمودینامیکی بخار-مایع می‌باشد. در این تحقیق، شرایط بهینه‌ی بارگیری گاز CO₂ با استفاده از روش طراحی مرکب مرکزی تعیین گردید. تجزیه و تحلیل معادلات، مطابق رگرسیون چندجمله‌ای درجه دوم و تحلیل واریانس ANOVA انجام شد. مطابق نتایج به دست آمده، افزایش فشار و زمان و کاهش دما، منجر به افزایش میزان حلالیت گاز دی‌اکسید کربن در مخلوط آمینی گردید. شرایط بهینه‌ی جذب نیز در فشار ۶/۱ bar، دمای ۲۱ °C و زمان ۱/۵ ساعت به دست آمد. در انتها، مکانیزم تأثیر دما بر میزان حلالیت با اصل لوشاتلیه، تأثیر فشار بر حلالیت با قانون هنری و تأثیر زمان بر حلالیت با بررسی سینتیکی واکنش جذب تعیین گردید.

کلیدواژه‌ها: جذب گاز دی‌اکسید کربن، مخلوط آبی آمین پپرازین و مایع یونی، تعادل بخار-مایع، روش مرکب مرکزی

۱. مقدمه

با شیوه‌ی زندگی ساکنان شهرهای جهان دارد [۲۰۱]. دی‌اکسید کربن در بین گازهای گلخانه‌ای موجود در جو، دارای بیشترین تأثیر بر پدیده‌ی گرمایش زمین می‌باشد. CO₂ موجود در اتمسفر به‌عنوان سپر حرارتی زمین عمل می‌کند و با اثر گلخانه‌ای طبیعی مانع از سرد شدن زمین می‌شود. البته، غلظت‌های بالای دی‌اکسید کربن در جو که از سوخت‌های فسیلی حاصل می‌شود، به‌عنوان آلاینده‌ی جوی به شمار می‌رود [۳]. بر اساس گزارشات استانداردهای سازمان ایمنی و بهداشت شغلی^۱ (OSHA) تاکنون اثراتی از سرطان‌زایی در

اکوسیستم کروی زمین به مثابه‌ی سیستم یکپارچه‌ای است که هر شوکی بر هر ناحیه‌ی آن، بر کل سیستم اثر می‌گذارد. از این‌رو، مخاطرات و چالش‌های زیست‌محیطی، نه تنها یک مسئله‌ی داخلی، بلکه یک مسئله‌ی جهانی است. اهمیت این موضوع در رابطه با آلودگی هوا بیش از هر عامل دیگری نمود دارد. از آنجاکه مرزی در جو وجود ندارد، انتشار گازهای گلخانه‌ای در یک مکان و زمان معین می‌تواند باگذشت زمان، در یک مکان دیگر اثر خود را نمایان سازد. نکته‌ی قابل توجه آن است که تولید و انتشار گازهای گلخانه‌ای، رابطه‌ی معناداری

1. Occupational Safety and Health Administration

خصوص این گاز مشاهده نشده است. همچنین، مطالعات در خصوص کارگرانی که به‌طور مداوم با مقادیر زیاد گاز CO_2 در تماس بوده‌اند، نشان داده است که مواجهه با میزان ۱/۵-۱ درصد برای ۴۲ تا ۴۴ روز باعث ایجاد تداخل برگشت‌پذیر در تعادل اسیدبته‌ی خون می‌گردد و این میزان مواجهه باعث می‌شود که عمق تنفس برای فرد زیاد شود [۴]. با توجه به اینکه CO_2 گازی تقریباً بی‌بو و بی‌رنگ است، تشخیص آن در محیط در مقادیر کمتر از ۴۰ درصد مشکل بوده و تشخیص مسمومیت با آن نیز دشوار می‌باشد؛ زیرا علائم مسمومیت با دی‌اکسید کربن مشابه مسمومیت با تعداد زیادی از آلاینده‌هاست و دارای اثرات اختصاصی نیست [۵]. دانشمندان بر این باورند که اگر روند تولید گازهای گلخانه‌ای همچنان رو به افزایش باشد، در آن صورت آهنگ پدیده‌ی گرمایش زمین سریع‌تر خواهد شد و طی پنجاه سال آینده این افزایش دما به ۳ الی ۵ درجه‌ی سانتی‌گراد خواهد رسید [۶]. حتی اگر از همین امروز تولید گازهای گلخانه‌ای متوقف گردد، این افزایش دما طی بیست سال آینده به یک درجه‌ی سانتی‌گراد خواهد رسید. هرچند این مقدار افزایش دما چندان زیاد به نظر نمی‌رسد، اما می‌تواند موجب تغییرات شدیدی در وضعیت پدیده‌های جوی و میزان بارندگی‌ها شده و تأثیرات ویرانگر بر جای بگذارد. به گزارش مجله‌ی نشنال جئوگرافیک، به علت افزایش گازهای گلخانه‌ای و گرم شدن زمین تا سال ۲۰۵۰ بیش از یک میلیون گونه‌ی گیاهی و جانوری در معرض انقراض قرار خواهند گرفت و توزیع جغرافیایی خیلی از گونه‌های جانوری نیز تغییر خواهد کرد [۷]. سازمان ملل در گزارش اخیر خود به تلفات خسارات و هزینه‌ی سنگین، بروز طغیان آب، خشک‌سالی‌ها، قحطی و موج فزاینده‌ی گرما اشاره داشته و آن‌ها را از جمله بلایای طبیعی انسان ساخت بر اثر تولید گازهای گلخانه‌ای مانند دی‌اکسید کربن می‌داند. آمارها نشان می‌دهد به ازای افزایش یک درجه‌ی سانتی‌گراد دما، ۳ درصد به میزان مرگ‌ومیر افزوده می‌شود [۸].

جداسازی دی‌اکسید کربن از طریق جذب آن در یک حلال فیزیکی و شیمیایی، یک تکنولوژی تجاری شده است که به مدت ۶۰ سال در صنعت گاز طبیعی مورد استفاده قرار گرفته و به‌عنوان بالغ‌ترین فرآیند در جداسازی گاز دی‌اکسید کربن و همچنان به‌عنوان یک فناوری به‌روز، در نظر گرفته می‌شود. اساس جذب شیمیایی یا واکنشی، واکنش دی‌اکسید کربن با حلال است که این واکنش، موجب افزایش نیروی محرکه‌ی انتقال جرم، به دلیل کاهش فشار جزئی تعادلی دی‌اکسید کربن در سطح مشترک گاز-مایع و افزایش ضریب انتقال

جرم فاز مایع، می‌گردد. این واکنش برگشت‌پذیر بوده و تعادل آن وابسته به دما است. فشار جزئی دی‌اکسید کربن در گاز دودکش پس از احتراق، معمولاً در محدوده‌ی ۱۵-۳ KPa است؛ بنابراین، جذب شیمیایی از آنجایی که حلال‌های شیمیایی به فشار جزئی وابستگی کمتری دارند، محتمل‌ترین تکنولوژی مورد استفاده برای جداسازی دی‌اکسید کربن در فشارهای جزئی پایین است. در جذب شیمیایی، به شدت جریان کمتری از حلال در مقایسه با جذب فیزیکی به دلیل افزایش ظرفیت حلال، نیاز است؛ اما همان‌طور که ذکر شد، نیاز به انرژی برای احیاء حلال یا فرآیند دفع، به دلیل انجام واکنش‌های شیمیایی، بیشتر می‌شود [۹]. توانایی یک حلال شیمیایی در جداسازی CO_2 به میزان حلالیت تعادلی و نیز مقدار انتقال جرم و سینتیک واکنش بستگی دارد. نجفالو (۲۰۱۹) در پژوهشی به مدل‌سازی ترمودینامیکی جذب دی‌اکسید کربن در محلول دی‌متانول آمین پرداخت. در این پژوهش به‌منظور تعیین حلالیت گاز کربن دی‌اکسید در محلول آبی متیل دی‌اتانول آمین (MDEA) از معادله حالت SAFT-HR استفاده نمود و با استفاده از پارامترهای تنظیم شده در این پژوهش، برای بازه دمایی ۲۹۸-۱۵/۴۱۳ کلوین و بازه فشاری ۳۶-۷/۵۰۳۶ کیلو پاسکال، پیش‌بینی حلالیت تعادلی کربن دی‌اکسید انجام گردید [۱۰]. پاشایی و همکارانش (۲۰۲۰) به مدل‌سازی تجربی و بهینه‌سازی جذب CO_2 توسط پپیرازین با استفاده از روش RSM-CCD پرداختند. در این پژوهش به حداکثر راندمان حذف ۹۷/۹ درصد، سرعت جذب g/min و میزان لودینگ mol/mol ۰/۲۵۸ دست یافتند [۱۱]. رشیدی و همکارش (۲۰۲۳) به مدل‌سازی سطح پاسخ فرآیند جذب CO_2 حلال متیل دی‌اتانول آمین-پپیرازین بدون آب پرداختند. در این مطالعه تأثیر عوامل مختلفی از جمله غلظت متیل دی‌اتانول آمین-پپیرازین ۳۰-۵۰ درصد وزنی، دما ۲۰-۴۰ درجه سانتی‌گراد، جریان ورودی حلال ۳-۹ میلی‌لیتر در دقیقه و غلظت دی‌اکسید کربن ۵-۱۵ درصد حجمی ارزیابی کردند. به‌منظور طراحی آزمایش‌ها و مدل‌سازی نتایج از روش سطح پاسخ Box-Behnken استفاده نمودند. ترتیب اثر متغیرها بر راندمان حذف CO_2 بدین شرح بود؛ سرعت جریان حلال $> ۴۹/۵۵$ (درصد) غلظت حلال $> ۲۴/۵۹$ (درصد) دمای جذب $> ۱۸/۰۵$ (درصد). بالاترین راندمان حذف CO_2 با ۹۴/۶۲ درصد در دمای بهینه ۳۰ درجه سانتی‌گراد و غلظت ۱۰ درصد حجمی CO_2 ، و همچنین حداکثر غلظت آمین و جریان حلال به دست آوردند [۱۲]. در این تحقیق، جذب گاز CO_2 توسط مخلوط آمینی آبی پپیرازین و مایع یونی به‌صورت آزمایشگاهی





