

# ارزیابی چرخه حیات سیستم حصر مستقیم کربن دی اکسید با فرآیند فیشر-تروپش برای تولید سوخت حمل و نقل تحت سه سناریو تولید برق

دانشجوی کارشناسی ارشد، دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه علم و صنعت ایران، تهران، ایران،  
hanieh\_mohebi@mecheng.iust.ac.ir

حانیه محبی

استادیار، دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه علم و صنعت ایران، تهران، ایران، samane\_ghandehariun@iust.ac.ir

سمانه قندهاریون\*

کارشناسی، دانشکده مهندسی مکانیک، دانشگاه علم و صنعت ایران، تهران، ایران، samane\_g@hotmail.com

شایان اثمیری

## چکیده

انتشار گازهای گلخانه ای به ویژه کربن دی اکسید باعث گرمایش جهانی و تغییر اقلیم شده است. روش های مختلفی برای کاهش کربن دی اکسید اتمسفر پیشنهاد می شوند. یکی از این روش ها جذب مستقیم کربن دی اکسید از هوا و تولید سوخت است. از آنجا که خود این سیستم ها انتشار کربن دی اکسید دارند، لازم است ارزیابی چرخه حیات برای این سیستم ها انجام شود. در این مقاله ارزیابی چرخه حیات برای تولید سوخت حمل و نقل با استفاده از جذب مستقیم کربن دی اکسید انجام شده است. این سیستم ابتدا کربن دی اکسید اتمسفر را جذب می کند و با استفاده از الکترولیز آب و واکنش جابجایی آب-گاز معکوس آن را به گاز سنتز تبدیل می کند. در ادامه، با واکنش فیشر-تروپش گاز سنتز به سوخت تبدیل می شود. در این مقاله چرخه ای سه سناریو برای تولید برق مورد نیاز سیستم در نظر گرفته شده اند که عبارتند از برق شبکه ایران، برق شبکه آینده و برق پاک (تولید شده از ۱۰۰ درصد انرژی تجدیدپذیر). در سناریو برق شبکه ایران، سیستم حدود  $4/6 \text{ gCO}_2\text{eq./gCO}_2 \text{ captured}$  آلایندهی دارد؛ آلاینده ترین واحدها در این سناریو، تولید برق با هدف تولید هیدروژن برای واکنش فیشر-تروپش و برای واکنش جابجایی آب-گاز معکوس است. بنابراین، ضریب انتشار برق مهمترین عامل در تعیین سیستم با اثرات زیست محیطی کم شناسایی می شود. آلایندهی سیستم در شرایط برق شبکه های آینده  $0/8 \text{ gCO}_2\text{eq./gCO}_2 \text{ captured}$  برآورد می شود. با استفاده از برق پاک نیز، آلایندهی سیستم به  $0/72 \text{ gCO}_2\text{eq./gCO}_2 \text{ captured}$  کاهش می یابد. در نهایت، نتایج نشان می دهد که در گام اول، برق باید تحت فرآیندهایی با انتشار آلاینده کمتر تولید شود.

**واژه های کلیدی:** جذب مستقیم کربن دی اکسید، سوخت های کربن صفر، ارزیابی چرخه حیات، جذب کربن و استفاده از آن، واکنش فیشر-تروپش.

## A Life Cycle Assessment of a Direct Air Capture System Coupled with Fischer-Tropsch Process for Transportation Fuel Production Under Three Electricity Generation Scenarios

H. Mohebi  
S. Ghandehariun  
Sh. Asmari

School of Mechanical Engineering, Iran University of Science and Technology, Tehran, Iran

School of Mechanical Engineering, Iran University of Science and Technology, Tehran, Iran

School of Mechanical Engineering, Iran University of Science and Technology, Tehran, Iran

### Abstract

Greenhouse gas emissions, specifically carbon dioxide emissions, cause global warming and climate change. There are methods to reduce the amount of carbon dioxide in the atmosphere by capturing and utilizing the carbon dioxide. One method is the direct capture of carbon to produce fuels such as transportation fuels. However, to determine if the system is environmentally friendly, it is required to perform a life cycle assessment. This paper presents a life cycle assessment of an integrated system for transportation fuel production using direct air capture. This system absorbs carbon dioxide at first and then converts it into syngas using water electrolysis and reverse water-gas shift reaction. Subsequently, Fischer-Tropsch Synthesis takes place to produce fuel from the syngas. Environmental impacts are evaluated under three scenarios: using Iran's electricity grid, future electricity grids, and clean (100% renewable) electricity. Using Iran's electricity grid, the impacts of the system are  $4.6 \text{ gCO}_2 \text{ eq./gCO}_2 \text{ captured}$ ; the most polluting part of the integrated system is the electricity for hydrogen production used in the Fischer-Tropsch and RWGS. Therefore, the electricity emission factor is identified as the most important factor in determining the integrated system with low environmental effects. In the second scenario, the system has an impact of  $0.8 \text{ gCO}_2 \text{ eq./gCO}_2 \text{ captured}$ . The environmental impacts of clean electricity are reduced to  $0.72 \text{ gCO}_2 \text{ eq./gCO}_2 \text{ captured}$ . The results show that the emission factor of the electricity has a significant impact. Therefore, this system can be used only where electricity is generated partly from renewable resources.

**Keywords:** Direct Air Capture, Carbon-Neutral Fuels, Life Cycle Assessment, Carbon Capture and Utilization, Fischer-Tropsch Process.

۱۹۵۰، دمای منطقه ای مرکز-غرب آسیا حدوداً ۱۳ درجه سلسیوس بود

که امروزه به حدود ۱۴/۵ درجه سلسیوس افزایش یافته است [۱].

قبل از انقلاب صنعتی، غلظت کربن دی اکسید اتمسفر ۳۳۰-۱۸۰ ppm بوده است، اما اکنون به دلیل احتراق سوخت های فسیلی و تخریب جنگل غلظت کربن دی اکسید افزایش یافته است [۲]. آلایندهی ناشی از احتراق انرژی و فرآیندهای صنعتی نیز حدوداً ۳۶/۳ گیگا تن CO<sub>2</sub>

### ۱- مقدمه

امروزه، گرمایش زمین و تغییر اقلیم از اساسی ترین مشکلات بشریت است. عامل اصلی این مشکلات آلایندهی بیش از حد محیط زیست توسط فعالیت های انسانی بعد از انقلاب صنعتی می باشد. در همین مدت، میانگین دمای کره ای زمین افزایش یافته است. در سال

\* نویسنده مکاتبه کننده، آدرس پست الکترونیکی: samane\_ghandehariun@iust.ac.ir

تاریخ دریافت: ۱۴۰۳/۲۶

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۶/۰۷

در سال ۲۰۲۱ بوده است [۳]. در نتیجه، می‌توان دریافت کاستن کربن دی‌اکسید آزاد شده در بخش‌های تولید برق و گرما، حمل‌ونقل و صنعت، می‌تواند به میزان قابل توجهی به جلوگیری از گرمایش زمین و تغییر اقلیم و پایداری به قرارداد پاریس کمک کند.

ایران جایگاه ششم را در رتبه‌بندی کشورها برحسب میزان تولید کربن‌دی‌اکسید دارد [۴]. لذا، لازم است ایران به عنوان یکی از آلاینده ترین کشورهای متعهد به قرارداد پاریس، نسبت به کاهش تولید گازهای گلخانه‌ای خود اقدام نماید.

با توجه به ترانزنامه انرژی سال ۱۳۹۶، حدود ۹۸ درصد انرژی ایران از سوخت‌های فسیلی است. از نظر آلاینده‌ی نیز، ایران حدود ۷۴۵ میلیون تن گاز کربن‌دی‌اکسید آزاد کرده است. ۶۷ درصد از این آلاینده‌ی‌ها مربوط به مصرف نهایی انرژی بوده و در مصرف نهایی انرژی، حمل‌ونقل بیشترین سهم آلاینده‌ی را دارد [۵]. لذا، کاستن میزان تولید گازهای گلخانه‌ای در بخش حمل‌ونقل، کمک شایانی به غایت ما می‌تواند بکند.

حمل‌ونقل در ایران به شدت وابسته به سوخت‌های فسیلی است. در نتیجه، با تولید سوخت پاک و یا به عبارت دیگر کربن‌زدایی سوخت مصرفی در حمل‌ونقل، می‌توانیم به کاهش کربن‌دی‌اکسید تولیدی در حمل‌ونقل بپردازیم. معمولاً جذب کربن‌دی‌اکسید در نقاط تولیدکننده ی کربن‌دی‌اکسید<sup>۱</sup> مانند دودکش کارخانه‌ها و نیروگاه‌ها استفاده می‌شد که هدف این کار جلوگیری از ورود این گاز به اتمسفر است. ۳ روش عمده برای این کار وجود دارد: جذب قبل از احتراق<sup>۲</sup>، احتراق با اکسیژن خالص<sup>۳</sup> و جذب بعد از احتراق<sup>۴</sup> [۷و۶].

