

## MODELOVÁNÍ PROUDĚNÍ BIOPLYNU ADSORPČNÍM LOŽEM

*Tomáš Hlinčík, Alice Procházková, Václav Koza*

*VŠCHT Praha, Ústav plynárenství, koksochemie a ochrany ovzduší, Technická 5, 166 28 Praha 6  
e-mail: tomas.hlincik@vscht.cz,*

*Bioplyn produkovaný anaerobním rozkladem organického materiálu obsahuje kromě methanu a oxidu uhličitého také celou řadu dalších látek, z nichž některé působí problémy při jeho energetickém využití. Mezi takovými látkami se řadí hlavně sulfan a nízkomolekulární siloxany. Pro zajištění spolehlivého provozu kogeneračních jednotek spalujících bioplyn je proto nutné instalovat vhodnou technologii odstraňování těchto nežádoucích složek bioplynu. Vhodnou metodou pro čištění bioplynu od těchto látek je adsorpce. V mnoha provozních aplikacích se již používají adsorpční zařízení k čištění bioplynu. Některá z nich však mají problémy s rovnoměrným prouděním plynu celým objemem adsorpčního lože. Článek je zaměřen na modelování proudění bioplynu skrze adsorpční lože v programu CFD. Simulace proudění bioplynu je prováděna na modelu adsorbéru, který má stejné parametry jako reálné zařízení. Výsledky simulačních výpočtů poskytují celkový pohled na rozložení proudění v adsorbéru, velikost tlakové ztráty při průchodu zařízením a rozložení rychlostí v adsorpční vrstvě.*

*Klíčová slova: modelování, bioplyn, adsorpce*

Došlo 4.10. 2012, přijato 26. 2. 2013

### 1. Úvod

Kvalita bioplynu se určuje především z pohledu poměru hořlavého methanu k „neužitečnému“ oxidu uhličitému. Dá se říci, že oxid uhličitý zředňuje bioplyn, čímž se zvyšují náklady, především na skladování plynu [1]. Z pohledu stopových složek je jednoznačně znatelný rozdíl mezi plyny vznikajícími v tělesech komunálních skládek a mezi tzv. reaktorovými plyny [2]. V bioplynech bylo identifikováno více než 140 látek, které dosahují celkové koncentrace až 2 000 mg/m<sup>3</sup> (0,15 % obj.) [3].

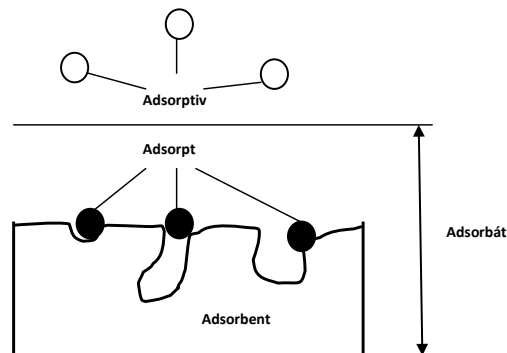
Pod pojmem technicky významné příměsi v bioplynu si lze představit ty minoritní složky, které mohou být zdrojem korozních problémů, jsou nositeli toxických vlastností nebo mohou způsobit další problémy při následném využití bioplynu, například pro energetické účely. Jedním z příkladů problematických minoritních složek v případě energetického zhodnocení plynu je přítomnost organokřemičitých látek, které škodí kogeneračním jednotkám svými abrazivními účinky ve spalovacích prostorách motorů. Kromě přítomnosti sloučenin křemíku je také závažným problémem velké množství sulfanu v plynu, které vlivem koroze způsobuje zkrácení životnosti motoru kogeneračních jednotek [2].

Proto je vhodné při použití bioplynu pro energetické účely instalovat vhodnou metodu čištění bioplynu od těchto nežádoucích látek. Jednou z možností je použití adsorpčních technologií, jejichž hlavní předností je možnost současné separace více druhů škodlivých látek adsorbentu v jednom kroku.

### 2. Adsorpční technologie sušení

Principem adsorpce je zachycování molekul plyných nebo kapalných látek na povrchu tuhé fáze. Látky, na jejichž povrchu jsou okolní částice vázány, jsou označovány termínem adsorbent. Adsorptivem

se označují adsorbované látky. Částice adsorptivu neprocházejí fázovým rozhraním, ale zůstávají na povrchu (nazýváme je poté adsorpt), ke kterému jsou poutány silami různých povah a v důsledku toho také různých velikostí. Společný systém adsorbentu a adsorptu je označován jako adsorbát. Uvedené definice nejlépe popisuje obrázek 1 [4].



Obr. 1. Základní pojmy adsorpce.