بررسی گردیده است. این ترکیب بهینه‌ی مخلوط آمینی با استفاده از روش طراحی رئوس حدی تعیین شد. مخلوط آمینی مورد استفاده در این پژوهش شامل آب، پپرازین و ۱- بوتیل-۳- متیل ایمیدازولیوم هیدروژن سولفات بوده است. در این پژوهش به‌عنوان یک ترکیب نوین در جداسازی گاز دی‌اکسید کربن بهره گرفته شد [۱۳]. همچنین، از روش سطح پاسخ (RSM)، بر اساس روش طراحی مرکب مرکزی (CCD) به‌منظور طراحی آزمایش‌ها، ساخت مدل‌ها و یافتن شرایط عملیاتی بهینه برای دستیابی به پاسخ‌های مطلوب در محدوده‌ی دما، فشار و زمان استفاده شده است. این نوع طراحی پرکاربردترین روش سطح پاسخ می‌باشد. همچنین در این روش تعداد ۵ سطح را اعمال می‌کند و یک روش چرخش‌پذیر می‌باشد. در روش CCD هر فاکتور پنج سطح متفاوت دارد (شامل سه نقطه در داخل حدود مشخص شده برای هر عامل و دو نقطه خارج از حدود مشخص شده برای هر عامل است [۱۴]).

۲. مواد و روش‌ها

۲-۱. مواد مورد استفاده

در این پژوهش آب یون‌زدایی شده^۱، نیتریک اسید^۲، هیدروکلریک اسید^۳، سولفوریک اسید^۴، پپرازین^۵، گاز نیتروژن^۶، سدیم هیدروکسید^۷، ۱- بوتیل-۳- متیل ایمیدازولیوم هیدروژن سولفات^۸، پتاسیم کلرید^۹، سدیم کلرید^{۱۰}، تهیه و استفاده شده است. تنظیم pH با استفاده از pH متر مدل Metrohm827 ساخت شرکت متروهم انجام شد. وزن کردن نمونه‌ها با استفاده از ترازوی سرتیوس مدل TE1245 با دقت $0.0001 \pm$ انجام گرفت.

۲-۲. راکتور جذب

راکتور جذب گاز دی‌اکسید کربن، شامل سه دهانه می‌باشد که دهانه بالایی راکتور به قطر داخلی ۲۵ میلی‌متر به سنسور فشار متصل می‌باشد. دهانه‌ی سمت چپ جهت ورود گاز تعبیه شده است. دهانه‌ی سمت راست به قطر داخلی ۲۰

میلی‌متر می‌باشد که جهت تسهیل در ورود و خروج حلال و همچنین شستشوی راکتور بر روی دیواره راکتور تعبیه گردیده است. با توجه به اینکه در طی فرآیند جذب دمای راکتور باید ثابت نگه‌داشته شود، بنابراین، جهت ثابت نگه‌داشتن دمای آن یک هیتر در زیر راکتور قرار داده و دمای آن را توسط ترمومتر مرتباً اندازه‌گیری نموده تا در طول فرآیند ثابت نگه‌داشته شود. در طول آزمایش، راکتور بر روی هیتر قرار گرفته و دمای آن کنترل گردیده است. علاوه بر این، با استفاده از هیتر آزمایشات را در دماهای مختلفی انجام داده و نقش دما را در فرآیند جذب گاز مورد بررسی قرار گرفت. بعلاوه، تغییرات فشار توسط کنترلر الکتریکی فشار اندازه‌گیری شده است. این کنترلر دارای ترانسیمپتر خازنی بوده که در مقابل شوک‌های لحظه‌ای پایدار و از ثبات فیزیکی خوبی برخوردار می‌باشد.

۲-۳. آزمایش جذب گاز

به‌منظور انجام آزمایش جذب گاز دی‌اکسید کربن، ابتدا مقدار معینی از حلال پپرازین با غلظت مشخص تهیه نموده، سپس توسط سرنگ حلال مورد نظر به درون راکتور تزریق شده، دهانه‌ی ورودی حلال را کاملاً بسته و بلافاصله پمپ خلأ را روشن نموده تا اینکه سیستم تعادلی تحت خلأ قرار گیرد. سپس، المنت داخل حمام آب را روشن نموده تا اینکه دمای حمام به مقدار مورد نظر برسد. با افزایش دمای حمام، فشار داخل راکتور کمی افزایش یافته و در نهایت ثابت می‌گردد. زمانی که دمای حمام آب به دمای مورد نظر آزمایش برسد، در این هنگام فشار اندازه‌گیری شده توسط سنسور فشار ثبت و یادداشت می‌گردد. این فشار را فشار بخار حلال نامیده و با P_0 نشان داده می‌شود.

۲-۴. محاسبات اندازه‌گیری ظرفیت تعادلی حلال

در این محاسبات، P_0 فشار بخار حلال، P_{TI} فشار درون بالن (فشار کل) که برابر با مقدار دی‌اکسید کربن خالص ورودی به راکتور می‌باشد. P_{CO_2} برابر با فشار جزئی اولیه دی‌اکسید کربن می‌باشد و از رابطه‌ی (۱) محاسبه می‌گردد.

1. De-Ionized Water
2. Nitric Acid
3. Hydrochloric Acid
4. Sulfuric Acid
5. Piperazine
6. Nitrogen Gas
7. Sodium Hydroxide
8. 1-butyl-3-methyl-imidazoliumhydrogen sulphate
9. Potassium Chloride
10. Sodium Chloride

$$P_{CO_{2i}} = P_{T1} - P_o \quad (1)$$

با داشتن مقادیر دما، حجم رآکتور و فشار جزئی دی اکسید کربن، تعداد مول دی اکسید کربن ورودی به رآکتور را طبق قانون گازهای ایده آل به دست آورده و با n_1 نشان داده می شود.

$$n_1 = \frac{v \times P_{CO_{2i}}}{ZRT} \quad (2)$$

سپس، به سیستم زمان داده شده تا فشار داخل رآکتور افت کرده و در نهایت، به حالت تعادل برسد. زمانی که فشار داخل رآکتور ثابت گردید، زمان تعادل فرا رسیده است. در این زمان، فشار کل داخل بالن با P_{T2} نشان داده می شود. فشار جزئی تعادلی یا نهایی رآکتور با $P_{CO_{2f}}$ نشان داده شده و از رابطه (۳) محاسبه می گردد.

$$P_{CO_{2f}} = P_{T2} - P_o \quad (3)$$

تعداد مول دی اکسید کربن باقی مانده در داخل رآکتور از معادله (۴) به دست می آید.

