



CHALMERS

Modellering av en bubbelkolonn för avskiljning av koldioxid via reaktion med kalciumhydroxid

Modelling of a bubble column for separation of carbon dioxide by reaction with calcium hydroxide.

Examensarbete inom högskoleingenjörsprogrammet Kemiteknik

Jonathan Barclay & Isac Östman

Examinator: Diana Bernin

INSTITUTIONEN FÖR Kemi och Kemiteknik

CHALMERS TEKNISKA HÖGSKOLA

Göteborg, Sverige 2021

www.chalmers.se

Förord

Detta examensarbete har utförts som avslutning på vår tre år långa höskoleingenjörsutbildning inom Kemiteknik på Chalmers Tekniska Högskola.

Vi vill ge ett stort tack till vår handledare Patric Kvist för det akademiska stöd och vägledning han har gett under arbetets gång.

Vi vill även tacka Wolf-Dieter Deckwer som har författat den fantastiska boken “Bubble Column Reactors”.

Sammanfattning

Carbon Capture Utilization and Storage eller CCUS för kort är en kemisk metod som används vid behandling av koldioxid, för att minska utsläpp i luften. CCUS är den generella metoden där ett flertal olika metoder tillkommit. En av de kemiska apparaterna som används är Bubbelkolonnen. Dess funktion är i helhet att omvandla koldioxid till karbonater. Detta sker genom att koldioxid bubblas genom en vätskeblandning innehållande en motjon, reaktionen som sker resulterar i att en karbonat faller ut.

Rapporten går igenom viktiga parametrar som krävs vid modellering av en bubbelkolonn, samt viktiga egenskaper för gas- och vätskefasen. Genom att ta fram viktiga parametrar så har teoretiska försök gjorts för olika typer av bubbelkolonnreaktorer. Därefter har beräkningar på modellerna gjorts där främst reaktorns kapacitet, samt konverteringsgraden har beräknats. Slutligen gjordes en känslighetsanalys där två parametrar mättes mot konverteringsgraden. Parametrarna är höjden på kolonnen samt medelhastigheten för gasflödet.

Vad som då kunde noteras var att en ökad höjd för samtliga modeller kommer resultera i en högre konverteringsgrad. Även en högre konverteringsgrad var resultatet av lägre medelhastighet för två av modellerna. Den sista modellen som tillämpar axiell spridning fick däremot en högre konverteringsgrad av högre medelhastighet.

Summary

Carbon Capture Utilization and Storage or CCUS for short is a chemical method used in the treatment of carbon dioxide, to reduce emissions into the air. CCUS is the general method where a number of different methods exist. One of the chemical devices used is the Bubble Column. Its function as a whole is to convert carbon dioxide into carbonates. This is done by bubbling carbon dioxide through a liquid mixture containing a counterion, the reaction that occurs results in a carbonate precipitating.

The report reviews key parameters required when modelling a bubble column, as well as key properties of the gas and liquid phase. By developing important parameters, theoretical experiments have been carried out for different types of bubble column reactors. Since then, calculations have been made on the models where mainly the reactor's capacity, as well as the conversion rate have been calculated. Finally, a sensitivity analysis was carried out in which two parameters were measured against the conversion rate. The parameters are the height of the column as well as the average speed of the gas flow.

What was then noted was that an increased height for all models will result in a higher conversion rate. Even a higher conversion rate was the result of lower average speed for two of the models. On the other hand, the last model applying axial dispersion had a higher conversion rate of higher average speed.

1 Inledning	9
1.1 Bakgrund	9
1.2 Syfte	10
1.3 Avgränsningar	10
1.4 Precisering av frågeställningen	10
1.5 Rapportens disposition	10
2 Teori och Metod	11
2.1 Bubbelkolonn	12
2.1.1 Modifierade bubbelkolonner	12
2.1.2 Spargers	12
2.2 Bubbelegenskaper	12
2.2.1 Bubbeldiameter	13
2.2.2 Bubbelhastighet	13
2.2.3 Gas och liquid Hold-up	14
2.2.4 Kontaktyta	14
2.2.5 Kontaktytans area	15
2.3 Reaktionen	15
2.3.1 Individuella reaktioner	15
2.4 Reaktionskinetik	17
2.4.1 Kinetisk ordning	17
2.4.2 Reaktionshastighetskonstanten	17
2.4.3 Gasens Löslighet	18
2.5 Massöverföring	18
2.5.2 Massöverföringskoefficienten	19
2.5.3 Diffusionskoefficient	20
2.5.4 Flödes hastighet	20
2.6.3 Modell 1.3	23
3 Resultat	25
3.1 Reaktordimensioner	25
3.2 Bubbelegenskaper	26
3.2.1 Gas Hold-up	26
3.3 Masstransport	26
3.3.1 Massöverföringskoefficient	26
3.3.3 Flödes hastighet	27
3.3.4 Reaktionshastighetskonstant	27
3.4 Modeller för bubbelkolonn reaktorer	28
3.4.1 Modell 1.1	28
3.4.2 Modell 1.2	28
3.4.3 Modell 1.3	29
3.4.3 Modell variation med avseende på höjd och medelhastighet	29
4 Slutsats	33
5 Bilaga	34

Nomenklatur

Ord och begrepp

ADM	Axial dispersion model, partial mixing
CCUS	Carbon capture utilization and storage
CCU	Carbon capture and utilization
CCS	Carbon capture and storage
CSTR	Continuous Stirred Tank Reactor, perfect mixing
MRI	Magnetresonanstomografi
PFM	Plug Flow Model, no mixing
Pitch	Kvoten för avstånd mellan hålen och hålens diameter
Weeping velocity	Den minsta hastighet för att ingen vätska ska rinna ut genom hålen i spargern

Variabler och konstanter

$\Delta H_{298 K}^{\circ}$	Entalpi vid 298 K
A	Area [m^2]
a	Kontaktyta [m^2]
Bo_G	Bodens tiens nummer
c_{AL}	Koncentrationen som går ut ur systemet [mol/l]
c_{AL}^*	Koncentrationen som maximalt kan lösas upp [mol/l]
c_{AL_0}	Koncentrationen i början [mol/l]
c	Koncentration [mol/l]
D_A	Diffusionskoefficient [m^2/s]
D	Massdiffusion för vätska [m^2/s]
d_b	Bubbeldiameter [m]
d_{θ}	Gasfördelarhålets diameter [m]
E_a	Aktiveringsenergi
E_G	Spridningskoefficient
ε_G	Gas Hold-up
ε_L	Liquid Hold-up
G_r	Grashofs tal
g	Gravitationskonstanten [m/s]
H_L	Vätskans höjd i kolonnen [m]
H	Henrys konstant [$m^3 \cdot atm/kmol$]
I	Jonstyrkan [mol/kg]
j	Massflöde [kg/s]
k	Reaktionshastighet [m/s]
k_L	Massöverföringskoefficient [m/s]
$k_L a$	Volumetric material transfer number [$/s$]
K_{sp}	Löslighet [g/l]
L_B	Vätskenivån med gas [m]
L_R	Vätskenivån utan gas [m]

M	Molmassa [g/mol]
m	massa [g]
n	Antal hål [st]
p	Koncentrationen på gasens sida [mol/l]
ρ_G	Densitet för gas [kg/m^3]
ρ_L	Densitet för vätska [kg/m^3]
Q	Parameter specifik för ekvation
q	Quench
R	Allmänna gaskonstant [$J/K \cdot mol$]
r	Reaktionskinetik
$R_A a$	Specifika reaktorkapaciteten [$mol/m^3 s$]
Sc	Schmidts tal
Sh	Sherwoods tal
St	Stantons tal
S	Tvärsnittsarean på bubbelkolonnen [m^2]
T	Temperatur [K]
t	Spargerns tjocklek [m]
U	Konverteringsgrad [%]
u_G	Gastillstånd [m/s]
u_B^*	Gashastighet [m/s]
v_θ	Vätskeflöde [m/s]
V_c	Weeping velocity [m/s]
v	Hastighet [m/s]
V^\bullet	Flödes hastigheten [m^3/s]
V_h^\bullet	Flödes hastighet för spargerhål [m^3/s]
V_R	Volym över hela reaktorn [m^3]
μ_L^2	Viskositet för vätska [$Pa \cdot s$]
ΔX	Avstånd mellan hålen i spargern [m]
Z	Laddning [C]
σ_L	Ytspänning för vätska [N/m]

Kemiska formler

Ca^{2+}	Kalciumjon
$Ca(OH)_2$	Kalciumhydroxid
$CaCO_3$	Kalciumkarbonat
CH_4	Metan
CO	Kolmonoxid
CO_2	Koldioxid
CO_3^{2-}	Karbonatjon
H_2	Vätgas
H_2CO_3	Kolsyra
H_2O	Vatten
HCO_3^-	Vätekarbonatjon
Mg^{2+}	Magnesiumjon
N_2	Kvävgas
Na_2CO_3	Natriumkarbonat
$NaOH$	Natriumhydroxid
OH^-	Hydroxidjon

1 Inledning

1.1 Bakgrund

I dagens samhälle blir de allmänna miljöfrågorna större och viktigare, speciellt i och med att den globala uppvärmningen blivit en världsomfattande fråga. Detta lockar framtidens teknik för att inrikta sig på utsläpp, utnyttjande och lagring av koldioxid. Detta har givit carbon capture utilization and storage, eller CCUS för kort, stor uppmärksamhet. CCUS kommer visa hur omvandling och koldioxidinfångning ska utföras och detta kommer sannolikt bli ett essentiellt tillvägagångssätt för att minska jordens koldioxidutsläpp och optimera strukturen för energiförbrukningen i framtiden.

