

b). *Regim staționar, izoterm, curgere tip piston cu dispersie axială.*

În cazul în care se ia în considerare și dispersia axială, ecuațiile care descriu modificarea compoziției fazelor sunt:

$$\frac{1}{\text{Pe}_G} \cdot \frac{d^2 Y}{dz^2} - \frac{dY}{dz} - \frac{K_Y \cdot a \cdot H}{G_0} \cdot \left( Y - K_e \cdot \frac{\alpha^2}{1 - \alpha} \right) = 0 \quad (\text{II.4.115})$$

$$\frac{1}{\text{Pe}_L} \cdot \frac{d^2 \alpha}{dz^2} + \frac{d\alpha}{dz} + \frac{K_Y \cdot a \cdot H}{L_0 \cdot M} \cdot \left( Y - K_e \cdot \frac{\alpha^2}{1 - \alpha} \right) = 0$$

Condițiile la limită:

$$\begin{aligned} Y|_{z=0} - \frac{1}{\text{Pe}_G} \cdot \frac{\partial Y}{\partial z} \Big|_{z=0} &= Y_{\text{in}} \\ \frac{dY}{dz} \Big|_{z=1} &= 0 \end{aligned} \quad (\text{II.4.116})$$

$$\begin{aligned} \alpha|_{z=1} + \frac{1}{\text{Pe}_L} \cdot \frac{d\alpha}{dz} \Big|_{z=1} &= \alpha_{\text{in}} \\ \frac{d\alpha}{dz} \Big|_{z=0} &= 0 \end{aligned}$$

Soluționarea numerică a sistemului de ecuații diferențiale (II.4.115) pornește de la scrierea acestor ecuații ca și ecuații cu diferențe (metoda matricială, §I.4.1.2.3):

$$\frac{1}{\text{Pe}_g} \cdot \frac{Y_{i+1} - 2 \cdot Y_i + Y_{i-1}}{\Delta z^2} - \frac{Y_{i+1} - Y_{i-1}}{2 \cdot \Delta z} - \frac{K_Y \cdot a \cdot H}{G_0} \cdot \left( Y_i - K_e \cdot \frac{\alpha_i^2}{1 - \alpha_i} \right) = 0 \quad (\text{II.4.117})$$

$$\frac{1}{\text{Pe}_L} \cdot \frac{\alpha_{i+1} - 2 \cdot \alpha_i + \alpha_{i-1}}{\Delta z^2} - \frac{\alpha_{i+1} - \alpha_{i-1}}{2 \cdot \Delta z} - \frac{K_Y \cdot a \cdot H}{L_0 \cdot M} \cdot \left( Y_i - K_e \cdot \frac{\alpha_i^2}{1 - \alpha_i} \right) = 0$$

O problemă importantă în asigurarea stabilității și convergenței soluției numerice a sistemelor de ecuații neliniare de tipul sistemului II.4.117 este modul de

transpunere în scheme cu diferențe a condițiilor la limită. Una din tehnicile care asigură o bună convergență este aceea a construirii a câte unei celule suplimentare la cele două extremități: celulele "-1" și "n+1".

$Y_{-1}$	$Y_1$	$Y_2$	.....	$Y_{n-1}$	$Y_n$	$Y_{n+1}$
$\alpha_{-1}$	$\alpha_1$	$\alpha_2$	.....	$\alpha_{n-1}$	$\alpha_n$	$\alpha_{n+1}$

Figura II.4.25 Condițiile la limită pentru absorber: celulele "-1" și "n+1".

Condiția pe gaz la  $z=0$  :

$$Y_{in} - Y|_{z=0} = -\frac{1}{Pe_g} \cdot \left. \frac{dY}{dz} \right|_{z=0}$$

se poate scrie în forma:

$$Y_{in} - Y_1 = -\frac{1}{Pe_g} \cdot \frac{Y_2 - Y_{-1}}{2 \cdot \Delta z} \tag{II.4.118}$$

Din relația (II.4.118) se explicitiază  $Y_{-1}$ :

$$Y_{-1} = Y_2 - 2 \cdot \Delta z \cdot Pe_g \cdot Y_1 + 2 \cdot \Delta z \cdot Pe_g \cdot Y_{in} \tag{II.4.119}$$

iar expresia lui se utilizează ca și nodul " $Y_{i-1}$ " în cazul celulei "1", ecuația acesteia rămânând de forma II.4.117.

Condiția pe lichid la  $z=1$ :

$$\alpha_{in} - \alpha|_{z=1} = \frac{1}{Pe_L} \cdot \left. \frac{d\alpha}{dz} \right|_{z=1}$$

se discretizează peste ultimele trei celule:

$$\alpha_{in} - \alpha_n = \frac{1}{Pe_L} \cdot \frac{\alpha_{n+1} - \alpha_{n-1}}{2 \cdot \Delta z} \tag{II.4.120}$$

Din relația II.4.120 se explicitiază  $\alpha_{n+1}$ :

$$\alpha_{n+1} = \alpha_{n-1} + 2 \cdot Pe_L \cdot \Delta z \cdot \alpha_{in} - 2 \cdot Pe_L \cdot \Delta z \cdot \alpha_n \tag{II.4.121}$$

iar expresia lui se folosește la discretizarea nodului "n".  
In ceea ce privește condiția pe lichid la  $z=0$ :

$$\left. \frac{d\alpha}{dz} \right|_{z=0} = 0 \quad (\text{II.4.122})$$

discretizând peste nodurile "-1" – "2":

$$\frac{\alpha_2 - \alpha_{-1}}{2 \cdot \Delta z} = 0 \quad (\text{II.4.123})$$

rezultă  $\alpha_1 = \alpha_2$  și deci în expresia nodului "1", drept  $\alpha_{i-1}$  se folosește " $\alpha_2$ ".  
In mod similar, condiția pe gaz la  $z=1$  devine:

$$\frac{Y_{n+1} - Y_{n-1}}{2 \cdot \Delta z} = 0 \quad (\text{II.4.124})$$

ceea ce conduce la înlocuirea lui  $Y_{n+1}$  cu  $Y_{n-1}$  în expresia nodului "n".

Soluționarea numerică a sistemului algebric neliniar II.4.117 necesită utilizarea unuia din algoritmi specifici sistemelor neliniare. Algoritmul Newton-Raphson, prezentat anterior, necesită pe lângă un fișier MATLAB de tip "funcție" care să conțină ecuațiile sistemului înca un fișier care să conțină derivatele acestor ecuații în raport cu necunoscutele – compoziția fazelor gazoasă și lichidă.

