

ΕΘΝΙΚΟ ΜΕΤΣΟΒΙΟ ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ
ΣΧΟΛΗ ΧΗΜΙΚΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ



Τομέας II: Ανάλυσης Σχεδιασμού και Ανάπτυξης Διεργασιών και Συστημάτων

Διπλωματική Εργασία:

*Σχεδιασμός στήλης απορρόφησης Διοξειδίου του Άνθρακα
από υδατικό διάλυμα Μονοαιθανολαμίνης.*

Ανασασόπουλος Ιωάννης

Επιβλέπουσα καθηγήτρια: Ελένη Γρηγοροπούλου

Αθήνα 2018

Πρόλογος.

Με την παρούσα διπλωματική εργασία ολοκληρώνεται ο προπτυχιακός κύκλος σπουδών μου στην σχολή Χημικών Μηχανικών του Εθνικού Μετσόβιου Πολυτεχνείου. Αρχικά, θα ήθελα να ευχαριστήσω την επιβλέπουσα καθηγήτριά μου κα Ελένη Γρηγοροπούλου για την βοήθεια και την καθοδήγηση κατά την διάρκεια εκπόνησης της διπλωματικής εργασίας. Επίσης, θα ήθελα να ευχαριστήσω τους συμφοιτητές μου και συναδέλφους τόσο για την συνεργασία μας τα χρόνια των σπουδών μου όσο και για την ανταλλαγή απόψεων και ιδεών. Τέλος, θα ήθελα να ευχαριστήσω τα συγγενικά και φιλικά πρόσωπα για την διαρκή στήριξη καθ' όλη την διάρκεια των σπουδών μου.

Πίνακας Περιεχομένων

Πρόλογος.....	2
Κατάλογος Εικόνων.....	5
Κατάλογος Πινάκων.....	5
Κατάλογος Διαγραμμάτων.....	6
Περίληψη.....	8
Abstract.....	10
A. Θεωρητικό Μέρος.....	11
1 Εισαγωγή.....	11
2 Μείωση του CO ₂	12
3 Μέθοδοι απομάκρυνσης CO ₂	14
3.1 Βασικά συστήματα απομάκρυνσης.....	14
3.1.1 Αιχμαλώτιση από ρεύματα της βιομηχανικής διαδικασίας.....	15
3.1.2 Οι διεργασίες πριν την καύση.....	15
3.1.3 Καύση με οξυγόνο.....	16
3.1.4 Οι Διεργασίες μετά την καύση.....	17
3.2 Τεχνολογίες απομάκρυνσης.....	17
3.2.1 Απορρόφηση.....	18
3.2.1.1 Φυσική απορρόφηση.....	19
3.2.1.2 Χημική απορρόφηση.....	19
3.2.1.3 Πύργοι Απορρόφησης.....	20
3.2.2 Προσρόφηση.....	22
3.2.3 Κρυογονική απόσταξη.....	23
3.2.4 Μεμβράνες.....	24
3.2.4.1 Μεμβράνες υποβοηθούμενες από απορρόφηση.....	24
4 Αποθήκευση/Χρησιμοποίηση CO ₂	25
5 Εγκαταστάσεις Απομάκρυνσης.....	25
6 Ανάπτυξη μοντέλου.....	31
6.1 1 ^ο Βήμα.....	33
6.2 2 ^ο Βήμα.....	33
6.3 3 ^ο Βήμα.....	35
6.3.1 Υπολογισμός συντελεστή Henry.....	35
6.3.2 Υπολογισμός συντελεστών διάχυσης υγρής και αέριας φάσης.....	36
6.3.2.1 Υπολογισμός συντελεστή διάχυσης αέριας φάσης.....	40
6.3.2.2 Υπολογισμός συντελεστή διάχυσης CO ₂ στην υγρή φάση.....	41
6.3.2.3 Υπολογισμός συντελεστή διάχυσης MEA στην υγρή φάση.....	41
6.4 4 ^ο Βήμα.....	42
6.5 5 ^ο Βήμα.....	44

6.6	6° Βήμα	47
B.	Υπολογιστικό Μέρος	48
1	Σενάριο	48
2	Υπολογισμοί εισόδου και εξόδου υγρού και αερίου	49
2.1	Εύρεση παροχής και σύστασης υγρού	52
2.2	Θερμοκρασία υγρού στην έξοδο	54
3	Υπολογισμός Διαμέτρου στήλης	55
4	Σχεδιασμός στήλης απορρόφησης	56
4.1	Χαρακτηριστικά Πληρωτικού υλικού	57
4.2	Υπολογισμός συντελεστή Henry	58
4.3	Υπολογισμός συντελεστή διάχυσης στην αέρια φάση	61
4.4	Υπολογισμός συντελεστή διάχυσης CO ₂ στην υγρή φάση	61
4.5	Συντελεστής διάχυσης ΜΕΑ στο υδατικό διάλυμα	63
4.6	Υπολογισμός συντελεστή μεταφοράς μάζας στην υγρή φάση	63
4.7	Υπολογισμός συντελεστή μεταφοράς μάζας στην αέρια φάση	63
4.8	Επίλυση εξίσωση ταχύτητας	64
5	Αποτελέσματα επίλυσης	66
5.1	Εύρεση όγκου στήλης	67
6	Ευαισθησία αποτελεσμάτων	71
6.1	Σενάριο 1ο	71
6.2	Σενάριο 2°	72
6.3	Σενάριο 3°	73
6.4	Σενάριο 4°	75
6.5	Σενάριο 5°	77
6.6	Σενάριο 6°	78
6.7	Συνδυαστικό σενάριο	80
7	Συζήτηση αποτελεσμάτων	81
	Συμπεράσματα	85
	Βιβλιογραφία	86
	Παράρτημα	90
A.	Συντελεστές μεταφοράς μάζας	90
B.	Πληρωτικά υλικά	91
Γ.	Χρήση Solver	93
Δ.	Κανόνες τραπέζιου	94
E.	Πίνακες αποτελεσμάτων σεναρίων	95

Κατάλογος Εικόνων.

Εικόνα 1. Παραγωγή διοξειδίου του άνθρακα ανά τον κόσμο έτους 2016 ^[4]	12
Εικόνα 2. Σχηματική αναπαράσταση αποθήκευσης CO ₂ ^[3]	13
Εικόνα 3. Σχηματική αναπαράσταση απομάκρυνσης διοξειδίου του άνθρακα ^[3]	14
Εικόνα 4. Οι διαδικασίες πριν την καύση ^[3]	15
Εικόνα 5. Η διεργασία για την απομάκρυνση του διοξειδίου πριν την καύση ^[24]	16
Εικόνα 6. Η καύση με οξυγόνο ^[3]	17
Εικόνα 7. Οι διαδικασίες μετά την καύση ^[3]	17
Εικόνα 8. Τυπική χημική απορρόφηση ^[8]	20
Εικόνα 9. Η αρχή της προσρόφησης ^[8]	22
Εικόνα 10. Αρχή λειτουργίας υβριδικής μεθόδου ^[8]	24
Εικόνα 11. Αποθήκευση διοξειδίου του άνθρακα ^[3]	25
Εικόνα 12. Σχηματική απλοποιημένη αναπαράσταση της διεργασίας ^[7]	31

Κατάλογος Πινάκων.

Πίνακας 1. Κοινοί διαλύτες στην παραγωγή φυσικού αερίου και στις πριν την καύση διαδικασίες ^[3]	26
Πίνακας 2. Βιομηχανίες Μεγάλης Κλίμακας σε λειτουργία ^[27]	28
Πίνακας 3. Συνοπτικός πίνακας τεχνολογιών υπό ανάπτυξη	30
Πίνακας 4. Υπολογισμός συντελεστή διάχυσης αέριας φάσης.	36
Πίνακας 5. Υπολογισμός συντελεστή διάχυσης υγρής φάσης.	38
Πίνακας 6. Μοριακό βάρος και όγκοι κατανομής του αερίου ^[20]	40
Πίνακας 7. Παρουσίαση ενδεικτικών βιβλιογραφικών αναφορών για τον υπολογισμό των συντελεστών μεταφοράς μάζας.	42
Πίνακας 8. Σύστημα αντιδράσεων στο σύστημα ^{[5],[11]}	44
Πίνακας 9. Κινητική αντίδρασης.	44
Πίνακας 10. Σύσταση βιομηχανικού αερίου.	48
Πίνακας 11. Δεδομένα Σεναρίου.	49
Πίνακας 12. Υπολογισμός μέσου μοριακού βάρους αερίου.	50
Πίνακας 13. Παροχή αερίων στην αέρια φάση.	51
Πίνακας 14. Σύσταση αερίου εξόδου από την στήλη απορρόφησης.	52
Πίνακας 15. Χαρακτηριστικά πληρωτικού υλικού ^[17]	57
Πίνακας 16. Συνοπτική παρουσίαση αποτελεσμάτων.	69
Πίνακας 17. Συνοπτικός Πίνακας αποτελεσμάτων βασικού σεναρίου.	70
Πίνακας 18. Φυσική Ρόφηση για την απορρόφηση CO ₂	71
Πίνακας 19. Αποτελέσματα στήλης σε ισοθερμοκρασιακή λειτουργία.	73
Πίνακας 20. Στοιχεία 3ου εναλλακτικού σεναρίου.	74

Πίνακας 21. Διαφοροποίηση αποτελεσμάτων για το 3ο σενάριο.	74
Πίνακας 22. Στοιχεία 4ου εναλλακτικού σεναρίου.	75
Πίνακας 23. Διαφοροποίηση αποτελεσμάτων στο 4ο σενάριο.	76
Πίνακας 24. Στοιχεία 5ου εναλλακτικού σεναρίου.	77
Πίνακας 25. Αποτελέσματα 5ου σεναρίου.	77
Πίνακας 26. Στοιχεία 6ου σεναρίου.	78
Πίνακας 27. Αποτελέσματα 6ου σεναρίου.	79
Πίνακας 28. Μελέτη ενός συνδυαστικού σεναρίου.	80
Πίνακας 29. Αποτελέσματα συνδυαστικού σεναρίου.	80
Πίνακας 30. Διαφορές στους συντελεστές μεταφοράς μάζας.	90
Πίνακας 31. Διαφορές στα αποτελέσματα του μοντέλου.	90
Πίνακας 32. Χαρακτηριστικά Πληρωτικών υλικών.	92
Πίνακας 33. Παρουσίαση διαφορών στα αποτελέσματα με την επιλογή διαφορετικού πληρωτικού υλικού.	92
Πίνακας 34. Σενάριο 1ο: Φυσική Ρόφηση.	95
Πίνακας 35. Σενάριο 2ο: Ισοθερμοκρασιακή Στήλη.	96
Πίνακας 36. Σενάριο 3ο: Αλλαγή της συγκέντρωσης CO ₂ στην MEA, 1η περίπτωση.	97
Πίνακας 37. Σενάριο 3ο: Αλλαγή της συγκέντρωσης CO ₂ στην MEA, 2η περίπτωση.	98
Πίνακας 38. Σενάριο 3ο: Αλλαγή της συγκέντρωσης CO ₂ στην MEA, 3η περίπτωση.	99
Πίνακας 39. Σενάριο 4ο: Αλλαγή απαίτησης του ποσοστού απομάκρυνσης CO ₂ , 1η περίπτωση.	100
Πίνακας 40. Σενάριο 4ο: Αλλαγή απαίτησης του ποσοστού απομάκρυνσης CO ₂ , 2η περίπτωση.	101
Πίνακας 41. Σενάριο 5ο: Αλλαγή στην συγκέντρωση της MEA στο υδατικό διάλυμα, 1η περίπτωση.	102
Πίνακας 42. Σενάριο 5ο: Αλλαγή στην συγκέντρωση της MEA στο υδατικό διάλυμα, 2η περίπτωση.	103
Πίνακας 43. Σενάριο 5ο: Αλλαγή στην συγκέντρωση της MEA στο υδατικό διάλυμα, 3η περίπτωση.	104
Πίνακας 44. Σενάριο 6ο: Παραλαβή διαφορετικής συγκέντρωσης CO ₂ στο αέριο εισόδου, 1η περίπτωση.	105
Πίνακας 45. Σενάριο 6ο: Παραλαβή διαφορετικής συγκέντρωσης CO ₂ στο αέριο εισόδου, 2η περίπτωση.	106
Πίνακας 46. Συνδυαστικό Σενάριο.	107

Κατάλογος Διαγραμμάτων.

Διάγραμμα 1. Υπολογισμός ταχύτητας πλημμύρισης με την βοήθεια της πτώσης πίεσης ^[18]	34
Διάγραμμα 2. Υπολογισμός παράγοντα αύξησης της απορρόφησης μέσω διαγράμματος ^[16]	46
Διάγραμμα 3. Κατανομή του ρυθμού της αντίδρασης κατά ύψος της στήλης.	66
Διάγραμμα 4. Κατανομή του παράγοντα αύξησης της απορρόφησης κατά το ύψος της στήλης.	66

Διάγραμμα 5. Κατανομή θερμοκρασίας κατά το ύψος της στήλης.....	67
Διάγραμμα 6. Ποσοστό των αντιστάσεων κατά το ύψος της στήλης.	67
Διάγραμμα 7. Γραφική αναπαράσταση εξίσωσης λειτουργίας.	68
Διάγραμμα 8. Ταχύτητα αντίδρασης χημικής έναντι φυσικής ρόφησης.....	72
Διάγραμμα 9. Ισοθερμοκρασιακό σενάριο έναντι αδιαβατικού αντιδραστήρα.....	73
Διάγραμμα 10. Προφίλ ταχύτητας για τις περιπτώσεις του 3ου σεναρίου.....	75
Διάγραμμα 11. Προφίλ ταχύτητας για τις περιπτώσεις του 4ου σεναρίου.....	76
Διάγραμμα 12. Προφίλ ταχύτητας για το 5ο σενάριο.	78
Διάγραμμα 13. Προφίλ ταχύτητας κατά το 6ο σενάριο.....	79
Διάγραμμα 14. Κατανομή ταχύτητας αντίδρασης κατά το συνδυαστικό σενάριο.....	81
Διάγραμμα 15. Απόκλιση μερικής πίεσης.	82

Περίληψη.

Το Διοξείδιο του Άνθρακα αποτελεί αέριο του φαινομένου του θερμοκηπίου οδηγώντας στην υπερθέρμανση του πλανήτη. Το αέριο αυτό αποτελεί κύριο προϊόν στις δραστηριότητες παραγωγής ενέργειας, αυξάνοντας την συγκέντρωσή του στην ατμόσφαιρα. Η μείωση της συγκέντρωσης του Διοξειδίου του Άνθρακα αποτελεί απαραίτητη προϋπόθεση για την προστασία του περιβάλλοντος. Για τον λόγο αυτό, έχουν αναπτυχθεί τέσσερα βασικά συστήματα απομάκρυνσής του, ανάλογα με το στάδιο στο οποίο λαμβάνει χώρα η απομάκρυνση: αιχμαλώτιση από ρεύματα βιομηχανικής διαδικασίας, διεργασίες μετά την καύση, διεργασίες πριν την καύση, καύση με οξυγόνο. Στα συστήματα αυτά εφαρμόζονται οι τεχνολογίες που οδηγούν στην απομάκρυνση και στην αποθήκευση του Διοξειδίου. Οι τεχνολογίες αυτές αποτελούνται κυρίως από διεργασίες απορρόφησης και προσρόφησης, απομάκρυνση μέσω μεμβρανών και κρυογονική απόσταξη. Σήμερα, λειτουργούν δεκαεπτά βιομηχανίες μεγάλης κλίμακας απομάκρυνσης διοξειδίου που χρησιμοποιούν κατά πλειοψηφία την αιχμαλώτιση από ρεύματα βιομηχανικής διαδικασίας, ενώ υπάρχουν πάνω από 80 πιλοτικές μονάδες που εξετάζουν νέους διαλύτες και αναπτύσσουν τεχνολογίες όπως ο 'βρόχος του ασβεστίου'.

Στην παρούσα εργασία, αναπτύχθηκε μια προσομοίωση απορρόφησης Διοξειδίου του Άνθρακα από υδατικό διάλυμα Μονοαιθανολαμίνης στο υπολογιστικό περιβάλλον του Microsoft Excel. Η προσομοίωση επιλύει την διεργασία της απορρόφησης και διαστασιολογεί την στήλη απορρόφησης που απαιτείται με την χρήση του ρυθμού της αντίδρασης. Αναπτύσσεται ένα βασικό σενάριο όπου παραλαμβάνεται αέριο ροής 2640 kmol/h και σύστασης 13,3% διοξειδίου του άνθρακα σε πίεση μίας ατμόσφαιρας και σε θερμοκρασία 20 βαθμών Κελσίου, με απαίτηση απομάκρυνσης του διοξειδίου κατά 90%. Στην συνέχεια εξετάζονται διαφορετικά σενάρια, όπου μεταβάλλονται: οι συγκεντρώσεις εισόδου (του διοξειδίου του άνθρακα στην ΜΕΑ, της ΜΕΑ στο υδατικό διάλυμα, του διοξειδίου του άνθρακα στο αέριο), η απαίτηση του ποσοστού απομάκρυνσης του διοξειδίου, η απορρόφηση από χημική σε φυσική και συγκρίνονται τα αποτελέσματά τους. Κατά τα σενάρια αυτά μεγαλύτερη διαφορά στο ύψος της στήλης παρατηρήθηκε στο σενάριο της

φυσικής ρόφησης και στο σενάριο της αλλαγής απαίτησης του ποσοστού απομάκρυνσης CO₂. Τέλος, αξιολογείται η προσομοίωση με βάση τα αποτελέσματα και την συμφωνία αυτών με την βιβλιογραφία και διαπιστώνεται ότι: τα αποτελέσματα της προσομοίωσης κρίνονται ικανοποιητικά, η απορρόφηση περιορίζεται από τις υψηλές ροές του υγρού και του αερίου ρεύματος, την κύρια αντίσταση της διεργασίας αποτελεί η αντίσταση στο υγρό φιλμ.

Abstract.

Carbon Dioxide is a gas of the greenhouse effect leading to global warming. Carbon Dioxide is a major product in energy production activities, increasing its concentration in the atmosphere. The reduction of carbon dioxide concentration is a prerequisite for the protection of the environment. For this reason, four key systems have been developed, depending on the stage at which the removal takes place: capture by industrial process streams, post-combustion processes, pre-combustion processes and oxy-fuel combustion. Several technologies are applied that lead to the removal and storage of Dioxide. These technologies mainly consist of absorption and adsorption processes, membrane removal and cryogenic distillation. Nowadays, seventeen large-scale carbon dioxide removal industries operate using mostly the capture by industrial process streams, while over 80 pilot plants examine new solvents and develop new technologies such as 'calcium looping'.

In the present study, a carbon dioxide absorption simulation was developed using a monoethanolamine aqueous solution in the environment of Microsoft Excel. The simulation resolves the absorption process and design the absorption column required by the use of the rate of reaction. A baseline scenario is being developed whereby a flow of 2640 kmol/h of gas with a 13,3% content in carbon dioxide is obtained at atmospheric pressure and at a temperature of 20 degrees Celsius, with a requirement for removal 90% of the carbon dioxide. Furthermore, different scenarios are considered varying at: the input concentrations (of carbon dioxide in MEA, of MEA in the aqueous solution, of carbon dioxide in the gas), CO₂ removal requirement, use of physical instead of chemical absorption, while comparing their results. In these scenarios, a greater difference in column height was observed in the scenario of natural absorption and in the change of requirement of CO₂ removal rate. Finally, the simulation is evaluated based on the results and their agreement with the literature and it is found that: the results of the simulation are considered satisfactory, the absorption is limited by the high flows of the liquid and the gas streams, the main resistance of the process is the resistance of the liquid film.

A. Θεωρητικό Μέρος.

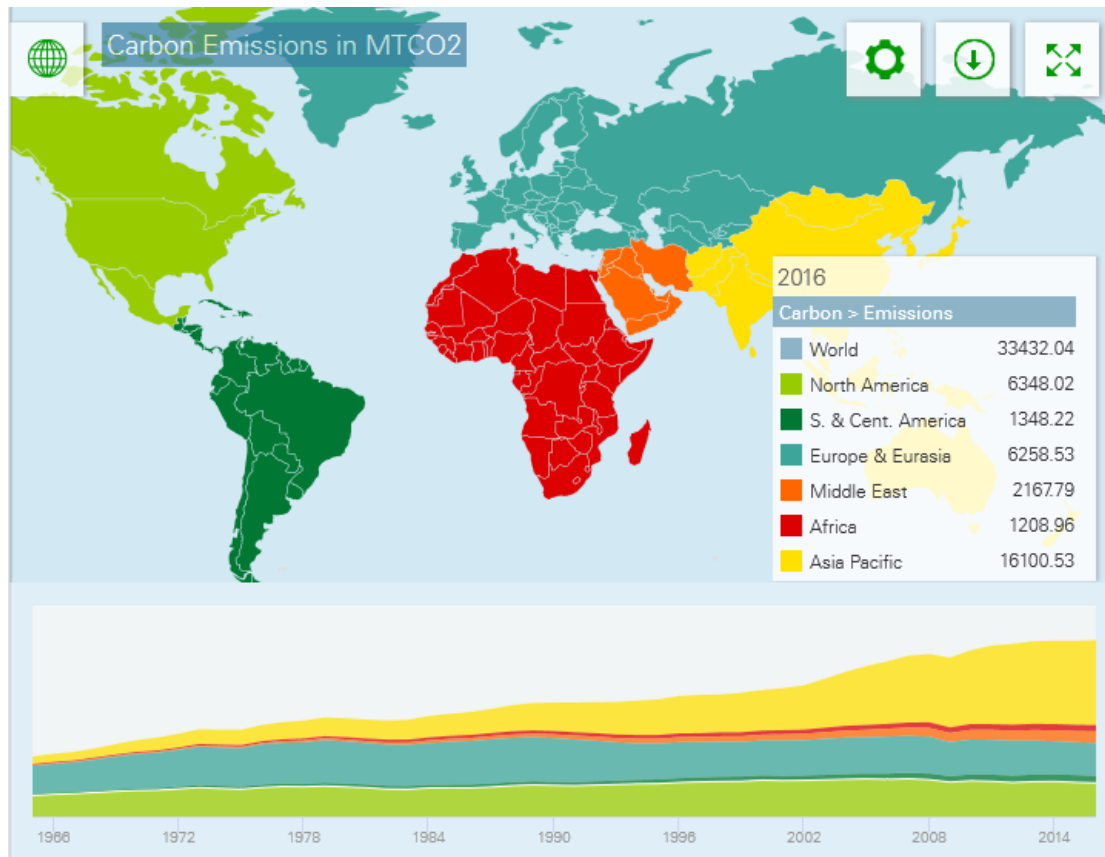
1 Εισαγωγή.

Το διοξείδιο του άνθρακα αποτελεί ένα άχρωμο και άοσμο αέριο της ατμόσφαιρας. Υπάρχει σε ίχνη σε μία συγκέντρωση της τάξεως του 0,04 %. Αποτελεί αέριο ζωτικής σημασίας καθώς χρησιμοποιείται για την φωτοσύνθεση από τα φυτά και τις άλγες παράγοντας οξυγόνο. Επιπλέον, το διοξείδιο του άνθρακα έχει και βιομηχανική χρήση. Με εφαρμογές από την βιομηχανία των φαγητών και των αναψυκτικών έως την χρήση του για ανάκτηση πετρελαίου, ως διαλύτη ή ως ψυκτικό ^{[1],[2]}.

Παρόλα αυτά, το διοξείδιο του άνθρακα θεωρείται ως αέριο του θερμοκηπίου, και καθώς οι ανθρωπογενείς δραστηριότητες αυξάνουν την συγκέντρωσή του στην ατμόσφαιρα, οδηγεί στην υπερθέρμανση του πλανήτη.

Αποτελεί το κύριο προϊόν των δραστηριοτήτων παραγωγής ενέργειας. Ενδεικτικά, τα ορυκτά καύσιμα (από τα οποία λαμβάνεται περί το 86% της ενέργειας στον κόσμο) αποτελούν την κύρια πηγή παραγωγής διοξειδίου του άνθρακα (76%) από ανθρωπογενείς δραστηριότητες, ακολουθώντας από απόσταση ο τομέας των μεταφορών και της μεταποίησης και κατασκευών, σύμφωνα με στοιχεία του 2001 ^[3].

Μόνο για το 2016 (Εικ.1), παράχθηκαν από την κατανάλωση ενέργειας 33432.04 εκατομμύρια τόνοι CO₂ ^[4].



Εικόνα 1. Παραγωγή διοξειδίου του άνθρακα ανά τον κόσμο έτους 2016 ^[4].

2 Μείωση του CO₂.

Για την μείωση του διοξειδίου του άνθρακα έχουν αναπτυχθεί διάφορες λύσεις και συνδυασμός αυτών.

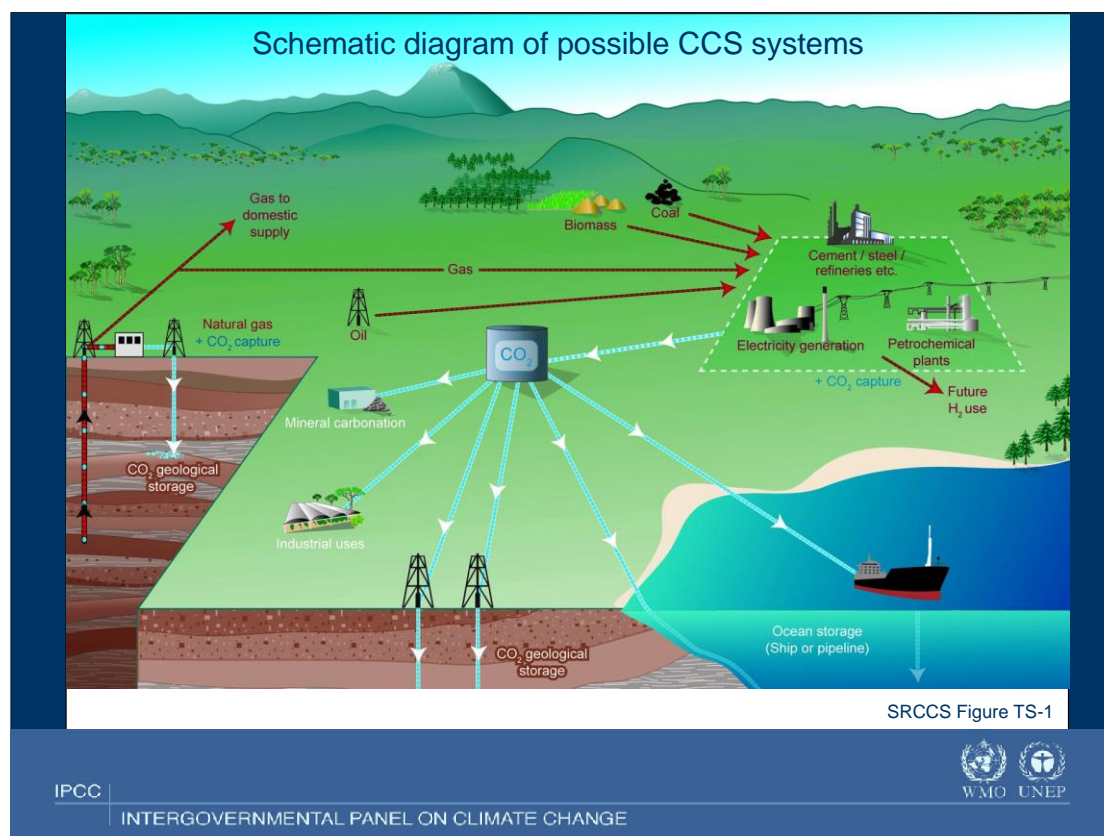
Κάποιες από αυτές μπορεί να είναι:

- Μείωση στην κατανάλωση ενέργειας και συνεπώς στην παραγωγή της.
- Βελτίωση στην αποδοτικότητα της παραγωγής και διανομής ενέργειας.
- Στροφή σε εναλλακτικά καύσιμα και πηγές ενέργειας (φυσικό αέριο, πυρηνική ενέργεια).
- Ελάττωση της ανάγκης για μεταφορές.

Τα παραπάνω αφορούν τις ανθρώπινες δραστηριότητες και την αλλαγή συμπεριφοράς για την μείωση της παραγωγής του διοξειδίου.

Από την στιγμή όμως που οι ανθρώπινες δραστηριότητες υφίστανται και οι βιομηχανίες παράγουν υψηλές ποσότητες διοξειδίου του άνθρακα, η μείωσή του έγκειται στην ανάπτυξη τεχνολογιών που θα αποτρέψουν την απελευθέρωσή του στην ατμόσφαιρα. Το σύνολο των τεχνολογιών αυτών

ονομάζεται Δέσμευση και Αποθήκευση του Διοξειδίου του Άνθρακα (Carbon Capture and Storage, CCS) (Εικ.2) και ανήκει στην Αιχμαλώτιση του Διοξειδίου του Άνθρακα (Carbon Sequestration). Η Αιχμαλώτιση του Διοξειδίου περιλαμβάνει τόσο την δέσμευσή του από τις ανθρώπινες δραστηριότητες όσο και την αιχμαλώτισή του από την ατμόσφαιρα [5],[27].



Εικόνα 2. Σχηματική αναπαράσταση αποθήκευσης CO₂ [3].

Στην παρούσα εργασία επιλέχθηκε να αναπτυχθεί μια προσομοίωση απομάκρυνσης του διοξειδίου του άνθρακα. Προσομοιώνεται η απορρόφηση του CO₂ από υγρό διαλύτη. Πιο συγκεκριμένα η χημική του απορρόφηση από υδατικό διάλυμα Μονοαιθανολαμίνης (ΜΕΑ). Η συγκεκριμένη τεχνική είναι από τις πλέον διαδεδομένες.

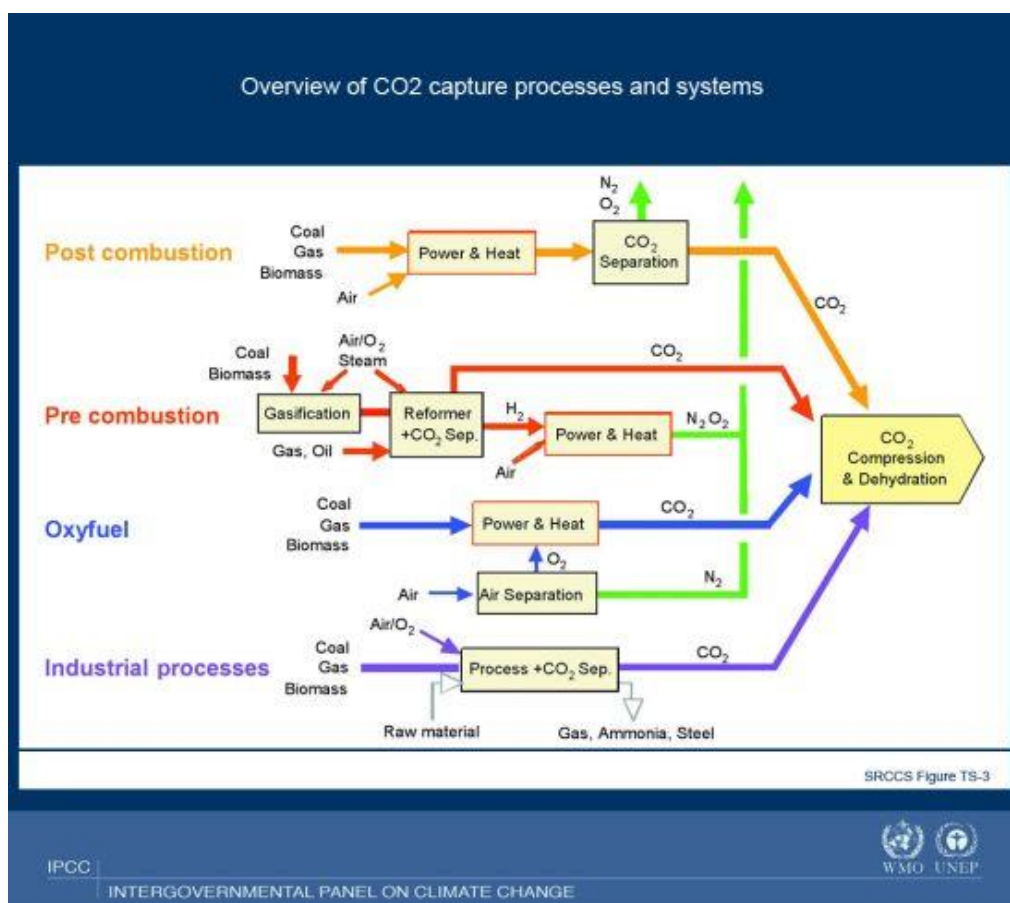
3 Μέθοδοι απομάκρυνσης CO₂.

3.1 Βασικά συστήματα απομάκρυνσης.

Υπάρχουν 4 βασικά συστήματα για την απομάκρυνση του διοξειδίου του άνθρακα (Εικ.3) από τα αέρια που παράγονται από ανθρωπογενείς δραστηριότητες.

1. Αιχμαλώπιση από ρεύματα βιομηχανικής διαδικασίας. (capture from industrial process streams)
2. Οι διεργασίες μετά την καύση (post-combustion processes).
3. Οι διεργασίες πριν την καύση (pre-combustion processes).
4. Η καύση με οξυγόνο.(oxyfuel combustion).

Το σύστημα που θα προτιμηθεί εξαρτάται από την συγκέντρωση του διοξειδίου του άνθρακα, την πίεση του αερίου και το είδος του καυσίμου που χρησιμοποιείται^{[3],[5]}.