I Sverige delas utsläppen upp i olika kategorier, territoriella utsläpp delas upp i utsläpp som omfattar EUs system för handel med utsläppsrätter, övriga utsläpp samt utsläpp och upptag inom markanvändningssektorn. Dessutom finns en kategori som sker utanför handeln, som innefattar inrikes transporter, jordbruk, avfallshantering, arbetsmaskiner, produktanvändning, hushållsvärming samt utsläpp från industrin(1). De svenska klimatmålen innefattar ett långsiktigt klimatmål inom utsläpp som omfattas av att nettoutsläppen måste vara noll till 2045. Detta innebär att utsläppen inom Sveriges gränser 2045 måste vara minst 85% lägre än 1990 och de återstående utsläppen kan helt eller delvis täckas av kompletterande åtgärder. Enligt den klimatpolitiska ramen är målet att minska utsläppen från den icke-handelssektorn med 63% fram till 2030 och 75% till 2040 (jämfört med utsläppen 1990)(1). För att uppnå dessa milstolpar kan kompletterande åtgärder motsvarande 8 procentenheter respektive 2 procentenheter användas. Kompletterande åtgärder inkluderar absorptionen av koldioxid i skog och mark som ett resultat av ytterligare åtgärder, utsläppsminskningar åtgärder genomförda utanför Sveriges gränser, och fångst och lagring av koldioxid genom förbränning av biodrivmedel så kallad biokolavskiljning och -lagring (CCS)(1).

Carbon capture utilization, eller CCU för kort, är det generella begreppet för koldioxiduppfångning med mål att återvinna koldioxiden för ytterligare användning. Metoden används inom områden som härdning av koldioxidbetong, återanvändning av koldioxid och polymerproduktion(2). Vid användning av bubbelkolonn i uppfångning av koldioxid bubblar man CO₂ genom en basisk vattenlösning. Detta då man vill binda koldioxiden till en motjon i vattenlösningen för att bilda karbonater, denna teknik kallas Carbon mineralization. Detta då karbonaten som utvinns har ett värde, och ett användningsområde. I nuläget är processen ännu inte ekonomisk lönsam för företag, då kostnaden för koldioxidinfångningen, reagenter och transport är dyrare än produkten som utvinns. Dock finns potential i mineralisering av koldioxid till karbonater som visats genom uppstart av bland annat en pilotanläggning i Korea som har en kapacitet på 10 ton CO₂ per dag(2).

Carbon Capture and storage slutmål är till skillnad från Carbon capture utilization att koldioxiden ska geologisk lagras, och inte användas till något. Processen går till att man istället avskiljer koldioxiden och lagrar den, oftast genom att geologiskt lagra den i marken. I denna process ser man inget nyttjande av slutprodukten. Problemet med processen är då att den inte är lönsam för företag att göra, då kostnaden för processen är hög samt att slutprodukten inte har något värde. Utöver det tillkommer höga transportkostnader då koldioxidenkarbonaten måste fraktas till en lämplig plats för lagring.

På grund av dessa aspekter har länder, framförallt Kina forskat och utvecklat CCUS metoder för att få ett mer lönsamt resultat vid processen. De har byggt upp en så kallad färdplan till hur de ska gå tillväga för att förbättra dessa metod. Denna plan beskriver att man kan bekämpa klimatförändringar och underlätta socioekonomisk utveckling genom att tillhandahålla tekniskt genomförbara och ekonomiska alternativ med en vision att vara klar vid 2030(2).

Karbonater som utvinns vid processen består av en karbonatjon, CO_3^{2-} , samt motjon såsom kalcium, Ca . Vilken typ av salt som används har stor påverkan på vad ett företag gör med karbonaten. Vid användning av salt som t.ex. kalium framställs kaliumkarbonat K_2CO_3 som kan användas inom livsmedelsindustrin, framställning av såpa samt framställning av kristallglas.

1.2 Syfte

Syftet med arbetet är att genom matematisk modellering och datainhämtning analysera olika utfall för dimensionering av en bubbelkolonnreaktor. Resultatet skall kunna användas som underlag i konstruktion av en kolonn på labbskala för analys i en MRI (magnetresonanstomograf).

1.3 Avgränsningar

- Systemet som analyseras kommer enbart ta hänsyn till reaktion av koldioxid med kalciumhydroxid i vatten.
- Då bubbelkolonnen skall anpassas för att köras i en MRI utrustning begränsas diametern på kolonnen till 66 mm.
- För att processen skall vara så enkel och miljövänligt som möjligt är målet att använda kolonnen vid rumstemperatur och atmosfärstryck.

1.4 Precisering av frågeställningen

- Litteratursökning kring området koldioxidinfångning med fokus på reaktion med kalciumhydroxid och bubbelkolonnreaktor.
- Föreslå och ta fram relevanta reaktionsvägar samt ta fram ett flödesschema för processen.
- Baserat på ovanstående information ta fram en modell för reaktorn.
- Simulera olika fall för processen på labb-skala i Matlab.

1.5 Rapportens disposition

Kapitel 2 går igenom teori, samt metod för projektet där teorin bakom bubbelkolonner och dess uppbyggnad kommer att konstateras. Under kapitlets gång kommer även egenskaper för gas och vätska att skrivas ner. Därefter kommer även reaktioner som sker, masstransport och flöden samt teori för modeller som kan användas. Kapitel 3 täcker resultaten där allt från reaktordimensioner, bubbelegenskaper, beräkningar på flöden, massöverföring. Kapitlet går även genom beräkningar på de alternativa modellernas reaktor kapacitet och konverteringsgrad. Slutligen går kapitel 3 genom en känslighetsanalys, där de parametrar som anses vara känsligast för ändring analyseras. En sammanställning av resultatet, samt svar på frågeställning presenteras i kapitel 4.

2 Teori och Metod

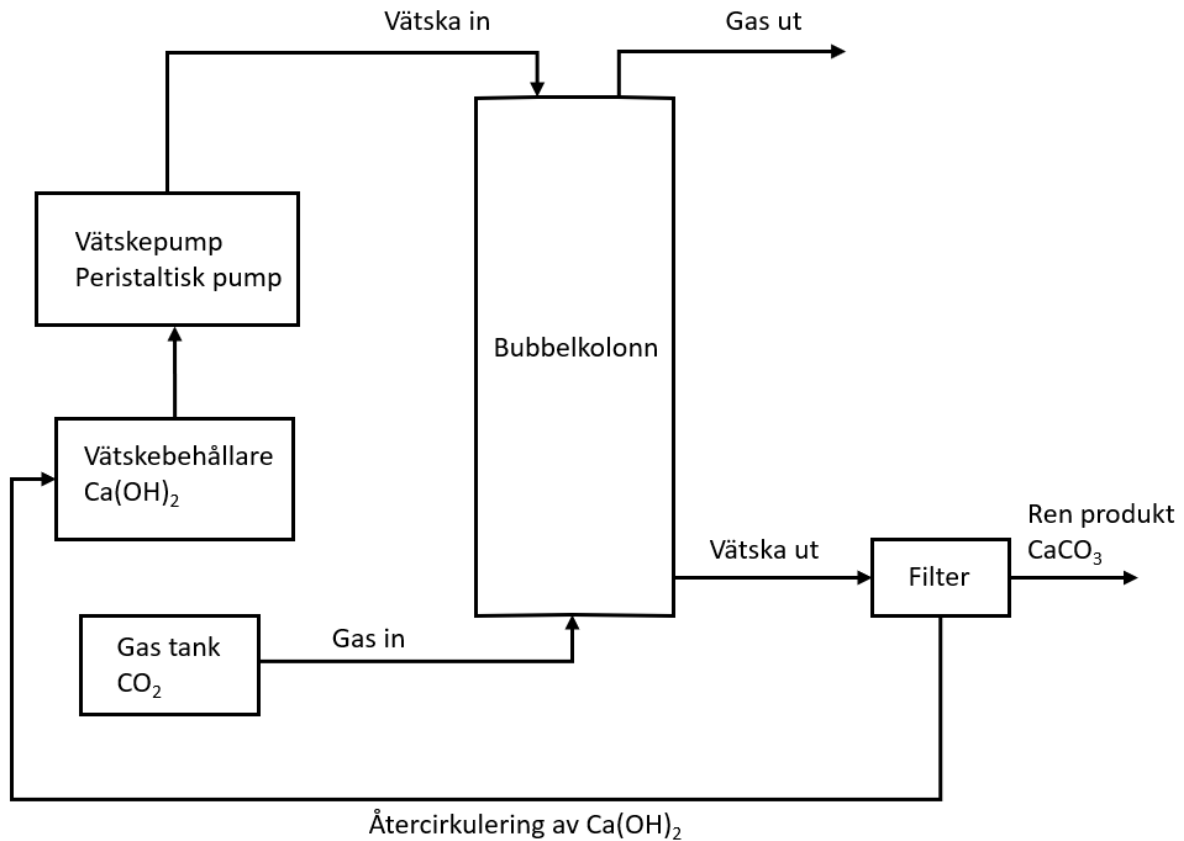
Den generella reaktionen för CO_2 infångning med användning av vattenlösningen $Ca(OH)_2$ är formulerad som ekvation 1.



$$\Delta H_{298K}^\circ = -109 \text{ kJ/mol}$$

(3)

Reaktionen är termodynamiskt gynnsam i en temperatur mellan 298K och 1023K, där en lägre temperatur gynnar reaktionen främst. Den producerade $CaCO_3$ kan till viss del gå tillbaka till $Ca(OH)_2$ genom förbränning eller hydrering. I Figur 1 är ett förslag på hur processen kan se ut på labb-skala. CO_2 kommer föras in i botten på kolonnen medans en vätskeblandning av $Ca(OH)_2$ tillförs i toppen. Vätskeblandningen tas ut i botten och går vidare till ett filter för separation av den solida karbonaten medans överbliven $Ca(OH)_2$ återcirkuleras. Kolonnen kommer köras vid rumstemperatur och atmosfärstryck. Gasen in är en blandning av koldioxid (20%) och kvävgas (80%) för att efterlikna mängd CO_2 i diverse process strömmar.