Obvykle rozeznáváme dva typy adsorpce – fyzikální adsorpci a chemisorpci. Pokud při sorpci nedochází k žádné chemické reakci a uplatňují se síly fyzikální povahy, jedná se o fyzikální adsorpci. Tento děj probíhá na základě van der Waalových sil působících mezi povrchem adsorbentu a částicemi adsorptivu. Fyzikální adsorpce probíhá na celém povrchu tuhé látky a je typická vysokou rychlostí sorpce (ustavení rovnováhy při adsorpci z plynné fáze trvá maximálně několik sekund) a schopností vrstvení adsorbovaných molekul. Naadsorbované látky se poměrně snadno desorbují zvýšením teploty nebo snížením tlaku. Například siloxany jsou k povrchu adsorbentu fixovány pomocí fyzikální adsorpce. Naproti tomu, jsou-li molekuly na povrchu adsorbentu vázány prostřednictvím elektronových vazeb,

tedy sdílením elektronů, nazýváme tento děj chemisorpcí. V podstatě dochází k vzniku povrchové sloučeniny. Množství zachycených molekul tvoří jednu vrstvu a v porovnání s fyzikální adsorbpcí je celkově nižší. Rychlost chemisorpce roste obvykle s rostoucí teplotou. Sulfan, jako jedna z nežádoucích látek přítomných v bioplynu, je k impregnovaným adsorbentům vázán mechanismem chemisorpce. Speciální impregnační činidla jsou pak schopna naadsorbovaný sulfan oxidovat až na elementární síru [4].

Při návrhu adsorbčního zařízení se snažíme zvolit takový sorbent, který má pro odstraňovanou složku velkou kapacitu, to znamená, že je schopen se za dané teploty a koncentrace touto složkou co nejvíce nasýtit. Rozměry a provedení adsorbčeru musí vyhovovat podmínkám proudění plynu adsorbční vrstvou. Významné mohou být v určitých případech i další okolnosti, např. vlhkost surového plynu, vývin adsorbčního tepla, apod. Regenerace nasyceného adsorbentu – desorpce, se provádí zvýšením teploty za současného prohánění inertního plynu. Nejběžnější je desorpce parou, která současně ohřívá sorbent a odnáší desorbované složky. Proces adsorpce je možné zkontinualizovat použitím alespoň dvou adsorbčerů, kdy jeden pracuje v adsorbčním a druhý v desorbčním cyklu [5].

Proudění čistěného plynu vrstvou adsorbentu nemusí být vždy rovnoměrné, což zvyšuje provozní náklady adsorbčního zařízení.

Tento článek je zaměřen na problematiku proudění čistěného plynu vrstvou adsorbčního lože v adsorbčeru se složitějším uspořádáním lože adsorbentu.

### 3. Výpočtová část

Pro modelování a simulace proudění plynu adsorbčerm bylo vybráno provozní adsorbční zařízení, které se nachází na Ústřední čistírně odpadních vod v Praze. Zde je vyráběný bioplyn využíván pro kombinovanou výrobu elektřiny a tepla v kogeneračních jednotkách. Adsorbčery naplněné aktivním uhlím zde byly postaveny z důvodu čištění produkovaného bioplynu od organokřemičitých sloučenin. Konstrukce adsorbčerů má specifický tvar, viz obrázek 2.



Obr. 2. Fotografie adsorbčeru.

Vstup do adsorbčeru se nachází v zadní části zobrazeného zařízení na obrázku 2. V přední části adsorbčeru vystupuje vyčištěný bioplyn a směřuje do motoru kogenerační jednotky. Proudění bioplynu adsorbčerním zařízením je vedeno v horizontálním směru. Pro čištění plynu se používají vždy dva adsorbčery zapojené za sebou, třetí adsorbčer se používá krátkodobě v době výměny adsorbentů v prvních dvou adsorbčerech. Pro simulaci proudění plynu adsorbčerm byla použita metoda CFD – Computational Fluid Dynamics. Při použití této metody je potřeba nejprve vytvořit model zařízení, na kterém byla vytvořena výpočtová síť, aby výpočet konvergoval. Na tento geometrický model zařízení se následně aplikuje definovaný matematický model, který představuje soustavu parciálních diferenciálních rovnic. Tyto rovnice byly řešeny v simulačním programu, který je založen na metodě konečných objemů, kdy výpočetní oblast (v tomto případě adsorbčer) se vyplní elementy konečných prvků (výpočtová síť). V této výpočetní oblasti se provádí numerická simulace definovaného modelu. Matematický model definuje základní bilanční rovnice, rovnice kontinuity a Navier – Stokesova rovnice [6].