Funcția `fabsnr`, prezentată mai jos, are drept intrări vectorul necunoscutelor – raportul molar și gradul de carbonatare în fiecare nod de discretizare și numărul de noduri ("celule" pe axa  $z$ ) iar ca ieșire valoarea numerică, "fabs", rezultată pentru fiecare ecuație a sistemului.

```
function fabs=fabsnr(xv,n)
global ay ae ba bae by yin alfain ain bin
nb=2*n;y=zeros(n,1);alfa=zeros(n,1);
for k=1:2:nb-1
    y((k+1)/2)=xv(k);
end;
for k=2:2:nb
    alfa(k/2)=xv(k);
end;
fy=zeros(n,1);
falfa=zeros(n,1);fabs=zeros(2*n,1);
% Section no.1
fy(1)=ain*yin+ay(1,1)*y(1)+ay(1,2)*y(2)+ae(1)*alfa(1)^2/(1-
alfa(1));
```

```

falfa(1)=ba(1,1)*alfa(1)+bae(1)*alfa(1)^2/(1-alfa(1))+
ba(1,2)*alfa(2) + by(1)*y(1);
% Section no. k
for k=2:n-1
fy(k)=ay(k,1)*y(k-1)+ay(k,2)*y(k)+ay(k,3)*y(k+1)+
ae(k)*alfa(k)^2/(1-alfa(k));
falfa(k)=ba(k,1)*alfa(k-1)+ba(k,2)*alfa(k)+bae(k)*alfa(k)^2/(1-
alfa(k))+ba(k,3)*alfa(k+1)+by(k)*y(k);
end;
% Section no. n
fy(n)=ay(n,1)*y(n-1)+ay(n,2)*y(n)+ae(n)*alfa(n)^2/(1-alfa(n));
falfa(n)=bin*alfain+ba(n,1)*alfa(n-1)+ba(n,2)*alfa(n)+
bae(n)*alfa(n)^2/(1-alfa(n))+by(n)*y(n);
nn=2*n;
nn1=nn-1;
for k1=1:2:nn1
    fabs(k1)=fy((k1+1)/2);
end;
for k1=2:2:nn
    fabs(k1)=falfa(k1/2);
end;

```

Coefficienții din fața necunoscutelor  $y(k)$  și  $\alpha(k)$  sunt definiți în programul principal:

```

% Section no.1
ain=(2/dz+peg);
ay(1,1)=(-2*peg*dz-2)/(peg*dz^2)-peg-ky(1)*au*h/g0;
ay(1,2)=2/(peg*dz^2);
ae(1)=ky(1)*au*h*ke(1)/g0;
ba(1,1)=-(1/(2*dz)+1/(pel*dz^2));
bae(1)=-ky(1)*au*h*ke(1)/(l0*m);
ba(1,2)=1/(2*dz)+1/(pel*dz^2);
by(1)=ky(1)*au*h/(l0*m);
% Section no. k
for k=2:n-1
    ae(k)=ky(k)*au*h*ke(k)/g0;
    bae(k)=-ky(k)*au*h*ke(k)/(l0*m);
    by(k)=ky(k)*au*h/(l0*m);
    ay(k,1)=.5/dz+1/(peg*dz^2);
    ay(k,2)=-2/(peg*dz^2)+ky(k)*au*h/g0;
    ay(k,3)=-.5/dz+1/(peg*dz^2);
    ba(k,1)=-0.5/dz+1/(pel*dz^2);
    ba(k,2)=-2/(pel*dz^2);
    ba(k,3)=0.5/dz+1/(pel*dz^2);
end;
% Section no. n
ay(n,1)=1/(2*dz)+1/(peg*dz^2);

```

```

ay(n,2)=(1/(2*dz)+1/(peg*dz^2)+ky(n)*au*h/g0);
ae(n)=ky(n)*au*h*ke(n)/g0;
bin=2/dz+pel;ba(n,1)=2/(pel*dz^2);
by(n)=ky(n)*au*h/(10*m);
ba(n,2)=-(2+2*dz*pel)/(pel*dz^2)-pel;
bae(n)=-ky(n)*au*h*ke(n)/(10*m);

```

În ceea ce privește matricea Jacobiana a sistemului II.4.116, ea este definită în fișierul MATLAB de tip funcție "jfabs"(derivarea s-a realizat direct în raport cu vectorul xv):

```

function jf=jfabs(xv,n)
global ay ae ba bae by
nn=2*n;
% Section 1
jf(1,1)=ay(1,1);
jf(1,2)=ae(1)*(2*xv(2)-3*xv(2)^2)/((1-xv(2))^2);
jf(1,3)=ay(1,2);
for k=4:nn
    jf(1,k)=0;
end;
jf(2,1)=by(1);
jf(2,2)=ba(1,1)+bae(1)*(2*xv(2)-3*xv(2)^2)/((1-xv(2))^2);
jf(2,3)=0;
jf(2,4)=ba(1,2);
for k=5:nn
    jf(2,k)=0;
end;
% Section k
for kk=3:2:nn-3
    for k=1:kk-3
        jf(kk,k)=0;
    end;
    jf(kk,kk-2)=ay((kk+1)/2,1);jf(kk,kk-1)=0;
    jf(kk,kk)=ay((kk+1)/2,2);
    jf(kk,kk+1)=bae((kk+1)/2)*(2*xv(kk+1)-3*xv(kk+1)^2)/((1-xv(kk+1))^2);
    jf(kk,kk+2)=ay((kk+1)/2,3);
    for k=kk+3:nn
        jf(kk,k)=0;
    end;
end;
for kk=4:2:nn-2
    for k=1:kk-3
        jf(kk,k)=0;
    end;
    jf(kk,kk-2)=ba(kk/2,1);jf(kk,kk-1)=by(kk/2);

```

```

    jf(kk, kk) = ba(kk/2, 2) + bae(kk/2) * (2*xv(kk) - 3*xv(kk)^2) / ((1 -
xv(kk))^2);
    jf(kk, kk+1) = 0; jf(kk, kk+2) = ba(kk/2, 3);
    for k = kk+3:nn
        jf(kk, k) = 0;
    end;
end;
% Section n
for k = 1:nn-4
    jf(nn-1, k) = 0;
end;
jf(nn-1, nn-3) = ay(nn/2, 1); jf(nn-1, nn-2) = 0;
jf(nn-1, nn-1) = ay(nn/2, 2);
jf(nn-1, nn) = ae(nn/2) * (2*xv(nn) - 3*xv(nn)^2) / ((1 - xv(nn))^2);
for k = 1:nn-3
    jf(nn, k) = 0;
end;
jf(nn, nn-2) = ba(nn/2, 1); jf(nn, nn-1) = by(nn/2);
jf(nn, nn) = ba(nn/2, 2) + bae(nn/2) * (2*xv(nn) - 3*xv(nn)^2) / ((1 -
xv(nn))^2);

```

În figurile II.4.26 și II.4.27 sunt prezentate, comparativ, profilele compoziției fazelor în cazul curgerii tip piston și al curgerii tip piston cu dispersie axială ( $Pe_g = Pe_L = 20$ ). Valorile parametrilor au fost prezentate în paragraful anterior (§ - a).

