

Rezumatul tezei de abilitare

Integrated assessment of innovative CO₂ capture processes using dynamic modeling and techno-economic evaluation

Evaluarea integrată a proceselor inovative de captare a CO₂ utilizând modelarea dinamică și analiza tehnico-economică

În prezenta teză de abilitare sunt evidențiate principalele rezultate obținute în cadrul activităților mele de cercetare din ultimii 10 ani. Activitatea s-a desfășurat preponderant, în domeniul evaluării, prin modelare matematică, a proceselor de captare a dioxidului de carbon, integrate în sectorul energetic (producția de energie termică și electrică) și în alte procese industriale mari consumatoare de energie (de exemplu, industria chimică, industria petrolului și a gazelor, fabricarea cimentului, metalurgie etc.) și precum și în evaluarea tehnico-economică a acestora.

Schimbările climatice și încălzirea globală sunt cauzate de creșterea emisiilor de gaze cu efect de seră, în principal de dioxidul de carbon rezultat din activitatea umană. CO₂ provenit din arderea combustibililor fosili și a proceselor industriale, reprezintă aproximativ 76% din totalul emisiilor de gaze cu efect de seră. O soluție viabilă, pentru reducerea efectului de seră, este utilizarea unor tehnici avansate de captare, utilizare și stocare a dioxidului carbonului (Carbon Capture Utilization and Storage - CCUS).

Absorbția gaz-lichid poate fi considerată una dintre cele mai atractive și eficiente metode de captare a dioxidului de carbon din gazele de ardere produse de sectorul energetic sau de alte sectoare industriale mari consumatoare de energie. Mono-etanol-amina (MEA) este cel mai utilizat solvent pentru absorbția de CO₂, iar procesul de captarea a dioxidului de carbon utilizând coloane cu umplutură, este cea mai promițătoare tehnologie pentru implementarea la scară industrială. Utilizarea acestei metode pentru captarea dioxidului de carbon are unele dezavantaje cum ar fi: consum ridicat de energie termică pentru procesul de regenerare a solvenților (aproximativ 3 GJ/t CO₂), pierderi semnificative de solvent prin evaporare, degradarea în timp a solventului și coroziunea instalației. Alte sisteme de captare a CO₂, mai eficiente din punct de vedere energetic și având costuri de operare mai scăzute, sunt sistemele gaz-solid reactive ce utilizează sorbenți pe bază de calciu, cum ar fi oxidul de calciu. Această metodă, cunoscută sub

denumirea de ciclul chimic al calciului (Calcium Looping - CaL), presupune existența a două reactoare, interconectate, în strat fluidizat circulant. În primul reactor (carbonator) are loc captarea CO₂ prin reacția cu CaO, produsul obținut (CaCO₃) fiind ulterior transportat în cel de-al doilea reactor (calcinator) unde are loc regenerarea adsorbantului și eliberarea CO₂, în urma procesului de descompunere. Un avantaj al acestei metode de captare a CO₂, față de procesele de adsorbție gaz-lichid, o reprezintă temperatura ridicată de operare (500 - 650°C în carbonator și 800-900°C în calcinator) ceea ce sporește potențialul de recuperare a căldurii, cu o influență benefică asupra eficienței energetice globale a instalației. Un dezavantaj al tehnologiei de ciclu chimic al calciului este reprezentat de scăderea capacității de captare o dată cu creșterea numărului de cicluri de carbonatare-calcinare, ceea ce necesită înlocuirea periodică a unei cantități de sorbent deja utilizat cu unul proaspăt.

Aceste tehnologii de captare a dioxidului de carbon sunt mari consumatoare de energie, ceea ce duce la creșterea necesarului de combustibil pentru termocentralele pe bază de cărbune cu 25-40%. Pentru a crește eficiența termică a termocentralelor, cu avantaje inerente pentru separarea CO₂ în literatura de specialitate, s-a propus o nouă tehnologie, cunoscută sub denumirea de combustia în ciclu chimic (Chemical Looping Combustion - CLC). CLC implică utilizarea unui oxid metalic ca și purtător de oxigen (OC). Transportatorul de oxigen realizează un ciclu închis între două reactoare interconectate: reactorul de combustie în care are loc oxidarea combustibilului utilizând oxigenul din purtătorul de oxigen și reactorul de oxidare în care are loc regenerarea oxidului metalic utilizând oxigen din aer.