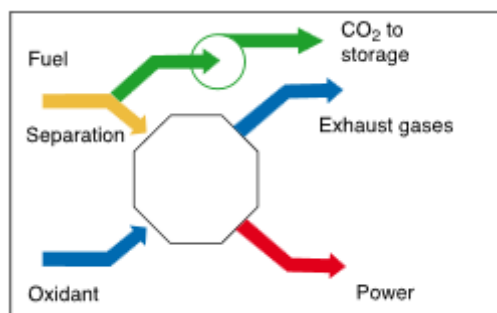
Εικόνα 3. Σχηματική αναπαράσταση απομάκρυνσης διοξειδίου του άνθρακα ^[3].

3.1.1 Αιχμαλώτιση από ρεύματα της βιομηχανικής διαδικασίας.

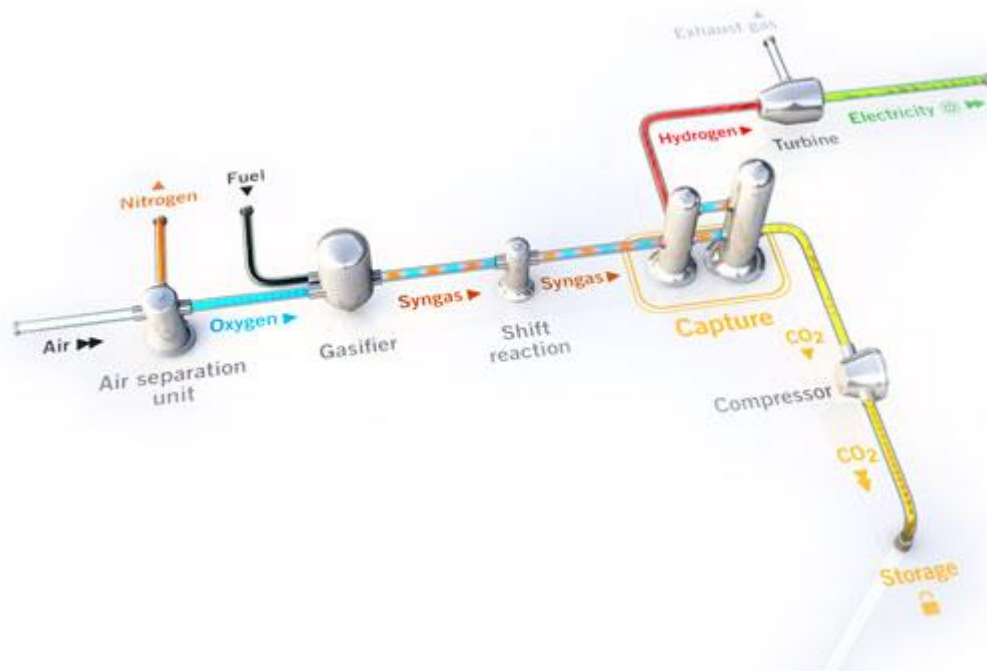
Κατά την παραγωγική διαδικασία μιας βιομηχανικής μονάδας είναι δυνατόν να δημιουργηθούν ρεύματα τα οποία περιέχουν διοξείδιο του άνθρακα. Κάποιες από τις βιομηχανικές δραστηριότητες αυτές είναι η παραγωγή και ο καθαρισμός του φυσικού αερίου, η παραγωγή αμμωνίας, υγρών καυσίμων, λιπασμάτων, τσιμέντου, φαγητών και ποτών κτλ. Για την αιχμαλώτιση του διοξειδίου χρησιμοποιούνται οι τεχνολογίες που έχουν αναπτυχθεί τόσο για τις μετά την καύση διαδικασίες όσο και για την πριν τις καύση διαδικασίες (βλ.3.2) [3].

3.1.2 Οι διεργασίες πριν την καύση.

Στις διεργασίες πριν την καύση το καύσιμο μετατρέπεται με την αντίδρασή του με αέρα ή/και οξυγόνο σε αέριο μίγμα υδρογόνου και μονοξειδίου του άνθρακα (syngas). Η διαδικασία αυτή ονομάζεται ολοκληρωμένος κύκλος αεριοποίησης (integrated gasification combined cycle IGCC). Στην συνέχεια το μονοξείδιο αντιδρά με τον ατμό σε καταλυτικό αντιδραστήρα και παράγει διοξείδιο του άνθρακα και υδρογόνο. Έπειτα είτε με φυσική είτε με χημική ρόφηση απομακρύνεται το CO₂ σε υψηλή πίεση. Το υδρογόνο μπορεί να καεί στην συνέχεια δίχως να παράγει διοξείδιο του άνθρακα (Εικ.4 & 5). Το διοξείδιο συμπιέζεται και μεταφέρεται για αποθήκευση [3],[5],[24].



Εικόνα 4. Οι διαδικασίες πριν την καύση [3].



Εικόνα 5. Η διεργασία για την απομάκρυνση του διοξειδίου πριν την καύση [24].

3.1.3 Καύση με οξυγόνο.

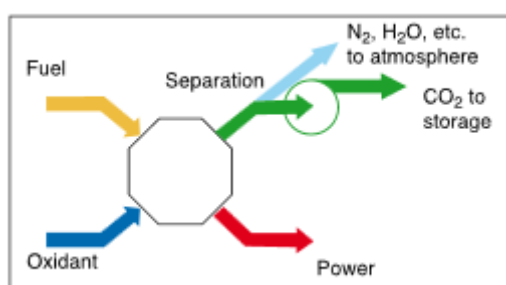
Η καύση με οξυγόνο, χρησιμοποιεί καθαρό οξυγόνο για την καύση με ανακυκλωμένο καυσαέριο, δίνοντας καυσαέριο πλούσιο σε διοξείδιο του άνθρακα (μίγμα CO_2 και H_2O) (Εικ.6). Με ψύξη του ρεύματος αυτού το νερό συμπυκνώνεται, παράγοντας σχεδόν καθαρό διοξείδιο του άνθρακα, το οποίο συμπιέζεται και μεταφέρεται στην τοποθεσία αποθήκευσης. Η τεχνολογία αυτή μπορεί να εφαρμοστεί τόσο σε νέες όσο και σε υπάρχουσες μονάδες καύσης. Με την μέθοδο αυτήν το CO_2 απομακρύνεται και αποθηκεύεται με λιγότερη επεξεργασία. Παρ όλα αυτά το κόστος διαχωρισμού του αέρα (λαμβάνοντας καθαρό οξυγόνο) μειώνει σημαντικά το οικονομικό όφελος, καθιστώντας αναγκαία την ανάπτυξη αποδοτικών συστημάτων παραγωγής οξυγόνου ώστε να εξελιχθεί η τεχνολογία αυτή. Η μέθοδος αυτή αποτελεί πριν-την καύση διεργασία η οποία χρησιμοποιεί καθαρό οξυγόνο αντί για αέρα, και αναφέρεται ως ξεχωριστό σύστημα^{[3],[5]}.



Εικόνα 6. Η καύση με οξυγόνο [3].

3.1.4 Οι Διεργασίες μετά την καύση.

Το κύριο σύστημα απομάκρυνσης είναι το δεύτερο, δηλαδή οι διεργασίες μετά την καύση. Χρησιμοποιείται σε διεργασίες καύσης ορυκτών καυσίμων, όπου λαμβάνονται τα καυσαέρια και αφαιρείται το διοξείδιο του άνθρακα. Κύρια τεχνική απομάκρυνσης αποτελεί η απορρόφηση του CO₂ από διαλύτη. Κατά την διαδικασία αυτή το διοξείδιο του άνθρακα διαχωρίζεται από ένα αέριο μίγμα αζώτου και οξυγόνου (Εικ.7), βρισκόμενο σε ατμοσφαιρική πίεση με συγκέντρωση διοξειδίου μικρότερης του 15%. Η διεργασία αυτή δέσμευσης διοξειδίου προσφέρει χαμηλό κόστος καθώς μπορεί να εφαρμοστεί στις είδη υπάρχουσες συμβατικές μονάδες καύσης άνθρακα, οι οποίες παράγουν τα 2/3 των εκπομπών CO₂[3],[5].



Εικόνα 7. Οι διαδικασίες μετά την καύση [3].

3.2 Τεχνολογίες απομάκρυνσης.

Τα βασικά συστήματα απομάκρυνσης αφορούν το σημείο στην παραγωγική διαδικασία όπου γίνεται η απομάκρυνση του Διοξειδίου του Άνθρακα,

υπάρχουν συγκεκριμένες τεχνολογίες που χρησιμοποιούνται σε αυτά για την αιχμαλώτιση του.

Οι κύριες τεχνολογίες είναι:

- Απορρόφηση.
- Προσρόφηση
- Κρυογονική Απόσταξη.
- Απομάκρυνση με μεμβράνες.

Στις τεχνολογίες απορρόφησης χρησιμοποιούνται υγροί διαλύτες όπου απομακρύνουν το επιθυμητό αέριο. Η απορρόφηση διαχωρίζεται σε φυσική και χημική, εφόσον υπάρχει χημική αντίδραση με το αέριο που απορροφάτε.

Στις τεχνολογίες προσρόφησης χρησιμοποιούνται στερεοί διαλύτες, στους οποίους το αέριο 'εγκλωβίζεται' στους πόρους του διαλύτη.

Η κρυογονική απόσταξη αποτελεί μία απόσταξη που πραγματοποιείται σε πολύ χαμηλές θερμοκρασίες. Στις θερμοκρασίες αυτές υγροποιείται το αέριο και απομακρύνεται.

Οι μεμβράνες αποτελούνται από υλικά τα οποία επιτρέπουν την διέλευση των αερίων με διαφορετικές ταχύτητες και συνεπώς τον εγκλωβισμό τους.

3.2.1 Απορρόφηση.

Κύρια τεχνική απομάκρυνσης αποτελεί ο καθαρισμός του αερίου με υγρό διαλύτη. Στην τεχνική αυτή, αέριο που περιέχει το προς απομάκρυνση διοξείδιο του άνθρακα οδηγείται σε μία διάταξη που περιλαμβάνει μια στήλη με είσοδο αερίου και χώρο κατανομής αυτού στον πυθμένα, είσοδο υγρού και έναν κατανομέα στην κορυφή, καθώς και εξόδους υγρού και αερίου σε πυθμένα και κορυφή αντίστοιχα. Το υγρό που εισέρχεται μπορεί να είναι είτε καθαρός διαλύτης είτε όχι, γεγονός που οφείλεται στην αναγέννηση του διαλύτη. Το αέριο που περιέχει το διοξείδιο του άνθρακα εισέρχεται στον χώρο κατανομής και ρέει προς τα πάνω κατ' αντιρροή. Το διοξείδιο του άνθρακα μεταφέρεται από την αέρια φάση στην υγρή και απορροφάται από τον διαλύτη. Με τον τρόπο αυτό το αέριο αποβάλλει το διοξείδιο και εξέρχεται από την κορυφή του πύργου σε υψηλές καθαρότητες. Αντίθετα, το υγρό παραλαμβάνει το CO₂ όπου

εμπλουτίζεται καθώς αποχωρεί από τον πυθμένα της στήλης. Στην συνέχεια σε στήλη απογύμνωσης γίνεται ανάκτηση του διαλύτη και του καθαρού διοξειδίου του άνθρακα με την προσθήκη θερμότητας και/ή με την μείωση της πίεσης. Η τεχνική αυτή έχει μελετηθεί και χρησιμοποιείται σε βιομηχανίες για πάνω από 80 χρόνια. Η απορρόφηση μπορεί να είναι τόσο φυσική όσο και χημική. Στην φυσική απορρόφηση το προς απομάκρυνση αέριο μεταβαίνει από την αέρια στην υγρή φάση με την βοήθεια του διαλύτη έχοντας ως κινητήρια δύναμη την διαφορά της μερικής πίεσης από την πίεση ισορροπίας της διαλυμένης ουσίας (διοξείδιο του άνθρακα) στον διαλύτη. Στην χημική απορρόφηση ο διαλύτης αντιδρά με την διαλυμένη ουσία αυξάνοντας ουσιαστικά την κινητήρια δύναμη της απορρόφησης. Η διεργασία της απορρόφησης εκτελείται ως επί το πλείστο σε αντιρροή καθώς η κινητήρια δύναμη είναι μεγαλύτερη, αντίθετα μόνο με την ύπαρξη χημικής αντίδρασης και μάλιστα μη αντιστρεπτής η κινητήρια δύναμη θα παραμείνει ίδια δίνοντας την δυνατότητα τόσο στην ροή των ρευμάτων κατ' αντιρροή όσο και κατ' ομορροή [6],[7],[10],[18].

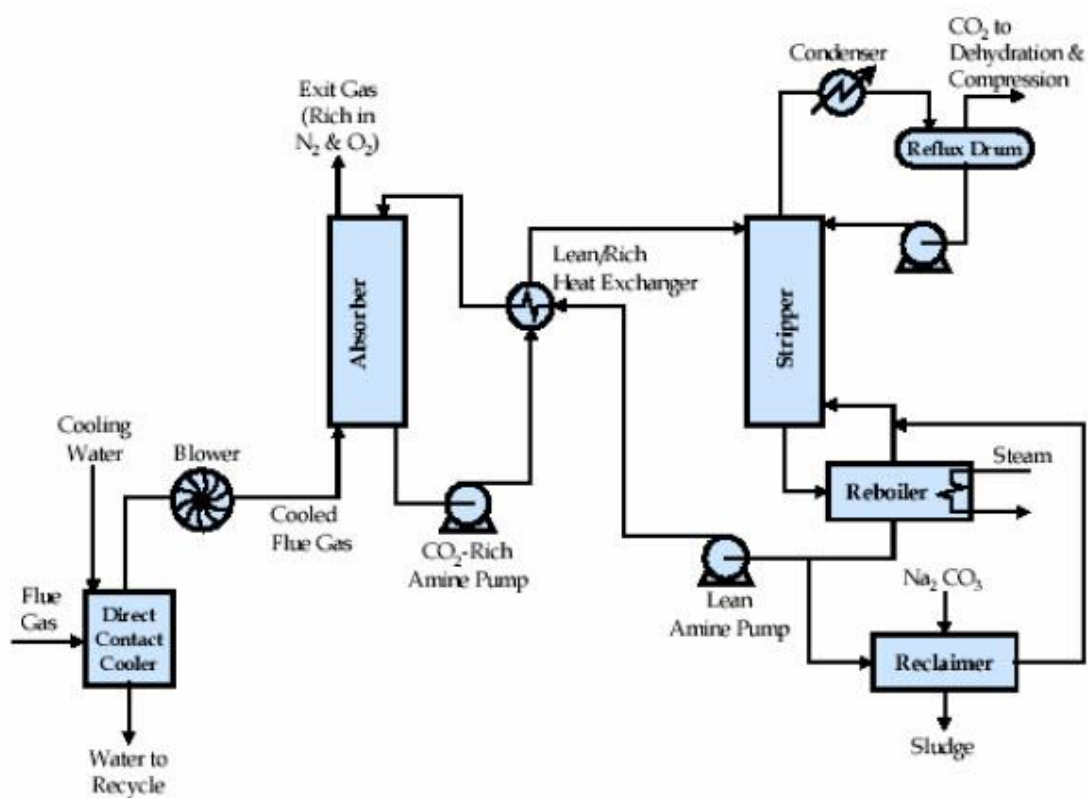
3.2.1.1 Φυσική απορρόφηση.

Η επιλογή της εξαρτάται από την συγκέντρωση του αερίου, την πίεση και την θερμοκρασία της στήλης. Η φυσική απορρόφηση εφαρμόζεται σε υψηλές συγκεντρώσεις του CO₂ (>35%). Απαραίτητη προϋπόθεση είναι η υψηλή πίεση (>20 bar) και η χαμηλή θερμοκρασία (0-5°C) όπου αυξάνει η απορροφητική ικανότητα του διαλύτη. Χρησιμοποιείται σε διαδικασίες πριν την καύση στον κύκλο IGCC. Τυπικοί φυσικοί διαλύτες είναι οι Σελεξολ (διμεθυλεθέρας)^[28] και Ρεκτισολ (κρύα μεθανόλη)^[29], Purisol (N-methyl-2-Pyrrolidone)^[30] και νερό [6],[10].

3.2.1.2 Χημική απορρόφηση.

Προτιμάται σε χαμηλές μερικές πιέσεις (πιέσεις πλησίον της ατμοσφαιρικής) και συγκεντρώσεις του διοξειδίου του άνθρακα. Βασίζεται σε μία ή περισσότερες αντιστρεπτές αντιδράσεις του διοξειδίου με το υδατικό διάλυμα. Επειδή το διοξείδιο είναι όξινο αέριο, η χημική απορρόφηση στηρίζεται στην

εξουδετέρωση βάσειως-οξέος και συνεπώς χρησιμοποιούνται βασικοί διαλύτες. Αρχικά οι διαλύτες αντιδρούν με το διοξείδιο με το οποίο σχηματίζουν ένα ενδιάμεσο σύμπλοκο, το οποίο διασπάται με την προσθήκη θερμότητας, για την ανάκτηση του διαλύτη και του διοξειδίου (Εικ.8). Οι πιο συχνοί διαλύτες για την εξουδετέρωση αυτή είναι αλκανολαμίνες και αλκαλικά άλατα. Τέτοιοι είναι MEA (μονοαιθανολαμίνη)^[5], DEA (δισαιθανολαμίνη)^[3], PZ (πιπεραζίνη)^[7], TEA (τριαιθανολαμίνη)^[32], DIPA (δισοπροπανολαμίνη)^[3], DGA (διγλυκολαμίνη)^[3] καθώς και η αμμωνία^[31]. Από τα αλκαλικά άλατα το πιο σημαντικό είναι το ανθρακικό κάλιο (K_2CO_3)^[6] και το ανθρακικό νάτριο (Na_2CO_3)^{[6],[7],[8]}.



Εικόνα 8. Τυπική χημική απορρόφηση ^[8].

3.2.1.3 Πύργοι Απορρόφησης.

Η απορρόφηση λαμβάνει χώρα εντός κυλινδρικών στηλών, ονομαζόμενες ως πύργοι απορρόφησης. Εντός των στηλών αυτών πραγματοποιείται η απορρόφηση και η δέσμευση του προς απομάκρυνση αερίου από τον υγρό

διαλύτη. Οι στήλες αυτές μπορεί να περιέχουν είτε δίσκους είτε πληρωτικό υλικό.

Στις στήλες με δίσκους, καθώς το υγρό κυλάει από το πάνω μέρος της στήλης προς τα κάτω γεμίζει τον κάθε δίσκο, υπερχειλίζοντας στον επόμενο. Οι δίσκοι αυτοί είναι διάτρητοι, δηλαδή από το κάτω μέρος τους παραλαμβάνουν το αέριο. Το αέριο και το υγρό έρχονται σε επαφή σε κάθε δίσκο όπου γίνεται η απορρόφηση. Ο κάθε δίσκος θεωρείται ως βαθμίδα ισορροπίας.

Στις στήλες με πληρωτικό υλικό, το υγρό κυλάει στην επιφάνεια του πληρωτικού υλικού αυξάνοντας την επιφάνεια επαφής του με το αέριο. Οι στήλες με πληρωτικό υλικό διακρίνονται σε στήλες με διατεταγμένο πληρωτικό υλικό και με τυχαία τοποθετημένο πληρωτικό υλικό. Το διατεταγμένο πληρωτικό υλικό τοποθετείται εντός της στήλης με συγκεκριμένη διάταξη δημιουργώντας περίπλοκα 'μονοπάτια' για το υγρό ώστε να αυξήσουν όσο το δυνατόν περισσότερο την επιφάνεια επαφής μεταξύ υγρού και αερίου. Με το τυχαίο πληρωτικό υλικό, φορτώνεται η στήλη χωρίς να λαμβάνεται υπόψιν η διάταξή του στον χώρο ^[18].

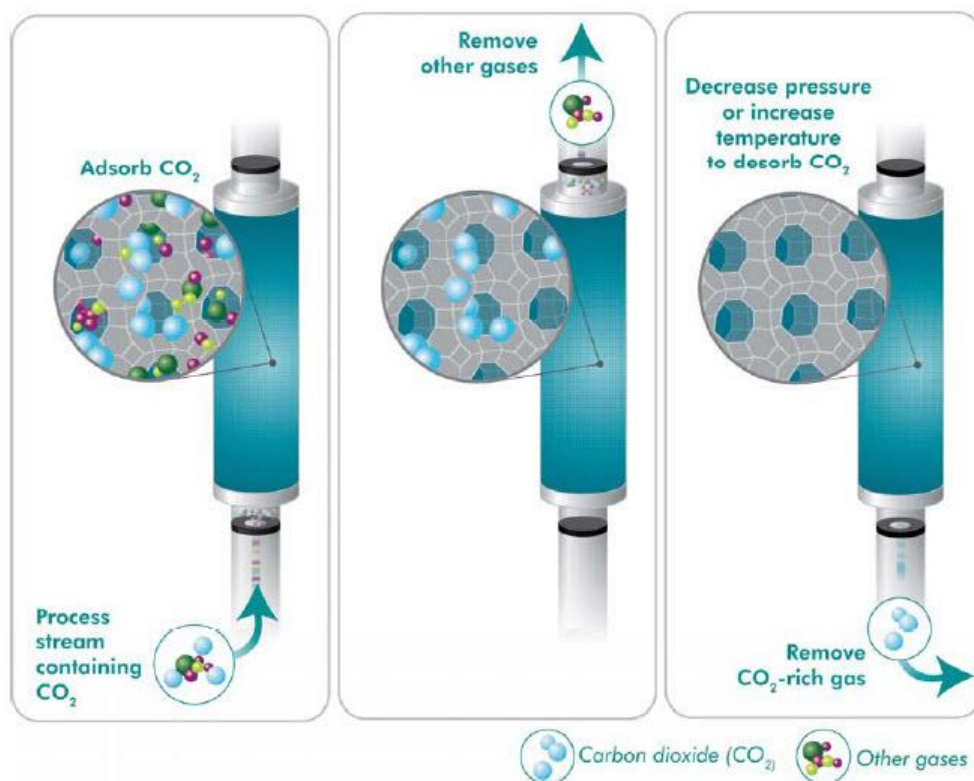
Γενικώς, στις στήλες με μεταλλικούς δίσκους υπάρχει κίνδυνος διάβρωσης εφόσον το υγρό είναι διαβρωτικό. Επίσης, οι στήλες με πληρωτικό υλικό παρέχουν μεγαλύτερη επιφάνεια επαφής μεταξύ των δύο φάσεων σε σχέση με τις στήλες με δίσκους, οδηγώντας σε αύξηση της αποδοτικότητας ^[35].

Το διατεταγμένο πληρωτικό υλικό επιλέγεται από μικρές έως πολύ υψηλές ροές υγρού (από 0,2 έως και πάνω από 250 m³/m²/h) και αερίου προσφέρει υψηλή απόδοση και μεγάλο εύρος πίεσης (από πιέσεις κενού έως και 100 bar) και διαμέτρου (από 40 χιλιοστά έως και παραπάνω από 11 μέτρα). Συνεπώς, το διατεταγμένο πληρωτικό υλικό μπορεί να χρησιμοποιηθεί ευρέως στις στήλες απορρόφησης. Το μειονέκτημα αυτού αποτελεί το υψηλό του κόστος.

Το τυχαία τοποθετημένο πληρωτικό υλικό προσφέρει μια οικονομικότερη λύση (από αυτή του διατεταγμένου πληρωτικού) προσφέροντας υψηλές αποδόσεις. Το τυχαία τοποθετημένο πληρωτικό υλικό περιορίζεται από τις υψηλές ροές του υγρού για τις οποίες απαιτούνται στήλες μεγαλύτερες από 5-6 μέτρα. Συνήθως, η πλέον ενδεδειγμένη επιλογή του γίνεται όταν η διάμετρος της στήλης βρίσκεται έως και περίπου στο ένα μέτρο^[36].

3.2.2 Προσρόφηση.

Τα προσροφητικά υλικά έχουν μεγάλο πορώδες, στα οποία η προσρόφηση λαμβάνει χώρα στα τοιχώματα των πόρων ή σε συγκεκριμένες θέσεις μέσα στο σωματίδιο. Ο διαχωρισμός πραγματοποιείται διότι οι διαφορές στο μοριακό βάρος, στο σχήμα ή στην πολικότητα προκαλούν ισχυρότερη συγκράτηση σε ορισμένα αέρια, ή ακόμα επειδή το μέγεθος των πόρων είναι τέτοιο που δεν επιτρέπουν την είσοδο μεγαλύτερων μορίων. Η διαδικασία αποτελείται από δύο κύρια βήματα: την προσρόφηση και την εκρόφηση. Αρχικά, το διοξείδιο του άνθρακα από το αέριο προσροφάται στο στερεό προσροφητικό και στην συνέχεια γίνεται ανάκτηση του προσροφητικού και του διοξειδίου (εκρόφηση) με αλλαγή πίεσης ή θερμοκρασίας (Εικ.9), τεχνικές Pressure Swing Adsorption (PSA, προσρόφηση με χρήση αλλαγής πίεσης) και Temperature Swing Adsorption (TSA, προσρόφηση με αλλαγή θερμοκρασίας) [8].



Εικόνα 9. Η αρχή της προσρόφησης [8].

Την κινητήρια δύναμη της προσρόφησης αποτελεί η εκλεκτικότητα του προσροφητικού στο αέριο που προσροφάται. Η προσρόφηση διαχωρίζεται σε χημική και φυσική. Στην φυσική προσρόφηση αναπτύσσονται ασθενείς

δυνάμεις Van der Waals ανάμεσα στο διοξείδιο και την επιφάνεια του προσροφητικού. Χρησιμοποιείται κυρίως στις διαδικασίες πριν την καύση αιχμαλώτισης διοξειδίου, όπου απαιτεί συνήθως υψηλή μερική πίεση (άνω της ατμοσφαιρικής) και χαμηλή θερμοκρασία (χαμηλότερη της θερμοκρασίας περιβάλλοντος). Τα χαρακτηριστικά ενός φυσικού προσροφητή είναι οι μεγάλες επιφάνειες (επιφανειακή τάση) ώστε να υπάρξει ικανή εκλεκτικότητα για την υψηλή καθαρότητα του αερίου από διοξείδιο. Τέτοια προσροφητικά έχουν προταθεί με βάση άνθρακα, ζεόλιθους ή μέταλλα. Στην χημική προσρόφηση υπάρχουν χημικές αλληλεπιδράσεις (ιοντικοί ή ομοιοπολικοί δεσμοί). Χρησιμοποιείται σε διαδικασίες μετά την καύση αιχμαλώτισης διοξειδίου, σε χαμηλές συγκεντρώσεις, πιέσεις και θερμοκρασίες.

Η προσρόφηση απαιτεί συγγένεια του αερίου με το προσροφητικό μέσο. Μειονέκτημα αυτού είναι, πως όσο μεγαλύτερη είναι η συγγένεια τόσο δυσκολότερη είναι η εκρόφηση και η ανάκτηση τόσο του διοξειδίου όσο και του προσροφητικού [9],[10].

3.2.3 Κρυογονική απόσταξη.

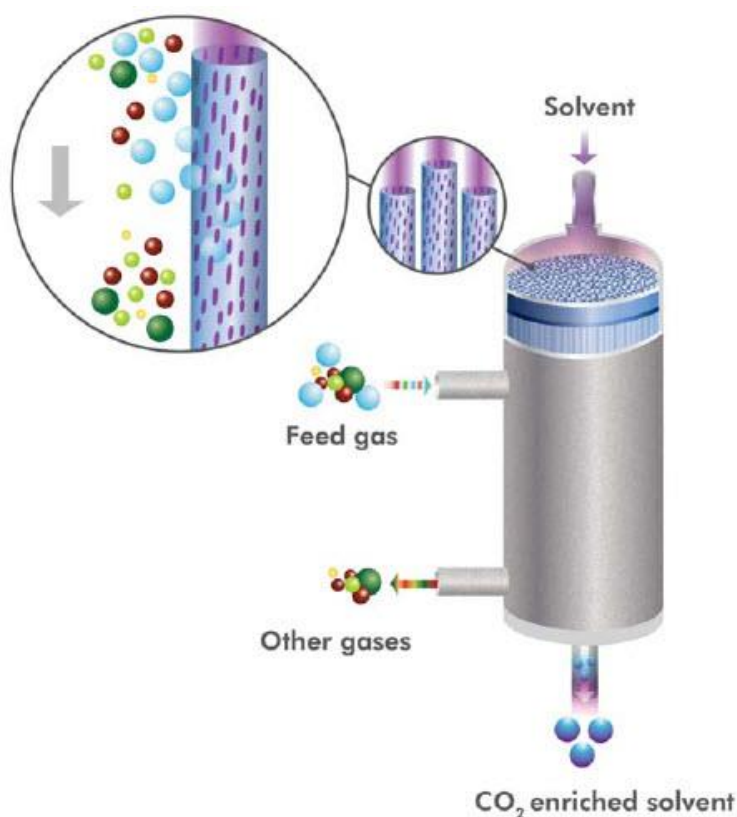
Η κρυογονική ή χαμηλής θερμοκρασίας απόσταξη, αποτελεί μία εμπορική διαδικασία που χρησιμοποιείται για την υγροποίηση και τον καθαρισμό του διοξειδίου του άνθρακα. Χρησιμοποιείται για τροφοδοσίες οι οποίες έχουν υψηλές συγκεντρώσεις διοξειδίου (>90%) και υψηλή πίεση. Το πλεονέκτημα της μεθόδου αυτής είναι η παραγωγή υγρού CO₂ το οποίο είναι εύκολο στην μεταφορά. Μειονέκτημά της αποτελεί το μεγάλο ποσό ενέργειας που απαιτεί η συμπύκνωση και η υγροποίηση του διοξειδίου. Η κρυογονική απόσταξη συναντάται σε πριν-την καύση διαδικασίες αιχμαλώτισης ή σε αιχμαλώτιση με καύση οξυγόνου όπου υπάρχει υψηλή συγκέντρωση διοξειδίου και πίεση αερίου [8],[10].

3.2.4 Μεμβράνες.

Αποτελούνται από πολυμερικά υλικά. Πρόκειται για πορώδεις ανόργανες μεμβράνες οι οποίες επιτρέπουν την διέλευση ορισμένων αερίων γρηγορότερα από άλλα ή δεν επιτρέπουν καν την διέλευση αερίων. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα τον διαχωρισμό του διοξειδίου του άνθρακα από το ρεύμα τροφοδοσίας. Η χρήση αυτών γίνεται σε υψηλές θερμοκρασίες. Οι εμπορικές μεμβράνες προέρχονται από οξική κυτταρίνη, πολυσουλφόνη και πολυιμίδιο (celluloseacetate, polysulfone, andpolyimide) ^[10].

3.2.4.1 Μεμβράνες υποβοηθούμενες από απορρόφηση.

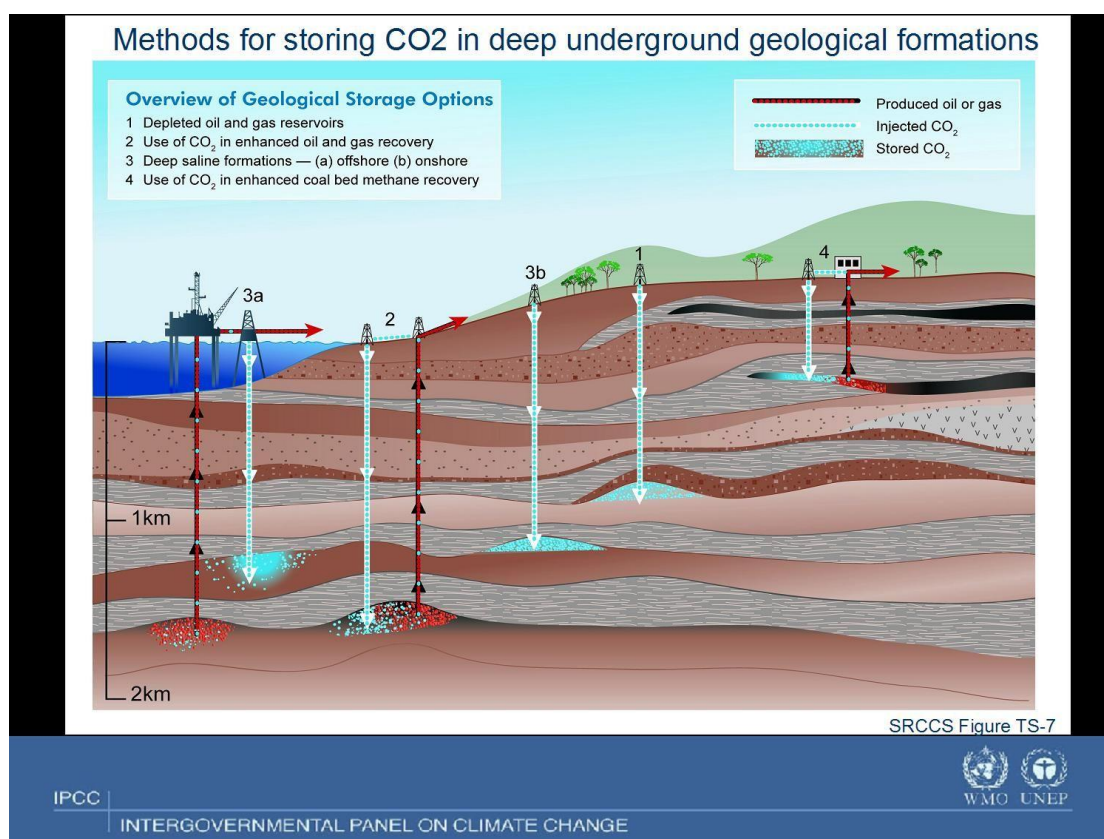
Επίσης, έχει αναπτυχθεί μια υβριδική μέθοδος όπου συνδυάζεται η χημική απορρόφηση με τις μεμβράνες (Εικ.10). Η μέθοδος αυτή βρίσκεται υπό μελέτη για την περαιτέρω ανάπτυξή της.



