

ИНХС РАН

Учреждение Российской академии наук
Ордена Трудового Красного Знамени
Институт нефтехимического синтеза им. А.В.Топчиева РАН

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ РАЗДЕЛИТЕЛЬНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ГАЗОЖИДКОСТНОЙ МЕМБРАННОЙ СИСТЕМЫ ДЛЯ ВЫДЕЛЕНИЯ CO_2 ИЗ ГАЗОВЫХ СМЕСЕЙ

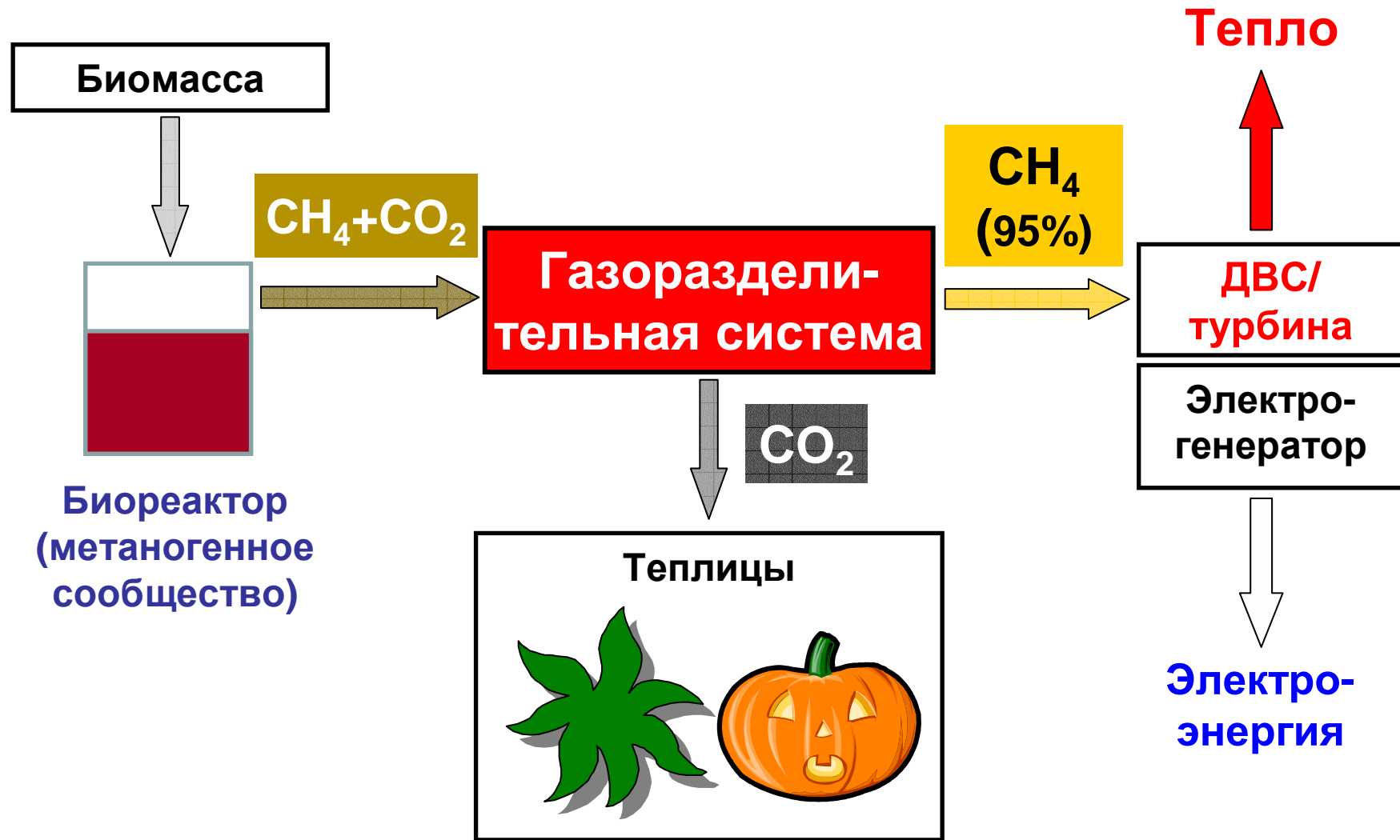
Шалыгин М.Г., Тепляков В.В.

Лаборатория №28
Физико-химия мембранных процессов



ИНХС РАН

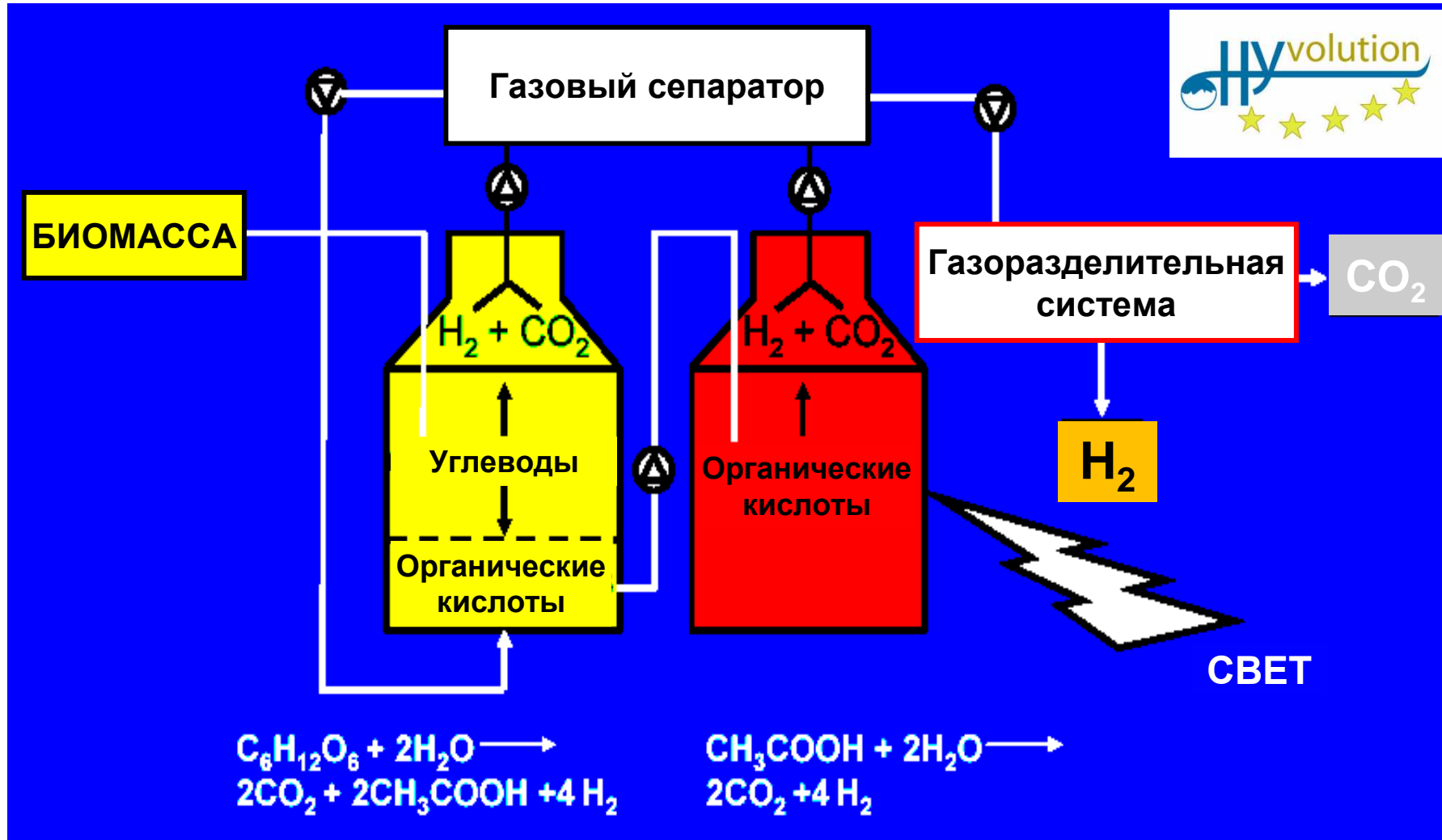
Автономные системы комбинированного производства тепловой и электрической энергии из непищевой растительной биомассы (ГК № 02.526.11.6010)

