



ИОНХС РАН

Учреждение Российской академии наук

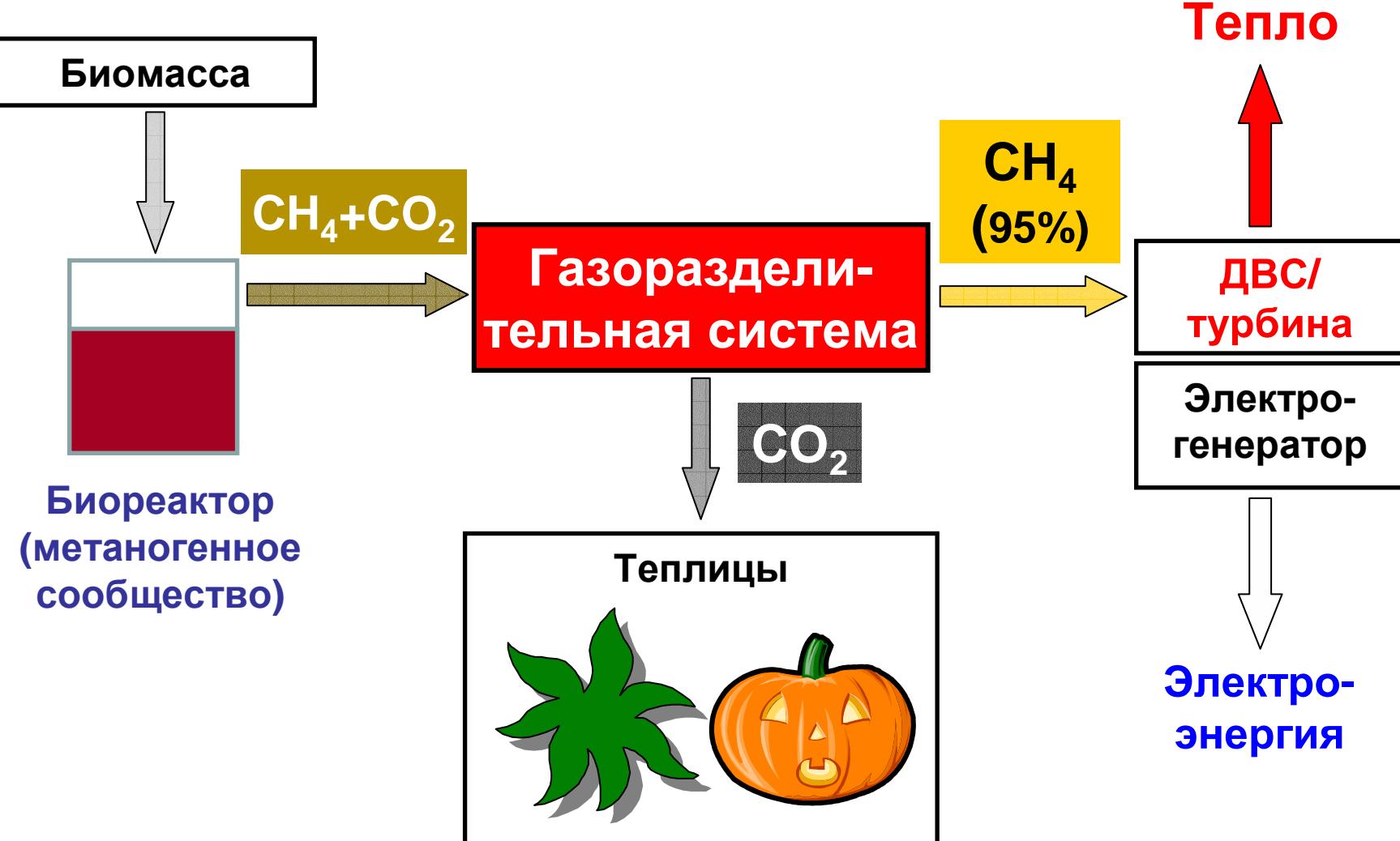
Ордена Трудового Красного Знамени

Институт нефтехимического синтеза им. А.В.Топчиева РАН

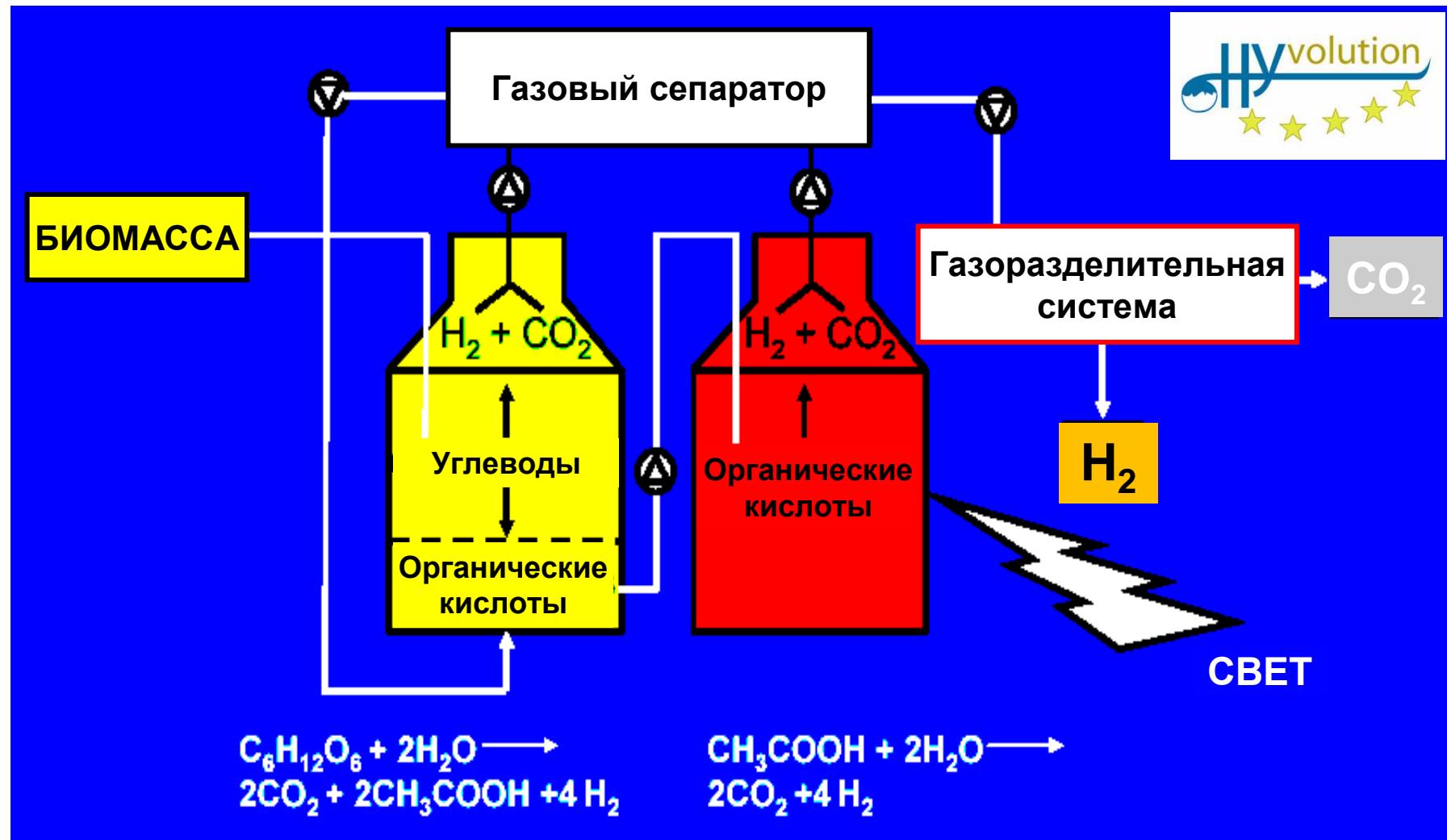
**ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ
РАЗДЕЛИТЕЛЬНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК
ГАЗОЖИДКОСТНОЙ МЕМБРАННОЙ СИСТЕМЫ
ДЛЯ ВЫДЕЛЕНИЯ CO_2 ИЗ ГАЗОВЫХ СМЕСЕЙ**

Шалыгин М.Г., Тепляков В.В.

**Лаборатория №28
Физико-химия мембранных процессов**



Нетермическое производство водорода (IP FP6 №019825 “HYVOLUTION”)

