

УДК 621.5.01:66.061.12
DOI 10.17513/snt.40607

ЧИСЛЕННАЯ МОДЕЛЬ АБСОРБЦИОННОГО РЕАКТОРА ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ГИДРОДИНАМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК

Карпилов И.Д., Брагин Д.М., Попов А.И., Кечин Н.Н.

*Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования
«Самарский государственный технический университет», Самара, Российская Федерация,
e-mail: igorkarpilov@mail.ru*

Очистка природного газа от кислых примесей является важным технологическим процессом в газоперерабатывающей промышленности и осуществляется в абсорбционных реакторах. Традиционные методы, используемые для проектировки абсорбционных реакторов, не учитывают локальные особенности гидродинамики и нуждаются в улучшении. Целью данной работы являлось исследование гидродинамических характеристик в абсорбционном реакторе с жидкой фазой в виде 30% водного раствора диэтанолamina и газовой фазы – 98.5% метана и 1.5% CO₂. В качестве метода было использовано численное моделирование гидродинамики двухфазного течения в абсорбционном реакторе. На основе геометрии лабораторного реактора создана CFD-модель с насадочным слоем из сферических частиц. В результатах представлены контуры распределения скорости, давления и объемных долей фаз, позволяющие выявить неравномерность распределения как газовой, так и жидкой фаз по сечению аппарата и области локального ухудшения массопереноса в насадочном слое. Показано, что основная часть газового потока обтекает активную зону контакта, что снижает эффективность абсорбции CO₂. Сделан вывод о высокой информативности численного моделирования для диагностики гидродинамических проблем и оптимизации конструкции абсорбционных реакторов. Разработанная модель может быть использована для выбора рациональных режимных параметров и модернизации промышленного оборудования газоочистки на основе алканоламиновых растворов.

Ключевые слова: абсорбционный реактор, CFD-моделирование, диэтаноламин, CO₂, гидродинамика

NUMERICAL MODEL OF AN ABSORPTION REACTOR FOR STUDYING HYDRODYNAMIC CHARACTERISTICS

Karpilov I.D., Bragin D.M., Popov A.I., Kechin N.N.

*Federal State Budgetary Educational Institution of Higher Education
“Samara State Technical University”, Samara, Russian Federation,
e-mail: igorkarpilov@mail.ru*

Purification of natural gas from acidic impurities is an important technological process in the gas processing industry and is carried out in absorption reactors. The traditional methods used for the design of absorption reactors do not take into account the local features of hydrodynamics and need to be improved. The purpose of this work was to study the hydrodynamic characteristics in an absorption reactor with a liquid phase in the form of a 30% aqueous solution of diethanolamine and a gas phase of 98.5% methane and 1.5% CO₂. Numerical simulation of the hydrodynamics of a two-phase flow in an absorption reactor was used as a method. Based on the geometry of the laboratory reactor, a CFD model with a packing layer of spherical particles has been created. The results show the contours of the distribution of velocity, pressure, and volume fractions of phases, which make it possible to identify the uneven distribution of both gas and liquid phases across the section of the apparatus and the area of local deterioration of mass transfer in the nozzle layer. It is shown that the main part of the gas flow envelopes the active contact zone, which reduces the efficiency of CO₂ absorption. It is concluded that numerical modeling is highly informative for diagnosing hydrodynamic problems and optimizing the design of absorption reactors. The developed model can be used to select rational operating parameters and modernize industrial gas purification equipment based on alkanolamine solutions.

Keywords: absorption reactor, CFD modeling, diethanolamine, CO₂, hydrodynamics

Введение

В современных условиях интенсивного развития газоперерабатывающей промышленности и ужесточения экологических требований к выбросам в атмосферу проблема эффективной очистки природного газа от кислых примесей, в первую очередь диоксида углерода (CO₂) и сероводорода (H₂S), приобретает первостепенное значение [1; 2]. Среди различных методов очистки газовых смесей наибольшее распространение получила абсорбционная технология на основе водных растворов алканоламинов [3; 4].

В контексте подготовки метаносодержащих газовых смесей диэтаноламин (ДЭА) занимает важное место благодаря сбалансированному сочетанию реакционной способности и физико-химических характеристик [5; 6]. В химическом реакторе подача диэтаноламинов в жидкой фазе происходит через верхнюю часть реактора на насадочный слой, который способствует контакту жидкости с метаном. Структура насадочного слоя и геометрия абсорбера оказывают существенное влияние на гидродинамику и массоперенос [7; 8]. Также гидравли-

ческие параметры потоков, включая скорость газа и жидкости, критически важны для формирования режима течения и эффективности контакта фаз [9; 10].

