DOI:10.11918/j.issn.0367-6234.2017.01.014

规整填料内乙醇胺吸收 CO_2 的计算流体力学模拟

陈丽椿, 查晓雄

(哈尔滨工业大学 深圳研究生院, 广东 深圳 518055)

摘 要: 为模拟规整填料单元内乙醇胺吸收烟气二氧化碳的过程,利用计算流体力学(CFD),考虑包含化学反应气液质量传递过程,建立伴有二级化学反应的气液两相流动模型. 通过改变吸收过程的操作条件,如气液入口流量比、CO_2 入口质量分数、乙醇胺入口摩尔分数、压强等,分析吸收塔规整填料单元内碳捕捉过程的影响因素. CFD 模拟结果表明:CO_2 吸收率随乙醇胺浓度与压强的增大而升高;随烟气 CO_2 浓度与气液流量比的增大而下降;对各影响因素影响定量排序,乙醇胺浓度对吸收效率影响最突出,其次依次是 CO_2 入口浓度、气液入口流量比、压强. 模拟与试验结果相吻合,得出了相应的最优参数.

关键词: 二氧化碳捕集;规整填料;计算流体力学;气液质量传递;一维非稳态扩散

中图分类号: O362 **文献标志码**: A **文章编号**: 0367-6234(2017)01-0101-07

CFD simulation of carbon dioxide in flue gas with monoethanolamine in structured packing

CHEN Lichun, ZHA Xiaoxiong

(Shenzhen Graduate School, Harbin Institute of Technology, Shenzhen 518055, Guangdong, China)

Abstract: The method of computational fluid dynamics (CFD) containing reactive mass transfer is adopted to simulate the process of carbon dioxide capture from flue gases with MEA in structured packing. The simulation of complex flows with second order reaction of CO_2 with MEA is built in representative elementary units (REU) of structured packed column. Various operating conditions including ratio of gas inlet flow to liquid inlet flow, CO_2 inlet mass fraction, MEA mole fraction and pressure on CO_2 capture process are examined. The absorption efficiency increases with the addition of MEA concentration and operating pressure, but decreases with CO_2 concentration and gas-liquid flow ratio. The influences of different factors on the absorption are ordered as MEA mole fraction, CO_2 mass fraction, ratio of gas inlet flow to liquid inlet flow and pressure. The CFD results of CO_2 absorption rate at different operating parameters are consistent with the reported ones, and the optimal parameters are got.

Keywords: CO_2 capture; structured packing; CFD; gas-liquid mass transfer; one dimensional unsteady diffusion

CO_2 捕集主要有 3 种方法:燃烧后捕集、燃烧前捕集与富氧燃烧捕集[1]. 其中燃烧后捕集方法指从化石燃料燃烧后产生的混合烟气中捕获 CO_2 气体. 燃烧后二氧化碳捕获技术具体又分为以下几种:溶剂吸收法、物理吸附法、低温蒸馏法与膜分离法[2]. 燃煤电厂烟气中的 CO_2 含量较低,适合的 CO_2 捕捉方法主要为化学溶剂吸收法与膜分离方法. 目前最主要的捕获方法是化学溶剂吸收法,也是目前工业上最常用的方法[3].

常用的化学吸收剂有有机胺溶液、氨水、强碱溶液等[4]. 其中乙醇胺(MEA)吸收酸性气体速率快,吸收能力强,价格低廉,广泛应用于工业二氧化碳吸收过程[5-6].

随着计算机技术的发展,利用计算流体动力学(CFD)对 CO_2 碳捕捉过程进行模拟成为新的研究方向[7-9]. 将 CFD 理论与实际工程相结合,实现 CO_2 捕集过程的模拟,对改进和完善当前的吸收反应设备,实现 CO_2 高效率吸收起到重要的指导作用. 目前的 CFD 模型仅限于在填料单元上模拟气液两相流动情况,很少涉及气液两相间的化学反应.

本文运用溶剂吸收法,加入化学反应与质量传递过程,利用 Fluent 模拟填料单元内 MEA 溶液吸收 CO_2 的过程. 塔内采用 Montz-pak B1 250.45 型规整填料,通过建立三维周期单元模型模拟中尺度下填料层内乙醇胺吸收 CO_2 的化学反应过程,近似得到在该填料单元内 CO_2 的吸收率. 随后改变吸收过程的操作条件(如改变入口气液流量比、CO_2 入口质量分数、乙醇胺摩尔分数、压强等),得到不同操作条件下 CO_2 吸收率,分析碳捕集过程的影响因素.

