

ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΗ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ ΑΝΤΙΔΡΑΣΤΗΡΑ ΚΙΝΗΤΗΣ ΚΛΙΝΗΣ ΑΝΤΙΡΡΟΗΣ CaO ΚΑΙ C ΓΙΑ ΤΗΝ ΔΕΣΜΕΥΣΗ SO₂ ΚΑΙ CO₂

Σ. Ε. Μανάβη¹, Δ. Σπαρτινός^{1,*}

¹Τμήμα Χημικών Μηχανικών, Πανεπιστήμιο Πατρών, Πάτρα, Ελλάδα

*dspart@chemeng.upatras.gr

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Το διοξείδιο του θείου και το διοξείδιο του άνθρακα είναι δύο από τους κυριότερους ατμοσφαιρικούς ρύπους, που προέρχονται από την καύση λιγνίτη στα θερμοηλεκτρικά εργοστάσια παραγωγής ενέργειας. Στην προσπάθεια μείωσης των εκπομπών των συγκεκριμένων ρύπων έχουν αναπτυχθεί μια σειρά από τεχνολογίες δέσμευσης, οι οποίες χρησιμοποιούν ροφητές με βάση το ασβέστιο. Η παρούσα εργασία είναι τμήμα ενός ερευνητικού έργου, που αποσκοπεί στην ανάπτυξη ενός φίλτρου από ασβεστόλιθο τύπου κινητής κλίνης το οποίο τοποθετείται μετά την καύση για να δεσμεύσει το SO₂ από τα καπναέρια των καυστήρων κονιοποιημένου λιγνίτη. Σε προηγούμενες εργασίες έγινε μαθηματική μοντελοποίηση, αριθμητική προσομοίωση και παραμετρική ανάλυση του αντιδραστήρα κινητής κλίνης αντιρροής CaO και C. Για λόγους απλούστευσης του υπολογιστικού μοντέλου και λόγω των συνθηκών στις οποίες λειτουργεί ο αντιδραστήρας, έγινε η παραδοχή ότι στον αντιδραστήρα δεν πραγματοποιείται η αντίδραση της ενανθράκωσης του CaO.

Στην παρούσα εργασία μελετήθηκε βιβλιογραφικά η αντίδραση της ενανθράκωσης του CaO και βρέθηκαν οι συνθήκες κάτω από τις οποίες πραγματοποιείται. Στη συνέχεια, υπολογίστηκαν η εγγενής κινητική σταθερά και η αποτελεσματική διαχυτότητα μέσω του παραγόμενου στρώματος CaCO₃ και προσδιορίστηκε ο ρυθμός της αντίδρασης σε ένα σωματίδιο CaO και στον αντιδραστήρα. Τέλος, καταστρώθηκαν τα ισοζύγια μάζας και ενέργειας για τα αέρια και τα στερεά σε έναν αντιδραστήρα κινητής κλίνης αντιρροής CaO και C για την δέσμευση του SO₂ και του CO₂. Η αδιαστατοποίηση των εξισώσεων των ισοζυγίων οδήγησε στην μαθηματική μοντελοποίηση του αντιδραστήρα.

ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Η παραγωγή ηλεκτρικής ενέργειας από καύση γαιανθράκων με μεγάλη περιεκτικότητα σε θείο εξακολουθεί να αποτελεί μια σημαντική λύση για την ικανοποίηση των ολοένα αυξανόμενων ενεργειακών απαιτήσεων σε παγκόσμιο επίπεδο^[1]. Δυστυχώς, η καύση τέτοιων γαιανθράκων έχει ως αποτέλεσμα την εκπομπή δύο πολύ σημαντικών ατμοσφαιρικών ρύπων, του διοξειδίου του θείου (SO₂) και του διοξειδίου του άνθρακα (CO₂). Αρχικά, η μείωση των εκπομπών του SO₂ κρίνεται απαραίτητη καθώς σε μεγάλες συγκεντρώσεις επιβαρύνεται το αναπνευστικό σύστημα των ανθρώπων αλλά και γιατί η διαλυτοποίηση του SO₂ στα σύννεφα προκαλεί το φαινόμενο της όξινης βροχής^[2]. Από την άλλη, ο έλεγχος των ανθρωπογενών εκπομπών του CO₂ κρίνεται αναγκαίος καθώς μελέτες αποκαλύπτουν ότι το CO₂ είναι υπεύθυνο περίπου για το 70% του φαινομένου του θερμοκηπίου^[3]. Το τελευταίο διάστημα, ανάμεσα στις διάφορες μεθόδους αποθείωσης καυσίμων που έχουν αναπτυχθεί, το τεχνολογικό ενδιαφέρον επικεντρώνεται στις ξηρές μεθόδους αποθείωσης μετά την καύση, καθώς αυτές οι μέθοδοι έχουν μειωμένο κόστος σε σχέση με τις υπόλοιπες^[4]. Παρόμοια, για την δέσμευση του CO₂ οι περισσότερες τεχνολογίες που έχουν αναπτυχθεί αφορούν την δέσμευση μετά από την καύση καθώς μπορούν να εγκατασταθούν σε ήδη υφιστάμενες μονάδες^[5].