Εικόνα 10. Αρχή λειτουργίας υβριδικής μεθόδου ^[8].

4 Αποθήκευση/Χρησιμοποίηση CO₂.

Εκτός από την επεξεργασία του αέριου ρεύματος αναπτύχθηκαν και μέθοδοι για την αποθήκευση του παραχθέντος διοξειδίου του άνθρακα. Μία τεχνική είναι η μεταφορά διοξειδίου του άνθρακα στα βάθη ωκεανών όπου πιστεύεται ότι μπορεί να εγκλωβιστεί για εκατοντάδες χρόνια. Επίσης, προτείνεται η μεταφορά του, υπογείως σε φυσικές κοιλότητες όπου υπήρχαν κοιτάσματα πετρελαίου (Εικ.11). Τέλος, η πλέον διαδεδομένη χρήση του διοξειδίου του άνθρακα έπεται από την αιχμαλώτιση του είναι αρχικά η μεταφορά του μέσω σωληνώσεων σε κοιτάσματα πετρελαίου και στην συνέχεια η χρήση του για την βελτιωμένη ανάκτηση πετρελαίου [3].



Εικόνα 11. Αποθήκευση διοξειδίου του άνθρακα [3].

5 Εγκαταστάσεις Απομάκρυνσης.

Στην βιομηχανία σήμερα δημιουργούνται ρεύματα όπου έχουν το διοξείδιο του άνθρακα ως παραπροϊόν. Συνήθως τα ρεύματα αυτά αποτελούνται από υψηλές

συγκεντρώσεις CO₂, οδηγώντας στην άμεση συμπίεση και αποθήκευσή του. Στην παραγωγή και καθαρισμό του φυσικού αερίου οι τεχνολογίες που χρησιμοποιούνται είναι κυρίως φυσικοί και χημικοί διαλύτες και μεμβράνες (Πίνακας 1) [3].

Πίνακας 1. Κοινοί διαλύτες στην παραγωγή φυσικού αερίου και στις πριν την καύση διαδικασίες [3].

Rectisol	Φυσικός διαλύτης
Purisol	Φυσικός διαλύτης
Selexol	Φυσικός διαλύτης
MEA	Χημικός διαλύτης
DEA	Χημικός διαλύτης

Κατά την παραγωγή ενέργειας χρησιμοποιούνται κυρίως οι διεργασίες πριν την καύση, μετατρέποντας το καύσιμο σε αέριο (syngas), απομακρύνοντας το διοξείδιο του άνθρακα, και στην συνέχεια παράγοντας ηλεκτρισμό.

Στην περίπτωση καυσαερίων βιομηχανιών πραγματοποιούνται οι διαδικασίες μετά την καύση με την χρησιμοποίηση κυρίως της χημικής απορρόφησης με αμίνες, καθώς παρέχουν την καλύτερη εκλεκτικότητα και απαιτούν την χαμηλότερη ενέργεια σε σχέση με τις υπόλοιπες διαδικασίες που υπάρχουν διαθέσιμες. Βέβαια, η χρήση αμινών σε μεγάλες βιομηχανικές κλίμακες, όπως είναι αυτές της παραγωγής ενέργειας δεν είναι δυνατή εξαιτίας των απαιτήσεων τόσο σε εξοπλισμό όσο και σε παροχή ενέργειας [3].

Σήμερα, βρίσκονται σε λειτουργία 17 βιομηχανίες μεγάλης κλίμακας* (Πίνακας 2). Όπως φαίνεται και στον Πίνακα 2, μόνο δύο βιομηχανίες μεγάλης κλίμακας χρησιμοποιούν μετά την καύση απομάκρυνση.

Περαιτέρω πληροφορίες παρουσιάζονται για το **Petra Nova** το οποίο βρίσκεται στην Ηνωμένες Πολιτείες της Αμερικής και απομακρύνει 1,4 εκατομμύρια τόνος ετησίως διοξειδίου του άνθρακα. Το συγκεκριμένο πρόγραμμα αφορά την απομάκρυνση CO₂ από την καύση άνθρακα. Η απομάκρυνση αντιστοιχεί μόλις στο 33% των εκπομπών διοξειδίου του άνθρακα του εργοστασίου τον χρόνο [33].

Η τεχνολογία που χρησιμοποιείται βασίζεται σε διεργασία απορρόφησης με διαλύτη αμίνης. Η αμίνη που χρησιμοποιείται φέρει το κωδικό όνομα KS-1 και είναι ιδιοκτησία της εταιρίας. Η διεργασία αποτελείται από στήλης απορρόφησης και στήλης αναγέννησης του διαλύτη. Το διοξείδιο παραλαμβάνεται σε καθαρότητα άνω του 99%, συμπιέζεται και μεταφέρεται με την βοήθεια αγωγών για την χρήση του σε βελτιωμένη ανάκτηση πετρελαίου.
[33]

**Βιομηχανίες μεγάλης κλίμακας ορίζονται οι βιομηχανίες εκείνες που εκπέμπουν πάνω από 800.000 τόνους CO₂, αν πρόκειται για βιομηχανίες παραγωγής ενέργειας μέσω άνθρακα, 400.000 τόνους CO₂, για τις υπόλοιπες βιομηχανίες [27].*

Πίνακας 2. Βιομηχανίες Μεγάλης Κλίμακας σε λειτουργία [27].

Όνομα	Χώρα	Αιχμαλώτιση CO ₂ (Μtpra*)	Έτος Λειτουργίας	Βιομηχανία	Τύπος απομάκρυνσης	Τρόπος μετακίνησης	Χρήση CO ₂
Terrell Natural Gas Processing Plant	Αμερική	0,4-0,5	1972	Επεξεργασία Φυσικού Αερίου	Βιομηχανικός Διαχωρισμός	Αγωγός	Βελτιωμένη Ανάκτηση Πετρελαίου
Enid Fertilizer	Αμερική	0,7	1982	Παραγωγή Λιπάσματος	Βιομηχανικός Διαχωρισμός	Αγωγός	Βελτιωμένη Ανάκτηση Πετρελαίου
Shute Creek Gas Processing Plant	Αμερική	7,0	1986	Επεξεργασία Φυσικού Αερίου	Βιομηχανικός Διαχωρισμός	Αγωγός	Βελτιωμένη Ανάκτηση Πετρελαίου
Sleipner CO ₂ Storage	Νορβηγία	1	1996	Επεξεργασία Φυσικού Αερίου	Βιομηχανικός Διαχωρισμός	Δεν απαιτείται μετακίνηση	Γεωλογική Αποθήκευση -Βαθύς Παράκτιοι Σχηματισμοί
Great Plains Synfuel Plant and Weyburn-Midale	Καναδάς	3,0	2000	Συνθετικό Φυσικό Αέριο	Βιομηχανικός Διαχωρισμός	Αγωγός	Βελτιωμένη Ανάκτηση Πετρελαίου
Snohvit CO ₂ Storage	Νορβηγία	0,7	2008	Επεξεργασία Φυσικού Αερίου	Βιομηχανικός Διαχωρισμός	Αγωγός	Γεωλογική Αποθήκευση -Βαθύς Παράκτιοι Σχηματισμοί
Century Plant	Αμερική	8,4	2010	Επεξεργασία Φυσικού Αερίου	Βιομηχανικός Διαχωρισμός	Αγωγός	Βελτιωμένη Ανάκτηση Πετρελαίου
Air Products Steam Methane Reformer	Αμερική	1,0	2013	Παραγωγή Υδρογόνου	Βιομηχανικός Διαχωρισμός	Αγωγός	Βελτιωμένη Ανάκτηση Πετρελαίου
Coffeyville Gasification Plant	Αμερική	1,0	2013	Παραγωγή Λιπάσματος	Βιομηχανικός Διαχωρισμός	Αγωγός	Βελτιωμένη Ανάκτηση Πετρελαίου
Lost Cabin Gas Plant	Αμερική	0,9	2013	Επεξεργασία Φυσικού Αερίου	Βιομηχανικός Διαχωρισμός	Αγωγός	Βελτιωμένη Ανάκτηση Πετρελαίου
Petrobras Santos Basin Pre-Salt Oil Field CCS	Βραζιλία	Περίπου 1,0	2013	Επεξεργασία Φυσικού Αερίου	Βιομηχανικός Διαχωρισμός	Δεν απαιτείται μετακίνηση	Βελτιωμένη Ανάκτηση Πετρελαίου

Boundary Dam Carbon Capture and Storage	Καναδάς	1,0	2014	Παραγωγή Ηλεκτρικής Ενέργειας	Απομάκρυνση μετά την καύση	Αγωγός	Βελτιωμένη Ανάκτηση Πετρελαίου
Uthmaniyah CO2-EOR Demonstration	Σαουδική Αραβία	0,8	2015	Επεξεργασία Φυσικού Αερίου	Βιομηχανικός Διαχωρισμός	Αγωγός	Βελτιωμένη Ανάκτηση Πετρελαίου
Quest	Καναδάς	Περίπου 1.0	2015	Παραγωγή Υδρογόνου	Βιομηχανικός Διαχωρισμός	Αγωγός	Γεωλογική Αποθήκευση -Βαθύς Παράλιοι Σχηματισμοί
Abu Dhabi CCS Project	Ηνωμένα Αραβικά Εμιράτα	0,8	2016	Παραγωγή Σίδηρου και Χάλυβα	Βιομηχανικός Διαχωρισμός	Αγωγός	Βελτιωμένη Ανάκτηση Πετρελαίου
Petra Nova Carbon Capture	Αμερική	1,4	2017	Παραγωγή Ηλεκτρικής Ενέργειας	Απομάκρυνση μετά την καύση	Αγωγός	Βελτιωμένη Ανάκτηση Πετρελαίου
Illinois Industrial Carbon Capture and Storage	Αμερική	1,0	2017	Παραγωγή Αιθανόλης	Βιομηχανικός Διαχωρισμός	Αγωγός	Γεωλογική Αποθήκευση -Βαθύς Παράλιοι Σχηματισμοί

*Μtpa= Million tones per annum (εκατομμύρια τόνοι ετησίως).

Σήμερα, υπάρχουν πάνω από 80 πιλοτικές μονάδες, οι οποίες εξετάζουν σε μικρότερες βιομηχανικές κλίμακες τεχνολογίες απομάκρυνσης CO₂. Τα προγράμματα αυτά στηρίζονται στην βελτιστοποίηση των υπαρχόντων διαλυτών, στην χρήση νέων καινούργιων χημικών διαλυτών, οι οποίοι έχουν ως βάση αμίνες καθώς και την περαιτέρω ανάπτυξη μεμβρανών. Επίσης, εξετάζονται οι παράμετροι του ολοκληρωμένου κύκλου αεριοποίησης καυσίμων (IGCC), προκειμένου να αναπτυχθεί η τεχνολογία αυτή.

Ενδιαφέρον παρουσιάζει το πρόγραμμα SOLVit το οποίο ολοκληρώθηκε το 2016, έπειτα από 88 μήνες δοκιμών. Στο πρόγραμμα αυτό υπήρχαν 6 πιλοτικές μονάδες και ελέγχθηκαν περίπου στους 90 διαλύτες ^{[31],[27]}.

Τέλος, βαρύτητα δίνεται στην τεχνολογία που καλείται 'βρόγχος του ασβεστίου' (calcium looping) (Πίνακας 3). Η τεχνολογία αυτή βασίζεται στην προσρόφηση του αερίου διοξειδίου του άνθρακα από προσροφητές ασβεστίου. Σε αντίθεση με την απορρόφηση αμινών, στην μέθοδο αυτή δεν απαιτείται ψύξη του καυσαερίου καθώς η προσρόφηση λαμβάνει χώρα σε υψηλές θερμοκρασίες (580-700 °C), όπου ευνοείται η αντίδραση αερίου-στερεού δίνοντας μεγάλη αποδοτικότητα απομάκρυνσης. Το διοξείδιο απομακρύνεται από το αέριο υπό την μορφή στερεού Ανθρακικού ασβεστίου (CaCO₃) και οδηγείται σε στήλη πύρωσης όπου αποτεφρώνεται και παραλαμβάνεται το διοξείδιο του άνθρακα. Η τεχνολογία αυτή αναπτύχθηκε τα τελευταία χρόνια, με ταχεία ανάπτυξη της έπειτα από το 2009, πιστεύεται πως μπορεί να βελτιώσει την απόδοση της απομάκρυνσης κατά 7%, αποτελώντας πολλά υποσχόμενη μέθοδο για το μέλλον ^[34].

*Πίνακας 3. Συνοπτικός πίνακας τεχνολογιών υπό ανάπτυξη
Χημικοί διαλύτες αμινών*

Χημικοί διαλύτες 'πατέντες' εταιρειών

Προσρόφηση σε στερεούς διαλύτες

Μεμβράνες Απορρόφησης

Ολοκληρωμένος κύκλος αεριοποίησης

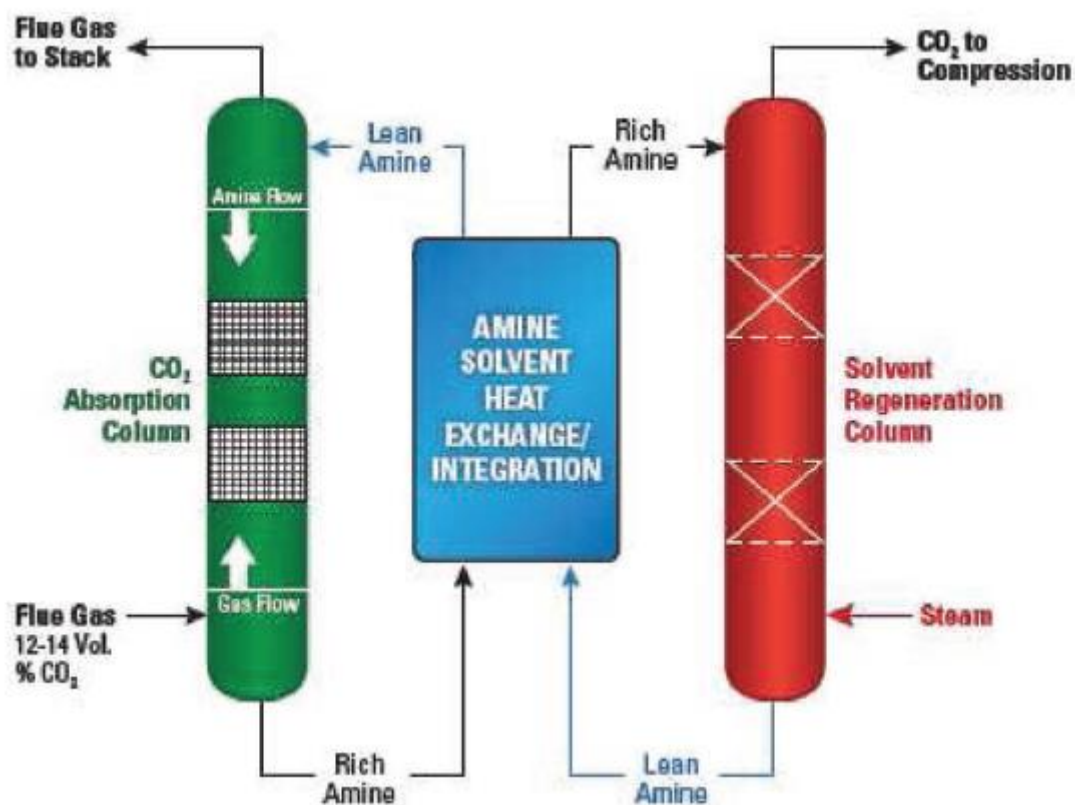
Βρόγχος Ασβεστίου

6 Ανάπτυξη μοντέλου.

Στην παρούσα εργασία αναπτύχθηκε μια προσομοίωση στο υπολογιστικό περιβάλλον του Microsoft Excel της τεχνολογίας απομάκρυνσης CO₂ με χημική απορρόφηση από διαλύτη MEA.

Η ολική διεργασία αποτελείται από δύο στάδια. Αρχικά από την απορρόφηση και την αντίδραση του διοξειδίου με την MEA δημιουργώντας ένα σύμπλοκο και στην συνέχεια την διάσπαση του συμπλόκου αυτού για την παραλαβή καθαρού διοξειδίου και διαλύτη^[7] (Εικ.12) (ανάκτηση διαλύτη, ο οποίος οδηγείται εκ νέου για απορρόφηση). Στην παρούσα εργασία αναπτύχθηκε το πρώτο στάδιο.

Στην στήλη απορρόφησης που μελετάται το υγρό με το αέριο έρχονται σε επαφή, με την βοήθεια και πληρωτικού υλικού, όπου το αέριο διοξείδιο του άνθρακα περνάει στην υγρή φάση και στην συνέχεια πραγματοποιείται η αντίδρασή του με την αμίνη. Η προσομοίωση εξετάστηκε αρχικά για μια μονάδα μικρής κλίμακας και έπειτα για εναλλακτικά σενάρια.



Εικόνα 12. Σχηματική απλοποιημένη αναπαράσταση της διεργασίας ^[7].

Το μοντέλο που αναπτύχθηκε στην παρούσα εργασία αναλύει την χημική απορρόφηση διοξειδίου του άνθρακα σε υδατικό διάλυμα ΜΕΑ σε στήλη απορρόφησης με χρήση τυχαίας διάταξης πληρωτικού υλικού. Δεδομένα:

- Επιλογή ροής, πίεσης, σύστασης και θερμοκρασίας του καυσαερίου προς επεξεργασία.
- Επιλογή αρχικής συγκέντρωσης του διοξειδίου του άνθρακα στο υδατικό διάλυμα (κατά πόσο το υδατικό διάλυμα είναι καθαρό από CO₂).
- Επιλογή συγκέντρωσης της ΜΕΑ στο διάλυμα.
- Επιλογή ποσοστού απομάκρυνσης του διοξειδίου του άνθρακα από το αέριο ρεύμα.
- Το μοντέλο παραλαμβάνει πίνακες με τις φυσικές ιδιότητες του υγρού και του αέριου ρεύματος καθώς και πίνακα με τα χαρακτηριστικά του πληρωτικού υλικού.

Παραδοχές:

Τα αέρια θεωρούνται ιδανικά, *έλεγχος της παραδοχής γίνεται παρακάτω*. Η συγκέντρωση του Διοξειδίου του Άνθρακα στο υδατικό διάλυμα ορίζεται με βάση την χημική αντίδραση.

Επίλυση:

Το μοντέλο επιλύει την διεργασία και επιστρέφει:

- Την ροή του διαλύτη, τις συνθήκες εξόδου του πύργου απορρόφησης σε υγρό και αέριο και την απομάκρυνση του διοξειδίου του άνθρακα (Βήμα 1^ο).
- Την διάμετρο του πύργου απορρόφησης (Βήμα 2^ο).
- Τους συντελεστές μεταφοράς μάζας και διάχυσης (Βήμα 3^ο & Βήμα 4^ο).
- Την κινητική της διεργασίας (Βήμα 5^ο).
- Τον όγκο του πύργου απορρόφησης (Βήμα 6^ο).

Τα επιμέρους βήματα επίλυσης παρουσιάζονται στην συνέχεια:

6.1 1^ο Βήμα.

Αρχικά το μοντέλο επιλύει το ισοζύγιο μάζας της απορρόφησης του διοξειδίου του άνθρακα, για την εύρεση της ροής του διαλύτη (ροή υγρής φάσης) ^[11]:

$$L * (X_{out} - X_{in}) = G * (y_{in} - y_{out}) \quad (1)$$

Στο ισοζύγιο αυτό:

L παροχή ΜΕΑ (kmolΜΕΑ/h).

X_{out} συγκέντρωση CO₂ υγρής φάσης, στην έξοδο (mol_{CO2}/ mol_{ΜΕΑ}).

X_{in} συγκέντρωση CO₂ υγρής φάσης, στην είσοδο (mol_{CO2}/ mol_{ΜΕΑ}).

G παροχή αερίου ρεύματος (kmol /h).

y_{in} συγκέντρωση CO₂ στην αέρια φάση, στην είσοδο (% vol).

y_{out} συγκέντρωση CO₂ στην αέρια φάση, στην έξοδο (% vol).

Σύμφωνα με το 2^ο μέλος του ισοζυγίου βρίσκεται η απομάκρυνση του διοξειδίου του άνθρακα ανά ώρα (kmol/h).

Έπειτα, με δεδομένη την απομάκρυνση βρίσκεται η σύσταση (% vol) και η ροή εξόδου του αερίου (kmol/h).

6.2 2^ο Βήμα.

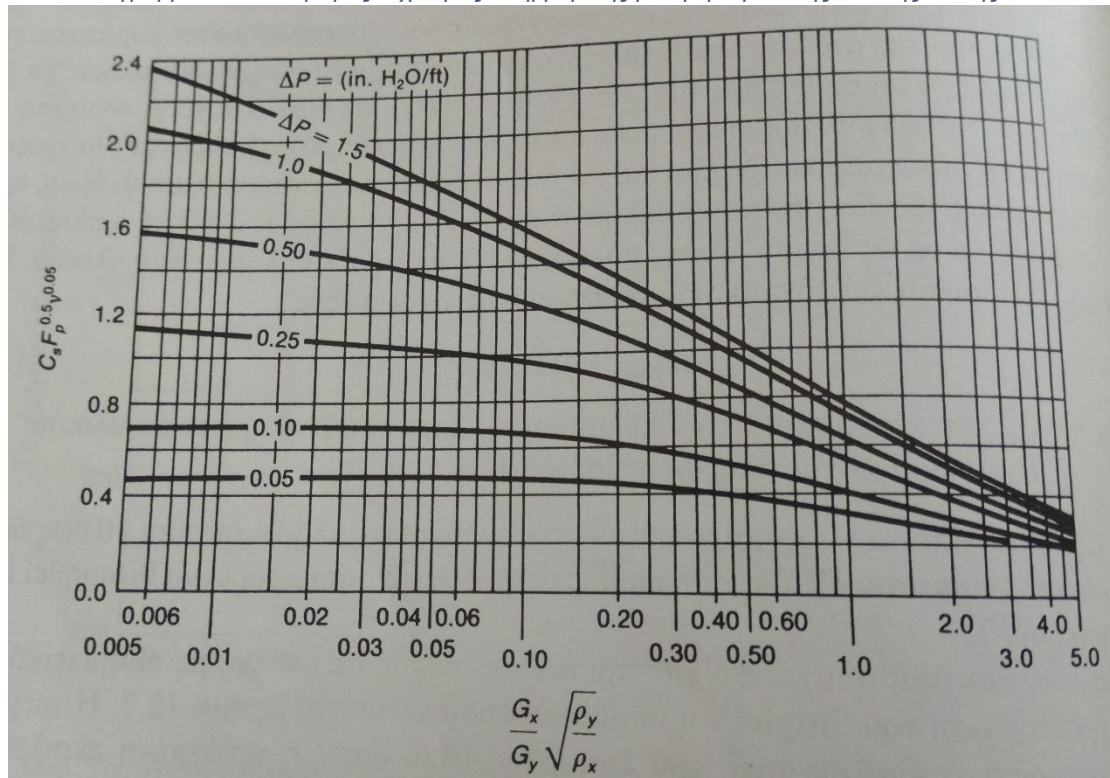
Εν συνεχεία, το μοντέλο εκτελεί το κριτήριο πλημμύρισης για την εύρεση της μέγιστης ταχύτητας του αερίου εντός της στήλης, ταχύτητας πλημμύρισης, με απώτερο σκοπό την εύρεση της διαμέτρου της στήλης ^[18].

Η ταχύτητα αυτή δηλώνει την οριακή τιμή της ταχύτητας του αερίου, έτσι ώστε να μην υπάρξει συσσώρευση του υγρού στην στήλη και κατά συνέπεια την πλημμύρισης της από αυτό.

Συνήθως επιλέγεται η ταχύτητα του αερίου να βρίσκεται ανάμεσα στο 50% έως 80% της ταχύτητας πλημμύρισης, με ανώτατο όριο το 90% της ταχύτητας ^[18].

Η ταχύτητα αυτή υπολογίζεται με την βοήθεια του Διαγράμματος 1.

Διάγραμμα 1. Υπολογισμός ταχύτητας πλημμύρισης με την βοήθεια της πτώσης πίεσης [18].



Στο Διάγραμμα 1 η τετμημένη υπολογίζεται με βάση τις ροές και τις πυκνότητες υγρού και αερίου.

$$\frac{G_L}{G_G} * \sqrt{\frac{\rho_G}{\rho_L}} \quad (2i)$$

G_L μαζική παροχή υγρού (kg/h).

G_G μαζική παροχή αερίου (kg/h).

ρ_G πυκνότητα αερίου (kg/m³).

ρ_L πυκνότητα υγρού (kg/m³).

Η πτώση πίεσης στην στήλη (ΔP) σε στήλες απορρόφησης κυμαίνεται μεταξύ 0,2-0,6 in νερού/ft (ή 163-490 Pa/m) [24].

Η τεταγμένη του Διαγράμματος 1 επιστρέφει την ταχύτητα πλημμύρισης της στήλης.

$$C_s * F_p^{0.5} * v^{0.05} \quad (2ii)$$

$$C_s = u_0 * \sqrt{\frac{\rho_G}{\rho_L - \rho_G}} \quad (2iii)$$

u_0 ταχύτητα πλημμύρισης (m/s).

F_p παράγοντας πλήρωσης (εξαρτάται από το πληρωτικό υλικό).

ν κινηματικό ιξώδες υγρού (cSt).

Ο παράγοντας πλήρωσης χαρακτηρίζει την πλήρωση της ροής εντός τις στήλης και δηλώνει κατά πόσο υπάρχει εντός της στήλης ελεύθερη ροή των δύο φάσεων.

Με την χρήση των εξισώσεων 2(i-iii) και του Διαγράμματος 1, βρίσκεται η ταχύτητα ανόδου του αερίου στην στήλη. Επιπλέον, βρίσκεται τόσο η ταχύτητα του υγρού κατά την κάθοδό του στην στήλη όσο και το εμβαδόν διατομής της στήλης και συνεπώς η διάμετρος της. Η διάμετρος αυτή αντιστοιχεί στην ελάχιστη διάμετρο της στήλης.

6.3 3^ο Βήμα.

Το μοντέλο επιλύει και βρίσκει τους συντελεστές διάχυσης τόσο στην υγρή όσο και στην αέρια φάση καθώς και τον συντελεστή Henry, για την χρήση αυτών στην εξίσωση ταχύτητας αντίδρασης του διοξειδίου του άνθρακα.

6.3.1 Υπολογισμός συντελεστή Henry.

Ο υπολογισμός του συντελεστή Henry είναι απαραίτητος ούτως ώστε να πραγματοποιηθεί η σύνδεση μεταξύ της συγκέντρωσης του διοξειδίου στην αέρια φάση (μερική πίεση στο αέριο) με την συγκέντρωση αυτού στην υγρή φάση.

Η γενική εξίσωση υπολογισμού του συντελεστή Henry είναι η παρακάτω ^[21]:

$$\ln(H) = x_1 * \ln(H_{21}) + x_3 * \ln(H_{23}) - a_{13} * x_1 * x_3 \quad (3)$$

Ο δείκτης 2 αντιπροσωπεύει το αέριο, ενώ τα 1 και 3 τα συστατικά του υδατικού διαλύματος.

Για τον υπολογισμό αυτό απαιτούνται οι συντελεστές Henry στα καθαρά συστατικά (ΜΕΑ και νερό, H_{21} και H_{23} αντίστοιχα), η σύσταση του υγρού διαλύματος (x_1, x_3) και η παράμετρος a_{13} που δηλώνει την αλληλεπίδραση των δύο συστατικών του υδατικού διαλύματος.

Η εύρεση συσχέτισης ανάμεσα στον συντελεστή Henry και την καθαρή αμίνη δεν υπάρχει βιβλιογραφικά. Για τον λόγο αυτό χρησιμοποιείται η αναλογία του υποξειδίου του αζώτου (N_2O) [21],[22]. Η τεχνική αυτή χρησιμοποιείται στην βιβλιογραφία για τον έμμεσο υπολογισμό του μεγέθους που ζητείται για το διοξείδιο του άνθρακα από το αντίστοιχο του υποξειδίου του αζώτου.

6.3.2 Υπολογισμός συντελεστών διάχυσης υγρής και αέριας φάσης.

Έχουν αναπτυχθεί διαφορετικές εξισώσεις υπολογισμού του συντελεστή διάχυσης στα αέρια, οι εξισώσεις αυτές παρουσιάζονται παρακάτω (Πίνακας 4) [37].

Πίνακας 4. Υπολογισμός συντελεστή διάχυσης αέριας φάσης.

Ιδανικά αέρια	$\frac{constant * T^{3/2} * (\frac{1}{mr_A} + \frac{1}{mr_B})^{1/2}}{p * S_{AB}}$
Διόρθωση Sutherland	$\frac{constant * T^{3/2} * (\frac{1}{mr_A} + \frac{1}{mr_B})^{1/2}}{p * S_{AB} * \frac{1}{1 + \frac{C_{AB}}{T}}}$
Bird, Hirshfelder και Curtiss	$\frac{1,883 * 10^{-20} * T^{3/2} * (\frac{1}{mr_A} + \frac{1}{mr_B})^{1/2}}{p * \sigma_{AB}^2 * \Omega}$
Fuller, Schetter και Gittings	$\frac{1,01 * 10^{-4} * T^{1,75} * (\frac{1}{mr_A} + \frac{1}{mr_B})^{1/2}}{p * [(\Sigma V_A)^{1/3} + (\Sigma V_B)^{1/3}]^2}$

$$\frac{1 - Y_A}{Y_B/D_{AB} + Y_C/D_{AC} + \dots}$$

Για τα ιδανικά αέρια ο συντελεστής διάχυσης δύο αερίων A και B δεν εξαρτάται από την συγκέντρωση της ουσίας. Σύμφωνα με την κινητική θεωρία των αερίων έχει αναπτυχθεί η σχέση ^[37]:

$$D_{AB} = \frac{\text{constant} * T^{3/2} * \left(\frac{1}{mr_A} + \frac{1}{mr_B}\right)^{1/2}}{p * S_{AB}}$$

Σύμφωνα με την παραπάνω εξίσωση ο συντελεστής διάχυσης εξαρτάται από την πίεση και την θερμοκρασία του αερίου, τα μοριακά βάρη των επιμέρους συστατικών, την μέση τιμή της διατομής των μορίων και μίας σταθεράς η οποία υπολογίζεται με βάση την υπόθεση της σφαιρικότητας των μορίων.

Σύμφωνα με τον Sutherland ^[37], η παραπάνω εξίσωση διορθώθηκε λαμβάνοντας υπόψιν τις ελκτικές δυνάμεις ανάμεσα στα μόρια.

$$D_{AB} = \frac{\text{constant} * T^{3/2} * \left(\frac{1}{mr_A} + \frac{1}{mr_B}\right)^{1/2}}{p * S_{AB}} * \frac{1}{1 + \frac{C_{AB}}{T}}$$

Όπου C_{AB} η σταθερά του Sutherland.

Για αραιά αέρια μίγματα και θεωρώντας τις συγκρούσεις των μορίων ελαστικές και δυαδικές οι Bird, Hirshfelder και Curtiss ^[37], ανέπτυξαν την παρακάτω σχέση:

$$D_{AB} = \frac{1,883 * 10^{-20} * T^{3/2} * \left(\frac{1}{mr_A} + \frac{1}{mr_B}\right)^{1/2}}{p * \sigma_{AB}^2 * \Omega}$$

Με το Ω να είναι το ολοκλήρωμα σύγκρουσης υπολογιζόμενο συναρτήσει kT/ϵ , όπου k η σταθερά του Boltzmann, και ϵ και σ , παράμετροι αλληλεπίδρασης.

Μία συσχέτιση που δημιουργήθηκε με την βοήθεια υπολογιστή και την χρήση πειραματικών σημείων αναπτύχθηκε από τους Fuller, Schetter και Gittings ^[37]:

$$D_{AB} = \frac{1,01 * 10^{-4} * T^{1,75} * \left(\frac{1}{mr_A} + \frac{1}{mr_B}\right)^{1/2}}{p * \left[(\Sigma V_A)^{1/3} + (\Sigma V_B)^{1/3}\right]^2}$$

Η παραπάνω συσχέτιση είναι ευρέως γνωστή και αφορά δυαδικά συστήματα σε χαμηλές πιέσεις, όπου ΣV_A η τιμή που προκύπτει από το άθροισμα των ατομικών όγκων διάχυσης. Ο όγκος διάχυσης αποτελεί μια παράμετρο η οποία έχει υπολογιστεί με ανάλυση παλινδρόμησης από πειραματικά δεδομένα. [37]

Για πολυσυστατικά συστήματα ο υπολογισμός γίνεται με την βοήθεια της σχέσης:

$$D_A = \frac{1 - Y_A}{Y_B/D_{AB} + Y_C/D_{AC} + \dots}$$

Με Y_i τα μοριακά κλάσματα των συστατικών και D_{Ai} οι συντελεστές διάχυσης για τα δυαδικά συστήματα [38].

Αντίστοιχα για τα υγρά, παρουσιάζονται συνοπτικά οι συσχετίσεις και οι εξισώσεις που έχουν αναπτυχθεί κατά την πάροδο του χρόνου (Πίνακας 5) [37].

Πίνακας 5. Υπολογισμός συντελεστή διάχυσης υγρής φάσης.

