

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРИРОДООХОРОННИХ ПРОЦЕСІВ

МОДЕЛЮВАННЯ АБСОРБЦІЙНОГО ОЧИЩЕННЯ ПРИРОДНОГО ГАЗУ

Лопаносов І. Ю., Бугаєва Л. М., Безносик Ю. О.

МОДЕЛИРОВАНИЕ АБСОРБЦИОННОЙ ОЧИСТКИ ПРИРОДНОГО ГАЗА

Лопаносов И. Ю., Бугаева Л. Н., Безносик Ю. А.

SIMULATION OF THE ABSORPTION PURIFICATION OF NATURAL GAS

Loranosov I., Bugaeva L., Beznosyk Yu.

Національний технічний університет України
«Київський політехнічний інститут імені Ігоря Сікорського»
Київ, Україна
ilyaxa51@gmail.com

В статті розглянуто застосування програми Hysys для комп'ютерного розрахунку процесу очищення природного газу від сірководню та оксиду вуглецю, а також моделювання моноетаноламінового абсорбера.

Ключові слова: комп'ютерне моделювання, математичне моделювання, Hysys, абсорбція, двокомпонентна хемосорбція

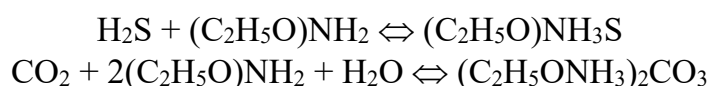
В статье рассмотрено использование программ Hysys для компьютерного расчета процесса очистки природного газа от сероводорода и оксида углерода, а также моделирование моноэтанолламинового абсорбера.

Ключевые слова: компьютерное моделирование, математическое моделирование, Hysys, абсорбция, двухкомпонентная хемосорбция

The article describes the using Hysys software for computer calculation of the purification process of natural gas from hydrogen sulfide and carbon monoxide, as well as the simulation of a monoethanolamine absorber

Keywords: simulation, mathematical modeling, Hysys, absorption, two-component chemisorption

Технологічні гази після риформінгу природних газів і парової конверсії використовуються для синтезу аміаку. Але азотоводнева суміш містить сполуки (CO₂, H₂S та інші) які діють на каталізатор як отрута, знижуючи їх активність. Одним з сучасних методів очищення природного газу від CO₂ і H₂S є абсорбція розчином моноетаноламіну [1,2]. Хімічна абсорбція описується наступними реакціями:



Технологічна схеми показана на рис. 1.

Газ подається в нижню частину колони-абсорбера (MEA CONTACTOR). Піднімаючись вгору по колоні, газ контактує з розчином аміну. В якості контактних пристроїв застосовуються або клапанні тарілки, або неструктурована насадка. Вибір

КОМП'ЮТЕРНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРИРОДООХОРОННИХ ПРОЦЕСІВ

типу контактної пристрою визначається для кожного конкретного випадку окремо. Кількість теоретичних ступенів контакту для абсорбера – 20. Пройшовши контактну частину абсорбера, газ надходить в секцію краплевловлювача. Призначення даної секції – максимально можливе зниження величини виносу розчину аміну з потоку очищеної сировини. Далі, очищений газ відводиться за межі установки. Колонна-абсорбер зазвичай обладнана датчиками температури для відстеження зміни температури по висоті апарату.

Розчин аміну за сигналом автоматичного контролера рівня відводиться з нижньої частини колони за допомогою автоматичного клапана. При зниженні тиску з розчину аміну виділяються фракції легкокиплячих вуглеводнів. Поділ отриманої суміші відбувається в сепараторі (FLASH TK). Відділений в процесі сепарації газ відводиться з верхньої частини апарату в факельну систему спалювання «кислих» газів або в блок термічної деструкції.

Далі, очищений від механічних домішок розчин насиченого аміну надходить в теплообмінник (E-100), де відбувається нагрів за рахунок теплообміну з потоком регенованого аміну з ребойлера (RBLRQ).