O parte importantă a activităților de cercetare a fost dedicată evaluării, prin modelare matematică și simulare, a capacității de absorbție a CO₂ într-o soluție apoasă de mono-etanol-amină (MEA), di-etanol-amină (DEA), metil-di-etanol-amină (MDEA) și amino-metil-propanol (AMP), în coloane cu umplutură. Astfel, au fost testate o serie de modele de corelație pentru transferul în masă și de calcul a zestrei de lichid din coloană, în vederea stabilirii capacității de predicție în cazul utilizării unor alcanolamine primare, secundare, terțiare și impeditate steric (MEA, DEA, MDEA și AMP). Totodată s-a urmărit evidențierea răspunsului dinamic al sistemului, în prezența unor perturbații, în cazul fiecărui utiliaj în parte, cât și în cazul interacțiunilor dintre acestea. Ca și indici de performanță a procesului au fost aleși doi parametri relevanți: rata de captare a CO₂ și eficiența energetică a procesului.

Intensificarea proceselor de transfer de masă are rolul de a reduce semnificativ costurile de capital și de operare ale instalației de captare a dioxidului de carbon. Astfel, s-a elaborat un model matematic complex cu ajutorul căruia s-a demonstrat posibilitatea de utilizare a stratului fluidizat trifazic, la captarea CO₂, în vederea purificării unei cantități mari de gaze de ardere provenite de la termocentrale. Pentru a evidenția eficiența captării de CO₂ în soluțiile apoase de MEA, atunci când se utilizează un sistem de fluidizare gaz-solid-lichid, s-a determinat fluxul molar de CO₂ transferat prin interfața gaz-lichid în cazul stratului fluidizat în comparație cu ratele de absorbție a CO₂ într-o coloană de absorbție cu umplutură. De asemenea, s-a studiat

potențialul de intensificare a procesului de absorbție a dioxidului de carbon, în cazul adăugării unei cantități de glicerină în soluțiile absorbante de hidroxid de sodiu și mono-etanolamină.

Pentru a evalua procesul de captare post-combustie a dioxidului de carbon utilizând ciclul chimic al calciului a fost dezvoltat și validat un model matematic dinamic al coloanelor în strat fluidizat, interconectate. Utilizând modelele dezvoltate a fost investigată modificarea capacității de captare a dioxidului de carbon cu numărul ciclurilor de carbonatare-calcinare. Totodată, s-a determinat rata de eliminare a CO₂ din gazele de ardere, în cazul unor perturbații de tip rampă, treaptă și sinusoidă asupra fluxului de intrare a gazelor pentru a evidenția răspunsul sistemului în cazul operării în regim de sarcină parțială.

De asemenea, în cadrul activităților de cercetare, a fost evaluat, prin modelare matematică dinamică, procesul de combustie în ciclul chimic al unei instalații de ardere a gazului de sinteza cu puterea instalată de 1 MWth. Ca și studiu de caz s-a considerat un sistem de două reactoare în strat fluidizat interconectate, ce utilizează oxidul de fier ca și purtător de oxigen. Fenomenele complexe care au loc în procesul de combustie în ciclul chimic a fost descrise cu ajutorul unui model hidrodinamic 1.5 D o curgere de ideala D și diferite mecanisme de transfer de căldură. Pe baza rezultatelor simulărilor, s-a prezis distribuția vitezei de curgere a gazului și a solidului în interiorul stratului fluidizat, distribuția compoziției gazelor, comportamentul purtătorului de oxigen și profilurile de temperatură din cele două reactoare ale sistemului (reactorul de combustie și cel de oxidare). Un accent deosebit este pus în diferite lucrări de specialitate asupra analizei indicatorilor de performanță tehnico-economici (de exemplu: eficiența energetică a instalațiilor de producere a energiei electrice prevăzute cu unități de captare CO₂, consumurile auxiliare specifice, pierderile de absorbat, costurile de capital și de operare etc.). Astfel s-a evaluat din punct de vedere tehnico-economic captarea CO₂ prin procesul de absorbție gaz-lichid într-o soluție apoasă de alanolamină sau/și prin ciclul chimic al oxidului de calciu, în cazul gazelor reziduale provenite de la termocentrale și din alte procese industriale cu consum ridicat de energie pentru a reduce emisiile de gaze cu efect de seră. Totodată, au fost evaluate opțiunile de captare a CO₂ pre și post-combustie pentru generarea de energie pe bază de combustie și gazeificare a combustibililor fosili cu scopul de a propune metode inovative, integrate termic de creștere a eficienței energetice generale a instalației.

Rezultatele obținute pentru toate cazurile investigate au fost publicate în reviste internaționale cu factor de impact ridicat (de exemplu Energy, International Journal of Greenhouse Gas Control, Applied Thermal Engineering, International Journal of Hydrogen Energy, Computers and Chemical Engineering Journal etc.) și au fost prezentate în cadrul unor conferințe de specialitate renumite în domeniul ingineriei chimice (European Symposium on Computer Aided Process Engineering, Clean Coal Technologies, International Conference on Greenhouse Gas Technologies etc.).