Figur 1. Flödesschema för bubbelkolonn

Fokus med det här arbetet och vad teorikapitlet kommer behandla är bubbelkolonnens reaktor. Modellen för reaktorn bestäms enligt ett flertal faktorer som alla kommer tas upp i teorin i logisk följd. Främst kommer modellen bestämmas beroende på hydrodynamiken och masstransporten.

2.1 Bubbelkolonn

En bubbelkolonn är en processteknisk apparat som används för värme- och massöverföring och diverse kemiska reaktioner mellan gas och vätska såsom oxidering, klorering, alkylering, polymerisation och hydrering. Bubbelkolonnen fungerar på så sätt att en eller flera gaser införs i en vätska. Gasen kommer bubbla genom vätskan och reagera med vätskan, eller alternativt en komponent som lösts upp i vätskan. Bubbelkolonnens uppbyggnad består av en vertikal cylinder där gas pumpas ut från botten av cylindern genom en basplatta, basplattan där gasen flödas ut kan vara uppbyggd på flera olika sätt. Vätskefasen kan ledas medströms eller motström till gasens flöde.

2.1.1 Modifierade bubbelkolonner

En packad bubbelkolonn är en typ av modifierad bubbelkolonn. I den packade bubbelkolonnen har ett packningsmaterial, eller en statisk mixer tillsatts. Detta görs då man får en bättre massöverföring, där man får en större mängd små bubblor samt förhindrar "back-mixing" i de båda faserna. Den packade bubbelkolonnen bidrar dessutom till en bättre naturlig omrörning, då antalet vägar gasen kan gå via packningsmaterialet har ökat. Detta bidrar däremot till ett högre tryckfall över kolonnen.

2.1.2 Spargers

Sparging är en teknik som används i bubbelkolonnen för att på ett bättre sätt distribuera gasen i vätskan. Spargern är ett munstycke som består av en massa små hål som används för att göra mindre bubblor, vilket leder till en större kontaktyta mellan gasen och vätskan. Detta leder till en ökad effektivitet och snabbhet på reaktionen. Det finns flera olika typer av spargers som alla har unik påverkan på bubblornas utformning. Några av de vanligaste förekommande typerna är perforated plate, porous plate, membrane, ring type och arm spargers. Formen på spargern, samt storleken på hålen kommer ha påverkan på reaktionens "Gas holdup" vilket visar på volymen av gas i den totala volymen i gas-vätske fasen i bubbelkolonnen, vilket är en viktig parameter för att kunna kategorisera de hydrodynamiska tecknen i bubbelkolonnen.

2.2 Bubbelegenskaper

Bubblorna som går igenom reaktorn kan ha många olika egenskaper, dessa egenskaper kommer ha stor betydelse till reaktorns effektivitet. De viktigaste egenskaper, med avseende på effektiviteten för reaktorn är bubbeldiametern, bubbelhastigheten, kontaktyta och gas holdup.(4) Detta då dessa egenskaper har en direkt påverkan på massöverföringen. Massöverföringen kommer få en lägre hastighet när bubblorna blir mindre och ytan på bubblorna är relativt styva. När bubblorna blir större ökar hastigheten vilket leder till mer turbulens och en högre massöverföring. För att få ytterligare högre överföring ska bubblornas ytor vara rörliga och oscillerande.(4) Storleken på bubblorna påverkar reaktorn mycket eftersom alla parametrar har sin viktiga del till hur reaktorn fungerar och vad reaktorn ger för resultat. Parametrar som bubblans stigningshastighet och uppehållstiden för gasfasen kommer ändras med att storleken ändras. Dessa två parametrar har ofta en stor bredd på sitt distributionsmönster som kan resultera i flera toppar. När bubblorna har icke enhetliga storlekar och stigningshastigheten är ojämn kommer resultatet bli en bredare uppehållstid för gasfasen. (4)

2.2.1 Bubbeldiameter

För att uppskatta diametern på bubblorna användes följande korrelation. Korrelationen är bra för låga gasflöden och balanserar lyftkraft mot ytspänning vid hålen på en sparger. Dessa korrelationer baseras på Kolmogoroffs isotropa turbulensteori. Denna funktion kan användas vid användning av en bubbelkolonn med ett tvåkomponent- munstycke som en sparger.

Korrelationerna beskrevs som följandes:

$$d_b = \left(\frac{6 \cdot d_0 \cdot \sigma_L}{g(\rho_L - \rho_G)} \right)^{\frac{1}{3}} \quad (1)$$

Där denna korrelation används för att beskriva bubblans diameter d_b . Där d_0 är diametern på hålen i spargern och även vart gasen kommer ifrån, och de generella diametermått varierar vanligtvis mellan 0.5 - 6mm(5). σ_L är ytspänningen där olika vätskor vid olika temperaturer uppvisar olika värden beroende på nämnda faktorer. Utöver detta används även densiteterna för både den valda vätskan och gasen.

Fotografiska metoder används oftast för att bestämma bubbelstorlekens distributioner. Gas matas in genom ett rör och en platta med enkla hål som kallas för perforerade plattor. Bubbeldiametern påverkas endast en del av gashastigheten när rör och perforerade plattor används som matningsanordning. Bubbeldiametern är känslig och påverkas mycket för de specifika inblandade materialsystemen. Bubblans sammanställningen är en parameter som påverkar diametern i hög grad.

2.2.2 Bubbelhastighet

Den genomsnittliga stigningshastigheten för gasbubblorna som rör sig i svärm en funktion av gashastigheten

$$u_B^* = \frac{u_G}{\varepsilon_G} \quad (2)$$

(4)

Under homogena flödestillstånd rör sig bubblorna i olika hastigheter som varierar mellan 3 – 22 cm/s. (4) Där u_B^* börjar med att sjunka när flödet är homogent och sedan börjar den att öka när flödet är heterogent.

I bubbelkolonnen kommer de mindre bubblorna att ha en lägre stigningshastighet på grund av att närvaron från de ytaktiva ämnena som finns i reaktorn och att ytspänningsgradient uppstår vid gränssytan mellan gasen och vätskan.

2.2.3 Gas och liquid Hold-up

En del av gas eller vätska i en gas och vätskeblandning kallas för det relativa gas- eller vätske holdup.

$$\varepsilon_G = \frac{L_B - L_R}{L_B} \quad (3)$$

$$\varepsilon_L = \frac{L_R}{L_B} \quad (4)$$

I denna formeln är L_R den vätskenivå som inte innehåller någon gas. Denna nivå ska överensstämma med nivån där det bara finns en vätskefas. L_B är drifhöjden i kolonnen.

Om det inte finns någon fast fas så gäller följande ekvation.

$$\varepsilon_G + \varepsilon_L = 1 \quad (5)$$

Enligt den erhållna fas kompositionen uttrycks de uppmätta värdet på hela kolonnen och dess tvärsnitt. Däremot är kvarhållningshastigheten för gas och vätska en funktion av tid och rum.

Gasretentionstiden är ett viktigt designkriterium för en bubbelkolonn. På ena sidan är det relaterat till bubbeldiametern för att bestämma gränssytans area och representerar därför den avgörande faktorn i massaöverföringsekvationen. När absorptionshastigheten är proportionell mot gränssytan, är en stor gränssyta särskilt önskvärt, detta sker när absorptionen är snabb. Å andra sidan föredras en bubbelkolonn för långsamma gas-vätske-reaktioner där gashalten är liten. Istället krävs en tillräcklig mängd vätska. Eftersom gas holdup och gränssytan för en specifik geometri och ett givet materialsystem endast är en funktion av gashastigheten, dras slutsatsen att för det långsammare reaktions-absorptionsområdet ger gashastigheten den bästa omsättningen.

2.2.4 Kontaktyta

Kontaktytan för en gas-vätska reaktor är en av de allra viktigaste parametrarna. Den har störst påverkan på reaktorns effekt, speciellt när det kommer till absorptionen av snabba kemiska reaktioner. Kontaktytan är generellt sätt en funktion av komponentens storlek, driftparametrar och dess fysikaliska, samt kemikaliska egenskaper. När det kommer till absorption som följs av långsamma eller indirekta reaktioner är massöverföringshastigheten bestämd av dess Volymetriska massöverföringskoefficienten $k_L a$, som är en funktion av den specifika kontaktytan, a (6).