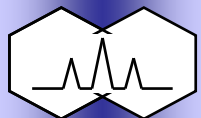




ИХХС РАН

Нетермическое производство водорода (IP FP6 №019825 "HYVOLUTION")



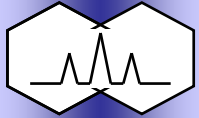


ИНХС РАН

Характеристики газовых смесей на выходе биореакторов

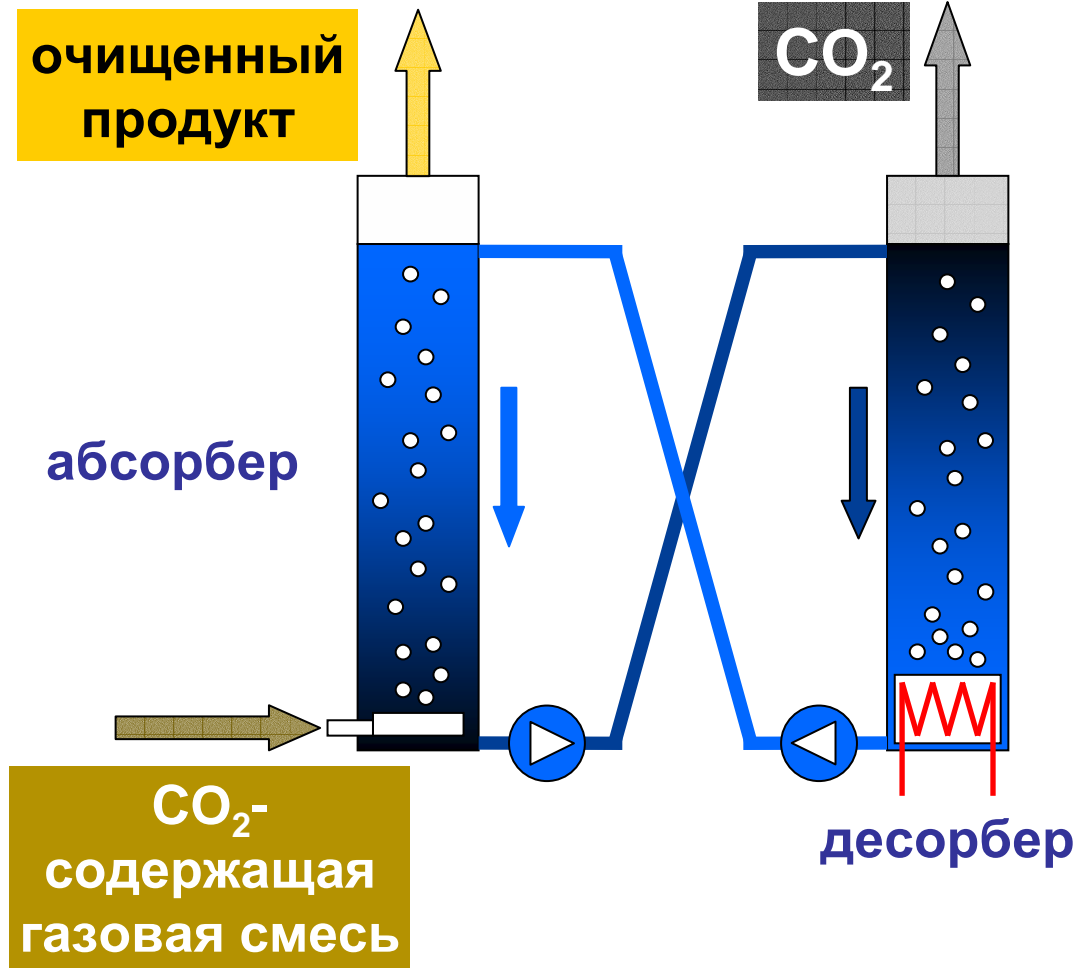
Газовая смесь	Основные компоненты	Концентрация CO ₂
Биогаз	CH ₄ , (H ₂), CO ₂	~ 20-40 %
Бiovодород	H ₂ , CO ₂	

- Температура < 70°C
- Давление < 1.5 атм
- Присутствие паров воды
- Присутствие примесей типа NH₃ , H₂S