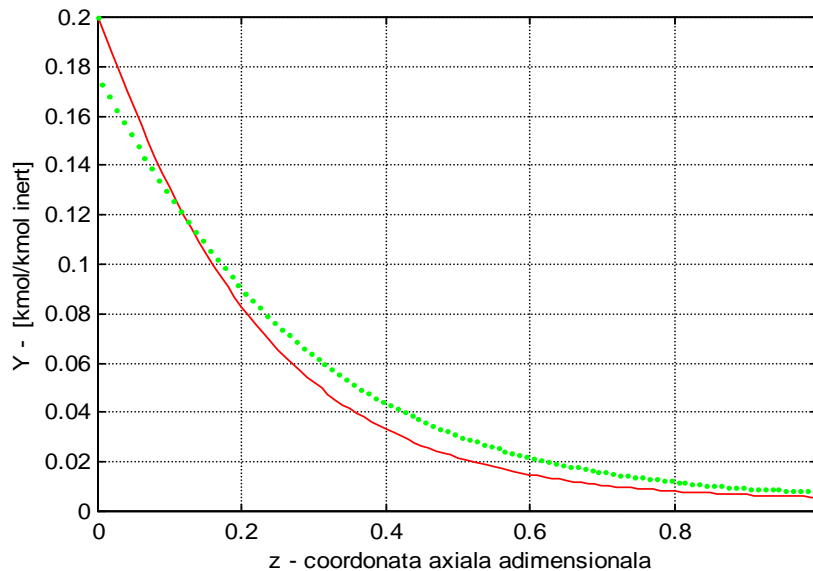


Figura II.4.26 Raportul molar în gaz: "-" : curgere tip piston; "." : piston cu dispersie axială,  $Pe_g = 20$ .

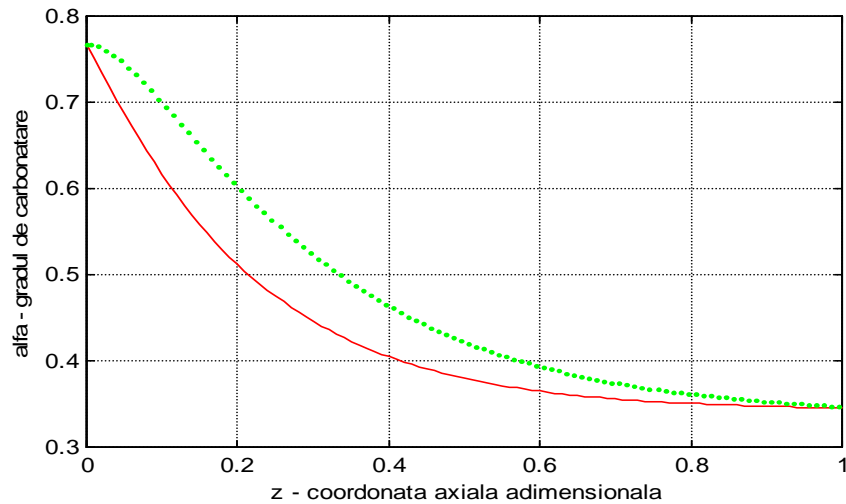


Figura II.4.27 Profilul gradului de carbonatare în lungul axei:  
 "-": curgere tip piston; ".": curgere tip piston cu dispersie axială,  $Pe_L = 20$ .

c). *Regim staționar, neizoterm, curgere tip piston cu dispersie axială.*

În cazul multor instalații industriale de absorbție, efectele termice care însoțesc absorbția nu pot fi neglijate în modelarea și simularea acestor procese. De exemplu, în cazul purificării gazului de sinteză de la fabricarea amoniacului prin absorbție în carbonat de potasiu activat cu dietanolamină, așa numitul procedeu Carsol, în cazul zonei inferioare a coloanei industriale, diferența între temperatura soluției semiregenerate la intrare și cea de la ieșire este în jur de 5-10 °C, fapt ce produce însemnate modificări în ceea ce privește viteza transferului de masă și compoziția la echilibru.

În figura II.4.28 este prezentată schema de principiu a absorberului industrial. Gazul de sinteză străbate zona inferioară a absorberului în contracurent cu soluția semiregenerată. În vederea unei purificări fine, în partea superioară are loc absorbția la temperatura mai scăzută și cu o soluție a cărei regenerare este mult mai avansată. Principalii parametri ai instalației sunt menționați pentru două regimuri diferite de exploatare (concentrația soluției regenerată de 19,8 și respectiv 27,2%). Este menționată de asemenea și compoziția fazei gazoase după fiecare strat de umplutură (fiecare strat având în jur de 5,5 m). De remarcat faptul că la ieșire soluția este răcită pe seama gazului, în realitate în zona inferioară temperatura ajungând la 110-111°C.

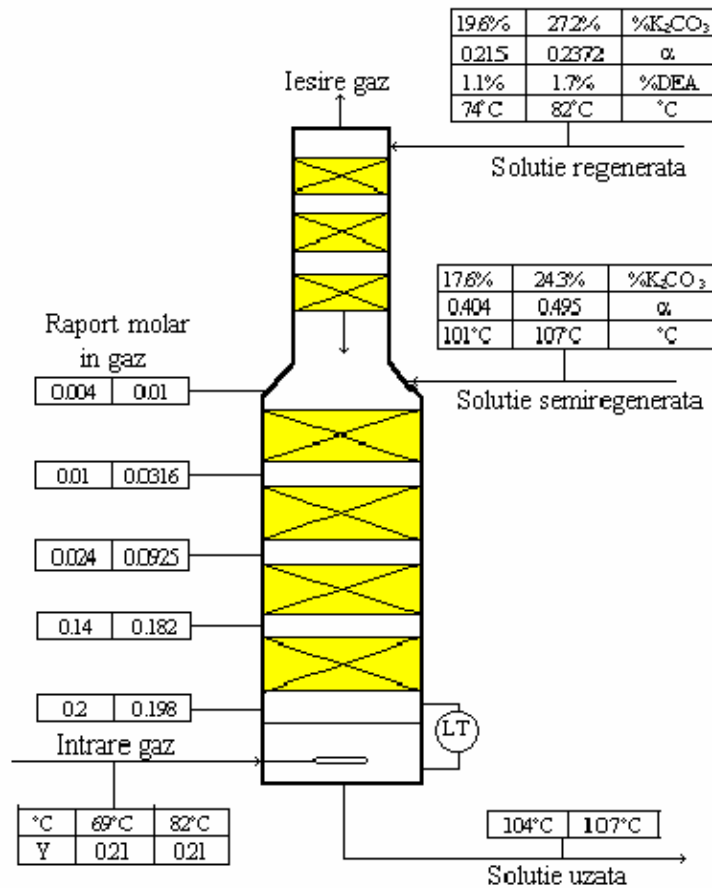


Figura II.4.28 Schema de principiu a absorberului industrial. Notă: pe figură sunt precizate valorile parametrilor pentru două situații de funcționare.