$$n_2 = \frac{v \times P_{CO_{2f}}}{ZRT} \quad (4)$$

تعداد مول دی اکسید کربن جذب شده از معادله (۵) محاسبه می گردد.

$$n = n_1 - n_2 \quad (5)$$

با داشتن تعداد مول حلال ورودی به رآکتور، مقدار ظرفیت جذب دی اکسید کربن طبق معادله (۶) به دست آمده و با α نشان داده می شود.

$$\alpha = \frac{n_{CO_2}}{\text{mole solvent}} \quad (6)$$

۲-۵. طراحی آزمایش مرکب مرکزی

در روش طراحی آزمایش^۱، آزمایش به گونه ای طراحی می شود که به منظور رسیدن به پاسخ، فاکتورها به صورت هم زمان با هم آزمایش می شود. چارچوب اصلی طراحی آزمایش بر اساس یکسری طرح های استاندارد است که برهم کنش بین فاکتورها در نظر گرفته شده و همچنین، با تعداد آزمایشات کمتری می توان به نقطه ی بهینه ی نهایی رسید. پیش نیاز انجام مرحله ی بهینه سازی در طراحی آزمایش

(DOE)، مرحله ی غربال گیری^۲ است. منظور از غربال گیری انتخاب فاکتورهای مؤثر بر فرآیند می باشد که بهینه سازی این فاکتورهای تأثیرگذار، به منظور رسیدن به نقطه ی بهینه نهایی انجام می گردد. منظور از بهینه سازی یافتن سطوحی از فاکتورهای مؤثر برای آزمایش است که پاسخ آزمایش (بسته به هدف آن) حداکثر و یا حداقل گردد که در اینجا بایستی سطوحی از فاکتورهای مؤثر را به دست آورد که در آن راندمان حذف دی اکسید کربن حداکثر شود.

۱-۵-۲. غربال گیری و تعیین پارامترهای اثرگذار بر فرآیند

آزمایش های غربال گیری که شامل طرح های دو سطحی می باشند [۱۴]، به منظور تعیین برهم کنش ها و متغیرهای مهم آزمایشگاهی انجام می شوند. علاوه بر این، میزان تأثیر هر کدام از فاکتورهای تحت بررسی بر روی پاسخ سیستم (تخمین اثر) به صورت مقایسه ای به دست می آید.

۲-۵-۲. بررسی برهم کنش پارامترهای مؤثر بر فرآیند جذب و تعیین مقادیر بهینه ی پارامترها

در این پژوهش، میزان جذب دی اکسید کربن به عنوان هدف آزمایش تعیین شده و با استفاده از روش غربال گیری در نرم افزار مینی تب، سه پارامتر دما (T) و فشار (P) مخلوط آمینی و همچنین زمان انجام فرآیند جذب، به عنوان متغیرهای اثرگذار بر آزمایش شناخته شدند. در روش پاسخ سطحی، اثرات پارامترهای مؤثر به صورت خطی، درجه دوم و برهم کنش های دوتایی بررسی می شوند. در (جدول ۱) سطوح مورد آزمایش متغیرها ارائه شده است.

جدول ۱: محدوددهی متغیرهای در نظر گرفته شده در طراحی آزمایش مرکب مرکزی

متغیرهای آزمایش	محدوده ی متغیرها				
	$+\alpha$	+۱	۰	-۱	$-\alpha$
فشار (bar)	۷/۴	۶	۴	۲	۰/۶
دما (°C)	۴۶/۸	۴۰	۳۰	۲۰	۱۳/۱
زمان (ساعت)	۷/۹	۶/۵	۴/۵	۲/۵	۱/۱

میزان ظرفیت جذب به عنوان متغیر پاسخ تعیین شد که با استفاده از محاسبات انجام شده جهت اندازه گیری ظرفیت

1. Design of Experiment
2. Screening





تعادلی حلال در بخش ۲-۳ محاسبه می‌شود. اکنون، با استفاده از الگوریتم طراحی مرکب مرکزی^۱ آزمایش‌های تعیین شرایط بهینه‌ی فرآیند جذب دی‌اکسید کربن طراحی می‌گردد. آزمایش‌های طراحی‌شده در (جدول ۲) نشان داده شده است.

جدول ۲: طراحی آزمایش مرکز ثقل ساده برای یافتن شرایط بهینه‌ی فرآیند جذب CO₂

آزمایش	فشار (P)	دما (T)	زمان (t)
۱	۴	۴۶/۸	۴/۵
۲	۴	۳۰	۴/۵
۳	۶	۴۰	۲/۵
۴	۴	۳۰	۴/۵
۵	۴	۱۳/۱	۴/۵
۶	۲	۴۰	۶/۵
۷	۴	۳۰	۴/۵
۸	۴	۳۰	۷/۹
۹	۲	۲۰	۲/۵
۱۰	۰/۶	۳۰	۴/۵
۱۱	۴	۳۰	۴/۵
۱۲	۶	۲۰	۲/۵
۱۳	۶	۴۰	۶/۵
۱۴	۲	۲۰	۶/۵
۱۵	۲	۴۰	۲/۵
۱۶	۶	۲۰	۶/۵
۱۷	۷/۴	۳۰	۴/۵
۱۸	۴	۳۰	۴/۵
۱۹	۴	۳۰	۴/۵
۲۰	۴	۳۰	۱/۱

۳. بررسی چگونگی تأثیر عوامل مؤثر بر فرآیند جذب

نرم‌افزار طراحی آزمایش، در واقع به بررسی برهم‌کنش و بهینه‌سازی فرآیند جذب می‌پردازد. درحالی‌که غالب بررسی‌های علمی مستلزم مطالعه‌ی تأثیر تک عاملی یک فاکتور بر متغیر پاسخ می‌باشد. لذا، پس از بهینه‌سازی فرآیند، اثر هر پارامتر بر فرآیند به‌طور جداگانه بررسی می‌گردد.

۳-۱. اثر فشار

بر اساس قانون هنری، فشار بر میزان انحلال‌پذیری دی‌اکسید کربن در مخلوط آمینی تأثیرگذار است [۱۵]. بررسی اثر فشار بدین‌صورت انجام می‌پذیرد که ابتدا ۵۰۰ میلی‌لیتر از ترکیب آمینی بهینه درون رآکتور ریخته می‌شود و دما و زمان در مقادیر بهینه محاسبه شده توسط نرم‌افزار در مرحله‌ی قبل ثابت نگه‌داشته می‌شود. سپس، شیر کپسول دی‌اکسید کربن را باز کرده تا گاز به درون رآکتور تزریق شود. زمانی که فشار رآکتور به میزان موردنظر رسید، شیر بسته می‌شود تا اینکه فرآیند جذب آغاز شود. این عمل در چندین فشار انجام می‌گیرد تا اینکه منحنی تغییرات میزان جذب CO₂ با تغییرات فشار ترسیم گردد.

۳-۲. اثر دما

توابع ترمودینامیکی مورد بررسی در فرآیند جذب و دفع گاز، تابعیت دمایی دارند. لذا، دمای محلول در طی فرآیند جذب، بر مکانیزم جذب مؤثر است [۱۶]. به‌منظور بررسی اثر دما، رآکتور در دماهای مختلف قرار داده شد. درحالی‌که دمای ظروف کنترل می‌شود، ۵۰۰ میلی‌لیتر از مخلوط آمینی با ترکیب بهینه به درون رآکتور تزریق شد و در فشار بهینه به‌اندازه‌ی کافی زمان داده شد تا اینکه فرآیند جذب به‌طور کامل انجام گیرد. پس از اتمام فرآیند جذب، میزان جذب توسط محاسبات ظرفیت جذب تعیین گردید.

۳-۳. اثر زمان

زمان رسیدن به تعادل، یکی از فاکتورهای مهم در فرآیند جذب گاز CO₂ توسط مخلوط آمینی می‌باشد. اطلاعات سینتیکی، ارزش عملی بسیار زیادی دارد و بیان‌گر سرعت جذب گونه‌ی جذب‌شونده در محلول بوده و زمان رسیدن به تعادل را کنترل می‌کند [۱۷]. به‌منظور بررسی اثر زمان و به دست آوردن زمان به تعادل رسیدن فرآیند جذب، پس از تنظیم فشار و دمای مخلوط آمینی با ترکیب بهینه، فرآیند

مرحله‌ی بعد از طرح‌ریزی آزمایش، انجام آزمایش‌های طراحی‌شده است. بدین‌صورت که ۵۰۰ میلی‌لیتر از مخلوط آمینی با ترکیب بهینه‌ی مرحله‌ی قبل تهیه شده و به درون رآکتور شارژ می‌شود. سپس، فرآیند جذب دی‌اکسید کربن مطابق روش ارائه شده در بخش (۲-۳) با تنظیم پارامترهای مؤثر بر فرآیند در مقادیر خواسته شده توسط نرم‌افزار طراحی آزمایش انجام می‌گیرد. نتایج بهینه‌سازی در بخش (۴-۲) گزارش شده است.