Традиционные подходы к проектированию абсорбционных аппаратов базируются на эмпирических корреляциях и упрощенных моделях идеального вытеснения или смешения, которые не учитывают сложную структуру потоков, неравномерность распределения фаз и локальные особенности гидродинамики. Однако с развитием технологий, в особенности CFD-моделирования, появилась возможность эффективно исследовать характеристики процесса в химическом реакторе [11; 12].

В связи с изложенным актуальность настоящего исследования обуславливается необходимостью детального анализа гидродинамических характеристик течения двухфазной системы в условиях абсорбционного реактора с применением современных CFD-технологий [13; 14]. Разработка CFD-модели, способной количественно предсказывать распределение скоростей и фаз как в пустом реакторе, так и в реакторе с насадочным слоем, позволит оптимизировать конструкцию аппарата и режимные параметры процесса для повышения эффективности очистки метана от CO_2 .

Цель исследования – исследование гидродинамических характеристик в абсорбционном реакторе с жидкой фазой в виде 30% водного раствора диэтанолamina и газовой фазы – 98.5% метана и 1.5% CO_2 . Для достижения указанной цели необходимо создание CFD-модели течения потоков внутри реактора.

Материалы и методы исследования

Основным методом исследования являлось численное моделирование. Численная модель реактора была создана на базе лабораторной установки [15]. Геометрия реактора представлена на рисунке 1. Высота реактора 350 мм, а диаметр основного реакционного пространства составляет 115 мм. Газовая смесь поступает из нижнего патрубка реактора, протекает через контактный слой, и очищенный газ выходит через верхний патрубок. Жидкость поступает в абсорбционный реактор из верхней части реактора и за счет гравитационных сил поступает на насадочный слой, где взаимодействует с потоком газа. Насадочный слой состоит из сферических частиц диаметром 18 мм и был использован для увеличения площади контакта. Расчетная сетка была выполнена из треугольных элементов со средним размером элемента 1 мм. Общее количество элементов сетки составляло 485 202 элемента.

Основные уравнения для создания численной модели включают уравнение неразрывности для каждой фазы, которое описывает закон сохранения массы в движущейся жидкости и выражается в виде:

$$\frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_k \mathbf{u}_k) = 0, \quad (1)$$

где ρ_k – плотность k -й фазы (кг/м^3), \mathbf{u}_k – вектор скорости k -й фазы (м/с), t – время (с).

Уравнение количества движения для k -й фазы, также известное как уравнение Навье–Стокса, описывает динамику жидкого или газового потока под воздействием внешних и внутренних сил.

Для модели Эйлера уравнение количества движения для смеси записывается в виде:

$$\frac{\partial (\rho_m \mathbf{u}_m)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_m \mathbf{u}_m \mathbf{u}_m) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_m + \rho_m \mathbf{g}, \quad (2)$$

где $\rho_m = \alpha_g \rho_g + \alpha_l \rho_l$ – плотность смеси (кг/м^3), $\mathbf{u}_m = \frac{\alpha_g \rho_g \mathbf{u}_g + \alpha_l \rho_l \mathbf{u}_l}{\rho_m}$ – скорость смеси (м/с), p – давление (Па), $\boldsymbol{\tau}_k$ – тензор вязких напряжений для k -й фазы (Па).

Уравнение энергии, основанное на первом законе термодинамики, описывает изменение полной энергии системы (внутренней, кинетической и потенциальной) под воздействием теплопередачи и работы внешних сил:

$$\frac{\partial (\rho_k c_p T)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_k c_p T \mathbf{u}_k) = \nabla \cdot (k_{eff} \nabla T) + \Phi + Q_k, \quad (3)$$

где c_p – удельная теплоемкость при постоянном давлении ($\text{Дж/(кг} \cdot \text{К)}$), T – температура (К), k_{eff} – эффективный коэффициент теплопроводности ($\text{Вт/(м} \cdot \text{К)}$), Φ – тепловыделение вследствие вязкого трения (Вт/м^3), Q_k – источник тепла для k -й фазы (Вт/м^3). В данной модели не рассматривались эндотермические реакции абсорбции углекислого газа, поэтому нагрев за счет внешних сил не учитывался.

