

RAPORTARE ȘTIINȚIFICĂ

□ RST - Raport științific și tehnic în extenso

○ Cuprins

Acest raport științific și tehnic prezintă rezultatele obținute în anul 2018 în cadrul proiectului: *Materiale adsorbante printate tridimensional pentru creșterea productivității procesului de captare a dioxidului de carbon* (acronim: 3D-CAPS), cod proiect: COFUND-ACT ERANET 3D-CAPS, nr. contract: 87/2017.

○ Obiective an 2018

Pentru anul 2018 s-a prevăzut trei activități care s-au realizat integral:

- *Elaborarea și implimentarea în COMSOL a unui modelului matematic de transfer de masă și termic pentru procesul de adsorbție;*

- *Elaborarea și implementarea în COMSOL a unui model matematic ce descrie regimul de curgere în micro-canalele sistemului (pe baza ecuațiilor de conservare a impulsului);*

- *Modelarea dinamică și simularea 3D a stratului de adsorbant cu o geometrie complexa prestabilită a canalelor de curgere al sistemului monolitic.*

○ Rezumatul etapei 2018 (maxim 2 pagini) – gradul de atingere a rezultatelor estimate

Raportului științific și tehnic al proiectului cu titlul "*Materiale adsorbante printate tridimensional pentru creșterea productivității procesului de captare a dioxidului de carbon*" (acronim: 3D-CAPS), cod proiect: COFUND-ACT ERANET 3D-CAPS, nr. contract: 87/2017 elaborat în cadrul activității prezentate mai sus prevăzute pentru anul 2018 cuprinde următoarele secțiuni:

- Implementarea în COMSOL a izotermelor de adsorbție multicomponent a amestecului $\text{CO}_2\text{-H}_2\text{O}$;
- Dezvoltarea și validarea unui model matematic 1D pentru un reactor în strat fix pentru studierea procesului de adsorbție CO_2 ;

- Dezvoltarea modelului matematic 1D și 2D pentru descrierea proceselor ce au loc într-un canal al monolitului;
- Dezvoltarea unui model 3D ce descrie procesul de curgere într-un reactor de tip monolit.

Astfel, toate activitățile prevăzute și convenite pentru anul 2018 au fost realizate integral.

o **Descrierea științifică și tehnică, cu punerea în evidență a rezultatelor etapei și gradul de realizare a obiectivelor**

Integrarea procesului de captarea pre-combustia CO₂ cu producția de hidrogen prin conversia catalitică cu vapori de apă (Sorption Enhanced Water Gas Shift - SEWGS) este o tehnologie cu un potențial ridicat de reducere a costului de capturare a CO₂ cu o înaltă eficiență din punct de vedere energetic și economic, comparativ cu tehnologiile mature.

Principalul obiectiv al acestui proiect este evaluarea etapei de adsorbție a CO₂, din cadrul procesului SEWGS, la valori ridicate de temperatură și presiune. În cadrul studiului de față se urmărește modelarea, utilizând COMSOL Multiphysics, a procesului de adsorbție în reactoare în strat fix umplute cu granule de adsorbant și reactoare de tip monolit (Figura 1) formate în întregime din material adsorbant K-HTC (hidrotalcit impregnat cu potasiu). Structurile de tip monolit fiind o alternativă la reactoarele în strat fix datorită suprafeței active mari a canalelor ce compun structura monolitului [Ruthven, 1984].

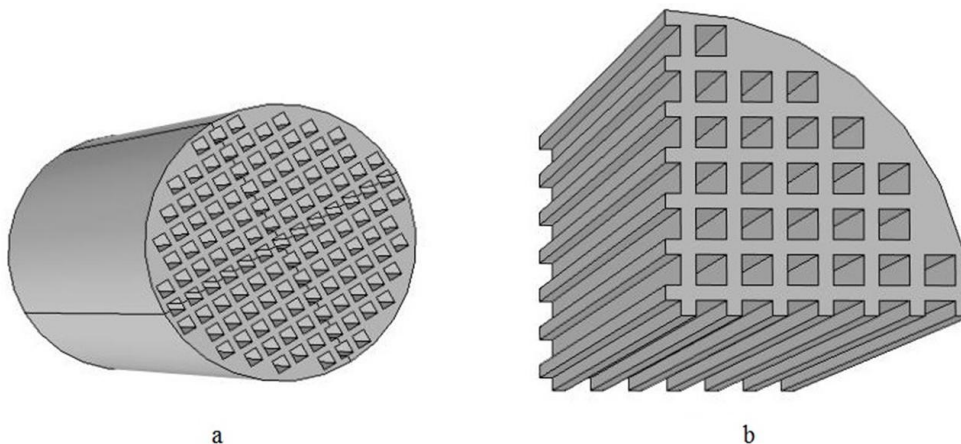


Figura 1. Reactorul de tip monolit:

- a - reactor monolit cu canale cu secțiune pătratică;
b - reprezentare schematică (implemetată în COMSOL)