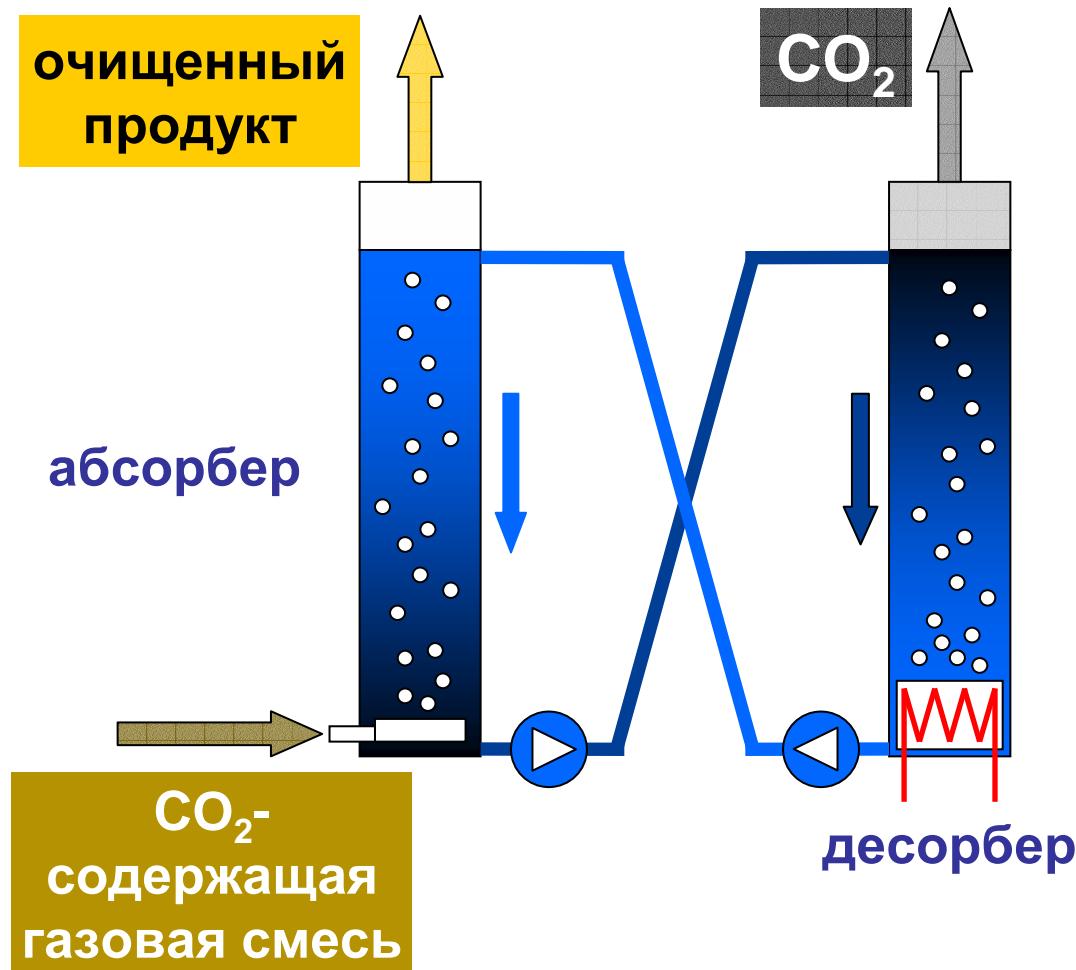


Характеристики газовых смесей на выходе биореакторов

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

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

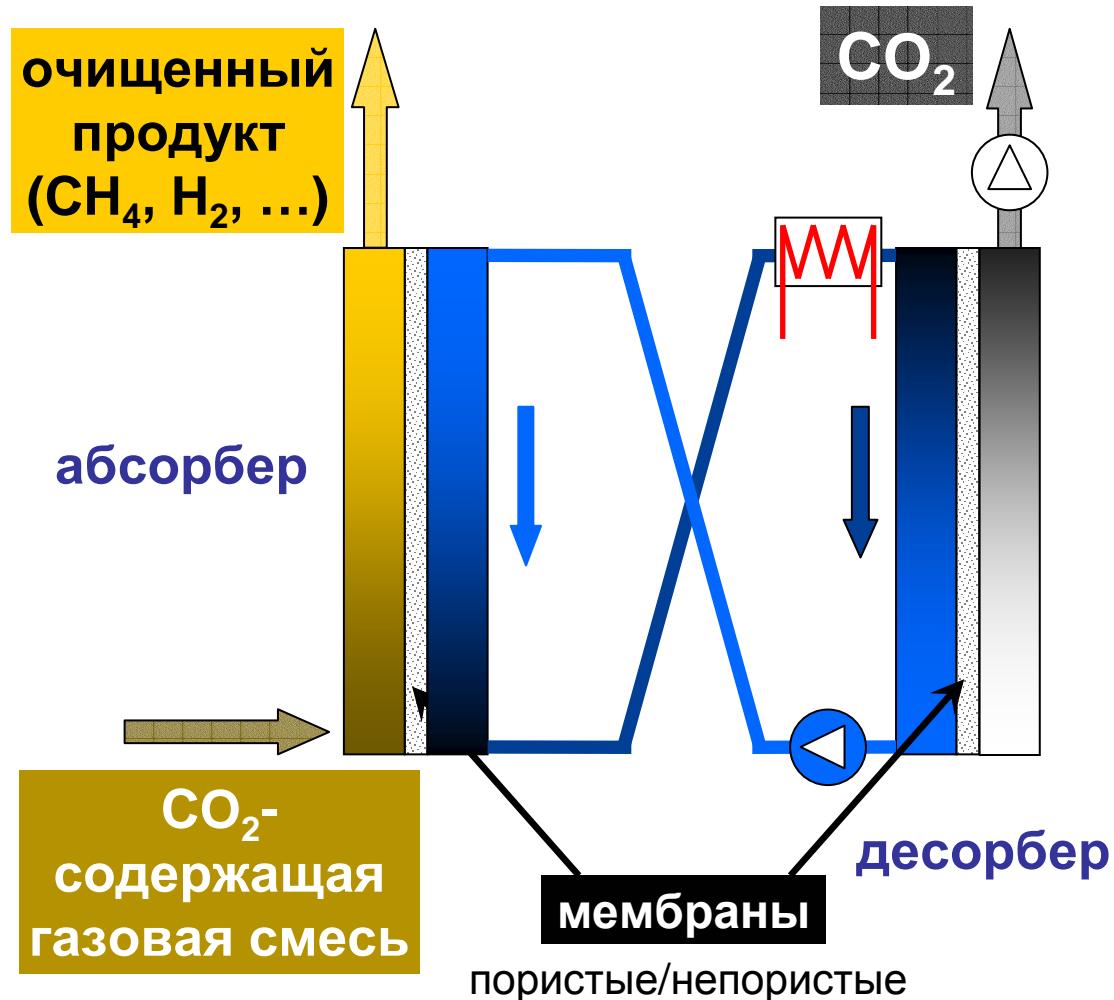
Традиционный абсорбционный процесс извлечения CO₂



Особенности процесса:

- неопределенная 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

Извлечение CO₂ с применением мембранных контакторов

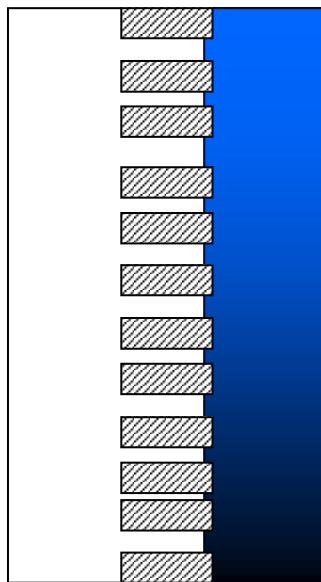


Особенности мембранных контакторов:

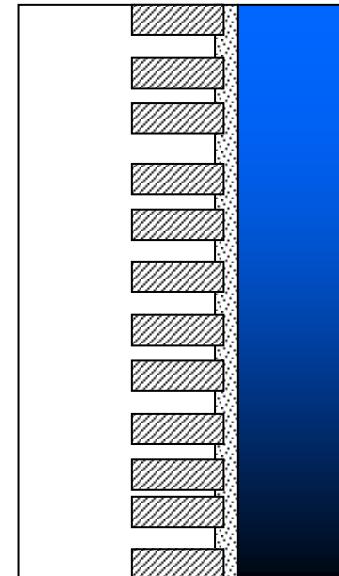
- известная геометрия и площадь межфазного контакта
- независимость потоков газовой и жидкой фаз
- удельная поверхность порядка $10^3 \text{ м}^2/\text{м}^3$
- дополнительное сопротивление массо-переносу в мембране