2.2.5 Kontaktytans area

Kontaktytans area är den arean där kontakten mellan vätskan och gasen befinner sig. Den beskrivs av bubblornas frekvens genom flödeshastigheten, volymen för gasen samt diametern. Kontaktytans area betecknas med a och beräknas med följande korrelation

$$a = 26 \left(\frac{H_L}{d_K} \right)^{-0.3} K^{-0.003} \varepsilon_G \quad (6)$$

Där d_K motsvarar kolonndiameter, ε_G är gas holdup som bestäms enligt ekvation (3), samt K som bestäms enligt ekvation (7)

$$K = \frac{\rho_L^* \sigma^3}{g \eta_L^4} \quad (7)$$

Där ρ_L motsvarar vätskans densitet, σ ytspänningen för vätskan och η_L är den kinematiska viskositeten som bestäms genom

$$\eta_L = \frac{\mu_L}{\rho_L} \quad (8)$$

Där μ_L är viskositeten för vätskan.

2.3 Reaktionen

Vid uppfångning av CO_2 med användning av $Ca(OH)_2$ så förekommer det ett flertal olika reaktioner som i slutändan resulterar i karbonaten $CaCO_3$.

2.3.1 Individuella reaktioner

Reaktion (1) innehåller flera individuella reaktioner, såsom $Ca(OH)_2$ upplösningen samt skapande av HCO_3^- . Vissa av reaktionerna är beroende av pH, medans andra sker oavsett pH. Följande individuella reaktioner sker under reaktion (1).

Upplösning av $Ca(OH)_2$:



Separerade OH^- kommer reagera med vattenlöst CO_2 och bilda kolsyrajoner.

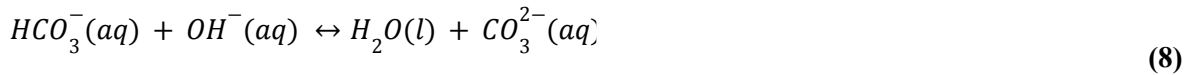
Kolsyrajonerna som främst kommer att bildas är CO_3^{2-} och HCO_3^- i pH mellan 6.5 och 10.5. Vid pH värden som är mindre än 6.5 bildas främst $H_2CO_3(aq)$, vilket betyder att $CaCO_3$ inte kommer bildas då CO_3^{2-} inte finns tillgängligt för att reaktionen ska kunna ske. Reaktionen sker som bäst i lösning med pH över 10. (3)

Reaktionerna vid CO_3^{2-} bildning:



Där reaktion (3) och (5) sker väldigt fort, och reaktion (4) är hastighets styrande då den sker långsammast. (3)

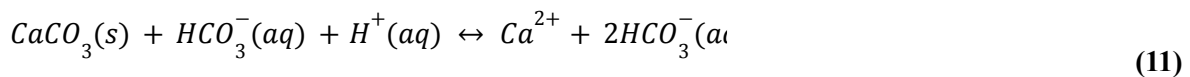
I lösning där $\text{pH} > 10$ så fortsätter reaktionen på följande sätt:



Där reaktion (7) är hastighets styrande då den är långsammast.

Vid värden där $7 < \text{pH} < 10$ så kommer reaktion (7) ske snabbare än (8) vilket leder till en högre koncentration av HCO_3^- än CO_3^{2-} i lösningen, detta leder till att mindre CaCO_3 bildas. (3)

Vid $\text{pH} < 7$ så ökar koncentrationen av HCO_3^- och H^+ vilket betyder att lösningen är surare. Detta i sin tur leder till att $\text{CaCO}_3(\text{s})$ upplöses istället för att bildas enligt följande reaktioner:



Då $\text{CaCO}_3(\text{s})$ reagerar till $\text{Ca}(\text{HCO}_3)_2$ som är lättare löst och CO_2 fortsatt pumpas in så kommer $\text{CaCO}_3(\text{s})$ upplösningen fortsätta att ske i en kvasistatisk process, och sluta då lösningen befinner sig i jämvikt. (3)

2.4 Reaktionskinetik

Reaktionskinetik är en del av fysikalisk kemi som handlar om hastigheten för kemiska funktioner. För att bestämma kinetiska parametrar använder man sig av både homogena och heterogena funktioner. De kinetiska parametrar som främst är betydelsefulla för gas-vätske reaktionen är reaktionsordningen, hastighetskonstant samt aktiveringsenergi.

2.4.1 Kinetisk ordning

Reaktionsordningen beskriver i vilken ordning en reaktion sker, samt om reaktionen sker i samma hastighet eller om den är beroende av reaktantens koncentration. Reaktionen kommer att ske i första ordningen och hastigheten på den kan betecknas med

$$r = k_{OH^-}[OH^-][CO_2] \quad (9)$$

Detta då reaktionen i helhet kommer vara styrd av två koncentrationer, $[OH^-]$ och $[CO_2]$ (7).

Anledningen till att det beror på just dessa två koncentrationer är då reaktion (7), som är den hastighetsstyrande reaktionen(3) är beroende av koncentrationen för just koldioxid och hydroxid.

Reaktionen kommer att ske snabbt, detta då $[OH^-]$ och $[CO_2]$ inte kommer kunna existera samtidigt utan att reagera.

Då reaktionen sker i första ordningen kan kinetiken för reaktionen, r_A uttryckas med

$$r_A = k_1 c_{AL} \quad (10)$$

där k_1 är reaktionshastighetskonstanten för en reaktion i första ordning och c_{AL} är koncentrationen av koldioxid i vätksefasen.

2.4.2 Reaktionshastighetskonstanten

Reaktionshastighetskonstanten för en reaktion i första ordning kommer att vara beroende av två koncentrationer, $[A]$ och $[B]$ vilket i detta fall är $[OH^-]$ och $[CO_2]$. Detta då reaktionshastigheten kommer att regleras beroende på reaktion (7). Koncentrationen av hydroxid som utvinns från $Ca(OH)_2$ i reaktion (2) är den reglerande faktorn då CO_2 flödet kommer vara konstant.

Reaktionshastighetskonstanten kommer därför att beräknas på koncentrationen OH^- . Där k_1 fås ut från följande samband enligt ekvation (10)(2).

$$\log \frac{k_1}{k_1^\infty} = 0.22I - 0.016I^2 \quad (11)$$

Där k_1 är beteckning för reaktionshastighetskonstanten, och I står för jonisk styrka. k_1^∞ är hastighetskonstanten i en utspädd lösning och fås genom sambandet i ekvation (11).

$$\log k_1^\infty = 11.895 - \frac{2382}{T} \quad (12)$$

$$I = \frac{1}{2} \sum c_i Z_i \quad (13)$$

I är jonisk styrka beräknas enligt ekvation (13) som beräknas med koncentrationen för jonerna, i som i detta fall är OH^- och Ca^{2+} , samt laddningen på jonerna Z . (8)

2.4.3 Gasens Löslighet

Ett ämnes löslighet är ett mått på mängden ämne som kan lösa sig i en viss mängd vätska. Lösligheten av gas-komponenter i vätskefasen har en stor påverkan på konverteringsgraden i gas-vätske reaktionen. Lösligheten för ämnena i reaktionen samlas i bilaga under Tabell 6.

2.5 Massöverföring

Diffusion är en process inom massöverföring. Denna process beskrivs som slumpmässiga rörelser av molekylerna mellan en högre koncentration till en lägre. Diffusionen är en långsam process och kan beräknas genom Fick's lag, som beskrivs av ekvation (14)

$$j = - D \frac{\partial c}{\partial x} \quad (14)$$

där J är massfluxet, D är diffusionskoefficienten, c är koncentrationen av det diffunderade ämnet och x är en position. Differentialekvationen av diffusion med reaktion kan beskrivas med ekvation (15)

$$D_A \frac{\partial^2 c_A}{\partial x^2} = \frac{\partial c_A}{\partial t} + v_A r \quad (15)$$

När en substans flyttar sig från huvuddelen av en fas till kontaktyta eller tvärtom så kallas det för massöverföring. Massfluxet j är proportionell mot koncentrationsskillnaden, t.ex. skillnaden mellan bulkkoncentration c och koncentration i gränssnittet c_i . Proportionaliteten mellan masstransport och koncentrationsskillnad ger massöverföringkoefficienten.

$$j = k(c_i - c) \quad (16)$$

Där k har ett index för vätska och gas som beror på om koncentrationen är på vätske- k_L eller gas-sidan k_G .

2.5.1 Tvåfilmsteori

Masstransporten kommer ändras beroende på om massöverföringen sker på vätskans- eller gasens sida. Masstransporten kan på vätskans sida beräknas genom

$$j_L = k_L(c_{Li} - c_L) \quad (17)$$

och på gasens sida beräknas genom

$$j_G = k_G(p - p_i) \quad (18)$$

Där j motsvarar massfluxet, k är massöverföringskoefficienten. Koncentrationen är c (molaritet) eller p (partialtryck) beroende på vilken fas det befinner sig i.