تمامی این روش‌ها هنگامی امکان‌پذیر است که نقطه‌ی تولید آلاینده‌ی موجود باشد و درواقع این روش‌ها فقط جلوگیری از ورود کربن‌دی‌اکسید به اتمسفر می‌کند؛ لذا، این فناوری‌ها در نظریه و در ایده‌آل‌ترین حالت، کربن صفر خواهند بود. اما، جذب کربن‌دی‌اکسیدی که در هوا آزاد شده فرایند کربن منفی است؛ به عبارت دیگر، این روش آلودگی اتمسفر را کاهش می‌دهد [۸].

اولین بار لاکتر پیشنهاد استفاده از جذب کربن‌دی‌اکسید مستقیم<sup>۵</sup> از هوا را ارائه کرد [۹]. او بحث کرد هنگامی که جذب CO<sub>2</sub> از نقاط آلاینده مانند دودکش کارخانه‌ها امکان‌پذیر نیست، می‌توان از این تکنولوژی استفاده کرد، چرا که در هر جایی امکان اجرا دارد. همچنین، راه‌های مختلف استفاده از کربن‌دی‌اکسید جذب شده را بررسی کرد، که یکی از آن‌ها تولید سوخت‌های هیدروکربنی بود. کیت که پایه‌گذار فناوری شرکت Carbon Engineering می‌باشد، به بررسی تعاملات کربن‌دی‌اکسید با استفاده از این فناوری تحت دو سناریو: (۱) بیومس به همراه جذب کربن و دفن آن که در این حالت قیمت جذب کربن‌دی‌اکسید ۱۶۰ دلار به ازای هر تن می‌شد (در سال ۲۰۰۵)؛ همچنین، تولید برق از این روش می‌توانست با تولید برق از زغال‌سنگ (بدون جذب کربن) از لحاظ قیمتی رقابت کند. (۲) جذب مستقیم از هوا با

استفاده از ماده جاذب<sup>۶</sup> سدیم هیدروکسید که قیمتی کمتر از ۵۰۰ دلار برای هر تن CO<sub>2</sub> رقم می‌زد، پرداخت. استخراج دی‌اکسید کربن مستقیماً از اتمسفر امکان مدیریت کربن را بدون نیاز به یک زیرساخت کاملاً تغییر یافته فراهم می‌کند. علاوه بر این نیاز به زیرساخت پیچیده حمل و نقل دی‌اکسید کربن را برطرف می‌کند، بنابراین حداقل تا حدی جبران هزینه بالاتر استخراج از هوا می‌شود [۱۰].

باکیوچی به بررسی طراحی فرآیند و انرژی مورد نیاز سیستم جذب مستقیم با ماده جاذب سدیم‌هیدروکسید پرداخت و به این نتیجه رسید که نیاز انرژی سیستم بیشتر از گرمای آزاد شده‌ی زغال‌سنگی است که برای تامین انرژی آن استفاده می‌شد، ولی از گرمای آزاد شده-ی گاز طبیعی برای تامین انرژی، کمتر است؛ بنابراین، او به این نتیجه رسید که این سیستم یا باید از انرژی‌های غیر فسیلی استفاده کند یا به بازده بهتری (از نظری انرژی) دست یابد [۱۱]. در سال ۲۰۱۸، کیت اولین نتایج از کارخانه‌ی آزمایشی جذب کربن‌دی‌اکسید در کانادا را منتشر کرد؛ کارخانه‌ی برنامه‌ریزی شده بر اساس این نتایج، توانایی جذب ۱۰۹ کیلوگرم کربن‌دی‌اکسید را با ماده جاذب پتاسیم هیدروکسید دارد و برآورد قیمت جذب کربن‌دی‌اکسید بین ۹۴ تا ۲۳۲ دلار پیش‌بینی شد [۱۲]. آذربادی و لاکتر یک آنالیز تکنولوژیکی-اقتصادی<sup>۷</sup> روی ماده جاذب‌های جامد مختلف انجام دادند و مدلی ارائه دادند که می‌تواند برای سنجش ارزش اقتصادی یک ماده جاذب جدید با ویژگی‌های مشخص نسبت به هزینه‌های تولید و تجاری‌سازی (یا برعکس، قیمت جذب کربن‌دی‌اکسید با یک ماده جاذب جدید که ویژگی‌ها و قیمت آن مشخص است) و بهینه‌سازی زمان استفاده از ماده جاذب برای به حداقل رساندن قیمت جذب کربن‌دی‌اکسید را انجام دهد [۱۱]. آن‌ها با این مدل، دو ماده جاذب MIL-101 (Cr) PEI-800 و mmen-Mg<sub>2</sub>(dobpdc) را مقایسه کردند و به این نتیجه رسیدند که حداقل قیمت فروش CO<sub>2</sub> جذب‌شده باید ۷۵ دلار به ازای هر تن باشد تا این دو ماده جاذب بتوانند سوددهی داشته باشند.

دیانتگ به بررسی چرخه‌حیات (LCA)<sup>۸</sup> سیستم جذب کربن‌دی‌اکسید بر اساس فناوری Carbon Engineering ولی با ماده جاذب NaOH (به جای KOH) و دفن کربن‌دی‌اکسید جذب شده پرداخت و به این نتیجه رسید که بازده جذب کربن ۶۲ درصد در طول عمر خود است؛ به عبارت دیگر، به ازای هر گرم CO<sub>2</sub> جذب شده، ۰/۳۸ گرم CO<sub>2</sub> آزاد می‌شود و در نتیجه این سیستم می‌تواند برای کمک به جلوگیری از گرمایش زمین به کار رود [۱۳]. مدهو به بررسی چرخه‌ی زندگی مقایسه‌ای بین سیستم با ماده جاذب جامد و مایع و دفن CO<sub>2</sub> پرداخت و به این نتیجه رسید که در همه‌ی زمینه‌های زیست محیطی (تغییر اقلیم، تشکیل ذرات معلق، کاهش منابع فسیلی، کاهش منابع فلزی، کاهش منابع آب و اشغال زمین) سیستم جذب کربن‌دی‌اکسید با ماده جاذب جامد بهتر عمل می‌کند [۱۴]. لاکتر و آذربادی با مقایسه‌ی فناوری جذب کربن‌دی‌اکسید با فناوری‌های مشابه مانند پتل‌های خورشیدی، پیش‌بینی برای کاهش قیمت جذب کربن‌دی‌اکسید تا ۱۰۰ دلار بر تن انجام دادند و به این نتیجه رسیدند

<sup>1</sup> Point source

<sup>2</sup> Pre-combustion capture

<sup>3</sup> Oxy-fuel combustion

<sup>4</sup> Post-combustion capture

<sup>5</sup> Direct Air Capture (DAC)

<sup>6</sup> Sorbent

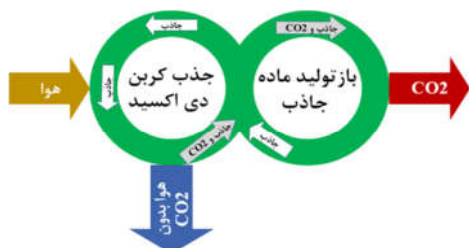
<sup>7</sup> Techno-Economic Analysis (TEA)

<sup>8</sup> Life Cycle Assessment (LCA)

## ۲- روش تحقیق

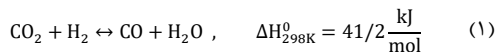
### ۲-۱- فرآیندها و واکنش‌ها

جذب مستقیم کربن‌دی‌اکسید از هوا به عنوان یک روش کاهش کربن‌دی‌اکسید، اولین بار توسط کلاوس لاکنر پیشنهاد شد [۷]. از آن پس انواع متنوعی از این روش‌ها ابداع شده‌اند، که مهم‌ترین این روش‌ها، استفاده از جذب شیمیایی<sup>۴</sup> و جذب سطحی<sup>۵</sup> است. روش کلی عملکرد فرآیندهای جذبی بدین شرح است: ابتدا، هوا با ماده‌ی جاذب تماس پیدا می‌کند و کربن‌دی‌اکسید جذب می‌شود. سپس، مرحله باز تولید جاذب<sup>۶</sup> انجام می‌شود که طی آن گاز کربن‌دی‌اکسید آزاد شده و ماده جاذب، بازتولید می‌شود که سیستم بتواند به صورت پیوسته کار کند. چرخه‌ی کلی این فرآیند در شکل ۱ قابل مشاهده است.