Stokes-Einstein	$\frac{k * T}{b * \pi * r_o * \eta_B}$
Wilke και Chung	$7,4 * 10^{-8} \frac{(\varphi * mr_B)^{1/2} * T}{v_A^{0,6} * \eta_{AB}}$
Scheibel	$8,2 * 10^{-8} * T * \left[1 + \left(\frac{3 * v_B}{v_A}\right)^{2/3}\right] * \frac{1}{\eta_B * v_A^{1/3}}$
Reddy και Doraiswamy	$K_{rs} * \frac{\mu_B^{1/2}}{(v_B * v_A)^{1/3}}$
Εξάρτηση από την συγκέντρωση	$D_0 * \frac{d \ln a}{d \ln c} * D_0 * \left(1 + \frac{d \ln v}{d \ln c}\right)$

Κατά την μελέτη των υγρών μια από τις πρώτες εξισώσεις που αναπτύχθηκαν για τον συντελεστή διάχυσης σε αραιά διαλύματα είναι η εξίσωση Stokes-Einstein ^[37] βασισμένη στο σφαιρικό μοντέλο.

$$D_{AB} = \frac{k * T}{b * \pi * r_o * \mu_B}$$

Με r_o την ακτίνα του μορίου και μ_B το δυναμικό ιξώδες του υγρού. Η σταθερά b εξαρτάται από το μέγεθος των μορίων της διαλυμένης ουσίας σε σχέση με τον διαλύτη.

Η παραπάνω σχέση συγκρινόμενη με πειραματικά δεδομένα αποτελεί μέτρια προσέγγιση σε βαθμό 40%.

Αργότερα, αναπτύχθηκε μία σχέση από τους Wilke και Chung ^[37] βασισμένοι σε πειραματικά δεδομένα και τοποθετώντας εμπειρικές τιμές.

$$D_{AB} = 7,4 * 10^{-8} \frac{(\varphi * m r_B)^{1/2} * T}{v_A^{0,6} * \mu_{AB}}$$

Με φ παράμετρο συσχέτισης του διαλύτη, v_A τον μοριακό όγκο της ουσία Α στο σημείο βρασμού σε κανονικές συνθήκες.

Μία ημι-εμπειρική σχέση που αναπτύχθηκε από τον Scheibe ^[37]:

$$D_{AB} = 8,2 * 10^{-8} * T * \left[1 + \left(\frac{3 * v_B}{v_A} \right)^{2/3} \right] * \frac{1}{\mu_B * v_A^{1/3}}$$

Οι Reddy και Doraiswamy ^[37] πρότειναν την σχέση:

$$\frac{D_{AB} * \mu_B}{T} = K_{rs} * \frac{m r_B^{1/2}}{(v_B * v_A)^{1/3}}$$

Η διασπορά της σχέσης αυτής σε σύγκριση με πειραματικά σημεία υπολογίζεται στο 15%.

Οι παραπάνω σχέσεις παρουσιάζουν περιορισμούς στο ιξώδες και σε υψηλές τιμές αυτού είναι μη εφαρμόσιμες.

Επιπλέον, η εξάρτηση του συντελεστή διάχυσης με την θερμοκρασία θεωρητικά πρέπει να έχει την μορφή της εξίσωσης Arrhenius.

Τέλος, η εξάρτηση του συντελεστή διάχυσης από την συγκέντρωση της ουσίας στο υγρό, παίρνει την μορφή:

$$D = D_0 * \frac{dlna}{dlnc} * D_0 * \left(1 + \frac{dlnv}{dlnc}\right)$$

Η μορφή αυτή είναι ημι-εμπειρική και εξαρτάται από ημι-εμπειρικούς συντελεστές βασισμένη σε πειραματικά δεδομένα [38]. Με βάση την παραπάνω μορφή αναπτύσσονται συσχετίσεις (χρησιμοποιώντας πειραματικά δεδομένα) για το σύστημα που βρίσκεται υπό εξέταση.

6.3.2.1 Υπολογισμός συντελεστή διάχυσης αέριας φάσης.

Στην παρούσα εργασία ο συντελεστής διάχυσης του αερίου υπολογίζεται με βάση την εμπειρική συσχέτιση του Fuller. Η συσχέτιση αυτή είναι βασισμένη σε αέριο δύο συστατικών σε χαμηλές πιέσεις. Καθώς το καυσαέριο έχει σύσταση κυρίως αέρα και διοξειδίου του άνθρακα (σε ποσοστό άνω του 93%), μπορεί να θεωρηθεί ως αέριο δύο συστατικών επεξεργαζόμενο σε χαμηλή πίεση [20].

$$D_G = \frac{0,00143 * T^{1,75}}{PM_{air,co2}^{1/2} * [\Sigma_{co2}^{1/3} + \Sigma_{air}^{1/3}]^2} cm^2/s \quad (4)$$

$PM_{air,co2}$ αριθμητικό μέσο μοριακό βάρος αέρα-διοξειδίου του άνθρακα

$\Sigma_{co2}, \Sigma_{air}$ όγκοι κατανομής της διάχυσης διοξειδίου του άνθρακα και αέρα αντίστοιχα. (Πίνακας 6).

T θερμοκρασία αερίου (K).

Πίνακας 6. Μοριακό βάρος και όγκοι κατανομής του αερίου [20].

$PM_{air,co2}$ (g/mol)	35
Σ_{co2}	26,9
Σ_{air}	19,7

6.3.2.2 Υπολογισμός συντελεστή διάχυσης CO₂ στην υγρή φάση.

Στην παρούσα εργασία χρησιμοποιούνται σχέσεις που έχουν αναπτυχθεί για την εξάρτηση του συντελεστή διάχυσης με βάση την συγκέντρωση των ουσιών στο διάλυμα και με την συμφωνία πειραματικών δεδομένων σύμφωνα με την ημι-εμπειρική μορφή που παρουσιάστηκε.

Για τον υπολογισμό του συντελεστή διάχυσης διοξειδίου του άνθρακα στο υδατικό διάλυμα, λήφθηκε υπόψιν η αναλογία του N₂O, όπως έγινε και στην περίπτωση του υπολογισμού του συντελεστή Henry ^[22].

$$D_{CO_2} = \frac{D, CO_2_{water}}{D, N_2O_{water}} * D_{N_2O} \text{ m}^2/\text{s} \quad (5)$$

Στην αναλογία αυτήν βρίσκεται αρχικά ο συντελεστής διάχυσης του υποξειδίου του αζώτου στο υδατικό διάλυμα που εξετάζεται και στην συνέχεια οι συντελεστές διάχυσης τόσο του διοξειδίου του άνθρακα όσο και του υποξειδίου του αζώτου σε καθαρό νερό, ώστε να υπολογιστεί έμμεσα ο συντελεστής διάχυσης του διοξειδίου του άνθρακα στο υδατικό διάλυμα.

6.3.2.3 Υπολογισμός συντελεστή διάχυσης MEA στην υγρή φάση.

Για τον υπολογισμό του συντελεστή διάχυσης της MEA στο υδατικό διάλυμα λαμβάνεται βιβλιογραφικά η παρακάτω εμπειρική σχέση που έχει αναπτυχθεί ^[23], σύμφωνα με την ημι-εμπειρική μορφή που παρουσιάστηκε:

$$\ln(D_{MEA}) = -13,275 - \frac{2198,3}{273 + T} - 7,8142 * 10^{-5} * C_{MEA} * 1000 \text{ m}^2/\text{s} \quad (6)$$

Για τον υπολογισμό αυτό η θερμοκρασία λαμβάνεται σε βαθμούς Κελσίου ενώ η συγκέντρωση σε mol/l.

Ο συντελεστής αυτός έχει εξάρτηση από την θερμοκρασία και αλλάζει με αλλαγή της.

6.4 4^ο Βήμα.

Στο σημείο αυτό, απαιτούνται να βρεθούν οι συντελεστές μεταφοράς μάζας που καθορίζουν τον ρυθμό της διεργασίας.

Στην βιβλιογραφία (Πίνακας 7) έχουν προταθεί διάφορες συσχετίσεις για τους υπολογισμούς των συντελεστών μεταφοράς μάζας kg και kl για στήλες με πληρωτικό υλικό. Οι συσχετίσεις αφορούν 'ρυάκια' υγρού τα οποία βρίσκονται σε συνεχή επαφή με το αέριο.

Πίνακας 7. Παρουσίαση ενδεικτικών βιβλιογραφικών αναφορών για τον υπολογισμό των συντελεστών μεταφοράς μάζας.

Πηγή	kl (m/s)	kg (m/s)
17	$C_l * \left(\frac{\rho_L * g}{\mu_L}\right)^{1/6} * \left(\frac{u_L}{a}\right)^{1/3} * \left(\frac{D_L}{d_h}\right)^{1/2}$	$C_G * \frac{a^{0,5} * D_G}{\sqrt{d_h * (\varepsilon - h_L)}} * \left(\frac{\rho_G * u_G}{a * \mu_G}\right)^{3/4} * S C_G^{1/3}$
25	$2 * \sqrt{\frac{0,9 * D_L * u_L}{\pi * S * \varepsilon * h_L * \sin(a)}}$	$0,054 * \frac{D_G}{S} * \left[\frac{\rho_G * S * (u_{l,e} + u_{g,e})}{\mu_G}\right]^{0,8} * S C_G^{0,33}$ <p>Με: $u_{l,e} = \frac{u_l}{\varepsilon * (1 - h_L) * \sin(a)}$, $u_{g,e} = \frac{u_g}{\varepsilon * (1 - h_L) * \sin(a)}$</p>
26	$\frac{0,0051}{(a_p * d_p)^{-0,4}} * \left(\frac{\mu_L * g}{\rho_L}\right)^{1/3} * \left(\frac{\rho_L * u_L}{a_e * \mu_L}\right)^{1/3} * S C_L^{-0,5}$	$c * \left(\frac{D_G}{a_p * d_p^2}\right) * \left(\frac{\rho_G * u_G}{a_p * \mu_G}\right)^{0,7} * S C_G^{1/3}$

Με:

$C_l C_G$ σταθερές του πληρωτικού υλικού.

ρ_L πυκνότητα υγρού (kg/m³).

u_L ταχύτητα καθόδου του υγρού (m/s).

D_L συντελεστής διάχυσης υγρής φάσης (m²/s).

d_h υδραυλική διάμετρος του πληρωτικού υλικού (m), υπολογισμένη ως:

$$d_h = \frac{4 * \varepsilon}{a}$$

Όπου α και ε , η ειδική επιφάνεια (m^2/m^3) και το κλάσμα κενού (m^3/m^3) του πληρωτικού υλικού, αντίστοιχα (δεδομένα από την βιβλιογραφία [17]).

D_G συντελεστής διάχυσης αέριας φάσης (m^2/s).

ρ_G πυκνότητα αερίου (kg/m^3).

u_G ταχύτητα αερίου (m/s).

μ_G δυναμικό ιξώδες αερίου ($\text{kg}/\text{m}\cdot\text{s}$).

g επιτάχυνση της βαρύτητας ($9,8 \text{ m}^2/\text{s}$).

Sc_G αδιάστατος αριθμός Schmidt.

Ο αριθμός Schmidt ορίζεται ως:

$$Sc = \frac{\mu_G}{\rho_G * D_G}$$

Στην παρούσα εργασία επιλέχθηκαν οι σχέσεις που αναπτύχθηκαν από τον Billet και τους συνεργάτες του [17] λόγω πληρότητας της βιβλιογραφικής αναφοράς.

Να σημειωθεί πως διαφορετικές συσχετίσεις δίνουν διαφορετικά αποτελέσματα και ακρίβεια στους υπολογισμούς των συντελεστών (βλ. Παράρτημα Α) [12].

Ο συντελεστής μεταφοράς μάζας στην υγρή φάση υπολογίζεται από την βιβλιογραφία 17 ως:

$$k_L = C_l * \left(\frac{\rho_L * g}{\mu_L}\right)^{1/6} * \left(\frac{u_L}{a}\right)^{1/3} * \left(\frac{D_L}{D_h}\right)^{1/2} \text{ m/s} \quad (7)$$

Ο υπολογισμός αυτού απαιτεί την γνώση χαρακτηριστικών του πληρωτικού υλικού, την ταχύτητα του υγρού και τον συντελεστή διάχυσης.

Ο συντελεστής μεταφοράς μάζας στην αέρια φάση υπολογίζεται από την βιβλιογραφία 17 ως:

$$k_G = C_G * \frac{a^{0,5} * D_G}{\sqrt{D_h * (\varepsilon - h_L)}} * \left(\frac{\rho_G * u_G}{a * \mu_G}\right)^{3/4} * Sc_G^{1/3} \text{ m/s} \quad (8)$$

Ο υπολογισμός αυτού απαιτεί δεδομένα της αέριας φάσης και του πληρωτικού υλικού.

6.5 5^ο Βήμα.

Για το σύστημα Νερό-Διοξείδιο του Άνθρακα-MEA παραλαμβάνονται οι αντιδράσεις που λαμβάνουν χώρα, οι οποίες παρουσιάζονται στο Πίνακα 8 [5],[11].

Πίνακας 8. Σύστημα αντιδράσεων στο σύστημα [5],[11].

Σύστημα H₂O-CO₂-MEA

1	$2\text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{OH}^-$
2	$\text{CO}_2 + 2\text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{H}_3\text{O}^+ + \text{HCO}_3^-$
3	$\text{HCO}_3^- + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{CO}_3^{2-} + \text{H}_3\text{O}^+$
4	$\text{RNH}_3^+ + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{RNH}_2 + \text{H}_3\text{O}^+$
5	$\text{CO}_2 + \text{OH}^- \leftrightarrow \text{HCO}_3^-$
6	$2\text{RNH}_2 + \text{CO}_2 + \text{H}_2\text{O} \leftrightarrow \text{RNHCOO}^- + \text{RNH}_3^+$

Όπου το R δηλώνει την ομάδα HOCH₂CH₂.

Από τις παραπάνω αντιδράσεις κυρίαρχο ρόλο παίζει η αντίδραση (6), η οποία αντιπροσωπεύει το σύνολο των αντιδράσεων*.

**Το παραπάνω λαμβάνεται κατά κόρον στην βιβλιογραφία^[11] καθώς οι υπόλοιπες αντιδράσεις ισορροπίας είναι αντιδράσεις και δεν επηρεάζουν την κινητική και την συγκέντρωση του διοξειδίου, παρά μόνο σε υψηλές τιμές pH.*

Η συγκεκριμένη αντίδραση μελετήθηκε πειραματικά και βρέθηκε η κινητική της (Πίνακας 9).

Πίνακας 9. Κινητική αντίδρασης.

Βιβλ/φία	T (K)	CMEA (mol/L)	Τάξη αντίδρασης	Ειδική αντίδρασης k (m ³ /mol·s)	σταθερά της
[13]	278-308	0,02-0,18	2	$9,77 * 10^7 * \exp\left(\frac{-4955}{T}\right)$	
[14]	291-313	0,00-3,20	2	$4,48 * 10^8 * \exp\left(\frac{-5400}{T}\right)$	
[15]	303-313	0,10-0,50	Ψευδό- πρώτης	$3,01 * 10^8 * \exp\left(\frac{-5376}{T}\right)$	

Η ειδική σταθερά της αντίδρασης (Πίνακας 9) που χρησιμοποιείται στην εργασία επιλέγεται από την βιβλιογραφία [14] :

$$k = 4,48 * 10^8 * \exp\left(\frac{-5400}{T}\right) m^3/mol * s \quad (9)$$

Η ειδική σταθερά επιλέγεται με γνώμονα το εύρος των συνθηκών στις οποίες αναπτύχθηκαν (θερμοκρασιακή περιοχή, συγκέντρωση ΜΕΑ).

Στην συνέχεια, το μοντέλο λαμβάνει τη γενική εξίσωση ταχύτητας για την εύρεση του ρυθμού της αντίδρασης σε κάθε σημείο της στήλης:

$$-r_{CO_2} = \frac{1}{\frac{Henry}{k_G * a} + \frac{Henry}{k_L * E * a} + \frac{Henry}{k * C_{mea} * f_l}} * P_{CO_2} \text{ mol}/m^3 * h \quad (10)$$

Για την επίλυση αυτού, αρχικά βρίσκεται ο παράγοντας ενίσχυσης της απορρόφησης E. Ο παράγοντας αυτός δηλώνει κατά πόσον επηρεάζεται η απορρόφηση από την ύπαρξη χημικής αντίδρασης. Είναι συνάρτηση δύο παραμέτρων, του αριθμού Hatta (Ha) και του συντελεστή E_∞. Ο αριθμός Ha δηλώνει την μέγιστη δυνατή μετατροπή στο υγρό φιλμ εν συγκρίσει με την μέγιστη μεταφορά μάζας μέσω του φιλμ. Συνεπώς μεγάλες τιμές του αριθμού Hatta (>2) δηλώνουν γρήγορες και ταχείες αντιδράσεις. Ο συντελεστής E_∞, είναι μια παράμετρος που διορθώνει τον συντελεστή μεταφοράς μάζας στην υγρή φάση λόγω της αντίδρασης που λαμβάνει χώρα στο υγρό φιλμ. [16]

Ο υπολογισμός του παράγοντα αύξησης της απορρόφησης πραγματοποιείται:

A. Μέσω διαγράμματος (Διάγραμμα 2) [16].

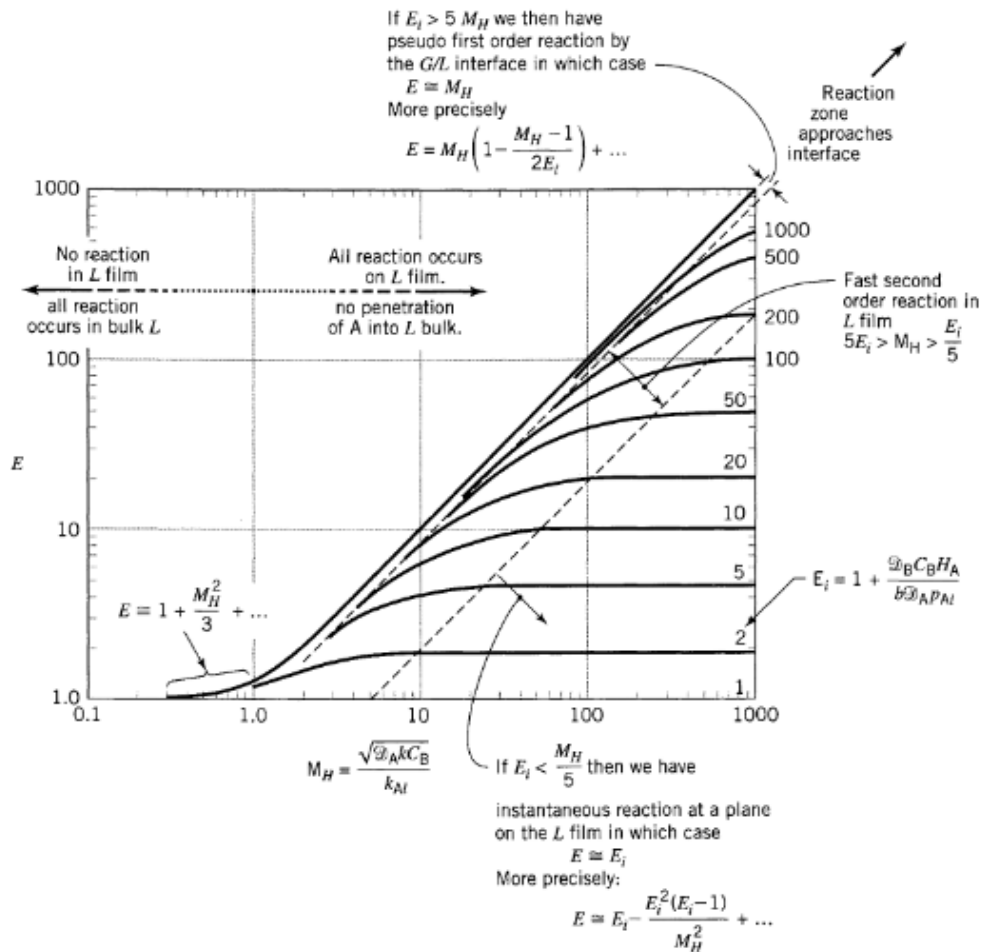
B. Μέσω επαναληπτικής διαδικασίας [12].

$$E = \left[\frac{Hatta * \sqrt{\frac{E_{\infty} - E}{E_{\infty} - 1}}}{\tanh \left[Hatta * \sqrt{\frac{E_{\infty} - E}{E_{\infty} - 1}} \right]} \right]$$

Γ. Μέσω αναλυτικής σχέσης [12].

$$E = \left[\frac{(2^2 * (E_{\infty} - 1) * E_{\infty})}{1 + Hatta^2} \right]^{1/2} * \frac{1 + Hatta^2}{2 * (E_{\infty} - 1)}$$

Διάγραμμα 2. Υπολογισμός παράγοντα αύξησης της απορρόφησης μέσω διαγράμματος [16].



Στην παρούσα εργασία παρουσιάζεται ο τρίτος τρόπος υπολογισμού του παράγοντα E, παρότι κατά την επεξεργασία και μελέτη αυτής χρησιμοποιήθηκαν και οι υπόλοιποι που αναφέρθηκαν δίνοντας τα ίδια αποτελέσματα.

Η αναλυτική σχέση που χρησιμοποιήθηκε από την βιβλιογραφία έχει ως ακολούθως:

$$E = \left[\frac{(2^2 * (E_{\infty} - 1) * E_{\infty})}{1 + Hatta^2} \right]^{1/2} * \frac{1 + Hatta^2}{2 * (E_{\infty} - 1)} \quad (11)$$

Η σχέση αυτή χρησιμοποιείται με ικανοποιητικά αποτελέσματα για απλές διμοριακές αντιδράσεις όπως είναι η αντίδραση ανάμεσα στο διοξείδιο του άνθρακα και την ΜΕΑ.

Όπου E_{∞} , παράμετρος, υπολογισμένη ως:

$$E_{\infty} = 1 + \frac{D_{MEA,am} * C_{MEA} * Henry}{\gamma * D_{CO2,am} * P_{CO2,i}} \quad (11i)$$

Και Hatta ο ρυθμός της χημικής αντίδρασης έναντι της διάχυσης:

$$Hatta = \frac{\sqrt{D_{CO2,am} * k * C_{MEA}}}{k_L} \quad (11ii)$$

Με:

$D_{CO2,am}$ συντελεστής διάχυσης διοξειδίου στο υδατικό διάλυμα (m²/s).

C_{MEA} συγκέντρωση ΜΕΑ (mol/m³).

$D_{MEA,am}$ συντελεστής διάχυσης ΜΕΑ στο υδατικό διάλυμα (m²/s).

$P_{CO2,i}$ συγκέντρωση διοξειδίου στην διεπιφάνεια υγρού-αερίου (Pa).

γ στοιχειομετρική αναλογία της αντίδρασης.

k , σταθερά ταχύτητας αντίδρασης (m³/ mol·s).

k_L συντελεστής μεταφοράς μάζας στην υγρή φάση (m/s).

6.6 6^ο Βήμα.

Τέλος, με την αναλυτική εύρεση του ρυθμού της αντίδρασης κατά το ύψος της στήλης και την ολοκλήρωση αυτού βρίσκεται ο όγκος της στήλης απορρόφησης, προϋποθέτοντας ακτινική συμμετρία, και συνεπώς το ύψος αυτής.

$$V = \frac{G}{\pi} * \int_{p_{CO2,out}}^{p_{CO2,in}} \frac{dp_{CO2}}{(-r_{CO2})} \quad m^3 \quad (12)$$

B. Υπολογιστικό Μέρος.

1 Σενάριο.

Για την δημιουργία του βασικού σεναρίου επεξεργασίας, λαμβάνονται ενδεικτικές τιμές από την βιβλιογραφία τόσο για το υδατικό διάλυμα όσο και για το αέριο ρεύμα.^{[5],[11]}

Λαμβάνεται διαλύτης Μονοαιθανολαμίνης (ΜΕΑ) συγκέντρωσης 15,3 % κατά βάρος σε θερμοκρασία περιβάλλοντος (20°C).

Το αέριο το οποίο παραλαμβάνεται και χρήζει επεξεργασίας, έχει μια ροή η οποία ορίζεται στα 2640 kmol/h και σύμφωνα με την σύσταση του Πίνακα 10.

Πίνακας 10. Σύσταση βιομηχανικού αερίου.

Σύσταση Αερίου(% vol)

Αέρας	80,62
CO₂	13,3
H₂O	3,25
O₂	1,81
SO₂	0,05
NO_x	0,0097

Παραδοχή* τέλειου αερίου πίεσης 1 ατμόσφαιρας και θερμοκρασίας 20°C.

Η απαιτούμενη απομάκρυνση του διοξειδίου του άνθρακα ορίζεται στο 90% κατ' όγκο.

*Για την παραδοχή αυτήν ελέγχεται κατά πόσον το αέριο μπορεί να θεωρηθεί ιδανικό στην επόμενη παράγραφο.

Συνοπτική παρουσίαση των δεδομένων του σεναρίου παρουσιάζονται στον Πίνακα 11 :

Πίνακας 11. Δεδομένα Σεναρίου.

Αδιαβατική στήλη απορρόφησης

Συγκέντρωση ΜΕΑ	15,3 (ή 2,5)	% w/w (ή kmol/m ³)	
Συγκέντρωση CO ₂ στο υγρό στην είσοδο	0	mol CO ₂ /mol MEA	
Συγκέντρωση CO ₂ στο υγρό στην έξοδο	0,484	mol CO ₂ /mol MEA	
Είσοδος Αερίου	2640	kmol/h	
Συγκέντρωση CO ₂ , εισόδου	13,3	% v/v	
Ποσοστό Απομάκρυνσης	90	%	
Θερμοκρασία εισόδου	20	°C	
Πυκνότητα υγρού ^[11]	1000	Kg/m ³	
Ιξώδες υγρού ^[11]	0,001 (10 ⁻⁶)	Kg/(m·s) (cSt)	
Επιφανειακή τάση υγρού ^[19]	6 · 10 ⁻²	N/m	
Θερμοχωρητικότητα Υγρού ^[11]	0,92	kcal/(kg·°C)	
Ιξώδες αερίου ^[11]	1,6 · 10 ⁻⁵	Kg/(m·s)	
Πληρωτικό Υλικό Berl Saddle	size	13	mm
	a	545	m ² /m ³
	Παράγοντας Πλήρωσης	240	

2 Υπολογισμοί εισόδου και εξόδου υγρού και αερίου.

Δεχόμενοι την παραπάνω σύσταση και γνωρίζοντας τα μοριακά βάρη των επιμέρους αερίων, υπολογίζεται το μέσο μοριακό βάρος (Πίνακας 12) ως εξής:

$$Mr_{gas} = \sum Mr_i * Comp_i$$

Πίνακας 12. Υπολογισμός μέσου μοριακού βάρους αερίου.

Μέσο μοριακό βάρος αερίου (g/mol)

	Σύσταση (%vol)	Μοριακό βάρος (g/mol)	$Mr_i \cdot Comp_i$
Air	80,62	29	23,4
CO₂	13,3	44	5,8
H₂O	4,3	18	0,8
O₂	1,77	32	0,6
SO₂	0,005	64	0,003
No_x	0,0097	46	0,004
		Mr_{gas}	30,6

Με βάση το μέσο μοριακό βάρος του αερίου υπολογίζεται η μάζα του αερίου, ίση με:

$$M_{gas} = n_{gas} * Mr_{gas} = 80730 \text{ kg/h}$$

Η ογκομετρική παροχή υπολογίζεται με βάση την καταστατική εξίσωση του τέλει αερίου.

$$\dot{V} = \frac{n_{gas} * R * T}{P}$$

Όπου:

n_{gas} η γραμμομοριακή ροή του αερίου (mol/h).

R παγκόσμια σταθερά αερίων (8,314 m³·Pa/(K·mol)).

T θερμοκρασία αερίου (K).

P πίεση αερίου (Pa).

Με βάση τα παραπάνω υπολογίζεται ογκομετρική παροχή αερίου:

$$\dot{V}_{in} = 64310 \text{ m}^3/\text{h} \text{ ή } \dot{V}_{in} = 17,9 \text{ m}^3/\text{sec}$$

Και η πυκνότητα του αερίου:

$$\rho_G = \frac{M_{gas}}{V_{in}} = 1,26 \frac{\text{kg}}{\text{m}^3}$$

Έλεγχος παραδοχής ιδανικού αερίου.

Για την εύρεση της απόκλισης των αερίων από το ιδανικό, υπολογίζεται ο συντελεστής συμπίεστικότητας (z) των επιμέρους αερίων. Ο υπολογισμός αυτός γίνεται με την βοήθεια της δυναμοσειράς του ακεντρικού παράγοντα που αναπτύχθηκε από τον Pitzer [39]:

$$z = z^{(0)} + \omega * z^{(1)} + \dots$$

Στην πράξη χρησιμοποιούνται οι δύο πρώτοι όροι της δυναμοσειράς αυτής.

Αρχικά, για τα επιμέρους αέρια (N_2, O_2, CO_2 κτλ) λαμβάνονται από πίνακες η κρίσιμη θερμοκρασία και πίεση καθώς και η τιμή του ακεντρικού παράγοντα. Στην συνέχεια, υπολογίζονται η ανοιγμένη θερμοκρασία και πίεση του κάθε αερίου, με βάση τις συνθήκες που επικρατούν εντός της στήλης απορρόφησης. Με την βοήθεια πινάκων [39], βρίσκονται τα $z^{(0)}$ και $z^{(1)}$ και υπολογίζεται ο συντελεστής συμπίεστικότητας του κάθε αερίου.

Με βάση τα παραπάνω, οι συντελεστές συμπίεστικότητας κυμαίνονται μεταξύ 0,998-0,989, δίνοντας σφάλμα μικρότερο του 1% από την συμπεριφορά του ιδανικού αερίου. Συνεπώς, η παραδοχή των τέλειων αερίων κρίνεται ορθή.

Χρησιμοποιώντας την σύσταση και την ογκομετρική παροχή του αερίου καθώς και αντιμετωπίζοντας το κάθε επιμέρους αέριο ως ιδανικό, λαμβάνεται η ογκομετρική και η γραμμομοριακή ροή του κάθε αερίου χωριστά (βλ. Πίνακα 13):

Πίνακας 13. Παροχή αερίων στην αέρια φάση.

Είσοδος Αερίου

	Σύσταση(%vol)	m ³ /h	kmol/h
Air	80,62	51847	2128
CO₂	13,3	8553	351
H₂O	4,3	2765	113
O₂	1,77	1138	47
SO₂	0,005	3,22	0,13
NO_x	0,0097	6,24	0,24

Από τον πίνακα αυτό, λαμβάνεται η ποσότητα του διοξειδίου που υπάρχει στο αέριο.

Η απομάκρυνση CO₂ έχει οριστεί στο 90% κατ' όγκο, συνεπώς υπολογίζεται η τελική ποσότητα αυτού έπειτα από την απορρόφηση:

$$CO_{2out} = CO_{2in} * (1 - 0,9) = 855 \text{ m}^3/h$$

Στην έξοδο, υπολογίζεται η νέα παροχή του αερίου, η οποία είναι μειωμένη κατά 90% σε CO₂, καθώς και η νέα σύσταση του αερίου (Πίνακας 14).

Η παροχή αυτή:

$$V_{out} = 56615 \text{ m}^3/h$$

Πίνακας 14. Σύσταση αερίου εξόδου από την στήλη απορρόφησης.

Έξοδος Αερίου

Σύσταση Αερίου(% vol)	
Air	91,5
CO₂	1,5
H₂O	4,9
O₂	2,0
SO₂	0,006
NO_x	0,01

2.1 Εύρεση παροχής και σύστασης υγρού.

Ορίζονται οι ποσότητες Καθαρή_{MEA} και Πλούσια_{MEA}, οι οποίες δείχνουν την συγκέντρωση του διοξειδίου του άνθρακα στο υδατικό διάλυμα (λόγος ανθρακώσεως molCO₂/molMEA).

Δεδομένου ότι ο διαλύτης αρχικά είναι καθαρός: Καθαρή_{MEA}=0 ή MEA_{,in}=0.

Παραδοχή: Στην έξοδο του υγρού, η τιμή λειτουργίας της απορρόφησης παραλαμβάνεται* ίση με 0,484. Οπότε: Πλούσια_{MEA}=0,484 ή MEA_{,out}=0,484. ^[11]

*Σύμφωνα με την αντίδραση CO₂-MEA ο μέγιστος λόγος ανθρακώσεως στο υδατικό διάλυμα δεν δύναται να υπερβεί την τιμή 0,5 λόγω χημικής αντίδρασης, καθώς 1mol CO₂ αντιδρά με 2mol MEA. [11]

Για την εύρεση της ποσότητας της MEA, επιλύεται το ισοζύγιο μάζας της απορρόφησης. (Σχ.1 Σελ. 33)

$$L * (X_{out} - X_{in}) = G * (y_{in} - y_{out})$$

Με βάση τα δεδομένα, το ισοζύγιο παίρνει την μορφή:

$$L * (0,484 - 0) = 2640 * (0,133 - 0,015) \rightarrow L = 643 \text{ kmol MEA/h}$$

Για την εύρεση της παροχής του υγρού απαιτείται η γραμμομοριακή συγκέντρωση της MEA στο υδατικό διάλυμα.