Výpočet tlakové ztráty přes porézní vrstvu je definován Ergunovou rovnicí:

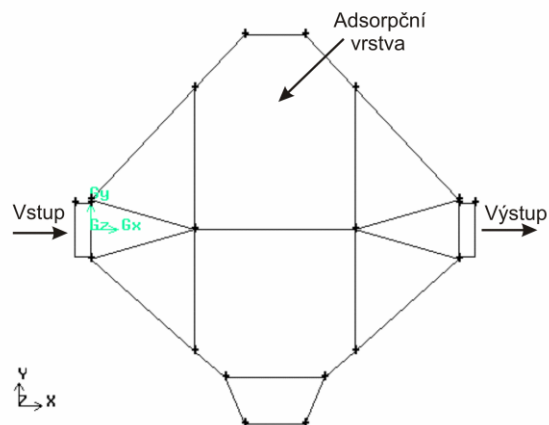
$$\frac{dp}{dl} = \left[ 150 * \frac{\mu * (1 - \varepsilon_a)^2}{(\phi d_p)^2 \varepsilon_a^3} \right] * v + 1,75 \frac{\rho(1 - \varepsilon_b)}{\phi d_p \varepsilon_b^3} v^2 \quad (1)$$

V rovnici (1) je  $\mu$  dynamická viskozita,  $\varepsilon_a$  mezovitost vrstvy,  $\phi$  sféricita částice,  $d_p$  průměr částic, v mimovrstvová rychlost [7].

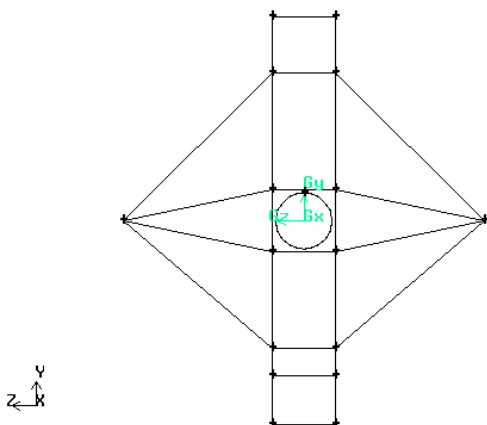
K numerické simulaci proudění byl použit turbulentní k- $\varepsilon$  STANDARD model, který navíc řeší rovnice pro turbulentní kinetickou energii  $k$  a rychlost disipace  $\varepsilon_b$  [8].

#### 3.1. Model adsorbčeru

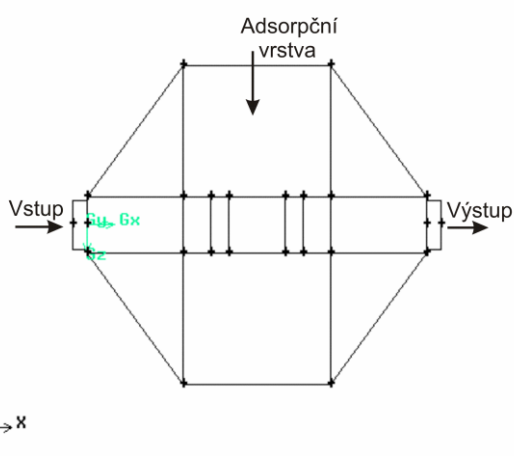
Model adsorbčeru je znázorněn na schematických obrázcích 3 - 6.



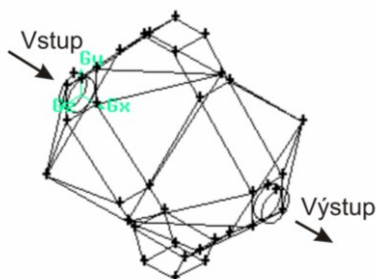
Obr. 3. Bokorys modelu.



Obr. 4. Nárys modelu.



Obr. 5. Půdorys modelu.

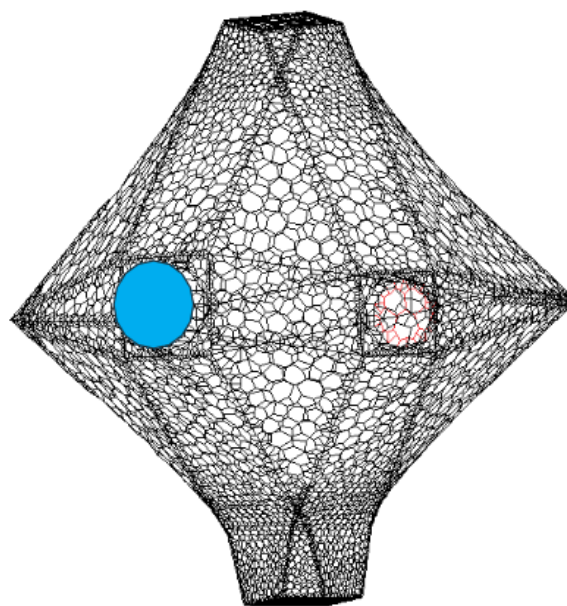


Obr. 6. 3D pohled modelu.