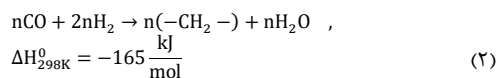


شکل ۱- چرخه کلی فرایند جذب کربن دی اکسید اتمسفر

واکنش جابجایی آب-گاز معکوس اولین بار توسط کارل بوش و ویلهلم وایلد مشاهده شد. در این واکنش، کربن‌دی‌اکسید با هیدروژن واکنش داده تا کربن‌مونواکسید و آب تولید شوند. کربن‌مونواکسید می‌تواند به عنوان ماده اولیه در واکنش فیشر-تروپش، تولید متانول و... استفاده شود که در نتیجه، کارایی کربن‌دی‌اکسید را بالاتر می‌برد [۱۷]. واکنش این سیستم به فرم زیر است:



در سال ۱۹۲۳، فرانز فیشر و هانز تروپش راهی برای تبدیل گاز به مایع<sup>۷</sup> معرفی کردند. در واکنش فیشر-تروپش گاز سنتز که شامل کربن مونواکسید و هیدروژن (و اکثراً مقداری کربن‌دی‌اکسید) است، به گستره‌ی بزرگی از محصولات هیدروکربنی شامل بنزین و گازوییل تبدیل می‌شود. واکنش کلی بدین صورت است [۱۸]:



سپس سیستم‌های جذب مستقیم کربن و فیشر-تروپش، برای تولید سوخت یا سایر مواد هیدروکربنی کوپل می‌شوند.

### ۲-۲- شبیه‌سازی با Aspen Plus

Aspen Plus یک نرم‌افزار شبیه‌سازی فرآیندهای شیمیایی و ترمودینامیکی در حالت پایدار است. این نرم‌افزار شامل انواع بانک داده‌ها و مدل‌های ترمودینامیکی است.

که برای رسیدن به این هدف، نیازمند چند صد میلیون دلار سرمایه گذاری در این زمینه است [۱۵]. دویتز به مطالعه‌ی چرخه‌ی حیات سیستم جذب کربن‌دی‌اکسید مستقیم با استفاده از فناوری Climeworks (ماده‌ی جاذب جامد) با اطلاعات واقعی از کارخانه‌های این شرکت پرداخت و به این نتیجه رسید دو کارخانه‌ی این شرکت در کشورهای ایسلند و سوئیس با بازده جذب کربن به ترتیب ۹۳/۱ درصد و ۸۵/۴ درصد کار می‌کنند [۱۶]. همچنین، او نشان داد که تمام سیستم‌های جذب مستقیم و ذخیره کربن با برق هر منطقه‌ای در طول عمر خود می‌توانند کربن منفی شوند؛ ولی سیستم‌های جذب مستقیم و تولید سوخت (متان در نظر گرفته شده است) در بهترین حالت می‌توانند تقریباً کربن صفر شوند و برای کارایی این سیستم‌ها نیازمند برق با کربن کم است.

با مرور منابع، نتیجه‌گیری شد که ارزیابی چرخه‌ی حیات سیستم حصر مستقیم و واکنش فیشر-تروپش<sup>۱</sup>، جداگانه در مقالات بررسی شده‌اند، اما مطالعات بسیار محدودی در خصوص ترکیب آنها انجام شده است. همچنین، لازم است ارزیابی چرخه‌ی حیات برای سیستم ترکیبی انجام شود تا مشخص شود که آیا سیستم می‌تواند در نهایت به کاهش انتشار کربن دی اکسید کمک کند. باتوجه به تاثیر میزان آلاینده‌ی برق مصرفی بر دوست‌دار محیط‌زیست بودن سیستم، سه سناریو برای تامین برق بررسی شد. هدف از این پژوهش بررسی و تعیین میزان انتشار گازهای گلخانه‌ای در سیستم حصر مستقیم و تولید سوخت با فیشر-تروپش، شناسایی اصلی‌ترین آلاینده‌ها در این سیستم و شناخت شرایطی که تحت آن‌ها این سیستم از لحاظ زیست محیطی توجیه پذیر باشد، است. دلایل اصلی انجام این تحقیق، جست‌وجوی راهی برای کاهش رد پای کربن در بخش حمل‌ونقل و تولید سوخت‌های هیدروکربنی است. با استفاده از نتایج سه سناریو، کاربردی بودن سیستم برای به کارگیری در کشور در شرایط مختلف ارزیابی شد.

روش پیشنهادی در این‌جا، استفاده از سیستم جذب کربن‌دی‌اکسید مستقیم از هوا است. این سیستم به وسیله‌ی محلول پتاسیم هیدروکسید کربن‌دی‌اکسید اتمسفر را جذب و با استفاده از الکترولیز آب و واکنش جابجایی آب-گاز معکوس<sup>۲</sup> آن را تبدیل به گاز سنتز<sup>۳</sup> می‌کند. در ادامه، واکنش فیشر-تروپش مورد استفاده قرار می‌گیرد تا گاز سنتز را به سوخت‌های هیدروکربنی تبدیل کند. پس از شبیه‌سازی سیستم و به دست آوردن موازنه‌های جرمی و انرژی، چرخه‌ی حیات سیستم با هدف ارزیابی تاثیرات محیط زیستی سیستم جذب مستقیم کربن‌دی‌اکسید و تولید سوخت بررسی می‌شود. برای شبیه‌سازی از نرم افزار Aspen Plus استفاده شده که یک نرم‌افزار شبیه‌سازی فرآیند در حالت پایدار است. برای بررسی چرخه‌ی حیات نیز از نرم افزار Sima Pro 9 استفاده می‌شود که نرم‌افزار تخصصی LCA است و بانک داده‌های مطمئن و فراوانی دارد.

<sup>4</sup> Absorption

<sup>5</sup> Adsorption

<sup>6</sup> Sorbent regeneration

<sup>7</sup> Gas-to-liquid (GtL)

<sup>1</sup> Fischer-Tropsch Reaction

<sup>2</sup> Reverse Water-Gas Shift (RWGS)

<sup>3</sup> Syngas

## ۲-۲-۱- مدل های ترمودینامیکی

مهم ترین عامل در دقت شبیه سازی، مدل ترمودینامیکی استفاده شده است. مدل های ترمودینامیکی، معادلات حالت، فاز، آنتالپی و موازنه های جرمی و انرژی را شبیه سازی و حل می کنند. روش ENRTL<sup>۱</sup> انرژی گیبس اضافی و ضرایب فعالیت (ضریبی ترمودینامیکی برای محاسبه ی میزان انحراف از حالت ایده آل در یک مخلوط) سیستم های الکترولیت را با توجه به رفتار غیر ایده آل مخلوط های یونی تخمین می زند [۱۹]. بنابراین، با استفاده از این مدل می توان تعادل های فازی را محاسبه کرد.

معادله ی حالت SRK<sup>۲</sup> مانند سایر معادلات حالت، رابطه ی فشار، دما و حجم گاز را بیان می کند. معادله ی اولیه به شرح زیر می باشد [۲۰ و ۲۱]:

$$p = \frac{RT}{V_M - b} - \frac{a}{\sqrt{T}V_M(V_M + b)} \quad (۳)$$

که در این معادله: p فشار گاز، T دمای گاز، V<sub>M</sub> حجم مولی، R ثابت گازها و a و b ضرایبی ثابت مربوط به حجم و پتانسیل جذب مولکول ها هستند.

این معادله تحت اصلاحات فراوانی برای افزایش دقت آن قرار گرفته است که معادله ی استفاده شده در نرم افزار، اصلاح Soave یا معادله ی SRK می باشد که به شرح زیر است:

$$p = \frac{RT}{V_M - b} - \frac{a_c \alpha(T)}{V_M(V_M + b)} \quad (۴)$$

که در آن:

$$a_c = 0.42747 \frac{R^2 T_c^2}{p_c} \quad (۵)$$

$$b = 0.08664 \frac{RT_c}{p_c} \quad (۶)$$

و

$$\alpha(T) = \left\{ 1 + m \left[ 1 - \left( \frac{T}{T_c} \right)^{1/2} \right] \right\} \quad (۷)$$

و m در آن:

$$m = 0.48 + 1.574\omega - 0.176\omega^2 \quad (۸)$$

و  $\omega$  ضریب غیر مرکزی<sup>۳</sup> مربوط به جز در ترکیب است. در تماس دهنده ی هوا و در واحدهای جاذب، محل هایی که CO<sub>2</sub> باید از مخلوط گازها جدا شود، تماس فیزیکی بین یک جریان گازی با یک جریان آبی وجود دارد. بنابراین در مدل ترمودینامیکی برای توصیف تعادل بخار-مایع در این اجزا استفاده شده است. ENRTL و معادله حالت SRK، برای فاز گاز اعمال شد.