ΣΤΟΧΟΙ ΚΑΙ ΜΕΘΟΔΟΛΟΓΙΑ

Η προτεινόμενη τεχνολογία δέσμησης SO₂ περιλαμβάνει τη διαβίβαση των καπναέριων από τους υπάρχοντες καυστήρες των σταθμών παραγωγής ηλεκτρικής ενέργειας σε έναν αντιδραστήρα κινητής κλίνης αντιρροής CaO-C για τη δέσμηση του SO₂. Σε αυτήν τη στερεά κλίνη το SO₂ αντιδρά και δεσμεύεται από το CaO με βάση την παρακάτω αντίδραση:



Όταν υπάρχει διαθέσιμο CO₂, κάτω από ορισμένες συνθήκες πραγματοποιείται η παρακάτω αντίδραση:



Η αντίδραση της δέσμησης του SO₂ για να επιτευχθεί απαιτεί υψηλές θερμοκρασίες και σε αυτό συμβάλει η ισχυρά εξώθερμη καύση του λιγνίτη:

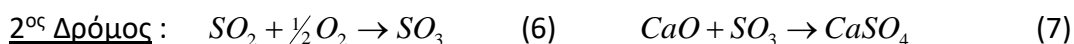
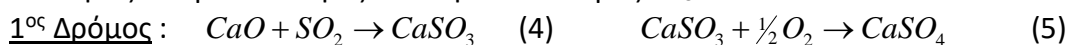


Σε προηγούμενες εργασίες έγινε μαθηματική μοντελοποίηση, αριθμητική προσομοίωση και παραμετρική ανάλυση του αντιδραστήρα κινητής κλίνης αντιρροής CaO και C^[6,7,8]. Όμως, για λόγους απλούστευσης του υπολογιστικού μοντέλου έγινε η παραδοχή ότι στον αντιδραστήρα δεν πραγματοποιείται η αντίδραση της ενανθράκωσης του CaO (εξ.2). Αυτή η παραδοχή είχε ως αποτέλεσμα το μοντέλο να ισχύει μόνο για συγκεκριμένο φάσμα θερμοκρασιών (T) και μερικών πιέσεων CO₂(P_{CO₂}). Ακόμη, με αυτόν τον τρόπο αγνοούνταν η δυνατότητα δέσμησης του παραγόμενου CO₂ στον αντιδραστήρα. Στην κατεύθυνση αντιμετώπισης των παραπάνω προβλημάτων, στην παρούσα εργασία αναπτύχθηκε ένα τροποποιημένο μοντέλο πιο κοντινό στην πραγματικότητα, στο οποίο περιλαμβάνεται και η αντίδραση του CO₂ με το CaO.