收稿日期: 2015-11-22
基金项目: 深圳市科技计划(JCYJ20150513155236762)
作者简介: 陈丽椿(1991—),女,硕士研究生;
查晓雄(1968—),男,教授,博士生导师
通信作者: 查晓雄,zhaxx@hit.edu.cn

1 CFD 模拟过程

1.1 数学模型

1.1.1 基本方程

设气相为理想气体,液相为不可压缩流体,瞬态流动,且流动过程为恒温,则质量守恒方程为

$$\frac{\partial(\alpha_k\rho_k)}{\partial t}+\nabla\cdot(\alpha_k\rho_k\boldsymbol{u}_k)=S_k,$$

动量守恒方程为

$$\frac{\partial(\alpha_k\rho_k\boldsymbol{u}_k)}{\partial t}+\nabla\cdot(\alpha_k\rho_k\boldsymbol{u}_k\boldsymbol{u}_k)=-\alpha_k\nabla p+\nabla^2(\alpha_k\mu_k\boldsymbol{u}_k)+\alpha_k\rho_k\boldsymbol{g}_k+\boldsymbol{F}_k,$$

能量守恒方程为

$$\frac{\partial(\alpha_k\rho_k h_k)}{\partial t}+\nabla\cdot(\alpha_k\rho_k\boldsymbol{u}_k h_k)=\alpha_k\frac{\partial p}{\partial t}+\nabla\cdot(\lambda_k\nabla T_k)+Q_k+S_{\mathrm{e},k}.$$

式中:$\boldsymbol{u}_k$ 为速度向量,ρ_k 为第 k 相的密度,S_k 为质量源项,p 为静压,μ_k 为动力黏度,$\boldsymbol{g}_k$ 为重力体积力,$\boldsymbol{F}_k$ 为相间相互作用力,h_k 为第 k 种物质的比焓,λ_k 为热导系数,Q_k 为相间热传导强度,$S_{\mathrm{e},k}$ 为化学反应中焓源项.

1.1.2 湍流模型

采用标准 $k-\varepsilon$ 模型,湍动能 k 与耗散率 ε 是两个基本未知量.

$$\frac{\partial(\rho k)}{\partial t}+\frac{\partial(\rho k u_i)}{\partial x_i}=\frac{\partial}{\partial x_j}\left[\left(\mu+\frac{\mu_t}{\sigma_k}\right)\frac{\partial k}{\partial x_j}\right]+G_k-\rho\varepsilon,$$

$$\frac{\partial(\rho\varepsilon)}{\partial t}+\frac{\partial(\rho\varepsilon u_i)}{\partial x_i}=\frac{\partial}{\partial x_j}\left[\left(\mu+\frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon}\right)\frac{\partial\varepsilon}{\partial x_j}\right]+\frac{C_{1\varepsilon}\varepsilon}{k}G_k-C_{2\varepsilon}\rho\frac{\varepsilon^2}{k}.$$

式中:

$$C_{1\varepsilon}=1.44,\quad C_{2\varepsilon}=1.92,$$
$$\sigma_k=1.00,\quad \sigma_\varepsilon=1.30.$$

1.1.3 化学组分守恒方程

第 k ($k=1,2$) 相流体的化学组分守恒方程采用以下通用形式:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_i)+\nabla\cdot(\rho\vec{v}Y_i)=-\nabla\vec{J}_i+R_i+S_i.$$

其中 Y_i 为第 i 种物质的质量分数,R_i 为化学反应的净产生速率,S_i 为离散相或者自定义源项产生的速率. 在系统中出现 N 种物质时,各种物质质量分数之和为 1.

湍流质量扩散系数为

$$\vec{J}_i=-(\rho D_{i,\mathrm{m}}+\frac{\mu_\mathrm{t}}{Sc_\mathrm{t}})\nabla Y_i,$$

式中 $D_{i,\mathrm{m}}$ 是第 i 种物质的扩散系数,Sc_t 是湍流施密特数,默认值为 0.7.

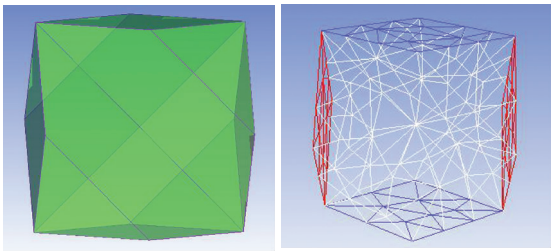
1.2 物理模型

采用 Montz-pak B1 250.45 型规整填料,填料板倾角为 45°,几何参数见表 1. 本文从填料层中提取出周期性填料单元,在 ICEM CFD 中建立三维模型,如图 1 所示,由于填料单元内部弯曲折角较多,故采用非结构化方法进行网格划分. 网格划分最大尺寸为 8 mm,整个模型生成 300 多个网格单元.