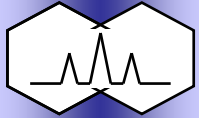
ИНХС РАН

Традиционный абсорбционный процесс извлечения CO_2



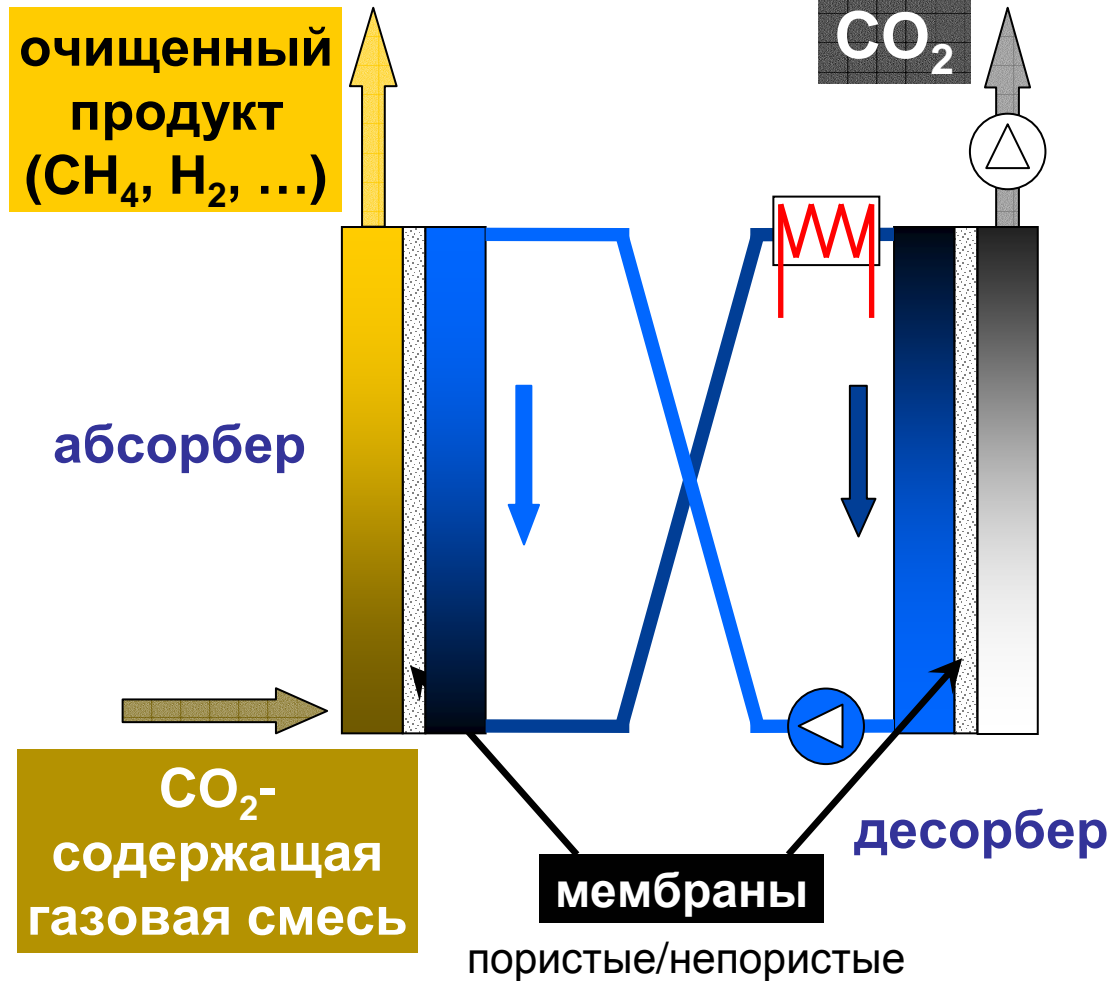
Особенности процесса:

- неопределённая площадь межфазного контакта
- взаимное проникновение фаз
- существенно ограниченный диапазон потоков газовой и жидкой фаз
- удельная поверхность порядка $10^2 \text{ м}^2/\text{м}^3$
- высокая селективность



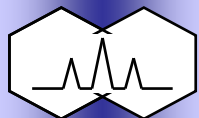
ИНХС РАН

Извлечение CO_2 с применением мембранных контакторов



Особенности мембранных контакторов:

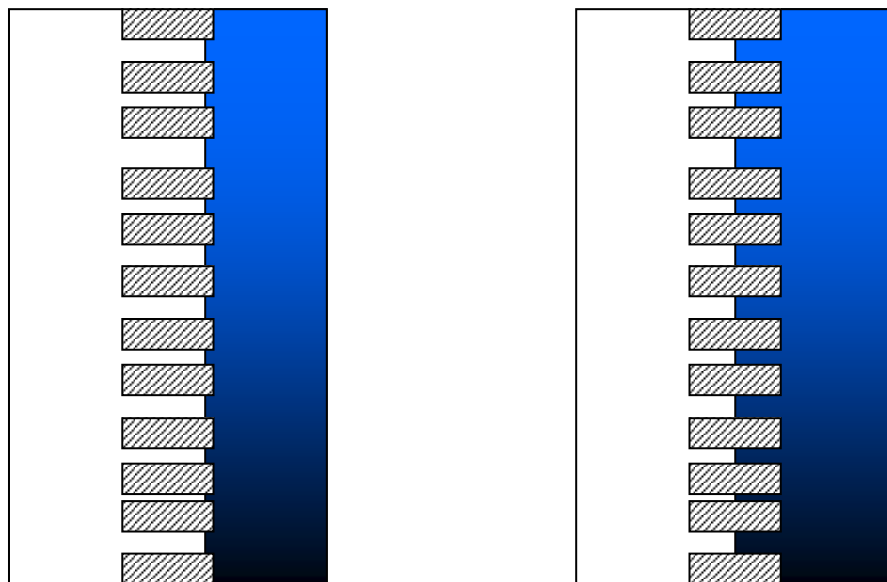
- известная геометрия и площадь межфазного контакта
- независимость потоков газовой и жидкой фаз
- удельная поверхность порядка $10^3 \text{ м}^2/\text{м}^3$
- дополнительное сопротивление массопереносу в мембране



ИНХС РАН

Мембранные контакторы с пористыми и непористыми мембранами

пористая мембрана

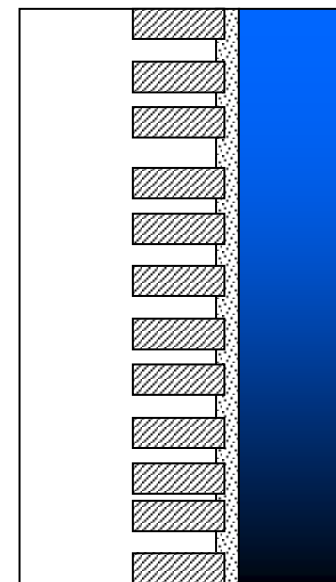


проницаемость пористой мембраны с
заполненными водой порами (50%):

$H = 100 \text{ мкм}, \varepsilon = 0.7, \tau = 1.2$

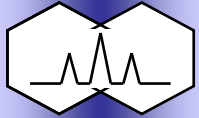
70 л/(м²·ч·атм)