З теплообмінника (E-100) розчин аміну подається в колону-десорбер (REGENERATOR). Підведення тепла, необхідного для процесу регенерації, відбувається в ребойлері (RBLRQ). Джерелом тепла може бути як прямий підігрівач (газовий паливник, термоелектричний нагрівач), так і непрямий (пар або гаряче масло). Апарат повітряного охолодження рефлюксу (CONDQ) забезпечує часткову конденсацію парів з колони-десорбера, формуючи тим самим потік рефлюксу.

Регенований амін відводиться з переливної секції ребойлера (RBLRQ) і подається в теплообмінник (E-100) для нагріву потоку насиченого аміну, після чого підпірним насосом подається в секцію апарату повітряного охолодження аміну (E-101).

Охолоджений регенований амін подається в колону-абсорбер нагнітальним насосом (P-100).

Розрахунок технологічної схеми проводився за допомогою програми Hysys (рис.1).

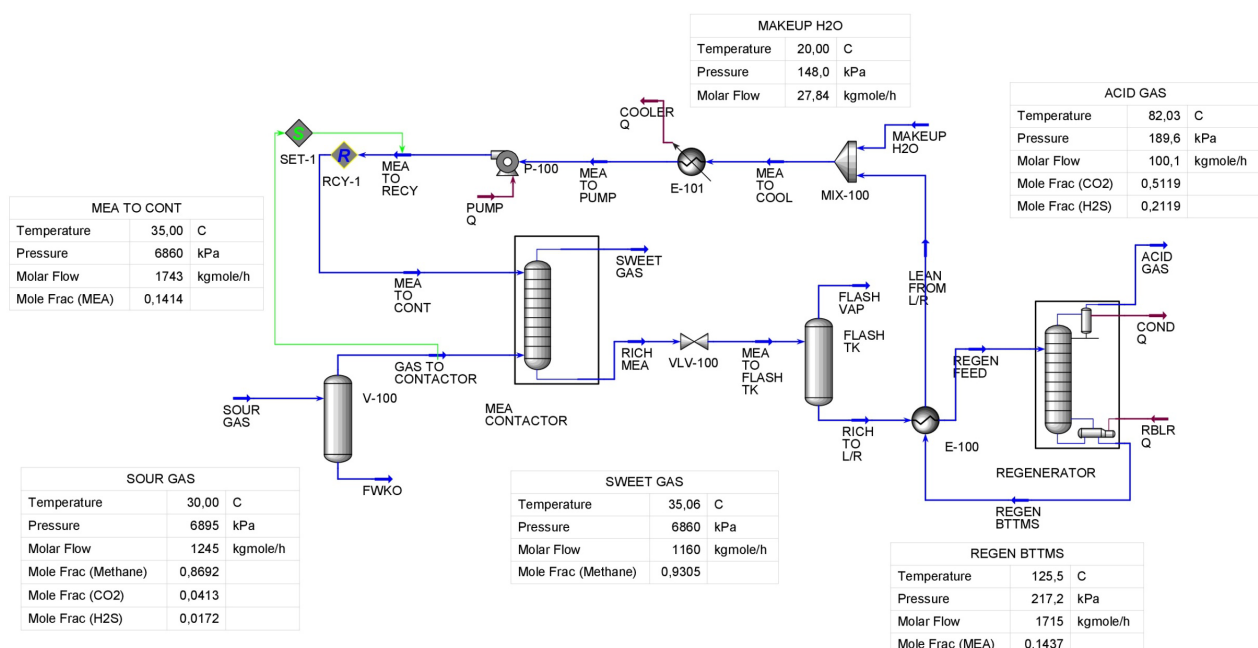
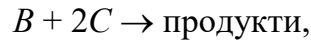
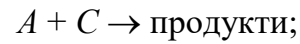


Рис.1. Розрахунок технологічної схеми за допомогою програми Hysys

Результати розрахунку технологічної схеми очищення природного газу від CO_2 і H_2S наведені на рис. 2-5.

Переваги очищення газу моноетаноламіном полягають в низькій вартості поглинача, стабільності процесу абсорбції, високій реакційній здатності і простоті регенерації поглинальних розчинів.