表 1 Montz-pak B1-250.45 填料几何参数

Tab.1 Geometric parameters of Montz-pak B1-250.45

比表面积/($\mathrm{m^2\cdot m^{-3}}$)	孔隙率/%	斜边长/m	底部长/m	倾斜角/(°)
244	98	0.016 5	0.022 5	45



(a) 几何模型 (b) 网格划分

图 1 填料周期单元模型

Fig.1 Periodic unit cell model of structured packing

1.3 乙醇胺吸收 CO_2 的化学反应

采用通用有限速率模型来模拟乙醇胺与 CO_2 的吸收反应. 在 Fluent 中设置通用有限速率模型模拟化学反应时,首先定义反应物和生成物各组分及其相关物性;其次定义化学反应;最后给出相关化学反应的动力学数据.

MEA 吸收 CO_2 的反应过程比较复杂,模拟过程中将反应简化,假定为二级不可逆反应,总的反应方程式为

$$CO_2+2MEA\xrightarrow{k_2}MEAH^++MEACOO^-. \quad (1)$$

CO_2 在 MEA 溶液中的扩散系数与溶解度可采用文献[10]数据,分别为 8.39×10^{-10} $\mathrm{m^2/s}$,0.808 mol/mol;乙醇胺的扩散系数为 1.1×10^{-10} $\mathrm{m^2/s}$[11]. 由于 Fluent 数据库中没有 MEA 以及相关产物的数据,通过 Aspen 数据库得到它们的基本物理性质数据见表 2.

式(1)中正向反应速率常数 k_2 由阿伦尼乌斯公式计算:

$$k_2=A\mathrm{e}^{-E_\mathrm{a}/RT}.$$

其中 A 是指数前因子,E_a 是反应活化能,R 是理想气体常数. 本文根据 Aboudheir 等[12]总结前人的试验数据,对其进行半对数拟合,拟合结果如图 2 所示.

表 2　主要物质基本物性

Tab.2　The physical property of main materials

物质	密度/（kg · m^{-3}）	比热容/（J · (kg · K)$^{-1}$）	导热系数/（W · (m · K)$^{-1}$）	黏度/（kg · (m · s)$^{-1}$）	摩尔质量/（kg · kmol^{-1}）	标准焓/（J · kmol^{-1}）
MEA	1.012 6×10^3	2.824 9×10^3	0.237 581	1.508 0×10^{-2}	61.083 7	−2.067 0×10^8
$MEAH^+$	4.680 0×10^2	3.349 9×10^2	0.156 314	1.770 0×10^{-5}	62.091 1	−3.344 2×10^8
$MEACOO^-$	7.485 3×10^2	1.998 3×10^2	0.120 730	1.770 0×10^{-5}	104.086 1	−6.931 3×10^8

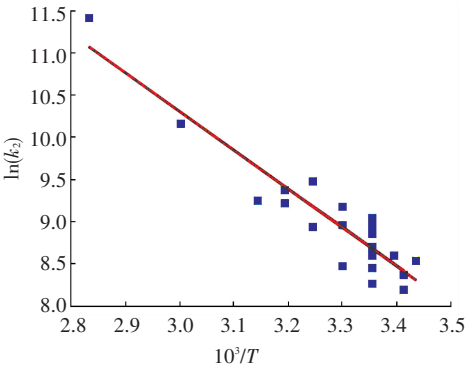


图 2　反应速率与温度的半对数拟合

Fig.2　Semi-log fitting of reacting rate vs. temperature

图 2 中，以 $10^3/T$ 为横坐标，$\ln(k_2)$ 为纵坐标，$\ln A$ 为图中的截距，$-(E_a/R)\times10^{-3}$ 为斜率，可以依此求出 A 与 E_a，分别为 2.678×10^{10} 与 $3.798\ 2\times10^4$.

1.4　质量传递模型

在实际传质过程中，气液两相在高度湍动状态下互相接触，此时不存在稳定的相界面. Higbit[13] 在建立的溶质渗透模型中指出：在填料塔中，气液两相接触时间很短，故应根据非稳态扩散模型来处理[14]. 图 3 为溶质渗透模型的示意图. 本文采用溶质渗透模型，编写用户自定义函数（UDF），导入至 Fluent 中进行编译计算.

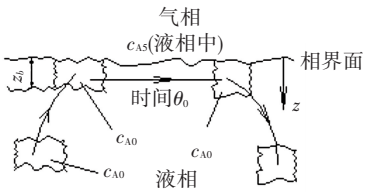


图 3　溶质渗透模型示意

Fig.3　The diagram of penetration theory

溶质在流体单元内进行的是一维非稳态扩散过程. CO_2 的吸收模拟过程，在 CO_2 从气相扩散至气液界面时伴有二级化学反应，CO_2 与 MEA 的生成速率分别为

$$r_{CO_2} = -k_2 c_{CO_2} c_{MEA},$$

$$r_{MEA} = -2k_2 c_{CO_2} c_{MEA};$$

CO_2 的传质微分方程可表示为

$$D_{CO_2}^{Solution}\frac{\partial^2 c_{CO_2}}{\partial y^2} = \frac{\partial c_{CO_2}}{\partial t} - r_{CO_2}.$$