1. Izotermele de adsorbție multicomponent

O componentă importantă a modelului dezvoltat reprezintă izotermele de adsorbție multicomponent, ce iau în considerare adsorbția la suprafață și la nivelul nanoporilor a CO₂ și H₂O, la presiuni înalte. Izotermele de adsorbție folosite se bazează pe interacțiunile fizice dintre sorbent (CO₂ și H₂O) și adsorbat (K-HTC) și au fost determinate pe baza datelor experimentale de către partenerul proiectului ECN [Boon et al, 2014]. Adsorbția la suprafață a CO₂ este descrisă cu ajutorul unei izoterme Langmuir, în conformitate cu studiile din literatură. Pentru descrierea contribuției adsorbției la suprafață a H₂O se folosește o izotermă Freundlich, care reflectă caracterul eterogen al legăturilor create în cazul procesului de adsorbție a H₂O. Contribuția nanoporilor pentru CO₂ și H₂O sunt descrise printr-o ecuație Dubinin-Astakhov, bazată pe teoria de umplere a volumului, unde presupunerea absenței interacțiunilor laterale între speciile adsorbite permite determinarea cantității de gaz adsorbit cu ajutorul volumului limitator a nanoporilor V_0 , parametrul de distribuție a mărimii porilor m și interacțiunea de energie nanopor-sorbat E [Ozawa et al, 1976; Doog et al, 1988; Do, 1998].

Astfel, în cazul CO₂,

$$q_{CO_2}^* = \frac{q_{CO_2}^s K_{CO_2} p_{CO_2}}{1 + K_{CO_2} p_{CO_2}} + \frac{A_{CO_2}(V_0 - V_0 A_{H_2O})}{v_{m,CO_2}(1 - A_{CO_2} A_{H_2O})} \quad \#(5)$$

și în cazul H₂O,

$$q_{H_2O}^* = K_{H_2O} p_{H_2O}^{1/n} + \frac{A_{H_2O}(V_0 - V_0 A_{CO_2})}{v_{m,H_2O}(1 - A_{CO_2} A_{H_2O})} \quad \#(6)$$

unde

$$A_i = \exp\left(-\left[\left(\frac{RT}{E_i}\right) \ln\left(\frac{p_{0,i}}{p_i}\right)\right]^{m_i}\right) \quad \#(7)$$

$$p_{0,i} = p_{c,i} \left(\frac{T}{T_{c,i}}\right)^2 \quad \#(8)$$

$$v_{m,i} = \frac{RT_{c,i}}{8p_{c,i}} \left(\frac{T}{T_{c,i}}\right)^{0.6} \quad \#(9)$$

Parametrii izotermei de adsorbție sunt prezentați în Tabelul 1 și sunt în acord cu valorile publicate în literatură de alți autori [Do, 1998; Lee et al, 2007; van Selow et al,, 2013; Marono et al, 2014].

Tabel 1. Parametrii izotermei multicomponent [Boon et al, 2014] (Ecuațiile 5-9).

Parametru	Valoare estimată	
$q_{CO_2}^s$	0.45 ± 0.13	mol kg^{-1}
K_{CO_2}	28 ± 26	MPa^{-1}
E_{CO_2}	23 ± 1	kJ mol^{-1}
m_{CO_2}	5.2 ± 1.5	-
K_{H_2O}	0.37 ± 0.07	$\text{mol kg}^{-1} \text{MPa}^{-1/n}$
n	1.9 ± 0.5	-
E_{H_2O}	12 ± 1	kJ mol^{-1}
m_{H_2O}	3.6 ± 0.8	-
V_0	74 ± 17	$\text{cm}^3 \text{kg}^{-1}$

Izotemele de adsorbție multicomponent implementate în programul COMSOL Multiphysics au fost validate utilizând datele experimentale obținute de la un parter din cadrul proiectului (ECN, Olanda) ce descriu capacitățile de străpungere pentru amestecul $\text{CO}_2\text{-H}_2\text{O}$, rezultatele obținute sunt prezentate în Figura 2. După cum se observă în Figura 2 nanostructura sorbentului este foarte importantă, în special la valori ridicate ale presiunilor parțiale. Un indicator al acestui fapt este impactul mai mare al CO_2 asupra capacității de adsorbție H_2O comparativ cu impactul H_2O asupra capacității de adsorbție a CO_2 . Volumul molar mai mare al CO_2 în comparație cu cel al H_2O determină ocuparea nanoporilor de către CO_2 , în detrimentul moleculelor de H_2O .

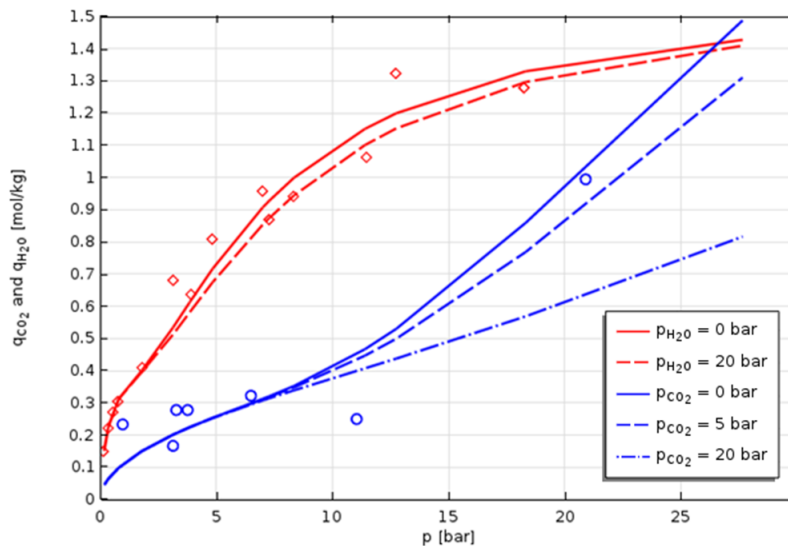


Figura 2. Absorbția în cazul sistemului $\text{CO}_2\text{-H}_2\text{O}$ în funcție de presiunea parțială, CO_2 (romburi roșii) și H_2O (cercuri albastre) component pur (linie continuă) și pentru amestec (linii întrerupte)