Adsorpční vrstva v adsorbéru se nachází uprostřed zařízení, kde je volně nasypán adsorbent, v tomto případě se jedná o aktivní uhlí. Adsorpční vrstva má nátokovou i odtokovou stranu pro čištěný plyn ohraničenou mříží přibližně ve tvaru čtverce postaveného na vrchol. Vlastní vrstva je pak v místech spodního i horního vrcholu rozšířena pod a nad mříž k hrdlům pro plnění a vyprazdňování adsorbentu. Mezi vstupním otvorem pro plyn a sorpční vrstvou se nachází volný prostor (volný prostor se také nachází mezi adsorpční vrstvou a výstupem plynu ze zařízení). Umístění tohoto volného prostoru a adsorpční vrstvy uprostřed zařízení je z důvodu vytvoření rovnoměrného

rozložení proudícího plynu adsorpční vrstvou. Plyn (bioplyn) je do zařízení přiváděn s objemovým průtokem  $2\,000\text{ m}^3/\text{h}$  potrubím o průměru  $400\text{ mm}$ . Vyčištěný bioplyn vystupuje potrubím o stejném průměru.

Geometrické rozměry reálného adsorbéru byly použity při modelování v programu Gambit. Na vytvořeném modelu adsorbéru byla následně vytvořena výpočetní síť pro simulační výpočet (obr. 7). Modře označená plocha označuje vstup do adsorbéru. Červeně označená plocha označuje výstup z adsorbéru.



Obr. 7. Výpočetní síť modelu adsorbéru.

### 3.2. Vlastnosti používaného adsorbentu

V adsorbéru se používá aktivní uhlí ve formě peletek, typ AP 4-50. Rozměry peletek aktivního uhlí byly proměřeny v laboratoři. Pro měření bylo vybráno náhodně 20 kusů peletek. U každé peletky byla naměřena délka, průměr a hmotnost. Z těchto výsledků laboratorního měření byly následně vypočítány průměrný objem, povrch, hustota peletky a mezerovitost vrstvy aktivního uhlí. Výsledky měření a výpočtů jsou uvedeny v tabulce 1.

Tab. 1. Vlastnosti používaného adsorbentu.

	Průměr výsledků	Směrodatná odchylka
Délka peletky [mm]	8,62	1,72
Průměr peletky [mm]	4,29	0,14
Hmotnost [g]	0,0879	0,023
Objem [ $\text{m}^3$ ]	$1,252 \cdot 10^{-7}$	
Povrch [ $\text{m}^2$ ]	$1,453 \cdot 10^{-4}$	
Hustota pevné fáze [ $\text{kg}/\text{m}^3$ ]	696,89	
Mezerovitost vrstvy [-]	0,365	

#### 4. Výsledky simulačních výpočtů

Řešení CFD modelu poskytne rozložení rychlostí a tlaků v adsorpčním zařízení, ze kterých se vyhodnotí rovnoměrnost rozložení proudícího plynu adsorbérem, tlaková ztráta proudícího plynu adsorbérem a rozložení rychlostí v adsorpční vrstvě materiálu.

V následující tabulce 2 jsou uvedeny vstupní podmínky pro výpočet.

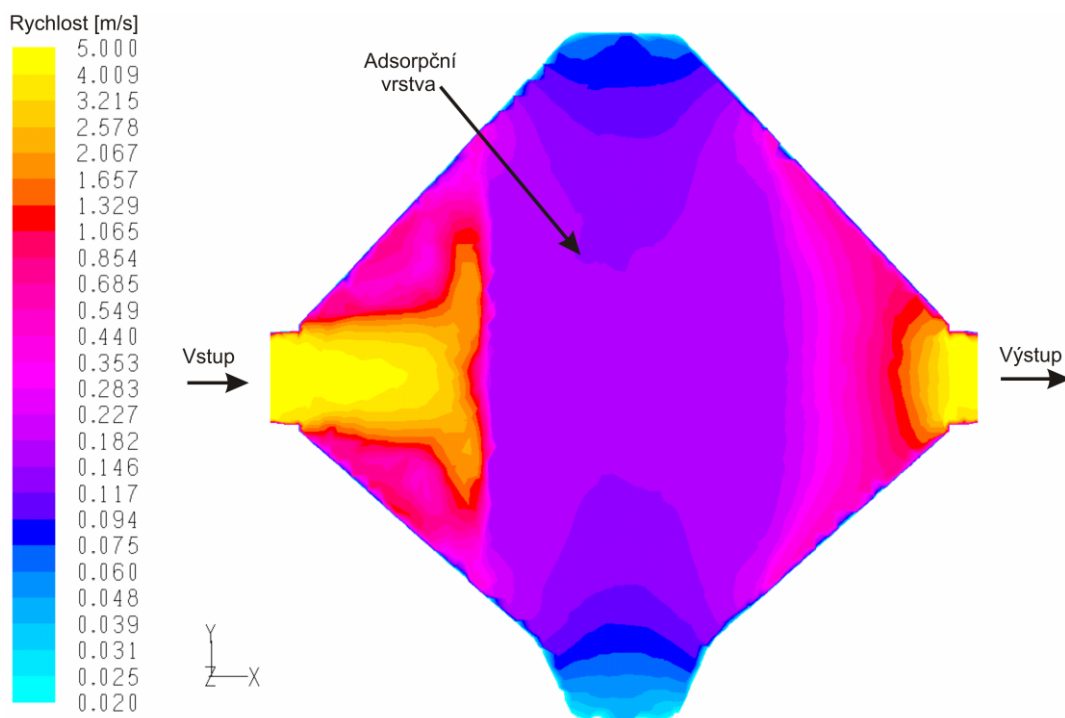
**Tab. 2.** Vstupní podmínky pro výpočet.