2.5.2 Massöverföringskoefficienten

Massöverföringskoefficienten är en konstant som relaterar till massöverföringshastigheten, massöverföringsytan och ändringen i koncentration. Då koncentrationen för gasen i reaktionen är så pass liten kan den försummas. Masstransporten sker på vätskesidan, och kan då beräknas med

$$k_L = \frac{Sh * D_{AB}}{d_B} \quad (19)$$

Där D_{AB} är diffusionskoefficienten, och d_B är bubblans diameter. Samt där Sh är sherwoods tal, vilket är dimensionslöst och beräknas enligt ekvation (20)

$$Sh = 0.31 * Gr^{1/3} * Sc^{1/3} \quad (20)$$

Där Gr är Grashofs tal och Sc är Schmidts tal, de båda är dimensionslösa och beräknas med ekvationerna (21) och (22).

$$Gr = \frac{d_b^3 * \rho_L * g * \Delta\rho}{\mu_L^2} \quad (21)$$

Där ρ_L är densiteten för vätska, och μ_L^2 är viskositeten för vätskan.

$$Sc = \frac{\mu}{\rho D} \quad (22)$$

Volymetriska massöverföringskoefficienten $k_L a$ är en annan koefficient som baseras på k_L som beskriver k_L fast man tillämpar kontaktytans area till massöverföringskoefficienten. Detta är mer relaterat till massöverföringsytan. Denna koefficient beskrivs med ekvation (23)

$$k_L a = \frac{k_L a}{a} \quad (23)$$

2.5.3 Diffusionskoefficient

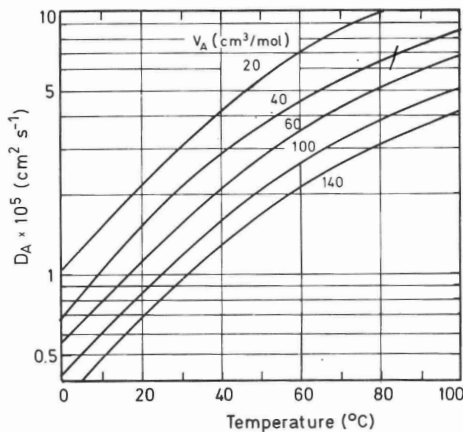


Table 5.8 Molar volumes ($\text{cm}^3 \text{mol}^{-1}$) at normal boiling-point

Gas	Wilke, Chang [74]	Hilderbrand, Scott [79]	Sovova [78]
H ₂	14.3	28	6.0
O ₂	25.6	28	27.9
N ₂	31.2	35	31.6
CO	30.7	35	29.2
CO ₂	34.0	40	37.3
NO	23.6	—	23.0
N ₂ O	36.4	—	—
SO ₂	44.8	45	43.1
NH ₃	25.8	—	—
H ₂ O	18.9	—	36.0
H ₂ S	32.9	—	39.6
COS	51.5	—	—
Cl ₂	48.4	—	53.0
CH ₄	—	39	38.6
C ₂ H ₆	—	55	50.2
C ₃ H ₈	—	—	72.0
n-C ₄ H ₁₀	—	—	93.0
C ₂ H ₄	—	50	—
C ₂ H ₂	—	42	32.5

Figur 2. Hayduk och Laudie korrelation. Med molar volymen för CO₂ kan diffusionskoefficienten läsas av i figuren till vänster vid given temperatur.

(4)

Vid beräkning av D_A används Hayduk och Laudie's korrelation, som kan ses i Figur 2. Där temperaturen av CO₂ kommer ligga på 25 °C som tidigare och volymflödet för gasen kommer ligga mellan 30 – 40 cm³/mol. Vid beräkning av D_A så dras det en linje runt 37 cm³/mol som går neråt med samma lutning till 25 °C. Vilket gör att vi kommer få ett värde på ca $1.8 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$

2.5.4 Flödes hastighet

För att beräkna flödet genom kolonnen används följande korrelation för "weeping velocity" (5).

$$V_c^2 = \left(\frac{(\rho_L - \rho_G) \cdot d_0 \cdot g}{\rho_G} \right) \cdot (0.37 + 140 \cdot H_L \left(\frac{\Delta X}{d_0} \right)^{-1.6}) \cdot \left(\frac{t}{d_t} \right) \quad (24) \dots\dots\dots$$

“Weeping velocity” är den minsta hastighet som krävs för att ingen vätska ska rinna ut genom hålen i spargern. Diametern för hålen betecknas med d_0 , och ΔX betecknar avståndet mellan varje håll.

Vätskans höjd i kolonnen betecknas med H_L och t betecknar spargerns tjocklek.

Vid beräkning av ekvation (24) fås den minsta möjliga hastighet på gasen för att ingen vätska ska rinna ut genom hålen i spargern. För att vara helt säker på att ingen vätska rinner igenom väljs en hastighet som är 15 % över den beräknade.

Då hastigheten är beräknad kan flödet för kolonnen även fås fram genom ekvation (25).

$$\dot{V} = v \cdot A \quad (25)$$

Därefter kan flödes hastigheten för hålen beräknas genom att tillämpa totala arean för hålen i spargern till flödes hastigheten i ekvation (26).

$$V_h^* = V^* \cdot \Sigma A_{h\ddot{a}l} \quad (26)$$

Där $\Sigma A_{h\ddot{a}l}$ motsvarar totala arean för alla hål tillsammans, och V^* flödes hastigheten genom kolonnen.

2.6 Modeller för bubbelkolonn reaktorer

Tabell 1.

Liquid phase	Gas Phase		
	CSTR	ADM	PFM
CSTR	1.1	1.2	1.3

Modellerna 1.1, 1.2 och 1.3 är väldigt optimala för vätskefasen när det kommer till bubbelkolonner. Omblandningsgraden i bubbelkolonner är ofta hög, därför är antagandet att det förekommer "perfect mixing" för vätskefasen rimlig(4) Därför använder sig alla modellerna av CSTR (Continuous Stirred Tank Reactor) för vätskeflödet baserat på att det förekommer perfekt mixning. För gasfasen finns det tre stycken huvudreaktorer som är optimala för olika typer av gasflöden. Dessa är CSTR, ADM och PFM. CSTR innebär att gasflödet kommer få "perfect mixing", termen förutsätter att det inte finns några rumsliga gradienter som t.ex. varierande koncentration, temperatur, kemisk potential eller katalytisk aktivitet. ADM som står för "axial dispersion model" innefattar att gasflödet kommer få "partial mixing", detta innebär att gasflödet kommer innefatta "back mixing" vilket betyder att det kommer ske en omrörning av gasflödet i vätskan vilket återcirkulerar gasen i vätskeflödet. Vid användning av PFM(Plug Flow Model) sker "no mixing", den förutsätter att gasflödets hastighet i stort sett är konstant.

Vid analys av de tre olika modellerna kollar man främst på konverteringsgraden, U och effektiviteten, detta görs genom beräkningar på reaktorns kapacitet $R_A a$ och volymflöden.

Då reaktionen sker i första ordningen kan kinetiken för reaktionen, r_A uttryckas med

$$r_A = k_1 \varepsilon_L c_{AL} \quad (28)$$

Där k_1 är reaktionshastighetskonstanten för en reaktion i första ordning och c_{AL} är koncentrationen av koldioxid i vätskefasen samt ε_L finns med då reaktionen sker i vätskefasen. Då reaktionen sker i vätskefasen som antas ha "perfect mixing" och modelleras som en CSTR så kan vi använda samma reaktion uttryck i alla tre modeller. För uttrycket antas även en konstant medelhastighet på gasen, och även att reaktionen är i det långsamma reaktions-absorptionsområdet.

2.6.1 Modell 1.1

Modell 1.1 antar att båda faserna är väl omblandade och kan ses som en CSTR. Gasfasen i modellen kommer precis som vätskefasen att konstateras vara i "perfect mixing". Denna modell kan beskriva sin reaktors kapacitet i en första ordens reaktion genom

$$R_A a = \left(\frac{1}{Q} + \frac{1}{k_1 \varepsilon_L} \right)^{-1} * c_{AL0}^* \quad (29)$$

Där k_1 är reaktionskonstanten, ε_L är gas-holdup för vätskan, C_{AL0}^* är vätskefas-koncentration som står i jämvikt med den initiala gas koncentrationen och Q som är en variabel som utfås av ekvation (30).

$$\frac{1}{Q} = \frac{V_R}{V_h^*} * \frac{RT}{H} + \frac{1}{k_L a} \quad (30)$$

Där V_R är volymen över hela reaktorn.