ΘΕΩΡΗΤΙΚΟ ΥΠΟΒΑΘΡΟ

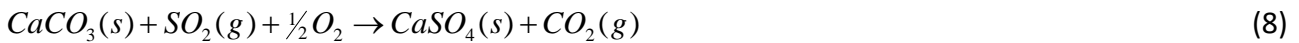
Οι αντιδράσεις που πραγματοποιούνται στον αντιδραστήρα της προτεινόμενης τεχνολογίας ανήκουν στην κατηγορία των μη καταλυτικών αντιδράσεων αερίου-στερεού^[6,9]. Τα βασικότερα μοντέλα τα οποία συναντώνται στην βιβλιογραφία για αυτού του τύπου τις αντιδράσεις είναι το μοντέλο του σμικρυνόμενου πυρήνα με ευδιάκριτη διεπιφάνεια, το μοντέλο αντίδρασης όγκου, το μοντέλο παράλληλων πόρων όπου η αρχική δομή του πόρου δεν αλλάζει, το μοντέλο παράλληλων πόρων όπου το σωματίδιο αντιπροσωπεύεται από έναν πόρο ο οποίος υφίσταται αλλαγές στη δομή λόγω αντίδρασης, το μοντέλο τυχαίων πόρων και το μοντέλο των κόκκων^[10,11,12]. Μερικοί σημαντικοί παράγοντες για την επιλογή μοντέλου είναι η απαιτούμενη μαθηματική ακρίβεια, το μέγεθος, τα δομικά χαρακτηριστικά και ο τρόπος σχηματισμού του σωματιδίου.

Για τον μηχανισμό της έμμεσης θείωσης, εξ.1, έχουν προταθεί δύο δρόμοι, εφ' όσον οι συνθήκες επιτρέπουν τη οξείδωση του SO₂ προς SO₃:



Η αντίδραση της εξ.6 είναι μια καταλυτική εξώθερμη αντίδραση και η κινητική της εξαρτάται σε μεγάλο βαθμό από το χρησιμοποιούμενο καταλύτη. Αυτό έχει ως αποτέλεσμα σε «κακές» καταλυτικές συνθήκες να παρουσιάζει μικρές μετατροπές^[13].

Η αντίδραση της ενανθράκωσης του οξειδίου του ασβεστίου, εξ.3, πραγματοποιείται σε ένα εύρος μερικών πιέσεων CO₂(1-15 atm) και θερμοκρασιών (673-1023K)^[9,14]. Οι περισσότεροι ερευνητές παρατήρησαν ότι ο μηχανισμός της αντίδρασης αρχικά ελέγχεται από το γρήγορο στάδιο της επιφανειακής αντίδρασης^[15] και στη συνέχεια από το πιο αργό στάδιο της διάχυσης του CO₂ μέσω του παραγόμενου στρώματος^[9]. Για την μοντελοποίηση της αντίδρασης έχουν χρησιμοποιηθεί διάφορα μοντέλα ανάλογα με το μέγεθος και το πορώδες των σωματιδίων CaO που χρησιμοποιήθηκαν στις πειραματικές διατάξεις^[9,14,15,16]. Επιπλέον, ο ασβεστόλιθος που δημιουργείται από την αντίδραση (1) μπορεί κάτω από συγκεκριμένες συνθήκες να αντιδράσει με το SO₂ σύμφωνα με την παρακάτω αντίδραση^[6,13]:



Όπως και οι δύο προηγούμενες αντιδράσεις που αναφέρθηκαν, έτσι και ο μηχανισμός της καύσης του άνθρακα έχει μελετηθεί εκτενώς [17,18].

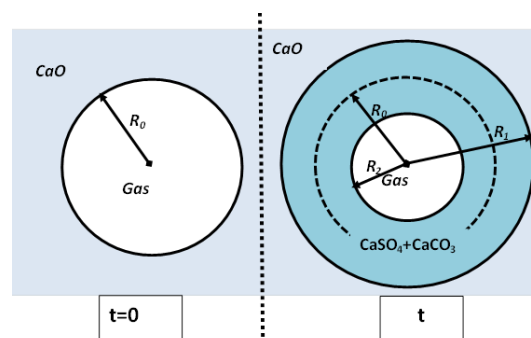
Στους αντιδραστήρες κινητής κλίνης υπάρχουν 3 τρόποι κίνησης των αερίων και των στερεών (ομορροή, αντιρροή και διασταυρούμενη ροή) [19]. Έχει αποδειχθεί ότι η μετατροπή των στερεών είναι σημαντικά μεγαλύτερη στην αντιρροή, σε σύγκριση με την ομορροή [19]. Οι αντιδραστήρες κινητής κλίνης λειτουργούν συνήθως σε μόνιμη κατάσταση και στις περισσότερες περιπτώσεις η ροή των αερίων και των στερεών προσεγγίζει την εμβολική, το οποίο είναι το βασικότερο πλεονέκτημά τους [19]. Όμως για πολύ εξώθερμες αντιδράσεις εμφανίζουν περιοχές υψηλής θερμοκρασίας (hot spots), το οποίο αποτελεί το κύριο μειονέκτημά τους.

