

RAPORT ȘTIINȚIFIC

Acest raport științific prezintă rezultatele obținute, în anul 2022, în cadrul proiectului: *“Integrarea metodelor de intensificare a proceselor cu strategii de reglare avansată pentru îmbunătățirea performanțelor sistemelor de captare CO₂ (CONTROLCO2)”*, cod proiect: PN-III-P4-ID-PCE-2020-0632, nr. contract: PCE 181 / 2021. Rezultatele cercetării proiectului pe anul 2022 au făcut obiectul a 8 articole științifice astfel: 4 publicate și 1 trimis spre publicare în reviste cotate ISI și 3 articole prezentate la conferințe internaționale cu colective de recenzie după cum urmează:

Articole publicate în reviste

1. F.M. Ilea, A.M. Cormos, S. Dragan, C.C. Cormos, Assessment of turbulent contact absorber hydrodynamics with application in carbon capture, *Chemical Engineering Journal*, 449, 2022, 137674 (FI - 16,744);
2. A.M. Cormos, S. Dragan, C.C. Cormos, Integration of membrane technology for decarbonization of gasification power plants: A techno-economic and environmental investigation, *Applied Thermal Engineering*, 205, 2022, 118078 (FI 6,645);
3. A.C. Bozonc, A.M. Cormos, S. Dragan, C. Dinca, C.C. Cormos, Dynamic modeling of CO₂ absorption process using hollow-fiber membrane contactor in MEA solution, *Energies*, 15(19), 2022, 7241 (FI – 3,252);
4. I.D. Dumbrava, C.C. Cormos, A. Imre-Lucaci, A.M. Cormos, CFD modelling of supercritical water reforming of glycerol for hydrogen production, *International Journal of Hydrogen Energy*, 47, 2022, 12147-12158 (FI -7,139);
5. C.C. Cormos, Green hydrogen production from decarbonized biomass gasification: An integrated techno-economic and environmental analysis, *Energy*, 2022, trimis spre publicare (FI – 8,857).

Prezentări la conferințe

1. F.M. Ilea, A.M. Cormos, S. Dragan, C.C. Cormos, Assessment of industrial applicability for three-phase fluidized bed absorption technology used for post-combustion CO₂ capture: A dynamic modelling study, 25th Conference on Process Integration, Modelling and Optimisation for Energy Saving and Pollution Reduction - PRES 2022, Bol, Croatia, 5 - 8 September 2022;
2. A.D. Selejan, A.M. Cormos, H.I. Lisei, C.C. Cormos, The development of 1D mathematical model of biogas steam reforming process for hydrogen production, 22nd Romanian International Conference on Chemistry and Chemical Engineering, Sinaia, Romania, 7 - 9 September 2022;
3. F.M. Ilea, A.M. Cormos, V.M. Cristea, C.C. Cormos, Enhancing the post-combustion CO₂ carbon capture plant performance by setpoints optimization of the decentralized multi-loop control system, 17th Conference on Sustainable Development of Energy, Water and Environment Systems (SDEWES), Paphos, Cyprus, 6 - 10 November 2022.

În cadrul proiectului a fost prevăzută, pentru anul 2022, realizarea unei etape cu activitățile aferente astfel:

Etapa 2 - Evaluarea potențialului de intensificare a procesului de captare a dioxidului de carbon utilizând un sistem trifazic gaz-solid-lichid în strat fluidizat precum și elaborarea unor strategii de control avansat pentru captarea dioxidului de carbon, în vederea îmbunătățirii performanțelor economice și protecția mediului (Task 3-4).

Act 2.1 - Evaluarea și validarea modelului matematic ce descrie procesul de captare post-combustie a dioxidului de carbon folosind sistemul inovativ trifazic gaz-solid-lichid prin modelare și simulare.

Act 2.2 - Evaluarea, utilizând modelarea și simularea, a posibilității de utilizare a glicerinei în amestec cu mono-etanolamina / hidroxid de sodiu pentru captarea dioxidului de carbon.

Act 2.3 - Evaluarea în regim de operare flexibil și dezvoltarea unui sistem de reglare eficient de tip Proportional-Integral-Derivative (PID) și Model Predictive Control (MPC) pentru reglarea proceselor de captare post-combustie a dioxidului de carbon (activitate ce se continuă și în anul III de proiect).

Toate activitățile prevăzute și convenite pentru anul 2022 au fost realizate integral.

Descrierea științifică și tehnică, cu punerea în evidență a rezultatelor etapei:

Raportul proiectului pe anul 2022 prezintă modelarea, simularea și reglarea procesului de captare post-combustie a dioxidului de carbon în soluții apoase de hidroxid de sodiu și monoetanolamină, utilizând coloane cu umplutură și sisteme trifazice gaz-solid-lichid în strat fluidizat.

ACTIVITĂȚILE 2.1 ȘI 2.2

1. EVALUAREA EXPERIMENTALĂ A SISTEMULUI TRIFAZIC GAZ-SOLID-LICHID

O alternativă, la tehnologia de captare a CO₂ în coloane cu umplutură, este utilizarea unei coloane de absorbție în strat fluidizat trifazic gaz-solid-lichid. În acest caz, coloana de absorbție are o umplutură sub formă de granule sferice din material plastic, cu densitate scăzută ce funcționează în regim de strat fluidizat. Umplutura are în esență rolul de a mări pe cât posibil suprafața de contact dintre cele două faze: cea lichidă și cea gazoasă. Transferul de substanță are loc „pe suprafața” peliculei de lichid formată pe corpurile de umplere, între faza lichidă și cea gazoasă. Utilizarea unui astfel de tip de coloană prezintă un potențial ridicat de intensificare a procesului de transfer de masă, datorită faptului că particulele solide, puse în mișcare de faza gazoasă, favorizează creșterea ariei de transfer prin reînnoirea constantă a filmului de lichid ce se formează la suprafața lor. Această creștere duce la creșterea fluxului molar de CO₂ transferat și astfel, la o capacitate de prelucrare mult îmbunătățită, dar și la creșterea eficienței de absorbție.

În studiul hidrodinamic al coloanei de absorbție s-a utilizat ca fază gazoasă aerul și apa ca fază lichidă. Umplutura inertă constă în particule sferice goale cu un diametru de 1 cm și densitate scăzută

(170, 210, 330 kg/m³). Densitatea particulelor solide depinde de materialul din care sunt alcătuite (polietilenă, polipropilenă etc.) și de grosimea peretelui. Faza gazoasă este introdusă în coloana de absorbție pe la baza acesteia cu ajutorul unei suflante, iar faza lichidă (apa) soluția absorbantă este introdusă pe la vârful coloanei prin intermediul unei pompe de unde este dispersată pe toată secțiunea absorberului. Faza lichidă care iese din coloană este stocată și poate fi recirculată înapoi în sistem (Figura 1).

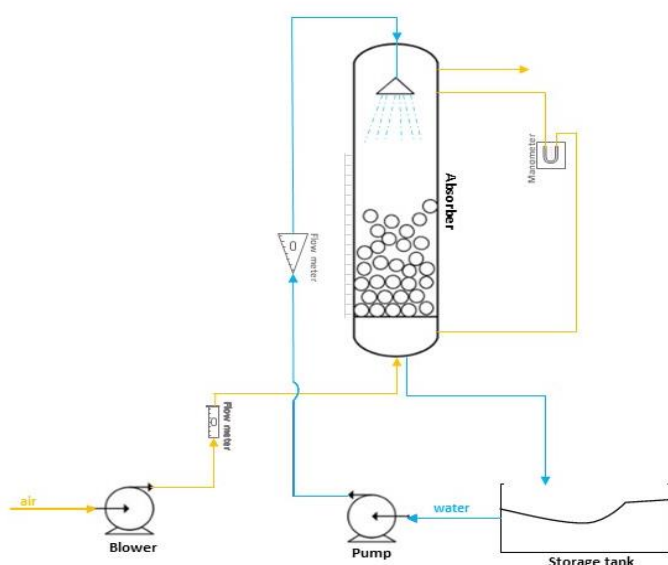


Figura 1. Configurația experimentală pentru sistemul trifazic gaz-solid-lichid

Pentru a evalua influența vitezei gazului și ale debitului de lichid asupra hidrodinamicii sistemului, s-au efectuat măsurători experimentale, la diferite valori ale acestora. Parametrii procesului sunt prezentați în *Tabelul 1*.

Tabelul 1. Parametrii procesului

Sistem hidrodinamic	
Parametru	Valoarea
Diametrul coloanei [m]	0.14
Înălțimea stratului staționar [m]	0.12
Diametrul particulelor [m]	0.01
Densitatea particulelor de solid [kg/m^3]	170, 210, 337
Viteza gazului [m/s]	0 – 2.5
Densitatea de pulverizare [$\text{m}^3/(\text{m}^2\cdot\text{h})$]	6.49, 9.74, 13, 16.24
Debitul de lichid [l/h]	100, 200
Temperatura [K]	298

Astfel, s-a determinat căderea de presiune pe coloană pentru diferite densități ale lichidului pulverizat și ale solidului în funcție de viteza gazului (*Figura 2*). Rezultatele experimentale arată că pierderea de presiune în coloană crește odată cu creșterea vitezei gazului, a densității lichidului de pulverizare și a densității particulelor solide. Acest lucru se datorează frecării crescute dintre faza gazoasă și particulele solide acoperite de lichid, ceea ce determină, de asemenea, fenomenul de fluidizare. O creștere a densității particulelor solide de la $170 \text{ kg}/\text{m}^3$ la $337 \text{ kg}/\text{m}^3$ conduce la o creștere a căderii de presiune de 1,4 - 2,1 ori la aceeași densitate de pulverizare. La o densitate constantă a solidului și o creștere a densității de pulverizare a lichidului de la $6,49 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$ la $16,24 \text{ m}^3/\text{m}^2\text{h}$, s-a observat o creștere de 1,8 - 2,5 ori a căderii de presiune. În acest caz, se constată că creșterea este mai semnificativă pentru valori scăzute ale densității solide și valori ridicate ale vitezei gazului.