Мембранные контакторы с пористыми и непористыми мембранами

пористая мембра



непористая мембра



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

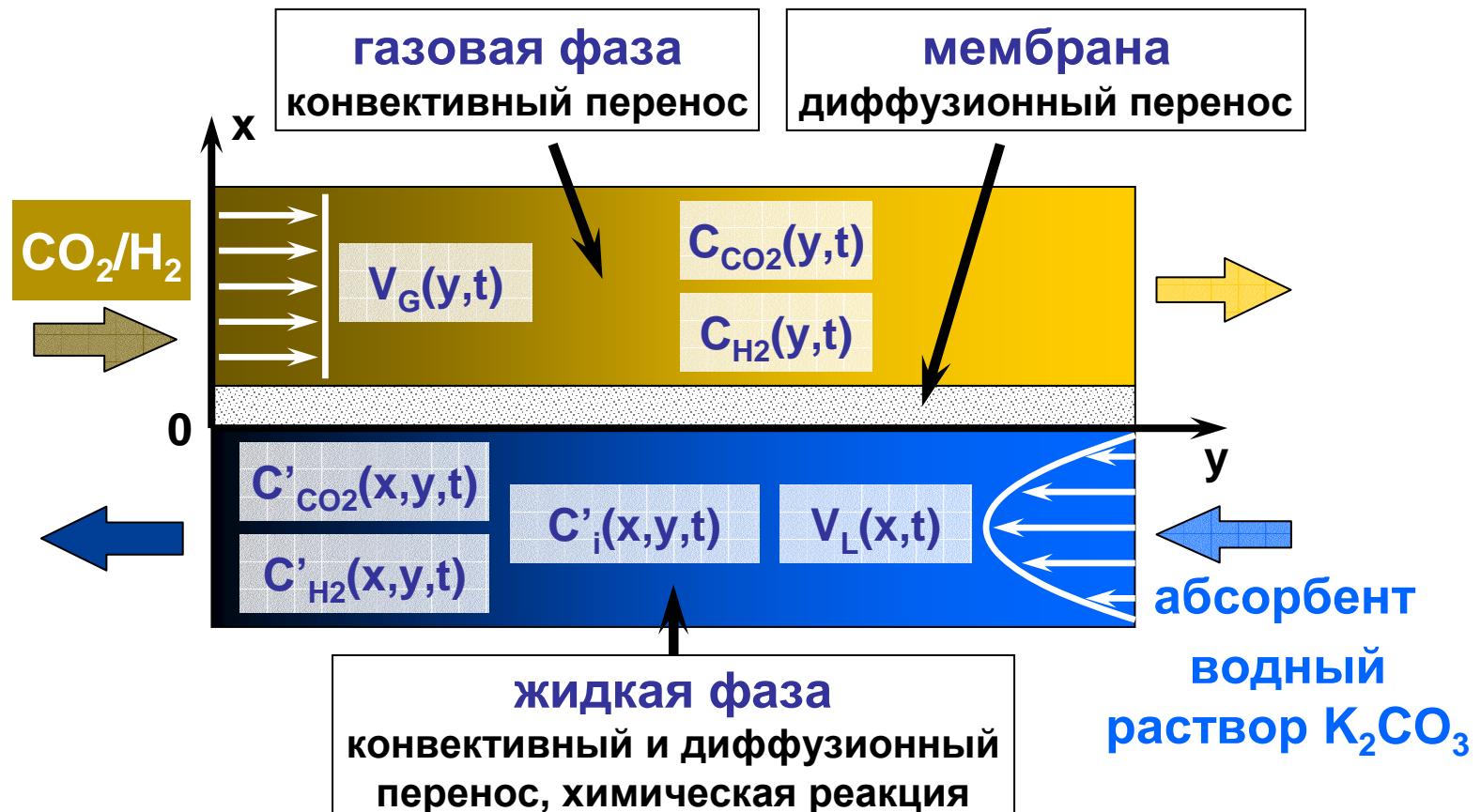
$$H = 100 \text{ мкм}, \epsilon = 0.7, t = 1.2$$

70 л/(м²·ч·атм)

проницаемость
непористой
мембраны на
основе ПВТМС

1600 л/(м²·ч·атм)