непористая мембрана



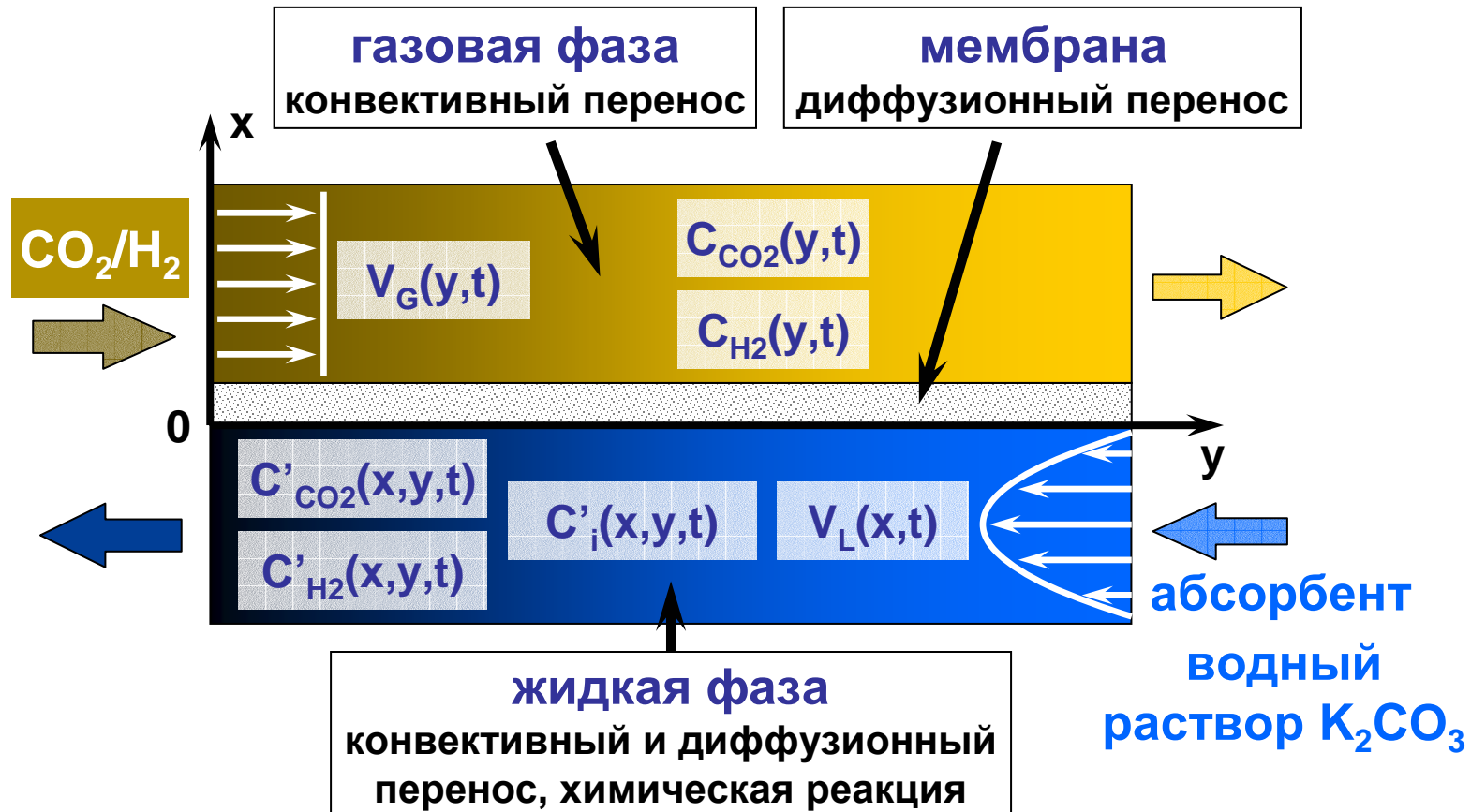
проницаемость
непористой
мембраны на
основе ПВДМС

1600 л/(м²·ч·атм)

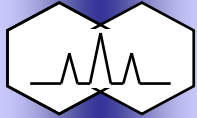


ИНХС РАН

Математическая модель массопереноса в мембранном контакторе



- отсутствие градиента давления
- режим идеального вытеснения в газовой фазе
- ламинарный режим течения жидкости
- изотермические условия



ИНХС РАН

Математическая модель массопереноса в мембранном контакторе

$$\frac{\partial J_{Gi}^{gas}(y,t)}{\partial y} = BD_{Gi}^{mem} \frac{C_{Gi}^{mem}(0,y,t) - C_{Gi}^{mem}(-H_{mem},y,t)}{H_{mem}}$$

$$C_{Gi}^{mem}(-H_{mem},y,t) = pS_{Gi}^{mem} J_{Gi}^{gas}(y,t) \left(\sum_i J_{Gi}^{gas}(y,t) \right)^{-1}$$

$$\frac{C_{Gi}^{liq}(x,y,t)}{S_{Gi}^{liq}} = \frac{C_{Gi}^{mem}(x,y,t)}{S_{Gi}^{mem}} \quad D_{Gi}^{liq} \frac{\partial C_{Gi}^{liq}(x,y,t)}{\partial x} = D_{Gi}^{mem} \frac{\partial C_{Gi}^{mem}(x,y,t)}{\partial x} \quad \frac{\partial C_{Li}^{liq}(x,y,t)}{\partial x} = 0$$

$$\left\{ \begin{aligned} \frac{\partial C_{Gi}^{liq}(x,y,t)}{\partial t} &= D_{Gi}^{liq} \frac{\partial^2 C_{Gi}^{liq}(x,y,t)}{\partial x^2} - V^{liq}(x) \frac{\partial C_{Gi}^{liq}(x,y,t)}{\partial y} \\ \frac{\partial C_{CO_2}^{liq}(x,y,t)}{\partial t} &= D_{CO_2}^{liq} \frac{\partial^2 C_{CO_2}^{liq}(x,y,t)}{\partial x^2} - V^{liq}(x) \frac{\partial C_{CO_2}^{liq}(x,y,t)}{\partial y} + R_{CO_2}^{liq}(x,y,t) \\ \frac{\partial C_{CO_3^{2-}}^{liq}(x,y,t)}{\partial t} &= D_{CO_3^{2-}}^{liq} \frac{\partial^2 C_{CO_3^{2-}}^{liq}(x,y,t)}{\partial x^2} - V^{liq}(x) \frac{\partial C_{CO_3^{2-}}^{liq}(x,y,t)}{\partial y} + R_{CO_2}^{liq}(x,y,t) \\ \frac{\partial C_{HCO_3^-}^{liq}(x,y,t)}{\partial t} &= D_{HCO_3^-}^{liq} \frac{\partial^2 C_{HCO_3^-}^{liq}(x,y,t)}{\partial x^2} - V^{liq}(x) \frac{\partial C_{HCO_3^-}^{liq}(x,y,t)}{\partial y} - 2R_{CO_2}^{liq}(x,y,t) \end{aligned} \right.$$

$$V^{liq}(x) = \frac{4V_{max}^{liq}}{H_{liq}^2} x (H_{liq} - x)$$

$$R_{CO_2}^{liq} = C_{HCO_3^-}^{liq} \left(k_{-1} K_C K_W \frac{C_{HCO_3^-}^{liq}}{C_{CO_3^{2-}}^{liq}} + k_{-2} \right) - C_{CO_2}^{liq} \left(k_1 + k_2 \frac{C_{CO_3^{2-}}^{liq}}{K_C C_{HCO_3^-}^{liq}} \right)$$