2. Modelarea matematică a reactorului în strat fix

Cu scopul validării modelelor matematice dezvoltate, s-a implementat în COMSOL un model 1D pentru simularea adsorbției într-un reactor cu strat fix umplut cu granule sferice de sorbent. La realizarea modelului s-a utilizat modulul 'Batteries and Fuel Cells' al aplicației COMSOL Multiphysics, modul ce permite simularea transportului în mediul poros. Ecuațiile modelului matematic dezvoltat sunt prezentate în Tabelul 2. Discretizarea domeniului poros s-a făcut cu o rețea de discretizare predefinită fină, calibrată pentru dinamica fluidelor. Ecuațiile pentru modelul intraparticulă sunt bazate pe ipoteza cunoașterii forței motrice a sistemului în cazul particulelor poroase sferice (Tabel 3) [Ruthen, 1984].

Tabel 2. Ecuațiile modelului 1D al reactorului în strat fix

Ecuția de conservare a masei	$\frac{\partial c_i}{t} + \nabla \cdot (-D_i \nabla c_i) + u \cdot \nabla c_i = R_i \#(10)$
	$N_i = -D_i \nabla c_i + u c_i$
Ecuția de conservare a masei în mediul poros	$P_{1,i} \frac{\partial c_i}{t} + P_{2,i} + \nabla \cdot \Gamma_i + u \cdot \nabla c_i = R_i + S_i \#(11)$

$$P_{1,i} = (\varepsilon_p + \rho k_{p,i})$$

$$P_{2,i} = (c_i - \rho_p c_{p,i}) \frac{\partial \varepsilon_p}{\partial t}, \rho_p = \frac{\rho}{(1 - \varepsilon_p)}$$

$$N_i = \Gamma_i + u c_i = -D_{e,i} \nabla c_i + u c_i$$

Tabel 3. Ecuatiile ce descriu interacțiunile intraparticulă Boon et al, 2014; Ruthen, 1984]

Forța motrice (LDF)	$\frac{\partial q_{CO_2}}{\partial t} = k_{LDF} \cdot (q_{CO_2}^* - q_{CO_2}) \#(12)$
Coeficientul de transfer de masă a procesului de adsorbție	$k_{LDF} = k_{LDF}^{pore} + k_{LDF}^{surf} \#(13)$
k_{LDF} pentru difuzia în pori	$k_{LDF}^{pore} = \frac{15D_s}{(d_p/2)^2} \frac{\varepsilon_p}{\varepsilon_p + (1 - \varepsilon_p) \rho_p RT (\partial q_{CO_2}^* / \partial c)}$
k_{LDF} pentru difuzia la suprafață	$k_{LDF}^{surf} = \frac{15D_s}{(d_p/2)^2} \frac{\rho_p RT (\partial q_{CO_2}^* / \partial p_{CO_2})}{\varepsilon_p + (1 - \varepsilon_p) \rho_p RT (\partial q_{CO_2}^* / \partial c)}$

3. Modelarea matematică a reactorului de tip monolit

Modelarea procesului de adsorbție, într-un reactor de tip monolit s-a realizat utilizând modele de tip 1D, 2D sau 3D. Într-o primă etapă s-a dezvoltat un model 1D ce descrie procesul de adsorbție într-un singur canal de geometrie dreptunghiulară format în întregime din mediu poros capabil de adsorbția CO₂. În cadrul modelului dezvoltat s-au utilizat interfețele 'Transport of Diluted Species in Porous Media' pentru descrierea proceselor de transport (Tabel 2) și 'Domain ODEs and DAEs' pentru a rezolva ecuațiile specifice interacțiunilor interparticule (Tabel 3), utilizând parametrii procesului prezentați în Tabelul 4.

În etapa a doua, s-a construit un model 2D pentru simularea procesului de adsorbției a CO₂ într-un singur canal, al monolitului, cu lungimea de 1 m și lățimea de 0.1 mm, dar pentru scăderea timpului de calcul, lungimea și viteza curgerii au fost micșorate de 10 ori. Ecuatiile modelului matematic ce descriu procesul de transport de masă în interiorul canalului conțin componenta de convectivă și difuzivă:

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + \nabla \cdot (-D_i \nabla c_i + c_i u) = 0 \#(16)$$

Difuzia la suprafață (D_s) și viteza de adsorbție (r_{ads}) sunt folosite pentru a descrie formarea speciei adsorbite c_s :

$$\frac{\partial c_s}{\partial t} + \nabla \cdot (-D_s \nabla c_s) = r_{ads} \#(17)$$

Fenomenele ce descriu etapa de adsorbție din cadrul tehnologiei SEWGS sunt convecția-difuzia speciilor gazoase în volum canalului, modelată prin interfața 'Transport of Diluted Species', și difuzia-adsorbția CO₂, modelată cu ajutorul interfeței 'General Form Boundary PDE' la limita suprafeței active. Cele două interfețe utilizate sunt legate prin intermediul vitezei de adsorbției, definită ca un flux în condiția la limită pentru Ecuația 16. Profilul de viteză în interiorul canalului este modelat folosind interfața 'Laminar Flow' pentru curgere laminară. Parametrii procesului sunt prezentați în Tabelul 4.