(۲) بر اساس نرخ: این مدل توسط لوییس و ویتمن پیشنهاد شده است [۲۳]. این مدل تمامی جوانب موازنه انرژی، سینتیک، انتقال گرما و جرم، هیدروپنماتیک و مشخصات برج را مد نظر قرار داده که در نتیجه دقت بالاتری نسبت به مدل قبل دارد [۲۴]. در این مدل، از نظریه دو فیلم استفاده می شود؛ به عبارت دیگر، در مرز بین گاز و مایع دو فیلم با ضخامت معین در نظر گرفته می شود که در حالت پایدار قرار دارند و انتقال جرم فقط با پدیده ی پخش بین این دو فیلم صورت می گیرد. لذا، غلظت اجزا را می توان یکنواخت در همه جا به غیر از محل فیلم ها در نظر گرفت و چون ضخامت فیلم ها بسیار نازک است، از ماده موجود در فیلم ها نیز می توان چشم پوشی کرد. ضریب انتقال جرم (k<sub>c</sub>) مربوط به CO<sub>2</sub> در این مدل از رابطه (۹) محاسبه می شود [۱۹ و ۲۵].

$$k_c = \frac{D_{CO_2}}{\delta} \quad (۹)$$

جدول ۱- واکنش های اصلی سیستم

منبع	محل واکنش	واکنش	آنتالپی واکنش (ΔH)
[۱۰]	Air Contactor	CO <sub>2</sub> (g) + 2KOH(aq) → H <sub>2</sub> O(l) + K <sub>2</sub> CO <sub>3</sub> (aq)	-8/95 $\frac{kJ}{mol}$
[۱۰]	Pellet Reactor	K <sub>2</sub> CO <sub>3</sub> (aq) + Ca(OH) <sub>2</sub> (s) → 2KOH(aq) + CaCO <sub>3</sub> (s)	-8/5 $\frac{kJ}{mol}$
[۱۰]	Calciner	CaCO <sub>3</sub> (s) → CaO(s) + CO <sub>2</sub> (g)	3/178 $\frac{kJ}{mol}$
[۱۰]	Slaker	CaO(s) + H <sub>2</sub> O(l) → Ca(OH) <sub>2</sub> (s)	-9/63 $\frac{kJ}{mol}$
[۲۷]	Water Electrolysis	H <sub>2</sub> O → H <sub>2</sub> + 0.5O <sub>2</sub>	8/285 $\frac{kJ}{mol}$
[۱۵]	RWGS	CO <sub>2</sub> + H <sub>2</sub> → CO + H <sub>2</sub> O	2/41 $\frac{kJ}{mol}$
[۲۷]	FT (paraffins)	nCO + (2n + 1)H <sub>2</sub> → C <sub>n</sub> H <sub>2n+2</sub> + nH <sub>2</sub> O	-
[۲۷]	FT (olefins)	nCO + 2nH <sub>2</sub> → C <sub>n</sub> H <sub>2n</sub> + nH <sub>2</sub> O	-

## ۲-۲-۳- واکنش های شیمیایی

واکنش های اصلی سیستم در جدول ۱ نشان داده شده است. نرم افزار Aspen Plus با بانک داده های خود و با استفاده از ترکیب های موجود در فرآیند، توانایی تولید واکنش های بین آن ها را دارد. در جدول ۲ واکنش های تولید شده توسط نرم افزار ارائه شده است.

جدول ۲- واکنش های تولید شده توسط Aspen Plus

نوع واکنش	واکنش
تعادلی	H <sub>2</sub> O + HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup> ↔ CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup> + H <sub>3</sub> O <sup>+</sup>
تعادلی	CaOH <sup>+</sup> ↔ Ca <sup>2+</sup> + OH <sup>-</sup>
تعادلی	2H <sub>2</sub> O + CO <sub>2</sub> ↔ HCO <sub>3</sub> <sup>-</sup> + H <sub>3</sub> O <sup>+</sup>
تعادلی	2H <sub>2</sub> O ↔ OH <sup>-</sup> + H <sub>3</sub> O <sup>+</sup>
نمک	K <sub>2</sub> CO <sub>3</sub> ↔ CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup> + Ca <sup>2+</sup>
نمک	CaCO <sub>3</sub> ↔ CO <sub>3</sub> <sup>2-</sup> + Ca <sup>2+</sup>
تجزیه	KOH → K <sup>+</sup> + OH <sup>-</sup>
تجزیه	Ca(OH) <sub>2</sub> → CaOH <sup>+</sup> + OH <sup>-</sup>

## ۲-۲-۲- مدل انتقال جرم

به طور کلی دو راه برای تشریح پدیده ی انتقال گرما و سینتیک بین گاز و مایع (که بیشتر در جذب کربن دی اکسید هنگام تماس آن با مایع جاذب اتفاق می افتد) وجود دارد:

(۱) تعادل و بازده در هر مرحله: این روش تقریبی است و فرض می کند که در هر مرحله گاز و مایع در تعادل کامل قرار دارند و با استفاده از بازده، این تقریب را بهبود می بخشد [۱۹ و ۲۲].

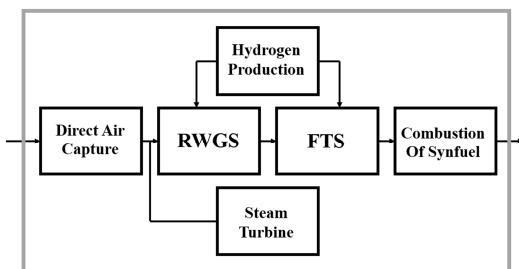
<sup>۱</sup> Electrolyte Non-Random Two-Liquid model

<sup>۲</sup> Soave-Redlich-Kwong

<sup>۳</sup> Acentric factor

۸، لیو [۲۱]، مارکزه [۲۸] و بیانکی [۱۹] می‌باشد.

این سیستم شامل ۸ قسمت است: (۱) تماس‌دهنده ی هوا و جذب‌کننده (۲) راکتور گندله (۳) پخت آهک (۴) تولید آب آهک (۵) افزایش فشار کربن‌دی‌اکسید (۶) تولید هیدروژن و گاز سنتز (۷) واکنش فیشر-تروپش (۸) تولید توان؛ تمامی ۶ قسمت اول تنها برای جذب مستقیم کربن‌دی‌اکسید می‌باشند.



شکل ۲- مرز سیستم و اصلی‌ترین واحدهای آلاینده

در شکل ۳ فرآیند کلی این سیستم مشاهده می‌شود؛ ابتدا هوا در قسمت تماس‌دهنده‌ی هوا<sup>۹</sup> با ماده جاذب پتاسیم‌هیدروکسید تماس پیدا کرده و کربن‌دی‌اکسید آن جذب می‌شود. نرم افزار Aspen Plus واحدی برای تماس دهنده ی هوا ندارد؛ چراکه این جزء، فناوری جدیدی است که هنوز در نرم افزار مدل سازی نشده است. بنابراین، برای مدل سازی این واحد از دو مخلوط کننده و یک جدا کننده استفاده شده است. سپس، ماده جاذب که حالا CO<sub>2</sub> جذب شده در خود دارد، به راکتور گندله<sup>۱۰</sup> هدایت می‌شود که در آن جا با افزودن کلسیم‌هیدروکسید (Ca(OH)<sub>2</sub>)، گندله‌های کلسیم‌کربنات (CaCO<sub>3</sub>) تشکیل می‌شوند. در حقیقت راکتور گندله برای حذف یون کربنات تولید شده در تماس‌دهنده‌ی هوا استفاده می‌شود. واکنشی که در راکتور صورت می‌گیرد، واکنش تبلور است که کمی گرمازا است. آب موجود در گندله‌های کلسیم‌کربنات جدا شده و گندله‌ها با عبور از مبادله‌کن گرمایی (دو مبادله‌کن برای شبیه سازی راحت‌تر در نرم افزار) گرما می‌گیرند و به بخش پخت آهک<sup>۱۱</sup> منتقل می‌شوند. بعد از پخت، گاز کربن‌دی‌اکسید آزاد شده و کلسیم‌اکسید تولید می‌شود؛ کلسیم-اکسید در بخش تولید آب آهک<sup>۱۲</sup> با آب واکنش داده و به راکتور گندله هدایت می‌شود تا سیستم توانایی کار پیوسته را داشته باشد [۸، ۲۱]. از طرف دیگر، فشار CO<sub>2</sub> در یک کمپرسور چندمرحله-ای<sup>۱۳</sup> تا ۱۵۰ بار افزایش می‌یابد و به قسمت بعد منتقل می‌شود. تمامی مراحل تا اینجا کار (به علاوه‌ی تولید توان)، برای جذب کربن‌دی-اکسید اتمسفر بود و بعد از این مرحله، کربن‌دی‌اکسید به عنوان یک جریان تحت کنترل سیستم در می‌آید.

### ۳-۲- ارزیابی چرخه‌حیات سیستم

ارزیابی چرخه‌حیات سیستم یا LCA ابزاری برای اندازه‌گیری تاثیرات زیست‌محیطی فرآیندها، سیستم‌ها یا محصولات است. مراحل LCA چهارگانه است: (۱) تعریف هدف و دامنه<sup>۱</sup> (۲) آنالیز منابع<sup>۲</sup> (۳) محاسبه تاثیرات<sup>۳</sup> (۴) و توضیح تاثیرات<sup>۴</sup> [۲۶].