Då reaktorns kapacitet har beräknats kan man nu få fram ett värde på konverteringsgraden, U . Detta görs genom ekvation (31)

$$U = \frac{R_A a^* V_R}{V_h^* c_{A0}} \quad (31)$$

Där c_{A0} är den initiala koncentrationen för gasen, c_{A0} beskrivs genom ekvation (32)

$$c_{A0} = \frac{P_A}{R \cdot T} \quad (32)$$

Och där c_{AL0}^* fås fram genom ekvation (33)

$$c_{AL0}^* = \frac{P_A}{H} \quad (33)$$

Där P_A är partialtrycket

2.6.2 Modell 1.2

Modell 1.2 som bygger på en CSTR-ADM, där ADM som är förkortning för "axial dispersion model" är gas reaktorn. ADM innefattar att det kommer finnas axiel fördelning i gasfasen, detta leder till att det tillkommer ett flertal parametrar vid beräkning då det förekommer "partial mixing". I början

av beräkning av modell 1.2 kommer Bodenstiens nummer bli beräknat som är en dimensionslös parameter inom kemisk reaktionsteknik, som beskriver förhållandet mellan mängden ämne som införs genom konvektion med den som införs genom diffusion. Detta nummer kan beskrivas med följande korrelation.

$$Bo_G = \frac{u_G \cdot L}{E_G \cdot \varepsilon_G} \quad (34)$$

För beräkning behövs spridningen i gasfasen som kan beskrivas med denna korrelation.

$$E_G = 5 \cdot 10^4 \cdot \frac{u_G}{\varepsilon_G} \cdot D_k^{1.5} \quad (35)$$

Stantons tal (St), är ett dimensionslöst tal för massöverföring.

$$St = k_L a \cdot \frac{L}{u_G} \cdot \frac{RT}{H} \quad (36)$$

Med hjälp av Bodenstiens nummer och Stantons tal kan quench talet q beräknas, vilket är ett kvottal som används vid nästa beräkning.

$$q = \sqrt{\frac{1+4 \cdot St}{Bo_G}} \quad (37)$$

Sammanställning av ovannämnda tal för modell 1.2 kommer resultera i att talet N kan beräknas som kommer behövas för vidare beräkning.

$$N = (1 + q)^2 \cdot e^{\frac{Bo_G \cdot q}{2}} - (1 - q)^2 \cdot e^{-\frac{Bo_G \cdot q}{2}} \quad (38)$$

Q för denna modellen beräknas genom följande där talet Q är en variabel som utfås av ekvation (39) som sedan sätts in i ekvation (40) för beräkning av reaktorns kapacitet.

$$Q = \frac{V_G^-}{V_R} \cdot \frac{H}{RT} \cdot \left(1 - \frac{4}{N} q \cdot e^{\frac{Bo_G}{2}}\right) \quad (39)$$

$$R_A a = \frac{V_G^-}{V_R} \cdot \frac{H}{RT} \cdot \left(1 - \frac{4}{N} q \cdot e^{\frac{Bo_G}{2}}\right) \cdot C_{AL0}^* \quad (40)$$

$$U = \frac{R_A a^* V_R}{V_h^* c_{A0}} \quad (41)$$

2.6.3 Modell 1.3

Modell 1.3 som bygger på en CSTR-PFM, kan beskriva sin reaktors kapacitet i en första orders reaktion på samma sätt som i modell 1.1.

Reaktorns kapacitet beräknas med ekvation (29) och byggs upp av parameter Q, samt koncentrationerna som beräknas med ekvationerna (32) och (33)

$$Q = \frac{V_G^-}{V_R} \cdot \frac{H}{RT} \cdot (1 - e^{-St}) \quad (42)$$

Parameter Q beräknas med ekvation (42) där alla värden sen tidigare är kända. Då alla beräkningar är gjorda kan konverteringsgraden, U beräknas genom ekvation (43).

$$U = \frac{R_A a^* V_R}{V_G^- \cdot c_{A0}} \quad (43)$$

3 Resultat

3.1 Reaktordimensioner

Vid beräkning av reaktorns dimensioner blev Diametern är satt till 66 mm enligt max diametern i MRI utrustningen. Därefter beräknades vätskehöjden, H_L som beskriver hur mycket av kolonnen som är vätskefylld utan någon gas. Detta gjordes enligt standardförhållandet för bubbelkolonner: $\frac{H_L}{d} = 10$. Då kunde ett värde på H_L sättas som finns i tabell 2. Då ett värde på vätskehöjden för kolonnen var bestämd gjordes ytterligare undersökningar på andra bubbelkolonner där det framkom att många kolonner har ett H_L som står för 80% av kolonnen(4). Därifrån kunde ett värde på kolonnens längd bestämmas, som finns i tabell 2.

Nästa problem var att beräkna antalet hål där CO_2 ska flöda ut från spargern. Där kraven är att alla hål ska ha samma avstånd från varandra. Vi gjorde en uppskattning på 2 mm för att få ett rimligt avstånd på hålen med en pitch på 3. Detta motiveras med att vi vill ligga inom det rekommenderade intervallet för pitch och att det ska finnas många hål men ändå kunna tillverka spargern enligt toleranser på en 3D printer. För att sedan beräkna ett rimligt avstånd användes: $\frac{\Delta X}{d_0} = pitch$ där en pitch rimligtvis ligger mellan 3 – 50 så uppskattades den i detta projekt till 3(4). Vilket resulterade i ett avstånd (ΔX) på 6mm från varandra. Detta innebär att det måste ske en beräkning på hur man kan få 2mm i diameter hål att bli jämnt fördelade över en platta som har en diameter på 66mm. För att beräkna detta görs det ytterligare en ring runt varje hål på 3mm från spargerhålet vilket ger oss en ring på 8mm i diameter. Då kan en beräkning utföras för att få hålen jämnt fördelade med hjälp av korrelationen: $n = \frac{(\pi * 66^2)}{(2 * 8)^2}$

Tabell 2. Sammanfattning av resultat från reaktor och sparger dimensionering enligt $\frac{H_L}{d} = 10$.

Parameter	Värde
Reaktorns diameter, d_R	66 mm

Vätskehöjd, H_L	660 mm
Kolonnhöjd	756 mm
Diameter på spargerhål	2 mm
Pitch	3 mm
Antal hål i sparger, n	53st

3.2 Bubbelegenskaper

Det första som utfördes innan beräkning var olika antaganden som behövdes för att få rimliga svar. Då gashålen på spargern är en av de viktigare parametrarna för bubbeldiameter användes en sparger-håldiameter på 2mm. Eftersom hålens storlek ska vara relevanta till reaktorns storlek, som motiverades ovan. För utförande av beräkningen användes ekvation (1) tillsammans med antagandet av sparger diameter och fysikaliska värden på H_2O & CO_2 vid $25^\circ C$. Fysikaliska värden återfinns i bilagan.. Detta resulterar i en bubbeldiameter på 4.458mm.

3.2.1 Gas Hold-up

Beräkning av gas hold-up görs genom användning av höjden på kolonnen och vätskenivån i kolonnen. Dessa värden betecknas med L_B och L_R , där $L_R = H_L$. Vid beräkning av gas hold-up används ekvation (3) och (4). Dessa parametrar är beräknade enligt standardförhållandet för kolonnhöjden och diametern. Vid en beräkning där man bortser från förhållandet mellan höjd och diameter kommer gas holdup att öka då längden på reaktorn och vätskehöjden ökar. Dvs, om standardförhållandet mellan vätskehöjd och diameter istället skulle vara 20, så hade resultatet för gas holdup varit större. Värden för Gas holdup är beräknade och visas i tabell 3.

Tabell 3. Sammanfattning av resultat från Gas holdup baserade på värden från tabell 2.

Paramterar	Värden
L_B	756mm
L_R	660mm
ϵ_G	0.127
ϵ_L	0.873

3.3 Masstransport

3.3.1 Massöverföringskoefficient

Massöverföringskoefficienten är en konstant som relaterar till massöverföringshastigheten samt ändringen i koncentration. I fallet för detta projekt sker masstransporten som tidigare konstaterat på vätskesidan, alltså beräknas den enligt ekvation (19). Massöverföringskoefficienten är bestämd av ett flertal dimensionslösa tal, såsom Schmidts, Grashofs och Sherwoods tal. Dessa är beroende av vilken vätska man beräknar på, då de beräknas med viskositet, densitet samt diffusivitet.

Vid beräkning av massöverföring för vätskesidans area $k_L a$, som sker genom ekvation (23) tillämpar man kontaktytan till massöverföringskoefficienten k_L . Där det enda stora påverkan till skillnad från massöverföringskoefficienten är arean, där en större area resulterar i ett större värde på $k_L a$.

Vid beräkning utfås värden som visas i tabell 4.

Tabell 4. Beräknade värden på massöverföringskoefficienterna.

Parameter	Värde
Schmidts tal, Sc	$4.97 \cdot 10^{-2}$
Grashofs tal, Gr	$10.86 \cdot 10^5$
Sherwoods tal, Sh	11.7
massöverföringskoefficienten, k_L	$4.729 \cdot 10^{-2} m/s$
Volymetrisk massöverföringskoefficienten, $k_L a$	$k_L a = 3.35 \cdot 10^{-2} m/s$

3.3.3 Flödes hastighet

Vid beräkning av flödes hastigheten behövs först "Weep velocity" bestämmas. Detta då man får ett värde på minsta hastigheten som krävs för att inte få någon någon vätska som rinner igenom spargern. Hastigheten är som tidigare nämnt den minsta hastighet som krävs för att ingen vätska ska rinna ut genom hålen i spargern. Därför sökes en hastighet lite över, där ett värde på 15% över den beräknade hastigheten bestämdes.

Flödes hastigheten över hela kolonnen bestäms då ett värde på hastigheten samt arean har beräknats, detta görs genom ekvation (24). Då flödes hastigheten är spridd över flera små hål i spargern behövs en flödes hastighet även bestämmas för sparger hålen. Detta görs då enligt ekvation (25) och värde presenteras i tabell 5

Tabell 5. Sammanfattning av resultatet från hastighetsberäkningar.

