



**ΕΘΝΙΚΟ  
ΜΕΤΣΟΒΙΟ  
ΠΟΛΥΤΕΧΝΕΙΟ**  
ΣΧΟΛΗ ΜΗΧΑΝΟΛΟΓΩΝ ΜΗΧΑΝΙΚΩΝ

Α.Π. :  
Αθήνα

ΚΟΣΜΗΤΟΡΑΣ

**Προς τα Μέλη ΔΕΠ της  
Σχολής Μηχ/γων  
Μηχ/κών**

**ΠΡΟΣΚΛΗΣΗ**

Σας προσκαλούμε στην παρουσίαση της Διδακτορικής Διατριβής της **κας ΠΡΕΝΤΖΑ Λουκίας** που εκτόνησε στο τομέα Θερμότητας της Σχολής, Διπλωματούχος Μηχανολόγος Μηχανικός του ΕΜΠ, η οποία θα πραγματοποιηθεί την Πέμπτη 28 Μαρτίου 2019, ώρα 11:00π.μ. στην Αίθουσα Σεμιναρίων στο Υπόγειο των Εργαστηρίων του Τομέα Θερμότητας της Σ.Μ.Μ. του ΕΜΠ Πολυτεχνειούπολη Ζωγράφου. Το Θέμα της Διδακτορικής Διατριβής είναι:

**«Θερμοδυναμική Ανάλυση συστημάτων δέσμευσης διοξειδίου του άνθρακα»**  
Επισυνάπτεται περίληψη της παραπάνω Διδακτορικής Διατριβής

**Ο Κοσμήτορας της Σχολής**

**N. Μαρμαράς**  
**Καθηγητής Ε.Μ.Π**

## ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Το πεδίο έρευνας της Διδακτορικής Διατριβής είναι τα Συστήματα Δέσμευσης Διοξειδίου του Άνθρακα ή Carbon Capture Systems (CCS), με έμφαση στις εφαρμογές χημικής απορρόφησης και φυσικής προσρόφησης. Κύριος στόχος της έρευνας είναι η διερεύνηση των διαφόρων παραμέτρων λειτουργίας που επιδρούν στην απόδοση αυτών των διεργασιών με σκοπό την εξαγωγή συμπερασμάτων για τη βελτιστοποίηση της διαδικασίας. Η προσέγγιση των συστημάτων πραγματοποιείται τόσο μέσα από προσομοιώσεις και για τις δύο τεχνολογίες όσο και μέσω πειραματικής διερεύνησης για τη χημική απορρόφηση.

Η βιβλιογραφική ανασκόπηση περιγράφει τις διαθέσιμες τεχνολογίες δέσμευσης διοξειδίου του άνθρακα αλλά επικεντρώνεται κυρίως στη χημική απορρόφηση και τη φυσική προσρόφηση. Για τις δύο αυτές μεθόδους διερευνώνται οι σύγχρονες τεχνικές, οι κύριες προσεγγίσεις προσομοίωσης τους καθώς και αντιπροσωπευτικά στατικά και δυναμικά μοντέλα.

Στη συνέχεια, αναπτύσσεται στο λογισμικό Matlab® ένα στατικό μοντέλο ρυθμού αντίδρασης το οποίο προσομοιώνει τη χημική απορρόφηση και πραγματοποιείται επικύρωσή του για δύο υδατικά διαλύματα αλκανολαμινών, της Μονοαιθανολαμίνης (MEA) και της 2-Άμινο-2-μέθυλο-1-προπανόλης (AMP). Το μοντέλο προσομοιώνει τα δύο κύρια τμήματα της διάταξης, δηλαδή τον απορροφητή και τον αναγεννητή όπου πραγματοποιείται ανάκτηση του διαλύματος. Οι προβλέψεις του μοντέλου τόσο για τον απορροφητή όσο και για τον αναγεννητή επικυρώνονται μέσω σύγκρισης με πειραματικά δεδομένα από τη βιβλιογραφία παρουσιάζοντας ικανοποιητικές προβλέψεις των διαφόρων παραμέτρων. Η επικύρωση του μοντέλου ακολουθείται από παραμετρική ανάλυση η οποία ποσοτικοποιεί την επίδραση των διαφόρων παραμέτρων στην διαδικασία. Η μελέτη ευαισθησίας που διενεργείται δείχνει ότι η παροχή εισόδου του αερίου καθώς και η θερμοκρασία εισόδου του υγρού είναι οι κύριες παράμετροι που επηρεάζουν την απόδοση της δέσμευσης CO<sub>2</sub> και την απαιτούμενη ενέργεια αναγέννησης στον εκροφητή. Η σύγκριση μεταξύ των δύο διαλυμάτων που μελετήθηκαν επιβεβαιώνει την υπεροχή της MEA ως απορροφητικό μέσο έναντι της AMP.