4. Rezultate și discuții

În cadrul acestei etape a proiectului s-au dezvoltat și simulat în programul COMSOL Multiphysics trei modele matematice ce descriu procesul de adsorbție a CO₂:

Caz 1 – modelul 1D al reactorului în strat fix;

Caz 2 – modelul 2D al canalului poros;

Caz 3 – modelul 2D al reactorului monolit.

Parametrii de proces utilizați la simularea modelelor sunt prezentați în Tabelul 4.

Tabel 4. Parametrii modelelor matematice dezvoltate

Parametru	Valoare			
D_{m,CO_2}	7.4e-5			m ² s ⁻¹
D_{p,CO_2}	1.2e-6			m ² s ⁻¹
D_s^0	1.5e-10			m ² s ⁻¹
d_p	3.15e-4			m
ε_b	0.4			-
ε_p	0.07			-
ε_t	0.44			-
ρ_b	553			kg m ⁻³
ρ_p	922			kg m ⁻³
T_f	673.15			K
	Caz 1	Caz 2	Caz 3	
L	0.2	1	0.1	m
d_t	0.016	-	-	m
h	0.02	-	-	m
δ	-	0.05	1e-4	m
u_f	0.0056	0.35	0.035	m s ⁻¹
p_f	101325	25e5	25e5	Pa

y_{CO_2}	0.05	0.13	0.13	-
y_{H_2O}	0.29	0.29	0.29	-
y_{CO}	-	0.04	0.04	-
y_{H_2}	-	0.24	0.24	-
y_{N_2}	0.66	0.3	0.3	-

În scopul validării modelelor dezvoltate s-a comparat curba de străpungere obținută în urma simulării modelului 1D în COMSOL, a reactorului în strat fix, cu cea prezentată în literatură (utilizând aceiași parametri ai procesului)[Reijers et al, 2014]. După cum se observă în Figura 3, rezultatele obținute prin simularea procesului în COMSOL sunt similare cu rezultatele publicate: timpii de străpungere fiind apropiați și profilul curbelor fiind similar.

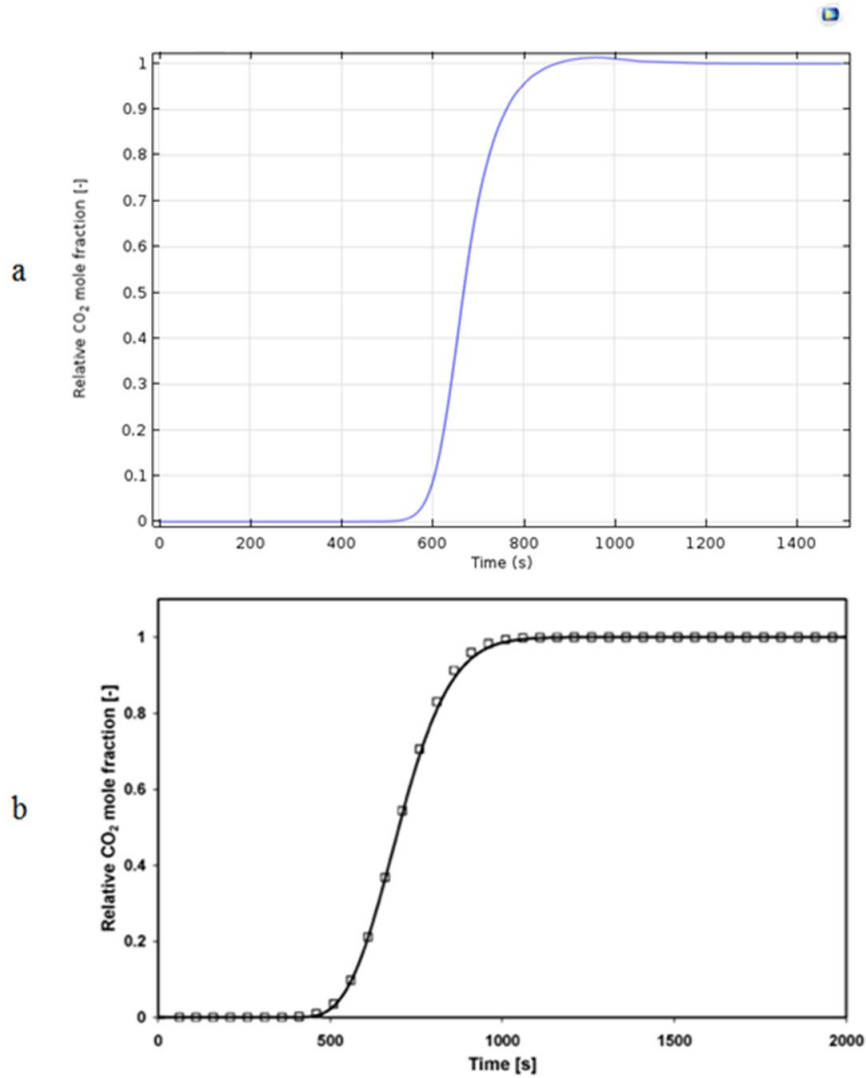


Figura 3. Variația concentrației relative a CO₂ la ieșirea din reactorul 1D
 $k_{LDF} = 0.1 \text{ s}^{-1}$, $\rho_b = 553 \text{ kg m}^{-3}$, $T = 673 \text{ K}$, $\varepsilon = 0.4$, $u_f = 0.0056 \text{ m s}^{-1}$ și $p_{\text{CO}_2} = 1000 \text{ Pa}$.
 a - curba de străpungere calculată pe baza modelului COMSOL Multiphysics;
 b - curba de străpungere prezentată în literatură [Reijers et al, 2009].