گام اول ارزیابی چرخه‌حیات (هدف) این مقاله بررسی و اندازه-گیری میزان آزاد شدن گازهای گلخانه‌ای در سیستم جذب مستقیم و تولید سوخت با فیشر-تروپش، شناسایی اصلی‌ترین آلاینده‌ها در این سیستم و شناخت شرایطی که تحت آن‌ها این سیستم دوستدار محیط زیست می‌شود، است. دلایل اصلی انجام این تحقیق، جست‌وجو راهی برای کاهش ردپای کربن در بخش حمل‌ونقل و تولید سوخت‌های هیدروکربنی است. چرخه‌ی حیات سیستم این مقاله از روش گهواره تا گور استفاده می‌کند و مرزهای آن از استخراج مواد اولیه و جذب کربن در فرآیند آغاز شده و به احتراق سوخت ختم می‌شود.

واحد اصلی LCA گرم کربن‌دی‌اکسید معادل آزاد شده بر گرم کربن‌دی‌اکسید جذب شده  $(\frac{g CO_2 eq}{g CO_2 captured})$  است. برای انجام آن از نرم افزار SimaPro 9 و از روش IPCC 2013 GWP 20a V1/03 استفاده شده است.

در مرحله آنالیز منابع، داده‌های مورد نیاز برای انجام LCA جمع آوری شده و سیستم مدل می‌شود. سیستم تحت سه شرایط (۱) استفاده از برق شبکه ایران (۲) استفاده از برق شبکه‌های آینده و (۳) برق پاک مورد بررسی قرار گرفته است و ورودی، خروجی و مصارف سیستم نیز با شبیه سازی در نرم افزار Aspen Plus به دست آمده است. سیستم جذب کربن مورد استفاده، سیستم شرکت Carbon Engineering است و اصلی‌ترین واحدهای آلاینده این سیستم در شکل ۲ مشخص است که شامل جذب مستقیم کربن‌دی‌اکسید، واکنش جابجایی آب-گاز معکوس و تولید هیدروژن مورد نیاز آن، واکنش فیشر-تروپش<sup>۵</sup> و تولید هیدروژن مورد نیاز آن، توربین بخار<sup>۶</sup> برای تولید انرژی مورد نیاز سیستم و احتراق سوخت تولید شده می‌باشد.

پس از مدل‌سازی سیستم و به دست آوردن مصارف و جریان‌های سیستم، در فاز سوم ارزیابی چرخه حیات (محاسبه تاثیرات) میزان انتشار کربن دی اکسید محاسبه می‌شود [۲۷].

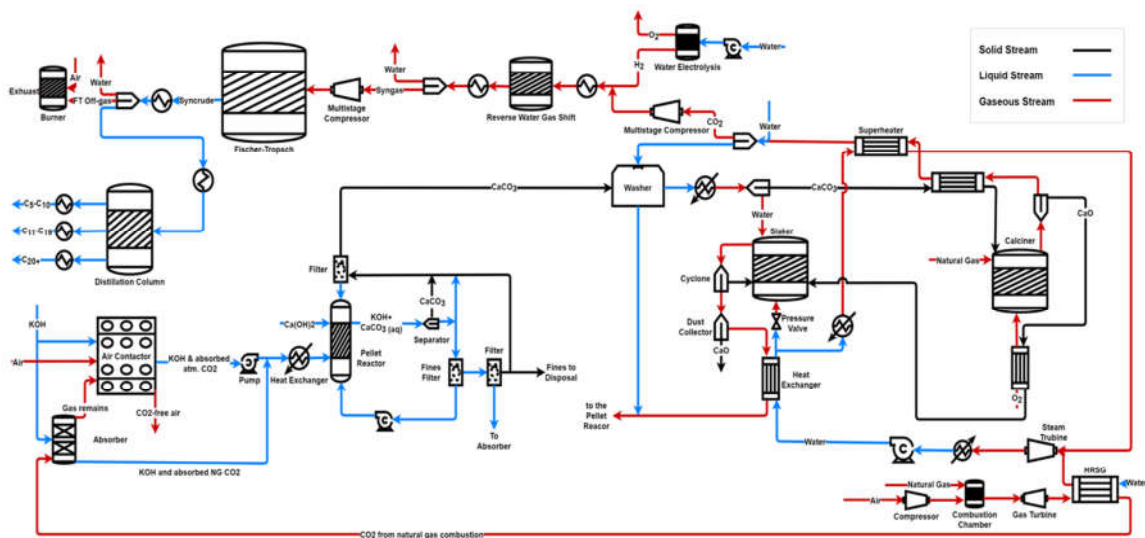
این عمل به دو شکل کلی انجام می‌شود: (۱) نقطه میانی<sup>۷</sup> (۲) نقطه پایانی<sup>۸</sup>. روش مورد استفاده در پژوهش روش نقطه‌ی میانی است که در بخش نتایج ارائه شده است.

### ۴-۲- شرح سیستم و نحوه مدل‌سازی در نرم افزار Aspen Plus

سیستم استفاده شده، سیستم شرکت Carbon Engineering با ماده جاذب محلول پتاسیم هیدروکسید است که بر اساس کارهای کیت

<sup>1</sup> Goal and scope definition  
<sup>2</sup> Inventory analysis  
<sup>3</sup> Impact assessment  
<sup>4</sup> Interpretation  
<sup>5</sup> FTS  
<sup>6</sup> Steam Turbine  
<sup>7</sup> Midpoint  
<sup>8</sup> Endpoint

<sup>9</sup> Air Contactor  
<sup>10</sup> Pellet Reactor  
<sup>11</sup> Calciner  
<sup>12</sup> Slaker  
<sup>13</sup> Multistage Compressor



شکل ۳- فرآیند کلی سیستم تولید سوخت از کربن دی اکسید هوا

مورد نظر مانند گازوئیل یا بنزین به دست آید. دیگر منبع انرژی سیستم احتراق گاز طبیعی است که بخار آب تولید کرده و توربین بخار را فعال می کند که کربن دی اکسید ماحصل از آن نیز در جذب کننده<sup>۴</sup> گرفته می شود. در شکل ۴ نمودار دیاگرامی کامل فرآیند نشان داده شده است و در شکل ۵، مدل استفاده شده در نرم افزار Aspen Plus دیده می شود که به دلیل وضوح بیشتر مدل به دو قسمت تقسیم شده است.