Процес поглинання CO_2 і H_2S розчином моноетаноламіну спрощено можна представити у вигляді:



де A, B, C – відповідають $\text{H}_2\text{S}, \text{CO}_2, (\text{C}_2\text{H}_5\text{O})\text{NH}_2$.

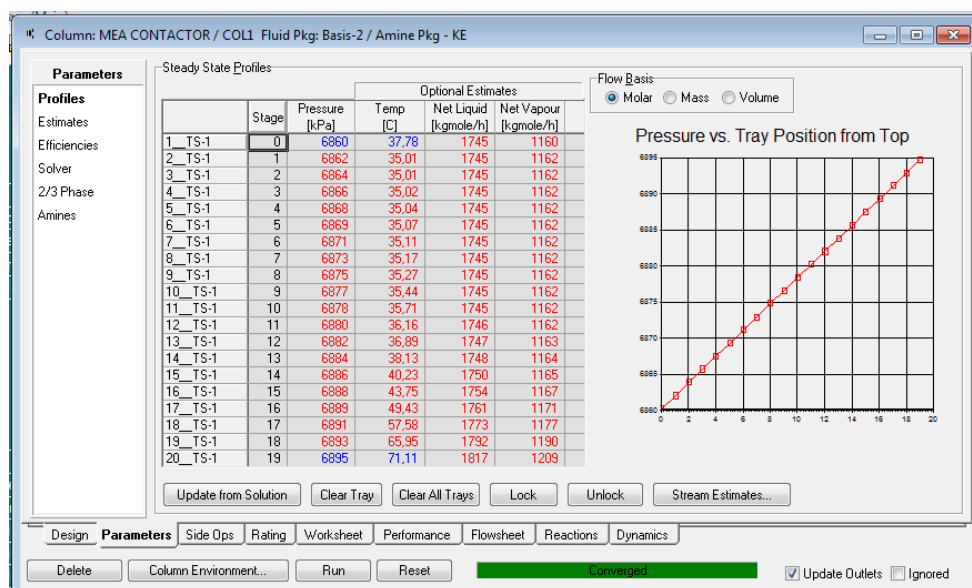
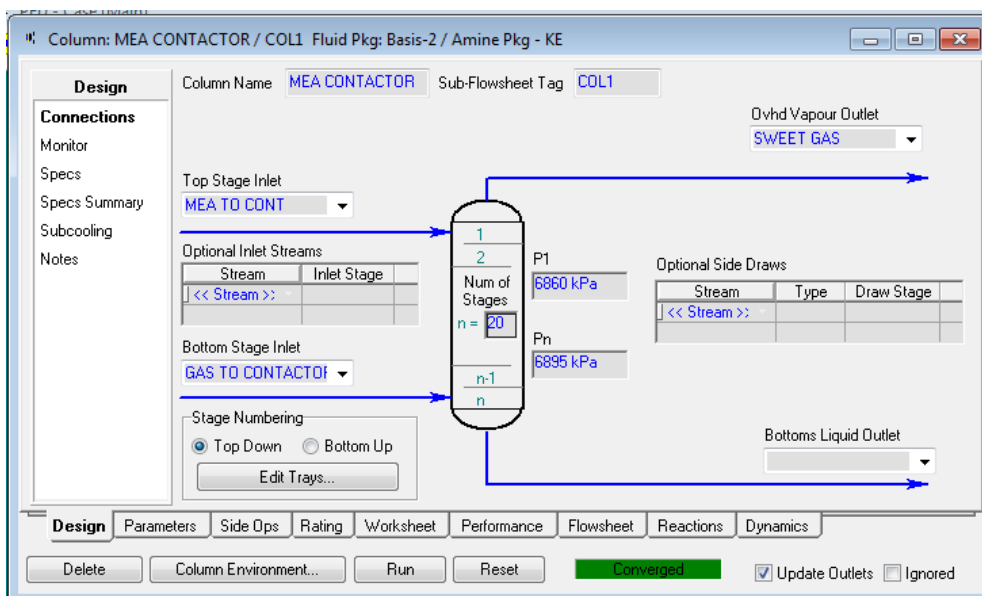