Figura 4 prezintă rezultatul simulării modelului 1D simplificat al unui canal poros de monolitului.

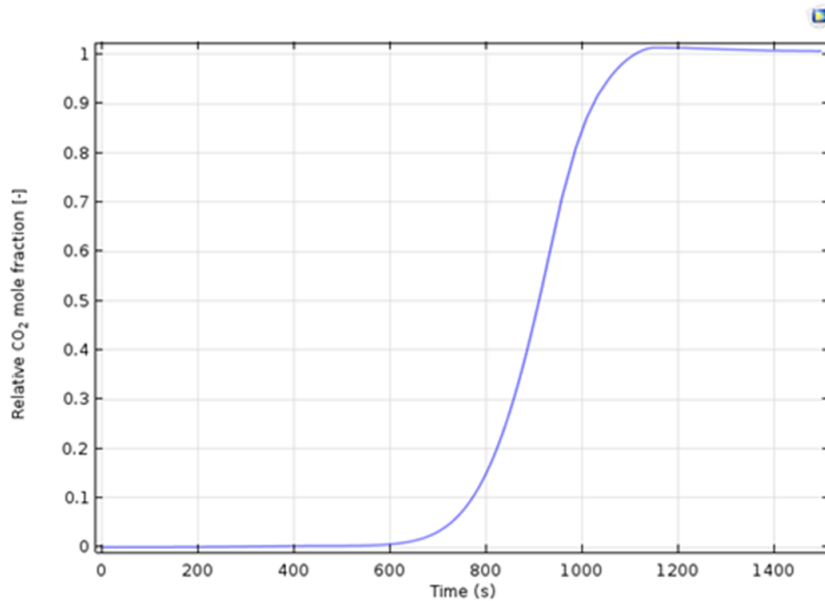


Figura 4. Concentrația relativă a CO₂ la ieșirea din reactor calculată de modelul COMSOL 1D a canalului poros pentru $k_{LDF} = 0.1 \text{ s}^{-1}$, $\rho_p = 992 \text{ kg m}^{-3}$, $T = 673 \text{ K}$, $\varepsilon = 0.4$, $u_f = 0.35 \text{ m s}^{-1}$, $p_f = 25e5 \text{ Pa}$ și $y_{CO_2} = 0.13$.

Deoarece modelul 1D se comportă conform așteptărilor, s-a construit, în programul COMSOL, un model 2D, al unui reactor poros de lungime 1 m și o lățime de 0.05 m, utilizând aceiași parametri ai procesului. Interfața 'Laminar Flow' pentru curgere laminară a fost adăugată pentru a descrie profilul vitezei în interiorul canalului poros. Concentrațiile CO₂ la suprafață porilor, la momente diferite de timp, în canalul poros, sunt prezentate în Figura 5.

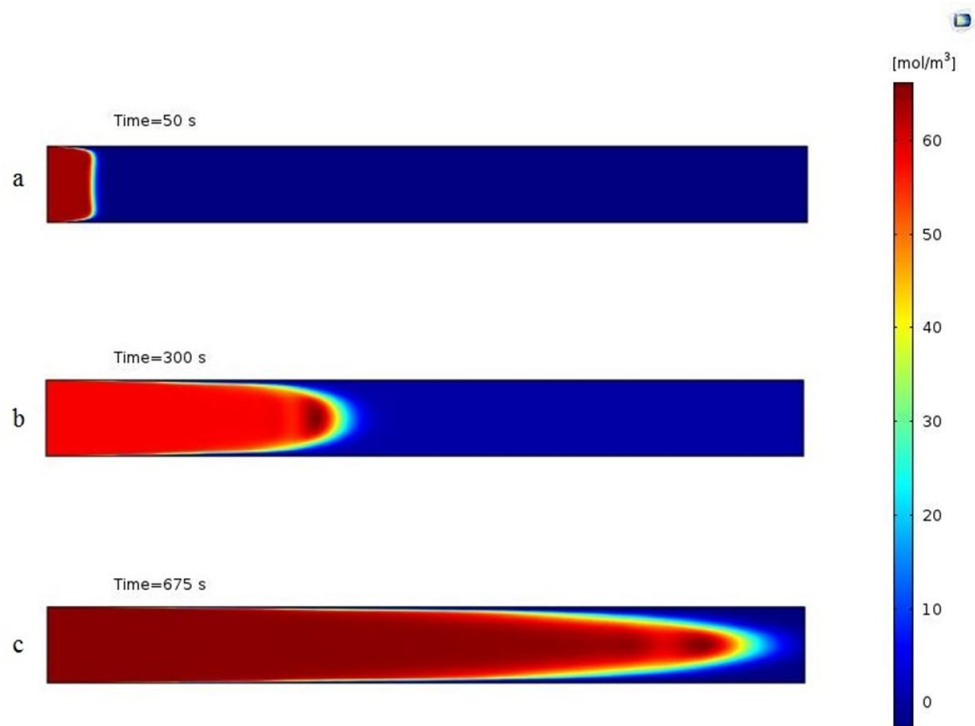


Figura 5. Concentrația la suprafață a CO₂ calculată de modelul COMSOL 2D al canalului poros
 a – concentrația CO₂ la 50 s;
 b – concentrația CO₂ la 300 s; c – concentrația CO₂ în apropierea străpunerii.