ΜΑΘΗΜΑΤΙΚΗ ΜΟΝΤΕΛΟΠΟΙΗΣΗ

Αρχικά για τον υπολογισμό των ρυθμών των αντιδράσεων στον αντιδραστήρα χρειάζεται να βρεθεί η εξίσωση του ρυθμού r' (σε μονάδες: mole/smole αρχικού CaO) για τυχαίο σωματίδιο CaO στον όγκο ΔV του αντιδραστήρα. Ο υπολογισμός του r' γίνεται σύμφωνα με το μοντέλο των παράλληλων κυλινδρικών πόρων και για την εφαρμογή του μοντέλου γίνονται οι εξής παραδοχές:

- Ομοιόμορφο μέγεθος κυλινδρικών πόρων.
- Σταθερές συγκεντρώσεις του SO_2 και του CO_2 .
- Η αντίδραση (1) προχωράει μέσω σχηματισμού CaSO_3 και το δεσμευόμενο αέριο από το CaO είναι το SO_2 , εφόσον οι συνθήκες είναι μη καταλυτικές [6, 7, 20]
- Ο ρυθμός της αντίδρασης (1) καθορίζεται από τον συνδυασμό της εγγενούς κινητικής της αντίδρασης και της διάχυσης του SO_2 στο παραγόμενο στρώμα CaSO_4 και ο ρυθμός της αντίδρασης (2) καθορίζεται από συνδυασμό της εγγενούς κινητικής της αντίδρασης και της διάχυσης του CO_2 στο παραγόμενο στρώμα CaCO_3 [9].
- Δεν υπάρχει βαθμίδα θερμοκρασίας στο σωματίδιο του CaO σε τυχαίο χρόνο t , αλλά η θερμοκρασία μεταβάλλεται συναρτήσει του της ιστορίας των αντιδρώντων στερεών σωματιδίων.
- Δεν πραγματοποιείται η αντίδραση απευθείας θείωσης του ασβεστόλιθου, εξ.8

Είναι αξιοσημείωτο επίσης ότι, όπως φαίνεται στο Σχήμα 1, η ακτίνα των πόρων (R_2) μειώνεται με την πάροδο του χρόνου, με αποτέλεσμα το σταδιακό κλείσιμο των πόρων. Το γεγονός αυτό οφείλεται στον μεγαλύτερο γραμμομοριακό όγκο των CaSO_4 και CaCO_3 σε σχέση με αυτόν του CaO.



Σχήμα 1: Γεωμετρία πόρου CaO σύμφωνα με το μοντέλο παράλληλων κυλινδρικών πόρων

Αρχικά, με βάση τις παραπάνω παραδοχές μπορεί να γραφεί το ισοζύγιο μάζας για το CaO στο σωματίδιο ή ισοδύναμα η εξίσωση του ρυθμού r'' (σε mole/sm³ αρχικού στερεού) ως εξής:

$$r'' = \frac{1}{V} C_{\text{CaO}} NL_p 2\pi R_1 \frac{dR_1}{dt} = \frac{1}{V} (C_{\text{CaCO}_3} + C_{\text{CaSO}_4}) NL_p 2\pi \left(R_1 \frac{dR_1}{dt} - R_2 \frac{dR_2}{dt} \right) \quad (9)$$

με αρχική συνθήκη: $R_1 = R_2 = R_0$ για $t = 0$

Μετά από πράξεις και με την βοήθεια των παραδοχών, μπορεί να εξαχθεί και ο ρυθμός κατανάλωσης του CaO r' (σε mole/smole αρχικού στερεού CaO):

$$r' = \frac{2\varepsilon_{CaO}R_1}{(\varepsilon_{CaO} - 1)C_{CaO}R_o^2} \left(\frac{[SO_2]^0}{\frac{R_1 \ln(R_2/R_1)}{De_1} - \frac{1}{k_1}} + \frac{[CO_2]^0}{\frac{R_1 \ln(R_2/R_1)}{De_2} - \frac{1}{k_3}} \right) \Rightarrow r' = r'_1 + r'_2 \quad (10)$$