Vstupní podmínka	Hodnota
Vstupní objemový průtok plynu [m <sup>3</sup> /h]	2 000
Vstupní rychlost [m/s]	4,42
Laminární člen (Ergunova rovnice) [m <sup>-2</sup> ]	4,67.10 <sup>7</sup>
Turbulentní člen (Ergunova rovnice) [m <sup>-1</sup> ]	8 861,95
Mezerovitost vrstvy [-]	0,365

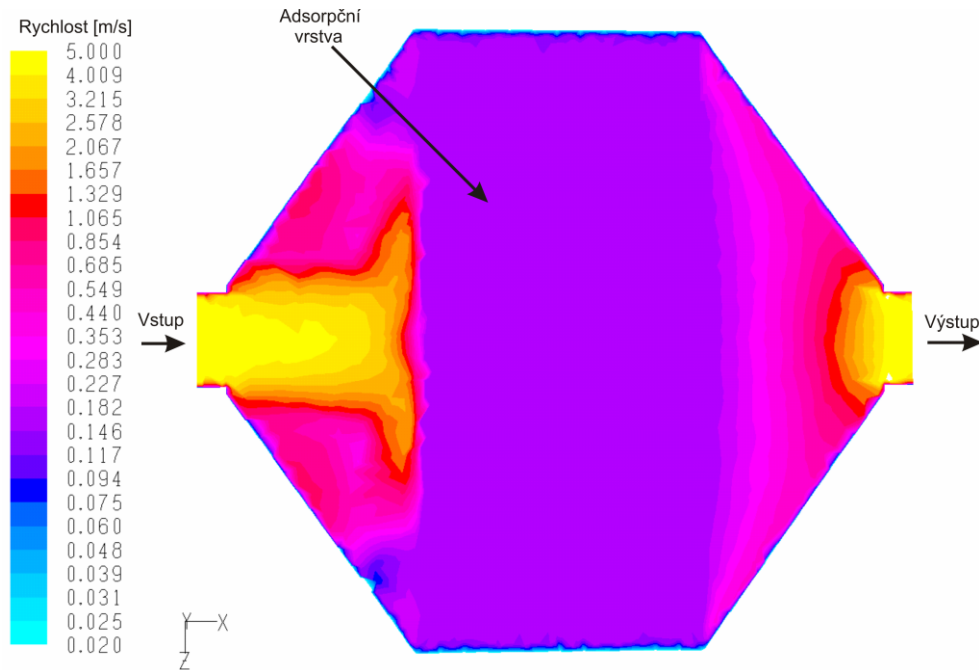
Na následujících obrázcích 8, 9 a 10 jsou výsledky simulačních výpočtů v konturovém zobrazení rychlostních polí. Obrázek 8 ukazuje pole rychlostí ve svislém řezu osou adsorbéru od vstupu plynu k výstupu. Je vidět, že plyn neproudí jen přímo mezi čelními plochami vrstvy, ale i materiálem přesahujícím čelní plochy nahoru do plnicího a dolů do vyprazdňovacího hrdla. Rychlost plynu od vstupu k výstupu je v těchto přesazích nižší než v centru vrstvy adsorbentu. Vzhledem k tomu, že plyn proudící přesahy snižuje tok mezi čelními plochami, klesá rychlost i tam. Obrázek 9

ukazuje pole rychlostí ve vodorovném řezu osou adsorbéru od vstupu plynu k výstupu. Je vidět, že v této vodorovné rovině se přesahy adsorbentu mimo čelní plochy neuplatňují a rychlost plynu adsorbentem je v celé zobrazené ploše prakticky stejná a současně maximální, které plyn ve vrstvě dosahuje. Z výsledků je patrné rozložení rychlostí při vstupu do zařízení, ke kterému dochází v důsledku rozšíření průtočného průřezu. Dále je patrný náraz proudu plynu do adsorpční vrstvy, kde dochází k následné cirkulaci proudícího plynu ve volném prostoru před adsorpční vrstvou, obrázek 10. Rychlost plynu adsorpční vrstvou je velmi malá v porovnání s rychlostí vstupujícího plynu do zařízení. Nejvyšší rychlosti plynu se nacházejí uprostřed adsorpční vrstvy, tedy v místě kam směřuje hlavní proud vstupujícího plynu do zařízení. Nejnižší rychlost plynu v adsorpční vrstvě se nachází v její horní a dolní části. Za adsorpční vrstvou dochází ke zrychlení plynu v důsledku zúžení průtočného průřezu ve výstupním potrubí.