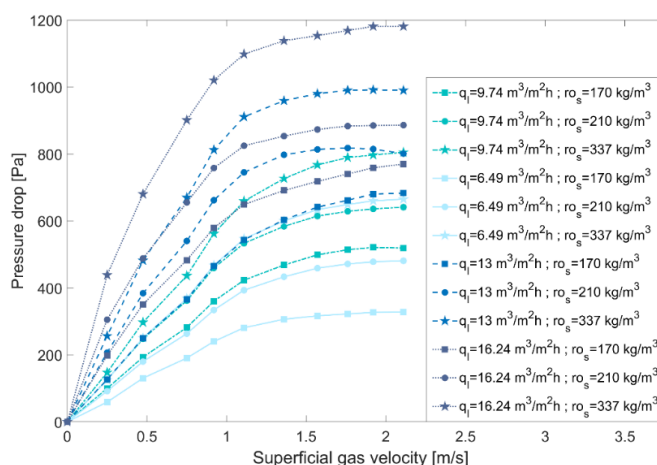


Figura 2. Caderea de presiune în cazul sistemului aer/apă

În ceea ce privește expansiunea stratului fluidizat, analiza a fost efectuată folosind particule solide cu o densitate de $\rho_s = 170 \text{ kg}/\text{m}^3$ și diferite valori ale vitezei gazului și ale densității de pulverizare a lichidului. Rezultatele sunt prezentate în *Figura 3*.

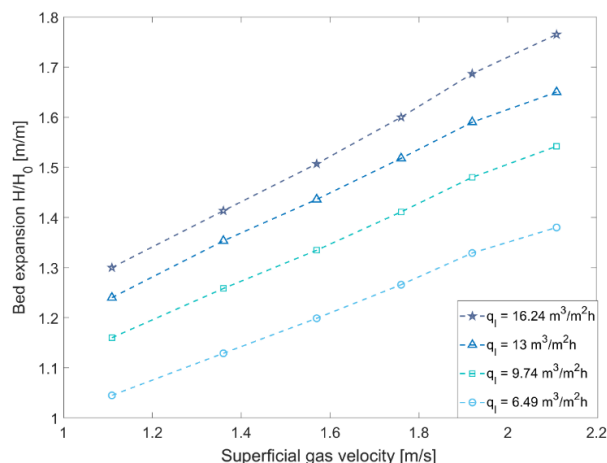


Figura 3. Expansiunea stratului fluidizat pentru sistemul experimental aer/apă

La o densitate constantă de pulverizare a lichidului din coloană, căderea de presiune crește odată cu creșterea vitezei gazului până când începe fluidizarea. Când se atinge viteza minimă de fluidizare, stratul solid staționar începe să se extindă, înălțimea sa crescând odată cu creșterea vitezei gazului. După cum se arată în *Figura 3*, creșterea vitezei gazului și a densității de pulverizare, duce la o creștere semnificativă a expansiunii stratului fluidizat. Această particularitate poate fi atribuită frecării dintre faza gazoasă și particulele solide acoperite de lichid. Ca atare, chiar dacă cele două faze circulă în contracurent, ambele contribuie la obținerea unor valori mai mari ale expansiunii stratului fluidizat. Cu toate acestea, este necesar să se mențină valorile debitului de gaz în anumite limite pentru a favoriza fluidizarea, dar pentru a evita trecerea la un regim de strat circulant.

Zestrea de lichid din coloana de absorbție este puternic influențată de densitatea de pulverizare a lichidului, după cum se arată în *Figura 4*. În acest caz, s-a observat că în cazul creșterii vitezei gazului, zestrea de lichid nu se modifică semnificativ, acest efect fiind mult mai mare pentru valori mai mari ale densității de pulverizare a lichidului, conform datelor publicate în literatură (Gimenes et al., 1998).

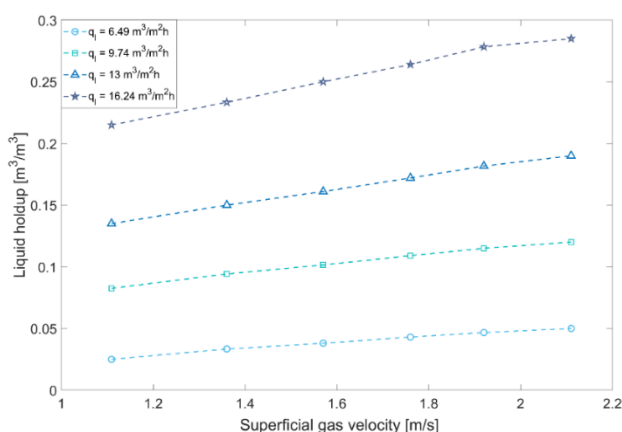


Figura 4. Zestrea de lichid pentru sistemul experimental aer/apă

2. MODELAREA MATEMATICĂ A PROCESULUI DE CAPTARE CO_2

2.1 Modelul de transfer de masă

Procesul de absorbție a dioxidului de carbon în soluție alcalină este un proces eterogen gaz-lichid. Investigarea performanțelor procesului de captare a CO_2 cu ajutorul unui sistem în strat fluidizat

trifazic gaz-solid-lichid a fost realizată cu ajutorul unui model dezvoltat anterior (Tabel 2), scalat la nivel industrial (Ilea et al., 2020). Pentru o mai bună descriere a hidrodinamicii procesului, s-au implementat, în modelul matematic, noi corelații, determinate pe baza datelor experimentale, pentru estimarea vitezei minime de fluidizare, căderii de presiune în coloană și expansiunea stratului fluidizat.

Tabelul 2. Modelul matematic de transfer de masă al procesului

Bilanțul de masă și energie		Observații
$F_j^e = F_j^0 \pm w_j \cdot \frac{N_{CO_2} \cdot M_{CO_2}}{\rho_j}$	(1)	j - indicator de fază (gaz/lichid), l - indicator de fază pentru faza lichidă,
$\frac{dC_{CO_2}^j}{dt} = \frac{F_j^0}{w_j} \cdot C_{CO_2}^0 \cdot j - \frac{F_j^e}{w_j} \cdot C_{CO_2}^j \pm N_{CO_2} - v_r$	(2)	0 - inițial, e - ieșire
$\frac{dC_{NaOH}^l}{dt} = \frac{F_l^0}{w_l} \cdot C_{NaOH}^0 \cdot l - \frac{F_l^e}{w_l} \cdot C_{NaOH}^l - v_r$	(3)	
$\frac{dT_j}{dt} = \frac{F_j^0}{w_j} \cdot T_j^0 - \frac{F_j^e}{w_j} \cdot T_j - \frac{\Delta H_r \cdot v_r}{\rho_j \cdot cp_j} \mp \frac{h \cdot a_e \cdot (T_l - T_g)}{(\rho_j \cdot cp_j \cdot w_j)}$	(4)	
Ecuatiile transferului de masă		Observații
$k_l = C_l * \left(\frac{g}{\vartheta_l}\right)^{\frac{1}{6}} * \left(\frac{D_{CO_2}^l}{S}\right)^{0.5} * w_{le}^{0.5}$	(5)	Billet and Schultes, 1997
$k_g = C_g * \left(\frac{1}{\varepsilon - \varepsilon_l}\right)^{0.5} * \left(\frac{a}{S}\right)^{0.5} * D_{CO_2}^g * \left(\frac{w_{ge}}{a * \mu_g}\right)^m * \left(\frac{\vartheta_g}{D_{CO_2}^g}\right)^n$	(6)	Billet and Schultes, 1997
$a_e = a * e^{11.8967} \cdot \left(\frac{w_l^2}{d_e * g}\right)^{-0.0152} \cdot Fr_g^{-0.2466} \cdot Ga_l^{-0.7174}$	(7)	Corelație determinată, în cadrul proiectului, pe baza datelor experimentale (Ilea et al., 2022)
$N_{CO_2} = a_e * E * k_l * (C_{CO_2}^g - C_{CO_2}^l)$	(8)	

2.2 Modelul hidrodinamic

Calcularea expansiunii stratului fluidizat, a zestrei de lichid și a căderii de presiune în coloană sunt componente importante ale modelului dezvoltat. O trecere în revistă a literaturii de specialitate arată variația parametrilor de proces, luați în considerare, atunci când se face referire la coloanele de absorbție cu contact turbulent și cum influențează aceștia rezultatele obținute experimental. În cazul căderii de presiune și al expansiunii stratului, corelațiile existente, prezentate în *Tabel 3 și 4*, au fost testate pentru sistemul propus, dar a dus la rezultate "negative", obținându-se un factor de corelație sub R=0,70. Din acest motiv, au fost propuse noi corelații pentru calculul acestor parametri hidrodinamici (Ecuatiile 13 și 17). Pentru corelațiile aferente pierderii de presiune și ariei efective de transfer de masă, s-au folosit criteriile de similitudine bazate pe referințe din literatură pentru a arăta influența forțelor motrice implicate în proces. Criteriul lui Reynold a fost utilizat pentru a arăta raportul dintre forțele inerțiale (curgerea fluidelor) și forțele de frecare (vâscozitatea). Criteriul Webber ia în considerare tensiunea superficială, în timp ce forțele gravitaționale sunt reprezentate prin criteriile de similitudine ale lui Froude și Galileo, toate acestea regăsindu-se în ecuația dezvoltată în cadrul proiectului de cercetare de față. Aceasta a fost determinată pe baza corelației propuse de Rama et al (Rama et al., 1983). Coeficienții obținuți, pe baza datelor experimentale, au arătat că, în cazul sistemului trifazic gaz-solid-lichid, unele variabile considerate în literatură nu au avut nicio influență asupra procesului studiat.

O analiză a corelațiilor propuse în literatură, conduce la concluzia că pierderea de presiune, în coloana de fluidizare, depinde proporțional de viteza lichidului și de înălțimea stratului (Bensebia et al., 2016). Prin urmare, creșterea vitezei lichidului sau a înălțimii stratului staționar ar duce la o creștere a căderii de presiune. Cu toate acestea, nu se poate observa același consens în cazul vitezei gazelor, unii autori luând-o în considerare, alții nu, și nici în cazul mărimii granulelor, unii autori susținând că aceasta are o influență mică sau chiar nulă asupra căderii de presiune în coloană (Uchida et al., 1977).