Рис. 2. Налаштування абсорбера

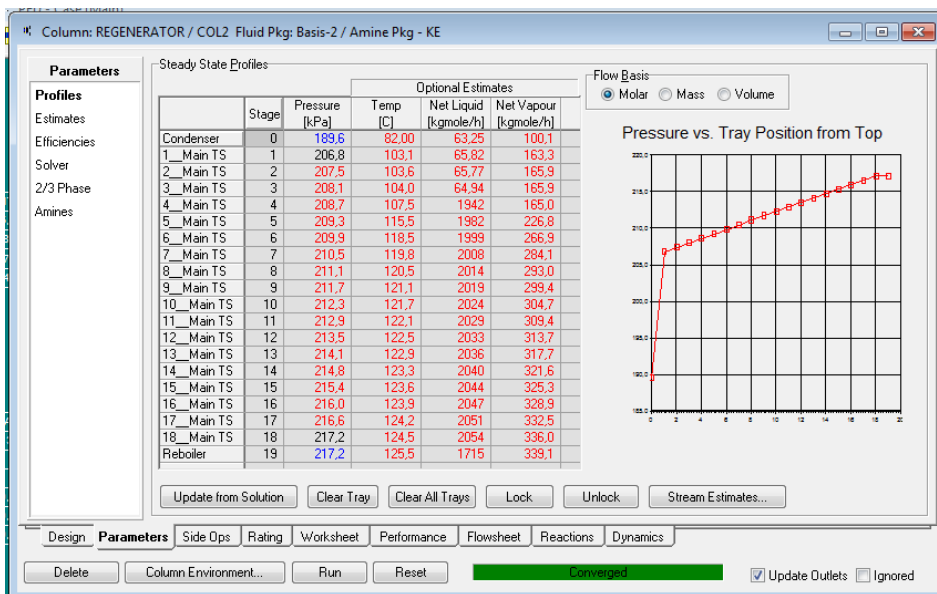
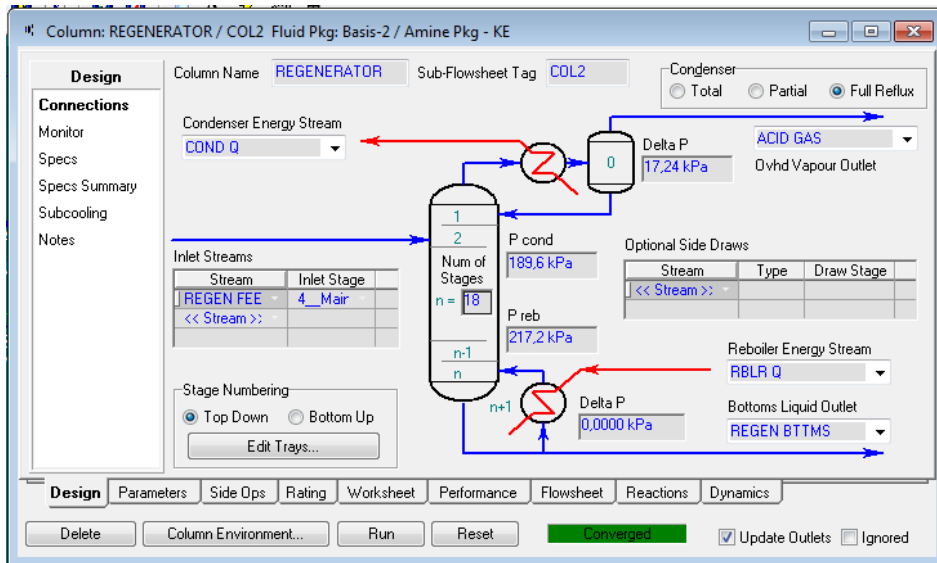