Este deci evident faptul ca atât în modelare și simulare cât și în proiectare nu se poate neglija componenta termică. În ceea ce privește hidrodinamica, în legătură cu turnuri având astfel de dimensiuni (înălțimea umpluturii, în zona inferioară este de 22 metri iar diametrul acestei zone este de 3,75 metri) informațiile prezente în literatură sunt foarte sarace. Rezultatele privind simularea prezentate în continuare pornesc deci de la valori ipotetice ale numerelor Peclet atât în ceea ce privește efectul amestecării axiale asupra compoziției fazelor cât și asupra temperaturii acestora. Unii autori (Gianetto A., Silverston P.L.- [22]) iau în considerare pentru numerele Peclet referitoare la transferul de masă și pentru cele referitoare la transferul termic aceleași



valori. Acest punct de vedere este justificat într-un fel de faptul că ambele sunt cauzate în absorber de același fenomen: curgerea turbulentă peste corpurile de umplură.

Deducerea ecuațiilor care descriu modificarea temperaturii fazelor în lungul axei și în timp în condițiile în care se are în vedere efectul amestecării axiale, pornește din nou de la scrierea fluxurilor termice aferente unui element de volum de înălțime  $dh$ . Fluxurile difuzive sunt și în acest caz produsul dintre forța motrice (gradientul de temperatură în direcția axială), suprafața prin care are loc difuzia și conductivitatea termică difuzivă (eddy thermal conductivity), datorată inclusiv turbulenței și amestecării cauzate de curgerea prin umplură. Valorile acesteia pot fi de câteva zeci de ori mai mari decât cele ale conductivității termice datorate numai convecției.

În cazul schemei de fluxuri din figura II.4.29, debitul de lichid prin coloana s-a considerat constant, la fel și caldura specifică a soluției. În ceea ce privește gazul, s-a luat în considerare atât modificarea compoziției cât și a caldurii molare a acestuia. Ecuațiile II.4.127 și II.4.128 sunt deduse într-o manieră similară cu cea prezentată pentru ecuațiile referitoare la modificarea compoziției fazelor.

În ceea ce privește condițiile la limită, vom considera din nou că turnul de absorbtie este închis la difuziune la ambele capete ale coloanei:

- la intrarea gazului ( $z=0$ ), fluxul piston de la intrare (conducta de alimentare cu gaz) este egal cu suma fluxurilor termice piston și difuziv din coloană; la ieșire gaz ( $z=1$ ), temperatura este continuă și deci gradientul de temperatură este zero;

- la intrarea lichidului ( $z=1$ ), ca și în cazul gazului, fluxul piston de la intrarea în absorber este egal cu suma fluxurilor piston și difuziv din coloană; la ieșirea lichidului ( $z=0$ ), gradientul de temperatură este nul.

Atașând cele două ecuații cu derivate parțiale care descriu modificarea compoziției fazelor, modelul matematic al absorberului este constituit din următoarele patru ecuații cu derivate parțiale:

$$\frac{H \cdot \beta_g}{G_0 \cdot (1+Y)^2} \cdot \frac{\partial Y}{\partial t} = \frac{1}{Pe_g} \cdot \frac{\partial^2 Y}{\partial z^2} - \frac{\partial Y}{\partial z} - \frac{K_Y \cdot a \cdot H}{G_0} \cdot (Y - Y^*) \quad (\text{II.4.125})$$

$$\frac{H \cdot \phi_L}{L_0} \cdot \frac{\partial X}{\partial t} = \frac{1}{Pe_L} \cdot \frac{\partial^2 X}{\partial z^2} + \frac{\partial X}{\partial z} + \frac{K_Y \cdot a \cdot H}{L_0} \cdot (Y - Y^*) \quad (\text{II.4.126})$$

$$\frac{\phi_g H}{(1+Y) \cdot V_m G_0} \cdot \frac{\partial T_g}{\partial t} = \frac{1}{Pe_{TG}} \cdot \frac{\partial^2 T_g}{\partial z^2} - \frac{\partial T_g}{\partial z} - \frac{c_M^A \cdot T_g}{c_M} \cdot \frac{\partial Y}{\partial z} - \frac{c_M^A}{c_M} \cdot \frac{\partial Y}{\partial z} \cdot \frac{\partial T_g}{\partial z} - \frac{K_Y a H T_g^A}{G_0 c_M} (Y - Y^*) + \frac{\alpha_{ra} H}{G_0 c_M} (T_L - T_g) \quad (\text{II.4.127})$$

$$\frac{\phi_L \rho H}{L_{m0}} \frac{\partial T_L}{\partial t} = \frac{1}{Pe_{TL}} \frac{\partial^2 T_L}{\partial z^2} + \frac{\partial T_L}{\partial z} + \frac{K_Y a H}{L_{m0} c_s} (Y - Y^*) (T_g c_M^A + (-\Delta H_R)) - \frac{\alpha_T a H}{L_{m0} c_s} (T_L - T_g) \quad (\text{II.4.128})$$

Condițiile la limită sunt:

$$Y|_{z=0} - \frac{1}{Pe_G} \cdot \frac{\partial Y}{\partial z} \Big|_{z=0} = Y_{in}; \quad \frac{\partial \alpha}{\partial z} \Big|_{z=0} = 0$$

$$T_g|_{z=0} - \frac{1}{Pe_{TG}} \cdot \frac{\partial T_g}{\partial z} \Big|_{z=0} = T_{gin}; \quad \frac{\partial T_L}{\partial z} \Big|_{z=0} = 0$$

(II.4.129)

$$\frac{\partial Y}{\partial z} \Big|_{z=1} = 0 \quad \alpha|_{z=1} + \frac{1}{Pe_L} \cdot \frac{\partial \alpha}{\partial z} \Big|_{z=1} = \alpha_{in}$$

$$\frac{\partial T_g}{\partial z} \Big|_{z=1} = 0 \quad \alpha|_{z=1} + \frac{1}{Pe_{TL}} \cdot \frac{\partial T_L}{\partial z} \Big|_{z=1} = T_{Lin}$$

Notății noi utilizate:

- $L_m$  – debitul masic de lichid, [kg/s];
- $\lambda_E$  – conductivitatea termică "eddy", [kJ/(m s °C)];
- $T_g, T_L$  – temperatura gazului sau lichidului, [°C];
- $C_M^i, C_M^A$  – caldura molară a inertului sau a substanței care se absoarbe ( $CO_2$ ), [kJ/kmol];
- $c_s$  – caldura specifică a lichidului, [kJ/kmol °C];
- $V_M$  – volumul molar, [m<sup>3</sup>/kmol];
- $Pe_{Tg}, Pe_{TL}$  numerele Peclet referitoare la amestecarea termică axială;
- $\alpha_T$  – coeficientul de transfer termic gaz – lichid, [kJ/(m<sup>2</sup> °C s)];
- $\Delta H_R$  – entalpia de reacție, [kJ/kmol].