Газовая фаза

Мембрана

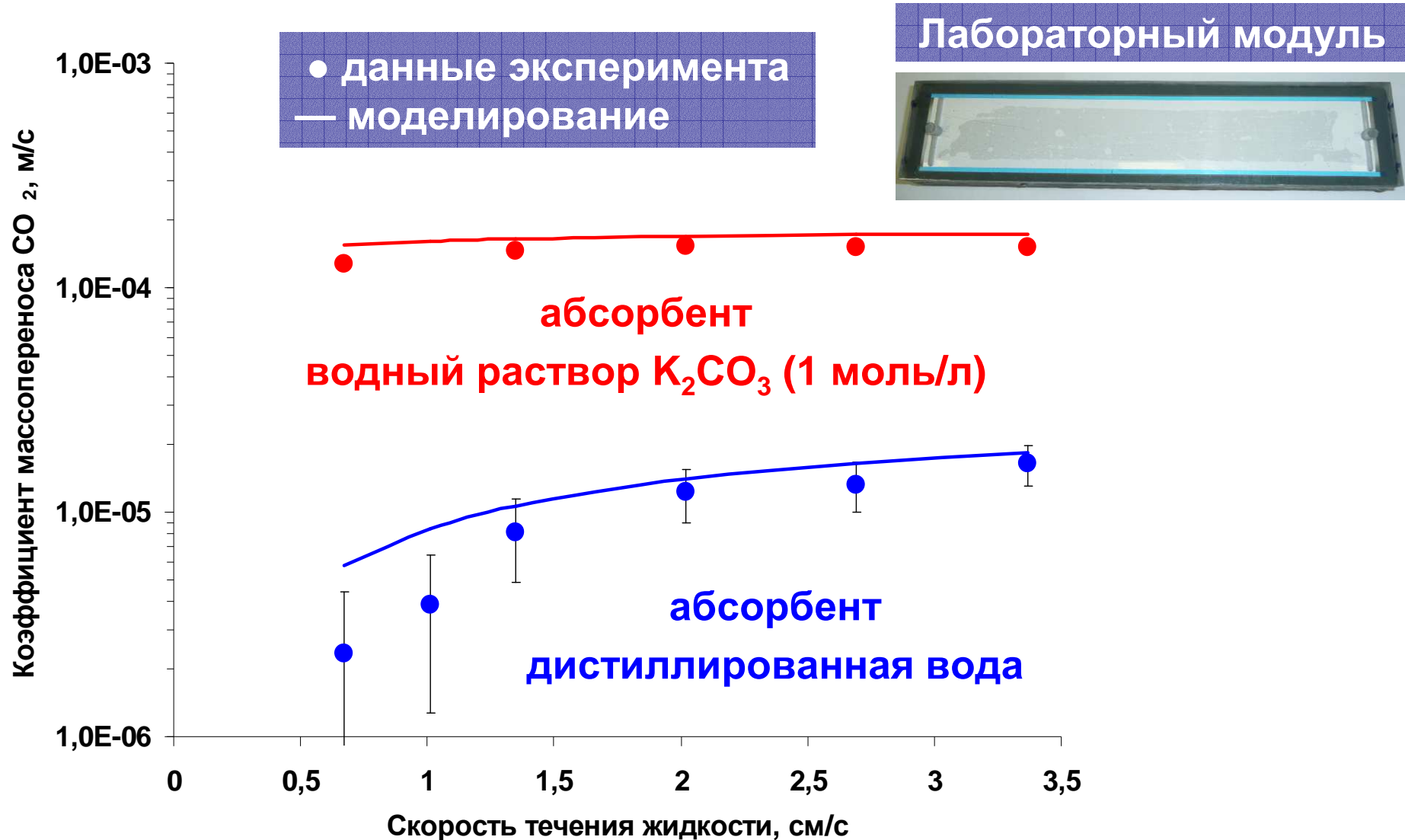
Жидкая фаза

- J – поток
- B – ширина модуля
- D – коэффициент диффузии
- C – концентрация
- H – толщина
- V – скорость жидкости
- R – скорость образования компонента
- K, k – константы равновесия и скорости хим. реакции



ИНХС РАН

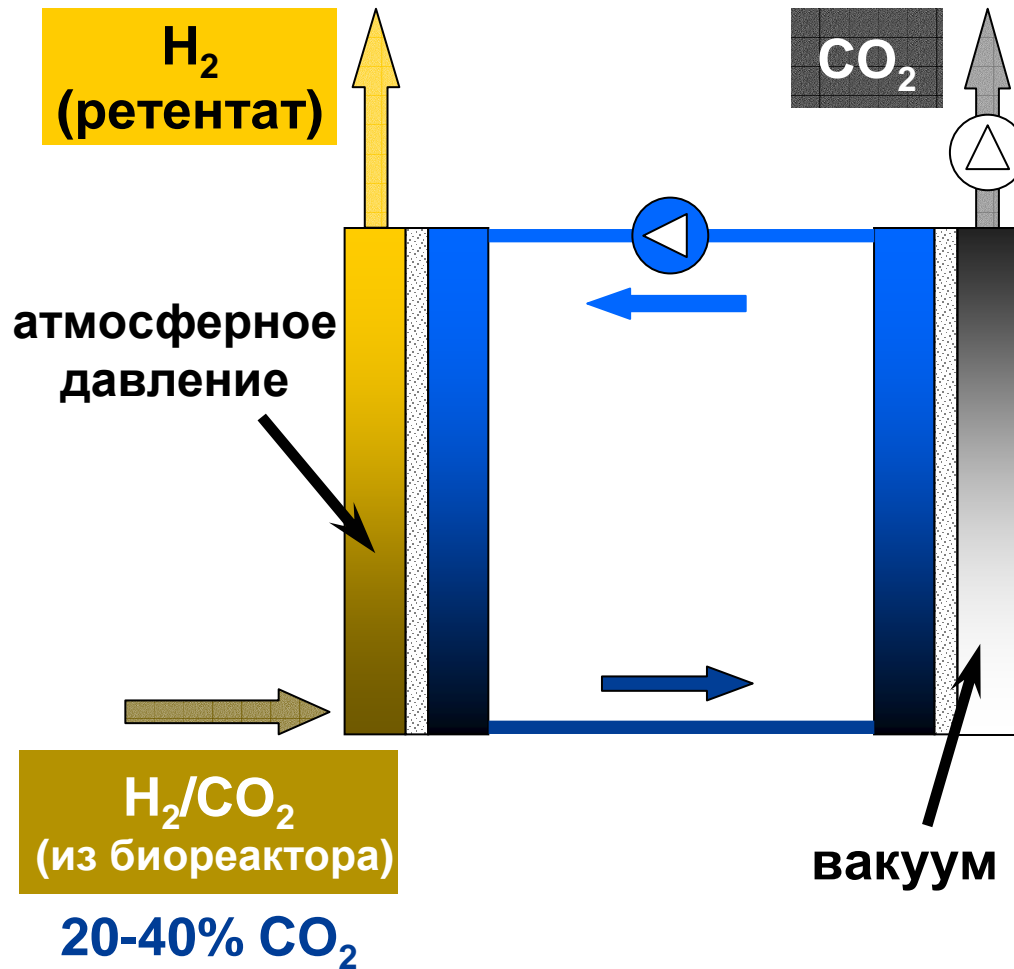
Сравнение экспериментальных данных и результатов моделирования





ИНХС РАН

Моделирование системы при разделении смеси H_2 / CO_2

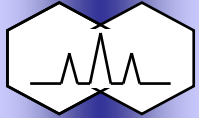


Постоянные параметры:

- давление 1 атм
- абсорбент водный раствор K_2CO_3 (2 моль/л)
- толщина канала для жидкой фазы 200 мкм
- температура 60°C