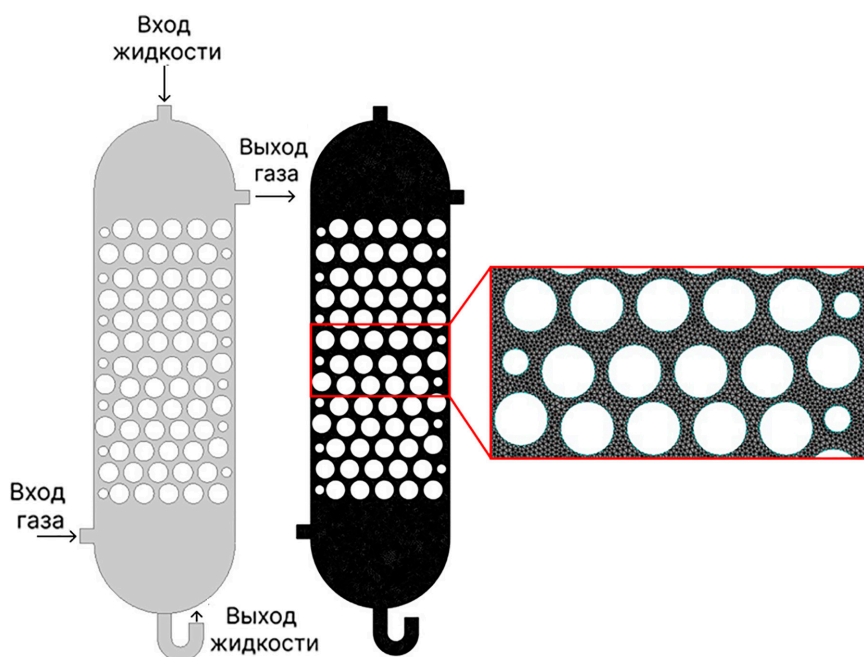


Рис. 1. Геометрия численной модели абсорбционного реактора и расчетная сетка из треугольных элементов
Источник: составлено авторами по результатам данного исследования

Модель VOF представляет собой метод отслеживания свободной поверхности в многофазных потоках, основанный на решении уравнения переноса для объемной доли фазы:

$$\frac{\partial \alpha_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\alpha_g \mathbf{u}_g) + \nabla \cdot (\alpha_g (1 - \alpha_g) \mathbf{u}_{rel}) = 0, \quad (4)$$

где α_g – объемная доля газовой фазы в контрольном объеме, \mathbf{u}_{rel} – относительная скорость между фазами.

Для корректного описания явлений на межфазной границе в VOF-модель включается коэффициент поверхностного натяжения, который действует в область интерфейса:

$$\sigma \kappa = \sigma \nabla \cdot \left(\frac{\nabla \alpha_g}{|\nabla \alpha_g|} \right), \quad (5)$$

где σ – коэффициент поверхностного натяжения (Н/м), κ – кривизна межфазной поверхности (м^{-1}).

Граничные условия модели включают значения скорости водного раствора диэтанолamina, равной 0.04 м/с, скорости газовой смеси из нижнего патрубка, которая равна 0.5 м/с, а также разрежение давления на выходе жидкости, равного -50 Па, и разрежение на выходе газа при значении -150 Па. Значение разрежения на выходных патрубках установлено исходя из баланса между гравитационной силой, которая является основной для движения воды,

и разностью давления для движения газа. При излишнем разрежении давления на выходе газов наблюдается унос жидкой фазы через выход газа. Выходной патрубок жидкости выполнен в виде U-образной трубы для создания гидростатического давления, которое предотвращает истечение газа через выход жидкости. Задача решалась в нестационарном виде с размером временного шага, адаптированного по числу Куранта $C < 1$. С текущим размером сетки временной шаг менялся в пределах от $1.5 \cdot 10^{-6}$ до $3.4 \cdot 10^{-5}$ секунд. Для аппроксимации уравнений модели использовался второй порядок дискретизации.

Результаты исследования и их обсуждение

Контур объемной доли 30% водного раствора диэтанолamina в реакторе демонстрирует четко выраженное вертикальное распределение жидкой фазы с преобладающей концентрацией в верхней половине аппарата и показан на рисунке 2.