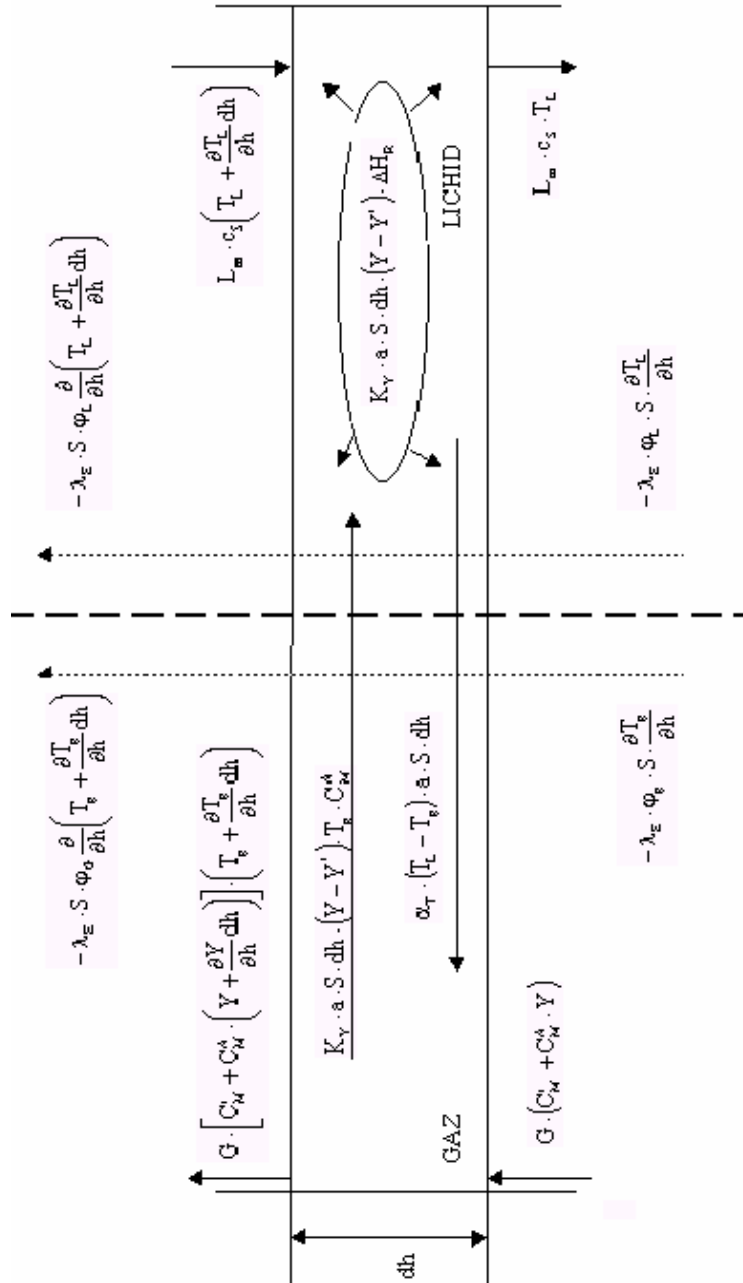


Figura nr.II.4.29 Fluxurile termice pentru un element de volum al unei coloane de absorbtie

Redăm în continuare o modalitate de soluționare numerică a sistemului de ecuații II.4.125 – II.4.128 cu condițiile la limită II.4.129 pentru cazul regimului staționar ( a se vedea și figura II.4.30):

1. Profilul staționar inițial a fost generat pornind de la simularea funcționării coloanei printr-o cascadă de reactoare cu amestecare perfectă, pentru fiecare reactor realizându-se și bilanțul termic;

2. Soluția numerică a celor două ecuații neliniare (din cauza echilibrului, a se vedea și relațiile II.4.117) referitoare la compoziții se obține prin discretizare prin diferențe finite și soluționarea sistemului de ecuații neliniare pe baza algoritmului Newton-Raphson, conform paragrafului precedent.

3. Folosind profilul de compoziții obținut la punctul 2, o primă estimare a temperaturii fazelor se calculează prin rezolvarea pe baza unei scheme implicite a celor două ecuații referitoare la temperatura fazelor.

4. Pe baza valorilor compoziției și temperaturii fazelor se recalculează parametrii modelului (transfer de masă, echilibru) pentru fiecare celulă de discretizare;

5. Pașii 2-4 sunt repetați până la obținerea convergenței soluțiilor.

Urmatoarele ecuații au fost utilizate în evaluarea parametrilor modelului [22]:

- Relații referitoare la transferul de masă și aria udată:

$$K_Y = \frac{K_g \cdot P}{(1+Y) \cdot (1+Y^*)} \quad (II.4.130) \quad K_g = \frac{k_g k_L He}{k_g + k_L He} \quad (II.4.131)$$

$$k_g = 3.6 \cdot \frac{a_p D_G}{RT_k} \left( \frac{G_{m0}}{a_p \eta_g} \right)^{0.7} \left( \frac{\eta_g}{\rho_g D_g} \right)^{0.33} (a_p D_p)^{-2} \quad (II.4.132)$$

$$k_L = E_p \cdot E \cdot k_{L0} \quad (II.4.133)$$

$$k_L^0 = 0.0051 \left( \frac{\eta_L \cdot g}{\rho_L} \right)^{0.33} \left( \frac{L_{m0}}{a \eta_L} \right)^{0.66} \left( \frac{\eta_L}{\rho_L D_L} \right)^{-0.5} (a_p D_p)^{0.4} \quad (II.4.134)$$

$$a = a_p \left\{ 1 - \exp \left[ -1.45 \left( \frac{L_{m0}}{a_p \eta_L} \right)^{0.1} \left( \frac{a_p L_{m0}^2}{g \rho_L^2} \right)^{-0.05} \left( \frac{L_{m0}^2}{a_p \sigma \rho_L} \right)^{0.2} \left( \frac{\sigma}{\sigma_c} \right)^{0.75} \right] \right\} \quad (II.4.135)$$