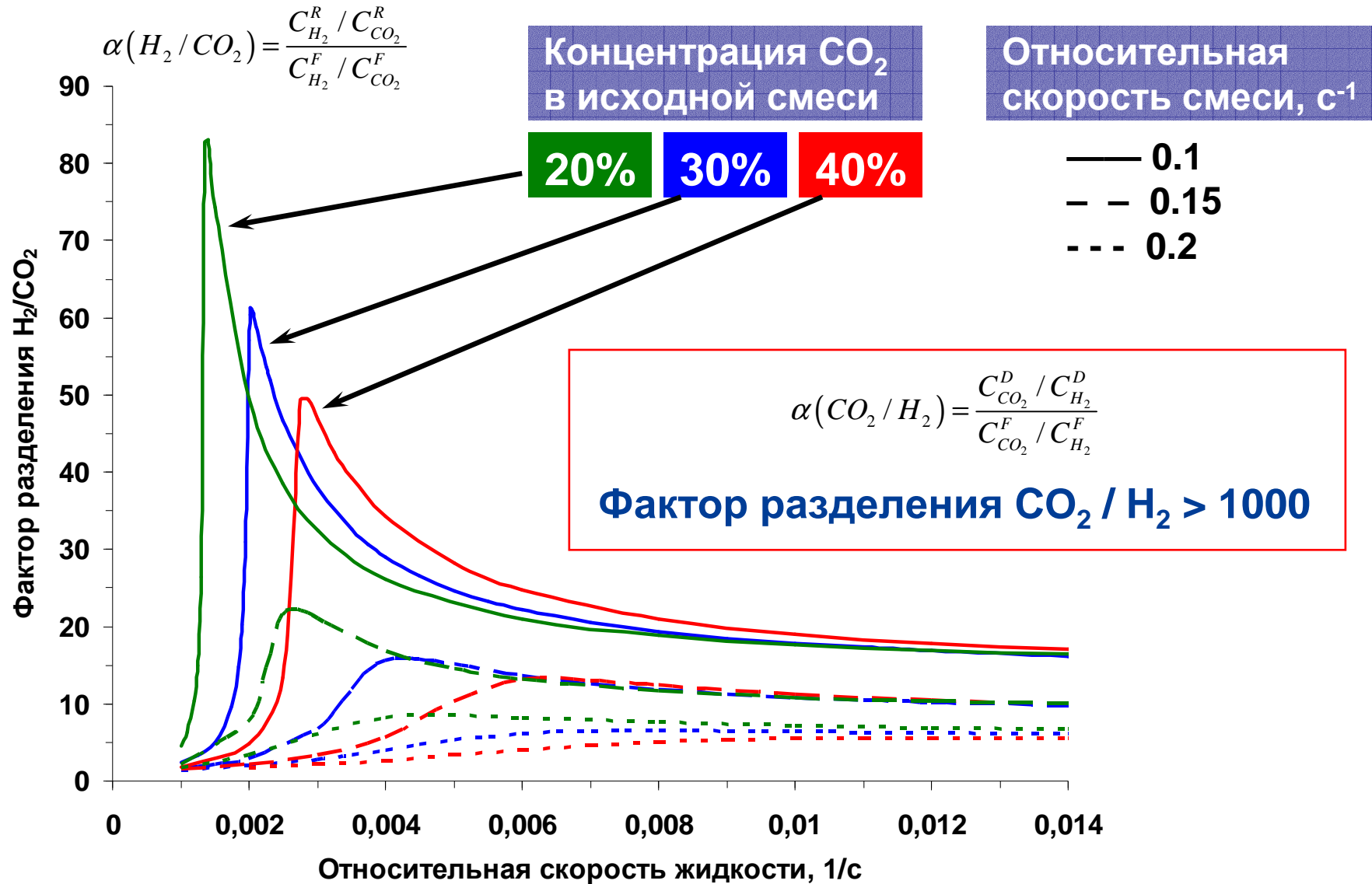
Переменные параметры:

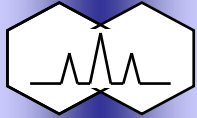
- скорость течения абсорбента
- скорость газовой смеси
- исходная концентрация CO_2
- проницаемость мембраны