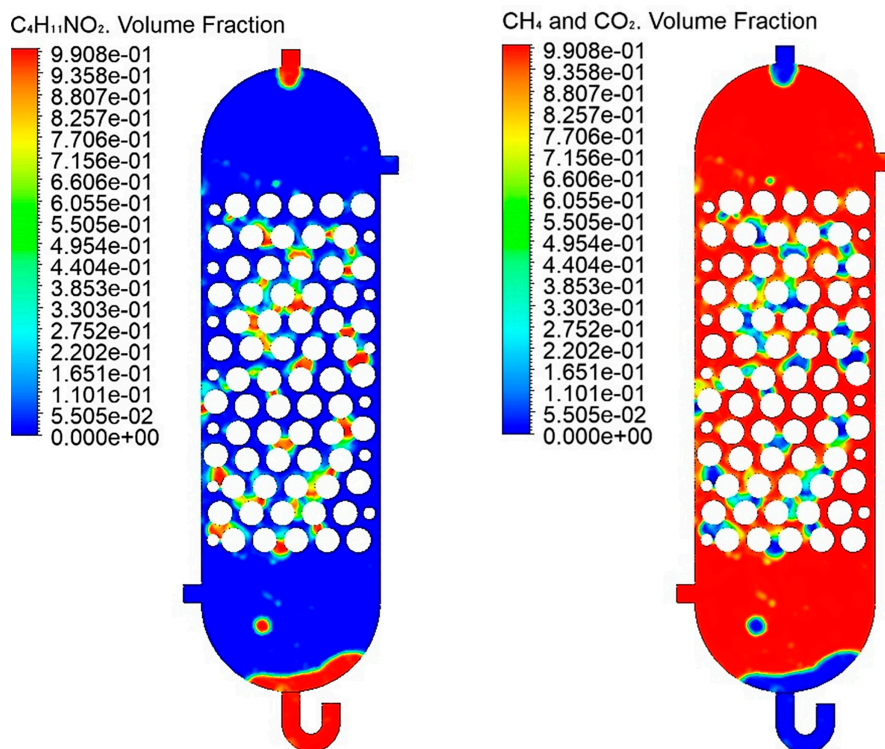


Рис. 2. Контуры объемной доли диэтанолamina (слева) и смеси метана и диоксида углерода (справа)

Источник: составлено авторами по результатам данного исследования

При движении вниз через насадочный слой происходит постепенное уменьшение объемной доли жидкости, что обусловлено интенсивным контактом с восходящим потоком газовой смеси и образованием интенсивно диспергированной системы. В центральной области насадочного слоя наблюдается зона переходного режима с объемной долей жидкости в диапазоне 0.50-0.85, где происходит наиболее интенсивный обмен между фазами. Такое распределение качественно согласуется с физической моделью противоточного газожидкостного контакта.

Распределение объемной доли смеси метана и диоксида углерода в реакторе демонстрирует дополняющий к жидкой фазе контур с преобладанием газовой фазы в нижней и центральной частях аппарата (рис. 2). Максимальная концентрация газа наблюдается в нижней части реактора в непосредственной близости от входного патрубка газовой смеси, где газовый поток еще не подвергся значительному рассеянию и контакту с жидкой фазой. При движении вверх через насадочный слой газовая фаза постепенно диспергируется на множество мелких пузырьков, что приводит к уменьшению локальной объемной доли газа и увеличению межфазной поверхности контакта. В верхней части

реактора, где газовый поток выходит из насадочного слоя, объемная доля газовой смеси возрастает до 0.70-0.90, что обусловлено уменьшением интенсивности контакта после прохождения основного слоя насадки. Локальные области с пониженной объемной долей газа соответствуют скоплениям жидкости и формированию пленочных потоков.

Распределение относительного давления в абсорбционном реакторе представлено на рисунке 3. Анализ полей давления показывает наличие ярко выраженного градиента давления в области входа газовой фазы (нижний патрубок), где давление достигает максимального значения 46.53 Па и быстро снижается при движении вверх через насадочный слой. Область максимального давления сконцентрирована в нижней части реактора и в непосредственной близости от входного патрубка газа, что соответствует ожидаемому физическому поведению двухфазного потока с доминирующим влиянием гидравлического сопротивления насадки.

При прохождении газовой смеси через насадочный слой, состоящий из сферических частиц диаметром 18 мм, происходит постепенное снижение давления вследствие вязкого трения и гравитационного воздействия жидкой фазы.