Tabelul 3. Determinarea căderii de presiune

Referință	Corelație	
Handle et al. (1976)	$\Delta p = \rho_p \cdot (1 - \varepsilon_0) \cdot g \cdot H_0 + 26.8 \cdot \varepsilon_0 \cdot Re_l^{-0.189} \cdot Fr_l^{0.948} \cdot g \cdot H_0 \cdot \rho_l$	(9)
Wozniak et al. (1977)	$\Delta p = \rho_p \cdot (1 - \varepsilon_0) \cdot g \cdot H_0 + 4.67 \cdot 10^5 \cdot \left(\frac{H_0}{D_c}\right)^{0.4515} \cdot Re_g^{-1.798} \cdot Re_l^{0.8261} \cdot \rho_g \cdot w_g$	(10)
Rama et al. (1983)	$\Delta p = \rho_p \cdot (1 - \varepsilon_0) \cdot g \cdot H_0 + 12.8 \cdot \left(\frac{H_0}{d_p}\right)^{0.4515} \cdot Fr_l^{1.66} \cdot Re_l^{-0.34} \cdot Ga_l^{0.09} \cdot We^{-0.34} \cdot \rho_l$	(11)
Lyashuk et al. (2001)	$\Delta p = 163 \cdot w_l^{0.34} \cdot \rho_l^{0.34} \cdot w_g^{0.29} \cdot H_0^{0.38} \cdot f^{-1.35}$	(12)
Ilea et al. (2022)	$\Delta p = \rho_l \cdot g \cdot H_0 \cdot \left(\frac{H_s}{H_0}\right)^{-1.7372} \cdot Re_g^{1.2535} \cdot Ga_l^{-0.4632} \cdot Re_l^{0.3897} \cdot We_l^{0.8760}$	(13)

Înălțimea stratului expandat este importantă la proiectarea unui absorbant cu contact turbulent pentru a determina înălțimea coloanei (Gillan et al., 2017). Determinările experimentale privind expansiunea stratului fluidizat au arătat că aceasta este influențată nu numai de debitul de gaz, ci și de debitul de lichid și de densitatea particulelor (Imran et al., 2020). Astfel, în literatura de specialitate, au fost propuse mai multe corelații pentru calcularea raportului dintre înălțimea stratului fluidizat și înălțimea stratului neexpandat (Tabelul 4). Corelațiilor propuse de Lyashuk et al., 2001 și Shackley et al., 2000, au fost implementate în modelul matematic dezvoltat, obținându-se un factor de corelație R, sub valoarea de 0,80, între rezultatele obținute prin simulare și cele experimentale. Ca urmare, a fost determinată o nouă corelație pentru calculul înălțimii stratului fluidizat pe baza datele experimentale de la instalația pilot (Ilea et al., 2022). Totodată, s-a verificat că modelul poate prezice cu exactitate comportamentul real al unor astfel de sisteme trifazice gas-solid-lichid, prin analiza căderii de presiune și a expansiunii stratului în funcție de viteza gazului (Figura 5 și 6), considerând valori constante ale densității de pulverizare a lichidului ($q_l = 13 \text{ m}^3/\text{m}^2 \cdot \text{h}$) și ale densității fazei solide ($\rho_s = 210 \text{ kg}/\text{m}^3$).

Tabelul 4. Determinarea înălțimii stratului fluidizat

Referință	Corelație	
Gimenes et al. (1998)	$\frac{H_{sf}}{H_0} = 1.862 \cdot d_p^{0.306} \cdot \left(1 - \frac{\Phi}{\zeta}\right)^{1.37} \cdot L^{0.108} \cdot (1000 \cdot \rho_p \cdot v_p)^{-0.107} \cdot e^{0.35 \cdot w_g}$	(14)
Shackley et al. (1983)	$\frac{H_{sf}}{H_0} = 0.0833 \cdot (-14.9 \cdot f^2 + 15.7 \cdot f - 2.1) \cdot H_0^{-0.34} \cdot L^{0.26} \cdot \rho_p^{-0.43} \cdot w_g^{0.78} \cdot d_p^{-0.85}$	(15)
Lyashuk et al. (2001)	$\frac{H_{sf}}{H_0} = 0.16 \cdot w_g^{0.44} \cdot L^{0.27} \cdot H_0^{-0.71} \cdot f^{-1.54}$	(16)
Ilea et al. (2022)	$\frac{H_s}{H_0} = \left(\frac{D_c}{d_p}\right)^{0.8861} \cdot \left(\frac{\rho_s}{\rho_g}\right)^{-0.3346} \cdot \left(\frac{w_g}{w_{lmf}}\right)^{-0.1172} \cdot \left(\frac{w_l}{w_{lmf}}\right)^{0.2318}$	(17)

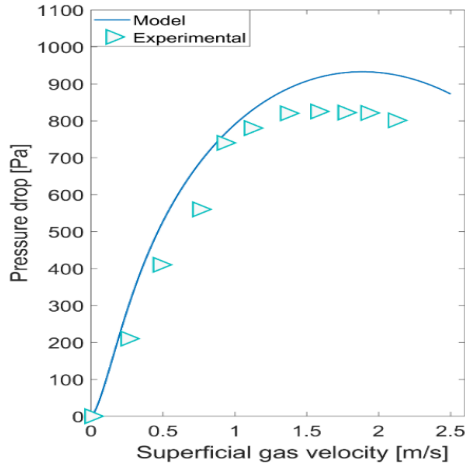


Figura 5. Căderea de presiune raportată la viteza de circulație a gazului

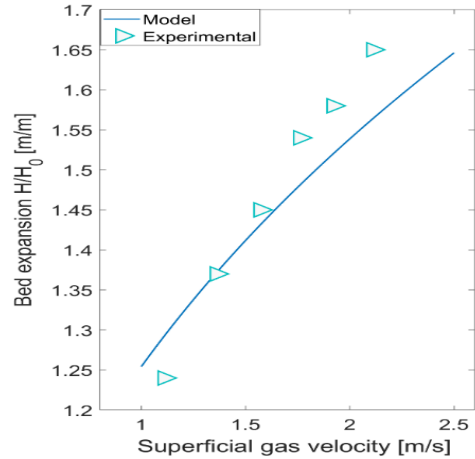


Figura 6. Expansiunea stratului fluidizat raportată la viteza de circulație a gazului

Un alt parametru important al procesului este zestrea de lichid (Hassan et al., 2020), ce poate fi calculată cu corelațiile prezentate în *Tabelul 5*. În cadrul acestui proiect pentru estimarea zestrei de lichid s-a utilizat ecuația dezvoltată de Gimenes et al. 1998, întrucât pentru particule sferice simple, oferă cele mai bune rezultate datorită similarității dintre sistemul descris de autorii menționați și sistemul propus în acest proiect.

Tabelul 5. Determinarea zestrei de lichid într-o coloană de fluidizare

Referință	Corelație	
Bruce et al. (2006)	$h_l = 2.01 \cdot Fr_l^{1.06} \cdot Re_l^{-0.655} \cdot \left(\frac{H_0}{d_p}\right)^{-0.853} \cdot \left(f \cdot \frac{d_p}{D_c}\right)^{-0.203}$	(18)
Shackley et al. (2000)	$h_l = 0.00035 \cdot L^{0.7} \cdot w_g^{0.75} \cdot H_0^{-0.92} \cdot f^{-2.5}$	(19)
Lyashuk et al. (2001)	$h_l = 0.00164 \cdot w_g^{0.16} \cdot w_l^{0.95} \cdot \rho_l^{0.95} \cdot H_0^{-1.09} \cdot f^{-2.02}$	(20)
Gimenes et al. (1998)	$h_l = 0.001884 \cdot e^{0.237 \cdot w_g} \cdot (\rho_l \cdot w_l)^{0.616} \cdot H_0^{-0.357} \cdot d_p^{-0.411}$	(21)

REZULTATE ȘI DISCUȚII REFERITOARE LA MODELAREA SISTEMULUI TRIFAZIC

Modelul matematic dezvoltat a fost utilizat pentru a analiza performanța diferitelor configurații ale sistemului, utilizând parametri de proces prezentați în *Tabelul 6*. Astfel, în cazul unei coloane de absorbție la scară industrială, înălțimea stratului a fost împărțită în 3 secțiuni pentru a se asigura posibilitatea fluidizării fazei solide. Înălțimea stratului fluidizat scade cu fiecare secțiune ca răspuns la scăderea vitezei gazului (0,4 m pentru prima secțiune, 0,3 m pentru a doua secțiune, 0,2 m pentru a treia secțiune).

Pentru a analiza comportamentul acestui sistem, au fost luate în considerare mai multe cazuri care se referă la utilizarea unor dimensiuni și distribuții diferite ale particulelor pe cele 3 secțiuni ale coloanei, precum și la diferite densități ale fazei solide. Cazul de bază (*a*) consideră particule cu aceleași caracteristici distribuite în cele trei secțiuni ($d_p=0,05$ m, $\rho_p=500$ kg/m³). Al doilea caz (*b*) propune utilizarea unor particule mai mici pentru fiecare secțiune, variind de la 0,05 m pentru secțiunea inferioară la 0,03 m pentru secțiunea superioară. Al treilea caz (*c*) presupune o variație a densității

particulelor de la 500 kg/m^3 la 300 kg/m^3 . Fiecare caz influențează în mod diferit performanța sistemului. După cum se observă în *Figura 7*, o scădere a diametrului particulelor conduce la o creștere importantă a înălțimii stratului fluidizat. De asemenea, o scădere a densității ajută la obținerea unor valori mai mari ale înălțimii stratului în comparație cu cazul de bază. Un diametru sau o densitate redusă a particulelor conduce la o valoare redusă a vitezei minime de fluidizare.

Tabelul 6. Parametrii procesului

Parametru	Instalație pilot	Instalație industrială
Diametrul coloanei [m]	0.14	1
Înălțimea stratului staționar [m]	0.12	0.3 – 0.5
Înălțimea coloanei [m]	1.1	3
Diametrul particulelor solide [m]	0.01	0.05 – 0.02
Densitatea particulelor solide [kg/m^3]	170, 210, 330	100 – 500
Debit de lichid [m^3/h]	0.1, 0.2	10-50
Debit de gaz [m^3/h]	60 – 120	4000 – 10000

Viteza gazului are o mare influență asupra performanței sistemului, deoarece determină înălțimea stratului fluidizat. Creșterea vitezei gazului pentru toate cele trei cazuri luate în considerare determină o înălțime mai mare a acestuia (*Figura 8*). Valoarea înălțimii stratului fluidizat este importantă atunci când ne referim la valoarea ratei de captare a dioxidului de carbon.