Рис. 3. Налаштування регенератора

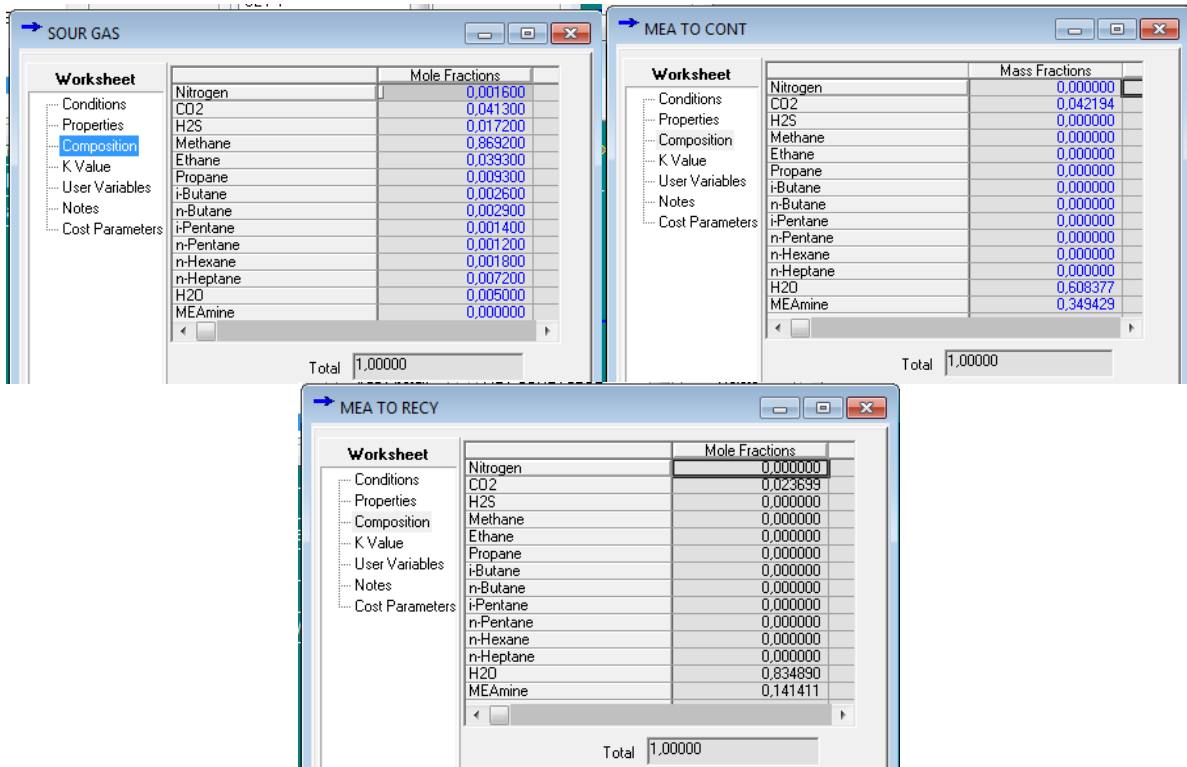


Рис. 4. Вхідні потоки

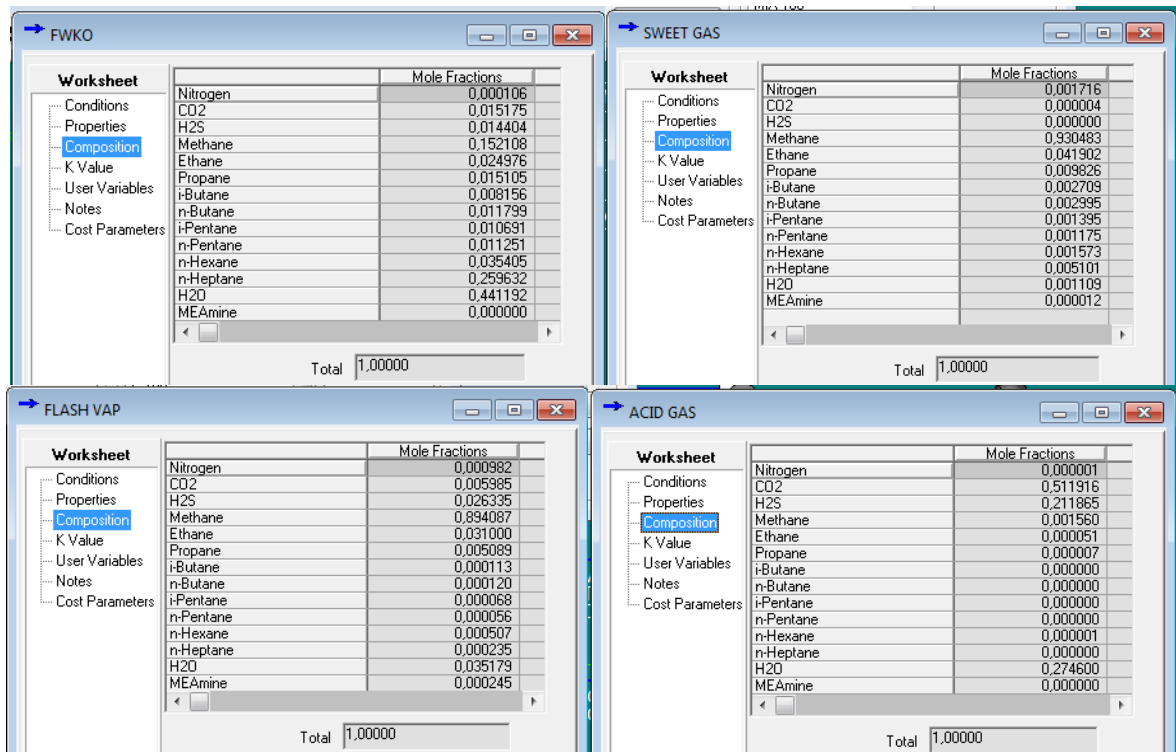


Рис.5. Вихідні потоки

Механізм даного процесу можна представити може бути описаний кінетичною математичною моделлю двокомпонентної хемосорбції на основі плівкової моделі []. Система кінетичних рівнянь повинна бути доповнена системою диференціальних рівнянь покомпонентного матеріального балансу. З системи кінетичних рівнянь:

$$D_A \frac{d^2 A}{dy^2} - r_A AB = 0; \quad (1)$$

$$D_C \frac{d^2 C}{dy^2} - r_C CB = 0; \quad (2)$$

$$D_B \frac{d^2 B}{dy^2} - n_A r_A AB - n_C r_C CB = 0; \quad (3)$$

з граничними умовами:

$$y = 0, A = A_p, C = C_p, B = B_p, \left(\frac{dB}{dy} \right)_{y=0} = 0; \quad (4)$$

$$y = y_{жA}, A = C = 0, B = B_{ж}; \quad (5)$$

в яких D – коефіцієнт дифузії, C – концентрація, r – константа швидкості хімічної реакції, y – координата межі розділу фаз, отримують значення коефіцієнту прискорення хемосорбції.

Для знаходження аналітичного рішення системи рівнянь (1) – (3) приймаємо, що концентрація хемосорбенту в зоні реакції товщиною $y_{реакц}$ постійна і дорівнює концентрації на межі фаз B_p , а концентрація абсорбуємого компонента змінюється лінійно:

$$B_p = B_{ж} \left[1 - \frac{\gamma_A - 1}{M_A \frac{D_B}{D_A}} - \frac{\Phi - 1}{M_C \frac{D_B}{D_C}} \right]; \quad (6)$$

де стехіометричні комплекси дорівнюють відповідно:

$$M_A = \frac{B_{ж}}{n_A \cdot A_p} \text{ та } M_C = \frac{B_{ж}}{n_C \cdot C_p}.$$

Параметр $\Phi = \frac{\beta_{жA} \cdot D_C}{\beta_{жC} \cdot D_A}$ може бути розраховано після експериментального визначення коефіцієнтів $\beta_{жA}$ та $\beta_{жC}$.