Structura programului de calcul al compoziției și temperaturii fazelor în regim staționar al proceselor de absorbție însoțite de reacție chimică

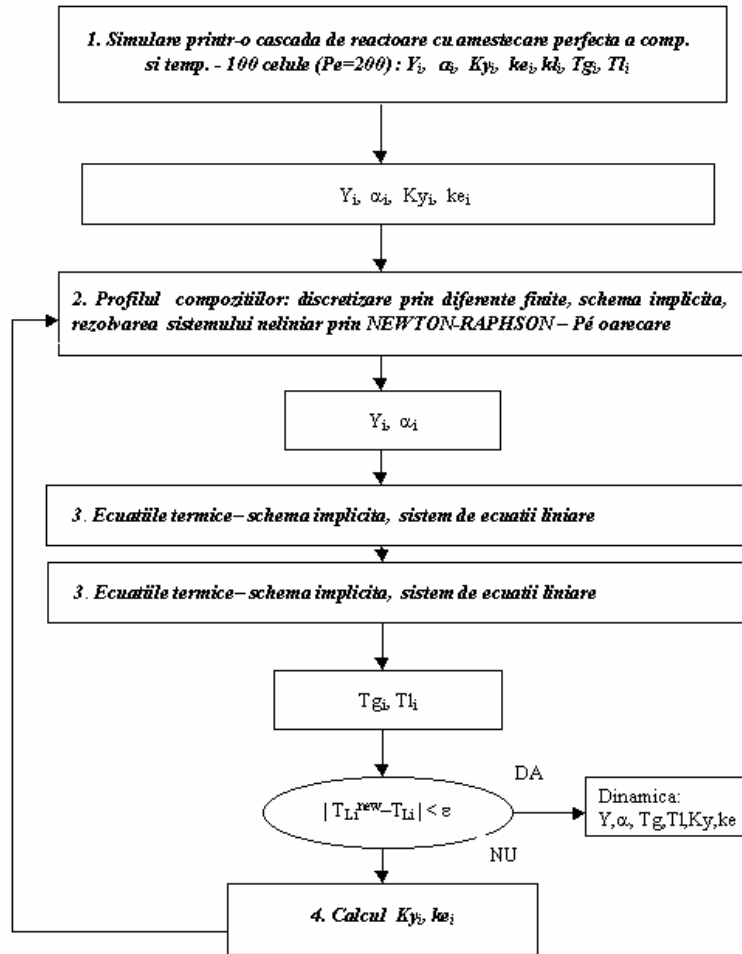


Figura II.4.30 Organigrama de soluționare a ecuațiilor 1.4.100 – 1.4.103 pentru situația de regim staționar

$$E = \left[ \left( 1 + \frac{3^{1.5} \cdot (E_\infty - 1) \cdot E_\infty}{1 + \phi} \right)^{0.33} - 1 \right] \cdot \frac{(1 + \phi)^{0.75}}{3^{0.5} \cdot (E_\infty - 1)^{0.5}} \quad (\text{II.4.136})$$

$$E_\infty = 1 + \frac{K \cdot [\text{CO}_2^i] + [\text{HCO}_3^-]}{2 \cdot ([\text{CO}_2^i] - [\text{CO}_2^*])} \cdot \left( \sqrt{1 + \frac{4 \cdot K \cdot [\text{CO}_2^i] - [\text{CO}_3^{2-}] - [\text{HCO}_3^-]^2}{(K \cdot [\text{CO}_2^i] + [\text{HCO}_3^-])^2}} - 1 \right) \quad (\text{II.4.137})$$

$$K = 4 \cdot \frac{K_1}{K_2} \quad (\text{II.4.138}) \quad \phi = \frac{D_L \cdot k_{\text{OH}^-} \cdot [\text{OH}^-]}{(k_L^0)^2} \quad (\text{II.4.139})$$

$$\log K_1 = -\frac{3404.7}{T_{\text{LK}}} + 14.843 - 0.03279 T_{\text{LK}} \quad (\text{II.4.139})$$

$$\log K_2 = -\frac{2902.7}{T_{\text{LK}}} + 6.498 - 0.0238 T_{\text{LK}} \quad (\text{II.4.140})$$

$$[\text{OH}^-] = \frac{K_w \cdot [\text{CO}_3^{2-}]}{K_2 \cdot [\text{HCO}_3^-]} \quad (\text{II.4.141})$$

$$\log k_{\text{OH}^-} = 13.635 - \frac{2895}{T_{\text{LK}}} + 0.08 \cdot I_i \quad (\text{II.4.142})$$

$$I_i = \frac{1}{2} \cdot ([\text{K}^+] + [\text{HCO}_3^-] + 2^2 \cdot [\text{CO}_3^{2-}]) \quad (\text{II.4.143})$$

$$\log K_w = -3.7197 - \frac{3167.13}{T_{\text{LK}}} \quad (\text{II.4.144})$$

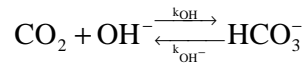
- relații referitoare la echilibru:

$$Y^* = \frac{[\text{CO}_2^*]}{\text{He} \cdot P} \quad (\text{II.4.145}) \quad [\text{CO}_2^*] = \frac{K_2 \cdot [\text{HCO}_3^-]}{K_1 \cdot [\text{CO}_3^{2-}]} \quad (\text{II.4.146})$$

$$K_1 = \frac{[\text{H}^+][\text{HCO}_3^-]}{[\text{CO}_2]} \quad (\text{II.4.147}) \quad K_2 = \frac{[\text{H}^+][\text{CO}_3^{2-}]}{[\text{HCO}_3^-]} \quad (\text{II.4.148})$$

În notarea mărimilor care caracterizează transferul de masă și echilibrul s-au păstrat notațiile standard folosite în literatură :

$a$  = aria udată dintr-un  $m^3$  de umplutură;  
 $a_p$  = suprafața specifică a umpluturii ;  
 $D_L$  = coeficientul de difuzie al substanței care se absoarbe în lichid ;  
 $D_g$  = coeficientul de difuziune al substanței care se absoarbe în gaz ;  
 $D_p$  = diametrul echivalent al corpurilor umpluturii ;  
 $E$  = factorul de amplificare a absorbției de către reacția chimică ;  
 $E_p$  = factorul de amplificare a reacției chimice de către promotor ;  
 $G_{m0}$  = debitul masic de gaz raportat la suprafața secțiunii transversale;  
 $He, He_w$  = Solubilitatea fizică a  $CO_2$  în soluție sau în apă ;  
 $I_i$  = tăria ionică a soluției ;  
 $k_{OH}$  = constanta de viteză pentru reacția dintre ionii hidroxil și dioxidul de carbon, reacție care decide viteza transferului de masă :