由于反应速率很大，是瞬间反应，且假设二者的扩散系数相等，根据溶质渗透理论得到传质系数[15]：

$$k_{L,\,CO_2} = \left(1 + \frac{c_{MEA}}{2c_{CO_2,\,i}}\right)\left(\frac{4D_{CO_2}}{\pi\theta_c}\right)^{\frac{1}{2}}.$$

将传质系数代入质量源项 S_m，

$$S_m = Mk_{L,\,CO_2}AC_L(c_{CO_2,\,i} - c_{CO_2,\,0})/V.$$

式中 M 为 CO_2 的摩尔质量，A 为单元接触面积，C_L 为溶液总的摩尔浓度，$c_{CO_2,i}$ 与 $c_{CO_2,0}$ 分别表示二氧化碳在界面与液相主体的浓度，V 为单元体积.

1.5　边界条件

边界条件参考华能碳捕集试验研究文献[6]. 边界条件具体设置如图 4 所示.

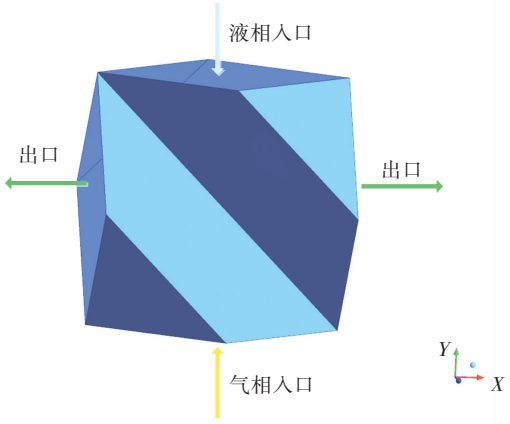


图 4　周期单元边界条件

Fig.4　Boundary conditions of REU

将气相设为主相，液相设为第二相. 基本压力设为1 kPa. 由于液相的加入，考虑重力的影响，且重力大小为 9.8，方向为 y 轴负方向.

1）气相入口，采用速度入口，方向垂直进口面. 气体入口流量为 2 250 m^3/h，塔径为 1.2 m，转化成气体入口速度为 0.552 6 m/s. 进口烟气简化为 CO_2 与 N_2 的混合气体，其中 CO_2 的质量分数为 14%.

2）液相入口，采用速度入口，方向垂直于进口面. 入口流量为 3×10^4 L/h，转化成液体入口速度为

0.007 37 m/s. 进口组分为 MEA 与水,其中 MEA 的摩尔分数为 5%,文中 MEA 浓度均由摩尔分数来表示.

3) 出口设置,设置两边出口均为压力出口,大小设为 1 kPa.

4) 壁面设置,设置壁面为无滑移壁面,忽略流体与填料之间的相互作用.

5) 化学反应,采用组分输运模型和通用有限速率模型,操作温度为 300 K,操作压强为 1 kPa.

6) 湍流模型,采用标准 $k-\varepsilon$ 模型.

7) 其他设置,压力速度耦合采用简单算法,离散化方法中压力项采用标准算法,动量、湍动能、耗散率离散格式均采用一阶迎风标准,松弛因子及残差均为默认值,设置单位步长为 0.001 s,模拟 1.5 s 的反应过程.

2 乙醇胺吸收二氧化碳模拟结果

2.1 CO_2吸收率

CO_2气相传至液相,然后与液相中的 MEA 发生反应,生成 $MEACOO^-$与 $MEAH^+$,由总反应化学方程式可知,1 摩尔 CO_2对应生成 1 摩尔 $MEACOO^-$,$MEACOO^-$的量可以代表 CO_2吸收的情况. 不同时刻 $MEACOO^-$在壁面与出口的平均摩尔分数如图 5 所示.