Το ολοκληρωμένο σύστημα δέσμευσης με χημική απορρόφηση προσομοιώθηκε και στο εμπορικό λογισμικό Aspen Plus. Η διάταξη αποτελείται από δύο στήλες με πληρωτικό υλικό, τον απορροφητή και τον αναγεννητή, τον αναβραστήρα και τον εναλλάκτη θερμότητας. Το σύστημα μοντελοποιήθηκε για δύο περιπτώσεις διαλυμάτων αμινών, ένα υδατικό διάλυμα MEA και ένα διάλυμα του μείγματος MDEA/PZ. Το διάλυμα MDEA/PZ δεσμεύει το 99% του ρύπου από το καυσάεριο ενώ το διάλυμα MEA το 80%, για τις συγκεκριμένες συνθήκες. Για τα δύο συστήματα υπολογίστηκε ο ολικός εξεργειακός βαθμός απόδοσης θεωρώντας τη διάταξη ως ένα ολοκληρωμένο θερμοδυναμικό σύστημα. Η ολική εξεργειακή απόδοση βρέθηκε υψηλότερη για την περίπτωση του μείγματος MDEA/PZ. Υπολογίζοντας επιμέρους βαθμούς απόδοσης για τις στήλες της διάταξης, ο απορροφητής παρουσίασε χαμηλότερους βαθμούς απόδοσης και για τα δύο διαλύματα, σε σχέση με τον αναγεννητή ο οποίος παρουσιάζει ελαφρώς υψηλότερες τιμές. Συνολικά, το σύστημα παρουσιάζει υψηλότερους βαθμούς απόδοσης τόσο σε μακροσκοπικό επίπεδο όσο και σε επίπεδο επιμέρους τμημάτων. Επιπλέον, η ανάλυση έδειξε ότι η διάταξη MDEA/PZ απαιτεί 5% χαμηλότερη ενέργεια στον αναγεννητή σε σχέση με την περίπτωση της

MEA. Τέλος, πραγματοποιήθηκε προσομοίωση διάταξης υγροποίησης CO<sub>2</sub> με τη μέθοδο Linde-Hampson.

Στη συνέχεια μελετήθηκε η περίπτωση ταυτόχρονης δέσμευσης CO<sub>2</sub> και H<sub>2</sub>S από ρεύματα φυσικού αερίου με χρήση δύο τύπων διαλύματος, MEA και MDEA. Διενεργήθηκαν παραμετρικές προσομοιώσεις με σκοπό τη ανάλυση της επιλεκτικότητας των δύο αμινών στον ένα ρύπο έναντι του άλλου.

Επιπρόσθετα, προσομοιώθηκε η δυναμική συμπεριφορά του απορροφητή στις διατάξεις χημικής απορρόφησης. Η μαθηματική λύση του προβλήματος επιτεύχθηκε με την ανάπτυξη ενός κώδικα σε Matlab® με εφαρμογή της μεθόδου των πεπερασμένων διαφορών. Μελετήθηκαν διάφορα σενάρια διακύμανσης λειτουργίας με σκοπό την εξαγωγή συμπερασμάτων για τη δυναμική συμπεριφορά του συστήματος. Οι επιμέρους παράμετροι που μελετήθηκαν είναι οι παροχές εισόδου των δύο ρευστών, οι θερμοκρασίες τους, οι λόγοι παροχών και η συγκέντρωση του διαλύματος. Εξετάζοντας το μεταβατικό φαινόμενο, η απόκριση του συστήματος σε μεταβολές της παροχής αερίου είναι άμεση ενώ στην περίπτωση μεταβολών της υγρής παροχής το σύστημα χρειάζεται χρόνο περίπου δύο λεπτών μέχρι να σταθεροποιηθεί σε νέα σταθερή λειτουργία για την εξεταζόμενη περίπτωση.

Στη συνέχεια, αναπτύχθηκε υπολογιστικός κώδικας σε Matlab® που προσομοιώνει το στάδιο προσρόφησης της διαδικασίας δέσμευσης με εναλλαγή πίεσης. Το μοντέλο βασίζεται στα μοντέλα ισόθερων των Toth και Langmuir και στην Linear Driving Force (LDF) προσέγγιση. Από τα ισοζύγια μάζας και ενέργειας προέκυψε σετ διαφορικών εξισώσεων το οποίο επιλύθηκε με τη μέθοδο των πεπερασμένων διαφορών. Το δυναμικό μοντέλο επικυρώθηκε μέσω σύγκρισης με πειραματικές καμπύλες διάσπασης από τη βιβλιογραφία για τον ζεόλιθο 13X. Πραγματοποιήθηκαν παραμετρικές προσομοιώσεις με σκοπό τον προσδιορισμό της επίδρασης της παροχής και της θερμοκρασίας του αερίου στη διαδικασία της προσρόφησης και στις καμπύλες διάσπασης. Τα αποτελέσματα έδειξαν ότι η αύξηση της θερμοκρασίας προσρόφησης οδηγεί σε σημαντική μείωση του χρόνου διάσπασης λόγω της επιδείνωσης της προσροφητικής ικανότητας του υλικού. Το μοντέλο εφαρμόστηκε και για άλλα 3 υλικά: τον ζεόλιθο EMC1, τον ενεργοποιημένο άνθρακα και τη μεταλλική οργανική δομή Mg-MOF-74. Από την σύγκριση των υλικών προέκυψε ότι το Mg-MOF-74 επέδειξε σημαντικά μεγαλύτερους χρόνους διάσπασης σε σχέση με τα άλλα υλικά επιτυγχάνοντας πιο αποδοτική διεργασία.

Τέλος, η διαδικασία της χημικής απορρόφησης διερευνήθηκε και πειραματικά μέσω του σχεδιασμού και της κατασκευής δύο πειραματικών διατάξεων οι οποίες κατασκευάστηκαν στο Εργαστήριο με υλικά χαμηλού κόστους. Στόχος της πειραματικής διερεύνησης είναι η επιβεβαίωση των θεωρητικών παρατηρήσεων και η συλλογή πειραματικών δεδομένων που επικυρώνουν τα αναπτυχθέντα μοντέλα. Το μοντέλο επικυρώθηκε και με χρήση ίδιων πειραματικών δεδομένων και επιβεβαιώθηκαν πειραματικά παρατηρήσεις που προέκυψαν από τις προσομοιώσεις.