1. Central Composite Design

جذب گاز مانند قبل انجام شده و تعداد مول‌های جذب‌شده محاسبه می‌گردد.

۴- بحث و نتیجه‌گیری

۴-۱. نتایج طراحی آزمایش مرکب مرکزی برای تعیین شرایط بهینه‌ی جذب گاز CO₂

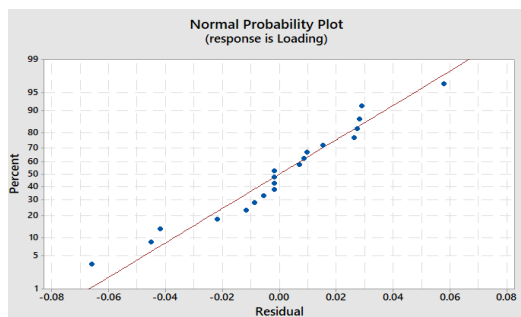
این طراحی آزمایش نیز با سطح اطمینان ۹۵ درصد و استفاده از یک مدل درجه دوم در یک بلاک با تعداد ۲۰ آزمایش و متغیر پاسخ ظرفیت جذب تحلیل شد که نتایج به‌دست‌آمده در (جدول ۳) ارائه شده است.

جدول ۳: نتایج طراحی آزمایش مرکب مرکزی برای یافتن شرایط بهینه‌ی فرآیند جذب CO₂

آزمایش	فشار (P)	دما (T)	زمان (t)	ظرفیت جذب CO ₂
۱	۴	۴۶/۸	۴/۵	۱/۴۰
۲	۴	۳۰	۴/۵	۱/۴۸
۳	۶	۴۰	۲/۵	۱/۵۲
۴	۴	۳۰	۴/۵	۱/۵۱
۵	۴	۱۳/۱	۴/۵	۱/۵۳
۶	۲	۴۰	۶/۵	۱/۴۲
۷	۴	۳۰	۴/۵	۱/۴۷
۸	۴	۳۰	۷/۹	۱/۴۶
۹	۲	۲۰	۲/۵	۱/۴۶
۱۰	۰/۶	۳۰	۴/۵	۱/۴۴
۱۱	۴	۳۰	۴/۵	۱/۴۸
۱۲	۶	۲۰	۲/۵	۱/۷۲
۱۳	۶	۴۰	۶/۵	۱/۴۶
۱۴	۲	۲۰	۶/۵	۱/۵۱
۱۵	۲	۴۰	۲/۵	۱/۴۵
۱۶	۶	۲۰	۶/۵	۱/۸۰
۱۷	۷/۴	۳۰	۴/۵	۱/۶۵
۱۸	۴	۳۰	۴/۵	۱/۴۸
۱۹	۴	۳۰	۴/۵	۱/۴۸
۲۰	۴	۳۰	۱/۱	۱/۵۰

۲-۴. تجزیه و تحلیل آماری مدل مرکب مرکزی

داده‌های آزمایشی به نرم‌افزار طراحی آزمایش داده شده و توسط یک مدل برازشی درجه دوم با لحاظ کردن اثرات دوتایی فراخوانی می‌شوند. سپس، با استفاده از مدل مرکب مرکزی بهینه‌سازی انجام می‌گیرد [۱۸]. لذا، در این مرحله نیز مشابه طرح آزمایش قبل، ابتدا بایستی کفایت مدل بررسی شده و نتایج بهینه‌سازی گزارش شود که این بررسی، همانند قبل با استفاده از جداول و شکل‌های مربوط به واریانس داده‌ها انجام می‌گیرد. برای بررسی کفایت مدل چهار فرض در نظر گرفته می‌شود. فرض اول در خصوص توزیع طبیعی داده‌ها می‌باشد. واریانس داده‌ها نباید در یک نقطه تجمع محسوس داشته باشد؛ یعنی انحراف داده‌ها بیش از حد معینی قابل قبول نیست و توزیع جمعیت باقی‌مانده‌ها باید یک فرم گوسی^۱ داشته باشد. توزیع نرمال یا تابع گوسی، یکی از مهم‌ترین احتمالات توزیعی پیوسته در قضایای احتمال است. علت اهمیت این منحنی توزیعی، هم‌خوانی نسبتاً زیاد واریانس داده‌های حاصل از آزمایش، هنگام نوسان‌های طبیعی و فیزیکی حول یک مقدار ثابت، با مقادیر حاصل از این توزیع است. علت این موضوع، همان‌طور که قبلاً گفته شد، نقش بنیادین توزیع نرمال در اصل حد مرکزی است [۱۹]. در طرح آزمایش حاضر، بررسی احتمال نرمال بودن داده‌ها، با بهره‌گیری از نمودارهای احتمال و بافت‌نگار (شکل‌های ۱ و ۲) انجام می‌گیرد. در نمودار ترسیم احتمال نرمال (شکل ۱) بهترین خط از مقادیر باقی‌مانده عبور داده شده و اگر داده‌ها انحراف کمی از خط رگرسیونی داشته باشند، مشخص می‌شود که داده‌ها یک پراکندگی طبیعی دارند. به‌عنوان مثال اگر خط عبوری اندکی پهن‌تر شود و بتواند تمام داده‌ها را پوشش دهد، میزان تطابق قابل قبول است. (شکل ۱) به‌خوبی این شرط را اقتناع می‌کند.



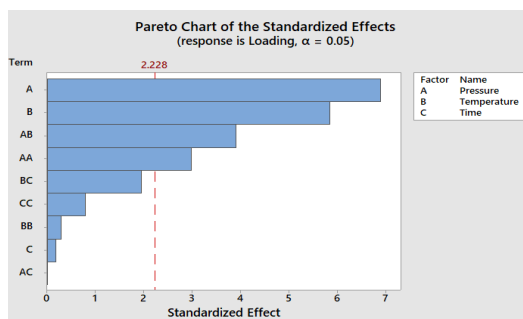
شکل ۱: نمودار احتمال در طرح آزمایش شرایط بهینه‌ی فرآیند جذب CO₂

1. Gaussian



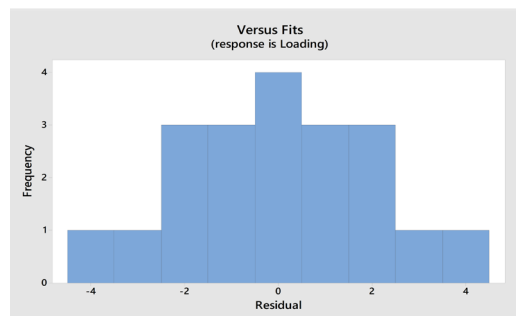
شکل ۴: نمودار باقی‌مانده در طرح آزمایش شرایط بهینه‌ی فرآیند جذب CO₂

نمودار دیگری که به منظور بررسی پارامترهای اثرگذار بر فرآیند بررسی می‌گردد، نمودار پارتو^۲ (شکل ۵) می‌باشد. نمودار پارتو از ۹ نمودار میله‌ای و یک نمودار خطی تشکیل شده است. نمودارهای میله‌ای که دارای یک روند نزولی می‌باشند، نشان‌دهنده‌ی تک‌تک تأثیرات آزمایش (اثرات خطی متقابل و درجه دوم) به صورت مجزا بوده و خط چین قرمز رنگ معرف مقدار کل می‌باشد. محور عمودی معرف نوع تأثیر است، این در حالی است که محور افقی درصد تجمعی را نمایش می‌دهد. نمودار پارتو به منظور تعیین مهم‌ترین عامل در میان مجموعه‌ای از عوامل استفاده می‌گردد. این نمودار در فرآیند کنترل کیفیت نشان‌دهنده‌ی عوامل وقوع شایع‌ترین نقایص است [۲۰]. در این منحنی یک خط به‌عنوان مبنا قرار می‌گیرد (در اینجا ۲/۲۲۸)، هر نمودار میله‌ای که خط را قطع کند، به‌عنوان یک پارامتر اثرگذار شناخته شده و نمودارهایی که قبل از خط قرار بگیرند، بر فرآیند اثرگذار نیستند. همچنین، از پایین به بالا اثرگذاری پارامترها افزایش می‌یابد، به طوری که اثر متقابل فشار-دما کمترین اثرگذاری و اثر درجه اول فشار بیشترین تأثیر را بر میزان جذب دی‌اکسید کربن دارد.