În cazul reactorului de tip monolit, adsorbția CO₂ are loc la suprafața pereților canalului dreptunghiular, astfel datorită suprafeței active mari a canalelor ce compun structura monolitului, adsorbția în reactorul monolit este mai mare comparativ cu a reactoarelor în strat fix. Curba de străpungere (în cazul modelul 2D al reactorului monolit) este prezentată în Figura 6. Iar, concentrația CO₂ la suprafață, la diferite valori ale timpului, este prezentată în Figura 7. Diferența mare de mărime între lungimea canalului și lățimea acestuia a determinat dificultăți în construirea rețelei de discretizare, dar profilul laminar se poate observa cu claritate.

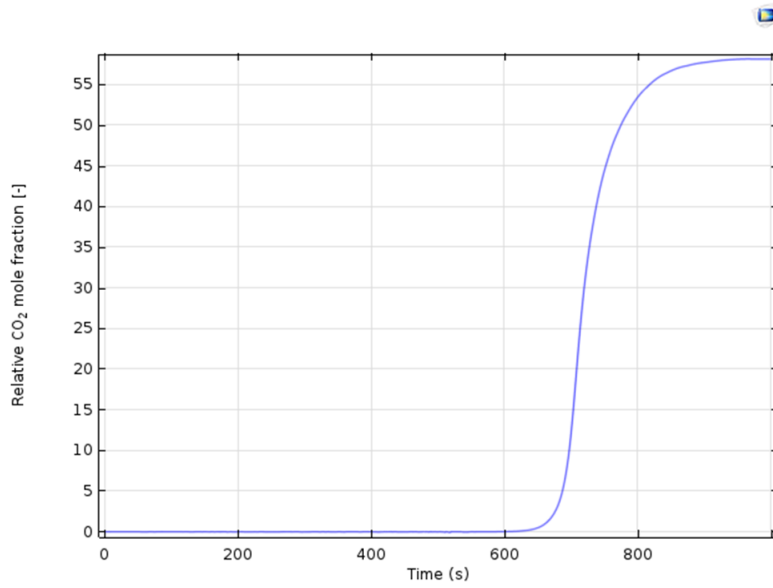


Figura 6. Concentrația molară CO₂ relativă la ieșirea din reactor calculată de modelul COMSOL 2D al reactorului monolit pentru $k_{LDF} = 0.1 \text{ s}^{-1}$, $\rho_p = 1074 \text{ kg m}^{-3}$, $T = 673 \text{ K}$, $\varepsilon = 0.4$, $u_f = 0.035 \text{ m s}^{-1}$, $p_f =$

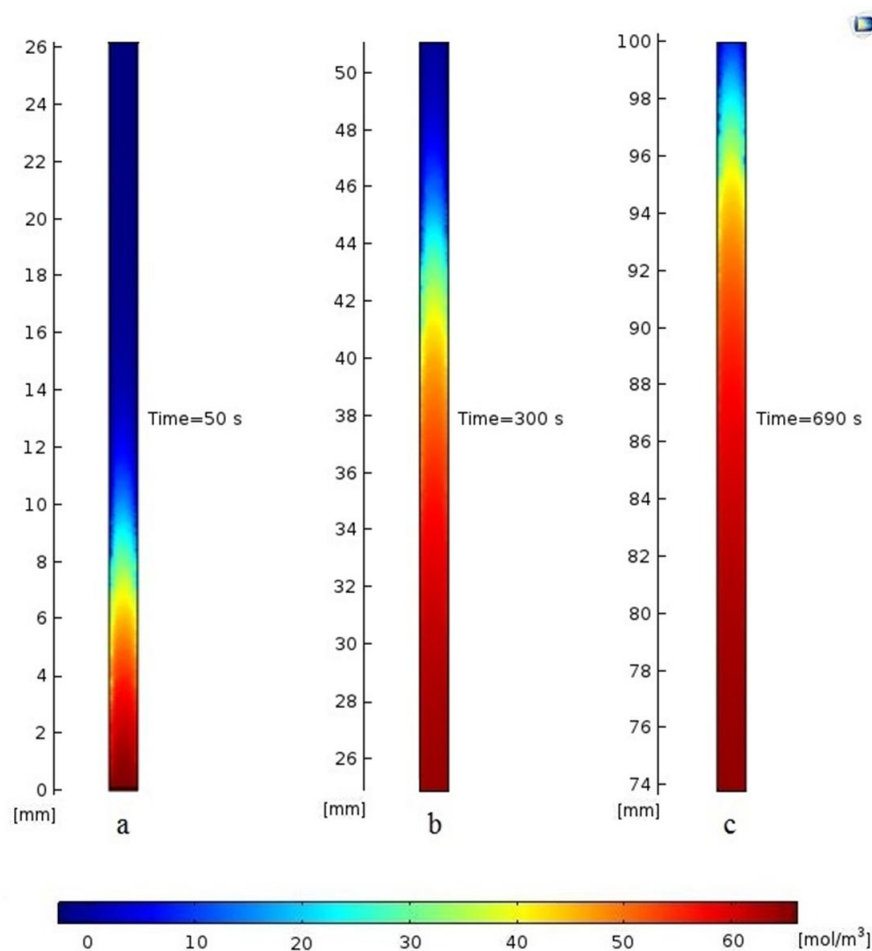


Figura 7. Concentrația la suprafață a CO_2 în canalul monolit de 0.1 m lungime și 0,1mm lățime la momente diferite de timp
 a – concentrația CO_2 în apropierea intrării reactorului la 50 s; b – concentrația CO_2 la 300 s; c – concentrația CO_2 în apropierea străpunerii la 690 s.