$k_g, k_L$  = Coeficienții parțiali de transfer de masă referitori la gaz și lichid ;

$k_L^0$  = Coeficientul parțial de transfer de masa pentru partea de lichid în cazul absorbției fizice ;

$K_w$  = constanta de disociere a apei ;

$L_{m0}$  = debitul masic de lichid raportat la suprafața secțiunii transversale ;

$M$  = masa moleculară a dioxidului de carbon ;

$P$  = presiunea absolută ;

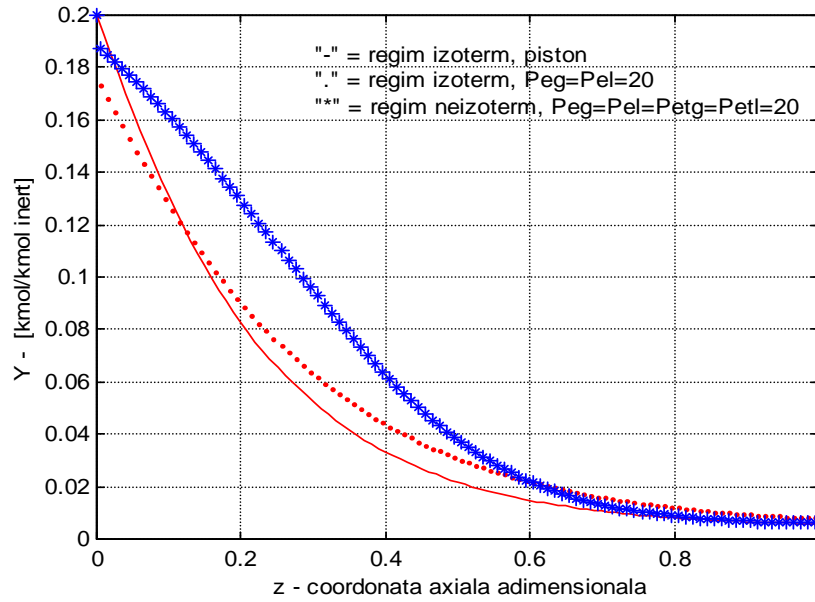
$R$  = constanta generală a gazelor ;

$T_g, T_L$  = temperatura gazului sau lichidului ;

$T_{gk}, T_{Lk}$  == temperatura absolută a gazului sau lichidului ;

$\eta, \rho$  = vâscozitatea, respectiv densitatea gazului sau lichidului.

În figurile II.4.31 și II.4.32 sunt prezentate profilul raportului molar și al gradului de carbonatare pentru trei situații diferite în privința modelării coloanei: regim izoterm, curgere tip piston și respectiv piston cu amestecare axială și regim neizoterm, piston cu amestecare axială.



izoterm – curgere tip piston; regim izoterm – piston cu amestecare axială și respectiv regim neizoterm – piston cu amestecare axială.

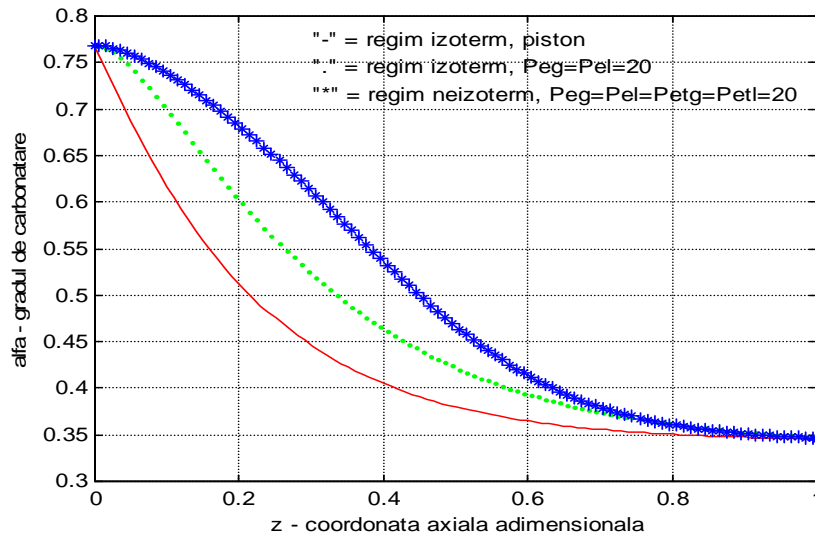


Figura II.4.32 Profilul gradului de carbonatare în lungul axei în cazul regimului izoterm – curgere tip piston; regim izoterm – piston cu amestecare axială și respectiv regim neizoterm – piston cu amestecare axială.



Se poate remarca importanta modificare de profil odată cu schimbarea ipotezelor avute în vedere la dezvoltarea modelului matematic: efectele termice care acompaniază absorbția duc la o modificare substanțială a profilului compoziției fazelor. În figura II.4.33 este prezentat profilul temperaturii fazelor pentru valori ale numerelor Peclet de 20 atât în privința transferului de masă cât și a celui termic.

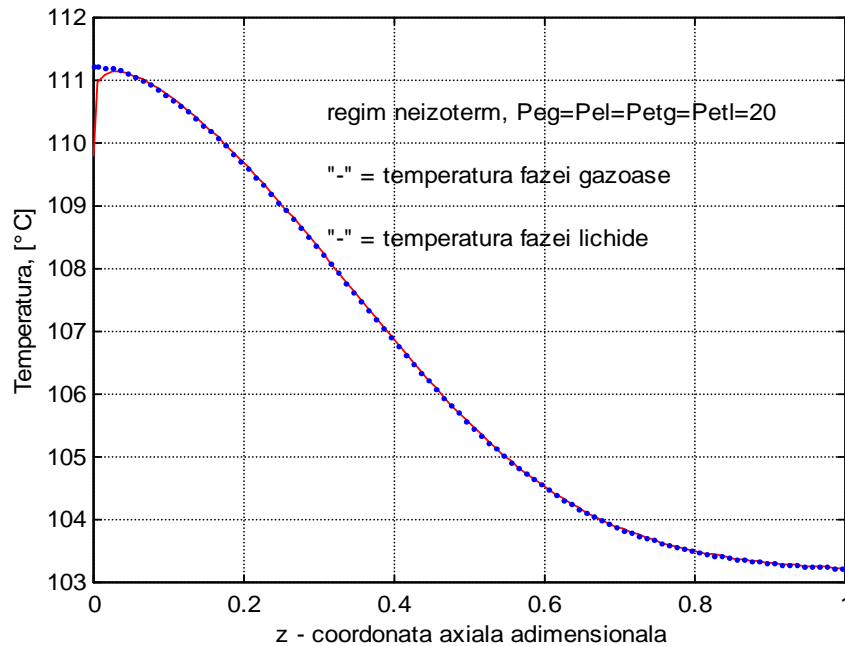


Figura II.4.33 Profilul temperaturii fazelor în absorber: curgere tip piston cu amestecare axială, coeficienții de amestecare axială  $Pe_g=Pe_l=Pe_{Tg}=Pe_{Tl}=20$ .