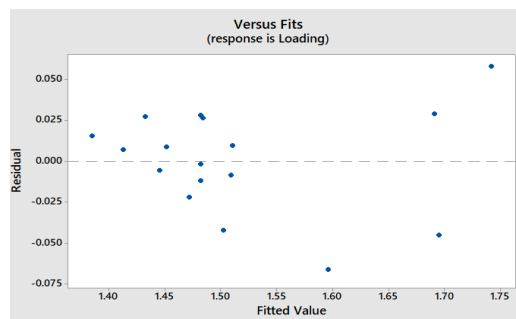
شکل ۵: نمودار پارتو در طرح آزمایش شرایط بهینه‌ی فرآیند جذب CO₂

به طور مشابه نمودار بافت‌نگار شکل (۲)، نیز باید یک فرم گوسی داشته باشد تا اینکه بتوان آن را برآمده از یک جمعیت داده‌ی طبیعی فرض کرد که در شکل (۲) این فرم کاملاً مشهود بوده و داده‌ها دارای یک توزیع طبیعی هستند.



شکل ۲: نمودار بافت‌نگار در طرح آزمایش شرایط بهینه‌ی فرآیند جذب CO₂

ثابت بودن واریانس داده‌ها، دومین فرضی است که بررسی می‌شود. بر این اساس، اگر ترسیم مقادیر باقی‌مانده برحسب مقادیر تخمین زده شده از روند^۱ مشخصی تبعیت نکند و جهت خاصی نداشته باشد، شرط ثابت بودن واریانس داده‌ها برقرار است که در (شکل ۳) پخشیدگی داده‌ها کاملاً نمایان است.



شکل ۳: نمودار نقطه‌ای در طرح آزمایش شرایط بهینه‌ی فرآیند جذب CO₂

سومین شرط مورد بررسی، فرض استقلال داده‌ها نسبت به زمان می‌باشد. بررسی این شرط بدین منظور است که نشان دهد واریانس داده‌های حاصل از آزمایش تابعیت زمانی ندارد و روند تغییرات باقی‌مانده‌ها با زمان به صورت نوسانی بوده و از الگوی خاصی تبعیت نمی‌کند. در (شکل ۴) محور افقی ترتیب انجام ۲۰ آزمایش را به صورت تصادفی برای سه پارامتر اثرگذار بر فرآیند نشان می‌دهد و محرز است که نمودار روند خاصی را نشان نمی‌دهد و واریانس مستقل از زمان می‌باشد.

1. Trend
2. Pareto Chart

۳-۴. آنالیز واریانس مدل مرکب مرکزی

چهارمین شرط کفایت، بحث صحت مدل می‌باشد که از نمودار خاصی قابل دست‌یابی نیست و با استفاده از درصدهای خطا (R^2) مشخص می‌شود [۲۱]. طبق جدول (۴)، مقادیر R^2 و R^2 تعدیل‌شده به ترتیب ۹۵/۶۸ درصد و ۹۲/۰۷ درصد می‌باشد. R^2 تعدیل‌شده نسبت به R^2 رگرسیون نتایج دقیق‌تری

را نشان می‌دهد، زیرا به‌جای استفاده از مجموع مربعات از میانگین مربعات استفاده می‌کند. مزیت این کار دخیل کردن درجه‌ی آزادی به‌عنوان شاخصه‌ی عوامل مؤثر بر آزمایش می‌باشد. نتایج برازش از انطباق مناسب داده‌ها بر مدل حکایت دارد که این مؤید صحت مدل است.

جدول ۴: آنالیز واریانس طرح آزمایش مرکب مرکزی

منبع	درجه‌ی آزادی	خطای مجموع مربعات	خطای میانگین مربعات	F-value	p-value	میزان تأثیر
مدل	۹	۰/۱۷۴۰	۰/۰۱۹۳	۱۲/۲۳	۰/۰۰۰۰	کاملاً تأثیرگذار
اثر درجه اول فشار	۱	۰/۰۷۵۲	۰/۰۷۵۲	۴۷/۵۶	۰/۰۰۰۲	کاملاً تأثیرگذار
اثر درجه اول دما	۱	۰/۰۵۴۰	۰/۰۵۴۰	۳۴/۱۶	۰/۰۰۰۲	کاملاً تأثیرگذار
اثر درجه اول زمان	۱	۰/۰۰۰۰	۰/۰۰۰۰	۰/۰۳	۰/۰۰۰۸	بدون تأثیر
اثر متقابل فشار-دما	۱	۰/۰۲۴۲	۰/۰۲۴۲	۱۵/۳۱	۰/۵۳۲۰	کاملاً تأثیرگذار
اثر متقابل فشار-زمان	۱	۰/۰۰۰۰	۰/۰۰۰۰	۰/۰۰	۱/۰۰۰۰	بدون تأثیر
اثر متقابل دما-زمان	۱	۰/۰۰۶۱	۰/۰۰۶۱	۳/۸۳	۰/۲۳۰۰	بدون تأثیر
اثر درجه دوم فشار	۱	۰/۰۱۴۱	۰/۰۱۴۱	۸/۹۴	۰/۰۰۰۰	تأثیرگذار
اثر درجه دوم دما	۱	۰/۰۰۰۱	۰/۰۰۰۱	۰/۰۸	۰/۰۰۰۰	بدون تأثیر
اثر درجه دوم زمان	۱	۰/۰۰۱۰	۰/۰۰۱۰	۰/۶۳	۰/۰۰۰۰	بدون تأثیر
خطای باقی‌مانده	۷	۰/۰۱۵۸	۰/۰۰۱۶	-	-	-
انطباق ناپذیری	۳	۰/۰۱۴۹	۰/۰۰۳۰	۵/۴۲	۰/۰۶۸۱	بدون تأثیر
میزان خطای خالص	۴	۰/۰۰۰۹	۰/۰۰۰۲	-	-	-
R^2	۹۵/۶۷					
R^2 تعدیل‌شده	۹۲/۰۷					

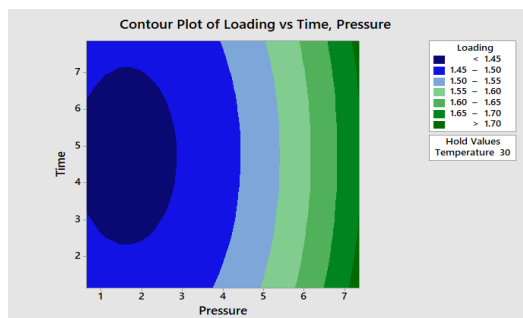
p -value، معنی‌داری^۲ آماری مدل‌ها و معادلات مورد بررسی قرار گرفت و مقادیر $\alpha > ۰/۰۵$ به‌عنوان مقادیر بدون تأثیر در نظر گرفته شد. نتایج پیش‌بینی شده توسط مدل‌های سطح پاسخ به‌طور قابل‌توجهی با نتایج آزمایشات هم‌خوانی داشت. در این بررسی R^2 برای ظرفیت جذب نمونه ۹۵/۶۷ درصد بود. هنگامی که این مقدار نزدیک به یک است، تغییرات داده‌های به‌دست‌آمده به‌خوبی می‌تواند توسط مدل‌های برازشی توضیح داده شوند که در این مطالعه مدل‌های تجربی درصد بالایی از تغییرات متغیرهای وابسته را توصیف کردند. علاوه بر این، کیفیت تناسب مدل‌ها به‌وسیله‌ی تست عدم تطابق مورد