Інтегруючи рівняння (1) - (3) при умові $B = B_p = const$ і граничних умовах (4) та (5), отримаємо заключний вираз для розрахунку коефіцієнтів прискорення γ_A і γ_C в довільній області хемосорбції:

$$\gamma_A = \frac{W_A'}{W_A} = \frac{A_p \cdot \beta_A \frac{R_A \sqrt{B_p}}{th(R_A \sqrt{B_p})}}{A_p \cdot \beta_A} = \frac{R_A \sqrt{B_p}}{th(R_A \sqrt{B_p})}; \quad (7)$$

$$\gamma_C = \frac{W_C'}{W_C} = \frac{R_C \sqrt{B_p}}{th(R_C \sqrt{B_p})}; \quad (8)$$

де

$$R_A = \frac{\sqrt{r_A \cdot D_A \cdot B_{жс}}}{\beta_A} - \text{кінетичний параметр,}$$

$$\bar{B}_p = 1 - \frac{\gamma_A - 1}{M_A \frac{D_B}{D_A}} - \frac{\frac{\gamma_C}{\Phi} - 1}{M_C \frac{D_B}{D_C}}.$$

Для отримання чисельного рішення математичної моделі процесу двохкомпонентної хемосорбції була застосована комбінація методів ітерації та прогонки (рис.1). Аналіз результатів показав, що значення γ_A і γ_C , розраховані чисельними і аналітичними методами в діапазоні $M_A \theta_A = 10 \div 1000$ (при $R_A = 10$, $R_C = M_C \theta_C = 5$), практично співпадають. При цьому величина $\bar{B}_p = B_p / B_{жс} \geq 0,25$. При подальшому підвищенні концентрації компонента A в газі, тобто зі зменшенням $M_A \theta_A$ глибина вичерпування хемосорбенту на поверхні розподілу збільшується ($\bar{B}_p \rightarrow 0$), і аналітичний розрахунок стає менш точним.

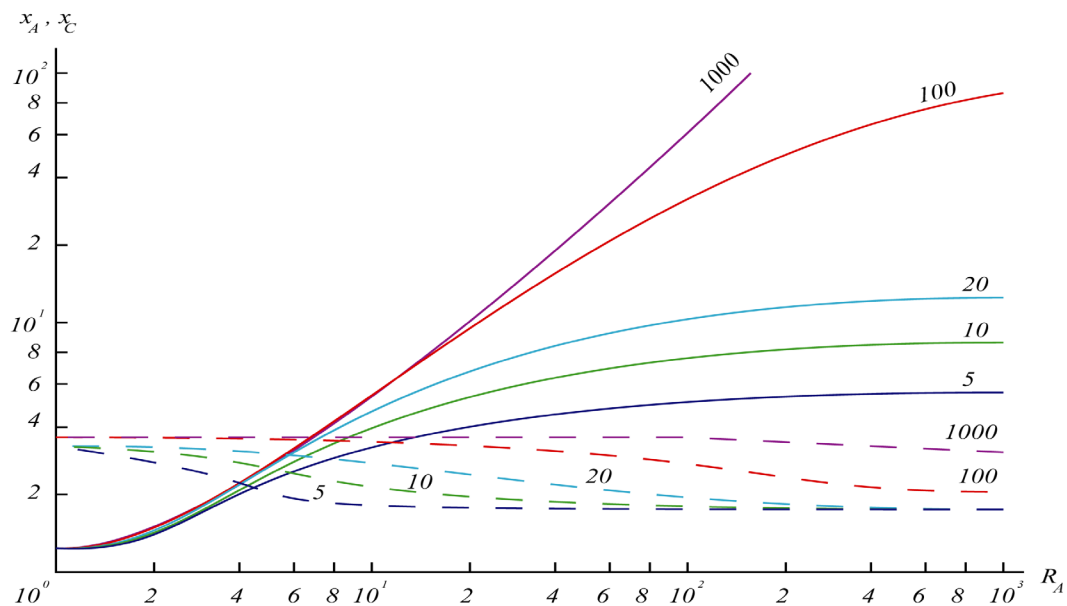


Рис. 1. Чисельне рішення системи рівнянь (1) – (3)
 ($R_C = 5$; $M_C \theta_C = 5$); $x_A = \gamma_A$ - суцільні лінії,
 $x_C = \gamma_C$ - пунктирні; цифри на лініях - $M_A \theta_A$