ИНХС РАН

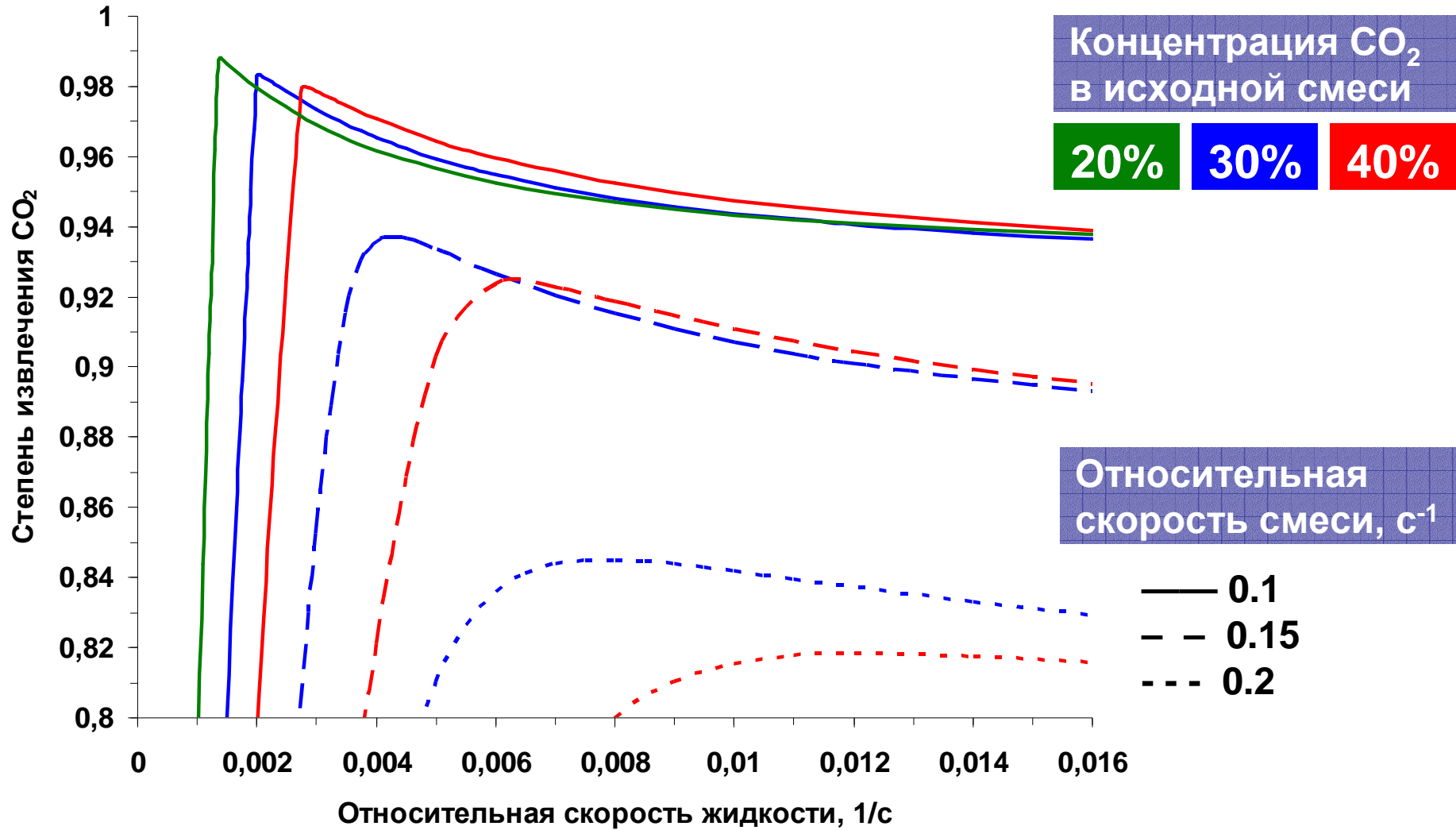
Факторы разделения



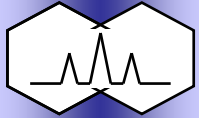


ИНХС РАН

Степень извлечения компонентов

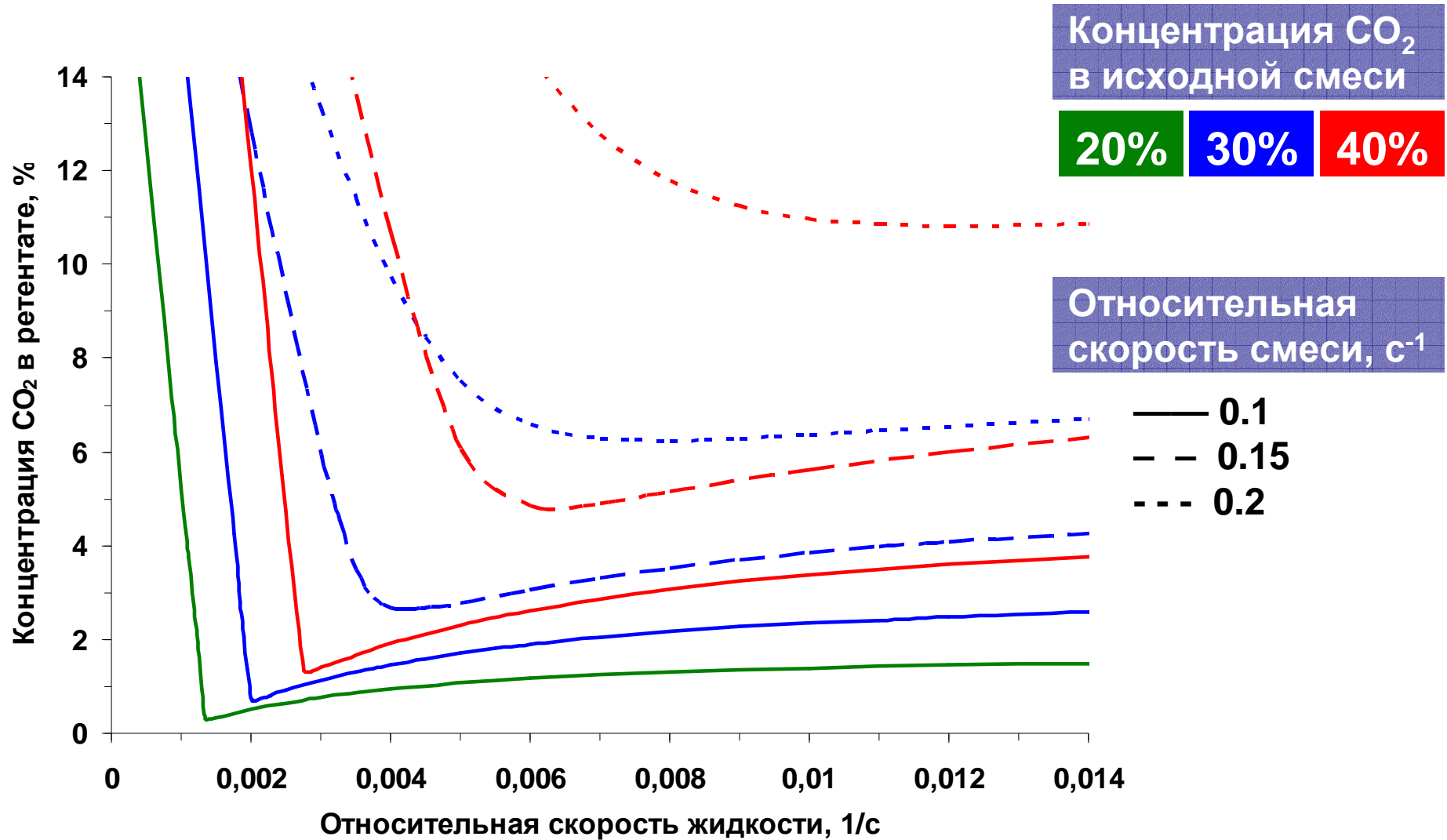


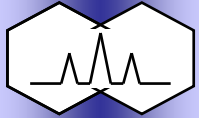
Степень извлечения $\text{H}_2 > 0.99$



ИНХС РАН

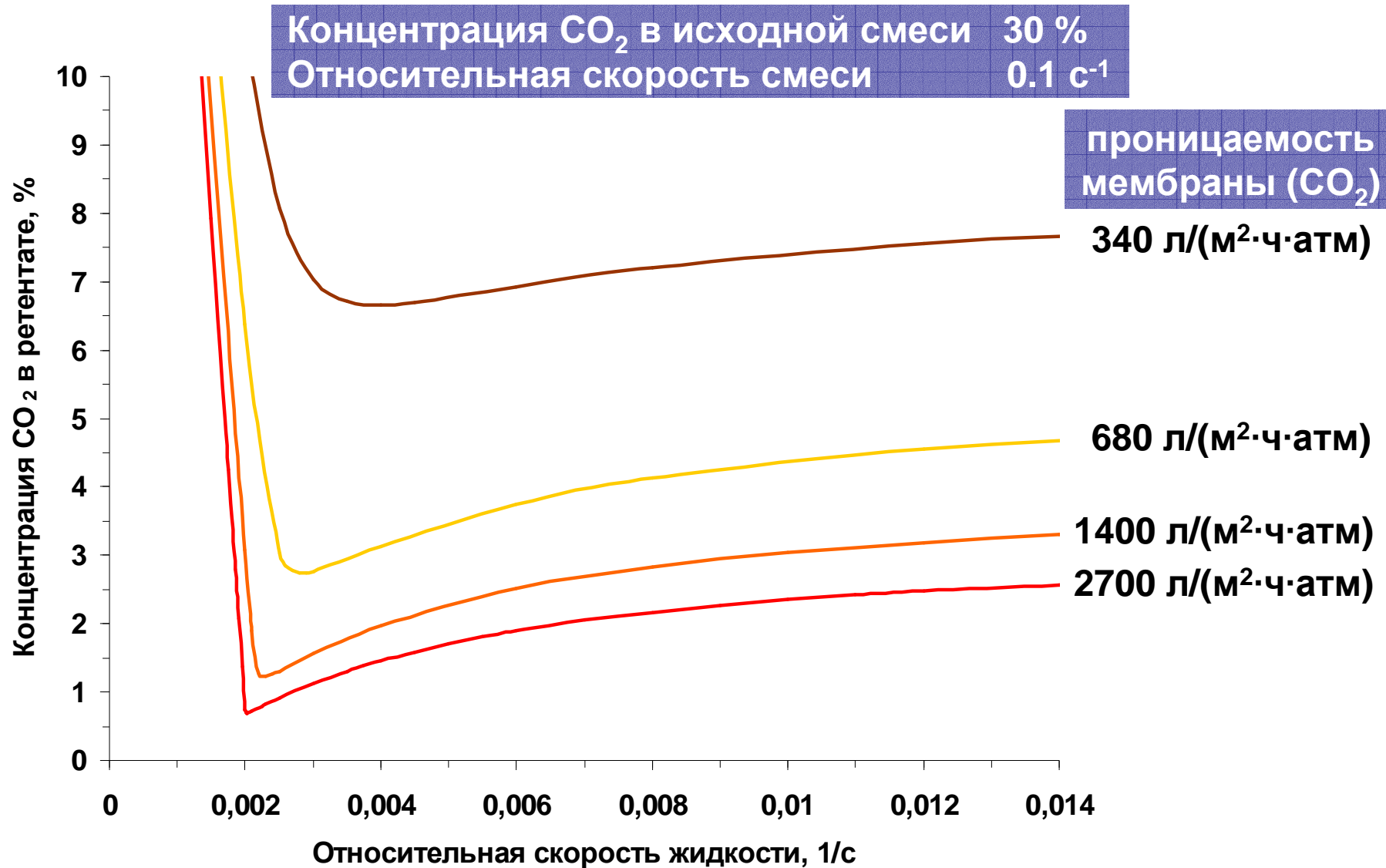
Зависимость концентрации CO_2 в ретентате от состава исходной смеси

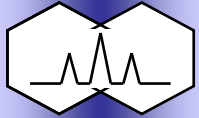




ИНХС РАН

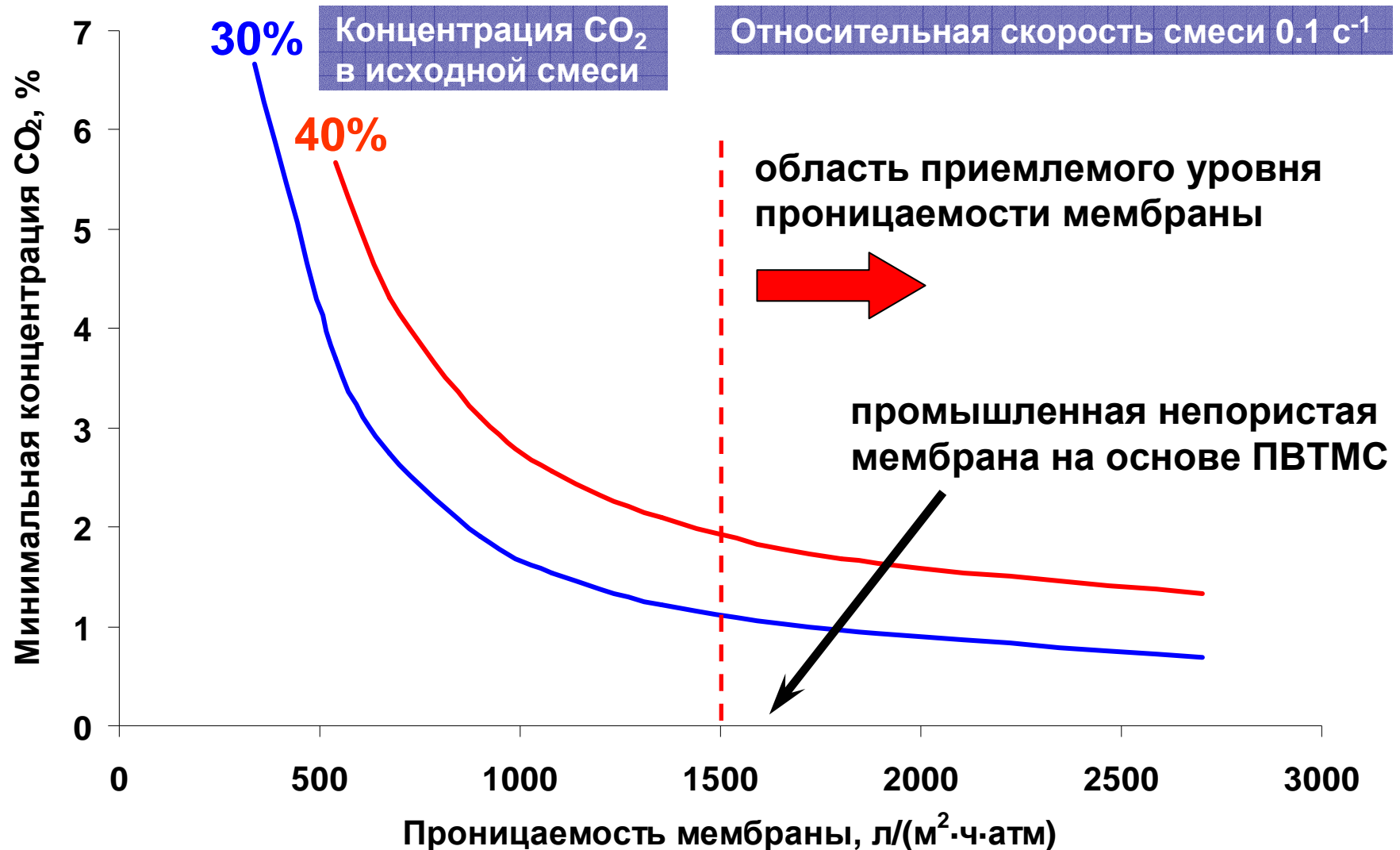
Зависимость концентрации CO_2 в ретентате от проницаемости мембраны

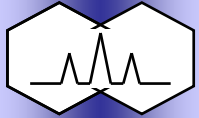




ИНХС РАН

Зависимость минимальной концентрации CO_2 в ретентате от проницаемости мембраны

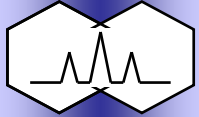




Выводы

Математическое моделирование позволяет :

- исследовать зависимости ключевых характеристик системы от варьируемых параметров**
- определить область возможного варьирования ключевых параметров**
- оценить значения варьируемых параметров, соответствующие оптимальным**
- на ранних стадиях проектирования системы сформулировать требования к характеристикам её ключевых элементов (например, определить минимальный уровень проницаемости мембраны)**



ИНХС РАН

Работа выполнена при поддержке грантов:

**FP6 IP n°019825-(SES6) “HYVOLUTION”,
РФФИ № 07-03-00752,
госконтракта № 02.526.11.6010**

Спасибо за внимание!