تجزیه و تحلیل پارامترهای مستقل فشار (X_1)، دما (X_2) و زمان (X_3) بر میزان جذب دی‌اکسید کربن توسط نرم‌افزار مینی‌تب بررسی گردید. از تجزیه و تحلیل واریانس و رگرسیون به‌منظور بررسی هم‌خوانی مدل‌های پیشنهادی و بررسی آماری معنی‌داری فاکتورهای مدل استفاده شد [۲۲]. مطابق نتایج (جدول ۴)، متغیر پاسخ (ظرفیت جذب) هم‌خوانی مطلوبی با مدل رگرسیونی چندجمله‌ای درجه دوم مرکب مرکزی داشت. ضرایب برازش مدل‌های تجربی و R^2 ، R^2 تعدیل‌شده^۱ مربوطه در (جدول ۴) ارائه شده است. طراحی آزمایش حاضر در سطح اطمینان ۹۵ درصد صورت گرفته است، لذا بر اساس شاخص

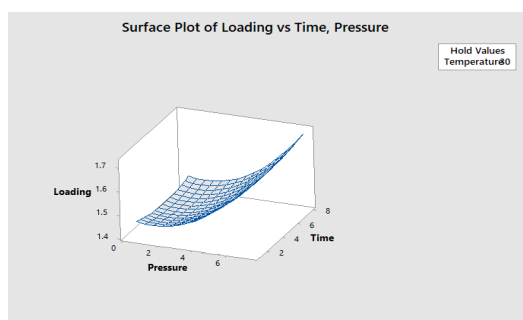
1. R^2 -Adjusted
2. Signification



کانتور فشار برحسب زمان در دمای ثابت ۳۰ °C در سطح میانی در طراحی مرکب مرکزی شکل (۸) و نمودار سه بعدی شکل (۹) در نظر گرفته شده است. طبق این نمودارها، با افزایش فشار و زمان، میزان ظرفیت جذب افزایش یافته است.

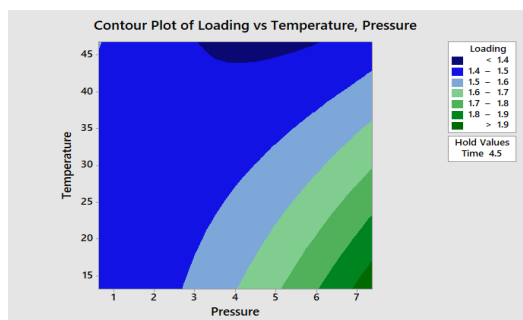


شکل ۸: کانتور فشار برحسب زمان برای طراحی مرکب مرکزی



شکل ۹: نمودار سه بعدی فشار برحسب زمان برای طراحی مرکب مرکزی

نمودار کانتور فشار برحسب دما در زمان ثابت ۴/۵ ساعت در سطح میانی، در طراحی مرکب مرکزی شکل (۱۰) و نمودار سه بعدی شکل (۱۱) در نظر گرفته شده است. طبق این نمودار، با افزایش فشار و کاهش زمان، میزان ظرفیت جذب افزایش یافته است.



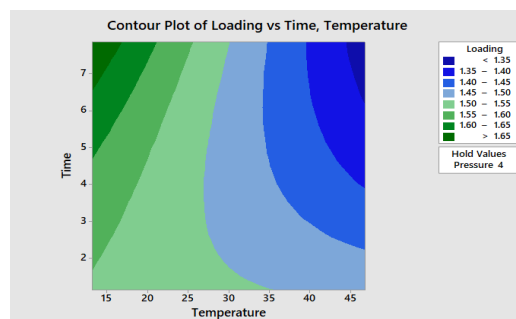
شکل ۱۰: کانتور فشار برحسب دما برای طراحی مرکب مرکزی

بررسی قرار گرفت. این آزمون دقت مدل را در پیش بینی متغیرها تعیین می کند. نتایج به دست آمده از مشاهدات تجربی با مقادیر پیش بینی شده از معادلات رگرسیون مقایسه شدند. در مجموع، نتایج نشان می دهد مدل مورد استفاده می تواند جهت تخمین شرایط بهینه فرآیند جذب دی اکسید کربن (ظرفیت جذب) مورد استفاده قرار گیرد [۲۳].

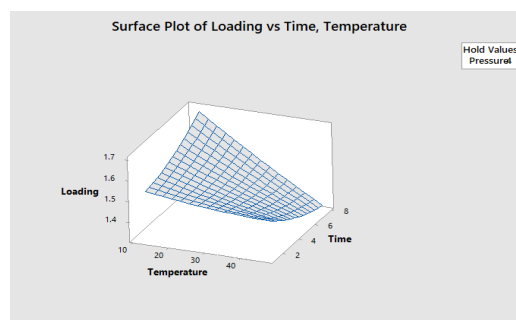
۴-۴. بهینه سازی و تعیین شرایط بهینه انجام فرآیند

تغییرات ظرفیت جذب با پارامترهای اثرگذار بر آزمایش، در کانتورها و نمودارهای سه بعدی ۶ تا ۱۱ ترسیم شده است. از آنجا که در این آزمایش سه پارامتر اثرگذار وجود داشت و در هر نمودار سه بعدی تنها دو پارامتر قابل رسم می باشد، پارامتر سوم در سطح میانی ثابت شده است.

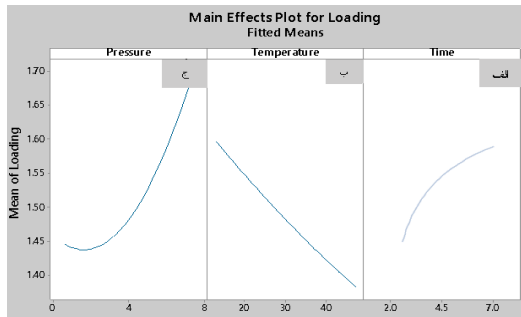
نمودار کانتور دما برحسب زمان در فشار ثابت ۴ bar در سطح میانی در طراحی مرکب مرکزی شکل (۶) و نیز نمودار سه بعدی شکل (۷) در نظر گرفته شده است. طبق این نمودارها، میزان جذب دی اکسید کربن (ظرفیت جذب)، در حداقل دما و حداکثر زمان، افزایش یافته است. به طوری که می توان گفت، با کاهش دما و افزایش مدت زمان، میزان جذب دی اکسید کربن افزایش یافته است.



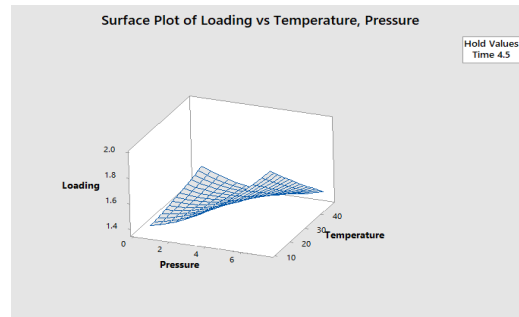
شکل ۶: کانتور زمان برحسب دما برای طراحی مرکب مرکزی



شکل ۷: نمودار سه بعدی زمان برحسب دما برای طراحی مرکب مرکزی



شکل ۱۲: نمودار تأثیر جداگانه‌ی پارامترهای مؤثر بر فرآیند جذب دی‌اکسید کربن: الف) زمان (ب) دما (ج) فشار



شکل ۱۱: نمودار سه‌بعدی فشار بر حسب دما برای طراحی مرکب مرکزی

۱-۵. اثر زمان

همان‌طور که در شکل (۱۲-الف) مشاهده می‌شود با افزایش زمان، حلالیت گاز CO_2 افزایش می‌یابد. در زمان‌های اولیه، مخلوط آمینی ظرفیت جذب زیادی دارد، لذا افزایش زمان توأم با افزایش فرصت و شانس برخورد و در نتیجه تماس بیشتر بین مخلوط آمین و گاز CO_2 می‌باشد؛ بنابراین، جذب سریع اتفاق می‌افتد و شیب منحنی زیاد است. پس از مدتی بخش عمده‌ای از حجم مخلوط توسط گاز پر شده و ظرفیت قابل جذب در دسترس کمتر می‌شود. لذا شیب منحنی کاهش می‌یابد. در نهایت، مخلوط کاملاً از گاز اشباع شده و با شکل‌گیری فرآیند نفوذ درونی سرعت جذب خیلی کم می‌شود. در این هنگام اصطلاحاً گفته می‌شود که فرآیند جذب به تعادل رسیده است و دیگر با گذر زمان جذبی اتفاق نخواهد افتاد [۲۴].