Математическая модель массопереноса в мембранным контакторе



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

Математическая модель массопереноса в мембранным контакторе

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

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

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

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

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

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

Газовая фаза

Мембрана

Жидкая фаза

J – поток

B – ширина модуля

D – коэффициент диффузии

C – концентрация

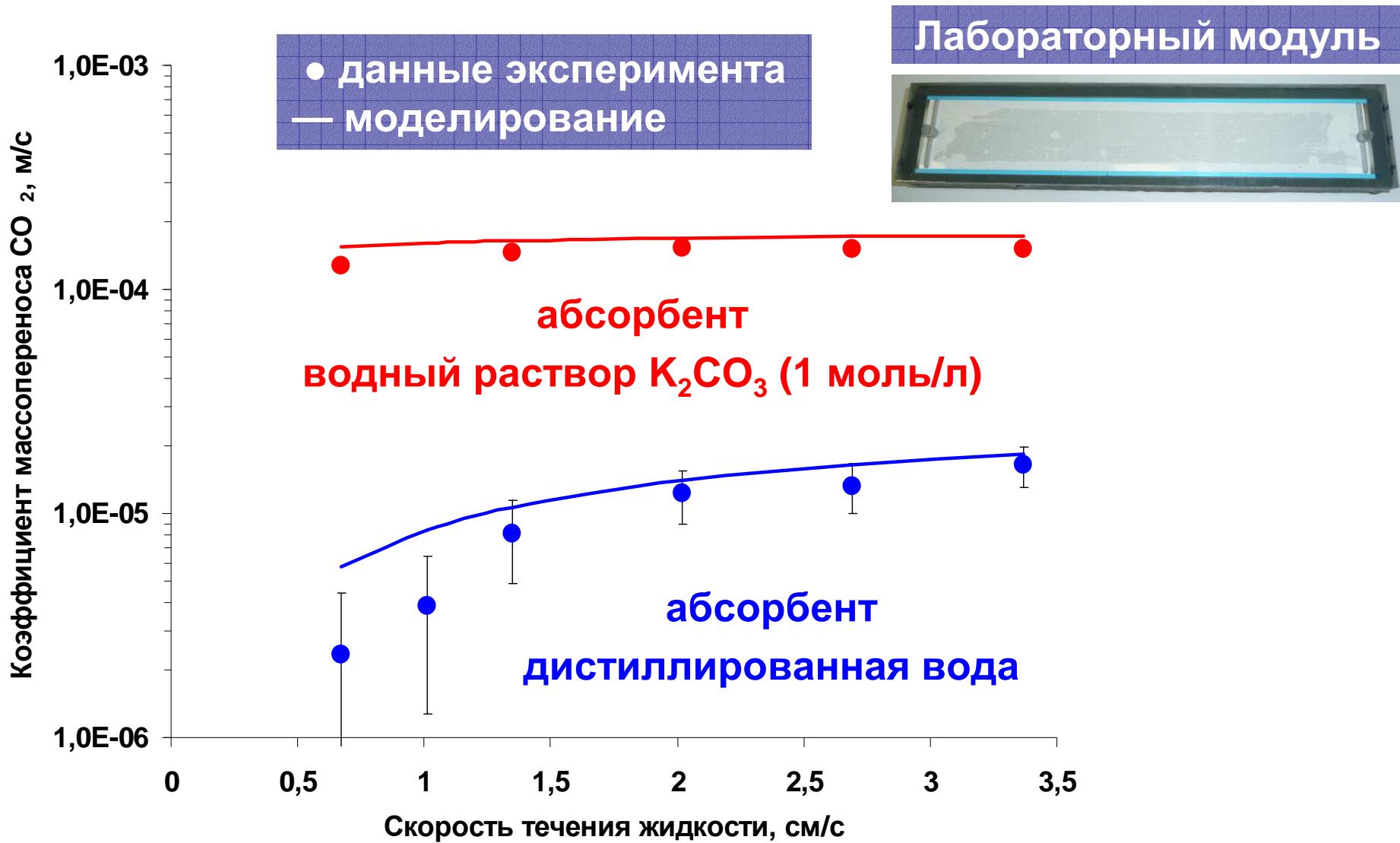
H – толщина

V – скорость жидкости

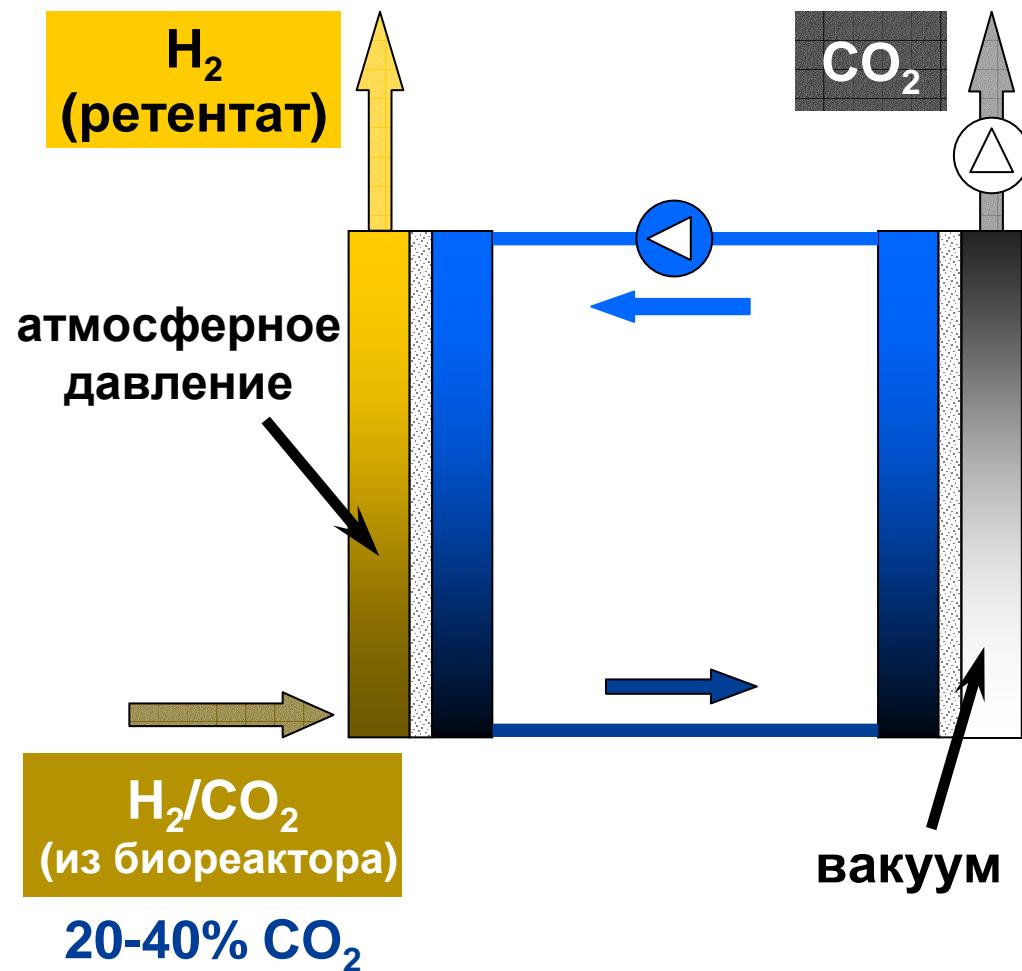
