

## Δυναμική μοντελοποίηση και έλεγχος διεργασιών δέσμευσης CO<sub>2</sub> με διαλύτες αλλαγής φάσης

Παναγιώτης Καζεπίδης<sup>1,2</sup>, Αθανάσιος Ι. Παπαδόπουλος<sup>1\*</sup>, Παναγιώτης Σεφερλής<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Ινστιτούτων Χημικών Διεργασιών & Χημικών Πόρων (ΙΔΕΠ), ΕΚΕΤΑ, Θεσσαλονίκη, Ελλάδα

<sup>2</sup> Τμήμα Μηχανολόγων Μηχανικών, Α.Π.Θ., Θεσσαλονίκη, Ελλάδα

[\\*spapadopoulos@certh.gr](mailto:*spapadopoulos@certh.gr)

### ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Οι διεργασίες απορρόφησης/εκρόφησης που βασίζονται σε διαλύτες αποτελούν μία ώριμη τεχνολογία για τη δέσμευση CO<sub>2</sub> από απαέρια καύσης. Μία νέα τεχνολογία για αυτές τις διεργασίες είναι η χρήση διαλυτών αλλαγής φάσης (Phase-Change Solvents PCSs), οι οποίοι μειώνουν σημαντικά τις ενεργειακές απαιτήσεις αναγέννησης του διαλύτη και δίνουν τη δυνατότητα της ευρείας βιομηχανικής χρήσης τέτοιων συστημάτων. Τα χαρακτηριστικά και η συμπεριφορά των PCSs ερευνώνται συστηματικά και νέες μελέτες δημοσιεύονται συχνά τα τελευταία χρόνια<sup>[1]</sup>. Σήμερα, υπάρχει σημαντικό κενό στον έλεγχο αυτών των πολύπλοκων συστημάτων. Η ύπαρξη δύο υγρών φάσεων μπορεί να αυξήσει την πολυπλοκότητα της διεργασίας, αλλά προσφέρει πολλά πλεονεκτήματα στις ενεργειακές απαιτήσεις και νέες δυνατότητες ελέγχου στη δυναμική μοντελοποίηση.

Ο στόχος αυτής της εργασίας είναι να διερευνήσει και να χρησιμοποιήσει τις δυνατότητες ελέγχου των διεργασιών δέσμευσης CO<sub>2</sub> που βασίζονται σε διφασικούς διαλύτες. Ένα δυναμικό μοντέλο αναπτύσσεται με τη βοήθεια ενός υπάρχοντος μοντέλου Ισορροπίας Ατμών-Υγρού-Υγρού (Vapor-Liquid-Liquid VLLLE)<sup>[2]</sup> που βασίζεται στην τεχνική της Ορθογώνιας Ταξιοθεσίας σε Πεπερασμένα Στοιχεία (Orthogonal Collocation on Finite Elements OCFE). Το σύνθετο δυναμικό μοντέλο λαμβάνει υπόψη τόσο τη μοριακή όσο και την ενεργειακή συσσώρευση (holdup) στην υγρή φάση σε όλη τη διεργασία. Η χρήση ενός βέλτιστου προβλεπτικού ελεγκτή (Model Predictive Controller MPC) είναι μία προηγμένη μέθοδος για τον έλεγχο διεργασιών, ενώ ικανοποιεί και ένα σύνολο περιορισμών. Για το σκοπό αυτό, εφαρμόζεται ένας οικονομικός MPC σε μία διεργασία δέσμευσης CO<sub>2</sub> που χρησιμοποιεί ένα μίγμα PCS, το οποίο αποτελείται από Ν-κυκλοεξυ-1, 3-προπανοδιαμίνης (S<sub>1</sub>N) και Ν, Ν-διμεθυλο-κυκλοεξυλαμίνης (DMCA). Το διάγραμμα ροής της δυναμικής διεργασίας με το μίγμα S<sub>1</sub>N/DMCA σε σχέση με το VLLLE μοντέλο περιλαμβάνει την προσθήκη μίας δεξαμενής για τον έλεγχο της διαδικασίας, η οποία τοποθετείται πριν από την τροφοδοσία του ρεύματος ανακύκλωσης στη στήλη απορρόφησης. Ο διαχωριστής φάσης που αποτελεί μέρος και της VLLLE διεργασίας είναι η δεύτερη δεξαμενή της διαδικασίας. Για να υπάρχει μία ρεαλιστική προσέγγιση ελέγχου, ο MPC χρησιμοποιεί μεταβλητές ελέγχου που μπορούν να μετρηθούν σε οποιαδήποτε πραγματική βιομηχανική εφαρμογή. Πιο συγκεκριμένα, οι μετρούμενες μεταβλητές είναι η θερμοκρασία στην κορυφή της στήλης απογύμνωσης και η θερμοκρασία του πυθμένα της στήλης απορρόφησης. Ο MPC ελέγχει τη διεργασία αποτελεσματικά χειραγωγώντας τη λειτουργία του αναβραστήρα και τη ροή του ρεύματος ανακύκλωσης στη στήλη απορρόφησης. Συμπερασματικά, αυτή η εργασία καλύπτει μία ανεξερεύνητη περιοχή στις διεργασίες δέσμευσης CO<sub>2</sub> που βασίζονται σε PCS και ενισχύει τις δυνατότητες βιομηχανικής εφαρμογής τους.

**ΛΕΞΕΙΣ ΚΛΕΙΔΙΑ:** δέσμευση CO<sub>2</sub>, διαλύτες αλλαγής φάσης, MPC, βέλτιστος σχεδιασμός, βέλτιστο δυναμικό μοντέλο

**ΑΝΑΦΟΡΕΣ**

[1] Papadopoulos, A.I., Perdomo, F.A., Tzirakis, F., Shavaliyeva, G., Tsivintzelis, I., Kazepidis, P., Nessi, E., Papadokonstantakis, S., Seferlis, P., Galindo, A., Jackson, G., Adjiman, C.S., (2020): Molecular engineering of sustainable phase-change solvents: from digital design to scaling-up for CO<sub>2</sub> capture, *Chem. Eng. J.*, 127624, <http://dx.doi.org/10.1016/j.cej.2020.127624>.

[2] Kazepidis, P., Papadopoulos, A.I., Tzirakis, F., Seferlis P., (2021): Optimum design of industrial post-combustion CO<sub>2</sub> capture processes using phase-change solvents, *Chem. Eng. Res. Des.*, 75 (209-222), <https://doi.org/10.1016/j.cherd.2021.08.036>