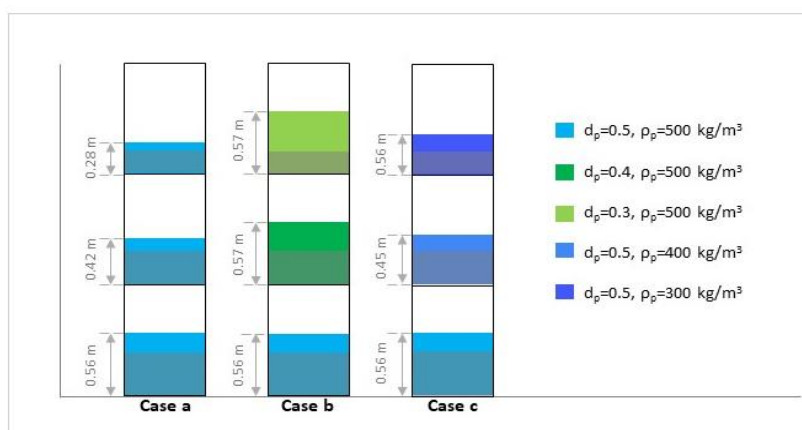


Figura 7. Influența caracteristicilor particulelor asupra înălțimii stratului fluidizat

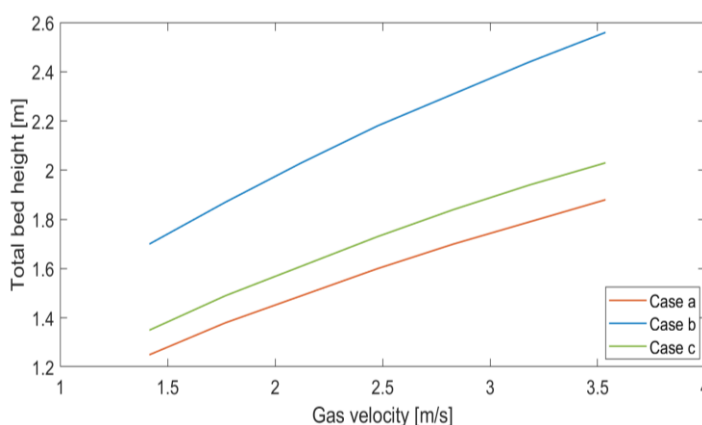


Figura 8. Influența vitezei gazelor asupra înălțimii totale a stratului fluidizat

În același timp (*Figura 9*), creșterea vitezei gazului duce la creșterea valorilor ratei de captare a CO₂. Devine evident că în cazul *b* se prezintă cea mai eficientă rată de captare datorită scăderii dimensiunii particulelor, care determină o valoare mult mai mare a înălțimii stratului fluidizat în toate secțiunile coloanei de fluidizare.

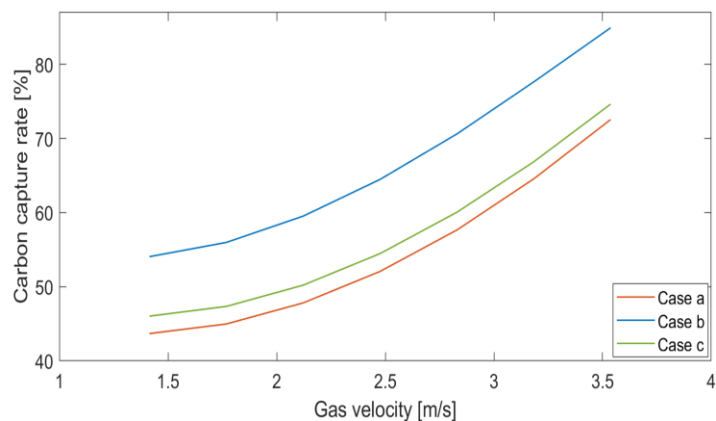


Figura 9. Influența vitezei gazului asupra ratei de captare a dioxidului de carbon

Un alt parametru important este densitatea de pulverizare a lichidului, care se poate dovedi utilă la îmbunătățirea performanțelor sistemului. Creșterea sa, așa cum se arată în *Figura 10*, ajută la atingerea unor valori mai mari ale ratei de captare. Acest lucru se datorează frecării crescute dintre faza gazoasă și particulele sferice acoperite de lichid, care asigură înălțimi mai mari ale stratului.

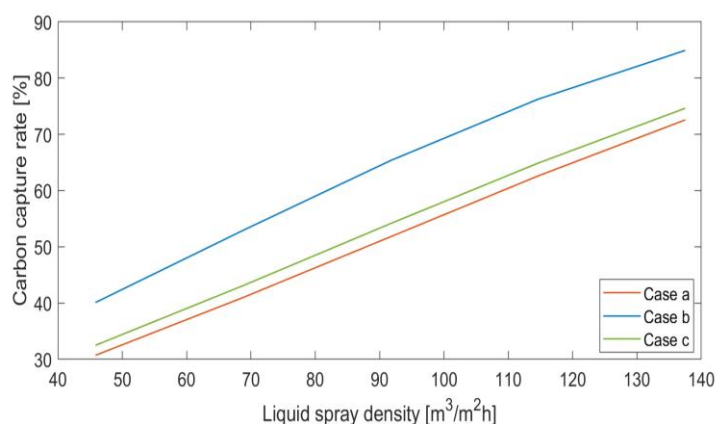


Figura 10. Influența densității de pulverizare a lichidului asupra ratei de captare a CO₂

Pentru îmbunătățirea performanței procesului de captare a dioxidului de carbon, în ceea ce privește eficiența de absorbție/regenerare și scăderea timpului de absorbție a CO₂, Aschenbrenner și Styring 2010, au propus utilizarea glicerinei, ce are o presiune scăzută a vaporilor și este disponibilă în cantități mari, ceea ce duce la scăderea costurilor pentru captarea CO₂. Amestecul de glicerină și solvenți pe bază de amine sau hidroxizi ar putea rezolva problema pierderilor de solvenți, a coroziunii echipamentelor și a necesarului ridicat de energie pentru regenerarea solvenților (Tan et al., 2013).

Pentru chemosorbția CO₂ în soluții apoase de hidroxid de sodiu, rata de captare este inferioară celei obținute în cazul utilizării de alcanolamine. Hidroxidul de sodiu este folosit ca și absorbant, în principal pentru a evalua performanțele tehnologiilor de captare a CO₂, fiind non-toxic și ușor de manipulat. În urma studiilor efectuate, utilizând o viteză constantă a gazului (1.1 m/s), un debit constant de lichid (200 l/h) și o concentrație de glicerină de 0.5 M, egală cu a hidroxidului de sodiu, s-

a constatat faptul că adăugarea de glicerină la amestecul absorbant crește foarte mult rata de captare a CO₂ (Figura 11) cu aproximativ 15%. Aceasta creștere se poate corela atât cu capacitatea glicerinei de a reacționa chimic cu dioxidul de carbon, dar și cu vâscozitatea acestui solvent. Adiția lui crește vâscozitatea lichidului și astfel favorizează apariția unui timp mai mare de contact între cele două faze, lichidă și gazoasă. Totodată, după cum se poate observa în Figura 11, creșterea densității fazei solide duce la scăderea ratei de captare ca urmare a creșterii vitezei minime de fluidizare și implicit scăderii înălțimii stratului fluidizat.

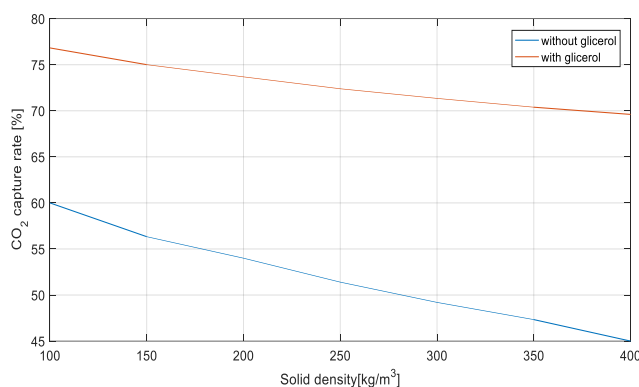


Figura 11. Influența densității solidului asupra ratei de captare în sisteme cu/fără glicerol

Studii anterioare au arătat că rata de captare a CO₂ este direct proporțional influențată de creșterea înălțimii stratului fluidizat, respectiv a expansiunii stratului. Pentru a analiza influența glicerolului asupra sistemului de captare, s-a urmărit variația expansiunii stratului fluidizat cu concentrația glicerolului (Figura 12). Creșterea concentrației de glicerol duce la scăderea expansiunii stratului fluidizat ca urmare a creșterii vâscozității amestecului lichid.

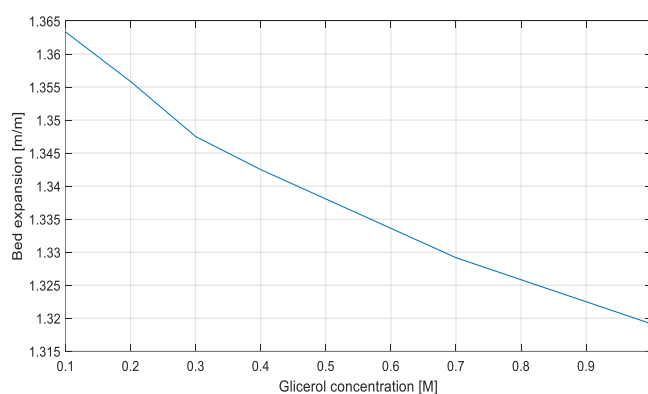


Figura 12. Influența concentrației de glicerol asupra expansiunii stratului fluidizat

ACTIVITATEA 2.3

3. REGLAREA PROCESULUI

Pentru implementarea practică, a tehnologiilor de captare a CO₂, trebuie acordată o atenție deosebită proiectării și aplicării unor strategii de reglare eficiente (Faezeh et al., 2021). Procesul luat în considerare în acest studiu este compus din 4 subsisteme: coloana de absorbție, coloana de desorbție, un vas tampon și un schimbător de căldură încrucișat (Figura 13). Schimbătorul de căldură introdus în instalație este utilizat pentru a recupera o parte din energia utilizată pentru procesul de desorbție.