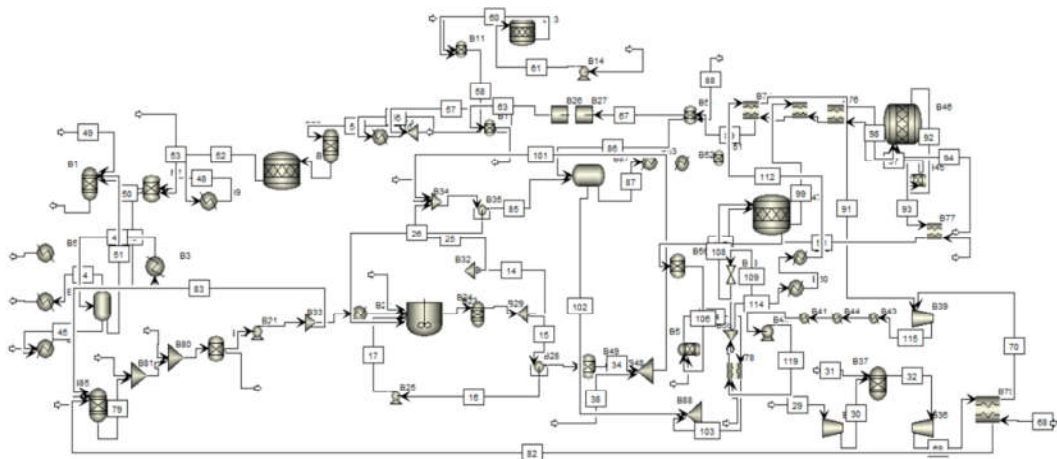


شکل ۴- نمودار دیاگرامی کامل فرآیند

همزمان با این عملیات، آب در قسمت تولید هیدروژن، الکترولیز<sup>۱</sup> شده و گازهای اکسیژن و هیدروژن آزاد می شوند. الکترولیز آب در محلول بازی صورت می گیرد؛ این نوع الکترولیز آب، بالغ ترین و تجاری-ترین فناوری تولید هیدروژن از آب به شمار می آید. الکترولیز آب در دمای ۶۰ درجه سلسیوس و فشار یک بار اتفاق می افتد. گاز هیدروژن با کربن دی اکسید مخلوط شده و در مبادله کن گرمایی تا دمای ۵۵۰ درجه سلسیوس گرما می گیرد. سپس طی واکنش جایجایی آب-گاز معکوس گاز سنتز به دست می آید. فشار گاز سنتز نیز در یک کمپرسور چندمرحله ای تا فشار راکتور فیشر-تروپش یعنی ۲۵ بار زیاد شده و وارد واکنش فیشر-تروپش می شود. راکتور فیشر-تروپش به عنوان یک راکتور چند لوله ای با بستر ثابت مدل سازی شد که در ۵۰۱ کلون و ۲۵ بار کار می کند. کاتالیزور، مبتنی بر کبالت با پشتیبانی آلومینا (Co-Pt/γ-Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) بود که برای سنتز هیدروکربن های زنجیره بلند مناسب است. راکتور به عنوان پیکربندی یک طرفه طراحی شده است، جایی که هیچ گردش مجددی در ورودی آن در نظر گرفته نشده است. محصولات راکتور فیشر-تروپش شامل آلکان ها از کربن ۱ تا کربن ۸۰ و آلکن ها از کربن ۱ تا کربن ۴۰ هستند گستره ی محصولات این واکنش به کاتالیست استفاده شده، شرایط ترمودینامیکی مثل دما و فشار، نسبت مولی هیدروژن به کربن مونواکسید و طراحی راکتور بستگی دارد. کد استفاده شده برای شبیه سازی واکنش از مرجع [۲۹] برگرفته شده است و به صورت دستی وارد نرم افزار شد. در نهایت، نفت خام مصنوعی<sup>۲</sup> تولید می شود؛ آب از محصولات جدا می شود و محصولات کم کربن مانند متان و اتیلن برای تامین انرژی سوزانده می شوند و سایر محصولات به یک برج تقطیر<sup>۳</sup> وارد می شوند تا محصول

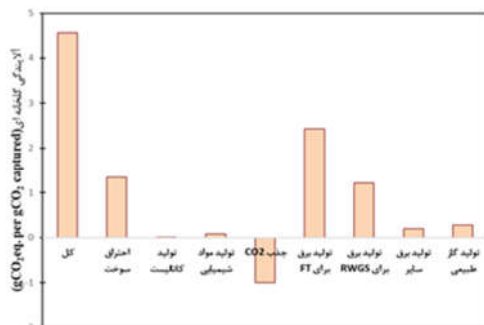
<sup>1</sup> Water Electrolysis  
<sup>2</sup> Syn crude  
<sup>3</sup> Distillation Column

<sup>4</sup> Absorber



شکل ۵- مدل شبیه‌سازی شده در نرم‌افزار Aspen Plus

شود؛ به عبارت دیگر استفاده از این سیستم در ایران، اوضاع را بدتر نیز خواهد کرد.



شکل ۶- میزان آلایندهی سیستم با برق شبکه ایران

بیشترین میزان آلایندهی مربوط به تولید برق برای تولید هیدروژن مورد نیاز واکنش فیشر-تروپش با آلایندهی ۲/۴۳ گرم کربن‌دی‌اکسید معادل به کربن‌دی‌اکسید جذب شده است. در ادامه، احتراق سوخت تولید شده و تولید برق برای هیدروژن RWGS با آلایندهی به ترتیب  $1/21$  و  $1/34$   $gCO_2eq./gCO_2captured$  قرار دارند. همچنین، میزان آلایندهی گاز طبیعی و تولید برق برای سایر قسمت‌های سیستم برابر  $0/28$  و  $0/2$  بوده و آلایندهی چندان نادرنده. تولید مواد شیمیایی، تولید کاتالیست و ساخت کارخانه نیز، بسیار کم تاثیرند.

همچنین، از آنجایی که حدود ۴۰۰۰۰۰ تن سوخت گازوییل تولید می‌شود و ارزش گرمای<sup>۲</sup> گازوییل حدودا  $43200$   $kJ/kg$  است [۳۰]، آلایندهی سیستم در این حالت معادل  $253$   $gCO_2 eq./MJ fuel$  می‌شود.

تولید سوخت گازوییل به روش معمول و احتراق آن، آلایندهی حدود  $100$   $gCO_2 eq./MJ fuel$  دارد؛ یعنی، آلایندهی سیستم در این حالت حدود ۲/۵ برابر بیشتر است [۲۱]. بنابراین، استفاده از برق شبکه‌ای ایران نه تنها از نظر زیست‌محیطی مخرب است، بلکه از روش معمول

به دلیل برخی از محدودیت‌های نرم‌های نرم‌افزار، فرضیاتی برای برای شبیه‌سازی سیستم استفاده شد که به شرح زیر است:

- واحدی برای شبیه‌سازی تماس‌دهنده‌ی هوا در نرم‌افزار وجود ندارد، لذا برای مدل‌سازی واحد تماس‌دهنده‌ی هوا از دو مخلوط‌کننده و یک جداکننده استفاده شده است.
- در نرم‌افزار واحدی که بتواند هم یک راکتور بستر شناور را مدل کند، هم جریانی که بدون واکنش دادن از آن عبور کند و گرما بگیرد، وجود ندارد. بنابراین جریان گندله‌ها در واحدهای مبادله‌کن گرمایی گرما گرفته و سپس با عبور از جداکننده، آب از آن جدا شده و گندله‌های کلسیم کربنات گرما گرفته و به قسمت پخت آهک منتقل می‌شوند.
- باهدف ساده کردن شبیه‌سازی در نرم‌افزار، دو مبادله‌کن گرمایی به جای یک مبادله‌کن گرمایی وجود دارد.
- باتوجه به اینکه در نرم افزار Aspen Plus فقط یک خروجی از راکتور وجود دارد، یک مرحله جداسازی هیدروژن و اکسیژن بعد از الکترولیز آب اضافه شد.

### ۳- نتایج

به طور کلی، سیستم شبیه‌سازی شده توانایی جذب حدود ۰/۹۶ میلیون تن  $CO_2$  در سال (در مقابل ۱/۱ میلیون تن  $CO_2$  هدف Carbon Engineering) و تولید سوخت حدود ۴۰۰۰۰۰ تن در سال (در مقابل ۴۶۳۰۰۰ تن در سال پیش بینی شده توسط [۲۱]) را دارد. مصارف جرمی و انرژی سیستم به تفکیک بخش در جدول ۳ ذکر شده است.

### ۳-۱- سناریو اول: برق شبکه ایران

برق ایران به شدت به سوخت‌های فسیلی وابسته است که از ضریب آلایندهی بسیار بالای آن نیز واضح است؛ لذا، سیستم دوستدار محیط زیست نخواهد بود. همانطوریکه در شکل ۶ دیده می‌شود به ازای جذب هر گرم کربن‌دی‌اکسید، حدود ۴/۶ گرم کربن‌دی‌اکسید آزاد می‌-

<sup>2</sup> Lower Heating Value (LHV)

<sup>1</sup> Fluidized bed reactor

تولید گازوئیل نیز آلوده‌تر می‌باشد. در نتیجه، اولین قدم برای استفاده از این سیستم اطمینان حاصل کردن از آلاینده‌گی پایین برق مصرفی است.

### ۳-۲- سناریو دوم: برق شبکه‌ای آینده

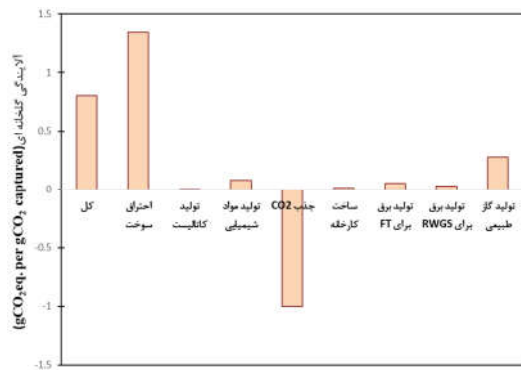
انتظار می‌رود برق شبکه‌های آینده پاک باشد؛ به این معنی که میزان آلاینده‌گی آنان زیر ۲۰ گرم کربن‌دی‌اکسید به ازای هر کیلووات ساعت باشد. چنین، شبکه‌های برقی امروزه در نواحی که از انرژی‌های پاک استفاده می‌کنند، یافت می‌شود [۲۱]. در نتیجه، بررسی سیستم تحت این شرایط دیدگاه خوبی به ما راجع به آینده‌ی این فناوری می‌دهد.