Η συγκέντρωση της MEA δίνεται κατά βάρος 15,3%. Με βάση 100kg ή 0,1m³ διαλύματος, γίνονται οι παρακάτω υπολογισμοί.

$$\text{Μάζα MEA} = 15\% * \text{Μάζα διαλύματος} = 15\text{kg MEA}$$

Δεδομένου του μοριακού βάρους της MEA (61,08 kg/kmol), υπολογίζεται:

$$\text{Μολ MEA} = 15/61,08 = 0,25 \text{ kmol MEA}$$

Συνεπώς συγκέντρωση MEA:

$$C_{mea} = 0,25/0,1 = 2,5 \text{ kmol/m}^3$$

Χρησιμοποιώντας τους υπολογισμούς αυτούς, λαμβάνεται η ποσότητα του υγρού διαλύματος που απαιτείται για την δεδομένη απορρόφηση διοξειδίου του άνθρακα:

$$L_{total} = \frac{L}{C_{MEA}} = \frac{642}{2,5} = 257,2 \text{ m}^3/\text{h}$$

Για την εύρεση της σύστασης του υγρού στην έξοδο χρησιμοποιείται το ισοζύγιο μάζας λαμβάνοντας ως όγκο ελέγχου ολόκληρη τη στήλη απορρόφησης.

$$\frac{F_g}{\pi} * (p_{co2,in} - p_{co2,out}) = \frac{F_l}{b * C_T} * (C_{MEA,in} - C_{MEA,out})$$

Όπου:

F_g	γραμμομοριακή ροή αερίου (mol/h).
π	πίεση αερίου (Pa).
$p_{CO_2,in}, p_{CO_2,out}$	μερική πίεση εισόδου και εξόδου του διοξειδίου του άνθρακα στο αέριο ρεύμα (Pa).
F_l	γραμμομοριακή ροή υγρού (mol/h).
b	στοιχειομετρικός συντελεστής αντίδρασης (=2).
C_T	μοριακή πυκνότητα υγρού (=49560* mol/m ³).
$C_{MEA,in}, C_{MEA,out}$	συγκέντρωση MEA εισόδου και εξόδου στο υδατικό διάλυμα (mol/m ³).

$$\frac{2640 * 10^3}{10^5} * (13300 - 1510,94) = \frac{12748}{2 * 49560} * (2,5 * 1000 - C_{MEA,out})$$

$$\rightarrow C_{MEA,out} = 80 \text{ mol/m}^3$$

**Η μοριακή πυκνότητα του υγρού υπολογίζεται με την χρήση της συγκέντρωσης της MEA (κατά βάρος), την πυκνότητα και την ογκομετρική παροχή του υγρού. Πιο συγκεκριμένα, η ογκομετρική παροχή με την χρήση της πυκνότητας γίνεται μαζική παροχή. Με την βοήθεια της κατά βάρος συγκέντρωσης της MEA βρίσκεται η ποσότητα νερού και MEA (σε kg/h). Με την χρήση των μοριακών βαρών οι ποσότητες αυτές μετατρέπονται σε μοριακές (mol/h). Συνεπώς διαιρώντας την μοριακή παροχή με την ογκομετρική παροχή λαμβάνεται η μοριακή πυκνότητα του διαλύματος (mol/m³).*

2.2 Θερμοκρασία υγρού στην έξοδο.

Η Θερμοκρασία του υγρού στην έξοδο εξαρτάται από την παραγωγή ενέργειας εξαιτίας της αντίδρασης ανάμεσα στο διοξείδιο του άνθρακα και την MEA, δεδομένου ότι ο πύργος απορρόφησης είναι αδιαβατικός και συνεπώς δεν χάνεται θερμότητα προς το περιβάλλον. Έχοντας ως δεδομένο την ενθαλπία της αντίδρασης ίση με 20,2 kcal/mol CO₂ [11], ανεξάρτητη της θερμοκρασίας

καθώς και την θερμοχωρητικότητα του υγρού, υπολογίζεται η αύξηση της θερμοκρασίας του υγρού.

$$\text{Παραγωγή Θερμότητας} = \Delta H * G * (y_{in} - y_{out}) = 6286870,2 \text{ kcal/h}$$

$$\Delta T = \frac{\text{Παραγωγή Θερμότητας}}{m_l * C_{pl}} = 26,5^\circ C$$

Τελική θερμοκρασία υγρού: 46,5 °C.

3 Υπολογισμός Διαμέτρου στήλης.

Ο υπολογισμός της διαμέτρου της στήλης εξαρτάται άμεσα από την ταχύτητα πλημμύρισης και την επιλογή της πτώσης πίεσης στην στήλη απορρόφησης.

Στην περίπτωση αυτή επιλέχθηκε μία ενδιάμεση πτώση πίεσης ίση με 405 Pa/m ενδεικτική σε στήλες απορρόφησης.

Η ταχύτητα αυτή υπολογίζεται με την βοήθεια του Διαγράμματος 1 (Σελ. 34).

Όπως γίνεται αντιληπτό, η σχέση (2i) μπορεί να υπολογιστεί με τα δεδομένα του σεναρίου.

$$\frac{G_L}{G_G} * \sqrt{\frac{\rho_G}{\rho_L}} = 0,11$$

Λαμβάνοντας την τιμή αυτή και διαβάζοντας το Διάγραμμα 1, η τεταγμένη αυτού θα λάβει την τιμή 1,2.

Επιλύοντας την τεταγμένη (2ii,2iii) ως προς την φαινόμενη ταχύτητα:

$$u_0 = \frac{1,2}{F_p^{0,5} * \nu^{0,05} * \sqrt{\frac{\rho_G}{\rho_L - \rho_G}}} = 2,2 \text{ m/s}$$

Για το πληρωτικό υλικό που έχει επιλεχθεί η τιμή του παράγοντα πλήρωσης έχει τιμή $F_p=240$. [17]

Η ταχύτητα αυτή εκφράζει την ταχύτητα πλημμύρισης και η τιμή της ταχύτητας του αερίου λαμβάνεται ίση με το 80% αυτής, σύμφωνα με τον περιορισμό του ανώτατου ορίου του 90%.

Γνωρίζοντας, την ογκομετρική παροχή του αερίου βρίσκεται το εμβαδόν της διατομής της στήλης και συνεπώς η διάμετρος αυτής.

$$\text{Εμβαδόν διατομής}(A) = \frac{V_{in}}{u_o * 0,8} = 10,2 \text{ m}^2$$

$$d = \sqrt{\frac{4 * A}{\pi}} = 3,6 \text{ m}$$

Από τα παραπάνω βρίσκεται η διάμετρος της στήλης στα $d = 3,6 \text{ m}$. Η τιμή αυτή αποτελεί την ελάχιστη επιτρεπτή διάμετρο της στήλης.

4 Σχεδιασμός στήλης απορρόφησης.

Ο πύργος απορρόφησης λαμβάνει στο πάνω μέρος του την υγρή φάση που περιέχει τον διαλύτη και στο κάτω μέρος του το αέριο που περιέχει το διοξείδιο του άνθρακα. Η στήλη περιέχει πληρωτικό υλικό με το οποίο υποβοηθείται η μεταφορά μάζας. Το πληρωτικό υλικό που επιλέχθηκε είναι το Berl Saddle για το οποίο λήφθηκαν και τα χαρακτηριστικά του από την βιβλιογραφία (βλ. Παράρτημα Β) ^[17].

Κατά την άνοδο του αερίου και την κάθοδο του υγρού, οι δύο φάσεις έρχονται σε επαφή, όπου και γίνεται η απορρόφηση. Αρχικά, το διοξείδιο του άνθρακα απορροφάται στην υγρή φάση και στην συνέχεια αντιδράει με τον διαλύτη.

Για την μοντελοποίηση του παραπάνω φαινομένου πρέπει να ληφθούν υπόψιν εκτός άλλων και οι συντελεστές μεταφοράς μάζας τόσο στην υγρή όσο και στην αέρια φάση καθώς και οι συντελεστές διάχυσης.

Η στήλη απορρόφησης διαιρείται σε 1000 ίσα στοιχειώδη κομμάτια ύψους Δz . Η υποδιαίρεση αυτή έγινε με γνώμονα την ακρίβεια και την ευαισθησία των αποτελεσμάτων που παρατηρείται με την αλλαγή του αριθμού των στοιχειωδών

κομματιών. Σε κάθε στοιχειώδες κομμάτι της στήλης υπολογίζονται όλα εκείνα τα μεγέθη που απαιτούνται για την επίλυση των ισοζυγίων με βάση τις αρχικές και τελικές συνθήκες. Για την επίλυση των ισοζυγίων απαιτείται ο ορισμός ενός αρχικού όγκου της στήλης. Με τον ορισμό του όγκου επιλύονται τα στοιχειώδη τμήματα της στήλης. Σύμφωνα με την απόκλιση των αποτελεσμάτων από τις τελικές συνθήκες, επανεκτιμάται ο όγκος της στήλης και επιλύεται εκ νέου η στήλη. Η εύρεση του όγκου γίνεται με την βοήθεια του υπολογιστικού εργαλείου Solver του Microsoft Excel (βλ. Παράρτημα Γ). Οι υπολογισμοί στην στήλη έγιναν από την κορυφή προς τον πυθμένα της. Δηλαδή από την είσοδο του υγρού προς την έξοδό του, και από την έξοδο του αερίου προς την είσοδό του.

Στις αρχικές συνθήκες αυτές το αέριο έχει την συγκέντρωσή εξόδου από την στήλη απορρόφησης σε διοξείδιο του άνθρακα (τιμή ίση με 1,5 % με βάση το σενάριο που εξετάζεται), και η συγκέντρωση της MEA σε διοξείδιο του άνθρακα θα είναι μηδενική (είσοδος καθαρού διαλύτη ίση με 0 molCO₂/molMEA).

Με βάση τα παραπάνω επιλύεται το πρώτο στοιχειώδες κομμάτι της στήλης.

Κατά αντιστοιχία επιλύεται το κάθε στοιχειώδες κομμάτι της στήλης που διαφέρει κατά Δz από το προηγούμενο.

4.1 Χαρακτηριστικά Πληρωτικού υλικού.

Τα χαρακτηριστικά του πληρωτικού υλικού συνοψίζονται στον Πίνακα 15 ^[17].

Πίνακας 15. Χαρακτηριστικά πληρωτικού υλικού ^[17].

Πληρωτικό υλικό	Berl Saddle	
size	13	mm
packing specified surface area (a)	545	m ² /m ³
void fraction (ε)	0,65	m ³ /m ³
hydraulic diameter of packing (d _h)	477 · 10 ⁻⁵	m
C _g	0,232	
C _l	1,364	
a _e	85,87	1/m
C _h	0,83	

a_h	404	
H_i (υγρό παρακράτημα)	0,1	

Από τα παραπάνω μεγέθη αξίζει να αναφερθεί:

a_e διαβρεχόμενη επιφάνεια του πληρωτικού υλικού [17].

$$a_e = 1,5 * (a * D_h)^{-0,5} * \left(\frac{\rho_L * u_L * D_h}{\mu_L}\right)^{-0,2} * \left(\frac{\rho_L * u_L^2 * D_h}{\sigma_L}\right)^{0,75} * \left(\frac{u_L}{g * D_h}\right)^{-0,45} * \alpha$$

Όπου:

ρ_L πυκνότητα υγρού (kg/m³).

u_L ταχύτητα υγρού (m/s).

μ_L ιξώδες υγρού (cSt).

σ_L επιφανειακή τάση (N/m).

4.2 Υπολογισμός συντελεστή Henry.

Η γενική εξίσωση υπολογισμού του συντελεστή Henry δίνεται από την εξίσωση 3 (Σελ. 35)^[21]:

$$\ln(H) = x_1 * \ln(H_{21}) + x_3 * \ln(H_{23}) - a_{13} * x_1 * x_3 \quad (3)$$

Για την δεδομένη θερμοκρασία εισόδου του υδατικού διαλύματος (20°C), υπολογίζεται ο συντελεστής Henry.

Βιβλιογραφικά βρίσκεται η συσχέτιση του συντελεστή Henry για το διοξείδιο του άνθρακα σε καθαρό νερό ως: ^[21]

$$H_{23} = 2,82 * 10^6 \exp\left(\frac{-2044}{273 + T}\right) Pa * m^3/mol \quad (3i)$$

Όπου T η θερμοκρασία του υγρού (°C).

Γίνεται αντιληπτό ότι ο συντελεστής Henry που θα βρεθεί θα εξαρτάται από την θερμοκρασία και συνεπώς θα βρίσκεται στην επίλυση καθενός από τα στοιχειώδη κομμάτια στα οποία έχει χωριστεί η στήλη.

Όπως έχει αναφερθεί η συσχέτιση ανάμεσα στον συντελεστή Henry και την καθαρή αμίνη δεν υπάρχει βιβλιογραφικά. Για τον λόγο αυτό χρησιμοποιείται η αναλογία του υποξειδίου του αζώτου (N_2O) ^{[21],[22]}.

Για τον υπολογισμό αυτόν λαμβάνεται ο λόγος των δύο συντελεστών σε καθαρό νερό και στην συνέχεια πολλαπλασιάζεται με τον συντελεστή του N_2O στο συστατικό για το οποίο δεν έχουμε δεδομένα.

Στην περίπτωση αυτήν έχουμε:

$$H_{21} = Henry, CO2_{MEA} = \frac{Henry, CO2_{water}}{Henry, N2O_{water}} * Henry, N2O_{MEA} \quad (3ii)$$

Ο συντελεστής Henry για το N_2O σε καθαρό νερό βρίσκεται ^[22]:

$$H_{N2O,water} = 8,55 * 10^6 \exp\left(\frac{-2284}{273 + T}\right) Pa * m^3/mol \quad (3iii)$$

Ενώ για την καθαρή αμίνη ^[22]:

$$H_{N2O,MEA} = 120700 * \exp\left(\frac{-1136,5}{273 + T}\right) Pa * m^3/mol \quad (3iv)$$

Συνδυάζοντας τις (3ii), (3iii), (3iv) υπολογίζεται τελικά ο συντελεστής Henry του διοξειδίου του άνθρακα στην καθαρή MEA (H_{21}).

Εν συνεχεία, η παράμετρος μεταξύ νερού και μονοαιθανολαμίνης πρέπει να υπολογιστεί. Η αλληλεπίδραση αυτή υπολογίζεται από μια εμπειρική σχέση η εξαρτάται από την θερμοκρασία, την σύσταση του διαλύματος και τέσσερις σταθερές οι οποίες βρίσκονται βιβλιογραφικά ^[21].

K_1 1,3378.

K_2 0,1831.

K_3 -0,00405.

K_4 -3,054.

$$a_{13} = K_1 + K_2 * T + K_3 * T^2 + K_4 * x_3 \quad (3v)$$

Με την βοήθεια των εξισώσεων (3i,3ii,3v), λαμβάνεται από την εξίσωση (3), ο συντελεστής Henry του διοξειδίου στο διάλυμα για μια συγκεκριμένη θερμοκρασία και σύσταση του υγρού.

Ο συντελεστής Henry του διοξειδίου του άνθρακα σε καθαρό νερό υπολογίζεται από την εξίσωση (3i):

$$H_{23} = 2,82 * 10^6 \exp\left(\frac{-2044}{273 + 20}\right) = 2633 \text{ Pa} * m^3/mol$$

Για την εύρεση του συντελεστή Henry σε καθαρή μονοαιθανολαμίνη παραλαμβάνεται η αναλογία του υποξειδίου του αζώτου και υπολογίζεται:

Ο συντελεστής Henry για το N₂O σε καθαρό νερό από την (3iii):

$$H_{N2O,water} = 8,55 * 10^6 \exp\left(\frac{-2284}{273 + 20}\right) = 3520 \text{ Pa} * m^3/mol$$

Ενώ για την καθαρή αμίνη (3iv):

$$H_{N2O,MEA} = 120700 * \exp\left(\frac{-1136,5}{273 + 20}\right) = 2495 \text{ Pa} * m^3/mol$$

Τελικώς επιστέφοντας στην (3ii) ο συντελεστής Henry του διοξειδίου του άνθρακα σε καθαρή MEA:

$$H_{21} = \frac{Henry, CO2_{water}}{Henry, N2O_{water}} * Henry, N2O_{MEA} = 1867 \text{ Pa} * m^3/mol$$

Η αλληλεπίδραση μεταξύ νερού και μονοαιθανολαμίνης υπολογίζεται σύμφωνα με την εξίσωση (3v).

$$a_{13} = 1,3378 + 0,1831 * 20 - 0,00405 * 20^2 - 3,054 * 0,88 = 0,69$$

Με την χρήση των εξισώσεων (3i),(3ii) και (3v) στην (3), λαμβάνεται ο συντελεστής Henry στην είσοδο του υγρού:

$$\ln(H) = 0,12 * \ln(1867) + 0,88 * \ln(2633) - 0,69 * 0,12 * 0,88 = 7,76$$

$$H = 2322 \text{ Pa} * m^3/mol$$

4.3 Υπολογισμός συντελεστή διάχυσης στην αέρια φάση.

Ο υπολογισμός του συντελεστή διάχυσης για το διοξείδιο του άνθρακα στην αέρια φάση γίνεται σύμφωνα με την εξίσωση 4 (Σελ. 40), και για την θερμοκρασία εισόδου του διαλύτη λαμβάνει την μορφή:

$$D_G = \frac{0,00143 * 20^{1,75}}{34,9^{1/2} * [26,9^{1/3} + 19,7^{1/3}]^2} = 0,629 \text{ cm}^2/\text{s} \text{ ή } 6,29 * 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$$

4.4 Υπολογισμός συντελεστή διάχυσης CO₂ στην υγρή φάση.

Για τον υπολογισμό του συντελεστή διάχυσης διοξειδίου του άνθρακα στο υγρό διάλυμα, λήφθηκε υπόψιν η αναλογία του N₂O που αναπτύχθηκε προηγουμένως.

Για τον συντελεστή διάχυσης του υποξειδίου του αζώτου στο συγκεκριμένο υδατικό διάλυμα, αναπτύχθηκε η παρακάτω σχέση:

$$D_{N_2O} = (b_0 + b_1 * C_{MEA} + b_2 * C_{MEA}^2) * \exp\left(\frac{b_3 + b_4 * C_{MEA}}{273 + T}\right) \text{ m}^2/\text{s} \quad (5i)$$

Στην παραπάνω σχέση γνωστή είναι η συγκέντρωση της MEA στο διάλυμα καθώς και η θερμοκρασία σε κάθε σημείο της στήλης.

Οι συντελεστές b_0, b_1, b_2, b_3, b_4 έχουν προσδιοριστεί, από την βιβλιογραφία [22]:

$$b_0 \ 5,07 * 10^{-6}.$$

$$b_1 \ 8,67 * 10^{-7}.$$

$$b_2 \ 2,78 * 10^{-7}.$$

$$b_3 \ -2371.$$

$$b_4 \ -93,4.$$

Για την ολοκλήρωση της αναλογίας του CO₂ με το N₂O, απαιτείται η εύρεση του συντελεστή διάχυσης σε καθαρό νερό. Οι συσχετίσεις δίνονται παρακάτω:

$$D_{N_2O,Water} = 5,07 * 10^{-6} \exp\left(\frac{-2371}{273 + T}\right) m^2/s \quad (5ii)$$

$$D_{CO_2,Water} = 2,35 * 10^{-6} \exp\left(\frac{-2119}{273 + T}\right) m^2/s \quad (5iii)$$

Με την βοήθεια των σχέσεων (5i), (5ii), (5iii) και την αναλογία CO₂ και N₂O, υπολογίζεται τελικά ο συντελεστής διάχυσης του διοξειδίου του άνθρακα στο υδατικό διάλυμα (Σχ.5 Σελ. 41).

Ο παραπάνω συντελεστής εξαρτάται και αυτός από την θερμοκρασία, συνεπώς υπολογίζεται κατά ύψος της στήλης.

Στους παραπάνω υπολογισμούς ο συντελεστής διάχυσης υπολογίζεται σε m²/s, ενώ η θερμοκρασία τοποθετείται σε βαθμούς Κελσίου και η συγκέντρωση της αμίνης σε mol/l.

Για τον συντελεστή διάχυσης του υποξειδίου του αζώτου στην θερμοκρασία εισόδου του διαλύτη από την 5i έχουμε:

$$D_{N_2O} = (5,07 * 10^{-6} + 8,67 * 10^{-7} * 2,5 + 2,78 * 10^{-7} * 2,5^2) * \exp\left(\frac{-2371 - 93,4 * 2,5}{273 + 20}\right) = 1,23 * 10^{-9} m^2/s$$

Για τους συντελεστές διάχυσης του CO₂ και του N₂O, λαμβάνονται οι εξισώσεις 5ii και 5iii:

$$D_{N_2O,Water} = 5,07 * 10^{-6} \exp\left(\frac{-2371}{273 + 20}\right) = 1,55 * 10^{-9} m^2/s$$

$$D_{CO_2,Water} = 2,35 * 10^{-6} \exp\left(\frac{-2119}{273 + 20}\right) = 1,7 * 10^{-9} m^2/s$$

Με την βοήθεια των σχέσεων (5i), (5ii), (5iii) στην σχέση 5, λαμβάνεται ο συντελεστής διάχυσης του διοξειδίου του άνθρακα στο υδατικό διάλυμα.

$$D_{CO_2} = \frac{1,7 * 10^{-9}}{1,55 * 10^{-9}} * 1,23 * 10^{-9} = 1,35 * 10^{-9} m^2/s$$

Ο παραπάνω συντελεστής εξαρτάται από την θερμοκρασία, συνεπώς υπολογίζεται κατά το ύψος της στήλης.

4.5 Συντελεστής διάχυσης ΜΕΑ στο υδατικό διάλυμα.

Για τον υπολογισμό αυτού του συντελεστή λαμβάνεται η εξίσωση 6 (Σελ. 41) [23]:

$$\ln(D_{MEA}) = -13,275 - \frac{2198,3}{273 + 20} - 7,8142 * 10^{-5} * 2,5 * 1000 = -20,97$$
$$D_{MEA} = 7,78 * 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$$

Ο συντελεστής αυτός έχει εξάρτηση από την θερμοκρασία και αλλάζει με αλλαγή της.

4.6 Υπολογισμός συντελεστή μεταφοράς μάζας στην υγρή φάση.

Ο υπολογισμός του συντελεστή μεταφοράς μάζας στην υγρή φάση υπολογίζεται σύμφωνα με την εξίσωση 7 (Σελ. 43), για την είσοδο του υγρού:

$$k_L = 1,364 * \left(\frac{1000 * 9,81}{0,001}\right)^{1/6} * \left(\frac{0,007}{545}\right)^{1/3} * \left(\frac{1,35 * 10^{-9}}{0,0047}\right)^{1/2} = 24,9 * 10^{-5} \text{ m/s}$$

Η τιμή αυτή εξαρτάται από τον συντελεστή διάχυσης και συνεπώς αλλάζει κατά το ύψος της στήλης.

4.7 Υπολογισμός συντελεστή μεταφοράς μάζας στην αέρια φάση.

Ο συντελεστής μεταφοράς μάζας στην αέρια φάση υπολογίζεται από την εξίσωση 8 (Σελ. 43), για την είσοδο του υγρού:

$$k_G = 0,232 * \frac{545^{0,5} * 6,29 * 10^{-5}}{\sqrt{0,0047 * (0,65 - 0,11)}} * \left(\frac{1,26 * 1,75}{545 * 1,6 * 10^{-5}} \right)^{3/4} * \left(\frac{1,6 * 10^{-5}}{1,26 * 6,29 * 10^{-5}} \right)^{1/3} = 0,25 \text{ m/s}$$

Η τιμή αυτή σε αντιστοιχία με τον προηγούμενο συντελεστή μεταφοράς μάζας εξαρτάται από τον συντελεστή διάχυσης της αέριας φάσης και μεταβάλλεται κατά το ύψος της στήλης.

4.8 Επίλυση εξίσωση ταχύτητας.

Στην δεδομένη θερμοκρασία αρχικά βρίσκεται η τιμή της σταθεράς αντίδρασης k .

Όπως έχει αναφερθεί η σταθερά της αντίδρασης δίνεται από τη εξίσωση 9 (Σελ. 45):

$$k = 4,48 * 10^8 * \exp\left(\frac{-5400}{20}\right) = 4,42 \text{ m}^3 / \text{mol} * \text{s}$$

Έπειτα, γίνεται ο υπολογισμός του παράγοντα ενίσχυσης της απορρόφησης, E από την εξίσωση 11 (Σελ. 46).

Ο παράγοντας αυτός εξαρτάται από την παράμετρο E_∞ , και τον αριθμό Hatta (Ha).

Η παράμετρος E_∞ υπολογίζεται από την εξίσωση 11i όπως φαίνεται παρακάτω:

$$E_\infty = 1 + \frac{D_{MEA} * C_{MEA} * Henry}{2 * D_{CO2} * p_{CO2}}$$

Από τα παραπάνω μεγέθη που απαιτούνται για τον υπολογισμό της παραμέτρου E_∞ έχουν υπολογιστεί όλα, εκτός της τιμής της μερικής πίεσης του διοξειδίου του άνθρακα στην διεπιφάνεια αερίου-υγρού (p_{CO2}). Η τιμή αυτή δεν είναι άμεσα υπολογίσιμη με αποτέλεσμα να γίνεται εκτίμηση της τιμής αυτής. Η εκτίμηση γίνεται με την παραδοχή της αμελητέας αντίστασης στο αέριο φιλμ, δηλαδή στην ουσία η μερική πίεση στον κύριο όγκο του αερίου (η οποία είναι γνωστή) είναι ίση με την μερική πίεση στην διεπιφάνεια αερίου-υγρού.

Συνεπώς η 11i θα λάβει την μορφή:

$$E_{\infty} = 1 + \frac{7,78 * 10^{-10} * 2,5 * 10^3 * 2348}{2 * 1,35 * 10^{-9} * 1528} = 1107$$

Ο αριθμός Hatta δίνεται ως εξής:

$$Ha = \frac{(1,35 * 10^{-9} * 4,44 * 2,5 * 10^3)^{1/2}}{33,8 * 10^{-5}} = 16$$

Με την αντικατάσταση των μεγεθών αυτών στην εξίσωση 11 έχουμε:

$$E = \left[\frac{(2^2 * (1104 - 1) * 1104)}{1 + 11,5^2} \right]^{1/2} * \frac{1 + 11,5^2}{2 * (1104 - 1)} = 16$$

Έπειτα από τον υπολογισμό και του παράγοντα αύξησης, παραλαμβάνεται η γενική εξίσωση της ταχύτητας (Σχ.10 Σελ. 45) για την αντίδραση:

$$\begin{aligned} -r_{CO_2} &= \frac{1511}{\frac{2348}{0,25 * 3600 * 85} + \frac{2348}{0,00025 * 3600 * 16 * 85} + \frac{2348}{4,42 * 2,5 * 1000 * 0,1}} \rightarrow -r_{CO_2} \\ &= \frac{1511}{0,03 + 1,93 + 0,00059} = 767 \text{ mol/m}^3 * h \end{aligned}$$

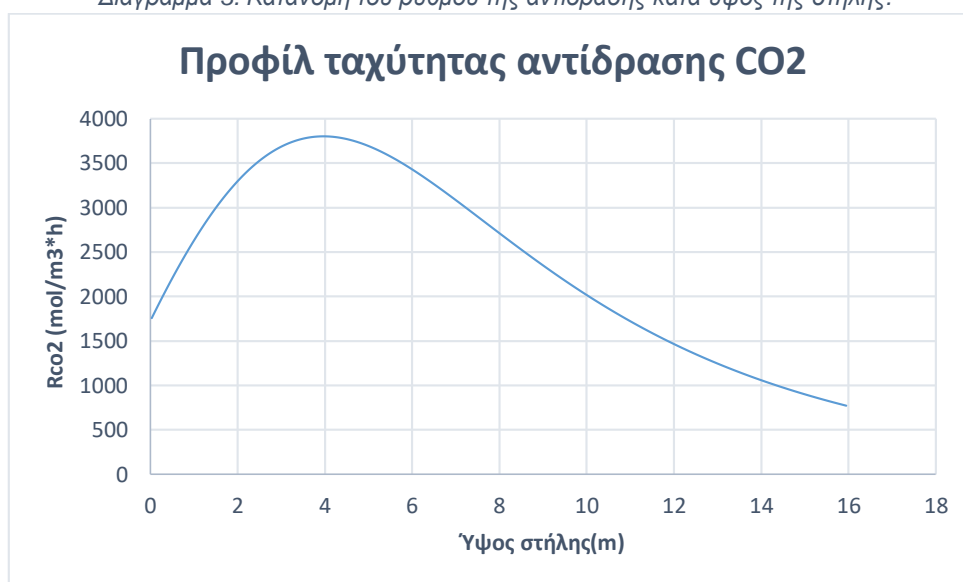
Στην παραπάνω εξίσωση ταχύτητας, ο 1^{ος} παράγοντας του παρονομαστή του κλάσματος δηλώνει στην αντίσταση από το αέριο φιλμ, ο 2^{ος} παράγοντας δηλώνει την αντίσταση από το υγρό φιλμ ενώ ο 3^{ος} παράγοντας την αντίσταση από την κύρια μάζα του υγρού. Από το παραπάνω η αντίσταση του αερίου φιλμ αποτελεί το 1,53% της συνολικής αντίστασης της διεργασίας, η αντίσταση του υγρού φιλμ αποτελεί το 98,44% της συνολικής αντίστασης ενώ η αντίσταση στην κύρια μάζα του υγρού αποτελεί μόλις το 0,03 % της συνολικής αντίστασης.

5 Αποτελέσματα επίλυσης.

Κατά αντιστοιχία γίνεται επίλυση σε όλο το ύψος της στήλης, υπολογίζοντας τους συντελεστές μεταφοράς μάζας και διάχυσης σε κάθε στοιχειώδες κομμάτι της στήλης.

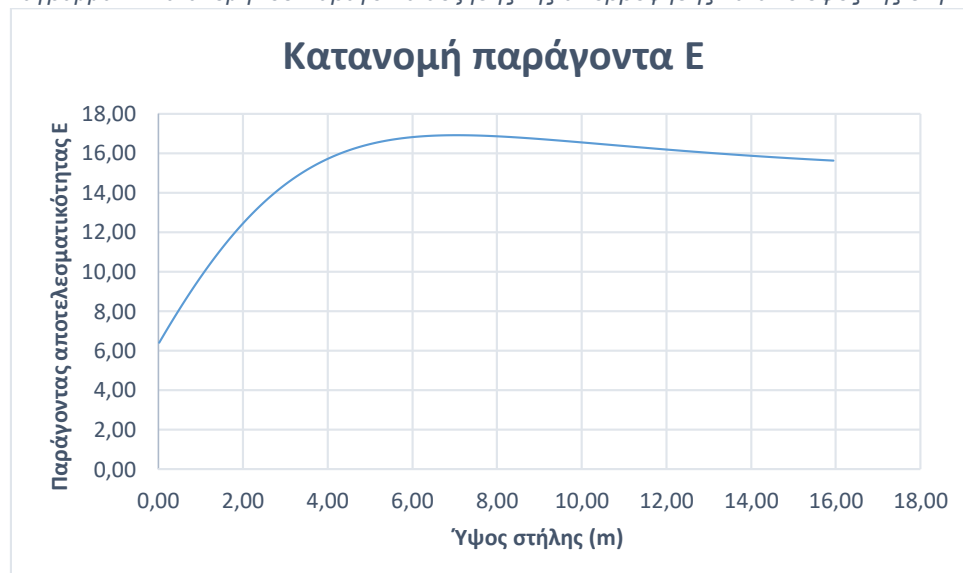
Δημιουργείται το προφίλ της ταχύτητας αντίδρασης του διοξειδίου του άνθρακα (Διάγραμμα 3) (Ως σημείο 0 ορίζεται ο πυθμένας της στήλης):

Διάγραμμα 3. Κατανομή του ρυθμού της αντίδρασης κατά ύψος της στήλης.



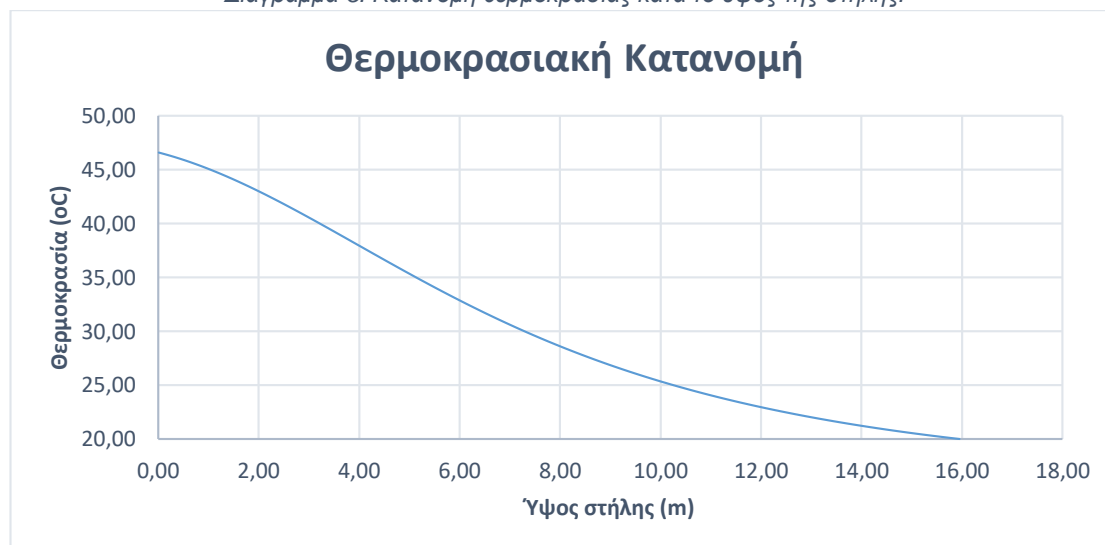
Στο Διάγραμμα 4 που ακολουθεί απεικονίζεται η κατανομή του παράγοντα αύξησης της απορρόφησης στο ύψος της στήλης:

Διάγραμμα 4. Κατανομή του παράγοντα αύξησης της απορρόφησης κατά το ύψος της στήλης.