Fluxul fierbinte de amină săracă în CO_2 este răcit în contact cu fluxul rece de amină bogată în CO_2 , care trebuie preîncălzit înainte de a fi introdus în desorber. Fluxul de amină săracă este depozitat într-un vas tampon, prevăzut cu o serpentină interioară pentru o răcire suplimentară. În vasul tampon se adaugă un flux proaspăt de soluție de amină și unul de pă proaspătă pentru a ajusta concentrația fluxului recirculat. Absorberul și desorberul sunt ambele coloane cu strat fix de umplutură structurată (Faezeh et al., 2021; Gaspar et al., 2011).

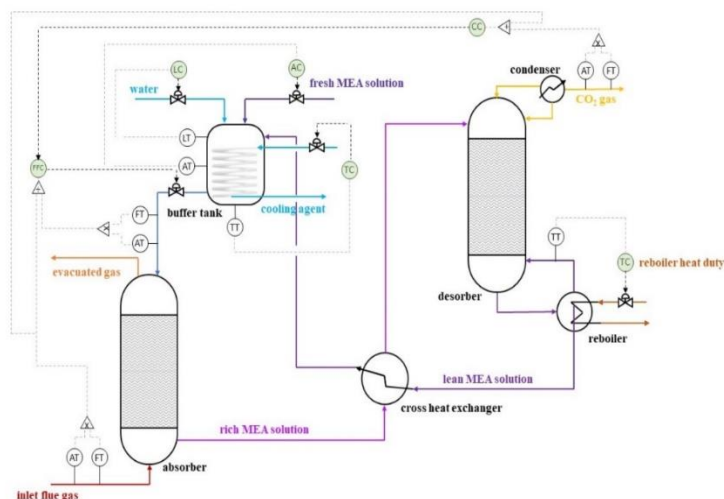


Figura 13. Diagrama procesului și structura de reglare

AC = reglator de concentrație, CC = reglator rată de captare a CO_2 , FFC = reglator de raport, LC = reglator de nivel, TC = reglator de temperatură, AT = traducător de compoziție, FT = traducător de debit, LT = traducător de nivel, TT = traducător de temperatură

3.1. Reglarea unei coloane de absorbție (studiu preliminar)

Într-o primă etapă, s-a urmărit implementarea unui sistem de reglare a ratei de absorbție a CO_2 utilizând atât strategia de reglare clasică (Regulator Proporțional-Integral, PI), cât și strategia de reglare avansată (Reglare Predictivă după Model, MPC).

Cele două abordări de reglare luate în considerare au fost analizate în prezența unor perturbații tipice, cum ar fi modificarea, sub formă de semnal treptă, a debitului de intrare a gazelor de ardere, cu o creștere de 10% față de valoarea din punctul său nominal de funcționare. În studiul preliminar variabila de execuție (manipulate) a fost debitul de lichid, comandat de reglator pentru a menține concentrația de CO_2 gazos de ieșirea din absorber la valoarea de referință de $1,81 \cdot 10^{-5}$ Kmol/m³, aceasta din urmă asigurând eliminarea a cel puțin 85% CO_2 din amestecul gazos. După cum se arată în *Figura 14*, atât sistemul de reglare PI, cât și cel MPC reușesc să contracareze efectul modificării debitului de intrare a gazelor de ardere, aducând concentrația de CO_2 gazos de ieșirea din absorber la valoarea dorită. Avantajul MPC implementat fără restricții față de PI constă în durata perioadei de timp în care concentrația de gaz CO_2 controlată depășește valoarea de referință impusă. În cazul MPC, această perioadă este mai mică în comparație cu abordarea de reglare PI, după cum este prezentată în *Figura 14*. Acest fapt are un impact direct asupra creșterii eficienței captării CO_2 și are ca rezultat scăderea emisiilor de CO_2 . În plus, depășirea ușor mai mică a concentrației reglate de CO_2 gazos pentru cazul MPC, în comparație cu cazul PI, subliniază același impact favorabil (Cormos et al., 2015).

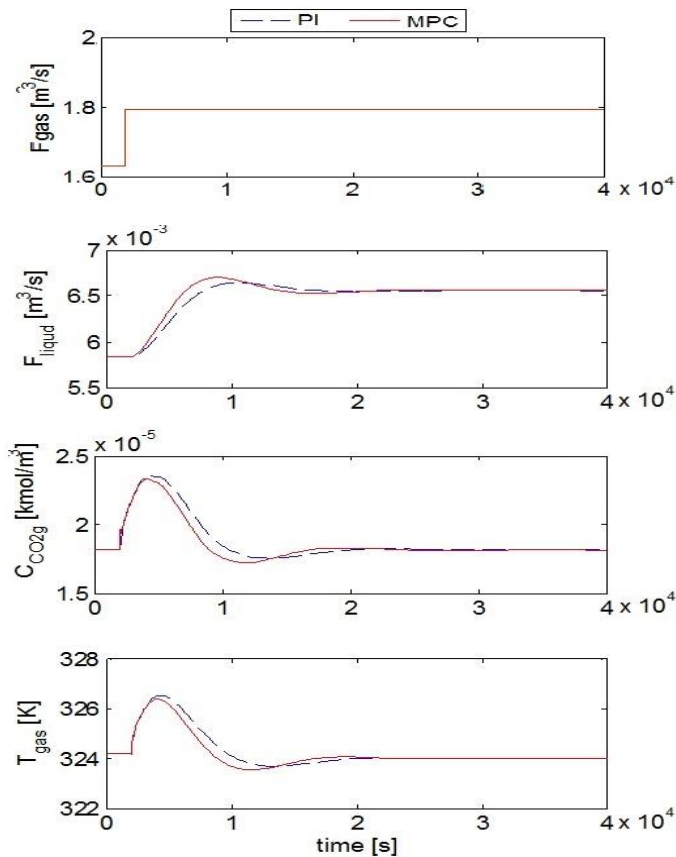


Figura 14. PI vs MPC

3.2. Strategia de reglare folosind un sistem de reglare descentralizat

În urma evaluării rezultatelor obținute la reglarea unei coloane de absorbție, în cadrul acestui proiectul s-a urmărit proiectarea unui sistem de reglare descentralizat cu mai multe bucle de reglare, pentru întreaga unitate de captare a dioxidului de carbon, ce urmărește menținerea ratei (raportului) de captare a dioxidului de carbon (CC) la valoarea de referință dorită. Cele mai frecvente perturbații ale instalației de captare prost-combustie a dioxidului de carbon constau în modificări ale debitului și concentrației de CO₂ din gazele de ardere (Sharma et al., 2014; He et al., 2016; Manaf et al., 2018; Lin et al., 2012; Arce et al. 2012; Jung et al., 2021). Variabilele reglate și execuție, utilizate în acest studiu sunt prezentate în *Tabelul 7*.

Tabelul 7. Variabilele reglate și manipulate

Variabilele reglate	Variabile manipulate
Rata de captare CO ₂	Valoare de referință a regulatorului de raport
Raportul debitelor molare de MEA și CO ₂ intrate în absorber	Debit molar de MEA la intrare în absorber
Concentrația de MEA în vasul tampon	Debit molar de MEA proaspăt
Nivelul din vasul tampon	Debit de apă proaspătă
Temperatura MEA din vasul tampon	Debit de agent de răcire în vasul tampon
Temperatura lichidului din reboiler	Debit de abur la intrare în reboiler

Sistemul de reglare este proiectat conform unei configurații de reglare în cascadă, regulatorul principal din "bucă master" (conducătoare), având sarcina de a menține rata de captare (CC) la valoarea de referință dorită. Bucă de reglare internă, denumită și "bucă slave" (condusă), este

responsabilă de menținerea raportului debitelor molare de MEA săracă în CO₂ și dioxid de carbon care intră în sistem, la valoarea de referință comandată de regulatorul principal. Buclele de reglare ale vasului tampon au rolul de a face față perturbațiilor de temperatură, concentrație și debit care pot fi cauzate de soluția de amină săracă în CO₂ care intră în coloana de absorbție, pentru a menține operabilitatea și performanța generală a sistemului. Bucla de reglare a temperaturii lichidului din reboilerul desorberului menține stabilitatea termică a sistemului și asigură funcționarea eficientă din punct de vedere energetic. Toate regulatoarele utilizează legea de reglare proporțional-integral (PI) și sunt acordate prin metoda "încercare și eroare", imitând prin acest mod acordare practica de tip experimental și industrial.

Rezultatele simulării arată că la diferite perturbații ale gazelor de ardere la intrarea în proces, sistemul de reglare propus reușește să readucă variabilele de reglare la valoarea de referință, dar cu o anumită abatere. Această abatere este dependentă de valorile de referință asumate inițial, ceea ce înseamnă că este necesară o optimizare a valorilor de referință pentru a obține cea mai bună performanță posibilă a instalației, nu numai în ceea ce privește performanța sistemului de reglare, ci și pentru a obține eficiența dorită a ratei de captare CO₂ precum și pentru a reduce consumul de energie. În acest scop, au fost luați în considerare mediile a 3 indici de performanță: eroarea medie pentru reglarea ratei de captare a dioxidului de carbon (eroare definită ca diferența dintre valoarea de referință CC și valoarea CC măsurată în timpul desfășurării procesului), valoarea medie a indicelui de performanță energetică și valoarea medie a ratei de absorbție. Fiecare calcul al indicilor de performanță a fost efectuat pentru un interval de timp în care apare o perturbație a debitului de gaze de ardere la intrare (scenariu caracterizat de o creștere, urmată de o scădere a gazului de alimentare). Această perturbație este prezentată în *Figura 14*. Calculul acestor indici a fost realizat în conformitate cu ecuațiile (22)-(27) (Zhang et al., 2018; Chan et al., 2018; Nittaya et al. 2014a; Nittaya et al. 2014b; Cormos et al., 2015).

Eroarea absolută medie pentru rata de captare a CO₂ pe intervalul de timp considerat t-t₀ este prezentată în ecuația (22). Valoarea de 85% a fost considerată ca fiind punctul de referință pentru bucla de reglare CC.

$$E_{CC} = \frac{\int_{t_0}^t |85 - CC|}{t - t_0} \quad (22)$$

Indicele mediu de performanță energetică:

$$\overline{E}_P = \frac{\int_{t_0}^t E_P}{t - t_0} \quad (23)$$

Valoarea medie a ratei de absorbție:

$$\overline{R}_{abs} = \frac{\int_{t_0}^t R_{abs}}{t - t_0} \quad (24)$$

Ca și indicatori de performanță instantanee a procesului de captare, utilizați și pentru reglare, s-au considerat rata de captare, rata de absorbție și indicele de performanță energetică.