۲-۵. اثر دما

از (شکل ۱۲-ب) قابل مشاهده است که با کاهش دما، حلالیت گاز CO_2 افزایش می‌یابد. از سوی دیگر، با بررسی منحنی‌های سه‌بعدی مشاهده می‌شود که افزایش دما تأثیر فشار بر حلالیت را تشدید می‌کند؛ بدین‌صورت که افزایش فشار، افزایش حلالیت CO_2 را به دنبال دارد که این افزایش در دماهای بالاتر، بیشتر است. همچنین، در بارگیری‌های پایین‌تر اثرات تغییر دما محسوس‌تر است.

دما، مقیاس و میزانی از متوسط انرژی جنبشی ماده را نشان می‌دهد. هنگامی که دما افزایش پیدا می‌کند، حرکت مولکول‌های گاز بیشتر شده و بنابراین احتمال این که ذرات گاز حل‌شده در مایع، به فاز گازی فرار کنند بیشتر شده و حلالیت گاز کاهش می‌یابد. در نتیجه، افزایش دما به معنای

نمودارهای فوق، بیان‌گر این واقعیت هستند که میزان جذب دی‌اکسید کربن با فشار و زمان نسبت مستقیم داشته و با دما نسبت عکس دارد. لذا شرایط بهینه در حداکثر فشار و زمان و حداقل دما اتفاق می‌افتد. این مقادیر بهینه، با استفاده از تابع بهینه‌ساز پاسخ^۱ در نرم‌افزار مینی‌تب و تنظیم هدف^۲ آزمایش بر بیشترین میزان جذب دی‌اکسید کربن، محاسبه شد. نتایج بهینه‌سازی پاسخ در جدول (۴) آورده شده است. نحوه‌ی تأثیرگذاری هر پارامتر در بخش ۳-۴ شرح داده می‌شود.

جدول ۴: سطوح بهینه‌ی طرح آزمایش مرکب مرکزی

ظرفیت جذب	زمان (ساعت)	دما ($^{\circ}C$)	فشار (bar)
۱/۸۲	۵/۱	۲۱	۶/۱

نتایج بهینه‌سازی توسط نرم‌افزار نشان می‌دهد شرایط بهینه‌ی جذب CO_2 عبارت است از: فشار ۶/۱ bar، دمای $21^{\circ}C$ و زمان ۵/۱ ساعت؛ که در این حالت بیشینه‌ی ظرفیت جذب، برابر ۱/۸۲ می‌باشد.

۵. تحلیل نتایج مربوط به طراحی آزمایش مرکب مرکزی

در طراحی آزمایش، معمولاً، تمرکز بر صحت‌سنجی مدل و پس از آن یافتن حالات بهینه و بررسی برهم‌کنش‌های احتمالی بین پارامترها می‌باشد؛ اما در مطالعات کلاسیک علمی همواره اثر منفرد هر عامل بر هدف آزمایش (که در این پژوهش ظرفیت جذب می‌باشد) دارای ارزش مطالعاتی زیادی است. لذا، اثر هر پارامتر به‌طور مجزا در شکل (۱۲) نشان داده شده است که در بخش‌های بعدی اثر هر پارامتر به‌صورت جداگانه مورد بحث و بررسی قرار گرفته است.

1. Response Optimizer
2. Target



انحلال پذیری کمتر و کاهش دما به معنای انحلال پذیری بیشتر گازهاست. طبق اصل لوشاتلیه، این رفتار گازها را بهتر می‌توان درک نمود. حل شدن گاز در مایع معمولاً گرمازا است؛ بنابراین افزایش دمای اعمال شده به سمت محصولات این واکنش، یک تغییر در سیستم به وجود آورده و سیستم به سمت واکنش دهنده‌ها پیش می‌رود تا این تغییر را کمتر کند. در نتیجه، غلظت تعادلی ذرات گاز در فاز گازی افزایش و انحلال پذیری گاز کمتر خواهد شد. برعکس این حالت نیز، برای کاهش دما در سمت محصولات برای گاز اتفاق می‌افتد؛ یعنی کاهش دما، طبق اصل لوشاتلیه، باعث افزایش انحلال پذیری گاز می‌شود.

۳-۵. اثر فشار

از مشاهده‌ی (شکل ۱۲-ج) می‌توان نتیجه گرفت که افزایش فشار جزئی گاز CO_2 همواره باعث افزایش بارگیری آن می‌شود و این اثر برای تمامی دماها و درصدهای مختلف آمین صادق است. دلیل این امر این است که با افزایش فشار، نیروی رانش^۱ بین فاز گاز و سطح مشترک^۲ دو فاز مایع و گاز افزایش یافته و در نتیجه مقدار انتقال جرم افزایش می‌یابد. شیب نمودار فشار جزئی CO_2 نسبت به مقدار بارگیری آن در ابتدا کم بوده و با افزایش میزان بارگیری بیشتر می‌شود. این افزایش شیب به خاطر کاهش حلالیت گاز در اثر اشباع^۳ شدن محلول با جذب مقدار زیاد CO_2 می‌باشد.

در مورد گازها، با ترکیب اصل لوشاتلیه و قانون هنری، می‌توان اثر فشار را روی انحلال پذیری آن‌ها بررسی کرد. مطابق قانون هنری، هنگامی که دما ثابت است، انحلال پذیری گاز با فشار جزئی آن متناسب می‌باشد.

$$P = K_h \times C \quad (7)$$

که P ، فشار جزئی گاز موجود در بالای مایع، K_h ثابت هنری و C غلظت گاز در مایع است. در یک دمای ثابت، از این فرمول می‌توان نتیجه گرفت؛ زمانی که فشار جزئی کاهش پیدا می‌کند، غلظت گاز در مایع نیز کاهش پیدا خواهد کرد و این به معنای کاهش انحلال پذیری نیز می‌باشد و برعکس. برای سیستمی که در آن مقداری گاز در مایع حل شده است، افزایش فشار باعث افزایش فشار جزئی (فشار وارد بر هر قسمت از این ترکیب) می‌شود و گاز بیشتر متراکم می‌شود.

افزایش فشار جزئی بدین معناست که ذرات گازی بیشتری وارد مایع می‌شوند (میزان گاز بالای مایع در این حالت، کمتر می‌شود) و فشار جزئی نیز با این تغییر، کاهش پیدا می‌کند؛ یعنی برای کم کردن اثر این تغییر در افزایش فشار، واکنش خود را به گونه‌ای تغییر می‌دهد که انحلال پذیری بیشتر شود. اگر در همین حالت، فشار وارد بر سیستم کاهش یابد، مولکول‌های گازی بیشتری از مایع فرار می‌کنند و برای همین انحلال پذیری کم‌تر می‌شود.

۶. نتیجه‌گیری

در این پژوهش، عوامل مؤثر بر حلالیت گاز دی‌اکسید کربن در ترکیب آمینی و مایع یونی و رفتار این سامانه مورد بررسی قرار گرفت. مهم‌ترین نتایج به‌دست‌آمده عبارتند از شرایط بهینه‌ی جذب دی‌اکسید کربن با استفاده از طراحی مرکب مرکزی در پنج سطح با تعداد ۲۰ آزمایش تعیین شد که در این بررسی مشخص گردید شرایط مناسب جذب عبارت است از: فشار ۶/۱ bar، دمای $21^\circ C$ و زمان ماند ۵/۱ ساعت که حداکثر ظرفیت جذب، ۱/۸۲ حاصل گردید. مدل مرکب مرکزی نیز با بررسی آنالیز واریانس دارای کفایت تعیین شد و هم‌خوانی مناسبی ($R^2 = 0.95/67$) با داده‌های حاصل از آزمایش داشت. میزان بارگیری با افزایش فشار و زمان و کاهش دما افزایش یافت. با توجه به تجربیات حاصل از پژوهش، انجام آزمایش‌ها در دماهای بالا به‌منظور کامل کردن اطلاعات مورد نیاز در طراحی واحدهای صنعتی نیز توصیه می‌گردد.

مراجع:

- [1]. A Mikhaylov, N.Moiseev, K. Aleshin, & T.Burkhardt, (2020). Global climate change and greenhouse effect. *Entrepreneurship and Sustainability Issues*, 7(4), 2897.
- [2]. E.Ermolaev, C. Sundberg, M.Pell, S.Smårs & H.Jönsson, (2019). Effects of moisture on emissions of methane, nitrous oxide and carbon dioxide from food and garden waste composting. *Journal of Cleaner Production*, 240, 118165.