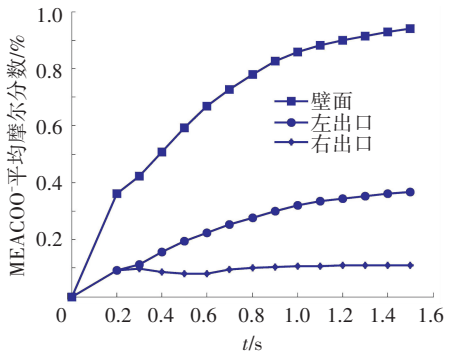


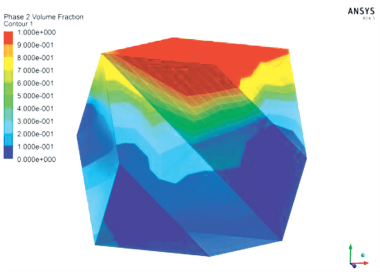
图 5 $MEACOO^-$在壁面与出口的平均摩尔分数

Fig.5 Mean mole fraction of $MEACOO^-$ at wall and outlet

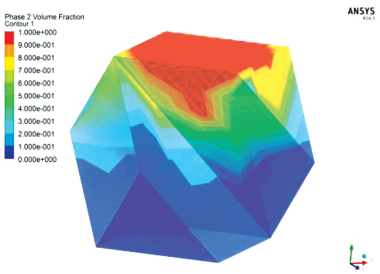
随着流体的流动与反应的进行,$MEACOO^-$浓度不断增加,随后趋于稳定. 初始时刻,气液两相接触发生化学反应,生成产物 $MEACOO^-$,在 0 ~ 1.0 s 的时间内 $MEACOO^-$在填料表面与出口面均逐渐增加,此时间段内大量生成 $MEACOO^-$,在 1.0 s 以后,增长速率减缓,开始趋于稳定,此时填料内部的化学反应也达到稳定状态.

单元内生成的 $MEACOO^-$主要集中在填料壁面,两个出口面的平均摩尔分数少于壁面,表明每一时刻会有产物移出填料单元,且浓度占总体的 1/5 左右,不可忽略. 故 CO_2的吸收率定义为壁面的 $MEACOO^-$与两个出口面平均的 $MEACOO^-$浓度之和.

不同气速下填料单元内液相分布如图 6 所示,液相体积分数代表液相分布,气体流速影响液相分布,气体流速越慢,则液体受气体的影响越小,流动状态波动也越小,从而在填料表面流动的面积越大.



(a) V_gas = 0.055 26 m/s;1.5 s



(b) V_gas = 0.552 6 m/s;1.5 s

图 6 不同气速下填料单元内液相分布

Fig.6 Liquid phase distribution versus gas velocity

2.2 不同操作条件下乙醇胺吸收 CO_2的化学反应模拟

2.2.1 烟气 CO_2质量分数

为分析烟气 CO_2浓度对吸收效率的影响,设定液体流量 3×10^4 L/h,烟气流量为2 250 m^3/h,MEA 摩尔分数为 0.05,压强与温度分别为 1 kPa 与 300 K,仅改变烟气 CO_2的质量分数,依次取烟气 CO_2质量分数 0.08、0.10、0.12、0.14、0.16 和 0.18. 模拟结果见图 7.

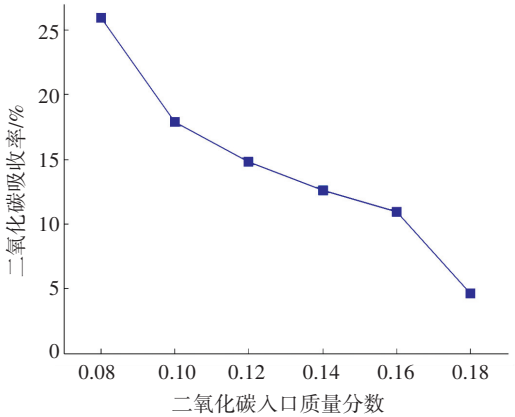


图 7 不同 CO_2质量分数下的烟气 CO_2吸收率

Fig.7 CO_2 absorptivity versus CO_2 mass fraction

由图 7 可知,CO_2吸收率随入口质量分数的升

高而降低. 将模拟结果与试验结果[16]进行了对比，试验中设定反应温度为 303 K，MEA 摩尔分数为 26%，以 4 L/min 的流量向反应器内通入 CO_2 质量分数分别为 9%、12%、15%和 18%的烟气. 模拟结果趋势与实验结果一致.

CO_2 质量浓度增大，则乙醇胺与二氧化碳的摩尔比值减小，从化学平衡角度来看，正向反应推动力减小，不利于 CO_2 吸收. 烟气中 CO_2 浓度升高，气相分压提高，进入液相主体中的 CO_2 的量增大，但抵消其对初始浓度的增大作用，所以随着烟气浓度的升高，吸收效率反而降低.

2.2.2　乙醇胺摩尔分数

为分析 MEA 摩尔分数对二氧化碳吸收效率的影响，仅改变 MEA 摩尔分数，其他边界条件不变，设定流量 3×10^4 L/h，烟气流量 2 250 m^3/h 为液体 75 倍，烟气 CO_2 质量分数为 14%，压强与温度分别为 1 kPa与 300 K，乙醇胺摩尔分数依此取 0.02、0.05、0.10、0.15、0.20 和 0.30.

模拟结果如图 8 所示，CO_2 吸收率随 MEA 摩尔分数的增加而明显上升.