Rata de captare este calculată ca fiind cantitatea de CO₂ care părăsește coloana de desorbție raportată la cantitatea de CO₂ care intră în instalația de captare:

$$CC = \frac{CO_2(\text{captată})}{CO_2(\text{intrată în absorber})} \cdot 100 \quad (25)$$

Rata de absorbție este definită ca fiind raportul dintre cantitatea de CO₂ absorbită și cantitatea de CO₂ care intră în instalația de captare:

$$R_{abs} = \frac{CO_2(\text{intrată în absorber}) - CO_2(\text{ieșită din absorber})}{CO_2(\text{intrată în absorber})} \cdot 100 \quad (26)$$

Indicele de performanță energetică este definit ca fiind cantitatea de energie (în MJ) necesară pentru a capta un kilogram de dioxid de carbon:

$$EP = \frac{Q_r}{CO_2(\text{captured})} \quad (27)$$

REZULTATE ȘI DISCUȚII PRIVIND REGLAREA PROCESULUI DE CAPTARE CO₂

Performanța sistemului de reglare propus a fost investigată în ceea ce privește capacitatea de a asigura atât eliminarea efectului perturbațiilor, cât și urmărirea valorilor de referință impuse buclilor de reglare. În plus, performanța sistemului de reglare a fost optimizată prin testarea diferitelor valori de referință pentru trei variabile reglate importante: concentrația de MEA în vasul tampon, temperatura vasului tampon și temperatura reboilerului. Rezultatele de performanță obținute cu punctele de referință optimizate au fost comparate cu valorile nominale, prezentate anterior și neoptimizate, ale indicilor de performanță.

Tabelul 8. Rezultatele indicilor de performanță

Variația valorii de referință pentru bucla de reglare a concentrației de MEA			
MEA de referință	E_{CC}	\overline{R}_{abs}	\overline{E}_p
1.275 M (-15%)	2.42	97.01	3.035
1.5 M (nominal)	0.46	95.57	3.033
1.725 M (+15%)	0.32	95.26	3.034
1.785 M (+19%)	0.29	94.22	3.036
1.80 M (+20%)	0.33	94.15	3.039
Variația valorii de referință pentru bucla de reglare a temperaturii vasului tampon			
Temperatura de referință	E_{CC}	\overline{R}_{abs}	\overline{E}_p
315 K	0.45	95.53	3.038
320 K (nominal)	0.46	95.57	3.033
325 K	0.95	95.55	3.032
Variația punctului de referință pentru bucla de reglare a temperaturii lichidului din reboiler			
Temperatura de referință	E_{CC}	\overline{R}_{abs}	\overline{E}_p
393.5	0.66	93.83	2.829
395 K (nominal)	0.46	95.57	3.033
398	0.33	93.45	20.38

Se dorește ca rata de captare să aibă o valoare cât mai mică posibil a erorii absolute medii pentru a se asigura o redresare rapidă și eficientă a valorii dorite a ratei de captare în urma apariției unei perturbații. Se urmărește ca valoarea medie a ratei de absorbție să fie cât mai mare posibil, iar valoarea indicelui mediu de performanță energetică să fie cât mai mică. Cele mai reprezentative rezultate obținute sunt prezentate în *Tabel 8*.

Pe baza studiului privind variația indicilor de performanță, prezentați în Tabelul 8, s-au stabilit următoarele valori pentru referințele buclilor de reglare, care au potentialul de a conduce la valori ale indicilor de performanță care caracterizează o operare avantajoasă față de cazul nominal ($E_{CC}=0.35$, $R_{abs}=95.19$, $E_p=2.95$). Aceste valori de referință sunt: pentru concentrația de MEA $C_{MEA}=1.785$ M, pentru temperatura din vasul tampon $T_{ref}=320$ K și pentru temperatura în reboiler $T_{reb}=394.5$ K.

Analiza sistemului de reglare

Cu noile valori de referință găsite, performanța sistemului de reglare a fost evaluată luând în considerare un scenariu de creștere urmată de o scădere a debitului de gaze de ardere de alimentare, care reprezintă modificarea cererii de energie electrică pe parcursul unui ciclu zilnic de 24 de ore. Amplitudinea de creștere/diminuare este stabilită la o valoare de 20%. Această variație este prezentată în *Figura 15*.

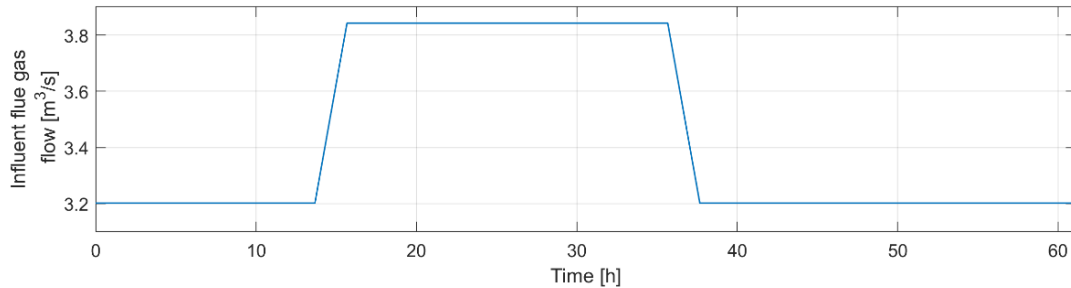


Figura 15. Scenariul de perturbație a debitului de gaze de ardere de intrare

Performanța strategiei de reglare propuse a fost analizată în funcție de capacitatea reglatoarelor de a readuce variabilele reglate la valorile de referință cât mai repede și mai eficient posibil, în ciuda acțiunii perturbației. Pentru reglarea în cascadă, rezultatele sunt prezentate în *Figurile 16 și 17*, care prezintă atât rezultatele regulatorului principal, cât și cele ale regulatorului din bucla internă de reglare. Se poate observa că rata de captare a dioxidului de carbon este menținută între 80 și 90%, iar sistemul de reglare principal este capabil să ajungă rapid la valoarea de referință dorită de 85% prin ajustarea valorii de referință a regulatorului intern al raportului molar.

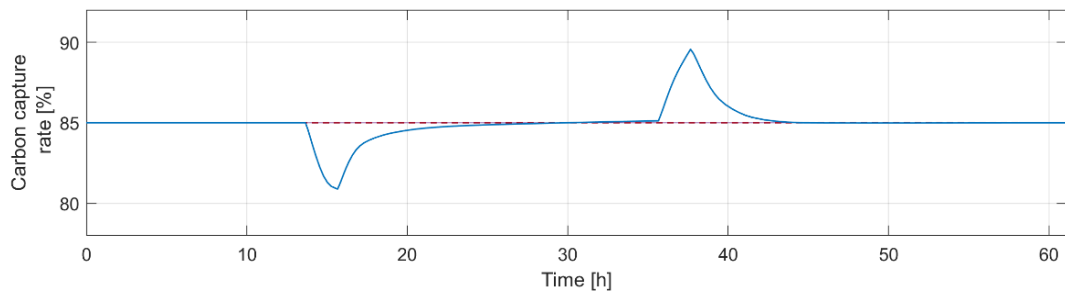


Figura 16. Performanța reglării ratei de captare a dioxidului de carbon (valoarea de referință este marcată cu linie punctată iar variabila reglată cu linie continuă)

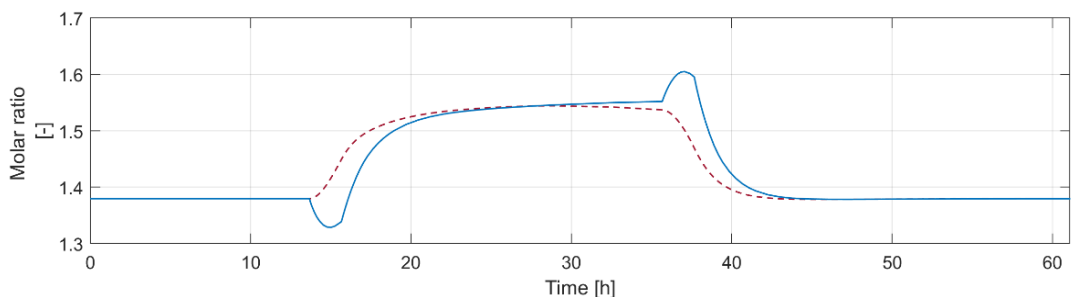


Figura 17. Performanța regulatorului de raport molar (valoarea de referință este marcată cu linie punctată iar variabila reglată cu linie continuă)

Sistemele de reglare ale vasului tampon includ trei bucle de reglare: reglarea nivelului, reglarea concentrației de MEA și a temperaturii. Performanțele de reglare sunt prezentate în figurile 18-20. Strategia de reglare pentru vasul tampon are ca scop evitarea pătrunderii în coloana de absorbție a perturbațiilor nedorite care provin din coloana de desorbție și prevenirea recirculării acestora în instalația de captare.