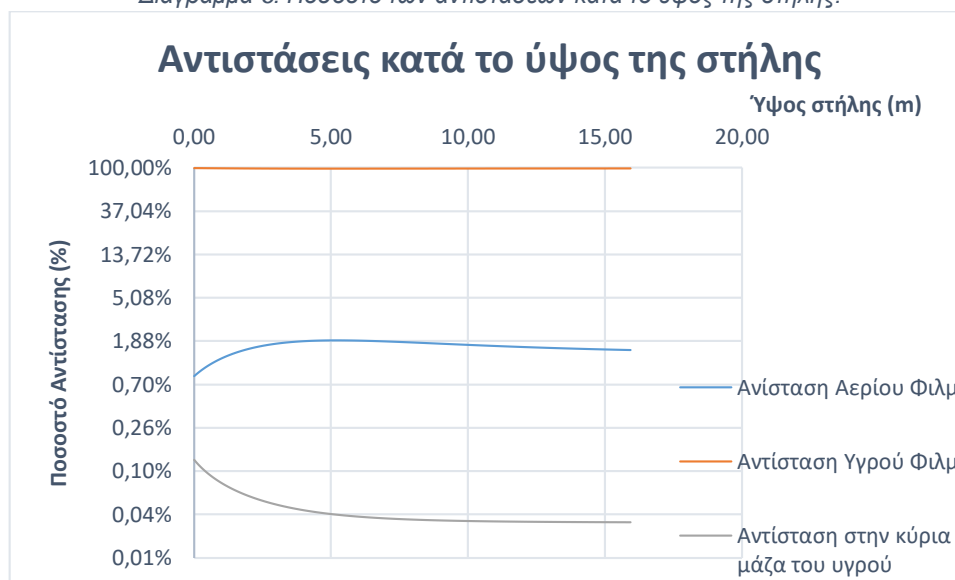
Ενώ στο Διάγραμμα 5 παρουσιάζεται η θερμοκρασία κατά το ύψος της στήλης:

Διάγραμμα 5. Κατανομή θερμοκρασίας κατά το ύψος της στήλης.



Στο λογαριθμικό Διάγραμμα 6 παρουσιάζεται το ποσοστό των αντιστάσεων κατά το ύψος της στήλης.

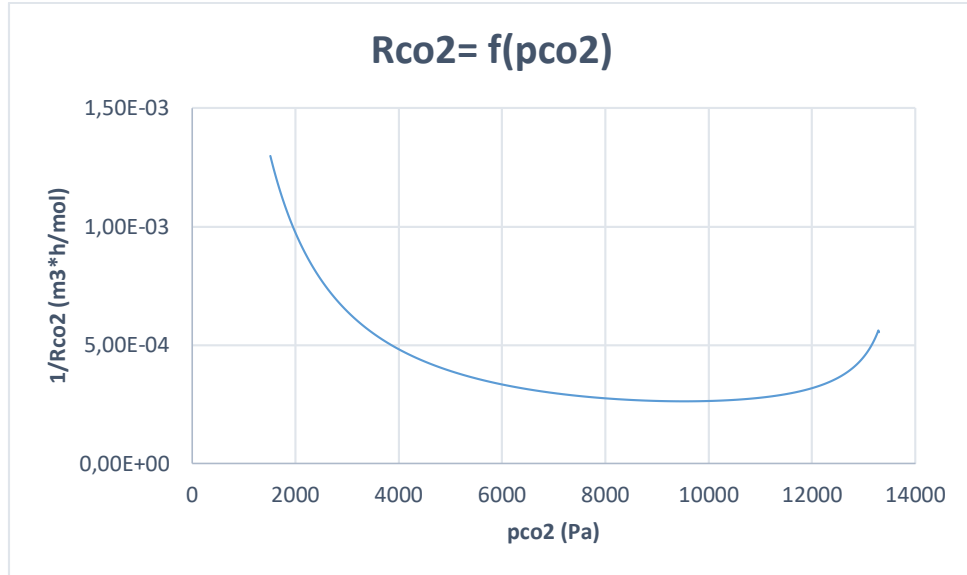
Διάγραμμα 6. Ποσοστό των αντιστάσεων κατά το ύψος της στήλης.



5.1 Εύρεση όγκου στήλης.

Εν συνεχεία για την εύρεση του ύψους της στήλης απαιτείται η γραφική ολοκλήρωση της εξίσωσης λειτουργίας (Διάγραμμα 7) ^[16].

Διάγραμμα 7. Γραφική αναπαράσταση εξίσωσης λειτουργίας.



Το εμβαδόν που ορίζει το παραπάνω διάγραμμα αντιστοιχεί στο ολοκλήρωμα της εξίσωσης (Σχ.12 Σελ.47):

$$Εμβαδόν = \frac{V * \pi}{F_g}$$

Όπου:

V όγκος στήλης (m^3).

π πίεση αερίου (Pa).

F_g γραμμομοριακή παροχή αερίου (mol/h).

Το παραπάνω εμβαδόν υπολογίστηκε με τον κανόνα του τραπεζίου (βλ. Παράρτημα Δ).

Επιλύοντας τον παραπάνω τύπο ως προς τον όγκο της στήλης, λαμβάνεται:

$$V = \frac{F_g * Εμβαδόν}{\pi} = \frac{2640 * 10^3 * 6,19}{10^5} = 163,3 m^3$$

Έχοντας γνωστά την διάμετρο και το εμβαδόν της στήλης υπολογίζεται και το ύψος της στήλης: **$h=15,9m$** .

Συνοπτικά τα αποτελέσματα του μοντέλου παρουσιάζονται στον παρακάτω πίνακα (Πίνακας 16):

Πίνακας 16. Συνοπτική παρουσίαση αποτελεσμάτων.

Είσοδος υγρού	257,22	m³/h
Συγκέντρωση ΜΕΑ	15,3 (ή 2,5)	% w/w (ή kmol/m³)
Συγκέντρωση CO₂ στο υγρό στην είσοδο	0	mol CO₂/mol MEA
Συγκέντρωση CO₂ στο υγρό στην έξοδο	0,484	mol CO₂/mol MEA
Είσοδος Αερίου	2640	kmol/h
Συγκέντρωση CO₂, εισόδου	13,3	% v/v
Μερική Πίεση CO₂, εισόδου	13300	Pa
Ποσοστό Απομάκρυνσης	90	%
Συγκέντρωση CO₂, εξόδου	1,5	% v/v
Μερική Πίεση CO₂, εξόδου	1511	Pa
Θερμοκρασία εισόδου	20	°C
Θερμοκρασία εξόδου	46,6	°C
Διάμετρος Στήλης	3,6	m
Εμβαδόν Στήλης	10,3	m²
Όγκος Στήλης	163,3	m³
Ύψος Στήλης	15,9	m
Ταχύτητα αντίδρασης CO₂, στην είσοδο του υγρού	1757	mol/m³·h
Ταχύτητα αντίδρασης CO₂, στην έξοδο του υγρού	770	mol/m³·h

Ακολουθεί συνοπτικός πίνακας (Πίνακας 17) αποτελεσμάτων κατά το ύψος της στήλης.

Πίνακας 17. Συνοπτικός Πίνακας αποτελεσμάτων βασικού σεναρίου.

A/A	Ύψος στήλης	Ύψος στήλης (%)	Pco2 out (Pa)	Cmea (kmol/m ³)	k (m ³ /mol*s)	kl (10 ⁴ *m/s)	kg (10 ² *m/s)	E	Rco2 (mol/m ³ *h)
1	0,0	0	13300	0,08	20,54	3,75	28,01	6,4	1757
2	0,8	5	12778	0,19	19,30	3,68	27,88	9,1	2491
3	1,6	10	12093	0,33	17,77	3,59	27,70	11,5	3080
4	2,4	15	11283	0,49	16,10	3,49	27,48	13,3	3498
5	3,2	20	10393	0,68	14,42	3,39	27,25	14,7	3734
6	4,0	25	9466	0,87	12,84	3,29	27,01	15,7	3802
7	4,8	30	8540	1,06	11,42	3,19	26,77	16,3	3726
8	5,6	35	7646	1,24	10,18	3,09	26,53	16,7	3544
9	6,4	40	6806	1,41	9,13	3,01	26,32	16,9	3293
10	7,2	45	6033	1,57	8,25	2,93	26,12	16,9	3006
11	8,0	50	5332	1,72	7,51	2,86	25,93	16,9	2708
12	8,8	55	4703	1,84	6,90	2,80	25,77	16,7	2417
13	9,6	60	4144	1,96	6,40	2,74	25,63	16,6	2144
14	10,4	65	3649	2,06	5,98	2,69	25,50	16,5	1893
15	11,2	70	3212	2,15	5,63	2,65	25,39	16,3	1667
16	12,0	75	2828	2,23	5,34	2,61	25,29	16,2	1465
17	12,8	80	2491	2,30	5,09	2,58	25,20	16,0	1287
18	13,6	85	2195	2,36	4,89	2,55	25,13	15,9	1130
19	14,4	90	1934	2,41	4,71	2,53	25,06	15,8	993
20	15,2	95	1706	2,46	4,56	2,51	25,00	15,7	872
21	16,0	100	1509	2,50	4,44	2,49	24,95	15,6	769

6 Ευαισθησία αποτελεσμάτων.

Στην συνέχεια παρουσιάζονται τα αποτελέσματα που προκύπτουν με ορισμένες αλλαγές στο βασικό σενάριο που εξετάστηκε. Τα σενάρια προκύπτουν από τα εξής:

1. Φυσική Ρόφηση
2. Ισοθερμοκρασιακή Απορρόφηση
3. Αλλαγή της συγκέντρωσης CO₂ στην ΜΕΑ.
4. Αλλαγή απαίτησης του ποσοστού απομάκρυνσης CO₂.
5. Αλλαγή στην συγκέντρωση της ΜΕΑ στο υδατικό διάλυμα.
6. Παραλαβή διαφορετικής συγκέντρωσης CO₂ στο αέριο εισόδου.

6.1 Σενάριο 1ο.

Αρχικά, εξετάζεται ένα σενάριο δίχως την παρουσία μονοαιθανολαμίνης στο υδατικό διάλυμα. Στο σενάριο αυτό το υδατικό διάλυμα αποτελείται μόνο από νερό και η απορρόφηση του διοξειδίου δεν γίνεται πλέον με χημική αλλά με φυσική ρόφηση.

Για το σενάριο αυτό επιλέγεται η ίδια ποσότητα διαλύτη εν συγκρίσει με το βασικό σενάριο που επιλύθηκε.

Στον Πίνακα 18 παρουσιάζονται οι αλλαγές που παρατηρήθηκαν.

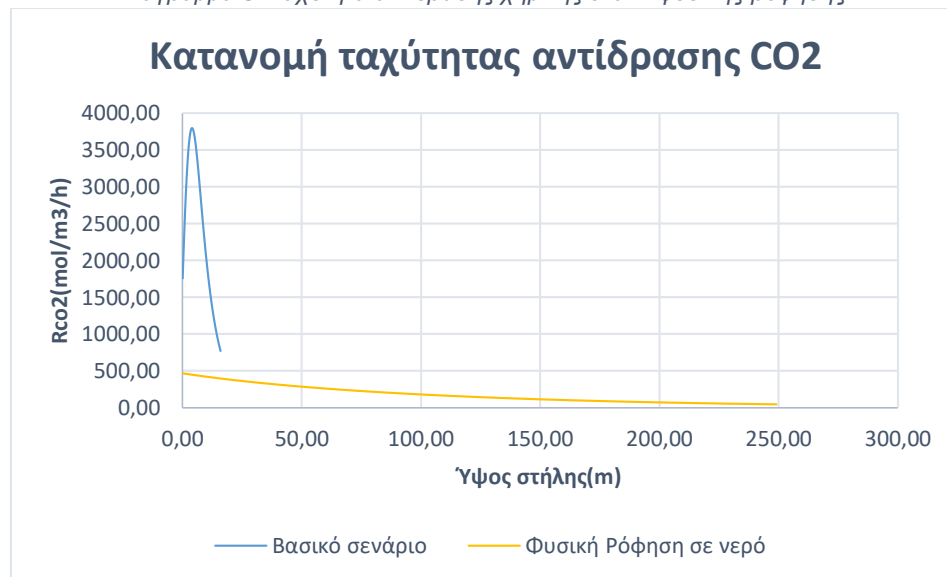
Πίνακας 18. Φυσική Ρόφηση για την απορρόφηση CO₂.

	Αρχικό Σενάριο	Φυσική Ρόφηση
L_{in} (m³/h)	257	257
T_{out} (°C)	46,5	20
Διάμετρος (m)	3,6	3,6
Όγκος (m³)	163,3	2547
Ύψος (m)	15,9	250
Ρυθμός αντίδρασης, πυθμένα (mol/m³ * h)	1757	467

Ρυθμός αντίδρασης, κορυφής ($\text{mol}/\text{m}^3 * \text{h}$)	770	50
-------------------------------------------------------------------	-----	----

Όπως φαίνεται η στήλη απορρόφησης με φυσική ρόφηση απαιτεί πολλαπλάσιο όγκο όπως και ύψος στήλης.

Διάγραμμα 8. Ταχύτητα αντίδρασης χημικής έναντι φυσικής ρόφησης.



Στο Διάγραμμα 8 φαίνεται η διαφορά στην ταχύτητα αντίδρασης του διοξειδίου ανάμεσα στην χημική και στην φυσική απορρόφηση.

6.2 Σενάριο 2°.

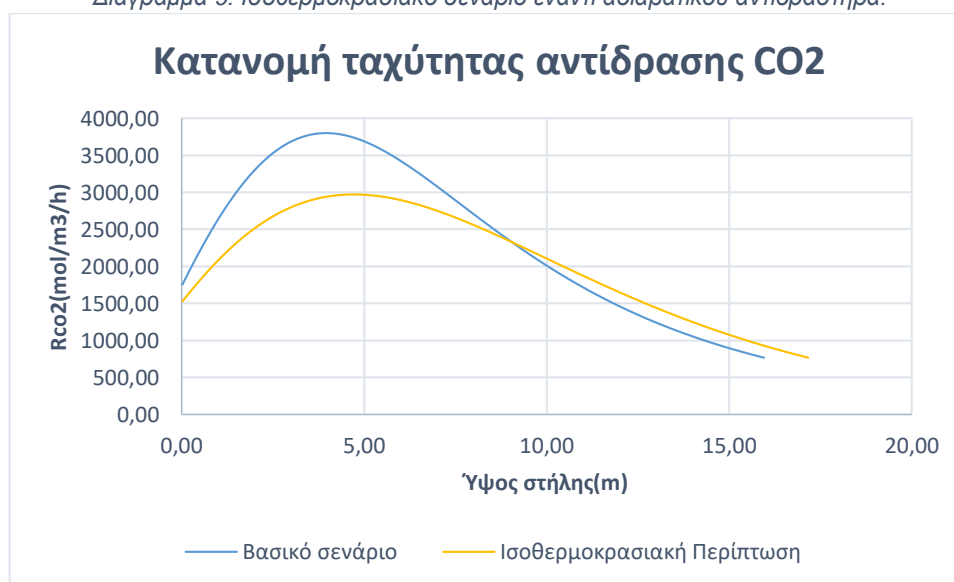
Στο δεύτερο αυτό σενάριο εξετάστηκε η επίδραση που θα υπάρξει στην περίπτωση που η διεργασία λάβει μέρος σε πύργο απορρόφησης χωρίς αδιαβατικά τοιχώματα. Πιο συγκεκριμένα επιλέχθηκε να εξεταστεί πύργος απορρόφησης ο οποίος θα λειτουργεί ισοθερμοκρασιακά, σε θερμοκρασία ίση με την θερμοκρασία περιβάλλοντος (20 °C)(Πίνακας 19).

Πίνακας 19. Αποτελέσματα στήλης σε ισοθερμοκρασιακή λειτουργία.

	Αρχικό Σενάριο	Ισοθερμοκρασιακός Πύργος
L_{in} (m ³ /h)	257	257
T_{out} (°C)	46,5	20
Διάμετρος (m)	3,6	3,6
Όγκος (m ³)	163	175
Ύψος (m)	15,9	17,2
Ρυθμός αντίδρασης, πυθμένα ($mol/m^3 * h$)	1757	1530
Ρυθμός αντίδρασης, κορυφής ($mol/m^3 * h$)	770	770

Η διαφορά ανάμεσα στην ταχύτητα της αντίδρασης στα δύο σενάρια που εξετάζονται παρουσιάζεται στο Διάγραμμα 9.

Διάγραμμα 9. Ισοθερμοκρασιακό σενάριο έναντι αδιαβατικού αντιδραστήρα.



6.3 Σενάριο 3°.

Στο βασικό σενάριο θεωρήθηκε τόσο η αρχική όσο και η τελική συγκέντρωση του διοξειδίου του άνθρακα εντός της αμίνης (0 στην περίπτωση εισόδου του

υδατικού διαλύματος και 0,484 στην έξοδο του υγρού). Η εξέταση διαφορετικών σεναρίων κρίνεται απαραίτητη καθώς τόσο στην είσοδο όσο και στην έξοδο οι συγκεντρώσεις μπορεί να μην ανταποκρίνεται στην πραγματικότητα. Διότι, κατά την είσοδο του υγρού ο διαλύτης δεν θα είναι καθαρός (εκτός αν λαμβάνεται συνεχώς καθαρός διαλύτης), εφόσον εισέρχεται στην στήλη έπειτα από την ανάκτηση του. Επιπλέον, γνωρίζοντας πως η θερμοδυναμική ισορροπία είναι μια κατάσταση ιδανική, μπορεί να επιλεγεί τιμή συγκέντρωσης διοξειδίου του άνθρακα στην έξοδο σε χαμηλότερη τιμή από της ισορροπίας.

Στο σενάριο αυτό εξετάστηκαν τρεις περιπτώσεις (Πίνακας 20):

Πίνακας 20. Στοιχεία 3ου εναλλακτικού σεναρίου.

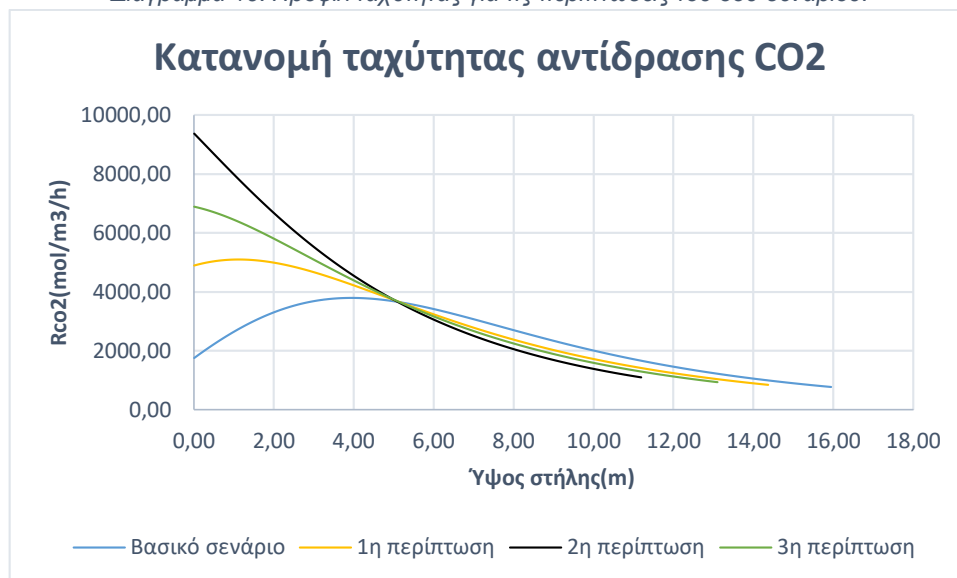
Συγκέντρωση $\text{CO}_2/\text{mol MEA}$	Mol Αρχικό σενάριο	1 ^η	2 ^η	3 ^η
Lean _{MEA}	0	0,1	0,1	0
Rich _{MEA}	0,484	0,484	0,3	0,3

Οι αλλαγές που παρατηρήθηκαν συνοψίζονται στον Πίνακα 21:

Πίνακας 21. Διαφοροποίηση αποτελεσμάτων για το 3ο σενάριο.

	Αρχικό Σενάριο	1 ^η	2 ^η	3 ^η
L _{in} (m ³ /h)	257	324	622	415
T _{out} (°C)	46,5	41	31	36
Διάμετρος (m)	3,6	3,65	3,7	3,62
Όγκος (m ³)	163	147	114	134
Ύψος (m)	15,9	14,3	11,2	13,1
Ρυθμός αντίδρασης, πυθμένα ($\text{mol}/\text{m}^3 * \text{h}$)	1757	4890	9372	6894
Ρυθμός αντίδρασης, κορυφής ($\text{mol}/\text{m}^3 * \text{h}$)	770	844	1099	933

Διάγραμμα 10. Προφίλ ταχύτητας για τις περιπτώσεις του 3ου σεναρίου.



Από το Διάγραμμα 10 διαπιστώνεται πως ο ρυθμός της ταχύτητας της αντίδρασης αυξάνεται σε κάθε επιμέρους περίπτωση του σεναρίου που εξετάζεται, οδηγώντας και σε μείωση του ύψους της στήλης.

6.4 Σενάριο 4^ο.

Το σενάριο αυτό επιλέχθηκε να εξεταστεί καθώς οι περιβαλλοντικές απαιτήσεις πιθανόν να είναι αυστηρότερες και συνεπώς η απομάκρυνση που εξετάστηκε να μην επαρκεί (90%). Στο σενάριο αυτό εξετάστηκαν δύο πιθανές απαιτήσεις απομάκρυνσης διοξειδίου (Πίνακας 22):

Πίνακας 22. Στοιχεία 4ου εναλλακτικού σεναρίου.

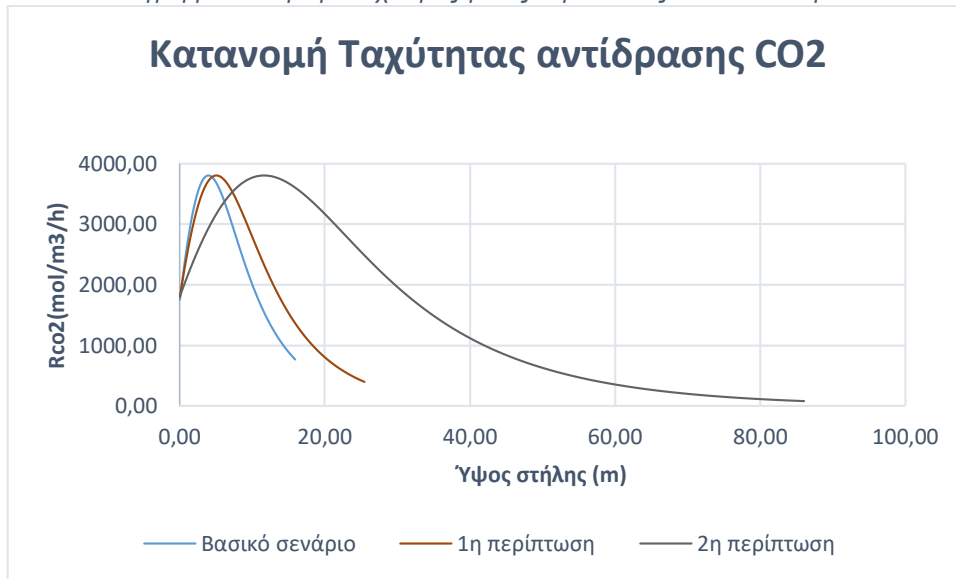
	Αρχικό σενάριο	1^η	2^η
% of CO₂ removal	90	95	99

Τα αποτελέσματα προέκυψαν ως εξής (Πίνακας 23).

Πίνακας 23. Διαφοροποίηση αποτελεσμάτων στο 4ο σενάριο.

	Αρχικό Σενάριο		
	1 ^η	2 ^η	
L_{in} (m ³ /h)	257	273	287
$P_{CO_2,out}$ (Pa)	1511	761	153
Όγκος (m ³)	163	260	880
Ύψος (m)	15,9	25,4	86
Ρυθμός αντίδρασης, πυθμένα ($mol/m^3 * h$)	1757	1802	1837
Ρυθμός αντίδρασης, κορυφής ($mol/m^3 * h$)	770	397	81

Διάγραμμα 11. Προφίλ ταχύτητας για τις περιπτώσεις του 4ου σεναρίου.



Το Διάγραμμα 11 παρουσιάζει τα ίδια προφίλ στην ταχύτητα αντίδρασης. Η εκάστοτε διαφορά φαίνεται στην αύξηση της απαίτησης του ποσοστού απομάκρυνσης του διοξειδίου του άνθρακα. Όπως είναι λογικό, για μεγαλύτερο ποσοστό απομάκρυνσης απαιτείται μεγαλύτερο ύψος στήλης. Αξίζει να σημειωθεί πως όσο μεγαλώνει η ακρίβεια της απομάκρυνσης τόσο αυξάνεται ο ρυθμός αύξησης του ύψους της στήλης.

6.5 Σενάριο 5°.

Στο σενάριο αυτό εξετάστηκε κατά πόσο η περιεκτικότητα της αμίνης στο υδατικό διάλυμα επηρεάζει την διεργασία. Οι περιπτώσεις που εξετάστηκαν (Πίνακας 24) καθώς και τα αποτελέσματα αυτών (Πίνακας 25) παρουσιάζονται παρακάτω:

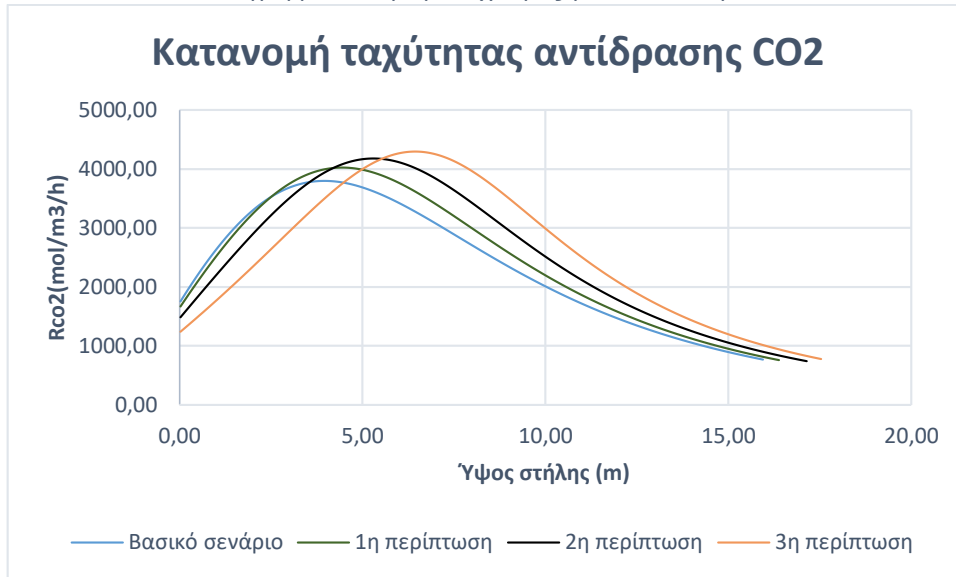
Πίνακας 24. Στοιχεία 5ου εναλλακτικού σεναρίου.

	Αρχικό	1^η	2^η	3^η
	σενάριο			
%w/w ΜΕΑ	15	20	25	30
C_{ΜΕΑ} (kmol/m³)	2,5	3,3	4	4,9

Πίνακας 25. Αποτελέσματα 5ου σεναρίου.

	Αρχικό Σενάριο	1^η	2^η	3^η
L_{in} (m³/h)	257	197	157	131
T_{out} (°C)	46,5	54,8	63,5	72
Διάμετρος (m)	3,6	3,5	3,5	3,4
Όγκος (m³)	163	161	162	157
Ύψος (m)	15,9	16,4	17	17,5
Ρυθμός αντίδρασης, πυθμένα (mol/m³ * h)	1757	1668	1484	1240
Ρυθμός αντίδρασης, κορυφής (mol/m³ * h)	770	792	811	827

Διάγραμμα 12. Προφίλ ταχύτητας για το 5ο σενάριο.



Από τα παραπάνω αποτελέσματα (Διάγραμμα 12) συμπεραίνεται πως εξάρτηση της διεργασίας από την συγκέντρωση της αμίνης στο υδατικό διάλυμα είναι μικρή. Μάλιστα αυξημένη συγκέντρωση οδηγεί σε ελαφρώς μειωμένο ρυθμό ταχύτητας.

6.6 Σενάριο 6°.

Εφόσον το αέριο προέρχεται από κάποια βιομηχανία, είναι φυσικό επόμενο να μην έχει σε κάθε περίπτωση ίδια σύσταση σε διοξείδιο του άνθρακα. Οι εξής περιπτώσεις μελετήθηκαν (Πίνακας 26), συνοψίζοντας και τις αλλαγές (Πίνακας 27) που επέφεραν.

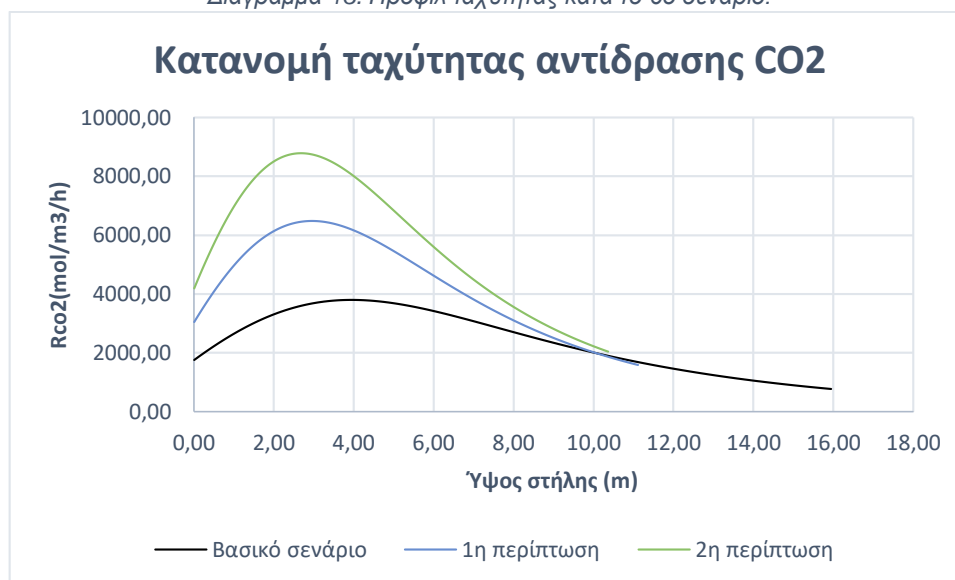
Πίνακας 26. Στοιχεία 6ου σεναρίου.

	Αρχικό σενάριο	1^η	2^η
%v/vCO_{2in}	13,3	20	25

Πίνακας 27. Αποτελέσματα του σεναρίου.

	Αρχικό Σενάριο	1 ^η	2 ^η
L_{in} (m³/h)	257	383	475
P_{CO₂,out} (Pa)	1511	2439	3226
Διάμετρος (m)	3,64	3,8	3,8
Όγκος (m³)	163	125	120
Ύψος (m)	15,9	11,1	10,4
Ρυθμός αντίδρασης, πυθμένα ($mol/m^3 * h$)	1757	3055	4195
Ρυθμός αντίδρασης, κορυφής ($mol/m^3 * h$)	770	1400	1998

Διάγραμμα 13. Προφίλ ταχύτητας κατά το 6ο σενάριο.



Το Διάγραμμα 13 παρουσιάζει πως η αυξημένη συγκέντρωση διοξειδίου του άνθρακα στο αέριο που εισέρχεται οδηγεί σε αύξηση της μέγιστης ταχύτητας της διεργασίας. Μάλιστα, καθώς η ταχύτητα της αντίδρασης εξαρτάται από την πίεση του CO₂, η οποία έχει αυξηθεί στο σενάριο αυτό, προκύπτουν και χαμηλότερα ύψη στηλών. Βεβαίως, καθώς όσο αυξάνεται η συγκέντρωση εισόδου του διοξειδίου τόσο η απομάκρυνση που έχει οριστεί (90%) κρίνεται ανεπαρκής.

6.7 Συνδυαστικό σενάριο.

Τέλος, εξετάστηκε ένα ακόμα τελευταίο σενάριο το οποίο περιέχει διάφορες περιπτώσεις (Πίνακας 28) όλων των σεναρίων που παρουσιάστηκαν. Τα αποτελέσματα αυτού παρουσιάζονται στον Πίνακα 29.