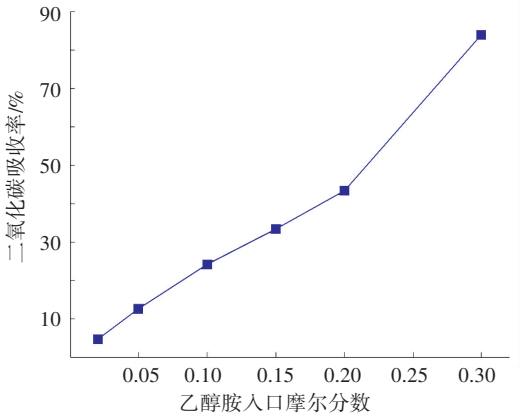


图 8　不同乙醇胺摩尔分数下 CO_2 吸收率

Fig.8　CO_2 absorptivity versus MEA mole fraction

文献[16]试验中设定反应温度为 303 K，将 CO_2 质量分数为 15%的模拟烟气以 4 L/min 的流量通入 MEA 摩尔分数分别为 8%、17%、26%与 35%的吸收溶液中，模拟结果与试验结果趋势相同. 随 MEA 浓度的增加，CO_2 吸收速率升高. 因为 MEA 摩尔浓度的增加，增大了其与 CO_2 的摩尔比，使得 CO_2 从气相传至液相马上与之反应，气液界面与液相主体的传质推动率增强，从而使得 CO_2 吸收效率升高.

2.2.3　气液流量比

为分析气液流量比对 CO_2 吸收效率的影响，设定液体流量 3×10^4 L/h，烟气 CO_2 质量分数为 14%，MEA 溶液摩尔分数为 5%，操作温度 300 K 与压强 1 kPa，仅改变入口烟气流量，依此选取烟气流量为液体流量的 7.50、75.00、150.00、181.25 与 212.50 倍. 模拟结果如图 9 所示，CO_2 吸收率随气液流量比的增大而降低. 将模拟结果与文献[16]的试验结果进行对比，试验采用通气式搅拌釜作为主体反应器，温度为 303 K，吸收溶液摩尔分数为 26%，模拟烟气中 CO_2 质量分数为 12%时，随烟气流量的增加，CO_2 脱除率降低，与本文模拟结果趋势一致.

气液流量比增大意味着气液两相在填料单元内停留的时间减少，且气体会将吸收剂带出填料单元，所以 CO_2 吸收率随气液流量比的增大而降低. 气液流量比还关系到填料层的充分浸润，气液流量比过高，会导致液体流不下来，进而导致液泛.

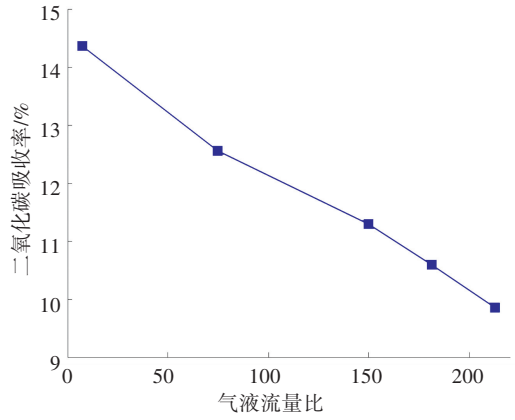


图 9　不同气液流量比下 CO_2 吸收率

Fig.9　CO_2 absorptivity versus ratio of gas-liquid flow

2.2.4　环境压强

为分析压强对 CO_2 吸收效率的影响，仅改变压强，其他边界条件不变，烟气流量为 2 250 m^3/h、液体流量 3×10^4 L/h、烟气 CO_2 质量分数为 14%、乙醇胺摩尔分数为 5%、操作温度 300 K，结果如图 10 所示.

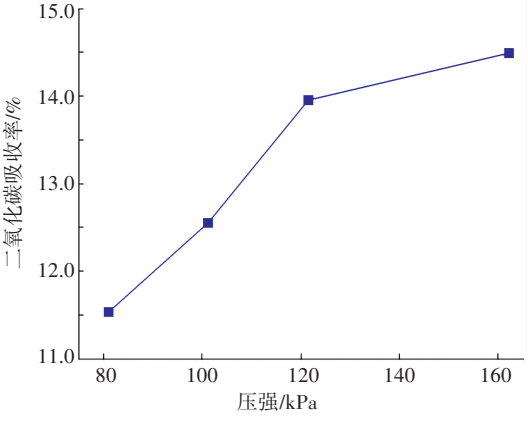


图 10　不同环境压强下二氧化碳吸收率

Fig.10　CO_2 absorptivity versus pressure

CO_2 吸收量随压强增大而增多，原因在于压强的增大，使化学平衡朝正向移动，反应推动力增大，化学反应更加充分，吸收率也就升高了. 在实际操

作中,发电厂烟气量大,会带来很多的能源消耗,并且增压需要耐压设备,费用较大,极不经济.