R – скорость образования компонента

K, k – константы равновесия и скорости хим. реакции

Сравнение экспериментальных данных и результатов моделирования



Моделирование системы при разделении смеси H_2 / CO_2



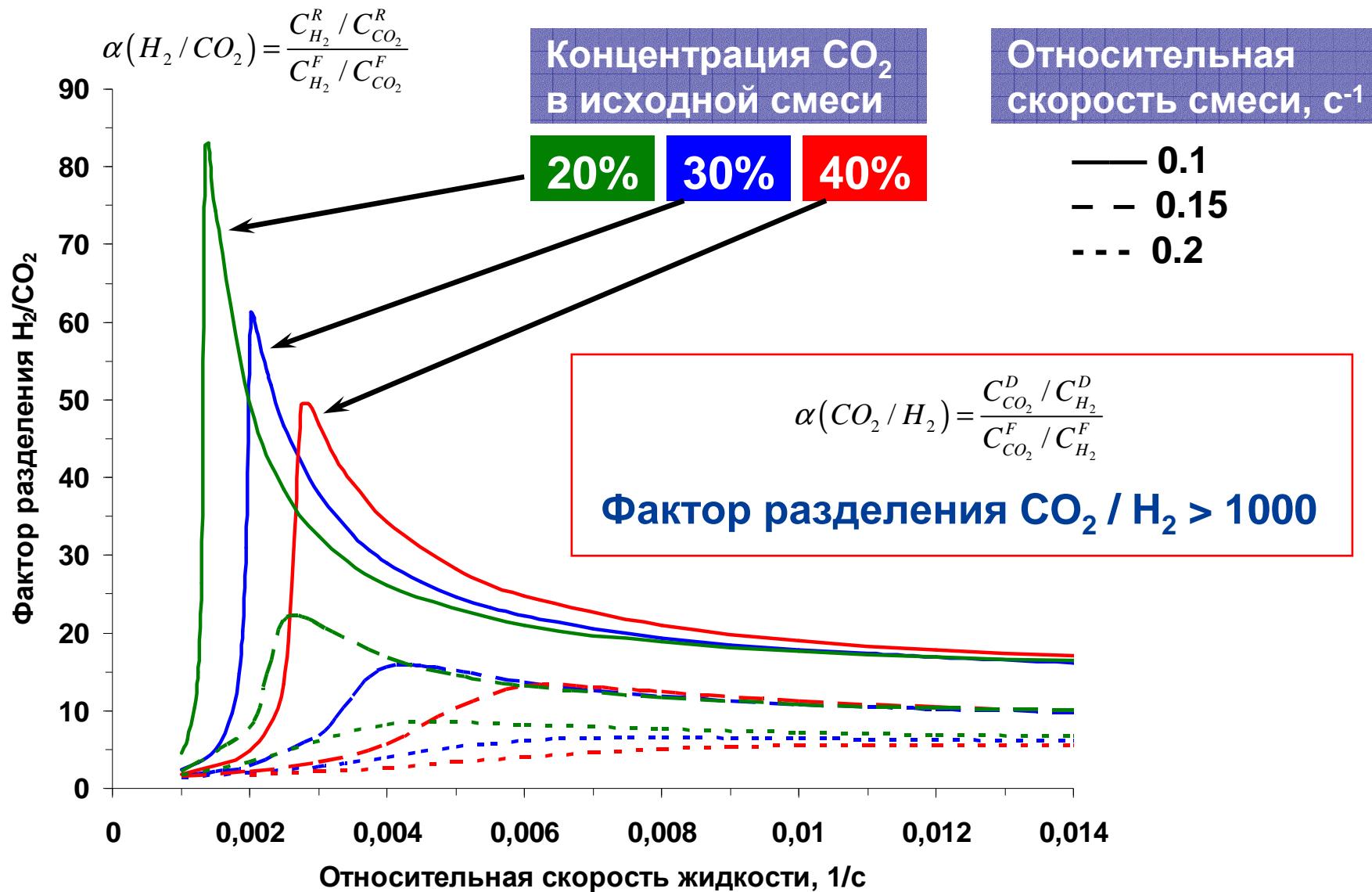
Постоянные параметры:

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

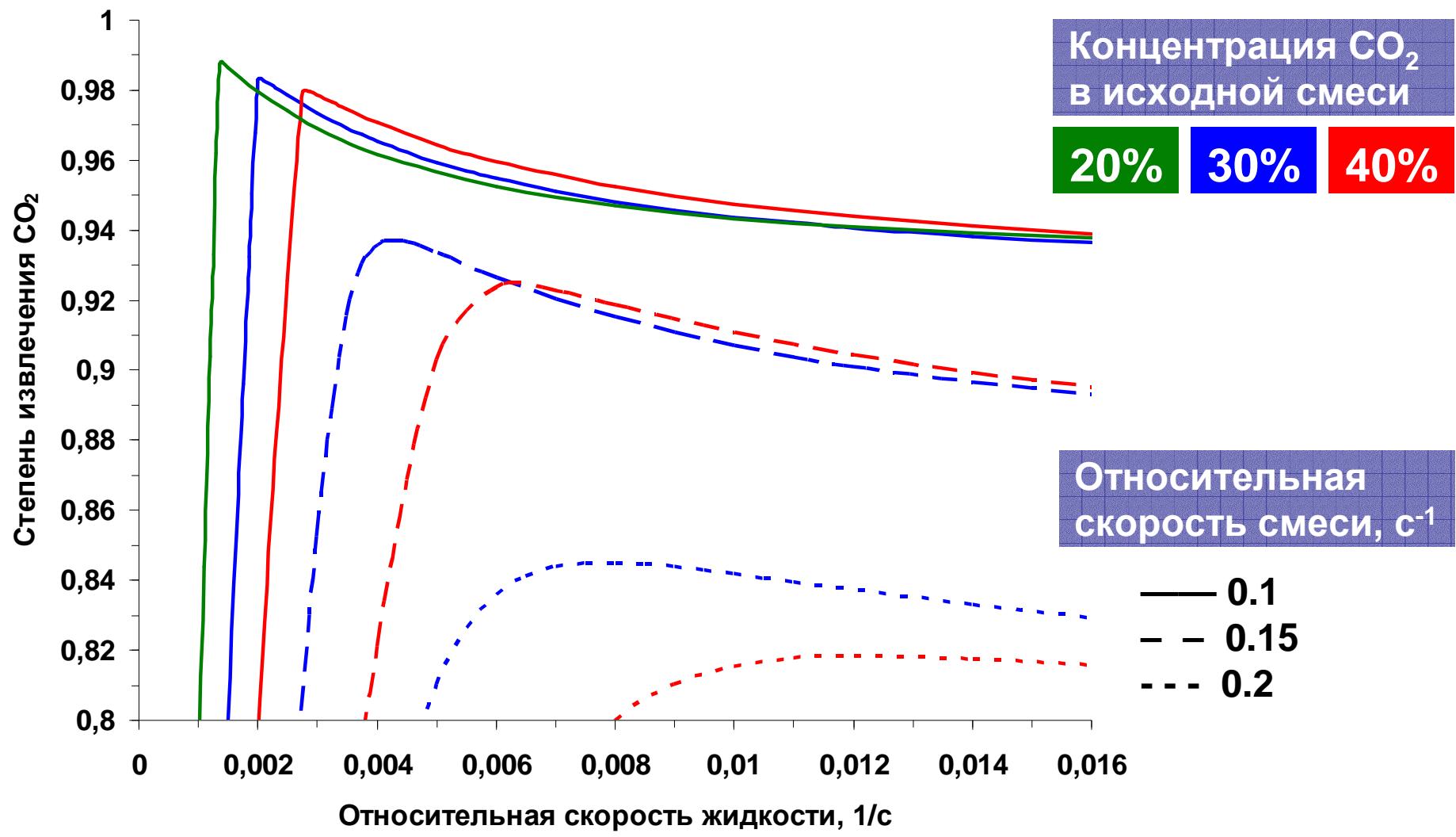
Переменные параметры:

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

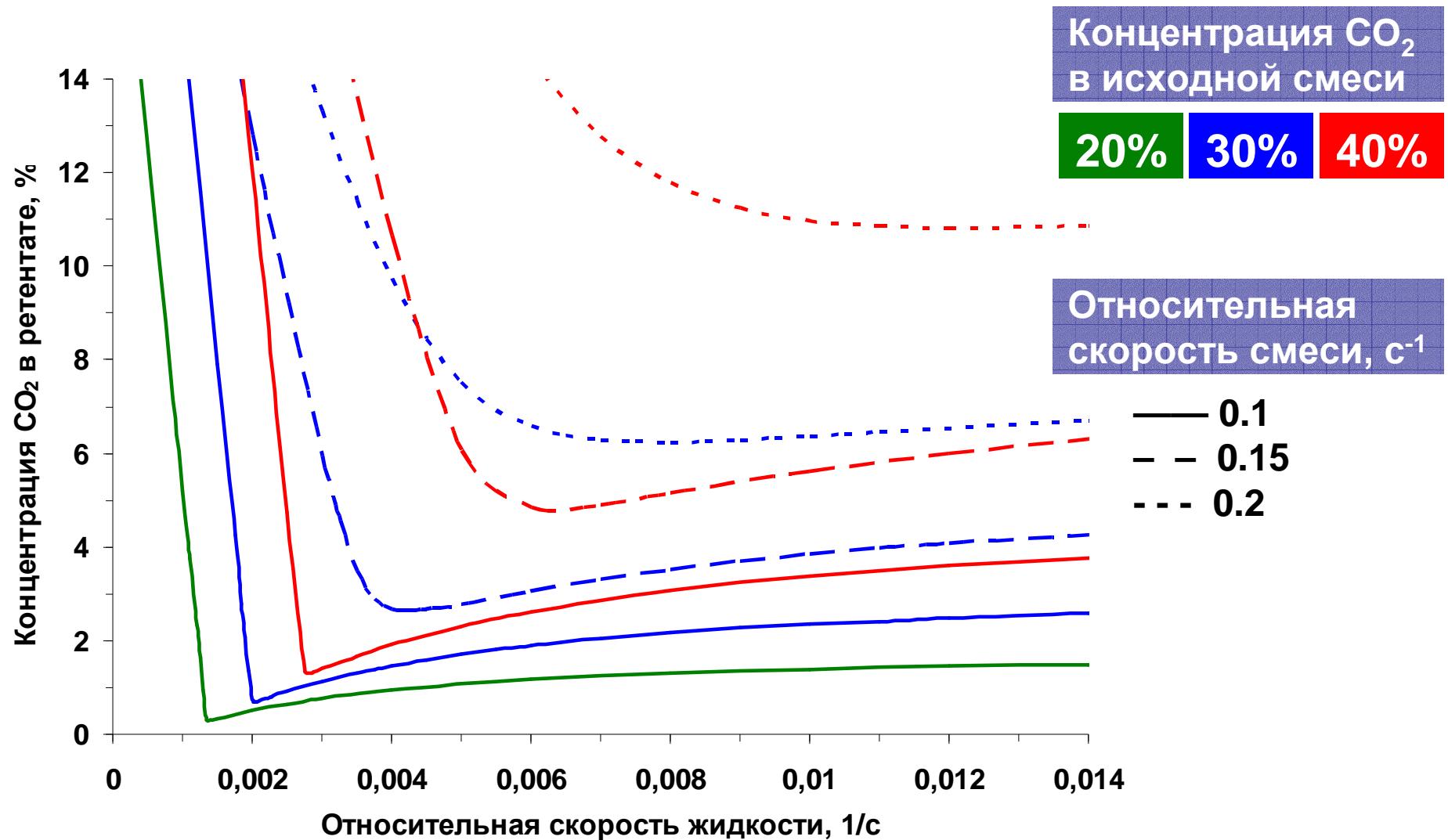
Факторы разделения



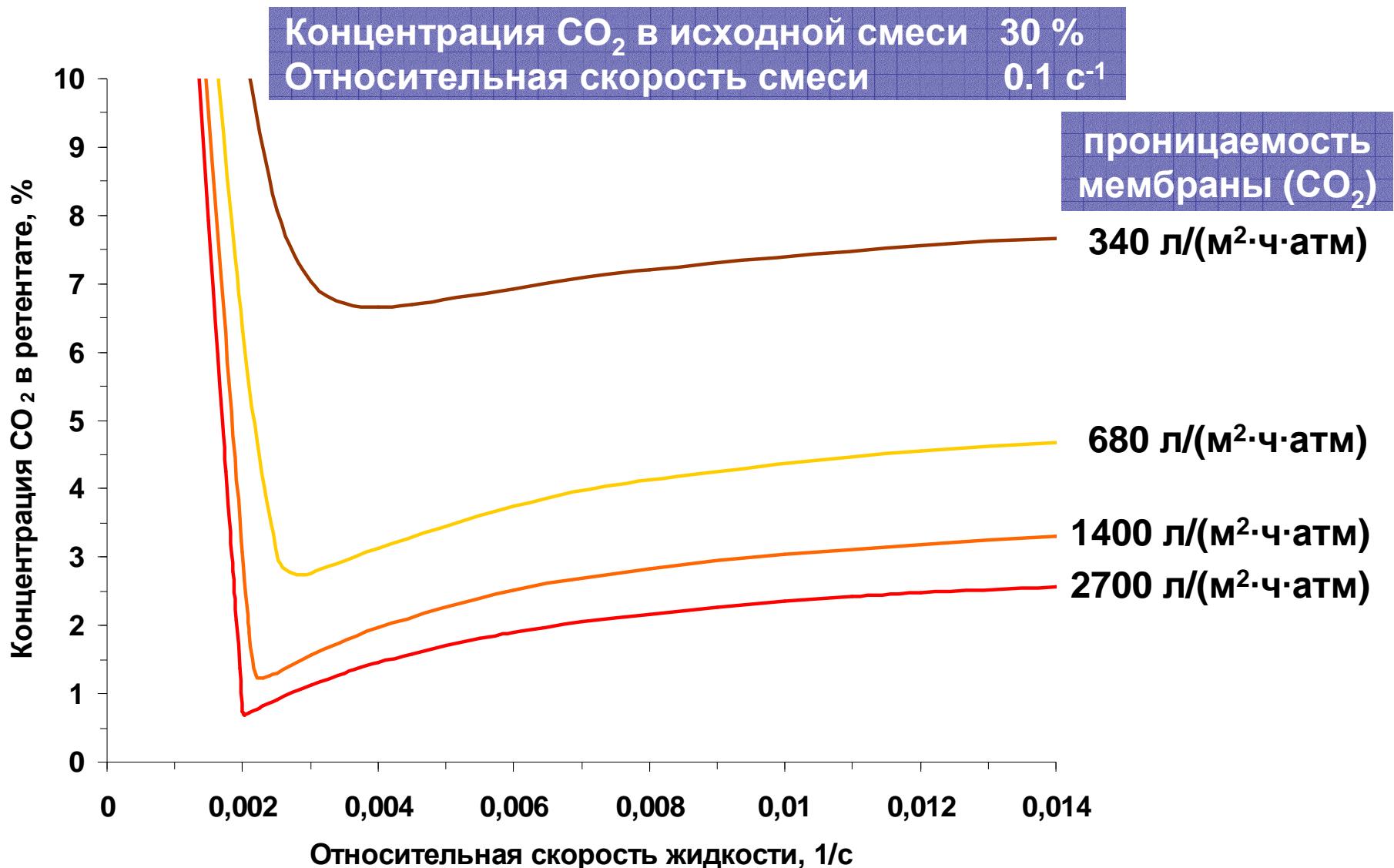
Степень извлечения компонентов



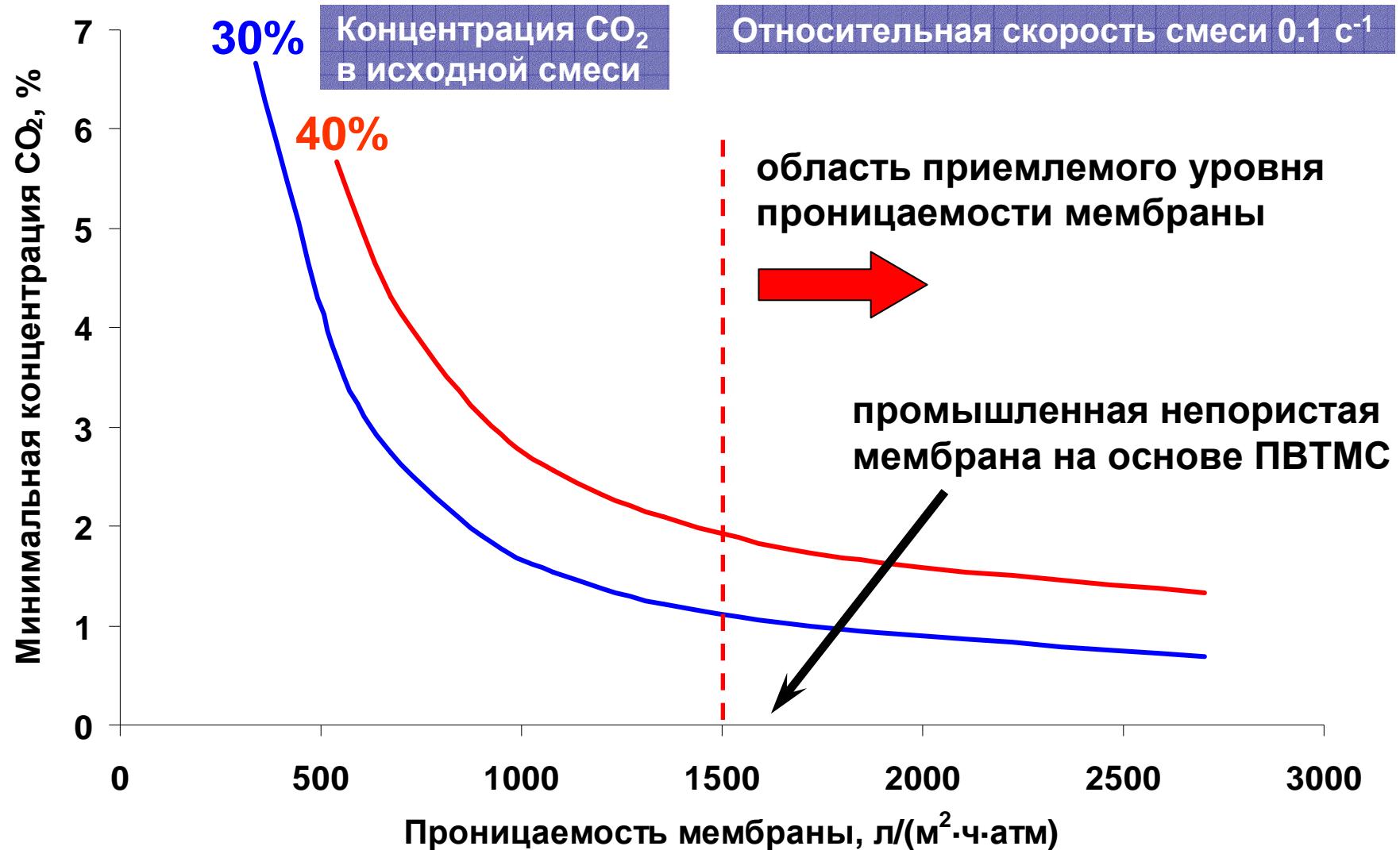
Зависимость концентрации CO₂ в ретентате от состава исходной смеси



Зависимость концентрации CO₂ в ретентате от проницаемости мембранны



Зависимость минимальной концентрации CO₂ 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 мембранны)

Работа выполнена при поддержке грантов:

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

Спасибо за внимание!