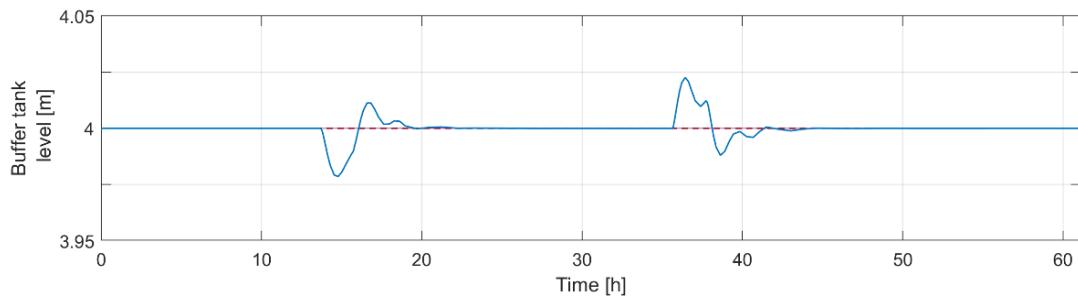


Figura 18. Performanța regulatorului de nivel al vasului tampon

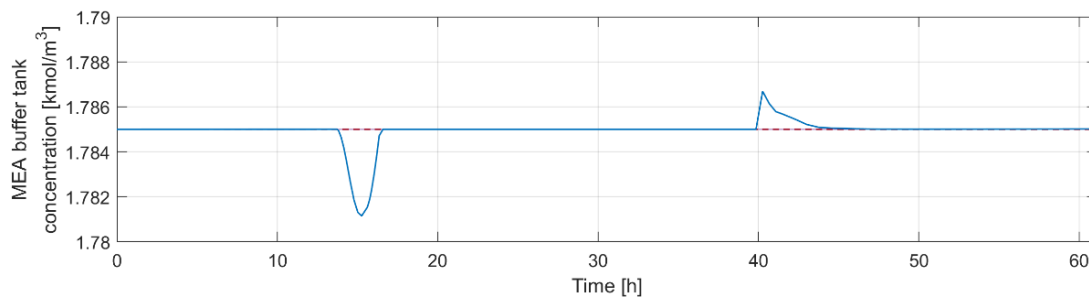


Figura 19. Performanța regulatorului de concentrație a MEA din vasul tampon

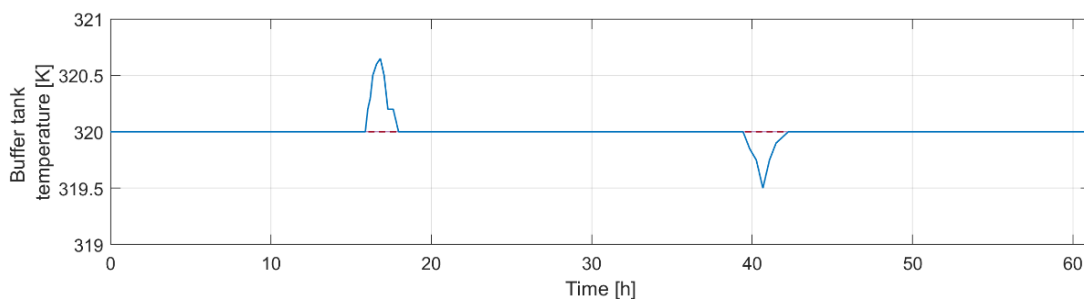


Figura 20. Performanța regulatorului de temperatură a vasului tampon

Buclo de reglare al temperaturii din reboiler este concepută pentru a menține eficiența energetică a sistemului, prin reglarea sarcinii termice a reboilerului (*Figura 21*). Obiectivul este atins cu un decalaj foarte mic (0.01%).

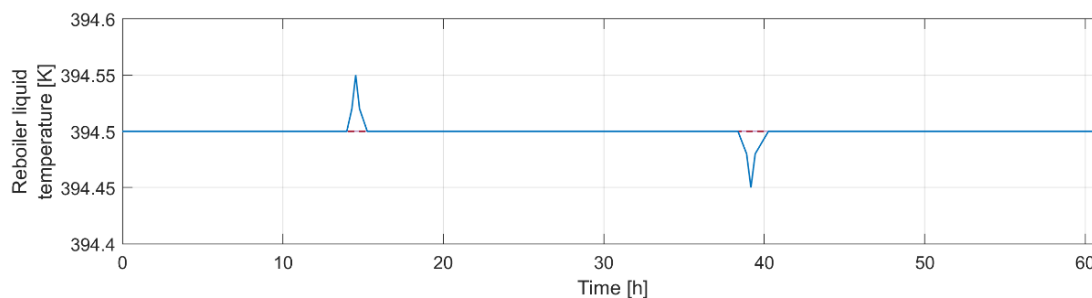


Figura 21. Performanța regulatorului de temperatură a lichidului din reboiler

Eficiența energetică a instalației de captare a CO₂ poate fi evaluată prin indicele de performanță energetică, prezentat în *Figura 22*. Acesta este menținut la valori cuprinse între 2.58 și 3.2, indiferent de creșterea sau descreșterea perturbației cauzate de debitul de gaze de ardere, ceea ce înseamnă că s-a realizat o funcționare eficientă din punct de vedere energetic a instalației.

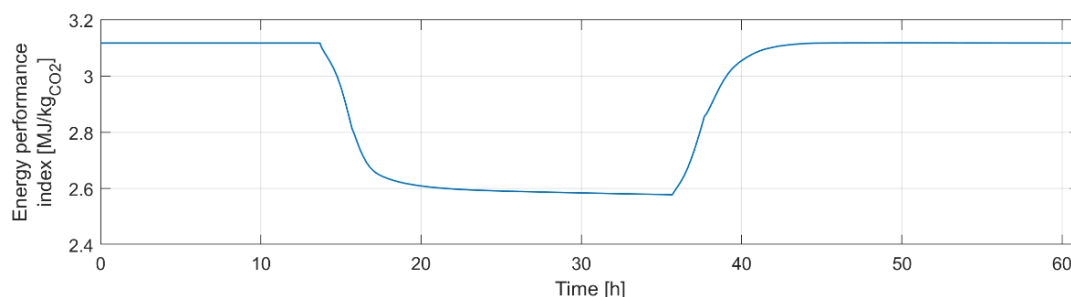


Figura 22. *Indicele de performanță energetică*

Un alt indice de performanță luat în considerare în acest studiu este rata de absorbție, prezentat în *Figura 23*, care rămâne peste 92% în ciuda acțiunii perturbațiilor din instalație. Mai mult, valoarea revine la cea inițială rapid și cu un decalaj redus.

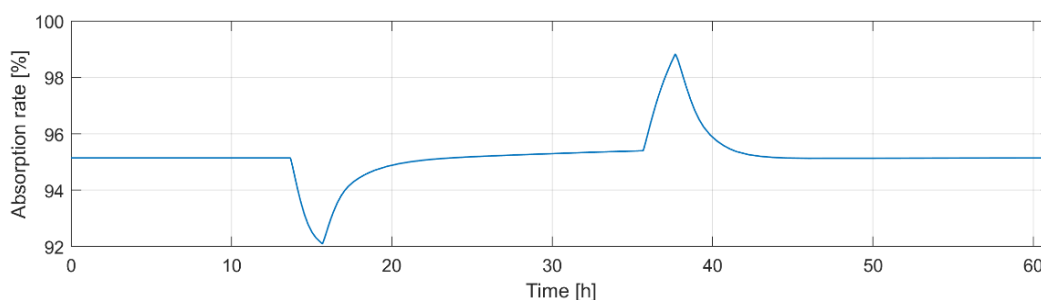


Figura 23. *Rata de absorbție*

CONCLUZII

În cadrul etapei 2022 a proiectului, s-a evaluat performanța unui coloane de fluidizare trifazică gas-solid lichid folosind un model matematic la scală pilot/ industrială. Pentru o bună descriere a hidrodinamicii procesului, s-au implementat, în modelul matematic, noi corelații determinate pe baza datelor experimentale, pentru estimarea vitezei minime de fluidizare, căderii de presiune în coloană și expansiunea stratului fluidizat. Modelul hidrodinamic a fost validat atât în ceea ce privește expansiunea stratului fluidizat, cât și a căderii de presiune, obținându-se coeficienți de corelație de peste 0,97. Și în ceea ce privește răspunsul la variațiile vitezei gazelor cu coeficienți de corelație de peste 0,93. Modelul matematic dezvoltat a fost utilizat pentru a analiza performanța diferitelor configurații ale sistemului, cum ar fi cazul unei coloane de absorbție la scară industrială, unde stratul de umplură a fost împărțit în 3 secțiuni diferite, pentru a se asigura fluidizarea particulele sferice de către faza gazoasă. Au fost luate în considerare trei cazuri în care caracteristicile particulelor solide variază de la un strat la altul: a) particule cu aceleași caracteristici distribuite în cele trei secțiuni, b) utilizarea unor particule mai mici pentru fiecare secțiune, variind de la 0,05 m la 0,03 m și c) variația a densității particulelor de la 500 kg/m³ la 300 kg/m³. S-a dovedit că cea mai bună performanță a fost obținută atunci când diametrul particulelor scade cu fiecare strat a coloanei, aceasta conduce la o creștere de 25% a ratei de captare a CO₂ și de 42% pentru înălțimea totală a stratului fluidizat.

Creșterea vitezei gazului de la 1,4 la 3,5 m/s duce la o creștere a ratei de captare de până la 50-60%. Același lucru este valabil și pentru creșterea densității de pulverizare a lichidului. Totodată, s-a evidențiat faptul că utilizarea glicerolului ca și co-solvent duce la o îmbunătățire a ratei de captare cu 25% în amestec cu soluția apoasă de NaOH.

Deasemenea, în cadrul acestui proiect s-a urmărit proiectarea unui sistem de reglare descentralizat cu mai multe bucle, pentru întreaga unitate de captare a dioxidului de carbon, ce urmărește menținerea ratei de captare a dioxidului de carbon (CC) la valoarea de referință dorită. Găsirea celor mai bune valori de referință ale regulatorului de concentrație MEA, ale regulatorului de temperatură a vasului tampon și ale regulatorului de temperatură a lichidului din reboiler în cadrul unui sistem de reglare al instalației care utilizează o buclă de reglare în cascadă pentru variabila principală (rata de captare a dioxidului de carbon) a fost obiectivul principal al acestui studiu. Astfel, s-a dorit, obținerea valorilor îmbunătățite ale celor trei indici de performanță luați în considerare: eroarea medie absolută a regulatorului de captare, indicele de performanță energetică și indicele ratei de absorbție. Analiza a fost efectuată în condițiile aplicării unor perturbații de creștere și diminuare a debitului de gaze de ardere la alimentare.

Rezultatele obținute arată interacțiunile puternice dintre variabilele instalației sunt induse de fluxurile de recirculare și de funcționarea individuală a buclelor de reglare. Cazul cel mai favorabil al valorilor pentru valorile de referință ale buclelor de reglare conduce la o eroare medie absolută pentru rata de captare a CO₂, cu o valoare cu aproximativ 24% mai mică decât cea obținută în cazul nominal. De asemenea, aceasta îmbunătățește eficiența energetică a sistemului cu 3%, conducând la o valoare a indicelui de performanță energetică sub 3 MJ/(kg CO₂). În plus, rata de absorbție este, de asemenea, ușor crescută în acest caz, menținând o valoare de peste 92%. Rezultatele arată că strategia de reglare implementată îmbunătățește performanțele de funcționare, prezentând un răspuns eficient și flexibilitate în ceea ce privește contracararea efectului perturbațiilor debitului de gaze de ardere, menținând în același timp performanțele ridicate ale instalației de CC post-combustie.