Όπου r'_1 (σε mole/smole αρχικού στερεού CaO) ο ρυθμός δέσμευσης του SO₂ από το CaO και r'_2 (σε mole/smole αρχικού στερεού CaO) ρυθμός δέσμευσης του CO₂ από το CaO στο σωματίδιο. Στην εξ.10 εμφανίζονται οι κινητικές σταθερές για των αντιδράσεων (1) και (2). Παρακάτω δίνεται η εξάρτηση τους από την θερμοκρασία^[9,20]:

$$k_1 = 5.36 \cdot 10^{-2} \exp\left(-\frac{7350}{RT}\right) \quad (11)$$

$$k_2 = 3,54 \cdot 10^{-4} \text{ m/s} \quad (\text{Για } T=823-1115 \text{ K}) \quad (12)$$

Η εξάρτηση της αποτελεσματικής διαχυτότητας του SO₂ στο παραγόμενο στρώμα CaSO₄ από την θερμοκρασία δίνεται από την παρακάτω σχέση^[6,20]:

$$De_1 = 5,4 \cdot 10^{-2} \exp\left(-\frac{10500}{RT}\right) \quad (13)$$

Η εξάρτηση της αποτελεσματικής διαχυτότητας του CO₂ μέσω του παραγόμενου στρώματος CaCO₃ από την θερμοκρασία δίνεται από την παρακάτω εξίσωση^[9]:

$$De_2 = D_o \exp\left(-\frac{E}{RT}\right) \quad (14)$$

Για $T < 788\text{K}$ ισχύει^[9]: $E_1 = 88 \text{ kJ/mol}$, $D_{o1} = 1,67 \cdot 10^{-14} \text{ m}^2/\text{s}$.

Για $T > 788 \text{ K}$ ισχύει^[9]: $E_2 = 179,2 \text{ kJ/mol}$, $D_{o2} = 1,49 \cdot 10^{-8} \text{ m}^2/\text{s}$.

Για τον υπολογισμό του ρυθμού r_3 της καύσης του C γίνονται οι ακόλουθες παραδοχές^[6,7]:

- Η καύση των σωματιδίων C πραγματοποιείται σύμφωνα με το μοντέλο ανέπαφου πυρήνα για σφαιρικούς κόκκους σμικρυνόμενου μεγέθους χωρίς τέφρα.
- Η αντίδραση 3 είναι πρώτης τάξης ως προς το O₂ και μηδενικής τάξης ως προς τον C.
- Ο ολικός ρυθμός της αντίδρασης καθορίζεται από την αλληλεπίδραση της εξωτερικής μεταφοράς μάζας του O₂ και της εγγενούς κινητικής της αντίδρασης.
- Όλα τα σωματίδια C έχουν στην είσοδο την ίδια διάμετρο (d_0) και σε δεδομένο ΔV του αντιδραστήρα και δεδομένη θέση η συγκέντρωση του O₂ και η θερμοκρασία είναι ίδιες για όλα τα σωματίδια, ενώ μεταβάλλονται στην αξονική διεύθυνση του αντιδραστήρα.

Με βάση τις παραπάνω παραδοχές, ο ολικός ρυθμός r_3 για τα σωματίδια C, που περιέχονται στον όγκο ΔV (σε m³), δίνεται από την εξίσωση^[6,7]:

$$r_3 = k_{3,ολ} \left(\frac{S_c}{\Delta V} \right) \left([O_2] - \frac{[CO_2]_b}{k_{a3}} \right) \quad (15)$$

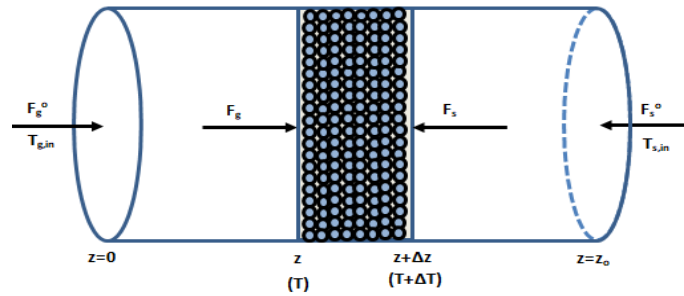
Η διατομή του αντιδραστήρα κινητής κλίνης αντιρροής CaO και C παρουσιάζεται στο Σχήμα 2. Ο αντιδραστήρας είναι κυλινδρικού σχήματος, συνεχούς λειτουργίας και βρίσκεται σε μόνιμη κατάσταση. Από τη θέση $z=0$ εισέρχεται το μίγμα αερίων (SO₂, O₂, N₂), ενώ από τη θέση $z=z_0$ εισέρχονται τα στερεά και κινούνται κατ' αντιρροή ως προς τα αέρια.