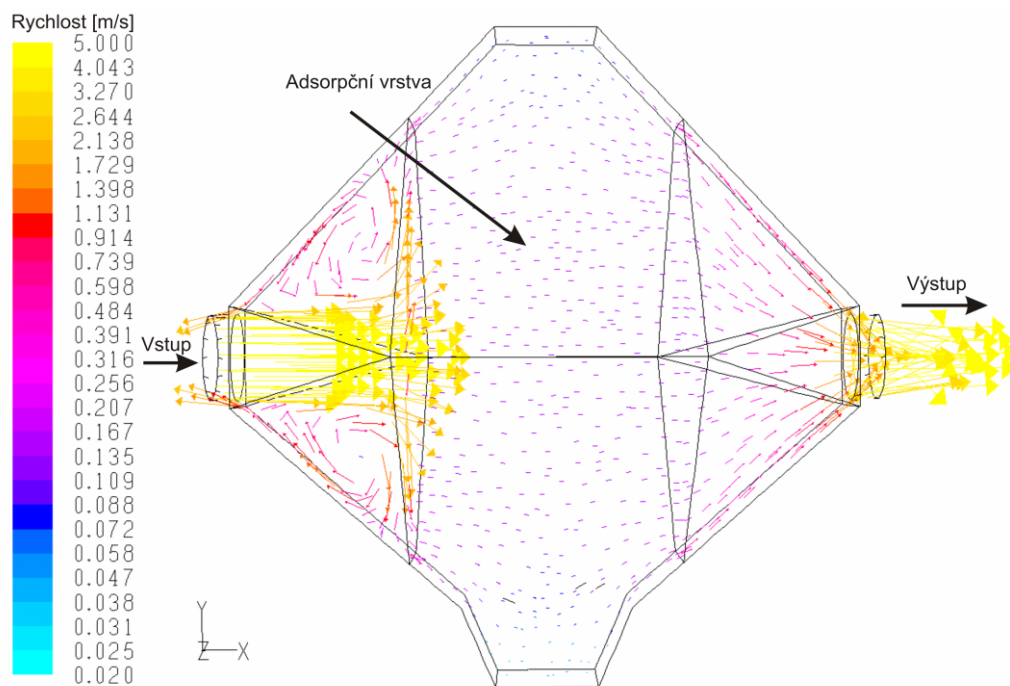
Pro přehledné vyhodnocení simulačních výpočtů byly vybrány výsledné hodnoty rychlostí a tlaků v zařízení, které se nacházely na vytvořené přímce, která procházela středem vstupního otvoru do zařízení a vystupovala středem výstupního otvoru ze zařízení. Stejným způsobem byly vyhodnoceny výsledné hodnoty rychlostí, které se nacházely na vytvořené přímce, která procházela středem spodní části zařízení a vystupovala středem horní části zařízení.



**Obr. 8.** Rychlostní pole v konturovém zobrazení – bokorys.



**Obr. 9.** Rychlostní pole v konturovém zobrazení – půdorys.



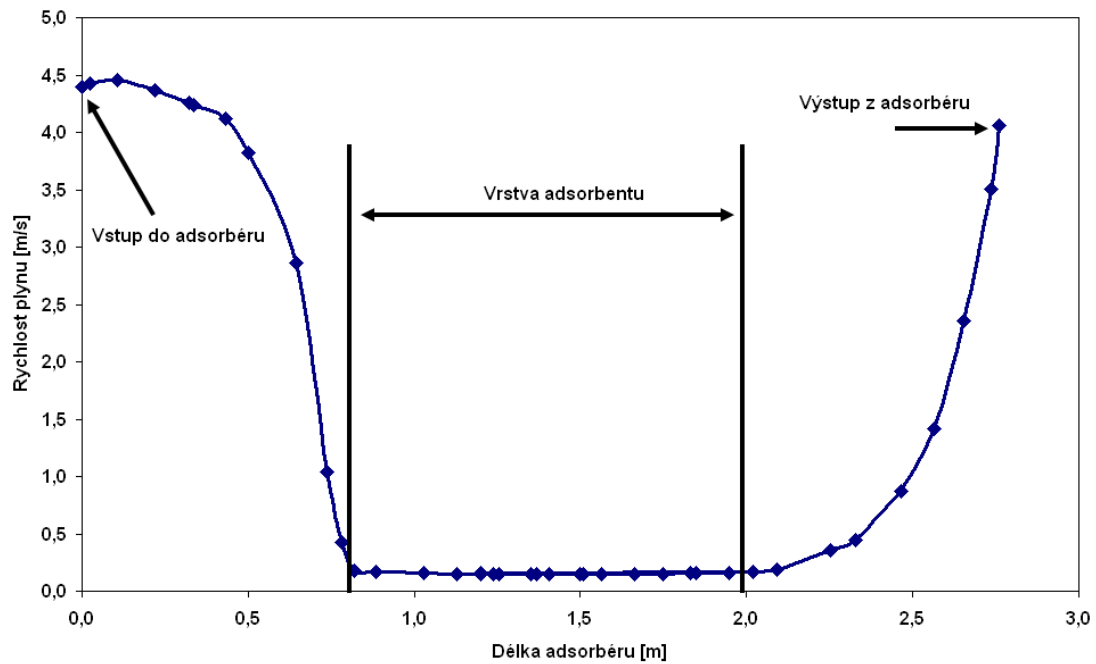
**Obr. 10.** Vektorové pole rychlostí – bokorys.