BIBLIOGRAFIE

- Arce A., Mac Dowell, N., Shahb, N., Vega, L.F., (2012). Flexible operation of solvent regeneration systems for CO₂ capture processes using advanced control techniques: towards operational cost minimisation. *Int J Greenh Gas Control*, 11, 236-250.
- Aschenbrenner O., Styring P., (2010). Comparative study of solvent properties for carbon dioxide absorption. *Energy Environ Sci*, 3, 1106-1113.
- Bensebia B., Bensebia O., Bentahar F., (2016). Analysis of the Pressure Drop Through the Bed and Across the Supporting Grid in Type II-TBC: Experimentation and Modelling. *Arab J Sci Eng* 41, 2589–2600.
- Bruce A., Balasubramanian R., Sai P., Kamatam K., (2006). Modelling of hydrodynamics in a type I turbulent bed contactor. *Chem Eng Sci*, 61, 2089-2095.
- Chan, L. L. T., Chen, J., (2018). Improving the energy cost of an absorber-stripper CO₂ capture process through economic model predictive control. *Int J Greenh Gas Control*, 76, 158–166.
- Cormos, A.M, Vasile M., Cristea M.V., (2015). Flexible operation of CO₂ capture processes integrated with power plant using advanced control techniques. *Comput Aided Chem Eng*, 37, 1547-1552.
- Cristea V.M., Burca M.I., Ilea F.M., Cormos A.M., (2020). Efficient decentralized control of the post combustion CO₂ capture plant for flexible operation against influent flue gas disturbances. *Energy* 205, 117960.
- Faezeh, K., Alireza, A., Kaveh, B., Zahra, Z., (2021). Analysis of Carbon Dioxide Capturing Technologies and their technology developments. *Cleaner Eng and Techn*, 5, 100279.

Gaspar, J., Cormos, A.M., (2011). Dynamic modeling and validation of absorber and desorber columns for post-combustion CO₂ capture. *Comput and Chem Eng*, 35, 2044-2052.

Gillani S.S.J., Ullah A., Zaman M., Chughtai I.R., Inayat M. H., (2017). Counter-current three-phase fluidization in a turbulent contact absorber: A CFD simulation. *Particuology*, 35, 51-67.

Gimenes M.L., Handley D. (1998). A model for particle collection in a turbulent bed contactor - New packings *Chem Eng Res Des*, 76(A7), 855-863.

Handle R. (1976), Technical University Clausthal. F.R.G., Ph.D. Thesis.

Hassan P.; Ahad G. (2020). CO₂ absorption into aqueous diethanolamine solution with nano heavy metal oxide particles using stirrer bubble column: Hydrodynamics and mass transfer. *J Environm Chem Eng*, 8(5), 104110.

He, Z., Sahraei, M.S., Luis, A., Ricardez-Sandoval, L.A., (2016). Flexible operation and simultaneous scheduling and control of a CO₂ capture plant using model predictive control. *Int J Greenh Gas Control*, 48, 300-311.

Ilea F.-M., Cormos A.M., Dragan S., Cormos C.C., (2022). Assessment of turbulent contact absorber hydrodynamics with application in carbon capture. *Chem Eng J*, 449, 137674.

Imran M., A. Ullah, S.W. Ahmad, (2020). Numerical Simulation of Hydrodynamics in a Turbulent Contact Absorber: A Simplified Approach. *Arab J Sci Eng* 45, 7477–7485.

Jung H., Heo S., Lee J.H., (2021). Model predictive control for amine-based CO₂ capture process with advanced flash stripper. *Control Eng Pract*, 114, 104885.

Lin Y.J., Wong D.S.H., Jang S.S., Ou,J.J. (2012), Control strategies for flexible operation of power plant with CO₂ capture plant. *AIChE J*, 58, 1366-1371.

Lyashuk A., Research, Design, Calculations and Operating Experience, (2001). *Chem Petroleum Eng*, 37(3-4), 125-133.

Manaf N.A., Cousins A., Feron P., Abbas A., (2016). Dynamic modelling, identification and preliminary control analysis of an amine-based post-combustion CO₂ capture pilot plant. *J Clean Prod*, 113, 635-653.

Nittaya T., Douglas P.L., Croiset E., Ricardez-Sandoval L.A., (2014a). Dynamic modelling and control of MEA absorption processes for CO₂ capture from power plants. *Fuel*, 116, 672-691.

Nittaya T., Douglas P.L., Croiset E., Ricardez-Sandoval L.A., (2014b). Dynamic modeling and evaluation of an industrial-scale CO₂ capture plant using MEA absorption processes. *Ind Eng Chem Res*, 53, 11411–11426.

Rama O. P., Rao D. P. (1983). Hydrodynamics of a mobile bed contactor with low density packing particles of different shapes. *Can J Chem Eng*, 61, 63-868.

Shackley I. (2000). The Design and Operation of Turbulent Bed Contactors. Department of Chemical and Process Engineering University of Sheffield., Ph.D., 249.

Sharma S.D., Azzi M., (2014). A critical review of existing strategies for emission control in the monoethanolamine-based carbon capture process and some recommendations for improved strategies. *Fuel*, 121, 178–188.

Billet R., Schultes M., 1993, Predicting mass transfer in packed columns, *Chem. Eng. and Technol.* 16, p. 1-9.

Tan H., Aziz A.A., Aroua M., (2013). Glycerol production and its applications as a raw material: a review. *Renew Sustain Energy Rev*, 27 (2013), 118-127.

Uchida S., Chang C.S., Wen C., (1977). Mechanics of a turbulent contact absorber. *Can J Chem Eng*, 55, 392-396.

Wozniak M. (1977). Pressure drop and effective interfacial area in a column with a mobile bed, *Int Chem Eng*, 17, 553.

Zhang Q., Turton R., Bhattacharyya D., (2018). Nonlinear model predictive control and H_∞ robust control for a post-combustion CO₂ capture process. *Int J Greenh Gas Control*, 70, 105–116.

REZUMAT EXECUTIV

AL ACTIVITĂȚILOR REALIZATE ÎN PERIOADA DE IMPLEMENTARE

În anul 2022 în cadrul proiectului: *“Integrarea metodelor de intensificare a proceselor cu strategii de reglare avansată pentru îmbunătățirea performanțelor sistemelor de captare CO₂ (CONTROLCO₂)”*, cod proiect: PN-III-P4-ID-PCE-2020-0632, nr. contract: PCE 181 / 2021 au fost prevăzute și realizate integral trei activități:

- Evaluarea și validarea modelului matematic ce descrie procesul de captare post-combustie a dioxidului de carbon folosind sistemul inovativ trifazic gaz-solid-lichid prin modelare și simulare.

- Evaluarea, utilizând modelarea și simularea, a posibilității de utilizare a glicerinei în amestec cu mono-etanolamina / hidroxid de sodiu pentru captarea dioxidului de carbon.

- Evaluarea în regim de operare flexibil și dezvoltarea unui sistem de reglare eficient de tip Proportional-Integral-Derivative (PID) și Model Predictive Control (MPC) pentru reglarea proceselor de captare post-combustie a dioxidului de carbon (activitate ce se continuă și în anul III de proiect).

Aceste activități au fost realizate în proporție de 100 %. Pentru exemplificare s-au realizat analize detaliate ale: (i) procesului de captare post-combustie a dioxidului de carbon folosind sistemul inovativ trifazic gaz-solid-lichid folosind evaluări experimentale și de modelare matematică și simulare (folosind programele Matlab și Comsol); (ii) evaluarea posibilității de utilizare a glicerinei în amestec cu mono-etanolamina / hidroxid de sodiu pentru captarea dioxidului de carbon în vederea intensificării procesului; (iii) evaluarea unui regim de operare flexibil al instalației de captare post-combustie a CO₂ integrată cu centrala termo-electrică și dezvoltarea unui sistem de reglare evoluat.

S-a evaluat utilizarea unor metode inovative de contact gaz-lichid, cum ar fi fluidizarea trifazică gaz-solid-lichid, care este o opțiune promițătoare, pentru intensificarea transferului de masă. În cazul stratului fluidizat, solidul este agitat riguros de fluid ceea ce duce la viteze mari de transfer de masă și căldură, și ca urmare coloanele de fluidizare gaz-solid-lichid sunt potrivite decarbonizării unei cantități foarte mari de gaze reziduale. În plus, s-a analizat posibilitatea de utilizare a unui solvent netoxic (glicerină) în amestec cu hidroxizi și amine care ar putea rezolva problema pierderilor de solvenți, a coroziunii echipamentelor și a necesarului ridicat de energie pentru regenerarea solvenților ceea ce ar duce la scăderea costurilor de exploatare ale instalațiilor de captare a CO₂. Totodată s-a urmărit proiectarea unui sistem de reglare descentralizat cu mai multe bucle de reglare automată, pentru întreaga unitate de captare a CO₂, ce urmărește menținerea ratei de captare a dioxidului de carbon (CC) la valoarea de referință dorită în condițiile unei operări flexibile în timp a instalației de captare integrată cu centrala termo-electrică.

Din punct de vedere al activităților de diseminare al rezultatelor proiectului în anul 2022 s-au publicat 8 articole științifice astfel: 4 publicate și 1 trimis spre publicare în reviste cotate ISI cu factor de impact ridicat (de ex. Chemical Engineering Journal – impact factor 16,744, Energy – impact factor 8,857; Applied Thermal Engineering – impact factor 6,465; International Journal of Hydrogen Energy – impact factor 7,139; Energies – impact factor 3,252) și 3 articole prezentate la conferințe internaționale cu colective de recenzie și vizibilitate mare (de ex. 17-th Conference on Sustainable Development of Energy, Water and Environment Systems – SDEWES; 25-th Conference on Process Integration for Energy Saving and Pollution Reduction – PRES'22; 22-nd Romanian International Conference on Chemistry and Chemical Engineering – RICCE). Diseminarea rezultatelor proiectului în reviste cu factor de impact ridicat și prezentarea la conferințe internaționale de largă vizibilitate certifică valoarea științifică și originalitatea rezultatelor proiectului.

Director de proiect
Conf.dr. Ana-Maria Cormoș