Ορίζεται ένας διαφορικός όγκος ελέγχου (ΔV), για τον οποίο εξάγονται τα ισοζύγια μάζας και ενέργειας, βάσει των παρακάτω παραδοχών^[6,7]:

- Οι μεταβλητές δεν αλλάζουν τιμή κατά την ακτινική διεύθυνση του αντιδραστήρα.
- Ο αντιδραστήρας είναι αδιαβατικός.

Η αξονική διάχυση μάζας για τα αέρια αντιδρώντα και η αξονική θερμική αγωγιμότητα της κλίνης είναι αμελητέες.

Ο «χρόνος» t αντιπροσωπεύει τον χρόνο παραμονής των στερεών από το σημείο εισροής τους στον αντιδραστήρα (z_0) μέχρι μια τυχαία θέση (z). Επομένως, ισχύει ότι: $t = \frac{z_0 - z}{u_{sol}}$ (16)



Σχήμα 2. Αξονική διατομή του αντιδραστήρα κινητής κλίνης CaO και C.

Για τον υπολογισμό του ρυθμού r στον αντιδραστήρα λαμβάνεται υπ' όψη ότι όλα τα σωματίδια CaO έχουν το ίδιο μέγεθος, το ίδιο πορώδες, τον ίδιο αριθμό και μέγεθος πόρων και ότι σε δεδομένο ΔV οι συγκεντρώσεις του SO_2 και του CO_2 και η θερμοκρασία είναι ίδιες για όλα τα σωματίδια. Προφανώς τα μεγέθη $[SO_2]^o, [CO_2]^o$ και T δεν είναι σταθερά στην αξονική κατεύθυνση του αντιδραστήρα. Σύμφωνα με αυτές τις παραδοχές ο ρυθμός r δίνεται από τη σχέση:

$$r = \frac{r' F_{CaO}^o}{u_{sol}} = \frac{(r'_1 + r'_2) F_{CaO}^o}{u_{sol}} = r_1 + r_2 \quad (17)$$

Ακόμη ισχύει για την αντίδραση καύσης του άνθρακα:

$$r_3 = \frac{6F_C^o k_{3,0\Lambda} (1 - X_C)^{2/3}}{d_o u_s C_{C,F}} \left([O_2] - [CO_2]_b / k_{a3} \right) \quad (18)$$

Μετά την εκτέλεση των πράξεων, προκύπτουν οι αδιάστατες εξισώσεις των ισοζυγίων μάζας και ενέργειας.

- **Αδιάστατα Ισοζύγια Μάζας Αερίων**

$$\frac{dX_{SO_2}}{d\zeta} = R1 \quad (19) \quad \frac{dX_{CO_2}}{d\zeta} = R3 - R2 \quad (20) \quad \frac{dX_{O_2}}{d\zeta} = \frac{1}{2} R1(NF_g) + R3 \quad (21)$$

με οριακές συνθήκες: $\zeta = 0 \Rightarrow X_{SO_2} = 0, X_{CO_2} = 0, X_{O_2} = 0$

- **Αδιάστατα Ισοζύγια Μάζας Στερεών**

$$\frac{dX_{CaO}}{d\zeta} = -R1(NF_1) - R2(NF_2) \quad (22) \quad \frac{dR_{01}}{d\zeta} = \frac{NR1}{R_{01}} \quad (23) \quad \frac{dX_C}{d\zeta} = -R3(NF_3) \quad (24)$$