در این حالت، سیستم دوستدار محیط‌زیست است؛ هر گرم از کربن‌دی‌اکسید جذب شده، تنها ۰/۸ گرم کربن‌دی‌اکسید آزاد می‌کند. میزان آلاینده‌گی این سیستم در شکل ۷ نشان داده شده است. آلاینده‌ترین قسمت، دیگر برق برای تولید هیدروژن FT نبوده و احتراق سوخت تولیدی با همان میزان آلاینده‌گی قبلی می‌باشد. سپس، تولید گاز طبیعی با هم با همان مقدار قبلی و تولید مواد شیمیایی با آلاینده‌گی  $0/082 \text{ gCO}_2\text{eq./gCO}_2 \text{ captured}$  هستند. دیگر مورد قابل توجه، آلاینده‌گی ساخت کارخانه است که در سناریو قبل حتی دیده نمی‌شد. به طور کلی، در سناریو قبل به علت شدت بالای آلاینده‌گی برق، سایر آلاینده‌گی‌ها اهمیت خود را از دست می‌دادند. ولی در اینجا، برای حتی پاک تر کردن سیستم هم می‌توان برنامه‌ریزی کرد. با استفاده از اطلاعات مربوط به سوخت تولیدی، آلاینده‌گی سیستم بر حسب انرژی سوخت در این حالت  $7/44 \text{ gCO}_2 \text{ eq./MJ fuel}$  خواهد بود. لذا، استفاده از این سیستم تحت این شرایط از نظر زیست‌محیطی بهتر از استفاده از گازوئیل معمولی است.

این موضوع با یافته‌های ليو [۲۱] مطابقت دارد که تعیین کرده بود برای اینکه استفاده از گازوئیل تولیدی این سیستم پاک‌تر از گازوئیل معمولی باشد، باید برق مورد استفاده ضریب آلاینده‌گی کمتر از  $139 \text{ gCO}_2/\text{kWh}$  داشته باشد. بنابراین، قدم دوم برای سیستم سعی در تولید سوخت با مشخصات احتراقی بهتر و تولید گاز طبیعی پاک‌تر می‌باشد.

جدول ۳- مصارف جرمی و انرژی سیستم

بخش	جریان جرمی یا انرژی	مقدار ( $\frac{\text{tonne}}{\text{hr}}$ یا MW)
تماس دهنده هوا و جذب کننده	KOH	۴/۵
	انرژی	ناچیز
راکتور گندله	CaCO <sub>3</sub>	۸۵/۱
	انرژی	ناچیز
تولید آب آهک	CaO	۱۶/۵
	انرژی	ناچیز
پخت آهک	گاز طبیعی	۱۰/۸
	انرژی	ناچیز
کمپرسور CO <sub>2</sub>	انرژی	۲۶/۱
	تولید هیدروژن	آب
RWGS	انرژی	۷۳۰
	Ni	$2/5 \times 10^4$
FT	انرژی	$2/5 \times 10^4$
	تولید توان	انرژی

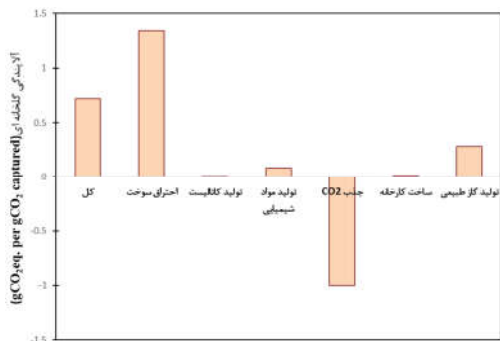


شکل ۷- میزان آلاینده‌گی سیستم با برق شبکه آینده

### ۳-۳- سناریو سوم: برق پاک

در این سناریو فرض می‌شود که یک نیروگاه انرژی پاک مثل خورشیدی و یا ... به طور خاص به استفاده این سیستم تخصیص گردد. تفاوت این منبع با برق شبکه آینده این است که منبع برق پاک به تمامی از انرژی‌های تجدیدپذیر استفاده می‌کند اما درصدی از برق شبکه آینده از انرژی تجدیدپذیر تامین می‌شود. در پاک‌ترین حالت، آلاینده‌گی سیستم  $0/72 \text{ gCO}_2\text{eq./gCO}_2 \text{ captured}$  می‌باشد. از آنجایی که چند پارامتر احتراق سوخت، تولید کاتالیست، تولید مواد شیمیایی، ساخت کارخانه و تولید گاز طبیعی به برق وابسته نیستند و ثابت باقی می‌مانند، میزان آلاینده‌گی این حالت با حالت قبل فرق چندانی ندارد. بنابراین، احتراق سوخت، تولید گاز طبیعی و تولید مواد شیمیایی به ترتیب مهم‌ترین آلاینده‌های سیستم هستند که مقادیر آلاینده‌گی این بخش‌ها در شکل ۸ مشاهده می‌شود.

با توجه به تولید  $400000$  تن سوخت، آلاینده‌گی سیستم بر حسب انرژی ذخیره شده سوخت برابر  $40 \text{ gCO}_2 \text{ eq./MJ fuel}$  است. مشخصاً، سوخت تولیدی این سیستم با برق تجدیدپذیر پاک‌تر از استفاده از گازوئیل تولیدی به روش‌های معمول است. این موضوع به ما نشان می‌دهد که مهم‌ترین عامل در تعیین پاک بودن سیستم، ضریب آلاینده‌گی برق مورد استفاده در سیستم است. با توجه به اینکه این فرآیند هنوز در حال بررسی می‌باشد، تاکنون در کشور ما اجرا نشده است. سناریو اول با توجه به اینکه توجیه زیست محیطی نداشت، قابل اجرا نیست، اما سناریو سوم را می‌توان در مناطقی از کشور که برق آن به تمامی از انرژی‌های تجدیدپذیر تامین می‌شود، اجرا کرد.



شکل ۸- میزان آلاینده‌گی سیستم با برق پاک



## ۴- نتیجه گیری

گاز کربن دی‌اکسید به عنوان مهمترین عامل گرمایش زمین و تغییر اقلیم شناخته می‌شود. برای جلوگیری از گرم شدن بیش از حد زمین، سعی در کنترل و کاهش تولید گاز کربن دی‌اکسید شده است. یکی از فناوری‌هایی که در این راستا پراهمیت است، جذب مستقیم کربن دی‌اکسید از اتمسفر است. از آنجایی که جذب مستقیم کربن دی‌اکسید نیازمند انرژی و هزینه‌های زیاد است، استفاده از کربن دی‌اکسید برای تولید سوخت‌های هیدروکربنی پیشنهاد می‌شود که در این جا چنین سیستمی بررسی می‌شود. این سیستم توانایی جذب ۰/۹۶ میلیون تن کربن دی‌اکسید و تولید ۴۰۰۰۰۰ تن سوخت در سال را داراست. فعالیت سیستم با تماس کربن دی‌اکسید با محلول پتاسیم هیدروکسید و جذب آن آغاز می‌شود. در ادامه با افزودن کلسیم‌اکسید به محلول، گندله‌های کلسیم‌کربنات حاصل می‌شوند. سپس، گندله‌های کلسیم‌کربنات گرما داده شده و گاز کربن دی‌اکسید تحت کنترل سیستم آزاد می‌شود. از سوی دیگر، الکترولیز آب انجام می‌گیرد و هیدروژن تولید می‌شود. با واکنش کربن دی‌اکسید و هیدروژن تحت عنوان واکنش جابجایی آب-گاز معکوس، گاز سنتز تولید می‌شود. گاز سنتز به واکنش فیشر-تروپش تغذیه می‌شود تا پس از انجام واکنش، سوخت‌های هیدروکربنی مایع تولید شود. از آن جایی که این سیستم برای کاهش گازهای گلخانه‌ای پیشنهاد شده، چرخه‌ی حیات سیستم از نظر پتانسیل گرمایش زمین بررسی می‌شود. این بررسی تحت سه سناریوی برق شبکه‌ی ایران، برق شبکه آینده و برق پاک صورت می‌گیرد. با برق شبکه‌ی ایران که بسیار آلاینده است، آلاینده‌ی سیستم برابر  $4/6 \text{ gCO}_2\text{eq./gCO}_2 \text{ captured}$  اندازه‌گیری می‌شود. عامل اصلی این آلاینده‌ی برق مورد استفاده برای تولید هیدروژن واکنش‌های فیشر-تروپش و جابجایی آب-گاز معکوس است. در سناریوی دوم، آلاینده‌ی به زیر  $1 \text{ gCO}_2\text{eq./gCO}_2 \text{ captured}$  رسیده و سیستم دوستدار محیط زیست می‌شود. تحت این شرایط، احتراق سوخت، تولید گاز طبیعی و تولید مواد شیمیایی بیشترین سهم آلاینده‌ی را دارند.

در سناریوی آخر یعنی استفاده از برق پاک نیز، آلاینده‌ی به  $0/72 \text{ gCO}_2\text{eq./gCO}_2 \text{ captured}$  کاهش پیدا کرده ولی مهم‌ترین آلاینده‌ها نسبت به سناریو دوم تغییری نمی‌کنند. نتیجه می‌شود که مهم‌ترین عامل تعیین مناسب بودن سیستم از نظر زیست‌محیطی، ضریب آلاینده‌ی برق مورد استفاده است و در درجه‌های بعدی، احتراق سوخت و تولید گاز طبیعی می‌توانند پاک‌تر شوند.