Na obrázku 11 je zobrazen průběh rychlostí zařízení. Z obrázku je patrné snížení rychlosti proudícího plynu až do místa, ve kterém je umístěna adsorpční vrstva. Za adsorpční vrstvou dochází k postupnému nárůstu rychlosti proudícího plynu až do maximální

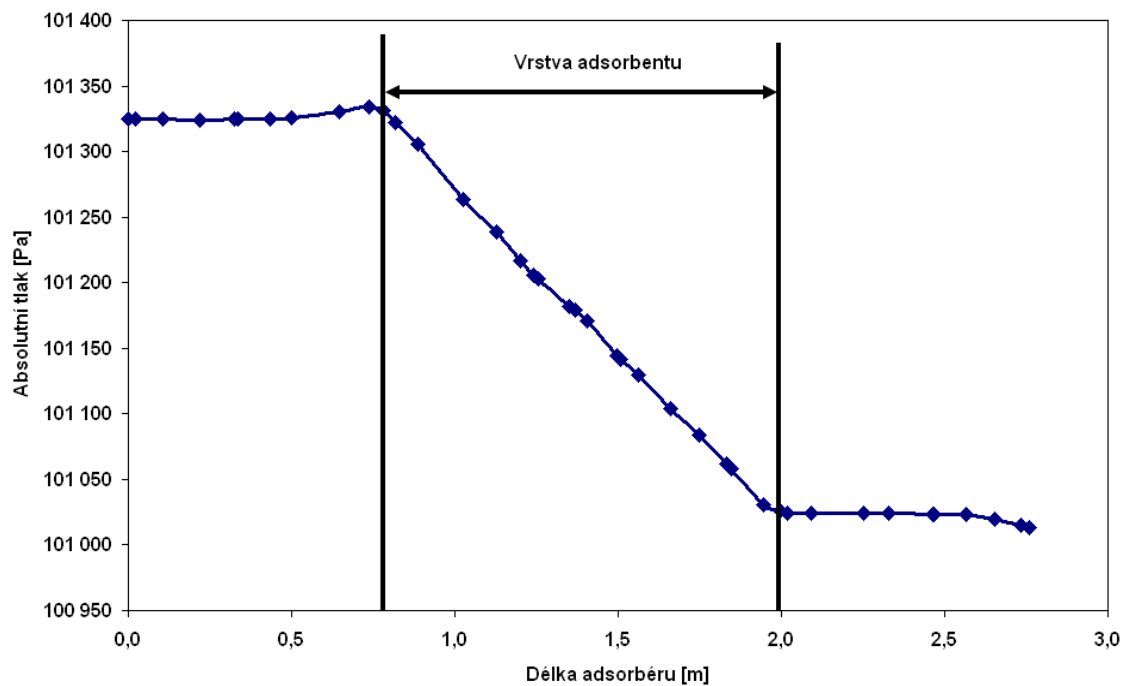
hodnoty rychlosti, kde se nachází výstupní otvor ze zařízení.

Na obrázku 12 je vyneseno průběh absolutního tlaku plynu v adsorbéru. Na obrázku je zřejmá tlaková ztráta plynu cca 300 Pa při průchodu vrstvou absorbentu.