με οριακές συνθήκες: $\zeta = 1 \Rightarrow X_{CaO} = 0, R_{01} = 1, X_C = 0$

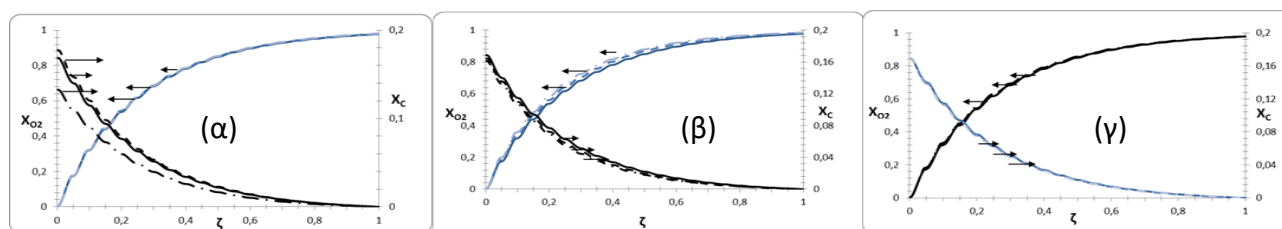
- **Αδιάστατα Ισοζύγια Ενέργειας Αερίων και Στερεών**

$$\frac{d\Theta_g}{d\zeta} + N_h(\Theta_g - \Theta_s) = 0 \quad (25) \quad \frac{d\Theta_s}{d\zeta} + N(F_{Cp})N_h(\Theta_g - \Theta_s) + N_{h1}R1 + N_{h2}R2 + N_{h3}R3 = 0 \quad (26)$$

με οριακές συνθήκες: $\zeta = 0 \Rightarrow \Theta_g = \Theta_{g,in}, \zeta = 1 \Rightarrow \Theta_s = \Theta_{s,in}$

Το σύστημα των διαφορικών εξισώσεων, που προκύπτει μετά την αδιαστατοποίηση, αποτελεί ένα πρόβλημα «ακραίων τιμών».

Το μαθηματικό μοντέλο στις προηγούμενες εργασίες επιλύθηκε με τη μέθοδο πεπερασμένων στοιχείων και έδωσε αποτελέσματα για την κατανομή των θερμοκρασιών και των μετατροπών κατά μήκος του αντιδραστήρα. Συγκεκριμένα στα διαγράμματα της μετατροπής του O_2 (X_{O_2}) και του C (X_C) συναρτήσει της θέσης ζ στον αντιδραστήρα [7] φαίνεται ότι το οξυγόνο καταναλώνεται σχεδόν 100% από τις αντιδράσεις καύσης του C και της θείωσης του CaO στην έξοδο του αντιδραστήρα ($\zeta=1$). Σύμφωνα λοιπόν με τα παραπάνω είναι λογική η παραδοχή που έγινε στην παρούσα εργασία ότι δεν πραγματοποιείται η αντίδραση της απ' ευθείας θείωσης του $CaCO_3$, ε.ξ.8.



Σχήμα 3. Κατανομή των μετατροπών του O_2 και του C κατά μήκος του αντιδραστήρα σε συνθήκες λειτουργίας : $T_{g,in}=550K$, $q_o=4.6 \cdot 10^{-6} m^3/s$, $u_s=3.2 \cdot 10^{-4} m/s$, $\gamma^{\circ}_{SO_2}=0.02$, $\gamma^{\circ}_{O_2}=0.1$, $d_o=4mm$, $z_o=5cm$. Επίδραση της θερμοκρασίας $T_{s,in}$ (α) : - $T_{s,in}=550K$ - - - $T_{s,in}=600K$ -.- $T_{s,in}=650K$. Επίδραση της θερμοκρασίας $T_{g,in}$ (β) : - $T_{g,in}=550K$ - - - $T_{g,in}=600K$ -.- $T_{g,in}=650K$. Επίδραση της γραμμομοριακής παροχής $\gamma^{\circ}_{O_2}$ (γ) :- $\gamma^{\circ}_{O_2}=0.1$ - - - $\gamma^{\circ}_{O_2}=0.08$ -.- $\gamma^{\circ}_{O_2}=0.06$ ^[7].

ΣΥΜΠΕΡΑΣΜΑΤΑ

Σε προηγούμενες εργασίες έγινε μαθηματική μοντελοποίηση, αριθμητική προσομοίωση και παραμετρική ανάλυση του αντιδραστήρα κινητής κλίνης αντιρροής CaO και C . Για λόγους απλούστευσης του υπολογιστικού μοντέλου και λόγω των συνθηκών στις οποίες λειτουργεί ο αντιδραστήρας, έγινε η παραδοχή ότι στον αντιδραστήρα δεν πραγματοποιείται η αντίδραση της ενανθράκωσης του CaO . Αυτή η παραδοχή είχε ως αποτέλεσμα το μοντέλο να ισχύει μόνο για συγκεκριμένο φάσμα θερμοκρασιών (T) και μερικών πιέσεων CO_2 (P_{CO_2}). Ακόμη, με αυτόν τον τρόπο αγνοούνταν η δυνατότητα δέσμευσης του παραγόμενου CO_2 στον αντιδραστήρα.