Parametrar	Värden
------------	--------

Weeping Velocity, V_c	27.7 m/s
Hastighet(15% över V_c), v	31,85 m/s
Flödes hastighet, V^*	0.109 m ³ /s
Flödes hastighet över sparger hål, V_h^*	1.81 * 10 ⁻⁵ m ³ /s

3.3.4 Reaktionshastighetskonstant

I beräkningen för reaktionshastighet behövs endast två okända parametrar bestämmas, dessa är koncentrationen för joner, c_i samt laddningen, Z_i . Vid beräkning av c_i använder man lösligheten och molmassan för $Ca(OH)_2$ och med hjälp av vetskapen av att $Ca(OH)_2$ är en 2:1 elektrolyt kan vi därmed konstatera att OH^- koncentrationen kommer bli två gånger större. När $Ca(OH)_2$ reagerar och löses upp som i reaktion (2) kommer det resultera i OH^- en laddning på $Z = -1$. Med dessa två parametrar kan konstantan bestämmas med hjälp av ekvation (11), (12) och (13). Där uträknade värden visas i tabell 6.

Tabell 6. Sammanfattning av resultat från reaktionshastighetskonstant där k_1^∞ används för beräkning av k_1 .

Parameter	Värde	Enhet
Koncentrationen, C	0.209	mol/l
Laddningen, Z	- 1	-
Jonstyrka, I	0.105	mol/l
Reaktionshastighetkonstant vid utspädda förhållanden, k_1^∞	7.97 • 10 ³	mol/s
Reaktionshastighetkonstant, k_1	7.97	mol/s

3.4 Modeller för bubbelkolonn reaktorer

3.4.1 Modell 1.1

Modell 1.1 bygger som tidigare nämnt upp på CSTR för både vätske-, och gasflödet. Dess reaktor kapacitet är endast beroende av den volymetriska massöverföringskoefficienten, samt koncentrationen. Då koncentrationen är konstant är det endast massöverföringskoefficienten som kan variera, där det som kan påverka massöverföringskoefficienten är arean. Dvs. en större area hade gett en högre reaktor kapacitet. Värde för Q , $R_A a$ och U beräknades enligt ekvation (29), (30) och (31) och visas i tabell 7.

Tabell 7. Sammanställning av resultat för modell 1.1 vid användning av standardförhållandet

$$\frac{H_L}{d} = 10$$

Parameter	Värde
Q	$7.5 \cdot 10^{-3}$
Reaktorns kapacitet, $R_A a$	$5.1 \cdot 10^{-2} \text{ mol/m}^3 \text{ s}$
Konverteringsgrad, U	77.6%

3.4.2 Modell 1.2

Under modell 1.2 framkommer nya värden såsom Bodensteins tal, quench kvoten, N samt spridningshastigheten i gasfasen, E_G . Detta då modell 1.2 innefattar axiell spridning, vilket resulterar i att det tillkommer parametrar vid beräkning. Då bubbelkolonnen har små mått kommer spridningshastigheten att bli för liten, vi antar därför ett rimligt värde på E_G .

Vid beräkning av ekvation (34)-(41) som gäller för modell 1.2 fås värden ut som placeras i tabell 8.

Tabell 8. Sammanställning av resultat för modell 1.2 vid användning av standardförhållandet

$$\frac{H_L}{d} = 10$$

Parameter	Värde
Spridningskoefficient, E_G	0.01
Bodensteins tal, Bo_G	0.512
Quench, q	8
N	624.5
Q	$9.03 \cdot 10^{-3}$
Reaktorns kapacitet, $R_A a$	$6.11 \cdot 10^{-2} \text{ mol/m}^3 \text{ s}$

3.4.3 Modell 1.3

Modell 1.3 som bygger på en CSTR-PFM, där CSTR används för vätskeflödet och PFM för gasflödet kommer ha en beräkning lik modell 1.1. Vid beräkning av reaktorns kapacitet använder man sig av stantons tal som är en massöverföringsparameter som är beroende av den volymetriska massöverföringskoefficienten, Längden på kolonnen samt medelhastigheten för gasflödet. Värden som beräknats för modell 1.3 presenteras i tabell 9.

Tabell 9. Sammanställning av resultat för modell 1.3 vid användning av standardförhållandet

$$\frac{H_L}{d} = 10$$

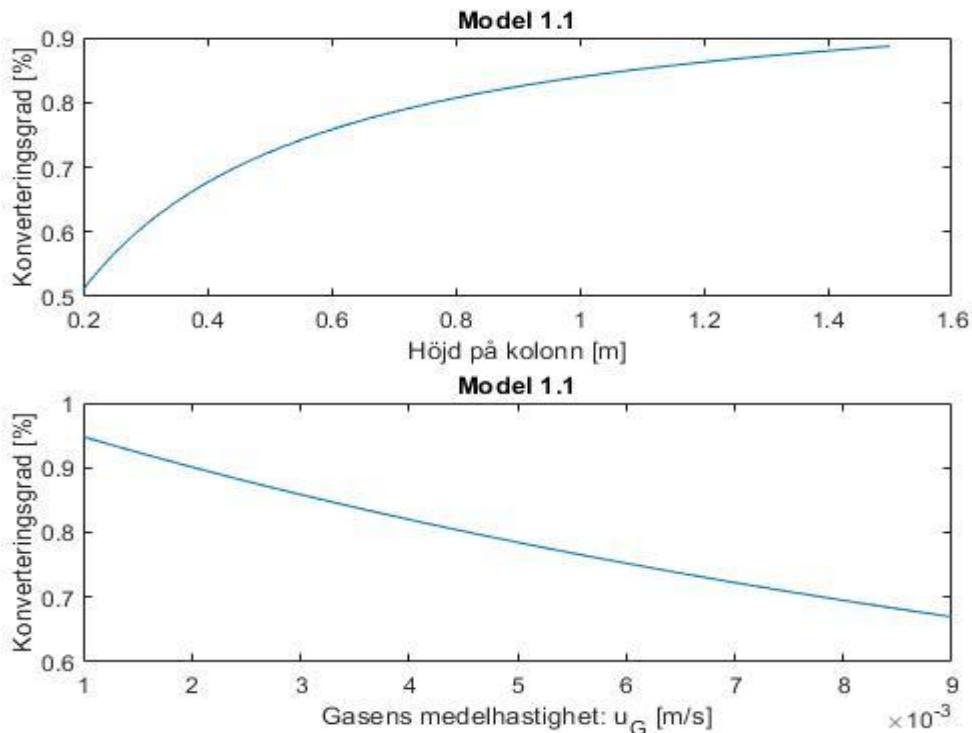
Parameter	Värde
Q	$9.486 * 10^{-3}$
Reaktorns kapacitet, $R_A a$	$6.42 * 10^{-2} \text{ mol/m}^3 \text{ s}$
Konverteringsgrad, U	97.9%

3.4.3 Modell variation med avseende på höjd och medelhastighet

Under beräkningen för reaktor kapacitet och konverteringsgrad för samtliga modeller konstaterades tidigt att vissa parametrar, som går att variera, väger tyngre på resultatet. De parametrar som konstaterades var höjden på kolonnen, samt medelhastigheten. Därför gjordes en känslighetsanalys på dessa två parametrar där resultatet för konverteringsgrad plottades upp vid förändring av höjd, samt gasens medelhastighet för samtliga modeller.

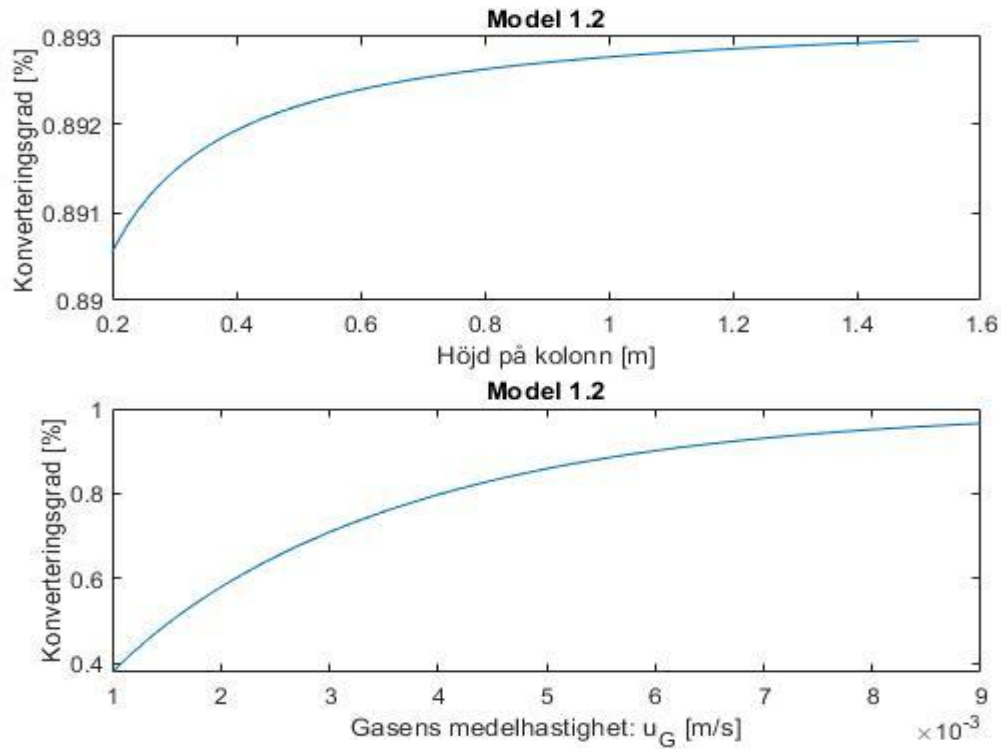
I Figur (3). presenteras förändringen i konverteringsgrad mot förändringen i höjd på kolonnen. Genom att kolla på figuren kan man konstatera att en högre höjd på kolonnen resulterar i en högre konverteringsgrad. Detta då gasfasen kommer färdas genom vätskefasen under en längre period, om man antar att hastigheten är konstant, vilket kommer resultera i en högre konverteringsgrad.