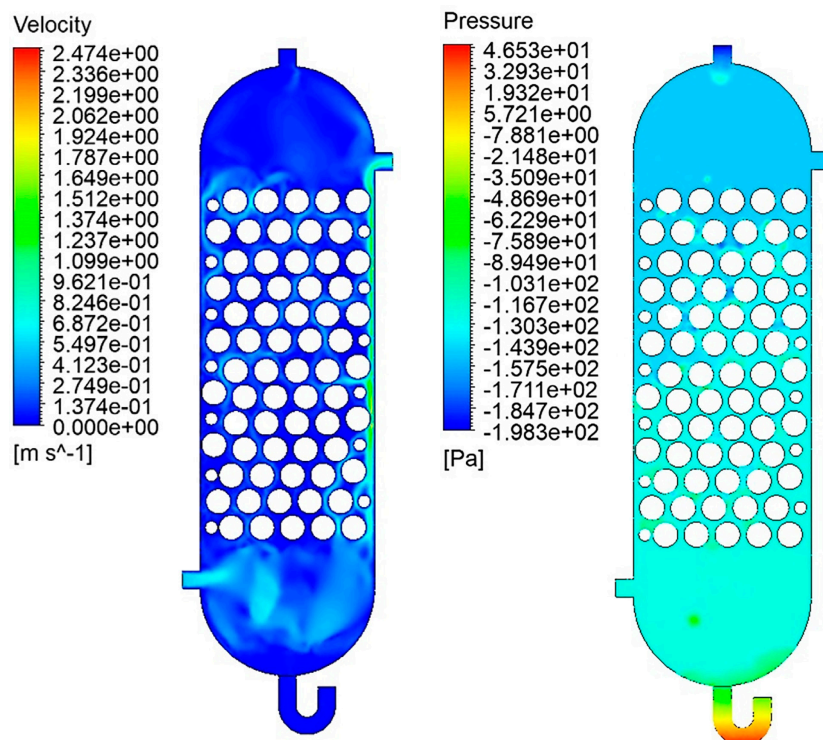


Рис. 3. Контур распределения скорости в реакторе (слева) и контур распределения относительного давления (справа)
 Источник: составлено авторами по результатам данного исследования

На выходе из реактора (верхний газовый патрубок) давление достигает значений в диапазоне от -198.3 до -187.1 Па, что соответствует установленному граничному условию разрежения в -150 Па и указывает на корректность выбранных режимных параметров. Перепад давления между входом и выходом газа составляет примерно 245 Па. Неравномерность поля давления в радиальном направлении, видимая в центральной части реактора, указывает на наличие вихревых образований и неоднородное распределение скоростей фаз, что является типичным для потоков в насадочных аппаратах с противоточной схемой контакта.

Распределение скорости потока в абсорбционном реакторе представляет собой сложную картину (рис. 3), отражающую взаимодействие противоточных потоков газовой и жидкой фаз. Распределение скорости показывает, что основная часть газа движется вдоль правой стенки и не участвует в контакте с жидкостью. Отсутствие равномерного контакта по всей площади насадочного слоя препятствует эффективной абсорбции CO_2 . Именно благодаря CFD-моделированию была выявлена причина неэффективности работы реактора. Следовательно, компьютерное моделирование является эффективным методом для выяв-

ления проблемных участков, а также определения оптимальных гидродинамических характеристик.

Заключение

В результате данного исследования была разработана CFD-модель абсорбционного реактора с насадочным слоем. Полученные результаты подтверждают высокую эффективность CFD-моделирования как инструмента для диагностики гидродинамических проблем в абсорбционных аппаратах и определения причин неэффективности процесса. Разработанную модель можно использовать для анализа работы химических реакторов и оптимизации промышленного дизайна. Таким образом, выполненное численное исследование демонстрирует прикладную ценность CFD-методов для решения практических проблем проектирования и оптимизации химических реакторов и газоочистного оборудования, используемого в газоперерабатывающей промышленности.

Список литературы

1. Castellanos-Sánchez J.E., Aguilar-Aguilar F.A., Hernández-Altamirano R., Venegas Venegas J.A., Raj Aryal D. Biogas purification processes: review and prospects // Biofuels. 2024. T. 15. № 2. С. 215-227. DOI: 10.1080/17597269.2023.2223801.
2. Атласкин А.А., Крючков С.С., Воротынец А.В., Петухов А.Н., Трубянов М.М., Атласкина М.Е., Воротынец И.В.