Зі збільшенням швидкості реакції одного з газів з хемосорбентом прийнятна точність досягається лише при низькій концентрації швидко реагує компонента газу. Наприклад, в діапазоні значень $M_A \theta_A = 10 \div 10000$ (при $R_A = 315$ і $R_C = M_C \theta_C = 5$) помилка аналітичного розрахунку до 10 % досягається при значеннях $M_A \theta_A \geq 1000$, чому відповідає $\bar{B}_p \geq 0,25$. При порівняльних значеннях величин $M_A \theta_A$ і $M_C \theta_C$ досягається точність розрахунку величин γ_A і γ_C обома методами забезпечується в випадку, коли і значення R_A і R_C також порівняльні між собою. Наприклад, в

діапазоні зміни відношення $R_A/R_C = 1 \div 60$ (при $M_A\theta_C = 10$; $R_C = M_C\theta_C = 5$) величині γ_A і γ_C , знайдені обома методами, розрізняються не більш ніж на 10% лише при $R_A/R_C \leq 2$, чому відповідає та сама величина $\bar{B}_p \geq 0,25$.

Проаналізувавши отримані результати, можна заключити, що рівняння (7-8) справедливі, коли порівняні швидкості реакцій або коли швидкості реакцій непорівнянні, але швидко реагуючого компонента в газі набагато більше, ніж повільно реагуючого. Цим умовам відповідає область значень безрозмірної концентрації хемосорбента $1 > \bar{B}_p \geq 0,25$, в якій різка зміна концентрацій A і C поблизу поверхні розподілу виникає при $B=B_p=const$. Таким чином, для вибору способу розрахунку коефіцієнтів прискорення масопередачі попередньому необхідно оцінити значення \bar{B}_p , для чого можна скористатися формулою (6).

Отримані вирази для коефіцієнтів прискорення масопередачі можна використовувати в подальших розрахунках з метою моделювання технологічного процесу і знаходження решти параметрів, характеризуючи даний процес. Знайдені коефіцієнти прискорення порівняні зі значеннями, розрахованими чисельним методом і таким чином, отримані області можливого застосування даних формул. Також розроблені алгоритми для чисельного та аналітичного методів рішення. В результаті рішення математичної моделі отримують профілі концентрацій компонентів по висоті колони, оптимальну витрату розчину моноетаноламіну. Аналіз отриманих значень дозволяє рекомендувати оптимальні витрати абсорбенту для повного знешкодження CO_2 і H_2S розчином моноетаноламіну.

ВИСНОВКИ

Використання математичної моделі процесу хемосорбції двох газів дозволяє проводити розрахунки аналогічних колон як на стадії проектування, так і на стадії дослідження промислових процесів. Особливістю розробленої математичної моделі є відсутність ітераційних процедур при розрахунку. Отримані результати можливо використовувати для розрахунку і оптимізації діючих колон знешкодження газових викидів в хлорорганічних виробництвах.

ЛІТЕРАТУРА

1. Bugaeva, L. N., Beznosik Yu. A., Statjukha G. A., Kvitka A. A. An application of expert system to choice, simulation and development of gases purification processes. *J. Computers Chem. Engng*, 1996. Vol. 20, Suppl. P. S401 – S402.
2. Аксельрод Ю. В. Газожидкостные хемосорбционные процессы. М.: Химия, 1989. 240 с.
3. Безносик Ю. А., Бойко Т. В. Абсорбция хлора и хлористого водорода из отходящих газов в производстве хлорметанов. *Химическое машиностроение: Респ. межвед. науч.-техн. сб.* К.: Техніка, 1981. Вып.34. С. 77 – 82.
4. Безносик, Ю. А., Бондарь А. Г., Статюха Г. А. Математическое моделирование процесса нейтрализации в производстве хлорметанов. *Химическая технология*, 1980. № 1. С. 48 – 50.
5. Безносик Ю. О. Математичне моделювання процесу хемосорбції хлорорганічних виробництв. *Технологический аудит и резервы производства*, 2014. № 3/5(17). С.28–30.