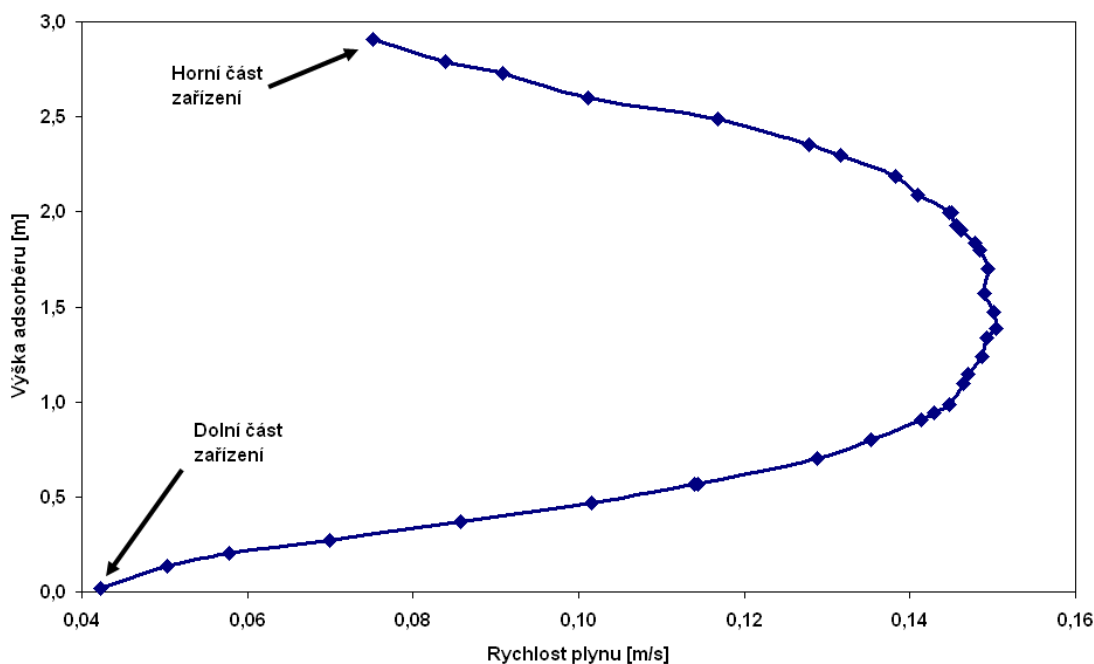
Obr. 11. Průběh rychlosti proudícího plynu adsorbérem.



Obr. 12. Průběh absolutního tlaku plynu v adsorbéru.

Na obrázku 13 je zobrazen profil rychlosti ve směru od vstupu do výstupu adsorbéru v závislosti na jeho výšce. K nejvyšší rychlosti plynu dochází ve středu

adsorpční vrstvy. Ve směru k dolní a horní části zařízení rychlosti proudícího plynu adsorpční vrstvou klesají.



Obr. 13. Průběh rychlosti proudícího plynu adsorpční vrstvou.

## 5. Závěr

Cílem představeného matematického modelu bylo posouzení rovnoměrnosti proudění bioplynu adsorbérem. Z výsledků vyplývá, že volný prostor v adsorbéru umístěný před adsorpční vrstvou umožňuje rovnoměrné rozdělení plynu před vstupem do adsorpční vrstvy. Dále bylo zjištěno, že rychlost proudění adsorpční vrstvou je nejvyšší uprostřed, tedy v místě vstupu hlavního proudu plynu do adsorpčního zařízení.

Prezentované simulace umožnily komplexní posouzení rozložení čištěného bioplynu v adsorbéru, které má vliv na jeho správnou funkci při čištění bioplynu.

## 6. Literatura

1. Kolektiv autorů; Plynárenská příručka-150 let plynárenství v Čechách a na Moravě; GAS; 1997.
2. Straka F. a kol.: Bioplyn – druhé rozšířené vydání, Gas s. r.o., Praha, 2006.
3. Schweigkofler M., Niessner R.: Removal of siloxanes in biogases, Journal of Hazardous Materials B83, 183-196, 2001.
4. Jurová E.: Odstraňování CO<sub>2</sub> separačními postupy, disertační práce, VŠCHT Praha, 2007.
5. Míka V., Neužil L.: Chemické inženýrství II, skriptum VŠCHT Praha; 1999.
6. Hlinčík T., Koza V.: Rozdělení čištěného plynu v tkaninových filtrech, Paliva 3, 2011.
7. Levenspiel O.: Engineering flow and heat exchange, Plenum Press, New York, 1998.
8. Kozubková M.: Modelování proudění – Fluent I. VŠB – TU Ostrava, 2008.

## Summary

Tomáš Hlinčík, Alice Procházková, Václav Koza  
Institute of Chemical Technology, Prague

### Biogas flow modeling through the adsorbent bed

The biogas produced by the anaerobic decomposition of organic material contains in addition to methane and CO<sub>2</sub> also a number of other substances, some of which cause problems by its energetic use. Among such substances are included hydrogen sulfide and low molecular siloxanes. To ensure reliable operation of the biogas-fired cogeneration units, it is therefore necessary to install appropriate technology to remove these harmful components of biogas. A suitable method seems to be adsorption. Many operational applications are already using adsorption equipment for the biogas cleaning. Some of them have problems with a steady flow of the entire volume of the gas through the adsorption bed.

This paper is focused on modeling of the biogas flow through the adsorption bed in the CFD. The biogas flow simulations were performed on the model of the adsorber, which had the same characteristics as the real device. The findings simulation calculations provided an overall view of the flow distribution in the adsorber, size, pressure loss caused by the biogas passing through the adsorber and the distribution of velocity in the adsorption layer placed in the absorber.