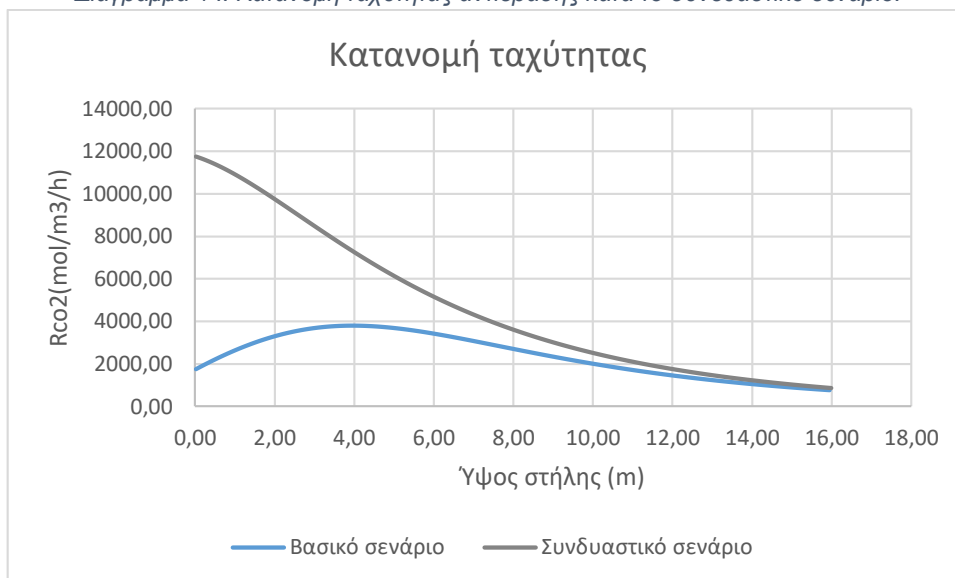
Πίνακας 28. Μελέτη ενός συνδυαστικού σεναρίου.

	Αρχικό σενάριο	Συνδυαστικό Σενάριο
$P_{CO_2,in}$ (Pa)	13300	20000
Lean_{MEA} (mol CO₂/mol MEA)	0	0,1
Rich_{MEA} (mol CO₂/mol MEA)	0,484	0,4
% of CO₂ removal	90	95

Πίνακας 29. Αποτελέσματα συνδυαστικού σεναρίου.

	Αρχικό Σενάριο	Συνδυαστικό Σενάριο
L_{in} (m³/h)	257	660
$P_{CO_2,out}$ (Pa)	1511	1234
Διάμετρος (m)	3,64	3,9
Όγκος (m³)	163	191
Ύψος (m)	15,9	16
Ρυθμός αντίδρασης, πυθμένα ($mol/m^3 * h$)	1757	11753
Ρυθμός αντίδρασης, κορυφής ($mol/m^3 * h$)	770	862

Διάγραμμα 14. Κατανομή ταχύτητας αντίδρασης κατά το συνδυαστικό σενάριο.



Κατά το συνδυαστικό σενάριο που εξετάστηκε παρουσιάστηκε η μέγιστη τιμή του ρυθμού (Διάγραμμα 14) της αντίδρασης της διεργασίας, με ένα ύψος στήλης απορρόφησης στα 16m. Μάλιστα το συνδυαστικό σενάριο αυτό, ίσως είναι το κοντινότερο δυνατό σε πραγματικές συνθήκες απομάκρυνσης, καθώς η απαίτηση απομάκρυνσης του διοξειδίου είναι αυξημένη και κυρίως διότι ο διαλύτης που εισέρχεται εντός της στήλης απορρόφησης δεν είναι καθαρός από διοξείδιο του άνθρακα, γεγονός που οφείλεται στην ανάκτησή του.

Οι συνοπτικοί πίνακες αποτελεσμάτων για τα σενάρια αυτά (κατ' αντιστοιχία με τον Πίνακα 17 Σελ. 70) παρουσιάζονται στο Παράρτημα Ε.

7 Συζήτηση αποτελεσμάτων.

Η προσομοίωση που αναπτύχθηκε παρουσιάζει αποτελέσματα ικανοποιητικά σε όλα τα πιθανά σενάρια που εξετάστηκαν, σύμφωνα με ποιοτικά αποτελέσματα που προέρχονται από την βιβλιογραφία.

Στα σενάρια που εξετάστηκαν απαιτείται μια στήλη απορρόφησης παρόμοιας διαμέτρου (κοντά στα 3,6 m). Η τιμή αυτή της διαμέτρου κρίνεται υψηλή για στήλες με πληρωτικό υλικό καθώς σύμφωνα με την βιβλιογραφία ^[18] η διάμετρος των στηλών απορρόφησης με τυχαία κατανομημένο πληρωτικό υλικό κυμαίνεται στο ένα μέτρο. Παρ' όλα αυτά υπάρχουν περιπτώσεις και εταιρείες

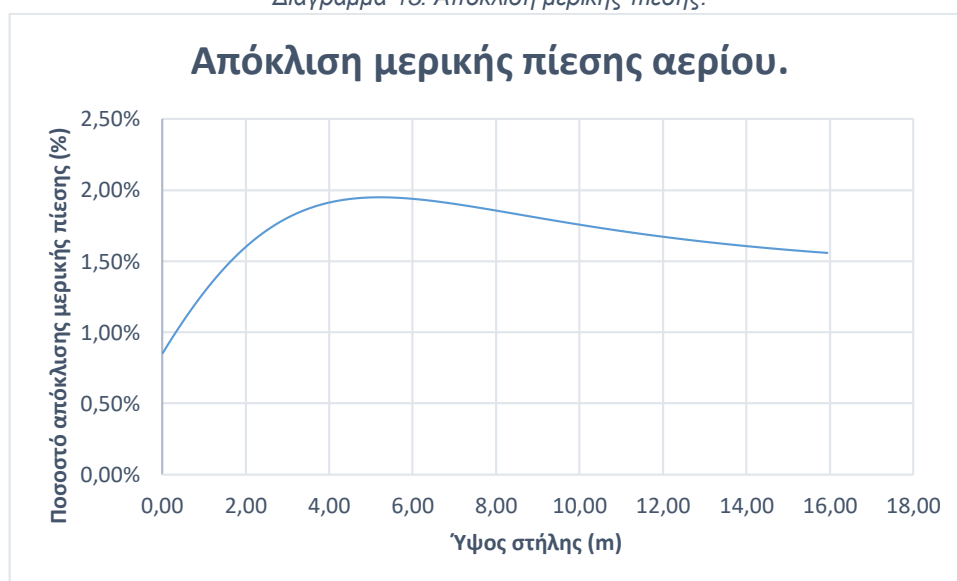
που σχεδιάζουν στήλες οι οποίες μπορεί να φτάσουν έως μια διάμετρο 8 μέτρων. Η ασυμφωνία αυτή πιθανόν να οφείλεται στην ανάπτυξη της τεχνολογίας από την στιγμή που συγγράφθηκε η βιβλιογραφία.

Λαμβάνοντας υπόψιν το Διάγραμμα 6 (Σελ. 67), καθώς και την έκφραση του ρυθμού της αντίδρασης ως:

$$-r_{CO_2} = k_g * a * (p_{CO_2} - p_{CO_2,i})$$

με $p_{CO_2,i}$ την μερική πίεση του διοξειδίου του άνθρακα στην διεπιφάνεια αερίου-υγρού, παραλαμβάνεται το Διάγραμμα 15, όπου παρατηρείται η απόκλιση της μερικής πίεσης του διοξειδίου στον κύριο όγκο του αερίου εν συγκρίσει με την μερική πίεση του διοξειδίου στην διεπιφάνεια αερίου-υγρού.

Διάγραμμα 15. Απόκλιση μερικής πίεσης.



Σύμφωνα με τα παραπάνω επιβεβαιώνεται η αμελητέα αντίσταση στο αέριο φιλμ. Συνεπώς, συμπεραίνεται πως η κύρια αντίσταση σε όλη την στήλη είναι αυτή του υγρού φιλμ.

Κατά την εξέταση των διαφόρων σεναρίων που αναπτύχθηκαν, η μεγαλύτερη διαφορά των αποτελεσμάτων σημειώθηκε στην φυσική ρόφηση. Στο σενάριο αυτό, μελετήθηκε η διαφορά που θα υπάρξει στην περίπτωση που υπάρχει αλλαγή της ρόφησης από χημική σε φυσική. Η φυσική ρόφηση, σύμφωνα με τα αποτελέσματα, απαιτεί όγκο στήλης περίπου δεκαπενταπλάσιο από αυτόν της χημικής ρόφησης. Πιο συγκεκριμένα, η φυσική ρόφηση απαιτεί έναν όγκο της τάξης των 2550 m³, ενώ η χημική ρόφηση έναν όγκο της τάξης των 163 m³. Στο

ύψος της στήλης, μεταφράζεται ως 249 μέτρα έναντι 15,9 μέτρων, αύξηση της τάξης του 1400%. Η διαφορά είναι μεγάλη αποδεικνύοντας την προτίμηση της χημικής έναντι της φυσικής ρόφησης.

Στο ισοθερμοκρασιακό σενάριο που εξετάστηκε, ο ρυθμός της διεργασίας μειώθηκε στα υψηλά κομμάτια της στήλης, ενώ παρέμεινε σταθερός κοντά στον πυθμένα της στήλης. Αυτό οφείλεται στο γεγονός πως στον πυθμένα της στήλης η θερμοκρασία έχει μικρή μεταβολή, εφόσον η χημική αντίδραση δεν έχει μεταβάλει σημαντικά την θερμοκρασία. Τελικώς, η μείωση του ρυθμού της αντίδρασης στα υψηλά σημεία της στήλης, οδηγεί σε μία αύξηση του απαιτούμενου ύψος της στήλης απορρόφησης κατά 1,5 μέτρα, αύξηση 8%.

Κατά το σενάριο όπου μελετήθηκε η επίδραση της συγκέντρωσης του Διοξειδίου στο υδατικό διάλυμα, παρατηρήθηκε πως αύξηση της συγκέντρωσης του Διοξειδίου στο υδατικό διάλυμα της MEA οδηγεί στην αύξηση της παροχής του απαιτούμενου υδατικού διαλύματος και στην αύξηση του ρυθμού της αντίδρασης και συνεπώς στην μείωση του όγκου και του ύψους της στήλης. Αρχικά, καθώς τα όρια της συγκέντρωσης του διοξειδίου μειώνονται απαιτείται μεγαλύτερη ποσότητα διαλύτη για να απομακρύνει την ίδια ποσότητα διοξειδίου. Αντίθετα, ο ρυθμός της αντίδρασης αυξάνεται και συνεπώς η μεταφορά μάζας και η αντίδραση του διοξειδίου οδηγώντας στην μείωση τελικά του όγκου και συνεπώς και του ύψους της στήλης απορρόφησης.

Το επόμενο σενάριο που εξετάστηκε είναι η επίδραση που θα έχει η αλλαγή του ποσοστού απομάκρυνσης του διοξειδίου από το αέριο ρεύμα. Η αλλαγή αυτή ήταν αναμενόμενη, οδηγώντας στην αύξηση του όγκου της στήλης και του ύψους αυτής καθώς και της παροχής του υδατικού διαλύματος. Η αλλαγή οφείλεται στην συγκέντρωση του διοξειδίου του άνθρακα στην αέρια φάση. Εφόσον ο ρυθμός της διεργασίας είναι ανάλογος της συγκέντρωσης στην αέρια φάση, όσο μεγαλύτερη απομάκρυνση απαιτείται, και συνεπώς συγκέντρωση αέριας φάσης, τόσο ο ρυθμός θα μειώνεται οδηγώντας σε πολύ μικρούς ρυθμούς αντίδρασης στην κορυφή της στήλης από όπου εξέρχεται το αέριο. Μάλιστα, το ύψος της στήλης απορρόφησης αυξάνεται εκθετικά με το ποσοστό απομάκρυνσης. Ενδεικτικά, αύξηση του ποσοστού απομάκρυνσης κατά 5% (από 90% σε 95%) οδηγεί σε αύξηση του ύψους κατά 60% (από 15,9 σε 25,5

μέτρα), ενώ αύξηση κατά 9% (από 90% σε 99%) οδηγεί σε αύξηση κατά 440% του ύψους (από 15,9 σε 86 μέτρα)

Το σενάριο κατά το οποίο εξετάστηκε αλλαγή της συγκέντρωσης ΜΕΑ στο υδατικό διάλυμα, παρουσίασε την μικρότερη απόκλιση από το βασικό σενάριο. Τόσο ο ρυθμός της αντίδρασης του διοξειδίου όσο και ο όγκος και το ύψος της στήλης παρέμειναν στα ίδια επίπεδα με το βασικό σενάριο που εξετάστηκε, ενώ η σημαντική διαφορά που σημείωσε, αποτελεί την μείωση της παροχής του υδατικού διαλύματος που απαιτείται για την απορρόφηση. Κατά την σταθεροποίηση της ροής του υδατικού διαλύματος στην ροή του βασικού σεναρίου, παρουσιάστηκε μικρή απόκλιση του ύψους της στήλης. Πιο συγκεκριμένα, αύξηση της συγκέντρωσης της ΜΕΑ στο υδατικό διάλυμα κατά 5%, 10%, 15% υπολογίστηκε μείωση του ύψους της στήλης κατά 2%, 3% και 3,5% αντίστοιχα.

Επιπλέον, στο σενάριο στο οποίο αυξήθηκε η συγκέντρωση του διοξειδίου του άνθρακα στο αέριο ρεύμα, παρουσιάστηκε αύξηση του ρυθμού της αντίδρασης (εφόσον ο ρυθμός είναι ανάλογος με την συγκέντρωση) και συνεπώς μείωση του όγκου και του ύψους της στήλης.

Τέλος, το συνδυαστικό σενάριο που επιλέχθηκε, μπορεί να ερμηνευθεί χρησιμοποιώντας τα αποτελέσματα όλων των υπολοίπων σεναρίων που εξετάστηκαν. Η παραλαβή υδατικού διαλύματος με αρχική συγκέντρωση σε διοξείδιο του άνθρακα καθώς και η ύπαρξη μεγαλύτερης ποσότητας διοξειδίου στο αέριο ρεύμα, οδηγούν στην αύξηση της παροχής του υδατικού διαλύματος παράλληλα με την αύξηση του ρυθμού της αντίδρασης. Ενώ η αύξηση της παροχής οδηγεί στην αύξηση του απαιτούμενου όγκου της στήλης, το ύψος της στήλης παραμένει σταθερό και ίσο με το βασικό σενάριο καθώς αυξήθηκε η απαιτούμενη διάμετρος της στήλης.

Συμπεράσματα.

Στο βασικό σενάριο που μελετήθηκε λαμβάνοντας ένα αέριο ρεύμα ποσότητας 2640 kmol/h, απαιτήθηκαν 257 m³/h υδατικού διαλύματος ΜΕΑ, συγκέντρωσης 2,5 kmol/h, για τον καθαρισμό του αερίου κατά 90% από το διοξείδιο του άνθρακα. Η στήλη απορρόφησης απαιτεί διάμετρο 3,6 μέτρων και ύψους 15,9 μέτρων, με κεραμικό πληρωτικό υλικό BerlSaddle. Τα παραπάνω αποτελέσματα κρίνονται ικανοποιητικά, βασιζόμενα στην βιβλιογραφία ^{[5],[11],[12]}.

Η χρήση στήλης απορρόφησης με τυχαία διαταγμένο πληρωτικό υλικό περιορίζεται από τις ροές του υγρού και του αερίου ρεύματος. Καθώς η διάμετρος της στήλης αυξάνεται με αύξηση της ροής, η στήλη περιορίζεται σε χαμηλές ροές και σε πιλοτική κλίμακα. Για την χρήση στήλης απορρόφησης μεγάλης βιομηχανικής κλίμακας, απαιτείται η ύπαρξη διατεταγμένου πληρωτικού υλικού ή δίσκων.

Σύμφωνα με την εξίσωση του ρυθμού, η μεγαλύτερη αντίσταση στην διεργασία που εξετάστηκε είναι η αντίσταση στο υγρό φιλμ. Όπως φαίνεται, η αντίσταση στο αέριο φιλμ καθώς και η αντίσταση στην κύρια μάζα του υγρού είναι αμελητέες.

Αντικείμενο για περαιτέρω μελέτη στην παρούσα εργασία, θα μπορούσε να αποτελέσει η ανάπτυξη της προσομοίωσης για το τμήμα της εκγύμνωσης του διαλύτη, όπου λαμβάνεται το διοξείδιο του άνθρακα από την μία και ανακτάται ο διαλύτης από την άλλη επιστρέφοντας στην στήλη απορρόφησης. Τέλος, η μελέτη διατεταγμένου πληρωτικού υλικού θα αποτελούσε απαραίτητη προϋπόθεση για την μεταφορά του μοντέλου σε βιομηχανική κλίμακα.

Βιβλιογραφία.

1. en.wikipedia.org/wiki/Carbon_dioxide (2018)
2. webelements.com/compounds/carbon/carbon_dioxide (2018)
3. Working Group III (2005), "Carbon Dioxide Capture and Storage", Report of the Intergovernmental Panel on Climate Change (IPCC), Bert Metz, Ogunlade Davidson, Helen de Coninck, Manuela Loos, Leo Meyer, Published by Cambridge University Press, Chapter 3
4. tools.bp.com/energy-charting-tool.aspx (2018)
5. Mohammad R.M. Aby Zahra (2009). "Carbon Dioxide Capture from Flue Gas", Chapter 1. Printpartners Ipskamp B. V.
6. Maryam Takht Ravanchi, Saeed Sahebdehfar, Farnaz Tahriri Zangeneh (2011), "Carbon dioxide sequestration in petrochemical industries with the aim of reduction in greenhouse gas emissions, Chemical Science Engineering Journal vol.5(2) pg.173-178
7. Jason E. Bara (2012), "What chemicals will we need to capture CO₂", Greenhouse Gas Sci Technology vol.2 pg.162-171.
8. APEC Energy Working Group (2009), "Building capacity for CO₂ capture and storage in the apec region, A training manual for policy makers and practitioners", Jennifer Harwood, The Delphi Group, Module 2.
9. M. Olivares-Marin, M. Maroto-Valer (2012), "Development of adsorbents for CO₂ capture from waste materials: a review", Greenhouse Gas Sci Technology vol.2 pg.20-35.
10. CO₂ Capture Project (2008), "Three basic methods to separate gases".
11. Β.Γ. Μαντζουράνης, Ι.Κ. Μαραγκόζης (1971), "Υπολογισμός εγκαταστάσεων χημικών διεργασιών βάσει θεωρητικών προτύπων: 1. Πύργος χημικής ρόφησης αερίων", Τεχνικά Χρονικά τεύχος 10, σελ. 673-691.
12. L. Faramarzi, G.M. Kontogeorgis, M.L. Michelsen, K. Thomsen, E.H. Stenby (2010), "Absorber model for CO₂ capture by Monoethanolamine", Industrial & Engineering Chemistry Research vol.49, pg.3751-3759.

13. H. Hikita, S. Asai, H. Ishikawa, M. Honda (1977), "The Kinetics of Reactions of Carbon Dioxide with Monoethanolamine, Diethanolamine, and Triethanolamine by a Rapid Mixing Method", *Chemical Engineering Journal*, 13, pg.7–12.
14. G.F. Versteeg, L. van Dijk, W.P.M. van Swaaij (1996), "On the kinetics between CO₂ and alkanolamines both in aqueous and non-aqueous solutions, an overview", *Chemical Engineering Community*, 144, pg.113-158.
15. S. Y. Horng, M. H. Li (2002), "Kinetics of absorption of carbon dioxide into aqueous solution of monoethanolamine + triethanolamine", *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 49, pg.257-266.
16. Octave Levenspiel (1999), "Chemical reaction engineering third edition", John Wiley and Sons, inc.
17. R. Billet, M. Schultes (1999), "Prediction of mass transfer columns with dumped and arranged packings updated summary of the calculation method of Billet and Schultes", *Chemical Engineering Research & Design*, 77, pg.498-504.
18. W.L. McCabe, J.C. Smith, P. Harriot (2014), "Unit operations of chemical engineers 6th edition", McGraw-Hill., chapter 18.
19. A.M. Arias, P.L. Mores, N.J. Scenna, S.F. Mussati (2016), "Optimal design and sensitivity analysis of post-combustion CO₂ capture process by chemical absorption with amines", *Journal of Cleaner Production*, 115, pg.315-331.
20. B.E. Poling, J.M. Prausnitz, J.P. O'Connell (2001), "The properties of gases and liquids fifth edition", McGraw-Hill, chapter 11.
21. Y.W. Wang, S. Xu, F.D. Otto, A.E. Mather (1991), "Solubility of N₂O in alkanolamines and in mixed solvents", *The Chemical Engineering Journal*, 48, pg.31-40.
22. J.J. Ko, T.C. Tsai, C.Y. Lin, H.M. Wang, M.H. Li (2001), "Diffusivity of nitrous oxide in aqueous alkanolamine solutions", *J. Chemical Engineering Data*, 46, pg.160-165.
23. E.D. Snijder, M.J.M. te Riele, G.F. Versteeg, W.P.M. van Swaaij (1993), "Diffusion Coefficients of several aqueous alkanolamine solutions", *J. Chemical Engineering Data*, 38, pg.475-480.

24. cheresources.com/content/articles/separation-technology/packed-column-design (2018)
25. J.A. Rocha, J.L. Bravo, J.R. Fair (1996), "Distillation columns containing structured packings: a comprehensive model for their performance. Mass transfer model", *Industrial & Engineering Chemistry Research* vol.35, pg.1660-1667.
26. K. Onda, H. Takeuchi, Y.Okumoto (1968), "Mass transfer coefficients between gas and liquid phases in packed columns", *Journal of Chemical Engineering Japan*, vol.1, pg56-62.
27. globalccsinstitute.com/projects/large-scale-ccs-projects (2018)
28. uop.com/?document=uop-selexol-technology-for-acid-gas-removal (2018)
29. I.Y. Mohammed, M. Salah, A. Mohamed, G. Sabina (2014), "Comparison of Selexol and Rectisol technologies in an integrated gasification combined cycle (igcc) plant for clean energy production" *International Journal of Engineering Research*, vol.3, pg 742-744.
30. B. Burr, L.Lyddon, " A comparison of physical solvents for acid gas removal", Bryan Research and Engineering, Inc.
31. F. Chu, L. Yang, X. Du, Y. Yang (2017), "Mass transfer and energy consumption for CO₂ absorption by ammonia solution in bubble column", *Applied Energy*, vol.190, pg 1068-1080.
32. A.B. Lopez, M.D. La Rubia, J.M. Navaza, R. Pacheco, D. Gomez-Diaz (2014), "Carbon dioxide absorption in triethanolamine aqueous solutions: Hydrodynamics and mass transfer", *Chemical Engineering Technology*, vol.37 No.3, pg 419-426.
33. en.m.wikipedia.org/wiki/Petra_Nova (2018)
34. D.P. Hanak, E.J.Anthony, V. Manovic (2015), "A review of developments in pilot-plant testing and modelling of calcium looping process for CO₂ capture from power generation systems", *Energy & Environmental Science*, vol.8, pg.2199-2249.
35. separationprocesses.com/Operations/Table20 (2018)
36. amacs.com/ (2018)
37. thermopedia.com/content/696/ (2018)

- 38.Δ.Κ. Ασημακόπουλος, Β.Ι. Λυγερού, Γ.Α. Αραμπατζής (2012), “Μεταφορά θερμότητας και μάζας”, Εκδόσεις Παπασωτηρίου, κεφάλαιο 17.
- 39.Δ.Π. Τασσιός (2001), “Εφαρμοσμένη θερμοδυναμική χημικής μηχανικής”, Πανεπιστημιακές Εκδόσεις Ε.Μ.Π., κεφάλαιο 8, παράρτημα Δ.
- 40.revisionmaths.com (2018)

Παράρτημα.

A. Συντελεστές μεταφοράς μάζας.

Στην παρούσα εργασία επιλέχθηκαν και χρησιμοποιήθηκαν οι συσχετίσεις που αναπτύχθηκαν από τον Billet ^[17] και τους συνεργάτες του. Ενδιαφέρον παρουσιάζει η διαφορά που θα παρουσιάζαν τα αποτελέσματα σε περίπτωση που λαμβανόταν μια διαφορετική βιβλιογραφική αναφορά. Το μοντέλο που αναπτύχθηκε από τον Rocha ^[25] και τους συνεργάτες του αφορά στήλες με διατεταγμένο πληρωτικό υλικό και συνεπώς δεν δύναται να χρησιμοποιηθεί. Αντίθετα, η δουλειά των Onda, Takeuchi και Okumoto ^[26] μπορεί να μας δώσει μια προσέγγιση των συντελεστών μεταφοράς μάζας τόσο στην υγρή όσο και στην αέρια φάση. Παρακάτω (Πίνακες 30 & 31) παρουσιάζονται τόσο οι διαφορές ανάμεσα στις δύο βιβλιογραφικές πηγές (17 και 26) για τους συντελεστές μεταφοράς μάζας στην υγρή και στην αέρια φάση, όσο και η διαφορά που παρουσιάζεται στα αποτελέσματα με την χρήση αυτών.

Πίνακας 30. Διαφορές στους συντελεστές μεταφοράς μάζας.

	(m/s)	Αναφορά 17	Αναφορά 26
Πυθμένας	kg (*10 ²)	28	11,2
	kl (*10 ⁴)	3,74	2,48
Κορυφή	kg (*10 ²)	24,9	10,1
	kl (*10 ⁴)	2,49	1,65

Πίνακας 31. Διαφορές στα αποτελέσματα του μοντέλου.

	Αναφορά 17	Αναφορά 26	
Όγκος Στήλης	163	167,2	m ³
Ύψος Στήλης	15.9	16,3	m
Ταχύτητα αντίδρασης CO₂, στην είσοδο του υγρού	1757	1722	mol/m ³ ·h
Ταχύτητα αντίδρασης CO₂, στην έξοδο του υγρού	770	752	mol/m ³ ·h

Από τα παραπάνω παρατηρείται πως ενώ οι διαφορές στις τιμές των συντελεστών διαφέρουν σημαντικά (απόκλιση 33% και 60% για την υγρή και την αέρια φάση αντίστοιχα) η διαστασιολόγηση της στήλης και ο ρυθμός της αντίδρασης διαφέρουν σε μικρότερο βαθμό (~3% απόκλιση στον όγκο της στήλης και το ύψος της και ~2% απόκλιση στον ρυθμό αντίδρασης του διοξειδίου). Με τα παραπάνω αποτελέσματα γίνεται αντιληπτό πως η αναφορά 26 αποτελεί μία πιο συντηρητική προσέγγιση στον σχεδιασμό της στήλης απορρόφησης.

B. Πληρωτικά υλικά.

Το πληρωτικό υλικό που χρησιμοποιήθηκε είναι το κεραμικό σάγμα Berl διαμέτρου δεκατριών χιλιοστών. Ωστόσο διαφορετικά πληρωτικά υλικά με διαφορετικά χαρακτηριστικά θα παρουσιάσουν και διαφορές στα αποτελέσματα του μοντέλου.

Αρχικά, οι διαφορές αυτές θα παρατηρηθούν στις ταχύτητες τόσο του υγρού όσο και του αερίου καθώς θα προσφέρουν διαφορετική επιφάνεια επαφής μεταξύ των δύο φάσεων. Επιπλέον, τόσο οι συντελεστές μεταφοράς μάζας όσο και η διαστασιολόγηση του πύργου θα διαφέρουν.

Στην βιβλιοθήκη του μοντέλου, υπάρχουν στοιχεία και χαρακτηριστικά και άλλων πληρωτικών υλικών, όπως αυτά λήφθηκαν από την βιβλιογραφία. ^[17]

Τα πληρωτικά αυτά υλικά είναι:

- Berl Saddle, 13mm
- Berl Saddle, 25mm
- Rasching Ring, 25mm
- Rasching Ring, 50mm

Τα χαρακτηριστικά αυτών παρουσιάζονται στον Πίνακα 32.

Πίνακας 32. Χαρακτηριστικά Πληρωτικών υλικών.

Πληρωτικό	Berl Saddle	Berl Saddle	Rasching Ring	Rasching Ring
Size (mm)	13	25	25	50
Packing Surface Area (m ² /m ³)	545	260	190	95
Void Fraction	0,65	0,68	0,68	0,83
Hydraulic Diameter of packing (m)	0,0047	0,0100	0,0143	0,0349
C _g	0,232	0,387	0,0412	0,21
C _l	1,364	1,246	1,361	1,416
A _e (1/m)	85,9	102,7	96	126
Ch	0,83	0,62	0,58	0,58
A _h	404	191	126	85
H _l	0,11	0,06	0,05	0,03
F _p	240	110	155	65

Οι διαφορές στα αποτελέσματα συνοψίζονται στον Πίνακα 33.

Πίνακας 33. Παρουσίαση διαφορών στα αποτελέσματα με την επιλογή διαφορετικού πληρωτικού υλικού.

Πληρωτικό	Berl Saddle 13mm	Berl Saddle 25mm	Rasching Ring 25mm	Rasching Ring 50mm
kg (κορυφής) (*10 ² m/s)	24,9	42,8	36,5	17,5
kl (κορυφής) (*10 ⁴ m/s)	2,49	2,45	2,20	2,05
u _{liquid} (*10 ⁴ m/s)	69,8	103,3	87,2	134,6
u _{gas} (m/s)	1,7	2,6	2,2	3,4
Διάμετρος (m)	3,61	2,97	3,23	2,6
Επιφάνεια (m ²)	10,2	6,9	8,2	5,3
Όγκος Στήλης (m ³)	163,3	135,5	145,3	112
Ύψος Στήλης (m)	15,9	19,6	17,7	21,1
Ταχύτητα αντίδρασης CO ₂ , στην είσοδο του υγρού (mol/m ³ ·h)	1757	2107	1963	2559

Ταχύτητα αντίδρασης CO ₂ , στην έξοδο του υγρού (mol/m ³ ·h)	770	926	864	1122
------------------------------------------------------------------------------------------	-----	-----	-----	------

Από τον παραπάνω πίνακα γίνεται αντιληπτό πως το πληρωτικό υλικό Rasching Ring καθώς και η αύξηση του μεγέθους του πληρωτικού Berl Saddle οδηγούν στην αύξηση των ταχυτήτων των δύο φάσεων. Αποτέλεσμα αυτών είναι η μείωση της διαμέτρου της στήλης. Επιπλέον, η ταχύτητα αντίδρασης του διοξειδίου αυξάνεται γεγονός που οδηγεί στην μείωση του απαιτούμενου όγκου της στήλης. Παρ' όλα αυτά, στο ύψος της στήλης παρατηρείται αύξηση καθώς έχει μειωθεί η επιφάνεια της στήλης.

Γ. Χρήση Solver.

Για την επίλυση της προσομοίωσης χρησιμοποιείται η βοήθεια του υπολογιστικού εργαλείου Solver του Excel. Η χρήση αυτού γίνεται για την εύρεση του όγκου της στήλης καθώς και του προφίλ της συγκέντρωσης του Διοξειδίου του Άνθρακα στην αέρια φάση. Πιο συγκεκριμένα, γνωρίζοντας τις αρχικές και τελικές συνθήκες τόσο του υγρού όσο και του αέριου ρεύματος, ορίζεται μια βοηθητική μεταβλητή (dummy variable), με την βοήθεια της οποίας επιλύεται η διαφορική εξίσωση της συγκέντρωσης του διοξειδίου του άνθρακα. Η διαφορική εξίσωση έχει την μορφή:

$$\frac{dp_{CO_2}}{dV} = -r_{CO_2}$$

Η διαφορική αυτή επιλύεται με την μέθοδο αριθμητικής ανάλυσης Runge-Kutta.

Κατά την λύση της διαφορικής, βρίσκεται τόσο το προφίλ της συγκέντρωσης του διοξειδίου του άνθρακα όσο και το προφίλ της ταχύτητας της αντίδρασης του. Συνεπώς, υπολογίζεται και ο αρχικός όγκος της στήλης, μέσω της ταχύτητας της αντίδρασης. Η απόκλιση των τιμών αυτών από τις αναμενόμενες τελικές συνθήκες, οδηγεί στον εκ νέου υπολογισμό της βοηθητικής μεταβλητής. Με την χρήση του Solver, υπολογίζεται η βοηθητική μεταβλητή ώστε η απόκλιση αυτή να μηδενιστεί.

Συμπερασματικά, ο ορισμός μιας βοηθητικής μεταβλητής οδηγεί στον αρχικό υπολογισμό του όγκου της στήλης απορρόφησης και των τελικών συνθηκών της απορρόφησης. Με την χρήση του Solver, μηδενίζεται η απόκλιση των τελικών συνθηκών από αυτές που έχουν υπολογιστεί.

Δ. Κανόνας τραπεζίου.

Για την ολοκλήρωση μιας γραφικής παράστασης, ακολουθείται μια διαμέριση του γραφήματος σε πολλά επιμέρους τραπέζια. Η λογική βρίσκεται στον διαχωρισμό της γραφικής παράστασης σε πολλά τμήματα, έτσι ώστε να μπορούν να θεωρηθούν ευθύγραμμα. Εν συνεχεία, δημιουργούνται τραπέζια των οποίων το εμβαδόν είναι άμεσα υπολογίσιμο. Αθροίζοντας τα επιμέρους εμβαδά όλων των τραπεζίων που δημιουργούνται λαμβάνεται και το ολικό εμβαδόν που ορίζει η γραφική παράσταση. ^[40]

Υπολογισμός.

Για δεδομένη γραφική παράσταση (f) απαιτείται ολοκλήρωση στο διάστημα $[\alpha, \beta]$ γνωστά τα $f(\alpha)$ και $f(\beta)$.

Αλγόριθμος:

1^ο βήμα: Ορισμός αριθμού τραπεζίων N .

2^ο βήμα: υπολογισμός απόστασης $\beta - \alpha$.

3^ο βήμα: υπολογισμός αθροίσματος των $2 \cdot f(i)$, με $i=1, \dots, n$.

4^ο βήμα: υπολογισμός του παράγοντα $h = (\beta - \alpha) / (N - 1)$.

5^ο βήμα: εύρεση εμβαδού, $E = [h/2 \cdot (f(\alpha) + f(\beta) + 2 \cdot f(i))]$.

Ε. Πίνακες αποτελεσμάτων σεναρίων.