Totodată pentru stabilirea timpului necesar simulării întregului reactor de tip monolit s-a realizat și simulat modelul matematic 3D ce descrie procesul de curgere a unui amestec de gaze într-un reactor tip monolit cu 69 de canale cu secțiune pătratică de lățime 2 mm și lungime 1 m (Figura 8), timpul de simulare necesar obținut fiind de 3 zile pentru un calculator cu procesor i7 și 32 Gb RAM.

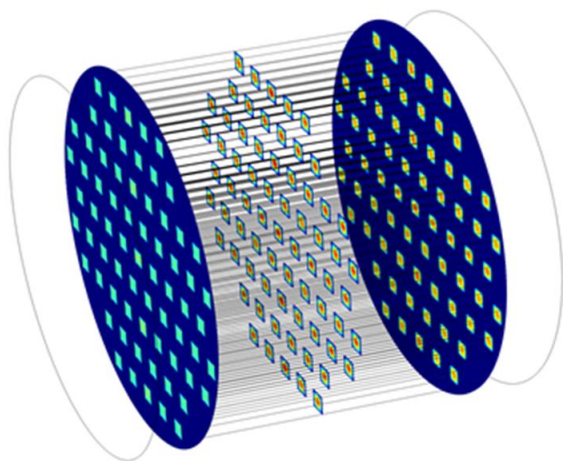


Figura 8. Variația vitezei de curgere a gazului într-un reactor de tip monolit

Nomenclatură		
A	parametru de interacțiune nanopor-sorbat	-
C	concentrație în zona de volum	mol m^{-3}
c_s	concentrație la suprafață	mol m^{-2}
d_p	diametru particulă	M
d_t	diametru tub	M
D_m	coeficient difuzie moleculară	$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$
D_p	coeficient difuzie în interiorul particulei	$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$
D_s	coeficient difuzie la suprafață	$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$
D_s^0	coeficient difuzie la suprafață la zero acoperire	$\text{m}^2 \text{s}^{-1}$
E	energia de interacțiune nanopor-sorbat	J mol^{-1}
h	înălțime	M
i	index specie	-
K	parametru de interacțiune suprafață-sorbat	Pa^{-1}
k_{LDF}	coeficient forță motrice a transferului de masă	s^{-1}
L	Lungime	M
m	parametru de distribuție mărime-por	-
n	parametru izotermă Freundlich	-
N	flux molar	$\text{mol m}^{-2} \text{s}^{-1}$
p_f	presiune la intrare	Pa
p_i	presiune parțială component i	Pa
p_c	presiune critică	Pa
p_0	presiune saturație	Pa
q	cantitate adsorbită în exces	mol kg^{-1}
q^*	cantitate adsorbită la echilibru	mol kg^{-1}
q^s	cantitate maximă (un singur strat) adsorbită	mol kg^{-1}
r_{ads}	relație viteză de adsorbție	$\text{mol m}^{-2} \text{s}^{-1}$
R	constantă gaz ideal	$\text{J mol}^{-1} \text{K}^{-1}$

t	timp	S
T_f	temperatură intrare	K
T_c	temperatură critică	K
u_f	viteză intrare	$m\ s^{-1}$
V_0	volum limitator a nanoporilor pe masă de sorbent	$cm^3\ kg^{-1}$
y_i	fracție molară component i	-
<i>Litere grecești</i>		
δ	lățime canal	M
ε_b	porozitate strat	-
ε_p	porozitate particulă	-
ε_t	porozitate totală	-
ρ_b	densitate strat	$kg\ m^{-3}$
ρ_p	densitate particulă	$kg\ m^{-3}$
<i>Abrevieri</i>		
CCS	captura și stocarea dioxidului de carbon	
HTC	hidrotalcit	
IPCC	Panoul Interguvernamental privind schimbările climatice	
K-HTC	hidrotalcit impregnat cu potasiu	
PSA	adsorbție cu schimbare de presiune	
SEWGS	conversia monoxidului de carbon cu vapori de apă îmbunătățită prin adsorbție	
WGS	conversia monoxidului de carbon cu vapori de apă	

- **Anexe (documentatie de executie, caiet de sarcini, teme de proiectare, buletine de incercari, atestari, certificari, etc. – dupa caz)**

Nu este cazul

- **Prezentare rezultate verificabile etapă – parametrii, nivel de performanță parametrii**

Nu este cazul

- **Concluzii (se prezintă punctual)**

În cadrul acestei etape a proiectului (derulată în anul 2018), s-a implementat în COMSOL izotermele de adsorbție multicomponent a amestecului CO₂-H₂O și s-a validat pe baza datelor experimentale, obținute de la partenerul ECN, ce descriu capacitatea și cinetica de adsorbție, pe material adsorbant K-HTC, a CO₂, H₂O și amestecului CO₂-H₂O la presiuni

parțiale de până la 24 bar(a) și temperaturi de 400°C. Izoterma este compusă dintr-un termen care descrie adsorbția la suprafață la presiuni scăzute și un termen care descrie adsorbția la nivelul nanoporilor la presiuni ridicate.