1. Driving Force
2. Interface
3. Saturate



- [10]. A. Majafloo, (2019). Thermodynamic Modeling of Carbon Dioxide Absorption in Methyl Diethanolamine Aqueous Solutions. *Nashrieh Shimi va Mohandesi Shimi Iran*. 23;38(2). 183-94.
- [11]. H. Pashaei, A. Ghaemi, M. Nasiri & B. Karami, (2020). Experimental modeling and optimization of CO₂ absorption into piperazine solutions using RSM-CCD methodology. *ACS omega*, 5(15), pp.8432-8448.
- [12]. Choubtashani, S., & Rashidi, H. (2023). CO₂ capture process intensification of water-lean methyl diethanolamine-piperazine solvent: Experiments and response surface modeling. *Energy*, 267, 126447.
- [13]. S. Zare, & A. Pouranfard, (2022). Experimental and theoretical study of CO₂ absorption by Water-Ionic liquid-Piperazine solution using the method of Constrained Mixture Design. *Farayandno*, 17(79), 25-40.
- [14]. J. Hagenkord, B. Funke, E. Qian, M. Hegde, K. B. Jacobs, M. Ferber, & D. Bick, (2022). Design and reporting considerations for genetic screening tests. *The Journal of Molecular Diagnostics*, 22(5), 599-609.
- [15]. N. Akbarzad, A. Ghaemi, & M. Rezakazemi, (2022). Optimization and modeling of carbon dioxide absorption into blended sulfolane and piperazine aqueous solution in a stirrer reactor. *International Journal of Environmental Science and Technology*, 19(5), 4047-4068.
- [16]. S. Choubtashani, & H. Rashidi, (2022). CO₂ capture process intensification of water-lean methyl diethanolamine-piperazine solvent: Experiments and response surface modeling. *Energy*, 126447.
- [3]. M. Kiefer, J. Rodríguez-Guzmán, J. Watson, B. van Wendel de Joode, D. Mergler & da Silva, A. S. (2016). Worker health and safety and climate change in the Americas: issues and research needs. *Revista Panamericana de Salud Pública*, 40, 192-197.
- [4]. K. Ahmed Ali, M. I. Ahmad & Yusup, Y. (2020). Issues, impacts, and mitigations of carbon dioxide emissions in the building sector. *Sustainability*, 12(18), 7427.
- [5]. J. Godin, W. Liu, S. Ren & C. C. Xu, (2021). Advances in recovery and utilization of carbon dioxide: A brief review. *Journal of Environmental Chemical Engineering*, 9(4), 105644
- [6]. İ. Koç, (2021). Changes that may occur in temperature, rain, and climate types due to global climate change: the example of Düzce. *Turkish Journal of Agriculture-Food Science and Technology*, 9(8), 1545-1554.
- [7]. T. D. Güzel, & K. Alp, (2020). Modeling of greenhouse gas emissions from the transportation sector in Istanbul by 2050. *Atmospheric Pollution Research*, 11(12), 2190-2201.
- [8]. Y. Xiao, F. Peng, Y. Zhang, J. Wang, Y. Zhuge, S. Zhang & H. Gao, (2019). Effect of bag-controlled release fertilizer on nitrogen loss, greenhouse gas emissions, and nitrogen applied amount in peach production. *Journal of Cleaner Production*, 234, 258-274.
- [9]. P. Muthumari, R. K. Nilavuckkarasi, B. Ambedkar, J. Dhanalakshmi, P. P. Papitha & M. Moniha, (2020). Infrared spectroscopic and physico-chemical analysis of carbon dioxide-rich and-lean 30 wt% monoethanolamine. *Journal of Environmental Engineering and Science*, 15(4), 164-171.

- characteristics through response surface methodology. *Fuel*, 266, 117072.
- [23]. K. Kumar, B. Dabade, L. Wankhade (2022). Determination of prediction model and optimization of process parameters for fabrication of Al-SiC composite using response surface methodology. *Advances in Materials and Processing Technologies*, 17: 1-7.
- [24]. C. J. Lin,, & S. Y.Jeng, (2020) "Optimization of deep learning network parameters using uniform experimental design for breast cancer histopathological image classification". *Diagnostics*, 10 (9), 622.
- [17]. A. Esmaceli, A. Tamuzi, T. N. Borhani, Y. Xiang, & Shao, L. (2022). Modeling of carbon dioxide absorption by solution of piperazine and methyldiethanolamine in a rotating packed bed. *Chemical Engineering Science*, 248, 117118.
- [18]. R., Hasanzadeh, M., Mojaver, T., Azdast, & C. B. Park, (2021). Polyethylene waste gasification syngas analysis and multi-objective optimization using central composite design for simultaneous minimization of required heat and maximization of exergy efficiency. *Energy Conversion and Management*, 247, 114713.
- [19]. D. Ozturk, E., Dagdas, B. A. Fil, & M. J. Bashir, (2021). Central composite modeling for electrochemical degradation of paint manufacturing plant wastewater: One-step/two-response optimization. *Environmental Technology & Innovation*, 21, 101264.
- [20]. E., ANTIPOVA, C., POZO, G., D., GUILLÉN-GOSÁLBEZ, BOER, L. F. CABEZA, & L. JIMÉNEZ, (2016). On the use of filters to facilitate the post-optimal analysis of the Pareto solutions in multi-objective optimization. *Computers & Chemical Engineering*, 74, 48-58.
- [21]. B. Saengsawang, P. Bhuyar, N. Manmai, V. K. Ponnusamy, R. Ramaraj, & Y. Unpaprom, (2020). The optimization of oil extraction from macroalgae, *Rhizoclonium* sp. by chemical methods for efficient conversion into biodiesel. *Fuel*, 274, 117841.
- [22]. M., Elkelawy, H. A. E., Bastawissi, K. K., Esmacil, A. M., Radwan, H., Panchal, K. Sadasivuni, & M. Israr, (2020). Maximization of biodiesel production from sunflower and soybean oils and prediction of diesel engine performance and emission



Effect of Vapor-Liquid Equilibrium on CO₂ Gas Absorption by Amine Peprasine- Ionic liquid Solution Using Central Composite Test Design Method

Soheila Zare¹, Abdolrasoul Pouranfard^{2*}

1. PhD Student, Department of Chemical Engineering, Engineering Faculty, Yasuj University, Yasouj, Iran

2. Assistant Professor, Department of Chemical Engineering, Engineering Faculty, Yasouj University, Yasouj, Iran

ARTICLE INFO

REVIEW ARTICLE

Article History:

Received: 12 June, 2023

Revised: 27 July, 2023

Accepted: 19 August, 2023

Keywords:

CO₂ gas absorption
Amine Peprasine-Ionic liquid mixture
Vapor-liquid equilibrium
CMD

ABSTRACT

In this research, the absorption of CO₂ by an aqueous solution of Amine Piperazine-Ionic liquid was investigated. The Response Surface Method (RSM) based on Central Composite Design (CCD) was used to design experiments, build models, and find optimal operating conditions to achieve optimal responses in the range of used temperature, pressure, and time. The design and optimization of this group of separation units requires to accurate equilibrium and thermodynamic data of vapor-liquid equilibrium. In this study, the optimal loading conditions of CO₂ gas were determined using the central composite design (CMD) method. Analysis of the equations performed using quadratic polynomial regression and ANOVA analysis of variance. Enhancement of the pressure and time and reducing the temperature cause increase the solubility of carbon dioxide gas in the amine mixture. The optimal absorption conditions were obtained at pressure 1.6 bar, temperature 21 °C and time 1.5 hours. Finally, the mechanism of temperature effect on solubility via Lochatelier's principle, the effect of pressure on solubility by Henry's law, and the effect of time on solubility by examining the kinetics of the adsorption reaction was investigated.

DOR: [20.1001.1.25885251.1402.10.1.6.0](https://doi.org/10.1001.1.25885251.1402.10.1.6.0)

How to cite this article

S. Zare, A.R. Pouranfard, Effect of Vapor-Liquid Equilibrium on CO₂ Gas Absorption by Amine Peprasine - Ionic liquid Solution Using Central Composite Test Design Method. *Iranian Journal of Gas Engineering*. 2023; 10(1): 80 -93. (https://www.ijge.irangi.org/article_707975.html)

* Corresponding Author.

E-mail address: r.pouranfard@yu.ac.ir, (A.R. Pouranfard).

Available online 20 August 2023

2666-5468/© 2021 The Authors. Published by Iranian Gas Institute.

This is an open access article under the CC BY license. (<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0>)