Πίνακας 34. Σενάριο 1α: Φυσική Ρόφηση

Δεδομένα		A/A	Ύψος στήλης	Ύψος στήλης (%)	P _{co2 out} (Pa)	kl (10 ⁴ *m/s)	kg (10 ² *m/s)	R _{co2} (mol/m ³ *h)
L (m ³ /h)	257,22	1	0,2	0	13300	2,79	24,96	467
%w/w MEA	0	2	12,7	5	11877	2,73	24,96	411
C _{MEA} (kmol/m ³)	0	3	25,2	10	10617	2,69	24,96	364
Lean (mol CO ₂ /mol MEA)	-	4	37,6	15	9499	2,66	24,96	323
		5	50,1	20	8506	2,63	24,96	288
Rich (mol CO ₂ /mol MEA)	-	6	62,5	25	7620	2,61	24,96	257
		7	75,0	30	6830	2,60	24,96	229
P _{co2,in} (Pa)	13300	8	87,5	35	6124	2,58	24,96	205
% removal	90	9	99,9	40	5492	2,57	24,95	183
P _{co2,out} (Pa)	1510	10	112,4	45	4927	2,56	24,95	164
T _{in} (°C)	20	11	124,8	50	4421	2,55	24,95	147
T _{out} (°C)	20	12	137,3	55	3968	2,54	24,95	132
Diameter (m)	3,61	13	149,8	60	3562	2,53	24,95	118
Volume (m ³)	2547	14	162,2	65	3198	2,53	24,95	106
Height (m)	249,2	15	174,7	70	2871	2,52	24,95	95
		16	187,1	75	2578	2,51	24,95	85
		17	199,6	80	2315	2,51	24,95	76
		18	212,1	85	2080	2,51	24,95	69
		19	224,5	90	1868	2,50	24,95	62
		20	237,0	95	1678	2,50	24,95	55
		21	249,2	100	1511	2,50	24,95	50

Πίνακας 35. Σενάριο 2ο: Ισοθερμοκρασιακή Στήλη.

Δεδομένα		A/A	Ύψος στήλης	Ύψος στήλης (%)	P _{co2 out} (Pa)	C _{mea} (kmol/m ³)	k (m ³ /mol*s)	kl (10 ⁴ *m/s)	kg (10 ² *m/s)	E	R _{co2} (mol/m ³ *h)
L (m ³ /h)	257,22	1	0,0	0	13300	0,08	4,44	2,77	24,95	3,3	1531
%w/w MEA	15,3	2	0,9	5	12793	0,18	4,44	2,75	24,95	4,6	2023
C _{MEA} (kmol/m ³)	2,5	3	1,7	10	12159	0,31	4,44	2,73	24,95	5,8	2418
Lean (mol CO ₂ /mol MEA)	0	4	2,6	15	11428	0,46	4,44	2,70	24,95	6,9	2704
		5	3,4	20	10630	0,63	4,44	2,68	24,95	8,0	2883
Rich (mol CO ₂ /mol MEA)	0,484	6	4,3	25	9795	0,80	4,44	2,66	24,95	8,9	2965
		7	5,2	30	8949	0,97	4,44	2,63	24,95	9,8	2963
P _{co2,in} (Pa)	13300	8	6,0	35	8114	1,14	4,44	2,61	24,95	10,6	2894
% removal	90	9	6,9	40	7305	1,31	4,44	2,60	24,95	11,4	2772
P _{co2,out} (Pa)	1510	10	7,7	45	6537	1,47	4,44	2,58	24,95	12,0	2613
T _{in} (°C)	20	11	8,6	50	5818	1,62	4,44	2,57	24,95	12,6	2430
T _{out} (°C)	20	12	9,5	55	5153	1,75	4,44	2,55	24,95	13,1	2234
Diameter (m)	3,61	13	10,3	60	4545	1,88	4,44	2,54	24,95	13,6	2034
Volume (m ³)	175	14	11,2	65	3994	1,99	4,44	2,53	24,95	14,0	1835
Height (m)	17,2	15	12,0	70	3498	2,09	4,44	2,52	24,95	14,3	1644
		16	12,9	75	3056	2,18	4,44	2,52	24,95	14,6	1464
		17	13,7	80	2662	2,26	4,44	2,51	24,95	14,9	1297
		18	14,6	85	2315	2,33	4,44	2,50	24,95	15,1	1144
		19	15,5	90	2009	2,40	4,44	2,50	24,95	15,3	1005
		20	16,3	95	1741	2,45	4,44	2,49	24,95	15,5	879
		21	17,2	100	1511	2,50	4,44	2,49	24,95	15,6	770

Πίνακας 36. Σενάριο 3ο: Αλλαγή της συγκέντρωσης CO2 στην MEA, 1η περίπτωση.

Δεδομένα		A/A	Ύψος στήλης	Ύψος στήλης (%)	P _{co2 out} (Pa)	C _{mea} (kmol/m ³)	k (m ³ /mol*s)	kl (10 ⁴ *m/s)	kg (10 ² *m/s)	E	R _{co2} (mol/m ³ *h)
L (m ³ /h)	324,2	1	0,0	0	13300	0,58	15,29	3,72	27,83	13,0	4890
%w/w MEA	15,3	2	0,7	5	12288	0,74	13,84	3,62	27,62	14,0	5070
C _{MEA} (kmol/m ³)	2,5	3	1,5	10	11257	0,91	12,49	3,52	27,40	14,7	5079
Lean (mol CO ₂ /mol MEA)	0,1	4	2,2	15	10239	1,08	11,27	3,43	27,19	15,2	4947
		5	2,9	20	9259	1,24	10,20	3,34	26,98	15,5	4711
Rich (mol CO ₂ /mol MEA)	0,484	6	3,6	25	8334	1,39	9,27	3,26	26,79	15,6	4405
		7	4,3	30	7476	1,53	8,48	3,19	26,61	15,7	4061
P _{co2,in} (Pa)	13300	8	5,0	35	6689	1,66	7,80	3,12	26,45	15,6	3704
% removal	90	9	5,8	40	5973	1,77	7,23	3,06	26,30	15,6	3351
P _{co2,out} (Pa)	1510	10	6,5	45	5328	1,88	6,75	3,00	26,16	15,5	3014
T _{in} (°C)	20	11	7,2	50	4750	1,97	6,34	2,95	26,04	15,4	2699
T _{out} (°C)	41	12	7,9	55	4232	2,06	6,00	2,91	25,93	15,3	2410
Diameter (m)	3,61	13	8,6	60	3770	2,13	5,70	2,87	25,84	15,1	2148
Volume (m ³)	147	14	9,4	65	3359	2,20	5,45	2,84	25,75	15,0	1912
Height (m)	14,4	15	10,1	70	2993	2,26	5,24	2,81	25,68	14,9	1701
		16	10,8	75	2668	2,31	5,05	2,78	25,61	14,8	1512
		17	11,5	80	2378	2,36	4,89	2,76	25,55	14,7	1345
		18	12,2	85	2121	2,40	4,75	2,74	25,50	14,7	1196
		19	13,0	90	1892	2,44	4,63	2,72	25,45	14,6	1064
		20	13,7	95	1689	2,47	4,53	2,70	25,41	14,5	947
		21	14,4	100	1511	2,50	4,44	2,69	25,37	14,5	845

Πίνακας 37. Σενάριο 3ο: Αλλαγή της συγκέντρωσης CO₂ στην MEA, 2η περίπτωση.

Δεδομένα		A/A	Ύψος στήλης	Ύψος στήλης (%)	P _{co2 out} (Pa)	C _{mea} (kmol/m ³)	k (m ³ /mol*s)	kl (10 ⁴ *m/s)	kg (10 ² *m/s)	E	R _{co2} (mol/m ³ *h)
L (m ³ /h)	622,5	1	0,0	0	13300	1,50	8,64	3,98	28,52	12,6	9373
%w/w MEA	15,3	2	0,6	5	11968	1,61	8,03	3,90	28,37	12,6	8587
C _{MEA} (kmol/m ³)	2,5	3	1,1	10	10752	1,72	7,51	3,84	28,23	12,6	7814
Lean (mol CO ₂ /mol MEA)	0,1	4	1,7	15	9648	1,81	7,06	3,78	28,10	12,5	7074
		5	2,3	20	8651	1,89	6,68	3,72	27,98	12,5	6379
Rich (mol CO ₂ /mol MEA)	0,3	6	2,8	25	7753	1,97	6,35	3,67	27,88	12,4	5737
		7	3,4	30	6946	2,04	6,07	3,63	27,78	12,3	5149
P _{co2,in} (Pa)	13300	8	3,9	35	6223	2,10	5,83	3,59	27,70	12,3	4615
% removal	90	9	4,5	40	5574	2,16	5,61	3,56	27,63	12,2	4133
P _{co2,out} (Pa)	1510	10	5,1	45	4994	2,20	5,43	3,53	27,56	12,1	3699
T _{in} (°C)	20	11	5,6	50	4475	2,25	5,27	3,50	27,50	12,1	3310
T _{out} (°C)	30,9	12	6,2	55	4010	2,29	5,13	3,47	27,44	12,0	2961
Diameter (m)	3,61	13	6,7	60	3594	2,32	5,01	3,45	27,40	11,9	2650
Volume (m ³)	114	14	7,3	65	3222	2,35	4,90	3,43	27,35	11,9	2371
Height (m)	11,2	15	7,8	70	2889	2,38	4,81	3,41	27,32	11,8	2122
		16	8,4	75	2591	2,41	4,73	3,40	27,28	11,8	1900
		17	9,0	80	2324	2,43	4,65	3,38	27,25	11,8	1701
		18	9,5	85	2085	2,45	4,59	3,37	27,22	11,7	1524
		19	10,1	90	1871	2,47	4,53	3,36	27,20	11,7	1365
		20	10,6	95	1679	2,49	4,48	3,35	27,18	11,7	1223
		21	11,2	100	1511	2,50	4,44	3,34	27,16	11,7	1099

Πίνακας 38. Σενάριο 3ο: Αλλαγή της συγκέντρωσης CO₂ στην MEA, 3η περίπτωση.

Δεδομένα		A/A	Ύψος στήλης	Ύψος στήλης (%)	P _{co2 out} (Pa)	C _{mea} (kmol/m ³)	k (m ³ /mol*s)	kl (10 ⁴ *m/s)	kg (10 ² *m/s)	E	R _{co2} (mol/m ³ *h)
L (m ³ /h)	414,9	1	0,0	0	13300	1,00	11,83	3,77	27,88	13,8	6894
%w/w MEA	15,3	2	0,7	5	12097	1,15	10,76	3,68	27,68	14,2	6630
C _{MEA} (kmol/m ³)	2,5	3	1,3	10	10950	1,30	9,81	3,59	27,49	14,3	6261
Lean (mol CO ₂ /mol MEA)	0	4	2,0	15	9875	1,44	9,00	3,51	27,31	14,4	5828
		5	2,6	20	8881	1,56	8,30	3,44	27,14	14,4	5362
Rich (mol CO ₂ /mol MEA)	0,3	6	3,3	25	7969	1,68	7,70	3,37	26,99	14,4	4891
		7	3,9	30	7141	1,78	7,19	3,31	26,85	14,3	4431
P _{co2,in} (Pa)	13300	8	4,6	35	6393	1,88	6,75	3,26	26,73	14,3	3996
% removal	90	9	5,3	40	5719	1,96	6,38	3,21	26,62	14,2	3590
P _{co2,out} (Pa)	1510	10	5,9	45	5114	2,04	6,06	3,17	26,52	14,1	3217
T _{in} (°C)	20	11	6,6	50	4573	2,11	5,79	3,13	26,43	14,0	2878
T _{out} (°C)	36,4	12	7,2	55	4089	2,17	5,55	3,10	26,35	13,9	2572
Diameter (m)	3,61	13	7,9	60	3657	2,23	5,35	3,07	26,28	13,8	2298
Volume (m ³)	134	14	8,5	65	3271	2,28	5,17	3,04	26,21	13,7	2051
Height (m)	13,1	15	9,2	70	2926	2,32	5,02	3,02	26,16	13,7	1831
		16	9,8	75	2618	2,36	4,89	3,00	26,10	13,6	1635
		17	10,5	80	2343	2,39	4,77	2,98	26,06	13,5	1460
		18	11,1	85	2098	2,43	4,67	2,96	26,02	13,5	1304
		19	11,8	90	1879	2,45	4,58	2,95	25,98	13,4	1165
		20	12,5	95	1683	2,48	4,51	2,93	25,95	13,4	1041
		21	13,1	100	1511	2,50	4,44	2,92	25,92	13,3	933

Πίνακας 39. Σενάριο 4ο: Αλλαγή απαίτησης του ποσοστού απομάκρυνσης CO₂, 1η περίπτωση.

Δεδομένα		A/A	Ύψος στήλης	Ύψος στήλης (%)	P _{co2 out} (Pa)	C _{mea} (kmol/m ³)	k (m ³ /mol*s)	kl (10 ⁴ *m/s)	kg (10 ² *m/s)	E	R _{co2} (mol/m ³ *h)
L (m ³ /h)	273,5	1	0,0	0	13300	0,08	20,54	3,82	28,13	6,3	1802
%w/w MEA	15,3	2	1,3	5	12609	0,21	19,01	3,74	27,96	9,5	2681
C _{MEA} (kmol/m ³)	2,5	3	2,6	10	11683	0,39	17,11	3,63	27,73	12,0	3324
Lean (mol CO ₂ /mol MEA)	0	4	3,8	15	10601	0,60	15,10	3,50	27,46	13,9	3695
		5	5,1	20	9445	0,82	13,19	3,38	27,18	15,2	3802
Rich (mol CO ₂ /mol MEA)	0,484	6	6,4	25	8291	1,05	11,50	3,26	26,89	16,0	3693
		7	7,7	30	7194	1,26	10,07	3,15	26,62	16,4	3435
P _{co2,in} (Pa)	13300	8	8,9	35	6190	1,45	8,90	3,05	26,38	16,5	3095
% removal	95	9	10,2	40	5297	1,62	7,97	2,96	26,16	16,5	2726
P _{co2,out} (Pa)	761	10	11,5	45	4516	1,78	7,22	2,89	25,97	16,5	2365
T _{in} (°C)	20	11	12,8	50	3841	1,91	6,63	2,82	25,80	16,3	2032
T _{out} (°C)	46,5	12	14,0	55	3264	2,02	6,16	2,77	25,66	16,2	1734
Diameter (m)	3,61	13	15,3	60	2772	2,11	5,78	2,72	25,54	16,1	1475
Volume (m ³)	260	14	16,6	65	2355	2,19	5,48	2,69	25,44	15,9	1251
Height (m)	25,5	15	17,9	70	2000	2,26	5,23	2,65	25,36	15,8	1061
		16	19,1	75	1700	2,32	5,03	2,63	25,28	15,7	899
		17	20,4	80	1445	2,37	4,86	2,60	25,22	15,6	763
		18	21,7	85	1230	2,41	4,72	2,58	25,17	15,5	647
		19	23,0	90	1046	2,44	4,61	2,57	25,12	15,4	549
		20	24,2	95	891	2,47	4,52	2,55	25,09	15,4	466
		21	25,5	100	761	2,50	4,44	2,54	25,06	15,3	397

Πίνακας 40. Σενάριο 4ο: Αλλαγή απαίτησης του ποσοστού απομάκρυνσης CO₂, 2η περίπτωση.

Δεδομένα		A/A	Ύψος στήλης	Ύψος στήλης (%)	P _{co2 out} (Pa)	C _{mea} (kmol/m ³)	k (m ³ /mol*s)	kl (10 ⁴ *m/s)	kg (10 ² *m/s)	E	R _{co2} (mol/m ³ *h)
L (m ³ /h)	296,8	1	0,1	0	13300	0,08	20,54	3,89	28,22	6,2	1837
%w/w MEA	15,3	2	4,4	5	12184	0,29	18,22	3,75	27,96	10,5	3034
C _{MEA} (kmol/m ³)	2,5	3	8,7	10	10644	0,57	15,39	3,58	27,59	13,5	3685
Lean (mol CO ₂ /mol MEA)	0	4	13,0	15	8936	0,88	12,72	3,40	27,19	15,2	3779
		5	17,3	20	7283	1,19	10,53	3,23	26,80	16,0	3471
Rich (mol CO ₂ /mol MEA)	0,484	6	21,6	25	5821	1,46	8,88	3,09	26,46	16,3	2968
		7	25,9	30	4598	1,68	7,68	2,98	26,17	16,3	2430
P _{co2,in} (Pa)	13300	8	30,2	35	3610	1,86	6,82	2,89	25,94	16,1	1941
% removal	99	9	34,5	40	2827	2,01	6,20	2,82	25,76	16,0	1530
P _{co2,out} (Pa)	153	10	38,8	45	2211	2,12	5,74	2,76	25,62	15,8	1198
T _{in} (°C)	20	11	43,1	50	1729	2,21	5,41	2,72	25,50	15,6	936
T _{out} (°C)	46,5	12	47,4	55	1353	2,28	5,16	2,69	25,42	15,5	731
Diameter (m)	3,61	13	51,7	60	1060	2,33	4,98	2,66	25,35	15,4	571
Volume (m ³)	880	14	56,0	65	830	2,38	4,84	2,64	25,30	15,3	446
Height (m)	86	15	60,3	70	651	2,41	4,73	2,63	25,25	15,3	349
		16	64,6	75	511	2,43	4,64	2,61	25,22	15,2	273
		17	68,9	80	401	2,45	4,58	2,60	25,20	15,2	214
		18	73,2	85	315	2,47	4,53	2,60	25,18	15,1	168
		19	77,5	90	247	2,48	4,49	2,59	25,16	15,1	132
		20	81,8	95	194	2,49	4,46	2,59	25,15	15,1	103
		21	86,0	100	153	2,50	4,44	2,58	25,14	15,1	81

Πίνακας 41. Σενάριο 5ο: Αλλαγή στην συγκέντρωση της MEA στο υδατικό διάλυμα , 1η περίπτωση.

Δεδομένα		A/A	Ύψος στήλης	Ύψος στήλης (%)	P _{co2 out} (Pa)	C _{mea} (kmol/m ³)	k (m ³ /mol*s)	kl (10 ⁴ *m/s)	kg (10 ² *m/s)	E	R _{co2} (mol/m ³ *h)
L (m ³ /h)	196,6	1	0,0	0	13300	0,10	31,32	3,77	29,42	9,4	1668
%w/w MEA	20	2	0,8	5	12818	0,23	29,15	3,69	29,25	13,4	2389
C _{MEA} (kmol/m ³)	3,27	3	1,7	10	12175	0,41	26,47	3,59	29,02	16,7	3016
Lean (mol CO ₂ /mol MEA)	0	4	2,5	15	11397	0,62	23,51	3,48	28,75	19,3	3514
		5	3,3	20	10519	0,85	20,53	3,35	28,44	21,2	3851
Rich (mol CO ₂ /mol MEA)	0,484	6	4,1	25	9582	1,10	17,71	3,23	28,12	22,4	4008
		7	4,9	30	8628	1,36	15,21	3,10	27,78	23,0	3993
P _{co2,in} (Pa)	13300	8	5,8	35	7696	1,61	13,06	2,98	27,46	23,2	3831
% removal	90	9	6,6	40	6815	1,85	11,29	2,87	27,15	23,1	3567
P _{co2,out} (Pa)	1510	10	7,4	45	6005	2,06	9,85	2,78	26,88	22,8	3244
T _{in} (°C)	20	11	8,2	50	5274	2,26	8,69	2,69	26,62	22,4	2901
T _{out} (°C)	54,7	12	9,0	55	4624	2,43	7,77	2,61	26,40	22,0	2565
Diameter (m)	3,54	13	9,8	60	4052	2,59	7,03	2,54	26,20	21,6	2250
Volume (m ³)	161	14	10,7	65	3552	2,72	6,43	2,48	26,03	21,2	1966
Height (m)	16,4	15	11,5	70	3115	2,84	5,95	2,43	25,88	20,8	1714
		16	12,3	75	2734	2,94	5,55	2,39	25,75	20,4	1493
		17	13,1	80	2402	3,03	5,23	2,35	25,64	20,1	1301
		18	13,9	85	2113	3,11	4,96	2,32	25,54	19,9	1134
		19	14,8	90	1861	3,18	4,73	2,29	25,46	19,6	990
		20	15,6	95	1641	3,24	4,55	2,26	25,38	19,4	866
		21	16,4	100	1511	3,27	4,39	2,24	25,32	19,2	760

Πίνακας 42. Σενάριο 5ο: Αλλαγή στην συγκέντρωση της MEA στο υδατικό διάλυμα , 2η περίπτωση.

Δεδομένα		A/A	Ύψος στήλης	Ύψος στήλης (%)	P _{co2 out} (Pa)	C _{mea} (kmol/m ³)	k (m ³ /mol*s)	kl (10 ⁴ *m/s)	kg (10 ² *m/s)	E	R _{co2} (mol/m ³ *h)
L (m ³ /h)	157,2	1	0,0	0	13300	0,13	47,99	3,85	31,11	13,7	1485
%w/w MEA	25	2	0,9	5	12878	0,27	44,54	3,77	30,92	18,9	2113
C _{MEA} (kmol/m ³)	4,09	3	1,7	10	12310	0,46	40,25	3,66	30,66	23,3	2718
Lean (mol CO ₂ /mol MEA)	0	4	2,6	15	11605	0,70	35,42	3,54	30,34	26,8	3271
		5	3,4	20	10781	0,98	30,43	3,40	29,97	29,4	3730
Rich (mol (CO ₂ /mol MEA)	0,484	6	4,3	25	9864	1,28	25,61	3,26	29,56	30,9	4045
		7	5,2	30	8894	1,61	21,26	3,11	29,12	31,5	4174
P _{co2,in} (Pa)	13300	8	6,0	35	7916	1,94	17,55	2,96	28,69	31,4	4109
% removal	90	9	6,9	40	6973	2,26	14,52	2,82	28,27	30,8	3878
P _{co2,out} (Pa)	1510	10	7,7	45	6099	2,55	12,14	2,70	27,88	29,9	3539
T _{in} (°C)	20	11	8,6	50	5312	2,81	10,29	2,58	27,53	28,9	3148
T _{out} (°C)	63,4	12	9,4	55	4617	3,05	8,88	2,48	27,23	28,0	2754
Diameter (m)	3,47	13	10,3	60	4013	3,25	7,79	2,40	26,96	27,0	2385
Volume (m ³)	162	14	11,2	65	3491	3,43	6,95	2,32	26,73	26,2	2055
Height (m)	17,1	15	12,0	70	3042	3,58	6,29	2,26	26,54	25,5	1767
		16	12,9	75	2656	3,71	5,77	2,21	26,37	24,8	1520
		17	13,7	80	2323	3,82	5,35	2,16	26,22	24,3	1309
		18	14,6	85	2037	3,91	5,01	2,12	26,10	23,8	1130
		19	15,4	90	1789	4,00	4,73	2,09	25,99	23,4	978
		20	16,3	95	1574	4,07	4,50	2,06	25,90	23,0	849
		21	17,1	100	1511	4,09	4,32	2,03	25,82	22,7	741

Πίνακας 43. Σενάριο 5ο: Αλλαγή στην συγκέντρωση της MEA στο υδατικό διάλυμα ,3η περίπτωση.

Δεδομένα		A/A	Ύψος στήλης	Ύψος στήλης (%)	P _{co2 out} (Pa)	C _{mea} (kmol/m ³)	k (m ³ /mol*s)	kl (10 ⁴ *m/s)	kg (10 ² *m/s)	E	R _{co2} (mol/m ³ *h)
L (m ³ /h)	130,9	1	0,0	0	13300	0,16	71,97	3,99	33,27	19,0	1241
%w/w MEA	30	2	0,9	5	12960	0,29	67,20	3,91	33,08	25,1	1714
C _{MEA} (kmol/m ³)	4,9	3	1,8	10	12507	0,48	61,29	3,81	32,82	30,4	2213
Lean (mol CO ₂ /mol MEA)	0	4	2,6	15	11937	0,71	54,48	3,70	32,50	34,9	2735
		5	3,5	20	11245	0,99	47,13	3,56	32,11	38,3	3257
Rich (mol CO ₂ /mol MEA)	0,484	6	4,4	25	10436	1,31	39,64	3,41	31,65	40,5	3736
		7	5,3	30	9528	1,68	32,50	3,25	31,14	41,5	4104
P _{co2,in} (Pa)	13300	8	6,2	35	8555	2,07	26,12	3,08	30,60	41,3	4288
% removal	90	9	7,0	40	7564	2,47	20,79	2,91	30,05	40,2	4247
P _{co2,out} (Pa)	1510	10	7,9	45	6607	2,86	16,57	2,75	29,52	38,6	3999
T _{in} (°C)	20	11	8,8	50	5725	3,21	13,37	2,59	29,03	36,8	3611
T _{out} (°C)	72,2	12	9,7	55	4941	3,53	11,00	2,46	28,60	35,0	3165
Diameter (m)	3,38	13	10,5	60	4261	3,80	9,26	2,35	28,23	33,3	2722
Volume (m ³)	157	14	11,4	65	3678	4,04	7,96	2,25	27,91	31,8	2318
Height (m)	17,5	15	12,3	70	3184	4,24	6,99	2,17	27,64	30,5	1967
		16	13,2	75	2764	4,40	6,25	2,10	27,42	29,4	1670
		17	14,0	80	2407	4,55	5,68	2,04	27,22	28,5	1421
		18	14,9	85	2103	4,67	5,23	1,99	27,06	27,7	1213
		19	15,8	90	1843	4,78	4,87	1,94	26,92	27,1	1040
		20	16,7	95	1619	4,87	4,57	1,91	26,80	26,5	896
		21	17,5	100	1511	4,94	4,34	1,88	26,70	26,0	777

Πίνακας 44. Σενάριο 6ο: Παραλαβή διαφορετικής συγκέντρωσης CO₂ στο αέριο εισόδου , 1η περίπτωση.

Δεδομένα		A/A	Ύψος στήλης	Ύψος στήλης (%)	P _{co2 out} (Pa)	C _{mea} (kmol/m ³)	k (m ³ /mol*s)	kl (10 ⁴ *m/s)	kg (10 ² *m/s)	E	R _{co2} (mol/m ³ *h)
L (m ³ /h)	383,1	1	0,0	0	20000	0,08	20,54	4,14	25,90	5,9	3056
%w/w MEA	15,3	2	0,6	5	19275	0,18	19,38	4,07	25,78	8,2	4208
C _{MEA} (kmol/m ³)	2,5	3	1,1	10	18340	0,31	17,97	3,98	25,63	10,2	5152
Lean (mol CO ₂ /mol MEA)	0	4	1,7	15	17240	0,46	16,42	3,88	25,45	11,8	5850
		5	2,2	20	16027	0,63	14,86	3,78	25,25	13,1	6287
Rich (mol CO ₂ /mol MEA)	0,484	6	2,8	25	14751	0,80	13,36	3,67	25,05	14,0	6471
		7	3,3	30	13462	0,98	11,97	3,57	24,84	14,6	6433
P _{co2,in} (Pa)	20000	8	3,9	35	12198	1,16	10,74	3,47	24,63	15,0	6216
% removal	90	9	4,5	40	10991	1,32	9,68	3,37	24,44	15,2	5873
P _{co2,out} (Pa)	2438	10	5,0	45	9861	1,48	8,76	3,29	24,26	15,3	5452
T _{in} (°C)	20	11	5,6	50	8819	1,62	7,99	3,21	24,09	15,3	4992
T _{out} (°C)	46,5	12	6,1	55	7870	1,75	7,34	3,14	23,94	15,2	4525
Diameter (m)	3,79	13	6,7	60	7013	1,87	6,79	3,08	23,80	15,1	4071
Volume (m ³)	125	14	7,2	65	6244	1,98	6,33	3,02	23,68	15,0	3644
Height (m)	11,1	15	7,8	70	5556	2,07	5,94	2,97	23,57	14,9	3250
		16	8,3	75	4944	2,15	5,62	2,93	23,47	14,8	2892
		17	8,9	80	4400	2,23	5,34	2,89	23,38	14,7	2570
		18	9,5	85	3917	2,30	5,10	2,86	23,31	14,5	2282
		19	10,0	90	3487	2,36	4,90	2,83	23,24	14,4	2025
		20	10,6	95	3107	2,41	4,73	2,80	23,18	14,3	1798
		21	11,1	100	2438	2,5	4,58	2,78	23,12	14,2	1600

Πίνακας 45. Σενάριο 6ο: Παραλαβή διαφορετικής συγκέντρωσης CO₂ στο αέριο εισόδου ,2η περίπτωση.

Δεδομένα		A/A	Ύψος στήλης	Ύψος στήλης (%)	P _{co2 out} (Pa)	C _{mea} (kmol/m ³)	k (m ³ /mol*s)	kl (10 ⁴ *m/s)	kg (10 ² *m/s)	E	R _{co2} (mol/m ³ *h)
L (m ³ /h)	475	1	0,0	0	25000	0,08	20,54	4,41	25,28	5,7	4196
%w/w MEA	15,3	2	0,5	5	24061	0,18	19,33	4,33	25,16	7,9	5779
C _{MEA} (kmol/m ³)	2,5	3	1,0	10	22850	0,32	17,86	4,24	25,00	9,8	7064
Lean (mol CO ₂ /mol MEA)	0	4	1,6	15	21429	0,48	16,26	4,13	24,82	11,3	7999
		5	2,1	20	19867	0,65	14,65	4,01	24,62	12,5	8564
Rich (mol CO ₂ /mol MEA)	0,484	6	2,6	25	18232	0,83	13,12	3,89	24,41	13,3	8775
		7	3,1	30	16586	1,02	11,72	3,78	24,20	13,8	8678
P _{co2,in} (Pa)	25000	8	3,6	35	14982	1,19	10,49	3,67	24,00	14,2	8342
% removal	90	9	4,2	40	13458	1,36	9,43	3,57	23,80	14,3	7839
P _{co2,out} (Pa)	3225	10	4,7	45	12038	1,52	8,52	3,48	23,62	14,4	7239
T _{in} (°C)	20	11	5,2	50	10736	1,67	7,76	3,39	23,46	14,4	6597
T _{out} (°C)	46,5	12	5,7	55	9556	1,80	7,12	3,32	23,31	14,3	5953
Diameter (m)	3,84	13	6,2	60	8494	1,91	6,59	3,25	23,18	14,2	5334
Volume (m ³)	120	14	6,7	65	7545	2,02	6,15	3,19	23,06	14,1	4757
Height (m)	10,4	15	7,3	70	6700	2,11	5,77	3,14	22,95	13,9	4229
		16	7,8	75	5950	2,20	5,46	3,10	22,86	13,8	3752
		17	8,3	80	5285	2,27	5,19	3,06	22,77	13,7	3325
		18	8,8	85	4695	2,34	4,96	3,02	22,70	13,6	2944
		19	9,3	90	4174	2,39	4,77	2,99	22,63	13,5	2608
		20	9,9	95	3711	2,45	4,61	2,96	22,58	13,4	2310
		21	10,4	100	3225	2,49	4,47	2,94	22,53	13,3	2052

Πίνακας 46. Συνδυαστικό Σενάριο.

Δεδομένα		A/A	Ύψος στήλης	Ύψος στήλης (%)	P _{co2 out} (Pa)	C _{mea} (kmol/m ³)	k (m ³ /mol*s)	kl (10 ⁴ *m/s)	kg (10 ² *m/s)	E	R _{co2} (mol/m ³ *h)
L (m ³ /h)	660	1	0,0	0	20000	1,00	11,83	4,18	25,00	12,5	11754
%w/w MEA	15,3	2	0,8	5	17704	1,18	10,56	4,06	24,78	12,8	11101
C _{MEA} (kmol/m ³)	2,5	3	1,6	10	15563	1,35	9,47	3,95	24,58	13,0	10218
Lean (mol CO ₂ /mol MEA)	0,1	4	2,4	15	13612	1,51	8,58	3,85	24,40	13,0	9225
		5	3,2	20	11864	1,65	7,84	3,76	24,23	13,0	8212
Rich (mol CO ₂ /mol MEA)	0,4	6	4,0	25	10315	1,77	7,23	3,68	24,09	13,0	7237
		7	4,8	30	8955	1,88	6,73	3,61	23,96	12,9	6334
P _{co2,in} (Pa)	20000	8	5,6	35	7767	1,98	6,32	3,55	23,85	12,8	5519
% removal	95	9	6,4	40	6734	2,06	5,98	3,50	23,75	12,7	4793
P _{co2,out} (Pa)	1234	10	7,2	45	5838	2,13	5,70	3,46	23,67	12,6	4156
T _{in} (°C)	20	11	8,0	50	5061	2,19	5,47	3,42	23,60	12,5	3600
T _{out} (°C)	36,5	12	8,8	55	4388	2,25	5,27	3,39	23,53	12,4	3116
Diameter (m)	3,9	13	9,6	60	3806	2,29	5,11	3,36	23,48	12,4	2698
Volume (m ³)	190	14	10,4	65	3302	2,33	4,97	3,34	23,43	12,3	2336
Height (m)	16	15	11,2	70	2866	2,37	4,85	3,32	23,39	12,2	2023
		16	12,0	75	2488	2,40	4,75	3,30	23,36	12,2	1752
		17	12,8	80	2160	2,43	4,67	3,28	23,33	12,2	1518
		18	13,6	85	1876	2,45	4,60	3,27	23,30	12,1	1316
		19	14,4	90	1630	2,47	4,54	3,26	23,28	12,1	1142
		20	15,2	95	1416	2,49	4,48	3,25	23,26	12,0	991
		21	16,0	100	1234	2,50	4,44	3,24	23,24	12,0	862