Способ удаления диоксида углерода и сероводорода из метаносодержащих газовых смесей. EDN: HECSUK.

3. Yin X., Shen S. Water-lean monophasic absorbents containing secondary alkanolamines and dimethyl sulfoxide for energy-efficient CO₂ capture // *Energy*. 2023. T. 281. C. 128352. DOI: 10.1016/j.energy.2023.128352.

4. Hu H., Fang M., Liu F., Wang T., Xia Z., Zhang W., Yuan J. Novel alkanolamine-based biphasic solvent for CO₂ capture with low energy consumption and phase change mechanism analysis // *Applied Energy*. 2022. T. 324. C. 119570. DOI: 10.1016/j.apenergy.2022.119570.

5. Choubtashani S., Rashidi H. CO₂ capture process intensification of water-lean methyl diethanolamine-piperazine solvent: Experiments and response surface modeling // *Energy*. 2023. T. 267. C. 126447. DOI: 10.1016/j.energy.2022.126447.

6. Zhou Z., Davoudi E., Vaferi B. Monitoring the effect of surface functionalization on the CO₂ capture by graphene oxide/methyl diethanolamine nanofluids // *Journal of Environmental Chemical Engineering*. 2021. T. 9. № 5. C. 106202. DOI: 10.1016/j.jece.2021.106202.

7. Yuan Z.G., Wang Y.X., Liu Y.Z., Wang D., Jiao W.Z., Liang P. F. Research and development of advanced structured packing in a rotating packed bed // *Chinese Journal of Chemical Engineering*. 2022. T. 49. C. 178-186. DOI: 10.1016/j.cjche.2021.12.023.

8. von Seckendorff J., Hinrichsen O. Review on the structure of random packed-beds // *The Canadian Journal of Chemical Engineering*. 2021. T. 99. C. S703-S733. DOI: 10.1002/cjce.23959.

9. Dhaneesh K.P., Ranganathan P. A comprehensive review on the hydrodynamics, mass transfer and chemical absorption

of CO₂ and modelling aspects of rotating packed bed // *Separation and Purification Technology*. 2022. T. 295. C. 121248. DOI: 10.1016/j.seppur.2022.121248.

10. Chen W.C., Meng W.H., Liu Z.H., Chu G.W., Zhang L.L., Chen J.F. Hydrodynamics of gas flow in a rotating packed bed under floating motions: Experimental and simulation study // *Chemical Engineering Journal*. 2022. T. 442. C. 136149. DOI: 10.1016/j.cej.2022.136149.

11. Nikitin M., Pashchenko D. Computational fluid dynamics simulations of fluid flow through the packed beds: A study of contact point treatments // *International Communications in Heat and Mass Transfer*. 2025. T. 169. C. 109613. DOI: 10.1016/j.icheatmasstransfer.2025.109613.

12. Liu R., Wang M., Li X., Liu Y., Pei C., Gong J. Effects of scaling criteria on modelling of multi-phase flow in the packed bed using coarse grain CFD-DEM // *Chemical Engineering Science*. 2024. T. 296. C. 120244. DOI: 10.1016/j.ces.2024.120244.

13. Makarem M.A., Farsi M., Rahimpour M.R. CFD simulation of CO₂ removal from hydrogen rich stream in a micro-channel // *International Journal of Hydrogen Energy*. 2021. T. 46. № 37. C. 19749-19757. DOI: 10.1016/j.ijhydene.2020.07.221.

14. Wodołażski A., Smoliński A. Bio-hydrogen production in packed bed continuous plug flow reactor-CFD-multiphase modelling // *Processes*. 2022. T. 10. № 10. C. 1907. DOI: 10.3390/pr10101907.

15. Дубек Б., Валовский Г., Романюк В. Десульфурация сырого биогаза с использованием адсорбционно-абсорбционной технологии для производства биогаза из свиного навоза // *Техника и технологии в животноводстве*. 2021. № 1 (41). C. 94-107. DOI: 10.51794/27132064-2021-1-94.

Конфликт интересов: Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

Conflict of interest: The authors declare that there is no conflict of interest.

Финансирование: Финансовая поддержка осуществлена Министерством науки и высшего образования Российской Федерации (тема № FSSE-2025-0006) в рамках государственного задания Самарского государственного технического университета (создание новых молодежных лабораторий).

Financing: Financial support was provided by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (topic no. FSSE-2025-0006) within the framework of the state assignment of Samara State Technical University (creation of new youth laboratories).