*d) Regim dinamic, neizoterm, curgere tip piston cu amestecare axială*

În ceea ce privește dinamica, prezentăm în figurile II.4.34 – II.4.35 modificarea raportului molar în gaz și respectiv a temperaturii fazei gazoase la mijlocul zonei inferioare a absorberului industrial urmare a scăderii debitului de soluție cu 15% timp de 300 de secunde. Iată situațiile luate în considerare în ceea ce privește simularea:

- în cazul raportului molar în gaz, se prezintă rezultatele obținute pentru:
  - regim izoterm, curgere tip piston cu amestecare axială, valoarea numerelor Peclet atât pentru gaz cât și pentru lichid - 20;

- regim neizoterm, piston cu dispersie axială, valoarea numerelor Peclet – 20, atât pentru amestecarea axială termică cât și pentru cea referitoare la compoziția fazelor;
- regim neizoterm, piston cu dispersie axială, valoarea numerelor Peclet – 200 din nou pentru ambele amestecări; pentru a ușura compararea, s-a ales în cazul numerelor Pe de 200 o secțiune de discretizare unde valorile inițiale de regim staționar sunt apropiate;
- în cazul temperaturii, prezentarea comparativă se referă numai la ultimele două situații prezentate mai sus. Se poate remarca faptul că deși se referă la aceeași secțiune de discretizare, temperatura inițială (cea corespunzătoare regimului staționar) nu este aceeași ca urmare a profilului staționar diferit de la care încep modificările în dinamică.

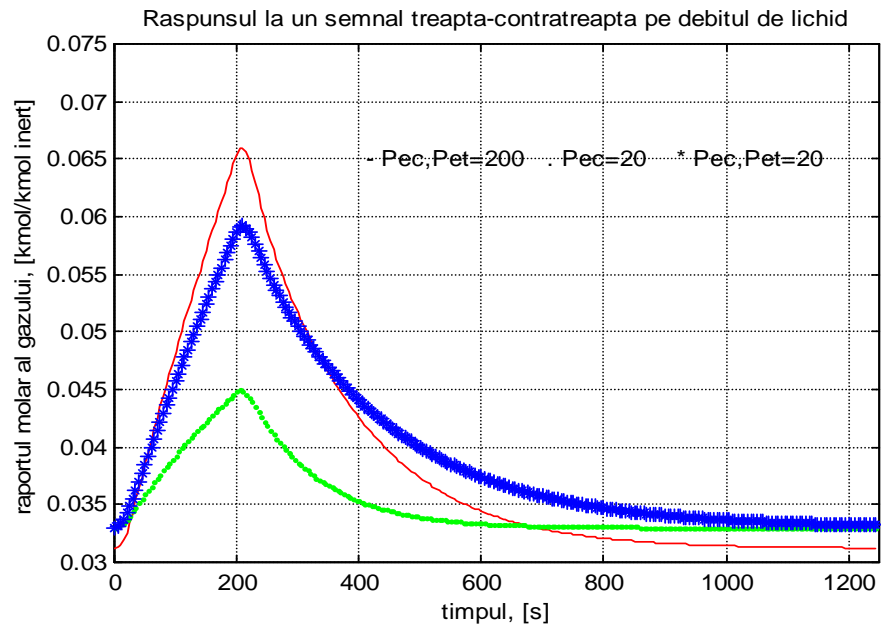


Figura II.4.34 Modificarea raportului molar în gaz ca urmare a scăderii debitului de soluție cu 15% timp de 300 secunde pentru trei situații privind simularea.

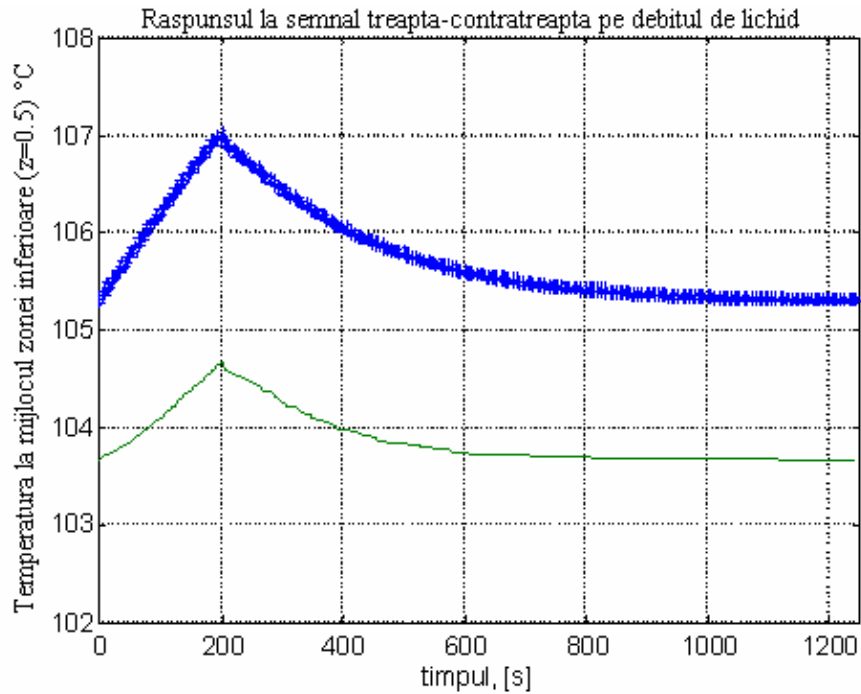


Figura II.4.35 Modificarea temperaturii lichidului ca urmare a scăderii debitului de soluție cu 15% timp de 300 secunde pentru două situații privind simularea.

Soluționarea celor 4 ecuații cu derivate parțiale (II.4.125)-(II.4.128) s-a realizat printr-o schemă explicită utilizând metoda diferențelor finite. Parametrii modelului (transfer de masă, caldură, echilibru) au fost recalculați la fiecare pas pe axa timpului. Profilul staționar inițial atât în ce privește compoziția fazelor cât și temperatura acestora a fost obținut conform metodologiei prezentate anterior (§ II.4.8 -c).

Se pot constata importante deosebiri între rezultatele obținute prin simulare în funcție de ipotezele de la care s-a plecat în formularea modelului.