Στην παρούσα εργασία έγινε περαιτέρω βιβλιογραφική έρευνα για τις αντιδράσεις δέσμευσης του SO_2 από το CaO και καύσης του C , καθώς και για τους αντιδραστήρες κινητής κλίνης. Επίσης έγινε βιβλιογραφική έρευνα σχετικά με την αντίδραση της ενανθράκωσης του CaO και βρέθηκαν οι συνθήκες κάτω από τις οποίες πραγματοποιείται. Στη συνέχεια, υπολογίστηκαν η εγγενής κινητική σταθερά της αντίδρασης και η αποτελεσματική διαχυτότητα μέσω του παραγόμενου στρώματος $CaCO_3$ και προσδιορίστηκε ο ρυθμός της αντίδρασης σε ένα σωματίδιο CaO και στον αντιδραστήρα. Τέλος, καταστρώθηκαν τα ισοζύγια μάζας και τα ισοζύγια ενέργειας για τα αέρια και τα στερεά σε έναν αντιδραστήρα κινητής κλίνης αντιρροής CaO και C για την δέσμευση του SO_2 και του CO_2 . Η αδιαστατοποίηση των εξισώσεων των ισοζυγίων οδήγησε στην μαθηματική μοντελοποίηση του αντιδραστήρα.

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

- [1] N.E. Altun. Fuel Processing Technology (128) (2014) 461-470.
- [2] J.H. Seinfeld & S.N. Pandis. New York, USA: John Wiley & Sonc,Inc (2016).
- [3] Y. Wu, C. Chan. Engineering Applications of Artificial Intelligence (24) (2011) 154-63.
- [4] B. Ozturk & Y. Yildirim. Process Safety and Environmental Protection (86) (2008) 31-36.
- [5] H. Herzog. Massachusetts,USA: The MIT Press Essential Knowledge series (2009).
- [6] Δ.Ν. Σπαρτινός. Πάτρα, Ελλάδα: Πανεπιστήμιο Πατρών (1993).
- [7] J.H. Stefan, S.I. Manavi, F.E. Paloukis, D.N. Spartinos. Jour.ofChem.Tec.&Biotec. (93) (2018) 2681-2690.
- [8] Ε.Θ. Βλάχση & Δ.Ν. Σπαρτινός. 7^οΠΣΧΜ, Πανεπιστήμιο Πατρών (2009).
- [9] S.K Bhatia & D.D. Perlmutter. AIChE Journal (29) (1988) 79-86.
- [10] K.B. Bischoff & G.F. Forment. New York, USA: John Wiley & Sonc,Inc (1979).
- [11] P.A. Ramachandran & L.K. Doraiswamy. AIChE Journal (881) (1982) 28.
- [12] S. Arabi & H.H. Rafsanjani. Chemical Product and process modeling (3) (2008) 1-29.
- [13] A.N. Hayhurst & J.S. Dennis Chem. Eng. Sci. (45) (1990) 1175.
- [14] A. Silaban & D.p. Harrison. Chem.Eng.Communications (137) (1995) 177-190.
- [15] D.Mess, A.F. Sarofim, J.P.Longwell. Energy and Fuels (13) (1999) 99-1005.
- [16] P. Sun, J.R. Grace, J.C. Lim, E.J. Anthony. Chem.Eng.Sci. (63) (2008) 47-56.
- [17] M.M. Avedesian & J.F. Davidson. Trans. Instit. Chem. Engrs. (51) (1973) 121.
- [18] R.R. Cwiklinski, C.G.Vayenas, C. Gerorgakis, J. Wei. Chem.Eng.Sci. (36) (1981) 1883.
- [19] R. Paula, V. Castro, J.I. Medeiros, O.Q.F. Araujo, M.A. Cruz, G.T. Ribeiro, V.O. Reich Energy Conversion and Management (143) (2017) 173-187.
- [20] D.N. Spartinos, C.G. Vayenas. Chem. Eng. Process (30) (1991) 97-106.