2.2.5 影响因素排序

为定量分析各个影响因素及其交互作用对 CO_2 吸收影响的大小,分别用 A、B、C、D 代表烟气 CO_2 质量分数、MEA 摩尔分数、气液流量比与环境压强,两两因素的交互作用分别用 $A*B$、$A*C$、$A*D$、$B*C$、$B*D$、$C*D$ 表示,交互作用的吸收效率由对应的影响因素的吸收效率乘积得到. 选取每个因素的高低两个水平值,并进行组合得到 $2^4=16$ 种模拟方案. 16 种模拟方案参数设置及模拟得到对应的 CO_2 吸收率,如表 3 所示.

对每个因素影响大小进行极差分析并进行排列,如图 11 所示.

表 3 模拟方案与结果

Tab.3 Simulation results

序号	A	B	C	D/ kPa	吸收效率/%
1	0.08	0.02	10	81.060	5.67
2	0.08	0.02	10	182.385	6.69
3	0.08	0.02	200	81.060	5.33
4	0.08	0.02	200	182.385	5.55
5	0.08	0.30	10	81.060	81.40
6	0.08	0.30	10	182.385	90.50
7	0.08	0.30	200	81.060	65.70
8	0.08	0.30	200	182.385	60.20
9	0.18	0.02	10	81.060	25.80
10	0.18	0.02	10	182.385	28.00
11	0.18	0.02	200	81.060	23.00
12	0.18	0.02	200	182.385	23.50
13	0.18	0.30	10	81.060	35.50
14	0.18	0.30	10	182.385	39.50
15	0.18	0.30	200	81.060	28.10
16	0.18	0.30	200	182.385	25.60

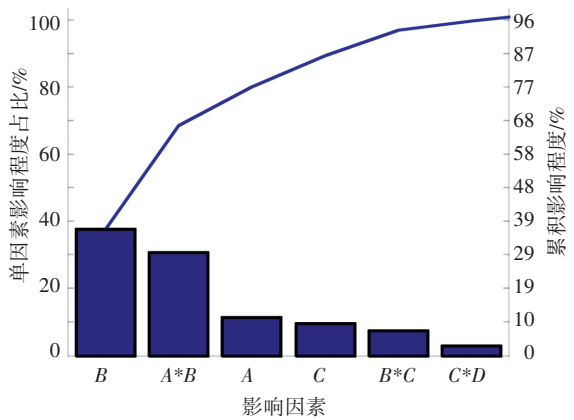


图 11 不同因素影响大小排列图

Fig.11 Pareto of different influence factors

影响因素 B,即 MEA 质量分数对吸收影响最大(占比 38%),其次依次是 MEA 摩尔分数与 CO_2 质量分数交互作用、CO_2 质量分数、气液流量比、MEA 摩尔分数与气液流量比交互作用、气液流量比与压强交互作用. 以上影响因素及其交互作用对吸收的影响累积达到 96%,剩余的 4 个因素或交互作用对吸收影响忽略不计.

2.3 最优参数

实际应用中,在满足工艺要求的前提下,还需综合考虑 CO_2 的吸收效率、胺降解、运营成本等问题. 本文中,当烟气流量为2 250 m^3/h,CO_2 质量分数为 14%时,选取 MEA 溶液为烟气流量的 1/10,即 225 m^3/h,MEA 摩尔分数选取 20% ~ 30%,温度为 300 K,压强为常压,才使模拟得到的 CO_2 吸收效率是最高的.

3 结 论

1)模拟了中尺度下吸收塔规整填料单元内乙醇胺吸收 CO_2 的传质与吸收过程,并通过填料表面 $MEACOO^-$ 在壁面与出口面的平均摩尔分数值近似计算得到 CO_2 的吸收率. MEA 吸收 CO_2 的过程,属于带化学反应的气液两相流动过程,气液两相接触时间越长,反应越充分,则生成的 $MEACOO^-$ 越多.

2)模拟分析了不同操作条件下规整填料单元内 MEA 吸收 CO_2 的化学反应,并得到不同操作条件对 CO_2 吸收率的影响.

3)对因素影响大小进行定量分析,MEA 摩尔分数对吸收效率影响最突出,其次依次是 CO_2 入口浓度、气液入口流量比、压强. 在实际碳捕集过程中,电厂燃烧烟气中 CO_2 初始浓度是确定的,需要根据操作条件确定合理的气液流量、乙醇胺浓度,从而保证 CO_2 最大脱除率.

本文模拟是在局部填料单元模型上进行的,未考虑吸收塔塔壁与材质对吸收过程的影响. 该方法是利用 Fluent 软件对碳捕集过程模拟的一种尝试. 在该方法的基础上,将来在计算机性能允许的条件下,利用 CFD 可以实现在规整填料塔整体模型上的碳捕集过程模拟.