Intr-o primă etapă s-a dezvoltat și validat un model 1D al unui reactor în strat fix pentru descrierea procesului de adsorbție a dioxidului de carbon, curbele de străpungere fiind similare cu cele prezentate în literatură.

S-au construit un model 1D simplificat și un model 2D pentru simularea adsorbției CO₂ într-un canal poros, a căror rezultate au fost în concordantă cu valorile prezentate în literatură. În continuare, s-a dezvoltat un model 2D al unui reactor monolit care descrie adsorbția CO₂ la suprafața pereților unui singur canal de geometrie dreptunghiulară.

Bibliografie

Boon, J., Cobden, P.D., van Dijk, H.A.J., Hoogland, C., van Selow, E.R., and van Sint Annaland, M. (2014) Isotherm model for high-temperature, high-pressure adsorption of CO₂ and H₂O on K-promoted hydrotalcite. *Chem. Eng. J.* 248, 406-414.

Doong, S.J., and Yang, R.T. (1988) A simple potential-theory model for predicting mixed gas adsorption. *Ind. Eng. Chem. Res.* 27 (4), 630-635.

Do, D.D. *Adsorption Analysis: Equilibria and Kinetics*; Imperial College Press: London, UK, 1998.

Govender, S., and Friedrich, H.B. (2017) Monoliths: a review of the basics, preparation methods and their relevance to oxidation. *Catalysts* 7 (2), 62.

Hatch, C.D., Wiese, J.S., Crane, C.C., Harris, K.J., Kloss, H.G., and Baltrusaitis, J. (2012) Water adsorption on clay minerals as a function of relative humidity: application of BET and Freundlich adsorption models. *Langmuir* 28 (3), 1790-1803.

Lee, K.B., Verdooren, A., Caram, H.S., and Sircar, S. (2007) Chemisorption of carbon dioxide on potassium-carbonate-promoted hydrotalcite. *J. Colloid Interface Sci.* 308 (1), 30-39.

Maroño, M., Torreiro, Y., Montenegro, L., and Sánchez, J. (2014) Lab-scale tests of different materials for the selection of suitable sorbents for CO₂ capture with H₂ production in IGCC processes. *Fuel* 116, 861-870.

Ozawa, S., Kusumi, S., and Ogino Y. (1976) Physical adsorption of gases at high pressure. IV. An improvement of the Dubinin-Astakhov adsorption equation. *J. Colloid Interface Sci.* 56 (1), 83-91.

Reijers, H.T., Boon, J., Elzinga, G.D., Cobden, P.D., Haije, W.G., and van den Brink, R.W. (2009) Modelling study of the sorption-enhanced reaction process for CO₂ capture. I. Model development and validation. *Ind. Eng. Chem. Res.* 48 (15), 6966-6974.

Reijers, H.T., Boon, J., Elzinga, G.D., Cobden, P.D., Haije, W.G., and van den Brink, R.W. (2009) Modelling study of the sorption-enhanced reaction process for CO₂ capture. II. Application to steam-methane reforming. *Ind. Eng. Chem. Res.* 48 (15), 6975-6982.

Ruthven, D.M. *Principles of adsorption and adsorption processes*; John Wiley & Sons, 1984.

van Selow, E.R., Cobden, P.D., van den Brink, R.W., Hufton, J.R., and Wright, A. (2009) Performance of sorption-enhanced water-gas shift as a pre-combustion CO₂ capture technology. *Energy Procedia* 1 (1), 689-696.

van Selow, E.R., Cobden, P.D., van Dijk, H.A.J., Walspurger, S., Verbraeken, P.A., and Jansen, D. (2013) Qualification of the ALKASORB sorbent for the sorption-enhanced water-gas shift process. *Energy Procedia* 37, 180-189.

- o **Scurt raport despre deplasarea (deplasările) în străinătate privind activitatea de diseminare si/sau formare profesională**

În anul 2018 s-au realizat trei mobilități în străinătate la partenerii proiectului cu ocazia evaluării execuției proiectului astfel: (i) ECN, Petten Olanda în perioada 22 - 23 Februarie 2018, la această întâlnire de evaluare a stadiului de implementare a proiectului au participat doi membrii din echipa de cercetare: conf. dr. Ana-Maria Cormoș și conf dr. ing. Arpad Imre-Lucaci, (ii) SINTEF Oslo, Norvegia, în perioada 11 - 12 Iunie 2018, la această întâlnire de evaluare a stadiului de implementare a proiectului au participat doi membrii din echipa de cercetare: conf. dr. Ana-Maria Cormoș și conf dr. ing. Arpad Imre-Lucaci și (iii) ECN, Petten Olanda în perioada 14 August - 10 Noiembrie 2018, stagiul de mobilitate la care a participat un membru din echipa de cercetare: Masterand ing. Dumbravă Ionela-Dorina care a desfășurat activități științifice de modelare matematică și simulare prevăzute a se realiza în cadrul proiectului în acest an (activități cuprinse în Task-ul 3.4 "Multi Cycle Modelling" din cadrul WP3).

Privitor la activitatea de diseminare a rezultatelor proiectului a fost realizată o mobilitate la conferința 4th International Conference on Chemical Engineering (ICCE 2018) - Innovative materials and processes for a sustainable development, 2018 de către un membru din echipa de cercetare: Drd. Vlad Sandu.

Director de proiect

Prof. Dr. Ing. Călin-Cristian Cormoș