## ۵- نمادها

$\Delta H$	انتالپی واکنش [KJ/mol]
n	تعداد کربن در محصول
$V_M$	حجم مولی $[\text{m}^3/\text{mol}]$
T	دما [K]
$\delta$	ضخامت فیلم [m]
$k_c$	ضریب انتقال جرم
$D_{CO_2}$	ضریب پخش کربن دی‌اکسید [m]
a	ضریب ثابت مربوط به حجم و پتانسیل جذب مولکول‌ها
b	ضریب ثابت مربوط به حجم و پتانسیل جذب مولکول‌ها
$\omega$	ضریب غیر مرکزیت مربوط به جز در ترکیب
p	فشار [Pa]

## ۶- مراجع

- [1] J.M. Gutiérrez, Jones R.G., Narisma G.T., Alves L.M., Amjad M., Gorodetskaya I.V., Grose M., Klutse N.A.B., Krakovska S., Li J., Martínez-Castro D., Mearns L.O., Memild S.H., Ngo-Duc T., van den Hurk B., Yoon J.-H. Atlas. In Climate Change 2021: The Physical Science Basis. Contribution of Working Group I to the Sixth Assessment Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change [V. Masson-Delmotte, Zhai P., Pirani A., Connors S.L., Péan C., Berger S., Caud N., Chen Y., Goldfarb L., Gomis M.L., Huang M., Leitzell K., Lonnoy E., Matthews J.B.R., Maycock T.K., Waterfield T., Yelekçi O., Yu R., and Zhou B. (eds.)]. Available at: <http://interactiveatlas.ipcc.ch>
- [۲] چمنی ف. و بیکی ح.، شبیه سازی و بهینه سازی فرآیند ریفرمینگ گاز طبیعی با بخار آب و اصلاح مجدد جهت کاهش انتشار دی اکسید کربن. نشریه مهندسی مکانیک دانشگاه تبریز، د. ۵۱، ش. ۴، ص. ۳۲۲-۳۱۵، ۱۴۰۰.
- [3] International Energy Agency. IEA Greenhouse Gas Emissions from Energy. Available at: <https://www.iea.org/data-and-statistics/data-product/CO2-emissions-from-fuel-combustion>
- [4] Available at: <http://www.globalcarbonatlas.org/en/CO2-emissions>.
- [۵] امینی ف.، صابرقحای ل.، سلیمانپور پ.، گل قهرمانی ن.، شفیع زاده م.، توانپور م.، فرمد م.، ترازنامه انرژی سال ۱۳۹۶. ۱۳۹۸، صفحات ۱۱۵، ۱۱۷، ۳۰۴.
- [6] Zhang Z., Borhani T.N.G., El-Naas M.H., Carbon caoture. Exergetic, energetic and environmental dimensions, pp. 997-1016, 2018.
- [۷] قربانی ب.، پیاده روحی ف.، میانسری م.، مهرپویا م.، ساختار یکپارچه تولید همزمان دی‌اکسیدکربن مایع و آب شیرین با استفاده از گردآورهای بشقابکی خورشیدی و عملیات تبدیل LNG به گاز طبیعی. نشریه مهندسی مکانیک دانشگاه تبریز، د. ۵۱، ش. ۲، ص. ۱۶۹-۱۷۵، ۱۴۰۰.
- [8] Markewitz P., Kuchshinrichs W., Leitner W., Linszen J., Zapp P., Bongartz R., Schreiber A., Muller T.E., Worldwide innovations in the development of carbon capture technologies and the utilization of CO<sub>2</sub>. Energy and Environmental Science, Vol. 5, No. 6, pp. 7281-7305, 2012.
- [9] Lackner K.S., Ziock H.-J., Grimes P., Carbon Dioxide Extraction from Air: Is It An Option?. United States: No. LA-UR-99-583, 1999.
- [10] Keith D., Ha-Duong M., Stolaroff J., Climate strategy with CO<sub>2</sub> capture from the air, Climatic Change, Vol. 74, No. 1-3, pp. 17-45, 2006.
- [11] Baciocchi, R., Storti, G., Mazzotti M., Process design and energy requirements for the capture of carbon dioxide from air, Chemical Engineering and Processing: Process Intensification., Vol. 45, No. 12, pp. 1047-1058, 2006.
- [12] Keith D.W., Holmes G., St. Angelo D., A Process for Capturing CO<sub>2</sub> from the Atmosphere, Joule, Vol. 2, No. 8, pp. 1573-1594, 2018.
- [13] Lackner K.S., Azarabadi H., Buying down the Cost of Direct Air Capture, Industrial and Engineering Chemistry Research, Vol. 60, No. 22, pp. 8196-8208, 2021.
- [14] De Jonge M.M.J., Daemen J., Loriaux J.M., Steinmann Z.J.N., Huijbregts M.A.J., Life cycle carbon efficiency of Direct Air Capture systems with strong hydroxide sorbents, International Journal of Greenhouse Gas Control, Vol. 80, no. November 2018, pp. 25-31, 2019.
- [15] Mahdu K., Pauliuk S., Dhathri S., Creutzig F., Understanding environmental trade-offs and resource demand of direct air capture technologies through comparative life-cycle assessment. Nature Energy, 6(11), 1035-1044. 2021.
- [16] Deutz S., Bardow A., Life-cycle assessment of an industrial direct air capture process based on temperature-vacuum swing adsorption, Nature Energy, Vol. 6, No. 2, pp. 203-213, 2021.
- [17] Zhang Q., Pastor-Perez L., Zhang X., Gu S., CO<sub>2</sub> Conversion to Value-Added Gas-Phase Products: Technology

- Overview and Catalysts Selection, Engineering Solutions for CO<sub>2</sub> Conversion, pp. 175–203, 2021.
- [18] Konarova M., Aslam W., Perking G. Fischer-Tropsch synthesis to hydrocarbon biofuels: Present status and challenges involved. In Book: Hydrocarbon Biorefinery: Sustainable Processing of Biomass for Hydrocarbon Biofuels; chapter 3: pp. 77–96, 2022.
- [19] Bianchi S., Process modelling of a Direct Air Capture (DAC) system based on the Kraft process. MSc. Thesis, Politecnico di Torino, 2018.
- [20] Redlich O., Kwong J.N.S. On the Thermodynamics of Solutions. V., On the thermodynamics of solutions. V. An equation of state. Chemical reviews, pp. 233–244, 1949.
- [21] Liu C.M., Sandhu N.K., McCoy S.T., Bergerson J.A., A life cycle assessment of greenhouse gas emissions from direct air capture and Fischer-Tropsch fuel production, Sustainable Energy and Fuels, Vol. 4, No. 6, pp. 3129–3142, 2020.
- [22] Zhang Y., Chen H., Chen C.C., Plaza J.M., Dugas R., Rochelle G.T., Rate-based process modeling study of CO<sub>2</sub> Capture with aqueous monoethanolamine solution, Industrial and Engineering Chemistry Research, Vol. 48, No. 20, pp. 9233–9246, 2009.
- [23] Lewis W.K., Whitman W.G., Principles of Gas Absorption, Industrial and Engineering Chemistry, Vol. 16, No. 12, pp. 1215–1220, 1924.
- [24] Qi G., Wang S., Yu H., Feron P., Chen C., [Rate-based modeling of CO<sub>2</sub> absorption in aqueous NH<sub>3</sub> in a packed column, Energy Procedia, Vol. 37, No. x, pp. 1968–1976, 2013.
- [25] Moiola S., Pellegrini L.A., Gamba S., Simulation of CO<sub>2</sub> capture by MEA scrubbing with a rate-based model, Procedia Engineering, Vol. 42, pp. 1651–1661, 2012.
- [26] ISO 14040: 2006 Environmental management — Life cycle assessment — Principles and framework. International Organization for Standardization 2006; available at: <https://www.iso.org/obp/ui/fr/#iso:std:iso:14040:ed-2:v1:en>
- [27] Müller L., Langhorst T., Kätelhön A., Bachmann M., Sternberg A., Bardow A. TEA&LCA Guidelines for CO<sub>2</sub> Utilization (Version 1.1): Part C LCA Guidelines. Technical Report 2020.
- [28] Marchese M., Buffo G., Santarelli M., Lanzini A., CO<sub>2</sub> from direct air capture as carbon feedstock for Fischer-Tropsch chemicals and fuels: Energy and economic analysis, Journal of CO<sub>2</sub> Utilization, Vol. 46, 2021.
- [29] Marchese M., Giglio E., Santarelli M., Lanzini A., Energy performance of Power-to-Liquid applications integrating biogas upgrading, reverse water gas shift, solid oxide electrolysis and Fischer-Tropsch technologies, Energy Conversion and Management, Vol. 6, 2020.
- [30] Cengel Y.A., Boles M.A. Thermodynamics An Engineering Approach. McGraw-Hill Education: 8th Edition: 938: 2015.