参考文献

[1] MACDOWELL N, FLORIN N, BUCHARD A, et al. An overview of CO_2 capture technologies[J]. Energy & Environmental Science, 2010,3(11): 1645-1669. DOI:10.1039/c004106h.

[2] WHITE C M, STRAZISAR B R, GRANTIE E J, et al. Separation and capture of CO_2 from stationary sources and sequestration in geological formations coalbeds and deep saline aquifers[J]. Journal of the Air & Waste Management Association, 2003, 53(6): 645-715.

DOI:10.1080/10473289.2003.10466206.

[3]黄斌，许世森，郜时旺，等. 华能北京热电厂 CO_2 捕集工业试验研究[J]. 中国机电工程学报，2009，29(17)：14-20.
HUANG Bin，XU Shisen S，GAO Shiwang，et al. Industrial test of CO_2 capture in Huaneng Beijing coal-fired power station[J]. Proceedings of the CSEE，2009，29(17)：14-20. DOI:10.3321/j.issn:0258-8013.2009.17.003.

[4] PENG Y，ZHAO B，LI L. Advance in post combustion CO_2 capture with alkaline solution：a brief review[J]. Energy Procedia，2012，14(1)：1515-1522. DOI:10.1016/j.egypro.2011.12.1126.

[5] KITTEL J，IDEM R，GELOWITZ，et al. Corrosion in MEA units for CO_2 capture：pilot plant studies[J]. Energy Procedia，2009，1(1)：791-797. DOI:10.1016/j.egypro.2009.01.105.

[6] LEPAUMIER H，DA SILVA E F，EINBU A，et al. Comparison of MEA degradation in pilot-scale with lab-scale experiments[J]. Energy Procedia，2011，4(1)：1652-1659. DOI:10.1016/j.egypro.2011.02.037.

[7] ASENDRYCH D，NIEGODAJEW P，DROBNIAK S. CFD modeling of CO_2 capture in a packed bed by chemical absorption[J]. Chemical and Process Engineering，2013，34(2)：269-282. DOI:10.2478/cpe-2013-0022.

[8] 徐斌. 面向建材应用的二氧化碳捕获过程 CFD 模拟[D]. 哈尔滨：哈尔滨工业大学，2014.
XU Bin. CFD simulation of carbon dioxide capture reactors for architectural materials application[D]. Harbin：Harbin institute of technology，2014.

[9] 代成娜，项银，雷志刚. 规整填料塔中离子液体吸收 CO_2 的传质与流体力学性能[J]. 化工学报，2015，66(8)：2953-2961.
DAI Chengna，XIANG Yin，LEI Zhigang G. Mass transfer and hydraulic performance of CO_2 absorption by ionic liquids over structured packings[J]. Journal of Chemical Industry and Engineering，2015，66(8)：2953-2961. DOI:10.11949/j.issn.0438-1157.20150753.

[10]VERSTEE G F，VANSWAAIJ W P M. Solubility and diffusivity of acid gases (CO_2，N_2O) in aqueous alkanolamine solution[J]. Journal of Chemical & Engineering Data，1988，33(1)：29-34. DOI:10.1021/je00051a011.

[11]DANCKWERT L K，SHARMA M M. The absorption of carbon dioxide into solutions of alkalis and amines[J]. Chemical Engineering，1966，44：244-280.

[12]TONTIWACHWUTHIKUL P，ABOUDHEIR A，IDEM R，et al. Kinetics of the reactive absorption of carbon dioxide in high CO_2-loaded，concentrated aqueous monoethanolamine solutions[J]. Chemical Engineering Science，2003，58(23)：5195-5210. DOI:10.1016/j.ces.2003.08.014.

[13]HIGBIE R. The rate of absorption of a pure gas into a still liquid during shortperiod of exposure[J]. Transactions of the American Institute of Chemical Engineers，1935，1(1)：365-389.

[14]贾绍义，柴诚敬. 化工传质与分离过程[M]. 北京：化学工业出版社，2007：32-36.
JIA Shaoyi，CHAI Chengjing. Chemical mass transfer and separation process[M]. Beijing：Chemical Industry Press，2007：43-46.

[15]曾作祥. 传递过程原理[M]. 上海：华东理工大学出版社，2013：300-302.
ZENG Zuoxiang. Transfer process principle[M]. Shanghai：East China University of Science and Technology press，2013：300-302.

[16]司南. 乙醇胺(MEA)溶液吸收 CO_2 的试验研究[D]. 哈尔滨：哈尔滨工业大学，2009：27-32.
SI Nan. Experimental study on absorption of CO_2 in aqueous monoethenolamine (MEA) solution[D]. Harbin：Harbin institute of technology，2009：27-32.

（编辑　杨　波）