I Figur 3. presenteras även skillnaden i gasens medelhastighet och hur skillnaden kommer påverka konverteringsgraden. Man kan här konstatera att en lägre medelhastighet leder i modell 1.1 till en högre konverteringsgrad. Detta kan förklaras med att en högre hastighet kommer leda till att gasfasen snabbare pressas genom vätskefasen, vilket leder till mindre chans för reaktion.



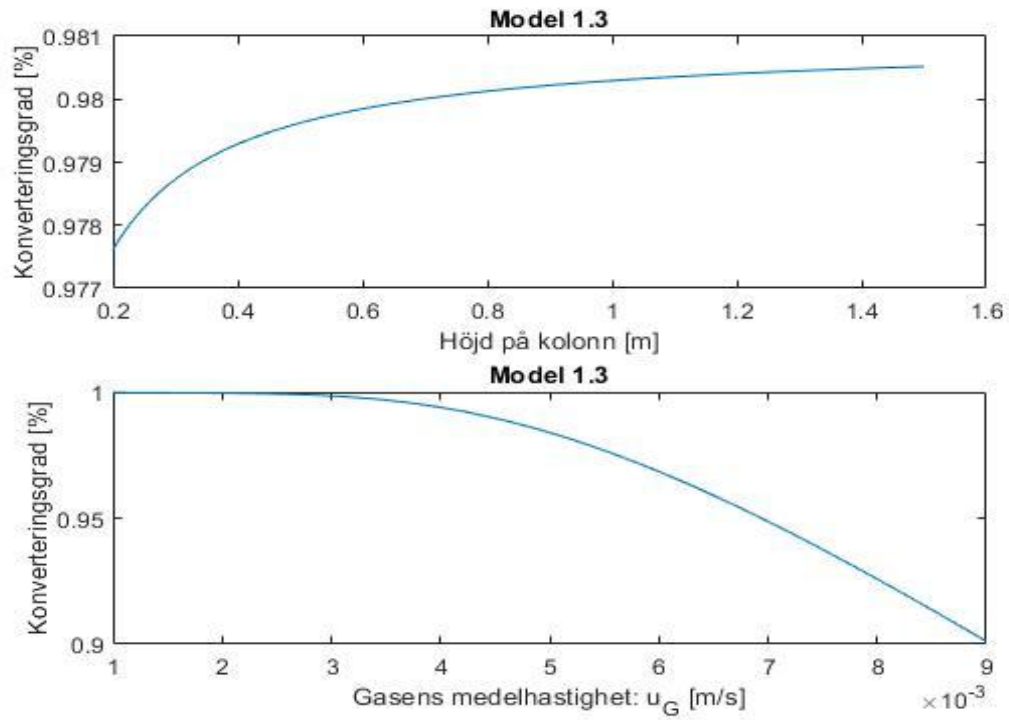
Figur (3). Samband mellan konverteringsgrad & höjd på kolonn och samband mellan konverteringsgrad & gasens medelhastighet i modell 1.1

Figur (4). presenterar samma samband som Figur 3. fast för modell 1.2. Man kan här konstatera att precis som modell 1.1 kommer en högre höjd leda till större konverteringsgrad. Vid en högre medelhastighet för gasen ser det däremot lite annorlunda ut. För modell 1.2 visar det sig att en högre medelhastighet för gasen kommer leda till en större konverteringsgrad. Detta, trots att det verkar lite ologiskt kan förklaras med att det blir en bättre “back mixing” mellan gasfasen och vätskefasen. Däremot är modell 1.2 inte speciellt användbar för bubbelkolonnen som experimentellt kommer används, detta då bubbelkolonnen är så pass liten. Under modell 1.2 förekommer det problem för dimensionerna som används, då bubbelkolonnen är liten blir Spridningskoefficienten, E_G orimligt liten. Därför antogs ett värde som var rimligare. Detta resulterar däremot att modellen inte är passande för bubbelkolonnen som beräkningarna är gjord på.



Figur (4). Samband mellan konverteringsgrad & höjd på kolonn och samband mellan konverteringsgrad & gasens medelhastighet i modell 1.2

Sambandet mellan konverteringsgrad och höjd på kolonn, samt samband mellan konverteringsgrad och gasens medelhastighet för modell 1.3 presenteras i figur (5). Det går här att konstatera att precis som i de tidigare modellerna kommer en högre höjd leda till en högre konverteringsgrad. Precis som i modell 1.1 kommer även en lägre gas medelhastighet leda till en högre konverteringsgrad.



Figur (5). Samband mellan konverteringsgrad & höjd på kolonn och samband mellan konverteringsgrad & gasens medelhastighet i modell 1.3

4 Slutsats

Under arbetets gång har genom matematisk modellering och datainhämtning analyser gjorts på olika utfall för dimensionering av en bubbelkolonnreaktor. Reaktordimensionerna är satta att de ska kunna konstrueras för analys i en MRI.

Genom framtagning av korrelationer för bubbelkolonn, bubblornas egenskaper, massöverföring mm. har en analys på modellerna gjorts. Modell 1.1 och 1.3 visar sig vara mer passande för kolonnen som beräkningarna har gjorts på. Detta då modell 1.2 har för låg flödes hastighet, då dimensionerna för kolonnen är så pass små. Det resulterar i att vi får en spridningskoefficient E_G , som blir för liten, därför har ett antagande på värde istället gjorts då det inte finns korrelationer för mindre flödes hastigheter. Man kan därför konstatera att modell 1.2 inte är passande. Modell 1.3 stöter också på lite problem vid beräkning då den försummar för mycket parametrar som spelar roll. Därför får modellen en konverteringsgrad som är högre än den borde vara.

Vid fortsättning av projektet rekommenderas det att experimentellt testa det teoretiska som rapporten går över. Under det experimentella bör man även se hur ändring av flödes hastighet påverkar konverteringsgraden för att se om simuleringen stämmer överens med verkligheten. Man bör även titta närmare på tryckfallet över spargern, samt experimentera med andra motjoner.

5 Bilaga

Tabell 10.

	CO_2	H_2O	$CaOH_2$	$CaCO_3$	OH^-	Enheter
Densitet	1.836	995.2	2211	2711		kg/m^3
Viskositet	$1.494 * 10^{-3}$	$89 * 10^{-3}$				$Pa \cdot s$
Molmassa	44	18.2	74.09	100	32	g/mol
Löslighet	0.1449		0.155	0.0013		$g/100ml$
Koncentration			0.021		0.042	mol/l
Ytspänning		0.072				N/m

Referenser

1. Så följer vi upp klimatmålen [Internet]. Naturvårdsverket. [cited 2021 May 27]. Available from: <https://www.naturvardsverket.se/Sa-mar-miljon/Klimat-och-luft/Klimat/Tre-satt-att-berakna-klim-atpaverkande-utslapp/Sa-foljer-vi-upp-klimatmalen/>
2. Kim M, Na J, Park S, Park J-H, Han C. Modeling and validation of a pilot-scale aqueous mineral carbonation reactor for carbon capture using computational fluid dynamics. *Chem Eng Sci.* 2018 Feb 23;177:301–12.
3. Carbon Dioxide Capture Using Calcium Hydroxide Aqueous Solution as the Absorbent | Energy & Fuels [Internet]. [cited 2021 May 27]. Available from: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/ef200415p>
4. Deckwer W-D. *Bubble Column Reactors*. Baffins Lane, Chichester West Sussex PO19 1UD, England: John Wiley and Sons Ltd; 1992.
5. Kulkarni AV, Joshi JB. Design and selection of sparger for bubble column reactor. Part I: Performance of different spargers. *Chem Eng Res Des.* 2011 Oct 1;89(10):1972–85.
6. Akita K, Yoshida F. Bubble Size, Interfacial Area, and Liquid-Phase Mass Transfer Coefficient in Bubble Columns. *Ind Eng Chem Process Des Dev.* 1974 Jan;13(1):84–91.
7. Pohorecki R, Moniuk W. Kinetics of reaction between carbon dioxide and hydroxyl ions in aqueous electrolyte solutions. *Chem Eng Sci.* 1988 Jan 1;43(7):1677–84.
8. Ionic Strength - an overview (pdf) | ScienceDirect Topics [Internet]. [cited 2021 May 27]. Available from: <https://www.sciencedirect.com/topics/chemistry/ionic-strength/pdf>